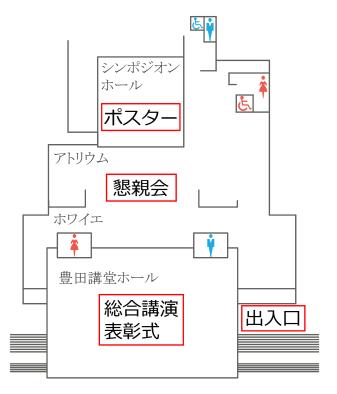
日本応用数理学会2018年度年会

名古屋大学 東山キャンパス 2018年9月3日~5日

簡易キャンパスマップ



豊田講堂 案内図



※ES総合館の案内図は, 裏表紙をご覧ください

日本応用数理学会年会2018年度年会 実行委員会

実行委員長 畔上 秀幸 (名古屋大学)

張 紹良 (名古屋大学)

片桐 孝洋 (名古屋大学)

杉山 雄規 (名古屋大学)

松本 敏郎 (名古屋大学)

曽我部 知広 (名古屋大学)

宮武 勇登 (大阪大学)

剱持 智哉 (名古屋大学)

荻野 正雄 (名古屋大学)

小藤 俊幸 (南山大学)

代田 健二 (愛知県立大学)

片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校)

堀之内 成明 ((株)豊田中央研究所)

村井 大介 ((株)豊田中央研究所)

山中 脩也 (明星大学)

発行日:2018年9月3日

Memo

9月3日	A (7305:)	D (PG25-)	G (PGss :)	D (PG25=)	P (Passi)	D (D005-)			
9月3日	A (ES021)	B (ES022)	C (ES024)	D (ES025)	E (ES034)	F (ES033)			
09:30-10:50	[研究部会 OS] 応用カオス (1) [<i>p.3</i>]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (1) [<i>p.3</i>]	[正会員主催 OS] 非線形問題のシ ミュレーション と 可視化 (1) [p.3]	[研究部会 OS] 折紙工学 (1) [p.4]	[研究部会 OS] 機械学習 [<i>p.4</i>]	[研究部会 OS] 数理設計 (1) [p.4]			
11:00-12:20	[研究部会 OS] 応用カオス (2) [<i>p.5</i>]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (2) [<i>p.5</i>]	[正会員主催 OS] 非線形問題のシ ミュレーション と可視化 (2) [p.5]	[研究部会 OS] 折紙工学 (2) [p.6]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (1) [p.6]	[研究部会 OS] 数理設計 (2) [p.6]			
12:30-13:30				キャリアデザイ ンのためのラン チミーティング					
13:30-14:50	[正会員主催 OS] 乱数生成と評価 [p.7]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (3) [p.7]	[正会員主催 OS] 非線形問題のシ ミュレーション と可視化 (3) [p.7]	[研究部会 OS] 計算の品質 (1) (14:10~) [p.8]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (2) [p.8]	[一般講演] 最適化 [<i>p.8</i>]			
15:00-16:20	[研究部会 OS] 応用カオス (3) [<i>p.9</i>]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (4) [<i>p.9</i>]	[研究部会 OS] ウェーブレット (1) [<i>p.9</i>]	[研究部会 OS] 計算の品質 (2) [p.10]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (3) [p.10]	[正会員主催 OS] FreeFem++で の開発と利用 [p.10]			
16:30-17:50	[一般講演] 数理 モデリング (1) [<i>p.11</i>]	[一般講演] 常微分方程式 [<i>p.11</i>]	[研究部会 OS] ウェーブレット (2) [<i>p.11</i>]	[研究部会 OS] 計算の品質 (3) [p.12]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (4) [p.12]	[講習会] FreeFem++で の開発と利用 (~18:00)[<i>p.12</i>]			
18:00-20:00				『応用数理』 編集委員会					
9月4日	A (ES021)	B (ES022)	C (ES024)	D (ES025)	E (ES034)	F (ES033)			
09:00-10:20	[一般講演] 数理 モデリング (2) [<i>p.13</i>]	[正会員主催 OS] 多倍長精度浮動 小数点演算の高 速化手法と応用 (1) [p.13]	[研究部会 OS] 数理政治学 [p.13]	[研究部会 OS] 行列・固有値問 題の解法とその 応用 (1) [<i>p.14</i>]	[研究部会 OS] 離散システム (1) [<i>p.14</i>]	[正会員主催 OS] Max-Plus 代数 の数理とその応 用 (1) [<i>p.14</i>]			
10:30-11:50	[研究部会 OS] CAE モデリン グとデータ活用 [<i>p.15</i>]	[正会員主催 OS] 多倍長精度浮動 小数点演算の高 速化手法と応用 (2) [p.15]	[研究部会 OS] 数理ファイナン ス (1) [p.15]	[研究部会 OS] 行列・固有値問 題の解法とその 応用 (2) (~12:10) [<i>p.16</i>]	[研究部会 OS] 離散システム (2) [p.16]	[正会員主催 OS] Max-Plus 代数 の数理とその応 用 (2) [<i>p.16</i>]			
11:50-13:00		JSIAM Letters 編集委員会							
13:00-14:20		ポスター講演 @ 豊田講堂 シンポジオンホール [<i>p.17</i>]							
14:30-14:50		表彰式 @ 豊田講堂							
15:00-16:00	総合講演 l @ 豊田講堂 [p.18]								
16:10-17:10	総合講演 2 @ 豊田講堂 [p.18]								
18:00-20:00	懇親会 @ 豊田講堂 アトリウム								

9月5日	A (ES021)	B (ES022)	C (ES024)	D (ES025)	E (ES034)	F (ES033)
09:30-10:50	[研究部会 OS] 連続体力学の 数理 (1) [p.19]	[研究部会 OS] 数理医学 (1) [p.19]	[研究部会 OS] 数理ファイナン ス (2) [p.19]	[研究部会 OS] 科学技術計算と 数値解析 (1) [p.20]	[研究部会 OS] 数理的技法によ る情報セキュリ ティ (1) [p.20]	[一般講演] 高性能計算 [<i>p.20</i>]
11:00-12:20	[研究部会 OS] 連続体力学の 数理 (2) [<i>p.21</i>]	[研究部会 OS] 数理医学 (2) [p.21]	[研究部会 OS] 数理ファイナン ス (3) [p.21]	[研究部会 OS] 科学技術計算と 数値解析 (2) [p.22]	[研究部会 OS] 数理的技法によ る情報セキュリ ティ (2) [p.22]	[一般講演] 数値解析・数値 計算 (1) [p.22]
12:20-13:30		研究部会連絡会				
13:30-14:50	[研究部会 OS] 連続体力学の 数理 (3) [p.23]	[研究部会 OS] 産業における 応用数理 [p.23]	[研究部会 OS] 数理ファイナン ス (4) [p.23]	[研究部会 OS] 科学技術計算と 数値解析 (3) [p.24]	[研究部会 OS] 数論アルゴリズ ムとその応用 (1) [<i>p.24</i>]	[一般講演] 偏微分方程式 (1) [<i>p.24</i>]
15:00-16:20	[正会員主催 OS] 自己駆動運動の 数理解析 [p.25]	[正会員主催 OS] クルマづくりを 支える応用数理 [<i>p.25</i>]	[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) [<i>p.25</i>]	[研究部会 OS] 科学技術計算と 数値解析 (4) (~16:40) [p.26]	[研究部会 OS] 数論アルゴリズ ムとその応用 (2) [<i>p.26</i>]	[一般講演] 偏微分方程式 (2) [<i>p.26</i>]
16:30-17:50	[一般講演] 統計科学 (~18:10) [<i>p.27</i>]	[正会員主催 OS] ブロックチェー ンと応用数理 [<i>p.27</i>]	[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) [<i>p.2</i> 7]		[一般講演] 流体計算 [<i>p.28</i>]	[一般講演] 数値解析・数値 計算 (2) (~18:10) [p.28]

9月3日 09:30-10:50

A (ES021)

[研究部会 OS] 応用カオス (1)

- 1. ベイズ理論によって捉えるカオス性と情報量との間の一般的な関係式について
- ○梅野 健 (京都大学大学院情報学研 究科数理工学専攻)
- 2. カオス尺度のカオス判定力向上に向けた試み
- ○井上 啓 (山陽小野田市立山口東京 理科大学)
- 3. 1次元カオス写像におけるカオス尺度の極限値に関する考察
- ○奥富 秀俊 (東芝情報システム株式 会社), 真尾 朋行 (東芝情報システム 株式会社)
- 4. カオス尺度の計算方法について
- ○真尾 朋行 (京都大学/東芝情報システム株式会社), 奥富 秀俊 (東芝情報システム株式会社), 梅野 健 (京都大学)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 応用力 学系 (1)

1. 余次元 2 の分岐に対する標準形 の非可積分性

Acosta-Humánez Primitivo (Simón Bolívar 大学), ○矢ヶ崎 一幸 (京都大学)

2. ◎ 2 自由度ハミルトン系における横断的なヘテロクリニック軌道の存在と非可積分性

矢ヶ崎 一幸 (京都大学情報学研究 科), ○山中 祥五 (京都大学情報学研 究科)

- 3. ◎摂動系における周期軌道, ホモクリニック軌道, 第一積分および可換なベクトル場の非保存
- ○本永 翔也 (京都大学情報学研究 科), 矢ヶ崎 一幸 (京都大学情報学研 究科)
- 4. ◎遅延微分方程式に対する岡村 の距離関数と解の一意性のための十 分条件
- ○西口 純矢 (東北大学 数理科学連携研究センター)

C (ES024)

[正会員主催 OS] 非線形 問題のシミュレーション と可視化(1)

- 1. ◎ Modified Improved Interpolating Moving Least Squares 近似を用いた Element-free Galerkin 法の精度向上
- ○藤田 宜久 (函館工業高等専門学校), 伊東 拓 (日本大学), 生野 壮一郎 (東京工科大学), 中村 浩章 (核融合科学研究所)
- 2. 微小スケール領域における電磁 波伝搬解析へのメッシュレス法の適 用
- ○伊東 拓 (日本大学), 藤田 宜久 (函 館工業高等専門学校), 生野 壮一郎 (東京工科大学), 中村 浩章 (核融合 科学研究所, 名古屋大学)
- 3. メッシュレス法を用いた電磁波 伝搬シミュレーション
- ○齋藤 歩 (山形大学大学院理工学研究科), 高山 彰優 (山形大学大学院理工学研究科), 神谷 淳 (山形大学大学院理工学研究科)
- 4. 溶液中における対称双頭型両親 媒性分子の自己会合:散逸粒子動力 学シミュレーション
- ○藤原 進 (京都工芸繊維大学), 水口 朋子 (京都工芸繊維大学), 橋本 雅人 (京都工芸繊維大学)

9月3日 09:30-10:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 折紙工学 (1)

- 1. 超長部材の圧潰特性に関する一 考察
- ○陳 暁詩, 楊 陽, 趙 希祿, 萩原 一郎
- 2. 等面四面体の source unfolding
- 〇山岸 義和 (龍谷大学), 西崎 惇也 (龍谷大学), 佐治 拓道 (龍谷大学)
- 3. ◎展開立方体折紙による宇宙構造システム構築のための構造座屈の調査
- ○有田 祥子 (静岡大学), 宮崎 康行 (日本大学), 福田 一樹 (静岡大学), 山極 芳樹 (静岡大学)
- 4. 折紙ロボットで折るための展開図
- ○ルイス ディアゴ (明治大学), 楊陽 (明治大学), ジュリアン アンドレス ロメロ (AZAPA), 萩原 一郎 (明治大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 機械学習

- 1. カーネルリッジ回帰による物質・ 材料研究
- ○田村 亮 (物質・材料研究機構/東京大学)
- 2. 時空間データ解析のための自己 回帰テンソル分解
- ○竹内 孝 (NTT)
- 3. ◎ Selective Inference に基づく 変化点検出とその応用
- ○梅津 佑太 (名古屋工業大学), 竹 内 一郎 (名古屋工業大学/理化学研 究所/物質・材料研究機構)
- 4. ◎関数推定の理論に基づく深層 学習の原理解析
- ○今泉 允聡 (統計数理研究所)

F (ES033)

[研究部会 OS] 数理設計 (1)

- ○熱弾性場の3次元形状最適化 解析
- ○小森 太陽 (岐阜工業高等専門学校専攻科学生), 片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校機械工学科)
- 2. Shape optimization for a linear elastic fish robot

Azegami Hideyuki, O Chancharoen Wares (Nagoya University)

3.

An Improved Shape Optimization Formulation of the Bernoulli Problem by Tracking the Neumann Data

Azegami Hideyuki, \bigcirc Rabago Julius Fergy

4. © Enhanced Collaborative Optimization Using Alternating Direction Method of Multipliers

Tao Siyu (Northwestern University), \bigcirc Shintani Kohei (Northwestern University), Yang Guang (Toyota Motor North America), Meingast Herb (Toyota Motor North America), Chen Wei (Northwestern University)

9月3日 11:00-12:20

A (ES021)

[研究部会 OS] 応用カオス(2)

- 1. APFA のカオス性
- ○中澤 勇夫 (京都大学), 梅野 健 (京都大学)
- 2. 2016年台湾地震の電離層に おける先行現象
- ○後藤 振一郎 (京都大学), 打田 凌馬 (京都大学), 五十嵐 喜良 (京都大学), Chen Chia-Hung (成功大学), 梅野 健 (京都大学)
- 3. Arnold の猫写像のカオス真軌道 の生成と乱数性の解析

多久島 秀平 (福岡工業大学), ○田村 健太郎 (福岡工業大学), 斉藤 朝輝 (公立はこだて未来大学), 山口 明宏 (福岡工業大学)

- 4. 力学系の混合性の電磁気学への応用
- ○杉本 哲 (京都大学工学部情報学 科), 梅野 健 (京都大学情報学研究科 数理工学専攻)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 応用力 学系 (2)

- 1. 倒立バネ振り子モデルによるヒトの歩行・走行・転倒の分岐
- 〇森田 英俊 (京都大学), 青井 伸也 (京都大学), 土屋 和雄 (京都大学), 國府 寬司 (京都大学)
- 2. ◎レイリー・ベナール対流におけるラグランジュ的な流体輸送の解析
- ○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), 吉村 浩 明 (早稲田大学基幹理工学部機械科 学・航空学科)
- 3. On a novel variational approach to robust finite time optimal control
- ○藤本 健治 (京都大学), 大倉 裕貴 (京都大学)
- 4. 車輪の質量不釣り合いに起因したパラメータ励振を伴う蛇行動の非線形解析
- ○徐 鑫哲 (筑波大学大学院システム 情報工学研究科), 藪野 浩司 (筑波大 学システム情報系)

C (ES024)

[正会員主催 OS] 非線形 問題のシミュレーション と可視化(2)

- 1. 通信回避アルゴリズム付き共役 勾配法の収束改善
- ○松元 朗 (東京工科大学), 藤田 宜 久 (函館工業高等専門学校), 伊藤 拓 (日本大学), 生野 壮一郎 (東京工科 大学)
- 2. ◎ポリゴンモデルから局所的陰 関数曲面モデルへの変換
- 〇谷 周世 (立命館大学大学院), 仲田 晋 (立命館大学), 風間 正喜 (富士通), 諏訪 多聞 (富士通)
- 3. バーチャルリアリティ空間にお ける核融合炉の組み立て
- 〇大谷 寬明 (核融合科学研究所), 宫澤 順一 (核融合科学研究所), 高丸尚教 (中部大学), 嘉無木 昇 (中部大学), 石黒 静児 (核融合科学研究所)

9月3日 11:00-12:20

D (ES025)

[研究部会 OS] 折紙工学 (2)

- 1. 果物の入った箱入りアッセンブリトラスコアの輸送に関する一考察
- ○阿部 綾 (明治大学), 寺田 耕輔 (奈 良高専), 萩原 一郎 (明治大学)
- 2. 編み紙の数理 ~ 材料の伸びを考慮した曲面設計最適化~
- ○堀川 由人 (大阪大学工学研究科), 垂水 竜一 (大阪大学基礎工学研究 科)
- 3. ねじり折り平坦可折定理の証明 の完成
- ○川崎 英文 (九州大学)
- 4. 6次元のかたち巡り
- ○宮崎 興二 (京都大学名誉教授)

E (ES034)

[研究部会 OS] 応用可積 分系 (1)

- 1. 相似可積分幾何を用いた対数型 美的曲線の空間曲線への拡張
- ○梶原 健司 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所), Schief Wolfgang (University of New South Wales)
- 2. © Fairing of discrete planar curves with integrable discretization of Euler's elasticae
- ○GRAIFF ZURITA SEBASTIAN ELIAS (九州大学大学院数理学府), 梶原 健司 (九州大学マス・フォア・ インダストリ研究所)
- 3. Lotka-Volterra flow on discrete centroaffine plane curves
- 〇朴 炯基 (九州大学大学院), 梶原 健司 (九州大学), 松浦 望 (久留米工業大学)
- 4. Kahan-廣田-木村型離散 three wave system と QRT 写像
- ○高江 宥光 (京大数理), 木村 欣司 (サレジオ高専), 中村 佳正 (京大数理)

F (ES033)

[研究部会 OS] 数理設計 (2)

- 1. トポロジー最適化理論に基づく 剛性最大化構造に対する数値的・実 験的検証
- ○吉原 健太 (長岡技術科学大学 機械創造工学専攻), 倉橋 貴彦 (長岡技術科学大学 機械創造工学専攻), 小林 正成 (オイレス工業株式会社)
- 2. 制約質量下の最適密度分布の存 在と数値的構成
- ○海津 聰
- 3. ◎波動型方程式の係数同定逆問題に対する H1-H2 勾配法
- ○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)
- 4. スカラー波動方程式の係数同定 問題に対する H2 勾配法
- ○代田 健二 (愛知県立大学情報科学 部)

9月3日 12:30-13:30 @ D (ES025)

キャリアデザインのためのランチミーティング

今回の年会でも、若手・女性研究者が日ごろ気になっていることを多くの方と共有し、情報交換を行う時間を設けました。今回は、若手のキャリアデザインに焦点を当てて、参加者間の情報交換・意見交換、また学会への意見・要望などをいただければと思っております。少しばかりの軽食と飲み物をご用意してお待ちしております。事前の登録等は不要ですので、お気軽にご参加ください。

9月3日 13:30-14:50

A (ES021)

[正会員主催 OS] 乱数生 成と評価

- 1. 一様分布との適合度検定を用いた乱数性判定における P 値の分布の離散性の影響の解析
- ○山口 明宏 (福岡工業大学), 斉藤 朝輝 (公立はこだて未来大学)
- 2. Overlapping Template matching 検定におけるテンプレートの選び方に関する一考察
- ○岩崎 淳 (福岡工業大学)
- 3. ◎整数上のカオス写像における ビット毎の 0/1 の出現確率に関する 一考察
- ○村岡 英之 (九州工業大学), 荒木 俊輔 (九州工業大学), 宮崎 武 (北九 州市立大学), 上原 聡 (北九州市立大 学), 硴崎 賢一 (九州工業大学)
- 4. ラグ付きフィボナッチ生成法に対するある非統計的検定について
- ○原本 博史 (愛媛大学)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 応用力 学系 (3)

- 1. ネットワーク上の蔵本モデルの同期現象
- ○千葉 逸人 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所)
- 2. ネットワーク力学系の同期とネットワーク構造
- ○國府 寛司 (京都大学・大学院理学 研究科)
- 3. 複数のグラフに依存する結合振 動子系の連続極限
- ○伊原 亮輔 (京都大学), 矢ヶ崎 一幸 (京都大学)
- 4. 化学反応経路網の幾何学的理解 に向けて
- ○荒井 迅 (中部大学創発学術院)

C (ES024)

[正会員主催 **OS**] 非線形 問題のシミュレーション と可視化(**3**)

- 1. 等価回路モデルによる HTS 内の 遮蔽電流密度解析
- 〇山口 敬済 (山形大学), 高山 彰優 (山形大学), 齋藤 歩 (山形大学), 神谷 淳 (山形大学)
- 2. プラズマ対向壁リサイクリング モデル開発を目指した水素プラズマ 照射の分子動力学シミュレーション
- ○斎藤 誠紀 (釧路工業高等専門学校),中村 浩章 (核融合科学研究所),澤田 圭司 (信州大学),小林 政弘 (核融合科学研究所),河村 学思 (核融合科学研究所),蓮尾 昌裕 (京都大学)
- 3. タングステンフラクタル構造の 光学応答シミュレーション
- 〇中村 浩章 (核融合科学研究所),中村 浩章 (名古屋大学),浅野 恵吾 (名古屋大学),安永 卓生 (九州工業大),梶田 信 (名古屋大学),大野 哲靖 (名古屋大学),吉田 直亮 (九州大学)
- 4. 超伝導リニア駆動型ペレット入 射法の FEM シミュレーション
- 〇高山 彰優 (山形大学), 山口 敬済 (山形大学), 齋藤 歩 (山形大学), 神谷 淳 (山形大学)

9月3日 13:30-14:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 計算の品 質 (1)(14:10~)

- 1. ◎高精度行列 行列積のための Batched BLAS および疎行列演算を 用いた実装方式の GPU 環境での性 能評価
- ○石黒 史也 (名古屋大学大学院 情報学研究科), 片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤センター), 大島 聡史 (九州大学情報基盤研究開発センター), 永井 亨 (名古屋大学情報基盤センター), 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター)
- 2. 分散並列計算環境における疑似 多倍長精度演算を用いた行列・ベク トル積の実装と評価
- 〇小林 亮太 (芝浦工業大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 応用可積 分系(2)

- 1. 戸田格子におけるポアンカレ不 変量
- ○佐々 成正 (原子力機構)
- 2. ◎ベルヌイ分布と正規分布を重ね合わせた制約ボルツマンマシンにおける相転移と秩序パラメータ
- ○舘崎 優人 (宇都宮大学大学院工学研究科情報システム科学専攻), 上村佳嗣 (宇都宮大学大学院工学研究科情報システム科学専攻), 小池 正史 (宇都宮大学大学院工学研究科情報システム科学専攻), 矢嶋 徹 (宇都宮大学大学院工学研究科情報システム科学専攻)
- 3. 正多面体上のハミルトン閉路に 対応する離散ソボレフ不等式の最良 定数
- 〇山岸 弘幸 (都立高専), 亀高 惟倫 (阪大名誉教授), 關戸 啓人 (京大)
- 4. ◎順序付きハミンググラフにお ける量子ウォークについて
- ○三木 啓司 (気象大学校), 辻本 諭 (京都大学大学院情報学研究科), Luc Vinet (Université de Montréal)

F (ES033)

[一般講演] 最適化

- 1. 情報伝達長を考慮したピラミッド組織構造の2階層リエゾン配置モデル
- ○澤田 清 (流通科学大学)
- 2. ◎ 非 二 部 的 Dulmage-Mendelsohn 分解と Berge 双対 の束構造
- ○喜多 奈々緒 (東京理科大学)
- 3. ◎幾何学的最適化に基づく対称 性をもつ連続時間線形システムの新 しい同定法
- ○佐藤 寛之 (京都大学), 佐藤 一 宏 (北見工業大学), Damm Tobias (University of Kaiserslautern)

9月3日 15:00-16:20

A (ES021)

[研究部会 OS] 応用カオス (3)

- 1. あるマスター方程式から導出される期待値方程式に対する接触幾何 学的記述
- ○後藤 振一郎 (京都大学), 日野 英逸 (統計数理研究所)
- ○奥戸 道子 (東京大学), 鈴木 秀幸 (大阪大学)
- 3. ◎ 統 計 量 に よ る Peak-to-Average Power Ratio の上界
- ○津田 宏史 (京都大学 情報学研究 科), 梅野 健 (京都大学 情報学研究 科)
- 4. 普遍超一般化中心極限定理
- ○梅野 健 (京都大学大学院情報学 研究科数理工学専攻)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 応用力 学系 (4)

- 1. 三体 8 の字解と、それから分岐 する解の線形安定性
- ○藤原 俊朗 (北里大学), 福田 宏 (北里大学), 尾崎 浩司 (東海大学)
- 2. ◎確率的レイリー・プレセット 方程式の変分的定式化と分岐現象の 解析
- ○牛奥 隆博 (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)
- 3. SU(p,q) 上の自由剛体の力学系 に関する安定性解析
- ○多羅間 大輔 (立命館大学理工学部 数理科学科), Ratiu Tudor S. (上海 交通大学数学科学学院)
- 4. 変分的積分法と非平衡熱力学系への応用
- ○吉村 浩明 (早稲田大学), Gay-Balmaz Francois (Ecole Normale Superieure de Paris)

C (ES024)

[研究部会 OS] ウェーブ レット (1)

- 1. [OS 特別講演:40 分] On the Double Windowed Ridgelet Transform and its Inverse
- 木下 保 (筑波大学 数理物質系), 藤井 克哉 (筑波大学 数理物質科学 研究科)
- 2. 信号の周波数ピークごとの分解 と瞬時周波数
- ○山内 佑維 (大阪教育大学)
- 3. 画像分離問題における回転角度と平行移動量の同定について
- 〇守本 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)

9月3日 15:00-16:20

D (ES025)

[研究部会 OS] 計算の品 質(2)

- 1. 厳密な固有値・特異値がわかる 行列の生成法
- ○尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学)
- 2. 一般化エルミート固有値問題の 周回積分型精度保証付き部分固有値 計算

今倉 暁 (筑波大学システム情報系), 保國 惠一 (筑波大学システム情報 系), ○高安 亮紀 (筑波大学システム情報系)

- 3. ◎ LU 分解を用いた CholeskyQRアルゴリズムの誤差解 析
- 〇寺尾 剛史 (芝浦工業大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東 京女子大学)
- 4. 行列積に関する計算順序の特定 法とその応用
- ○坂本 篤志 (芝浦工業大学大学院), 尾崎 克久 (芝浦工業大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 応用可積 分系 (3)

- 1. Pitman 変換による箱玉系の解析 Croydon David (京都大学大学院情
- 報学研究科), 佐々田 槙子 (東京大学 大学院数理科学研究科), 加藤 毅 (京 都大学大学院理学研究科), ○辻本 諭 (京都大学大学院情報学研究科)
- 2. ◎番号付き・運搬車付き箱玉系 のもう1つの一般化
- ○前田 一貴 (関西学院大学理工学 部)
- 3. ◎時間 2 階 max 方程式の解について
- 〇山本 惇太郎 (早稲田大学大学院数学応用数理専攻), 高橋 大輔 (早稲田大学大学院数学応用数理専攻)
- 4. ◎ Laurent 双直交多項式に付随 する可積分系とその正値解について
- 〇小林 克樹 (京都大学大学院 情報 学研究科), 前田 一貴 (関西学院大学 理工学部 数理科学科), 辻本 諭 (京 都大学大学院 情報学研究科)

F (ES033)

[正会員主催 OS] FreeFem++での開発 と利用

- 1. 超収束する HDG 法の開発
- ○及川 一誠 (早稲田大学)
- 2. 非定常性を考慮した熱弾性場の 形状最適化
- ○片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校), 広瀬 智史 (岐阜工業高等専門学校 専攻科学生)
- 3. Development of Dynamic Loading Module in FreeFem++ for Obtaining a System of Linear Equations
- ○藤原 宏志 (京都大学), Hecht Frédéric (University Pierre and Marie CURIE)
- 4. 半導体ドリフト拡散方程式での 指数関数重み係数の要素積分法
- ○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメ ディアセンター)

9月3日 16:30-17:50

A (ES021)

[一般講演] 数理モデリン グ (1)

- 1. 排除体積効果を伴う2体相互作用におけるパターン形成について
- ○由良 文孝 (公立はこだて未来大学システム情報科学部), 田久保 直子 (東京大学アイソトープ総合センター), 林達也 (東京大学大学院数理科学研究科), 間田潤 (日本大学生産工学部), 栗原 裕基 (東京大学大学院医学系研究科), 時弘哲治 (東京大学大学院数理科学研究科)
- 2. 拡散効果を取り入れた病原体・免疫モデルの漸近挙動
- ○佐々木 徹 (岡山大環境生命科学研 究科)
- 3. ◎ BZ 反応振動子系への大域的 フィードバック制御
- ○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)
- 4. 周期昆虫における生活環恒常性 の進化
- ○今 隆助 (宮崎大学)

B (ES022)

[一般講演] 常微分方程式

1. 結晶方位差と三重点による結晶 粒界の発展方程式

Epshteyn Yekaterina (The University of Utah), Liu Chun (Illinois Institute of Technology), ○水野 将司 (日本大学理工学部)

- 2. 非線形連立 ODE とコネクトーム
- ○伊藤 利明 (同志社大学)
- 3. ◎船体転覆モデルに対するリア プノフスペクトルを用いた解析手法 の検討
- 〇日田 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)
- 4. ある遅延微分方程式の陽的な周期解について
- ○中田 行彦 (島根大学)

C (ES024)

[研究部会 OS] ウェーブ レット (2)

- 1. [OS 特別講演:40 分] ウェーブ レット解析による聴性定常反応波形 高速加算法の検証
- 〇井川 信子 (流通経済大学), 守本晃 (大阪教育大学), 芦野 隆一 (大阪教育大学)
- 2. 両側四元数フーリエ変換と右側 四元数フーリエ変換に関するいくつ かの注意
- ○芦野 隆一 (大阪教育大学)

9月3日 16:30-17:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 計算の品 質(3)

- 1. 2 階楕円型作用素に対する逆作用 素ノルム評価の改良
- ○渡部 善隆 (九州大学), 木下 武彦, 中尾 充宏 (早稲田大学)
- 2. 微分方程式の爆発解の精度保証 付き数値計算:ケーススタディー 指数関数非線型項を持つ場合
- ○松江 要 (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), 高安 亮紀 (筑波大学システム情報系)
- 3. フーリエ係数の時間発展方程式 に対する解の精度保証付き数値計算 ○高安 亮紀 (筑波大学システム情報 系)
- 4. 3 次元領域における Navier-Stokes 方程式の定常解の検証
- ○劉 雪峰 (新潟大学), 中尾 充宏 (早稲田大学), 大石 進一 (早稲田大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 応用可積 分系 (4)

- 1. $A_2^{(2)}$ 型クラスター代数の生成元 について
- ○野邊 厚 (千葉大学教育学部)
- 2. ◎要素指定逆固有値問題に関する一意解のII型離散ハングリー系を利用した解法
- ○上田 純也 (同志社大学大学院理工学研究科), 近藤 弘一 (同志社大学大学院理工学研究科)

F (ES033)

[講習会] FreeFem++ での開発と利用(~ 18:00)

- 1. 流体構造連成問題 弱連成形 式での力の釣り合いと領域の変形
- ○高石 武史 (武蔵野大学), 鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

9月4日 09:00-10:20

A (ES021)

[一般講演] 数理モデリン グ (2)

1. ◎非独立なマーケット・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 (芝浦工業大学理 工学研究科)

- 2. 再生核補間を用いた後退確率微分方程式の数値解析
- ○田中 俊介
- 3. バーゼル III 適格 Additional Tier1 債券 (AT1 債) に 対する構造 型プライシングモデルの改良と実証 分析
- ○杉山 泰平 (三井住友アセットマネジメント株式会社), 中川 秀敏 (一橋大学大学院経営管理研究科)
- 4. Inequality of Realization of a Stochastic Economic Dynamics based on the Erdős Discrepancy Problem
- ○加藤 寛之 (嘉悦大学)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 多倍長 精度浮動小数点演算の高 速化手法と応用(1)

- 1. [招待講演: 40 分] Intel AVX-512 命令を用いた複数の整数除算の 高速化
- ○高橋 大介 (筑波大学計算科学研究 センター)
- 多倍長精度浮動小数点演算の並列化

八木 武尊 (東京理科大学), 菱沼 利彰 (筑波大学), 石渡 恵美子 (東京理科大学), ○長谷川 秀彦 (筑波大学)

- 3. 4倍長精度・高次数解法による 常微分方程式の数値解法
- ○平山 弘 (神奈川工科大学)

C (ES024)

[研究部会 **OS**] 数理政治 学

- 1. 協力行動に対するクラスタリングの効果
- ○守田智(静岡大学工学部)
- 2. 二重比例法による議席配分のシミュレーション分析
- ○諸星 穂積 (政策研究大学院大学)
- 3. 選挙キャンペーンの決定と有権 者の教育水準に関する因果関係の測 定について
- ○中川 訓範 (静岡大学)
- 4. 議席配分方式の偏りについて
- ○一森 哲男 (大阪工業大学)

9月4日 09:00-10:20

D (ES025)

[研究部会 OS] 行列・固 有値問題の解法とその応 用(1)

- 1. 複素モーメント型教師あり次元 削減法
- ○今倉 暁 (筑波大学), 松田 萌望 (筑 波大学), 叶 秀彩 (筑波大学), 櫻井 鉄 也 (筑波大学)
- 2. ◎相互作用型の残差スムージン グによる積型 BiCG 法の収束性改善
- ○相原 研輔 (東京都市大学)
- 3. Block BiCGSTAB 法の近似解高 精度化と数値的安定化
- ○多田野 寬人 (筑波大学), 倉本 亮世 (筑波大学)
- 4. 一般化非定値固有値問題へのシ ルベスター慣性則
- ○中務 佑治 (国立情報学研究所), Noferini Vanni (University of Essex)

E (ES034)

[研究部会 OS] 離散シス テム(1)

1. 船速最適化を実現する船舶スケジューリングに対する高速な列生成アルゴリズム

田中 未来 (統計数理研究所), ○小林 和博 (東京理科大学)

- 2. ◎東上の DR-劣モジュラ性による部分空間選択
- ○中島 蒼 (東京大学, 理研 AIP), 前 原 貴憲 (理研 AIP)
- 3. ◎展開型マッチングゲームにおける部分ゲーム完全均衡

河瀬 康志 (東京工業大学), 山口 勇 太郎 (大阪大学), ○横井 優 (国立情 報学研究所)

- 4. 非可換な変数をもつ多項式行列 の行列式の次数の計算について
- ○平井 広志 (東京大学大学院情報理 工学系研究科)

F (ES033)

[正会員主催 OS] Max-Plus 代数の数理とその 応用(1)

- 1. [招待講演: 40 分] Max-Plus 代数からトロピカル幾何へ,最近の進展と工程計画問題への応用
- ○小林 正典 (首都大学東京・大学院 理学研究科・数理科学専攻)
- [招待講演:40分] Max-Plus 代数のダイナミクス
- ○高橋 大輔 (早稲田大学基幹理工学 部応用数理学科)

9月4日 10:30-11:50

A (ES021)

[研究部会 **OS**] **CAE** モ デリングとデータ活用

- 1. [15分] 流体構造連成解析のため のメッシュ制御技術の開発
- ○山田 知典 (東京大学)
- 2. [15分] き裂進展予測サロゲート モデルの構築
- ○和田 義孝 (近畿大学)
- 3. [15分] 粒子法による流体解析の ための粒子・ポリゴン境界表現の開 発
- ○室谷 浩平 (鉄道総合技術研究所)
- 4. [15分] Bezier 曲線を生成元とした Voronoi 図の正確な隣接関係の決定
- ○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)
- 5. [15 分] 視体積交差メッシュの接 続性計算
- ○森口 昌樹 (明治大学 先端数理科 学インスティテュート)

B (ES022)

[正会員主催 OS] 多倍長 精度浮動小数点演算の高 速化手法と応用(2)

- 1. [招待講演:40分] 多倍長計算 環境 exflib の最新計算環境への対応 と普及
- ○藤原 宏志 (京都大学大学院情報学 研究科)
- 2. [招待講演:40 分] PEZY-SC2 上における倍々精度 Rgemm の実装 と評価
- ○菱沼 利彰 (株式会社 PEZY Computing), 中田 真秀 (理化学研究所)

C (ES024)

[研究部会 OS] 数理ファ イナンス (1)

- 1. コピュラを用いた VaR の推定に ついて
- Molina Barreto Andres Mauricio (中央大学商学研究科), 石村 直之 (中央大学商学部)
- 2. 最大値に依存する金融商品のリスク計算について
- ○中津 智則 (芝浦工業大学)
- 3.

 A Study on Ruin Probability of a Mortgage Loan with Risk Factors

赤堀 次郎 (立命館大学理工学部数理科学科), Constantinescu Corina (University of Liverpool), ○今村 悠里 (東京理科大学経営学部ビジネスエコノミクス学科)

9月4日 10:30-11:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 行列・固 有値問題の解法とその応 用(2)(~12:10)

- 1. ◎非線形固有値問題に対する block Arnoldi 法
- 〇長坂 英明 (慶應義塾大学理工学研究科基礎理工学専攻), 野寺 隆 (慶應義塾大学理工学部数理科学科)
- 2. 少数のレゾルベントの線形結合 の多項式をフィルタとして用いた一 般固有値問題の解法
- ○村上 弘 (首都大学東京)
- 3. 対称固有値問題を解く反復射影 法に対して収束を保証するリスター トについて
- ○相島 健助 (法政大学)
- 4. ◎実対称疎行列に対する効率的 三重対角化アルゴリズム
- ○廣田 悠輔 (東京電機大学)
- 5. 荻田・相島の固有ベクトル反復 改良法における重複固有値の扱いに ついて

白間 久瑠美 (電気通信大学), 工藤 周平 (電気通信大学), ○山本 有作 (電気通信大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 離散シス テム (2)

- 1. \bigcirc On a construction of Ramanujan graphs
- ○佐竹 翔平 (神戸大学 大学院システム情報学研究科)
- 2. ◎完全多部四点木システムから の系統樹構築

平井 広志 (東京大学), ○岩政 勇仁 (東京大学)

- 3. 最小スパナー問題の困難性と固 定パラメータ容易性
- ○小林 佑輔 (京都大学)

F (ES033)

[正会員主催 OS] Max-Plus 代数の数理とその 応用 (2)

- 1. [招待講演: 40 分] 数理計画問題における max-plus 代数の活用制御工学から組合せ最適化まで
- ○五島 洋行 (法政大学)
- 2. Max-Plus 代数とスケジューリン グ問題
- ○久保 奨 ((独) 統計センター), 西 成 活裕 (東京大学先端科学技術研究 センター)
- 3. ◎ Max-Plus 代数における行列 の核とその基底の特徴づけ
- ○西田 優樹 (同志社大学大学院理工 学研究科数理環境科学専攻)

9月4日 13:00-14:20 ポスター講演 @ 豊田講堂 シンポジオンホール

- ○:登壇者, ◎:優秀ポスター賞対象
 - 1. ◎座席位置選択モデルにおける状態空間生成条件について
 - ○小笠原 悠 (首都大学東京)
 - 2. 消失点検出のための直線の確率表現に基づく投票法
 - ○舛本 高紀 (和歌山大学大学院システム工学研究科), 陳 謙 ((株) センスタイムジャパン), 今井 敏行 (和歌山大学システム工学部)
 - 3. ◎計算手順と配列の並び替え手順の最適化による n 次元 HOTRG の計算時間の削減
 - ○山田 悠加 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 今村 俊幸 (理研 R-CCS), 櫻井 鉄也 (筑波大学)
 - 4. © Robust Multi-material Topology Optimization for Lattice Structure Under Material Uncertainties
 - O Shintani Kohei (Northwestern University), Chan Yu-Chin (Northwestern University), Chen Wei (Northwestern University)
 - 5. ◎多集団年齢構造化 SIR 感染症モデルを用いたクラミジア疫学データの考察
 - ○國谷 紀良 (神戸大学大学院システム情報学研究科)
 - 6. ◎粒子法と Bohm 形式による波束の干渉の数値解析
 - ○廣野 史明 (法政大(情報)), 岩沢 美佐子 (法政大(理工)), 善甫 康成 (法政大(情報))
 - 7. グラフの閉路リダクションを用いた Min-Plus 行列の対角化
 - ○佐藤 宏平 (小山高専), 西田 優樹 (同志社大学), 渡邉 扇之介 (小山高専)
 - 8. ◎深層学習における skip 結合の理解
 - ○長瀬 准平 (芝浦工業大学大学院理工学研究科), 石渡 哲哉 (芝浦工業大学システム理工学部)
 - 9. ◎グレブナー基底を用いた黄金比に収束するファジーセルオートマトンの列挙
 - ○福田 亜希子 (芝浦工業大学), 渡邉 扇之介 (小山工業高等専門学校)
 - 10. ◎力学的境界条件下における Caginalp system に対する構造保存スキーム
 - ○奥村 真善美 (大阪大学)
 - 11. Mathematical modeling of cell-cell adhesion and its applications
 - ○村川 秀樹 (九州大学), Carrillo Jose A. (Imperial College London), 佐藤 純 (金沢大学), 富樫 英 (神戸大学)
 - 12. 折紙工法による紙/樹脂製緩衝材兼運搬箱の開発

萩原 一郎 (明治大学), 寺田 耕輔 (奈良高専), ○阿部 綾 (明治大学)

- 13. ◎ Einstein 方程式の補正形式と重力崩壊の数値計算
 - ○浦川 遼介 (早稲田大学), 土屋 拓也 (早稲田大学), 米田 元 (早稲田大学)
- 14. ◎空き家の有効活用数理モデルを用いた地域別最適政策の考察
 - ○野間田 匡顕 (理学研究科)
- 15. ◎コウイカにおける動的パターン形成メカニズムの理解に向けて
 - ○水野 佳奈 (島根大学総合理工学研究科), 岩本 真裕子 (島根大学総合理工学研究科)
- 16. 粘着円充填
 - ○牧田 渉 (龍谷大学), 岸田 健太 ((株) イーオン), 須志田 隆道 (北海道大学), 山岸 義和 (龍谷大学)

- 17. ◎ある2次元ソリトン方程式の解とネットワーク
 - 〇城戸 真弥 (早稲田大学数学応用数理専攻), 田中 悠太 (早稲田大学数学応用数理専攻), 渡邉 靖之 (早稲田大学数学応用数理専攻), 丸野 健一 (早稲田大学), 筧 三郎 (立教大学)
- 18. ◎スペクトラル特徴量スケーリングの多クラス分類問題への拡張
 - ○松田 萌望 (筑波大学), 保國 惠一 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)
- 19. ◎様々な Hele-Shaw 型問題の基本解近似解法による統一的数値解法
 - ○榊原 航也 (京都大学・理研), 矢崎 成俊 (明治大学)
- 20. ◎成分濃縮ネットワークでの分離特性関数および不均一性の平衡解への影響
 - ○照山 楓 (茨城大学), 三瓶 貴俊 (茨城大学), 渡邊 辰矢 (茨城大学)
- 21. ベイズ推定を用いた並列数値計算ライブラリの性能予測
 - 〇原田 祐希 (鳥取大学), 田中 和幸 (鳥取大学), 福本 智哉 (鳥取大学), 深谷 猛 (北海道大学), 山本 有作 (電気通信大学), 星 健夫 (鳥取大学)
- 22. 一般アルキメデス螺旋格子による葉序的なボロノイタイリング
 - ○須志田 隆道 (北海道大学 電子科学研究所), 山岸 義和 (龍谷大学 理工学部)
- 23. ◎反復線形ソルバを用いた大規模密一般化固有値問題向け SS-RR 法の性能評価
 - ○矢野 貴大 (筑波大学), 二村 保徳 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)
- 24. グレゴリー級数の剰余項の連分数表示

薄井 宗一 (福島大学), ○笠井 博則 (福島大学), 大浦 拓哉 (京都大学)

- 25. Shifted Block BiCGStab 法の近似解精度劣化の数値的原因解析
 - ○倉本 亮世 (筑波大学大学院システム情報工学研究科), 多田野 寛人 (筑波大学計算科学研究センター)
- 26. ◎ CCM による力学系ネットワーク構造の推定 2
 - ○井上 晟綜 (大阪府立大学工学研究科), 堀田 武彦 (大阪府立大学工学研究科)
- 27. ◎ Einstein 方程式の 2 次摂動まで考慮した数値計算
 - ○福島 実紗 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 土屋 拓也 (早稲田大学基幹理工学部), 米田 元 (早稲田大学基 幹理工学部)
- 28. ◎シフト付き CholeskyQR 法を用いた一般内積空間における QR 分解の計算

深谷 猛 (北海道大学), 中務 佑治 (国立情報学研究所), Kannan Ramaseshan (Arup, UK), 山本 有作 (電気通信大学), ○柳澤 優香 (早稲田大学 理工学術院総合研究所)

- 9月4日 14:30-14:50 表彰式 @ 豊田講堂
- 9月4日 15:00-17:10 総合講演 @ 豊田講堂
 - 1. ゼータ関数の普遍性について

松本 耕二 (名古屋大学)

2. 応用数理としての風が吹けば桶屋が儲かる 菊地 昇 (豊田中央研究所)

9月4日 18:00-20:00 懇親会 @ 豊田講堂 アトリウム

9月5日 09:30-10:50

A (ES021)

[研究部会 OS] 連続体力 学の数理 (1)

- 1. 制限された空間での弾性薄膜の 破壊
- ○赤堀 裕介 (横浜国大環境情報研究院), 増田 千紘 (横浜国大理工学部), 田中 良巳 (横浜国大環境情報研究院)
- 2. Maxwell 型と Zener 型の粘弾性 き裂進展モデルについて
- 〇高石 武史 (武蔵野大学), 西浦 廉 政 (東北大学 AIMR), Avalos Edgar (東北大学 AIMR), Xie Shuangquan (東北大学 AIMR), 赤木 和人 (東北 大学 AIMR)
- 3. ◎ MRE のための 3 次元粘弾性 方程式に対するマルチスケール係数 同定法
- ○前川 秀 (京都大学)
- 4. 共通ヌルクラインに基づく地震 の最終滑り量の予測不能性
- ○鈴木 岳人 (青学大理工)

B (ES022)

[研究部会 OS] 数理医学 (1)

- 1. ◎血管新生における血管内皮細胞の基本動態に関する数理モデル
- 〇林 達也 (東京大学大学院数理科学研究科),由良 文孝 (はこだて未来大学),間田 潤 (日本大学生産工),時弘哲治 (東京大学大学院数理科学研究科),礪波 一夫 (東京大学大学院医学系研究科),栗原 裕基 (東京大学大学院医学系研究科)
- 2. ◎ NF- κ B 非古典的経路における振動現象の数理的解析
- ○畑中 尚也 (大阪大学基礎工学研究 科 システム創成専攻 数理科学領域), 井上 純一郎 (東京大学医科学研究所 癌細胞増殖部門 分子発癌分野), 鈴 木 貴 (大阪大学数理・データ科学教 育研究センター)
- 3. [特別講演: 40 分] 数理解析を 用いた中心体複製の開始制御機構の 解明
- 〇中村 貴紀 (東京大学 医科学研究所 分子シグナル制御分野), 西住 紀子 (東京大学 医科学研究所 分子シグナ ル制御分野), 中澤 嵩 (大阪大学 数 理・データ科学教育研究センター), 森 竜樹 (大阪大学 基礎工学研究科), 鈴木 貴 (大阪大学 数理・データ科 学教育研究センター), 武川 睦寛 (東 京大学 医科学研究所 分子シグナル 制御分野)

C (ES024)

[研究部会 OS] 数理ファ イナンス (2)

- 1. © Hyperbolic symmetrization of Heston type diffusion
- ○井田 有紀 (立命館大学), 木下 剛 (立命館大学)
- 2. 一次元におけるバリア・オプション型期待値の計算方法について
- ○浅野 了 (東京工業大学 理学院 数学系 二宮研究室)
- 3. 二回積分型カーネル関数を用いた偏微分方程式の数値解法について
- ○家田 雅志 (みずほ第一フィナン シャルテクノロジー株式会社)
- 4. 日本のクレジット市場における 信用サイクルの変動要因
- ○廣中 純 (野村アセットマネジメント (株))

9月5日 09:30-10:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (1)

- 1. ◎反応拡散方程式に対する修正 Strang splitting 解法について
- ○中野 航輔 (名古屋大学), 宮武 勇 登 (大阪大学), 剱持 智哉 (名古屋大学), 曽我部 知広 (名古屋大学), 張 紹良 (名古屋大学)
- ②滑らかな領域上の Robin 境界 条件を持つ Poisson 方程式に対する Nitsche 法
- ○千葉 悠喜 (東京大学大学院数理科学研究科), 齊藤 宣一 (東京大学大学院数理科学研究科)
- 3. ◎離散化誤差を考慮した常微分 方程式の初期値推定について
- 〇松田 孟留 (東京大学), 宮武 勇登 (大阪大学)
- 4. 微分代数方程式に対する離散勾 配法の構築
- ○佐藤 峻 (東京大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ(1)

- 招待講演:40分] ProVerif を 用いた TLS1.3 ハンドシェイクプロ トコルの形式検証
- ○荒井 研一 (長崎大学大学院工学研究科), 岡崎 裕之 (信州大学大学院理工学系研究科), 布田 裕一 (東京工科大学コンピュータサイエンス学部)
- 2. ProVerif の検証過程の可視化
- ○吉田 真紀 (情報通信研究機構)
- 3. Scyther tool の検証過程の可視 化
- ○吉田 真紀 (情報通信研究機構)

F (ES033)

[一般講演] 高性能計算

- 1. ◎データ同化のためのアジョイント 法の性能モデル構築の試み
- ○藤川 隼人 (名古屋大学大学院 情報学研究科), 片桐 孝洋 (名古屋大学 情報基盤センター), 永井 亨 (名古屋大学 情報基盤センター), 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター)
- 2. ◎ OpenMP の対象ループとスレッド数を変更する自動チューニング手法の評価
- ○櫻井 刀麻 (名古屋大学大学院情報学研究科), 片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤センター), 永井 亨 (名古屋大学情報基盤センター), 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター)
- 3. 医用画像処理に用いられる大変形微 分同相写像の MPI 並列化とコード最適 化

中島 大地 (名古屋大学大学院 情報学研 究科情報システム学専攻), 田村 友輝 (名 古屋工業大学大学院 情報工学専攻), 物 部 峻太郎 (名古屋工業大学大学院 情報 工学専攻), ○片桐 孝洋 (名古屋大学 情報基盤センター), 本谷 秀堅 (名古屋工業大学大学院 情報工学専攻), 永井 亨 (名 古屋大学 情報基盤センター), 荻野 正雄 (名古屋大学 情報基盤センター)

- 4. 有限要素解析由来の疎行列に対する FPGA を用いた線形ソルバのハードウェ ア化
- 〇井原 遊 (東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻), 橋本 学 (東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻), 奥田 洋司 (東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻)

9月5日 11:00-12:20

A (ES021)

[研究部会 OS] 連続体力 学の数理 (2)

- 1. ◎動弾性境界積分方程式法の almost O(N) 法
- ○佐藤 大祐 (東京大学), 安藤 亮輔 (東京大学)
- 2. 境界要素法における重心要素を 用いない Calderon の前処理に関す る一考察
- ○新納 和樹 (京都大学), 大塚 悠貴 (京都大学), 西村 直志 (京都大学)
- 3. 波動方程式の transmission 問題 における時間域境界積分法の安定性 について
- 三澤 亮太 (京都大学工学研究科), 福 原 美桜 (京都大学情報学研究科), 新 納 和樹 (京都大学情報学研究科), ○ 西村 直志 (京都大学情報学研究科)

B (ES022)

[研究部会 OS] 数理医学 (2)

- 1. 蕁麻疹の謎を解いた一行の方程 式
- ○李 聖林 (広島大学理学部数学科・ JST さきがけ), 秀 道広 (広島大学 医学部皮膚科), 高萩 俊輔 (広島大学 医学部皮膚科), 柳瀬 雄輝 (広島大学 医学部皮膚科)
- 2. MCC Polar Cytoskeleton's Selforganization Simulations using Active Hydrodynamics in a Hexagonal Cell with PCP boundary conditions
- FRANCO-MEDRANO Fermin (阪大院医学系研究科), 鈴木 貴 (阪大院医学系研究科), 小西 聡史 (阪大院医学系研究科), 矢野 智樹 (阪大院医学系研究科), 月田 早智子 (阪大院医学系研究科)
- 3. [特別講演: 40 分] Chemotaxis model in the immunology
- O Hyung Ju Hwang (Pohang University of Science and Technology)

C (ES024)

[研究部会 OS] 数理ファ イナンス (3)

- 1. Risk-sensitive asset management with lognormal interest rates
- ○畑 宏明 (静岡大学教育学部)
- 2. Bitcoin におけるマイニング業者 の収益に関するモデリング
- ○安田 和弘 (法政大学)
- 3. 連続制御と確率インパルス制御 の混合問題に対する数値計算アルゴ リズムの数値実験を通じた比較
- ○内藤 瞭介 (法政大学大学院理工学研究科), 安田 和弘 (法政大学)
- 4. 二項モデル下における Predictable Forward Performance Processes を用いた期待効用に関する数値的考察
- ○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)

9月5日 11:00-12:20

D (ES025)

[研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (2)

- 1. ◎非双曲型平衡点を持つ力学系 における Lyapunov 関数の精度保証 による構成について
- ○寺坂元 (電気通信大学 情報・ネットワーク工学専攻), 中村 正男 (電気通信大学 情報・ネットワーク工学専攻), 新田 光輝 (電気通信大学情報・ネットワーク工学専攻), 山本野人 (電気通信大学 情報理工学研究科)
- 2. ◎精度保証付き数値計算による 高次元力学系の安定・不安定多様体 の捕捉について
- ○新田 光輝 (電気通信大学), 山本 野人 (電気通信大学)
- 3. ◎高次元半線形熱方程式の球対 称問題に対する有限要素法の誤差解 析
- ○中西 徹 (東京大学大学院数理科学研究科), 齊藤 宣一 (東京大学大学院数理科学研究科)
- 4. 数値積分を用いる Lagrange-Galerkin スキームの収束性
- 〇内海 晋弥 (早稲田大学), 田端 正久 (九州大学(名誉教授))

E (ES034)

[研究部会 OS] 数理的技 法による情報セキュリティ (2)

- 1. [招待講演:40分] 同種写像暗号の数理
- ○高島 克幸 (三菱電機)
- 2. ◎ Groebner 基底を用いた同種写 像核計算
- ○髙橋 康 (九州大学大学院数理学府), 安田 雅哉 (九州大学 IMI 研究所)
- 3. ◎ DeepLLL の改良と BKZ への 組込みの提案
- ○中邑 聡史 (九州大学大学院数理学府), 安田 雅哉 (九州大学 IMI 研究所)

F (ES033)

[一般講演] 数値解析・数 値計算 (1)

- 1. 無誤差変換技法を用いた陽的補 外法の精度改善
- ○幸谷 智紀 (静岡理工科大学)
- 2. Enclosing the Hermitian positive definite solution of the conjugate discrete-time algebraic Riccati equation
- O Miyajima Shinya (Iwate University)
- 3. 新しいタイプの 2 次と 3 次 IMEX RK 公式
- ○大野 博 (茨城大学工学部)
- 4. シミュレーションプログラムの 微分可能化と自動微分したプログラ ムの動作確認
- ○堀端 康善 (法政大学 理工学部)

9月5日 13:30-14:50

A (ES021)

[研究部会 OS] 連続体力 学の数理 (3)

- 1. 筋肉における確率的挙動を示す 分子モータと連続体の力学的連成の 数理について
- ○鷲尾 巧 (東京大学)
- 2. ◎圧力 Poisson 問題と対応する Stokes 問題の境界条件
- 〇松井 一徳 (金沢大学 自然科学研 究科 数物科学専攻)
- 3. ◎剪断流における不変解の高レイノルズ数漸近展開解析
- ○出口 健悟 (モナシュ大学)

B (ES022)

[研究部会 OS] 産業にお ける応用数理

- 1. 半導体の抵抗率測定法の開発に現れるいつくかの応用数学の問題
- ○劉 雪峰 (新潟大学大学院自然科学 研究科)
- 2. 半導体製造プロセスにおける悪 条件線形方程式の解法
- ○木村 泰己 (東芝メモリ株式会社), 松縄 哲明 (東芝メモリ株式会社), 三 本木 省次 (東芝メモリ株式会社)
- 3. 名古屋大学情報基盤センターに おけるスーパーコンピュータ民間利 用制度の展開と課題
- ○片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤センター), 田島 嘉則 (名古屋大学情報連携統括本部), 毛利 晃大 (名古屋大学情報連携統括本部), 山田 一成 (名古屋大学情報連携統括本部), 高橋 一郎 (名古屋大学情報連携統括本部), 荻野 正雄 (名古屋大学情報連携統括本部), 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター), 永井 亨 (名古屋大学情報基盤センター), 服部 昌祐 (名古屋大学情報連携統括本部)
- 4. ものづくり研究会 活動紹介 高田 章 (旭硝子株式会社), 櫻井 鉄 也 (筑波大学), ○井手 貴範 (アイシ ン・エィ・ダブリュ株式会社)

C (ES024)

[研究部会 OS] 数理ファ イナンス (4)

- 1. 1次元拡散過程を用いたペアトレーディングモデルでの最適閾値について
- ○関根 順 (大阪大学大学院基礎工学研究科), 深澤 正彰 (大阪大学大学院基礎工学研究科), 前田 ひとみ (大阪大学大学院基礎工学研究科)
- 2. An expansion of BSDE to study arbitrage free price of xVA.
- ○田中 章博 (大阪大学大学院基礎工 学研究科)

9月5日 13:30-14:50

D (ES025)

[研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (3)

- 1. 代用電荷法による複素平面から 3次元曲面への写像
- ○岡野 大 (愛媛大学)
- ②代用電荷法における Fekete 点の近似
- ○平野 広明 (東京大学), 田中 健一郎 (東京大学)
- 3. 再生核ヒルベルト空間における 関数近似のための標本点生成法について
- ○田中 健一郎 (東京大学)
- 4. 連分数を用いた数値解析接続と Fourier 変換への応用
- ○緒方 秀教 (電気通信大学大学院情報理工学研究科情報・ネットワーク工学専攻)

E (ES034)

[研究部会 OS] 数論アル ゴリズムとその応用 (1)

- 1. ◎ Coppersmith アルゴリズムを 用いた Nemec らによる素因数分解 法について
- ○菊地 修 (首都大学東京大学院修士 2年), 内山 成憲 (首都大学東京教授)
- 2. 多項式 $x^2 + 5x + 5$ に関する 2 次 Frobenius 擬素数について
- ○長島 早紀 (首都大学東京大学院), 篠原 直行 (情報通信研究機構), 内山 成憲 (首都大学東京)
- 3. F4-style アルゴリズムの実装について
- ○緑川輝(首都大学東京大学院修士2年),篠原直行(情報通信研究機構主任研究員),内山成憲(首都大学東京教授)
- 4. Q(sqrt-23) に虚数乗法を持つ楕円曲線を用いた特別な整数に対する素数証明アルゴリズム
- ○小貫 啓史 (首都大学東京)

F (ES033)

[一般講演] 偏微分方程式 (1)

- 1. ◎ SKT 交差拡散定常極限方程式 の解の多重度と安定性の数値解析
- 〇森 竜樹 (阪大基礎工), 鈴木 貴 (阪 大 MMDS), 四ツ谷 晶二 (龍谷大理 工)
- 2. ◎非対称細胞分裂における極性 パターン形成メカニズムの解明
- ○中原 智弘 (広島大学), 李 聖林 (広島大学 JST さきがけ)
- ルジャンドル陪関数の変形と応用12
- ○田川 昭夫 (なし)
- 4. 文字列の非可換位相半群上の偏 微分方程式と生物群集の動態解析
- ○小谷野 仁 (東京工業大学),澤田 和典 (株式会社ぐるなび),山本 希 (東京工業大学),山田 拓司 (東京工 業大学)

9月5日 15:00-16:20

A (ES021)

[正会員主催 OS] 自己駆動運動の数理解析

- 1. ◎有限領域に閉じ込められた樟 脳粒の自己駆動運動
- 〇小谷野 由紀 (千葉大学), 末松 J. 信彦 (明治大学), 北畑 裕之 (千葉大学)
- 2. ◎円環水路上に現れる樟脳円板 のクラスター運動に対する数学解析
- ○岡本 守 (北海道大学理学院博士課程),後藤田 剛 (北海道大学電子科学研究所附属社会創造数学研究センター人間数理研究分野),長山 雅晴 (北海道大学電子科学研究所附属社会創造数学研究センター人間数理研究分野)
- 3. 流体力学を伴う液滴の自発運動 と相互作用
- ○義永 那津人 (東北大学 WPI-AIMR, 産総研 MathAM-OIL)
- 4. 単一自己駆動粒子が呈する準周 期的な運動の数理解析
- ○池田 幸太 (明治大), 宮路 智行 (明治大), 北畑 裕之 (千葉大), 小谷野 由紀 (千葉大), 義永 那津人 (東北大)

B (ES022)

[正会員主催 OS] クルマ づくりを支える応用数理

- 1. [23分] 形態最適化計算の自動 車関連の実問題への応用
- 〇村井 大介 (株式会社 豊田中央研究所), 吉田 広顕 (株式会社 豊田中央研究所)
- 2. [19分] 車載エアコン用モータ の音響シミュレーション
- ○柘植 竜也 (株式会社 デンソー), 大澤 司 (株式会社 デンソー),池 田 和正 (株式会社 デンソー)
- 3. [19分] 自動車の電動化に向けた開発・製造における熱流体シミュレーション
- ○堀之内 成明 (株式会社 豊田中 央研究所)
- 4. [19分] Deep Convolutional Neural Network による自動車用 オートマチックトランスミッション の制御に現れる時系列データの 2 値 分類
- 〇井手 貴範 (アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 川上 雄史 (アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 富田 陽久 (アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 森山 英二 (アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 筒井 洋(アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 筒井 洋(アイシン・エィ・ダブリュ株式会社), 保木 邦仁 (電気通信大学), 村松 正和 (電気通信大学)

C (ES024)

[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)

- マルチコア・メニーコア計算機 環境における Chebyshev 基底通信 削減 CG 法の性能評価
- ○大島 聡史 (九州大学), 藤井 昭宏 (工学院大学), 田中 輝雄 (工学院大学), 深谷 猛 (北海道大学), 須田 礼仁 (東京大学)
- ② GPU における SELL 形式疎 行列ベクトル積の性能評価
- ○佐藤 駿一 (筑波大学大学院システム情報工学研究科), 高橋 大介 (筑波大学計算科学研究センター)
- 3. ◎ディープラーニングを用いた 数値計算ライブラリにおける反復解 法の前処理選択の検討
- ○山田 賢也 (名古屋大学大学院情報 学研究科), 片桐 孝洋 (名古屋大学情 報基盤センター), 永井 亨 (名古屋大 学情報基盤センター), 荻野 正雄 (名 古屋大学情報基盤センター)
- 4. ◎ Oakforest-PACS 上における SA-AMG 法の高並列環境下に向け た Hybrid 並列化に関する分析
- ○野村 直也 (東京大学), 中島 研吾 (東京大学)

9月5日 15:00-16:20

D (ES025)

[研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (4) (\sim 16:40)

- 1. 微圧縮超弾性体の大変形問題に 対する近傍問題の構成
- ○山田 貴博 (横浜国立大学)
- 2. ◎オフセット角度を用いた断層 画像再構成における厳密解の構成法
- ○神田 直大 (芝浦工大/理化学研究 所), 高梨 宇宙 (理化学研究所)
- 3. ◎抵抗率測定に使用される四探 針法の数理モデルの解析:有限要素 解の Hypercircle 法による誤差評価
- ○中野 泰河 (新潟大学大学院 自然 科学研究科 数理物質科学専攻 数 理科学コース), 劉 雪峰 (新潟大学大 学院 自然科学研究科)
- 4. ◎抗原・抗体の体内動態の定量 的解析に向けたモデルパラメータの 多様性に対する考察
- ○小松 瑞果 (神戸大学大学院システム情報学研究科), 谷口 隆晴 (神戸大学大学院システム情報学研究科/JST さきがけ)
- 5. ◎アンケートデータを用いた交流ネットワーク推定手法
- ○佐藤 智久 (神戸大学), 谷口 隆晴 (神戸大学), 增本 康平 (神戸大学), 近藤 徳彦 (神戸大学), 岡田 修一 (神戸大学)

E (ES034)

[研究部会 OS] 数論アル ゴリズムとその応用(2)

- 1. An HFE-based variant of a key exchange protocol employing multivariate polynomial maps
- ○中村 周平 (日本大学生産工学部), 伊藤 勝 (日本大学理工学部), 秋山 浩一郎 (東芝研究開発センター), 平 田 典子 (日本大学理工学部)
- 2. Circulant UOV/Rainbow の安 全性について
- ○橋本 康史 (琉球大学)
- 3. © Superspecial Trigonal Curves of Genus 5
- ○工藤 桃成 (神戸市立工業高等専門 学校), 原下 秀士 (横浜国立大学)

F (ES033)

[一般講演] 偏微分方程式 (**2**)

- de Sitter 時空における Klein-Gordon 方程式の解の伝播について
- ○土屋 拓也 (早稲田大学), 中村 誠 (山形大学)
- 2. 非局所境界条件にむだ時間を含む双曲型システムに対する状態推定
- 〇丸山 颯天 (神戸大学), 佐野 英樹 (神戸大学), 若生 将史 (神戸大学)
- 3. Voronoi 格子上における離散 Green-Gauss 公式を介した離散変分 とその応用
- ○降籏 大介 (大阪大学サイバーメ ディアセンター)
- 4. 量子システムの理論的な最適制 御問題について研究
- ○王 全芳 (香港中文大学)

9月5日 16:30-17:50

A (ES021)

[一般講演] 統計科学(~ 18:10)

- 1. 統計多様体上の状態空間モデルを用いた発展型ネットワーク解析 小松 瑞果 (神戸大学), ○谷口 隆晴 (神戸大学, JST さきがけ), 大川 剛 直 (神戸大学, JST CREST)
- 2. Benford の法則に従う分布の構成
- ○小澤 一文 (秋田県立大学名誉教 授)
- 3. 双対平坦空間における次元削減について
- ○熊谷 敦也 (日本大学商学部)
- 4. 強化学習による囚人のジレンマ を考慮した戦略を持つマルチエージ ェントシステムの提案
- 〇内海 友貴 (法政大学大学院), 李 磊 (法政大学理工学部)
- ⑤サッカーのパス回しによって つくられるネットワークの成長につ いて
- 〇山本 健 (琉球大学), 成塚 拓真 (中央大学)

B (ES022)

[正会員主催 **OS**] ブロックチェーンと応用数理

- 1. [10 分] ブロックチェーンセッションへのイントロ
- ○佐古 和恵 (NEC)
- 2. 政治学から見たブロックチェー ン
- ○岸本 一男 (筑波大学名誉教授)
- 3. 仮想通貨、スマートコントラクト、リスクの計量化:数理ファイナンスの立場から
- ○関根 順 (大阪大学大学院基礎工学 研究科)
- 4. スケーラビリティと分散化について
- ○岡本 龍明 (NTT)

C (ES024)

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

- 1. 密テンソルに対する ALS 法の実 装方法に関する考察
- ○深谷 猛 (北海道大学)
- 2. 大規模な数値線形代数の問題に おける精度保証付き数値計算
- ○尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学)
- 3. タイルサイズチューニングのためのタイル QR アルゴリズムの性能モデル
- ○鈴木 智博 (山梨大学), 高柳 雅俊 (山梨大学)
- 4. EigenExa へのオンライン自動チューニング活用の試みについて
- ○今村 俊幸 (理化学研究所)

9月5日 16:30-17:50

E (ES034)

[一般講演] 流体計算

- 1. MPS 法による静水圧問題における重心ボロノイ分割を用いた粒子位置の提案
- ○長谷川 颯 (名古屋大学大学院情報 学研究科情報システム学専攻), 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター), 片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤セン ター), 永井 亨 (名古屋大学情報基盤 センター)
- 2. 2層渦あり流れの数値シミュレーション
- ○東海林 まゆみ (日本女子大学), 岡本 久 (学習院大学)
- 3. ◎粒子法シミュレーションのキャビテーション気泡における圧縮破壊現象への応用
- ○西 圭祐 (生体情報 (数学) 研究室)
- 4. Stokes-Darcy 方程式に対する処 罰法と不連続 Galerkin 近似
- ○周 冠宇 (東京理科大学), 柏原 崇 人 (東京大学), 及川 一誠 (早稲田大学), Chung Eric (The Chinese University of Hong Kong), Shiue Ming-Cheng (National Chiao Tung University)

F (ES033)

[一般講演] 数値解析・数 値計算 (2) (~18:10)

 ○べき型の非線形性を持つ確率 微分方程式の爆発解の数値解析

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)

ドロネー分割と階層的クラスタリングに基づくサッカートラッキングデータの解析

成塚 拓真 (中央大学理工学部), ○山 崎 義弘 (早稲田大学理工学術院)

- 3. 構造情報処理の厳密性を保証する近似図形処理フレームワーク
- ○今井 敏行 (和歌山大学システム工 学部)
- 4. IMEX RK 法の絶対安定領域の 描画法
- ○大野 博 (茨城大学工学部)
- 5. ◎感染症数理モデルにおける確 率最適制御
- ○加藤 京士 (東京工業大学数理計算 科学系)

ベイズ理論によって捉えるカオス性と情報量との間の一般的な関係式について

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

カオスと情報量との間の一般的な等式 $H[X|Y]=\Lambda_q[Y]+D(q||p)$ が成立することを示した。本稿は、その背景、新たに導出した等式の意味と証明、その帰結をできるだけ自己完結的に説明することを目的とする。

2 ペロン=フローベニウス方程式のベイ ズ理論的解釈

写像力学系 (M,μ,F) を考える。ここで,M は可微分多様体、 μ は M 上の不変測度、F は M から M へのヘルダー連続な写像とする。この時、不変測度 μ がルベーグ測度に対して絶対連続、つまり $\mu(dx)=\rho(x)dx$ で書けると仮定し、以下は絶対連続な確率測度を考える。この時、初期値 $(X\in M)$ の確率測度 p(X)dX と写像 F によって変換された後の値 Y=F(X) の確率測度 q(Y)dY の間に、以下の確率保存則が成立する。

$$q(Y) = \sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{p(X)}{\left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \tag{1}$$

これがペロン=フローベニウス方程式であり、 初期値 X の確率測度が不変測度に一致する時、 つまり $p(X)dX = \rho(X)dX$ の時、通常の不変 測度が満足する式

$$\rho(Y) = \sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{\rho(X)}{\left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \tag{2}$$

が得られる。このペロン=フローベニウス方程式が、ベイズ理論でいう逆確率を求める式に他ならないのではないかと考えたのが本研究の出発点である。ここで、データYを得た時、その原因 (初期値) がXである確率 p(X|Y) をベイズ理論の逆確率とする。逆確率 p(X|Y) の持つ性質として、結果Y が得られた時に、複数の排他的的な原因X に対して以下の確率の性質を満足せねばならない。

$$\sum_{X \in F^{-1}(X)} p(X|Y) = 1 \tag{3}$$

ここで、p(X) をベイズ理論でいう事前分布の 密度関数と考え、ペロン=フローベニウス方程 式 (1) から逆確率 p(X|Y) を

$$p(X|Y) = \frac{p(X)}{q(Y) \left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \tag{4}$$

と定義すると、逆確率の満足する式 (3) とペロン=フローベニウス方程式 (1) と等価となる。逆に言うと、力学系のペロン=フローベニウス方程式 (確率保存則)(1) は、ベイズ理論の逆確率 p(X|Y) を式 (4) によって求める基礎方程式と捉えることができる。この場合、尤度関数 L(Y|X) が

$$L(Y|X) = \frac{1}{\left|\frac{dF(X)}{dX}\right|} \tag{5}$$

となり、ペロン=フローベニウス方程式 (1) そのものが、ベイズの公式

$$p(X|Y) = \frac{L(Y|X)p(X)}{\sum_{X \in F^{-1}(Y)} L(Y|X)p(X)}$$
 (6)

となる。このペロン=フローベニウス方程式のベイズ理論的な解釈が、本理論の出発点とする。尚、事前分布 p(X) が不変測度の確率密度関数 $\rho(X)$ となる場合、結果 Y の分布 q(Y) も不変測度と等しくなり, F がエルゴード的であるならば、頻度論対ベイズ理論の論争で指摘されていた事前分布の正当性の問題は生じない。

3 逆確率のエントロピー

前節で求めた逆確率 p(X|Y) は、結果としてのデータ Y が与えらえた時、原因が X である条件付き確率と考えられる。従って、その逆確率のエントロピー H(X|Y) を計算することにより、データ Y が与えられた時に、X に関する曖昧さ (=X の情報がどのくらい不足しているか)を測れる。まず、逆確率のエントロピーS(Y) は、以下で与えられる。

$$S(Y) = -\sum_{X \in F^{-1}(Y)} p(X|Y) \ln p(X|Y) \quad (7)$$

この S(Y) は Y によって値が異なるので, データ Y の確率 q(Y) による平均のエントロピー h により逆確率の情報量 H(X|Y) を求めるのは自然であろう。それは、

$$h \equiv H(X|Y) = \int_{M} S(Y)q(Y)dY \qquad (8)$$

となる。但し、 式 (4), (7) から S(Y) は

$$-\sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{p(X)}{q(Y) \left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \ln \left(\frac{p(X)}{q(Y) \left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \right)$$
(9)

で与えらえる。この情報量hを以下の様に3つの成分A,B,Cに分解する。

$$h = H(X|Y) = A + B + C,$$
 (10)

但し、

$$A = \int_{M} \sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{p(X)}{\left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \ln \left| \frac{dF(X)}{dX} \right| dY$$
(11)

$$B = -\int_{M} \sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{p(X)}{\left| \frac{dF(X)}{dX} \right|} \ln p(X) dY$$
 (12)

$$C = \int_{M} \sum_{X \in F^{-1}(Y)} \frac{p(X)}{\left|\frac{dF(X)}{dX}\right|} \ln q(Y) dY \quad (13)$$

となる。X から Y = F(X) への変数変換に伴う確率の保存を考えると、A, B, C それぞれが、

$$A = \int_{M} \ln \left| \frac{dF(Y)}{dY} \right| q(Y)dY \equiv \Lambda_{q}[Y] \quad (14)$$

$$B = -\int_{M} \ln[p(Y)] \cdot q(Y) dY \qquad (15)$$

$$C = \int_{M} \ln[q(Y)] \cdot q(Y) dY \tag{16}$$

と書ける。よって逆確率の情報量hに関して、以下の定理が成立する。

Theorem 1

$$h = H(X|Y) = \Lambda_q[Y] + D(q||p)$$

ここで, D(q||p) は以下の式で定義される KL情報量である。

$$D(q||p) = \int_{M} \ln \left[\frac{q(Y)}{p(Y)} \right] \cdot q(Y)dY$$

(証明):式 (15),(16) より B+C=D(q||p) が成立することから明らか。

Theorem 2

$$h = H(X|Y) \ge \Lambda_a[Y]$$

(証明):KL 情報量の性質 $D(q||p) \ge 0$ から明らか。等号は、 $p(\cdot) = q(\cdot) = \rho(\cdot)$ 、つまり事前確率 p(X) が不変測度の確率密度 $\rho(X)$ に等しい時に成立する。

Theorem 1 の等式はデータ Y に任意の確率 密度関数 q(Y) を持つ時に成立するが、Y が不 変測度 $\mu(dY) = \rho(Y)dY$ に従う時、h は KS エントロピー h_{KS} となり、文献 [1] で示された Rohlin の式 (あるいは Pesin の等式)

$$h_{KS} = \int_{M} \ln \left| \frac{dF(Y)}{dY} \right| \rho(Y)dY = \Lambda_{\rho}[Y] = \lambda$$

と一致する。但し、 λ は軌道不安定性を示すリアプノフ指数であり、 $\lambda>0$ であればカオスであるカオス性を示す量である。つまり,**Theorem** 1は、H(X|Y) が、情報の $\Lambda_q[Y]$ (データ Y のカオス性)と D(q||p)(分布の違いによる情報コスト)に分解できると言う新しいタイプの情報の保存則を示しており、Rohlin(あるいは Pesin) の等式の一般化となっている。

4 相互情報量と情報保存則

H(X), H(Y) を X と Y の情報量 (エントロピー) とし, R を X と Y との間の相互情報量とする。情報量の一般的な性質から等式

$$R = H(X) - H(X|Y) = H(X) - \Lambda_q[Y] - D(q||p)$$
(17)

が成立する。よって、 $D(q||p) \ge 0$ から次の定理

Theorem 3

$$R \leq H(X) - \Lambda_q[Y]$$

が成立する。つまり R の上限が写像 F のカオス性と関連する $H(X) - \Lambda_q[Y]$ で与えられる。 又、H(Y|X) = 0 なので、 $X \to Y = F(X)$ の情報伝搬における以下の情報保存則 (H(X) の分解公式) と情報量の不等式が成立する。

Theorem 4

 $H(X) = H(Y) + \Lambda_q[Y] + D(q||p) \ge H(Y) + \Lambda_q[Y]$

参考文献

[1] V. A. Rohlin, "On the fundamental ideas in measure theory", Amer. Math. Soc. Trans. I Vol. 10 (1962), 1–54.

カオス尺度のカオス判定力向上に向けた試み

井上 啓1

¹ 山陽小野田市立山口東京理科大学工学部 e-mail: kinoue@rs.tusy.ac.jp

1 概要

カオス現象を理解する上で、そのカオスをいかに定量化するかが重要な要素の一つである.カオスの定量化に関しては、これまでに、いくつかの指標が提案されてきた.現在、主流となる指標は、リアプノフ指数、KSエントロピー、フラクタル次元などである.これらの指標の中で、特に、リアプノフ指数は、カオスの定義にも用いられており、初期値に関する(指数関数的)鋭敏性を指標化したものである.しかしながら、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必ずしもいえない.

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].

これまでの研究を通して、カオス領域においては、リアプノフ指数とカオス尺度の値のオーダーが一致することがわかってきた.一方で、カオス尺度の計算において、入力分布と出力分布の領域分割が固定されているため、カオス尺度の値がリアプノフ指数の値と比べて高い値を取る傾向があった.また、2次元以上の力学系では、入力分布と出力分布の直交系が異なる場合が考慮されていなかった.本研究では、これらの点を踏まえて、カオス尺度によるカオス判定力の向上を目指すことを試みる.

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

$$\begin{split} p_{i,A}^{(m)}(M) &= \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} 1_{A_i}(x_k), \\ p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M) &= \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} 1_{A_i}(x_k) 1_{A_j}(x_{k+1}) \end{split}$$

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 カオス尺度の計算方法の改良

ここでは、カオス写像 $f:I\to I,I\subset\mathbf{R}^2$ の 軌道の分布を考える. いま、軌道点の含まれる分割は以下のように写像されると想定される.

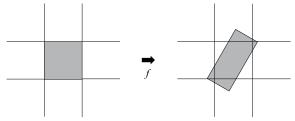


図 1. ある分割の写像

写像後の分割が多数の分割に跨るほどカオス 尺度が大きな値を取ると考えられる。そこで、 カオス尺度を計算する前に以下のような前処理 を行うことを考える.

3.1 分割の切れ目の調整

上記の場合では、領域分割が固定されているために、この分割の写像が複数の分割に余計に跨っている可能性がある。その原因の一つが、分割の切れ目の影響である。そこで、分割の切れ目の影響を軽減するために、カオス尺度を計算する前に以下のような調整を行う。

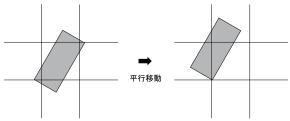
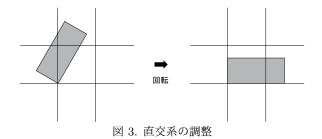


図 2. 分割の切れ目の調整

このように分割の切れ目を調整することで、 写像された分割が跨る分割数を減らすことを考 える.

3.2 直交系の調整

上記のように、分割の切れ目を調整しても入力と出力の直交系が異なる場合は、複数の分割に余計に跨っている可能性がある。この入力と出力の直交系の違いによる影響を軽減するために、さらに、カオス尺度を計算する前に以下のような調整を追加で行う。



このように直交系を調整することで,写像された分割が跨る分割数を最小限に減らすことができ,各軸の伸縮の影響を把握できるようにする.

4 計算アルゴリズムの改良

現在,以下の写像を対象として,上記の改良のアイデアをカオス尺度の計算に反映させるための計算アルゴリズムの改良を試みている.

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} A\mathbf{x} & (0 \le y \le \frac{1}{2}) \\ A\mathbf{x} + b & (\frac{1}{2} < y \le 1) \end{cases}$$
$$f(\mathbf{x}) = B\mathbf{x} \pmod{1}$$

ただし,

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$
$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$

実際には、ある分割の軌道点がカオス写像により、どの分割に写像されるかによってカオス 尺度の値が決定される。先述したように、多数 の分割に分離して写像されればされるほど、カ オス尺度が大きな値を取る。したがって、分割 の切れ目の調整と直交系の調整によって跨る分 割の個数を最小化できれば、リアプノフ指数に 比べて高い値を取っていたカオス尺度がリアプ ノフ指数の値に近づく可能性が高いと考えられる。

具体的な計算結果については,年会にて発表 する予定である.

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, IN-FORMATION, Vol.16, No.6(B), 8589-8596, 2013.

1次元カオス写像におけるカオス尺度の極限値に関する考察

奥富秀俊1, 真尾朋行1,2

1 東芝情報システム, 2 京都大学大学院情報学研究科

e-mail: okutomi@tjsys.co.jp

1 概要

カオス尺度とリアプノフ指数には関係性があることが知られている [1],[2]. 著者らは先行研究において,不変測度をもつ代表的な 1 次元カオス写像を対象として,カオス尺度の極限値とリアプノフ指数の数理的関係を示した [3]. また,いくつかの仮定の下で,カオス尺度の極限値の推定値を与える推定関数を示した [4]. 本稿では k=2,3,4,5 のチェビシェフ写像に対する,仮定の妥当性の評価結果を報告する.

2 カオス尺度の極限とリアプノフ指数

本稿で扱う写像 τ はルベーグ測度に対して絶対連続な不変測度 $\mu(dx)=\rho(x)dx$ をもつ 1次元カオス写像とする 1 . 著者らは先行研究 [3] において、カオス尺度の分割幅 $\Delta x \to 0$ におけるカオス尺度の極限 $H_{\Delta x \to 0}$ は、リアプノフ指数 λ に対して、

$$\lambda = \int \log \gamma(x) \ \rho(x) dx$$

$$H_{\Delta x \to 0} = \int (\log \gamma(x) + D(x)) \rho(x) dx$$

$$(\gamma(x) = |\tau'(x)| = |d\tau(x)/dx|)$$

として与えられ、D 関数は、以下の D_1 関数または D_2 関数のどちらかであることを示した.

$$D_1(x) = -\frac{\varepsilon_1(x)}{\gamma(x)} \{ H_s(q(x)) + \log \varepsilon_1(x) \}$$

$$D_2(x) = \begin{cases} -\frac{\varepsilon_2(x)}{\gamma(x)} \{ H_s(q(x)) + \log \varepsilon_2(x) \} \\ (\gamma(x) \ge 1) \\ -\log \gamma(x) & (\gamma(x) < 1) \end{cases}$$

$$\varepsilon_1(x) = \gamma(x) - \lfloor \gamma(x) \rfloor$$

$$\varepsilon_2(x) = \gamma(x) - \lfloor \gamma(x) \rfloor + 1$$

$$H_s(x) = x \log(x) + (1 - x) \log(1 - x)$$

 D_1 関数は分割区間 $[x, x + \Delta x]$ の写像区間 $[\tau(x), \tau(x + \Delta x)]$ が $|\gamma| + 2$ 個の分割区間にま

たがる場合に選ばれ, D_2 関数は $\lfloor \gamma \rfloor + 1$ 個の分割区間にまたがる場合に選ばれる.一般に写像区間 $[\tau(x), \tau(x+\Delta x)]$ を分割幅 Δx で分割した場合は,その両端が端数的になる(両端の合計が $\varepsilon_1(x)$ または $\varepsilon_2(x)$ である).q(x) 関数は,端数的部分を,それぞれの端に q(x):1-q(x) に分割する意味として与えている.

3 カオス尺度の極限値の推定

有限の Δx に対して q(x) は一意に求まるが, $\Delta x \to 0$ の極限では不明である. そこで以下の 仮定を設定した.

仮定1 q(x) は, D_1 関数の場合の定義域 J_1 上を一様分布し,同じく D_2 関数の場合の定義域 J_2 上を一様分布する.

$$J_1 = [0, 1]$$

$$J_2 = \left(\frac{\varepsilon_1(x)}{\varepsilon_2(x)}, \frac{1}{\varepsilon_2(x)}\right)$$

仮定 2 D_1 関数と D_2 関数の選択比率は以下で与えられる.

$$\varepsilon_1(x) : 1 - \varepsilon_1(x)$$

上記仮定の下で,カオス尺度の極限値の推定値 \hat{H} を与える推定関数 D_{ref} を導出した(詳細は文献 [4] を参照)

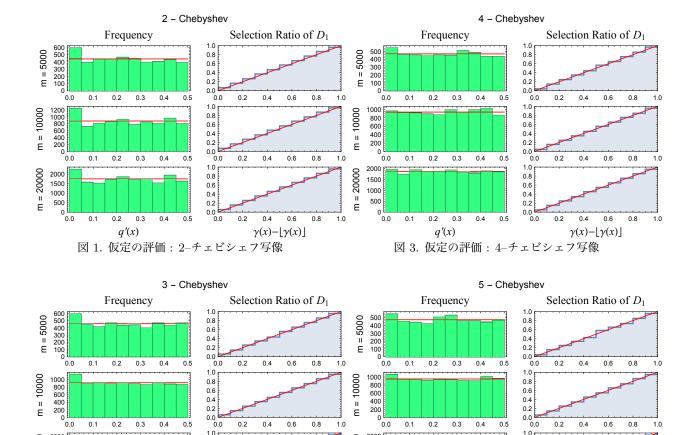
$$\hat{H} = \int (\log \gamma(x) + D_{\text{ref}}(x))\rho(x)dx$$

$$D_{\text{ref}}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\gamma(x)} & (\gamma(x) \ge 1)\\ \frac{\gamma(x)}{2} - \log \gamma(x) & (\gamma(x) < 1) \end{cases}$$

4 有限の Δx での仮定の評価

図 $1\sim4$ に, k=2,3,4,5 のチェビシェフ写像について, 分割数が m=5000,10000,20000 における仮定の評価結果を示した(図の左が仮定 1, 右が仮定 2). なお, 仮定 1 の q(x) の一様分布性の評価は, 以下の q'(x) が区間 [0,0.5]

¹例えばロジスティック写像, k-チェヒシェフ写像, テント写像, ベルヌーイシフト写像, 等である.



において一様分布する様子を確認すればよいよ うに変換してある.

図 2. 仮定の評価: 3-チェビシェフ写像

0.2 0.4 0.6 0.8 1.0

> 0.6 0.8

 $\gamma(x) - \lfloor \gamma(x) \rfloor$

0.8

0.6 0.4

0.2

$$q'(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} - \left| \frac{1}{2} - q(x) \right| & (q(x) \in J_1) \\ \frac{1}{2} - \left| \frac{1}{2} - \frac{q(x) - \varepsilon_1(x)}{1 - \varepsilon_1(x)} \right| & (q(x) \in J_2) \end{cases}$$

図より,経験的ではあるが仮定の妥当性が見 て取れる. なお、紙面の関係で本稿には未掲載 であるが、分割数 m が小さい場合は仮定から 離れる傾向が見られる. 一方で, 分割数mが 大きくなるほど、また、kの次数が大きいほど、 仮定と一致する傾向が見られる.

5 まとめ

0.1 0.2 0.3 0.4

> 0.2 0.3 0.4

2000

1500

1000

本稿では、先行研究[4]で示した、カオス尺 度の極限値の推定値 Ĥ を与える推定関数 Dref の導出上の仮定について、その仮定の妥当性を, k = 2, 3, 4, 5 のチェビシェフ写像について経験 的に確認した、当該仮定の理論的かつ合理的な 説明手段の検討を課題とする.

参考文献

20000 2000

E

1500

1000

0.1 0.2 0.3 0.4 0.5

0.1 0.2 0.3 0.4

[1] K.Inoue, M.Ohya, K.Sato, APPLI-CATION OF CHAOS DEGREE TO SOME DYNAMICAL SYSTEMS, Chaos Solitons and Fractals, 11, 1377-1385(2000)

図 4. 仮定の評価: 5-チェビシェフ写像

0.0

0.8

0.6 0.4

0.2 0.4 0.6 0.8 1.0

> 0.6 0.8 1.0

 $\gamma(x) - \lfloor \gamma(x) \rfloor$

- [2] 大谷正則, 原利英, 数理物理と数理情報 の基礎, pp93-96, 近代科学社 (2016)
- [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, 日本応用数理学会第13回研究部会連合 発表会,応用カオス (1)-4, (2017)
- [4] 奥富秀俊, 真尾朋行, 奥富秀俊, 真尾朋行, カオス尺度の極限値の算出について, 日 本応用数理学会 2017 年度年会, 応用カ オス (1)-4, (2017)

カオス尺度の計算方法について

真尾 朋行 1,2, 奥富 秀俊 1, 梅野 健 2

1 東芝情報システム株式会社, 2 京都大学大学院情報学研究科

e-mail: t_mao@tjsys.co.jp, mao.tomoyuki.48m@st.kyoto-u.ac.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].

カオス尺度はデータから直接計算可能なカオスの定量化指標と考えられるが、実際のデータ分析に応用するためにはリアプノフ指数や KSエントロピーとの関係、特に大小関係について明らかにしておく必要があり、先行研究 [3] のような議論がある.

また、カオス尺度とリアプノフ指数との数理 的関係について調査したところ、分割による端 数的な部分の影響とみられる、リアプノフ指数 との差異が生じることが分かった [4]. そこで 本稿では、分割による端数が出現するケースと して最も単純な非対称テント写像を用いて、カ オス尺度と KS エントロピーとの差について調 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 [5]. 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 非対称テント写像におけるカオス尺度

 $T_k(x)$ を,頂点の位置が 1/k であるテント写像とする. $(k \in \mathbb{N}, k > 2)$

$$T_k(x) = \begin{cases} kx & (0 \le x \le \frac{1}{k}) \\ \frac{k}{k-1}(1-x) & (\frac{1}{k} \le x \le 1) \end{cases}$$
 (1)

k=2 のときは左右対称なテント写像, k>2 のときは非対称テント写像である,

定理 1. $T_k(x)$ を (1) 式で与えたテント写像とし、定義域 [0,1] を分割数 nk $(n \in \mathbb{N})$ で等間隔に分割してカオス尺度 H_{CD} を計算するとき、 $H_{CD} \geq H_{KS}$ である(H_{KS} は KS エントロピー).

証明 分割数 nk $(n \in \mathbb{N})$ で等間隔に分割した場合のカオス尺度 H_{CD} を計算する.

例として,k=4,n=2 の場合の $T_k(x)$ および分割の様子を図 1 に示すと, $0 \le x \le \frac{1}{k}$ および $\frac{1}{k} \le x \le 1$ の 2 つの領域においてそれぞれ別の,写像と分割区間が交差するパターン(図中の赤と緑)が n 回ずつ出現することがわかる.それぞれのパターンにおける条件付き確率を図 2 に示す.

 $0 \le x \le \frac{1}{k}$ の領域では、すべての分割区間において写像は k 個の区間にまたがり、条件付き確率はぞれぞれ $\frac{1}{k}$ となる.

いっぽう, $\frac{1}{k} \le x \le 1$ の領域では,隣接する k-1 区間が繰り返しのパターンとなり,それぞれの分割区間において写像は 2 個の区間にまたがり,条件付き確率はぞれぞれ $\frac{k-i}{k}$ および $\frac{i}{k}$ (i=1,2,...,k-1) となる.

したがって、カオス尺度 H_{CD} は

$$H_{CD}$$

$$= \frac{1}{nk} nk \left(-\frac{1}{k} \log \frac{1}{k} \right)$$

$$+ \frac{1}{nk} n \sum_{i=1}^{k-1} \left(-\frac{k-i}{k} \log \frac{k-i}{k} - \frac{i}{k} \log \frac{i}{k} \right)$$

$$= -\frac{1}{k} \log \frac{1}{k}$$

$$+ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \left(-\frac{k-i}{k} \log \frac{k-i}{k} - \frac{i}{k} \log \frac{i}{k} \right)$$

また、KSエントロピー H_{KS} は

$$H_{KS} = -\frac{1}{k} \log \frac{1}{k} - \frac{k-1}{k} \log \frac{k-1}{k} \tag{2}$$

である. よって, カオス尺度 H_{CD} と KS エントロピー H_{KS} の差は

$$H_{CD} - H_{KS}$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \left(-\frac{k-i}{k} \log \frac{k-i}{k} - \frac{i}{k} \log \frac{i}{k} \right)$$

$$- \left(-\frac{k-1}{k} \log \frac{k-1}{k} \right)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \left(-\frac{k-i}{k} \log \frac{k-i}{k} - \frac{i}{k} \log \frac{i}{k} \right)$$

$$+ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \log \frac{k-1}{k}$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \left(-\frac{k-i}{k} \log \frac{k-i}{k-1} - \frac{i}{k} \log \frac{i}{k-1} \right)$$

$$\geq 0$$
(3)

ただし, $-\log \frac{k-i}{k-1} \ge 0$, $-\log \frac{i}{k-1} \ge 0$ を用いた.よって, $H_{CD} \ge H_{KS}$ である.(等号成立は k=2 ,すなわち左右対称なテント写像のとき)

4 まとめ

カオス尺度の計算において,等間隔の分割を 用いた場合の端数の影響を非対称テント写像を 用いて調査し,定理1を示した.

(3) 式のカオス尺度 H_{CD} と KS エントロピー H_{KS} の差は,分割を与えてカオス尺度を計算する際に端数的な区間において過大評価される情報の量と推測できるが,この量に対する合理的な解釈を見出すことが今後の課題である.

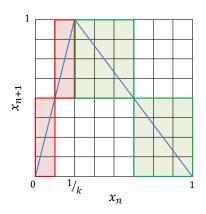


図 1. k=4, n=2 の場合の非対称テント写像と分割

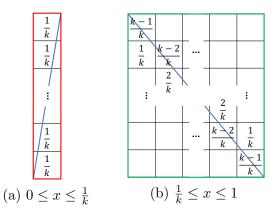


図 2. 繰り返しのパターンと条件付き確率

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] T. Kamizawa, T. Hara, and M. Ohya, "On relations among the entropic chaos degree, the Kolmogorov-Sinai entropy and the Lyapunov exponent", Journal of Mathematical Physics, 55, 032702 (2014).
- [4] 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", JSIAM 第 13 回研究部会連合発 表会 応用カオス (1)-4, 2017.
- [5] 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.

余次元2の分岐に対する標準形の非可積分性

Acosta-Humánes Primitivo B.¹, 矢ヶ崎 一幸 ²

¹Simón Bolívar 大学 (コロンビア), ²京都大学情報学研究科

e-mail: ¹primi@intelectual.co , ²yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

余次元2の分岐は力学系における基礎的かつ 大変興味深い現象であり,fold-Hopf および2 重 Hopf 分岐はとりわけ重要である[1].前者に 対しては,その分岐点においてサドル・ノード 分岐と Hopf 分岐曲線が交わり,その標準形は 次式で与えられる.

$$\dot{x}_1 = \nu x_1 - \omega x_2 + \alpha x_1 x_3 - \beta x_2 x_3,
\dot{x}_2 = \omega x_1 + \nu x_2 + \beta x_1 x_3 + \alpha x_2 x_3,
\dot{x}_3 = \mu + s(x_1^2 + x_2^2) + x_3^2,
x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$$
(1)

ここで, $\mu,\nu\neq 0$, $\omega>0$, $\alpha,\beta\in\mathbb{R}$ および $s=\pm 1$ である.後者に対しては,その分岐点において 2 つの Hopf 分岐曲線が交わり,その標準形は次式で与えられる.

$$\dot{x}_1 = -\omega_1 x_2
+ (\nu + s(x_1^2 + x_2^2) + \alpha(x_3^2 + x_4^2))x_1,
\dot{x}_2 = \omega_1 x_1
+ (\nu + s(x_1^2 + x_2^2) + \alpha(x_3^2 + x_4^2))x_2,
\dot{x}_3 = -\omega_2 x_4
+ (\mu + \beta(x_1^2 + x_2^2) - (x_3^2 + x_4^2))x_3,
\dot{x}_4 = \omega_2 x_3
+ (\mu + \beta(x_1^2 + x_2^2) - (x_3^2 + x_4^2))x_4,
x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{R}^4$$
(2)

ここで, $\mu, \nu \neq 0$, $\omega > 0$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ および $s = \pm 1$ である.これらの標準形の分岐点近傍 のダイナミクスは,あるパラメータ領域においては無視された高次項の影響を受けないが,他 のパラメータ領域においてはそれらの高事項の 影響によりカオスなどの複雑な挙動を起こす可能性がある [1] .

式 (1) の非可積分性に対しては次の結果が示されている [2] .

定理 $\mathbf{1}$ $\mu, \nu, \alpha, \beta, \omega \in \mathbb{C}$, $s=\pm 1$ とし , $\mu, \nu \neq 0$, $\alpha \pm \nu/\sqrt{-\mu} \notin \mathbb{Q}$ および $2\alpha \notin \mathbb{Z}_{\leq 0} := \{k \in \mathbb{Z} \mid k \leq 0\}$ ならば , 式 (1) の複素化は \mathbb{C}^3 における x_3 平面近傍で有理型関数的に可積分である .

ここで,可積分性は次の Bogoyavlenskij [3] による定義の意味である.

定義 2 (Bogoyavlenskij) 微分方程式系

$$\dot{x} = v(x), \quad x \in D \subset \mathbb{C}^n,$$
 (3)

を考える.ここで,n>0 は整数,D は \mathbb{C}^n における領域であり, $v:D\to\mathbb{C}^n$ は正則とする. $1\leq q\leq n$ を満たす整数 q に対して,次の条件を満たす q のベクトル場 $v_1(x)(:=v(x)),v_2(x),\ldots,v_q(x)$ と n-q 個のスカラー値関数 $F_1(x),\ldots,F_{n-q}(x)$ が存在するとき,式 (3) は (q,n-q)-可積分あるいは単に可積分という.

(i) v_1,\dots,v_q はほとんど至るところ線形独立であり,互いに可換,すなわち,任意の $j,k=1,\dots,q$ に対して

$$[v_j, v_k] := \frac{\partial v_k}{\partial x} v_j - \frac{\partial v_j}{\partial x} v_k = 0$$

となる;

(ii) $\partial F_1/\partial x,\dots,\partial F_{n-q}/\partial x\ v_1,\dots,v_q$ はほとんど至るところ線形独立であり, F_1,\dots,F_{n-q} は v_1,\dots,v_q の第1積分,すなわち, $j=1,\dots,q$ および $k=1,\dots,n-q$ に対して

$$\frac{\partial F_k}{\partial x}v_j = 0$$

となる.

もし v_1,v_2,\ldots,v_q および F_1,\ldots,F_{n-q} が有理型であるならば,式(3)は有理型関数的に可積分という.

2 主結果

本報告の主結果は次の通りである.

定理 3 $\mu, \nu, \alpha, \beta, \omega \in \mathbb{C}$, $s=\pm 1$ とし,次の条件のうちひとつが成立するならば,式 (1) の複素化は \mathbb{C}^3 上 x_3 平面近傍で有理型関数的に非可積分である:

- (i) $\mu \neq 0$, $\alpha \notin \mathbb{Q}$ $\exists k \forall \nu \neq 0$;
- (ii) $\mu \neq 0, \nu/\sqrt{-\mu} \notin \mathbb{Q}$ $\exists k \forall 2\alpha 1 \notin \mathbb{Z}_{\leq 0}$;
- (iii) $\mu = 0, \nu \neq 0$ および $2\alpha 1 \notin \mathbb{Z}_{\leq 0}$

定理 4 $\mu, \nu, \alpha, \beta, \omega_1, \omega_2 \in \mathbb{C}$, $s=\pm 1$ とし,次 の条件のうちひとつが成立するならば,式 (2) の複素化は \mathbb{C}^4 上 (x_1, x_2) 平面近傍で有理型関数的に非可積分である.

- (i) $\mu \neq 0$, $\nu/\mu \notin \mathbb{Q}$, $\alpha \notin \mathbb{Z}_{\geq 0} = \{k \in \mathbb{Z} \mid k \geq 0\}$ および $(\alpha + \nu/\mu + 1)s \beta\nu \neq 0$;
- (ii) $\mu \neq 0$, $\alpha + \nu/\mu \notin \mathbb{Q}$, $\alpha \notin \mathbb{Z}_{\geq 0}$ **b b b b** $(\alpha + \nu/\mu + 1)s \beta\nu \neq 0$;
- (iii) $\mu = 0, \nu \neq 0, \alpha \notin \mathbb{Z}_{\geq 0}, \alpha\beta + s \neq 0$ および $\beta \neq s$

3 証明の概略

以下の手順で主定理は証明される.まず,座標変換 $(x_1,x_2)=(r\cos\theta,r\sin\theta)$ を用いて,式 (1) を次のように変換する.

$$\dot{r} = (\nu + \alpha x_3)r,
\dot{x}_3 = \mu + sr^2 + x_3^2,
\dot{\theta} = \omega + \beta x_3$$
(4)

式 (4) の (r,x_3) 成分は θ とは独立である.同様に,変数変換 $(x_1,x_2)=(r_1\cos\theta_1,r_1\sin\theta_1)$ および $(x_3,x_4)=(r_2\cos\theta_2,r_2\sin\theta_2)$ を用いると,式 (2) は次のようになる.

$$\dot{r}_1 = r_1(\nu + sr_1^2 + \alpha r_2^2),
\dot{r}_2 = r_2(\mu + \beta r_1^2 - r_2^2),
\dot{\theta}_1 = \omega_1, \quad \dot{\theta}_2 = \omega_2$$
(5)

式 (5) の (r_1,r_2) 成分は θ_1 および θ_2 とは独立である.式 (4) および (5) の (r,x_3) 成分および (r_1,r_2) 成分によって与えられる平面多項式ベクトル場が非可積分であるならば,式 (1) および (2) が,それぞれ,非可積分となることを示す.次に,文献 [7] の議論を発展させ,Morales-Ramis-Simó 理論 [4,5] の非ハミルトン系への拡張 [6] を用いて,平面多項式ベクトル場の非可積分性に対する判定アルゴリズムを与える.最後に,そのアルゴリズムを式 (4) および (5) の (r,x_3) 成分および (r_1,r_2) 成分に適用して,それらの非可積分性を判定する.

謝辞 本研究は科学研究費補助金 (課題番号: 17H02859) の助成を受けたものである.

参考文献

[1] Y.A. Kuznetsov, *Elements of Applied Bifurcation Theory*, 3rd ed., Springer, New York, 2004.

- [2] K. Yagasaki, Nonintegrability of the unfolding of the fold-Hopf bifurcation, Nonlinearity, **31** (2018), 341-350.
- [3] O.I. Bogoyavlenskij, Extended integrability and bi-hamiltonian systems, Comm. Math. Phys., **196** (1998), 19–51.
- [4] J.J. Morales-Ruiz and J.P. Ramis, Galosian obstructions to integrability of Hamiltonian systems, *Methods Appl. Anal.*, 8 (2001), 33–96.
- [5] J.J. Morales-Ruiz, J.P. Ramis and C. Simó, Integrability of Hamiltonian systems and differential Galois groups of higher variational equations, Ann. Sc. École Norm. Sup., 40 (2007) 845–884.
- [6] M. Ayoul and N.T. Zung, Galoisian obstructions to non-hamiltonian integrability, C. R. Math. Acad. Sci. Paris, 348 (2010), 1323–1326.
- [7] P. Acosta-Humanez, J.T. Lazaro, J.J. Morales-Ruiz and C. Pantazi, Differential Galois theory and non-integrability of planar polynomial vector fields, J. Differential Equations, 264 (2018), 7183–7212.

2 自由度ハミルトン系における横断的なヘテロクリニック軌道の存在と非 可積分性

矢ヶ崎 一幸1,山中 祥五2

1 京都大学情報学研究科, 2 京都大学情報学研究科

e-mail: s.yamanaka@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

次の2自由度ハミルトン系を考える.

$$\begin{cases} \dot{x} = JD_x H(x, y), \\ \dot{y} = JD_y H(x, y), \end{cases} (x, y) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \quad (1)$$

ここで、ハミルトニアン $H: \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ は解析的で、J はシンプレクティック行列

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

である. 以下を仮定する.

- (A1) x 平面 $\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \mid y=0\}$ は不 変である.
- (A2) x 平面上には 2 つのサドル・センター型の平衡点 $(x,y)=(x_{\pm},0)$ が存在し、 $JD_x^2H(x_{\pm},0)$ は 1 組の実固有値 $\lambda_{\pm},-\lambda_{\pm}$ $(\lambda_{\pm}>0)$, $JD_y^2H(x_{\pm},0)$ は 1 組の純虚固有値 $i\omega_{\pm},-i\omega_{\pm}$ $(\omega_{\pm}>0)$ を有する.
- (A3) x 平面上にサドル・センター $(x_-,0)$ から $(x_+,0)$ へのヘテロクリニック軌道 $(x,y)=(x^{\rm h}(t),0)$ が存在する. Fig. 1を参照せよ.

本報告では、ハミルトン系 (1) に対して、横 断的なヘテロクリニック軌道の存在と非可積分 性の関連性を明らかにする.

2 既存の結果

Lyapunov の中心定理 [1] により、サドル・センター $(x_{\pm},0)$ の近傍には、 $\alpha_{\pm} \to 0$ のとき $(x_{\pm},0)$ に漸近する、周期軌道の 1 パラメータ族 $\gamma_{\pm}^{\alpha_{\pm}}$ $(\alpha_{\pm} \in (0,\alpha_{\pm}^{0}], \alpha_{\pm}^{0} > 0)$ が存在する.

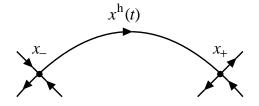


Fig. 1. 仮定 (A2) と (A3)

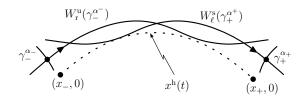


Fig. 2. $\gamma_{-}^{\alpha_{-}}$ の不安定多様体の分枝 $W_{\rm r}^{\rm u}(\gamma_{-}^{\alpha_{-}})$ と $\gamma_{+}^{\alpha_{+}}$ の安定多様体の分枝 $W_{\ell}^{\rm s}(\gamma_{-}^{\alpha_{+}})$

ヘテロクリニック軌道 $(x^h(t),0)$ 側の, $\gamma_-^{\alpha_-}$ の 不安定多様体と $\gamma_+^{\alpha_+}$ の安定多様体の分枝を,それぞれ, $W_{\rm r}^{\rm u}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W_\ell^{\rm s}(\gamma_+^{\alpha_+})$ と表す.Fig. 2 を参照せよ.

まず、Melnikov 型手法と非可積分性に関する文献 [2] と [3] の結果の概要を述べる。ヘテロクリニック軌道 $(x,y)=(x^{\rm h}(t),0)$ 周りの直交変分方程式

$$\dot{\eta} = JD_{\eta}^2 H(x^{\mathbf{h}}(t), 0)\eta, \quad \eta \in \mathbb{R}^2$$
 (2)

とサドル・センター $(x_{\pm},0)$ 周りの直交変分方程式

$$\dot{\eta} = J D_y^2 H(x_{\pm}, 0) \eta \tag{3}$$

の基本行列を、それぞれ、 $\Psi(t)$ と $\Phi_{\pm}(t)$ とおく、式 (3) は $q_{\pm}(\eta) = \frac{1}{2}\eta^{T}D_{y}^{2}H(x_{\pm},0)\eta$ をハミルトニアンとする線形ハミルトン系である。ここで、T は転置演算を表す。このとき、極限

$$B_{\pm} = \lim_{t \to +\infty} \Phi_{\pm}(-t)\Psi(t)$$

が存在し. $B_0 = B_+ B_-^{-1}$ とおく. 非零のベクトル $\eta_0 \in \mathbb{R}^2$ に固定して,Melnikov 関数を次式で定義する.

$$M(t_0) = q_-(\eta_0) - q_+(B_0\Phi_-(t_0)\eta_0)$$

定理 1 ([2]) $M(t_0)$ が単純零点をもつならば, $H(\gamma_-^{\alpha_-}) = H(\gamma_+^{\alpha_+})$ を満たす十分小さい $\alpha_\pm > 0$ に対して, $W^{\rm u}_{\rm r}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W^{\rm s}_{\ell}(\gamma_+^{\alpha_+})$ は横断的に交差する.

直交変分方程式 (2) には,2つの平衡点 $(x,y) = (x_+,0)$ に対応した 2つの確定特異点 0^\pm が存在

する. この特異点 0^{\pm} に対するモノドロミー行列を M_{+} とする.

定理 2 ([3]) ハミルトン系 (1) が有理型的に可積分と仮定する.このとき, M_+ と M_- は可換である.さらに, $\lambda_+/\omega_+=\lambda_-/\omega_-$ ならば, $M_+=M_-^{-1}$ または $M_+=M_-$ である.

3 主結果

 $D_y^2 H(x_\pm,0)$ の固有値を $\sigma_1^\pm, \sigma_2^\pm$ とおく、 $\sigma_1^\pm \sigma_2^\pm$ このものののです。 σ_1^\pm とののです。 σ_2^\pm は同符号となる、 σ_1^+ が σ_1^- が異符号のとき,十分小さい $\alpha_\pm>0$ に対して $H(\gamma_-^{\alpha-}) \neq H(\gamma_+^{\alpha+})$ となることが示される.以下では σ_1^+ が σ_1^- は同符号とする.Melnikov 関数とモノドロミー行列の関係を調べ,定理 1 を適用することにより次の結果を得る.

定理 $3 \alpha_{\pm} > 0$ は $H(\gamma_{-}^{\alpha_{-}}) = H(\gamma_{+}^{\alpha_{+}})$ を満たし、十分小さいものとする.

- (i) $\omega_{+}=\omega_{-}$ かつ M_{+} と M_{-} が非可換ならば, $W_{\rm r}^{\rm u}(\gamma_{-}^{\alpha_{-}})$ と $W_{\ell}^{\rm s}(\gamma_{+}^{\alpha_{+}})$ は横断的に交差する.
- (ii) $\omega_+ \neq \omega_-$ ならば、 $W_{\rm r}^{\rm u}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W_{\ell}^{\rm s}(\gamma_+^{\alpha_+})$ は横断的に交差するか、2 次的に接するか、交わらないかのいずれかである.

定理 4 定理 3の条件に加えて、 $\lambda_+/\omega_+ = \lambda_-/\omega_-$ と仮定する.

- (i) $\omega_+ = \omega_-$ かつ $M_+ \neq M_-^{-1}$ が非可換ならば, $W_{\rm r}^{\rm u}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W_\ell^{\rm s}(\gamma_+^{\alpha_+})$ は横断的に交差する.
- (ii) $\omega_+ \neq \omega_-$ かつ $M_+ = M_-^{-1}$ ならば, $W^{\mathrm{u}}_{\mathrm{r}}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W^{\mathrm{s}}_{\ell}(\gamma_+^{\alpha_+})$ は交わらない.

定理 3, 4 o (i) は, $(x^{h}(t), 0)$ がホモクリニック軌道となる $x_{+}=x_{-}$ の場合に対する文献 [4,5] の結果の一般化である.

4 具体例

ハミルトン関数を

$$H = \frac{1}{2}(x_2^2 + y_2^2) + \frac{1}{2}(x_1^2 + \omega^2 y_1^2)$$
$$-\frac{1}{4}(x_1^4 + y_1^4) - \frac{1}{2}\beta_1 x_1 y_1^2 - \frac{1}{2}\beta_2 x_1^2 y_1^2$$

とする,次の2自由度ハミルトン系を考える:

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad \dot{y}_1 = y_2
\dot{x}_2 = -x_1 + x_1^3 + \frac{1}{2}\beta_1 y_1^2 + \beta_2 x_1 y_1^2, \qquad (4)
\dot{y}_2 = -\omega^2 y_1 + \beta_1 x_1 y_1 + \beta_2 x_1^2 y_1 - y_1^3$$

x 平面は不変平面であり, $(x,y)=(\pm 1,0,0,0)$ は平衡点である。 $\omega^2-\beta_2>|\beta_1|$ のとき,それらはサドルセンターとなり,仮定 (A1)-(A3) が満たされる。特に,一組のヘテロクリニック軌道

$$x_{\pm}^{\rm h}(t) = \left(\tanh\left(\pm\frac{t}{\sqrt{2}}\right), \pm\frac{1}{\sqrt{2}}{\rm sech}^2\left(\pm\frac{t}{\sqrt{2}}\right)\right)$$

が存在する. また, $\omega_+ = \omega_-$ となるのは $\beta_1 = 0$ のときである.

直交変分方程式のモノドロミー行列を計算することにより以下を得る.

補題 1 $\omega^2 - \beta_2 > |\beta_1|$ とする. M_+ と M_- が可換であれば, $\beta_1 = 0$ かつ $\beta_2 = \frac{1}{2}n(n-1), n \in \mathbb{Z}$ であり, $M_+ = M_-^{-1}$ となる.

よって、定理2と定理3あるいは4より次の結果を得る.

定理 $\mathbf{5}$ $\omega^2 - \beta_2 > |\beta_1|$ とする. $\beta_1 \neq 0$ または $\beta_2 \neq \frac{1}{2}n(n-1), n \in \mathbb{Z}$ ならば、ハミルトン系 (4) は有理型的に非可積分である. さらに、 $\beta_1 = 0$ かつ $\beta_2 \neq \frac{1}{2}n(n-1), n \in \mathbb{Z}$ ならば、 $H = H(\gamma_-^{\alpha_-}) = H(\gamma_+^{\alpha_+})$ を満たす十分小さい $\alpha_\pm > 0$ に対して、不安定多様体と安定多様体の分枝 $W^u_{\mathbf{r}}(\gamma_-^{\alpha_-})$ と $W^s_{\ell}(\gamma_+^{\alpha_+})$ および $W^u_{\ell}(\gamma_+^{\alpha_+})$ と $W^s_{\mathbf{r}}(\gamma_-^{\alpha_-})$ は横断的に交差する.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17H02859 および 17J01421 の助成を受けたものである.

- [1] K.R. Meyer, G.R. Hall and D. Offin, Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and the N-Body Problem, Springer, New York, 2009.
- [2] T. Sakajo and K. Yagasaki, J. Nonlinear Sci., 18 (2008), 485–525.
- [3] K. Yagasaki and S. Yamanaka, J. Differential Equations, 263 (2017) 1009– 1027
- [4] J.J. Morales-Ruiz and J. M. Peris, Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6), 8 (1999) 125–141.
- [5] K. Yagasaki, Nonlinearity, 16 (2003), 2003–2012.

摂動系における周期軌道, ホモクリニック軌道, 第一積分 および可換なベクトル場の非保存

本永 翔也1, 矢ヶ崎 一幸2

1,2 京都大学 情報学研究科

e-mail : $^1{\rm mnaga@amp.i.kyoto-u.ac.jp},\,^2{\rm yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp}$

1 はじめに

一般に解析的に解くことが不可能で、カオス のような複雑な挙動を示す可能性のある力学系 に対して, 周期軌道やホモクリニック軌道, 第 一積分や可換なベクトル場を求める, あるいは それらの存在を示すことは基本的かつ重要な問 題であり、Poincaré [1] をはじめ数多くの研究 が行われている. 本報告では、周期軌道あるい はホモクリニック軌道と、第一積分あるいは可 換なベクトル場をもつ微分方程式系が摂動を受 けるとき, それらが微小変化を許して存在し続 けるための必要条件, すなわち, それらが保存 されないための十分条件を与える. また、1自 由度ハミルトン系が周期的摂動を受ける場合に おいて周期軌道およびホモクリニック軌道が存 在するための十分条件を与える標準的なメルニ コフの方法[2]との関係についても論じる.

2 既知の結果

摂動系における周期軌道, ホモクリニック軌道, 第一積分および可換なベクトル場の保存に関する既知の結果を述べる.

まず、周期軌道やホモクリニック軌道を解析するための手法としてメルニコフの方法があげられる。その標準的な方法 [2] では、次のような1自由度ハミルトン系が周期的摂動を受ける場合が取り扱われる。

$$\dot{x} = JDH(x) + \varepsilon g(x, \theta), \quad \dot{\theta} = 1$$
 (1)

ここで、 ε は微小パラメータを表し、 $x \in \mathbb{R}^2$ 、 $\theta \in \mathbb{S}^1 = \mathbb{R}/T\mathbb{Z}$ (T>0 は定数)である。また、 $H: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ および $g: \mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}$ は、それぞれ、 C^3 級および C^2 級とし、J はシンプレクティック行列で

$$J = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{array}\right)$$

である. H(x) が非摂動系のハミルトニアンである. 次を仮定する.

(M) $\varepsilon = 0$ のとき、式 (1) は周期 T^{α} の周期軌道の 1 パラメータ族 $q^{\alpha}(t)$ 、 $\alpha \in (-1,0)$ 、をもつ.

このとき, $lT^{\alpha}=mT$ $(l,m\in\mathbb{N}$ は互いに素) を満たし、周期軌道に対する**メルニコフ関数**

$$M^{m/l}(\tau) := \int_0^{mT} DH(q^{\alpha}(t)) \cdot g(q^{\alpha}(t), t + \tau) dt \quad (2)$$

が単純な零点をもつならば、 $\varepsilon>0$ が十分小さいとき、式 (1) において周期 mT の周期軌道 (m-次分数調波または m/ℓ -次超分数調波)が存在する [2]. また、条件 (M) の代わりに、次を仮定する

(M') $\varepsilon = 0$ のとき、式 (1) においてホモクリニック軌道 $q^0(t)$ を有する双曲的鞍点 p が存在する.

このとき,ホモクリニック軌道に対する**メルニ コフ関数**

$$M(\tau) := \int_{-\infty}^{\infty} DH(q^0(t)) \cdot g(q^0(t), t+\tau) dt$$
 (3)

が単純な零点をもつならば、 $\epsilon > 0$ が十分小さいとき、式(1) において横断的ホモクリニック軌道が存在する[2].

一方、Poincaré は、有名な制限 3 体問題に関する研究 [1] において、可積分な 2 自由度ハミルトン系が摂動を受ける場合に対して、摂動パラメータについて解析的な第一積分で、ハミルトニアンと独立なものが存在しないことを一般的な条件のもとで示している。この結果は、非摂動系における第一積分や可換なベクトル場が、摂動によって失われることを意味する。また、Morales-Ruiz [3] は、式 (1) が ε > 0 のときも (非自励的な) ハミルトン系となる場合に対して、ホモクリニック軌道に対するメルニコフ関数 (3) が恒等的に零となることが、Morales-Ramis 理論 [4] によって得られる、ハミルトニアンと独立な第一積分が存在するための必要条件と同値であることを示している。

3 周期軌道

Mを向きづけられたパラコンパクトな C^3 級 n 次元多様体とする. 以下では、ベクトル場は すべて M 上で C^2 級、第一積分は C^3 級とする. また、パラメータ ε に依存する場合は、それらは ε について C^2 級とする.

 X_{ε} を \mathcal{M} 上のベクトル場で, $X_{\varepsilon} = X^{0} + \varepsilon X^{1} + O(\varepsilon^{2})$ とし,以下を仮定する.

- (A1) 定数 T > 0 に対して X^0 は T-周期軌道 $\gamma(t)$ をもつ.
- (A2) X^0 は第一積分 F をもつ.

次の積分を定義する:

$$\mathscr{I}_{F,\gamma} := \int_0^T dF(X^1)(\gamma(t))dt \qquad (4)$$

定理 1 X_{ε} が $\gamma(t)$ の近傍において第一積分 $F_{\varepsilon}=F+O(\varepsilon)$ をもつならば、 $\mathscr{I}_{F,\gamma}=0$ となる.

系 2 n=2 とする. $\mathscr{I}_{F,\gamma}\neq 0$ ならば、 X_{ε} は $\gamma(t)$ の近傍において ε について C^2 級の第一積 分をもたない.

定理 3 X_{ε} が T-周期軌道 $\gamma_{\varepsilon} = \gamma + O(\varepsilon)$ をもつならば, $\mathscr{I}_{F,\gamma} = 0$ となる.

条件 (A1) と (A2) に加えて、次を仮定する。 (A3) X^0 は可換なベクトル場 Z をもつ。 次の積分を定義する:

$$\mathscr{J}_{F,Z,\gamma} := \int_0^T dF([X^1, Z])(\gamma(t))dt \qquad (5)$$

ここで, [.,.] はリー括弧である.

定理 4 X_{ε} が $\gamma(t)$ の近傍において可換なベクトル場 $Z_{\varepsilon}=Z+O(\varepsilon)$ をもつならば, $\mathcal{J}_{F,Z,\gamma}=0$ となる.

4 周期軌道に対するホモクリニック軌道

条件(A1)の代わりに次の条件を考える:

(A1') X^0 は周期軌道 $\gamma(t)$ に対するホモクリニック軌道 $\gamma^h(t)$ をもつ.

積分(4)と(5)を、それぞれ、積分

$$\mathscr{I}_{F,\gamma^{\mathrm{h}}} := \int_{-\infty}^{\infty} dF(X^{1})(\gamma^{\mathrm{h}}(t))dt, \tag{6}$$

$$\mathscr{J}_{F,Z,\gamma^{\mathrm{h}}} = \int_{-\infty}^{\infty} dF([X^{1},Z])(\gamma^{\mathrm{h}}(t))dt$$

に入れ替えて, 定理 1,3,4 と同様の結果が得られる.

5 メルニコフの方法との関係

再び、式 (1) を考える。条件 (M) の下で、 $lT^{\alpha}=mT$ $(l,m\in\mathbb{N}$ は互いに素)ならば、 $\varepsilon=0$ のとき、任意の $\tau\in[0,T]$ に対して、 $\hat{\gamma}_{\tau}^{m/l}(t)=(q^{\alpha}(t),t+\tau)$ は mT-周期軌道となる。式 (4) は

$$\mathscr{I}_{H,\hat{\gamma}_{\tau}^{m/l}} = \int_{0}^{mT} DH(q^{\alpha}(t)) \cdot g(q^{\alpha}(t), t+\tau) dt$$
 となり、式 (2) で定義された、周期軌道に対するメルニコフ関数 $M^{m/\ell}(\tau)$ に一致する。定理1より次を得る。

定理 5 条件 (M) を仮定する。式 (1) が第一積 分 $H_{\varepsilon} = H + O(\varepsilon)$ をもつならば, $M^{m/\ell}(\tau)$ は 恒等的に零である.

また、条件 (M') の下で、 $\varepsilon=0$ のとき、任意の $\tau\in[0,T]$ に対して、 $\hat{\gamma}_{\tau}(t)=(q^0(t),t+\tau)$ は周期軌道 $(x,\theta)=(p,t+\tau)$ に対するホモクリニック軌道となる。式 (6) は

$$\mathscr{I}_{H,\hat{\gamma}_{\tau}} = \int_{-\infty}^{\infty} D_x H(q^0(t)) \cdot g(q^0(t), t + \tau) dt$$

となり、式 (3) で定義された、ホモクリニック 軌道に対するメルニコフ関数 $M(\tau)$ に一致する。 よって、定理 5 と同様に次が成り立つ。

定理 6 条件 (M') を仮定する. 式 (1) が第一積 分 $H_{\varepsilon} = H + O(\varepsilon)$ をもつならば, $M(\tau)$ は恒等的に零である.

- [1] H. Poincaré, New Methods of Celestial Mechanics, Vol. 1-3, American Institute of Physics, 1993 (original 1892).
- [2] J. Guckenheimer and P. Holmes, Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields, Springer, New York, 1983.
- [3] J.J. Morales-Ruiz, A note on a connection between the Poincaré-Arnold-Melnikov integral and the Picard-Vessiot theory, in Differential Galois theory, T. Crespo and Z. Hajto (eds.), Banach Center Publ. 58, Polish Acad. Sci. Inst. Math., 2002, pp. 165–175.
- [4] J.J. Morales-Ruiz and J.P. Ramis, Galoisian obstructions to integrability of Hamiltonian systems. I, Methods Appl. Anal. 8 (2001), 33–95.

遅延微分方程式に対する岡村の距離関数と解の一意性のための十分条件

西口 純矢1

1 東北大学 数理科学連携研究センター

e-mail: junya.nishiguchi.b1@tohoku.ac.jp

1 イントロダクション

岡村 [1] はタイムラグを持たない常微分方程式に対して、いわゆる「岡村の距離関数」を用いて一意性のための必要十分条件を与えた。ここで、岡村の距離関数は連続的微分可能であり、一意性のための条件が方程式によって得られることが重要である。本講演では、遅延微分方程式の初期値問題の統一的理論([2,3])を背景として、岡村の距離関数を遅延微分方程式に拡張しその条件を与える。また、通常の Lipschitz条件を拡張した「C¹-延長に関して局所 Lipschitz」という仮定の下で、岡村の距離関数の具体例の表示を与える。さらに、Winston [4] による解の一意性に対する主張を考察する。

2 定式化

 $0 \in I \subset (-\infty, 0]$ を区間とし、 $\mathrm{Map}(I, \mathbb{R}^n)$ で I から \mathbb{R}^n への写像全体のなす線型空間を表す。このとき、以下の条件を満たす $H \subset \mathrm{Map}(I, \mathbb{R}^n)$ を考える:

- (i) H は $\mathrm{Map}(I,\mathbb{R}^n)$ の線型部分空間,
- (ii) H 上の線型演算が連続となるように H に位相が与えられる.

I を **過去区間**, H を **履歴空間** とよぶ。 恒等 的に 0 に等しい写像 0: $I \to E$ は H の零元である.

区間 $J \subset \mathbb{R}$ に対して,

$$J+I:=\{\,t+\theta:t\in J,\,\theta\in I\,\}$$

と書く. 写像 $\gamma: J+I \to \mathbb{R}^n$ と $t \in J$ に対して, $I_t \gamma \in \operatorname{Map}(I, \mathbb{R}^n)$ を

$$I_t \gamma(\theta) = \gamma(t+\theta) \quad (\theta \in I)$$

で定める.これを γ の t における過去区間 I をもつ **履歴** (history) とよぶ.

連続写像 $F\colon \mathbb{R}\times H\supset \mathrm{dom}(F)\to \mathbb{R}^n$ に対して,履歴空間 H を持つ **遅れ型関数微分方程** 式 を

$$\dot{x}(t) = F(t, I_t x) \quad (t \in \mathbb{R}, x(t) \in \mathbb{R}^n)$$

で定める. その初期値問題は,

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = F(t, I_t x), & t \ge t_0, \\ I_{t_0} x = \phi_0, & (t_0, \phi_0) \in \text{dom}(F) \end{cases}$$
(*)

と定式化される. $\phi \in \operatorname{Map}(I, \mathbb{R}^n)$ と $v \in \mathbb{R}^n$ に対して, $\phi^{\wedge v} : [0, +\infty) + I \to \mathbb{R}^n$ を,

$$\phi^{\wedge v}(t) = \begin{cases} \phi(t), & t \in I, \\ \phi(0) + tv, & t \in \mathbb{R}_+ \end{cases}$$

で定める。

3 主結果

$$y(s) = x(t_0+s) - \phi_0^{\wedge F(t_0,\phi_0)}(s)$$
 を考えることで、(*) は

$$\begin{cases} y'(s) = F(t_0 + s, I_s \phi_0^{\wedge F(t_0, \phi_0)} + I_s y) \\ -F(t_0, \phi_0), & s \ge 0, \end{cases}$$

$$I_0 y = \mathbf{0}$$

に帰着される。したがって、 $(t_0, \phi_0) = (0, \mathbf{0}),$ $F(t_0, \phi_0) = F(0, \mathbf{0}) = 0$ と仮定してよい。

 $C_{\mathrm{c}}(I,\mathbb{R}^n)_{\mathrm{u}}$ でコンパクトなサポートを持つ連続関数全体のなす空間に一様収束位相を入れた Banach 空間を表す.

定理 1. H は延長可能かつ延長に関して統制されていると仮定する. $V: \text{dom}(V) \to \mathbb{R}_+$ を、 $\mathbb{R} \times C_{\text{c}}(I,\mathbb{R}^n)^2_{\text{u}}$ の開集合を定義域とする, $\phi_1 \neq \phi_2$ なる (t,ϕ_1,ϕ_2) の各点で C^1 級の関数とする. 次の2つの条件を考える:

(i) 任意の $(t, \phi_1, \phi_2) \in \text{dom}(V)$ に対して,

$$V(t, \phi_1, \phi_2) = 0 \iff \phi_1 = \phi_2.$$

(ii) ある T > 0 に対して次が成り立つ:

$$I_0 \gamma_1 = I_0 \gamma_2 = \mathbf{0}$$

なるすべての C^1 級関数

$$\gamma_1, \gamma_2 \colon [0, T] + I \to \mathbb{R}^n$$

٤,

$$(t, I_t \gamma_1, I_t \gamma_2) \in \text{dom}(V), \quad I_t \gamma_1 \neq I_t \gamma_2$$

なるすべての $t \in [0,T]$ に対して,

$$D_1V(t, I_t\gamma_1, I_t\gamma_2)$$
+ $D_2V(t, I_t\gamma_1, I_t\gamma_2)\mathcal{F}(t, I_t\gamma_1)$
+ $D_3V(t, I_t\gamma_1, I_t\gamma_2)\mathcal{F}(t, I_t\gamma_2)$
 $\leq 0.$

このとき, (i), (ii) が成り立つならば, (*) の解は存在すれば局所一意である.

ただし、 D_i は第 i 成分に関する Fréchet 微分作用素で、 $\mathcal{F}(t,I_t\gamma) \in C_{\mathrm{c}}(I,\mathbb{R}^n)$ は

$$\mathcal{F}(t, I_t \gamma)(\theta) = \begin{cases} F(t + \theta, I_{t+\theta} \gamma), & t + \theta \ge 0, \\ 0, & t + \theta \le 0 \end{cases}$$

とする. H に関する仮定や [5, Theorem 3] と の比較を講演中に述べる. 定理 1 において本質的に重要なことは,

$$t \mapsto I_t \gamma \in C_{\mathrm{c}}(I, \mathbb{R}^n)_{\mathrm{u}}$$

が可微分で、その微分が $I_t[\gamma']$ で与えられることである。これは、 $I_0\gamma=\mathbf{0}$ でなければ一般に正しくない。

V の具体例は次のように与えられる.

定理 2. F は $(0,\mathbf{0})$ において C^1 -延長に関して局所 Lipschitz と仮定し,L>0 を Lipschitz 定数とする.このとき, $V: \operatorname{dom}(V) \to \mathbb{R}_+$ を

$$\operatorname{dom}(V) = \{(t,\phi_1,\phi_2) \in \mathbb{R} \times C_{\operatorname{c}}(I,\mathbb{R}^n)^2_{\operatorname{u}} : \phi_1,\phi_2 \text{ は } 0 \text{ でピークを持つ}\}, \ V(t,\phi_1,\phi_2) = \operatorname{e}^{-2Lt} \|\phi_1 - \phi_2\|^2_{\infty} \ (\|\cdot\|_{\infty} \text{ は上限ノルム})$$

で定めると、V は定理 1 の条件 (滑らかさに関する条件と(i), (ii)) を満たす.

ここで、 ϕ が 0 **でピークを持つ** とは、

$$\|\phi\|_{\infty} = |\phi(0)| > |\phi(\theta)| \quad (\forall \theta \neq 0)$$

が成り立つことをいう。上の定理の証明では、Banach による古典的な結果を用いる。適切な条件を仮定すれば、 \mathbb{R}^n ではなく一般の Banach 空間に値を取る場合も扱える。

4 Winston による主張の考察

Driver [6] による状態依存遅延微分方程式に対する一意性の反例は、状態依存遅れの困難さをよく表している。Winston [4] はあるタイプの状態依存遅れ方程式について一意性の十分条件を導いたが、ある条件を仮定しなければその証明は正しくない。講演において、その条件と定理 1.2 との関係の考察を述べる。

- [1] 岡村 博, 『微分方程式序説』, 共立出版, 2003.
- [2] J. Nishiguchi, A necessary and sufficient condition for well-posedness of initial value problems of retarded functional differential equations, J. Differential Equations 263 (2017), 3491–3532.
- [3] J. Nishiguchi, A unified theory of well-posedness for delay differential equations, and its application to state-dependent delay, in preparation.
- [4] E. Winston, Uniqueness of solutions of state dependent delay differential equations, J. Math. Anal. Appl. 47 (1974), 620–625.
- [5] T. Furumochi, On the uniqueness of solutions of a system of functional-differential equations, Funkcial. Ekvac. **15** (1972), 149–159.
- [6] R. D. Driver, A two-body problem of classical electrodynamics: the one-dimensional case, Ann. Physics 21 (1963), 122–142.

Modified Improved Interpolating Moving Least Squares 近似を用いた Element-free Galerkin 法の精度向上

藤田 宜久1, 伊東 拓2, 生野 壮一郎3, 中村 浩章4,5

 1 函館工業高等専門学校, 2 日本大学, 3 東京工科大学, 4 核融合科学研究所, 5 名古屋大学 e-mail : fujita@hakodate.kosen-ac.jp

1 背景

幾何学構造を伴った有限要素の情報を必要としないために、準備すべきデータを大幅に簡素化できる解析手法として、メッシュレス法が注目を集めている。メッシュレス法の一つである Element-Free Galerkin (EFG) 法 [1] は Moving Least-Squares (MLS) 近似を用いて離散化を行っている。このとき、MLS 近似にはデルタ関数特性がないため、節点上で基本境界条件が厳密に満足されるわけではない。

Ju-Feng 等はデルタ関数特性をもつ近似手法 として Improved Interpolating MLS (IIMLS) 近似 [2] を提案した. IIMLS 近似は節点間での 近似精度も向上するほか,形状関数生成時に任 意の重み関数を使用することができるという 利点も併せ持っている. しかしながら, Least-Squares 近似系のいずれの手法も, EFG 法で 必要とされる導関数近似の精度は Runge の現 象[3]によって、次数が高くなるにつれて発散 してしまう. そこで,本研究では Runge の現 象を抑制することにより, IIMLS 近似の導関数 近似精度を向上させた. Runge の現象を抑制す るためには、Chebyshevノードを用いることが 有効的である.しかしながら、メッシュレス法 の長所である節点配置に制約を設けることは意 に反する. そこで、間接的に Chebyshev ノー ドを用いた.

本研究の目的は Modified IIMLS (MIIMLS) 近似を開発するとともに, EFG 法へ導入し精 度向上を図ることである.

2 計算手法

本論文では簡単のために2次元Poisson問題:

$$\begin{cases}
-\nabla^2 u = p & \text{in } \Omega, \\
u = \bar{u} & \text{in } \Gamma_{\text{D}}, \\
q \equiv \frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q} & \text{in } \Gamma_{\text{N}},
\end{cases}$$
(1)

を扱う. ただし, Ω は単一閉曲線 $\partial\Omega$ によって 囲まれた領域であり, $\Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm N} = \partial\Omega$ である. また,n は $\partial\Omega$ 上での外向きの法線ベクトルで あり、p(x)、 $\bar{u}(x)$ 、 $\bar{q}(x)$ はそれぞれ Ω 内、 $\Gamma_{\rm D}$ 、 $\Gamma_{\rm N}$ 上で定義された既知関数である. 基本境界条件を課した弱形式に対して、MLS 近似を用いて離散化を行うと連立一次方程式:

$$\left[\frac{A \mid B}{B^{\mathrm{T}} \mid O} \right] \left[\frac{\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{\lambda}} \right] = \left[\frac{\boldsymbol{f}}{\boldsymbol{g}} \right], \tag{2}$$

に帰着される。ただし、 λ は Lagrange の未定係数である。また、N 次元ベクトル空間の正規直交基底を $\{e_1^*,e_2^*,\cdots,e_N^*\}$ 、M 次元ベクトル空間の正規直交基底を $\{e_1,e_2,\cdots,e_M\}$ とすると、行列成分はそれぞれ

$$A := \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \int_{\Omega} \nabla \phi_i \nabla \phi_j^{\mathrm{T}} \, \mathrm{d}\Omega \, \boldsymbol{e}_i^* \boldsymbol{e}_j^{*\mathrm{T}}, \quad (3)$$

$$B := \sum_{i=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} \int_{\Gamma_{\mathbf{D}}} \phi_i N_m \, \mathrm{d}l \, \boldsymbol{e}_i^* \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{T}}, \quad (4)$$

$$\boldsymbol{f} := \sum_{i=1}^{N} \left(\int_{\Omega} \phi_i^{\mathrm{T}} p \, \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \phi_i^{\mathrm{T}} \bar{q} \, \mathrm{d}l \right) \boldsymbol{e}_i^*, \tag{5}$$

$$\mathbf{g} := \sum_{m=1}^{M} \int_{\Gamma_{\mathbf{D}}} N_m \bar{u} \, \mathrm{d}l \, \mathbf{e}_m, \tag{6}$$

となる。ただし,N は領域内の節点数,M は境界上の節点数である。また, $\phi_i(x)$ は形状関数であり, $N_m(l)$ は一次内挿関数である.

MLS 近似及び IIMLS 近似において,近似関数 u(x) は形状関数 $\phi(x)$ と 既知関数 f(x) の一次結合:

$$u(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\phi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f},\tag{7}$$

$$\phi(\mathbf{x}) := \{\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \cdots, \phi_N(\mathbf{x})\}^{\mathrm{T}}, \quad (8)$$

$$\mathbf{f} := \{f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \cdots, f(\mathbf{x}_N)\}^{\mathrm{T}},$$
 (9)

で表される. 形状関数の導関数を用いることで, 導関数近似も

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{x})}{\partial x_k} = \frac{\partial \boldsymbol{\phi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial x_k} \boldsymbol{f}, \tag{10}$$

と表すことができる. 故に(3)より, 導関数近似精度が全体に与える影響は大きい.

Runge の現象を抑えるために、Chebyshev ノードを間接的に用いる必要がある. つまり、 Chebyshev 変換を行うために、形状関数を用い て変換行列:

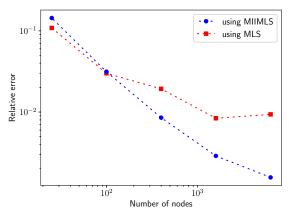
$$\widetilde{\Phi} := \left[\phi(\widetilde{x}_1), \phi(\widetilde{x}_2), \cdots, \phi(\widetilde{x}_{\widetilde{N}})\right]^{\mathrm{T}}, \quad (11)$$

を定義すると、MIIMLSにおける導関数近似は

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{x})}{\partial x_k} = \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial x_k} \widetilde{\boldsymbol{\phi}} \boldsymbol{f}, \tag{12}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{x}) := \left\{ \phi_1(\boldsymbol{x}), \phi_2(\boldsymbol{x}), \cdots, \phi_{\widetilde{N}}(\boldsymbol{x}) \right\}^{\mathrm{T}}, \quad (13)$$

となる. ただし、 \widetilde{x} は Chebyshev ノードであり、 \widetilde{N} は Chebyshev ノードの節点数である. また、 $\widetilde{\phi}(x)$ は Chebyshev ノードを用いて計算された形状関数である. このとき、多項式基底は幾何変換により計算精度を向上させている [4].



 \boxtimes 1. The relative error as functions of the number os nodes. Here, the Poisson problem is solved using EFG with MLS and MIIMLS.

3 数値解析結果及び考察

導関数近似の精度向上を行うために、MIIMLS 近似を開発した.また、MIIMLS近似を EFG 法の離散化に用いることで、解析精度の向上を 図った.

本研究を通して、数値積分に伴うバックグラウンドセルの大きさは節点が9点含まれるように決定しており、バックグラウンドセル内の積分点数は100点である.また、形状関数の作成しに使用した重み関数は

$$w(r) := \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \exp(-8r^2) & 0 < r \le R \\ 0 & r > R \end{cases}$$
 (14)

である. ただし,rは節点間距離,Rはサポート半径である. さらに,境界条件として基本境界上条件 Γ_D のみを課している.

節点数 N と相対誤差 $e_r(x)$ の関係を図1に 示す. ただし, 二次元 Poisson 問題の解析解を $u = \cos(\pi x)\cos(\pi y)$ とする. また, $e_{\rm r}(x) =$ $|\bar{u}(x)-u(x)|/|u(x)|$ であり、 $\bar{u}(x)$ は近似解であ る. 同図より, 節点数が少ない場合には離散化 に MLS 近似を用いた方が高精度に計算される. 一方, 節点数が 10^2 を 境に MIIMLS 近似を用い た方が高精度に計算される. これは, MIIMLS 近似では境界上での近似精度が MLS 近似と比 べて劣っていることに起因する. 節点数が少な い場合には、境界上の節点数の割合が計算領域 内部の節点数に対して大きいために, 精度の劣 化として顕著に現れている.また,それぞれの 手法を用いた結果は線形に変化していない. こ れは, それぞれの手法において積分点数などの 最適なパラメータが異なっていることを表して いる. 故に、MLS 近似と MIIMLS 近似それぞ れを用いた場合の最適なパラメータを見つける 必要がある.

- [1] T. Belytschko, Y. Y. Lu and L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Methods Eng., Vol. 37 (1994), 229–256.
- [2] W. Ju-Feng, S. Feng-Xin and C. Yu-Min, An improved interpolating element-free Galerkin method with nonsingular weight function for two-dimensional potential problems, Chin. Phys. B, Vol. 21 (2012), 090204.
- [3] J. Epperson, On the Runge Example, Amer. Math. Monthly, Vol. 94 (1987), 329–341.
- [4] D. Mirzaei, Analysis of moving least squares approximation revisited, J. Comput. Appl. Math., 282 (2015), 237– 250.

微小スケール領域における電磁波伝搬解析へのメッシュレス法の適用

伊東 拓 1, 藤田 宜久 2, 生野 壮一郎 3, 中村 浩章 4,5

 1 日本大学, 2 函館工業高等専門学校, 3 東京工科大学, 4 核融合科学研究所, 5 名古屋大学 e-mail : itoh.taku@nihon-u.ac.jp

1 はじめに

電磁波伝搬シミュレーションの手法として、Finite-Difference Time-Domain 法 (FDTD) が知られている。一方、FDTD よりも節点を柔軟に配置できる方法として、Kaufmann らが提案した方法がある [1]。同方法を我々は、Meshless Time-Domain Method (MTDM) と呼んでいる。MTDMではメッシュレス法で用いられる形状関数で物理量の離散化を行う。文献 [1] では、メッシュレス法の1つである Radial Point Interpolation Method (RPIM) [2] の形状関数が用いられている。一方、形状関数としてInterpolating Moving Least-Squares 法 (IMLS) [3]を用いることで、MTDMの安定性が向上することが報告された [4]。以下では、文献 [4] の方法を単に MTDM と記す。

MTDMでは柔軟に節点を配置できることから、複雑領域でのシミュレーションを容易にする。しかしながら、従来MTDMはメートルスケールの領域におけるシミュレーションに対して適用されることが多かった。一方、柔軟な節点配置が可能というMTDMの特徴を活かせば、微小スケール(マイクロスケール以下を想定)の部品を含むような複雑なデバイスでのシミュレーションにおいて、効率的かつ安定的に計算できる可能性がある。

本研究の目的は、微小スケール領域における 電磁波伝搬シミュレーションを行う際にMTDM を適用し、性能評価を行うことである.

2 Meshless Time-Domain Method

本研究では,2 次元 TM-Mode の Maxwell 方程式:

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = -\sigma E_z + \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{\partial E_z}{\partial y},\tag{2}$$

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \tag{3}$$

を考え、電磁波伝搬シミュレーションを行う。 ただし、 E_z は電場 E の z 成分、 H_x , H_y はそれ ぞれ電界 H の x,y 成分である。また、 ε,σ,μ はそれぞれ誘電率、導電率、透磁率である。

MTDMでは、時間の離散化をする際、FDTDと同様に Leap-Frog 法が用いられる。また、物理量はメッシュレス法の形状関数によって離散化される。そのために、まずは節点がシミュレーション領域内に配置される。具体的には、 E_z の離散化のために x_i^E $(i=1,2,\ldots,N^E)$, H_x,H_y の離散化のために x_j^H $(j=1,2,\ldots,N^H)$ がそれぞれ配置される。これらの節点に付随した形状関数の線形結合によって E_z,H_x,H_y がそれぞれ表される。

MTDM によって離散化された 2 次元 TM-Mode の Maxwell 方程式は,最終的に下記のようになる [1, 4].

$$E_{z,i}^{n} = \alpha E_{z,i}^{n-1} + \beta \left(\mathbf{H}_{y}^{n-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\phi}_{i}^{H}}{\partial x} - \mathbf{H}_{x}^{n-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\phi}_{i}^{H}}{\partial y} \right), (4)$$

$$H_{x,j}^{n+\frac{1}{2}} = H_{x,j}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu} \mathbf{E}_z^n \cdot \frac{\partial \phi_j^E}{\partial y},\tag{5}$$

$$H_{y,j}^{n+\frac{1}{2}} = H_{y,j}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\mu} \mathbf{E}_z^n \cdot \frac{\partial \phi_j^E}{\partial x}.$$
 (6)

ここで, n はステップ数, Δt は時間刻み幅である。また、

$$\begin{split} & \boldsymbol{E}_{z}^{n} \equiv \left[E_{z,1}^{n}, E_{z,2}^{n}, \dots, E_{z,N^{E}}^{n}\right]^{\mathrm{T}}, \\ & E_{z,i}^{n} \equiv E_{z}^{n}(\boldsymbol{x}_{i}^{E}), \\ & \boldsymbol{H}_{x}^{n-\frac{1}{2}} \equiv \left[H_{x,1}^{n-\frac{1}{2}}, H_{x,2}^{n-\frac{1}{2}}, \dots, H_{x,N^{H}}^{n-\frac{1}{2}}\right]^{\mathrm{T}}, \\ & \boldsymbol{H}_{y}^{n-\frac{1}{2}} \equiv \left[H_{y,1}^{n-\frac{1}{2}}, H_{y,2}^{n-\frac{1}{2}}, \dots, H_{y,N^{H}}^{n-\frac{1}{2}}\right]^{\mathrm{T}}, \\ & H_{x,j}^{n-\frac{1}{2}} \equiv H_{x}^{n-\frac{1}{2}}(\boldsymbol{x}_{j}^{H}), \quad H_{y,j}^{n-\frac{1}{2}} \equiv H_{y}^{n-\frac{1}{2}}(\boldsymbol{x}_{j}^{H}), \\ & \phi_{j}^{E} \equiv \left[\phi_{1}^{E}(\boldsymbol{x}_{j}^{H}), \phi_{2}^{E}(\boldsymbol{x}_{j}^{H}), \dots, \phi_{N^{E}}^{E}(\boldsymbol{x}_{j}^{H})\right]^{\mathrm{T}}, \\ & \phi_{i}^{H} \equiv \left[\phi_{1}^{H}(\boldsymbol{x}_{i}^{E}), \phi_{2}^{H}(\boldsymbol{x}_{i}^{E}), \dots, \phi_{N^{H}}^{H}(\boldsymbol{x}_{i}^{E})\right]^{\mathrm{T}}, \\ & \alpha \equiv \frac{2\varepsilon - \sigma\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t}, \quad \beta \equiv \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \end{split}$$

とする。ただし、 $\phi_i^E(x)$ 、 $\phi_j^H(x)$ は、それぞれ x_i^E 、 x_j^H に付随した形状関数である。 $\phi_i^E(x)$ 、

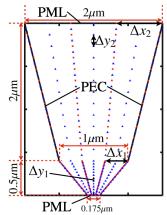
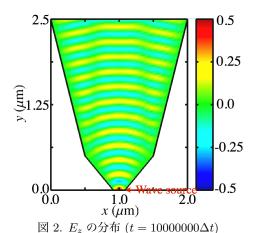


図 1.2 段階の Taper 構造をもつプローブ



 $\phi_i^H(x)$ lt, Kronecker delta function property:

$$\phi_i^E(\mathbf{x}_j^E) = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, N^E), \quad (7)$$

$$\phi_i^H(\mathbf{x}_i^H) = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, N^H) \quad (8)$$

を満足する必要がある。ただし、 δ_{ij} は Kronecker のデルタである。IMLS で生成された $\phi_i^E(\boldsymbol{x})$,

 $\phi_i^H(\mathbf{x})$ は、(7), (8) を満たす [3].

本研究では FDTD で用いられる Staggered Mesh ベースの節点配置を採用するが、領域形状に合わせて節点を配置可能である。具体例を図 1 に示す。なお、同図において、赤い正方形が x_i^E 、青い三角形が x_i^H である。

3 微小スケール領域における数値実験

本節では、数値実験として、マイクロスケール領域での2次元シミュレーションをMTDMで行う。そのために、近接場光学顕微鏡におけるプローブでの電磁波伝搬シミュレーション[5]を考える。プローブとしては、図1に示した2段階のTaper構造をもったものを採用する。近接場光学顕微鏡では、入射光がプローブ先端で反射し、その反射光を観測する必要があるが、こ

こでは文献 [5] と同様に、プローブ先端にソースを設定し、反射後の光がどのように伝搬するかについて調べる。本来は入射光と反射光の合成を考える必要があるが、今回のシミュレーションでは考慮していない。なお、今回のシミュレーションでは、振幅 1V/m、速度 299792458m/s、波長 $0.4\mu m$ の \sin 波をソースとし、プローブ側面からは電磁波が漏れないものとする。

図 1 で、 $\Delta x_1 = 0.05\mu m$ 、 $\Delta y_1 = 0.025\mu m$ 、 $\Delta x_2 = 0.25\mu m$ 、 $\Delta y_2 = 0.0625\mu m$ と設定し、MTDM で電磁波伝搬シミュレーションを行った。図 2 に E_z の分布を示す。同図より、視覚的には E_z が滑らかな分布であることが確認できる。なお、この分布は $t = 100000000\Delta t$ のときのものである。したがって、我々は、2 段階のTaper 構造をもつプローブにおいて、MTDMによる比較的長時間のシミュレーションを安定的に実行できたと考えている。

- [1] Kaufmann T., Engström C., Fumeaux C., and Vahldieck R., Eigenvalue Analysis and Longtime Stability of Resonant Structures for the Meshless Radial Point Interpolation Method in Time Domain, IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 58(2010), 3399–3408.
- [2] Wang J. G. and Liu G. R., A Point Interpolation Meshless Method Based on Radial Basis Functions, Int. J. Numer. Meth. Engng, 54(2002), 1623–1648.
- [3] Lancaster P. and Salkauskas K., Surfaces Generated by Moving Least Squares Methods, Mathematics of Computation, **37**(1981), 141–158.
- [4] Itoh T. and Ikuno S., Interpolating Moving Least-Squares-Based Meshless Time-Domain Method for Stable Simulation of Electromagnetic Wave Propagation in Complex-Shaped Domain, IEEE Trans. on Magn., **52**(2016), Art. no. 7207404.
- [5] Sawada K., Nakamura H., Kambe H., and Saiki T., FDTD Analysis of a Near-Field Optical Fiber Probe with a Double Tapered Structure, IEICE Trans. Electron., E85-C(2002), 2055–2058.

メッシュレス法を用いた電磁波伝搬シミュレーション

齋藤 $歩^1$, 高山 彰優 1 , 神谷 淳 1

1 山形大学大学院理工学研究科

e-mail : saitoh@yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

電磁波伝搬シミュレーションには、有限差分時間領域(FDTD)法が広く使われており、多くの素晴らしい研究成果が生まれている.しかしながら、FDTD 法では、前処理として解析領域全体を予め直交メッシュに分割する必要があり、領域の形状が複雑になるほど、メッシュ幅を細かくしなければ離散化誤差が大きくなってしまう.さらに、FDTD 法は陽解法であるため、定常状態になるまでに多大なタイムステップを要してしまう.これらの理由から、定常状態の電磁波伝搬シミュレーションには、陰解法が適していると考えられる.

陰解法を用いた電磁波シミュレーションでは、 有限差分-境界要素(FD-BE)併用法や有限要素-境界要素(FE-BE)併用法のように、領域型 と境界型の離散化法を組み合わせることによっ て電磁波伝搬問題を離散化してきた[1]. しか しながら、FD-BE併用法やFE-BE併用法のど ちらの解法も前処理として対象領域、境界及び 界面は予め要素の集合に分割しなければならな い. 自動要素分割法も多数提案されているが、 解析形状の複雑さや境界条件の連続性の問題に よって手作業による処理が増大してしまう.

要素分割の処理を回避するため,近年,多くのメッシュレス法は提案された [2,3]. また,筆者等の研究によって,これまで,メッシュレス法の改良もなされてきた. 例えば,従来のElement-Free Galerkin (EFG) 法では境界条件が厳密に満たされないが,新たな境界条件の組み込み法を提案することによって,高性能なEFG 法を開発できた [3]. このような背景を踏まえて,定常状態の電磁波伝搬問題をメッシュレス法によって離散化できれば,要素分割の労力を回避した画期的な電磁波伝搬シミュレーションが可能となる.

本研究の目的はメッシュレス法による定常状態における2次元電磁波散乱問題の数値解法を開発し、数値実験によって提案法の性能を調べることである.

2 メッシュレス法による 2 次元電磁波散 乱問題の数値解法

本研究では, TE 波が法線方向からに入射してくると仮定した 2 次元定常電磁波散乱問題:

$$-(\Delta + k^2) E_z = i\omega\mu\sigma E_z \qquad \text{in } \Omega_{\rm I}, \quad (1)$$

$$-\left(\Delta + k_0^2\right) E_z = 0 \qquad \text{in } \Omega_{\mathcal{E}}, \quad (2)$$

を対象とする。但し, E_z は電界の z 成分であり, k_0 及び k はそれぞれ自由空間と散乱物における波数である。また, ω , μ 及び σ は周波数,透磁率及び導電率それぞれを表し,i は虚数単位を示す。さらに, Ω_I 及び Ω_E はそれぞれ単一閉曲線 $\partial\Omega$ で囲まれた領域及び Ω_I を囲む無限領域を表す。

境界条件として,以下の方程式:

$$\llbracket E_z \rrbracket = 0, \qquad \llbracket \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial n} \rrbracket = 0 \quad \text{on } \partial \Omega, \quad (3)$$

を仮定する. 但し,n は境界 $\partial\Omega$ に沿った法線ベクトルを示し,[] は $\partial\Omega$ での被演算子の差を表す演算子を意味する.

(1)-(3) を離散化しよう。本研究では,離散化法として $\Omega_{\rm I}$ 及び $\Omega_{\rm O}$ に対してそれぞれ X-EFGM[3] 及び境界要素法を採用する。この目的のため,(1) と等価な弱形式と (2) と等価な境界積分方程式を導かなければならない。

 $\partial\Omega$ で Direchlet 境界条件が成り立つと仮定すると, (1) は以下の弱形式:

$$\forall w \text{ s.t. } w|_{\partial\Omega} = 0 : J[w, E_z] = 0,$$
 (4)

と等価になる. 但し, J[w,u] は

$$J[w, u] \equiv \iint_{\Omega_{\mathbf{I}}} \nabla w \cdot \nabla u \, d^2 \mathbf{x}$$
$$-(k^2 - i\beta) \iint_{\Omega_{\mathbf{I}}} w \, u \, d^2 \mathbf{x}.$$

で定義される汎関数を表し、 β は $\beta=\omega\mu\sigma$ で定義する. さらに、 $\forall w \text{ s.t. } w\big|_{\partial\Omega}=0$ は任意の関数 $w\left(x\right)$ が $\partial\Omega$ 上で w=0 を満たしていることを示す.

一方, Sommerfeld の放射条件を仮定することによって, (2) と等価な境界積分方程式は,

$$c(\boldsymbol{y})E_{z}(\boldsymbol{y}) + \oint_{\partial\Omega} \frac{\partial w^{*}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})}{\partial n} E_{z}(\boldsymbol{x})ds$$
$$- \oint_{\partial\Omega} w^{*}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \frac{\partial E_{z}(\boldsymbol{x})}{\partial n} ds = E_{z}^{I}(\boldsymbol{y}), \quad (5)$$

で表される. 但し、c(y) は形状関数であり、関数 $w^*(x,y)$ は $-(\Delta+k^2)$ の基本解を表す. また、 $E_z^{\rm I}(y)$ は点 y 上の入射波の電界である. まず、弱形式 (4) を離散化すると、

$$[A - (k^2 - i\beta) B]\hat{\boldsymbol{u}} + C\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{0}, \qquad (6)$$

が得られる. ここで, \hat{u} は \hat{u}_i に対応する節点ベクトルであり, λ は M 次元未知ベクトルである. また, 行列 A, B 及び C はそれぞれ,

$$A = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \iint_{\Omega_{\mathrm{I}}}
abla \phi_{i} \cdot
abla \phi_{j} d^{2} \boldsymbol{x} \ \boldsymbol{e}_{i}^{*} \boldsymbol{e}_{j}^{*T},$$
 $B = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \iint_{\Omega_{\mathrm{I}}} \phi_{i} \phi_{j} d^{2} \boldsymbol{x} \ \boldsymbol{e}_{i}^{*} \boldsymbol{e}_{j}^{*T}$
 $C = \sum_{i=1}^{N} \sum_{p=1}^{M} \phi_{i}(\boldsymbol{x}(s_{p})) \boldsymbol{e}_{i}^{*} \boldsymbol{e}_{p}^{T},$

で与えられており、N 及び M はそれぞれ全節 点数及び境界節点数である。さらに、 n_p は第 p 番目の節点に付随する単位法線ベクトルを表し、 s_p は第 1 境界節点から第 p 境界節点までの 弧長を表す。

次に,境界積分方程式(5)は,

$$H\boldsymbol{u} - G\boldsymbol{q} = \boldsymbol{f},\tag{7}$$

に離散化される. 但し、u と q はそれぞれ u_p と q_p に対応する節点ベクトルであり、f は、

$$\boldsymbol{f} = \sum_{p=1}^{M} E_{z}^{\mathrm{I}}\left(\boldsymbol{x}(s_{p})\right) \boldsymbol{e}_{p}.$$

で定義される. また, M 次正方行列 H と G は影響行列を表す.

最後に,境界条件(3)を離散化することによって,

$$C^T \hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u}, \qquad \frac{1}{\mu} D^T \hat{\boldsymbol{u}} = -\frac{1}{\mu_0} \boldsymbol{q}, \qquad (8)$$

が得られる. ここで, 行列 D は,

$$D = \sum_{i=1}^{N} \sum_{p=1}^{M} (\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}(s_p)) \cdot \nabla \phi_i(s_p)) \boldsymbol{e}_i^* \boldsymbol{e}_p^T,$$

で与えられる.

(6)-(8) を連立して解くことにより、 $\Omega_{\rm I}\cup\partial\Omega$ 上の電界 E_z を得ることができる.

3 数值実験

本節では,提案法の性能を数値的に調べる. 実験条件として,領域 $\Omega_{\rm I}$ は $\Omega_{\rm I}=(0,1)\times(0,1)$ であると仮定し,入射波 $E_{\rm I}^{\rm I}(x)$ は

$$E_x^{\mathrm{I}}(\boldsymbol{x}) = E_0 e^{ik(\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{x})},$$

で与えられる. 但し, E_0 は入射波の強度を表し, e_x はx 方向に沿った単位ベクトルとする. さらに,本研究では,パラメタを以下のように 固定する: $k/k_0=1, E_0=1$.

無次元化された導電率 β が電界の空間分布 に及ぼす影響を調べよう. $\beta=0$ 及び $\beta=10^3$ に対する E_z の空間分布をそれぞれ図 1(a) 及び 図 1(b) に示す. これらの図からわかるように, 比較的滑らかな電界 E_z の分布を得ることができる.

以上の結果より、2次元電磁波散乱問題の数 値解法の一つとして、提案法は有益な方法とな り得ると云える.

- Z. Xiang et al., Progress In Electromagnetics Research, vol. 22, pp.107-129, 1999.
- [2] A. Kamitani et al., Plasma and Fusion Research, Vol. 6, Article#:2401074, 2011.
- [3] A. Saitoh *et al.*, IEEE Trans. Magn., Vol. 49(5), pp.1601-1604, 2013.

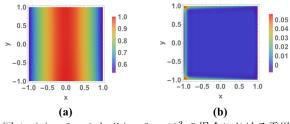


図 1. (a) : $\beta=0$ と (b) : $\beta=10^3$ の場合における電界 E_z の空間分布.

溶液中における対称双頭型両親媒性分子の自己会合: 散逸粒子動力学シミュレーション

藤原 進¹, 水口 朋子¹, 橋本 雅人¹ ¹京都工芸繊維大学 材料化学系 e-mail: fujiwara@kit.ac.jp

1 緒言

両親媒性分子とは分子中に親水基と疎水基 を併せ持つ分子であり、その中でも双頭型両親 媒性分子は、疎水基の両端にそれぞれ親水基を 持つ分子である. 両親媒性分子は一般に, 溶媒 中で様々な自己会合体を形成するが、これらの 会合体のサイズはナノスケールであるため、ナ ノスケールの鋳型としての応用が期待されて いる[1]. また、ベシクルやチューブなどの中 空構造は、それぞれドラッグデリバリーシステ ムのキャリアやナノ流路などへの応用も期待 されている[1]、本研究では、形成される会合 体が粒子間相互作用の大きさに対してどのよ うに変化するのかを明らかにするため、親水性 粒子間相互作用パラメータの様々な値に対し て、 粗視化した双頭型両親媒性分子と溶媒から なる系の散逸粒子動力学(DPD)シミュレーシ ョンを行い、会合体の形態及び構造を解析した.

2 シミュレーションモデル・方法

シミュレーション・モデルとして,以下の粗視化モデルを用いる[2]. 対称双頭型両親媒性分子は親水性粒子 A と疎水性粒子 B からなる屈曲性分子 AB_3A でモデル化する. また,溶媒粒子 S は 1 つの親水性粒子でモデル化する. 両親媒性分子の共有結合は,結合伸縮ポテンシャルで記述する. 非結合相互作用は三つの項,すなわち保存力,散逸力,ランダム力からなる. 保存力における粒子 i, j 間の反発相互作用パラメータ a_{ij} を次式のように設定する.

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} A & B & S \\ A & a_{AA} & 200 & 25 \\ B & 200 & 25 & 200 \\ S & 25 & 200 & 25 \end{pmatrix}$$
 (1)

ここで、i,j = A, B or S である. 粒子数は、双頭型両親媒性分子を 1000 個、溶媒粒子を 40,000 個とし、周期境界条件を適用する. 温度は $k_{\rm B}T=0.64$ 、時間刻みは $\Delta t=0.04$ とした. シミュレーションソフトは、 OCTA の

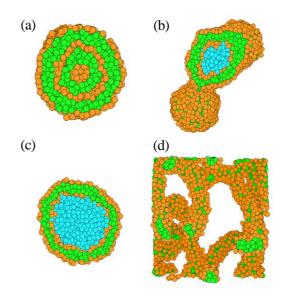


図 1. 対称双頭型両親媒性分子によって形成された自己会合構造のスナップショット. (a) 内部構造を有する球状ミセル (a_{AA} =15), (b) チューブおよびベシクル (a_{AA} =25), (c) ベシクル (a_{AA} =30), (d) ひも状ミセル (a_{AA} =50). 溶媒粒子については, (b)と(c)におけるチューブとベシクルの内部以外表示していない.

COGNAC[3]を用いた.最初に、初期配置としてランダムな双頭型両親媒性溶液を用意した.その後、粒子 A 同士の反発相互作用パラメータ a_{AA} の様々な値に対してDPDシミュレーションを 1,000,000 ステップ行い、自己会合構造の形成過程を解析した.

3 結果・考察

DPD シミュレーションにより得られた 4種類の自己会合構造 (内部構造を有する球状ミセル,チューブ,ベシクル,ひも状ミセル)のスナップショットを図1に示す。この図から、親水基間の反発相互作用パラメータ a_{AA} が大きくなるにつれて、会合体の形態が球状ミセルからチューブへ、さらにベシクルへ、最終的にひも状ミ

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

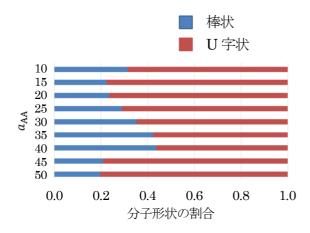


図 2. 反発相互作用パラメータ a_{AA} に対する 2種類の分子形状 (棒状, U字状) の割合.

セルへと変化することが明らかになった.また,自己会合体中の分子形状(棒状または U 字状)を解析した結果、ベシクル中の棒状分子の割合は、他の自己会合構造(球状ミセル、チューブ、ひも状ミセル)に比べて多いことが分かった(図 2).これは、4種類の自己会合構造の中でベシクルの曲率が最も小さいためであると考えられる.

4 結論

溶液中における対称双頭型両親媒性分子のDPD シミュレーションを, 親水基間の反発相互作用パラメータ aAA の様々な値に対して行った結果, 4種類の自己会合構造(内部構造を有する球状ミセル, チューブ, ベシクル, ひも状ミセル) が得られた. また, aAA が大きくなるにつれて, 会合体の形態が球状ミセルからチューブへ, さらにベシクルへ, 最終的にひも状ミセルへと変化することが分かった. さらに, ベシクル中の棒状分子の割合は, 他の自己会合構造(球状ミセル, チューブ, ひも状ミセル) の場合に比べて多いことが明らかになった.

我々がこれまで行ってきた非対称双頭型両親媒性分子 AB_3C (A, C は親水性粒子, B は疎水性粒子) の DPD シミュレーションにおいて得られた自己会合構造は、ベシクルとひも状ミセルの 2 種類のみであった[4]. この結果と本シミュレーション結果を比較すると、非対称双頭型両親媒性分子に比べて、対称双頭型両親媒性分子の方が多様な構造を形成することが明らかになった.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 15K05244 の助成 を受けたものです.

- [1] I. W. Hamley, Introduction to Soft Matter, Rev. ed., J. Wiley, 2007.
- [2] S. Fujiwara, Y. Iida, T. Tsutsui, T. Mizuguchi, M. Hashimoto, Y. Tamura and H. Nakamura, Plasma Fusion Res., Vol. 13 (2018), 3401029 (6 pages).
- [3] http://octa.jp/.
- [4] S. Fujiwara, Y. Takahashi, H. Ikebe, T. Mizuguchi, M. Hashimoto, Y. Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, Plasma Fusion Res., Vol. 11 (2016), 2401073 (5 pages).

土木・建築用超長柱材への 折紙工学からのアプローチに関する一考察

陳 暁詩¹,楊 陽¹,萩原 一郎¹,趙 希禄² ¹明治大学,²埼玉工業大学 e-mail: ka-nata@live.cn

1 はじめに

運動エネルギーを変形エネルギーに変換する最適な構造は柱であり、その柱の役割を最大にするには、途中で折れ曲がらずにできるだけ長い軸方向の圧潰変形を継続させることである。従来、自動車の吸収材として長さ700mm程度の部材での検討は報告されているが、長さ3000mmの中空六角柱断面材での検討は見られない、ここではこれについての検討を行う。

2 自動車のエネルギー吸収材レベルの長さの場合

資源の有効利用,軽量化の観点からも柱構造の断面は中空であり,折れ曲がりやすい特性を有す.長さ700mm程度の自動車のエネルギー吸収材では,あらかじめ座屈波形を求め,その半波長ごとの腹部,節部にビードを設けて圧潰変形の持続が得られている.

3 土木・建築で使用される超長材の場合の 現状と対策

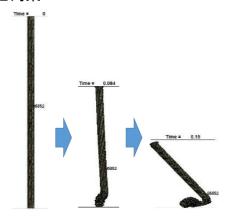


図 1.六角柱の場合は途中で折れて倒れる 3000mm に対して約 50%が畳めた

図1では、圧壊解析モデルに全て LS-DYNA の 三角形シェル要素を使い、節点数は約4000で、 要素数は約8000である. 長さ3000mm、板厚 2.3mm 半径60.5mm の六角断面の真直材である. 下端は z 軸以外完全固定で 8t の重量が上端に 50km/h の速度で衝撃する問題を扱う.この場合, 下端から約 1500mm の箇所で折れ曲がり最終的 に得られた変形量は全長の 50%である.

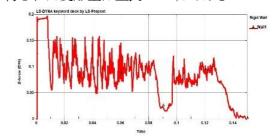


図 2.上記荷重変位線図

図2はそれによって得られる荷重―時間線図である.最初のピーク荷重が高くなっており2番目以降のピーク荷重は最初のピーク荷重の0.75倍程度となっている.折れ曲がったところで比較的長い極小値を示す荷重変位線図となっている.このような真直材では、目的のものは得られない.そこで図3で基本形状のモデルであらかじめ座屈波形を計算し、図4のような反転螺旋構造とした場合の検討を行う.

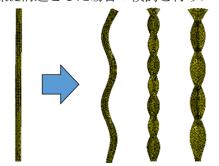


図3.基本形状および計算で得られた座屈波形例



図 4.座屈波形に応じて反転螺旋構造を作成

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

反転螺旋構造を入れて10段,20段,30段の3パターンで検討した.図5では、反転螺旋構造を入れて10段の場合は、3000mmに対して約65%畳まれた.

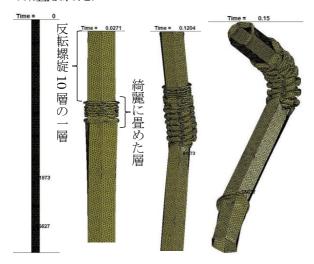


図 5. 座屈波形に応じて反転螺旋を10層入れるシミュレーション結果

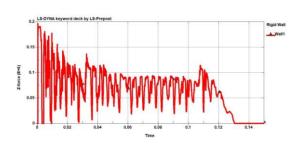


図 6. 反転螺旋を 10 層に入れるモデル 荷重変位線図

一方,図7では、反転螺旋構造を入れて30段の場合は、3000mmに対して約75%畳まれた.

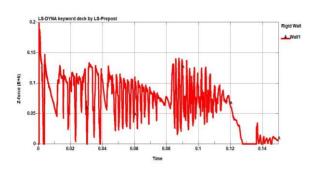


図 8. 反転螺旋を 30 層に入れるモデル 荷重変位線図

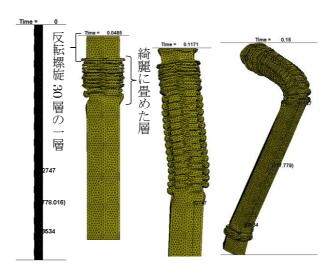


図7. 座屈波形を応じて反転螺旋を 30層に入れるシミュレーション結果

詳細は省くが 20 段の場合は,50~60%の折り畳み量であった.これは一段の反転螺旋の長さが座屈の波形と一致していないと思われるが今後さらに詰めてゆく.

4 まとめと今後の課題

今回,真直材と反転螺旋折紙構造で長さ3000mmの部材について圧潰量長さの比較を行った.一段の長さが比較的に座屈半波形長さに近い,10段と30段の場合は比較的に良い結果となったが,これの原因の追及と共に,更に優れた設計仕様があるか更に検討を進めてゆく.

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,特許第2727680号,平成1 年9月7日出願,平成9年12月12日登録.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

等面四面体の source unfolding

山岸 義和, 西崎 惇也, 佐治 拓道 龍谷大学理工学部

e-mail: yg@rins.ryukoku.ac.jp

1 概要

凸多面体上で、一点 P からの測地的距離による cut locus を考えると、source unfolding と呼ばれる展開図が得られる。等面四面体の source unfolding は、平面のタイル張り (ボロノイ分割)を与える。等面四面体で、source unfolding が六角形とならないような基準点 P の集合 (分岐点集合) は、面の垂心を端点とする二次曲線および線分の和集合となる。

2 等面四面体の source unfolding

等面四面体とは、四つの面が互いに合同な (鋭角) 三角形であるような四面体をいう。とく に正四面体は等面四面体である。はじめに等 面四面体 $M=M(\mathrm{OABC})$ の面 $\Delta\mathrm{OAB}$ を平面上に置いて、頂点 O は原点, 頂点 A は座標 u=(1,0), 頂点 B は座標 $v=(v_1,v_2)$ に置かれたとする。つぎに辺 OB を動かさずに四面体を転がせば、座標 -u+v に頂点 C が来る。このように、滑らないように四面体を転がすと、合同な三角形による平面タイリングが得られる。格子 $L=u\mathbb{Z}+v\mathbb{Z}\subset\mathbb{R}^2$ 上の点は M の頂点を表す。 $2L=u\mathbb{Z}+v\mathbb{Z}$ 上の点は頂点 O に対応し、u+2L 上の点は頂点 A, v+2L 上の点は頂点 B, -u+v+2L 上の点は頂点 C に対応する。

格子以外の座標 $p\in\mathbb{R}^2\setminus L$ を考えると、点集合 $\Lambda(p):=\pm p+2L$ は M の (頂点以外の) 一つの点に対応する。平面から四面体への射影を $\pi:\mathbb{R}^2\to M$ とすれば、 $\Lambda(p)=\pi^{-1}(\pi(p))$ である。

 $\Lambda(p)$ を母点集合とする平面のボロノイ分割を考える。すなわち、各母点 $\alpha\in\Lambda(p)$ のボロノイ領域 $T(\alpha)$ を

 $T(\alpha) = \left\{ \zeta \in \mathbb{R}^2 : |\zeta - \alpha| \le |\zeta - \beta|, \forall \beta \in \Lambda(p) \right\}$

で定義する。 $\alpha, \beta \in \Lambda(p), \alpha \neq \beta$ とするとき $T(\alpha)$ と $T(\beta)$ は互いに合同な多角形で、共有点を持たないか、一点を共有するか、辺を共有するかのいずれかである。すなわち、 $\mathbb{R}^2 = \bigcup_{\alpha \in \Lambda(p)} T(\alpha)$ は平面のタイル張りを与える。

T(p) は、M 上の点 $\pi(p)$ に関する source unfolding と呼ばれる。多角形 T(p) から周を除いた内部を $\operatorname{int}(T(p))$ とするとき、 $G:=M\setminus\pi(\operatorname{int}(T(p)))$ は M 上の有限個の線分からなる。G の部分に切り込みを入れることによって $M\setminus G$ は展開されて多角形 (の内部) $\operatorname{int}(T(p))$ となる。任意の点 $\alpha\in\operatorname{int}(T(p))$ について、 α と p を両端とする線分を $\ell(p,\alpha)$ とすると、その像 $\pi(\ell(p,\alpha))$ は M 上で $\pi(p)$ から $\pi(\alpha)$ への最短経路 (測地線) となる。 $\pi(p)$ からの最短経路が二本以上あるような M 上の点は G 上にある。G を cut locus という。多面体の cut locus については $\pi(p)$ に関すると、 $\pi(p)$ に対しては $\pi(p)$ に対して $\pi(p)$

3 source unfolding の分岐

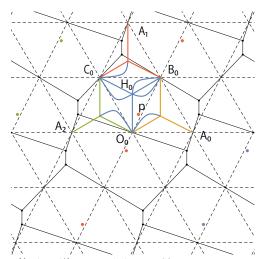


図 1. 等面四面体による平面タイル張り。source unfolding が六角形の場合。

平面で $O_0=0$, $A_0=u$, $B_0=v$, $C_0=-u+v$ とする。p が三角形 $\triangle O_0 B_0 C_0$ の周または内部を動くとして、T(p) が何角形となるかを調べる。とくに、T(p) が六角形でないような p 全体の集合 Γ および $\pi(\Gamma) \subset M$ のことを、ここでは分岐点集合と呼ぶ。

 $q_1 = -p, q_2 = -p + 2v, q_3 = -p - 2u + 2v \in \Lambda(p)$ を考える。母点 p と q_1 は O_0 をはさんで対称の位置にある。すなわち線分 $\ell(p,q_1)$ の中点は O_0 である。また、 $\ell(p,q_2)$ の中点は O_0 の中点は O_0 である。

補題 1 $p \in \triangle O_0 B_0 C_0 \setminus \{O_0, B_0, C_0\}$ のとき、T(p) は $T(q_1)$, $T(q_2)$, $T(q_3)$ と隣接する。

三角形 $\triangle O_0 B_0 C_0$ の垂心を H_0 とする。 $A_1 = -u + 2v, A_2 = -u \in \pi^{-1}(A)$ とおくと、 H_0 は 三角形 $\triangle A_0 A_1 A_2$ の外心である。

命題 $2 p = H_0$ のとき、T(p) は三角形である。

 $q_4 = -p + 2u, q_5 = -p - 2u + 4v, q_6 = -p - 2u \in \Lambda(p)$ とする。

命題 3 $p \in \triangle(H_0, O_0, B_0) \setminus (\ell(H_0, O_0) \cup \ell(H_0, B_0))$ のとき、T(p) は $T(q_4)$ と隣接する。 $p \in \triangle(H_0, B_0, C_0) \setminus (\ell(H_0, B_0) \cup \ell(H_0, C_0))$ のとき、T(p) は $T(q_5)$ と隣接する。 $p \in \triangle(H_0, C_0, O_0) \setminus (\ell(H_0, C_0) \cup \ell(H_0, O_0))$ のとき、T(p) は $T(q_6)$ と隣接する。

命題 4p が線分 $\ell(H_0, O_0)$, $\ell(H_0, B_0)$, $\ell(H_0, C_0)$ 上 (ただし端点 H_0, O_0, B_0, C_0 を除く) のとき、T(p) は五角形である。

以下、 $p \in \triangle H_0O_0B_0$ について考える。 $(p \in \triangle H_0B_0C_0, p \in \triangle H_0C_0O_0$ の場合も同様に議論できる。)

命題 5 二次曲線の部分集合 γ が存在して、 $p \in \Delta O_0 B_0 H_0 \setminus \gamma$ に対して T(p) は六角形であり、 $p \in \gamma \cap \Delta O_0 B_0 H_0$ に対して T(p) は四角形である。

辺 O_0B_0 の中点を K_0 とする。 $\triangle O_0B_0C_0$ が二等辺三角形 $O_0C_0=B_0C_0$ の場合、 $\gamma=\ell(H_0,K_0)\cup\ell(O_0,B_0)$ である。 $O_0C_0\neq B_0C_0$ の場合、 γ は H_0 と B_0 または C_0 を結ぶ弧である。 $O_0C_0<B_0C_0$ の場合、 γ は H_0 と O_0 を結ぶ弧である。

[2] では、M が正四面体の場合、すなわち \triangle OBC が正三角形の場合の T(p) の辺の数を 調べた。この場合、分岐点集合は線分の和集合 \mathcal{L} なる

平面上の 4 点 $\alpha_i = (x_i, y_i) \ (i = 1, 2, 3, 4)$ に対して

$$f(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = \begin{vmatrix} x_1^2 + y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 + y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ x_3^2 + y_3^2 & x_3 & y_3 & 1 \\ x_4^2 + y_4^2 & x_4 & y_4 & 1 \end{vmatrix}$$

とおく。この 4 点が同一円周上にあるための条件は、 $f(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = 0$ で表される ([3])。

ボロノイ多角形の辺の数が変化するのは、4つ (以上) の母点が同一円周上にあるときである。 $p_1=p+2u-2v$ とおくと、二次曲線 γ は $f(p,q_1,p_1,q_4)=0$ で表される。

- [1] Miller, E. and Pak, I., Metric Combinatorics of Convex Polyhedra: Cut Loci and Nonoverlapping Unfoldings, Discrete and Computational Geometry 39 (2008) 339-388.
- [2] 物部侑吾, 山岸義和, 正四面体の cut locus, 第 14 回日本応用数理学会研究部会連合発表会, 2018年3月15日, 大阪大学.
- [3] 杉原厚吉, 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.

展開立方体折紙による宇宙構造システム構築のための構造座屈の調査

有田 祥子¹,宮崎 康行²,福田 一樹¹,山極 芳樹¹ ¹ 静岡大学工学部機械工学科,² 日本大学理工学部航空宇宙工学科 e-mail: arita. shoko@shizuoka. ac. jp

1 概要

宇宙開発の発展に伴い、様々な大規模宇宙ミ ッションの実現を目指した研究・開発や、地球 近傍のスペースデブリ問題の解決に向けた宇 宙機システムの研究・開発が盛んに行われてい る. これらの宇宙機のシステムとして、ロケッ トによる輸送の低コスト化の観点から、展開構 造システムは不可欠である. 膜・ケーブル・バ ネ性部材などの柔軟構造部材は、曲げる・巻き つける・折りたたむなど、部材の変形や座屈を 利用した収納・展開を行うことによって、より 大型・軽量構造を実現している. 特に座屈は、 柔軟構造部材に容易に生じて、膜のしわやたる みなど, 予期せぬ変形を及ぼしてしまう原因と もなるが、その大変形によってスムーズな展開 を可能にさせているとともに、部材のひずみエ ネルギーのみで変形が大きく進行するため、展 開動力が小さく抑えられ, 宇宙機の軽量化にお いて非常に有用な構造現象としてコイラブル マストロやコンベックスブームロなどの展開シ ステムに利用されている. そこで著者らはこれ までの研究で、時々刻々大変形する柔軟構造物 に適した座屈解析手法を提案してきた[3].

本研究では、円筒ねじり折紙を利用した新しい展開宇宙構造物"展開立方体"を提案している。本報告では、超小型衛星への搭載を念頭に置いて作成した展開立方体の構造模型を紹介するとともに、著者らが開発してきた座屈解析手法を用いて展開立方体の展開初期における座屈解析を実施した結果を報告する。

2 円筒ねじり折紙を利用した展開立方体

著者らは、第1章で述べた座屈のメリットを活かした有用な展開構造物として、図1のような折紙⁴¹に基づいた、図2のような立方体の展開構造システムを提案した。この構造の有用性としては以下のようなものが考えられる。

- 1. 面を確保でき、太陽電池等の搭載が可能.
- 2. 薄膜展開よりも確実な面の展開率の確保.
- 3. 折り目の数が少なく、作成が容易.
- 4. 座屈前後に異なる安定形態をもつバイステ

- ーブルのため、収納時も展開後も安定で、 長期保管における応力緩和の恐れが無い.
- 5. Cubesat など人工衛星に搭載しやすい形状のため、汎用性が期待できる.

【小型衛星への有用性】

小型衛星への搭載が容易なため、太陽電池を 膜面に搭載することによる大電力衛星、機能性 膜面を構造要素とすることによる超軽量バス 衛星、ミッション終了後に展開して大気抵抗に より軌道降下を早めるデオービット機構など として利用することが考えられる.

【大型宇宙構造物への有用性】

展開立方体は、1 軸方向へのモジュール接続がいくつでも可能であるが、図3のように、異なる立方体展開法を組み合わせると、3 軸方向に立方体を展開できる長大構造物を構築できる。こうした性質を用いることで、大型宇宙構造物の支持構造としての利用が期待できる。

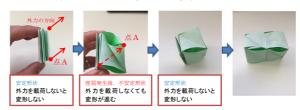


図 1. 展開折紙 "Tower of Collapsing Cube[4]"



図 2. 展開立方体の構造模型

1段展開; 橙色の面を上に引上げる

2段展開; 各面の展開立方体を展開する

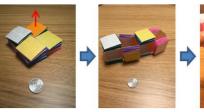




図3. 異なる立方体展開を組み合わせた大型構造

3 座屈解析手法

宇宙展開構造物は短時間で大きく変形する ため、座屈解析においても運動の影響を無視で きない、そこで著者らは、有限要素法による動 解析において座屈解析をする手法を提案した^[5].

本手法では、FEM の各時間ステップで、初めに剛体モード空間を導出する. そして構造物の全てのモードに対し、剛体モード空間に対する直交成分を持つか否かを調べることで、変形を含むモードのみを抽出する. 次に、抽出されたモードの変形仕事を計算し、その符号によって、変形が座屈か否かを判定している. 座屈と判定されたモードは、微小外乱による座屈変位を仮定した運動方程式を立式・求解することで、以下の2つの座屈評価値を得ている. これら2つの評価値と、検出された座屈モードの個数を用いることで、座屈特性を評価する.

【DF 値(Disturbance Force Value)】

座屈モード方向に変位を生じさせる外乱外力の最小値のノルムで、式(1)-(4)で得られる。0以上の実数として得られ、DF値が小さければ、微小な外乱で座屈変位を生じてしまうため、より不安定、DF値が大きければ、より安定に近い構造の状態であると評価する。式において、 θ は \mathbf{n} と \mathbf{b}_0 のなす角、 \mathbf{e}^* は座屈モード方向の単位ベクトル、 $\mathbf{\tilde{q}}$ は剛体モード空間、 \mathbf{M} は質量マトリクス、 $\mathbf{\dot{x}}_0$ および $\mathbf{\ddot{x}}_0$ は前の時間ステップでの速度ベクトルおよびその時間 1 階微分、 $\mathbf{\beta}$ は時間積分に用いた Newmark- $\mathbf{\beta}$ 法の係数である。

$$(DF) = \sqrt{|\boldsymbol{c}|^2 - (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{c})^2 - \left(\frac{\boldsymbol{b}_0 \cdot \boldsymbol{c} - (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{b}_0)(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{c})}{|\boldsymbol{b}_0| \sin \theta}\right)^2}$$
(1)

$$\boldsymbol{b}_0 = (\boldsymbol{I} - \tilde{\boldsymbol{Q}} [\tilde{\boldsymbol{Q}}^T \tilde{\boldsymbol{Q}}]^{-1} \tilde{\boldsymbol{Q}}^T) \boldsymbol{M} \dot{\boldsymbol{x}}_0$$
 (2)

$$c = \frac{1}{2\beta} (\boldsymbol{I} - \tilde{\boldsymbol{Q}} [\tilde{\boldsymbol{Q}}^T \tilde{\boldsymbol{Q}}]^{-1} \tilde{\boldsymbol{Q}}^T) \boldsymbol{M} \ddot{\boldsymbol{x}}_0$$
(3)

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{\left| (\boldsymbol{I} - \tilde{\boldsymbol{Q}} [\tilde{\boldsymbol{Q}}^T \tilde{\boldsymbol{Q}}]^{-1} \tilde{\boldsymbol{Q}}^T) \boldsymbol{M} \boldsymbol{e}^* \right|} (\boldsymbol{I} - \tilde{\boldsymbol{Q}} [\tilde{\boldsymbol{Q}}^T \tilde{\boldsymbol{Q}}]^{-1} \tilde{\boldsymbol{Q}}^T) \boldsymbol{M} \boldsymbol{e}^* \qquad (4)$$

【BD 値(Buckling Displacement Value)】

DF 値の外乱外力が加わった場合の座屈変位の節点ごとのノルムを並べたベクトルで、式(5)で得られる. 成分は0以上の実数として得られ、その値が大きければ外乱によって大きく座屈変位してしまうためより不安定、小さければより安定に近いと評価する. また、成分値の大きさに応じて各節点をコンター表示することで、構造座屈の発生および外乱が生じた場合の座屈変位の程度を可視化する. 式中のα は座屈モ

ード方向への変位の大きさである.
$$(BD) = \alpha \begin{bmatrix} \mathbf{e}_{node1}^* \mid \mathbf{e}_{node2}^* \mid & \dots & \mathbf{e}_{nodeN}^* \end{bmatrix}^T$$
(5)

4 座屈解析結果

構造模型における支柱1本分の展開初期に対する座屈解析を行った結果,図4,5に示す2種の座屈が検出された.図4は支柱の変形形状を決定する分岐座屈であり,60個の座屈モードが得られた.図5は1個の座屈モードのみを有する座屈で,モード形状より,ヒンジで繋がれた隣接する2本の支柱の二面角を開く方向の,スナップスルー座屈と考えられる.

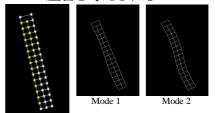


図 4. 支柱の展開初期における分岐座屈

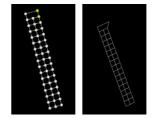


図 5. 支柱の展開初期におけるスナップスルー座屈

- [1] 萩芳郎,石村康生,川口健一,弾性梁を 組み込んだ円筒膜構造の大変位解析,膜 構造研究論文集,No.3,pp. 1-7,2012.
- [2] Miyazaki, Y., Inoue, S., Tamura, A., Analytical solution of the bending of a bi-convex boom, Mechanical Engineering Journal, Vol. 2 (2015), No. 6, pp. 1-19.
- [3] 有田祥子,宮崎康行,福田一樹,山極芳樹, 展開宇宙構造物の動的座屈解析,第 54 回 日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期 大会, C04, 2017.
- [4] Paul, J., CUT AND FOLD TECHNIQUES FOR PROMOTIONAL MATERIALS, Laurence King Publishing, 2013, pp112-123.
- [5] Arita, S., Miyazaki, Y., Modified method of detecting dynamic buckling, Mechanical Engineering Letters, Vol. 4 (2018), No. 17-00441, pp. 1-8.

Development of a pattern for folding with an origami robot (折紙ロボットで折るための展開図)

ルイス ディアゴ¹, 楊 陽¹, ジュリアン アンドレス ロメロ², 萩原 一郎¹ Meiji Institute for Advanced Mathematical Sciences MIMS(明治大学)
² AZAPA Ltd.Co.

1 Introduction

Several methods have been developed to obtain a 2D origami pattern that allows representing three-dimensional structures by folding a sheet of (e.g. Treemaker, Origamizer, paper Oripa). However, most of above methods have been thought to be fold by a human, whose abilities are still far from being reproduced by a robot. In a first attempt to modify the origami patterns, in such a way that they can be constructed by robots whose manipulation abilities are still limited comparison with human abilities), Hoan et al [1] proposed to develop a method of decomposition of the 3D structures of such that the pattern obtained can be represented by a tree structure that has no loops. The solution proposed by Hoan is based on triangular meshes that represent the 3D object. They obtain a segmentation of the object into parts and project each segment in the plane, in such a way that the pattern obtained does not include loops. In this method it is necessary to recognize the loops in the segment and then decompose the tree in such a way that the loops are eliminated. Although Hoan's method seems viable, as they do not expose the conditions of the robot they use to perform the patterns, even the method is far from being implemented.

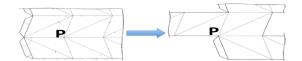


Figure 1. Removing loops in the 3D structure [1]

In figure 1, although all the folds in the resulting pattern (right part) are simple folds, it is necessary to make rotations of the pattern in the plane, for which it is necessary to develop a robot with those possibilities. In addition, due to the rotations it can

happen that the parts of the pattern that have been previously bent obstruct the operation of the robot. The authors do not propose any practical solution to solve these problems.

On the other hand, Julian et al [2] propose starting from the design of a simple robot that can only make simple folds in one direction and can glue the paper to achieve objects in three dimensions that can be represented by a surface in revolution. With the limitations of the robot in mind, the authors propose to develop a new type of pattern that they call the "Norigami" pattern because in addition to folding the pattern, it has places on the pattern that must be glued to obtain the shape of the object in 3D. The result of the 3D model obtained by the robot is a form of bent accordion that must be opened posteriorly to obtain the 3D object.

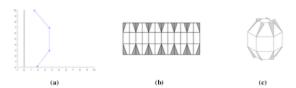


Figure 2. Example of pattern obtained from a surface of revolution [2]: a) Profile b) Pattern c) 3D model.

In this paper we present a solution to deal with more complex objects that cannot be reproduced by a surface in revolution. The work focuses on the decomposition of the object through the curve-skeleton. Skeleton curves are used as pivot axes to reproduce the segments of the 3D object. The rest of the work is organized as follows: In section 2, a method of skeletonization of 3D objects is introduced. Section 3 briefly explains how to obtain the pattern for each of the curves obtained from the skeleton and section 4 shows some examples of resulting skeletons. Finally, conclusions and future work are presented.

2 Curve-Skeleton decomposition

Curve-skeletons are thinned 1D representations of 3D objects useful for many visualization tasks navigation, including virtual reduced-model formulation, visualization improvement, animation, etc. There are many algorithms in the literature describing extraction methodologies for different applications; however, it is unclear how general and robust they are [3]. In this paper we explore the use of the thinning approach for generating the pivotal axis for Norigami pattern generation. The thinning approach attempt to produce a curve skeleton by iteratively removing voxels from the boundary of an object until required thinness is obtained. Topology preserving is checked in every iteration.

3 Pattern generations from Skeleton curves

In the SOR methodology [2], a single profile is rotated in sections with an angle of $2\pi/K$. These sections generate N equal sub-segments, side by side to each other. In our proposed approach horizontal and vertical planes are used to create a set of polylines with uniformly distributed points (e.g. all polylines have the same number of points and all points connecting the polylines at the same height lies on the same plane).

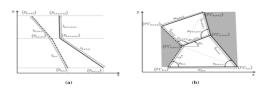


Figure 3. Pattern generation from two profiles [2]

The coordinates of the points P1' and P2' in the pattern are obtained from the coordinates of the same points P1 and P2 in the profiles by using the following equations:

P1'
$$_{k,n} = [l_{k,n}cos(\mu_{k,n} + \rho_n), l_{k,n}sin(\mu_{k,n} + \rho_n)]$$
 (1)
P2' $_{k,n} = [l_{k,n}cos(\gamma_{k,n} + \rho_n), l_{k,n}sin(\gamma_{k,n} + \rho_n)]$

where $l_{kn} = \|P_{kn+1} - P_{kn}\|$, μ_{kn} and γ_{kn} are the interior angles of the trapezoids in figure 3b. Note that the angles should be alternated to keep the symmetry in the Norigami pattern. Different from [2], the width of the pattern should be computed by $w_{kn} = \text{SQRT}(P_x^2_{kn} + P_x^2_{k+l,n} - 2P_{xk,n}P_{xk+l,n}\cos a_k)$. Preliminary results with the proposed method for complicated shaped decomposed by the curve skeleton are presented in the following section.

4 Preliminary results

Figure 4 shows two examples of 3D shapes and their respective curve-skeletons (in white). Models like the knight model in Fig.4 (right) the thinning method offered good results. However, some models like the colon in Fig.4 (left) includes some loops in the skeleton that must be removed to compute the pattern decomposition using the proposed method.

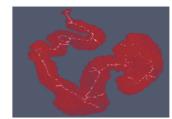




Figure 4. Example of Curve-Skeleton: colon (left) and knight (right)

Conclusions and Future Works

This work presented a first approach to generalize the process of generating a norigami pattern that can be folded by a robot. In the paper it was shown that the generation of the skeleton from the thinning method produces good results for forms that do not have loops in their skeleton. In future work, we will compare the proposed method with other skeleton generation methods proposed in [3]

References

[1] 萩原一郎、ホアン・タイタット・グェン、ユウ・ボウ、タイ・フゥン・タオ、展開図作成装置、展開図の作成方法、およびプログラム、特願2015-049529号(2015年3月12日)、特開2016-170597(2016年9月23日)

[2] JA Romero, LA Diago, and I Hagiwara. "Norigami Crease Pattern Model Design Based on Surfaces of Revolution." In ASME 2017 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, pp. V05BT08A047–V05BT08A047. American Society of Mechanical Engineers, 2017.

[3] Nicu D. Cornea, Deborah Silver and Patrick Min. Curve-Skeleton Properties, Applications and Algorithms., IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics. Vol 13 No.3, May 2007 Pages 530-548

カーネルリッジ回帰による物質・材料研究

田村 亮

物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

東京大学大学院 新領域創成科学研究科

e-mail: tamura.ryo@nims.go.jp

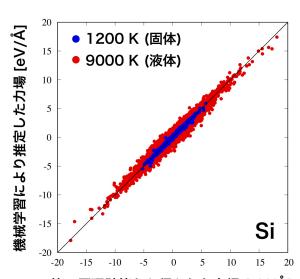
1 概要

現在,物質・材料科学分野ではデータ科学を 利用した材料研究であるマテリアルズ・インフォ マティクスが注目を集めている. 本講演では, 講演者が行ってきたマテリアルズ・インフォマ ティクス研究の中で、カーネルリッジ回帰[1] を利用した事例を2つ紹介する。カーネルリッ ジ回帰は、教師あり学習の一種であり、与えら れたトレーニングデータに対して、特徴(説明 変数)とラベル(目的変数)の間にある関係を 得るための関数を,過学習を避けるように求め る手法である。1つ目の研究事例は、第一原理 計算から得られる力場を学習することで、原子 配置(説明変数)から力場(目的変数)を予測 する研究である[2]. 2つ目は、嗅覚センサから 得られるシグナルを学習することで、ニオイの シグナル (説明変数) から特定情報 (目的変数) を抽出することを目的とした研究である[3].こ れらの具体的事例を通して,物質・材料科学に おけるデータ科学手法の有用性を議論する.

2 機械学習力場構築

計算物質科学分野では、新規材料開発を目的とし、第一原理分子動力学シミュレーションによって計算機中で物質が示す物性を計算する研究が行われている。しかしながら、第一原理計算では多くの計算リソースが必要となるため、第一原理計算の精度を落とさずに分子動力学シミュレーションを実行できる手法の開発が急務となっている。

これを実現できる可能性を有した手法として, 近年注目を集めているのが,各原子周りの局所 的な原子構造から,力場を予測する機械学習手 法である.これを用いることで,第一原理計算 に準じた精度での長時間分子動力学シミュレー ションが実行可能となり,熱力学的特性や物性 の温度依存性を高速に得ることができる.本研 究では,固体・液体状態の力場を推定できる機械 学習モデルをシリコンおよびゲルマニウムを対 象とし構築した.用いた機械学習手法は,カー ネルリッジ回帰であり、第一原理計算から得ら れる力場をラベルに, 各原子周りの局所的な構 造を表現できるフィンガープリント [4] を特徴 とし学習を行った。これにより、局所構造を入 力した際に力場が出力される機械学習モデルが 構築できる。その結果、機械学習によって推定 された力場は、第一原理計算によって得られる 力場と良く一致することがわかった(シリコン の結果を図1に示す) 両者の相対誤差は、固 体状態では2%程度であり[5],液体状態でも 大きく見積もって5%程度に収まることが明ら かになった [2]. これは分子動力学シミュレー ションを行う際に必要な精度に収まっており, この手法を用いることで,第一原理計算に準じ た長時間分子動力学シミュレーションが実行で きることが示唆された.



第一原理計算から得られた力場 [eV/Å] 図 1. シリコンにおける第一原理計算結果 (横軸) vs. 機械学習による推定力場 (縦軸) のプロット. トレーニングには使用していないテストデータの結果を示す.

3 ニオイセンサーのシグナル解析

超高感度小型センサ素子「MSS(Membranetype Surface stress Sensor」[6] を用いることで、 様々な種類の分子を測定することができる. 現 在、この MSS を使用したニオイ分析センサー システムの開発が行われている [7].

本研究では、この MSS の測定結果を機械学 習によって解析することによって、ニオイから 特定の情報を数値化できることを示した。その 一例として、香りの異なる様々なお酒のニオイ から、アルコール度数という特定情報の推定に 挑戦した。具体的には、まずニオイ分子を吸着 する様々な材料を MSS の表面に塗布し、ビー ルやウォッカなど各種のお酒のニオイを吹きか け、それぞれのお酒に特有のシグナルを測定 する。このシグナルを特徴とし、アルコール 度数をラベルとすることで機械学習用のトレー ニングデータを用意した。 このトレーニング データを用いて, アルコール度数を推定するた めの予測モデルをカーネルリッジ回帰によって 構築した. さらに、予測精度が改善されるよ うに、機械学習で得られる情報から逆算して, よりお酒のニオイに適した感応材料の選定や、 電気信号パターンのどこに注目するか、抽出す る特徴量の最適化を行った. このように双方 向的に最適化されたハード (センサ+感応材料) とソフト (予測モデル) を利用することで、図 2に示すようにトレーニングデータにないお酒 (赤ワイン, 芋焼酎, ウイスキー) のアルコール 度数を高い精度で推定することに成功した[3]. 本手法は、アルコール度数だけでなく、ニオ

本手法は、アルコール度数だけでなく、ニオイを特徴付けるあらゆる特定情報の数値化に応用することが可能である。 例えば、果実の成熟度や健康状態などを数値化してニオイと関連付けることで、それらを定量的に推定できる可能性がある.

謝辞

機械学習力場構築は、宮崎剛グループリーダー(NIMS)、林建波博士(NIMS)、鈴木鉄兵博士(2017年当時 NIMS)との共同研究であり、ニオイセンサーのシグナル解析は、柴弘太主任研究員(NIMS)、今村岳独立研究者(NIMS)、及び吉川元起グループリーダー(NIMS)との共同研究です。ここに感謝申し上げます。

参考文献

 C. M. Bishop, Pattern Recognition and Machine Learning (Springer-Verlag, New York, 2006).

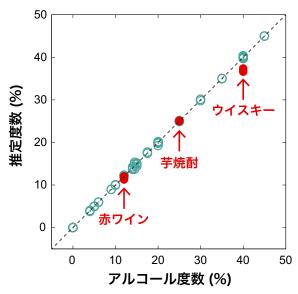


図 2. アルコール度数 (横軸) vs. 機械学習による推定度数 (縦軸) のプロット. 緑点はトレーニングデータの結果, 赤点はトレーニングに使用していないお酒 (テストデータ) の結果を示す.

- [2] R. Tamura, J. Lin, and T. Miyazaki, in preparation.
- [3] K. Shiba, R. Tamura, G. Imamura, and G. Yoshikawa, Sci. Rep. 7, 3661 (2017).
- [4] V. Botu and R. Ramprasad, Int. J. Quant. Chem. 115, 1074 (2015).
- [5] T. Suzuki, R. Tamura, and T. Miyazaki, Int. J. Quant. Chem. 117, 33 (2017).
- [6] G. Yoshikawa, T. Akiyama, S. Gautsch, P. Vettiger, and H. Rohrer, Nano Letters 11, 1044 (2011).
- [7] http://www.nims.go.jp/news/press/2015/09/201509290.html.

時空間データ解析のための自己回帰テンソル分解

竹内 孝1

¹NTT コミュニケーション科学基礎研究所

e-mail: koh.t@acm.org

1 概要

高機能センシングデバイスと高速移動通信網の普及に伴い、センサーネットワークを介した都市の広範囲リアルタイムモニタリングシステムが実現されつつある。システムを通して観測される人の行動やモノの移動、大気環境など多種多様な時空間データを解析し、都市のマネジメントや企画に役立てようとする試みが注目を集めており、データ解析技術は今後ますます重要になると考えられる。

時空間データの解析は、空間統計学、空間経済学、気候学、リモートセンシング [1,2] などの分野で盛んに行われてきた. これらの研究は、センサー未設置場所の観測データの推定 (空間内挿) あるいはセンサー設置場所での将来観測値の予測 (時間外挿) を目的とする場合が多い. その中でもセンサー未設置場所での将来観測値の予測問題は、空間内挿と時間外挿を同時に行うため、最も難度の高い問題の 1 つとされている. この問題が解決されれば時空間的な需要予測が可能となるため、タクシー配車やライドシェアの効率化、バイクシェアサービスの車両再配置、宿泊施設の宿泊数予測などへの応用が期待される.

現在的なモニタリングシステムは,数百から数千のセンシングデバイスから構成され,複数種類のデータを観測する場合が多い.例えばニューヨーク市のあるバイクシェアサービスでは,344個のバイクステーションから30分毎に返却あるいは貸出された自転車数が送信される.ただ,システム構築に大量のセンシングデバイスを必要とするため,安価だが安定性の低い機器が利用される場合が多く,デバイス故障,データ転送エラー,ストレージ故障などによるデータ欠損が発生しやすい[3].そのため,データ欠損を扱いつつ大規模多種類の時空間データを処理するための技術が必要となる.

多変量時系列データの予測問題では,多変量 自己回帰 (VAR) やガウス過程 (GP) [4] など が広く利用されている.これらの手法は,変数 間の線形あるいは非線形の相関情報を利用し

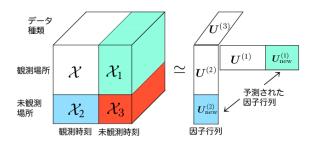


図 1: 時空間データ解析のためのテンソル分解 モデル. \mathcal{X}_1 , \mathcal{X}_2 , \mathcal{X}_3 の推定は、センサー設置 場所のデータ予測、センサー未設置場所のデー タ補完と予測の問題に対応する.

高い予測精度を示すが、パラメータ推定の計算量がデータ次元やデータ点数に対して指数的に増加するため、大規模データの解析には適さない [5].

大規模な時空間データの解析を行うための手 法として,行列分解やその一般化であるテンソ ル分解が提案されている [6, 5, 7]. テンソル分 解は、時空間データを高次元配列のテンソル 2 として扱い, テンソルを少数の因子に分解する ことでデータに含まれる重要な情報を抽出する 手法である. テンソル分解の計算量はデータの 観測時刻数、観測場所数、データ種類数に対し て線形にスケールし、さらに欠損データが存在 しても因子推定が可能なため, 欠損値の復元に 広く利用されてきた. 図1に, 時空間データ を観測時刻, 観測場所, データ種類数の3つの モードからなる3階テンソルとして扱い分解す る例を示す. 例えばタクシーの降車履歴データ から新たなサービス提供場所での需要を予測す る問題に取り組むとする. 観測済みのデータを \mathcal{X} (白色ブロック)とすると、サービス提供場所 での将来需要予測, サービス未提供場所の過去 需要補完,将来需要予測の問題は,因子行列を 用いて3つの異なるブロック $\mathcal{X}_1($ 緑), $\mathcal{X}_2($ 青), \mathcal{X}_3 (赤)を推定する問題として扱える.

テンソル分解に時空間的な相関情報を取り入れるために、グラフ正則化技術を使用したテンソル分解が提案されている[7]. グラフ正則化は、因子内のパラメータが空間的に隣接する場

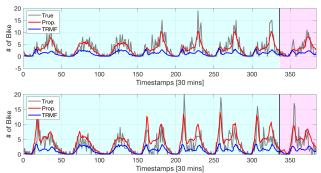


図 2: バイクシェアデータを用いた,データ未観測場所における過去需要補完 (青色背景) および将来需要予測 (赤色背景) 問題の実験例. 提案手法 (赤), TRMF [6](青), 真値 (黒).

所であったり前後する時刻に対応する場合,両者が類似した推定値をもつように促すため,時空間的に滑らかな因子の抽出を可能にする.このようなアイディアは空間経済学の分野などで利用されているが,どのようなデータにも適用可能なグラフ構築方法は存在しないとされている[8]. また,既存のグラフ正則化では,グラフラプラシアンを使用するため,パラメータ間の正と負の相関を区別して使用できない.

これらの問題を解決するために、時間方向のグラフ正則化に自己回帰モデルの回帰係数を用いる Temporal regularized matrix factorization (TRMF) [6] が提案されている。TRMFは因子の推定と因子毎のパラメータ間の自己相関の学習を交互に行うことで、事前にグラフを構築する問題を回避した。さらに学習された自己回帰モデルを用いて将来の因子行列 $U_{\text{new}}^{(1)}$ の予測を行うことで、観測値の予測において既存法よりも大幅な性能改善を示した。しかし、TRMF は空間に対応する因子の学習ではグラフ正則化を用いるのみで、空間的な自己相関を学習する問題は扱っていない。

本研究では、センサーの未設置場所でのデータ補完と予測の問題を解決するために、空間上と時間方向のそれぞれの因子おいて自己回帰モデルの学習を行いつつ、因子の推定を行う新たなテンソル分解を提案する。まず、コンピュー婦をでは受害した。というでは、空間情報を用いた有向グラフ自己回帰正則化を提案し、これをTRMFを組み合わせることで自己回帰テンソル分解を提案する。さらに時空間データは観測値が非負値となる場合があるため、因子パラメータを提案する。さらに時空間データは観測値が非負値となる場合があるため、因子パラメータを非負に制約する非負自己回帰テンソル分解が因子の提案したテンソル分解が因子の推定を行うための効率的なアルゴリズムの導出

を行う. 実世界で観測されたタクシー履歴データおよびバイクシェアリングのデータを用いた実験を行い提案手法の優位性を示す.

- [1] L. Anselin, "Thirty years of spatial econometrics," *Papers in regional science*, vol. 89, no. 1, pp. 3–25, 2010.
- [2] X. Zhou, S. Shekhar, and R. Y. Ali, "Spatiotemporal change footprint pattern discovery: an inter-disciplinary survey," Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery, vol. 4, no. 1, pp. 1–23, 2014.
- [3] L. Li, J. McCann, N. S. Pollard, and C. Faloutsos, "Dynammo: Mining and summarization of coevolving sequences with missing values," in *Proc. of SIGKDD*, 2009, pp. 507–516.
- [4] C. E. Rasmussen, "Gaussian processes for machine learning." MIT Press, 2006.
- [5] M. T. Bahadori, Q. R. Yu, and Y. Liu, "Fast multivariate spatio-temporal analysis via low rank tensor learning," in *Proc. of NIPS*, 2014, pp. 3491–3499.
- [6] H.-F. Yu, N. Rao, and I. S. Dhillon, "Temporal regularized matrix factorization for high-dimensional time series prediction," in *Proc. of NIPS*, 2016, pp. 847–855.
- [7] N. Rao, H.-F. Yu, P. K. Ravikumar, and I. S. Dhillon, "Collaborative filtering with graph information: Consistency and scalable methods," in *Proc. of NIPS*, 2015, pp. 2107–2115.
- [8] L. Anselin, "Under the hood issues in the specification and interpretation of spatial regression models," *Agricultural economics*, vol. 27, no. 3, pp. 247–267, 2002.
- [9] S. R. Dubois and F. H. Glanz, "An autoregressive model approach to two-dimensional shape classification," *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, no. 1, pp. 55–66, 1986.

Selective Inference に基づく変化点検出とその応用

梅津 佑太 1, 竹内 一郎 1,2,3

 1 名古屋工業大学, 2 理化学研究所, 3 物質・材料研究機構

e-mail: umezu.yuta@nitech.ac.jp, takeuchi.ichiro@nitech.ac.jp

1 あらまし

変化点検出問題は、1950年代以降、理論・応用の両面で重要な課題として知られている。一方、計測技術の発展に伴い、複数の系列が同時に観測されるようになった。多次元系列の変化点検出において興味のある問題は次の2点である:

- 1) 系列に共通の変化点を検出するとともに、 どの系列が変化したかを知ること
- 2) 検出した変化点の統計的有意性

多次元系列の変化点検出手法における統計的有 意性について少なからず提案されているものの [1, 2],検出した変化点でどの系列が変化した かということはそれほど考慮されていない.

本研究では、統計的仮説検定に基づく変化点検出問題を、"検出した変化点"における"パラメータに関する有意性検定"という2段階推論、つまり、post-selection inference の問題であると考える。特に、近年注目を集めているselective inference (SI) [3] のアイデアを用いることで、SIの意味での統計的過誤を、望ましい有意水準にコントロールできることを示す。また、local alternative に対応する対立仮説を考えることで、本研究で考える検定問題が、近似的に1次の不偏検定となっていることを示すとともに、3次のオーダーで検出力を評価した場合の下界を導出する。最後に、提案手法の多重変化点検出への拡張について述べる。

2 変化点検出と Selective Inference

T 時点からなる N 本の系列

$$X = (\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_T) \sim N_{N \times T}(M, \Xi \otimes \Sigma)$$

を考える. ただし, $\Xi \in \mathbb{R}^{T \times T}$ と $\Sigma \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は 既知であるとし, 以下の検定問題を考える:

$$H_0: \boldsymbol{m}_t = \boldsymbol{m}_{t+1}, \ ^{\forall}t, \ \text{vs.}$$

 $H_1: \boldsymbol{m}_t \neq \boldsymbol{m}_{t+1}, \ ^{\exists!}t$ (1)

多変量 CUSUM 統計量を

$$\boldsymbol{S}(t) = \left\{ \frac{T}{t(T-t)} \right\}^{1/2} \sum_{u=1}^{t} (\boldsymbol{x}_u - \bar{\boldsymbol{x}}) \in \mathbb{R}^N$$

とする. ただし, $\bar{x}=\sum_{u=1}^T x_u/T$ である. 各 tで、 $\rho_1(t),\ldots,\rho_N(t)$ を $|S_1(t)|,\ldots,|S_N(t)|$ を降順に並べ替えたものとし、以下のスコア (WRAG: Weighted Rank AGgregation) を考える:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{S}(t)) = \max_{1 \leq k \leq N-1} \theta_k(t), \ \theta_k(t) = \sum_{i=1}^{N} c_{k,i} \rho_i(t)$$

ただし, $c_{k,i}$ は既知の定数であり, 表 1 に示すように, いくつかの既存手法を包含するものである. WRAG によって推定される変化点を

$$\hat{t} = \operatorname*{arg\ max}_{1 \leq t \leq T-1} \mathcal{F}(\boldsymbol{S}(t)) = \operatorname*{arg\ max}_{1 \leq t \leq T-1} \operatorname*{max}_{1 \leq k \leq N-1} \theta_k(t)$$

で定義すれば、検定問題 (1) に対する自然な検 定統計量は以下で与えられる:

$$\max_{1 \le t \le T-1} \max_{1 \le k \le N-1} \theta_k(t) = \hat{\theta}_{\hat{k}}(\hat{t})$$

検定統計量の実現値を θ_0 とする. SI では、変化点および対応する系列の選択に関する事象 (selection event) $\{\hat{t}=t,\hat{k}=k\}$ を条件付け、選択的な p-値

$$P(\hat{\theta}_k(t) > \theta_0 \mid \hat{t} = t, \hat{k} = k)$$

を用いることで検定を定式化する.

WRAG の定義より、 $\theta_k(t) \geq 0$ である。また、 $\theta_k(t)$ は多変量 CUSUM 統計量の絶対値、並べ替えおよび線形結合で表されることから、ある $\boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^N$ と $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^T$ が存在して、 $\theta_k(t) = \boldsymbol{\delta}^\top X \boldsymbol{\eta}$ とかける。検定問題 (1) のアナロジーとして、

$$H_0: \boldsymbol{\delta}^\top M \boldsymbol{\eta} = 0$$
 vs. $H_1: \boldsymbol{\delta}^\top M \boldsymbol{\eta} = \mu > 0$

を考える. δ や η はデータに依存して定まるランダムな仮説であることに注意する. 簡単のため, CUSUM 統計量の絶対値や並べ替えに関する条件も selection event と考え, まとめて $\mathcal E$ と表すことにすれば, 以下の定理が成り立つ.

定理 1. $X \sim \mathrm{N}(M,\Xi \otimes \Sigma)$ とする. このとき, ある $L,U \geq 0$ および $v^2 \geq 0$ が存在して,

$$\left[F_{\pmb{\delta}^{\top}M\pmb{\eta},v^2}^{[L,U]}(\hat{\theta}_k(t))\mid\mathcal{E}\right]\sim \mathrm{Unif}(0,1)$$

が成り立つ。ただし, $F_{\mu,\sigma^2}^{[l,u]}(\cdot)$ は切断正規分布 $\mathrm{TN}(\mu,\sigma^2,l,u)$ の累積分布関数である.

表 1. WRAG の例. double CUSUM では, $\gamma_k = k(2N-k)/(2N)$ であり, φ は既知の定数である.

手法:	ℓ_1 [1]	ℓ_{∞}	top K	double CUSUM [4]
$c_{k,i}$	1	$I\{i=1\}$	$I\{i \leq K\}$	$ \gamma_k^{\varphi}/kI\{i \le k\} $ $ -\gamma_k^{\varphi}/(2N-k)I\{i \ge k+1\} $

定理 1 より、帰無仮説のもとで選択的な p-値 $1-F_{0,v^2}^{[L,U]}(\hat{\theta}_k(t))$ は通常の p-値と同様に振る舞うため、これを用いて SI の意味での $type\ I$ errorをコントロールできる。また、対立仮説における $\mu \to 0$ の極限で次の定理が成り立つ。

定理 $2. z_{\alpha}$ を帰無分布の上側 100α -%点とする. このとき、対立仮説のもとで、

$$P\left(\hat{\theta}_k(t) \ge z_\alpha \mid \mathcal{E}\right)$$

$$= \alpha + \frac{\kappa}{v}\mu + \frac{\kappa}{v^2} \frac{\phi(U/v) - \phi(L/v)}{\Phi(U/v) - \Phi(L/v)} \mu^2 + O(\mu^3)$$

$$\ge \frac{3}{4}\alpha + \frac{1}{4} \frac{\phi(z_\alpha/v) - \phi(U/v)}{\phi(L/v) - \phi(U/v)} + O(\mu^3)$$

が X に関してほとんど確実に成立する。ただし、 $\phi(\cdot)$ は標準正規分布の確率密度関数であり、 $\kappa<0$ は次の通り:

$$\kappa = \frac{\phi(z_{\alpha}/v) - \{\phi(U/v) - \alpha(\phi(U/v) - \phi(L/v))\}}{\Phi(U/v) - \Phi(L/v)}$$

不偏検定とは仮説の境界 $\mu=0$ で検出力が有意水準 α になる検定のことであり、この意味で、 SI は 1 次の近似的な不偏検定になっていることがわかる. さらに、 SI の精度を 3 次のオーダーで検証すると、不偏ではないものの、少なくとも $3\alpha/4$ 以上の検出力を持つことがわかる.

3 多重変化点検出問題への拡張

提案手法を多重変化点検出問題へ拡張するため、中心t、幅 2h の窓 $W_h(t) = \{t-h+1,\ldots,t+h\}$ で分割し、local hypothesis test [5] を考える:

$$H_{0,t}: \boldsymbol{m}_{u} = \boldsymbol{m}_{u+1}, \ ^{\forall}u \in W_{h}(t), \text{ vs.}$$

 $H_{1,t}: \boldsymbol{m}_{u} \neq \boldsymbol{m}_{u+1}, \ ^{\exists!}u \in W_{h}(t)$ (2)

窓 $W_h(t)$ 内の x_{t-h+1},\ldots,x_{t+h} で定義される 多変量 CUSUM 統計量を $S_t(u)$ とすれば, 検定 問題 (2) に対する変化点の自然な推定量は

$$\mathcal{T} = \left\{ t \mid \mathcal{F}(S_t(t)) \ge \mathcal{F}(S_t(u)), \ \forall u \in W_h(t) \right\}$$

であり, $W_h(t)$ の定義より, $\mathcal{T} \subset \{h, \dots, T-h\}$ である. また, \mathcal{T} は local change point estimates [6] と呼ばれる. したがって, 検出され

た変化点 $t \in \mathcal{T}$ に対して、2 節で述べた手法を適用すれば良い。また、検定の多重性を考慮する場合は、Bonferroni 補正などを用いて適当にfamily-wise error rate をコントロールする。

謝辞

本研究の一部は、科学研究費 (18K18010, 17H-00758, 16H06538), JST CREST (JPMJCR1302, JPMJCR1502), 理化学研究所革新知能統合研究センター、および、JST イノベーションハブ構築支援事業・情報統合型物質・材料開発イニシアティブの補助を受けて行われた.

- [1] Jirak, M.Uniform change point tests in high dimension, *The Annals of Statistics*, **43**, 2451–2483 (2015).
- [2] Li, S., Xie, Y., Dai, H., and Song, L.M-statistic for kernel change-point detection, In Advances in Neural Information Processing Systems, 3366– 3374 (2015).
- [3] Lee, J. D., Sun, D. L., Sun, Y., and Taylor, J. E.Exact post-selection inference, with application to the lasso, *The Annals of Statistics*, 44, 907–927 (2016).
- [4] Cho, H.Change-point detection in panel data via double CUSUM statistic, *Electronic Journal of Statistics*, **10**, 2000–2038 (2016).
- [5] Hao, N., Niu, Y. S., and Zhang, H.Multiple change-point detection via a screening and ranking algorithm, Statistica Sinica, 23, 1553 (2013).
- [6] Yau, C. Y. and Zhao, Z.Inference for multiple change points in time series via likelihood ratio scan statistics, Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), 78, 895-916 (2016).

Analysis of Mechanism of Deep Learning by Function Estimation Theory

Masaaki Imaizumi (Institute of Statistical Mathematics)

1 Introduction

Deep neural networks (DNNs) have shown outstanding performance on various tasks of the data analysis. Enjoying their flexible modeling by a multi-layer structure and many elaborate computational and optimization techniques, DNNs empirically achieve higher accuracy than many other machine learning methods such as kernel methods. Hence, DNNs are employed in many successful applications, such as image analysis, medical data analysis, natural language processing, and others.

Despite such outstanding performance of DNNs, little is yet known why DNNs outperform the other methods. Without sufficient understanding, practical use of DNNs could be inefficient or unreliable. To reveal the mechanism, numerous studies have investigated theoretical properties of neural networks from various aspects. The approximation theory has analyzed the expressive power of neural networks, the statistical learning theory elucidated generalization errors, and the optimization theory has discussed the landscape of the objective function and dynamics of learning.

2 Regression Framework

Suppose that we observe a set of observations $\{(Y_i, X_i)\}_{i=1}^n$ which is independently and identically generated from the following model

$$Y_i = f^*(X_i) + \xi_i, \ \xi_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2),$$

where f^* is an unknown function with *D*-dimensional input and ξ_i is a noise variable for i = 1, ..., n. Purpose of the regression framework is to estimate f^* from the set of observations.

One limitation of the existing statistical analysis of DNNs is a *smoothness assumption* for data generating processes. Suppose that f^* is a β -times differentiable function. With this setting, however, many popular methods such as kernel methods, Gaussian processes, series methods, and so on, as well as DNNs, achieve a bound for generalization errors as

$$O\left(n^{-2\beta/(2\beta+D)}\right), \qquad (n\to\infty).$$

This is known to be a minimax optimal rate of generalization with respect to sample size n, and hence, as long as we employ the smoothness assumption, it is not easy to show a theoretical evidence for the empirical advantage of DNNs.

3 Estimation by Deep Neural Networks

Firstly, we provide a formulation of models by DNNs. Let $L \in \mathbb{N}$ be the number of layers in DNNs. For $\ell \in [L+1]$, let $D_{\ell} \in \mathbb{N}$ be the dimensionality of variables in the ℓ -th layer. For brevity, we set $D_{L+1} = 1$, i.e., the output is one-dimensional. We define $A_{\ell} \in \mathbb{R}^{D_{\ell+1} \times D_{\ell}}$ and $b_{\ell} \in \mathbb{R}^{D_{\ell}}$ be matrix and vector parameters to give the transform of ℓ -th layer. The architecture Θ of DNN is a set of L pairs of (A_{ℓ}, b_{ℓ}) :

$$\Theta := ((A_1, b_1), ..., (A_L, b_L)).$$

We define $|\Theta| := L$ be a number of layers in Θ , $\|\Theta\|_0 := \sum_{\ell \in [L]} \|\operatorname{vec}(A_\ell)\|_0 + \|b_\ell\|_0$ as a number of non-zero elements in Θ , and $\|\Theta\|_{\infty} := \max\{\max_{\ell \in [L]} \|\operatorname{vec}(A_\ell)\|_{\infty}, \max_{\ell \in [L]} \|b_\ell\|_{\infty}\}$ be the largest absolute value of the parameters in Θ . For an activation function $\eta : \mathbb{R}^{D'} \to \mathbb{R}^{D'}$ for each $D' \in \mathbb{N}$, this paper considers the ReLU activation $\eta(x) = (\max\{x_d, 0\})_{d \in [D']}$. The model of neural networks with architecture Θ and activation η is the function $G_{\eta}[\Theta] : \mathbb{R}^{D_1} \to \mathbb{R}$, which is defined inductively as

$$G_n[\Theta](x) = x^{(L+1)},$$

and it is inductively defined as

$$x^{(1)} := x, \quad x^{(\ell+1)} := \eta(A_{\ell}x^{(\ell)} + b_{\ell}), \text{ for } \ell \in [L],$$

where $L = |\Theta|$ is the number of layers. The set of model functions by DNNs is thus given by

$$\mathcal{F}_{NN,\eta}(S,B,L') := \Big\{ G_{\eta}[\Theta] : I^D \to \mathbb{R} \mid \|\Theta\|_0 \le S, \|\Theta\|_{\infty} \le B, |\Theta| \le L' \Big\},$$

with $S \in \mathbb{N}$, B > 0, and $L' \in \mathbb{N}$. Here, S bounds the number of non-zero parameters of DNNs by Θ , namely, the number of edges of an architecture in the networks. This also describes sparseness of DNNs. B is a bound for scales of parameters.

Secondly, using the model of DNNs, we define a least square estimator by empirical risk minimization. Using the observations, we consider an estimator for f^* by the following minimization problem

$$\min_{f \in \mathcal{F}_{NN,\eta}(S,B,L)} \frac{1}{n} \sum_{i \in [n]} (Y_i - f(X_i))^2.$$

4 Non-Smooth Functions

This paper considers estimation of *non-smooth* functions for the data generating processes to break the difficulty. Specifically, we discuss a nonparametric regression problem with a class of *piecewise smooth functions*, which may be non-smooth on the boundaries of pieces in their domains.

Let H^{β} be a space of β -smooth functions (the Hölder space), and $\mathcal{R}_{\alpha,J}$ be a class of sets in a domain of f^* . Here, α denotes a degree of smoothness of boundaries of $R \in \mathcal{R}_{\alpha,J}$, and J is a number of kinks of boundaries. Using H^{β} and $\mathcal{R}_{\alpha,J}$, we define piecewise smooth functions. Let $M \in \mathbb{N}$ be a finite number of pieces of the support I^D . We introduce the set of piecewise smooth functions by

$$\mathcal{F}_{M,J,lpha,eta}:=\left\{\sum_{m=1}^M f_m\otimes \mathbf{1}_{R_m}: f_m\in H^eta, R_m\in \mathcal{R}_{lpha,J}
ight\}.$$

Since $f_m(x)$ realizes only when $x \in R_m$, the notion of $\mathcal{F}_{M,J,\alpha,\beta}$ can express a combination of smooth functions on each piece R_m . Hence, functions in $\mathcal{F}_{M,J,\alpha,\beta}$ are non-smooth (and even discontinuous) on boundaries of R_m .

5 Theoretical Results

Suppose that $f^* \in \mathcal{F}_{M,J,\alpha,\beta}$. With this situation, we derive a rate of generalization errors with the least square estimator by DNNs of the ReLU activation as

$$O\left(\max\left\{n^{-2\beta/(2\beta+D)}, n^{-\alpha/(\alpha+D-1)}\right\}\right), \qquad (n\to\infty)$$

up to log factors. Here, α and β denote a degree of smoothness of piecewise smooth functions, and D is the dimensionality of inputs. We prove also that this rate of generalizations by DNNs is optimal in the minimax sense. In addition, we show that some other standard methods, such as kernel methods and orthogonal series methods, are not able to achieve this optimal rate. Our results thus show that DNNs certainly have a theoretical advantage under the non-smooth setting. We will provide some numerical results supporting our results.

熱弾性場の3次元形状最適化解析

○小森 太陽 1, 片峯 英次 2

1 岐阜工業高等専門学校 専攻科学生, 2 岐阜工業高等専門学校 機械工学科

e-mail: 2017y18@edu.gifu-nct.ac.jp, katamine@gifu-nct.ac.jp

1 はじめに

形状最適化問題は工学の分野において重要な課題の一つである。その中でも,力学的負荷や熱による変形を伴う熱弾性場に対して,剛性あるいは強度最大化を目的とする形状最適化は,機器設計における基本的な課題である.

本研究では、フリーの有限要素解析ソフトの一つである FreeFem++[1]を利用して、熱弾性体の3次元形状最適化解析システムの構築を試みた. FreeFem++では、有限要素法の定式化で用いられる弱形式がプログラミングの記述として直接利用できる。また、Gmsh[2]というメッシュ作成ソフトを用いて CAD モデル、有限要素モデルを作成することで、FreeFem++に基づいた3次元問題の数値解析が実現できる.

本論文では、剛性が最大となるような形状決定を目的とした問題を例に取り上げ、平均コンプライアンス最小化問題について定式化を行い、Gmshを用いて有限要素モデルを作成し、FreeFem++を利用し数値解析を行った.形状最適化手法には、有限要素法と相性が良く滑らかな境界形状が得られる力法[3]を用いた.

本論文では、その解析手法と数値解析結果に ついて簡単に紹介する.

2 平均コンプライアンス最小化問題

2.1 問題の定式化

熱弾性場領域 Ω は境界 $\Gamma = \Gamma_\phi \cup \Gamma_q \cup \Gamma_h = \Gamma_P \cup \Gamma_U$ から構成されている.この領域において,温度分布を ϕ ,熱変位分布を u としたときの剛性最大化を目的とした平均コンプライアンス最小化問題を考える.領域の大きさの上限値を M としたとき,形状最適化問題は次のように表される.

Given
$$M$$
 and
$$k, \phi_o, q, h, \phi_f, Q, C, u_o, \alpha, P, f$$
 (1)

find
$$\Omega$$
 (2)

that minimize
$$a_{\varepsilon\phi}(\phi,\varepsilon(u)) + l_{\varepsilon}(u)$$
 (3)

subject to
$$a_{\phi}(\phi, \varphi) = l_{\phi}(\varphi)$$
 (4)

$$a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v)) = a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(v)) + l_{\varepsilon}(v)$$

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

式 (4) は熱伝導場,式 (5) は熱弾性場における 支配方程式の弱形式であり, φ は随伴温度,v は随伴変位を表している.

支配方程式内におけるそれぞれの項は次のように定義されている.

$$a_{\phi}(\phi,\varphi) = \int_{\Omega} k_{ij}\phi_{,i}\varphi_{,j}dx + \int_{\Gamma_{i}} h\phi\varphi \ d\Gamma \qquad (7)$$

$$l_{\phi}(\varphi) = \int_{\Omega} Q\varphi \ dx + \int_{\Gamma_h} h\phi_f \varphi \ d\Gamma + \int_{\Gamma_q} q\varphi \ d\Gamma$$
(8)

$$a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v)) = \int_{\Omega} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(u) \varepsilon_{ij}(v) \ dx \tag{9}$$

$$a_{\varepsilon\phi}(\phi,\varepsilon(v)) = \int_{\Omega} C_{ijkl}\phi\alpha_{kl}\varepsilon_{ij}(v) \ dx \tag{10}$$

$$l_{\varepsilon}(u) = \int_{\Omega} f_i u_i \ dx + \int_{\Gamma_P} P_i u_i \ d\Gamma \tag{11}$$

k は熱伝導率, ϕ_o は温度,q は熱流束,h は熱 伝達率, ϕ_f は既知境界温度,Q は発熱量,C は 剛性テンソル, u_o は変位, α は熱膨張係数テンソル,P は表面力,f は体積力を表している.

2.2 形状勾配

この問題は Lagrange の乗数法,あるいは随伴変数法によって制約条件のない停留化問題に置き換えることができる。領域変動に対する Lagrange 関数 L の導関数 \dot{L} を計算すると,停留条件は次のように得られる。

$$a_{\phi}(\phi, \varphi') = l_{\phi}(\varphi') \tag{12}$$

$$a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v')) = a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(v')) + l_{\varepsilon}(v')$$
 (13)

$$a_{\phi}(\phi',\varphi) = a_{\varepsilon\phi}(\phi',\varepsilon(u)) + a_{\varepsilon\phi}(\phi',\varepsilon(v)) \tag{14}$$

$$a_{\varepsilon}(\varepsilon(u'), \varepsilon(v)) = a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(u')) + l_{\varepsilon}(u')$$
 (15)

$$\Lambda \ge 0, \int_{\Omega} dx \le M, \ \Lambda(\int_{\Omega} dx - M) = 0$$
 (16)

ここで,弾性場の支配方程式 (13) と随伴弾性場の支配方程式 (15) を比較すると自己随伴関係 u=v が成立する。したがって,式 (14) は次のようになる。

$$a_{\phi}(\phi', \varphi) = 2a_{\varepsilon\phi}(\phi', \varepsilon(u))$$
 (17)

(5)

また,形状修正の感度を表す形状勾配密度 G は次のように導出できる.

$$G = G_0 + G_1 \Lambda \tag{18}$$

 $G_0 = 2C_{ijkl}\phi\alpha_{kl}\varepsilon_{ij}(u) + 2f_iu_i + Q\varphi$

$$-k_{ij}\phi_{,i}\varphi_{,j} - C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(u)\varepsilon_{ij}(u) \qquad (19)$$

$$G_1 = 1 \tag{20}$$

 G_0 および G_1 はそれぞれ平均コンプライアンス最小化、および領域の大きさ制約に対する形状勾配密度を表す.

このようにして形状勾配密度を導出できれば、力法を適用することが可能になる.

3 数值解析例

図1に示す解析モデルに対して、Gmshを用いてCADモデルとそれに基づく有限要素解析モデル(図2)を作成した。このとき、Freefem++上での有限要素モデルの取扱を容易にするために、それぞれの境界面に番号を付記し、同様な境界条件の境界面についてはグループ化した。

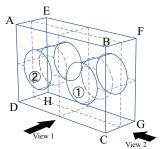
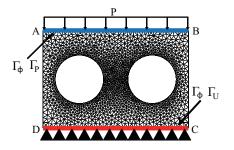


図 1: Analysis model

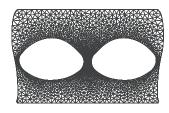
熱伝導場における境界条件は,既知温度境界 Γ_{ϕ} の面 ABFE では $\phi=0^{\circ}\mathrm{C}$,面 DCGH では $\phi=100^{\circ}\mathrm{C}$ を設定し,その他の境界面と穴境界 ①,②を断熱境界とした.弾性場における境界 条件は,表面力境界 Γ_{P} を面 ABFE に設け,面 DCGH を完全拘束境界 Γ_{U} とした.また形状更 新における境界条件は,面 ABFE と面 DCGH を拘束し,穴①,②の境界を含むそれ以外の境界を設計境界とした.

表面力境界 Γ_P での荷重 P を無視して温度 分布のみに基づく熱変形の場合を Case:A,表 面力 P および温度分布に基づく変形の場合を Case:B として解析を行った。それぞれの場合 における最適形状を図 3 および図 4 に示す。滑 らかな形状が得られていることが確認できる。 Case:A では,熱伝導による温度分布のみに基 づいてのみ変形が生じる。そのため,その熱伝 導を抑制するように,穴の設計境界が横方向に



☑ 2: Numerical model

拡大した形状になっている。一方 Case:B では、荷重による変形が考慮された最適形状になったと考察できる。目的汎関数の改善については、最適形状では Case:A, Case:B のそれぞれに対して約5%、約10%改善された。

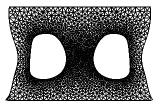




(a) view 1

(b) view 2

図 3: Optimum shape (Case:A)





(a) view 1

(b) view 2

☑ 4: Optimum shape (Case:B)

謝辞 本研究の一部は平成 29 年度公益財団法 人小川科学技術財団の助成を受けて行われた.

- [1] Hecht,F., New development in FreeFem++, J. Numer. Math., Vol.20 (2012), No.3-4, pp.251-265.65Y15.
- [2] Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in preand post-processing facilities, http://gmsh.info/
- [3] 畔上秀幸, 領域最適化問題の一解法, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 60, No. 574 (1994), pp. 1479-1486.

Shape optimization for a linear elastic fish robot

Chancharoen Wares¹, Hideyuki Azegami²

^{1,2}Nagoya University, A4-2 (780) Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya 464-8601, Japan

e-mail: ¹wares@az.cs.is.nagoya-u.ac.jp

e-mail: ²azegami@i.nagoya-u.ac.jp

1 Introduction

Artificial fish robots has been developed mainly by link mechanisms mimicking fish swimming (for example, see [1]). This study attempts to use a vibration mode of linear elastic body instead of the link mechanisms.

Based on observation of real fish swimming, Barret [1] used the swimming mode such as

$$\mathbf{u}_{\mathrm{R}}\left(\mathbf{x},t\right) = \mathbf{e}_{2}\left(c_{1}x_{1} + c_{2}x_{1}^{2}\right)\sin\left(kx_{1} + \omega_{0}t\right).$$

Here, letting $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^3$ be the domain of fish as shown in Fig. 1, $\mathbf{u}_{\mathrm{R}}: \Omega_0 \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$ denotes the transverse displacement at a location $\mathbf{x} = (x_i)_i \in \Omega_0$ with the domain and coordinate and time $t \in \mathbb{R}$, \mathbf{e}_2 the unit vector in the x_2 direction, $k = 2\pi/\lambda$ the wave number, λ the wavelength, ω_0 the undulation frequency, and c_1 and c_2 are constants for the amplitude envelope.

In this paper, we formulate the shape optimization problem by neglecting a fluid surrounding the fish and demonstrate the feasibility of this idea by a numerical example.

2 State determination problem

Let Ω_0 be a linear elastic body, $\Gamma_{D0} \subset \partial \Omega_0$ and $\Gamma_{N0} = \partial \Omega_0 \setminus \bar{\Gamma}_{D0}$ are the Dirichlet and Neumann boundaries. The varied domain is denoted as $\Omega(\phi)$ with a domain variation ϕ as shown in Fig. 1 using i as the identity mapping. The func-

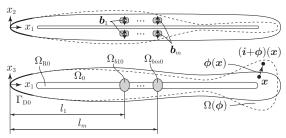


Fig. 1. Swimming fish problem.

tion spaces for ϕ are defined as $X = \{\phi \in H^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3) | \phi = \mathbf{0}_{\mathbb{R}^3} \text{ on } \bar{\Omega}_{R0} \}$, $\mathcal{D} = \{\phi \in X \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3) | i + \phi \text{: bijection} \}$ where $\bar{\Omega}_{R0} \subset \Omega_0$ is the domain of u_R in this study.

Let $\mathbf{b}_i: \Omega_{bi0} \to \mathbb{R}^3 \ (i \in \{1, \dots, m\})$ is an excitation force by artificial device given by

$$\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{e}_2 \left(c_1 l_i + c_2 l_i^2 \right) \sin \left(k l_i + \omega_0 t \right),\,$$

where l_i is the length as shown in Fig. 1, and ω_0 and other constants accord with the values used for u_R . The Fourier transform of b_i is obtained as

$$\mathscr{F}[\boldsymbol{b}_i] = \hat{\boldsymbol{b}}_i^{\mathrm{c}} \delta\left(\omega + \omega_0\right) + \hat{\boldsymbol{b}}_i \delta\left(\omega - \omega_0\right),$$

where $\delta(\cdot)$ denotes Dirac's delta function, i the imaginary unit, $(\cdot)^c$ the complex conjugate, and

$$\hat{\boldsymbol{b}}_i = \boldsymbol{e}_2 \left(c_1 l_i + c_2 l_i^2 \right) i e^{-ikl_i}. \tag{1}$$

We use $\boldsymbol{u}:\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right)\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^3$ as the displacement when $\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_m$ act, and $\hat{\boldsymbol{u}}$ denote the coefficient function of $\delta\left(\omega-\omega_0\right)$ in its Fourier transform. The function spaces for $\hat{\boldsymbol{u}}$ are defined as $\hat{U}=\{\hat{\boldsymbol{u}}\in H^1\left(\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right);\mathbb{C}^d\right)|\hat{\boldsymbol{u}}=\mathbf{0}_{\mathbb{R}^3}$ on $\Gamma_{\mathrm{D}0}\}$, $\hat{\mathcal{S}}=\hat{U}\cap W^{1,\infty}\left(\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right);\mathbb{C}^d\right)$. The structural damping in linear elastic body is assumed by using $r=1+\mathrm{i}g_{\mathrm{D}}$ with the structural damping factor g_{D} . ρ is the constant for the density. $\chi_{\Omega_{bi0}}$ denotes the characteristic function taking 1 in Ω_{bi0} . $\boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{u}\right)=\{\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}+\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\}/2$ and $\boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{u}\right)$ denote the linear strain and stress, respectively. $\boldsymbol{\nu}$ denotes the normal. Using the definition above, we set the state determination problem as follows.

Problem 1 (Frequency response) Let $\hat{\mathbf{b}}_i$ $(i \in \{1, ..., m\})$ be given as (1). For $\phi \in \mathcal{D}$, find $\hat{\mathbf{u}} \in \hat{\mathcal{S}}$ such that

$$-\omega_0^2 \rho \hat{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}} - r \nabla^{\mathrm{T}} \boldsymbol{S} \left(\hat{\boldsymbol{u}} \right) = \sum_{i=1}^{m} \chi_{\Omega_{bi0}} \hat{\boldsymbol{b}}_i \quad in \ \Omega \left(\boldsymbol{\phi} \right),$$
$$r \boldsymbol{S} \left(\hat{\boldsymbol{u}} \right) \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \quad on \ \Gamma_{\mathrm{N}} \left(\boldsymbol{\phi} \right).$$

3 Shape optimization problem

We use an objective cost function as

$$f(\boldsymbol{\phi}, \alpha, \hat{\boldsymbol{u}}) = \int_{\Omega_{\mathrm{R}0}} (\hat{\boldsymbol{u}} - \alpha \hat{\boldsymbol{u}}_{\mathrm{R}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{u}} - \alpha \hat{\boldsymbol{u}}_{\mathrm{R}})^{\mathrm{c}} \, \mathrm{d}x,$$

where $\hat{\boldsymbol{u}}_{\mathrm{R}}$ is given as

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{R} = \boldsymbol{e}_{2} (c_{1}x_{1} + c_{2}x_{1}^{2}) ie^{-ikx_{1}}$$
 in Ω_{R0} ,

and $\alpha \in \mathbb{R}$ is a variable to adjust the magnitude of $\hat{\boldsymbol{u}}_{R}$ to fit $\hat{\boldsymbol{u}}$. Using it, we formulate the shape optimization problem as follows.

Problem 2 (Error norm minimization) Find ϕ that satisfies

$$\min_{(\boldsymbol{\phi}, \hat{\boldsymbol{u}}) \in \mathcal{D} \times \hat{\mathcal{S}}} \left\{ f(\boldsymbol{\phi}, \alpha, \hat{\boldsymbol{u}}) | Problem 1 \right\}.$$

4 Shape derivative of cost function

We apply the Lagrange multiplier method to obtain the shape derivative of cost function. The adjoint problem is defined as follows.

Problem 3 (Adjoint problem for f)

Using the solution $\hat{\mathbf{u}}$ of Problem 1, find $\hat{\mathbf{v}}^c \in \mathcal{S}$ such that

$$-\omega_0^2 \rho \hat{\boldsymbol{v}}^{\text{cT}} - r \nabla^{\text{T}} \boldsymbol{S} \left(\hat{\boldsymbol{v}}^{\text{c}} \right) = 2 \chi_{\Omega_{\text{R}0}} \left(\hat{\boldsymbol{u}} - \alpha \hat{\boldsymbol{u}}_{\text{R}} \right)^{\text{T}}$$

$$in \ \Omega \left(\boldsymbol{\phi} \right),$$

$$r \boldsymbol{S} \left(\hat{\boldsymbol{v}}^{\text{c}} \right) \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \quad on \ \Gamma_{\text{N}} \left(\boldsymbol{\phi} \right).$$

The condition for α are given by

$$\alpha = \int_{\Omega_{\rm R0}} \operatorname{Re} \left[\hat{\boldsymbol{u}} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{\rm R}^{\rm c} \right] \mathrm{d}x \bigg/ \int_{\Omega_{\rm R0}} \hat{\boldsymbol{u}}_{\rm R} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_{\rm R}^{\rm c} \mathrm{d}x.$$

When $(\hat{\boldsymbol{u}}, \hat{\boldsymbol{v}}^c) \in \mathcal{S}^2$ are the solutions of Problems 1 and 3, α satisfies above, $\hat{\boldsymbol{b}}_i$ is assumed as a function varying with domain measure [2, Definition 9.4.3] and $\hat{\boldsymbol{v}}$ is assumed as a constant in Ω_{bi0} , we have the partial Fréchet derivative of the Lagrange function \mathcal{L} of fwith respect to an arbitrary domain variation $\varphi \in \mathcal{D}$ as

$$\mathcal{L}_{\boldsymbol{\phi}}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\alpha}, \hat{\boldsymbol{u}}, \hat{\boldsymbol{v}}^{c}\right) \left[\boldsymbol{\varphi}\right] = \langle \boldsymbol{g}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$$
$$= \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left(\boldsymbol{G}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}^{T} + g_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}\right) dx,$$

where g is the shape derivative of f, and

$$G_{\Omega} = 2 \operatorname{Re} \left[r(\boldsymbol{S}(\hat{\boldsymbol{u}})(\boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{v}}^{\text{cT}})^{\text{T}} + \boldsymbol{S}(\hat{\boldsymbol{v}}^{\text{c}})(\boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{u}}^{\text{T}})^{\text{T}}) \right],$$

$$g_{\Omega} = 2 \operatorname{Re} \left[\omega_0^2 \rho \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v}_0^{\text{c}} - r \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{v}_0^{\text{c}}) \right].$$



Fig. 2. Domains of Ω_{R0} , Ω_{b10} and Ω_{b20} .

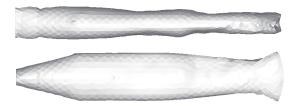


Fig. 3. Optimized shape: top and side views.

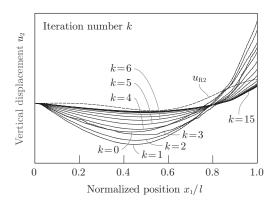


Fig. 4. Variation of $u_2(x_1,t)$ ($\omega_0 t = 1$) in reshaping.

5 Numerical example

To solve Problem 2, we developed a computer program by the finite element method following the scheme based on the H^1 gradient method [2, Section 9.9.1] with the g. In this study, we set m=2 and the domains of Ω_{R0} , Ω_{b10} and Ω_{b20} as shown in Fig. 2, and $\omega_0/(2\pi)=2.3$ Hz. The other constants were used referring to [3, Chapter 3]. Figure 3 shows the optimized shape. The change of $u_2(\Xi_1,0)$ on $\Xi_1 = \{x \in \Omega_{R0} | (x_2,x_3) = (0,0)\}$ in the reshaping iteration together with $u_{R2}(\Xi_1,0)$ are illustrated in Fig. 4.

References

- D.S. Barret, M.S. Triantafyllou, D.K.P. Yue, M.A. Grosenbaugh, and M.J. Wolfgang. Drag reduction in fish-like locomotion. J. Fluid Mech., Vol. 392, pp. 183–212, 1999.
- [2] H. Azegami. Shape optimization problems. Morikita Publishing Co., Ltd., Tokyo, 2016. (in Japanese).
- [3] D. Barrett. Propulsive efficiency of a flexible hull underwater vehicle. PhD thesis, Department of Ocean Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Boston, USA.

An Improved Shape Optimization Formulation of the Bernoulli Problem by Tracking the Neumann Data

Julius Fergy T. Rabago¹, Hideyuki Azegami²
^{1,2}Nagoya University, A4-2 (780) Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya 464-8601, Japan e-mail: ¹jfrabago@gmail.com, ²azegami@i.nagoya-u.ac.jp

1 Introduction

We consider the so-called exterior Bernoulli free boundary problem which is described as follows: given a bounded and connected domain $A \subset \mathbb{R}^2$ with a fixed boundary $\Gamma := \partial A$ and a constant $\lambda < 0$, one needs to find a bounded connected domain $B \subset \mathbb{R}^2$ with a free boundary $\Sigma := \partial B$, containing \bar{A} , and an associated state function $u := u(\Omega)$, where $\Omega = B \setminus \bar{A}$, satisfying the system

$$\begin{cases}
-\Delta u = 0 & \text{in } \Omega, \\
u = 1 & \text{on } \Gamma, \\
u = 0 & \text{and } \partial_{\mathbf{n}} u = \lambda & \text{on } \Sigma,
\end{cases}$$
(1)

where $\partial_{\mathbf{n}} u := \nabla u \cdot \mathbf{n}$ and \mathbf{n} is the outward unit normal vector to the free boundary Σ .

Our aim is to resolve (1) by means of shape optimization methods and, using the gradient information, formulate a novel Lagrangian-like approach for the numerical realization of the minimization problem. For this purpose, we consider the cost function

$$J(\Sigma) = \frac{1}{2} \int_{\Sigma} (\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda)^2 \, \mathrm{d}s,$$

where the state solution u satisfies, for a fixed $\beta > 0$, the following equivalent form of (1):

$$\begin{cases}
-\Delta u = 0 & \text{in } \Omega, \\
u = 1 & \text{on } \Gamma, \\
\partial_{\mathbf{n}} u + \beta u = \lambda & \text{on } \Sigma,
\end{cases}$$
(2)

The classical formulation of (1) by L^2 -tracking of the Neumann data considers the same functional J but with state problem equivalent to (2) in the case of β being equal to zero. To simplify a lot of computations, we let $\beta = \kappa$.

2 Shape Gradient of the Cost

We perturb the domain via velocity method [1] and consider the set of velocity fields $\Theta := \{ \mathbf{V} \in C^{k,1}(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^2) : \mathbf{V}|_{\Gamma \cup \partial U} = 0 \}$, where $U \in C^{2,1}$ denotes the hold-all domain.

Using the minimax formulation [2] coupled with Correa-Seeger theorem [3] and function space parametrization technique [1], we are able to establish the following result regarding the first-order shape derivative of J.

Proposition 1 Let $\Omega \in C^{2,1}$ be a bounded domain. Then, the shape derivative of J along a deformation field $\mathbf{V} \in \Theta$ at Ω is given by

$$dJ(\Sigma)[\mathbf{V}] = \int_{\Sigma} \mathscr{G} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \, ds$$

where

$$\begin{split} \mathscr{G} &= \nabla u \cdot \nabla p - \kappa (u-p) \partial_{\mathbf{n}} u \\ &+ (\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda) \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{n}^2} + \frac{\kappa}{2} \left(\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda \right)^2. \end{split}$$

and the adjoint state $p \in H^1(\Omega)$ satisfies

$$\begin{cases}
-\Delta p = 0 & \text{in } \Omega, \\
p = 1 & \text{on } \Gamma, \\
\partial_{\mathbf{n}} p + \beta p = -(\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda) & \text{on } \Sigma.
\end{cases}$$
(3)

3 Numerical Tests

In this work, we apply a variant of the well-known H^1 gradient method [4] to compute for a descent direction. Particularly, we take $\mathbf{V} \in [H^1(\Omega)]^2$ as the only solution to the equation

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{V} : \nabla \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}x + \int_{\Sigma} \kappa (\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}s$$

$$= -\int_{\Sigma} \mathscr{G} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}s, \quad \forall \boldsymbol{\varphi} \in [V(\Omega)]^{2}. \tag{4}$$

The main steps for computing the k^{th} domain Ω_k are given as follows:

- 1. Choose an initial shape Ω_0 .
- 2. Solve the systems (2) and (3) on Ω_k .
- 3. Evaluate V_k using (4).
- 4. Set $\Omega_{k+1} = (\mathbf{I}_2 + t_k \mathbf{V}_k) \Omega_k, t_k \geqslant 0.$

At each iteration, the step size t_k is chosen on the basis of an Armijo-Goldstein type line search search strategy. We stop the algorithm as soon as the cost reached a target value.

Example 1. We first test the accuracy of the shape gradient by considering (1) with $\Gamma = C(\mathbf{0}, r)$, $\lambda = [R(\log r - \log R)]^{-1}$, 0 < r < R,

where $C(\mathbf{0}, r)$ denotes the circle centered at the origin with radius r. We let r = 0.3 and R = 0.5, so $\lambda = -3.92$. Tab. 1 summarizes the numerical results toward the exact solution $\Sigma^* = C(0, R)$ and apparently, we got a more accurate result from the proposed formulation than the classical method.

Method	$d_H(\Sigma,\Sigma^*)$	cost	# iter	time	
Proposed	0.0155	0.0002	3	$2.7 \sec$	
Classical	0.0160	0.0040	150	$265~{\rm sec}$	
Tab. 1. Convergence test toward exact solution.					

Example 2. We consider Γ as the boundary of $S = (-0.25, 0.25)^2 \setminus [0, 0.25]^2$ with $\lambda = -10$. The optimal boundary is shown in Fig. 1a.

Example 3. We take $\lambda = -1.5$ and define Γ as the union of the boundaries

$$\Gamma_1 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 + 0.7\cos\theta - 0.4\cos 2\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}, 0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi \right\}$$

$$\Gamma_2 = \left\{ \begin{pmatrix} -2 + \cos\theta + 0.4\cos 2\theta \\ 0.5 + 0.7\sin\theta \end{pmatrix}, 0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi \right\}.$$

In this case, the result is shown in Fig. 1b. Example 4. We also apply our method to the interior case of the Bernoulli problem: given a bounded domain $A \subset \mathbb{R}^2$ with $\Gamma := \partial A$ and a number $\lambda > 0$, the interior Bernoulli problem consists in finding a bounded domain $B \subset \bar{A}$ with $\Sigma := \partial B$ and a function u on $\Omega = A \setminus \bar{B}$ such that

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{on } \Gamma, \\ u = 1 & \text{and } \partial_{\mathbf{n}} u = \lambda & \text{on } \Sigma, \end{cases}$$

where \mathbf{n} is the interior unit normal to Σ . In this case, the kernel of the gradient becomes

$$\mathscr{G} = \nabla u \cdot \nabla p - \partial_{\mathbf{n}} u \partial_{\mathbf{n}} p + (\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda) \frac{\partial^{2} u}{\partial \mathbf{n}^{2}} + \frac{\kappa}{2} (\partial_{\mathbf{n}} u - \lambda)^{2}.$$

We consider the interior case with $\Gamma = C(\mathbf{0}, R)$, $\lambda = [r(\log R - \log r)]^{-1}$, R/e < r < R. In this case, the problem admits two possible solutions; namely, the *elliptic* solution $C(\mathbf{0}, r)$, and the *hyperbolic* solution given by $C(\mathbf{0}, r_h)$, where r_h is the unique real number such that $0 < r_h < R$, $[r_h(\log R - \log r_h)]^{-1} = \lambda$. Convergence to the elliptic or hyperbolic solution depends on the initial guess. In our test, we are only interested in the elliptic solution. We take R = 0.9 and r = 0.7, so $\lambda = 5.6844$. Tab. 2 summarizes the results toward the elliptic solution $\Sigma^* = C(0, r)$.

Example 5. We consider the boundary $\Gamma = \partial S$ where $S = (-0.5, 0.5)^2 \setminus [0.1, 0.5]^2$ and take $\lambda = 14$. Figure 2 shows the position of Σ_k at some iterations using the proposed method.

Formulation	$d_H(\Sigma,\Sigma^*)$	cost	# iter	time		
Proposed	0.0158	0.00001	4	28 sec		
Classical	0.0164	0.00525	200	$661~{\rm sec}$		
Tab. 2. Convergence test toward the elliptic solution						

—proposed formulation

Fig. 1. The optimal domains (*shaded region*) for Example 2 (Plot **a**) and Example 3 (Plot **b**).

classical formulation

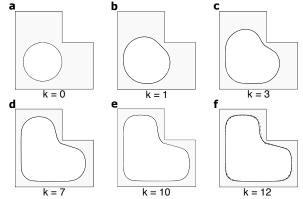


Fig. 2. Plot \mathbf{a} — \mathbf{f} : optimal domain Ω_k for k = 0, 1, 3, 7, 10, 120; Plot \mathbf{f} (dashed line): optimal domain computed using the classical approach.

Conclusion In summary, we conclude that the proposed method is more robust in solving the Bernoulli problem than the classical Neumann data tracking approach.

References

- M. C. Delfour and J.-P. Zolésio. Shapes and Geometries: Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization, Vol. 22 of Adv. Des. Control. SIAM, PA, 2011.
- [2] M. C. Delfour and J.-P. Zolésio. Shape sensitivity analysis by min-max differentiability. SIAM J. Control Optim., Vol. 26, No. 4, pp. 834–862, 1988.
- [3] R. Correa and A. Seeger. Directional derivative of a minimax function. Nonlinear Anal. Theory Meth. Appl., Vol. 9, pp. 13–22, 1985.
- [4] H. Azegami. Shape optimization problems. Morikita Publishing Co., Ltd., Tokyo, 2016. (in Japanese).

Enhanced Collaborative Optimization Using Alternating Direction Method of Multipliers

Siyu Tao¹, Kohei Shintani¹, Guang Yang², Herb Meingast², Wei Chen¹ Northwestern University, ²Toyota Motor North America, Inc. e-mail: kohel.shintani@northwestern.edu

1 Introduction

Enhanced collaborative optimization (ECO)[1] is a recently developed multidisciplinary design optimization (MDO) method in the family of collaborative optimization (CO)[2]. While ECO achieves better optimization performance than its predecessors, its formulation is much more complex and incurs higher computation and communication costs, mainly due to the use of linear models of nonlocal constraints. Consequently, ECO is often not the most desirable MDO method for large-scale and/or highly coupled applications. In this paper, we propose a new method named "ECO-ADMM" by introducing the alternating direction method of multipliers (ADMM) to ECO.

2 Enhanced Collaborative Optimization

MDO method initially developed for optimizing large-scale distributed systems. A general MDO problem of *N* discipline subproblems can be described as

$$\min_{\substack{x_0, x_1, \dots, x_N \\ \text{s.t.}}} F(x_0, x_1, \dots, x_N),
\text{s.t.} c_i(x_0, x_i) \ge 0, i = 1, 2, \dots, N,$$
(1)

where, F and c_i are global objective function and local constraint functions in Discipline i, and \boldsymbol{x}_0 and \boldsymbol{x}_i are shared design variables and local design variables of Discipline i. ECO solves Eq. (1) with a bilevel structure where a system-level subproblem and subproblems are iteratively solved until the solutions to all subproblems converge to a common global system design solution. The system-level subproblem is formulated as

$$\min_{\mathbf{x}_0} \quad J_0 = \sum_{i=1}^N \|\widehat{\mathbf{x}}_{0i} - \mathbf{x}_0\|_2^2, \tag{2}$$

where, $\hat{\boldsymbol{x}}_{0i}$ is copy of shared design variables stored in Discipline. Eq. (2) has a closed-form solution

$$x_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \hat{x}_{0i}.$$
 (3)

The system-level subproblem is created to ensure the consistency and global feasibility of the shared design variables and responses among all disciplines. The discipline *i* subproblem is

$$\min_{\bar{\mathbf{x}}_{0i}, \mathbf{x}_{i}, s_{i \neq j}} \quad J_{i} = \tilde{F}(\hat{\mathbf{x}}_{0i}, \mathbf{x}_{i}) + w_{ci} \|\hat{\mathbf{x}}_{0i} - \mathbf{x}_{0}\|_{2}^{2} \\
+ w_{Fi} \sum_{j=1, j \neq i}^{N} \sum_{k=1}^{n_{s}} s_{jk}, \\
\text{s.t.} \quad c_{i}(\hat{\mathbf{x}}_{0i}, \mathbf{x}_{i}) \ge 0, \\
\tilde{c}_{i}(\hat{\mathbf{x}}_{0i}) + s_{j} \ge 0, \\
s_{j} \ge 0, \quad j = \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, N\}, \\$$
(4)

where, \widetilde{F} is a quadratic model of the global objective function as a second-order Taylor approximation at the last iterate solution of \widehat{x}_{0i} and x_i , \widetilde{c}_i is the linear models of nonlocal constraints as a first-order Taylor approximation at the last iterate solution of \widehat{x}_{0i} , s_j is the vector of slack variables for \widetilde{c}_i . w_{ci} and w_{Fi} are weights for the consistency and slack variable penalties, respectively.

3 Enhanced Collaborative Optimization with Alternating Direction Method of Multipliers

ADMM [3] is a general optimization algorithm that blends dual decomposition and the method of multipliers. ADMM is developed for solving the optimization problem.

$$\min_{\mathbf{x},z} \quad f(\mathbf{x}) + g(z),$$
s.t.
$$\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}z = c.$$
(5)

where, $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ and $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^m$ are variables, and $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{p \times n}$, $\mathbf{B} \in \mathbf{R}^{p \times m}$ and $\mathbf{c} \in \mathbf{R}^p$ are parameters. The augmented Lagrangian for Eq..(5) is defined as

$$L_{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{z}) + \lambda^{\mathrm{T}} (\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{z} - \mathbf{c}) + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{z} - \mathbf{c}\|_{2}^{2},$$
 (6)

where $\rho > 0$ is a step size parameter. ADMM solves Eq. (5) via iterations of

Step 1:
$$\mathbf{x}^{k+1} = \operatorname{argmin} L_{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{z}^{k}, \boldsymbol{\lambda}^{k})$$
,
Step 2: $\mathbf{z}^{k+1} = \operatorname{argmin} L_{\rho}(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}^{k})$, (7)
Step 3: $\boldsymbol{\lambda}^{k+1} = \boldsymbol{\lambda}^{k} + \rho(\mathbf{A}\mathbf{x}^{k+1} + \mathbf{B}\mathbf{z}^{k+1} - \boldsymbol{c})$

The substantial similarity between ECO and ADMM makes it possible to develop a new method based on ECO which systematically brings in the Lagrangian multipliers used by ADMM. We develop our new method called ECO-ADMM.

ECO-ADMM has the same bilevel structure of ECO, but modifies all subproblem formulations to systematically use Lagrangian multipliers in a similar way as ADMM. The system-level subproblem Eq. (2) is modified as

$$\min_{\mathbf{x}_0} \quad J_0 = \sum_{i=1}^N \left\| \hat{\mathbf{x}}_{0i} + \frac{\lambda_{0i}}{\rho_i} - \mathbf{x}_0 \right\|_2^2, \tag{8}$$

whose solution is

$$\boldsymbol{x}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\widehat{\boldsymbol{x}}_{0i} + \frac{\boldsymbol{\lambda}_{0i}}{\rho_i} \right),$$

where λ_{0i} is the set of Lagrangian multipliers corresponding to $\widehat{\boldsymbol{x}}_{0i}$, and ρ_i is a user-defined penalty parameter comparable to w_{ci} in the original ECO. Eq. (4) is changed to

$$\min_{\bar{x}_{0i}, x_{i}, s_{i \neq j}} J_{i} = \tilde{F}(\hat{x}_{0i}, x_{i}) + \lambda_{0i}^{T}(\hat{x}_{0i} - x_{0})
+ \rho_{i} \|\hat{x}_{0i} - x_{0}\|_{2}^{2} + w_{Fi} \sum_{j=1, j \neq i}^{N} \sum_{k=1}^{n_{s}} s_{jk},
\text{s.t.} \quad c_{i}(\hat{x}_{0i}, x_{i}) \ge 0,
\tilde{c}_{i}(\hat{x}_{0i}) + s_{j} \ge 0,
s_{j} \ge 0, \quad j = \{1, ..., i-1, i+1, ..., N\}.$$
(9)

Compared with ECO iteration procedure, ECO-ADMM adds a stage for updating Lagrangian multipliers λ_{0i} by the formula

$$\lambda_{0i}^{\text{new}} = \lambda_{0i}^{\text{old}} + \rho(\hat{x}_{0i} - x_i). \tag{10}$$

Table 1 Performance comparison of number of system iterations between ECO-ADMM and ECO.

w_{ci} , ρ	ECO	ECO-ADMM
0.1	8	4
1.0	12	5
10.0	174	32

In addition to being used for the local subproblem, the new λ_{0i} values are also to be passed to the system-level solver in the next iteration.

4 Analytical Case Study

The case study is an analytic one with two disciplines used to demonstrate the advantage of ECO over CO [1]. We set the initial design z = [1.0, 0.0, 5.0] and solve three cases with different penalty parameters (w_{ci} , ρ). For all the cases, same global optimum is found. Table 1 shows performance comparison of number of system iterations between ECO-ADMM and ECO. ECO-ADMM converges much faster to the global optimum than ECO.

5 Conclusion

In this paper, we develop a new multidisciplinary design optimization(MDO) method by integrating alternating direction method of multipliers (ADMM) into the enhanced collaborative optimization (ECO). Test case shows that ECO-ADMM is expected to comprehensively outperform ECO in solving MDO problem.

References

- Roth, B. and I. Kroo. Enhanced collaborative optimization: application to an analytic test problem and aircraft design. in 12th AI-AA/ISSMO multidisciplinary analysis and optimization conference. 2008.
- [2] Kroo, I., et al., Multidisciplinary optimization methods for aircraft preliminary design. AIAA paper, 1994. 4325: p. 1994.
- [3] Bertsekas, D.P. and J.N. Tsitsiklis, Parallel and distributed computation: numerical methods. Vol. 23. 1989: Prentice hall Englewood Cliffs, NJ.

A PFAのカオス性

中澤 勇夫 1 , 梅野 健 1 1 京都大学情報学研究科

e-mail: nakazawa.isao.53e@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

Chaos 理論の研究ではパワー一定 Chaos 拡散符号の1種である Almost Periodic Function Codes を用いた拡散符号を周波数軸に移した APFA の通信分野への適用の研究を進めている。 本研究では概周期性を持つ APFA 通信方式として、相互検証するもので、同期系では OFDM 通信方式、ランダム雑音の AWGN、Chaos 符号として n 次元可解 Chaos と各々の分野の評価を横並びで相対検証する。

2 APFA システムと評価対象信号の選択

2.1 概周期系信号方式

H.Bohr によって 1924 年に導入された概周期 関数は近年、通信への適用が提案され、無理数の整数倍の小数部は (0,1) に一様分布するワイル (Weyl) の「一様分布定理」 (equidistribution theorem) に基づいている。素数は無数にあることから、概周期関数は無数に生成が可能である。図 1 は正規化周波数 $0 \sim 1$ に M 波を周期的に配置した周波数をターゲットとして、概周波数を配列した APFA 配置図を図 1 に示す。各々サブキャリアは正規分布を持った周波数偏移幅を有し、周波数偏移が無理数から成る。

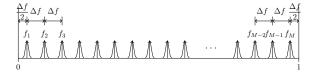


図 1: 周波数偏移分布を持った APFA の周波数配置 (周波数範囲 $0 < \sigma < 1$)

2.2 周期系信号方式

現在通信で使われている変調、多重、通信 方式は同期系信号方式が多く採用されている。 APFA は周波数多重方式の一種なので、周期系 信号方式として OFDM 方式と比較検証した。

2.3 非周期系信号(干渉性雑音)

(1) AWGN

通信通信では複数の個所でガウス (Gaussian)

雑音が加算され、受信系で S/N とか BER(Bit Error Rate) を評価する上でガウス雑音の加法性は重要な要素である。 AWGN は、① 加算性 (additive)、② 白色 (White)、③ ガウス (Gaussian) と定義されている。

(2) Inpulse noise Inpulse noise は一般的には外来雑音と捉えられていて、通常は各種レーダ波、現代は電子レンジからの妨害が報告されている。Inpulse noise は単位サンプル信号 (unit-sample sequence) $\delta(n)$ として表される。

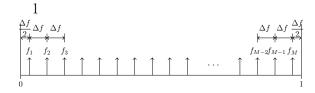


図 2: OFDM 周波数配置 (周波数範囲 $0 \le \sigma < 1$)

2.4 Chaos signal

通信を目的としたカオス符号の研究はパワーー定カオス拡散符号があげられる。パワーー定カオス拡散符号の代表的な符号として、時間軸上の時間長の制限が少ないn次元可解カオス符号を今回の相対比較研究の対象とした。

3 通信方式間の相対比較

(1) AWG N 雑音との確率分布特性とエントロピー

各サブキャリアーの総合信号の複素空間での Norm の確率密度分布をエントリピー (NGDE: Normalization Gaussian distribution entropy) により評価する。NGDE($Ent(\gamma)$) は以下で示される。

$$Ent(\gamma) = \frac{\sum_{p=0}^{P_m ax} -pro(\gamma_p) \log_2(pro(\gamma_p))}{\log_2 M}$$
 (1)

ここで、M:サンプリング総数、 γ_p :サンプリング点の Norm、

AWGN,OFDM,APFA の標準偏差とエントロピーを表1、確率密度分布を図3に各々示す。

(2) 正規化位相同期エントロピー

APFA 方式はサブキャリアの周波数偏移の標準偏差 (σ) でサブキャリアの位相分布が変わってくる。正規化位相エントロピーの定義を式3に、シミュレーション結果を図4,5に示す。

(3) カオス符号との相対比較

カオス性の研究では時系列データから決定論 的法則を抽出する手法に、基準面を通過する 間隔の推移を解析する RM(Return map) があ る。相対検証するために RM 平面上の確率密 度分布エントロピー(式2参照)法を用いた。

表 1: AWGN,OFDM,APFA の標準偏差とエントロ ピー

_			
項目	標準偏差	Norm	Phase
	宗華 左	Entropy	Entropy
AWGN	0.9999	0.86	0.9977
OFDM	0.9998	0.872	0.9985
$APFA(\sigma = 0.15)$	0.9998	0.8707	0.9965
$APFA(\sigma = 0.08)$	0.9996	0.8717	0.9976
$APFA(\sigma = 0.008)$	0.9998	0.8733	0.9983

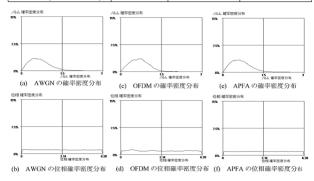


図 3: AWGN,OFDM,APFA の確率密度分布

$$Ent(\theta) = \frac{\sum_{p=0}^{P_m ax} -pro(\theta_p) \log_2(pro(\theta_p))}{\log_2 M}$$
 (2)

ここで、M:サンプリング総数、 θ_p :サンプリング点位相、

正規化位相同期エントロピー

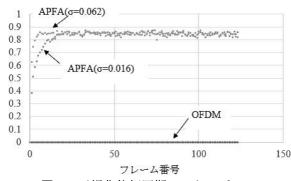


図 4: 正規化位相同期エントロピー

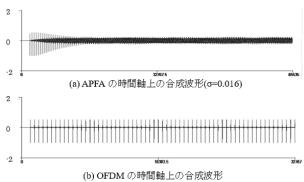


図 5: OFDM と APFA の時間軸上の合成信号

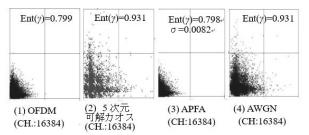


図 6: Return Map(RM) のエントロピー

4 まとめ

フレーム同期ごとの正規化位相同期エントロピーによりサブキャリアの位相分布を検証し、APFA 方式は AGWN と OFDM の中間にあり標準偏差 σ によってかわる。正規化位相同期エントロピーは常に変動して、収束は見られない。また、RM エントロピーでは APFA 方式は OFDM に近い分布を示している。

- K. Umeno, "On Complex Spreading Sequence with Constant Power and Exact Orthogonality for Chaos-CDMA," IEICE Technical Report, NLP2008-37, pp.23-27, July 2008.
- [2] I. Nakazawa, K. Umeno,"Fundamental study on almost periodic frequency arrangements for super-multi-access radio communication systems," IEICE Communication Express, Vol.1, 1-6, pp.673-678 December 2016.
- [3] I. Nakazawa, K. Umeno," Performance Evaluation of Wideband Radio Communication Systems using Almost Periodic Frequency Arrangement," Proc. of ICSGTEIS 2016, Bali, 6-8 Oct. 2016.

2016年台湾地震の電離層における先行現象

後藤振一郎 1 , 打田凌馬 1 , 五十嵐喜良 1 , Chen Chia-Hung 3 , 梅野健 1 京都大学情報学研究科数理工学専攻 2 成功大学

1 概要

規模が大きな地震に関して、地震前に電離層で何らかの意味で異常が起こることが知られている。しかし、そのメカニズムや異常が発生するかどうかのマグニチュードしきい値に関して解明すべき課題は多い。一般的な議論は難しいので、まずはどのような条件や手法でこの種の先行現象が観測されるか、様々な解析例を集めることが上述の課題を解決する手がかりになるであろう。一方 2016 年 2 月 5 日に台湾南部でモーメントマグニチュード 6.4 の内陸地震が発生した。この地震の先行現象として電離層での異常現象を Iwata-Umeno の方法で捉えることができたので、報告する。

2 導入

電離層は地球上空にあるイオン化した媒質 で、無線通信に影響を及ぼす。この電離層は太 陽フレアや、地球の大規模な火山噴火、磁気嵐 等により撹乱を受ける。それらの撹乱は電離層 の総電子数 (Total Electron Content, TEC) の 時間変動により観測される。ここで、TEC の 時間変動は米国の GPS を含む全球測位衛星シ ステムに於ける人工衛星から発する電波を受信 する地上の観測局によって評価される。TEC の時間変動の異常を抽出する様々な手法が提案 されているが、その一つが地理的に近い複数の 観測局の TEC データを用いることにより、異 常検出の精度を高めた Iwata-Umeno の方法 [1] である。Iwata-Umeno の方法を含むこれまで の研究によれば、巨大地震の1時間程度前に TEC の時間変動が異常を示すことが報告され ている。しかし、その異常現象がどの程度の地 震で生じるかや、地域性等、まだまだ解決すべ き課題は多いのが現状である。

以上を踏まえ本研究は、2016 年台湾地震の 電離層における先行現象を Iwata-Umeno の 方法で解析し、その結果、40 分程度前に TEC の時間変動に異常が現れることを示す [2]。

なお、本研究で用いる人工衛星システムは GPS である。また、台湾は日本などと同様に、 地震が頻発する地域に属し、また台湾におけ る地上の GPS 観測局の密度は日本以上に高い。 従って、台湾は GPS を用いた電離層における地震の先行現象を研究するのに適している。2016年2月5日に台湾南部で内陸型の地震 (Mw6.4)が発生した。

3 Iwata-Umeno の方法

本稿では観測局 i での TEC 時系列とは

$$(t_1, \mathcal{E}_1), \dots, (t_N, \mathcal{E}_N), \quad \mathcal{E}_k = \mathcal{E}(t_k), \quad (1)$$

のような時刻 t_k とその時刻での実際に観測された TEC 値 \mathcal{E}_k が並んだものとして定め、これを $\mathcal{D}^j(t_1;t_N)$ と書く。また、以下では全ての k に対し、 $\Delta:=t_{k+1}-t_k=30[\sec]$ の 30 秒間隔の時系列データを扱う。

以下が Iwata-Umeno で用いられた TEC 時系列異常検知の方法である [1]。

- 1) 時間の次元を持つパラメーター $t_{\rm sample}, t_{\rm test}$ を設定する。本稿では $t_{\rm sample}=2[{\rm hour}],$ $t_{\rm test}=0.25[{\rm hour}]$ とする。また、解析に用いる観測局の数を M+1 個と書く時、この M を指定する。これらは TEC 時系列から時系列の異常を検出する際のパラメーターとなる。
- 2) 中心となる GPS 観測局 1 つを決める。この観測局をi とラベル付けする。観測局i は、震源に近いものを選んだり、人工衛星と観測局i を結ぶ直線と電子密度が高い電離層の交点の地上への射影 (SIP) が震源に近くなるように選ぶ。
- 3) TEC 時系列 $\mathcal{D}^i_{\mathrm{sample}} := \mathcal{D}^i(t; t+t_{\mathrm{sample}})$ に対し、多項式フィッテイング曲線を最小 二乗法で構成し、 $\mathcal{F}^i_{\mathrm{sample}}(t)$ と表す。以後、 $\mathcal{F}^i_{\mathrm{sample}}$ の定義域を拡張して \mathcal{F}^i と書くと、 $\mathcal{F}^i(t), t \in (t+t_{\mathit{sample}}, t+t_{\mathrm{sample+test}})$ なる、異常が無い場合の予測 TEC 値を見積もることができる。
- 4) TEC 時系列 $\mathcal{D}_{test}^i := \mathcal{D}^i(t+t_{sample};t+t_{sample}+t_{test})$ でのデータを $(t_k,\mathcal{E}_k(t_k))$ と書く。そして、観測局 i での TEC 異常値時系列 を定義するために、 $x_k^i = \mathcal{E}^i(t_k) \mathcal{F}^i(t_k)$ とおき、

$$(t_k, x_k^i), (t_{k+1}, x_{k+1}^i), \dots$$

からなる時系列を $\mathcal{X}^i(t+t_{\mathrm{sample}};t+t_{\mathrm{sample}}+t_{\mathrm{test}})$ と書く。

- 5) 観測局i周辺のM局で上の手続きに従い、 $\mathcal{X}^{j}(t+t_{\mathrm{sample}};t+t_{\mathrm{sample}}+t_{\mathrm{test}})$ (但し $j=1,\ldots,M$)をM個計算する。
- 6) 観測局 i を中心とした相関

$$C^{i}(T(t)) = \frac{1}{MN} \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=0}^{N-1} x_{t(k)}^{i} x_{t(k)}^{j},$$

を計算する。ここで $t(k)=t+t_{\rm sample}+k\Delta$ 、 $T(t)=t+t_{\rm sample}+t_{\rm test}$,N は $\mathcal{D}_{\rm test}^i$ 内にあるデータ点数 ($(N-1)\Delta=t_{\rm test}$).

4 データと相関解析

図 1 に観測局 gais $extit{L}$ wanc 相関時系列を表す (M=2)。なお、これらの観測局や震源の地理的な位置や TEC 時系列は付録の図 2 にある。地震の無い日の時系列は [2] を参考のこと。

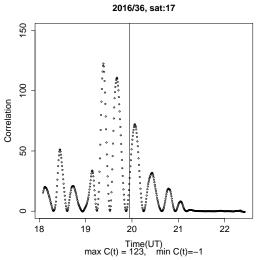


図 1. 地震当日の GPS17 による TEC 相関時系列. 縦線 は地震発生時刻, 縦線は地震発生時刻 (世界時,UT).

5 議論とまとめ

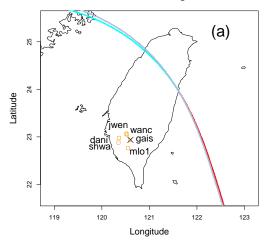
図1から地震発生時刻40分程度前に相関値が大きくなる現象を捉えることができた。電離層の撹乱は導入でも述べた通り、様々な原因がある。従って観測されたTEC異常が地震によるものかについては、慎重に議論する必要がある。中規模伝搬性電離圏撹乱(MSTID)と呼ばれる地震撹乱がこの台湾地震発生当時、日本上空で生じていたかを調べた結果、MSTIDは生じていなかった。また、地磁気指数であるKp指数とDst指数を地震発生時とそれ以前について調べたが、地磁気の活動は静かであった[2]。

物理的機構として、なぜこのような地震前兆 現象が観測されるかについて、近年様々な報告 が発表されている (例: LAI 結合モデル)。しかし、現状では今後の研究の進展が望まれているのが実情である。

この規模の地震でも TEC による地震前兆現象が確認できたことは特筆に値するであろう。 その物理的機構の解明や、今後の研究による更なる詳細が判明することを期待したい。

付録 (観測局の配置と TEC 時系列)

Feb. 5, 2016, satellite :17, gais & wanc



Feb. 5, 2016, satellite:17, gais & wanc

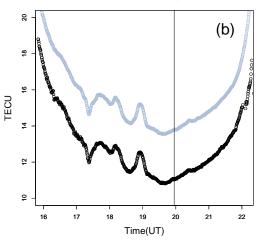


図 2. (a) 地震当日の GPS17 による SIP の軌跡 [青 : gais (地震前), 赤 : gais (地震後), 灰: wanc] 及び震源 : x. (b) TEC の時間変化 [黒 : gais, 灰 : wanc, 但しグラフの重なり防ぐため wanc での TEC 値をシフトしてある]. 縦線は地震発生時刻を表し, 1TECU= $10^{16}[1/m^2]$.

謝辞 本研究は(株)ケイ·オプティコムとの共同研究によるものである。

- T. Iwata and K. Umeno, J. Geophys. Res. Space Physics, 121 (2016), 8969-8984.
- [2] S. Goto, R. Uchida, K Igarashi, C-H. Chen, and K. Umeno, arXiv:1806.03782

Arnoldの猫写像のカオス真軌道の生成と乱数性の解析

多久島 秀平¹,田村 健太郎^{1,*},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: *s15c2028@bene.fit.ac.jp

1 まえがき

代表的なカオス写像の1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。Arnoldの猫写像について有限精度の数値計算によって生成された軌道と無限精度の計算のもとでの真の軌道との同等性は自明でない。本研究では代数的整数を用いて生成した無限精度のカオス真軌道[1][2]の乱数性と有限精度の計算で生成した軌道の乱数性の比較を行う。更に、Arnoldの猫写像で生成される時間方向に相関を持つ2値系列にXOR演算を適用することで乱数性が良好な2値系列が得られることを数値実験で示す。

2 Arnold の猫写像

Arnold の猫写像は、代表的な2次元のカオス写像であり式(2.1)で表される. 本研究では、パラメータ $\alpha = \beta = 1$ とする.

$$\begin{bmatrix} X_{n+1} \\ Y_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ \beta & \alpha\beta + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_n \\ Y_n \end{bmatrix} mod1 \qquad (2.1)$$

3 カオス真軌道の計算

カオス真軌道の計算では、代数的整数を用いて整数演算のみによる誤差の無い無限精度の計算を行う $^{[1]}$. 本研究ではm次の代数的整数 γ を用いて X_n , Y_n を

$${X_n \choose Y_n} = {a_{0,n} + \gamma a_{1,n} + \dots + \gamma^{m-1} a_{m-1,n} \choose b_{0,n} + \gamma b_{1,n} + \dots + \gamma^{m-1} b_{m-1,n}}$$
 (3.1)

と表す.ここで、係数 $a_{i,n}$, $b_{i,n}$ ($i=0,\cdots,m-1$)は,整数であり,mは 3 以上の奇数, γ 以外の共役解は全て虚数とする. 式(2.1)の写像後の X_{n+1} , Y_{n+1} の整数係数は次式で与えられる.

$$\begin{pmatrix} a_{0,n+1} \\ a_{1,n+1} \\ \vdots \\ a_{m-1,n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{0,n} + b_{0,n} - \delta(X_n + Y_n) \\ a_{1,n} + b_{1,n} \\ \vdots \\ a_{m-1,n} + b_{m-1,n} \end{pmatrix}$$
(3.2)

$$\begin{pmatrix} b_{0,n+1} \\ b_{1,n+1} \\ \vdots \\ b_{m-1,n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{0,n} + 2b_{0,n} - \delta(X_n + 2Y_n) \\ a_{1,n} + 2b_{1,n} \\ \vdots \\ a_{m-1,n} + 2b_{m-1,n} \end{pmatrix}$$
(3.3)

ここで、 $\delta(s)$ はsが含まれる区間を判別する関数であり、

$$\delta(s) = l \in Z \text{ if } s \in [l, l+1) \tag{3.4}$$

と定義される. sを解とするm次方程式 $f_s(x) = 0$ を構成し, $f_s(l) = 0$ または $f_s(l) \cdot f_s(l+1) < 0$ のとき $s \in [l, l+1)$ と判別できる.

Arnold の猫写像において、パラメータ $\alpha = \beta = 1$ の場合、 X_{n+1} については[0,1)、[1,2)の範囲、 Y_{n+1} については、[0,1)、[1,2)、[2,3)の範囲の判定を行うことでmod演算を実現する.

4 数值実験

4.1 数値実験1

本実験ではm=3 の場合において有限精度の計算による軌道とカオス真軌道との比較を行った(図1). ここで、初期値を $(X_0, Y_0) = (\sqrt[3]{2}-1, \sqrt[3]{2}-1)$ として、単精度、倍精度による有限精度の計算、および、カオス真軌道について 50 ステップの軌道を計算している. 図 1 より、単精度の場合は 16 ステップ、倍精度の場合は 34 ステップでカオス真軌道から逸脱することがわかる.

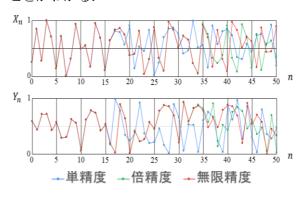


図 1 有限精度の計算による軌道とカオス真軌道との比較

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

4.2 数値実験 2

本実験では、Arnold の猫写像のカオス真軌 道から生成した 2 値系列について乱数検定 NIST SP800-22 で乱数性を評価し、有限精度の計算で生成した軌道による 2 値系列との比較を行う。ここで、 $X_n < 0.5$ のとき 0、 $X_n \ge 0.5$ のとき 1 として、2 値系列を生成した。カオス真軌道の計算では、m=3、 $\gamma=\sqrt[3]{p}$ とした。ここで、pは、素数とし、1000 個の素数を用いて10⁶ビットの 2 値系列を 1000 系列生成した。

単精度、倍精度の有限精度の計算、および、カオス真軌道の計算によって生成した2値系列の乱数性を評価した結果を表1に示す。ここで、NISTによる対応が不十分とされている検定と対象系列が異なるため比較ができない検定を除いた9種類の検定項目について、第一段階の検定の合格回数を示している。

結果として、倍精度の計算による2値系列とカオス真軌道による2値系列の評価結果は、ほぼ同等であることがわかる。また、検定番号7、11、12 の検定項目では、合格率による第二段階の判定で不合格となった。これは、 X_n を0.5で分割して得られる2値系列は時間方向に相関を有しているためと考えられる.

表1 生成した2値系列の乱数性評価(第一段階の検定)

検定 番号	検定名称	第一段階 検定回数	単精度	倍精度	カオス 真軌道
1	Frequency Test	1,000	991	991	983
2	BlockFrequency Test	1,000	968	989	985
3	Runs Test	1,000	985	986	986
5	Rank Test	1,000	988	991	989
7	NonOverlappingTemlate Test	148,000	74,229	75,054	74,903
10	LinearComplexity Test	1,000	990	992	986
11	Serial Test	2,000	863	979	988
12	ApproximateEntropy Test	1,000	0	0	0
13	CumulativeSums Test	2,000	1,976	1,980	1,972

表 2 XOR 演算を適用して生成した2値系列の乱 数性評価 (第二段階の判定)

検定 番号	検定 項目数	カオス 真軌道	k=1	k=2	k=5	k=8	k=10
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	0	0	1	1	1
3	1	1	1	0	1	1	1
5	1	1	1	0	1	1	1
7	148	18	19	33	148	148	148
10	1	1	1	1	1	1	1
11	2	1	0	1	2	2	2
12	1	0	0	0	1	1	1
13	2	2	0	2	2	2	2

4.3 数值実験3

乱数性が劣る 2 値系列に対して XOR 演算を適用することで乱数性が向上することが知られている [3] 。本実験では,カオス真軌道の計算から生成した 2 値系列に XOR 演算を適用して生成した 2 値系列の乱数性を評価する。本研究では,元となる 2 値系列のi番目とi+k番目のビットについて XOR 演算を適用して新たな 2 値系列を生成している.

乱数性の評価結果を表 2 に示す。ここで,NIST による第二段階の合格率の判定での合格 回数を示している。 結果としてk=8の場合に すべての検定項目について合格しており, 乱数性が良好な 2 値系列が得られている。

5 むすび

本研究では、Arnold の猫写像のカオス真軌道を計算し、生成した2値系列について乱数検定を行うことで乱数性を解析した。結果として、倍精度の計算によって得られる2値系列とカオス真軌道から得られる2値系列の乱数性の評価結果は、ほぼ同等であることを示した。また、Arnold の猫写像のカオス真軌道によって生成した2値系列について、XOR 演算を適用することで乱数性が良好な2値系列を生成できることを示した。本研究ではX軸のみを分割して2値系列を生成しているが、マルコフ分割など他の分割方法の検討は今後の課題である。

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.

- [1] Asaki Saito, Shin-ichi Yasutomi, Jun-ichi Tamura and Shunji Ito, True orbit simulation of piecewise linear and linear fractional map of arbitrary dimension using algebraic numbers, Chaos 25 (2015), 063103.
- [2] Asaki Saito, Akihiro Yamaguchi, Pseudorandom number generation using chaotic true orbits of the Bernoulli map, Chaos 26 (2016), 063122.
- [3] 藤井光昭, 暗号と乱数, 共立出版, 2018.

力学系の混合性の電磁気学への応用

杉本 哲1,梅野 健2

¹ 京都大学工学部情報学科 ² 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻 e-mail: sugimoto.satoshi.86w@st.kyoto-u.ac.jp¹

e-mail : umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp 2

1 概要

直交関数系のLebesugueスペクトルとして性質がよく知られているのは Chebyshev 多項式程度であったが、今回の研究発表会では、Legendre 多項式の系列が混合性を持つことを証明する。

Legendre 多項式の性質を理解することは、電磁気学など物理学で登場する微分方程式の解として頻繁に登場するので重要である。今回は Legendre 多項式が登場する一例として、電磁気学において行われる多重極展開について考察しようと思う。

2 用語説明

(混合性 [1],[2])

測度 μ を付与された測度空間 M と、M を M に、測度 μ を保存するように移す点変換 ϕ の作る 1 パラメータ群 ϕ の組み合わせを抽象力学系 (M,μ,ϕ) という。また、この抽象力学系の任意の部分集合 A,B に対して、

$$\lim_{i \to \infty} \mu(\phi^{-i}A \cap B) = \mu(A)\mu(B)$$

が成り立つとき、混合性を持つという。M上の任意の2乗可積分関数fに対し、

$$Uf(x) = f(\phi(x))$$

とするとき、U を、 ϕ によって誘導された作用素という。また、抽象力学系が混合性を持つことと、M 上の任意の 2 乗可積分関数 f,g に対し $\lim_{i\to\infty}(U^if,g)=(f,1)(1,g)$ が成り立つことは同値であることが知られている。 (Legendre 多項式 [3])

$$(1 - 2z\omega + \omega^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(z)\omega^n$$

となるときの $P_n(z)$ を Legendre の多項式という。また、以下の性質が知られている。

$$P_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} (z + \sqrt{z^2 - 1} \cos \phi)^n d\phi$$

$$\int_{-1}^{1} P_m(z) P_n(z) dz = 0 (m \neq n) (*)$$
$$\int_{-1}^{1} (P_n(z))^2 dz = \frac{2}{2n+1}$$

(多重極展開 [4])

電磁気学において、有界な領域内に電荷の分布 Ω が与えられたときの、十分遠方でのクーロンポテンシャルを計算するのに用いられる手法である。具体的には、電荷の分布を $\rho(\mathbf{r}')$ としたときに、位置 \mathbf{r} のクーロンポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ が

$$\phi(m{r}) = rac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} rac{\phi(m{r}')}{|m{r} - m{r}'|} dm{r}'$$

と書けるので、 $\cos\theta=rac{(m{r},m{r}')}{|m{r}||m{r}'|},r'=|m{r}'|,r=|m{r}|$ とおくと、

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_{i=0}^{\infty} P_i(\cos \theta) \left(\frac{r'}{r}\right)^i$$

となる。このようにクーロンポテンシャルを $\frac{r'}{r}$ のべき乗で展開することで、十分遠方でのポテンシャルの性質を調べる手法を多重極展開という。

また、これに伴い 2^m 重極テンソル (この数式 は参考文献 [3] も基に作成した)

$$Q_{i_1 i_2 \dots i_m} = \frac{1}{4\pi \epsilon_0 r^{n+1}} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' f_{i_1 i_2 \dots i_m}(r, r')$$

$$f_{i_1 i_2 \dots i_m}(r, r') = \sum_{k=0}^{[m/2]} \frac{(-1)^k (2m - 2k)!}{k! (m - k)! (m - 2k)! 2^k} \times r'^{2k} r'_{i_1} \dots r'_{i_{m-2k}} \times \delta_{i_{m-2k+1}, i_{m-2k+2}} \dots \delta_{i_{m-1}, i_m}$$

を用いることで、(実際の 2^m 重極モーメントは、これの定数倍により記述される。)クーロンポテンシャルの 2^m 重極モーメントは

$$Q_{i_1 i_2 ... i_m} n_{i_1} n_{i_2} ... n_{i_m}$$

の定数倍になる。(ここで、上記の数式には Einstein の和の規約が用いられ、さらに $n_i = \frac{(r)_i}{r}$)

3 研究成果

定理 1 Legendre 多項式を正規化した系列

$$P'_n(z) = {\sqrt{(2n+1)/2}P_n(z)}_{n=1,2...}$$

は混合性を持つ。ただし、抽象力学系 (M,μ,ϕ) において、 $M=(-1,1),\mu(dx)=\frac{dx}{2}$ とする。また、写像 ϕ は、写像

$$\psi: P'_n(z) \mapsto (z + \sqrt{z^2 - 1}\cos\phi)^n$$

 $\zeta: (z+\sqrt{z^2-1}\cos\phi)^n \mapsto (z+\sqrt{z^2-1}\cos\phi)^{n+1}$ としたとき、 $\phi=\psi\circ\zeta\circ\psi^{-1}$ と定義される。

証明 (2018)([5],[6] を参考にした。) U を以下のような性質を満たす、抽象力学系 (M,μ,ϕ) における、 ϕ によって誘導された演算子とする。

$$UP'_n = P'_{n+1}(n = 1, 2, ...), UP'_0 = P'_0$$

この演算子は、式 (*) から Legendre 多項式と $(z+\sqrt{z^2-1}\cos\phi)^n$ の多項式が一対一対応することを利用すれば作ることができる。 2 乗可積分関数 $f(x)=\sum_{i=0}^\infty a_i P_i'(x), g(x)=$

 $\sum_{i=0}^{\infty} b_i P_i'(x)$ に対し、

$$(T^{n}(f), g) = a_{0}b_{0} + (\sum_{i=1}^{\infty} a_{i}P'_{i+n}, \sum_{i=1}^{\infty} b_{i}P'_{i})$$

$$= a_{0}b_{0} + \sum_{i=1}^{\infty} a_{i}b_{i+n}$$

$$= a_{0}b_{0} + (\clubsuit)$$

ここで、コーシー・シュワルツの不等式を用いると、

$$|(\spadesuit)| \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{\infty} a_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{\infty} b_{i+n}^2}$$

さらに、gは2乗可積分関数なので、

$$\lim_{n \to \infty} \sum_{i=1}^{\infty} b_{i+n}^2 = 0$$

よって、 $\sqrt{\sum_{i=1}^\infty a_i^2}$ は、f が 2 乗可積分関数なので有限の値になることを考慮すると、

$$\lim_{n\to\infty} |(\spadesuit)| = 0$$

となり、混合性が示された。(終) また、ほかの古典直交関数系においても同様に 混合性を示すことができる。

(応用例)

電磁気学の多重極展開において、原点に点電荷qがある時、これは 2^i (i=1,2,...) 重極テンソルは0になる。このことを利用して、以下のような電荷分布 $\rho_n(\mathbf{r})$ を考える。(dは正の実数で、距離の次元を持つ)

$$\rho_0 = q\delta(\mathbf{r})$$

$$\rho_{n+1} = \rho_n(\mathbf{r} - \frac{d}{2}\mathbf{e}_x) - \rho_n(\mathbf{r} + \frac{d}{2}\mathbf{e}_x)$$

を考えると、 $\rho_n(\mathbf{r})$ は、点電荷がn 個あり、 \mathbf{x} 軸上に間隔d で等間隔に、右からk 番目の電荷が $(-1)^k{}_nC_kq$ となる電荷分布を表す。しかも、電荷分布 $\rho_n(\mathbf{r})$ は、その作り方から第 $2^i(i \neq n)$ 重極モーメントが0 で、第 2^n 重極モーメントが1 になる。このことからすると、Legendre 多項式は、実は1 次元ランダムウォークと何らかの関係性があり、電磁気学、あるいはより一般的に Laplace 方程式の解に関して興味深い事実がわかるのではないかと推測する。

謝辞 初の学会発表であった筆者である杉本に 学会についてご教示された筆者の研究室の後藤 振一郎博士、津田宏史氏に感謝する。

- [1] 十時東生, 復刊 エルゴード理論入門, 共立出版, 2009
- [2] アーノルド・アベズ, 古典力学のエルゴー ド問題 [POD 版], 吉岡書店, 2000
- [3] 渡部隆一, 宮崎浩, 遠藤静男, 改訂 工科 の数学 複素関数, 培風館, 2000
- [4] 津村浩二, 2018 年度前期電磁気学演習 2 第 5 回問題, 2018 年 4 月 26 日
- [5] Ken Umeno, SNR analysis for orthogonal chaotic spreading sequences, Nonlinear Analysis, Vol.47 (2001)
- [6] R. L. Adler, T. J. Rivlin, Ergodic and Mixing Properties of Chebyshev Polynomials, Proceedings of the American Mathematical Society, Vol. 15, (1964)

倒立バネ振り子モデルによるヒトの歩行・走行・転倒の分岐

森田英俊,青井伸也,土屋和雄,國府寛司 京都大学

e-mail: hmorita@math.kyoto-u.ac.jp

1 背景

ヒトはゆっくりと進むときは歩き,速く進むときは走る.そしてその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,実験により示されている[1].力学系の観点からは,この結果は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られよう.

二足による歩行と走行にあたる挙動を示す 比較的簡単なモデルとして,質点が(脚を模し た)最大二本のバネに支えられた倒立バネ振り 子(Spring Loaded Inverted Pendulum; SLIP) モデルがある[2] (走行だけについては最大一 本のものがある [3, 4]). これは足の接地状況に 応じてバネの本数が変化してダイナミクスが切 り換わる,ハイブリッド力学系である.歩行に あたる安定周期軌道と走行にあたる安定周期軌 道が得られる.これらは,全エネルギーを除い て,モデルのパラメーターが同じ値で共存し得 るのだが,各々のベイシンの間には転倒を示す 領域が横たわっている.そのため,いわゆる従 来のヒステリシス――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 S字に繋がれる—— とは異なる, アトラクター の共存を伴う分岐の構造があると考えられる.

本研究の目的はこの構造を探ることである. ただし,上記のモデルは比較的簡単であるとは 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, さらに単純化したモデ ルからこの分岐の解析を進めてゆく.前回[5] 我々は, Hopf 分岐の標準形と鉛直方向の放物 運動とのハイブリッド力学系モデルにおいて, S字のものとは異なる,新しい共存を伴う分岐 を発見し、その解析を行った、また、このモデ ルに類似したニュートン力学に従う物理系とし て,鉛直方向の倒立バネ質点モデルにおいても, 同様の構造が見られることが分かった.今回は, これをより歩行・走行および転倒に対応させる べく,この物理系を鉛直方向だけでなく水平方 向を含む二次元に拡張した,最大一本のSLIP モデルを考察する.

2 モデル

水平方向にx軸を,鉛直上向きにy軸をとる。ヒトの質量中心にあたる質量mの質点はxy平面内を動くものとする。脚にあたるバネの支点(足にあたる)が接地しているときの力学系((I) STANCE)と接地していないときの力学系((II) FLIGHT)の二つが,ある条件で切り換わるハイブリッド力学系である(図1).

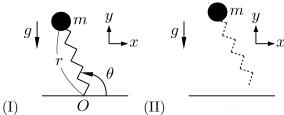


図 $^{'}$ 1. モデルの概念図 . $\dot{\mathbf{E}}$ $\dot{\mathbf{M}}'$ (\mathbf{I}) **STANCE** , 右が (\mathbf{II}) **FLIGHT** .

(I) バネの支点を固定しO とする.質点の位置を O を原点とした極座標 (r,θ) で表す.脚の長さにあたる r は,バネの力と重力を受けてニュートンの運動方程式に従って変化する.ただし θ は一定の角速度 $-\Omega$ で変化するよう制御される.発展方程式は,

$$m\ddot{r} = -k(r - l_0) - 2m\gamma\dot{r} + I(t, r)$$
$$+ mr\Omega^2 - mg\sin\theta \qquad (1a)$$
$$\dot{\theta} = -\Omega \qquad (1b)$$

第1式の右辺第1項はバネの弾性力,第2項はバネの減衰力,第4項は遠心力,第5項は重力の動径成分である.第3項は踏み込みにあたる撃力で,rが極小のときに与えられ,大きさはその極小値に依存する:

$$I(t,r) = mV(r)\delta(t - t_{\text{bottom}}) \tag{2}$$

ここで,V(r)として特に次の形を考える:

$$V(r) = -a \tanh\left(\frac{r - r_0}{\lambda}\right), \ r_0 = \frac{l_0 - 1}{1 - \Omega^2}$$
 (3)

ただし, r_0 は $\Omega=0$ の場合の弾性力と重力の釣り合いの位置,すなわち $(r,\dot{r},\theta)=(r_0,0,\pi/2)$ がその場合の(1) 式の平衡点である.

$({ m II})$ 質点は重力のみを受けて放物運動する:

$$m\ddot{y} = -mg$$

(I) から (II) への切り換え (離地) 条件は $, \theta$ がある角度 β に達する前に (後述) ,バネのカー $k(r-l_0)-2m\gamma\dot{r}$ が正から 0 になるときである . (II) から (I) への切り換え (接地) 条件は ,y が上から $l_0\sin\alpha$ になったときである;ただし α は接地時の θ である (接地角) .この二つの切り換えが交互に繰り返されることが走行 (RUN) にあたる.ただし,接地条件が実現するためには,放物運動の頂点が $l_0\sin\alpha$ より大きい必要があることに注意する.この条件が満たされない場合,(II) のまま質点は落下し続ける;これは転倒 (FALL) にあたる.

一方,(I) で(II) への切り替え条件が満たされないまま θ がある角度 β に達したときは,原点O が質点の前方に移動する.これは接地した脚が左から右(あるいは逆)へと変化したことにあたる.この原点の移動が繰り返されることが歩行(WALK)にあたる.このようにして一本のSLIP で二足歩行をモデル化する.

3 結果

(I) と(II) との切り換えを交互に繰り返す極限周期軌道,および(I)でバネの支点の移動を繰り返す極限周期軌道が得られた.すなわち,このモデルにおいて,それぞれ走行と歩行により実際に前方に進むことに成功した.

これらの分岐を見ると,例えば撃力のプロファイルを司るパラメーター λ を変えると,歩行のみから,歩行と走行との共存,そして走行のみへと分岐する(図 2).また,この歩行のベイシンと走行のベイシンとの間には,転倒領域が存在する(図 3).これは前回までに鉛直方向一次元のモデルで示した(二つのアトラクターをS字に繋いだものとは異なる)新しい分岐と同様なものになっている.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP15KT0015 の 助成を受けたものである.

参考文献

[1] F. J. DIEDRICH AND W. H. WAR-REN JR., Why change gaits? dynamics of the walk-run transition., J. Exp. Psychol.: Human Perception and Performance, 21 (1995), pp. 183–202.

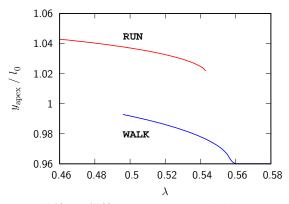


図 2. 分岐図 . 縦軸の $y_{\rm apex}$ はアトラクターの y の最大値 . $l_0=25,~\gamma=0.3,~\Omega=0.007,~a=2.5,~\alpha=91$ deg, $\beta=89$ deg , ただし時間の単位に $\sqrt{m/k}$, 長さの単位に mg/k を用いて無次元化してある .

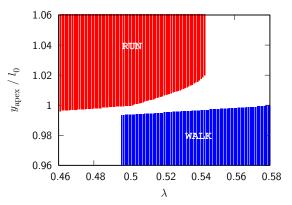


図 3. ベイシンの $\dot{r}=0,\;\theta=\alpha,\;r>r_0$ における断面を , 様々な λ についてスキャンしたもの.ただし , 便宜上 , 最初の 1 回だけはバネの力 $-k(r-l_0)-2m\gamma\dot{r}$ が負でも接地しているとしている.白い部分が転倒領域.パラメーターは図 2 と同じ.

- [2] H. Geyer, A. Seyfarth, and R. Blickhan, Compliant leg behaviour explains basic dynamics of walking and running, Proc. Roy. Soc. B: Biological Sciences, 273 (2006), pp. 2861–2867.
- [3] R. BLICKHAN, The spring-mass model for running and hopping, J. Biomech., 22 (1989), pp. 1217–1227.
- [4] H. Geyer, A. Seyfarth, and R. Blickhan, Spring-mass running: simple approximate solution and application to gait stability, J. Theor. Biol., 232 (2005), pp. 315–328.
- [5] 森田英俊,青井伸也,土屋和雄,國府寛司「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」日本応用数理学会2017年年会.

レイリー・ベナール対流におけるラグランジュ的な流体輸送の解析

渡辺 昌仁1, 吉村 浩明2

- 1早稲田大学大学院基幹理工学研究科機械科学専攻
- ² 早稲田大学基幹理工学部機械科学·航空学科

e-mail: ¹m-watanabe_26494@asagi.waseda.jp, ²yoshimura@waseda.jp

1 はじめに

大気循環の予測や化学物質の効率的な攪拌技術の確立等の観点から、流体輸送のメカニズムを解明することは極めて重要な課題となっている。本研究では、摂動のあるレイリー・ベナール対流の近可積分モデルを用いて、相空間と対流のパラメータに関する大域的構造を解明することを目的として、力学系の理論に基づいてラグランジュ的な視点から流体輸送の解析を行う。

2 摂動を受けるレイリー・ベナール対流

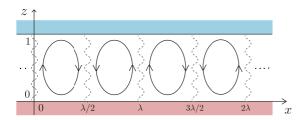


図 1. レイリー・ベナール対流の流線とセル

2次元の定常なレイリー・ベナール対流では、回転の向きが交互に異なるセルが並ぶ。いまセル境界付近で流体を混合させるために、以下の流れ関数 ψ を用いて、図1に示すように、定常な流速ベクトル場に周期的な摂動を与える[1].

$$\psi(x,z,t) = \frac{A}{k}\sin(\pi z)\sin\left[k\left\{x + \varepsilon\cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)\right\}\right]$$

T と ε は摂動の周期と振幅である。 x と z 軸方向の流速は $u=-\partial\psi/\partial z$, $w=\partial\psi/\partial x$ で与えられ,このモデルは流れ関数 ψ をハミルトニアンとする近可積分系となっている。

3 カオス領域の流体輸送

周期 T ごとにポアンカレ断面を xz 平面にとって,その時に1つのセルに現れるポアンカレ写像の様子を図2に示す.但し,パラメータを $A=\pi,k=\pi,T=1/\pi,\varepsilon=0.1$ とする.流体粒子がカオス的に運動して,不規則に点が分布する領域をカオス領域と呼び,流体粒子が準周期的に運動して,KAM 曲線上に点が分布する領域を規則領域と呼ぶ.また,積分時間を

 T_{int} とし、位置 x、時刻 $t=t_0$ における有限時間リアプノフ指数 (FTLE) の場 $\sigma_{t_0}^{T_{\text{int}}}(x)$ は次式で定義される [2]. 但し、写像 $\phi_{t_0}^t: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$; $x(t_0) \longmapsto x(t)$ は系のフローを表す.

$$\sigma_{t_0}^{T_{ ext{int}}}(oldsymbol{x}) = rac{1}{|T_{ ext{int}}|} \ln \left\| rac{d\phi_{t_0}^{t_0 + T_{ ext{int}}}(oldsymbol{x})}{doldsymbol{x}}
ight\|_2$$

図3と図4にFTLE場を示す。ここで、非自立系における安定・不安定多様体に対応するラグランジュ・コヒーレント構造 (LCS) は、FTLE場のリッジとして定義される [2]. よって図中の赤い曲線が LCS である。図2から図4より、積分時間 $T_{\rm int}$ が増加するとともに、LCSがカオス領域全体に広がることが確認できる。ここに、カオス的な流体輸送のメカニズムはローブダイナミクスに従うことが知られている [1].

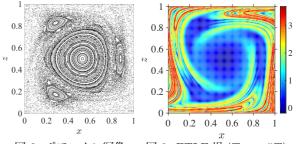


図 2. ポアンカレ写像 図 3. FTLE 場 $(T_{int} = 5T)$

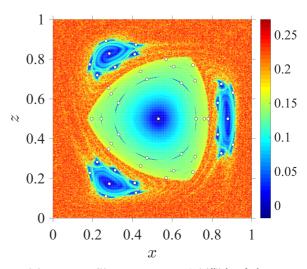
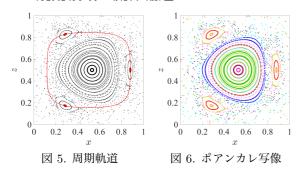


図 4. FTLE 場 $(T_{int} = 100T)$ と周期点 (白点)

4 規則領域の流体輸送



KAMトーラスの中心上に位置する流体粒子の軌道の様子をポアンカレ写像とともに図5に示す.次に、流体粒子に応じて色分けしたポアンカレ写像を図6に示す.図5と図6より、KAMトーラスの中心上の流体粒子はセル内を周期的に運動することが確認できる。また、その周りの規則領域は周期Tごとに、隣の規則領域が存在した場所に次々と移動すると考えられる。さらに詳しい調査により、規則領域は混合率の低い渦として運動することがわかった。また、図4のFTLE場における自点は周期点を意味する。これと図2より、規則領域がFTLEの低い領域として現れ、KAMトーラスの中心に周期点が存在することが確認できる。

5 周期軌道の ε パラメータ分岐

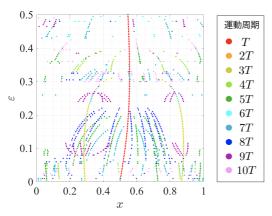


図 7. 周期点の座標 $(A = \pi, k = \pi, T = 1/\pi)$

図7に、縦軸に摂動の振幅 ε を、横軸に周期点の座標を取ったときの周期解の分岐を示す。点の色は運動周期を表す。さらに図8に、運動周期が9Tとなる周期解の分岐を示す。点の色は、元の位置に戻るまでに点(0.5,0.5)の周りを回る数を示す。図5と図6から、点(0.5,0.5)付近には運動周期Tの周期軌道が存在し、その点を中心とするトーラスが構成されていることがわかる。図7の赤い曲線は、 ε の変化に対してその周期軌道が不変であることを示している。

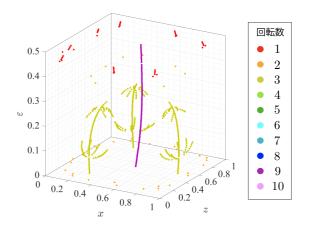


図 8. 周期点の座標 (運動周期 9T)

6 結言

数値解析により得られた知見を以下に述べる.

- 積分時間 T_{int} を十分に大きく取ることで、 LCS がほぼカオス領域全体に広がる様子 を確認した。
- 規則領域は、摂動の周期 T ごとに、別の 規則領域が存在した場所に次々と移動し ながら、混合率の低い渦としてセル内を 周期的に運動することを確認した.
- KAM トーラスの中心上には周期解が存在し、その解は摂動の振幅 ε をパラメータとして分岐することを見出した。

謝辞 本研究の一部は、公益財団法人吉田育英会マスター21(2017年度)、科研費基盤研究(B)(16KT0024)、科研費基盤研究(A)(17H01097)、早稲田大学特定課題研究(SR 2018K-195)、及び文部科学省「スーパーグローバル大学創成支援」による援助を受けている。ここに謝辞を表します。

- T. H. Solomon and J. P. Gollub, Chaotic particle transport in timedependent Rayleigh-Bénard convection, *Phys. Rev. A*, 38 (1988), 6280– 6286.
- [2] S. C. Shadden, F. Lekien and J. E. Marsden, Definition and properties of Lagrangian coherent structures from finite-time Lyapunov exponents in two-dimensional aperiodic flows, *Physica D*, 212 (2005), 271–304.

On a novel variational approach to robust finite time optimal control

藤本 健治1, 大倉 裕貴1

1 京都大学

e-mail: k.fujimoto@ieee.org

1 Introduction

For the better energy efficiency, many mechanical systems which have lightweight but complex structure are invented. The more complex the structure is, the more difficult to estimate the exact model parameters is. There are many researches about robust control for parameter uncertainty. In [1], an approach was suggested for robust time-optimal control for rest-to-rest maneuvering problem of flexible spacecraft with structural mode frequency uncertainty, and a "bang-off-bang" type input for robust fuel and time optimal control method was developed [2]. Another approaches, called zero vibration and derivative (ZVD) robust control and extra-insensitive (EI) robust control, were proposed for rest-to-rest motion of flexible structure[3]. The cost functions of these methods are the functions of time, so it is hard to evaluate the behavior of states explicitly by using these cost functions.

This paper proposes a new framework of LQ optimal control robust against parameter variation. By taking the variational system [4] which describes the variation with respect to the trajectory of the state, optimal control with a newly proposed cost function including the partial derivatives of the state enables one to suppress the effect of the parameter variation. The controllability of the variational effect is analyzed using the variational system description. But the full controllability of the variational effect reduces to a rather restrictive condition. It is relaxed by introducing a new notion of suppressability of the variational effect. This enables one to apply the proposed framework to a wider class of physical systems. Although a numerical example of an oscillatory system is exhibited in the presentation, it is omitted here for the reason of space.

2 Robust optimal control for parameter variation

2.1 Problem formulation

Consider a linear state space system depending on the parameter $\theta = [\theta_1, \theta_2, ..., \theta_p]^T$

$$\frac{\mathrm{d}x(t,\theta)}{\mathrm{d}t} = A(\theta)x(t,\theta) + B(\theta)u(t), \quad (1)$$

where $x(t,\theta) \in \mathbb{R}^n$ is the state, $u(t) \in \mathbb{R}^m$ is the input, $A(\theta) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ and $B(\theta) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ are matrices. A nominal parameter $\theta = \theta_{\text{nom}}$ is known but the true value of the model parameter θ is not exactly known.

The objectives of the paper is to generate the optimal trajectory of the input and state, which brings the response of the state with a small perturbation of the system parameter and that of the state with the nominal system parameter very close.

Consider the first-order Taylor series approximation of $x(t, \theta)$ around $\theta = \theta_{\text{nom}}$

$$x(t,\theta) \simeq x(t,\theta_{\text{nom}}) + \frac{\partial x}{\partial \theta} \cdot (\theta - \theta_{\text{nom}}).$$
 (2)

If the initial and the terminal value of the partial derivative $\partial x/\partial \theta$ are $\partial x(t_0)/\partial \theta = \partial x(t_f)/\partial \theta = 0$, then

$$x(t_0, \theta) = x(t_0, \theta_{\text{nom}}), \ x(t_f, \theta) = x(t_f, \theta_{\text{nom}}).$$
(3)

Thus, by considering the behavior of the state $\partial x/\partial \theta$ as well as the state x, the effects of the parameter variations can be reduced at the terminal state $x(t_f, \theta)$.

2.2 Expanded System

In order to evaluate the behavior of the state $\partial x/\partial \theta$, consider the variational system [4] with

respect to the model parameter θ

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} (\frac{\partial x}{\partial \theta_i}) &= \left. \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(A(\theta) x(t,\theta) + B(\theta) u(t) \right) \right|_{\theta = \theta_{\text{nom}}} \\ &= \left. \frac{\partial A(\theta)}{\partial \theta_i} x(t,\theta_{\text{nom}}) + A(\theta_{\text{nom}}) \frac{\partial x}{\partial \theta_i} \right. \\ &+ \left. \frac{\partial B(\theta)}{\partial \theta_i} u, \ (i = 1, 2, ..., p) \right. \end{split} \tag{4}$$

By combining the original system (1) with variational systems (4), we write

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x_{\mathrm{e}} = A_{\mathrm{e}}x_{\mathrm{e}} + B_{\mathrm{e}}u \tag{5}$$

where
$$x_{\rm e} = \left[x^{\rm T}, \frac{\partial x}{\partial \theta_1}^{\rm T}, \frac{\partial x}{\partial \theta_2}^{\rm T}, \cdots, \frac{\partial x}{\partial \theta_p}^{\rm T}\right]^{\rm T}$$
, and

$$A_{e} = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial A}{\partial \theta_{1}} & A & 0 & 0 \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial A}{\partial \theta_{p}} & 0 & 0 & A \end{bmatrix}, B_{e} = \begin{bmatrix} B \\ \frac{\partial B}{\partial \theta_{1}} \\ \vdots \\ \frac{\partial B}{\partial \theta_{p}} \end{bmatrix}.$$

We call the system in Eq. (5) as the expanded system in this paper. Here $x_e \in \mathbb{R}^{n(p+1)}$ is the expanded state, $A_e \in \mathbb{R}^{n(p+1) \times n(p+1)}$ and $B_e \in \mathbb{R}^{n(p+1) \times m}$ are matrices with appropriate dimensions. The objective is to find an optimal input u to minimize a cost function J

$$J = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} \left(x_e^{\mathrm{T}} Q x_e + u^{\mathrm{T}} R u \right) \mathrm{d}t, \qquad (6)$$

subject to boundary conditions

$$x(t_0, \theta) = x_0, \quad x(t_f, \theta) = x_f$$

$$\frac{\partial x(t_0)}{\partial \theta_i} = 0, \quad \frac{\partial x(t_f)}{\partial \theta_i} = 0$$
 (7)

where x_0 , x_f are the initial and the terminal values of the state, t_0 , t_f are the initial and the terminal time, $Q \in \mathbb{R}^{n(p+1)\times n(p+1)}$ is a positive semi-definite matrix, $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$ is a positive definite matrix.

The state $\partial x/\partial \theta_i$ of the expanded system describes the effect of parameter variation with respect to θ_i . By adding these partial derivative states to cost function J, we can evaluate parameter variation and derive a robust LQ optimal control law for parameter variation.

2.3 Design Procedure

Here we summarize the procedure of robust LQ optimal control design.

Procedure

step1: Derive the expanded system (5) from the original system (1).

step2: Define a cost function for the expanded system (5) $J = \frac{1}{2} \int (x_e^T Q x_e + u^T R u) dt$ and boundary conditions $x_e(t_0, \theta)$ and $x_e(t_f, \theta)$.

step3: Check the controllability of the expanded system (5). When the expanded system is not controllable, check the initial and terminal values of the uncontrollable subsystem $\bar{x}_{uc}(t_0)$, $\bar{x}_{uc}(t_f)$. Then focus on the controllable subsystem $\dot{\bar{x}}_c = \bar{A}_c \bar{x}_c + \bar{B}_c u$. Finally, define a cost function of the subsystem $J_c = \frac{1}{2} \int (\bar{x}_c^T \bar{Q} \bar{x}_c + u^T R_e u) dt$ and boundary conditions $\bar{x}_c(t_0)$, $\bar{x}_c(t_f)$.

To solve an LQ optimal control problem, many methods are proposed (for example, shooting method and its extension such as the generating function method).

- [1] Q. Liu and B. Wie, "Robust timeoptimal control of uncertain flexible spacecraft," *Journal of guidance, control, and dynamics*, vol. 5, no. 3, pp. 597–604, 1992.
- [2] B. Wie, R. Sinha, J. Sunkel, and K. Cox, "Robust fuel-and time-optimal control of uncertain flexible space structures," in *American Control Conference*, 1993, San Francisco, CA, USA, 1993, pp. 2475–2479.
- [3] L. Y. Pao and W. E. Singhose, "Robust minimum time control of flexible structures," *Automatica*, vol. 34, no. 2, pp. 229–236, 1998.
- [4] P. Crouch and A. van der Schaft, Variational an Hamiltonian Control Systems. Springer-Verlag, 1987.

車輪の質量不釣り合いに起因したパラメータ励振を伴う蛇行動の非線形解 析

徐 キン哲 1, 藪野 浩司 2

1 筑波大学,システム情報工学,知能機能システム

e-mail: s1720895@s.tsukuba.ac.jp

1 概要

鉄道車両の高速化に伴って、車両の安定性と 乗り心地が注目されている。車両の安定性に障 害になる問題の一つは自励振動の一種である蛇 行動の発生である。蛇行動が発生することによ り、乗り心地が悪くなることだけでなく、車輪 とレールにもダメージを与え、さらに脱線事故 が起こる可能性もある。

鉄道車輪軸に発生する蛇行動はレールと車輪の間に生じるクリープ力による自励振動現象と考えられている[1]. その一方,高速走行によって,車輪が正円になれないという報告さなされており[2],そこで偏心量が存在するため,車輪不釣り合いが生じる. そして,車輪の質量不釣り合いが存在する時,車両走行によって運動方程式のパラメータが周期的に変化することが明らかにされている. この場合,車輪軸は,自励振動と係数励振とを同時に生じる[3]. これまでの研究は,線形解析にとどまっており,応答振幅の大きさが明らかにされていない.

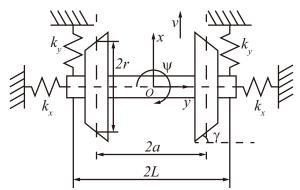
蛇行動現象の理論解析には、2自由度を持つ一輪軸台車モデルが広く使われている。そこで、本研究では、一輪軸台車モデルについて、非線形解析を行って係数励振が発生する時の応答振幅を明らかにする。

2 解析モデルと運動方程式

2.1 運動方程式

一輪軸台車が走行する時、横方向とヨーイン グ方向の2自由度を持っている.蛇行動現象の 理論解析で使う一輪軸台車のモデル図を図1に 示す.

横方向の変位をy, ヨーイング角度を ψ で表す。台車がx方向に速度vで走行すると仮定する。r、 γ およびa はそれぞれ静的平衡状態における中立位置の車輪回転半径、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。 k_x 、 k_y およびL はx 方向とy 方向のばね定数,およびばねつける点か



☑ 1. Fig.1 Model of single railway wheelset.

ら車輪軸中心までの距離である.

モデルを解析して,運動方程式は以下のよう に示す.

$$m\ddot{y} = -2k_x y - \frac{2f_{22}}{v}\dot{y} + 2f_{22}\psi \tag{1}$$

$$I_z \ddot{\psi} = -\frac{2f_{11}a^2}{v} \dot{\psi} - \frac{2f_{11}a\gamma}{r} y - 2k_x L^2 \psi \quad (2$$

ここで、パラメータが以下の通りである.

m 車輪軸装置の質量

 I_z 回転慣性モーメント

 f_{11} x 方向のクリープ係数

 f_{22} y 方向のクリープ係数

2.2 周期的な荷重変動を考慮した運動方 程式

車輪が摩耗によって正円ではなくなるため, 輪軸周りの質量不釣り合いが存在し,荷重が周 期的に変化していると考えられる.この影響を 考えると,荷重の周期変化は式(3)のように せる[4].

$$Q(t) = \bar{Q} + me\Omega^2 \cos \Omega t$$
$$= \bar{Q}(1 + \frac{me\Omega^2}{\bar{Q}} \cos \Omega t)$$
(3)

ここで,

Q レールが受ける荷重

Q 中立位置でレールが受ける荷重

e 車輪の質量不釣り合いによる偏心量

Ω 車輪回転する時の角速度

車輪とレールの接触点の力学関係によって、接触点の法線力が荷重とともに周期的に変化する. Kalker の理論により、クリープ係数と接触点の法線力の間に比例関係が成り立つと仮定すると [5]、質量不釣り合いが存在する場合のクリープ係数が式(4)のようにせる.

$$f_{ii}(t) = \overline{f}_{ii} \left(1 + \frac{me\Omega^2}{\overline{Q}} \cos \Omega t\right)^{\frac{2}{3}}$$
 (4)

 f_{ii} クリープ係数, i = 1, 2 \bar{f}_{ii} 中立位置のクリープ係数, i = 1, 2

周期的に変化しているクリープ係数を元の運動方程式(1)と(2)に代入すると,周期的に変動する係数をもった項が運動方程式に現れる.テーラー展開を用い,代表長さをa,代表時間をTにとると, y^* と ψ の無次元運動方程式は:

$$\ddot{y}^* + (\frac{d_{11}}{v^*} + d_{12}v^* \cos \frac{v^*}{r^*}t^*)\dot{y}^* + y^* - (k_{13} + k_{14}v^{*2} \cos \frac{v^*}{r^*}t^*)\psi^* = 0$$
 (5)

$$\ddot{\psi}^* + (\frac{d_{21}}{v^*} + d_{22}v^* \cos \frac{v^*}{r^*} t^*) \dot{\psi}^*$$

$$+ (k_{21} + k_{22}v^{*2} \cos \frac{v^*}{r^*} t^*) y^* + k_{23}\psi^* = 0 \quad (6)$$

のように得られる. ここで, [*] は無次元量を表す, v^* は無次元走行速度を表している.

無次元パラメータは以下のようにおく.

$$\begin{split} d_{11} &= k_{13} = \frac{\bar{f_{22}}}{ak_y}, d_{12} = k_{14} = \frac{4\bar{f_{22}}e^*}{3\bar{Q}r^{*2}}, \\ d_{21} &= \frac{\bar{f_{11}}ma}{I_zk_y}, d_{22} = \frac{4\bar{f_{11}}ma^2e^*}{3\bar{Q}I_zr^{*2}}, \\ k_{21} &= \frac{\bar{f_{11}}ma\gamma}{I_zk_yr^*}, k_{22} = \frac{4\bar{f_{11}}ma^2e^*\gamma}{3\bar{Q}I_zr^{*2}}, k_{23} = \frac{mL^2k_x}{I_zk_y} \end{split}$$

この式によって、一輪軸台車モデルの数理モデルが立てる.

3 非線形解析

運動方程式の非線形性を考慮すると,無次元蛇行動臨界速度近傍で,非線形解析を行う.そのため,無次元蛇行動臨界速度 v_c^* と微小パラメータ ε を用いる.

$$v^* = v_c^* (1 + \varepsilon) \tag{7}$$

式(5)、(6) で非線形項を考慮し, 行列形式で 以下のようにおく.

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} y \\ \psi \end{bmatrix} \tag{8}$$

$$\ddot{\boldsymbol{x}} + C\dot{\boldsymbol{x}} + K\boldsymbol{x} + N(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{9}$$

ここで、N(x) は非線形項、C と K は以下のようになる. [*] は簡単のため省略する。

$$C = \begin{bmatrix} \frac{d_{12}}{v} + d_{12}v\cos\frac{v}{r}t & 0\\ 0 & \frac{d_{21}}{v} + d_{22}v\cos\frac{v}{r}t \end{bmatrix},$$

$$K = \begin{bmatrix} 1 & -(k_{13} + k_{14}v^2\cos\frac{v}{r}t)\\ k_{21} + k_{22}v^2\cos\frac{v}{r}t & k_{23} \end{bmatrix}$$

$$(10)$$

多重尺度法を使って、パラメータ励振につい て非線形解析を行う. 詳しい解析内容は当日発 表する.

4 結言

本研究では、車輪質量不釣り合いによるパラメータの周期変動を考慮し、蛇行動の運動方程式に係数励振項が生じるを示した. 運動方程式について、非線形解析を行い、係数励振が発生する時の蛇行動の応答振幅を明らかにした.

- [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] Popp, K., Parametric Excitation of a Wheelset, ZAMM · Z. angew. Math. Mech., Vol.77, Issue. S1(1997), 269– 270.
- [3] 石田幸男, 井上剛志, 機械振動工学, 培風館, 2008.
- [4] 安藝雅彦, 輪軸質量不釣り合いによる係 数励振特性の解析, 第 15 回「運動と振 動の制御」シンポジウム 講演論文集 (2017).
- [5] Popp,K., Schiehlen, W., Fahrzeugdynamik, Teubner Verlag, Stuttgart 1993.

通信回避アルゴリズム付き共役勾配法の収束改善

松元 朗 1, 藤田 宜久 2, 伊東 拓 3, 生野 壮一郎 1

1 東京工科大学, 2 函館工業高等専門学校, 3 日本大学

e-mail : c0115306ab@edu.teu.ac.jp

1 はじめに

共役勾配法は並列化が容易である一方,単純に並列化すると,反復毎に並列化した内積演算における集団通信が必要となってしまう.大規模な並列環境では,集団通信は並列化効率のボトルネックとなり,高速化の妨げとなる.共役勾配法の並列化において,内積による集団通信を回避する手法はいくつか提案されている.しかしながら,提案された手法の多くでは,数値的に不安定となる,計算量が増加するといった問題が未解決のままである.

本研究の目的は、関連手法の中で比較的スカラー計算量の少ない、k段飛ばし共役勾配法の収束性能を改善することである. 現在いくつかの改善手法について研究を進めているが、本稿では、その中の1つの改善を施した結果を示す.

2 k 段飛ばし共役勾配法

k 段飛ばし共役勾配法では,内積を 1 度計算した後,その結果を利用し k+1 回の反復をスカラー計算のみで行う [1].

k+1 回の反復におけるスカラー計算量は $O(k^2)$ であり、Chronopoulos 等が提案した s-Step 法 [2] の $O(k^4)$,Toledo の提案した KBCG 法 [3] の $O(k^3)$ と比較するとスカラー計算量は 最も少ない.また共役勾配法やその派生では計算機誤差が問題となることが多々あるが,当該手法は比較的単純であるため,数学的に等価な計算順序の変更が容易であるという利点もある.

3 改善手法

本稿で扱う対象問題は以下の通りである.係数行列 A は対角要素が 25,副対角要素が -1 である 100 元の三重対角行列であり,右辺ベクトルは全ての要素が 1,初期解ベクトルは零ベクトルである.収束判定子は 10^{-9} とした.また,次の記号を用いることとする. $\gamma_i=(r_i,r_i)$, $\delta_{i,j}=(r_i,A^jr_i)$, $\eta_{i,j}=(r_i,A^jp_i)$, $\zeta_{i,j}=(p_i,A^jp_i)$.但し,添字 i は i 回目の反復における各値を示し,添字 j は k 段飛ばしの計算内の各値 $(j=1,2,\cdots,k)$ を示す.

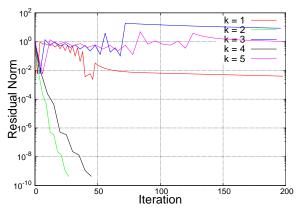


図 1. 従来の k 段飛ばし CG 法の残差履歴

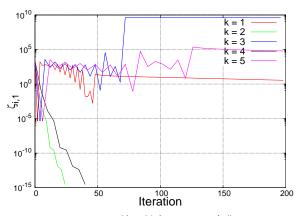


図 2.k の値に対する $\zeta_{i,1}$ の変化

k 段飛ばし共役勾配法では,内積計算の代わりにスカラー値である $\delta_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $\zeta_{i,j}$ の漸化式で置き換え,集団通信を回避する.即ち,内積計算を飛ばす分だけ Kyrlov 基底を先に計算しておくのである.具体的な更新式を以下に示す.

$$\alpha_i = \gamma_i / \zeta_{i,1}, \ \beta_i = \alpha_i \zeta_{i,2} / \zeta_{i,1} - 1 \tag{1}$$

$$\gamma_{i+1} = \beta_i \gamma_i \tag{2}$$

$$\delta_{i+1,j} = \delta_{i,j} - 2\alpha_i \eta_{i,j+1} + \alpha^2 \zeta_{i,j+2} \tag{3}$$

$$\eta_{i+1,j} = \delta_{i+1,j} + \beta_i \eta_{i,j+1} - \alpha_i \beta_i \zeta_{i,j+1} \tag{4}$$

$$\zeta_{i+1,j} = \eta_{i+1,j} + \beta_i \eta_{i,j} + \beta^2 \zeta_{i,j} - \alpha_i \beta_i \zeta_{i,j+1}$$
(5)

図 1 に,従来の k 段飛ばし共役勾配法の残差履歴を示す.同図よりわかるように,k の増加とともに収束が悪化する.そこで,本研究では (5) で計算される $\zeta_{i,1}$ の値が残差ベクトル r_i と連動していることに着目した.図 2 に,k の値

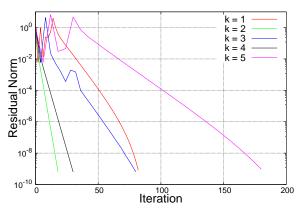


図 3. 改良版 k 段飛ばし CG 法の残差履歴

に対する $\zeta_{i,1}$ の変化を示す。図1, 2よりわかるように, $\zeta_{i,1}$ の値が減少するとともに,残差も同様に収束している.一方で, $\zeta_{i,1}$ の値が増加,発散すると残差も発散していき,規定の反復回数では収束しないことがわかる.本稿では $\zeta_{i,1}$ に関する図だけを示したが, $\delta_{i,1}$ と $\eta_{i,1}$ の履歴に関しても同様の特徴が得られた.

(3), (4), (5) からわかるように,これら3つの係数はそれぞれ互いに従属の関係にあり,k段飛ばし共役勾配法においては,解ベクトルや残差ベクトルの更新にも影響を与えることとなる.即ち, $\delta_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $\zeta_{i,j}$ のいずれかが不安定であると,収束に影響を与えている可能性があると云える.言い換えれば, $\delta_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $\zeta_{i,j}$ の値の急激な変化を抑制できれば,反復の安定性を高められる可能性がある.

そこで本稿では、更新の際に急激な変化を抑制するために係数 ω_{δ} , ω_{η} , ω_{ζ} を (3), (4), (5) の左辺に乗ずる方法を採用した、但し,

$$0 < \omega_{\delta}, \ \omega_{\eta}, \ \omega_{\zeta} < 1$$

である.

4 改善結果

改善後の残差の履歴を図3に示す.改善手法にて新しく導入した係数については,本稿では実験的に定め, $\omega_\delta = \omega_\eta = 0.1$, $\omega_\zeta = 1.0$ とした.図1,図3よりわかるように,反復初期の不安定さはまだ少し残っているものの,収束しなかったk段飛ばしの場合でも収束するように改善できた.また,改善後のk段飛ばし共役勾配法における,kの値に対する $\zeta_{i,1}$ の変化を図4に示す. $\zeta_{i,1}$ の値が,残差ベクトル \mathbf{r}_i と連動して減少していることが分かる.以上の理由より,本研究で提案した手法はk段飛ばし共役勾

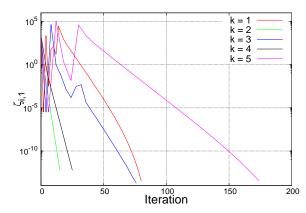


図 4. 改良版 k 段飛ばし CG 法における k の値に対する $\zeta_{i,1}$ の変化

配法の収束改善に有効であると云える.

5 おわりに

本稿では,従来のk段飛ばし共役勾配法の係数の更新式を変更することによって,収束が改善される場合があることを示した.新しく導入した係数は,1つの問題に特化する形で定数値として定めたが,今後はこれらの係数を動的に求める方法について調査する必要がある.

また,今後幅広い問題に適用するためには,新しく導入した係数に設定する値についての,数学的な検証も同様に必要である.

射辞 .

本研究成果は筑波大学計算科学研究センターの学際共同利用プロジェクト(COMA (PACS-IX) System)を利用して得られたものです.

- [1] 本谷 徹,須田 礼二, k 段飛ばし共役勾 配法:通信を回避することで大規模並列 計算で有効な対称正定値疎行列連立 1 次 方程式の反復解法,情報処理学会研究報 告,Vol.2012-HPC-133 No.30.
- [2] A.T.Chronopoulos, C.W.Gear, sstep iterative methods for symmetric linear systems, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.25(1989), pp.153-168.
- [3] S.A.Toledo, Quantative Performance Modeling of Scientific Computations and Creating Locality in Numerical Algorithms, PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology(1995).

ポリゴンモデルから局所的陰関数曲面モデルへの変換

谷 周世 1 ,仲田 晋 2 ,風間 正喜 3 ,諏訪 多聞 3 1 立命館大学大学院情報理工学研究科, 2 立命館大学情報理工学部, 3 富士通 e-mail: is0221vr@ed.ritsumei.ac.jp

1 序論

本研究の目的は、1つの多面体として表現されたポリゴンモデルを、形状表面付近のみを定義域とする陰関数曲面モデルに変換することである。多面体からの距離が定数 d_0 以下の領域を $\Omega_{\rm band}$ としたとき、陰関数曲面 f(x)=0 は条件「関数 f(x) の定義域は $\Omega_{\rm band}$ を内包する。」「関数 f(x) は局所的に多項式の集合として表現される。」を満たすこととする。図1はポリゴンモデルを陰関数曲面 f(x)=0 で近似した例である。

陰関数曲面モデルを生成する研究は様々あり、詳しくは文献[1]を参照してほしい. その中で、高速レンダリングに適した陰関数曲面モデルを生成する手法として、関数 f(x) を区分的多項式として生成する手法が開発された[2]. この手法は関数値評価を高速で行うため、障害物への距離を推定する処理が速く、粒子法の流体シミュレーションに利用されている[3]. しかし、区分的多項式型の陰関数曲面モデルはデータ量が膨大になるため、複雑なモデルの生成は困難であった.

本稿で提案する局所的陰関数曲面モデルであれば、関数を保持する場所は形状表面付近のみに限定しているため、小さな区分ごとに分割した場合でもデータ量は大きくならない。図2の右図のように、定義域が形状表面付近に限定されるため、用途の制約は受けるが、形状表面付近で衝突判定が行えるため、粒子法の流体シミュレーションには利用しても問題ない。

2 局所的陰関数曲面モデル

入力であるポリゴンモデルを含むバウンディングボックスを $L \times M \times N$ 個の正規格子で分割する. このうち、多面体の距離が d_0 以下である領域

$$\Omega_{\text{band}} = \{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \mid |d(\boldsymbol{x})| \le d_0 \}$$

と共通部分を持つセルを関数 f(x) の定義域とする.ここで、d(x) は多面体から点 $x \in \mathbb{R}^3$ への符号付距離場(内側が正、外側が負)であ

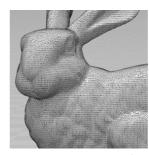
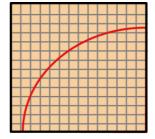




図 1. ポリゴンモデル(左, Stanford 3D Scanning Repository)と陰関数曲面モデルf(x) = 0 (右)



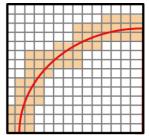


図2. 従来法(左)と局所的陰関数曲面(右)

る. これにより,条件「関数 f(x) の定義域は $\Omega_{\rm band}$ を内包する.」を保証しつつ,距離の大きい領域を削減することができる.

定義域として採用されたセルのインデックス集合を $I = \{(i,j,k)\}$ としたとき,各セル $(i,j,k) \in I$ における関数 $f_{ijk}(x)$ を多項式として生成する必要がある.ここでの多項式は[2]と同様に

$$f_{ijk}(\mathbf{x}) = a_{222}x^2y^2z^2 + a_{221}x^2y^2z + \dots + a_{100}x + a_{000}$$

とする. すなわち, 27個の係数 a_{000} , … a_{222} を決める必要がある. そのため, 我々は各セルにおいて 27個の係数を未知数とする補間条件を 27箇所設定し,係数を決定することとする. 具体的には,各セルの直方体領域の,8個の頂点,12個の辺の中点,6個の面の中点,1個の直方体の重心の合計 27箇所においてポリゴンからの符号付距離場 $d(\mathbf{x})$ を求め,その 27箇所の補間条件 $f_{ijk}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x})$ で構成される連

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集(2018.9.3·5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会









(a) 入力ポリゴンモデル

(b) 50^3

(c) 300^3

(d) 1000^3

図3. 本手法による局所的陰関数曲面モデルの生成結果

立1次方程式を解くことで27個の係数を得る. 以上より,条件「関数 f(x) は局所的に多項式の集合として表現される.」が保証される. セルの境界において f(x) の滑らかさは満たされないが,連続性は満たされる.

本研究で提案した局所的陰関数曲面モデル の実験結果を図3、表1に示す. 図3では、Asian Dragon (Stanford 3D Scanning Repository) のモデ ルを使用し,(a) は入力のポリゴンモデル,(b), (c), (d) は分割数を 50^3 , 300^3 , 1000^3 として 生成した局所的陰関数曲面モデルである. 局所 的陰関数曲面モデルでは分割数を高く生成で きるため、細かの部分も生成できていることが わかる. 表1では、従来法と局所的陰関数曲面 モデルでの生成したデータ量を示している. 従 来法では、分割数 10003 の陰関数曲面モデル を生成するためには、膨大な量のメモリが必要 となっていた. しかし, 局所的陰関数曲面モデ ルでは、従来法に対してデータ量を 99%以下に 抑えることが確認できた. つまり、曲面の存在 しないセルが約9%を占めており、本手法の形 状の表面付近のみを定義域とすることが、デー タ削減に有効的であることも確認できた.

3 結論

本研究では形状表面付近のみを定義域とする局所的陰関数曲面モデルに変換する手法を提案した.局所的陰関数曲面モデルの定義域の局所化により、大幅にデータ量を削減することに成功し、少ないデータ量で高解像度の陰関数曲面モデルへの変換を可能とした.

今後の展望として、本手法を利用して陰関数 曲面を生成した場合、セルごとに独立で補間処 理を行っているため、曲面が滑らかではないと いう欠点がある. 局所的な関数値だけで曲面を 滑らかにする補間処理ができれば、より実用的 な手法となると考えられる.

表 1. 既存手法と提案手法による実験結果

Asian Dragon					
贫	É来法	局所的陰関数曲面			
分割数	データ量	分割数	データ量		
50 ³	0.013[GB]	50^{3}	0.002[GB]		
300^{3}	2.916[GB]	300^{3}	0.055[GB]		
1000 ³	108[GB]	1000^{3}	0.649[GB]		

- [1] M. Berger, J. A. Levine, L. G. Nonato, G. Taubin and C. T. Silva, A Benchmark for Surface Reconstruction, ACM Transactions on Graphics, Vol. 32, No. 2, Article No. 20 (2013).
- [2] T. Itoh and S. Nakata, Fast Generation of Smooth Implicit Surface Based on Piecewise Polynomial, Computer Modeling in Engineering & Sciences, Vol. 107, No. 3 (2015), 187-199.
- [3] Y. Kanetsuki and S. Nakata, Acceleration of Particle Based Fluid Simulation with Adhesion Boundary Conditions Using GPU, Asiasim 2017: Modeling, Design and Simulation of Systems (2017), 337-348.

バーチャルリアリティ空間における核融合炉の組み立て

大谷 寬明^{1,2},宮澤 順一^{1,2},高丸 尚教³,嘉無木 昇³,石黒 静児^{1,2} ¹核融合科学研究所,²総合研究大学院大学,³中部大学

e-mail: ohtani.hiroaki@nifs.ac.jp

1 研究の背景

核融合科学研究所では、ヘリカル型核融合工 ネルギー原型炉に向けての詳細設計と核融合 炉の製作に必要な工学研究を行っている。原型 炉設計では建設時の組み立て工程や稼働開始 後のメンテナンス手順などを考慮する必要が ある。例えば、ブランケットなどの炉内部品を 取り出す時にほかの部品と干渉するかどうか をあらかじめ考慮しながら設計やメンテナン ス手順を検討する。この時、部品を取り外した り取り付けたり、移動させたりするロボットア ームの設計及びその動かす手順も検討してお り、原型炉とそのまわりのメンテナンス作業を 行う場所をまとめた総合的な設計を研究して いる。これらの設計は設計ソフトウェアを使っ て、通常のパソコンのディスプレイのような2 次元ディスプレイに映しながら行われている。 しかし、3次元の情報を2次元に投影するため 奥行き情報が失われてしまい、部品の立体構造 や3次元的な位置関係の把握は困難である。画 面上で部品を回転させることで立体構造を把 握する方法もあるが、回転させながら、ロボッ トアームのような立体構造物の動きを決める のは簡単ではない。

2 バーチャルリアリティ装置を使った設計データの表示

本研究では、没入型バーチャルリアリティ (VR)装置[1]CompleXcope を使って、ロボットアームを含めた原型炉設計の設計データ[2]を VR 空間に投影して[3]、炉内部品の位置関係やロボットアームの動きを、正確に3次元で確認できるシステムを構築した。

CompleXcope は縦3メートル×横3メートルのスクリーンを前左右床に配置して立体映像を投影している(図1)。そのため、4方向を囲まれた空間中にデーたが立体的に投影することで VR 空間を作り上げ、その中に自分自身が入って、あたかも目の前にモノが存在しているかのように感じることができる。自分自身が動いたり、コントローラーを操作したりすること

によって、視点をいろいろと変えることもできる。これまでの2次元ディスプレイを使った設計検討では原型炉を外部から眺めながら部品の位置や動きを確認していたが、本システムでは、設計データを VR 空間に表示して、自分自身が原型炉の中や傍らに立って部品の動きを眺めたり、歩いて視点を変えたりするなどして、部品の位置関係をあらゆる方向から確認することができる(図2)。この時、ロボットアームはあらかじめ設定した動きに合わせて VR 空間内で動かすこともできる。

CAD データの表示では旭エレクトロニクス社 製のソフトウェア VirDSE を用いている。



図 1. 原型炉 CAD データを CompleXcope に表示。

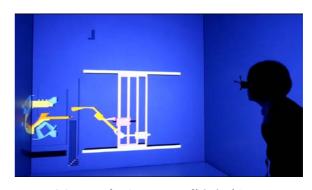


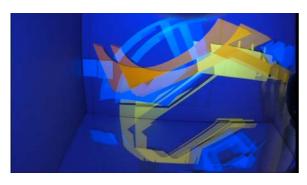
図2. ロボットアームの動きを確認。

3 部品をつかむ「手」と干渉判定

本システムでは、自分自身の「手」を VR 空

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

間に投影して、自分自身の手の動きと連動して動かすこともできる。この VR 空間中の仮想的な「手」で部品をつかんで動かしたりすることも可能である。さらに、図3のように干渉判定も行うことができる。図3では、仮想の「手」が部品(黄色)をつかんで移動させたところ(上図)、他の部品(上図では青色をしている)と干渉したため、その部品が赤色に変わっている(下図)。



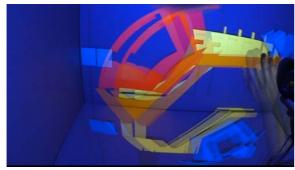


図3. 部品の干渉判定。仮想の「手」を使って部品(黄色)をつかみ、他の部品(青色)と干渉すると(上図)、 下図のように干渉した部品が赤く色が変わる。

4 まとめ

本研究では、没入型 VR 装置 CompleXcope を使ってヘリカル型核融合エネルギー原型炉のCAD データを可視化して、炉内部品の位置関係やロボットアームの動きを正確に把握し、部品同士の干渉、ロボットアームの動きやメンテナンス手順が適切かどうか等を、効率よく検討できるシステムを構築した。

しかし、本システムの VR 空間中の構造物の動きには、重力の効果、干渉時の機械振動、摺動での摩擦など物理的な要素が含まれていない。今後、これら物理的な効果や部品の材質を考慮したシミュレーション(構造解析や機構解析)も行い、これらの解析で得られた部品の軌

跡情報と VR 空間で投影してロボットアームの動きと部品の移動を連動させて表示し、VR 空間で物理に従う動きを確認できるようにする計画である。また、VR 技術は医療分野や社会科学の分野など様々な分野で研究開発が進められている。ゲーム業界を含め、様々な分野の研究者と協力して、核融合プラズマ・プラズマ物理研究における VR 装置を用いた可視化研究を推進していく予定である。

謝辞 本研究は核融合科学研究所一般共同研究(NIFS15KNTS037、NIFS18KNTS054)の支援の下で行われた。

- [1] C. Cruz-Neira et al: SIG-GRAPH' 93, (1993) 135-142.
- [2] J. Miyazawa et al: Plasma Fusion Res., 12 (2017), 1405017.
- [3] H. Ohtani et al: Proc. 36th JSST Ann. Int. Conf. Simulation Tech., (2017) 194.

果物の入った箱入りアッセンブリトラスコアの輸送に関する一考察

阿部 綾¹, 寺田 耕輔², 萩原 一郎¹

1明治大学,2奈良高専

e-mail: aya_abe@meiji.ac.jp

1 概要

今後、需要が見込まれる輸送形態として、イチゴのような高級志向の農産品の航空輸送やドローンによる配達といったものがある. そこで新しい梱包材として、再利用可能なことや緩衝材としての機能も兼ねることからATCP(Assembly Truss Core)を用いることにメリットが大きいと考えられる. 従来の梱包材と比してATCPの梱包材としての優位な機能について解析を行い、実用化について検討する.

2 研究の全容

本研究では、箱入りアッセンブリトラスコア (Box in Assembly Truss Core)によるドローン での物品輸送の有用性を示すひとつの方法と して、輸送対象物を四面体と八面体のハーフの 小箱に収め、それらを組立てたトラスコアパネ ル(ATCP)[1]を更に箱に詰めて緩衝材としての 優位性を持たせた形態(BATCP)で運ぶことを考 えている. ドローンでの輸送では荷物を落下さ せて届けることも想定されるが、その際にもど れだけこの緩衝材としての効果が機能するの かを検討する. まず、ドローンから荷物をある 高さで落とし、中身の傷み具合を観察し、その シミュレーションを実施し傷まないパッキン グにフィードバックする. また, 折紙で得られ るダンボール製のサスペンションについて,極 力避けたい周波数帯域を遮断するためのトポ ロジー最適化[2]を行う. 複数の固有周波数の大 幅な変更をするには、一般化固有値指標[3]の検 討が必要であり、それにより新たなメタマテリ アル折紙の創成につながることが期待される.

3 対象とする折紙モデル

四面体と八面体のハーフの展開図を図1に示す.フランジ角は45°とすると組立易さや材料コストの面から最も都合が良いとされる^[4]トラスコアに実際にイチゴを入れたもの及び箱に収納する形に空間充填して積み上げたものがそれぞれ図2,3となる.箱自体の積み重ね方に関しては図4のように縦積みと横積みとの2通りが想定される.

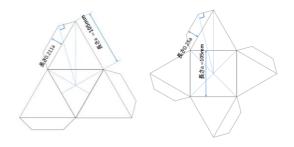


図1.正4面体と正8面体トラスコアの展開図



図2 イチゴを入れた各トラスコア



図3空間充填したトラスコア





図4箱に収納したもの(縦積みと横積み)

4 落下についての解析モデル

ATCP モデルを箱に詰めたいくつかのモデルを用意し、ある高さから落下させたときの衝撃について検討する。このとき、図5に示すようにパネルの段数や重ね方の異なるモデルごとに損傷の違いについても比較し、最も中身の損傷が出にくい詰め方について考察する

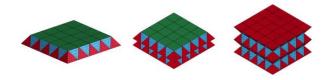


図5 解析モデル

5 一般化固有值指標

構造の固有振動数最適化問題を解いて、目標 の固有値に近づける既存の研究[3]において、式 (1) のような一般化固有値指標 λ*を用いるこ とで複数の固有振動数において, 現在の固有振 動数と目標とする固有振動数との差を最小に することにより、望ましい固有振動数を持つ構 造を設計することができるはずである. ここに $\lambda_{ni}(n_i = n_1, n_2, ..., n_m)$ は最適化の対象とする固 有値である. mは考慮する固有値の数である. また, $\omega_i(i=1,2,...,m)$ は重みで λ_0* と λ_{0i} (i = 1,2,...,m)は与えられたシフトパラメー タである.一般化固有値指標を用いれば, n, $\lambda_0 * と \lambda_{0i} (i = 1, 2, ..., m)$ の与え方によって, 目標とする複数の固有値が大幅に変わっても, 発散することなく固有値最適化問題が出来る とされている. 例えば, $n=0,\pm 2,...$ とし, $\lambda_{oi}(i=1,2,...,m)$ を与えられた目標固有値とす れば、Minimize A*によって、構造の固有値 $\lambda_{ni}(n_i = n_1, n_2, ..., n_m)$ と与えられた目標固有値 $\lambda_{oi}(i=1,2,...,m)$ との差の重み付き平均を最小 にすることができる.

λ∗=

$$\begin{cases} \lambda_0 * + \left(\frac{\sum_{i=1}^m \omega_i (\lambda_{ni} - \lambda_{0i})^n}{\sum_{i=1}^m \omega_i}\right)^n, & n = \pm 1, \pm 2, \dots; & n \neq 0 \\ \lambda_0 * + \exp(\sum_{i=1}^m \omega_i \ln|\lambda_{ni} - \lambda_{0i}|/\sum_{i=1}^m \omega_i), & n = 0 \end{cases}$$

$$(1)$$

6 結語

ドローンでの物品輸送について、落下の解析を行うこと、避けたい周波数帯域で伝達特性を低くするようなサスペンションのトポロジー最適化を行うことが当面の課題であり、シミュレーションによる解析でこれらの問題について今後取り組んでいく.

- [1] 寺田耕輔,佐藤秀敏,牧田哲暢,高橋徹,萩原一郎,組立式トラスコアパネルの開発,福島工業高等専門学校研究紀要第 55 号 (2014),pp. 1-5.
- [2] T. Torigaki, I. Hagiwara, Y. Kitagawa, M. Ueda, Z. D. Ma and N. Kikuchi, Development and Application of a Shape-Topology Optimization System Using a Homogenization Method, SAE International Congress and Exposition (1994-3月).
- [3] 馬正東, 菊池昇, 鄭, 萩原一郎, 振動低減 のための構造最適化手法の開発(第一報: ホモジェニゼーション方法を用いた構造 最適化理論), 日本機械学会論文集(C編), 59巻 562号(1993-6月), pp. 1730-1736.
- [4] 萩原一郎、寺田耕輔、コアパネル、特願 2017-166169 (2017年8月30日)

編み紙の数理 ~材料の伸びを考慮した曲面設計最適化~

堀川 由人1, 垂水 竜一2

1大阪大学工学研究科,2大阪大学基礎工学研究科

e-mail: horikawa@comec.mech.eng.osaka-u.ac.jp

1 概要

紙などの薄い材料から曲面形状を構成する際には、曲面を適当に分割してそれぞれの曲面片を平面から切り出す必要がある。この平面から曲面片を"切り出す"操作は、(a) 曲面を曲面片に分割する操作と、(b) 各曲面片を平面に展開する操作に分けられる。特に、この曲面を平面に展開する操作(b) は、曲面が可展面であれば自明だが、曲面が可展面でない場合には非自明な問題となる。先行研究 [1] では曲面を可展面に近似し、それを平面に展開するという手法に限られていたが、それでは材料の弾性的性質を十分に活かした設計が出来ない。

そこで本研究では、幾何的情報に加えて材料の弾性変形までも考慮した最適化を目的とする. 材料に発生する歪エネルギーは面内変形のみが寄与するものとし、曲面に関する等長変換、つまり面外方向への曲げはエネルギーを与えないものとしてモデルを扱う. このような面内変形のみを考慮する 2次元モデルを扱うためには、弾性体を 2次元 Riemann 多様体と見做して弾性論を定式化する必要がある. 以上を踏まえて、本講演ではまず Riemann 多様体上の弾性論の定式化 [2] を述べ、数値解析的に (b) の埋め込み写像を求めていく. なお、数値解析には IGA(Isogeometric Analysis)[3] を用いるため、埋め込まれた多様体は NURBS 多様体 [4] となる.

2 Riemann 多様体上の弾性論

M を d 次元多様体とし、弾性体の幾何的情報を持つとする。基準状態、現状態をそれぞれ時刻 0,t として、添字 $_{[0],[t]}$ で表す。例えば基準状態の弾性体は $M_{[t]}$ である。 $M_{[0]},M_{[t]}$ は微分同相とする。つまり、多様体としてこれらは同じであり、区別の必要の無い場合は単に M と書く。 $M_{[0]}$ と $M_{[t]}$ が異なるのはRiemann 計量 $g_{[0]},g_{[t]}$ であり、Riemann 多様体としては $(M_{[0]},g_{[0]}),(M_{[t]},g_{[t]})$ は全く別のものである。 \mathbb{R}^d 上での通常の弾性論では $g_{[0]},g_{[t]}$ はそれぞれ Euclid 計量として誘導される。

局所座標 $(x_{[0]}^i), (x_{[t]}^i)$ に関して、基準状態、現状態の Riemann 計量を

$$g_{[0]} = g_{[0]ij} dx_{[0]}^i dx_{[0]}^j \tag{1}$$

$$g_{[t]} = g_{[t]ij} dx_{[t]}^i dx_{[t]}^j$$
 (2)

のように局所表示する. 等方性を仮定すれば, 弾性係数テンソル場の局所座標表示は次のよう に書ける.

$$C = \left(\lambda g_{[0]}^{ij} g_{[0]}^{kl} + \mu \left(g_{[0]}^{ik} g_{[0]}^{jl} + g_{[0]}^{il} g_{[0]}^{jk} \right) \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{[0]}^{i}} \otimes \frac{\partial}{\partial x_{[0]}^{j}} \otimes \frac{\partial}{\partial x_{[0]}^{k}} \otimes \frac{\partial}{\partial x_{[0]}^{l}} \tag{3}$$

ここで λ, μ は Lamé 定数である. 歪エネルギー 密度 W は基準状態の体積素 $v_{[0]}$ を用いて局所 的に次のように書ける.

$$W = (\alpha A^2 + \beta B + \gamma A + \delta) v_{[0]}$$
 (4)

$$A = g_{[t]ij} \frac{\partial x_{[t]}^i}{\partial x_{[0]}^m} \frac{\partial x_{[t]}^j}{\partial x_{[0]}^n} g_{[0]}^{mn}$$
 (5)

$$B = g_{[t]ij} \frac{\partial x_{[t]}^{i}}{\partial x_{[0]}^{m}} \frac{\partial x_{[t]}^{j}}{\partial x_{[0]}^{n}} g_{[0]}^{mk} g_{[0]}^{nl} \frac{\partial x_{[t]}^{p}}{\partial x_{[0]}^{k}} \frac{\partial x_{[t]}^{q}}{\partial x_{[0]}^{l}} g_{[t]pq}$$

$$(6)$$

ただし定数に関して $\alpha=\frac{1}{8}\lambda,\beta=\frac{1}{4}\mu,\gamma=-\frac{1}{4}\left(\lambda d+2\mu\right),\delta=\frac{1}{8}d\left(\lambda d+2\mu\right)$ とおいた.この状況下で、歪エネルギー W は

$$W = \int_{M} \mathcal{W} \tag{7}$$

で定義される.

3 曲面の展開論

曲面形状を構成するための平面材料からの切り出しを考える上で、本来は平面を基準状態、曲面を現状態として問題を定式化するべきであるが、ここでは両者を入れ換え、曲面を基準状態、平面を現状態として問題を定式化する.これは曲面を基準状態とする方が計算が容易であり、変形が小さければこれらの定式化で歪エネルギーが大きく変わらないためである.

以降では、曲面片の 2次元 Euclid 空間へのはめ込みのうち、材料の変形として最も自然なものを考える。これは歪エネルギーWが極小となる変形として定式化される。外力は考えず、本質的なパラメータは Poisson 比のみとなる。この歪エネルギーは前節のように 2つの Riemann 計量から定まるのだが、 $g_{[0]}$ は曲面片の第一基本形式として誘導される Riemann 計量、 $g_{[t]}$ は埋め込みとして誘導される Euclid 計量として与えられる。なお、(a) の曲面分割において、各曲面片は正方形と微分同相になるように分割されているものとする。つまり、曲面片の座標は 1 枚あれば十分である。

3.1 弱形式定式化

歪エネルギーWが極小となるような埋め込み写像を求めるために、弱形式定式化を行う. 局所座標表示し、埋め込み先の座標を $x_{[0]}$ として変分法を適用すれば次式を得る.

$$\int_{M} g_{[t]ij} \frac{\partial w^{i}}{\partial x_{[0]}^{m}} \frac{\partial x_{[t]}^{j}}{\partial x_{[0]}^{n}} \left(2 \left(\alpha g_{[0]}^{mn} g_{[0]}^{kl} + \beta g_{[0]}^{mk} g_{[0]}^{nl} \right) \frac{\partial x_{[t]}^{p}}{\partial x_{[0]}^{k}} \frac{\partial x_{[t]}^{q}}{\partial x_{[0]}^{l}} g_{[t]pq} + \gamma g_{[0]}^{mn} \right) v_{[0]}$$

$$= 0$$
(8)

ここでwはテスト関数である.

3.2 離散化 (IGA)

埋め込み先の座標を $\tilde{x}^i_{[t]}=\xi^i_IN^I$ で表して離散化する. ここで N^I は B-spline 基底関数である. 関数列の添字は大文字とし, 同様に Einstein 規約を適用する. この状況下で, 歪エネルギー W の最小化問題は制御点の座標 $(\xi^i_I\in\mathbb{R})$ を求める問題に帰着される. つまり

$$A_{ijpq}^{IJPQ} = \int_{M} g_{[t]ij} \frac{\partial N^{I}}{\partial x_{[0]}^{m}} \frac{\partial N^{J}}{\partial x_{[0]}^{n}} \left(2 \left(\alpha g_{[0]}^{mn} g_{[0]}^{kl} + \beta g_{[0]}^{mk} g_{[0]}^{nl} \right) \frac{\partial N^{P}}{\partial x_{[0]}^{k}} \frac{\partial N^{Q}}{\partial x_{[0]}^{l}} g_{[t]pq} \right) v_{[0]}$$

$$(9)$$

$$B_{ij}^{IJ} = \gamma \int_{M} \left(g_{[t]ij} \frac{\partial N^{I}}{\partial x_{[0]}^{m}} \frac{\partial N^{J}}{\partial x_{[0]}^{n}} g_{[0]}^{mn} \right) v_{[0]}$$

$$(10)$$

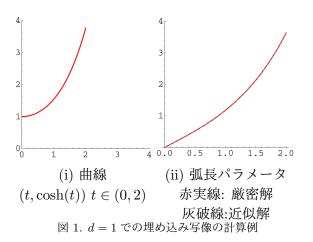
とおけば

$$\xi_{J}^{j}\xi_{P}^{p}\xi_{Q}^{q}A_{ijpq}^{IJPQ} + \xi_{J}^{j}B_{ij}^{IJ} = 0$$
 (11)

が解くべき非線形連立方程式となる.

3.3 計算結果

d=1 では、埋め込み写像を求める問題は弧長パラメータを求める問題に帰着される。素直に接ベクトルの長さを積分しても良いが、ここでは上の定式化を使った計算結果の例を図1 に示す。



当日の講演では,上記1次元の計算結果に加えて,2次元の計算結果と実際に制作した曲面についても述べる予定である.

- [1] Gershon Elber, Model fabrication using surface layout projection, Computer-Aided Design, Volume 27, 1995.
- [2] E. Efrati, E.Sharon, R.Kupferman, Elastic theory of unconstrained non-Euclidean plates, Elsevier, 2009.
- [3] J. Austin Cottrell, Thomas J. R. Hughes, Yuri Bazilevs, Isogeometric Analysis: Toward Integration of CAD and FEA, 2009.
- [4] Les Piegl, Wayne Tiller, The NURBS Book, Springer Verlag, 1995.

ねじり折り平坦可折定理の証明の完成

川崎 英文1

1 九州大学大学院数理学研究院

e-mail: kawasaki@math.kyushu-u.ac.jp

1 はじめに

平坦可折性は折り紙の基本的な研究課題であり、その多くは平面幾何で説明できる。例えば、展開図が1点から放射状に延びるn本の半直線からなる**単頂点折り**(図1)が平坦可折ならば:川崎の条件(角の交代和は0)、前川の条件(|山線数 - 谷線数 |=2)、極小角条件(真の極小角を挟む辺の山谷は逆)、最大角条件(真の最大角を挟む辺の山谷は同じ)を満たすことが知られている(K[1][2])。

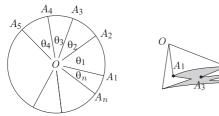


図 1. 単頂点折り

その一方で、ねじり折り(図 2)の平坦可折性定理を証明するには、凸解析分野の Gale の二者択一の定理や Helly の定理、Brouwer の不動点定理と同値な KKM 補題が必要となる。本講演でその証明を紹介する。

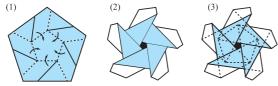


図 2. ねじり折りの中央の黒い領域がホール

本講演を通して、折った後の図形には B' の様に ' をつけて表す.

2 n 頂点折り

頂点が v_1, \ldots, v_n の凸多角形周りの n 頂点折 りとは、図 3 (1) のように、展開図が凸 n 角形 の頂点と辺、及び頂点からでる複数本の半直線 からなる折り方である。n 頂点折りを平坦に折りたためむことができるのは、図 3 (2) のような折り線に限られ、帯 B_i と辺 e_i がなす角は すべて等しい(YK[3]).

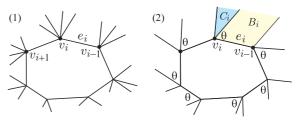


図 3. 平坦可折な n 頂点折りは (2) の折り線に限られる. 領域 B_i を帯, C_i をひだとよぶ.

定理 1 (YK[3]) n 頂点折りに適当に山谷をつけて折りたためるならば、以下が成立する.

- (a) 各項点から出る半直線は2本である.
- (b) 隣接する2項点から出る半直線4本のうち, 内側の2本は平行で山谷は逆である.
- (c) 帯が多角形の辺となす角はすべて等しい.

3 ねじり折りとホール

定理 1 の条件 (a)(b)(c) を満たす n 頂点折りで,多角形の辺の山谷が同じものを**ねじり折り** とよぶ.図 2 はねじり折りの例であり,多角形 P の中央に帯 B' やひだ C'_i で覆われない領域ができる.境界を含むその領域を**ホール**とよぶ.厳密には,図 4 の様に,多角形 P の有向辺ベクトルを $a_i := v_i - v_{i-1}$ とし,帯 B'_i の外向きの法線ベクトルを n_i とするとき,閉半平面 $H_i := \{x \in \mathbb{R}^2 \mid n_i^T x \geq n_i^T v_i\}$ の共通集合 $H := H_1 \cap \cdots \cap H_n$ をホールとよぶ.

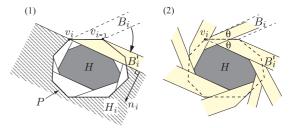


図 4. (1): 帯 B'_i で定まる半平面 H_i . (2): ホール.

定理 2 (Gale の二者択一の定理,[4]) 線形不等 式系 (1) が解 x をもつことと

$$Ax \ge b, \ x \in \mathbb{R}^m \tag{1}$$

双対系(2)が解yをもたないことは同値である.

$$y > 0, \ y^T A = 0, \ y^T b > 0.$$
 (2)

特にホールの場合, 双対系(2)は(3)になる.

$$y \ge 0, \ \sum_{i=1}^{n} y_i n_i = 0, \ \sum_{i=1}^{n} y_i n_i^T v_i > 0.$$
 (3)

定理 3 (K[5])

- (a) 帯が垂直 $(\theta = \frac{\pi}{2})$ の場合, $H = \emptyset$.
- (b) $\theta = 0$ の場合, H = P.
- (c) ホールは θ に関して非単調増加で、連続的に変化する. さらに、ある $0 < \bar{\theta} < \frac{\pi}{2}$ が存在して、 $H \neq \emptyset$ $(0 \le \theta \le \bar{\theta}), H = \emptyset$ $(\bar{\theta} < \theta \le \bar{\pi}).$

定理 4 (Helly の定理,[6]) \mathbb{R}^d の凸集合 D_i (1 $\leq i \leq n$) の共通集合が空ならば、高々 d+1 個の D_{i_j} (1 $\leq j \leq d+1$) で、それらの共通集合が空になるものが存在する.

補助定理 5 (KKM 補題 [7]) \mathbb{R}^n の点 $v_1, \ldots v_m$ と閉集合 F_1, \ldots, F_m が任意の $I \subset \{1, \ldots, m\}$ に対して,凸包が $\operatorname{co}\{v_i \mid i \in I\} \subset \bigcup_{i \in I} F_i$ を満たすならば, $(\bigcap_{i=1}^m F_i) \cap \operatorname{co}\{v_1, \ldots, v_m\} \neq \emptyset$.

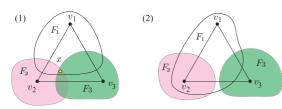


図 5. (1) は KKM 補題の仮定を満たすので、共通点 $x \in F_1 \cap F_2 \cap F_3$ がある. (2) は仮定を満たさない.

定理 6 (ねじり折りの平坦可折定理) ねじり 折りが平坦可折であるための必要十分条件は, ホールが空でないことである.

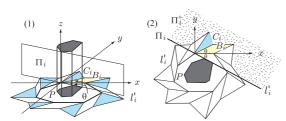


図 6. ホールが空でなければ, B_i や C_i は角柱の外側を動く. (2) は (1) を真上から見た図.

4 補足

- 1) 本稿の「極小角条件」は「隣接山谷条件」 とよばれることが多い([2]).
- 2) 法線ベクトル n_i は有向辺ベクトル a_i を $\frac{\pi}{2} \theta$ 回転したものなので、双対系 (3)

- の第2の等式を $\sum_{i=1}^{n} y_i a_i = 0$ で置き換えることができる.
- 3) 帯の傾斜角 θ が小さい場合の定理 6 は K[8] にある.
- 4) 図 7 の帯 B_i とひだ C_i を折ると, C_i は v_i を中心に 2θ 回転したひだ C_i' に移る.

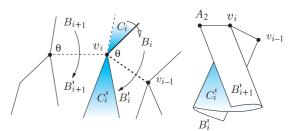


図 7. ひだ C_i は -2θ 回転する.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K05278 の 助成を受けている.

- [1] 川崎敏和, 平坦折り紙の山折り線と谷折り線の関係, 佐世保工業高等専門学校研究報告, 第 27 号, (1990), 55-79.
- [2] 川崎敏和, バラと折り紙と数学と, 森北出版, 1998.
- [3] 山口大貴,川崎英文,多角形周りの平坦 折り.日本応用数理学会 2016 年度年会, 予稿集, (2016), 448-449.
- [4] O. L. Mangasarian, Nonlinear programming, McGrraw-Hill, 1969.
- [5] H. Kawasaki, An application of a theorem of alternatives to origami, J. of the Operations Research Society Japan, 60 No. 3, (2017), 393–399.
- [6] R. T. Rockafellar, Convex Analysis, Princeton University Press, 1970.
- [7] B. Knaster, K. Kuratowski, and S. Mazurukiewicz, Ein Beweis des Fix-punktsatze fur n-dimensionale Simplexe, Fundamenta Mathematica, 14, (1929), 132–137.
- [8] 川崎英文, Helly の定理と KKM 補題によるねじり折りの考察, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2018 年春季研究発表会アブストラクト集, (2018), 162–163.

6次元のかたち巡り

○宮崎興二1, 石井源久2

- 1京都大学名誉教授 miyazakiijok@gmail.com
- ²(株)バンダイナムコスタジオ rxb00671@nifty.com

1 概要

宇宙は空間の3次元と時間の1次元の連続体として4次元の広がりを持つ、といわれる。それに対して P.D. Ouspensky は、時間も3次元の広がりを持ち宇宙は6次元に広がるという。本稿ではその場合の時間の流れを、空間の広がりに応じた直交3方向への運動に置き換えて、6次元の宇宙を図形的に表示する。つまり、3次元立方体を前後の一方向に動かせば4次元立方体、それを左右に動かせば5次元立方体、さらにそれを上下に動かせば6次元立方体となるが、この6次元立方体の3次元空間への直投影を図や模型によって具体的に示す。

いずれにしろ6次元空間にある原像は単なる立方体やその組み合わせに過ぎないが、得られる投影には、5次元までのすべての正方形や立方体ならびにそれらのさまざまな複合体やその部分ないしはその変形が、3次元の自然界や人工界の造形を基礎的に支える周期的あるいは非周期的なパターンを見せながら現れる。

2 6次元直交座標軸と6次元立方体

本稿では、正多面体群の対称性を持たせながら3次元空間へ直投影した図1の2種類の6次元直交座標軸を基礎的に用いる。単位長はそれぞれにおいて一定となっている。左は正8面体群の立方体あるいは正8面体の相対する稜線の中点を結ぶ6本の直線、右は正20面体群の正12面体の相対する側面の中心、あるいは正20面体の相対する頂点、を結ぶ6本の直線、が座標軸となっている。その中に、回転させると図2のような平面図形(線図)や立体模型(ソリッドモデル)を見せる6次元立方体が埋め込まれることになる[1]。





図1 6次元直交座標軸の直投影2種類



図2 6次元立方体のさまざまな直投影

3 正8面体群の対称性を持つ場合

正8面体群の対称性を持つ座標軸は、たがいに90°、60°、120°を作って交わり、それらは正3角形を連結した菱形ならびに正方形の2種類の菱形を作る。この菱形は、図3に示すような、菱形6面体に代表される3種類の3次元立方体、菱形12面体と平行6角柱を外殻とする2種類の4次元立方体、長菱形12面体状の菱形20面体を外殻とする5次元立方体、切頂8面体状の菱形30面体を外殻とする6次元立方体を作るが、この5種類の外殻は、E.Fedorovが、周期的な3次元空間充填図形の基本多面体として挙げた図4の5種類の平行多面体と一致する。

図3のすべては、R.B.Fuller がオクテット・トラスと名付ける正4面体と正8面体による図5のような周期的な3次元空間充填図形の中に埋め込まれるが、このトラスの各頂点には6本の直線が集まるところから、Fuller はオクテット・トラスこそ、直交3座標軸に代わる未来の

宇宙を支える6次元の座標軸であると主張する。

図3による空間充填図形は非周期的な造形も 構成する。たとえば図6左のような部分を取り 出して直投影すると、同図右のような、正8角 形を作る2種類の菱形による非周期的な平面充 填図形の平行性を保った図に一致する。











図3 各次元の立方体の正8面体群の直投影











図 4 平行多面体による 3 次元空間の充填







・トラス

図5 オクテット 図6 正8面体群による 非周期的パターン

4 正 20 面体群の対称性を持つ場合

正 20 面体群の対称性を持つ座標軸は、たが いに約 109°28′とその補角の約 70°32′を 作って交わり、それらは対角線の長さが黄金比 1:約1.618 となった1種類だけの黄金菱形を 作る。この菱形は、図7のように、尖ったもの と平たいものの2種類の菱形6面体としての3 次元立方体のほか、菱形 12 面体を外殻とする 4次元立方体、菱形 20面体を外殻とする 5次 元立方体、菱形 30 面体を外殻とする 6 次元立 方体を作る。黄金菱形が作る凸多面体は、以上 の2種類の6面体のほか、4、5、6次元の立 方体の外殻の合わせて図8の5種類に限られ、 これらを黄金ゾーン多面体ということがある。

黄金ゾーン多面体は、平行多面体と同じく周 期的に3次元空間を埋め尽くすこともできるが、 図 9、10 のように非周期的にも空間を充填する という特徴を持ち、非周期性で知られるペンロ ーズ・パターンの立体版の構成に使われる[2]。











各次元の立方体の正 20 面体群の直投影











図8 黄金ゾーン多面体











図9 黄金ゾーン多面体の非周期的な積層







図 10 正 20 面体群による非周期的パターン

5 折紙工学への応用

以上のような6次元立方体の投影に基づく造 形は、菱形を側面とする多面体の組み合わせと なっている。このような菱形による造形の製作 に当たっては、図 11 の左の折紙あるいは右の 編紙のような技法がすでに工夫されていて、6 次元立方体やその関連図形の折紙工学への幅 広い応用が期待される[3]。





図 11 左は折紙製、右は編紙製の菱形の連結図形

- [1] 宮崎, 石原『4次元グラフィクス』朝倉書 店, 1989
- [2] 宮崎, 石井, 山口『高次元図形サイエン ス』 京大学術出版会, 2005
- [3] 宮崎『多面体百科』丸善出版, 2016

相似可積分幾何を用いた対数型美的曲線の空間曲線への拡張

梶原 健司 ¹, Wolfgang K. Schief² ¹ 九大 IMI, ²University of New South Wales e-mail: kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

概要

対数型美的曲線 (LAC) と呼ばれる平面曲線 の族は、美的特性を内在する形状要素として、 工業意匠設計の研究で提案され、実際に用いら れるようになってきている[1]. LAC はユーク リッド幾何の枠組みでは、曲率半径の冪が弧長 の一次式で与えられる平面曲線として特徴付け られる。 最近、我々は相似幾何の枠組みで LAC を捉えることを試み、LACがユークリッド幾何 における Euler の弾性曲線の相似幾何類似とし て理解できることを示した。 すなわち、LAC は (1)Burgers 方程式が記述する相似弧長パラメー タを保つ平面曲線の可積分変形の定常流として 捉えられ、(2) 相似曲率の2乗に付加項を加え たエネルギー汎函数の臨界点として変分原理で 定式化できる[2]。この枠組みに基づき、我々は 可積分離散化の手法を適用して LAC の離散化 (dLAC) を提案し、与えられた G^1 データ(両 端点とそこでの接ベクトルの方向)を内挿する dLAC を生成するアルゴリズムを構成した [3].

一方、工業意匠設計では形状要素として美的 特性を内在した空間曲線と曲面が求められてお り、ユークリッド幾何に基づいて LAC のさま ざまな一般化が提案されている。しかし、LAC の定義自身が簡単なことも相まって, 一般化に 十分な理論的根拠がなく、どれがよいのかわか らないのが現状である[1]. 本研究では、相似幾 何に基づき LAC の空間曲線への拡張を試みる.

相似幾何における空間曲線と可積分変 形

空間曲線 $\gamma \in \mathbb{R}^3$ において、s を弧長とする. ユークリッド幾何における接ベクトル, 法線ベ クトル, 陪法線ベクトルをそれぞれ $T_{\rm E}$, $N_{\rm E}$, $B_{\rm E}$, $\kappa_{\rm E}$, $\tau_{\rm E}$ をそれぞれ曲率および捩率とする. このとき、Frenet 枠を $\Phi_{\rm E} = [T_{\rm E}, N_{\rm E}, B_{\rm E}]$ とす ると、Frenet-Serret の公式が成り立つ:

$$\Phi_{E,s} = \Phi_{E} \begin{bmatrix} 0 & -\kappa_{E} & 0\\ \kappa_{E} & 0 & -\tau_{E}\\ 0 & \tau_{E} & 0 \end{bmatrix}.$$
 (1)

相似幾何においては、相似弧長 θ を $d\theta = \kappa_{\rm E} ds$ で定義し、接ベクトル、法線ベクトル、陪法線 ベクトルをそれぞれ

$$T = \gamma_{\theta} = \frac{T_{\rm E}}{\kappa_E}, \quad N = \frac{N_{\rm E}}{\kappa_E}, \quad B = \frac{B_{\rm E}}{\kappa_E}, \quad (2)$$

で導入する。このとき、相似 Frenet 枠を $\Phi =$ [T, N, B] と定義すると、次の相似 Frenet-Serret の公式が成り立つ [4].

$$\Phi_{\theta} = \Phi L, \quad L = \begin{bmatrix} -\kappa & -1 & 0 \\ 1 & -\kappa & -\tau \\ 0 & \tau & -\kappa \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$\kappa = \frac{\kappa_{E,\theta}}{L}, \quad \tau = \frac{\tau_{E}}{L}.$$
(4)

 κ , τ はそれぞれ相似曲率,相似捩率と呼ばれ る. 次に、曲線の相似弧長を保つ可積分変形を 考える[4].

$$\gamma_t = PT + QN + RB,\tag{5}$$

とおくと、相似弧長の保存と(3)との両立条件

$$\Phi_{t} = \Phi M, \quad M = \begin{bmatrix} F_{1} & -G_{1} & -H_{1} \\ G_{1} & F_{1} & -H_{2} \\ H_{1} & H_{2} & F_{1} \end{bmatrix},$$

$$(6)$$

$$\begin{cases} F_{1} = P_{\theta} - \kappa P - Q, \\ G_{1} = Q_{\theta} - \kappa Q - \tau R + P, \\ H_{1} = R_{\theta} + \tau Q - \kappa R, \\ H_{2} = H_{1\theta} + \tau G_{1}, \\ G_{1\theta} = \tau H_{1}, \end{cases}$$

$$(7)$$

および

$$\tau_t = H_1 + H_{2\theta}, \quad \kappa_t = -F_{1\theta}, \tag{8}$$

が得られる. 特に, (8) は次のように書き直さ

$$\Phi_{\mathrm{E,s}} = \Phi_{\mathrm{E}} \begin{bmatrix}
0 & -\kappa_{\mathrm{E}} & 0 \\
\kappa_{\mathrm{E}} & 0 & -\tau_{\mathrm{E}} \\
0 & \tau_{\mathrm{E}} & 0
\end{bmatrix} . (1) \qquad \begin{bmatrix} \tau \\ \kappa \end{bmatrix}_{t} \\
= \begin{bmatrix} \Omega_{1}\tau & \Omega_{1}(\partial_{\theta} - \kappa) \\
\Omega_{2}(\partial_{\theta}^{2} - \partial_{\theta}\kappa - \tau^{2}) & -\Omega_{2}(\partial_{\theta}\tau + \tau\partial_{\theta} - \kappa\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ R \end{bmatrix}, (9)$$

ただし,

$$\Omega_1 = \partial_{\theta}^2 + \tau^2 + \tau \partial_{\theta}^{-1} \tau + 1,
\Omega_2 = \partial_{\theta} - \kappa - \kappa \partial_{\theta}^{-1},$$
(10)

はそれぞれ mKdV 階層, Burgers 階層の再帰演算子である。 もっとも簡単な場合として, 特に

$$Q = -\kappa, \quad R = -\tau, \tag{11}$$

と選ぶと、相似捩率 τ 、相似曲率 κ は次の方程式を満たす。

$$\tau_t + \frac{3}{2}\tau^2\tau_\theta + \tau_{\theta\theta\theta} + \tau_\theta = 0, \tag{12}$$

$$\kappa_t + \kappa_{\theta\theta\theta} - 3(\kappa\kappa_\theta)_\theta + 3\kappa^2\kappa_\theta + \frac{3}{2}(\tau^2\kappa)_\theta$$

$$-3(\tau\tau_\theta)_\theta + \kappa_\theta = 0. \tag{13}$$

すなわち τ は mKdV 方程式に従い、 κ は係数に τ を持つ 3 階の Burgers 方程式を満たす。 (13) はユークリッド曲率半径 $q=1/\kappa_{\rm E}$ による Cole-Hopf 変換

$$\kappa = -(\log q)_{\theta}, \quad q = \frac{1}{\kappa_E}, \tag{14}$$

で次のように線形化される.

$$q_t + q_{\theta\theta\theta} + \frac{3}{2}(\tau^2 q)_{\theta} + q_{\theta} = 0.$$
 (15)

3 定常解の記述する空間曲線と変分原理

LAC の空間曲線への拡張として、相似幾何 の枠組みを利用して (12), (15) の定常解が記述 する曲線を考える. (12), (15) で $(\theta,t) \rightarrow (\theta+(\lambda-1)t,t)$ と座標変換をしてから t 依存性を落とし、 θ について積分すると、 τ , q は次の方程式を満たす (λ, c_1, c_2) : 定数).

$$\tau_{\theta\theta} + \frac{1}{2}\tau^3 + \lambda\tau = c_1, \tag{16}$$

$$q_{\theta\theta} + \left(\lambda + \frac{3}{2}\tau^2\right)q = c_2. \tag{17}$$

特に $c_1 = c_2 = 0$ の場合,(16) は Euler の弾性 曲線の方程式にほかならず,一般解は楕円函数 で表される.また対応して (17) は Lamé 方程 式である.

最後に, (16), (17) の変分原理による定式化 を考える. 次のエネルギー汎函数を導入する:

$$I = \frac{1}{(q_0 q_1)^{\frac{1}{2}}} \int_{\theta_1}^{\theta_2} q\tau \, d\theta,$$

$$q_i = q(\theta_i) \quad (i = 1, 2).$$
(18)

I に対して、全相似弧長の保存を要請し、適 当な境界条件の下での曲線の変分を考えると、 Euler-Lagrange 方程式として

$$\tau_{\theta\theta} + \frac{1}{2}\tau^3 + d_1\tau = 0, \tag{19}$$

$$q_{\theta\theta} + \left(d_1 + \frac{3}{2}\tau^2\right)q = d_2\tau,$$
 (20)

が得られる $(d_1, d_2$: 定数).

謝辞 本研究はJSPS 科研費JP16H03941, 16K13763 の助成により実施された.

- [1] K.T. Miura and R.U. Gobithaasan, Mathematics for Industry, vol 24(2016), Springer, pp.107–119.
- [2] J. Inoguchi, K.Kajiwara, K.T. Miura, M.Sato and W. K.Schief, Y.Shimizu, Comput. Aided Geom. Des. 61(2018) 1–5.
- [3] J. Inoguchi, K.Kajiwara, K.T. Miura, H. Park and W. K. Schief, in preparation.
- [4] K.S. Chou and C. Qu, Chaos, Solitons and Fractals, **19**(2004) 47–53.

Fairing of discrete planar curves with integrable discretization of Euler's elasticae

Sebastián Elías Graiff Zurita¹, Kenji Kajiwara²

e-mail: ma217063@math.kyushu-u.ac.jp

1 Introduction

Let $\gamma(s) \in \mathbb{R}^2$ be an arc length parametrized plane curve (s: arc length), and define the tangent and normal vectors as $T(s) = \gamma'(s)$ and $N(s) = R_{\pi/2}T(s)$, where $R_{\pi/2}$ is a $\pi/2$ rotation matrix and $' = \mathrm{d}/\mathrm{d}s$. By definition, $\|T(s)\| = 1$, so T(s) can be parametrized as $T(s) = {}^t(\cos\theta(s),\sin\theta(s))$. The Frenet formula is given by $T'(s) = \kappa(s)N(s)$ and $N'(s) = -\kappa(s)T(s)$, where $\kappa(s) = \theta'(s)$ is the curvature. With this notation, a plain curve satisfying

$$\theta'' + \mu \sin(\theta - \phi) = 0, \tag{1}$$

or

$$\kappa'' + \frac{1}{2}\kappa^3 - \lambda\kappa = 0, \tag{2}$$

where μ , ϕ , and λ are real constants, is called an Euler's elastica. These curves can also be characterized as critical points of the elastic energy $E = \int_0^L \frac{1}{2} \theta'^2(s) \, \mathrm{d}s = \int_0^L \frac{1}{2} \kappa^2(s) \, \mathrm{d}s$, with fixed total arc length. Furthermore, (1) and (2) are reductions of the Sine-Gordon equation and the modified KdV equation, respectively —where they describe the isoperimetric deformation of plane curves.

Recently, Brander et al. [1] have constructed an algorithm to fair a given plane curve segment by an elastica, in a continuous framework, motivated mainly by the development of the robotic hot-blade technology. In this work, in view of higher quality numerical implementations, we apply a discrete analogue of that algorithm to fair a given discrete plane curve by an integrable discrete elastica, using the discretization shown in [2].

2 Discrete Euler's elastica

Let $\gamma_n \in \mathbb{R}^2$ be a discrete planar curve, and define the tangent vector as $T_n = (\gamma_{n+1} - \gamma_n)/\Delta$,

where $\Delta = \|\gamma_{n+1} - \gamma_n\| = \text{const.}$ Then T_n may be parametrized as in [3]:

$$T_n = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_n + \theta_{n+1}}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta_n + \theta_{n+1}}{2}\right) \end{pmatrix}.$$

With this notation, a discrete plane curve satisfying

$$\tan\left(\frac{\theta_{n-1} + \theta_{n+1}}{4}\right) = \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\tan\left(\frac{\theta_n}{2}\right), \quad (3)$$

or equivalently

$$\sin\!\left(\frac{\theta_{n+1}-2\theta_n+\theta_{n-1}}{4}\right)+\varepsilon\sin\!\left(\frac{\theta_{n+1}+2\theta_n+\theta_{n-1}}{4}\right)=0,\quad \left(4\right)$$

for some positive constant ε , is called a discrete Euler's elastica. These curves can also be characterized as critical points of the functional

$$S = \sum_{n=0}^{N-1} \left[\sin^2 \left(\frac{\theta_{n+1} - \theta_n}{4} \right) - \varepsilon \sin^2 \left(\frac{\theta_{n+1} + \theta_n}{4} \right) \right]. \tag{5}$$

The general solution of (3), or (4), is

$$\begin{cases} \sin\frac{\theta_n}{2} = k \operatorname{sn}(q + zn, k), \\ \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon} = \operatorname{cn}(z, k), \end{cases}$$
 (6)

with $k \geq 0$, q and z real parameters. In order to implement the fairing process for arbitrary discrete curves, we incorporate the freedom of rotation, via a real parameter ϕ . So, we consider

$$\begin{cases} \sin\frac{\theta_n - \phi}{2} = k \operatorname{sn}(q + zn, k), \\ \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} = \operatorname{cn}(z, k), \end{cases}$$
 (7)

Finally, our discrete elastica can be reconstructed as $\gamma_n = \gamma_{n-1} + \Delta T_{n-1}$ (n = 1, ..., N) and parametrized by the following seven parameters,

$$p = (x_0, y_0, \Delta, \phi, z, q, k),$$
 (8)

where $\gamma_0 = {}^t(x_0, y_0)$ is the starting point.

¹Graduate School of Mathematics, Kyushu University,

²Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

3 Fairing process

We consider the problem of fairing a given discrete plane curve by an appropriate discrete Euler's elastica, according to a suitable criteria. One possibility is to minimize the functional (5), however, having N (the number of points of the discrete curve) free parameters makes the fairing process numerically instable. Because of this, we have decided to do the fairing process via a L^2 -distance minimization, namely, we seek to find a set of parameters p that minimizes

$$\mathcal{L}(p) := \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{2} \| \zeta_n(p) - \gamma_n \|^2, \qquad (9)$$

where $\zeta_n(p)$ is the discrete Euler's elastica generated by p. Some examples are shown in Figure 1, where the optimization problem,

$$p^* = \operatorname*{arg\,min}_{p} \left\{ \mathcal{L}(p) \right\}, \tag{10}$$

was solved via a gradient-driven optimization method (IPOPT [4]).

4 Algorithm outline

The optimization problem (10) is non-convex and the result strongly depends on the initial guess. So, we have decided to implement a discrete analogue of the algorithm provided in [1], which gives an initial guess to the IPOPT method. That algorithm is anchored on the following: In a continuous context, define $u(s) \in \mathbb{R}$ as the projection of $\gamma(s)$ onto the line spanned by $(\sin \phi, -\cos \phi)$, i.e.

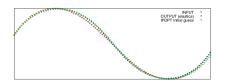
$$u(s) = (\sin \phi, -\cos \phi) \cdot \gamma(s), \tag{11}$$

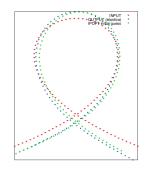
thus $u' = -\mu \sin(\theta - \phi)$. From (1), it follows that

$$\kappa(s) = \mu u(s) + \text{const.}$$
 (12)

Using this fact, and after solving several quadratic minimization sub-problems, it is possible to recover the control parameters of a given (continuous) elastica segment in a numerically stable manner.

In our scenario, we can recover the seven control parameters (8) of a given discrete elastica. Moreover, this algorithm can be used on any





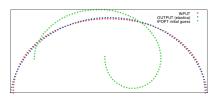


Figure 1: Examples of discrete curves approximated with elasticae. Red: given discrete curve, blue: output found with IPOPT optimization, green: initial guess.

discrete planar curve (not necessary an elastica). So, we have used it to obtain a set of parameters p that is going to be used as the starting point of a gradient-driven optimization method.

A more detailed explanation of this algorithm will be given at the presentation.

References

- [1] D. Brander, J. Gravesen and T. B. Nørbjerg, Adv. Comput. Math. **43** (2017) 25–43.
- [2] K. Sogo, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 064007.
- [3] J. Inoguchi, K. Kajiwara, N. Matsuura and Y. Ohta, Kyushu J. Math. **66** (2012) 303–324.
- [4] A. Wächter and L.T. Biegler, Math. Program., Ser. A **106** (2006) 25–57.

Lotka-Volterra flow on discrete centroaffine plane curves

Kenji Kajiwara¹, Nozomu Matsuura², Hyeongki Park³ ¹IMI, Kyushu University, ²Kurume institute of Technology, ³Kyushu University e-mail: h-paku@math.kyushu-u.ac.jp

1 Outline

It is known that the defocusing mKdV equation describes a motion of smooth centroaffine plane curves preserving the centroaffine arc length [1, 2]. It is also known that there is a relationship between the defocusing mKdV flow on centroaffine plane curves and the KdV flow on equicentroaffine plane curves [2]. In this presentation, we consider a continuous deformation of discrete plane curves in the centroaffine geometry, which is governed by the Lotka-Volterra equation. We also construct a relationship between the Lotka-Volterra flow on discrete centroaffine plane curves and the semi-discrete mKdV flow on discrete equicentroaffine plane curves described in [3].

Centroaffine plane curves $\mathbf{2}$

We simply regard \mathbb{R}^2 as a vector space, and consider a map $\gamma: \mathbb{Z} \to \mathbb{R}^2$, $n \mapsto \gamma_n$. If any consecutive three points γ_{n-1} , γ_n and γ_{n+1} are not colinear, then we call γ_n a discrete plane curve. Especially, γ_n is called a discrete centroaffine plane curve if γ_n satisfies $\det[\gamma_n,\gamma_{n+1}]\neq 0$ for all n. We define the tangent vector T_n and the second-order divided difference ΔT_n of a discrete centroaffine plane curve γ_n by

$$T_n = \frac{\gamma_{n+1} - \gamma_n}{\varepsilon_n},\tag{2.1}$$

$$\Delta T_n = \frac{2}{\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1}} \left(T_n - T_{n-1} \right), \qquad (2.2)$$

respectively. We determine ε_n so that γ_n has similar tangent vectors as those of a smooth centroaffine curve described in [2]. Namely, we choose ϵ_n as γ_n satisfies the following equation for an arbitrary constant λ :

$$\lambda = \frac{\det[T_n, \Delta T_n]}{\det[\gamma_n, T_n]},\tag{2.3}$$

which is equivalent to

$$\frac{\varepsilon_n + \varepsilon_{n-1}}{2} = \frac{\det[\gamma_n - \gamma_{n-1}, \gamma_{n+1} - \gamma_n]}{\lambda \varepsilon_n \det[\gamma_n, \gamma_{n+1}]}.$$
(2.4)

Then putting a function κ_n by

$$\kappa_n = \frac{\det[\gamma_n, \Delta T_n]}{\det[\gamma_n, T_n]}, \qquad (2.5)$$

 ΔT_n is written in terms of γ_n and T_n as

$$\Delta T_n = -\lambda \gamma_n + \kappa_n T_n, \qquad (2.6)$$

which is nothing but the discrete Frenet equation of γ_n .

Lotka-Volterra flow

We consider a family of discrete centroaffine plane curves $\gamma_n(t)$ with a parameter $t \in \mathbb{R}$, namely a continuous deformation of a discrete centroaffine plane curve γ_n . We also define functions $\epsilon_n(t)$, $\kappa_n(t)$ and $\lambda(t)$ as given above. In addition, we assume that $\epsilon = \epsilon_n(t)$ does not depend on n and t, and $\lambda = \varepsilon^{-2}$.

Consider the deformation of $\gamma_n = \gamma_n(t)$ given by

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = k\left(\left(\nu_{n-1} - \frac{1}{2\varepsilon}\right)\gamma_n - T_n\right), \quad (3.1)$$

$$\nu_n = \frac{1}{\varepsilon\left(\varepsilon\kappa_{n+1} - 1\right)}, \quad k: \text{ const.}. \quad (3.2)$$

$$\nu_n = \frac{1}{\varepsilon (\varepsilon \kappa_{n+1} - 1)}, \quad k : \text{ const..}$$
 (3.2)

Then this deformation preserves λ , namely, λ does not depend on t. Introducing the Frenet frame $\Phi_n(t) = [\gamma_n(t), T_n(t)] \in GL(2), (2.6)$ and (3.1) are rewritten in terms of $\Phi_n = \Phi_n(t)$

$$\Phi_{n+1} = \Phi_n L_n, \tag{3.3}$$

$$\frac{d\Phi_n}{dt} = \Phi_n M_n, \tag{3.4}$$

where

$$L_n = \begin{bmatrix} 1 & \nu_n \\ \varepsilon & 0 \end{bmatrix}, \tag{3.5}$$

$$M_n = \frac{k}{\varepsilon} \begin{bmatrix} \varepsilon \nu_{n-1} - \frac{1}{2} & -\nu_{n-1} \\ -\varepsilon & \varepsilon \nu_n + \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$
 (3.6)

Then the compatibility condition of (3.5) and (3.6) yields the Lotka-Volterra equation:

$$\frac{d\nu_n}{dt} = k\nu_n \left(\nu_{n+1} - \nu_{n-1}\right). \tag{3.7}$$

4 Relation with semi-discrete KdV flow on equicentroaffine discrete plane curves

Let γ_n be a discrete centroaffine curve. In the framework of equicentroaffine geometry, we usually use determinant function as a fixed area element on \mathbb{R}^2 so that the frame

$$\left[\gamma_n, \frac{\gamma_{n+1} - \gamma_n}{\delta_n}\right],\tag{4.1}$$

where $\delta_n = \det[\gamma_n, \gamma_{n+1}]$, takes values in the special linear group SL(2). Moreover, It is known that the semi-discrete KdV equation is derived from a particular motion of discrete plane curves in the equicentroaffine geometry [3]. For a family of centroaffine plane curves $\gamma_n(t)$ deformed by the Lotka-Volterra flow described above, we define another family of discrete curves $\Gamma_n(t)$ by

$$\Gamma_n(t) = h_n(t)\gamma_n(t), \tag{4.2}$$

$$h_{n+1}h_n \det[\gamma_n, T_n] = 1.$$
 (4.3)

Then it follows from (2.6) and (3.1) that $\Gamma_n = \Gamma_n(t)$ satisfies

$$\Gamma_{n+1} - 2\Gamma_n + \Gamma_{n-1} = 2(u_n - 1)\Gamma_n, \quad (4.4)$$

$$\frac{d\Gamma_n}{dt} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{1}{u_n} \Gamma_{n+1} - \Gamma_n \right), \tag{4.5}$$

where u_n is determined by

$$u_{n+1}u_n = -\frac{1}{\varepsilon\nu_n}. (4.6)$$

Then $\varepsilon = \det[\Gamma_n, \Gamma_{n+1}]$, and (4.4) and (4.5) are rewritten, in terms of the Frenet frame $\phi_n = [\Gamma_n, \frac{\Gamma_{n+1} - \Gamma_n}{\varepsilon}] \in SL(2)$, as

$$\phi_{n+1} = \phi_n U_n, \tag{4.7}$$

$$\frac{d}{dt}\phi_l = \phi_n V_n,\tag{4.8}$$

$$U_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{2(u_{n+1}-1)}{\varepsilon} \\ \varepsilon & 2u_{n+1}-1 \end{bmatrix}, \tag{4.9}$$

$$1 \begin{bmatrix} \frac{1}{1} - 1 & \frac{1}{2} \left(2 - \frac{1}{1} - \frac{1}{1}\right) \end{bmatrix}$$

$$V_n = \frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} \frac{1}{u_n} - 1 & \frac{1}{\varepsilon} \left(2 - \frac{1}{u_n} - \frac{1}{u_{n+1}} \right) \\ \frac{\varepsilon}{u_n} & 1 - \frac{1}{u_n} \end{bmatrix}.$$
(4.10)

This motion of a curve Γ_n preserves area ε , and the compatibility condition of (4.9) and (4.10) is equivalent to the semi-discrete KdV equation:

$$\frac{du_n}{dt} = \frac{1}{2\varepsilon} \left(\frac{1}{u_{n+1}} - \frac{1}{u_{n-1}} \right),\tag{4.11}$$

Therefore, (4.2) may be regarded as the geometric realization of the Miura transformation (4.6) between (3.7) and (4.11) [3].

Acknowledgements

This work has been partly supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers 15K04862, 16H03941 and 16K13763. One of the authors (H. Park) acknowledges the support from the "Leading Program in Mathematics for Key Technologies" of Kyushu University.

References

- [1] K. -S. Chou and C. Qu, Integrable equations arising from motions of plane curves, Phys. D. **162** (2002), 9–33.
- [2] H. Park, K. Kajiwara, T. Kurose and N. Matsuura, Defocusing mKdV flow on centroaffine plane curves, JSIAM Lett. 10 (2018), 25–28.
- [3] H. Park, Explicit Formulas for Integrable Deformations of Plane Curves in Various Geometries, Master's thesis, Kyushu Univ. (2018).

Kahan-廣田-木村型離散 three wave system と QRT 写像

高江宥光1,木村欣司2,中村佳正1

1京大数理,2サレジオ高専

e-mail: takae.yuukou.76c@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

非線形光学、プラズマ物理などの分野に現れる偏微分方程式として、三波相互作用方程式は、有名である。三波相互作用方程式から空間微分の項を消去すると、three wave ODE system を得ることができる。Petreraら[2]は、three wave ODE system に対して、Kahan-廣田-木村離散化法を適用し、離散 three wave ODE system を導入した。さらに、その system の 3 つの独立な保存量を得ることに成功している。しかし、Lax 対や解についての議論は行われていない。Lax 対を構成する足がかりとして、解を得ることは重要である。本講演では、その目的のため、ある変数を導入すると、その変数が QRT 写像[3,4]に従うことを示す。

2 three wave ODE system

三波相互作用方程式とは次のような方程式である,

$$\begin{split} \frac{\partial z_1}{\partial t} + \alpha_1 \frac{\partial z_1}{\partial x} &= \epsilon \overline{z}_2 \overline{z}_3, \\ \frac{\partial z_2}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial z_2}{\partial x} &= \epsilon \overline{z}_3 \overline{z}_1, \\ \frac{\partial z_3}{\partial t} + \alpha_3 \frac{\partial z_3}{\partial x} &= \epsilon \overline{z}_1 \overline{z}_2. \end{split}$$

ここで、方程式中のパラメータ $\alpha_i(i=1,2,3)$ と ϵ は実定数である. 次の条件が満たされる場合を考えると、

$$\frac{\partial z_i}{\partial \mathbf{x}} = 0, \quad i = 1, 2, 3,$$

次の常微分方程式を得る,

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = \overline{x}_2 \overline{x}_3,$$

$$\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = \overline{x}_3 \overline{x}_1,$$

$$\frac{\mathrm{d}x_3}{\mathrm{d}t} = \overline{x}_1 \overline{x}_2.$$

以下では、この方程式を three wave ODE system と呼ぶ.

3 離散 three wave ODE system

Petrera らは, Kahan-廣田-木村離散化を実行し, 次の離散 three wave ODE system を導入した,

$$(u_1^{n+1} - u_1^n)/\delta = (v_2^{n+1}v_3^n + v_3^{n+1}v_2^n)/2, (1)$$

$$(u_2^{n+1} - u_2^n)/\delta = (v_3^{n+1}v_1^n + v_1^{n+1}v_3^n)/2, (2)$$

$$(u_3^{n+1} - u_3^n)/\delta = (v_1^{n+1}v_2^n + v_2^{n+1}v_1^n)/2,$$
 (3)

$$(v_1^{n+1} - v_1^n)/\delta = (u_2^{n+1}u_3^n + u_3^{n+1}u_2^n)/2,$$
 (4)

$$(v_2^{n+1} - v_2^n)/\delta = (u_3^{n+1}u_1^n + u_1^{n+1}u_3^n)/2, (5)$$

$$(v_3^{n+1} - v_3^n)/\delta = (u_1^{n+1}u_2^n + u_2^{n+1}u_1^n)/2, (6)$$

 $v_i^n(i=1,2,3)$ は、それぞれ、 $u_i^n(i=1,2,3)$ の複素共役を示す。

three wave ODE system の解の議論は、すでに行われている [1]. ここでは、Ivanov の論文とは、異なる変数に着目する。 three wave ODE system において、 $x_1x_2x_3 - \overline{x_1}\overline{x_2}\overline{x_3}$ は、保存量かつ Hamiltonian である。しかし、離散方程式において、 $u_1^nu_2^nu_3^n - v_1^nv_2^nv_3^n$ は、保存量ではない。そこで、補助変数 $r^n = u_1^nu_2^nu_3^n - v_1^nv_2^nv_3^n$ を導入し、 r^n の時間変化について議論する。数値計算の結果から、 r^n が周期解を持つことが予想されるため、次の 2 次関係式を仮定する、

$$a_0 (r^n)^2 (r^{n+1})^2 + a_1 (r^n)^2 r^{n+1} + a_2 r^n (r^{n+1})^2 + a_3 (r^n)^2 + a_4 (r^{n+1})^2 + a_5 r^n r^{n+1} + a_6 r^n + a_7 r^{n+1} + a_8 = 0,$$

ここで、 a_i $(i=0,\ldots,8)$ は複素数の定数であるとする. 初期値 u_i^0, v_i^0 (i=1,2,3) を設定し、有限体 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ 上において、時間発展を計算する. そのデータを利用して、次の連立一次方程式、

$$a_{0}(r^{0})^{2}(r^{1})^{2} + a_{1}(r^{0})^{2}r^{1} +$$

$$a_{2}r^{0}(r^{1})^{2} + a_{3}(r^{0})^{2} + a_{4}(r^{1})^{2} +$$

$$a_{5}r^{0}r^{1} + a_{6}r^{0} + a_{7}r^{1} + a_{8} = 0,$$

$$...,$$

$$a_{0}(r^{8})^{2}(r^{9})^{2} + a_{1}(r^{8})^{2}r^{9} +$$

$$a_{2}r^{8}(r^{9})^{2} + a_{3}(r^{8})^{2} + a_{4}(r^{9})^{2} +$$

$$a_{5}r^{8}r^{9} + a_{6}r^{8} + a_{7}r^{9} + a_{8} = 0,$$

を解くことで、 a_i ($i=0,\ldots,8$) を決定する. 連立一次方程式の係数行列は、フルランクではないため、解を適当に規格化する. その計算結果より、 a_i ($i=0,\ldots,8$) は、特に、次の関係式、

$$a_0 = 1$$
, $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = 0$, $a_6 = a_7$,

を満たすと推測できる.以上の議論より、次の方程式における h_1 , h_2 を保存量の候補とする、

$$(r^n)^2 (r^{n-1} + r^{n+1}) + h_1 r^n + h_2 = 0.$$

ここで, h_1 , h_2 は, Petrera らが得た保存量 [2] と, 関数従属の関係にある. ここでは, r^n の時間変化について議論するため, h_1 , h_2 を利用する. 次の方程式,

$$(r^n)^2 (r^{n-1} + r^{n+1}) + h_1 r^n + h_2 = 0,$$

$$(r^{n+1})^2 (r^n + r^{n+2}) + h_1 r^{n+1} + h_2 = 0,$$

を解くことにより、 h_1 、 h_2 は、 r^{n-1} 、 r^n 、 r^{n+1} 、 r^{n+2} で表現される.

次の式の計算では、計算機代数システム RE-DUCE [5] を利用する. 次の関係式、

$$\begin{split} r^{n-1} &= u_1^{n-1} u_2^{n-1} u_3^{n-1} - v_1^{n-1} v_2^{n-1} v_3^{n-1}, \\ r^n &= u_1^n u_2^n u_3^n - v_1^n v_2^n v_3^n, \\ r^{n+1} &= u_1^{n+1} u_2^{n+1} u_3^{n+1} - v_1^{n+1} v_2^{n+1} v_3^{n+1}, \\ r^{n+2} &= u_1^{n+2} u_2^{n+2} u_3^{n+2} - v_1^{n+2} v_2^{n+2} v_3^{n+2}, \end{split}$$

式(1)-(6),

を用いることで、 h_1 、 h_2 を、 $u_i^n (i=1,2,3)$ と $v_i^n (i=1,2,3)$ によって書き下すことができる。 h_1 、 h_2 は、有理式であり、その項数は、次の通りである、

$$h_1 = \frac{105 \,\mathrm{\mathfrak{I}}}{42 \,\mathrm{\mathfrak{I}}}, \quad h_2 = \frac{336 \,\mathrm{\mathfrak{I}}}{106 \,\mathrm{\mathfrak{I}}}.$$

4 保存量の証明と *rⁿ* の解

次の式の計算では、計算機代数システム Risa/Asir [6] を利用する. h_1,h_2 は、保存量の 候補であるため、 h_1^n,h_2^n と書く. 保存量の証明 とは、normal form 簡約を用いることで、

$$G = 式 (1)-(6)$$
 のグレブナ基底,

Numerator
$$(h_1^{n+1} - h_1^n) \xrightarrow{*}_{G} 0$$
,

Numerator
$$(h_2^{n+1} - h_2^n) \xrightarrow{*}_G 0$$
,

を示すことである. 今回, それを行った.

以上の議論より, r^n は次の QRT 写像 [3, 4] に従うことがわかる,

$$r^{n+1} + r^{n-1} = \frac{-h_1 r^n - h_2}{(r^n)^2}.$$

そのため, r^n は楕円関数を用いて解を書き下すことができる.

5 今後の課題

 r^n の解については判明したが、 $u_i^n (i=1,2,3)$ と $v_i^n (i=1,2,3)$ の解を書き下すには、至っていない。それを行うことと、Lax 対を構成することを、今後の課題とする。

- [1] Rossen Ivanov, Hamiltonian formulation and integrability of a complex symmetric nonlinear system, Phys. Lett. A350, (2006) pp. 232–235.
- [2] Matteo Petrera, Andreas Pfadler, and Yuri B. Suris, On Integrability of Hirota-Kimura Type Discretizations, Regular and Chaotic Dynamics, 16, Nos. 3.4, (2011) pp. 245–289.
- [3] G.R.W. Quispel, J.A.G. Roberts and C.J. Thompson, Integrable mappings and soliton equations, Phys Lett A, 126, (1988) pp. 419–421.
- [4] G.R.W. Quispel, J.A.G. Roberts and C.J. Thompson, Integrable mappings and soliton equations II, Physica D, 34, (1989) pp. 183–192.
- [5] REDUCE, https://reduce-algebra.sourceforge.io/
- [6] Risa/Asir, http://www.math.kobe-u.ac.jp/Asir/asir-ja.html

トポロジー最適化理論に基づく剛性最大化構造に対する数値的・実験的検証

吉原 健太1, 倉橋 貴彦1, 小林 正成2

1長岡技術科学大学 機械創造工学専攻,2オイレス工業株式会社

e-mail: s163100@stn.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

本研究では、トポロジー最適化理論に基づき 引張り試験に対する剛性最大化構造^[1]を算定し、 3D プリンタにより試験片を作成し、引張り試 験を行う. 初期構造の場合と比較をし、材料の 低減割合に関する考察を行う.

2 剛性最大化問題に対する定式化

剛性最大化構造を算定するために,外力仕事に関する最小化問題を考え,式(1)に示す評価関数を定義する.

$$J = \frac{1}{2} \{u\}^T \{f\} = \frac{1}{2} \{u\}^T [K] \{u\}$$
 (1)

式(1)に関する制約条件として、線形弾性体の変形問題に対する支配方程式を導入する. 制約条件を考慮した評価関数の最小化問題に対して、ラグランジュ関数 J^* を導入し、ラグランジュ関数 に関する第一変分を誘導する. $E(\rho)=(E_0-E_{min})\rho^p+E_{min}$ とし、ラグランジュ関数のパラメータ ρ に関する勾配(感度)の式 $\partial J^*/\partial \rho$ を用いてパラメータ ρ を更新することにより、剛性最大化構造を算定する. $\partial J^*/\partial \rho$ に対しては文献⁽²⁾を参考にフィルタリング処理を行う. また、乗数パラメータ ρ は3と設定する.

3 剛性最大化構造算定に対する数値実験

図1に示す引張り試験モデルに対して1/4モデルのメッシュを作成し、図2に示す境界条件のもと、剛性最大化構造に対するトポロジー最適化解析を行った. 感度のフィルタリング処理における影響半径を3ケース設定し解析を行った. 結果として、影響半径が小さくなるほど評価関数の値が下がる結果を得ることができた. 影響半径の値は小さく設定するほど評価関数の値は下がるが、最適化計算により算定された構造を作成することを考慮し、本研究では影響

半径 R=0.75mm の時の結果を剛性最大化構造とし、引張り試験を行う.

4 剛性最大化構造に対する実験的検証

剛性最大化構造に対して引張り試験を行うため、3Dプリンタにより試験片を作成する.厚さをケース A:2.12mm、ケース B:2.03mmケース C:1.95mm、ケース D:1.90mmと変えたモデルについて試験片を作成し、初期構造(板状試験片 厚さ1.06mm)の場合と剛性最大化構造の伸び量について比較をする。各ケースにおける荷重量と伸び量の比較図を図5に示す、初期構造の場合の伸び量が同等となる剛性最大化構造は行ース Dであり、剛性最大化構造は初期構造に対して約10%の材料削減することができた。

5 おわりに

本研究では、トポロジー最適化解析により剛性最大化構造を算定し、3D プリンタにより試験片の作成を行い、引張り試験による材料削減割合に関する考察を行った。初期構造と同等の伸び量になる剛性最大化構造について実験を行ったところ、表1に示す結果を得ることができ、約10%の材料削減効果を確認することができた。

謝辞 本研究を行うにあたり、科学研究費補助金(基盤(C)) 18K03897 の援助を受けた。また、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を利用させて頂いた。ここに謝意を表す。

- [1] 倉橋, 吉原, 丸岡, 井山, トポロジー最適 化シミュレーション -剛性最大化構造に 対する考察 および 3D プリンタによる造 形-, 長岡高専紀要, Vol.53(2017), 1-6.
- [2] 西脇,泉井,菊池,トポロジー最適化,丸 善出版,2013.

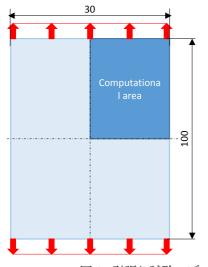


図1. 引張り試験モデル

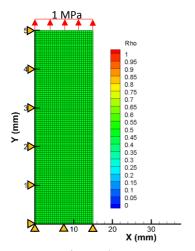


図 2. 有限要素メッシュ図および境界条件

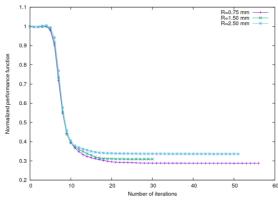


図 3. 評価関数の収束履歴

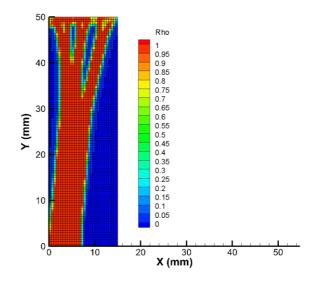


図 4. トポロジー最適化解析の結果 (R=0.75mm)

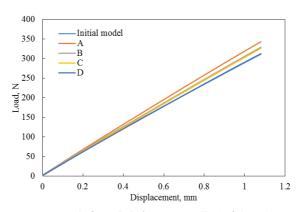


図 5. 厚さ変更試験片に対する荷重-変位関係

表 1. 各試験片における質量と変形量の関係

試験片	質量, g	変形 量, mm
初期構造	3.1	0.68
最適構造A	3.1	0.61
最適構造B	3.0	0.64
最適構造C	2.9	0.65
最適構造D	2.8	0.68

制約質量下の、最適密度分布の存在とその数値的構成

海津 聰 1

e-mail: kaizusatoshi@g-mail.com

1 密度分布をもつ境界値問題と最適密度 分布の定義

領域 D は空間 $\mathbf{R}^d, d=1,2,\cdots$ の有界領域で、D の境界 ∂D は Dirichlet 境界 Γ_D と Neumann 境界 Γ_N で構成。D 上に密度分布 $x(t) \in L^{\infty}(D)(=M), t \in D, (0 < \kappa \le x(t) \le 1$ を与え、分布 x(t) が与える全質量 $\|x\|_L$ は

$$||x||_{L} = \int_{D} x(t)dt,$$

$$L = L^{1}(D) \stackrel{\subseteq}{\neq} \left(L^{\infty}(D)\right)^{*} = M^{*}, \qquad (1)$$

$$M \stackrel{\subseteq}{\neq} L \stackrel{\subseteq}{\neq} M^{*}.$$

本稿の考察の密度分布 $x \in K$ は空間 M の 凸集合 $K = \{x \in M \mid \kappa \leq x \leq 1 \text{ in } D\}$, 全質量 $\|x\|_L \sim 0$ 制約 $(0 <) c_1 \leq |D|$ をみたす 密度分布集合 $x \in K_{c_1} = \{x \in K \mid \|x\|_L \leq c_1\}$ に限定.ここで $K_{|D|} = K$, $|D| = \int_D dt$.

密度分布 $x \in K_{c_1}$ の下で,次のポアソン方程 式の境界値問題 \mathbf{BDVP}_{c_1} の解 $u^x = u(x) \in V$ を考える. $H = L^2(D)$ はヒルベルト空間,一 次のソボレフ空間 V は, $V = \{v \in H \mid \nabla v \in H^d, v|_{\Gamma_D} = 0\}$.

領域 D の体積力 f(t), $f(t) \in H = L^2(D)$, 境界 Γ_N での応力 g(t) を $g(t) \in H^{1/2}(\Gamma_N) = \{g|_{\Gamma_N} \in L^2(\Gamma_N) \mid g \in V\}$.

非斉次項 $\{f,g\} \in H \times H^{1/2}(\Gamma_N)$ に対し, 境界値問題 \mathbf{BDVP}_{c_1} (2) の解 $u^x = u(x) \in V$ が一意的に定まり、存在.

$$a(x, u^{x}, v) = \langle f, g; v \rangle \quad \forall v \in V,$$

$$a(x, v, w) = \int_{D} x(t) \nabla v(t) \cdot \nabla w(t) dt,$$

$$\langle f, g; v \rangle = \int_{D} f(t) v(t) dt$$

$$+ \int_{\Gamma_{N}} g(t) v(t) d\sigma.$$
(2)

密度分布 $x \in K_{c_1}$ のコストを次式で定義.

$$j_0(x) = \langle f, g; u^x \rangle \tag{3}$$

このとき, $x \in K_{c_1}$ のコスト $j_0(x)$ は非負値.

$$j_0(x) = a(x, u^x, u^x) \ge \kappa \|u^x\|_V^2.$$
 (4)

凸集合 K_{c_1} の中でコスト $j_0(x)$ を最小化する密度分布 x^* を最適密度分布と呼び,次の最小化問題を考える.

$$\exists x^* \in K_{c_1} : j_0(x^*) = \min_{\forall x \in K_{c_1}} \langle f, g; u^x \rangle \qquad (5)$$

2 コスト関数 $j_0(x)$ の弱 * 連続性

(i-a) w^* 弱収束 基本的用語を確認. X,Y をバナッハ空間, Y^* を空間の共役空間, $X = Y^*$ を (本節で) 常に仮定。 $\{x_n\}_n \subset X, x_\infty \in X, x_n \stackrel{w^*}{\longrightarrow} x_\infty \in X \quad n \to \infty$, i. e., $x_\infty = w^* \lim_{n \to \infty} x_n$ とは,

$$\forall y \in Y, \quad \langle x_n, y \rangle \to \langle x_n, y \rangle \quad n \to \infty.$$

(i-b) w 弱収束 $\{x_n\}_n \subset X, x_\infty \in X,$ $x_n \xrightarrow{w} x_\infty \in X$ $n \to \infty$, i. e., $x_\infty = w \lim_{n \to \infty} x_n$ とは、

$$\forall x^* \in X^*, \quad \langle x_n, x^* \rangle \to \langle x_n, x^* \rangle \quad n \to \infty.$$

(i-b) w 強収束 $x_n \stackrel{\mathrm{S}}{\to} x_\infty \in X$ $n \to \infty$, i. e., $x_\infty = \operatorname{s} \lim_{n \to \infty} x_n$ は, $\lim_{n \to \infty} ||x_n - x_\infty||_X = 0$.

一般に $x_{\infty} = s \lim_{n \to \infty} x_n \Rightarrow x_{\infty} = w^* \lim_{n \to \infty} x_n$, 逆は一般に不成立, $x_{\infty} = w^* \lim_{n \to \infty} x_n \Rightarrow x_{\infty} = s \lim_{n \to \infty} x_n$.

(ii-a) コンパクト (定義) 集合 $S(\subset X)$ が w^* コンパクト $\iff \forall \{x_n\}_n (\subset S), \exists \{x_{n_m}\}_m (\subset \{x_n\}_n), \exists x_\infty \in S, \text{ such that } x_\infty = w^* \lim_{m \to \infty} x_{n_m},$

(ii-b) コンパクト (定理, [1]), 集合 $S(\subset X)$ が \underline{s} 有界, 且つ $\underline{w}^*(X,Y)$ 閉 $\Longrightarrow \forall \{x_n\}_n(\subset S)$, $\exists \{x_{n_m}\}_m(\subset \{x_n\}_n), \exists x_\infty \in S$, such that $x_\infty = w^* \lim_{m \to \infty} x_{n_m}, \underline{w}^*(X,Y)$ コンパクト.

(ii-c) コンパクト (系 1) $S(\subset X)$, $\underline{Y} \subset X^{**}$, $S(\subset X)$ が \underline{s} 有界, 色で, \underline{s} 閉 $\Longrightarrow \forall \{x_n\}_n(\subset S)$, $\exists \{x_{n_m}\}_m(\subset \{x_n\}_n), \exists x_\infty \in S$, such that $x_\infty = w^* \lim_{n \to \infty} x_{n_m}$, i. e., $\underline{w}^*(X,Y) \Rightarrow \mathcal{N} \nearrow \mathcal{N}$.

(ii-d) コンパクト (系 2) 空間 $S(\subset X)\underline{Y=X^*}$, (よって \underline{X} は回帰的) $S(\subset X)$ が \underline{s} 有界 $\Longrightarrow S^-$: $\underline{w}(X,Y)$ 閉包 は $\underline{w}(X,Y)$ コンパクト.

最適密度分布の**存在の根拠**. (4) で最小化列 $\{x^n\}_n$ が K_{c_1} 内に存在. K_{c_1} は M 有界. 更に $w^*(M,L)$ 閉. (ii-b) から $\{x_n\}_n$ の部分列 (簡単 のため,同一記号) と極限 x_∞ があり, $x_n \stackrel{w^*}{\rightharpoonup} x_\infty$ $n \to \infty$ ((ii-c)).

ソボレフ空間の,2種類の埋め込み写像,V ∋ $v \to i_{DV} \equiv v \in H_D, V \ni v \to i_{\Gamma_N} v \equiv v|_{\Gamma_D} \in j_0(U_{\Gamma_N})$ に対する Rellich-Sobolev 型の,コンパクト埋蔵定理を適用し([3]), $\{i_D u(x_n)\}_n, \{i_{\Gamma_N} u(x_n)\}_n\}_n$ の部分列,再度簡単のため $\{i_D u(x_n)\}_n, \{i_{\Gamma_N} u(x_n)\}_n\}_n$ と記し,各々で H_D, H_{Γ_N} の収束部分列で,その 3.2 極限は各々 $i_D u_\infty, i_{\Gamma_N} u_\infty$ である.結果, $u^\infty|_D = i_D u(x^\infty), u^\infty|_{\Gamma_N} = i_{\Gamma_N} u(x^\infty)$ である.このと き, $j_0(x^\infty) = \langle f, g; u(x^\infty) \rangle$.

補助定理 1 凸汎関数, $\phi: X \to \mathbf{R}_+ = \mathbf{R} \cup \{\infty\}$ に対し,次の命題 (a) と (b) は同値. 更に (c), (d) 成立. ここで \mathcal{T} は考察の X 局所凸べクトル位相 (locally convex topology) ([3]).

- (a) $\forall x \in X$, $\liminf_{y \to x} \phi(y) \ge F(x)$ (lower semi-continuous, l. s. c.).
- (b) $\forall a \in \mathbf{R}, \quad F_a = \{x \in X \mid \phi(x) \leq a\} \text{ is } \mathcal{T} \text{ closed.}$
- (c) ϕ : \mathcal{T} l. s. c. $implies <math>\phi$: $w(X, X^*)$ l. s. c.
- (d) Let $E: K \times V \ni \{x, v\} \to E(x, v) = \frac{a(x, v, v)}{2} \langle f, g; v \rangle \in \mathbf{R}$, then $\mathcal{E}(x) = E(x, u^x, u^x)$ is concave with respect to $x \in K$ and $j_0(x) = -2\mathcal{E}(x)$ is a convex function ([4]).

定理 2 ([4]) $j_0(x)$ は K_{c_1} 内の最小化列 $\{x_n\}_n$ ($\subset K_{c_1}$) は, $w^*(M,L)$ 収束する部分列,簡単のため再度 $\{x_n\}_n$ と記す,とその弱 * 極限 $x_\infty \in K_{c_1}$ をもち,次式成立.

$$w^* \lim_{n \to \infty} j_0(x_n) = j_0(x_\infty) = \inf_{x \in K_{c_1}} j_0(x).$$

3 近似解 , 構成の試み

3.1 各種の方向微分

X,Y: バナッハ空間, C: 凸集合, $F:C \ni x \to F(x) \in Y$. $x,y \in C$ に対し,

$$F'(x;y-x) = \lim_{\epsilon \to *0} \frac{F(x+\epsilon(y-x)) - F(x)}{\epsilon}$$

を方向 $y^x = y - x$ での、 $F(\cdot)$ の方向微分と呼ぶ。

(i) 境界値問題 (2) の解 $u(x) \in V$ での, $v \in V$ を固定. $u^x \in V$ の方向微分 $u'(x;y^x) \in V$ は、写像 $K \ni x \to a(x,u^x,v) \in \mathbf{R}$ を用い、

$$a(x, u'(x, y^x), v) = -a(y^x, u, v) \quad \forall v \in V. \quad (6)$$

(ii) $x \in K, y \in K$, 方向 $y^x = y - x$ での, $j_0(x)$ の方向微分, $j'_0(x; y^x)$:

$$j_0'(x, y^x) = -a(y^x, u(x), u(x)).$$
 (7)

3.2 凸関数,方向微分と単調作用素

考察の凸汎関数 $j_0(x), x \in K$ の,方向微分 $j_0'(x)$ は簡単な計算により, $j_0'(x) = -||\nabla u(x)||^2 (\in L(\subset M^*)$ が示される.一般に

$$\partial \phi(x) = \{x^* \in X^* \mid \phi'(x, y - x) \\ \ge \langle x^*, y - x \rangle \quad \forall x \in D(\partial \phi)\}, \ \forall y \in X.$$

3.3 近似解,構成の試み

 $\delta > 0$ を一つ定め、以下に続く.

- (i) 任意の $x_0 \in K$, $t_m(x_0) = \int_D x_0(t) dt \le c_1$ のとき $x_1 = x_0 \in K_{c_1}$, $t_m(x_0) > c_1$ のとき, $x_1 = \frac{c_1 \kappa |D|}{t_m(x_0) \kappa |D|} \in K_{c_1}$. $\kappa < x_0, a.e.D$.
- (ii) $x_1 \in K_{c_1}$ に対する (2) の解 $u(x_1) \in V$ を求め, $|\nabla u(x_1)|^2 \in L$ を算出する. $x_2 = x_1 \delta j_0'(x_1) (= x_1 + \delta |\nabla u(x_1)|^2) \in L$.
- (iii) $x_2 \notin K$ のとき、 $x_3 = P_K x_2$. 実際、 $x_2(t) > 1 \rightarrow x_3(t) = 1$, $x_2(t) < \kappa \rightarrow x_3(t) = \kappa$, $\kappa \leq x_2(t) \leq 1 \rightarrow x_3(t) = x_2(t)$.
 - (iv) $x_0 = x_3$ とし、項目 (i) に戻る.

- [1] A. E. Taylor, Functional analysis, John Wiley and Sons, Inc, 1958.
- [2] I. Ekeland, R. Temam, Convex analysis and variatinal problems, North-Holland Publ., Amserdam, Oxford, New York, 1976.
- [3] J. Nečas, Direct methods in the theory of elliptic equations, Springer-Verlag Berlin, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [4] 記録,第14回研究部会連合発表会,2018 年3月15日-16日,大阪大学工学部(吹 田キャンパス).

波動型方程式の係数同定逆問題に対する H^1 - 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 数値解法を提案する. ここで対象とする合成梁 は、鉄とコンクリートの梁をボルトのような連 結部材で数箇所接合して構成されている片持ち 梁とする (図 1).

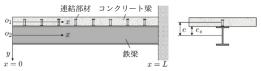


図 1. 片持ち合成梁

このような合成梁に対する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[2]:

$$\begin{cases} Cw_{,tt} - A_{k,\mu}w = 0 & \text{in } (0, L) \times (0, T), \\ w|_{t \le 0} = 0, \ w_{,t}|_{t \le 0} = 0 & \text{in } (0, L), \\ Dw|_{x = 0} = \overline{U}, \ Dw|_{x = L} = 0 & \text{on } (0, T). \end{cases}$$

 $w=(u_1(x,t),u_2(x,t),v_1(x,t),v_2(x,t))^{\mathrm{T}}$ は変位ベクトルであり, u_1,v_1 はコンクリート梁(梁 1)の, u_2,v_2 は鉄梁(梁 2)のx軸方向,y軸方向の変位とする. $C=\mathrm{diag}\left(\rho_1,\rho_2,\rho_1,\rho_2\right)$ であり, $\rho_i\in C^0[0,L]$ は梁 i の線密度とする.また L は梁の長さ,T は観測時間の長さである. $A_{k,\mu}$ は,次で定義される偏微分作用素とする:

 $A_{k,\mu}w =$

$$\begin{pmatrix} (a_{1}u_{1,x})_{,x} + k(u_{2} - u_{1} + e_{s}v_{2,x} + e_{c}v_{1,x}) \\ (a_{2}u_{2,x})_{,x} - k(u_{2} - u_{1} + e_{s}v_{2,x} + e_{c}v_{1,x}) \\ -(j_{1}v_{1,xx})_{,xx} \\ + (k(u_{2} - u_{1} + e_{s}v_{2,x} + e_{c}v_{1,x})e_{c})_{,x} \\ -\mu(v_{1} - v_{2}) \\ -(j_{2}v_{2,xx})_{,xx} \\ + (k(u_{2} - u_{1} + e_{s}v_{2,x} + e_{c}v_{1,x})e_{s})_{,x} \\ +\mu(v_{1} - v_{2}) \end{pmatrix}$$

 $a_i \in C^1[0,L], j_i \in C^2[0,L]$ は,それぞれ梁 i の軸剛性,曲げ剛性係数であり, e_c , e_s はコンクリート梁,鉄梁の厚さの半分の値とする.ここで各梁の線密度,剛性係数および厚さは既知であるとし, e_c , e_s は定数であることを仮定する. $k \in C^1[0,L]$, $\mu \in C^0[0,L]$ は,コンクリート梁と鉄梁の接触部分のせん断剛性,軸剛性で

あり、次の条件を満たすものとする.

 $0 \le k(x) \le \overline{k}$, $0 \le \mu(x) \le \overline{\mu}$, $\forall x \in [0, L]$. (1) ここで \overline{k} , $\overline{\mu}$ は与えられた正定数であり,接合部材が劣化していないときの接触部せん断剛性値,軸剛性値を意味している.D は $Dw = (u_1, u_2, v_1, v_2, v_{1,x}, v_{2,x})^{\mathrm{T}}$ により定義される作用素であり,x = 0 における Dirichlet 境界値 $\overline{U} \in (C^3[0, T])^6$ は既知であるとする.このとき,順問題の解 $w \in (H^2((0, T); H^1(0, L)))^2 \times (H^2((0, T); H^2(0, L)))^2$ は一意に存在する [3]. 対象としている合成梁の代表的な欠陥として,連結部材の劣化に伴う接触部の剛性低下がある

対象としている合成楽の代表的な欠陥として、連結部材の劣化に伴う接触部の剛性低下がある [2]. このことは、強制自由振動モデルにおいて k, μ の値の低下と同値である。そこで本研究では、次の波動型方程式の係数同定逆問題を考察する:

係数同定逆問題

x=0 で与えられた Neumann 境界値 \overline{Q} と $I\subseteq (0,L)$ で与えられた変位 $\overline{v}_i=v_i|_{I\times (0,T)}$ (i=1,2) より,接触部の剛性係数 k,μ を同定せよ.なお Neumann 境界値 \overline{Q} は,

$$a_1u_{1,x}|_{x=0}=\overline{N}_1\,,\quad a_2u_{2,x}|_{x=0}=\overline{N}_2\,,$$
 $-(j_1v_{1,xx})_{,x}$ $+k(u_2-u_1+e_sv_{2,x}+e_cv_{1,x})e_c|_{x=0}=\overline{T}_1\,,$ $-(j_2v_{2,xx})_{,x}$ $+k(u_2-u_1+e_sv_{2,x}+e_cv_{1,x})e_s|_{x=0}=\overline{T}_2\,,$ $-j_1v_{1,xx}|_{x=0}=\overline{M}_1\,,\quad -j_2v_{2,xx}|_{x=0}=\overline{M}_2$ により与えられる.

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 [4] とそれを応用した H^2 勾配法 [5] を組み合わせた数値解法を提案する.

2 係数同定逆問題に対する H^1 - H^2 勾配法

 H^1 勾配法は,形状最適化問題や位相最適化問題に対する数値解法として提案されている手法である [4].

 た関数とする.このとき,設計変数関数 $\theta \in C^1[0,L]$, $\zeta \in C^0[0,L]$ を用いて,密度型接触 部せん断剛性,軸剛性関数を次の通りに導入する. $\widetilde{k}(\theta) = \overline{k}\phi(\theta(x))$, $\widetilde{\mu}(\zeta) = \overline{\mu}\psi(\zeta(x))$. このとき, $\widetilde{k}(\theta)$, $\widetilde{\mu}(\zeta)$ は接触部剛性係数関数の条件 (1) をすべて満たしている.これらを用いて,密度型係数同定逆問題を次の通り定義する.

密度型係数同定逆問題

x=0 で与えられた Neumann 境界値 \overline{Q} と $I\subseteq (0,L)$ で与えられた変位 $\overline{v}_i=v_i|_{I\times (0,T)}$ (i=1,2) より,設計変数関数 $\theta\in C^1[0,L]$, $\zeta\in C^0[0,L]$ を同定せよ.

密度型係数同定逆問題を解くために,次の最 小化問題を導入する.

最小化問題

コスト汎関数 $J:C^1[0,L]\times C^0[0,L]\to \mathbb{R}_+$ を最小にする設計変数関数 $(\theta,\zeta)\in C^1[0,L]\times C^0[0,L]$ を見つけよ.

$$\begin{split} J(\widetilde{k}(\theta),\,\widetilde{\mu}(\zeta)) &= \int_0^T \frac{|Q[\widetilde{k}(\theta),\,\widetilde{\mu}(\zeta)] - \overline{Q}|^2}{||\overline{Q}||_{L^2}^2} \,\mathrm{d}t \\ &+ \int_0^T \int_I \sum_{i=1}^2 \frac{(v_i[\widetilde{k}(\theta),\,\widetilde{\mu}(\zeta)] - \overline{v}_i)^2}{||\overline{v}||_{L^2}^2} \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}t \,. \end{split}$$

ここで $Q[k(\theta), \tilde{\mu}(\zeta)]$ は $(k(\theta), \tilde{\mu}(\zeta))$ を係数関数に持つ順問題の解 $w[k(\theta), \tilde{\mu}(\zeta)]$ 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.最小化問題に必要な偏導関数は次のように得られる.

$$\partial_{\theta} J(\widetilde{k}(\theta), \, \widetilde{\mu}(\zeta)) = \partial_{k} J(\widetilde{k}, \, \widetilde{\mu}) \frac{\mathrm{d}\widetilde{k}}{\mathrm{d}\theta},$$
$$\partial_{\zeta} J(\widetilde{k}(\theta), \, \widetilde{\mu}(\zeta)) = \partial_{\mu} J(\widetilde{k}, \, \widetilde{\mu}) \frac{\mathrm{d}\widetilde{\mu}}{\mathrm{d}\zeta}.$$

 $\partial_k J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}), \, \partial_\mu J(\widetilde{k},\widetilde{\mu})$ は、それぞれ k 方向および μ 方向の Gâteaux 偏微分である.ここで $\partial_k J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}) \in H^2(0,L)^*, \, \partial_\mu J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}) \in H^1(0,L)^*$ であり、双一次形式

$$\alpha_{\varphi}^{(1)}(w, V)$$

$$= \int_{0}^{L} \varphi (u_{2} - u_{1} + v_{2,x}e_{s} + v_{1,x}e_{c})$$

$$\times (p_{2} - p_{1} + q_{2,x}e_{s} + q_{1,x}e_{c}) dx$$

$$\alpha_{\eta}^{(2)}(w, V) = \int_{0}^{L} \eta (v_{2} - v_{1}) (q_{1} - q_{2}) dx.$$

を用いて,次の通りに得られる.

$$\langle \partial_k J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}), \varphi \rangle = \int_0^T \alpha_{\varphi}^{(1)}(w[\widetilde{k},\widetilde{\mu}],V) \,\mathrm{d}t$$
 $+ \langle C \partial_t U_{\varphi}^{(\widetilde{k})}(T),W \rangle + \int_0^T \langle Z,F(\varphi)w[\widetilde{k},\widetilde{\mu}] \rangle \,\mathrm{d}t \,,$ $\langle \partial_{\mu} J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}), \eta \rangle = \int_0^T \alpha_{\eta}^{(2)}(w[\widetilde{k},\widetilde{\mu}],V) \,\mathrm{d}t$ $+ \langle C \partial_t U_{\eta}^{(\widetilde{\mu})}(T),W \rangle + \int_0^T \langle Z,G(\eta)w[\widetilde{k},\widetilde{\mu}] \rangle \,\mathrm{d}t \,.$ $V,U^{(\widetilde{k})},U^{(\widetilde{\mu})},Z$ は随伴問題の解であり, $F(\varphi)w$, $G(\eta)w$ は随伴問題に現れる外力項である.探索方向は,次の弱問題を解くことにより決定する. $(s_{\theta},\varphi)_{H^2} = -\langle \partial_{\theta} J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}),\varphi \rangle$, $\forall \varphi \in H^2(0,L)$, $(s_{\zeta},\eta)_{H^1} = -\langle \partial_{\zeta} J(\widetilde{k},\widetilde{\mu}),\eta \rangle$, $\forall \eta \in H^1(0,L)$. $(\cdot,\cdot)_{H^m}$ は $H^m(0,L)$ の内積である.

最小化設計変数関数を求めるための反復過程は、次の通りである: $l=0,1,2,\ldots$ に対して、

$$\begin{pmatrix} \theta_{l+1} \\ \zeta_{l+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_l \\ \zeta_l \end{pmatrix} + \epsilon_l \begin{pmatrix} s_{\theta}^{(l)} \\ s_{\zeta}^{(l)} \end{pmatrix}.$$

 $\epsilon_l > 0$ は,適切に選択された探索の幅である. 同定された設計変数関数を用いて,接触部剛性 係数関数 $\widetilde{k}(\theta_l)$, $\widetilde{\mu}(\zeta_l)$ を数値的に再構成する. 数値実験結果については,発表時に示す.

- [1] M.P. Bendsøe and O. Sigmund, Topology Optimization: Theory, Method, and Application, Springer, 2004.
- [2] 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
- [3] A. Morassi, G. Nakamura, K. Shirota and M. Sini, A variational approach for an inverse dynamical problem for composite beams, European J. Appl. Math., 18 (2007), 21-55.
- [4] 畔上秀幸,形状最適化問題,森北出版, 2016.
- [5] D. Kurashiki and K. Shirota, H^2 gradient method for the coefficient identification problem in a partial differential equation, JSIAM Letters, in press.

スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H² 勾配法

代田 健二1

1 愛知県立大学情報科学部

e-mail : shirota@ist.aichi-pu.ac.jp

1 はじめに

本研究の目的は、波動方程式族の係数同定問 題に対する安定な数値解法を開発することであ る. 著者は, 多次元線形波動型方程式の係数同 定問題[1]、そして実用問題である鉄とコンク リートの合成梁に対する欠陥同定問題 [2] に対 して, 一定精度で同定可能な数値解法を研究・ 開発してきた. これらの研究では、変分法的定 式化により元の係数同定問題を観測データを用 いた制約条件付き最小化問題へと変換し、その 問題を数値的に解くための射影勾配法を用いた アルゴリズムを導出、そして数値実験により一 定精度で同定可能であることを示した. 一方, 観測データに確率的な誤差が含まれている場 合やモデル化誤差が含まれる実測データに対し ては、安定かつ一定精度の数値解を得ることが できず、実用問題への適用に課題を残す結果と なった.

一方,著者は,機械部品等の数理的設計分野で近年盛んに研究されている密度型位相最適化問題に対して研究を実施し,一定の成果を上げることができた.密度型位相最適化問題の数理モデルは,適当に滑らかな関数を係数とする偏微分方程式に対する係数同定問題として表される.そのため,離散化・丸め誤差の影響により,非線形計画法を適用すると数値不安定現象が発生する.この問題に対して畔上は,数値的に安定かつ理論的にも一定の裏付けを持った H^1 勾配法を開発した[3]. そこで著者らは,1次元波動型方程式の係数同定問題に対して H^1 勾配法を拡張した H^2 勾配法を開発し,確率的な観測誤差が含まれる場合についても,安定かつ一定精度で同定可能なことを示した[4].

そこで本研究では、多次元問題への開発手法 適用の第一歩として、次のスカラー波動方程式 に対する係数同定問題を考察する:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla \cdot (K(\boldsymbol{x})\nabla u) = 0 & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ u(\cdot, 0) = \frac{\partial u}{\partial t}(\cdot, 0) = 0 & \text{in } \Omega, \\ u = g & \text{on } \Omega \times (0, T). \end{cases}$$

 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ (n=2,3) は区分的に滑らかな境

界 $\partial\Omega$ をもつ有界かつ凸な領域とし,T は与えられた観測時間の長さである.また, $g\in C^6((0,T);H^{\frac{5}{2}}(\partial\Omega))$ は与えられた関数とし,係数関数 $K\in L^\infty(\Omega)$ は, $0< C_1 \leq K(x) \leq C_2$, $\forall x\in\Omega$ を満たすものとする.ここで, C_1,C_2 は与えられた正定数である.

 $\omega \subseteq \Omega$ を与えられた部分領域とし、内部観測 $\overline{u} \in H^5((0,T);H^1(\omega))$ が与えられているとする. このとき、次の内部観測による係数同定問題を考察する:

係数同定問題

内部観測 \overline{u} より係数関数 K(x) を同定せよ.

係数関数を同定する方法として, H^2 勾配法を採用する。シグモイド関数と設計変数の合成関数により定義された密度型係数関数を導入し,設計変数を同定する密度型係数同定問題を導出する。内部観測データを用いた汎関数を導入し,汎関数の最小化関数を同定することで設計変数,すなわち係数関数の同定を試みる.最小化関数の同定には勾配法を採用し,その探索方向を求めるのに H^2 勾配法のアイディアを用いる.さらに,数値実験により提案手法の有効性を検証する.

2 H² 勾配法による同定アルゴリズム

本研究で用いる H^2 勾配法は、Hilbert 空間上での勾配法を基礎としている。そのため、本稿では L^∞ 空間ではなく $L^\infty(\Omega)$ に連続的に埋め込まれる $H^2(\Omega)$ に係数関数が属することを仮定する.

 $\phi \in C^2(\mathbb{R})$ を、 $0 \leq \phi(y) \leq 1$ 、 $\forall y \in \mathbb{R}$ を満たす関数とする、設計変数関数 $\theta \in H^2(\Omega)$ を用いて、密度型係数関数を導入する.

$$K_{\theta}(\mathbf{x}) := (C_2 - C_1)\phi(\theta(\mathbf{x})) + C_1.$$

ここで $K_{\theta} \in H^{2}(\Omega)$ であり、制約条件を満たしている.この密度型係数関数を用いて、元の係数同定問題を次のとおりに密度型へと変更する.

密度型係数同定問題

内部観測 u より、設計変数関数 θ を同定せよ.

この問題は,元の問題と違い,属する関数空間 以外に制約条件が課されていない.

密度型問題を解くため、次の汎関数を導入する.

$$J(\theta) = \widetilde{J}(K_{\theta}) = \int_{0}^{T} \int_{\omega} \frac{|u[K_{\theta}] - \overline{u}|^{2}}{\|\overline{u}\|^{2}} dxdt.$$

ここで, $\|\overline{u}\| := \left(\int_0^T \int_{\omega} |\overline{u}|^2 \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}t\right)^{\frac{1}{2}}$ である. 汎関数 J の最小化関数により,設計変数を同定する.最小化関数を同定する方法としては, 勾配法を用いる.そのため,汎関数 J の導関数が必要となる.

汎関数 J の導関数は、次のとおりに求めることができる.

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\mathrm{d}\widetilde{J}}{\mathrm{d}K} \circ \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\theta} \,.$$

ここで,

$$\frac{d\widetilde{J}}{dK}(\widetilde{K}) = -\int_0^T \nabla u[\widetilde{K}] \cdot \nabla w \, dt$$

であり、 $w \in H^1((0,T);H^1(\Omega))$ は随伴問題の解である.

未知の設計変数を,次の反復プロセスにより 同定する.

$$\theta_{\ell+1} = \theta_{\ell} + \epsilon_{\ell} \frac{s_{\ell}}{\|s_{\ell}\|_{\infty}} \ (\ell = 0, 1, 2, \dots).$$

ここで s_ℓ は探索方向, $\epsilon_\ell > 0$ は適切に与えられた探索の幅である. 探索方向は,次の弱形式の方程式を解くことで得る.

$$\begin{split} \alpha \left(\nabla^2 s_\ell, \, \nabla^2 v \right)_{L^2} + \beta \left(\nabla s_\ell, \, \nabla v \right)_{L^2} + \gamma \left(s_\ell, \, v \right)_{L^2} \\ = - \left\langle \frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\theta}(\theta_\ell), \, v \right\rangle, \, \, \forall v \in H^2(\Omega) \,. \end{split}$$

ここで, α , β , γ は与えられた定数である.

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。 $\Omega=(0,1)\times(0,1)$ とし、真の係数関数は、中心 (0.5,0.5) で半径 1/7 の円内では次の値をとり、それ以外では 1 をとるものとする。

$$K(x, y) = \cos(7\pi\sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2}) + 1.$$

Dirichlet 境界条件は, y=1 では

$$q = 0.075(\cos \pi (2x-1)+1)B_5(t) \ (0 < t < 0.4)$$

であり、その他では $g \equiv 0$ とする。ただし、 $B_5(t)$ は $\sup B_5 = [0, 0.1]$ を満たす 5 次 B スプライン関数である。T = 1.75、 $\omega = \Omega$ とする。また観測データには、1% のランダム誤差を加えたものを使用する。 $C_1 = 0.95$ 、 $C_2 = 3.05$ 、 $\theta_0 \equiv -1.0$ 、 $\alpha = 4.0 \times 10^{-4}$ 、 $\beta = 4.0 \times 10^{-2}$ 、 $\gamma = 1.0$ としたときの同定結果は、図 1 のとおりである。この結果より、提案手法は安定な数値解法となっていることが示唆された。一方、得られた結果の同定精度は十分ではなく、今後は、パラメータの選択法などを検討することにより、より高精度な同定結果が得られるように提案手法の改良する必要がある。

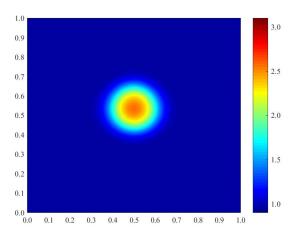


図 1. 同定係数関数 K_{θ}

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K03420 の助成 を受けたものです.

- C. Choi, G. Nakamura, and K. Shirota, Variational approach for identifying a coefficient for the wave equation, Cubo A Math. J., Vol.2 (2007), 81–101.
- [2] S. Jimbo, A. Morassi, G. Nakamura and K. Shirota, A non-destructive method for damage detection in steelconcrete structures based on finite eigendata, Inv. Prob. Sci. Eng., Vol.20 (2012), 233–270.
- [3] 畔上秀幸,形状最適化問題,森北出版, 2016.
- [4] D. Kurashiki and K. Shirota, H^2 gradient method for the coefficient identification problem in a partial differential equation, JSIAM Lett., in press.

一様分布との適合度検定を用いた乱数性判定におけるP値の分布の離散性の 影響の解析

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

NIST 乱数検定では、得られた P 値の分布と一様分布との適合度の検定を用いた乱数性の判定法が用いられている $^{[1]}$. これまでに適合度検定として、 χ^2 検定を用いる場合、Frequency Test と Rank Test は、P 値の離散分布の偏りの影響で、系列数が多くなると理想的な乱数列であっても有意水準以上の頻度で検定に不合格となることを示した $^{[2]}$.本研究では、適合度の検定にコルモゴロフースミルノフ検定(以下 K-S検定)を用いた場合においても P 値の離散分布の偏りにより理想的な乱数列であっても検定に不合格となることを示し、カオス真軌道 $^{[3]}$ 、メルセンヌ・ツイスターによって生成した 2 値系列に対する数値実験によって結果を検証する.

2 P値の一様性に基づく乱数性の判定

NIST 乱数検定(NIST SP800-22 Revision 1a) は, 15 種類 188 項目の乱数検定の集合として定義されている[1]. 各項目の乱数検定では,第一段階の検定として, m個の長さnの 2 値系列についてそれぞれ乱数検定を行い, m個の P値を得る. 次に第二段階の検定として,第一段階の検定で得られた P値の一様性に基づいて対象となる系列の乱数性の判定が行われる. 本研究では,一様分布との適合度の検定として, K-S検定を用いた場合について, P値の分布の離散性の判定結果への影響を解析する.

3 コルモゴロフ-スミルノフ検定

K-S 検定では、任意の分布関数と観察されたデータの分布との一致を検定することができる $^{[4]}$. 第一段階の検定で得られた $^{[4]}$ 値 p_1,p_2,\cdots,p_m の分布と一様分布との一致の検定において、K-S 検定の検定統計量は、

$$D = \max_{0 \le p \le 1} |F_m(p) - F_{unif}(p)| \tag{1}$$

と定義される. ここで, $F_m(p)$ は, 第一段階の 検定で得られた P 値の経験分布の分布関数,

$$F_m(p) = \frac{1}{m} \# \{1 \le i \le m | p_i \le p \}$$
 (2)

であり、 $F_{unif}(p)$ は、一様分布の分布関数、

$$F_{unif}(p) = p \ (p \in [0,1])$$
 (3)

である. 有意水準 α での検定の場合,

$$\sqrt{m} D \le K_m(\alpha) = \sqrt{-0.5 \log \alpha/2}$$
 (4) のとき合格と判定される.

4 P値の分布関数と K-S 検定の不合格条件

実際の P 値の分布関数を $\hat{F}(p)$ とし、式(1)の $F_m(p)$ が $\hat{F}(p)$ と一致する場合、K-S 検定の検定統計量は、系列数mに依存しない定数

$$\widehat{D} = \max_{0 \le p \le 1} |\widehat{F}(p) - F_{unif}(p)| \tag{5}$$

となる. $\hat{F}(p)$ が $F_{unif}(p)$ と一致する場合, $\hat{D}=0$ であるが, 一致ない場合, $\hat{D}>0$ となり, 有意水準 α の検定において系列数mが,

$$m_{\alpha} = \left(\frac{K_m(\alpha)}{\widehat{D}}\right)^2 \tag{6}$$

より大きくなると検定に不合格となる. 以下, Frequency Test および Rank Test について, \widehat{D} および m_{α} を算出する.

4.1 Frequency Test

Frequency Test は、対象とする 2 値系列の 0 と 1 の頻度について検定を行う. 長さ n の 2 値系列について、1 の個数をXとすると、P 値は、

 $p_{Freq}(X) = \operatorname{erfc}(|2X - n|/\sqrt{2n})$ (7) と定義される.ここでXの分布は,二項分布に 従うためXの生成確率は,

$$P_{Freq}(X) = {}_{n}C_{X}/2^{n} \tag{8}$$

となる. これらの P 値と生成確率を用いて, Frequency Test における P 値の分布関数は,

$$\hat{F}_{Freq}(p) = \sum_{p_{Freq}(X) \le p} P_{Freq}(X) \tag{9}$$

となる. 系列長 $n=10^6$ の場合, $\widehat{D}\simeq 0.000798$, $m_{0.01}\simeq 4,161,291$ となる.

4.2 Rank Test

Rank Test は、 $M \times M$ の2値行列の階数の分布に基づき対象とする系列の乱数性を判定する. 理想的な乱数列の場合に階数がM, M-1, および, M-2 以下となる確率を P_0 , P_1 , P_2 とする. 長さn の2値系列を $n_M=\lfloor n/M^2\rfloor$ 個の部分列に分け、各部分列から2値行列を構成して各行列の階数を計算する. 階数がM, M-1, および, M-2 以下となる観測度数を R_0 , R_1 , $R_2=n_M-R_0-R_1$ とすると、Rank Test のP値は、

$$p_{Rank}(R_0, R_1) = 1 - G(\chi_{Rank}^2, 2),$$
 (10)

$$\chi_{Rank}^{2} = \sum_{i=0,1,2} \frac{(R_{i} - n_{M} \times P_{i})^{2}}{n_{M} \times P_{i}}$$
 (11)

と定義される. ここで, $G(\chi^2,k)$ は, 自由度kの χ^2 分布の分布関数である. R_0 , R_1 の生成確率は,

$$P_{Rank}(R_0, R_1) = {}_{n_M}C_{R_0} \times {}_{n_M - R_0}C_{R_1} \times (P_0)^{R_0} \times (P_1)^{R_1} \times (P_2)^{R_2},$$
(12)

P値の分布関数は、

$$\hat{F}_{Rank}(p) = \sum_{p_{Rank}(R_0, R_1) \le p} P_{Rank}(R_0, R_1)_{\text{(13)}}$$

となる. 系列長 $n=10^6$ の場合, $\widehat{D}\simeq 0.004863$, $m_{0.01}\simeq 112,033$ となる.

5 数値実験

ベルヌーイシフト写像のカオス真軌道 $^{[3]}$, および、メルセンヌ・ツイスター $^{(MT)}$ を用いて生成した系列について、 $n=10^6$ の場合のFrequency Test と Rank Test の K-S 検定による検定結果を表 1,表 2 に示す。有意水準 $\alpha=0.01$ の場合、 $K_m(\alpha)\simeq 1.62$ であり、Frequency Test、Rank Test 共に、系列数mが大きくなると、K-S 検定に不合格となることがわかる。K-S 検定の検定統計量Dについては、算出した \hat{D} と概ね一致する結果が得られた。

また,第一段階の検定で得られた P 値について 10^{-6} の精度での異なる P 値の個数 N_p を計算した結果. Frequency Test の場合,約 2000 個,Rank Test の場合,約 6000 個の P 値が得られた.これらが均等に分布していれば, \hat{D} は、 $0.0001\sim0.0005$ の値をとることが予想されるが,理論値および実験値はこれよりも高い値となっており、Frequency Test および Rank Test については、P 値の離散分布の偏りが大きいと考えられる.

表1 K-S 検定の結果(カオス真軌道)

検定項目	m	D	$\sqrt{m} D$	N_p
Frequency Test	1×10^{6}	0.001472	1.472	1971
	2×10^{6}	0.001188	1.680	2019
	3×10^{6}	0.001078	1.867	2037
	1×10^{6}	0.004962	4.962	5346
Rank Test	2×10^{6}	0.005283	7.471	5663
	3×10^{6}	0.005149	8.918	5737

表 2 K-S 検定の結果(メルセンヌ・ツイスター)

検定項目	m	D	$\sqrt{m} D$	N_p
Frequency Test	1×10^{6}	0.001191	1.191	1969
	2×10^{6}	0.001336	1.889	2024
	3×10^{6}	0.001162	2.013	2039
	1×10^{6}	0.005119	5.119	5454
Rank Test	2×10^{6}	0.005052	7.145	5671
	3×10^{6}	0.004994	8.649	5735

6 まとめ

本研究では、NIST 乱数検定における Rank Test、および、Frequency Test について、P値の厳密な分布関数を算出し、対象とする系列数が多くなると一様分布との K-S 検定に不合格となることを示した。この結果は、カオス真軌道、および、メルセンヌ・ツイスターによって生成した 2値系列に対する検定結果とよく一致した。NIST 乱数検定に含まれる他の検定についても、Approximate Entropy Test など、K-S 検定で不合格となる検定があり、その解析は次の課題である。

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.

- [1] NIST SP800-22 Revision 1a, https://csrc.nist.gov/publications/de tail/sp/800-22/rev-la/final, 2010.
- [2] 山口明宏,斉藤朝輝,NIST 乱数検定における P値の一様性に基づく検定結果の判定法について,日本応用数理学会2015年度年会,2015.
- [3] Asaki Saito, Akihiro Yamaguchi, Chaos 26 (2016), 063122.
- [4] 伏見正則,乱数,UP 応用数学選書,東京 大学出版会,1989.

Overlapping Template Matching 検定におけるテンプレートの選び方に関する一考察

岩崎淳

福岡工業大学

e-mail: a-iwasaki@fit.ac.jp

1 概要

乱数検定は与えられた数列に対する仮説検定であり、"与えられた数列は理想的な乱数である"を帰無仮説とする.暗号の評価などに欠くことのできないものであり、実際に米国の標準共通鍵暗号 AES の選定時には、乱数検定のテストセットである NIST SP800-22 [1] が用いられた.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.

Overlapping Template Matching 検定はその中に含まれる検定の一つで、与えられた {0,1}数列の中にテンプレートと同じパターンが何回あるかを調べ、それによって検定を行う。元来、連(全てが1の並び)のみがテンプレートとして想定されており、厳密な参照分布も連に対してのみ導出されていた [2]. これは同じく SP800-22 に含まれる兄弟分的な Non-overlapping Template Matching 検定と状況が大きく異なる。近年、4-bit のすべてのテンプレートに対する参照分布の導出法が提案されているが [3]、本稿では長さも含めて任意のテンプレートに対する導出法を述べる。

また、テンプレートを任意に拡張すると、テンプレートを変えて検定を複数実施できる。その際、複数の検定は独立(p値の分布が独立)であった方が良いと考えられる。本稿ではその価値観に基づいたテンプレートの選び方についても考察する。

2 Overlapping Template Matching 検定

Overlapping Template Matching 検定のアルゴリズムは以下のようなものである:

- 1) 与えられた n-bit の乱数を M-bit のブロック,計 $N := \left| \frac{n}{M} \right|$ 個に分割.
- 2) 各ブロックごとに、与えられた m-bit の テンプレートと同じパターンが何回あら われるか (ヒット数) を数える. なお、テンプレートと同じパターンが複数重なっ

ていた場合にはすべてカウントする.

- 3) ヒット数がi回であったブロックの数を f_i とおき、その数を数える、ただし、ヒット数が5回以上は f_5 にまとめる、
- 4) 帰無仮説の下での $[f_0, f_1, \dots, f_5]$ の理論値を $[N\pi_0, N\pi_1, \dots, N\pi_5]$ として,3) で得られた $[f_0, f_1, \dots, f_5]$ をカイ二乗検定にかけて p 値を計算する.

パラメータの推奨値としては, $n = 10^6$, M = 1032, m = 9 ないし 10 である.

3 参照分布の導出

Overlapping Template Matching 検定行う ためには参照分布 $[\pi_0, \pi_1, \cdots, \pi_5]$ を導出して おく必要がある. これは、テンプレート・テン プレート長 m・ブロック長 M に依存する.

先行研究 [2] では、連のテンプレートに対して以下の方法で厳密な参照分布を導出している:

- 1) r-bit の数列 2^r 本のうちヒット数が i となる数列の本数を $T_i(r)$ とおく.
- 2) 漸化式を用いて, $T_0(M), T_1(M), \cdots$, $T_4(M)$ を求める.
- 3) $\pi_i = T_i(M)/2^M$ $(i = 0, 1, \dots, 4)$, $\pi_5 = 1 \sum_{i=0}^4 \pi_i$ と計算.

ブロックとしてありうる 2^M 本の数列一本一本に対してヒット数を調べることは現実的ではないが、ヒット数ごとに何本の数列が該当するかは数えられる。帰無仮説の下では 2^M 種類のブロックがあらわれる確率は一様なので、上記の方法で厳密な参照分布が求まる。

この手法を任意のテンプレートに拡張する. テンプレートが任意になった分だけ区別を増やしてやればよい. まず, 与えられた m-bit のテンプレートの左 j-bit を b_j とおく. 便宜上, b_0 と b_m も考える. 例えばテンプレートが 1101 ならば, $b_0 = \epsilon$, $b_1 = 1$, $b_2 = 11$, $b_3 = 110$, $b_4 = 1101$ となる. 次に, $T_i^j(r)$ を以下のように定義する: r-bit の数列 2^r 本のうち

ヒット数がiで

• $j = \max\{j' | 数列の右 j'$ -bit が $b_{j'}$ と一致 $\}$ を満たす

数列の本数. さらに、 $\{0,1,\cdots,m\}$ 上の関数 σ と τ を以下のように定義する:

$$\sigma(j) = \max\{j'|b_j||0$$
 の右 j' -bit が $b_{j'}$ と一致 $\}$, $\tau(j) = \max\{j'|b_i||1$ の右 j' -bit が $b_{i'}$ と一致 $\}$.

これらを用いて,以下の漸化式が立てられる:

$$T_i^j(r) = \sum_{j' \in \sigma^{-1}(j) \cup \tau^{-1}(j)} T_i^{j'}(r-1)$$
$$(j = 0, 1, \dots, m-1),$$
$$T_i^m(r) = \sum_{j' \in \sigma^{-1}(m) \cup \tau^{-1}(m)} T_{i-1}^{j'}(r-1)$$

適当な初期・境界条件を与えてこの漸化式を計算することで, $T_i^j(M)$ $(i=0,1,\cdots,4,\ j=0,1,\cdots,m)$ が得られる.そこから,

$$\pi_i = \frac{\sum_{j=0}^m T_i^j(M)}{2^M} \ (i = 0, 1, \dots, 4),$$

$$\pi_5 = 1 - \sum_{i=0}^4 \pi_i$$

として参照分布を求めることができる.

4 検定項目間の独立性

前節で述べた方法により任意のテンプレートに対して Overlapping Template Matching 検定を行えるようになり、テンプレートを変えて複数の検定を行うことができる。それによって新たに検定間の(非)独立性という問題が生じる。検定間でp値の結合分布が独立にならないのであれば、複数の検定を通じての有意水準を陽に表すことが難しくなる。また、強い相関のある複数の検定を実施するのは計算資源の無駄遣いと言えよう。ゆえに、検定間が独立になるように、良いテンプレートの組み合わせの選び方を考える。とりあえず選ぶ個数は2個とする。

詳細は割愛するが、前節の方法を拡張することで、2つのテンプレートに対して「参照分布の結合分布」を厳密に求めることができる. 仮にこの「参照分布の結合分布」が独立であれば、結果的に p 値の結合分布も独立になる. 実際には参照分布が完全に独立にならずとも、独立に近ければ p 値の結合分布も独立に近くなることが予想される. 特にサンプル数が少なく、「参照分布の結合分布」が独立な分布(各方向の周辺

分布の積)と"識別"できなければ、p値の結合分布も独立な場合と"識別"ができない.

一案として,参照分布の結合分布と独立な分布との"距離"として相互情報量を考えよう.テンプレート 1,2,3 をそれぞれ 1111111111,101110111,110111011 とする.パラメータはNIST の推奨値を用いた.テンプレート 1 と 2 を考えた時の相互情報量は 1.141274×10^{-6} (bit),テンプレート 2 と 3 を考えた時の相互情報量は 2.677488×10^{-1} (bit) となる.メルセンヌツイスタで生成した 10^6 本の数列について,テンプレート 1,2,3 に対する p 値を生成し,0.01 を下回った個数をまとめたのが表 1 である.テンプレートが 2 つ書かれている行は,2 つのテンプレートに対してそれぞれ p 値を計算し,両方で p 値が 0.01 を下回った個数を表示している.どの単一のテンプレートに対する検定にも問題

表 1. 各テンプレートに対する実験結果.

テンプレート 0.01 を下回った p 値の個数

1 10048
2 10077
3 10081
1, 2 103
2, 3 276

は認められない.また,テンプレート1と2の 検定の組み合わせの結果は,2つの検定が独立 であると考えても説明できる.しかし,テンプ レート2と3の検定の組み合わせの結果から, その2つの検定は明らかに独立ではないと言え る.ゆえに,その組み合わせは避けるべきと言 えよう.

- [1] NIST SP800-22, http://csrc.nist.gov/publications/nistpubs/800-22-rev1a/SP800-22rev1a.pdf.
- [2] K. Hamano and T. Kaneko, "Correction of Overlapping Template Matching Test Included in NIST Randomness Test Suite", IEICE trans. on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences, Vol. E90-A, No.9, (2007), 1788-1792.
- [3] F. Sulak, "New statistical randomness tests: 4-bit template matching tests", Turk J Math Vol. 41 (2017), 80—95.

整数上のカオス写像におけるビット毎の0/1の出現確率に関する一考察

村岡 英之 1 , 荒木 俊輔 1 , 宮崎 武 2 , 上原 聡 2 , 硴崎 賢 1

1九州工業大学,2北九州市立大学

e-mail: q794053h@mail.kyutech.jp

1 概要

理想的なカオス写像と計算機実装を想定した 有限精度の演算によるカオス写像では,リヤプ ノフ指数等のいくつかの統計的な性質は同様の 傾向を示すが,周期性等の異なる振る舞いが見 られる.そこで,有限精度上のカオス写像の性 質を考慮した擬似乱数生成器の構成に向けた研 究が行われている [1][2].

整数上で定義したカオス写像,本稿では特にテント写像やロジスティック写像において,計算過程の値を二進展開したビット列のビット毎の0/1の出現確率を調査し,0/1の出現頻度が同じであることを満たすため,擬似乱数生成に適したビット抽出位置について議論する.

2 整数上のカオス写像

一般に、テント写像とロジスティック写像は式(1)、式(2)と表される.

$$y = \begin{cases} ax & (x < 0.5) \\ a(1-x) & (x \ge 0.5) \end{cases} \tag{1}$$

$$y = \mu x (1 - x) \tag{2}$$

ただし、実数値 a, μ , x は $0 \le a \le 2$, $0 \le \mu \le 4$, $0 \le x \le 1$ を満たす. 計算機実装を想定し、

$$Y = \begin{cases} \left\lfloor \frac{(2 \cdot 2^n - A)}{2^n} \cdot X \right\rfloor & (X < 2^{n-1}) \\ \left\lfloor \frac{(2 \cdot 2^n - A)}{2^n} \cdot (2^n - X) \right\rfloor & (X \ge 2^{n-1}) \end{cases}$$
(3

$$Y = \left\lfloor \frac{(4 \cdot 2^n - M)}{2^n} \cdot \frac{X(2^n - X)}{2^n} \right\rfloor \tag{4}$$

と整数値で定義する. ただし, n は値の表現に用いるビット数を表し, A, M, X はそれぞれ閉区間 $[0,2^n]$ の整数値であり, [b] は実数 b の整数部分を返す床関数である. ここで, 式 (1) と式 (2) がカオスな振る舞いを見せる a と μ に注目するため, 式 (3) と式 (4) では $1 \le a \le 2$, $3 \le \mu \le 4$ を 2^n 個に分割するように定義した. 擬似乱数生成には,この写像の出力を次の写像への入力として繰り返し適用して得られる系列

が利用される. 本稿では,式(3)と式(4)の分子部分を式(5),式(6)とおく.

$$Q = \begin{cases} (2 \cdot 2^{n} - A)X & (X < 2^{n-1}) \\ (2 \cdot 2^{n} - A)(2^{n} - X) & (X \ge 2^{n-1}) \end{cases}$$

$$R = (4 \cdot 2^{n} - M)X(2^{n} - X) \qquad (6)$$

3 ビット毎の 0/1 の出現確率

擬似乱数出力として,Q,Rから抽出したビット列を連結することを想定する.このとき,生成される擬似乱数列における 0/1 の出現確率は抽出対象のビットの 0/1 の出現確率に依存する.そのため,0/1 の出現頻度が均しいことを満たすためには,抽出対象となるビットの 0/1 の出現確率の均一さが必要である.

そこで、0/1 の出現確率が均等なビットを把握するために、区間 [5,16] における n に対して、A、M、X に対する全数調査を行い、QとRのビット毎の0の出現確率を求めた。例として、n=16 のときの整数上のテント写像によるQに対するビット毎の0の出現確率の平均値と標準偏差を図1に示す。ただし、最下位ビットを第0番目のビットとする。求めた0/1の出

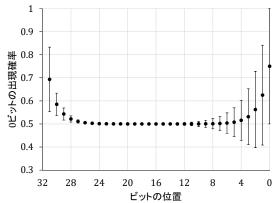


図 1. n=16 のときの整数上のテント写像による Q に対するビット毎の 0 の出現確率の平均値と標準偏差

現確率の平均値と標準偏差より、二つの写像ではいずれのnにおいても0/1の出現確率に偏りを持つビットは最上位および最下位からの一部であり、これらの部分ビット列の長さはnによらず一定であることや、0/1の出現頻度が均し

く,抽出対象となるビットが存在することを確認できた.さらに,n の増加に対し 0/1 の出現確率の偏りが小さく抽出対象となるビットの範囲が増加することも確認した.

これ以降,整数上のテント写像において,A に対するビット毎の出現確率について議論する。まず,出力値として切り捨てられる部分である $0 \le i \le n-2$ に着目すると, $2^{i+1} \mid A$ のとき,Q の第i 番目以下のビットにおける0 の出現確率は1 となり,それ以外は $(2^{n-1}+1)/2^n$ となる.

次に、Qの上位ビットにおける0の出現確率の例として、n=10のときのQの第 $(2n-4) \sim (2n-1)$ 番目のビット、つまり第 $16 \sim 19$ 番目のビットにおける0の出現確率を図2に示す。図

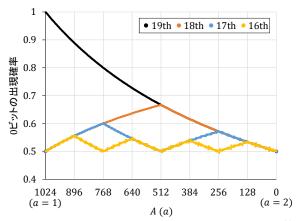


図 2. n=10 のときの整数上のテント写像における第 $16\sim19$ 番目のビットの 0 の出現確率

2のように、Qの最上位ビットである第 (2n-1) 番目のビットにおける 0 の出現確率は A=0 のときに約 1/2 から始まり、A に対して単調増加である。また、第 (2n-2) 番目以下のビットにおける 0 の出現確率の傾向として A に対し図 2 に示すような特徴的な山形が確認でき、その極大値の個数が第 (2n-2) 番目のビットのときに1個、そこから 1 つ下位のビットに行く度に倍になることが分かった。加えて、下位のビットに行くほど山形が多少崩れて 0 の出現確率に偏りを持つような A がごく一部に現れるものの、全体として 0 の出現確率が 1/2 に近づく傾向にあることが確認できた。

ここで,図1には現れていない特徴的な事柄について追記する。Qの中央にある第(n-1),n番目のビットでは,A=0, 2^n 付近で,0の出現確率に偏りを持つビットが多く見られた。そのため,擬似乱数生成に第(n-1),n番目のビットを用いる場合はAの選択や更新に注

意が必要である.

最後に、上記以外のビットの例として、n=10 のときの Q の第 (n+2) 番目のビット、つまり第 12 番目のビットにおける 0 の出現確率を図 3 に示す。図 3 のように、0 の出現確率は多

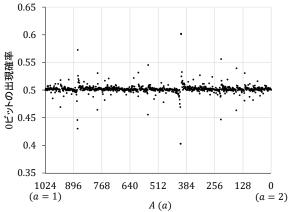


図 3. n = 10 としたときの整数上のテント写像における第 12 番目のビットの 0 の出現確率

くのAで1/2に近い値を取ることが分かった.

4 まとめ

本稿では,整数上のテント写像やロジスティック写像において,計算過程で求まる値のビット毎の0/1の出現確率について議論した.その結果,nによらず,最上位,最下位の一部のビットは抽出対象として適していないこと,それ以外の中央部のビットは抽出対象として適しており,nの増加に対してその範囲も広がることが分かった.本稿での議論は,ごく限られたビット長での全数調査の結果であるため,今後任意のビット長に対する理論的な解析を行う....

- [1] 奥富, "テント写像の下位側のビットを抽出して得られる擬似ランダムビット列の特徴について," 2013 年暗号と情報セキュリティシンポジウム (SCIS2013), 2F3-6, pp.1-6, 2013.
- [2] H. Muraoka, S. Araki, T. Miyazaki, S. Uehara and K. Kakizaki, "Occurrence Rate per Bit for Any Control Parameter on the Logistic Map over Integers," Proc. of International Symposium on Information Theory and its Applications(ISITA2016), pp.822-826, 2016.

ラグ付きフィボナッチ生成法に対するある非統計的検定について

原本 博史

愛媛大学 教育学部

e-mail: haramoto@ehime-u.ac.jp

1 概要

C 言語の擬似乱数生成関数 random() では、 ラグ付きフィボナッチ生成法と呼ばれる生成法 が用いられている。これは初期値 $(x_0, \ldots, x_{30}) \in (\mathbb{Z}/2^{32})^{31}$ から漸化式

$$x_{i+31} = x_{i+28} + x_i \pmod{2^{32}}$$
 (1)

を用いて擬似乱数を生成する方法である[1]。

ラグ付きフィボナッチ生成法で生成された擬似乱数は、最下位ビットの 0-1 分布が悪いことが経験的に知られており、これらを捨てる改良がなされる場合もある。さらに理論的な解析として、擬似乱数列の下位 1-6 ビット目それぞれの 0-1 分布と二項分布のずれを、MacWilliams恒等式を用いて測る研究がある [2,3]。本発表では、重み数え上げ多項式からほとんどの項を捨てた多項式でこのずれを近似的に測った結果と、 χ^2 適合度検定の適切なサンプルサイズについて報告する。

2 0-1 分布の計算法

nビット擬似乱数生成法Gで生成された $m+\ell$ 個の連続する出力 $x_0,\ldots,x_{m-1+\ell}$ に対し、nビット目に現れる1の個数をWで表す。擬似乱数の初期値が一様ランダムに選ばれる仮定のもとでは、Wは確率変数となる。以下、確率 $q_k=\mathbb{P}(W=k)$ を求める。

有限集合 S を初期値全体の集合とし、写像 $O_G: S \to (\mathbb{Z}/2^n)^{m+\ell}$ を、初期値 $s \in S$ に対して s から生成される $m+\ell$ 個の連続する出力 $x_0, \ldots, x_{m-1+\ell}$ を対応させるものとする。

ここで集合Sがアーベル群、 O_G が群準同型であれば、確率 g_k は

$$q_k = \# \left\{ s \in S \left| \sum_{i=2^{n-1}}^{2^n - 1} \operatorname{wt}_i(O_G(s)) = k \right\} / \# S \right.$$
$$= \# \left\{ v \in C \left| \sum_{i=2^{n-1}}^{2^n - 1} \operatorname{wt}_i(v) = k \right\} / \# C \right.$$

と表される。ここで、集合 C は出力全体の集

合 $O_G(S)$ とし、重み $\operatorname{wt}_i(\boldsymbol{v})$ はベクトル \boldsymbol{v} の成分が i であるものの個数を表す。

さらに、非負整数 $j_i (i=0,1,\ldots,2^n-1)$ に対し重み数え上げ

$$A_{j_0,...,j_{2^n-1}} :=$$

$$\#\{ \mathbf{v} \in C | \operatorname{wt}_i(\mathbf{v}) = j_i (i = 0, ..., 2^n - 1) \}$$

を用いると、確率 q_k は

$$q_k = \sum_{j_0 + \dots + j_{2^n - 1} = k} A_{j_0, \dots, j_{2^n - 1}} / \# C$$

と表される。したがって、Cのすべての要素に対する重み計算ができれば、確率 q_k を求めることができる。

3 重み数え上げ多項式と MacWilliams 恒等式

しかし、一般に #C が大きい場合、重み数え上げの計算は NP 完全であることが知られている [4]。これに対して松本-西村らは、通常の内積に関する直交補空間

$$C^{\perp} := \{ y \in (\mathbb{Z}/2^k)^m \mid (x, y) = 0 (x \in C) \}$$

の重み数え上げが可能な場合、符号理論に現れる MacWilliams 恒等式を利用して確率 q_k を求めている [2,3]。

定理 $\mathbf{1}$ (MacWilliams 恒等式 [5]) C の重み数え上げ多項式 $W_C(X_0,\ldots,X_{2^n-1})$ を

$$\sum_{j_0+\dots+j_{2^n-1}=m+\ell} A_{j_0,\dots,j_{2^n-1}} X_0^{j_0} \cdots X_{2^n-1}^{j_{2^n-1}}$$

で定めるとき、次の等式が成り立つ。

$$W_C(X_0, \dots, X_{2^n - 1}) = W_{C^{\perp}}(Z_0, \dots, Z_{2^n - 1}) / \# C^{\perp}$$

 $(Z_j = \sum_{p=0}^{2^n - 1} e^{2\pi\sqrt{-1}jp/2^n} X_j)$

n が大きい場合、 C^{\perp} の重み数え多項式 $W_{C^{\perp}}$ の計算も困難となる。そこで本研究では、多項式 $w_{C^{\perp}}$ を $W_{C^{\perp}}$ から X_0 に関する最大および 2 番目に大きい次数の項だけ残した多項式とし、

$$w_{C^{\perp}}(Z_0,\ldots,Z_{2^n-1})/\#C^{\perp}$$

からCの重み数え上げに対応するものを求めることとした。

4 χ^2 -discrepancy

確率変数 W に対する帰無仮説を

$$\mathcal{H}_0: W \sim B(m+\ell, 1/2)$$

とするとき、理論上想定される分布 (p_k) は $p_k=\binom{m+\ell}{k}/2^{m+\ell}$ $(k=0,\ldots,m+\ell)$ である。一方、擬似乱数の出力が従う分布は (q_k) である。このとき、 χ^2 適合度検定のサンプルサイズを

$$N_p = (\chi_{\nu}^2(p) - \nu)/\delta$$

とすると、得られる p 値の期待値は p となることが知られている [2]。ここで $\chi^2_{\nu}(p)$ は自由度 ν の χ^2 分布の 100p%点を表し、

$$\delta := \sum_{k=0}^{\nu} (p_k - q_k)^2 / p_k$$

を χ^2 -discrepancy という。

 δ, N_p は多項式 W_{C^\perp} より求まるが、 W_{C^\perp} を多項式 w_{C^\perp} に替えた場合のものをそれぞれ δ', N_p' で表す。

表 1 は、ラグ付きフィボナッチ法 (1) で生成される 34 個の出力について、1-6 の各ビット毎に $N_{0.99}$ および $N_{0.99}'$ を計算した結果である。現在は実験的な結果に止まるものの、多項式 $w_{C^{\perp}}$ が δ および N_p の計算において十分良い近似を与えていることがわかる。

表 1. 1-6 ビット目の $N_{0.99}$ および $N'_{0.99}$ の値

ビット	1	2	3
$N_{0.99}$	12249	49113	196568
$N'_{0.99}$	12288	49152	196607
ビット	$4 \mid$	5	6
	786390	5 3145680	6 12582839

多項式 $W_{C^{\perp}}$ から δ , N_p を求める計算では、6 ビット目でも計算コストが比較的大きくなる。他方、 δ' , N_p' の場合、20 ビット目程度まで計算は容易である。

5 γ² 適合度検定の結果

ラグ付きフィボナッチ生成法 (1) で生成された 34 個の連続する擬似乱数の 7-9 ビット目それぞれの 0-1 分布について、帰無仮説 \mathcal{H}_0 の有

意水準 1%での χ^2 適合度検定について結果を表 2-4 に示す。ここでサンプルサイズは、多項式 $w_{C^{\perp}}$ より求めた $N'_{0.75}$ および $N'_{0.99}$ とし、5 回ずつ実験している。

表 2. 7 ビット目 $(N'_{0.75}=10548139, N'_{0.99}=50331515)$

	1st	2nd	3rd	$4 \mathrm{th}$	$5 ext{th}$
$N'_{0.75}$	合格	合格	合格	合格	合格
$N'_{0.00}$	棄却	棄却	棄却	棄却	合格

表 3. 8 ビット目 ($N'_{0.75}$ =42192556, $N'_{0.99}$ =201326057)

	1st	2nd	3rd	4th	5th
$N'_{0.75}$	合格	合格	棄却	合格	合格
$N'_{0.99}$	合格	棄却	合格	棄却	棄却

表 4. 9 ビット目 $(N'_{0.75}=168770226, N'_{0.99}=805304230)$

	1st	2nd	3rd	4th	$5 \mathrm{th}$
$N'_{0.75}$	合格	合格	合格	合格	合格
$N'_{0.99}$	合格	棄却	合格	棄却	合格

謝辞 本研究は JSPS 科研費 16K13750 および 17K14234 の助成を受けたものです。

- [1] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming. Vol.2. Seminumerical Algorithms 3rd Ed., Addison-Wesley, 1997.
- [2] M. Matsumoto and T. Nishimura, A Nonempirical Test on the Weight of Pseudorandom Number Generators, in: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 2000, pp. 381–395, 2002.
- [3] H. Haramoto, M. Matsumoto T. Nishimura and Y. Otsuka, A non-empirical test on the second to the sixth least significant bits of pseudorandom number generators, in: Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 2012, pp. 417–426, 2013.
- [4] A. Vardy, The intractability of computing the minimum distance of a code, IEEE Trans. Inform. Theory 43, no.6 (1997), 1757–1766.
- [5] F. J. MacWilliams and N. J. Sloane, The Theory of Error-Correcting Codes, North Holland Pub., 1977.

ネットワーク上の蔵本モデルの同期現象

Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University, Japan Hayato Chiba (千葉逸人) chiba@imi.kyushu-u.ac.jp

Abstract

Dynamics of systems of large populations of coupled oscillators have been of great interest because collective synchronization phenomena are observed in a variety of areas. The Kuramoto model is often used to investigate such phenomena, which is a system of differential equations of the form

$$\frac{d\theta_k}{dt} = \omega_k + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^{N} f(\theta_j - \theta_k), \ k = 1, \dots, N.$$
 (1)

In this talk, an infinite dimensional Kuramoto model is considered, and Kuramoto's conjecture on a bifurcation diagram of the system will be proved; under certain assumptions, it is proved that when the parameter (coupling strength) K is smaller than the critical value K_c , then the trivial solution (de-synchronized state) is asymptotically stable, and when K exceeds K_c , a nontrivial solution (synchronized state) bifurcates from the trivial one.

It is well known that the spectrum (eigenvalues) of a linear operator determines a local dynamics of a system of differential equations. Unfortunately, a linear operator obtained from the infinite dimensional Kuramoto model has the continuous spectrum on the imaginary axis, so that the usual spectral theory does not say anything about the dynamics. To handle such continuous spectra, a new spectral theory of linear operators based on Gelfand triplets is developed. Basic notions in the usual spectral theory, such as eigenspaces, algebraic multiplicities, point/continuous/residual spectra, Riesz projections are extended to those defined on a Gelfand triplet. It is proved that they have the same properties as those of the usual spectral theory.

The results are applied to the Kuramoto model to prove Kuramoto's conjecture. It is proved that a generalized spectrum on the left half plane induces an exponential decay of solutions. Furthermore, a center manifold theorem on a certain space of distributions will be proved with the aid of the Gelfand triplet and the generalized spectrum. Even if there exists the continuous spectrum on the imaginary axis, there exists a finite dimensional center manifold on a space of distributions. Then, the dynamics on the center manifold determines a bifurcation diagram of the Kuramoto model.

References

- [1] H.Chiba, A spectral theory of linear operators on rigged Hilbert spaces under certain analyticity conditions, Adv. in Math. 273, 324-379, (2015).
- [2] H.Chiba, A proof of the Kuramoto's conjecture for a bifurcation structure of the infinite dimensional Kuramoto model, Ergo. Theo. Dyn. Syst, 35, 762-834, (2015).
- [3] H.Chiba, I.Nishikawa, Center manifold reduction for a large population of globally coupled phase oscillators, Chaos, 21, 043103 (2011).
- [4] H.Chiba, G. S. Medvedev, M. S. Muzuhara, Bifurcations in the Kuramoto model on graphs, Chaos, 28, (2018).

ネットワーク力学系の同期とネットワーク構造

國府寬司

京都大学・大学院理学研究科

e-mail: kokubu@math.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本講演は, C.-W. Shih (National Chiao-Tung Univ., 台湾), J.-P. Tseng (National Chengchi University, 台湾), 岡宏枝(龍谷大学)との進行中の共同研究に基づくものである.

結合振動子系などの結合力学系における同期 現象はさまざまなところにみられ,その数理的 メカニズムを理解することが重要な問題は数 多くあげられる.ここでは特に,結合力学系の ネットワーク構造に注目して,その同期につい て考えたい.

2013年の論文 [1] で, Fiedler, 望月らは,変 数の依存関係が有向グラフとして表現される散 逸的な常微分方程式系のクラスを Regulatory Network として数学的に定式化し,そのダイ ナミクスと有向グラフの構造との関係を調べ た.特に,その変数全体の集合の部分集合Iが determining node であることを,任意の2つの 解の I-成分の差が $t \to \infty$ で 0 に近づくならば いつでも,2つの解の差が $t \rightarrow \infty$ で0に近づく ということとして定義し,彼らの Regulatory Network においては, Regulatory Network に 付随する有向グラフの Feedback Vertex Set (以 下, FVS)は determining node であることを示 し,またそのある意味の逆も示した.ここでは, 彼らの理論の1つの応用として, Regulatory Network の複数のコピーを相互に結合させた 常微分方程式系を考え、その同期とネットワー ク構造との関係について調べる.

Fiedler, 望月らの Regulatory Network は生命科学における遺伝子制御ネットワークに動機付けられた数学的定式化である([2])が,上述のような Regulatory Network の結合系も,生命科学の分野などで自然に現れる.例えば図1はゼブラフィッシュの体節形成にみられる分節時計遺伝子の制御関係を表しているが,それに関わる細胞の内部の遺伝子の制御関係と,細胞を横断する遺伝子の制御関係がからみあうことで,複数の細胞の間の遺伝子の制御関係が同期し,体節形成が正しく進行することが重要であり,それは以下の図のような遺伝子ネットワー

ク間の結合関係として捉えることができる.

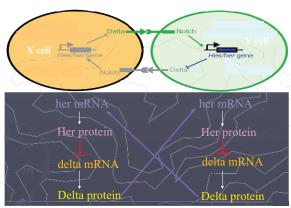


図 1. ゼブラフィッシュの分節時計遺伝子の制御関係

2 準備: Regulatory Network と FVS

変数 $\mathbf{z}=(z_1,\dots,z_N)$ に関する散逸的な常微分方程式系 $\dot{\mathbf{z}}=\mathbf{F}(\mathbf{z})$ を考える.この右辺は十分なめらかとし,各成分 $\mathbf{F}=(F_1,\dots,F_N)$ はそれぞれ

$$F_i = F_i(z_i, \mathbf{z}_{I_i})$$

の形をしているとする.ここで, I_i は i 変数に関する input set と呼ばれ, z_i 変数の微分方程式の変数の依存関係を示す.このとき, $\mathcal{N}=\{1,\ldots,N\}$ を頂点とし,j から i への有向辺を $j\in I_i$ と定めることで有向グラフ Γ が定義される.これを考えている常微分方程式系 $\dot{\mathbf{z}}=\mathbf{F}(\mathbf{z})$ に付随するネットワークと呼ぶ.

この常微分方程式系がさらに decay 条件, すなわちある定数 C>0 に対して

$$\forall i, \ \partial_1 F_i(z_i, \mathbf{z}_{I_i}) < -C$$

をみたすとき , $\dot{\mathbf{z}}=\mathbf{F}(\mathbf{z})$ とそれに付随する Γ の 組 $\mathbf{R}=(\mathbf{F},\Gamma)$ を Regulatory Network([1]) と呼ぶ.ただし, ∂_1 は第1変数に関する偏微分を表す.

有向グラフ Γ の頂点の部分集合Iに対して,部分グラフ $\Gamma \setminus I$ にループが全く存在しないとき,Iを Γ のFVS (Feedback Vertex Set) という.Regulatory Network $\mathbf{R} = (\mathbf{F}, \Gamma)$ に対し, $I \subset \Gamma$ が SDN (Set of Determining Nodes) であるとは, $\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{F}(\mathbf{z})$ の任意の 2 つの解 $\mathbf{z}(t)$, $\mathbf{z}'(t)$

について, $\lim_{t\to\infty}\{\mathbf{z}_I(t)-\mathbf{z}_I'(t)\}=0$ ならば必ず $\lim_{t\to\infty}\{\mathbf{z}(t)-\mathbf{z}'(t)\}=0$ となることをいう.ただし $\mathbf{z}_I(t)$ は $\mathbf{z}(t)$ のI 成分を表す.

Fiedler, 望月らの論文 [1] の主結果の 1 つは , Regulatory Network $\mathbf{R}=(\mathbf{F},\Gamma)$ においては FVS は必ず SDN であること ,また I が Γ を共有 するすべての Regulatory Network $\mathbf{R}=(\mathbf{F},\Gamma)$ について SDN ならば , I は Γ の FVS となることである .

3 問題の定式化と主結果

以下, $\mathcal{K}=\{1,\ldots,K\}$ とおく.次のような,巡回的に結合したK個の Regulatory Networks の結合系 (\mathbf{R},\mathbf{G}) を考える:

$$\dot{\mathbf{z}}^k = \mathbf{F}(\mathbf{z}^k) + \mathbf{G}^k(\mathbf{z}^1, \dots, \mathbf{z}^K), \quad k = 1, \dots, K$$

ここで $\mathbf{z}^k=(z_1^k,\dots,z_N^k)$ であり, $\mathbf{R}=(\mathbf{F},\Gamma)$ は Regulatory Network, \mathbf{G}^k はそれらの結合を表し, \mathcal{K} 上の標準的な巡回置換 σ に対し

$$\mathbf{G}^k(\mathbf{z}^1,\dots,\mathbf{z}^K) = \mathbf{G}^1(\mathbf{z}^{\sigma^k(1)},\dots,\mathbf{z}^{\sigma^k(K)})$$

が成り立つとする.この常微分方程式系の解を $\mathbf{Z}(t) = (\mathbf{z}^1(t), \dots, \mathbf{z}^K(t))$ と書く.

このような結合系 (\mathbf{R},\mathbf{G}) において , $V\subset\Gamma imes$ \mathcal{K} が \mathbf{SDNS} (Set of Determining Nodes for Synchronization) であるとは , (\mathbf{R},\mathbf{G}) の任意の 2 つの解 $\mathbf{Z}(t)$, $\mathbf{Z}'(t)$ が ,

$$\forall (i, k), (i, \ell) \in V, \lim_{t \to \infty} \{z_i^k(t) - z'_i^{\ell}(t)\} = 0$$

ならばいつでも $\lim_{t\to\infty}\{\mathbf{Z}(t)-\mathbf{Z}'(t)\}=0$ を満たすことと定義する .

以上の設定の下で,次が成り立つ:

定理 1 Regulatory Network $\mathbf{R} = (\mathbf{F}, \Gamma)$ の結合 系 (\mathbf{R}, \mathbf{G}) に対し, I が Γ の FVS ならば, $I \times \mathcal{K}$ は結合系 (\mathbf{R}, \mathbf{G}) の SDNS である.

ここで ,結合系 (\mathbf{R},\mathbf{G}) はそれ自体が1 つの $\mathrm{Reg-ulatory}$ Network となるが , $I \times \mathcal{K}$ は一般にその FVS とは限らないことを注意しておく .

次に , 結合系 (\mathbf{R},\mathbf{G}) の結合が巡回的とは限らないが線型 , すなわち

$$\mathbf{G}^{k}(\mathbf{z}^{1},\ldots,\mathbf{z}^{K}) = \sum_{j=1}^{K} a_{kj} D(\mathbf{z}^{k} - \mathbf{z}^{j})$$

の形である場合を考える.ここで $N \times N$ 行列 D は内的な結合を表し, $K \times K$ 行列 A =

 (a_{kl}) は外的な結合を表す.このとき上と同様に $I\subset\Gamma$ を Regulatory Network $\mathbf{R}=(\mathbf{F},\Gamma)$ の FVS であるとし,一般性を失うことなく $\mathcal{N}=\{1,\ldots,N\}$ が $I=\{\ell+1,\ldots,N\}$ となるように ラベル付けられているとしてよい.そのように した場合に行列 D が

$$D = \begin{pmatrix} D_J & P \\ Q & R \end{pmatrix}$$

であるとする.

定理 2 以上の仮定の下で, D_J が(必要ならさらにラベル付けを取り替えて)狭義下三角行列,すなわちその成分 d_{ij} が $i\leq j$ ならば $d_{ij}=0$ となるようにできるならば, $I\times\mathcal{K}$ は結合系 (\mathbf{R},\mathbf{G}) の SDNS である.

以上の定理の証明には,論文[1]のFVSに関する Lemma 2.2 と論文[3]の方法が重要な役割を果たす.講演では,いくつかのネットワークの具体例もあげて,定理の意味とその限界についても述べる予定である.

- [1] B. Fiedler, A. Mochizuki, G. Kurosawa, D. Saito, Dynamics and Control at Feedback Vertex Sets, I: Informative and Determining Nodes in Regulatory Networks, J. Dyn. Diff. Eq., 25 (2013), 563–604.
- [2] A. Mochizuki, B. Fiedler, G. Kurosawa, D. Saito, Dynamics and Control at Feedback Vertex Sets, II: A Faithful Monitor to Determine the Diversity of Molecular Activities in Regulatory Networks, J. Theor. Biol., 335 (2013), 130–146.
- [3] C.-W. Shih, J.-P. Tseng, A General Approach to Synchronization of Coupled Cells, SIAM J. Appl. Dyn., 12 (2013), 1354–1393.

複数のグラフに依存する結合振動子系の連続極限

伊原 亮輔 1, 矢ヶ崎 一幸 2

1,2 京都大学 情報学研究科 数理工学専攻

e-mail: ¹ihara0ryosuke@amp.i.kyoto-u.ac.jp, ²yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

グラフ上の結合振動子系は,ニューラルネットワークやジョセフソン接合配列,電力ネットワークなどさまざまな数理モデルを提供し,一般に大きな次元を有する.連続極限はこれらの系に対する有力な解析手法のひとつであり,大次元の微分方程式系の解を積分微分方程式の解によって近似するものである.最近 Medvedev [1] は単一グラフ上の結合振動子系に対する連続極限について数学的な基礎を与えている.

本報告では,文献 [1] の結果を拡張し,複数のグラフに依存する結合振動子系に対しても連続極限の手法が有効であることを理論的に明らかにする.また,具体例として,2つのグラフに依存する蔵本モデルを取りあげ,理論結果の有用性を確認する.

2 結合振動子系と連続極限

次式で与えられる,複数のグラフに依存する 結合振動子系を考える.

$$\frac{d}{dt}u_i^n(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n w_{ij}^{nk} D_k \left(u_j^n(t) - u_i^n(t) \right),$$

$$i \in [n] := \{1, 2, \dots, n\}$$
 (1)

ここで,各 $n\in\mathbb{N}$ に対し, $G_{nk}=\langle V(G_{nk}),E(G_{nk}),W(G_{nk})\rangle$ $(k\in[m])$ は m 個の重み付きグラフ列であり,集合 $V(G_{nk})=[n]$ および $E(G_{nk})$ は,それぞれ,節点集合および枝集合を表し, $W(G_{nk})$ は次の形の n 次対称行列とする.

$$(W(G_{nk}))_{ij} = \begin{cases} w_{ij}^{nk} & \text{for } (i,j) \in E(G_{nk}); \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

 $W(G_{nk})$ をグラフ G_{nk} に対する (枝の) 重み行列とよび , G_{nk} が単純グラフの場合 , その成分は 0 または 1 である . また , $D_k(u)$ はリプシッツ連続関数とする .

例えば , グラフ G_{n1} 上で定義された結合振動 子系に対する制御の問題では , 次のように G_1 とは異なるグラフ G_2 に依存する制御力を付加

することが考えられる:

$$\frac{d}{dt}u_i^n(t)
= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n w_{ij}^{n1} D_1 \left(u_j^n(t) - u_i^n(t) \right)
+ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n w_{ij}^{n2} D_2 \left(u_j^n(t) - u_i^n(t) \right)$$
(2)

式 (2) は式 (1) において m=2 とした場合となっている.式 (1) に対する連続極限は次式で与えられる.

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \sum_{k=1}^{m} \int_{I} W_{k}(x,y) \times D_{k}(u(y,t) - u(x,t))dy \quad (3)$$

ここで,I=[0,1] であり, $W_k(x,y)$ は,重み行列 $W_k(G_n)$ のある種の極限を表す, I^2 上の対称な可測関数で,graphon と呼ばれる.

3 理論結果

以下では,xの関数 g(x) および x と t の関数 u(x,t) を,それぞれ,x の関数の値を取る変数 および t の関数とみなし,g および u(t) と表す.

定理 1. 各 $k\in[m]$ に対して, D_k はリプシッツ連続, $W_k\in L^\infty(I^2)$, $\mathbf{u}(0)=\mathbf{g}\in L^\infty(I)$ とする.このとき,式(3)の解 $\mathbf{u}\in C^1(\mathbb{R};L^\infty(I))$ が一意的に存在する.

式 (1) の解を階段関数 $u_n(x,t)$,

$$u_n(x,t) = u_i^n(t), \quad x \in \left[\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}\right)$$
 (4)

によって表し,これを $\mathbf{u}_n(t)$ と記す.

定理 2. 各 $k \in [m]$ に対して $W_k: I^2 \to [-1,1]$ は対称な可測関数とし, $\mathbf{g} \in L^\infty(I)$ を式 (4) と同様の階段関数する.このとき,初期条件 $\mathbf{u}_n(0), \mathbf{u}(0) = \mathbf{g}$ に対する式 (1) と (3) の解は次式を満たす.

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_n\|_{C(0,T;L^2(I))} \to 0 \text{ (as } n \to \infty)$$

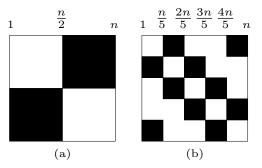
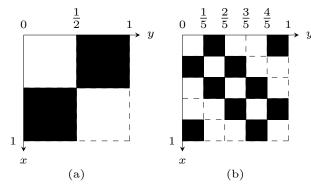


図 1. 重み行列 ($\Box = 0$, $\blacksquare = 1$): (a) $W(G_n)$; (b) $W(\bar{G}_n)$



 \square 2. graphon ($\square = 0$, $\blacksquare = 1$): (a)W(x,y); (b) $\overline{W}(x,y)$

4 適用例

bをある実数 , G_n と \bar{G}_n を , 図 1 に示すような重み行列をもつ単純グラフとして , 次の結合振動子系を考える .

$$\frac{d}{dt}u_{i}^{n}(t)
= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij}^{n} \sin\left(u_{j}^{n}(t) - u_{i}^{n}(t)\right)
+ \frac{b}{n} \sum_{j=1}^{n} \bar{w}_{ij}^{n} \sin 2\left(u_{j}^{n}(t) - u_{i}^{n}(t)\right)$$
(5)

式 (5) は自明解 $u_i(t)=0$ $(i\in[n])$ を有し,以下では,連続極限を用いて,この解の安定性を調べる.

式(5)に対する連続極限方程式は

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial t} u(x,t) \\ &= \int_0^1 W(x,y) \sin \left(u(y,t) - u(x,t) \right) \mathrm{d}y \\ &+ b \int_0^1 \bar{W}(x,y) \sin 2 \left(u(y,t) - u(x,t) \right) \mathrm{d}y \end{split} \tag{6}$$

となる.ここで,W(x,y) と $\bar{W}(x,y)$ は図 2 に示すような graphon である.式 (5) の自明解に

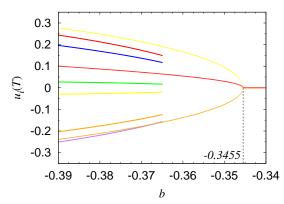


図 3. 式 (2) の数値シミュレーションの結果

対応して,式(6)も自明解u(x,t)=0をもつ. 関連した固有値問題は

$$\lambda \eta(x) = \int_0^1 W(x, y) (\eta(y) - \eta(x)) dy$$
$$+ 2b \int_0^1 \overline{W}(x, y) (\eta(y) - \eta(x)) dy$$

となり,6個の固有値

$$\lambda = 0, -\frac{1}{2} - \frac{5 \pm \sqrt{5}}{5}b, \ \lambda_i \ (i = 1, 2, 3)$$

を得る.ここで, λ_i はある3 次多項式の根である.容易に,

$$b > \frac{5 - \sqrt{5}}{8} \approx -0.3455$$

のときそのときに限って,実部正の固有値が存在し,連続極限方程式(6)の自明解が不安定となることが示される.

n=100 , T=400 として式 (5) に対する数値 シミュレーションを行った.得られた分岐図を 図 3 に示す.ここで,節点 $i=1\sim20$, $21\sim40$, $41\sim50$, $51\sim60$, $61\sim80$ および $81\sim100$ における $u_i(T)$ の値が,それぞれ,赤,橙,黄,緑,青および紫でプロットされている.非対称な非自明解が存在するとき,それと $u_i(T)$ 軸に関して対称な解が存在する.連続極限方程式から予測されるように,自明解は $b\approx-0.3455$ を境にそれよりも大きいとき安定,それよりも小さいとき不安定となっている.

参考文献

[1] G.S. Medvedev, The nonlinear heat equation on dense graphs and graph limits, SIAM J. Math. Anal., 46 (2014), 2743–2766.

化学反応経路網の幾何学的理解に向けて

荒井 迅1

1 中部大学創発学術院

e-mail: zin@isc.chubu.ac.jp

1 概要

本講演では量子化学計算で得られた反応経路 網のデータを可視化し、またポテンシャル曲面 の幾何構造を理解するための、数学的な裏付け のある手法を構築することを目的とした研究を 紹介する.

近年の計算機やアルゴリズムの進化により、第一原理計算(化学的な仮定を置かず真面目に電子状態を計算する手法)を用いた反応研究が飛躍的に拡大している.しかし、得られるデータは分子構造の配位を記述する高次元空間の情報であり、反応について理解するためには、何らかの方法で低次元空間に落としこむ必要がある.ところが、この部分の数学的理論はまだ未発達で、化学者が経験や基づき手動で行なっている状況である.

そこで本講演では、量子化学計算の結果をグラフとして可視化する際に多次元尺度法を用いた結果をまず前半で解説する。後半では、同変モース理論やコンレイ指数理論等のトポロジーの道具やそれらを計算機上に実装する計算トポロジー理論などを用いて、反応経路網の幾何学的な構造をより数学的に理解するための試みを紹介する。

2 多次元尺度法による反応経路の可視化

本節の内容は北海道大学の武次研究室との共 同研究 [1] の内容に基くものである.

本研究では量子化学計算に一般的に使える手法を開発するが、説明のために以下の具体的な問題設定を与える。考えるのは5つの金原子からなるクラスターの異性化反応、すなわちどのような構造を分子が取りやすいかを記述する問題である。N原子からなる分子の構造を記述する配位空間は3N-6次元あり、金5量体の場合は9次元空間である(正しくは R^{3N-6} を回転と平行移動、原子の入れ代えに関する対称性で割った、特異点を持つ空間になる)。第一原理計算を9次元の全空間で網羅的に行なうのは計算量的に不可能である。しかし、武次らの研究により、ポテンシャルの極小をとる特徴的

な構造や,それらを繋ぐ反応経路を探索しなが ら第一原理計算を行なる手法が確立している.

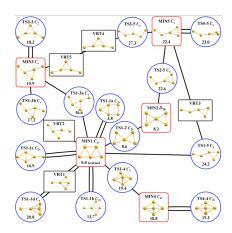


図 1. 既存手法による反応地図と反応経路

図1は第一原理計算により得られた金5量体の特徴的な構造と、それらを繋ぐ反応経路を2次元に配置したものである。実は、この図は計算の結果得られたポテンシャルの値と構造を元に、武次研究室の堤氏が手で構成したものである。どの構造をどこに配置するかは試行錯誤と化学的な経験から決定されたものであるが、理論的な裏付けはない。そのため、実際に観察される反応経路をこの図上にプロットすると、図2のようにグラフの平面プロットに対して連続にならない、不自然な跳躍が起きてしまうことがあった。

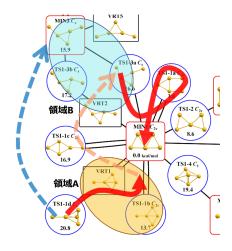


図 2. 反応経路の不自然な跳躍

そこで本研究では、グラフ理論の成果を用いて数学的に自然なグラフを構成する。例えば、図3は9次元配位空間での距離を最大限に保存するグラフを多次元尺度法で構成したものである。手で構成したグラフでは起きていた、不自然な反応経路の跳躍が起きず、化学的により自然な配置が得られている。また、この手法で構成した平面グラフとポテンシャルエネルギーの値を組み合わせると、図4のようなポテンシャル曲面とその上での分子配置の分布が得られる。

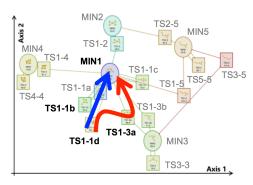


図 3. 提案手法による反応地図と自然な反応経路

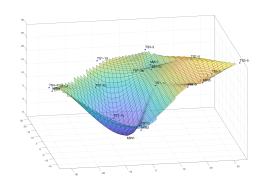


図 4. 提案手法に基づくポテンシャル曲面

3 同変モース理論の応用

前節の結果は既存手法よりも自然なポテンシャル曲面の理解を与えるものであるが,多次元尺度構成法は本質的に線型の理論であり,複雑な曲面に対しては良い結果を与える保証はない。また,第一原理計算を行なった反応経路から遠く離れた領域については有用な情報を与えることはできない。そこで,3N-6 個の変数に対する本来のポテンシャル曲面のトポロジーを可能な限り数学的に正確に把握することを考える。そのための試案を本節で紹介する.

ポテンシャル曲面の理解といってすぐに思い 付くのは,関数の特異点とトポロジーを結び付 けるモース理論である.しかし,配位空間には 分子の対称性に由来する特異点が存在するため, 通常のモース理論ではなく同変モース理論を使 う必要がある.実は,同変モース理論の化学反 応への応用が理論的に可能であることは以前か ら示唆されていたのだが [2],ホモロジー計算 の困難のため実際には用いられていなかった. そこで本研究では同変モース理論に必要な計算 アルゴリズムを近年開発された計算トポロジー の技法で実装することで,ポテンシャル曲面の トポロジーを記述する基礎理論を構築する.

さらに力学系理論で開発されたコンレイ指数の接続行列理論を同変モース理論と組み合わせる.接続行列を用いると,既に存在を示している特異点の情報から未知の特異点の存在を結論することができる(最も簡単な場合は「山と山の間には谷があるはず」という観察に対応する).これにより,配位空間の一部で行なった第一原理計算の結果から,不安定次数の高い構造の存在を予言することが可能になる.第一原理計算で不安定次数の高い構造を直接に探すのは計算量的に困難であるが,この方法ならば間接的に存在を示せる.

ポテンシャル曲面のトポロジーを把握すると、本研究の出発点である反応経路網のグラフ化でも進展が見込める.高次元に埋め込まれたグラフを、トポロジーをなるべく保ったまま平面に射影する構造保存埋め込みの手法が使えるのである.これにより、ポテンシャル曲面のトポロジーをより正しく反映したグラフを構成することができると期待される.

- [1] Takuro Tsutsumi, Yuriko Ono, Zin Arai and Tetsuya Taketsugu, A visualization of the intrinsic reaction coordinate and global reaction route map by classical multidimensional scaling, to appear in *Journal of Chemical Theory and Computation*.
- [2] Daniel Liotard and Michel Rérat, Equivariant Morse theory of the Nbody problem: Application to potential surfaces in chemistry, *Theoretica Chimica Acta* (1993) 86: 297–313.

等価回路モデルによる HTS 内の遮蔽電流密度解析

山口 敬済 1, 高山 彰優 1, 齋藤 歩 1, 神谷 淳 1

1 山形大学大学院理工学研究科

e-mail: yamaguchi@emperor.yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

よく知られているように、高温超伝導体(HTS) は核磁気共鳴や磁気共鳴画像法、リニアモー ターカーなどの HTS 機器に応用される。HTS 機器を開発するためには、HTS 内の遮蔽電流 密度解析が必要不可欠である。

HTS 機器の1つとして,近年,超伝導リニア駆動型ペレット入射法が提案された.リニアモーターカーの原理によって,同入射法はペレットコンテナを加速する.同入射法はペレットをプラズマ中心部へ直接入射できると予測されるため,空気銃を用いた従来法に代わる入射法として注目を集めている.しかしながら,同入射法を用いた実験はまだ始まったばかりであり,実際の加速性能は明らかではない.

本研究の目的は、等価回路モデルを用いて軸対称 HTS 薄膜内の遮蔽電流密度の時間発展を解析する数値コードを開発することである. さらに、同コードを用いて超伝導リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を調べることである.

2 等価回路モデル

超伝導リニア駆動型ペレット入射法の概念図を図1に示す。同入射法では、HTS 薄膜が取り付けられたペレットコンテナと印加磁東密度Bを生み出す電磁石を用いる。薄膜と電磁石の間に働く相互作用によって、ペレットコンテナは加速され、z方向へ速度vで推進する。薄膜は厚さb、半径Rの円板状と仮定し、薄膜位置をZとする。また、電磁石には長さ H_c 、半径 R_c のコイルを採用し、コイルには電流:

$$I_{\text{coil}}(Z, t) = \begin{cases} \alpha t & (0 < Z < Z_{\text{limit}}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (1)$$

を流す. 但し, α はコイル電流の電流増加率であり, $0 < Z < Z_{\text{limit}}$ は加速領域を表す. さらに,円柱座標 (r, θ, z) を採用する.

軸対称 HTS 薄膜に流れる遮蔽電流密度は θ 成分のみをもつため、遮蔽電流密度分布は電流ループの集合、 $\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_n$ 、を用いて近似できる。但し、 Λ_i は厚さ b, 幅 Δr_i の矩形断面

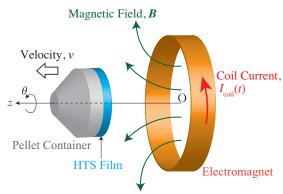
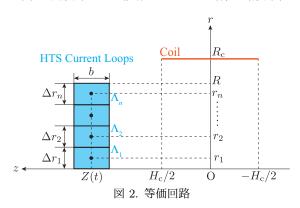


図 1. 超伝導リニア駆動型ペレット入射法の概念図



をもつ半径 r_i の電流ループである.

上記の仮定を用いれば、超伝導リニア駆動型ペレット入射法の電磁気的特性を等価回路(図2参照)によって記述できる。従って、Faraday則は以下の回路方程式と等価である。

$$L\frac{d\mathbf{I}}{dt} = -\left[\mathbf{M}\frac{dI_{\text{coil}}}{dt} + \mathbf{M}'vI_{\text{coil}} + \mathbf{V}\right], \quad (2$$

但し、I(t) 及び V(I) はそれぞれ電流ループの 遮蔽電流ベクトルと誘導起電力ベクトルである. また,L はインダクタンス行列であり,M(Z) はコイルによる電流ループへの相互インダクタンス・ベクトルである. さらに, $v \equiv dZ/dt$ は電流ループの速度,つまり,ペレットコンテナの速度である. (2) に現れる誘導起電力ベクトル V を決定するために,超伝導特性を表すベキ乗則 [1]:

$$V_j = V_{Cj} \left(\frac{|I_j|}{I_{Cj}} \right)^N \operatorname{sgn}(I_j), \tag{3}$$

を用いる. 但し,N は正の整数である. さらに, $V_{\mathrm{C}j}$ 及び $I_{\mathrm{C}j}$ はそれぞれ臨界電圧と臨界電流であり, $V_{\mathrm{C}j}=(2\pi r_j)E_{\mathrm{C}}$ と $I_{\mathrm{C}j}=(b\Delta r_j)j_{\mathrm{C}}$ から決定できる. 但し, E_{C} 及び j_{C} はそれぞれ臨界電界と臨界電流密度である.

一方,ペレットコンテナの運動は Newton の 運動方程式:

$$m\frac{dv}{dt} = -2\pi \sum_{j=1}^{n} r_j B_r I_j, \tag{4}$$

で決定される。但し,m は固体水素ペレットとペレットコンテナ,HTS 薄膜の総質量であり, $B_r(r,Z,t)$ は印加磁束密度 \mathbf{B} の r 成分である。ペレットコンテナは真空チューブ内を運動するため,空気抵抗を無視することができる。それ故,(4) の右辺は電流ループとコイルの間に働く Lorentz 力の総和を表す。

(2) と(4)を初期条件:

$$I = 0, v = 0, Z = Z_0$$
 at $t = 0,$ (5)

とともに解けば、HTS 薄膜内の遮蔽電流の時間 発展とペレットコンテナの運動を決定できる。 但し、 Z_0 は薄膜の初期位置である。(2) と (4)の初期値問題の解法には刻み幅自動調節付き Runge — Kutta 法 [2] を採用する。

3 数値シミュレーション

等価回路モデルでは、(2)と(4)の初期値問題を解くことによって、遮蔽電流の時間発展とペレットコンテナの運動を決定できる。本節では、等価回路モデルに基づいて開発した数値コードを用いて軸対称 HTS 薄膜内遮蔽電流密度を解析し、超伝導リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を検証する。

まず、HTS 薄膜内の遮蔽電流密度分布を調べる. 遮蔽電流が最も流れた時刻の遮蔽電流密度分布を図3に示す. 同図から明らかなように、遮蔽電流密度分布はHTS 薄膜の縁近傍に局在化する.

次に、コイル長 H_c が同入射法の加速性能に及ぼす影響を調べる。図 4 に終端速度 v_f のコイル長 H_c への依存性を示す。但し、終端速度 v_f は $Z>Z_{limit}$ を初めて満たした瞬間の速度である。同図から明らかなように、終端速度 v_f はコイル長 H_c に比例する。つまり、コイル長 H_c の増加とともに、同入射法の加速性能は向上する。

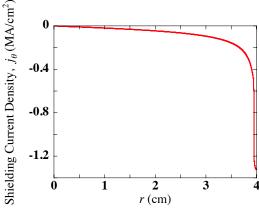


図 3. 遮蔽電流密度分布

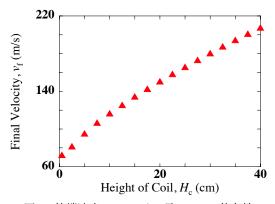


図 4. 終端速度 $v_{\rm f}$ のコイル長 $H_{\rm c}$ への依存性

4 結 論

本研究では、等価回路モデルを用いて軸対称 HTS 薄膜内遮蔽電流密度の時間発展を解析する数値コードを開発した。さらに、同コードを 用いて超伝導リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を調べた。本研究によって得られた結論を要約すると、以下のようになる。軸対称 HTS 薄膜内の遮蔽電流密度分布は縁近傍に局在化する。さらに、コイル長 H_c の増加とともに、超伝導リニア駆動型ペレット入射法の加速性能は向上する。コイル長 H_c を十分長くとれば、同入射法はペレットをプラズマ中心部に直接入射できる入射法として期待できる。

- [1] T. Yamaguchi, T. Takayama, A. Saitoh and A. Kamitani, Comparison between FEM and Equivalent-Circuit Model Simulations of Superconducting Linear Acceleration System for Pellet Injection, J. Adv. Simulat. (in press).
- [2] 森正武, FORTRAN77 数値計算プログラミング (増補版), 岩波書店, 1986.

プラズマ対向壁リサイクリングモデル開発を目指した水素プラズマ照射の 分子動力学シミュレーション

斎藤 誠紀¹,中村 浩章^{2,3},澤田 圭司⁴,小林 政弘²,河村 学思²,蓮尾 昌裕⁵
¹釧路工業高等専門学校,²核融合科学研究所,³名古屋大学,⁴信州大学,⁵京都大学 e-mail: saitos@kushiro-ct.ac.jp

1 研究背景と目的

磁場閉じ込め核融合炉における周辺部およびダイバータ部では、第一壁やダイバータ板で中性化した燃料中性粒子が多く存在している。これら中性粒子はプラズマとの相互作用(電離、荷電交換、再結合等)により、そこでのプラズマパラメータに影響するとともに、燃料の供給効率を決定する要因になる。また、最近では、中性粒子の温度がダイバータデタッチメント運転時の電子温度に影響しているとの指摘もある。これらの物理過程は、壁から発生した中性粒子種(原子か分子かなど)や、その温度、エネルギーに強く依存していると考えられるが、多くのシミュレーションモデルではこれらのパラメータは簡単な仮定に基づいており、計算の信頼性には疑問がある。

本研究[1-3]では、これらの課題を解決することを目標として、水素プラズマと対向壁との相互作用を分子動力学的手法に基づいてリサイクリングモデルを開発し、発生した中性粒子種やその温度(回転、振動)などのシミュレーションを行う。また、得られた結果を中性粒子の衝突輻射モデル[4]に取り込み、中性粒子輸送コードと結合することにより、プラズマへの影響を調べることを目指す。

2 シミュレーション手法

分子動力学法[5,6]を用いて炭素・水素原子の運動を計算する。以下に記す Brenner ポテンシャルを、i原子とj原子間の相互作用関数として用いる。

 $U_{ij}(\{r\}) = V^{R}(r_{ij}) - \bar{b}_{ij}(\{r\})V^{A}(r_{ij})$ V^{R} は二体の斥力ポテンシャル、 V^{A} は二体の引力ポテンシャルを表す。 r_{ij} は i 原子と j 原子の相対距離である。 \bar{b}_{ij} は多体力効果の因子である。 $\{r\}$ は系内に存在する全原子の位置ベクトルの集合である。運動方程式の積分には 2 次のシンプレクティック差分法を用いた。

標的材に原子が打ち込まれると、入射原子の運動エネルギーが標的材に入射する。入射した

エネルギーは標的材の熱エネルギーに変わり、入射点から周辺の原子へと伝播する。計算時間の問題から、分子動力学法の計算領域をこの熱の伝搬を計算できるほど十分広くとることは難しい。そこで、分子動力学法の領域外へ流出する熱エネルギーを計算するため、図1に示すように、分子動力学法計算領域(MD region)の外側に熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T$$

によって熱伝導を計算する領域(HC region)を設ける。熱伝導率 α は分子動力学法を用いて決定する。

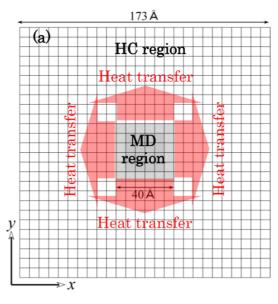


図 1. 分子動力学法 - 熱伝導方程式の ハイブリッド計算の概要

3 シミュレーションモデル

分子動力学法による炭素壁水素リサイクリングモデルのシミュレーション系を図2に示す。x,y方向の幅が40 Åのアモルファス炭素[7]を標的材として準備する。そのために、まず、40 Å×40 Å×30 Åの領域に炭素原子と水素原子を、炭素密度が1.122 Å3 、水素密度が1.073

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

Å³となるように一様乱数を用いて配置する。 そして、Langevin 熱浴を用いて、1000 K の温 度で 5 ps の間アニールし、標的材とする。ア ニール中に放出した水素は計算系から除外す る。結果、炭素原子 3872 個、水素原子 2080 個 で構成される水素含有アモルファス炭素が得 られた。

得られたアモルファス炭素を標的材として、水素原子を一発打ち込む計算を行う。水素原子の入射エネルギーは $500~{\rm eV}$ とし、z 軸に平行に打ち込む。x および y 方向には周期境界条件を課する。同様の試行を多数行い、標的材から放出された水素原子・分子の並進・振動・回転エネルギーの分布を計算する。

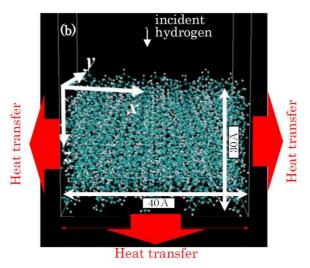


図 2. 計算モデル (MD region)

謝辞

本研究は LHD 計画共同研究 NIFS16KOAP031 の支援を受けて行われたものである。 本研究は、JSPS 科研費(18K13528)の助成

を受けたものである。

- [1] H. Nakamura, K. Sawada, M. Hasuo, and S. Saito: "Angular Distribution of Hydrogen Generated from Plasma-Facing Material", 18th ICPP, PPM1-39, Taiwan, 2016.
- [2] S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, K. Fujii, M. Hasuo, G. Kawamura, and M. Kobayashi: "Development of a Model for Hydrogen Recycling on Carbon Divertor by Molecular Dynamics

- Simulation", 16th PFMC, P2-52, Germany, 2017.
- [3] H. Nakamura, S. Saito, K. Sawada, M. Hasuo, G. Kawamura, M. Kobayashi, and A. M. Ito: "Population Distribution of Molecular Hydrogen at Plasma-Facing Material", Proc. 36th JSST, 2017.
- [4] K. Sawada and M. Goto: Atoms 4(4) (2016) 29.
- [5] S. Saito, A. M. Ito, and H. Nakamura: J. Appl. Phys. 110 (2011) 084320.
- [6] S. Saito, A. M. Ito, A. Takayama, and H. Nakamura: Jpn. J. Appl. Phys. 52 (2013) 01AL02.
- [7] S. Saito, A. M. Ito, A. Takayama, and H. Nakamura: Jpn. J. Appl. Phys. 51 (2012) 01AC05.

タングステンフラクタル構造の光学応答シミュレーション

中村 浩章 1,2 , 浅野 恵吾 2 , 安永 卓生 3 , 梶田 信 2 , 大野 哲靖 2 , 吉田 直亮 4 1 核融合科学研究所, 2 名古屋大学, 3 九州工業大学, 4 九州大学

e-mail: hnakamura@nifs.ac.jp

1 概要

核融合分野で、プラズマと壁(固体)の相互作用の研究が近年特に重要度を帯びている。その中で、ある温度のタングステンにある運動エネルギーを持つヘリウムプラズマを照射すると、ファズ構造と呼ばれるナノ構造が生じることを、名大グループが発見し、さらに多くの研究者により注目を浴びている [1-9]。この研究には、実験のみならず分子動力学シミュレーションを用いてファズ構造形成を再現する試みも行われている [6,7]。

さて、このタングステンファズ構造は、核融合炉材料としての研究のみならず、新たな試みとして"光触媒"としての利用も、前述の名大グループで検討されている。その一環として、ファズ構造の光学応答として反射率測定なども報告されている [8,9]。その報告によると、もともとの"平坦な表面"を持つタングステンの400nmの可視光の反射率は、約45% [10] であるが、その表面がファズ構造化することにより、反射率がほとんどゼロになる [8,9]。

我々は、タングステンのファズ構造化による反射率の低減メカニズムを、電磁波解析シミュレーションを用いて解明した。このシミュレーションには、finite-difference time-domain (FDTD) 法を用いている。そして、タングステン中で発生する誘導電流を扱うために、Drude-Lorentz モデルを用いる [11–16]。

2 Drude-Lorentz モデルを用いた FDTD 法

FDTD 法では、下記の Maxwell 方程式を差分化し、電磁場 (E, H) の時間及び空間の発展を計算する。

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0} \nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{\epsilon_0} \left(\mathbf{J}_{\mathrm{D}} + \sum_{i=1}^{m} \mathbf{J}_{\mathrm{L}i} \right) (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}, \qquad (2)$$

ここで、 ϵ_0 と μ_0 は真空の誘電率と透磁率を表す。さらに $J_{\rm D}$ と $J_{\rm Li}$ は、タングステン中に励

表 1. タングステン結晶の Drude-Lorentz モデルにおけ る光学定数 (文献 [10] より)

Parameters	Values
\overline{m}	4
$f_{ m D}$	0.206
$f_{ m L1}$	0.054
$f_{ m L2}$	0.166
$f_{ m L3}$	0.706
$f_{ m L4}$	2.590
$\Gamma_{\rm D} [{\rm rad/s}]$	9.722×10^{13}
$\Gamma_{\rm L1} \ [{\rm rad/s}]$	8.052×10^{14}
$\Gamma_{\rm L2} \ [{\rm rad/s}]$	1.946×10^{15}
$\Gamma_{\rm L3} \ [{\rm rad/s}]$	5.062×10^{15}
$\Gamma_{\rm L4} \; [{\rm rad/s}]$	8.866×10^{15}
$\omega_{\rm p} [{\rm rad/s}]$	2.008×10^{16}
$\omega_{\rm L1} \; [{\rm rad/s}]$	1.525×10^{15}
$\omega_{\rm L2} \; [{\rm rad/s}]$	2.912×10^{15}
$\omega_{\rm L3} \; [{\rm rad/s}]$	5.439×10^{15}
$\omega_{\mathrm{L4}} \; [\mathrm{rad/s}]$	1.139×10^{16}

起される電流密度の Drude 成分と Lorentz 成分を各々表す。そして、これらの電流密度の時間発展は以下の方程式を差分化し、計算する。

$$\frac{\partial \mathbf{J}_{\mathrm{D}}}{\partial t} + \Gamma_{\mathrm{D}} \mathbf{J}_{\mathrm{D}} = \epsilon_{0} f_{\mathrm{D}} \omega_{\mathrm{p}}^{2} \mathbf{E}, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{J}_{\mathrm{L}i}}{\partial t} + \Gamma_{\mathrm{L}i} \mathbf{J}_{\mathrm{L}i} = \epsilon_{0} f_{\mathrm{L}i} \omega_{\mathrm{p}}^{2} \mathbf{E} - \omega_{\mathrm{L}i}^{2} \mathbf{P}_{\mathrm{L}i}.(4)$$

これらの式に現れる定数は、タングステンの場合について表1にまとめている。さらに、 $J_{D, Li}$ と $P_{D, Li}$ の間には下記の関係が成り立つ。

$$\frac{\partial \mathbf{P}_{\mathrm{D}}}{\partial t} = \mathbf{J}_{\mathrm{D}}, \quad \frac{\partial \mathbf{P}_{\mathrm{L}i}}{\partial t} = \mathbf{J}_{\mathrm{L}i}.$$
 (5)

3 シミュレーション結果および考察

ファズ構造を、山形状に簡略化したモデル(山モデル、図 1)を用いて、山が電磁波吸収にもたらす影響を調べた。図 1に、反射率 R、吸収率 A、そして、それらの和 R+Aの表面の粗さ ρ 依存性をプロットした。これより、表面が荒くなることにより、つまり、ファズ構造化が進むにつれて、反射率が減少する。逆に言うと、

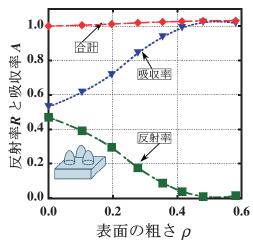


図 1. 反射率 R、吸収率 A、そして、それらの和 R+A の表面の粗さ ρ 依存性。ファズ構造を、図中の山モデルに簡略化した。山の高さ h=80 nm にした。なお、差分化の空間格子のサイズ $\Delta x=1$ nm として計算した。

吸収率が増加することをシミュレーションで突 き止めることができた。

4 まとめ

FDTD 法を用いて、タングステンのファズ 構造化により、光学応答が変化する様子を再現 することができた。表面がナノ構造化するこ とで、吸収率が増え、反射率が下がるという実 験結果の原因を突き止めることができた。本シ ミュレーション手法が、ファズ構造の光学応答 を調べるための有効な技法であることを示すこ とができたため、様々なタングステンのファズ 構造に今後適応できることが分かった。

謝辞 科研費補助金(15K06650)および、核 融合研共同研究 (NIFS17KNTS047) のサポー トをいただきました。

- H. Iwakiri, K. Yasunaga, K. Morishita,
 N. Yoshida: J. Nucl. Mater. 283–287,
 1134 (2000).
- [2] S. Takamura, N. Phno, D. Nishijima,S. Kajita: Plasma Fusion Res. 1, 051 (2006).
- [3] S. Kajita, W. Sakaguchi, N. Ohno, N. Yoshida and T. Saeki: Nuclear Fusion, 49 (2009) 095005.
- [4] S. I. Krasheninnikov: Phys. Scr., **T145**, 014040(2011).
- [5] H. Nakamura, S, Saito, A.M. Ito and

- A. Takayama: Plasma Fus. Res., 11 (2016) 2401080.
- [6] A. M. Ito, A. Takayama, Y. Oda, T. Tamura, R. Kobayashi, T. Hattori, S. Ogata, N. Ohno, S. Kajita, M. Yajima, Y. Noiri, Y. Yoshimoto, S. Saito, S. Takamura, T. Murashima, M. Miyamoto, H. Nakamura: J. Nucl. Mater. 463, 109(2015).
- [7] A. M. Ito, A. Takayama, Y. Oda, T. Tamura, R. Kobayashi, T. Hattori, S. Ogata, N. Ohno, S. Kajita, M. Yajima, Y. Noiri, Y. Yoshimoto, S. Saito, S. Takamura, T. Murashima, M. Miyamoto and H. Nakamura: Nuclear Fusion 55, 073013(2015).
- [8] S. Kajita, T. Saeki, N. Yoshida, N. Ohno, and A. Iwamae: Appl. Phys. Express, 3 (2010) 08085204.
- [9] S. Kajita, T. Saeki, Y. Hirahata, M. Yajima, N. Ohno, R. Yoshihara, N. Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys. 50, 08JG01(2011).
- [10] J. H. Weaver, C. G. Olson and D. W. Lynch: Phys. Rev. B 12 (1975) 1293.
- [11] H. Nakamura, K. Sawada, H. Kambe, T. Saiki and T. Sato: Prog. Theor. Phys. Suppl. 138 (2000) 173.
- [12] H. Nakamura, T. Sato, H. Kambe, K. Sawada and T. Saiki: Journal of Microscopy, 202 (2001) 50.
- [13] H. Nakamura, T. Saiki, H. Kambe and K. Sawada: Computer Physics Communication, 142 (2001) 464.
- [14] K. Sawada, H. Nakamura, H. Kambe, T. Saiki: IEICE Trans. Electron. E85-C (2002) 2055.
- [15] K. Sawada, Y. Kohashi, M. Sakai, T. Saiki, H. Nakamura: Journal of Plasma Physics, 72 (2006) 1019
- [16] K. Sawada, H. Nakamura, T. Maruoka, Y. Tamura, K. Imura, T. Saiki and H. Okamoto: Plasma and Fusion Res., 5 (2010) S2110.

超伝導リニア駆動型ペレット入射法の FEM シミュレーション

高山 彰優1,山口 敬済1,齋藤 歩1,神谷 淳1

1 山形大学大学院理工学研究科

e-mail: takayama@yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

よく知られているように、核融合エネルギー は少量の燃料から膨大なエネルギーが得られる と共に、長期的な安定供給が可能である.また、 二酸化炭素を発生しないクリーンエネルギーで あるため、将来のエネルギー源として非常に期 待されている.

ヘリカル型核融合炉のプラズマ中心に燃料となる固体水素ペレットを射出するため、近年、柳等は高温超伝導(HTS)リニア駆動型ペレット射出方式を提案した [1]. まず、同方式では、燃料となる固体水素ペレットをコンテナに注入する. なお、コンテナには、推進用と浮上用の薄膜が含まれる. 次に、レールのように敷設した電磁石と加速用の電磁石を複数用意する. 電磁石レールにペレットコンテナを配置すれば、コンテナが浮上し、加速用電磁石でコンテナが推進する. 柳等の理論によれば、ペレット速度は5~10 km/s であると見積もられる. しかしながら、現時点では、実際にはどのくらいの速度が得られるか不明である.

本研究の目的は、HTS 薄膜内の遮蔽電流密度の時間発展を解析する有限要素法コードを開発し、同コードを用いて、HTS リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を調べることである.

2 支配方程式と運動方程式

図 1 に HTS リニア駆動型ペレット入射法の軸対称モデルを示す.半径 R_c 及び高さ H_c のコイルを採用し,HTS 薄膜を推進するため,コイルには電流 $I_{\rm coil}$ を流す.薄膜には,単層かつ半径 R,厚み b のディスク型 HTS 薄膜を用いる.本研究では,中心対称軸を z 軸とし,加速用コイルの重心を原点とする円柱座標 (r,θ,z) を採用する.但し, r,θ,z 方向の単位ベクトルをそれぞれ e_r,e_θ,e_z で表す.また,本研究では,薄板近似 [2] を採用し,z 軸方向に遮蔽電流密度が流れないと仮定する.

上記仮定のもとで、HTS内に流れる遮蔽電流密度jの支配方程式を導く。スカラ関数S(r,t)を用いることによって、遮蔽電流密度jはj=

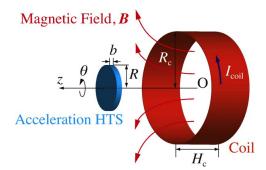


図 1. 超伝導リニア駆動型ペレット入射法の軸対称モデル

 $(2/b)(\nabla S \times e_z)$ で書き表すことができる. スカラ関数 S(r,t) の時間発展は以下の微積分方程式に支配される.

$$\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \int_0^R Q(r, r') S(r', t) r' dr' + \frac{2}{b} S$$

$$+\frac{\partial}{\partial t}\langle \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{e}_z \rangle + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{e}_\theta) = 0, \quad (1)$$

但し、 $\langle \ \rangle$ は厚み方向の平均化演算子であり,B及び E はそれぞれコイルの印加磁束密度及び電界である. なお,Q(r,r') の具体形は文献 [2] に詳述する.

よく知られているように、電界 E と遮蔽電流密度 j には、1 対 1 の密接な関係があり、その関係は J-E 構成方程式 E = E(|j|)(j/|j|) で表される。超伝導特性を表すため、関数 E(j) には、べき乗則 $E(j) = E_{\rm C}(j/j_{\rm C})^N$ を採用する。但し、 $E_{\rm C}$ 及び $j_{\rm C}$ はそれぞれ臨界電界、臨界電流密度であり、N は正の定数である。

一方、遮蔽電流密度の時間発展とは別に、薄膜の運動を決定する必要があり、Newton の運動方程式

$$\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{4\pi}{m} \int_0^R \frac{\partial S}{\partial r} \langle \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{e}_r \rangle r dr, \qquad (2)$$

で与えられる.但し,m はコンテナの質量を表す.

支配方程式 (1) と運動方程式 (2) の初期条件には,S(r,0)=v=0 at t=0 及び $z=z_0$ at t=0 を仮定する.但し,v はコンテナの速度であり, z_0 は薄膜の初期位置である.また,境界条件には S(R,t)=0 を与える.(1) と (2) を

連立した初期値・境界値問題を解けば、遮蔽電 流密度及び HTS 薄膜の運動の時間発展を決定 できる.

空間の離散化のため, (1) と (2) の初期値・境 界値問題に有限要素法 (FEM) を適用すれば, 同問題は次の連立常微分方程式

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{s}). \tag{3}$$

を解く問題に帰着される. 但し、ベクトルsと f(t,s) はそれぞれ $s = [S \ v \ z]^T$ 及び

$$m{f}(t, m{s}) = egin{bmatrix} -W^{-1}U[m{e}(m{S}) + vm{c}(z) + m{h}(z)] \ rac{4\pi}{m}m{a}^T(z)m{S} \ v \end{pmatrix}$$

で書き表される。但し,W は関数 Q(r,r') と FEM の形状関数から決定される $n \times n$ の対称 密行列であり,n は FEM の節点数を表す。U は境界条件から決定される $n \times n$ 行列である。また,ベクトル S と e(S) はそれぞれスカラ関数及び電界 E に対応する n 次元節点ベクトルである。a(z),c(z) 及び h(z) は印加磁束密度 B に対応する n 次元節点ベクトルである。本研究では,連立常微分方程式 (3) を刻み幅自動調節付き Runge-Kutta 法で解く。

3 HTS リニア駆動型ペレット入射法の数値シミュレーション

上述した手法に基づいて、HTS 薄膜内に流れる遮蔽電流密度の時間発展を解析する FEM コードを開発した。本節では、同コードを用いて、単一コイルの場合での HTS リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を数値的に調べる。本研究を通して、物理的・幾何学的パラメタを以下の値に固定する: $R_{\rm c}=5$ cm, $H_{\rm c}=10$ cm, m=10 g, $z_0=1$ mm, N=20, $j_{\rm C}=1$ MA/cm², $E_{\rm C}=1$ mV/m, R=4 cm, b=1 mm, n=1601. また、コイル電流 $I_{\rm coil}$ として、 $I_{\rm coil}(t,z)=\alpha t(z\geq 0)$ を与える。但し、 α はコイルの電流変化率であり、本研究では、 $\alpha=20$ kA/ms に固定する。さらに、z>30 cm では、 $I_{\rm coil}=0$ A とする。

HTS リニア駆動型ペレット入射法の加速性能を数値的に調べよう. まず,図2に速度vと薄膜位置zへの時間変化を示す. 同図より明らかなように、HTS 薄膜は急激に加速し、 $t \gtrsim 6$ ms ではペレット速度vがほぼ一定値となり、終

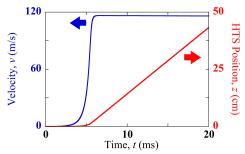


図 2. ペレット速度 v と HTS 薄膜の位置 z への時間変化.

端速度 $v_{\rm f}$ は 115 m/s が得られた. 但し, $v_{\rm f}$ は $z=20~{\rm cm}$ を薄膜が通過した直後の速度である. 次に,図 3 に遮蔽電流密度 j_{θ} の空間分布を示す.同図より明らかなように,遮蔽電流密度は薄膜の縁近傍に分布することがわかる.

4 結論

本研究では、HTS 薄膜内遮蔽電流密度の時間発展を解析するFEMコードを開発し、HTSリニア駆動型ペレット入射法の加速性能を調べた。本研究で得られた結論を要約すると、以下のようになる。

- 単一コイルの場合,最終速度は約115 m/s が得られた。
- 遮蔽電流密度は薄膜の縁近傍に分布する.

講演では、複数コイルを用いた場合の加速性能を述べる.

- [1] N. Yanagi and G. Motojima, private communication, National Institute for Fusion Science, (2017).
- [2] A. Kamitani and S. Ohshima, Magnetic shielding analysis of axisymmetric HTS plates in mixed state, IE-ICE Trans. Electron. Vol. E82-C, No. 5 (1999), 766-773.

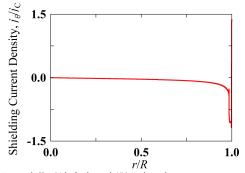


図 3. 遮蔽電流密度の空間分布. 但し, $t=5.6~\mathrm{ms}$

高精度行列-行列積のためのBatched BLASおよび疎行列演算を用いた実装方式のGPU環境での性能評価

石黒 史也1, 片桐 孝洋2, 大島 聡史3, 永井 亨2, 荻野 正雄2

¹名古屋大学 大学院情報学研究科, ²名古屋大学 情報基盤センター, ³九州大学 情報基盤研究 開発センター

e-mail: ishiguro@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 概要

本稿では、倍精度演算による精度を保証する高精度行列-行列積に、複数のBLAS演算をまとめて実行することで演算効率を向上させるBatched BLASを適用した実装方式を提案する。また、演算途中に密行列から疎行列になる特性を利用した「疎行列-密行列」実装方式の性能評価を行う。

2 高精度行列-行列積アルゴリズム

以降, IEEE754 標準の浮動小数点型データを 用いるものとする. また, アルゴリズムに尾崎 の方法[1]を利用する.

尾崎の方法は,入力行列に対して,以下の(1) ~(2) の処理を行う.このとき,式(i)の無 誤差変換を行う.

(1) 行列 A と行列 Bを下のように分解する. 右 肩括弧内の数字が若い方が上位ビットを持つようにする.

$$A = A^{(1)} + A^{(2)} + A^{(3)} + \dots + A^{(p)}$$

$$B = B^{(1)} + B^{(2)} + B^{(3)} + \dots + B^{(q)} \qquad \dots (i)$$

(2) 行列積 AB を以下のように計算する. これは $p \times q$ 個の行列積となる.

$$AB = (A^{(1)} + A^{(2)} + \dots + A^{(p)}) (B^{(1)} + B^{(2)} + \dots + B^{(q)})$$

$$= (A^{(1)} + A^{(2)} + \dots + A^{(p)}) (B^{(1)} + B^{(2)} + \dots + B^{(q)})$$

$$= A^{(1)} B^{(1)} + A^{(1)} B^{(2)} + A^{(2)} B^{(1)} + \dots + A^{(p)} B^{(q)}$$

$$\cdots (ii)$$

ここで、式(ii)の分解された行列積どうしの加算には、高精度な和を行う演算で加算される. 処理(1)の分解の仕方を工夫することで、処理(2)における行列積を無誤差の演算にすることができる.

処理(1)の分解の過程で,入力行列の要素値の散らばり度合い(レンジ)に依存し,疎行列が生成される.このため密行列を入力としても,分解の過程で疎度が大きくなる場合は,密行列から疎行列化したほうがよい.すなわち,「疎行列 - 密行列積」,および,「疎行列 -

疎行列積」の演算に切り替えるほうが、全体の計算量(実行時間)の縮減が期待できる. ただし、一般の数値計算ライブラリは、「疎行列・密行列積」、および、「疎行列・疎行列積」に特化した実装は提供されていないので、新規開発が必要である。また、この並列化は単純でないことが予想されるので、コードの独自並列化が必要となる。

3 Batched BLAS

Batched BLAS[2] は、複数の行列の演算について、同種のBLAS演算を並列に実行するインタフェースを提供する。ここではその中のGEMM演算について記載する。このインタフェースにより従来のBLASライブラリにおいて計算資源を十分に使い切れない、小規模サイズの行列積を多数行う演算でも、まとめて計算することで、小さなGEMM計算を単に連続して呼び出す性能に対して高い性能が期待できる。

したがって並列計算を行う場合に、個別の GEMM の次元が小さくプロセッサ側の並列度 が使い切れない場合でも全体としては十分使 い切れると考えられる.

4 「疎行列-密行列積」の実装方式

行列-行列積 A Bを行う場合,行列の要素値の幅が大きい場合,無誤差変換により,行列 A と行列 Bが疎行列になることが予想される.その場合,密行列演算を行うと多くが 0 演算となるため,無駄に計算量を増加させることになる.そこで,無誤差変換時に疎行列と判定される場合において,密行列から疎行列へ変換する実装を考える.

一般に、行列Aと行列Bで、双方とも疎行列になる可能性がある。しかし、行列-行列積演算ABを疎行列-ベクトル積で行う場合の演算効率を考慮し、ここでは行列Aの疎度を判定して疎行列化することとする。

式(iii)の計算をスレッド並列化する方法に

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

ついて、様々な方法が存在する[3]. その中で 今回、CPU環境での性能評価ではSpMVの行単位 の並列性を利用して、SpMV内でスレッド並列化 する方法の実装を用いて行った.

5 性能評価

今回,性能評価は東京大学情報基盤センター設置のスーパーコンピュータ Reedbush-H[4]を利用した.

性能評価では行列-行列積 C=AB を計算する. 試験行列として,A は,単位行列と,ある疎度分の要素に対して $0\sim1$ の範囲で生成した値で置き換えた行列とする.B は A の逆行列とする.今回,疎度を 90%に設定した.また尾崎の方法によって分解された行列 A の疎度が,90% 以上になる場合に疎行列-密行列形式(SpMV)を利用するようにした.

Batched BLAS を適用させた場合の結果については、発表の際に掲示する.

図1に、疎行列-密行列形式を利用した場合において、CPU 環境と GPU 環境でのルーチン全体の演算時間を載せる.

ここでルーチン全体の時間とは、無誤差変換時間及び疎行列形式への変更時間の実際の計算時間である。無誤差変換時間を error_free、疎行列の crs 形式への変換時間を setmat, GPU へのメモリ転送時間等も含めた SpMV 演算ルーチン時間を crs, その他の時間を other とした. その結果を図 1 に示す. サイズが小さいときと大きいときの実行時間の差が大きかったため、対数グラフであることに注意されたい.

図1から、行列サイズが1000より大きい場合では、GPU環境の方が、ルーチン全体の演算時間が短いことが分かった。これは、行列サイズが小さいときには、GPUデバイスへのメモリ転送コストが計算時間に対して大きなものとなっていたが、行列サイズが大きくなることで、メモリ転送のコストが相対的に下がったからであると考えられる。今回、サイズがN=10000の時、CPU実行に対して、GPU実行では、最大で42.8%まで全体の実行時間が短縮された。

今後の課題を以下に述べる。まず Batched BLAS を適用させた場合における,行列-行列 積演算部分の性能チューニングがある。特に, GPU の利用では,行列サイズが小さい場合は, CPU で実行するほうが高速である。行列サイ ズと GPU の性能を事前に評価したうえで,

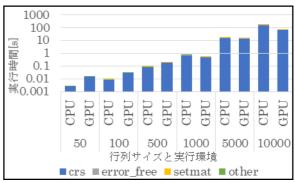


図1 疎行列-密行列形式のルーチン全体の実行時間

実行時に CPU 実行か GPU 実行かを動的に選択する実装が有効になると思われる. この観点では, 自動性能チューニングの適用が有力であると考えられる.

謝辞 本研究の一部は、文部科学省委託事業、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発、萌芽的課題 1、基礎科学のフロンティアー極限への挑戦「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」の支援による.

- [1] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. M. Rump: Error-Free Transformation of Matrix Multiplication by Using Fast Routines of Matrix Multiplication and its Applications, Numerical Algorithms, Vol. 59, No. 1, pp. 95-118, 2012.
- [2] J. Dongarra, S. Hammarling, N. J. Higham, S. D. Relton, P. Valero-Lara, and M. Zounon, The Design and Performance of Batched BLAS on Modern High-Performance Computing Systems, Proc. of ICCS2017, pp. 495-504 (2017)
- [3] 片桐孝洋, 尾崎克久, 荻田武史, 大石進一: 高精度行列-行列積アルゴリズムの疎行列 演算化による高速化, 日本応用数理学会 「行列・固有値問題の解法とその応用」研 究部会第 15 回研究会, SWoPP2013, 2013 年
- [4] Reedbush スーパーコンピューターシステム [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]. https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/, (参照 2018-06-29)

分散並列計算環境における疑似多倍長精度演算を用いた行列・ベクトル積 の実装と評価

小林 亮太 1,* 尾崎 克久 1

1 芝浦工業大学 システム理工学部 数理科学科

e-mail: *bv15031@shibaura-it.ac.jp

1 研究目的

本研究では疑似多倍長演算を用いて行列・ベクトル積を計算するルーチンを分散並列計算環境用に提案する.メモリの分散に対応するため、ベクトルの総和や内積計算を任意の順序で行う高精度計算アルゴリズムを提案し、その誤差評価を行う.また、実装したプログラムを理化学研究所の京コンピュータと名古屋大学のFX100を使用して性能評価を行う.

2 浮動小数点数に関する表記と先行研究

本発表では IEEE 754 [1] が定める浮動小数点数を使用する. また数値計算中に, アンダーフローやオーバーフローが起きないとする. 浮動小数点数の集合を \mathbb{F} ($\subset \mathbb{R}$) とし, $\mathbf{u}=2^{-p}$ (単精度: p=24, 倍精度: p=53) を単位相対丸めとする. $\mathbf{fl}(a\circ b)$ は $a,b\in \mathbb{F}$ の浮動小数点演算結果とする. エラーフリー変換アルゴリズムを

$$[x, y] = \text{TwoSum}(a, b), \ x = \text{fl}(a + b),$$

 $[x, y] = \text{TwoProdFMA}(a, b), \ x = \text{fl}(a \cdot b),$

と表記する. ここでは $y \in \mathbb{F}$ である.

文献 [2] では、エラーフリー変換アルゴリズムを使用したベクトルの総和計算アルゴリズム Sum2 や内積計算アルゴリズム Dot2 などの高精度計算アルゴリズムが提案されている. 文献 [3] では Sum2 や Dot2 といった逐次計算モデルのアルゴリズムを基にした並列計算環境用のアルゴリズムが提案されている. 今回実装を行う分散並列計算環境では、MPI と OpenMPによる階層を持った並列計算を行い、ペアノード間によるリダクション処理も行うため、先行研究で提案されたアルゴリズムを拡張する必要がある.

3 提案手法

任意の順序でベクトル $p \in \mathbb{F}^n$ の総和を高精度 で計算するアルゴリズム Sum2f を Algorithm 1 に示す. またベクトルp の Pairwise なリダクションを高精度で行うアルゴリズムを Sum2p と

する(本稿では省略). なお, Sum2p は Sum2f に包括される.

```
Algorithm 1 Sum2f
```

```
1: function res = Sum2f(p)
           \Lambda = \{1, \dots, n\}
           while n(\Lambda) \geq 2 do
 3:
                 i \neq \phi, i \in \Lambda
 4:
                j \neq \phi, \ j \in \Lambda \setminus i, \ \Lambda = \Lambda \setminus j
 5:
                 [p_i, \tilde{q}_i] = \text{TwoSum}(p_i, p_i)
 6:
 7:
                 q_i = \text{fl}(q_i + (q_i + \tilde{q}_i))
           end while
 8:
           i \neq \phi, i \in \Lambda
 9:
           res = fl(p_i + q_i)
11: end function
```

次に Sum2f を使用したベクトル $x,y \in \mathbb{F}^n$ の内積を高精度で計算するアルゴリズム Dot2f を提案する. Algorithm 2 にアルゴリズム Dot2f を示し、定理 1 に誤差評価を示す. ここでは、Sum2f の返し値は Algorithm 1 の 10 行目 $[p_i,q_i]$ とし、Sumf はベクトルの総和を任意の順序の浮動小数点演算で計算する関数とする.

Algorithm 2 Dot2f

```
1: function res = Dot2f(x,y)

2: for i = 1 : n do

3: [h_i, r_i] = \text{TwoProdFMA}(x_i, y_i)

4: end for

5: [p_n, q_n] = \text{Sum2f}(h), \ s_n = \text{Sumf}(r)

6: res = fl(p_n + (s_n + q_n))

7: end function
```

定理 1. $x, y \in \mathbb{F}^n$ に対して Dot2f を実行すると $|\operatorname{res} - x^T y| \le \operatorname{u}' |x^T y| + (n-1)^2 \tilde{\operatorname{u}}^2 (1+\operatorname{u}') |x^T| |y|$ が成り立つ. $\operatorname{u}' = \operatorname{u}/(1+\operatorname{u})$, $\tilde{\operatorname{u}} = \operatorname{u}'(1+\operatorname{u}')$ とする.

定理 1 は, Dot2 の誤差評価式 [2]

$$|\operatorname{res} - x^T y| \le \mathbf{u}|x^T y| + \gamma_n^2 |x^T||y|$$

より過大評価が小さい. ここではnu $<1, \gamma_n=n$ u/(1-nu) とする.

分散並列計算環境に対応する高精度内積計算アルゴリズム PDot2 を提案する. なお, PDot2 は Dot2f に包括される. Sump は, Sum2p と同様の順序でリダクションを行う関数である.

Algorithm 3 PDot2

```
1: function res = PDot2(x, y)
           %begin MPI M nodes parallel%
           %begin OMP m threads parallel%
 3:
            [\tilde{p}_1, \tilde{r}_1] = \text{TwoProdFMA}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1)
 4:
           for i=2:n' do
 5:
                 [\tilde{h}_i, \tilde{r}_i] = \text{TwoProdFMA}(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)
 6:
                 \tilde{s}_i = \text{fl}(\tilde{r}_i + \tilde{r}_{i-1})
 7:
                 [\tilde{p}_i, \tilde{q}_i] = \text{TwoSum}(\tilde{p}_{i-1}, h_i)
 8:
 9:
                 \tilde{q}_i = \mathrm{fl}(\tilde{q}_i + \tilde{q}_{i-1})
           end for
10:
11:
           \hat{p}_{id} = \tilde{p}_{n'}, \ \hat{s}_{id} = \tilde{s}_{n'}, \ \hat{q}_{id} = \tilde{q}_{n'}
           %end OMP m threads parallel%
12:
           for id = 2 : m \operatorname{do}
13:
                 \hat{s}_{id} = fl(\hat{s}_{id} + \hat{s}_{id-1})
14:
                 [\hat{p}_{id}, \check{q}_{id}] = \text{TwoSum}(\hat{p}_{id}, \hat{p}_{id-1})
15:
                 \hat{q}_{id} = \text{fl}(\hat{q}_{id} + (\hat{q}_{id-1} + \check{q}_{id}))
16:
17:
           end for
           p_{Id} = \hat{p}_m, \ s_{Id} = \hat{s}_m, \ q_{Id} = \hat{q}_m
18:
           %begin MPI Communication%
19:
20:
            [p_1, q_1] = \text{Sum2p}(p, q), \ s_1 = \text{Sump}(s)
           %end MPI Communication%
21:
           %end MPI M nodes parallel%
22:
           res = fl(p_1 + (q_1 + s_1))
23:
24: end function
```

4 実装方法

Algorithm 3を用いた行列・ベクトル積計算 ルーチンをPDDot2MVと呼ぶこととする. スー パーコンピュータへの実装は, 次の点に注意し て行った.

- 1. ペアノード間による MPI 通信
- **2.** ホットスポットに対するインライン展開 とループアンローリング
- 3. PBLAS 形式への対応

1. では, 図1のような通信をノード間で行いながらリダクション処理をすることで, 各ノードにリダクション処理を分散させた.

PDDot2MVでは、各ノードにおける各スレッドが担当するベクトルの要素の積とリダクション処理部分がホットスポットとなることが分かった. **2.** では、Algorithm 3 内の TwoProdFMA、TwoSum をインライン展開し、ループアンロー

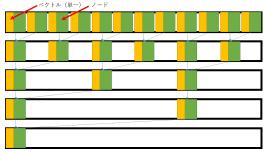


図 1. ペアノード間による MPI 通信

リングすることで高速化に成功した.

3. では、PBLAS の関数 PDGEMV を今回提案する PDDot2MV に置き換えての使用を可能にするため、データ分散をブロックサイクリック分散とし、計算時に必要となるベクトルの並び替えの実装を行った。また、転置や定数倍、先頭ポインタの指定オプションも加えて実装した。

5 数值実験結果

今回提案するルーチン PDDot2MV の性能評価を行った. 比較対象として PBLAS のルーチン PDGEMV を使用し, 実行時間比を京コンピュータと FX100 を用いて確認した. なお, PDDot2MV の計算回数は PDGEMV の 10 倍程度である.

 $A \in \mathbb{F}^{nM \times nM}, \ x \in \mathbb{F}^{nM}$ に対して, Ax = y の計算を行った. なお, n をノード当たりの行列サイズ, M^2 をノード数とする.

京コンピュータでは, n=15000, $M^2=100^2$ において 12.5 倍程度の実行時間であった. また FX100 では, n=20000, $M^2=20^2$ において 3.9 倍程度の実行時間であった. 大規模な分散並列計算環境では, PDDot2MV 内の通信時間の割合が全体の $10\%\sim20\%$ であることを確認した.

- [1] IEEE Computer Society, IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, IEEE Standard 754-2008, (2008)
- [2] T. Ogita, S. M. Rump and S. Oishi, Accurate Floating-point Sum And Dot Product, SIAM Journal on Scientific Computing, 26:6 (2005), 1955–1988
- [3] N. Yamanaka, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi, A Parallel Algorithm of Accurate Dot Product, Parallel Computing, 34:6-8 (2008), 392–410

戸田格子におけるポアンカレ不変量

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、シンプレクティック数値解法と運動量保存則の関係について議論を行ってきた。シンプレクティック数値解法はハミルトン系における正準変換そのものであり、正準変換は相空間内の面積和を変えない。さらに、その面積和が偏微分方程式系の運動量に一致する事から、運動量保存が言えた。

元来,この相空間内の面積和,あるいはポアンカレ不変量と呼ばれる量は力学的な量ではなく,統計力学的な量として与えられる。すなわち,1つの時間発展から決まるのではなく,無限個の時間発展を集めて初めて定義される量である。しかし,我々は幾つかの仮定の下で,偏微分方程式系の1つの時間発展において,ポアンカレ不変量が力学的な量として十分な精度で与えられることを示した[1].

本講演ではこの手法を偏微分方程式ではない 系, 例として1次元格子系に応用し, ポアンカ レ不変量を計算する手法を提案する.

2 仮想的周期格子系

1次元の周期的 N 粒子格子系に対し、ポアンカレ不変量を与える理論的枠組みを考えよう、1次元格子系のハミルトニアンを、

$$h_N(q, p) = h_N(q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N),$$
 (1)

で与えるとする. 系の時間発展は,

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial h_N}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial h_N}{\partial q_i}, \qquad (2)$$

である $(1 \le j \le N)$.

いま, 格子系 (1) と同じものを M セット用意し, $\Delta x (=1/M)$ づつずらして並べた仮想的周期格子系.

$$H = \sum_{i=1}^{M} h_N(q^{(i)}, p^{(i)}), \tag{3}$$

を導入する $(1 \le i \le M)$. まず, $(q_j^{(1)}, p_j^{(1)})$ は系 (1) そのもの, すなわち, $q_j^{(1)} = q_j$, $p_j^{(1)} = p_j$ で

あるとする. さらに, $q_j^{(1)}$ を基点として, $q_j^{(i)}$ の右隣の Δx ずれた位置に $q_j^{(i+1)}$ が位置する様に粒子が配置されると考える. 系 (3) の自由度は NM であり, 時間発展は,

$$\frac{dq_j^{(i)}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j^{(i)}}, \quad \frac{dp_j^{(i)}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j^{(i)}}, \quad (4)$$

で与えられる. 仮想的に Δx 間隔で並んではいるが, 格子間隔が 1 離れた $(q_j^{(i)}, p_j^{(i)})$ 同士でしか相互作用していないことに注意しよう.

発展方程式 (4) にシンプレクティック数値解 法を適用した離散的時間発展を

$$\begin{split} (q_{j}^{(i)}(t\!+\!\Delta t), p_{j}^{(i)}(t\!+\!\Delta t)) \\ &= \hat{S}(\Delta t) \, (q_{j}^{(i)}(t), p_{j}^{(i)}(t)) \quad (5) \end{split}$$

で表すことにする. ここで, Δt は時間メッシュであり, $S(\Delta t)$ は Δt に対し r 次の解法であるとする.

系 (3) は系 (1) に対する M 個の異なる初期値問題を同時に解いている系と解釈できる. また、系 (3) に対する初期値は、系 (1) に対する初期値を補間することで決定する. この時、系 (3) を離散化された偏微分方程式系と見なすことで、これまで我々が用いてきた計算手法を使って系 (1) のポアンカレ不変量を計算することができる [1]. その際、M を十分大きく取れば格子間隔 Δx (=1/M) が小さくなり、ポアンカレ不変量に対して十分な精度を確保することができる.

3 ポアンカレ不変量

系(3) 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(5) では, 正準変換 の性質から, ポアンカレ不変量,

$$I = \sum_{i,j} \iint_{D_{ij}} dq_j^{(i)} dq_j^{(i)}, \tag{6}$$

が保存される. ここで, D_{ij} は $(q_j^{(i)} - p_j^{(i)})$ 平面に 与えられた閉領域である. 今, 離散フーリエ変

換を、

$$u_m = \sqrt{\frac{1}{L}} \sum_{\ell=-L/2}^{L/2-1} a_{\ell} e^{ik_{\ell}(m-1)\Delta x},$$
 (7)

$$u_{M(j-1)+i} = q_j^{(i)} + i p_j^{(i)}, k_\ell = \frac{2\pi\ell}{L\Delta x},$$
 (8)

で定義すると, 式(6)で定義した Iは

$$I = \pi \sum_{\ell=1}^{L/2-1} \ell(|a_{\ell}|^2 - |a_{-\ell}|^2), \tag{9}$$

と表せることがわかっている [2]. 但し, L=NM である.

4 戸田格子方程式

本講演では周期的戸田格子方程式、

$$\frac{d^2q_n}{dt^2} = e^{-(q_n - q_{n-1})} - e^{-(q_{n+1} - q_n)}, \quad (10)$$

を例に取って考察する. 式 (10) において $1 \le n \le N$ とし, q_n に対して周期的境界条件, $q_{N+1} = q_1, q_0 = q_N$ を課すとする.

方程式(10)の一番簡単な周期解は、

$$q_n = S_n - S_{n+1}, (11)$$

$$S_n = \ln \theta_0 (n/L - \nu t + \delta_0), \tag{12}$$

で与えられる.ここで, $\theta_0(v)$ は楕円テータ関数, $\nu=\theta_0(1/N)/\theta_0(0)\mathrm{sn}(2K/N)/2K$ である.

この周期解 (11) に対するポアンカレ不変量 (9) は、

$$I = -8\pi^2 L\nu \sum_{\ell=1}^{\infty} \sin^2 \frac{\pi\ell}{N} \left(\frac{2q^{\ell}}{1 - q^{2\ell}} \right)^2, \quad (13)$$

と計算できる. 但し, q は式 (12) の θ_0 に対する nome であり, 式 (9) において $M\to\infty$ としている.

この解析的な結果を踏まえ、講演ではこれらに対する数値計算結果の詳細について議論する.

- [1] N. Sasa, J. Phys. Soc. Japan 83 (2014), 123003-1-123003-4.
- [2] N. Sasa, J. Phys. Soc. Japan 86 (2017), 074006-1-074006-6.

ベルヌイ分布と正規分布を重ね合わせた制約ボルツマシンにおける相転移と秩序パラメータ

舘崎 優人 1 , 上村 佳嗣 1 , 小池 正史 1 , 矢嶋 徹 1 宇都宮大学大学院工学研究科情報システム科学専攻 e-mail: mt176528@cc.utsunomiya-u.ac.jp

1 はじめに

ニューラルネットワークには機械学習と連想記憶の2つの用途がある.機械学習のモデルには深層学習や制約ボルツマンマシン (RBM) がある. RBM は可視層と隠れ層の間のみ結合するモデルである[1]. その素子の状態はベルヌイ分布やガウス分布等の確率分布に従うとする.

一方,連想記憶のモデルにはアソシアトロンやホップフィールトモデル (HM) がある. HM は完全グラフであり,ベルヌイ分布を仮定している [2]. HM では,イジングモデルを利用して,連想記憶を扱うモデルで系の振る舞いを解析し,記憶容量を評価した研究がある [3].

RBMとHMは一見異なるが、等価性があることが分かっており[4]、HMを解析してRBMの振る舞いを議論できる。本研究では、この等価性を通して想起相-スピングラス相の相転移を解析し、RBMの記憶容量を評価する。RBMのスピンは、ベルヌイ分布と正規分布を重ねた分布に従うとする。等価なHMはハミルトニアンを一般化した一般化ホップフィールドモデル(GHM)になる。重ね合わせの重みを変化させることで多様なモデルを系統的に解析できる。

2 GHM と RBM の等価性

RBM は可視層と隠れ層の 2 部グラフの構造をもつ。可視層は N_1 個,隠れ層は N_2 個の素子からなり,それぞれ $\{\sigma_i\}_{i=1}^{N_1}, \{\tau_\mu\}_{\mu=1}^{N_2}$ と表す。いずれの素子もベルヌイ分布と正規分布を重み $\Omega \in [0,1]$ で重ね合わせた分布 $p(s) \propto \sum_{\varepsilon=\pm 1} \exp\left[(s-\varepsilon\sqrt{1-\Omega})^2/(2\Omega)\right]$ に従うとすると,配位 (σ,τ) の出現確率は

$$P(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau} | \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z} p(\boldsymbol{\sigma}) p(\boldsymbol{\tau})$$

$$\times \exp\left(\sqrt{\frac{\beta}{N_1 + N_2}} \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{\mu=1}^{N_2} \xi_i^{\mu} \sigma_i \tau_{\mu}\right)$$
(1)

となる. ただし Z は分配関数, $\beta = 1/T$ は逆温度, $p(\sigma) \equiv \prod p(\sigma_i)$, $p(\tau)$ も同様. 記憶するパターン $\{\xi_i^{\mu}\}$ も分布 $p(\xi_i^{\mu})$ に従う. 重みはそれぞ

分配関数 Z を τ で周辺化すると GHM の分配関数を得る [4]. これが RBM と GHM の等価性である. 得られる GHM のハミルトニアンは

$$H \equiv -\sum_{\mu=1}^{N_2} u \left(\frac{\boldsymbol{\xi}^{\mu} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{N_1}} \right), \ u(x) \equiv \ln \mathbb{E}_{\tau_{\mu}} e^{x \tau_{\mu}} \quad (2)$$

である. 配位 σ は確率 $P(\sigma|\xi) \propto p(\sigma)e^{-\beta H}$ で出現する. $(\delta, \Omega_\tau, \Omega_\sigma) = (1, 1, 0)$ で標準の HM[2] を再現する. GHM の記憶容量は負荷パラメータ $\alpha \equiv N_2/(N_1+N_2)$ で議論する.

3 秩序パラメータを用いた相転移の解析

標準のオーバーラップ

$$m^{\mu}(\boldsymbol{\sigma})\!\equiv\!\frac{1}{N_{1}}\boldsymbol{\xi}^{\mu}\!\cdot\!\boldsymbol{\sigma},\ n^{i}(\boldsymbol{\tau})\!\equiv\!\frac{1}{N_{2}}\boldsymbol{\xi}_{i}\!\cdot\!\boldsymbol{\tau} \qquad (3)$$

とレプリカのオーバーラップ

$$q^{ab} \equiv \frac{1}{N_1} \boldsymbol{\sigma}^a \cdot \boldsymbol{\sigma}^b, \ r^{ab} \equiv \frac{1}{N_1} \boldsymbol{\tau}^a \cdot \boldsymbol{\tau}^b \qquad (4)$$

を用いて秩序パラメータの鞍点方程式

$$m = \langle \xi \langle \sigma \rangle_{\sigma|z,\xi} \rangle_{z,\xi}, \quad n = \langle \xi \langle \tau \rangle_{\tau|\eta,\xi} \rangle_{\eta,\xi} \quad (5)$$

$$q = \langle \langle \sigma \rangle_{\sigma|z,\xi}^2 \rangle_{z,\xi}, \qquad r = \langle \langle \tau \rangle_{\tau|\eta,\xi}^2 \rangle_{\eta,\xi}$$
 (6)

$$Q = \left\langle \left\langle \sigma^2 \right\rangle_{\sigma|z,\xi} \right\rangle_{z,\xi}, \quad R = \left\langle \left\langle \tau^2 \right\rangle_{\tau|\eta,\xi} \right\rangle_{\eta,\xi} \quad (7)$$

を導出するm, n はそれぞれ σ スピンと τ スピンの標準の秩序パラメータ, q, r は式 (4) が $a \neq b$ のときの秩序パラメータ, 対して Q, R は a = b のときの秩序パラメータである. ただし, $z, \eta \sim N(0,1)$, ξ は分布 $p(\xi)$ に従う. 平均化された σ , τ の確率密度関数 $P(\sigma)$, $P(\tau)$ は

$$P(\sigma) \propto p(\sigma) e^{\beta \bar{\alpha} \Omega_{\tau} m \xi \sigma + \sqrt{\beta \alpha r} z \sigma + \frac{\beta \alpha (R-r) \sigma^2}{2}}, \quad (8)$$

$$P(\tau) \propto p(\tau) e^{\beta \alpha \Omega_{\alpha} n \xi \tau + \sqrt{\beta \bar{\alpha} q} \eta \tau + \frac{\beta \bar{\alpha} (Q - q) \tau^2}{2}}$$
 (9)

である. ただし, $\bar{\alpha} \equiv 1-\alpha$ とする. σ スピンの GHM で想起相 $(m \neq 0, q \neq 0)$ -スピングラス相 $(m = 0, q \neq 0)$ の相転移を数値計算し記憶 容量を評価するため, m の値に着目する. 記憶 させるパターン ξ , 隠れ層のスピン τ , 可視層 のスピン σ の分布とそれぞれ変えて記憶容量を評価する. 解析は以下の通り行う. $0 \leq T \leq 1$, $0.00 \leq 0.15$ の範囲で鞍点方程式 (5)–(7) を数値計算で解く. T を固定したとき, $m \neq 0$ の解 が存在する範囲 $\alpha < \alpha_{\rm c}$ を求め, $(\alpha_{\rm c}, T)$ を図示して相図を作る.

4 結果

図 1 に相図を示す。図 1 (a) は $\Omega_{\sigma} = 0.000$, $\Omega_{\tau} = 1.0$ と固定し, $\delta = 0.80$, 0.85, 0.90, 0.95, 1.00 と変化させて記憶するパターンの状態の分布を変えた。どの分布でも,T = 0.0 で記憶容量が最大になった。ベルヌイ分布の場合 ($\delta = 1.00$) に記憶容量が最大で,正規分布を導入するにつれ急激に容量は小さくなる。T = 0.0 で比べると, $\delta = 1.00$ で $\alpha_{\rm c} = 0.122$ に対し, $\delta = 0.90$ で $\alpha_{\rm c} = 0.031$ と 25% 程度になる。想起相が開くのは T < 1.0 ($= \Omega_{\tau}$) の場合で, δ の値によらない。これは解析的にも式 (5) で $\alpha \to 0$ の極限から導ける。

図 1 (b) では $\Omega_{\sigma}=0.000$, $\delta=1.00$ と固定し, $\Omega_{\tau}=0.6$, 0.8, 1.0 と変化させて隠れ層のスピン分布を変えた.どの場合でも T=0.0 で $\alpha_{\rm c}$ は最大値 $\alpha_{\rm c}=0.122$ をとる.これは方程式 (5)–(7) で $T\to 0$ の極限から導ける.(a) とは逆に,正規分布の場合 $(\Omega_{\tau}=1.0)$ に記憶容量が最大で,ベルヌイ分布を導入するにつれ記憶容量は小さくなる.T=0.4 で比べると, $\Omega_{\tau}=1.0$ で $\alpha_{\rm c}=0.070$ に対し, $\Omega_{\tau}=0.8$ で $\alpha_{\rm c}=0.034$ と 49% 程度になる.

図 1 (c) では $\delta=\Omega_{\tau}=1.0$ と固定し, $\Omega_{\sigma}=0.000,\,0.007,\,0.020,\,0.100$ と変化させて可視層のスピン分布を変えた.顕著な特徴は, $\Omega_{\sigma}>0$ のとき,T>0 で α_{c} が極大値をとることである.例えば, $\Omega_{\sigma}=0.007$ では T=0.10 で α_{c} が極大になる. $T\to0$ では $\alpha_{c}\to0$ になった.分布の変化に対しては $\alpha_{c}\to0$ になった.分布の場合 $\alpha_{c}\to0$ に記憶容量が最大となり,正規分布を導入するにつれ記憶容量は小さくなる. $\alpha_{c}=0.119$ に対し, $\alpha_{\sigma}=0.007$ で $\alpha_{c}=0.106$ と $\alpha_{c}\to0.119$ に対し, $\alpha_{\sigma}=0.007$ で $\alpha_{c}=0.106$ と $\alpha_{c}\to0.007$ 程度になる.

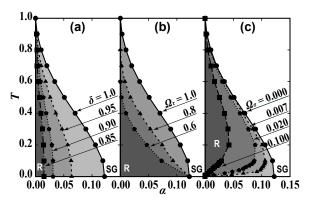


図 1. RBM の相図. 横軸 α , 縦軸 T. 曲線は転移線である. それぞれの δ , Ω_{τ} , Ω_{σ} の値に対し, 転移線の左側の領域は想起相 (R), 右側の領域はスピングラス相 (SG). (a): $\Omega_{\sigma}=0.000$, $\Omega_{\tau}=1.0$ とし, $\delta=0.80,0.85,0.90,0.95,1.00$ と変化させた場合. (b): $\Omega_{\sigma}=0.000$, $\delta=1.00$ とし, $\Omega_{\tau}=0.6,0.8,1.0$ と変化させた場合. (c): $\delta=\Omega_{\tau}=1.0$ とし, $\Omega_{\sigma}=0.000,0.$

5 まとめと今後の課題

本研究では、RBM の記憶容量を、GHM との等価性を用いて解析し、評価した. 記憶させるパターンの分布に正規分布を導入するにつれ急激に記憶容量は小さくなる. 隠れ層のスピン分布にベルヌイ分布を導入するにつれ記憶容量は小さくなるが、絶対零度では分布によらない値となる. 可視層では正規分布を導入するにつれ記憶容量は小さくなる. 臨界容量が最大となる温度があり、その値は分布により異なる. いずれも標準の HM の分布から離れると想起することが難しい.

今後の課題は、臨界容量が極大になる条件を さらに追究することにより、記憶させるパター ンに最適な RBM および温度の設定を明らかに することである、

- [1] P. Smolensky, in *Information processing in dynamical systems: Foundations of harmony theory*, MIT Press, 1986.
- [2] J. J. Hopfield, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 79, 2554 (1982).
- [3] D. J. Amit, H. Gutfreund and H. Sompolinsky, Phys. Rev. A 32, 1007 (1985).
- [4] A. Barra, G. Genovese, P. Sollich and D. Tantari, Phys. Rev. E 97, 022310 (2018).

正多面体上のハミルトン閉路に対応する離散ソボレフ不等式の最良定数

山岸 弘幸 1 ,亀高 惟倫 2 ,關戸 啓人 3

 1 都立高専, 2 阪大名誉教授, 3 京大

e-mail: yamagisi@metro-cit.ac.jp

1 正多面体とハミルトン閉路

5 つのプラトンの正多面体の,面の数F,頂点の数N,辺の数E を図1 でまとめている.本稿では正多面体を図1 に示した記号を用いる.

多面体	記号X	面 F	頂点 N	迈 E
正4面体	R4	4	4	6
正6面体	R6	6	8	12
正8面体	R8	8	6	12
正 12 面体	R12	12	20	30
正 20 面体	R20	20	12	30

図 1 正多面体

図 $2\sim6$ は正多面体の展開図である.外枠の左右を筒状に合わせ,上下それぞれに適切な面を貼ると,立体を構成できる.丸は頂点,丸内の数値が頂点の番号,線は辺を表す.0 番目の頂点から太い線を追っていくと $1,2,\cdots,N-1$ を経て 0 に戻る.この様な,グラフのすべての頂点を含む初等的な道(有向道,閉路,有向閉路)をハミルトン閉路と呼ばれている.正多面体 X のグラフに対応する離散ラプラシアン行列

$$\mathbf{A} = (a(\mathbf{X}; i, j))$$

を導入する.図 $2{\sim}6$ において,太い線で表示したハミルトン閉路上にある辺の両端の組 (i,j) の全体を $h(\mathbf{X})$,細い線で表示したハミルトン閉路上にない辺の両端の組 (i,j) の全体を $e(\mathbf{X})$ と置く.A の成分 $a(\mathbf{X};i,j)$ $(0 \le i,j \le N-1)$ を次の様に導入する.

$$a(\mathbf{X}; i, j) = \begin{cases} d & (i = j) \\ -b & (i, j) \in h(\mathbf{X}) \\ -c & (i, j) \in e(\mathbf{X}) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases}$$

 $(0 < b, c < \infty)$

ここで対角成分 (i = j) は

$$a(X; i, i) = d = \begin{cases} 2b + c & (X = R4, R6, R12) \\ 2b + 2c & (X = R8) \\ 2b + 3c & (X = R20) \end{cases}$$

である.A は $N \times N$ 実対称非負定値行列で固有値 0 をもつ. E_0 を A の固有値 0 の固有空間への射影行列とすると,擬グリーン行列は

$$G_* = \lim_{a \to +0} \left((\boldsymbol{A} + a\boldsymbol{I})^{-1} - a^{-1}\boldsymbol{E}_0 \right)$$

となる .ベクトル $oldsymbol{\delta}_j={}^t(\delta(-j),\delta(1-j),\cdots,\delta(N-1-j)),\ \delta(k)=1\ (k=0),\ 0\ (k\neq0)$ を導入する .

2 離散ソボレフ不等式の最良定数

本稿では正 4,6,8 面体での離散ソボレフ不等 式の最良定数を記述する.

定理 1 $u(0)+u(1)+\cdots+u(N-1)=0$ をみたす任意の $u={}^t(u(0),u(1),\cdots,u(N-1))\in {\bf C}^N$ に対し,u によらない正定数 C があって,離散ソボレフ不等式

$$\left(\max_{0 \le j \le N-1} |u(j)|\right)^2 \le C \, \boldsymbol{u}^* \boldsymbol{A} \boldsymbol{u}$$

が成り立つ . C のうち最良のものは $C_0(\mathrm{X})$ は

$$C_0(\mathbf{X}) = \max_{0 < j < N-1} {}^t \boldsymbol{\delta}_j \boldsymbol{G}_* \boldsymbol{\delta}_j = {}^t \boldsymbol{\delta}_{j_0} \boldsymbol{G}_* \boldsymbol{\delta}_{j_0}$$

であり,具体的には次のように表される.

$$C_0(R4) = \frac{5b+c}{16b(b+c)}$$

$$C_0(R6) = \frac{(3b+c)(7b^2+15bc+7c^2)}{16b(b+3c)(2b^2+3bc+c^2)}$$

$$C_0(R8) = \frac{35b^2+60bc+9c^2}{72b(b^2+4bc+3c^2)}$$

上の不等式でCを $C_0(\mathrm{X})$ で置き換えるとき, $oldsymbol{u} = oldsymbol{G}_*oldsymbol{\delta}_{j_0}$ で等号が成り立つ.

パラメーター b,c が (b,c)=(1,1) の場合,5 つの正多面体 [1,2],5 つの切頂正多面体 [3,4,5] の離散ソボレフ不等式の最良定数は求められている.さらに,(b,c)=(1,0) とすると正多角形の問題 [6,7] となり,こちらも求められている.(b,c)=(2,1) として,ハミルトン閉路ではないが,2 重結合を加えた正多面体の問題 [8] も考えてきた.本稿はハミルトン閉路上の辺とそうでない辺での重みを一般化した問題となっている.

- [1] 亀高惟倫,渡辺宏太郎,山岸弘幸,永井 敦,武村一雄,正多面体上の離散ソボレ フ不等式の最良定数,日本応用数理学会 論文誌,第21巻第4号(2011)289-308.
- [2] H.Yamagishi, Y.Kametaka, A.Nagai, K.Watanabe and K.Takemura, The best constant of three kinds of discrete Sobolev inequalities on regular polyhedron, Tokyo Journal of Mathematics 36 (2013) 253–268.
- [3] 亀高惟倫,山岸弘幸,永井敦,渡辺宏太郎,武村一雄,切頂正 4,6,8 面体上の離散ソボレフ不等式の最良定数,日本応用数理学会論文誌 第 25 巻 第 3 号 (2015) 135-150.
- [4] 山岸弘幸,切頂正 12 面体上の離散ソボレフ不等式の最良定数,九州大学応用力学研究所「非線形波動研究の現状 課題と展望を探る」研究集会報告 26AO-S2 (2015) 31-38.
- [5] Y.Kametaka, A.Nagai, H.Yamagishi, K.Takemura and K.Watanabe, The Best Constant of Discrete Sobolev Inequality on the C60 Fullerene Buckyball, Journal of the Physical Society of Japan 84 074004 (2015).
- [6] A.Nagai, Y.Kametaka, H.Yamagishi, K.Takemura and K.Watanabe, Discrete Bernoulli polynomials and the best constant of discrete Sobolev inequality, Funkcialaj Ekvacioj 51 (2008) 307–327.
- [7] H.Yamagishi, A.Nagai, K.Watanabe, K.Takemura and Y.Kametaka, The best constant of discrete Sobolev inequality corresponding to a bending problem of a string, Kumamoto Journal of Mathematics 25 (2012) 1–15.
- [8] 山岸弘幸,2 重結合を含む正多面体上の 離散ソボレフ不等式の最良定数,日本応 用数理学会論文誌 第27巻 第4号 (2017) 285-304.

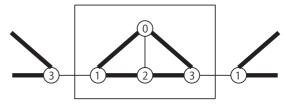


図2正4面体(R4)

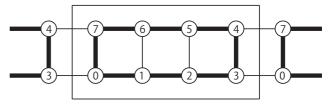


図 3 正 6 面体 (R6)

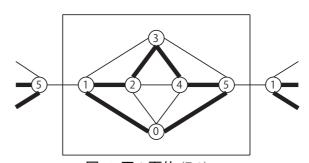


図 4 正 8 面体 (R8)

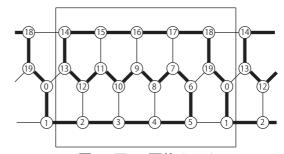


図 5 正 12 面体 (R12)

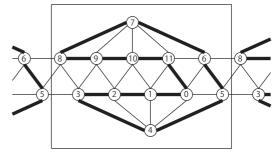


図 6 正 20 面体 (R20)

順序付きハミンググラフにおける量子ウォークについて

三木 啓司¹, 辻本 諭², Luc Vinet³

¹ 気象大学校,² 京都大学大学院情報学研究科,³Université de Montréal

e-mail: hmiki@mc-jma.go.jp

1 はじめに

量子状態をある場所から別の場所へと転送することは量子通信において重要なタスクである。特に、転送が確率1で行われるとき、該当する転送は完全状態転送(Perfect State Transfer、PST)と呼ばれ、高品質通信の実現に必要であると考えられている。短距離通信における量子状態転送を記述する数理モデルの一つに XX スピン鎖があり、特定のパラメータ下では PSTが観測されることが知られている [1]. この 1次元 XX スピン鎖は1次元格子上の連続時間量子ウォークと見なすことができ、その挙動は直交多項式を利用することで詳細に解析が可能であることが知られている [2].

筆者らはこれまで、多変数直交多項式を用いて解析可能な高次元の量子状態転送モデルを提案してきた [3,4]. 対応するモデルでは PST のような現象が確認されてはいるが、 PST そのものは発生しなかった. 本発表では新たに、順序付きハミンググラフ上の量子ウォークを考えることで、 PST を観測可能な 2 次元の XX スピン鎖が得られたので報告する [5].

2 1次元量子状態転送

サイト数N+1の1次元格子上におけるXXスピン鎖のハミルトニアンは以下で与えられる:

$$H = \sum_{i=0}^{N} \frac{J_i}{2} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \frac{B_i}{2} (\sigma_i^z + 1),$$

但し、 $J_{N+1}=0$ および σ^x , σ^y , σ^z は添字のサイトの空間にのみ作用するパウリ行列である.1 励起基底 $|e_n\rangle=(0,0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^T$ に対し、ハミルトニアンの作用は

$$H|e_n| = J_{n+1}|e_{n+1}| + B_n|e_n| + J_n|e_n|$$

と記述される。したがって、1 励起基底で張られる部分空間における 1 次元 XX スピン鎖は 1 次元格子上の(連続時間)量子ウォークと見なすことができる。特に、1 スルトニアン 1 において、

$$J_i = \sqrt{i(N+1-i)}, \quad B_i = 0,$$

とすると、H は 1 変数 Krawtchouk 多項式と呼ばれる二項分布関数を重み関数とする直交多項式を用いて対角化され、PST

$$e^{-i\pi H} | e_0) = | e_N)$$

が観測される.

3 順序付きハミンググラフ

 Q_N を長さ 2N の 01 列全体とし、要素 $x \in Q_N$ を N 組の長さ 2 の 01 列

$$x = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n), \quad \bar{x}_j = (x_{j1}, x_{j2})$$

と書く. このとき, $x \in Q_N$ に対して, シェイプと呼ばれる次の量を導入する:

$$e(x) = (e_1, e_2), \quad 0 \le e_1 + e_2 \le N.$$

ここで、 e_1, e_2 はそれぞれ x 内に含まれる 10 および 01 ないし 11 の数である。シェイプを用いることで、 Q_N の要素間の距離が定義され、行列 $A_{ii} \in \{0,1\}^{|Q_N| \times |Q_N|}$ を、

$$A_{ij} = (a_{xy})_{x,y \in Q_N}, \quad (0 \le i + j \le N)$$

$$a_{xy} = \begin{cases} 1 & (e(x - y) = (i, j)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

により導入する. このように定めた $\{A_{ij}\}_{0 \le i,j \le N}$ はアソシエーションスキームをなすことが知られており、(次数 2 の)順序付きハミングスキームと呼ばれている [6]. ここでは A_{ij} を隣接行列に持つようなグラフを G_{ij} と書き,順序付きハミンググラフと呼ぶことにする.

4 主結果

順序付きハミンググラフ G_{01} 上で, $\bar{x} \in Q^{(N,2)}$ に対応する点から粒子を量子ウォークさせると,グラフの対称性から,距離が等しい各点にはいずれも粒子が等確率で存在する.したがって,

$$V_{ij} = \{ x \in Q_N \mid e(x - \bar{x}) = (i, j) \}$$

と書いたとき、 $\{V_{i,j}\}_{0 \le i+j \le N}$ 間の集合同士の量子ウォークを考えることも可能になる。これら

をまとめ、さらにアソシエーションスキームに 附随する Bose-Mesner 代数を調べることで、次 の事実が導かれる.

定理 1. 三角型格子上 $0 \le i + j \le N$ におけるハミルトニアン

$$\begin{split} H &= \sum_{0 \leq i+j \leq N} I_{i,j} \frac{\sigma_{i,j}^{x} \sigma_{i,j+1}^{x} + \sigma_{i,j}^{y} \sigma_{i,j+1}^{y}}{2} \\ &\quad + J_{i,j} \frac{\sigma_{i,j}^{x} \sigma_{i+1,j-1}^{x} + \sigma_{i,j}^{y} \sigma_{i+1,j-1}^{y}}{2}, \\ I_{i,j} &= \sqrt{2j(N+1-i-j)}, \\ J_{i,j} &= \sqrt{2i(j+1)} \end{split}$$

で与えられるスピン鎖は、1 励起基底 $\{|e_{i,j})\}$ で 張られる部分空間において、 G_{01} 上の量子ウォー クと等価である.

このハミルトニアンHは、Krawtchok 多項式に附随するXXスピン鎖の自然な拡張と見なすことができ、以下の事実が明らかとなった.

定理 2. 定理 1 で与えられるハミルトニアンH は、1 励起基底において、重み関数

$$\binom{N}{x,y} \left(\frac{1}{2}\right)^x \left(\frac{1}{4}\right)^y \left(\frac{1}{4}\right)^{N-x-y} \qquad (0 \le x+y \le N)$$

に対して直交性を満たすような Tratnik 型2変数 Krawtchouk 多項式 [7] を用いて対角化され, そのスペクトルは

$$\lambda_{x,y} = 2N - 2x - 4y \quad (0 \le x + y \le N)$$
で与えられる。

これらの事実を利用することで,H で与えられる量子ウォーク(G_{01} 上の量子ウォーク)の挙動を解析することが可能になる.今,原点(0,0) から出発させた粒子が t 秒後に (i,j) にいる確率は遷移振幅

$$f_{i,j}(t) = (e_{i,j} | \exp(-itH) | e_{0,0})$$

の絶対値の二乗で与えられる. $|f_{i,j}(t)|$ を N=7 の場合に計算・プロットすると図 1 が得られた. このとき, (0,0) から (7,0) へと確率 1 で遷移する PST 現象が実際に確認することができている. これは一般の N の場合でも同様に成立する.

5 まとめ

PST が観測可能な2次元 XX スピン鎖を提案した.このスピン鎖は順序付きハミンググラフ

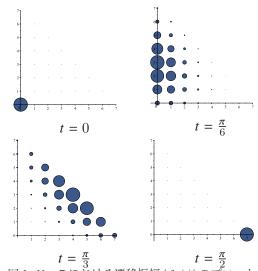


図 1. N=7 における遷移振幅 $|f_{ii}(t)|$ のプロット.

から自然と導かれる。定理の導出や詳細については発表にて述べる。

- [1] S. Bose, Quantum communication through spin chain dynamics: an introductory review, Contemp. Phys., Vol. 48 (2007) 13– 30
- [2] L. Vinet and A. Zhedanov, How to construct spin chains with perfect state transfer, Phys. Rev. A, Vol. 85 (2012) 012323.
- [3] H. Miki, S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, Quantum state transfer in a two-dimensional regular spin lattice of triangular shape, Phys. Rev. A, Vol. 85 (2012) 062306.
- [4] H. Miki and K. Miura, 3-dimensional solvable XX spin lattice Hamiltonian derived from 3-variable Krawtchouk polynomials, JSIAM Lett., Vol.8 (2016) 41–44.
- [5] H. Miki, S. Tsujimoto and L. Vinet, Quantum Walks on Graphs of the Ordered 2-Hamming Scheme and Spin Networks, arXiv:1712.09200.
- [6] W. Martin and D. Stinson, Association Schemes for Ordered Orthogonal Arrays and (*T*; *M*; *S*)-Nets, Canad. J. Math., Vol. 51 (1999) 326–346.
- [7] M.V. Tratnik, Some multivariable orthogonal polynomials of the Askey tableaudiscrete families, J. Math. Phys., Vol. 32 (1991) 2337–2342.

情報伝達長を考慮したピラミッド組織構造の2階層リエゾン配置モデル

澤田 清

流通科学大学 経済学部 経済情報学科

e-mail: Kiyoshi_Sawada@red.umds.ac.jp

1 はじめに

筆者は、高さHの完全K分木型ピラミッド組織構造に、組織内の情報交換や調整を専門的に行うリエゾンを配置する場合に、すべての組織メンバー間の情報伝達が最も効率的となるようなリエゾンの配置方法を求めるモデルを提案してきた[1,2].

本研究で扱うモデルでは、リエゾンを2人 配置し、異なる2つの階層それぞれの全メン バーと関係追加を行う. すなわち, 高さH(H =(2,3,...) の完全 (K=2,3,...) 型組織 構造に、2つのリエゾン頂点を追加し、1つの リエゾン頂点を深さ M(M = 1, 2, ..., H - 1)の全頂点と隣接化させ,他の1つのリエゾン 頂点を深さ N(N = M + 1, M + 2, ..., H) の 全頂点と隣接化させる. ここで, 完全 K 分木 は、すべての葉の深さが同じで、かつすべての 内部頂点の子の数が K である K 分木を指す. また,深さは根からその頂点までの経路の長さ を表す、このモデルに対して、筆者はすでに、 リエゾン頂点を除く全頂点間の最短経路長の総 和である総頂点間経路長を最小にする最適深さ の対 $(M, N)^*$ を求めている [3]. リエゾン頂点 との間の最短経路長を総頂点間経路長に含めな いのは、リエゾンが情報交換などの調整役であ るからである.

上述したモデルは、完全 K 分木の各辺の長さとリエゾン頂点との間に追加する辺の長さが同じであると仮定している。しかし、組織内メンバー間とリエゾンと組織内メンバーの間では、情報伝達長が異なると考えられる。本研究では、完全 K 分木の各辺の長さ1に対して、リエゾン頂点と隣接化させる追加辺の長さをL(0 < L < 1) とする。本稿では、リエゾンを配置する最適深さの対 $(M,N)^*$ を求めるために、リエゾン頂点との間に辺を追加することにより総頂点間経路長が短縮される長さである総頂点間短縮経路長を定式化する。

2. でリエゾンを1階層に1人配置する場合の 総頂点間短縮経路長の定式化を示し,3. でリエ ゾンを2階層に1人ずつ配置する場合の総頂点 間短縮経路長の定式化を行う.

2 1階層リエゾン配置モデル

ここでは、高さ $H(H=1,2,\dots)$ の完全 K 分木 $(K=2,3,\dots)$ に、1 つのリエゾン頂点を追加し、深さ $T(T=1,2,\dots,H)$ の全頂点と隣接化させたときの総頂点間短縮経路長の定式化を示す。ただし、前述したように、完全 K 分木の各辺の長さを 1、リエゾン頂点との間に追加する辺の長さを L(0 < L < 1) とする.

ここで、深さT以上の頂点間の短縮経路長の総和は、

$$\alpha_H(T) = \{W(H-T)\}^2 K^T (K-1)$$

$$\times \sum_{i=1}^T (i-L)K^{i-1}$$
 (1)

で与えられる. ただし, W(h)(h=0,1,2,...)は, 高さhの完全K分木の頂点数を表す. また, 深さT以上の頂点と深さT未満の頂点との間の短縮経路長の総和は,

$$\beta_H(T) = 2W(H-T)K^T(K-1)$$

$$\times \sum_{i=1}^{T-1} (i-L)(T-i)K^{i-1}, (2)$$

深さ T 未満の頂点間の短縮経路長の総和は,

$$\gamma(T)=K^T(K-1)\sum_{i=1}^{T-2}\sum_{j=1}^i(j-L)(i-j+1)K^{j-1}$$
 (3) となる。ただし, $\sum_{i=1}^0\cdot=0$, $\sum_{i=1}^{-1}\cdot=0$ と定義する。

以上より、深さTの全頂点とリエゾン頂点を隣接化させたときの総頂点間短縮経路長 $\sigma_H(T)$ は、

$$\sigma_H(T) = \alpha_H(T) + \beta_H(T) + \gamma(T) \tag{4}$$

と定式化される.

3 2階層リエゾン配置モデル

ここでは、2.01 階層リエゾン配置モデルの定式化を拡張し、高さ $H(H=2,3,\dots)$ の完全 K 分木 $(K=2,3,\dots)$ に、2 つのリエゾン頂点を追加し、それぞれ深さ $M(M=1,2,\dots,H-1)$ と深さ $N(N=M+1,M+2,\dots,H)$ の各階層の全頂点と隣接化させたときの総頂点間短縮経路長の定式化を行う。ここでも、完全 K 分木の各辺の長さを 1、リエゾン頂点との間に追加する辺の長さを L(0 < L < 1) とする.

深さM未満の頂点の集合を V_1 ,深さM以上N未満の頂点の集合を V_2 ,深さN以上の頂点の集合を V_3 と書くことにする.

このとき、 V_3 内の頂点間の短縮経路長の総和は、式(1) を用いて、

$$A_H(N) = \alpha_H(N) \tag{5}$$

と与えられる. また, V_1 と V_3 の頂点間および V_2 と V_3 の頂点間の短縮経路長の総和は,式 (2) を用いて,

$$B_H(N) = \beta_H(N) \tag{6}$$

となる. さらに, V_1 内の頂点間の短縮経路長の総和は,式(3)を用いて,

$$C(M) = \gamma(M) \,, \tag{7}$$

 V_1 と V_2 の頂点間の短縮経路長の総和は、式(2)を用いて、

$$D(M,N) = \beta_{N-1}(M) \tag{8}$$

と定式化される. V_2 内の頂点間のうち,深さM の頂点を根とする部分木内の頂点間の短縮経路長の総和は,式(3) を用いて,

$$E(M,N) = \gamma(N-M)K^M \tag{9}$$

と与えられる。さらに、 V_2 内の頂点間のうち、深さ M の頂点を根とする異なる部分木間の頂点間の短縮経路長は、次のように定式化される。すなわち、深さ M の頂点とリエゾン頂点との隣接化のみによる短縮経路長の総和は、式 (1) を用いて、

$$F(M,N) = \alpha_{N-1}(M)$$
, (10)

深さMの頂点とリエゾン頂点との隣接化による経路長短縮後に、さらに深さNの頂点とリ

エゾン頂点との隣接化により短縮される経路長 の総和は,

$$G(M, N) = (K^{M} - 1) \sum_{i=1}^{N-M-2} K^{N-i} \times \sum_{j=1}^{N-M-i-1} K^{N-M-j} (N - M - i - j)$$
(11)

となる. ただし,ここでも,
$$\sum_{i=1}^0 \cdot = 0$$
, $\sum_{i=1}^{-1} \cdot = 0$ と定義する.

以上より、2つのリエゾン頂点をそれぞれ深さMと深さNの各階層の全頂点と隣接化させたときの総頂点間短縮経路長 $S_H(M,N)$ は、

$$S_{H}(M, N) = A_{H}(N) + B_{H}(N) + C(M) + D(M, N) + E(M, N) + F(M, N) + G(M, N)$$
(12)

と定式化される.

なお、総頂点間短縮経路長 $S_H(M,N)$ を最大にする最適深さ対(M,N)*に関する考察は、発表時に報告する.

- [1] K. Sawada, A Model of Placing a Liaison in the Same Level of a Pyramid Organization Structure, in: Proc. of 2007 IEEE International Conference on Industrial Engineering and Engineering Management, pp.804–806, 2007.
- [2] K. Sawada, An Optimal Placement of a Liaison in the Same Level of a Pyramid Organization Structure Considering Communication Lengths between a Liaison and Members, in: Proc. of International Symposium on Operational Research and Applications, pp.463– 468, 2013.
- [3] 澤田 清, 完全 K 分木型組織構造の 2 階層 リエゾン配置モデル, 情報処理学会研究 報告, Vol. 2006-MPS-59 (2006), pp.85– 88.

非二部的 Dulmage-Mendelsohn 分解と Berge 双対の束構造

喜多 奈々緒 東京理科大学

e-mail: kita@rs.tus.ac.jp

1 Introduction

The Dulmage-Mendelsohn decomposition, or the DM decomposition, is a classical canonical decomposition in matching theory [3] applicable for bipartite graphs and is famous not only for its application in the field of matrix computation, but also for providing a prototypal structure in matroidal optimization theory [4]. The DM decomposition is stated and proved using the two color classes of a bipartite graph, and therefore generalizing this decomposition for nonbipartite graphs has been a difficult task. In our study, we obtain a new canonical decomposition that is a generalization of the DM decomposition for arbitrary graphs using a recently introduced tool in matching theory, the cathedral decomposition [1]. Our new DM decomposition enables us to understand all known canonical decompositions in a unified way. Furthermore, we apply our result to derive a new theorem regarding barriers [3]. The duality theorem for the maximum matching problem is the celebrated Berge formula [3], in which dual optimizers are known as barriers. Several results regarding maximal barriers have been derived by known canonical decompositions; however, no characterization has been known for general graphs. In our study, we provide the first full characterization of the family of maximal barriers in general graphs, in which the known results are developed and unified.

2 Notation

We use the basic notation given by Schrijver [5]. For basics of matching theory, we follow Lovász and Plummer [3]. Let G be a graph in the following. A graph in general comprises disjoint subgraphs called $factor\ components$ [3] and edges joining them. The set of factor-components of G is denoted

by $\mathcal{G}(G)$. Factor-components serve as bulding blocks of a graph in matching theory. We denote by D(G) the *defect* part of the Gallai-Edmonds decomposition [3].

3 Cathedral Decomposition of Graphs

The theory of cathedral decomposition [1] is made up of three central concepts regarding factor-components: the partially ordered structure between factor-components given by Theorem 3.2, the partition of each factor component given by Theorem 3.4, and the interrelationship between these two concepts given by Theorem 3.5.

Definition 3.1. A set $X \subseteq V(G)$ is said to be separating if there exist $H_1, \ldots, H_k \in \mathcal{G}(G)$, where $k \geq 1$, such that $X = V(H_1) \cup \cdots \cup V(H_k)$. For $G_1, G_2 \in \mathcal{G}(G)$, we say $G_1 \triangleleft G_2$ if there exists a separating set $X \subseteq V(G)$ with $V(G_1) \cup V(G_2) \subseteq X$ such that $G[X]/G_1$ is a factor-critical graph [3].

Theorem 3.2. For a graph G, the binary relation \triangleleft is a partial order over $\mathcal{G}(G)$.

Definition 3.3. For $u, v \in V(G) \setminus D(G)$, we say $u \sim_G v$ if u and v are identical or if u and v are factor-connected and deleting u and v from G makes the size of a maximum matching smaller by two or more edges.

Theorem 3.4. For a graph G, the binary relation \sim_G is an equivalence relation.

From the definition of \sim_G , for each $H \in \mathcal{G}(G)$, the family $\{S \in \mathcal{P}(G) : S \subseteq V(H)\}$ forms a partition of $V(H) \setminus D(G)$. We denote this family by $\mathcal{P}_G(H)$. We denote by $U_G(H)$ the set of vertices contained in the upper bounds of $H \in \mathcal{G}(G)$.

Theorem 3.5. Let G be a graph, and let $H \in \mathcal{G}(G)$. Then, for each connected component K of $G[U_G(H)]$, there exists $S \in \mathcal{P}_G(H)$ such

that $N_G(K) \cap V(H) \subseteq S$.

Under Theorem 3.5, we denote by $U_G(S)$ the set of vertices contained in factor-components from $U_G(H)$ "assigned to" S. We denote $U_G(H) \setminus S \setminus U_G(S)$ by $^{\top}U_G(S)$.

4 TFR Posets

We introduce a new set system as follows.

Definition 4.1. Let X be a set, and let \leq be a partial order over X. Let \smile be a binary relation over X such that,

- (i) for each $x, y, z \in X$, if $x \leq y$ and $y \smile z$ hold, then $x \smile z$ holds (transitivity);
- (ii) for each $x \in X$, $x \smile x$ does not hold (nonreflexivity); and,
- (iii) for each $x, y \in X$, if $x \smile y$ holds, then $y \smile x$ also holds (symmetry).

We call this poset endowed with this additional binary relation a poset with a transitive forbidden relation or TFR poset in short, and denote this by (X, \preceq, \smile) .

5 Nonbipartite DM Decomposition

In the following, we present the DM decomposition for general graphs.

Definition 5.1. A generalized DM component is a subgraph of the form $G[S \cup^{\top} U_G(S)]$, where $S \in \mathcal{P}(G)$, endowed with S as an attribute known as the base. For a DM component C, the base of C is denoted by $\pi(C)$. We denote by $\mathcal{D}(G)$ the set of DM components of G.

Definition 5.2. We define binary relations \preceq° and \preceq over $\mathcal{D}(G)$ as follows: for $D_1, D_2 \in \mathcal{D}(G)$, we let $D_1 \preceq^{\circ} D_2$ if $D_1 = D_2$ or if $N_G(^{\top}U_G(S_1)) \cap S_2 \neq \emptyset$; we let $D_1 \preceq D_2$ if there exist $C_1, \ldots, C_k \in \mathcal{D}(G)$, where $k \geq 1$, such that $\pi(C_1) = \pi(D_1)$, $\pi(C_k) = \pi(D_2)$, and $C_i \preceq^{\circ} C_{i+1}$ for each $i \in \{1, \ldots, k\} \setminus \{k\}$.

Definition 5.3. We define binary relations \smile° and \smile over $\mathcal{D}(G)$ as follows: for $D_1, D_2 \in \mathcal{D}(G)$, we let $D_1 \smile^{\circ} D_2$ if $\pi(D_2) \subseteq V(D_1) \setminus \pi(D_1)$ holds; we let $D_1 \smile D_2$ if there exists $D' \in \mathcal{D}(G)$ with $D_1 \preceq D'$ and $D' \smile^{\circ} D_2$.

Theorem 5.4. The triple $(\mathcal{D}(G), \preceq, \smile)$ is a

TFR poset for any graph G.

For a graph G, the TFR poset $(\mathcal{D}(G), \preceq, \smile)$ is uniquely determined. We call this structure the *nonbipartite Dulmage-Mendelsohn* (DM) decomposition of G. This is a generalization of the classical DM decomposition for bipartite graphs. This structure can be computed in $O(|V(G)| \cdot |E(G)|)$ time.

6 Characterization of Barriers

We can define the notion of spanning legitimate ideals of a TFR posets as an analogue of ideals in ordinary posets. For $(\mathcal{D}(G), \leq, \smile)$, we can define the normalizating operation [2] using the Gallai-Edmonds decomposition [3].

Theorem 6.1. Let G be a graph. A set of vertices $X \subseteq V(G)$ is a maximal barrier if and only if it is of the form $\bigcup \{\pi(C) : C \in \mathcal{I}\}$ for a spanning legitimate normalized upper ideal \mathcal{I} of the TFR poset $(\mathcal{D}(G), \preceq, \smile)$.

謝辞 This work is partly supported by JSPS KAKENHI 15J09683. The reader is referred to the paper [2].

- [1] Nanao Kita, New canonical decomposition in matching theory, arXiv preprint arXiv:1708.01051, under review.
- [2] Nanao Kita, Nonbipartite Dulmage-Mendelsohn decomposition for Berge duality, Lecture Notes in Computer Science 10976 (2018), 293–304.
- [3] László Lovász and Michael D. Plummer, *Matching theory*, vol. 367, American Mathematical Soc., 2009.
- [4] Kazuo Murota, *Matrices and matroids* for systems analysis, vol. 20, Springer Science & Business Media, 2009.
- [5] Alexander Schrijver, Combinatorial optimization: polyhedra and efficiency, vol. 24, Springer Science & Business Media, 2002.

幾何学的最適化に基づく

対称性をもつ連続時間線形システムの新しい同定法

佐藤 寛之 ¹, 佐藤 一宏 ², Tobias Damm³ ¹ 京都大学, ² 北見工業大学, ³University of Kaiserslautern e-mail: hsato@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

対称性を備えた連続時間線形システムの同定は、電気回路網やマルチエージェントシステムなど多くのシステムのモデル化において重要である。本稿では、対象とする連続時間システムに対応する離散時間システムの同定問題をリーマン多様体上の最適化問題として定式化し、幾何学的な共役勾配法に基づく新たな同定法を提案する。なお、本稿は[1]の研究結果に基づくものである。

2 対象とするシステム同定問題の定式化

本稿では次の連続時間線形システムの同定を 目標とする:

$$\dot{\hat{x}}(t) = F\hat{x}(t) + G\hat{u}(t),
\hat{y}(t) = C\hat{x}(t).$$
(1)

ここで、 $\hat{x}(t) \in \mathbb{R}^n$, $\hat{u}(t) \in \mathbb{R}^m$, $\hat{y}(t) \in \mathbb{R}^p$ はそれぞれシステムの状態,入力,出力を表す.また, $\operatorname{Sym}(n)$ を n 次対称行列全体の集合とすると, $F \in \operatorname{Sym}(n)$, $G \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $C \in \mathbb{R}^{p \times n}$ である.本稿では,システムを特徴付けるこれらの行列を同定するためのアルゴリズムについて議論する.なお,システム同定の基本的な事柄については [2] を参照されたい.

システム (1) は行列 F に関して対称性をもち,前節で述べたように多くの応用をもつ.与えられた入出力データ $\{(u(kh),y(kh))\}_{k=0,1,\dots,N}$ を利用して,(1) に対応する離散時間システム

$$\hat{x}_{k+1} = A\hat{x}_k + B\hat{u}_k,$$

$$\hat{y}_k = C\hat{x}_k \tag{2}$$

を同定することで、元のシステムを同定したい、ここで、h はサンプリング周期であり、 $\hat{x}_k := \hat{x}(kh), \hat{y}_k := \hat{y}(kh)$ である。また、行列 A, B は

$$A := \exp(Fh),$$

$$B := \left(\int_0^h \exp(Ft)dt\right)G$$

で与えられる。ここで,A は正定値対称行列である。したがって,十分大きなサンプリング周期 h を固定した上で A, B を推定できれば,

$$F = \log A/h,$$

$$G = \left(\int_0^h \exp(Ft)dt\right)^{-1} B$$

によって F,G を得ることができ、元のシステム (1) の同定が達成される. しかしながら、システム (2) に対する既存の同定法では A に正定値対称性をもたせることができず、連続時間システム (1) の同定法も提案されていなかった.

そこで、n次正定値対称行列全体を $\operatorname{Sym}_+(n)$ とし、多様体 $M:=\operatorname{Sym}_+(n) \times \mathbb{R}^{n \times m} \times \mathbb{R}^{p \times n}$ を 考えよう. 本稿ではシステム (2) の同定を $\Theta:=(A,B,C)\in M$ についての次の最適化問題として定式化する:

問題 2.1

minimize $f(\Theta) := ||e(\Theta)||_2^2$, subject to $\Theta \in M$.

ただし, $e(\Theta)$ は

$$e(\Theta) := \begin{pmatrix} y_1^\top - \hat{y}_1^\top(\Theta) & \dots & y_N^\top - \hat{y}_N^\top(\Theta) \end{pmatrix}^\top$$

と定義される予測誤差であり、上式における $\hat{y}_k(\Theta)$ は (2) の \hat{u}_k に u_k を代入して得られる \hat{y}_k である.

また、n次直交群 O(n) の M への作用を、任意の $U \in O(n)$ および $\Theta = (A,B,C) \in M$ について

$$U \circ \Theta := (U^{\top} A U, U^{\top} B, C U) \tag{3}$$

と定義すると、条件 $\hat{x}_0 = 0$ の下で

$$f(U \circ \Theta) = f(\Theta), \quad \Theta \in M, \ U \in O(n)$$

が成り立つ。この不変性に着目し,(3)で定義される群作用に基づいてMの商多様体を定義

すると、問題 2.1 をその商多様体上の最適化問題として定式化することができる.詳細は割愛するが、得られる商多様体は元の多様体 M より次元が小さく、より効率的な探索が可能となることが期待される.以下の議論では積多様体 M のみを扱うことにする.

3 積多様体 M 上の共役勾配法

積多様体 $M=\operatorname{Sym}_+(n)\times\mathbb{R}^{n\times m}\times\mathbb{R}^{p\times n}$ 上の最適化を行うには,M に,リーマン計量とよばれる,各点の接空間における内積を与える対称テンソル場 g を定め,リーマン多様体 (M,g) 上で目的関数の勾配などを計算する必要がある.その際, $\operatorname{Sym}_+(n)$ については自然なリーマン計量が知られており,それと行列空間における標準内積に基づいて,M にリーマン計量 g を導入する.すなわち,任意の $\Theta=(A,B,C)$ および $(\xi_1,\eta_1,\zeta_1),(\xi_2,\eta_2,\zeta_2)\in T_\Theta M$ に対して,

$$g_{\Theta}((\xi_1, \eta_1, \zeta_1), (\xi_2, \eta_2, \zeta_2))$$

:= tr(A^{-1}\xi_1 A^{-1}\xi_2) + tr(\eta_1^\tau \chi_2) + tr(\xi_1^\tau \xi_2)

と定義する。さて、問題 2.1 の目的関数をユークリッド空間全体 $\mathcal{R}:=\mathbb{R}^{n\times n}\times\mathbb{R}^{n\times m}\times\mathbb{R}^{p\times n}$ に拡張した関数を \bar{f} とし、 \bar{f} のユークリッド勾配を $\nabla \bar{f}:\mathcal{R}\to\mathcal{R}:(A,B,C)\mapsto(G_A,G_B,G_C)$ とすると、リーマン計量 g により定義される f のリーマン勾配 $\operatorname{grad} f$ は、 $\Theta\in M$ に対して

$$\operatorname{grad} f(\Theta) = (A \operatorname{sym}(G_A)A, G_B, G_C)$$

となる。ここで、 $\operatorname{sym}(\cdot)$ は $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対して $\operatorname{sym}(X) := (X + X^{\top})/2$ と作用する。ユーク リッド勾配 $\nabla \bar{f}(\Theta)$ を計算する際に必要な G_A , G_B , G_C の具体的な形は [1] を参照されたい.

問題 2.1 にリーマン多様体上の共役勾配法を適用することで、新たな同定アルゴリズムを導出しよう. 点列 $\{\Theta_k\}$, $\Theta_k=(A_k,B_k,C_k)\in M$ を生成することを考える. 点 $\Theta_k\in M$ および Θ_k における探索方向 $\eta_k=(A_k',B_k',C_k')\in T_{\Theta_k}M$ が与えられたとき、次の点 Θ_{k+1} を M 上の指数写像 Exp によって

$$\Theta_{k+1} := \operatorname{Exp}_{\Theta_k}(A'_k, B'_k, C'_k)
= (A_k \exp(A_k^{-1} A'_k), B_k + B'_k, C_k + C'_k)$$
(4)

と計算する. 行列 A_k に単に A_k' を加えるだけでは正定値性が保たれるとは限らないが, (4) のように計算することでその保証ができ, 多様体 M 上の自然な点の更新が達成されている.

また,共役勾配法での多様体 M 上の点 Θ_{k+1} における探索方向 $\eta_{k+1} \in T_{\Theta_{k+1}} M$ は, Θ_{k+1} における勾配 $\operatorname{grad} f(\Theta_{k+1})$ と 1 つ前の反復での点 $\Theta_k \in M$ における探索方向 $\eta_k \in T_{\Theta_k} M$ を用いて, $k \geq 0$ のとき

$$\eta_{k+1} = -\operatorname{grad} f(\Theta_{k+1}) + \beta_{k+1} \mathcal{P}_{\Theta_k, \Theta_{k+1}}(\eta_k)$$

と計算する [3]. ここで, β_{k+1} は実パラメータである.なお, $\eta_0 = -\operatorname{grad} f(\Theta_0)$ とする.また, $\mathcal{P}_{\Theta_k,\Theta_{k+1}}(\eta_k)$ は, $\eta_k = (A_k',B_k',C_k')$ の $\Theta_k = (A_k,B_k,C_k)$ から $\Theta_{k+1} = (A_{k+1},B_{k+1},C_{k+1})$ への測地線に沿った平行移動であり,次のように計算することができる:

$$P_{\Theta_k,\Theta_{k+1}}(A'_k, B'_k, C'_k)$$

$$= ((A_{k+1}A_k^{-1})^{1/2}A'_k((A_{k+1}A_k^{-1})^{1/2})^{\top}, B'_k, C'_k).$$

なお、計算コストが比較的小さい MOESP 法とよばれる手法を事前に適用することで良い近似解を計算し、それを提案アルゴリズムの初期点 $(A_0,B_0,C_0)\in M$ とすることが効果的である。ただし、 A_0 が正定値対称行列になるように修正された MOESP 法を用いる必要があることに注意する。このような初期点を選ぶことで、ランダムに選んだ $(A,B,C)\in M$ を初期点に用いるよりも良い結果が得られる。

講演では、提案アルゴリズムの詳細を述べる とともに、既存手法である N4SID 法や MOESP 法によるシステム同定結果との比較についても、 数値実験結果を示し議論する.

謝辞

本研究は日本学術振興会科学研究費補助金 (課題番号: JP16K17647, JP18K13773) およ び旭硝子財団の助成を受けている.

- [1] K. Sato, H. Sato, and T. Damm, Riemannian optimal system identification method of linear continuous-time systems with symmetry, arXiv preprint, arXiv:1804.10379, 2018.
- [2] L. Ljung, System Identification: Theory for the User, Prentice Hall, 1999.
- [3] P.-A. Absil, R. Mahony, and R. Sepulchre, *Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*, Princeton University Press, 2008.

あるマスター方程式から導出される 期待値方程式に対する接触幾何学的記述

後藤振一郎1、 日野英逸2

 1 京都大学情報学研究科数理工学専攻, 2 統計数理研究所

1 概要

本講演では、離散状態が目的分布であるような系を実現するためのマルコフ連鎖モンテカル口法の微分幾何学的記述を行う。特に、あるクラスのマスター方程式から期待値が満たす力学系を厳密に求め、その系の非平衡状態を接触幾何学を用いて記述する。その力学系を接触多様体上のベクトル場で記述し、かつ計量を導入し、緩和への収束が指数関数的になることを示す。

2 導入

マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法は指定した分布関数やそれに付随する期待値を系統的な手段により数値的に得る手法として、理工学の様々な分野で用いられる。特に近年、応用研究が目覚しい機械学習及びベイズ統計等においては、パラメーター推定を行う際に MCMC 法がふんだんに用いられる。またどのアルゴリズム設計でも求められるように、計算時間の短縮や誤差評価のためには精密な基礎理論の構築が欠かせない。そのため、現在まで主に確率論や統計的手法を援用することにより MCMC 法の基礎的研究が行われてきた。

MCMC 法に限らず理工学の基礎理論を固め る方法として、微分幾何学を用いた理論の定式 化がある。例えば、量子力学における幾何学的 位相の定式化やゲージ理論の構成、数理統計学 の微分幾何学による記述、などが挙げられる。 これら微分幾何学の援用は、見かけ上異なった 問題達の数理的共通部分を抜き出し、問題に対 する統一的なアプローチを提供し、異分野交流 の架け橋になってきた。例えば、数理統計学と 物理学の物性分野においては、スピン系の情報 幾何学を通じて両者から論じることが可能に なった。ここで情報幾何学とは数理統計学の幾 何学化として知られ、学際的研究分野をなして いる学問体系のことである。また、著者の一人 が明らかにした電気回路系と平衡熱力学の間の 幾何学を介したある種の類似性は、両者を統一 的に論じることを可能にした。これは接触幾何 学と呼ばれる幾何学を用いたことによる効果で

ある。ここで接触幾何学とは、古典ハミルトン 力学の幾何学化のシンプレクティック幾何学の 奇数次元版として知られている。

MCMC 法のクラスを限れば、確率論や統計的手法以外の手法でも基礎理論の構築を押し進めることも可能であるだろう。MCMC 法の中で熱浴法と呼ばれるクラスは決定論的力学系、特にマスター方程式、で記述される。そのため、確率論や統計的手法による研究に加え、力学系理論を主体にした研究も自然で、進展させるべきであると考えられる。著者の知る限り、そういった研究は未発達である。

以上を踏まえ本研究は、あるクラスのマスター方程式を提案し、期待値の時間発展を表す力学系を厳密に導出する。そして、その力学系が接触多様体上のベクトル場として表現でき、十分時間が経過し、緩和した後は情報幾何学で状態が記述できることを示す。また、接触多様体に情報幾何学で用いられるフィッシャー計量テンソル場と矛盾しない計量テンソル場に関し、力学系の緩和時間を議論する[1]。

3 可解な熱浴法

本章では、本研究で用いる主マスター方程式と双対マスター方程式を導入し、その基本的性質を述べる。本稿では Γ を離散状態集合とする。まず、マスター方程式を次のように導入する。 $p:\Gamma\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ を時間依存する関数でp(j,t) $\mathrm{d}t$ が時間間隔 $[t,t+\mathrm{d}t]$ の間に状態が $j\in\Gamma$ である確率とする。更に $w(j|j')\in I$ は状態 j' から j への遷移確率である (I=[0,1])。この時、分布関数はマルコフ過程に従うものとすると、

$$\frac{\partial p(j,t)}{\partial t} = \sum_{j'(\neq j)} [w(j|j') p(j',t) - w(j'|j) p(j,t)],\tag{1}$$

とモデル化され、マスター方程式と呼ばれる。 十分時間が経てば p は目的分布に漸近することが証明され、目的分布は平衡分布とも呼ばれる。これを本稿では $p_{\theta}^{\mathrm{eq}}(j)$ と表す。ここで $\theta=\{\theta^1,\dots,\theta^n\}\in\Theta\subseteq\mathbb{R}^n$ は目的分布を定め るパラメーター集合である。

本稿では(1)におけるwを次のように選ぶ。

定義 3.1. 式 (1) において $w(j|j') = p_{\theta}^{\text{eq}}(j)$ と選んだ方程式を (可解) 主マスター方程式と呼ぶ。また w を $w_{\theta}(j|j') = p_{\theta}^{\text{eq}}(j)$ と書く。

注意 3.1. 主マスター方程式の解は以下である:

$$p(j, t; \theta) = e^{-t} p(j, 0) + (1 - e^{-t}) p_{\theta}^{eq}(j).$$

また $\lim_{t\to\infty} p(j,t;\theta) = p_{\theta}^{eq}(j)$ が成立。

主マスター方程式の"双対"を以下の理由により導入する。(i) 離散分布は指数分布族に属すため、情報幾何で云う $\Psi^{\rm eq}$ ポテンシャルが存在。(ii) 微分 $\eta_a=\partial\Psi^{\rm eq}/\partial\theta_a$ により期待値標座標を導入することが可能。なお、 θ^a と η_a は一対一。(i),(ii) を踏まえ、以下を導入する。

定義 3.2. 主マスター方程式に現れる θ を $\eta=\{\eta_1,\ldots,\eta_n\}$ で書きなおした方程式を双対マスター方程式と呼ぶ。なお、解を $p(j,t;\eta)$ と書く。

4 観測量の時間発展

まず種々の期待値を定義する。

定義 4.1. $\mathcal{O}_a:\Gamma\to\mathbb{R}, (a\in\{1,\ldots,n\})$ をある関数とする。この時、

$$\begin{split} \left\langle \, \mathcal{O}_{\,a} \, \right\rangle_{\,\theta}(t) & \ := \ \sum_{j \in \Gamma} \mathcal{O}_{\,a}(j) p(j,t;\theta) \\ \left\langle \, \mathcal{O}_{\,a} \, \right\rangle_{\,\theta}^{\,\mathrm{eq}} & \ := \ \sum_{j \in \Gamma} \mathcal{O}_{\,a}(j) p_{\,\theta}^{\,\mathrm{eq}}(j) \end{split}$$

をそれぞれ \mathcal{O}_a の p による期待値、 $p_{\, heta}^{\, ext{eq}}$ による期待値と呼ぶ。

注意 4.1. 以下が成立:

$$\left\langle \left. \mathcal{O}_{a} \right. \right\rangle _{\theta}^{\,\mathrm{eq}} = \frac{\partial \left. \Psi^{\,\mathrm{eq}} \right.}{\partial \theta_{\,a}}, \quad \lim_{t \to \infty} \left\langle \left. \mathcal{O}_{a} \right. \right\rangle _{\theta}(t) = \left\langle \left. \mathcal{O}_{a} \right. \right\rangle _{\theta}^{\,\mathrm{eq}}$$

なお、 Ψ^{eq} は平衡状態に対して定義されていた。これを以下のように非平衡状態に拡張する:

$$\Psi(\theta, t) = \left(\frac{1}{J^0} \sum_{j \in \Gamma} \frac{p(j, t; \theta)}{p_{\theta}^{\text{eq}}(j)}\right) \Psi^{\text{eq}}(\theta),$$

ここで $J^0:=\sum_j 1$ 。以上の準備のもと、 $\langle\,\mathcal{O}_a\,
angle_{\theta}$ 等に対する力学系が近似なしに導出される。

命題 4.1. θ を時間依存しないパラメーター集合 $(\mathrm{d}\theta^{\,a}/\mathrm{d}t=0)$ で目的分布をパラメタライズ

する。すると以下が成立:

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left\langle \left\langle \mathcal{O}_{a} \right\rangle_{\theta} &= -\left\langle \left\langle \mathcal{O}_{a} \right\rangle_{\theta} + \left\langle \left\langle \mathcal{O}_{a} \right\rangle_{\theta}^{\mathrm{eq}}, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Psi &= -\Psi + \Psi^{\mathrm{eq}}. \end{split}$$

5 観測量の接触幾何学的記述

接触多様体とは奇数次元の多様体 $\mathcal C$ に接触 1 形式と呼ばれる 1 形式 λ が備わったペア $(\mathcal C,\lambda)$ のことである。ここで $\dim \mathcal C=2n+1$ とすると、 λ は次を満たす: $\lambda \wedge \underline{\mathrm{d}\lambda \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}\lambda} \neq 0$ 。

接触多様体の座標を (x,y,z) どする。ただし、 $x=\{x^a\},y=\{y_a\}$ でかつ $\lambda=\mathrm{d}z-y_a\mathrm{d}x^a$ (これ以降アインシュタインの規約を用いる)。 接触多様体上のベクトル場で接触ハミルトン力 学系と呼ばれるクラスが存在する。シンプレクティック幾何学と同様に、接触ハミルトニアンと呼ばれる関数を指定すると、一意的に接触ハミルトン力学系が定まる。以下が証明できる。

定理 5.1. [1]. 命題 4.1 での力学系はある接触ハミルトン系として記述できる。ここで接触多様体 (\mathcal{C},λ) は $\mathcal{C}\cong\mathbb{R}^{2n+1}$ 、 $\lambda=\mathrm{d}z-y_a\mathrm{d}x^a$ で、(x,y,z) は座標で $x^a=\theta^a,y_a=\langle\mathcal{O}_a\rangle,z=\Psi,$ とおいた。更にその接触ハミルトニアンを h とすると、 $h(t)=\exp(-t)h(0)$ が成立。

注意 4.1 等から平衡状態は情報幾何学で記述できることが分かり、ルジャンドル部分多様体と呼ばれる部分多様体に軌道の流れが漸近するすることも証明される。

定理 5.1 での C に計量テンソル場を導入する:

$$G = \frac{1}{2} \left[dx^a \otimes dy_a + dy_a \otimes dx^a \right] + \lambda \otimes \lambda.$$

また同じ定理内の力学系を \mathcal{C} 上のベクトル場と みなし、 $\dot{\gamma} \in T\mathcal{C}$ と表すと、以下が証明される。

命題 5.1. [1]. (目的分布からの距離)

$$\int_{-\infty}^{t} \sqrt{G(\dot{\gamma}, \dot{\gamma})} \, \mathrm{d}t = |h(t)| = \exp(-t) |h(0)|.$$

なお、これらの議論は双対マスター方程式を 出発点にしても可能である。

参考文献

[1] S. Goto and H. Hino, "Contact and information geometric description of an extended Markov Chain method", arXiv:1805.10592.

Adaptive Extra Chance Hamiltonian Monte Carlo

奥戸 道子1,鈴木 秀幸2

1 東京大学, 2 大阪大学

 $e\text{-}mail: michiko_okudo@mist.i.u-tokyo.ac.jp\\$

1 概要

Hamiltonian Monte Carlo (HMC) は Hamilton 系のダイナミクスをサンプル生成に利用した MCMC法であり、Hamilton 系の性質を利用して高いサンプリング効率を実現している。本研究では、計算時間を抑えながらサンプリング効率を高めるために、ダイナミクスの時間発展の中でサンプルを生成するタイミングを "extra chance" を用いて適応的に制御する手法を提案する。サンプリング途中での Hamilton 系の数値積分の数値誤差を用いて、無駄な計算を避けながらサンプルの棄却率を下げられることを数値実験で確認する。

2 背景:Hamiltonian Monte Carlo の ダイナミクスとサンプルの棄却

2.1 Hamiltonian Monte Carloの概要

Hamiltonian Monte Carlo [1] は確率分布に したがうサンプルを得るためのサンプリングア ルゴリズムである. 近年, [2] などでダイナミク スを用いた決定論的なサンプリングアルゴリズ ムが提案されているが、HMC は決定論的なサ ンプリングアルゴリズムと乱数を用いたサンプ リングアルゴリズムの中間とも呼べる手法であ る。MCMC法の基本形のひとつに、確率密度関 数の対数が定数を除いて与えられれば利用でき るランダムウォーク型の Metropolis 法があり, HMC はこれを改良したものである. Metropolis 法ではランダムウォークのステップ幅が狭い とサンプル間の距離が狭くなり収束が遅くなる という欠点があるが、HMC は Hamilton 系の ダイナミクスを利用することでランダムウォー ク的な振る舞いを抑えて遠くのサンプルをとれ る. これによりサンプルが確率分布が定義され ている空間を広く移動し、効率の良いサンプリ ングが出来る。

アルゴリズムの概要を説明する. サンプリングしたい確率分布の密度関数を

$$P(q) \sim \exp(-V(q)) \ (q \in \mathbb{R}^d)$$

とする。HMC では補助変数 $p \in \mathbb{R}^d$ を標準正規

分布に従う変数として導入し、(q,p) のサンプリングを行う。 $K(p) = p^{\top}p/2$ として H(q,p) = V(q) + K(p) とおくと、HMC は q,p の同時分布

$$\exp(-V(q))\exp(-K(p)) = \exp(-H(q, p))$$

からサンプリングする.

HMC は Metropolis 法の提案分布を Hamilton系の時間発展で置き換えた手法である. H(q,p) を Hamiltonian にもつ Hamilton系の時間発展の微分方程式を数値的に解いて、初期値 (q(0),p(0)) からある決まった時刻 T まで時間発展させて (q(T),p(T)) まで進める. 刻み幅 ϵ , step 数 L で時間 ϵL だけ Hamilton 系の時間発展をさせる 写像を Ψ^L_ϵ とすると、n 番目のサンプル (q_n,p_n) から次のサンプルの候補 (q^*_{n+1},p^*_{n+1}) を

$$(q_{n+1}^*, p_{n+1}^*) = \Psi_{\epsilon}^L(q_n, p_n)$$

によって提案する。この Ψ^L_ϵ が Hamilton 系のいくつかの良い性質を保存するとき、HMC は詳細釣り合いを満たし目的分布を定常分布として持つマルコフ連鎖を構築することが示される。

2.2 サンプルの棄却とダイナミクス

HMCは Metropolis 法の一種であるため、作られるサンプルは確率密度関数の値に応じた確率で棄却される。サンプルが棄却されると一つ前のサンプルを次のサンプルとして再利用することになるため、棄却率が高いとサンプル間の相関が高くなりサンプリング効率が悪くなる。

それに加えて、一般化HMCと呼ばれるHMCの拡張アルゴリズム [3] ではサンプルが棄却されると Hamilton 系のダイナミクスが中断され、次の数値積分ではそれまで移動してきた経路を遡る方向にサンプルが移動するため、サンプル間の相関がさらに高くなる.

サンプルの棄却率が上がる要因は、Hamilton系の数値積分における Hamiltonian H(q,p) の数値誤差である。H(q,p) が増大すると棄却率が上がる。積分を解析的に実行できる場合 H(q,p) は保存されるが、とても簡単な例を除いて解析

的には解けない。そのため数値積分が用いられるが、HMC に用いられる数値積分スキームでは H(q,p) は保存されない。

数値積分中に H(q,p) の値が振動する現象がしばしば見られるが,その場合 H(q,p) が再び小さくなるまで待てば棄却率は下がる.一方,数値積分の数値誤差が増大し H(q,p) が発散していく場合には,積分をそれ以上進めても棄却率が下がることは望めないので,無駄になる積分はせずに計算を切り上げるべきである.通常,HMC では数値積分を進める長さ ϵL はサンプリングを始める前にあらかじめ設定する必要があり,H(q,p) の値に応じて数値積分中に変えることはできない.

3 Adaptive Extra Chance HMC

本研究では、積分のstep数をこの先サンプルがacceptされる見込みがあるかを判断しながら適応的に変える枠組みを提案する。HMCのサンプリングの正当性を保証している詳細釣り合い条件を壊さずに、パラメータをサンプリング実行中に変えられることがポイントである。

提案アルゴリズムは、extra chance HMC (EHMC) [4] という HMC の改良になっている. Extra chance HMC は、サンプルが採択されるまで数値積分をある決められた時間までは延長可能にするアルゴリズムである。棄却されても積分を延長して新たなサンプルを提案することにより、棄却率を下げられることが数値実験で確認されている。一方で、積分を延長した結果サンプルが棄却された場合、計算が無駄になるという欠点がある。本研究で提案するアルゴリズムではこの点が改良されている。

アルゴリズムの概要を述べる. パラメータは積分の刻み幅 ϵ , step 数 L, 数値誤差に関するパラメータ C である. L は偶数にする. n 番目のサンプル (q_n,p_n) から次のサンプルの候補 (q_{n+1}^*,p_{n+1}^*) を生成する. 通常の HMC では $(q_{n+1}^*,p_{n+1}^*) = \Psi_{\epsilon}^L(q_n,p_n)$ と提案するが,提案アルゴリズムでは積分の中間地点において

$$|H(\Psi_{\epsilon}^{L/2}(q_n, p_n)) - H(\Psi_{\epsilon}^{L/2+1}(q_n, p_n))| < C$$
(1)

が満たされなければ積分を中断し $(q_{n+1}^*, p_{n+1}^*) = (q_n, p_n)$ とする。(1) が成り立てば $(q_{n+1}^*, p_{n+1}^*) = \Psi_{\epsilon}^L(q_n, p_n)$ とし、密度関数の値に応じた確率で棄却/採択する。採択されれば (q_{n+1}, p_{n+1}) が決まる。棄却されれば,(L+1) step 目から積分

を再開し上記の手順を繰り返す。これをサンプルが採択されるか(1)に基づいて積分が中断されるまで続ける。サンプルの棄却は積分を中断して作られた候補が棄却されたときのみ起こる。

4 数値実験

3つの正規分布を混ぜた 1 次元の混合正規分布からサンプリングを行った。3つの正規分布の平均はそれぞれ-3.5,0,3.5で,標準偏差は0.3,0.5,1である。 10^4 サンプルあたりの Effective Sample Size (ESS) というサンプルの相関の小ささを示す量と計算時間を表 1 に示した。

表 1. ESS と計算時間 (sec.)

2 11 200 2 11 3113 (500.)					
Method	ESS	$_{ m time}$	ESS/Time		
		(sec.)			
提案手法	2305.7	17.1	134.8		
EHMC	2709.6	34.1	79.3		
HMC	10.5	6.8	1.6		

提案手法のESS は extra chance HMC (EHMC) よりも 15% 程度小さいが、計算時間は 1/2 ほどになっているので、ESS/計算時間は 1.7 倍程度になっている。ESS/計算時間はスタンダードな HMC において最も小さく、この実験の設定では数値積分の延長はサンプル間の相関を下げるために有効であると言える。提案手法は計算時間を抑えながら効率的にサンプル間の相関を下げていることが確認された。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP18J10499 の助成を受けたものです。

- [1] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton and D. Roweth, Hybrid Monte Carlo, *Physics Letters B*, Vol. 195 (1987), 216–222.
- [2] H. Suzuki, J. Imura, Y. Horio and K. Aihara, Chaotic Boltzmann machines, Scientific Reports, Vol. 3 (2013), 1610.
- [3] A. M. Horowitz, A generalized guided Monte Carlo algorithm, *Physics Letters* B, Vol. 268 (1991), 247–252.
- [4] C. M. Campos and J. M. Sanz-Serna, Extra chance generalized hybrid Monte Carlo, *Journal of Compu*tational Physics, Vol. 281 (2015), 365– 374.

統計量による Peak-to-Average Power Ratio の上界

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, umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1 概要

Orthogonal Frequency Multiple Access (OFDM) は 4G/LTE や Wifi などに用いられて いるシステムであり、広く使われている無線通 信システムである。この OFDM システムには Peak-to-Average Power Ratio が大きいという 問題がある。一般に PAPR は累積確率分布によ リ測られるため、この曲線の理論値、近似値を求 めることは非常に重要な課題である。特に、送信 シンボルがある分布から独立に選ばれるような 場合に関しては近似曲線が求められている。し かしながら、そうではなく、例えば誤り訂正符号 使用時などといった場合は求まってはおらず、複 雑な上界が求められているだけである。本研究 では、この PAPR の累積確率分布の上界を、送 信シンボルの統計量を用いて表す。これは、送信 シンボルのセットさえ分かれば、事前に PAPR の曲線の上界を知ることができることを表して いる。

2 OFDM 信号と PAPR の定義

本節では OFDM 信号と PAPR の定義を行う。OFDM 信号は

$$s(t) = \sum_{k=1}^{K} A_k \exp\left(2\pi j \frac{k}{T} t\right) \tag{1}$$

と表すことができる。ここで K はキャリアの本数、 $A_k \in \mathbb{C}$ は送信シンボル、j は純虚数、T はシンボル長である。この信号を用いて PAPR を次のように定義する。

$$PAPR(\mathbf{c}) = \max_{0 \le t < T} \frac{|s(t)|^2}{P_{av}}$$
 (2)

ここで $\mathbf{c} = (A_1, \dots, A_K)^{\mathsf{T}}$ 、 P_{av} は OFDM 信号 の平均のパワーである。

一般には PAPR は符号語 cに依存し、かつ cはランダムに選ばれると考えられるため、累積確率分布 $Pr(PAPR > \gamma)$ を考えることができる。この符号語 c が独立に同分布から選ばれるような場合には、中心極限定理を用いて曲線を近似的に求めることが可能である [1]。 しかしながら、誤り訂正符号使用時などといった実用的なシチュエーションにおける PAPR は求めることが困難である。そこで PAPR 累積分布の上界を求める研究があるが、式が複雑で計算のためにさらなる仮定を必要とするものがほとんどで

ある [2]。そこで本研究では計算可能な上界を求めることを考える。

3 提案する上界

本節では次の定理を証明する。

定理 1

$$\Pr(\text{PAPR} > \gamma) \\
\leq \frac{K(2K-1)}{2P_{\text{av}}^2 \gamma^2} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}\{(\mathbf{c}^* G_k \mathbf{c})^2 + (\mathbf{c}^* \hat{G}_k \mathbf{c})^2\}$$

ただし $E\{X\}$ はXの期待値である。

この定理が示すように、PAPRの累積確率分布は、送信シンボルの4次モーメントを用いて上から抑えることができることを表している。文献[2]に、PAPRの累積確率分布は、高次モーメント(4次や5次)を用いて上から抑えることが示されているが、この証明には仮定を要し、仮定の是非については示されていない。本定理にはそういった仮定は要しない。

証明には次の補題を用いる[3]。

補題 2

$$\max_{t} |s(t)|^2 \le \rho(0) + 2 \sum_{k=1}^{K-1} |\rho(k)|$$

ただし $\rho(i)=\sum_{k=1}^{K-i}A_kA_{k+i}^*,\ \rho(K)=0$ 。 さらに $\rho(i)$ に関して次が成り立つ [4]。 補題 **3**

$$|\rho(0)|^{2} + 2\sum_{k=1}^{K-1} |\rho(k)|^{2}$$

$$= \sum_{k=0}^{K-1} |\rho(k)|^{2} + \sum_{k=0}^{K-1} |\rho(K-k)|^{2}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} |\rho(k) + \overline{\rho(K-k)}|^{2} + |\rho(k) - \overline{\rho(K-k)}|^{2} \right\}$$

$$= \frac{K}{2} \sum_{k=1}^{K} (\mathbf{c}^{*} G_{k} \mathbf{c})^{2} + (\mathbf{c}^{*} \hat{G}_{k} \mathbf{c})^{2}$$

ただし $G_k = V^*D_kV$, $\hat{G}_k = \hat{V}^*D_k\hat{V}$ で,

$$\begin{split} V_{m,n} &= \frac{1}{\sqrt{K}} \exp\left(-2\pi j \frac{mn}{K}\right), \\ \hat{V}_{m,n} &= \frac{1}{\sqrt{K}} \exp\left(-2\pi j n \left(\frac{m}{K} + \frac{1}{2K}\right)\right), \end{split}$$

 D_k は (k,k) 番目の要素が 1 で他の要素が 0 であるような対角行列である。

これらの補題を用いて定理を証明する。 証明 まず、補題2と3を用いて

$$\begin{aligned} & \max_{t} |s(t)|^{2} \\ & \leq & \rho(0) + 2 \sum_{k=1}^{K-1} |\rho(k)| \\ & \leq & \sqrt{2K-1} \sqrt{|\rho(0)|^{2} + 2 \sum_{k=1}^{K-1} |\rho(k)|^{2}} \\ & = & \sqrt{\frac{K(2K-1)}{2}} \sqrt{\sum_{k=1}^{K} (\mathbf{c}^{*}G_{k}\mathbf{c})^{2} + (\mathbf{c}^{*}\hat{G}_{k}\mathbf{c})^{2}} \end{aligned}$$

と評価できる。ここで2番目の不等式はCauchy-Schwarzの不等式である。

この結果を用いて

$$\begin{aligned} & \Pr(\text{PAPR} > \gamma) \\ &= \Pr(\text{PAPR}^2 > \gamma^2) \\ &= \Pr(\max_t |s(t)|^4 > P_{\text{av}}^2 \gamma^2) \\ &\leq \frac{\mathbb{E}\left\{\max_t |s(t)|^4\right\}}{P_{\text{av}}^2 \gamma^2} \\ &\leq \frac{K(2K-1)}{2P_{\text{av}}^2 \gamma^2} \sum_{k=1}^K \mathbb{E}\left\{(\mathbf{c}^* G_k \mathbf{c})^2 + (\mathbf{c}^* \hat{G}_k \mathbf{c})^2\right\} \end{aligned}$$

最初の不等式は Markov の不等式によるものである。

定理の中に期待値を含むため、計算のためには送信シンボル c の分布を知る必要がある。一般には符号語 c は符号語の集合 \mathcal{C} から一様に選ばれると考えることができるので [5]、定理は次のように書き換えることが可能である。

$$Pr(PAPR > \gamma)$$

$$\leq \frac{K(2K-1)}{2P_{\text{av}}^2 \gamma^2} \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{c} \in \mathcal{C}} \sum_{k=1}^{K} (\mathbf{c}^* G_k \mathbf{c})^2 + (\mathbf{c}^* \hat{G}_k \mathbf{c})^2$$

ただし $M = |\mathcal{C}|$ であり、符号語の総数である。

4 結論

本研究では、PAPRの累積確率分布の計算可能な上界を求めることを達成した。従来研究にも高次モーメントを用いて上界を導くものが存在したが、本研究における上界は何の仮定も課されていない。その意味でも従来研究の正しさを本研究が少なからず示したことになる。現在に至るまで、PAPRの抑制技術は多数存在するが、なぜPAPRが抑制されたかというメカニズム自体はあまり明らかになってはいない。もしPAPRの曲線に送信シンボルのモーメントと深く関わりがあるならば、送信シンボルのモーメントを調べることでPAPR自体が明らかになる可能性がある。

定理では Markov の不等式を用いたが、よりタイトな評価をするためには Chernoff の不等式を用いることがあげられる。しかしながら、Chernoff の不等式を用いるとパラメータがひとつ増えるため、評価をするためにはパラメータをどのように選ぶかが大きな問題となる。

これからの課題としては、PAPRの累積確率分布の上界値ではなく、近似値を求めることがあげられる。そのためにも、符号語のモーメントと PAPR の関係を明らかにすることが必要である。

References

- [1] H. Ochiai and H. Imai. "On the distribution of the peak-to-average power ratio in OFDM signals." IEEE transactions on communications 49.2 (2001): 282-289.
- [2] S. Litsyn. "Peak power control in multicarrier communications". Cambridge University Press, 2007
- [3] C. Tellambura, "Upper bound on peak factor of N-multiple carriers." *Electronics Letters* 33.19 (1997): 1608-1609.
- [4] H. Tsuda and K. Umeno, "Non-Linear Programming: Maximize SINR for Designing Spreading Sequence", *IEEE* Transactions on Communication, 66. 1 (2018): 278-289
- [5] V. Tarokh and H. Jafarkhani. "On the computation and reduction of the peak-to-average power ratio in multicarrier communications." *IEEE Trans*actions on Communications 48.1 (2000): 37-44.

普遍超一般化中心極限定理

梅野 健

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

本稿は、最近得られた超一般化中心極限定理 を更に異なるべき指数のべき則の和に適用でき る様に拡張したので、その新定理の内容 (普遍 超一般化中心極限定理) と証明の概略を示すこ とを目的とする。

2 超一般化中心極限定理とその拡張

まず、本稿の研究で中心的な役割を果たす安定分布について説明する。安定分布 $S(x;\alpha,\beta,\gamma,\mu)$ とは、以下の式で与えられる特性関数 $\phi(t)$ のフーリエ変換

$$S(x; \alpha, \beta, \gamma, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t) e^{-Ixt} dx$$

で書ける4つのパラメータ $(\alpha, \beta, \gamma, \mu)$ を持つ 分布関数である。但し、特性関数 $\phi(t)$ は

$$\phi(t) = \exp\{i\mu t - \gamma^{\alpha}|t|^{\alpha}(1 - i\beta \operatorname{sgn}(t)w(\alpha, t))\}$$

$$w(\alpha, t) = \begin{cases} \tan(\pi\alpha/2) & \text{if } \alpha \neq 1\\ -2/\pi \ln|t| & \text{if } \alpha = 1 \end{cases}$$

で与えられる。ここでパラメータ α , β , γ , μ は それぞれ、べき指数、歪度、尺度母数、平均値 の意味を持ち、 $0<\alpha\leq 2$, $-1\leq\beta\leq 1$, $\gamma>0$ である。 $\alpha=2$ の時、 $\beta=0$ の安定分布 S はガウス分布に一致し、 $\alpha=1$, $\beta=0$ の時、安定分布 S はコーシー分布に一致する。

条件 (超一般化中心極限定理)

1) $C_+ > 0, C_- > 0$ がそれぞれ確率分布 $P_{c_+}(c), P_{c_-}(c)$ に従う正値確率変数とし、以下の様に平均が存在するとする。

$$E[C_+] < \infty, E[C_-] < \infty$$

2) 各確率変数 X_i は同一のべき指数 $\alpha(0 < \alpha < 2)$ を持つべき分布であり、その確率 密度関数 $f_i(x)$ は、漸近的に

$$f_i(x) \simeq \begin{cases} c_{+i}x^{-(\alpha+1)} & \text{for } x \to \infty \\ c_{-i}|x|^{-(\alpha+1)} & \text{for } x \to -\infty \end{cases}$$
 (2)

となる。但し、 c_{+i} , c_{-i} は i 毎に異なるとし、それぞれそれぞれ 1) の確率密度関数 $P_{c_+}(c)$, $P_{c_-}(c)$ に従う。この条件の元で以下の定理が成立する。

定理 1 (超一般化中心極限定理,2018[1])

$$S_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - A_n}{n^{\frac{1}{\alpha}}} \xrightarrow{d} S(x; \alpha, \beta^*, \gamma^*, 0) \quad \text{for} \quad n \to \infty.$$

但し、確率変数 X_i は条件 (超一般化中心極限分布) を満足する独立な確率変数であり、 A_n は X_i の特性関数 $\varphi_i(t) = \mathrm{E}[\exp(\mathrm{I}tX_i)]$ と $\Im Y$:複素数 Y の虚数部分という定義の下、式

$$A_n = \begin{cases} 0 & \text{if } 0 < \alpha < 1 \\ n \sum_{i=1}^n \Im \ln(\varphi_i(1/n)) & \text{if } \alpha = 1 \\ \sum_{i=1}^n \mathrm{E}[X_i] & \text{if } 1 < \alpha < 2 \end{cases}$$

で決定され、安定分布のパラメータ β^*,γ^* は、

$$\beta_{i} = \frac{c_{+i} - c_{-i}}{c_{+i} + c_{-i}}, \gamma_{i} = \left\{ \frac{\pi(c_{+i} + c_{-i})}{2\alpha \sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)} \right\}^{\frac{1}{\alpha}}$$

の重み付き平均で、

$$\beta^* = \frac{\mathcal{E}_{C_+, C_-}[\beta_i \gamma_i^{\alpha}]}{\mathcal{E}_{C_+, C_-}[\gamma_i^{\alpha}]}, \gamma^* = \{\mathcal{E}_{C_+, C_-}[\gamma_i^{\alpha}]\}^{\frac{1}{\alpha}}$$
(3)

で与えられる。ここで、 \mathbf{E}_{C_+,C_-} は確率密度関数 f_i の漸近的特性を示すパラメータ C_+,C_- の確率分布 $\mathbf{P}_{c_+},\mathbf{P}_{c_-}$ に関する平均である。

証明 [1] 参照。

3 普遍超一般化中心極限定理

ここでは、前節の超一般化中心極限定理の更なる拡張(一般化)を考える。一般化とは、超一般化中心極限定理の条件 (超一般化中心極限定理) を満足する同一のべき指数 α を対象とする確率変数の和から、異なる $m(0 < m < \infty)$ 個のべき指数 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_m < 2$ を持つべき分布

$$f_i(x; \alpha_k) \simeq \begin{cases} c_{+i} x^{-(\alpha_k + 1)} & \text{for } x \to \infty \\ c_{-i} |x|^{-(\alpha_k + 1)} & \text{for } x \to -\infty \end{cases}$$

$$(4)$$

に従う確率分布を持つ独立な確率変数 X_i の和を考えることである。m=1 の場合は、同一のべき指数 α の分布の和であり超一般化中心極限定理 (2018) に一致する。よって $m\geq 2$ の場合を考える。

条件(普遍超一般化中心極限定理)

- 1) 確率変数 X_i の確率密度関数は、べき指数 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_m < 2$ のいずれかのべき指数 α_k を持ち条件 (超一般化中心極限定理) に従う。
- 2) 確率変数 X_i が小さい順に並べたべき指数 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_m < 2$ について $\alpha_k (1 \le k \le m)$ を持つ確率が q_{α_k} であり、 $0 < q_{\alpha_k} < 1$ を満足し、 $\sum_{k=1}^m q_{\alpha_k} = 1$ である。

定理 2 (普遍超一般化中心極限定理,2018)

$$S_n \stackrel{d}{\to} S(x; \alpha_1, \beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1] \{q_{\alpha_1}\}^{\frac{1}{\alpha_1}}, 0).$$

但し、確率変数 X_i は条件 (普遍超一般化中心極限定理) を満足する独立な確率変数であり、

$$S_n \equiv \frac{\sum_{i=1}^n X_i - A_n}{n^{\frac{1}{\alpha_1}}}$$

は、確率変数 X_i の和から、各 α_k で決まる超一般化中心極限定理に於けるサンプル平均の和 $A_{nq_{\alpha_k}}[\alpha_k]$ の総和 A_n 、つまり

$$A_n = \sum_{k=1}^{m} A_{nq_{\alpha_k}} [\alpha_k]$$
 (5)

を引いたものである。パラメータ $\beta^*[\alpha_1]$ 及び $\gamma^*[\alpha_1]$ は、最小のべき指数 α_1 を持つ nq_{α_1} 個の 確率変数に対して超一般化中心極限定理 $(nq_{\alpha_1} \rightarrow \infty)$ を適用した時に収束する安定分布のパラメータ β^*, γ^* であり、べき指数 α_1 によって決まる。従って、 $\beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1]$ と書ける。

証明 n 個の確率変数 X_i の和 $\sum_{i=1}^n X_i$ を各べき指数 α_k 毎の n(k) 個からなる確率変数の和 $\sum_{j=1}^{n(k)} X_j[\alpha_k]$ に分解する。ここで、 $\{X_j[\alpha_k]\}$ は、 $\{X_i\}$ の中で特にべき指数 α_k を持つものを抽出し並び変えたものであり、その個数を n(k) とすると、 $\lim_{n\to\infty} \frac{n(k)}{n} = q_{\alpha_k}$ である。よって n が十分大きなところで、 $n(k) \to nq_{\alpha_k}$ 個のべき指数 α_k の確率変数 $\{X_j[\alpha_k]\}$ の和となりこの

分解は $n \to \infty$ で

$$\sum_{i=1}^{n} X_i = \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{n(k)} X_j[\alpha_k] \to \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{nq_k} X_j[\alpha_k]$$
(6)

となる。ここで超一般化中心極限定理の結果を使うと、各 $\alpha_k (1 \le k \le m)$ で $n, n(k) \to \infty$ の時、

$$\frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_k}} X_j[\alpha_k] - A_{nq_{\alpha_k}}}{\left\{ nq_{\alpha_k} \right\}^{\frac{1}{\alpha_k}}} \xrightarrow{d} S(x; \alpha_k, \beta^*[\alpha_k], \gamma^*[\alpha_k], 0)$$

$$(7)$$

が成立する。特にk=1の時、

$$\frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_1}} X_j[\alpha_1] - A_{nq_{\alpha_1}}}{\left\{nq_{\alpha_1}\right\}^{\frac{1}{\alpha_1}}} \xrightarrow{d} S(x; \alpha_1, \beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1], 0)$$
(8)

となる。例えば $\alpha_2(>\alpha_1)$ に着目すると、 $n\to\infty$ の極限で

$$\frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_2}} X_j[\alpha_2] - A_{nq_{\alpha_2}}}{\left\{ nq_{\alpha_1} \right\}^{\frac{1}{\alpha_1}}} = \frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_2}} X_j[\alpha_2] - A_{nq_{\alpha_2}}}{\left\{ nq_{\alpha_2} \right\}^{\frac{1}{\alpha_2}}} \frac{\left\{ nq_{\alpha_2} \right\}^{\frac{1}{\alpha_2}}}{\left\{ nq_{\alpha_1} \right\}^{\frac{1}{\alpha_1}}}$$

$$= \frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_2}} X_j[\alpha_2] - A_{nq_{\alpha_2}}}{\{nq_{\alpha_2}\}^{\frac{1}{\alpha_2}}} \cdot \frac{1}{n^{\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2}}} \cdot \frac{q_{\alpha_2}^{\frac{1}{\alpha_2}}}{q_{\alpha_1}^{\frac{1}{\alpha_1}}} \to 0.$$

但し、式 (7) および $\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_2} > 0$ を用いた。同様に、一般の $\alpha_k (k \geq 2)$ で $\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\alpha_k} > 0$ 及び

$$\frac{\sum_{j=1}^{nq_{\alpha_k}} X_j[\alpha_k] - A_{nq_{\alpha_k}}}{\{nq_{\alpha_1}\}^{\frac{1}{\alpha_1}}} \to 0 \quad \text{for} \quad n \to \infty$$

が成立するので、式 (5),(6),(7),(8) より $n \to \infty$ の極限で

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} X_i - A_n}{\left\{ nq_{\alpha_1} \right\}^{\frac{1}{\alpha_1}}} \xrightarrow{d} S(x; \alpha_1, \beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1], 0).$$

よって
$$\frac{\sum_{i=1}^{n} X_i - A_n}{n^{\frac{1}{\alpha_1}}} \stackrel{d}{\to} S(x; \alpha_1, \beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1] \{q_{\alpha_1}\}^{\frac{1}{\alpha_1}}, 0).$$

参考文献

[1] M. Shintani and K. Umeno, "Super Generalized Central Limit Theorem -Limit Distributions for Sums of Nonidentical Random Variables with Power Laws-", J. Phys. Soc. Jpn. (Letters) vol. 84, 043003 (2018).

三体8の字解と、それから分岐する解の線形安定性

藤原俊朗¹,福田宏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 : fujiwara@kitasato-u.ac.jp, fukuda@kitasato-u.ac.jp, ozaki@tokai-u.jp

1 概要

三体 8 の字解は,等質量平面三体問題の周期解の一つで,8 の字の形をした閉じた曲線の上を3 つの質点が等しい時間間隔で追いかけっこをする解である.このような解は choreographic解と呼ばれている.粒子間のポテンシャルを $1/r^{\alpha}$ に一般化すると,三体 8 の字解は $-2 < \alpha$ の範囲で存在する. $\alpha = -2$ は調和振動子,1 は Newton ポテンシャルである.

 α を変化させると、三体 8 の字解は様々な分岐を起こす。この講演では、5 周期分岐に着目し、分岐する解のうち choreographic なのものについて、分岐点の α 、解の対称性と安定性を数値計算で調べた結果を報告する。

2 5 周期分岐に着目する理由:三体8の 字解とスラローム解

我々が周期倍分岐でも他の分岐でもなく5周期分岐に着目する理由は、スラローム解と呼ばれる choreographic 解の存在について興味を持ったからである。以下に概略を述べる。

三体 8 の字解は Moore [1] によって数値的に発見され、Chenciner と Montgomery [2] によって存在が証明された。この解は角運動量がゼロで、X 軸、Y 軸に対して対称な軌道を持つ。図 1 参照。その後、Šuvakov と V. Dmitrašinović [3]



図 1. 三体 8 の字解.

は、8 の字解がk 解繰り返したのと同じホモトピークラスに属す choreographic な解を多数発見し、これらをスラローム解と名付けた。 $k=5,7,14,\ldots$ が見つかっている。最小のk は 5 であり 3 つの解が存在する [4]. 図 2 参照.

我々は、スラローム解は三体8の字解からなんらかの意味で分岐したものに違いないと仮説を立てた。そこで、スラローム解のうちもっとも単純なk=5スラローム解をポテンシャルの指数 α を変えて追跡すれば、8の字解から分

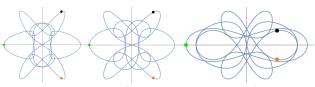


図 2. k=5 スラローム解. Choreographic で三体 8 の字解と同じ対称性を持つ. $\alpha=1$ では 3 つ存在する.

岐する現場をとらえることができるだろうと考 えた.

逆に、三体8の字解の5周期分岐の発生点を調べれば、自然にスラローム解の発生する様子がわかるだろうと考えた。それが5周期分岐に着目した理由である。

3 結果1:三体8の字解の5周期分岐

三体8の字解の5周期分岐を調べてわかったことは、大きく分けて2つ。I) $\alpha=1$ で k=5 スラローム解は3つあるが、そのうち2つは三体8の字解から分岐したものではない。図2右端の1つだけが三体8の字解の5周期分岐で生じた解である。II) 三体8の字解の5周期分岐は、choreographic な解に限っても、三体8の字解と同じ対称性を持つ解以外に、Y軸対称性が壊れた解や、X軸Y軸対称性が両方とも壊れた解を生じる。図3は対称性が壊れた分岐解の例を示している。

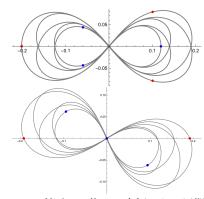


図 3. $\alpha=1.75$ 付近で三体 8 の字解から 5 周期分岐した解。Choreographic である。赤点は時刻ゼロでの 3 質点,青点は 1/2 周期後の 3 質点を表す。上の解は Y 軸対称性が壊れ X 軸対称性を持つ。角運動量はゼロではない。下の解は X 軸対称性も Y 軸対称性も壊れ,原点対称性を持つ。角運動量はゼロ。

これらの choreographic 解は、三体8の字解

が 5 回繰り返したのと同じホモトピークラスに属するので、k=5 スラロームと呼ぶことができる。しかしながら、 $\alpha=1$ まで生き延びるのは図 2 の 3 つ(三体 8 の字解から分岐したものに限れば右端の 1 つ)のみである。

4 結果 2:三体 8 の字解と分岐した解の 線形安定性

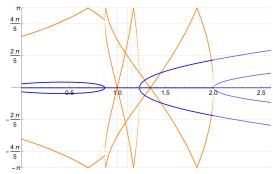


図 4. 三体 8 の字解のフロケ行列の固有値 μ . 横軸は α . オレンジは μ の偏角,青は $10^{-1}\log|\mu|$. $\alpha=1$ 付近では 4 つの固有値が $|\mu|=1$, $\alpha=1.5$ 付近では 2 つが $|\mu|=1$,2 つが $|\mu|\neq 1$ であることを示している.

5 周期分岐はフロケ行列の固有値 μ の偏角が $2\pi n/5$, $n=0,\pm 1,\pm 2,\ldots$ となる α で生じる. 図 4 は三体 8 の字解の μ の変化を示したものである.

分岐した解が choreographic 解となるのは, このうち 4 か所, $\alpha = 0.91, 1.10, 1.14, 1.75$ 付近 の分岐のみである.

 $\alpha=1.10,1.14$ 付近で分岐する解は、三体 8 の字解と同じ対称性を持つ解であり、 $\alpha=0.91,1.75$ 付近では、図 3 のような対称性の低い解である.

これらの解の安定性については、講演の中で 報告する.

謝辞 示唆に富むコメントをいただいた柴山充 瑠, 國府寛司, 矢ケ崎一幸氏に感謝します. 本 研究の一部は科研費の助成を受けています. 福 田は JSPS 科研費 17K05146, 尾崎は JSPS 科 研費 17K05588.

- [1] C. Moore, 1993, "Braids in classical gravity", Phys. Rev. Lett. 70 3675–9
- [2] A. Chenciner and R. Montgomery, 2000, "A remarkable periodic solution of the three-body problem in the case

- of equal masses", Ann. Math. 152~881-901
- [3] M. Šuvakov and V. Dmitrašinović, 2013, "Three Classes of Newtonian Three-Body Planar Periodic Orbits", Phys. Rev. Lett. 110 114301
- [4] M. Šuvakov and M. Shibayama 2016, "Three topologically nontrivial choreographic motions of three bodies", Celest. Mech. Dyn. Astron. 124 155–162

確率的レイリー・プレセット方程式の変分的定式化と分岐現象の解析

牛奥 隆博¹, 吉村 浩明²

- 1早稲田大学大学院基幹理工学研究科機械科学専攻
- ² 早稲田大学基幹理工学部機械科学·航空学科

e-mail: ¹mow1705@ruri.waseda.jp, ²yoshimura@waseda.jp

1 緒言

レイリー・プレセット方程式はキャビテーション現象の基礎となる単一気泡のモデルとして知られる。この方程式は、周期的に変動する周辺圧力に対して、振幅をパラメータとして周期倍分岐を起こし、やがてカオスへと至る非線形系の数理モデルとして知られている。

本研究では、気泡半径速度場に揺らぎとして 白色ノイズを与えた場合のモデルとして確率 的レイリー・プレセット方程式を提案する。ま た、確率的レイリー・プレセット方程式に見ら れる振幅パラメータ分岐現象が速度場の揺らぎ によってどのような影響を受けるかについて調 査・検討を行う。

2 変分法に基づくレイリー・プレセット 方程式の定式化

気泡を図1に示すような球形であると仮定し、その半径をR(t)、中心からの距離rにおける流速をu(t,r)で表す。周囲は非圧縮性の液体で満たされており、その密度を ρ_L 、粘性率を μ_L 、表面張力をSで表す。気泡から遠く離れた液体の圧力を $p_\infty(t)$ 、温度を T_∞ とし、 T_∞ は一定であるとする。気泡内部は断熱変化をする不凝縮性ガスと蒸気で満たされており、分圧を各々 p_G 、 p_v 、全圧を p_B とする。気泡内部の温度は遠方温度 T_∞ と一様等温とする。さらに、気泡界面での質量移動は無視できるものとする。

以上の仮定のもとで、通常のレイリー・プレ

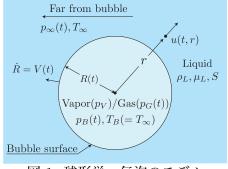


図 1: 球形単一気泡のモデル

セット方程式を変分法により定式化する. 流体の連続の式より $u(t,R)=R^2\dot{R}/r^2$ が導かれ、これより運動エネルギーT は $T=2\pi\rho_LR^3\dot{R}^2$ で与えられる. ここに、() は時間微分を表す、ポテンシャルエネルギーU は、気泡界面の境界条件から $U=4\pi\{SR^2+(p_\infty-p_v)\frac{R^3}{3}-\frac{p_{G_0}R_0^3}{3(1-\kappa)}\{\frac{R_0}{R}\}^{3(\kappa-1)}\}$ と与えられる. 但し、 κ は比熱比、 p_{G_0},R_0 は、それぞれ初期ガス分圧、初期気泡半径を表す. さらに、非保存力として働く流体の粘性力F は $F=-16\pi\mu_LR\dot{R}$ として与えられる. 以上から、ラグランジアンを $L(R,\dot{R}):=T(R,\dot{R})-U(R)$ として定義し、ラグランジュ・ダランベール原理

$$\delta \int_{a}^{b} L(R, \dot{R}) dt = \int_{a}^{b} F(R, \dot{R}) \cdot \delta R dt$$

より、両端固定条件 $\delta R(a) = \delta R(b) = 0$ のも と、停留点 R(t), $t \in [a,b]$ が満たすべきラグラ ンジュ・ダランベール方程式として下記のレイ リー・プレセット方程式を定式化できる.

$$\frac{p_v - p_\infty}{\rho} + \frac{p_{G_0}}{\rho} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{3\kappa} \\
= R\dot{V} + \frac{3}{2}V^2 + \frac{4\mu_L V}{\rho_L R} + \frac{2S}{\rho_L R} \tag{1}$$

但し、 $V := \dot{R}$ と置いた.

3 確率的レイリー・プレセット方程式

次に、気泡半径速度場に揺らぎを与えた場合の運動を考えよう。気泡界面での流速u(t,R)に揺らぎg(t)を考え、速度場をV(t):=u(t,R(t))= $\dot{R}(t)+g(t)$ と置くと、ラグランジュ・ダランベール原理を用いて導出したレイリー・プレセット方程式、式(1)は

$$\begin{cases}
dV = \frac{3cV}{R}dW + \left[-\frac{1}{R} \left\{ \frac{3}{2}V^2 + \frac{4\mu_L V}{\rho_L R} + \frac{2S}{\rho_L R} - \frac{p_v - p_\infty}{\rho_L} - \frac{p_{G0}}{\rho_L} \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} \right\} + \frac{6c^2 V}{R^2} \right] dt \\
dR = V dt - cdW
\end{cases}$$
(2)

のように変形できる。但し,cはノイズの強度,Wはウィーナー過程を表す。

4 気泡挙動と分岐の揺らぎによる影響

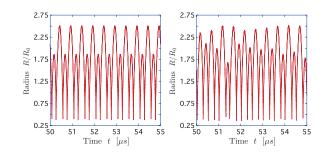
ここで $p_{\infty} = p_0\{1 - A\sin(2\pi f t)\}$ のように 周期的な変動を伴う場合を考え,確率微分方 程式 (2) を用いて振幅比 A をパラメータとし た分岐を調査する. 気泡周囲の液体を水と仮 定して、表1のパラメータのもと、数値積分 法にはオイラー・丸山法を用いて, 時間刻み $5.0 \times 10^{-7} [\mu \text{ s}]$ で数値計算を行った。遠方圧 力の変動振幅パラメータ A=2.8 に固定し, ノイズの強度をcとして,ノイズのない場合 (c=0) とノイズがある場合 $(c=5.0\times10^{-5})$ の各々に関する気泡半径の時間応答挙動を図2 に示す. また、図3に圧力振幅パラメータAに 関する分岐図を示す.まず、図2を見ると、ノ イズのない場合(a)では、明らかに2周期的挙 動を呈している一方、小さなノイズがある場合 (b) では、気泡半径挙動に揺らぎが加わって2 周期解の構造が壊れている様子が見て取れる. このことは、パラメータ A に関する分岐図を 見るとより明確となる。すなわち、図3を見る と、ノイズのない場合(a)では、周期倍分岐の 構造が明確に見て取れ、例えば A = 2.8 におい ては2周期解となっているが、ノイズがある場 合(b)を見ると、ほんの僅かなノイズが加わっ ただけでも1周期から2周期への周期倍分岐の 構造そのものが壊れていて*, A* = 2.8 において は既に不規則な挙動へと遷移していることが分 かる.

表 1: 数値計算に用いたパラメータ

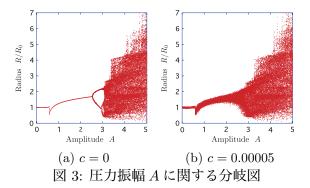
記号	値
加振周波数 f	4.0 [MHz]
初期気泡半径 R_0	$1.0 \; [\mu { m m}]$
初期気泡半径速度 V_0	$0.0 \; [m/s]$
大気圧 p_0	101325 [Pa]
水密度 $ ho_L$	$998.2 [kg/m^3]$
水の粘性率 μ_L	0.0010016 [Pa·s]
飽和蒸気圧 p_v	3026.028 [Pa]
水の表面張力 S	0.072736 [N/m]
比熱比 κ	1.4

5 結言

単一気泡に関するレイリー・プレセット方程 式の変分的定式化に関連して,速度場に揺らぎ



(a) c = 0 (b) c = 0.00005 図 2: 気泡半径の挙動 (A = 2.8)



を考慮した場合の確率的レイリー・プレセット 方程式の導出を行った。その上で、確率的レイ リー・プレセット方程式を用いて、ノイズを加 えた場合の気泡半径挙動について考察した。そ の結果、僅かなノイズを加えただけで、周期倍 分岐の構造は壊れてしまい、周期的な挙動から ランダムノイズの影響を受けた不規則な挙動へ と遷移することが分かった。

謝辞 本研究は,科研費基盤 (B)(16 KT0024), 科研費基盤 (A)(17H01097),早稲田大学特定課 題 (SR2018K-195),及び文部科学省「スーパー グローバル大学創成支援」による援助を受けて いる。ここに謝意を表します。

- [1] C. E. Brenenn, Cavitation and Bubble Dynamics, Oxford University Press, 1995.
- [2] S. Shikada and H. Yoshimura, Non-linear phenomena in Rayleigh-Plesset equation for single bubble dynamics, NEW TRENDS IN FLUID MECHANICS RESEARCH, Proc. 6 th Int. Conf. Fluid Mechanics, Amer. Inst. Phys. Conf. Vol.1376, pp.552–554, 2011.

SU(p, q) 上の自由剛体の力学系に関する安定性解析

多羅間 大輔 ¹, Tudor S. Ratiu²

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

この講演では、Mishchenkoと Fomenko[1] によって定式化された一般化された自由剛体の完全積分可能な Hamilton 力学系を SU(p,q) の場合に考え、平衡点の安定性を解析した結果について報告する。 SU(p,q) とは符号数 (p,q) の Hermite 内積に関するユニタリー行列全体のなす Lie 群である。 Lie 環 $\mathfrak{su}(p,q)$ の Cartan 部分環ごとに可積分な Hamilton 力学系が SU(p,q) 上に定まり、そこから対称性によって誘導される Lie 環上の Euler 方程式により力学系の挙動が記述できる。この講演では、Euler 方程式の孤立平衡点の安定性を解析し、ルート系の言葉を用いると Cartan 部分環ごとに安定性が決定されることを示す。時間が許せば、付随する SO(p,q) 上の自由剛体についても触れる。

2 $\mathfrak{su}(p,q)$ の Lie 環論

Lie 群 SU(p,q) およびその Lie 環 $\mathfrak{su}(p,q)$ を考える:

$$SU(p,q) = \left\{g \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid g^* \mathbf{I}_{p,q} g = \mathbf{I}_{p,q} \right\},$$
 $\mathfrak{su}(p,q) = \left\{X \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid X^* E_{p,q} + \mathbf{I}_{p,q} X = 0 \right\}.$ ただし, $n = p + q, \ g^* = \bar{g}^{\mathrm{T}}, \ X^* = \bar{X}^{\mathrm{T}}, \ \mathbf{I}_{p,q} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_p & 0 \\ 0 & -\mathbf{I}_q \end{pmatrix}$ である。 $(\mathbf{I}_p, \ \mathbf{I}_q \ \mathrm{tk} a \not\sim p \)$ 次, $q \)$ 次の単位行列である。) 以下一般性を失わず $p \leq q$ とする。

Cartan 部分環(対角化可能な行列のなす極大可換部分環) $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{su}(p,q)$ をとり,Killing 形式 $\kappa: \mathfrak{su}(p,q) \times \mathfrak{su}(p,q) \ni (X,Y) \mapsto 2n \mathrm{Tr}\,(XY)$ に関する直交補空間を \mathfrak{m} と記す: $\mathfrak{h} \oplus \mathfrak{m} = \mathfrak{su}(p,q)$. 複素化 $\mathfrak{su}(p,q) \otimes \mathbb{C} \cong \mathfrak{sl}(n,\mathbb{C})$ の Cartan

複系化 $\mathfrak{su}(p,q)\otimes\mathbb{C}=\mathfrak{sl}(n,\mathbb{C})$ の Cartan 部分環 $\mathfrak{h}\otimes\mathbb{C}$ に関してルート系 $\Delta(\mathfrak{h}\otimes\mathbb{C})\subset(\mathfrak{h}\otimes\mathbb{C})^*$ を考える.

ルート系 Δ ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$) には次のような基とよばれる部分集合 $\Pi = \{\alpha_1, \cdots, \alpha_{n-1}\}$ が存在する: Π はベクトル空間 ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$)* の基底である. また,任意のルート $\alpha \in \Delta$ ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$) は $\alpha_1, \cdots, \alpha_r$ の整数係数一次結合 $\alpha = \sum_{i=1}^{n-1} m_i \alpha_i$ で表され,

全ての $i=1,\cdots,n-1$ について一斉に $m_i\geq 0$ となるか一斉に $m_i\leq 0$ となるかいずれかである. 前者のルート全体を Δ_+ ($\mathfrak{h}\otimes\mathbb{C}$) と表す.

ルート $\alpha \in \Delta$ ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$) が実であるとは α (\mathfrak{h}) \subset \mathbb{R} となることである. ルート $\beta \in \Delta$ ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$) が 純虚であるとは β (\mathfrak{h}) \subset $i\mathbb{R}$ となることである. 実でも純虚でもないルートを複素ルートという.

実単純 Lie 環 $\mathfrak{su}(p,q)$ の Cartan 部分環は,以下のいずれかに共役である([2]).

$$\begin{split} &\mathfrak{h}_0 = \left\{ \sum_{j=1}^n s_j \sqrt{-1} \mathsf{E}_{jj} \mid s_j \in \mathbb{R} \right\}, \\ &\mathfrak{h}_0^{(r)} = \left\{ \sum_{j=1}^{p+q} s_j \sqrt{-1} \mathsf{E}_{jj} + \sum_{i=1}^r t_i \left(\mathsf{E}_{i,i+p} + \mathsf{E}_{i+p,i} \right) \right. \\ &\left. \left| s_j, t_i \in \mathbb{R}, \sum_{j=1}^{p+q} s_j = 0, s_i = s_{i+p} (i = 1, \cdots, r) \right. \right\}. \end{split}$$

ここで、 $r = 1, \dots, p$. また、 E_{ij} は $n \times n$ 行列 単位で、(i,j) 成分が 1 でそれ以外の成分は 0 で ある. 以後、 $\mathfrak{h}_0^{(0)} = \mathfrak{h}_0$ とする.

それぞれの Cartan 部分環に付随するルートは以下のように書き表すことができる。ただし、次の線型汎函数 f_k $(k=1,\cdots,n)$, g_ℓ $(\ell=1,\cdots,r)$ を用いる:

$$\begin{split} f_k : \mathfrak{h}_0^{(r)} \otimes \mathbb{C} &\to \mathbb{C}, \\ f_k \left(\sum_{j=1}^n s_j \mathsf{E}_{jj} + \sum_{i=1}^r t_i \left(\mathsf{E}_{i,i+p} + \mathsf{E}_{i+p,i} \right) \right) = s_k, \\ g_\ell : \mathfrak{h}_0^{(r)} \otimes \mathbb{C} &\to \mathbb{C}, \\ g_\ell \left(\sum_{j=1}^n s_j \mathsf{E}_{jj} + \sum_{i=1}^r t_i \left(\mathsf{E}_{i,i+p} + \mathsf{E}_{i+p,i} \right) \right) = t_\ell. \end{split}$$

命題 1. Cartan 部分環 $\mathfrak{h}_0^{(r)}$ に対応するルート系の部分集合 Δ_+ $\left(\mathfrak{h}_0^{(r)}\right)$ に含まれるルートのうち,純虚ルートは f_k-f_ℓ $(r+1\leq k<\ell\leq p)$ または $r+1\leq k\leq p, p+r+1\leq \ell\leq p+q$ または $p+r+1\leq k, \ell\leq p+q)$ の (p+q-2r)(p+q-2r-1)/2 個,実ルートは $2g_i$ $(i=1,\cdots,r)$

の r 個,複素ルートは $f_i - f_{i'} \pm g_i \pm g_{i'}$ (1 \leq $i < i' \leq r$, $(f_i - f_k) \pm g_i$ ($i = 1, \dots, r$, $k = r+1, \dots, p, p+r+1, \dots, p+q$) の 2r(p+q-2r) 個ある. (複合は順不同である.) 特に, $\mathfrak{h}_0^{(0)} = \mathfrak{h}_0$ は純虚ルートのみをもつ.

SU(p,q) 自由剛体の Euler 方程式と随 伴軌道上の孤立平衡点の安定性解析

SU(p,q)上の自由剛体の力学系は $T^*SU(p,q)$ 上の左不変な Hamilton 函数をもつ Hamilton 力学系であるから,Lie-Poisson 簡約によって本質的に $\mathfrak{su}(p,q)$ 上の Euler 方程式で記述される:

$$\frac{\mathsf{d}}{\mathsf{d}t}X = [X, \varphi_{a,b,D}(X)], \quad X \in \mathfrak{su}(p,q). \quad (1)$$

Killing 形式について対称な線型作用素 $\varphi_{a,b,D}$: $\mathfrak{su}(p,q) \to \mathfrak{su}(p,q)$ は次のように定義される: $a,b \in \mathfrak{h}_0^{(r)}$ を全ての $\alpha \in \Delta$ ($\mathfrak{h} \otimes \mathbb{C}$) に対して $\alpha(a) \neq 0$ ととり, $D: \mathfrak{h}_0^{(r)} \to \mathfrak{h}_0^{(r)}$ を対称な線型作用素とする.このとき,Killing 形式に関する 直交直和分解 $\mathfrak{su}(p,q) = \mathfrak{h}_0^{(r)} \oplus \mathfrak{m}_0^{(r)}$ に沿って任意の $X \in \mathfrak{su}(p,q)$ を $X = X_{\mathfrak{h}_0^{(r)}} + X_{\mathfrak{m}_0^{(r)}}, X_{\mathfrak{m}_0^{(r)}} \in \mathfrak{h}_0^{(r)}, X_{\mathfrak{m}_0^{(r)}} \in \mathfrak{m}_0^{(r)}$ と書き, $\varphi_{a,b,D}(X) = \operatorname{ad}_a^{-1} \circ \operatorname{ad}_b(X_{\mathfrak{m}_0^{(r)}}) + D(X_{\mathfrak{h}_0^{(r)}})$ と定める.

命題 2. Euler 方程式 (1) は Lie-Poisson 構造

$$\{F,G\}(X) = \kappa(X, [\nabla F(X), \nabla G(X)]),$$

 $(F,G\in\mathcal{C}^{\infty}\left(\mathfrak{su}(p,q)\right))$ に関する Hamilton 函数 $H(X)=rac{1}{2}\kappa\left(X,arphi_{a,b,D}(X)
ight)$ に対応する Hamilton 系である.

命題 3. 時間 t に依存しない複素パラメータ $\lambda \in \mathbb{C}$ をとる. Euler 方程式 (1) は Lie-Poisson 構造と整合的な Poisson 構造

$$\{F, G\}_{a,\lambda}(X) = \kappa (X + \lambda a, [\nabla F(X), \nabla G(X)]),$$

 $(F,G \in \mathcal{C}^{\infty}(\mathfrak{su}(p,q)))$ に関する Hamilton 函数

$$H_{a,\lambda}(X) = \frac{1}{2}\kappa \left(X + \lambda a, \varphi_{a,b,D}(X + \lambda a) \right)$$
$$+ \lambda \kappa \left(b - D(a), X + \lambda a \right)$$

に対応する Hamilton 系である.

このため, Euler 方程式 (1) は双 Hamilton 構造をもつといわれる.

Bolsinov と Oshemkov の双 Hamilton 系に関する結果 [3] を用いると, Euler 方程式 (1) の一

般の随伴軌道 $\mathcal{O} \subset \mathfrak{su}(p,q)$ 上への制限の可積 分性が証明される。さらに、軌道 \mathcal{O} 上の孤立 平衡点の集合が $\mathfrak{h}_0^{(r)} \cap \mathcal{O}$ であることも示され、 次のことがわかる.

命題 $\mathbf{4}$ ([3]). 孤立平衡点 $X \in \mathcal{O} \cap \mathfrak{h}_0^{(r)}$ が非退化 であるためには, $\frac{n(n-1)}{2}$ 個の数 $\alpha(X)/\alpha(a)$, $\alpha \in \Delta_+ \left(\mathfrak{h}_0^{(r)}\right)$ が互いに異なることが必要十分 である.

非退化孤立平衡点の(Lyapunov)安定性は,線型化方程式の安定性により判定できる([4]). 実際,Euler 方程式 (1) の随伴軌道 \mathcal{O} への制限 の線型化行列を接空間 $T_X\mathcal{O}$ の適当な基底に関 して計算すると, Δ_+ $\left(\mathfrak{h}_0^{(r)}\right)$ に含まれる実ルー トごとに実固有値をもつ 2×2 行列,純虚ルー トごとに純虚固有値をもつ 2×2 行列,2 組の 複素ルートのごとに実でも純虚でもない複素固 有値をもつ 4×4 行列をとって直和したものに なる.

定理 5. Cartan 部分環 $\mathfrak{h}_0^{(0)} = \mathfrak{h}_0$ に関して定まる Euler 方程式 (1) の一般の随伴軌道 \mathcal{O} 上への制限について,その孤立平衡点 $X \in \mathcal{O} \cap \mathfrak{h}_0$ は全て Lyapunov 安定である.一方,Cartan 部分環 $\mathfrak{h}_0^{(r)}$ $(r=1,\cdots,p)$ に関して定まる Euler 方程式 (1) の \mathcal{O} 上への制限についての孤立平衡点 $X \in \mathcal{O} \cap \mathfrak{h}_0$ は全て不安定である.

- [1] A. S. MISHCHENKO, A. T. FOMENKO, Integrability of Euler equations on semisimple Lie algebras, *Sel. Math. Sov.*, **2**(3) (1982), 207–291.
- [2] M. Sugiura, Conjugate classes of Cartan subalgebras in real semisimple Lie algebras, J. Math. Soc. Japan, 11(4), 1959, 374–434; Correction, J. Math. Soc. Japan, 23(2) (1971), 379–383.
- [3] A. V. Bolsinov, A. A. Oshemkov, Bi-Hamiltonian structures and singularities of integrable systems, *Regul. Chaotic Dyn.*, 14(4-5) (2009), 431–454.
- [4] T. S. Ratiu, D. Tarama, The U(n) free rigid body: integrability and stability analysis of the equilibria, *I. Differential Equations*, 259 (2015), 7284–7331.

変分的積分法と非平衡熱力学系への応用

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 概要

正則なラグランジアンに対するハミルトンの変分原理から導かれるオイラー・ラグランジュ方程式は、接バンドル上で well-defined なフローを自然に誘導することができる.これを離散系へ拡張し、いわゆる離散ハミルトンの原理から離散オイラー・ラグランジュ方程式を導くことができるが、この変分的積分法は離散化されたシンプレクティック構造を保存する積分法でよなな力束を受ける非平衡熱力学系の変分的定式化に対して、離散的な変分公式を導き、離散化されたシンプレクティック構造を一般化した構造的性質を有する積分法であることを示す.

2 非平衡熱力学系と変分的定式化

有限次元の単純非平衡熱力学系を考えよう [4] . いま,エントロピーを $S\in\mathbb{R}$ とし,Q を力学変数に対応する有限次元の配位空間として,ラグランジアン $L=L(q,\dot{q},S):TQ\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ が与えられているとする.ここに,TQ は Q の接バンドルである.また,系には外力,及び摩擦力が作用しており,それぞれ $F^{\mathrm{ext}},F^{\mathrm{fr}}:TQ\times\mathbb{R}\to T^*Q$ として与える.特に, $F^{\mathrm{fr}}:=-r\dot{q}$ として与えられているとする $(r\in\mathbb{R}^+)$.また,系は断熱閉鎖系であるとする.この時,曲線 $(q(t),S(t))\in Q\times\mathbb{R},\,t\in[0,T]\subset\mathbb{R}$ が

$$\delta \int_0^T L(q, \dot{q}, S) dt + \int_0^T \left\langle F^{\text{ext}}(q, \dot{q}, S), \delta q \right\rangle dt = 0 \quad (1)$$

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 [1] . 但し , 変分 $\delta q(t)$ と $\delta S(t)$ は

$$\frac{\partial L}{\partial S}(q, \dot{q}, S)\delta S = \left\langle F^{\text{fr}}(q, \dot{q}, S), \delta q \right\rangle \tag{2}$$

及び,端点条件として $\delta q(t_1)=\delta q(t_2)=0$ を満たし,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

$$\frac{\partial L}{\partial S}(q, \dot{q}, S)\dot{S} = \left\langle F^{\text{fr}}(q, \dot{q}, S), \dot{q} \right\rangle \tag{3}$$

を満足するものとする.

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

$$\begin{cases}
\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = F^{\text{ext}}(q, \dot{q}, S) + F^{\text{fr}}(q, \dot{q}, S), \\
\frac{\partial L}{\partial S}\dot{S} = \left\langle F^{\text{fr}}(q, \dot{q}, S), \dot{q} \right\rangle
\end{cases} (4)$$

で与えられる . エネルギー $E_L = \left\langle \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}, \dot{q} \right\rangle - L$ は解曲線 (q(t), S(t)) に沿って , $\dot{E}_L = \langle F^{\mathrm{ext}}, \dot{q} \rangle$ を満足する (第 1 法則) . また , 第 2 法則として , $\left\langle F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S), \dot{q} \right\rangle \leq 0$ より , $I = -\frac{1}{T} \left\langle F^{\mathrm{fr}}, \dot{q} \right\rangle \geq 0$ が得られる . ここに , $T = -\frac{\partial L}{\partial S}$ は温度である .

3 非平衡熱力学のフローと構造的性質

L(q,v,S) に関するルジャンドル変換は $\mathbb{F}L$: $TQ \times \mathbb{R} \to T^*Q$, $\mathbb{F}L(q,v,S) := \left(q, \frac{\partial L}{\partial v}(q,v,S)\right)$ で与えられ,各 S を固定した時の写像 $(q,v) \in TQ \mapsto \mathbb{F}L(q,v,S) \in T^*Q$ が微分同相写像であるとき,L(q,v,S) は正則であるとする.この時,力学系 (4) のフロー $F_t: TQ \times \mathbb{R} \to TQ \times \mathbb{R}$ は $F_t(q_0,v_0,S_0) = (q(t),v(t),S(t)) \in TQ \times \mathbb{R}$ と表される.また,このフロー F_t に関連して

$$F_T^* \Omega_L = \Omega_L - \int_0^T F_t^* (\mathbf{d}\theta^{\text{fr} + \text{ext} + \tau}) dt$$

が成り立つ.ここに, $\theta^{\mathrm{fr}}(q,v,S)\cdot(\delta q,\delta v,\delta S)=\langle F^{\mathrm{fr}}(q,v,S),\delta q\rangle$, $\theta^{\mathrm{ext}}(q,v,S)\cdot(\delta q,\delta v,\delta S)=\langle F^{\mathrm{ext}}(q,v,S),\delta q\rangle$, $\theta^{\tau}(q,v,S)\cdot(\delta q,\delta v,\delta S)=T(q,S)\delta S$ であり, $\theta^{\mathrm{fr}+\mathrm{ext}+\tau}:=\theta^{\mathrm{fr}}+\theta^{\mathrm{ext}}+\theta^{\tau}$ と置いた.

4 非平衡熱力学の離散的変分法

次に,上に述べた変分的手法に関する離散化を考えよう.時間刻み幅 h を固定し,時間間隔 [0,T] を離散化した時間の点列 $\{t_k=kh\mid k=0,...,N\}$ を定義する. 離散化ラグランジアン $L_d:(Q\times Q)\times(\mathbb{R}\times\mathbb{R})\to\mathbb{R}$ は

$$L_d(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q(t), \dot{q}(t), S(t)) dt$$

として定義される.但し, $q(t_i)=q_i$, $S(t_i)=S_i$,i=k,k+1 である.次に,式 (3) に関連し

て,関数 $P:T(Q \times \mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ を

$$P(q,\dot{q},S,\dot{S}) = \frac{\partial L}{\partial S}(q,\dot{q},S)\dot{S} - \left\langle F^{\text{fr}}(q,\dot{q},S),\dot{q} \right\rangle$$

と定義した上で, $C_K\subset T(Q imes\mathbb{R})$ に対して,離散的拘束 $C_K^d\subset (Q imes Q) imes(\mathbb{R} imes\mathbb{R})$ を以下のように定義する.

$$C_K^d = \{(q_0, q_1, S_0, S_1) \mid P_d(q_0, q_1, S_0, S_1) = 0\}$$

ここに, $P_d:(Q\times Q)\times(\mathbb{R}\times\mathbb{R})\to\mathbb{R}$ は $P_d:=P\circ\varphi$ である.ここに, $N_0(\Delta_Q)$ を $Q\times Q$ の対角 Δ_Q の近傍, T_0Q を TQ の零切断の近傍として,離散化写像 $\varphi=\varphi_Q\times\varphi_\mathbb{R}:N_0(\Delta_{Q\times\mathbb{R}})\to T_0(Q\times\mathbb{R})$ を用いた.

定義 $\mathbf{1}$ [3] 離散曲線 $(q_d, S_d) = \{(q_k, S_k)\}_{k=0}^N$ に対して,以下の離散変分公式を定義する.

$$\delta \sum_{k=0}^{N-1} L_d(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) + \sum_{k=0}^{N-1} \left[\langle F^{\text{ext}-}(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}), \delta q_k \rangle + \langle F^{\text{ext}+}(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}), \delta q_{k+1} \rangle \right] = 0$$

に対して,変分 $\delta S_k, \delta q_k$ が拘束

$$D_3L_d(\cdots)\delta S_k + D_4L_d(\cdots)\delta S_{k+1}$$
$$= \left\langle F^{\text{fr}-}(\cdots), \delta q_k \right\rangle + \left\langle F^{\text{fr}+}(\cdots), \delta q_{k+1} \right\rangle$$

を満たし ,かつ ,離散曲線 $(q_d,S_d)=\{(q_k,S_k)\}_{k=0}^N$ が現象論的拘束

$$(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) \in C_K^d$$

を満たすものとする.

定理 $\mathbf{2}$ $(q_d,S_d)=\{(q_k,S_k)\}_{k=0}^N$ が変分公式の解であるための必要十分条件は離散方程式

$$\begin{cases} D_1 L_d(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) + D_2 L_d(q_{k-1}, q_k, S_{k-1}, S_k) \\ + (F^{\text{fr}-} + F^{\text{ext}-})(q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) \\ + (F^{\text{fr}+} + F^{\text{ext}+})(q_{k-1}, q_k, S_{k-1}, S_k) = 0, \\ (q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) \in C_K^d \end{cases}$$

を満たすことである.

5 離散的変分法の構造的性質

定理 2 の離散発展方程式のフロー $F_{L_d}: C_K^d \to C_K^d, (q_k, q_{k+1}, S_k, S_{k+1}) \mapsto (q_{k+1}, q_{k+2}, S_{k+1}, S_{k+2})$ は全ての $r = (q_0, q_1, S_0, S_1) \in C_K^d$ に対して行列

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} D_2 D_1 L_d(r) + D_2 F_d^-(r) & D_4 D_1 L_d(r) + D_4 F_d^-(r) \\ D_2 P_d(r) & D_4 P_d(r) \end{bmatrix}$$

が正則であるとき , well-defined である . ここに , $F_d^- := F^{\mathrm{fr}-} + F^{\mathrm{ext}-}$ である .

定理 ${f 3}$ well-defined な離散発展方程式のフロー $F_{L_d}:C_K^d o C_K^d$ は以下の構造的性質を持つ.

$$\begin{split} \big(F_{L_d}^{(N-1)}\big)^* \Omega_{L_d, F_d}^+ - \Omega_{L_d, F_d}^- \\ &= -\mathbf{d} \sum_{k=0}^{N-1} \big(F_{L_d}^{(k)}\big)^* \theta_d^{\text{fr} + \text{ext} + \tau} \end{split}$$

ここに, $\theta_d^{{
m fr}+{
m ext}+ au}$ は離散外力場の 1 形式 1 形式 τ ののり, $\theta_d^{{
m fr}+{
m ext}+ au}=0$ の時,離散シンプレクティック構造の保存が導かれる.

6 結言

断熱閉鎖的な非平衡熱力学系に対して,まず連続系の枠組みで一般的な変分公式を示した.特に,変分公式から導かれる発展方程式のフローから導かれる構造的性質を示した.その上で,離散化写像を導入して,断熱閉鎖的な非平衡熱力学系に対する離散的な変分公式を導いた.連続系の場合と同様に,離散発展方程式のフローに関連する構造的性質を明らかにした.

謝辞 本研究の一部は,科研費基盤研究(B)(16 KT0024),科研費基盤研究(A)(17H01097),早稲田大学特定課題研究(SR 2018K-195),及び文部科学省「スーパーグローバル大学創成支援」による支援を受けている.ここに謝辞を表します.

- Gay-Balmaz, F. and H. Yoshimura, A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part I: discrete systems, J. Geom. Phys., 111, 169–193, 2016.
- [2] Gay-Balmaz, F. and H. Yoshimura, A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part II: continuum systems, J. Geom. Phys., 111, 194–212, 2016.
- [3] Gay-Balmaz, F. and H. Yoshimura, Dirac structures in nonequilibrium thermodynamics, *J. Math. Phys.* Vol. 59, 012701-29, 2018.
- [4] Stueckelberg, E.C.G. and P.B.Scheurer, Thermocinétique phénoménologique galiléenne, Birkhäuser, 1974.

On the Double Windowed Ridgelet Transform and its Inverse

藤井 克哉 1, 木下 保 1

1 筑波大学

e-mail: katsuyaf06@gmail.com

1 概要

リッジレット変換とは、ラドン変換の像をさらに1次元ウェーブレット変換した変換である. 現在この変換は、ニューラルネットなどの人工 知能などの分野でも研究されている.

今回,通常のラドン変換を窓ラドン変換で置き換え,2つの窓に関するリッジレット変換を提案する.また,その再生公式も得られたので報告する.

2 2つの窓に関するリッジレット変換

本研究では、画像処理への応用を念頭に置いているため、主に2次元上の関数に対する変換を考える.

 $f \in S(\mathbf{R}^2)$ に対して、ラドン変換(X-ray 変換) $\mathcal{X}f$ とは、

$$\mathcal{X}f(t,\theta) = \int_{\mathbf{R}_{\mathbf{x}}^2} f(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\theta} - t) d\mathbf{x}$$
 (1)

で定義される([1] 参照)。 X-ray 変換は現在でも,CT 画像再構成法などにも応用されている. また 1 次元ウェーブレット変換 W_vf を

$$W_{\psi}f(b,a) = \frac{1}{|a|^{1/2}} \int_{\mathbf{R}_t} \overline{\psi\left(\frac{t-b}{a}\right)} f(t)dt \quad (2)$$

で定義する. これらの変換を考えて, リッジレット変換 $\mathcal{R}_{v}f$ は, (1), (2) を合成した変換:

$$\mathcal{R}_{\psi} f(b, a, \theta) = \frac{1}{|a|^{1/2}} \int_{\mathbf{R}_{\mathbf{x}}^2} \overline{\psi\left(\frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\theta} - b}{a}\right)} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

で与えられる([2] 参照). さらに、窓ラドン変換(窓 X-ray 変換) $WX_{\psi}f$ とは、

$$\mathcal{WX}_{\psi}f(\mathbf{b}, a, \omega) = \int_{\mathbf{B}_{\mathbf{a}}} \overline{\psi(p)} f(\mathbf{b} + pa\gamma_{\omega}^{\perp}) dp$$

で定義される([3] 参照). ここで $\omega \in (-\pi, \pi]$ であり, $\gamma_{\omega}^{\perp} = (\sin \omega, -\cos \omega)$ とする.

今回, 我々は窓 X-ray 変換のパラメータ **b** を $b\gamma_{\theta}$ ($\gamma_{\theta} = (\cos\theta, \sin\theta)$, $\theta \in (-\pi/2, \pi/2]$) と

して表し、bに関して1次元ウェーブレット変換した変換 $\mathcal{WR}_{\eta,\tilde{\eta}}f$ を提案する. つまり、

$$\mathcal{WR}_{\psi,\tilde{\psi}}f(\mathbf{b}, \mathbf{a}, \omega)
:= \frac{1}{|a_1|^{1/2}} \int_{\mathbf{R}_q} \overline{\psi\left(\frac{q-b}{a_1}\right)} |a_2|^{1/2}
\times \mathcal{WX}_{\tilde{\psi}} f(q \boldsymbol{\gamma}_{\theta}, a_2, \omega) dq$$

$$= \left|\frac{a_2}{a_1}\right|^{1/2} \int_{\mathbf{R}_q} \overline{\psi\left(\frac{q-b}{a_1}\right)}
\times \int_{\mathbf{R}} \overline{\tilde{\psi}(p)} f\left(q \boldsymbol{\gamma}_{\theta} + p a_2 \boldsymbol{\gamma}_{\omega}^{\perp}\right) dp dq$$
(3)

を考え, $W\mathcal{R}_{\psi,\tilde{\psi}}f$ を 2 つの窓 ψ と $\tilde{\psi}$ を持つ 2 重窓リッジレット変換と呼ぶことにする.

3 主結果

(3) の定義式を出発にして、我々は次の $W\mathcal{R}_{\psi,\tilde{\psi}}f$ に関する別な表現式を得ることができた.

定理 $\mathbf{1}$ $\psi, \tilde{\psi} \in L^2(\mathbf{R}^1)$ とする. この時, $f \in L^2(\mathbf{R}^2_{\mathbf{x}})$ に対して $\mathcal{WR}_{\psi, \tilde{\psi}} f$ は,

$$\begin{split} & \mathcal{WR}_{\psi,\tilde{\psi}}f(\mathbf{b},\mathbf{a},\omega) \\ &= \frac{|a_{1}a_{2}|^{1/2}}{(2\pi)^{2}}\int_{\mathbf{R}_{\xi}^{2}}e^{i\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\xi}}\overline{\hat{\psi}(a_{1}\boldsymbol{\gamma}_{\theta}\cdot\boldsymbol{\xi})\hat{\psi}(a_{2}\boldsymbol{\gamma}_{\omega}^{\perp}\cdot\boldsymbol{\xi})}\hat{f}(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} \\ &= \frac{1}{|a_{1}a_{2}|^{1/2}\boldsymbol{\gamma}_{\omega}\cdot\boldsymbol{\gamma}_{\theta}} \\ & \times \int_{\mathbf{R}_{\mathbf{x}}^{2}}\overline{\psi\Big(\frac{\boldsymbol{\gamma}_{\omega}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{b})}{a_{1}\boldsymbol{\gamma}_{\omega}\cdot\boldsymbol{\gamma}_{\theta}}\Big)\hat{\psi}\Big(\frac{\boldsymbol{\gamma}_{\theta}^{\perp}\cdot\mathbf{x}}{a_{2}\boldsymbol{\gamma}_{\omega}\cdot\boldsymbol{\gamma}_{\theta}}\Big)}f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \end{split}$$

と表すことができる.

上の表現式をもとにして我々は $W\mathcal{R}_{\psi,\tilde{\psi}}f$ のいくつかの場合の再生公式を得られたので報告する.まず、 $\psi,\tilde{\psi}$ が許容条件を満たすとは、

$$C_{\psi} := \int_{\mathbf{R}} \frac{|\hat{\psi}(s)|^2}{|s|} ds, \quad C_{\tilde{\psi}} := \int_{\mathbf{R}} \frac{|\hat{\hat{\psi}}(s)|^2}{|s|} ds$$

が有限値になることである. [3] や [4] によれば, 許容条件を満たす窓 X-ray 変換は L^2 上でユニタリー作用素になることが知られている. この ことと1次元ウェーブレット変換の逆変換公式 から以下の形の再生公式の結果が得られた.

命題 $\mathbf{1} \ \psi, \tilde{\psi} \in L^2(\mathbf{R})$ は許容条件を満たすとする. $\mathcal{WR}_{\psi,\tilde{\psi}}f$ の再生公式は,

$$C_{\psi}C_{\tilde{\psi}}f(\mathbf{x})$$

$$= \int_{\mathbf{R_{a}^{2}}} \int_{\mathbf{R_{b}^{2}}} \tilde{\psi} \left(\frac{\boldsymbol{\gamma}_{\theta}^{\perp} \cdot \mathbf{x}}{a_{2}\boldsymbol{\gamma}_{\omega} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\theta}} \right) \psi \left(\frac{\boldsymbol{\gamma}_{\omega} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{b})}{a_{1}\boldsymbol{\gamma}_{\omega} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\theta}} \right)$$

$$\times \mathcal{WR}_{\psi,\tilde{\psi}}f(\mathbf{b}, \mathbf{a}, \omega) \frac{\boldsymbol{\gamma}_{\omega} \cdot \mathbf{x} \ d\mathbf{b} d\mathbf{a}}{|a_{1}a_{2}|^{5/2}(\boldsymbol{\gamma}_{\omega} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\theta})^{2}}$$

で与えられる.

また,[5]では許容条件を満たさないウェーブレットに対しての再生公式を得ている.今回,我々は許容条件を満たさないようなウェーブレットをもつ $W\mathcal{R}_{\psi,\tilde{\psi}}f$ に対しての再生公式についても発表する.

- S. Helgason, The Radon transform. Second edition, Progress in Mathematics, 5. Birkhhäuser Boston, Inc., Boston, MA, 1999.
- [2] E. Candés, Ridgelets: Theory and applications, Thesis (Ph.D.), Stanford University, 1998.
- [3] G. Kaiser, Generalized Wavelet Transforms I:The Windowed X-Ray Transform, Technical Reports Series no. 18, Univ. of Lowell, 1990, preprint.
- [4] T. Takiguchi, On invertibility of the windowed Radon transform, J. Math. Sci. Univ. Tokyo, 2 (1995), 621-636.
- [5] E. A. Lebedeva and E. B. Postnikov, On alternative wavelet reconstruction formula: a case study of approximate wavelets, R. Soc. open sci., 1 (2014), 140124.

信号の周波数ピークごとの分解と瞬時周波数

山内 佑維

大阪教育大学

e-mail : j179607@ex.osaka-kyoiku.ac.jp

1 周波数の特定

FFT では時間幅の逆数より細かく周波数を見ることができないが、例えば楽譜において半音の基本周波数の差が音の長さの逆数より細かいということがあった。この場合でも音名を特定したい為まず簡単な信号から瞬時周波数 [1]を求めた。無変化の純音の瞬時周波数、複数の純音を含む信号の周波数成分ピークごとの各瞬時周波数、雑音入り信号の閾値以下の周波数を無視した場合の瞬時周波数を調べた。以降、2節で瞬時周波数の求め方、3節で MATLAB での実装、4節で評価について述べる。

2 瞬時周波数

2.1 瞬時周波数

ある時点の瞬時における周波数を瞬時周波数と呼ぶ. 実信号で振幅 a(t) と位相 $\vartheta(t)$ の組み合わせが簡単に分かる場合は位相 $\vartheta(t)$ を微分することで瞬時周波数 $\omega_{\vartheta}(t)$ が簡単に求まる.

$$\omega_{\vartheta}(t) = \vartheta'(t) \tag{1}$$

しかし大体は無限の組み合わせが考えられる. その場合, 2.2 小節で述べる解析信号を求めることで振幅 A(t) と位相 $\varphi(t)$ が簡単に一意に定まる為, 位相 $\varphi(t)$ を微分することで瞬時周波数 $\omega(t)$ が一意に定まる.

$$\omega(t) = \varphi'(t) \tag{2}$$

次の 2.2 小節で解析信号とその利点について 説明する.

2.2 解析信号

原信号のパワースペクトルの平均と分散で、原信号の周波数の中心と広がりを求めることができる.しかし、原信号が実信号の場合、周波数成分は0を軸に対象となる為、パワースペクトルの平均は0、分散は正と負のピーク間の距離となり、これらの数値を原信号の周波数の中心と広がりと見なすことは無理がある.そこで

実信号を式 (3) のように振幅 a(t) と位相 $\vartheta(t)$ の組み合わせで表すことができれば, 2.1 小節の通り位相から周波数を求めることができる.

$$s(t) = a(t)\cos(\vartheta(t)) \tag{3}$$

しかし,原信号を式 (3) で表現する方法は無数にある.そこで原信号の非負の周波数成分を残し負の周波数成分は 0 にして時間成分に戻した信号を作る.これを解析信号と呼ぶ.解析信号は非負の周波数成分のみを残すことでパワースペクトルの平均,分散は非負のピークについての平均,分散となり,原信号の周波数の中心と広がりを求めることができる.また解析信号は複素信号であり,式 (4) の振幅 A(t) と位相 $\varphi(t)$ は簡単に一意に定まる.何故なら,複素信号の実部と虚部は一意に定まる為である.

$$z(t) = A(t)e^{(j\varphi(t))} = s_r(t) + js_i(t) \tag{4}$$

3 MATLAB での実装

数値実験として時不変の純音 (式 (5)), 時不変の二つの純音の和 (式 (6)), 雑音付き時不変の純音 (式 (7)) について瞬時周波数を調べた.

$$s(t) = a\sin\omega t \tag{5}$$

$$s(t) = a_1 \sin \omega_1 t + a_2 \sin \omega_2 t \tag{6}$$

$$s(t) = a\sin\omega t + v(t) \tag{7}$$

手順を図1に示す.まず前処理として原信号にFFTし,該当する信号のパワースペクトルを求め,雑音除去,パワースペクトルのピークごとの分割を行う.雑音除去は今回純音と白色雑音の組み合わせでパワースペクトルの値が正規分布となっていた為,平均,分散を求め平均と分散の2倍及び3倍の和を各々閾値として下回る値を0とした.パワースペクトルのピークごとの分割はピーク間の最小値を1/2にして左右を分ける.

次に解析信号を作成する.正の周波数成分は2倍,0の周波数成分は1倍,負の周波数成分は0にした配列をIFFTして得る[2].

その後, 複素平面上の角度を調べることで各 時点の位相を求め, 各々1 時点前との差分を取 る [3]. 各時点はサンプルレートの逆数分離れているのでサンプルレートを掛け、 2π を割る.このデータ列から、時不変の信号なら平均、中央値を取る.時不変の信号で位相の差分の平均を取ることは傾き 0、つまり周波数が変化しない直線の最小二乗推定である.

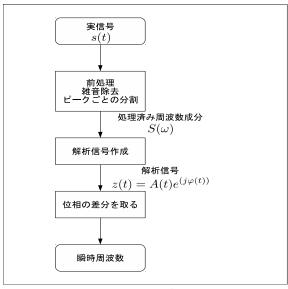


図 1. 瞬時周波数を求める手順

4 原信号の周波数との二乗誤差

時不変の純音は $A0\sim9$, $E1\sim10$,振幅は 1,5, 二つの純音は $A0\sim9$ もしくは $E1\sim10$ の範囲で 1 オクターブ違いで振幅は二つとも 1,雑音付き時不変の純音は時不変の純音と雑音のパワースペクトルの和を取り, SNR を 0, 10dB として 調べた.

時不変の純音は真値が目盛に近い値ほど平均, 中央値共に真値に近くなった. 真値と最も近い 目盛の差と平均, 中央値と真値の誤差の相関係 数は各々0.6078, 0.5806 であり正の相関がある と言える [4]. 異常値の影響を受けない為, 20 例 中 19 例が中央値との誤差の方が小さい. また, 周波数が高いほど誤差が大きい. 振幅による誤 差の差が中央値に比べ, 平均が大きい. 異常値 の値の違いはあるが, 異常値の数は変わらない 為である.

時不変の二つの純音は 36 例全てが中央値と の誤差の方が小さい.

雑音付き時不変の純音は目盛に当たる値であれば閾値を平均と分散の3倍の和とした信号の位相の差分の中央値との誤差が36例全てで一番小さい.他の44例では28例で1番,残る16例でも2番である.

5 課題

今回は簡単な時不変の信号について周波数を 求めた.今後の課題は楽音処理に対応する為の 時変やより多くの周波数成分を持つ信号におい ての瞬時周波数の解析が挙げられる.

謝辞 この研究は, JSPS 科研費 JP17K05363 の助成を受けたものです.

- [1] Leon Cohen, 吉川 昭, 佐藤 俊輔, 瞬間 周波数と複素信号, 時間-周波数解析, 第 2章, 朝倉書店, 1998.
- [2] ヒルベルト変換を使用した離散時間解析信号-MATLAB hilbert, MathWorks日本, https://jp.mathworks.com/help/signal/ref/hilbert.html, (参照 2018-8-4)
- [3] ヒルベルト変換および瞬間周波数-MATLAB&Simulink, Math-Works 日本, https://jp.mathworks.com/help/signal/ug/hilbert-transform-and-instantaneous-frequency.html, (参照 2018-8-4)
- [4] 東京大学教養学部統計学教室, 相関係数, 統計学入門, pp.47-50, 東京大学出版会, 1991.

画像分離問題における回転角度と平行移動量の同定について

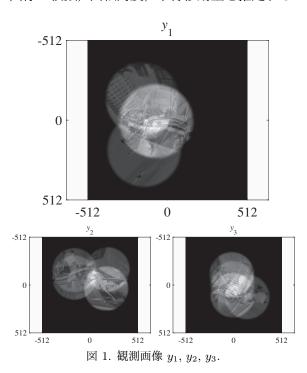
守本 晃¹, 芦野 隆一¹, 萬代 武史²

¹ 大阪教育大学, ² 大阪電気通信大学
e-mail: morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

c man : mornmoto@cc.osaka kyon

1 はじめに

図1にあるような、元画像を回転・平行移動して重み付き重ね合わせをおこなった画像を複数枚観測する. 観測画像から、元画像の枚数、回転角度、平行移動量、重みを推定する問題を考えたい. 本講演では、3枚の観測画像から、元画像の枚数、回転角度、平行移動量を推定する.



2 混合モデル

画像 $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$ に対して、平行移動 \mathcal{T}_c と回転 \mathcal{R}_{θ} を

$$\mathcal{T}_c f(x) = f(x - c), \quad c \in \mathbb{R}^2,$$

 $\mathcal{R}_{\theta} f(x) = f(P_{-\theta} x), \quad \theta \in [0, 360) \text{ degree}$

とする.ただし,
$$P_{\theta} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$
 は回転行列である.

ここで、元画像を $s_n \in L^2(\mathbb{R}^2)$, $n=1,\ldots,$ N とする. 観測画像 y_i は、混合モデル

$$y_j = \sum_{n=1}^{N} a_{j,n} \mathcal{T}_{c_j,n} \mathcal{R}_{\theta_{j,n}} s_n, \quad j = 1, 2, 3$$

で与えられる. 本研究では, y_1 , y_2 , y_3 から, 元 画像の枚数 N と角度と平行移動量を求める.

3 推定アルゴリズム

混合モデルの y_{j_1} と y_{j_2} (j_1 , j_2 は, 1, 2, 3) から, 元画像 s_n に着目すると,

$$s_n: \mathcal{R}_{-\theta_{j_1,n}}\mathcal{T}_{-c_{j_1,n}}y_{j_1} \sim \mathcal{R}_{-\theta_{j_2,n}}\mathcal{T}_{-c_{j_2,n}}y_{j_2}$$
である.したがって,

$$y_{j_1} \sim \mathcal{T}_{c_{j_1,n}} \mathcal{R}_{\theta_{j_1,n}} \mathcal{R}_{-\theta_{j_2,n}} \mathcal{T}_{-c_{j_2,n}} y_{j_2}$$

= $\mathcal{T}_{c_{j_1,n} - P_{\theta_{j_1,n} - \theta_{j_2,n}} c_{j_2,n}} \mathcal{R}_{\theta_{j_1,n} - \theta_{j_2,n}} y_{j_2}$

である.そこで,観測画像 y_{j_1} と $T_c \mathcal{R}_{\theta} y_{j_2}$ の内積をフーリエ空間で計算すると.

$$\int_{\mathbb{R}^2} \overline{y_{j_1}(x)} \, \mathcal{T}_c \mathcal{R}_{\theta} y_{j_2}(x) dx$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \left[\overline{\hat{y}_{j_1}(\xi)} \, \mathcal{R}_{\theta} \, \hat{y}_{j_2}(\xi) \right] \, e^{-ic \cdot \xi} \, d\xi$$

となる. これは, [...] のフーリエ変換である. 次のアルゴリズム 1 から,

相対角度: $\theta_n^{j_1,j_2} = (\theta_{j_1,n} - \theta_{j_2,n}) \mod 360$,相対平行移動量: $c_n^{j_1,j_2} = c_{j_1,n} - P_{\theta_n^{j_1,j_2}} c_{j_2,n}$ が求まる.

アルゴリズム 1 ([1]).

- 1) 同心円状のバンドパスマスクを BP(ξ) とし、フーリエ変換をとる。 $F_{j_1,j_2}(c,\theta) = \int \mathrm{BP}(\xi) \, \widehat{y}_{j_1}(\xi) \, \mathcal{R}_{\theta} \, \widehat{y}_{j_2}(\xi) \, e^{-ic\cdot\xi} \, d\xi$.
- 2) $H_{j_1,j_2}(\theta) = \max_{c} |F_{j_1,j_2}(c,\theta)|$ を図示する.
- 3) $H_{j_1,j_2}(\theta)$ のピークの数 \tilde{N} を元画像の数 N の推定値とする. ピークを取る角度を相対角度 $\theta_n^{j_1,j_2}, n=1,\ldots,\tilde{N}$ とする.
- 4) 相対角度 $\theta_n^{j_1,j_2}$ に対して,

$$c_n^{j_1,j_2} = \arg\max |F_{j_1,j_2}(c,\theta_n^{j_1,j_2})|$$

で相対平行移動量を推定する.

図 1 の観測画像 y_1 , y_2 , y_3 に対して,アルゴリズム 1 を用いると,図 2 に示した $H_{1,2}(\theta)$, $H_{2,3}(\theta)$, $H_{3,1}(\theta)$ がえられる.それぞれのグラフは 4 個のピークを持つので,元画像の枚数を $\tilde{N}=4$ と推定する.相対回転角度をピークを取る角度で推定すると,表 1 をえる.この表 1 では,ピークの高い順に番号を振った.

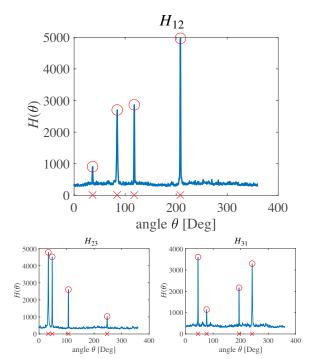


図 2. $H_{1,2}(\theta)$, $H_{2,3}(\theta)$, $H_{3,1}(\theta)$. 赤丸:グラフのピーク (推定値), 赤×:モデルパラメータ.

表 1. 相対角度の推定

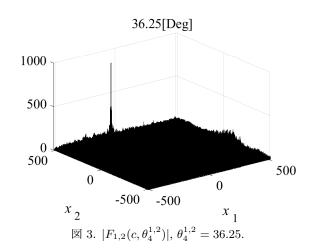
θ/n	1	2	3	4
$\theta_n^{1,2}$	208.5	118	84.5	36.25
$\theta_n^{2,3}$	33.75	47.75	106.5	247.5
$\theta_n^{3,1}$	45	241.75	194.25	76.5

ピークを取る相対角度 $\theta_n^{j_1,j_2}$ に対して, $|F_{j_1,j_2}(c,\theta_n^{j_1,j_2})|$ を描く.たとえば, $j_1=1,j_2=2$, $\theta_4^{l,2}=36.25$ の場合には,図 3 をえる.図 3 がピークを取る座標 (-107,417) が相対平行移動量 $c_4^{l,2}$ の推定値である.

4 元画像を対応させる

表 1 で求めた相対角度は、図 2 のピークの高い順に選んだ角度なので、 $\theta_n^{1,2}$ と $\theta_n^{2,3}$ が同じ元画像に対応した角度かどうかは、分からない、もし同じ元画像に対する相対回転角度ならば、

$$\tilde{\theta}_n^{1,2} + \tilde{\theta}_n^{2,3} + \tilde{\theta}_n^{3,1} \equiv 0 \mod 360$$



を満たす. 上式を満たすように, 相対角度を並べ替えると表 2 になる.

表 2. 相対角度の対応と並び替え

θ/n	1	2	3	4
$\theta_n^{1,2}$	208.5	118	84.5	36.25
$\theta_n^{2,3}$	33.75	47.75	106.5	247.5
$\theta_n^{3,1}$	45	241.75	194.25	76.5

₩							
$\tilde{ heta}/n$	1	2	3	4			
$\tilde{\theta}_n^{1,2}$	208.5	118	84.5	36.25			
$\tilde{\theta}_n^{2,3}$	106.5	47.75	33.75	247.5			
$\tilde{\theta}_n^{3,1}$	45	194.25	241.75	76.5			

謝辞 この研究は, JSPS 科研費 JP16K05216, JP17K05298, JP17K05363 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] A. Morimoto, R. Ashino and T. Mandai, An estimation of rotation and translation in image separation problem, in: Proc. of the 2018 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, pp. 113–118, 2018.

厳密な固有値・特異値がわかる行列の生成法

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 はじめに

真の解が事前に与えられる問題を用いて数値計算結果の精度を検証することは,数値計算ではよく行われる。本研究では,真の固有値がわかるテスト行列を数値計算のみを用いて生成する方法を提案する。ジョルダン細胞を対角ブロックに並べた行列 $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (上2重対角行列),正則な行列 $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を与え,

$$A := X^{-1}DX \tag{1}$$

と行列 A を生成すれば,A の固有値はすべてわかる.数値計算では,浮動小数点数とその演算を用いるため,(1) における行列積の計算中に丸め誤差が発生し,数値計算により得られた行列の固有値と D の対角成分が一致しないことがある.

著者らは,(1) における行列 X の候補として アダマール行列を用いた.さらに行列 D に摂動を加えることで,行列積の計算中に丸め誤差を 発生させずにテスト行列を生成する方法を提案 した [1]. 本発表では,X の候補をアダマール 行列に限定せずに,一般的な行列を用いてテスト行列を生成する手法を提案する.次に,行列 X の候補にアダマール行列を用いた場合のアルゴリズムを改良したものを紹介する.本手法は,厳密な特異値が事前にわかる行列 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ の 生成にも応用可能である.

2 表記

IEEE 754 規格 [2] によって定められる,ある固定精度における浮動小数点数の集合を $\mathbb F$ とする. $\mathrm{fl}(\cdot)$ は,括弧内に存在するすべての 2 項演算を浮動小数点演算で評価した結果を表す.ここでは,丸めのモードは最近点丸め(偶数丸め)が採用されているとする. $\mathrm{ufp}(a), a \in \mathbb R$ は |a| 以下の最大の 2 のべき乗数を返す関数とする.すなわち, $a \neq 0$ のとき $\mathrm{ufp}(a) = 2^{\lfloor \log_2 |a| \rfloor}$ である.ただし,例外的に $\mathrm{ufp}(0) = 0$ とする.u は単位相対丸めとする.倍精度浮動小数点数であれば, $u = 2^{-53}$ となる.

3 提案手法

表記の簡略化のために X^{-1} を Y と置く. 本研究の目標は

$$YD'X = fl((YD')X) = fl(Y(D'X))$$

となる D の近似行列 $D' \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を得ることである。ここから,提案手法に用いるいくつかの定数を定義する。 $x_{ij} \neq 0$ に対して ϕ_{ij} を, $y_{ij} \neq 0$ に対して ψ_{ij} を

$$x_{ij} \in \phi_{ij}\mathbb{Z}, \qquad x_{ij} \notin 2\phi_{ij}\mathbb{Z},$$

 $y_{ij} \in \psi_{ij}\mathbb{Z}, \qquad y_{ij} \notin 2\psi_{ij}\mathbb{Z}$ (2)

となる 2 のべき乗数とする。例外的に $x_{ij}=0$ のとき $\phi_{ij}=0$, $y_{ij}=0$ のとき $\psi_{ij}=0$ とする。定数 $\beta,\gamma,\theta,\omega$ を

$$\beta = \max_{i,j,k,\phi_{ij}\neq 0} \frac{\phi_{kj}}{\phi_{ij}},$$

$$\gamma = \max_{i,j,\phi_{ij}\neq 0} \frac{\text{ufp}(x_{ij})}{\phi_{ij}},$$

$$\theta = \max_{i,j,k,\psi_{ij}\neq 0} \frac{\psi_{ik}}{\psi_{ij}},$$

$$\omega = \max_{i,j,\psi_{ij}\neq 0} \frac{\text{ufp}(y_{ij})}{\psi_{ij}}$$
(3)

と定義する. これらのすべては1以上の2のべき乗数となる. このとき,次の定理を得る.

定理 1 対角ブロックにジョルダン細胞を並べた行列を $D \in \mathbb{F}^{n \times n}$ とする. (3) で定義された $\beta, \gamma, \omega, \theta$ を用いて浮動小数点数 $\sigma \in \mathbb{F}$ を

$$\begin{split} \sigma &=& 12 \mathtt{ufp}(\alpha) \beta \gamma \theta \omega \in \mathbb{F}, \\ \mathbb{F} &\ni& \alpha \geq n (\max_i |d_{ii}| + 1) \end{split}$$

と定める. $D' \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を

$$d'_{ij} = \begin{cases} f((\sigma + d_{ij}) - \sigma), & i = j \\ d_{ij}, & i \neq j \end{cases}$$

と求めたとき、 $2u \cdot \text{ufp}(\sigma) \leq 1$ ならば

$$fl((YD')X) = fl(Y(D'X)) = YD'X$$

が成立する.

定理 2 行列 $D\in\mathbb{F}^{n\times n}$ を対角行列とする. (3) で定義された $\beta,\gamma,\omega,\theta$ を用いて浮動小数点数 $\sigma\in\mathbb{F}$ を

$$\sigma = 12 \operatorname{ufp}(\alpha) \beta \gamma \theta \omega \in \mathbb{F},$$

$$\mathbb{F} \ni \alpha \ge n \max_{i} |d_{ii}|$$

と定める. 対角行列 $D' \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を

$$d'_{ii} = fl((\sigma + d_{ii}) - \sigma)$$

と求めたとき、 $4nu\beta\gamma\theta\omega \leq 1$ ならば

$$fl((YD')X) = fl(Y(D'X)) = YD'X$$

が成立する.

提案手法は、どのような計算順で計算をしても丸め誤差が発生しないため、再現性がある手法と言える。また、 $d_{ii}=d_{jj}$ ならば $d'_{ii}=d'_{jj}$ であるため、重複固有値を設定することができる。一方で、 $d_{ii}\neq d_{jj}$ であっても $d'_{ii}=d'_{jj}$ となる場合があり、近接固有値の設定には失敗することがある。特に絶対値が相対的に小さい固有値が重複する可能性がある。

4 行列の候補

式 (1) における行列 $X \in \mathbb{F}^{n \times n}$ の候補についていくつか紹介する. I を単位行列とする。まず, $X^TX = XX^T = cI$ でかつ,すべての (i,j) の組み合わせにおいて $x_{ij} \in \{-1,0,1\}$ となる weighing 行列は非常に便利な行列である. X が weighing 行列であるとき,(3) における定数は $\beta = \gamma = \phi = \omega = 1$ となる。特に c = n のとき、X はアダマール行列である。

のとき,X はアダマール行列である. ここで $X^{-1}=\frac{1}{c}W^T$ となるが,c が 2 のべき乗数ではない場合,除算において丸め誤差が発生する場合がある.よって, $\mathrm{fl}(D/c)$ に対して摂動を加えた行列 D' を得て,行列 $A=\mathrm{fl}((W^TD')W)=\mathrm{fl}(W^T(D'W))$ を得る.このとき,A の固有値は cd'_{ii} となるが,この積においても丸め誤差が発生する可能性があるため注意が必要である.

目標とする固有値を並べたベクトル $v \in \mathbb{F}^n$,Dの副対角の情報が入ったベクトルを $w \in \mathbb{F}^{n-1}$ とする.行列 A の固有値が $p_i + q_i$ となる $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, $p,q \in \mathbb{F}^n$ を出力するアルゴリズムを以下に示す.アルゴリズムは疑似的な MATLAB コードとして記述している.ここでは $2u \cdot \text{ufp}(\sigma) < 0$

1が満たされていると仮定する.

1: function $[A, p, q] = \texttt{test_mat}(v, w)$

2: n = length(v);

3: H = hadamard(n);

4: feature('setround', Inf)

5: s = 12 * n * ufp(max(abs(v/n)) + 1);

6: feature('setround', 0.5)

7: y = (s + v/n) - s;

8: A = spdiags([y[1;w]], 0:1, n, n) * H;

9: A = H * full(A);

10: $[p,q] = \mathsf{TwoProduct}(y,n);$

11: end

コードの 10 行目にある $[p,q]={\sf TwoProduct}(y,n)$ は、すべての i において

$$y_i n = p_i + q_i, \quad p_i = fl(y_i n)$$

を満たす $p,q \in \mathbb{F}^n$ を求める関数とする.

式 (1) における X の候補として,浮動小数点数の仮数部のビットに 1 が埋まっていないユニモジュラ行列も良い行列である.例えば,

$$\left(\begin{array}{cc}
0 & 1 \\
1 & 1
\end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc}
-1 & -1 & 1 \\
-1 & 0 & 1 \\
-1 & -1 & 0
\end{array}\right)$$
(4)

などは、その逆行列のすべての成分が -1,0,1 で表せられるため、weighing 行列と同様に $\beta=\gamma=\phi=\omega=1$ となる.行列のサイズが素数 であるときに (4) のような行列を用意し、それらに対してクロネッカー積を用いれば、行列 X と X^{-1} が容易に求まる.

5 今後の課題

行列の構造を指定したテスト行列の生成法の 提案や、複素固有値へと議論を拡張したい.ま た、大規模分散並列環境において本手法を実装 し、高速にテスト行列を生成できる環境を構築 する.

- [1] 尾崎克久,荻田武史,真の特異値や固有値がわかるテスト行列の生成法,平成29年日本応用数理学会年会,武蔵野大学(2017/09/07).
- [2] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.

一般化エルミート固有値問題の周回積分型精度保証付き部分固有値計算

今倉 暁¹, 保國 惠一¹, 高安 亮紀¹

1 筑波大学システム情報系

e-mail: takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

1 Introduction.

Consider verifying the m eigenvalues λ_i , counting multiplicity, of the Hermitian generalized eigenproblem

$$A\mathbf{x}_i = \lambda_i B\mathbf{x}_i, \quad \mathbf{x}_i \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\},$$
 (1)

 $i=1,\,2,\,\ldots,\,m$ in a prescribed interval $\Omega=[a,b]\subset\mathbb{R}$, where $A=A^{\mathsf{H}}\in\mathbb{C}^{n\times n},\,B=B^{\mathsf{H}}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ is positive semidefinite, and the matrix pencil zB-A ($z\in\mathbb{C}$) is nonsingular. Here, we assume that the number of eigenvalues in the interval Ω is known to be m and there do not exist eigenvalues of (1) at the end points $a,b\in\mathbb{R}$ of the region Ω . We denote the eigenvalues outside Ω by $\lambda_i,\,i=m+1,\,m+2,\,\ldots,\,r$, where $r=\mathrm{rank}\,B$.

Verification methods for generalized eigenvalues problems are presented in [1, 3, 5, 8]. There are two kinds: the ones in [3, 5] rigorously enclose all eigenvalues, and the others in [1, 8] rigorously enclose partial eigenvalues. In particular, the method in [1] is based on the variational principle and the method in [8] is based on a perturbation theory using the LDLT decomposition.

We present a verification method for partial eigenvalue using an eigensolver based on contour integrals, the block Hankel-type Sakurai–Sugiura (block SS) method [2].

2 Block Hankel-type SS method.

We review the block SS method, which is the basis of the proposed verification method. The block SS method has input parameters: $L, M \in \mathbb{N}_+, \ V \in \mathbb{R}^{n \times L}$ is a random matrix, and $(\gamma, \rho) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ are the scaling parameters for the eigenvalues. For $p = 0, 1, \ldots, 2M - 1$, let

$$\mathsf{M}_p = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma} (z - \gamma)^p V^{\mathsf{H}} B (zB - A)^{-1} B V \mathrm{d}z$$
(2)

be the p th complex moment in $\mathbb{C}^{L\times L}$ defined on the closed Jordan curve Γ through the end points of the interval $\Omega = [a, b]$, where i is the imaginary unit and π is the circle ratio. Denote the block Hankel matrices consisting of the moments (2) by

$$H_M^{\leq} = (\mathsf{M}_{i+j-1}) \in \mathbb{C}^{LM \times LM},$$

 $H_M = (\mathsf{M}_{i+j-2}) \in \mathbb{C}^{LM \times LM},$

i, j = 1, ..., 2M. Then, the following theorem shows that the block SS method can compute the eigenvalues in the prescribed domain [2].

Theorem 1 Denote an eigenvalue of the regular part of the matrix pencil $zH_M - H_M^{\leq}$ by θ_i . If rank $(H_M) = m$, then the eigenvalue of (1) is given by $\lambda_i = \gamma + \theta_i$, i = 1, 2, ..., m.

Next, we review the quadrature error of the complex moment [6]. Denote the Weierstrass canonical form of the matrix pencil zB-A by $Y^{-1}(zB-A)X=z\mathrm{I}_0-\Lambda$, where the columns of X are the eigenvectors of (1), I_0 is a block matrix whose leading $r\times r$ principal submatrix is the identity and the trailing $(n-r)\times (n-r)$ principal submatrix is zero, and Λ is a diagonal matrix whose leading r diagonal entries are the eigenvalues of (1) and the trailing n-r diagonal entries are one. Then, the complex moment (2) is expressed as

$$M_{p} = \sum_{k=1}^{r} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{(z-\gamma)^{p}}{z-\lambda_{k}} \mathcal{V}_{k} dz$$
$$= \sum_{k=1}^{r} (\lambda_{k} - \gamma)^{p} \mathcal{V}_{k}, \tag{3}$$

where $V_k = V^{\mathsf{H}} B \boldsymbol{x}_k \boldsymbol{x}_k^{\mathsf{H}} B V \in \mathbf{C}^{L \times L}$. In this study, we set the domain of the integration Γ in (2) to the circle with radius $\rho = (b-a)/2 > 0$ and center at $\gamma = (b+a)/2 \in \mathbb{R}$. We approximate the complex moment (2) by using the N-point trapezoidal rule with the equidistributed quadrature points $z_j = \gamma + \rho \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_j}$

with $\theta_j = 2\pi/N(j-1/2)$ for j = 1, 2, ..., N as follows

$$\mathsf{M}_{p}^{(N)} = \sum_{k=1}^{r} \mathcal{V}_{k} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{\rho^{p+1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p+1)\theta_{j}}}{\rho \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{j}} - (\lambda_{k} - \gamma)} \right). \tag{4}$$

Using the sum of geometric series, the quantity in the parentheses in (4) is written as

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{\rho^{p+1} e^{i(p+1)\theta_j}}{\rho e^{i\theta_j} - (\lambda_k - \gamma)} = \begin{cases} (\lambda_k - \gamma)^p \alpha_k, \\ (\lambda_k - \gamma)^p \beta_k, \end{cases}$$
(5)

where

$$\alpha_k = \frac{1}{1 - \left(\frac{\lambda_k - \gamma}{\rho}\right)^N}, \quad k = 1, 2, \dots, m,$$
$$-\left(\frac{\rho}{\lambda_k - 2}\right)^N$$

$$\beta_k = \frac{-\left(\frac{\rho}{\lambda_k - \gamma}\right)^N}{1 - \left(\frac{\rho}{\lambda_k - \gamma}\right)^N}, \quad k = m + 1, \dots, r.$$

It follows from (4), (5) that the approximated complex moment $\mathsf{M}_p^{(N)}$ is split into the two terms $\mathsf{M}_p^{(N)} = \mathsf{M}_{p,\mathrm{in}}^{(N)} + \mathsf{M}_{p,\mathrm{out}}^{(N)}$. Together with (3), we have the quadrature error

$$\mathsf{M}_p - \mathsf{M}_p^{(N)} = \sum_{k=1}^m (\lambda_k - \gamma)^p (1 - \alpha_k) \mathcal{V}_k$$
$$- \sum_{k=m+1}^r (\lambda_k - \gamma)^p \beta_k \mathcal{V}_k.$$

3 Bound of the complex moment for verification.

Since the eigenvalues of the block Hankel matrix pencil consisting of the complex moment M_p is invariant with respect to a multiple of a real number, the Hankel matrix pencil $zH_M-H_M^<$ consisting of M_p and the Hankel matrix pencil $zH_M^{\rm in}-H_M^{<,\mathrm{in}}$ have the same eigenvalues. Hence, we derive an enclosure of $\mathsf{M}_{p,\mathrm{in}}^{(N)}$ instead of an enclosure of M_p . Denote an approximation of $\mathsf{M}_p^{(N)}$ by $\bar{\mathsf{M}}_p^{(N)}$ for floating operation arithmetics. Then, it follows from $\mathsf{M}_{p,\mathrm{in}}^{(N)}-\mathsf{M}_p^{(N)}=\mathsf{M}_{p,\mathrm{out}}^{(N)}$ that the inequality

$$|\mathsf{M}_{p,\text{in}}^{(N)} - \bar{\mathsf{M}}_p^{(N)}| \leq |\mathsf{M}_{p,\text{out}}^{(N)}| + |\mathsf{M}_p^{(N)} - \bar{\mathsf{M}}_p^{(N)}|$$

holds. Therefore, we can enclose $\mathsf{M}_{p,\mathrm{in}}^{(N)}$ by using the quantity $\mathsf{M}_{p,\mathrm{out}}^{(N)}$ of the complex moment outside Γ and computing the approximated complex moment $\mathsf{M}_p^{(N)}$ for interval arithmetics.

4 Verification method.

As described above, the eigenvalues $\lambda_i \in \Omega$ are computed by solving the small eigenproblem of the Hankel matrix pencil $zH_M^{\rm in}-H_M^{<,{\rm in}}$ consisting of $\mathsf{M}_{p,{\rm in}}^{(N)}$ ($\mathsf{M}_{p,{\rm in}}^{(N)}/\rho^{p+1}$ in the implementation). To rigorously enclose the eigenvalues, we set m=LM, verify each block entry $\mathsf{M}_{p,{\rm in}}^{(N)}$ of the Hankel matrices by enclosing each entry $\mathsf{M}_{p,{\rm in}}^{(N)}/\rho^{p+1}$ of the block Hankel matrices, and then apply a verification method such as in [4, 7] to the small eigenproblem of regular matrix pencil $zH_M^{\rm in}-H_M^{<,{\rm in}}$.

Acknowledgement. The authors express their sincere gratitude to Prof. Y. Yamamoto (The University of Electro-Communications) for his essential suggestion of the error analysis and Dr. K. Ozaki (Shibaura Institute of Technology) for his advice for implementing the verification method. This work was partially supported by the fusion research project by young researchers in the University of Tsukuba.

References

- [1] H. Behnke: Computing, 47 (1991), 11– 27
- [2] T. Ikegami et al.: Journal of Computational and Applied Mathematics, 233 (2010), 1927–1936.
- [3] K. Maruyama et al.: Transactions of the Institute of Electronics, Information and Communication Engineers A, 87 (2004), 1111–1119.
- [4] S. Miyajima: Journal of Computational and Applied Mathematics., 236 (2012), 2545–2552.
- [5] S. Miyajima et al.: Reliable Computing, 14 (2010), 24–45.
- [6] T. Miyata et al.: Transactions of the Japan Society for Industrial and Applied Mathematics, 19 (2009), 537–550.
- [7] S. M. Rump: Computing, 42 (1989), 225–238.
- [8] N. Yamamoto: Linear Algebra and its Applications, 324 (2001), 227–234.

LU 分解を用いた Cholesky QR アルゴリズムの丸め誤差解析

寺尾 剛史1, 尾崎 克久2, 荻田 武史3

1 芝浦工業大学大学院理工学研究科,2 芝浦工業大学システム理工学部,

3 東京女子大学現代教養学部

e-mail: nb17105@shibaura-it.ac.jp

1 概要

本稿では、列フルランク行列に対する thin-QR 分解のアルゴリズムついて述べる. 近年の計算機環境における数値計算において、通信量の低減が重要となる場合がある. CholeskyQRアルゴリズムは thin-QR 分解の一つとして知られ、HouseholderQRアルゴリズムなどと比べて計算量が大きいが、通信量が小さいため高速に計算できる場合がある [1]. しかし、他のアルゴリズムに対して、比較的小さい条件数で破綻することが知られている. 我々は CholeskyQRの前処理に LU 分解を用いた手法の丸め誤差解析を行った.

2 準備

次に本稿で用いる記号について説明する。u を単位相対丸めとする(倍精度演算の場合 $u=2^{-53}\approx 10^{-16}$).また,入力行列のサイズは $m\times n, m\geq n$ とする.本論で紹介するアルゴリズムは MATLAB の形式に従うものとし,全て倍精度最近点丸めで計算されるものとする.ここで,数値計算では簡単のためアンダーフローやオーバーフローは発生しないものとする.また,X を列フルランク行列としたとき, $\kappa_2(X)=\sigma_{\max}(X)/\sigma_{\min}(X)$ とする.

3 CholeskyQR アルゴリズム

入力行列 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対する CholeskyQR アルゴリズムを用いた QR 分解とその誤差解析が提案されている.

Algorithm 1

function
$$[Y,R] = \text{CholQR}(X)$$

 $A = X' * X %A \leftarrow X^T X$
 $R = \text{chol}(A) %Cholesky decomposition$
 $Y = X/R %Solve linear system$
end

このとき、計算結果 $Y \in \mathbb{R}^{m \times n}, R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は、それぞれ近似列直交行列、上三角行列である.

次に、CholeskyQR アルゴリズムで得られた 行列の直交性の精度を改善する CholeskyQR2 アルゴリズムが提案されている [1].

Algorithm 2

function
$$[Z, R] = \text{CholQR2}(X)$$

 $[Y, R_1] = \text{CholQR}(X)$
 $[Z, R_2] = \text{CholQR}(Y)$
 $R = R_2 * R_1$
end

ここで得られる Z に対する直交性ついて,以下の結果が知られている.まず,

$$\delta := 8\kappa_2(X)\sqrt{mnu + n(n+1)u} \le 1 \tag{1}$$

を仮定する. この仮定は, 少なくとも $\kappa_2(X) \le \sqrt{u^{-1}}$ であることを意味する. このとき,

$$\|Y^TY - I\|_2 \le \frac{5}{64}\delta^2$$

$$\|Z^TZ - I\|_2 \le 6(mnu + n(n+1)u)$$
 が成り立つ [2].

4 LU-CholeskyQR アルゴリズム

本章では,LU分解を用いた CholeskyQR アルゴリズを紹介する.行列 X に対する Doolittle の LU 分解は,PX = LU と分解する.ただし,単位下三角行列 $L \in \mathbb{R}^{m \times n}$,上三角行列 $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$,P は置換行列である.次にこれらの行列を用いた CholeskyQR アルゴリズムを紹介する.

Algorithm 3

function
$$[Y,R] = \text{LU_CholQR_ver1}(X)$$

 $[L,U,P] = \text{lu}(X) \ \%LU \ decomposition$
 $A = L' * L$
 $S = \text{chol}(A) \ \%Cholesky \ decomposition$
 $R = S * U$
 $Y = X/R$ \ \%Solve \ linear \ system

Algorithm 4

function
$$[Y,R] = \text{LU_CholQR_ver2}(X)$$

 $[L,U,P] = \text{lu}(X) \ \%LU \ decomposition$
 $A = L' * L$
 $S = \text{chol}(A) \ \%Cholesky \ decomposition$
 $Y = L/S \ \%Solve \ linear \ system$
 $Y = P' * Y$
 $R = S * U$
end

先行研究において、丸め誤差の影響が大きくなる原因は、行列 X^TX の条件数が大きくなるためである。それに対して、経験的に $\kappa_2(L)\approx n$ が知られており、LU-Cholesky QR は X の悪条件性の影響が小さい。Algorithm 3 と Algorithm 4 の直交性 $\|Y^TY-I\|$ と残差 $\|YR-X\|$ の比較を行う。直交性は、Algorithm 4 が良い場合が多く、X の悪条件性の影響が小さい。しかし、残差は Algorithm 3 が良く、Algorithm 4 は LU 分解の残差 $\|LU-PX\|$ の影響が大きい、次に、Algorithm 3 に関する再直交化のアルゴリズムを示す。

Algorithm 5

function
$$[Z, R] = LU_CholQR2_ver1(X)$$

 $[Y, R_1] = LU_CholQR_ver1(X)$
 $[Z, R_2] = CholQR(Y)$
 $R = R_2 * R_1$
end

このとき,Yの条件数が小さいため,再直交化は通常の CholeskyQR アルゴリズムで十分である.

次に、Algorithm 4 に関する再直交化を行う アルゴリズムを考える。Algorithm 4 で得られる Y について Q=Y(I-E) を満たす列直交 行列 Q と上三角行列 E を考える。このとき、

$$I = (I - E^T)Y^TY(I - E)$$

$$Y^TY - I \approx E^TE + E^T + E \approx E^T + E$$

である. ここで, Y は比較的に直交性が良いため

$$(I - E)^{-1} \approx I + E, \quad E^T E \approx O$$
 (2)

であると仮定している. これより,以下の再直交化手法を提案する.

Algorithm 6

function
$$[Z, R] = \text{LU_CholQR2_ver2}(X)$$

 $[Y, R_1] = \text{LU_CholQR_ver2}(X)$
 $S = Y' * Y - I$
 $E = \text{diag}(0.5 * \text{diag}(S)) + \text{triu}(S, 1)$
 $Z = Y - Y * E$
 $R = R_1 + E * R_1$
end

この再直交化手法を Algorithm 3 で得られた行列 Y,R に用いた場合,悪条件下では式(2) の傾向を満たさないために精度の改善が小さい.

最後に、Algorithm 5 の直交性 $\|Z^TZ - I\|_2$ に関する誤差解析の結果を紹介する。仮定として

$$\delta_1 := 8\kappa_2(L)\sqrt{mnu + n(n+1)u} \le 1 \qquad (3)$$

$$\delta_2 := 64n^2u\kappa_2(L)\kappa_2(U) \le 1 \qquad (4)$$

を与える. このとき

$$||Y^TY - I||_2 \le \frac{7}{64} \max(\delta_1^2, \delta_2)$$

 $||Z^TZ - I||_2 \le 6.3(mnu + n(n+1)u)$

が成り立つ.式(1)と比較し,式(3)は $\kappa_2(L)$ が $\kappa_2(X)$ に依存しないため,悪条件問題に対しても仮定を満たし易い.また,式(4)の $\kappa_2(U)$ は $\kappa_2(X)$ に依存するが,係数部分は $\mathcal{O}(n^2u)$ であるため,仮定を満たし易い.よって,誤差解析における上限は先行研究が良いが,提案手法は $\kappa_2(X) < u^{-1}$ 程度まで計算が可能である.発表にて残差と直交性,計算性能の数値実験の結果を詳細に示す.

- [1] T. Fukaya, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa and Y. Yamamoto, CholeskyQR2: a simple and communication-avoiding algorithm for computing a tall-skinny QR factorization on a large-scale parallel system, Proceedings ScalA '14, (2014), 31–38.
- [2] Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa and T. Fukaya, Rounding Error Analysis of the CholeskyQR2 algorithm, ETNA, vol. 44 (2015), 306–326.

行列積に関する計算順序の特定法とその応用

坂本 篤志1, 尾崎 克久2

1 芝浦工業大学大学院, 2 芝浦工業大学

e-mail: mf17028@shibaura-it.ac.jp

1 概要

本発表では、行列積に対する数値計算を扱う. 計算結果は、浮動小数点演算の順序に依存する ため、計算機環境や使用するライブラリが異な れば、同じ入力に対しても異なる計算結果を得 ることがある.そのため、行列積の計算方法が 分からない場合は任意の計算順序に対応する誤 差評価を使用する必要がある.そこで、計算方 法が分からない問題に対して例題を与え、演算 結果から順序を特定する方法を幾つか紹介する. またそれらの応用として、異なる BLAS 間で同 一の計算結果を得ることも可能である.

2 前提条件

ここで紹介する計算手法や変換方法は,次の 条件を前提としている.

- 計算順序は入力した値に依らない
- 同じ入力に対して、何回実行しても同じ 計算結果を得る
- 分割統治法は用いられていない

また、本稿ではIEEE 754 規格 [1] に基づいた浮動小数点数を扱う. \mathbb{F} をある固定された浮動小数点数の集合とし、 \mathbf{u} を単位相対丸め (倍精度では 2^{-53})、 $\mathbf{f}(\cdot)$ を括弧内を浮動小数点演算で評価する関数とする. 行列の表現として、O を零行列、E を全ての要素が 1 である行列、I を単位行列とする. また、丸めの方式は最近点丸め (偶数丸め) を採用しているものとする.

 $\alpha, \beta \in \mathbb{F}, \ A \in \mathbb{F}^{m \times p}, \ B \in \mathbb{F}^{p \times n}, \ C \in \mathbb{F}^{m \times n}$ $(m, n, p \in \mathbb{N})$ に対して BLAS の gemm は次の計算を行う.

$$C \leftarrow \alpha AB + \beta C$$

3 計算順序の特定法

BLAS で行列積を計算する際に、postload か preload か、FMA が使われているかどうか、ブロック行列積が使われているかを特定する。 postload と preload は図 1、2 のように行列 C の要素を足すタイミングの違いを表しており、FMA は $a,b,c\in\mathbb{F}$ に対して、ab+c を最近点に丸め

る演算である.ここでは $\operatorname{fma}(a,b,c)$ は ab+c を FMA で評価したものとする.

- for k=1:p
- C(i,j)=A(i,k)*B(k,j)+C(i,j);
- end

図 1. preload の例

- store = 0;
- for k=1:p
- store=A(i,k)*B(k,j)+store;
- · end
- C(i,j)=C(i,j)+store;

図 2. postload の例

2つのベクトルを $x, y \in \mathbb{F}^n$, p を順列とする.

$$x^T y = \text{fl}(((x_{p_1}y_{p_1} + x_{p_2}y_{p_2}) + x_{p_3}y_{p_3}) + \dots)$$

のような内積計算の事を逐次計算と呼ぶことに する.

例題 1 $\alpha = 1$, $\beta = 0$, B = E, C = O

$$a_{ik} = \begin{cases} 1 & (k=1) \\ \mathbf{u} & (k \neq 1) \end{cases} \quad (1 \le i \le m)$$

とする. gemm によって得られた結果がEであるとき, 行列積中の全ての内積計算で逐次計算が行われている.

補題 2 $\alpha = \beta = 1$, $A = \mathbf{u}E$, B = E, C = O であるとき, gemm によって得られた結果が E であるならば, preload が保証される.

例題 3 $\alpha=\beta=1,\ B=E,\ C=O$ とする. また $v=\mathbf{u}/2^{\lceil\log_2p\rceil},\ 1\leq i\leq m$ として, 行列 A を次の様に設定する.

$$a_{ik} = \begin{cases} \mathbf{u} - (p-1)v + 2\mathbf{u}^2 & (k=p) \\ v & (k \neq p) \end{cases}$$

このとき gemm によって得られた結果が $(1 + 2\mathbf{u})E$ であるならば, postload が保証される.

例題 $\mathbf{4} \ \alpha = \beta = 1 + 2\mathbf{u}, \ A = 3\mathbf{u}E, \ B = I, \ G = \mathrm{fl}(AB), \ C = -3\mathbf{u}$ とする. このとき, gemm によって得られた結果によって, 次のように計算順が特定される.

- $-2\mathbf{u}E \Rightarrow \operatorname{fma}(\alpha, g_{ij}, (\beta C)_{ij})$
- $2\mathbf{u}E \Rightarrow \operatorname{fma}(\beta, c_{ij}, (\alpha G)_{ij})$
- $O \Rightarrow \{fl(\alpha G + \beta C)\}_{ij}$

あるベクトル $x,y \in \mathbb{F}^n$ において,

$$q_i = \operatorname{fma}(x_i, y_i, q_{i-1}) \quad (2 \le i \le n)$$
$$q_1 = \operatorname{fl}(x_1 y_1)$$

とする. このように $x^Ty=q_n$ と計算したことを FMA を用いた逐次計算と呼ぶ.

例題 5 行列積中の内積計算全てが逐次計算である前提のもと

$$a_{ik} = \begin{cases} 1 & (k=1) \\ \mathbf{u} + 2\mathbf{u}^2 & (k \neq 1) \end{cases}$$

$$b_{kj} = \begin{cases} 1 & (k=1) \\ 1 - \mathbf{u} & (k \neq 1) \end{cases}$$

であるとき, gemm によって得られた結果が $(1+2(k-1)\mathbf{u})E$ であるならば, FMA を用いた逐次計算が行われた。ただし, $2(k-1)\mathbf{u}<1$ である.

例題 6 $\alpha = 1$, $\beta = 0$, B = E, C = O,

$$a_{ik} = \begin{cases} 1 & (k = q) \\ \mathbf{u} & (k = q + 1, q + 2) \quad (1 \le q \le p - 2) \\ 0 & (k \ne q, q + 1, q + 2) \end{cases}$$

とする. ブロック行列積が行われていると仮定する. このとき, gemm によって得られた結果が $1+2\mathbf{u}$ であるならば, 行列 A のブロックの 堺は q 列目と q+1 にあると推測できる.

同じ行列サイズに対して,qがある周期ごとに現れたとき,ブロック行列積が用いられたと推測される.しかし,以下の条件が保証されているとは限らない.

- (1) ブロック行列同士の積は逐次計算か
- (2) 想定したブロック行列サイズで計算して いるか
- (3) ブロック行列間で要素の入れかえがないか

よって, 例題 6 によって推定できたブロック行列のサイズが上記の条件を満たしているかの確認方法を紹介する.

例題 7 n_b 個のブロック行列により行列 A が構成されているとする. それぞれのブロック行列は $1 \le s \le n_b$, $d = p/n_b = \lceil p/n_b \rceil$ のとき $A_s = A(:,(s-1)d+1:s*d)$ のように表されるとする. このとき, ある行列の組 A_z , A_w $(z \ne w)$ に対して,

$$(A_z)_{ik} = \begin{cases} 1 & (k=1) \\ \mathbf{u} & (k \neq 1) \end{cases}$$

$$(A_w)_{ik} = \begin{cases} \theta & (k < d) \\ -\frac{\mathbf{u}}{2} - (d-1)\theta - \mathbf{u}^2 & (k = d) \end{cases}$$

とおく. ただし, $\theta = -\frac{\mathbf{u}}{2}/2^{\lceil \log_2 d \rceil}$ とする. $\alpha = 1$, $\beta = 0$, B = E とし, A_z, A_w 以外のブロック行列が零行列であるとき, gemm によって得られた演算結果が $1 - \mathbf{u}$ であるならば, A_z で条件 (1) が保証され, A_z と A_w 間で条件 (2), (3) が保証される.

全てのブロック行列で条件 (1)(2)(3) を満たすには、例えば $n_b=2$ であれば (z,w)=(1,2),(2,1), $n_b=3$ であれば (z,w)=(1,2),(2,3),(3,1) のようなブロック行列の組み合わせの全てを試行する必要がある.

4 計算方法の変換

前章で紹介した例題をあるBLAS上で試行を行い、計算順序や方法が推定できたとする.幾つかの条件が揃えば、これを利用してあるBLASを用いながら、別のBLASで計算した結果を得るエミュレーションを行える。例えば、Octave (OpenBLAS) を用いた場合の計算結果をMATLAB (Intel Math Kernel Library)で再現することが条件付きで可能である。または、MATLABと Octave で同じ結果を得る計算アルゴリズムの構築も可能である。

5 今後の課題

今後は、各例題の証明の簡略化と、例題7を 改良し、試行回数を削減できる手法の開発を行 いたい.

参考文献

[1] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, 754-2008, 2008

Pitman 変換による箱玉系の解析

Croydon David¹, 佐々田 槙子², 加藤 毅³, 辻本 諭¹

1 京都大学大学院 情報学研究科, 2 東京大学大学院 数理科学研究科,

3 京都大学大学院 理学研究科

e-mail: tsujimoto.satoshi.5s@kyoto-u.jp

1 はじめに

高橋・薩摩により1990年に導入された箱玉系[1]は、任意の状態がソリトンに分解可能という 顕著な性質を有するオートマトンであり、超離 散可積分系の最も基本的なモデルである。箱玉 系については、可積分系の理論のみならず様々 な観点から研究されてきた。特に、Kortewegde Vries (KdV) 方程式[2]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

と箱玉系は, KdV 方程式の可積分差分の一つ として知られる離散 KdV 格子 [3]:

$$\frac{1}{u_{n+1}^{(t+1)}} - \frac{1}{u_n^{(t)}} = \delta \left(u_{n+1}^{(t)} - u_n^{(t+1)} \right)$$

との直接的な対応関係が確立されており [4,5],本手法はトロピカル幾何学とも関係し [6,7],超離散極限あるいは超離散化として可積分系にとどまらず幅広い分野への応用が図られている [8,9].

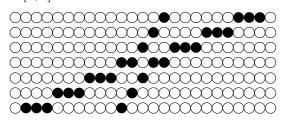


図 1. 箱玉系:2 ソリトン相互作用 (時間軸は下から上へ)

2 箱玉系とランダムウォーク

本発表では、箱玉系とランダムウォークとの 間の関係を明らかにし、ランダムな初期列に対 する箱玉系の時間発展について調べる.

玉の数を有限 $(\sum_{n\in\mathbb{Z}}\eta_n<\infty)$ に限定した 0 と 1 からなる無限列 $\eta=(\eta_n)_{n\in\mathbb{Z}}\in\{0,1\}^{\mathbb{Z}}$ に対する箱玉系の時間発展 $T:\{0,1\}^{\mathbb{Z}}\to\{0,1\}^{\mathbb{Z}}$ は

$$(T\eta)_n = \min \left\{ 1 - \eta_n, \sum_{m = -\infty}^{n-1} (\eta_m - (T\eta)_m) \right\}$$

により与えられる. ここで,

$$S_0 = 0, \ S_n = S_{n-1} + 1 - 2\eta_n \ (\forall n \in \mathbb{N})$$

により、パス $S = (S_n)_{n \in \mathbb{N}_0 = \{0,1,2,...\}}$ を導入する。このとき、箱玉系の時間発展 $T\eta$ に対応するパスは

$$(TS)_n = 2M_n - S_n - 2M_0, (1)$$

で表される。ここで、 M_n はn までに現れたパスの最大値

$$M_n = \sup_{m \le n} S_m.$$

でり、パスSに対する変換Tは"過去の最大値に対する鏡映変換"を表す。この変換(1)は、確率過程の理論においてPitman変換[11]として知られているものである。

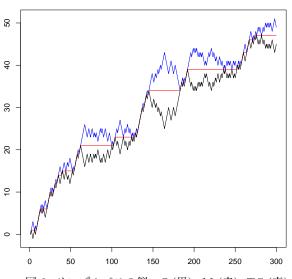


図 2. サンプルパスの例:S(黒), M(赤), TS(青)

箱玉系をパスに対する変換とみなすことで、 玉の数を必ずしも有限に限定しない両側無限列 に対する箱玉系を導入することができる。ここ では、箱玉系の時間発展ルールが定義可能な配 置空間を特徴づけるため、時間反転可能かつ任 意の時刻 $t \in \mathbb{N}$ の時間発展が計算可能となる初 期配列の集合について議論する。



図 3. ランダムな初期配列に対する箱玉系の時間発展の例

さらに、箱玉系の時間発展の下で、ランダムな初期配列に対して分布が不変となるいくつかの十分条件を与える。具体的な例についても口述する予定である。これに関連する先行研究として、箱玉系の玉の密度を1/2未満とした時のベルヌーイ分布の不変性や不変測度に対するソリトン分解などに関する Ferrari らの研究 [10]が報告されており、時間が許せば発表の中で紹介したい。また、単純ランダムウォークのスケール変換の極限からブラウン運動を得ることができ、連続空間上の箱玉系を導入することも可能であり、あわせて紹介する予定である。

- [1] D. Takahashi and J. Satsuma, A soliton cellular automaton, J. Phys. Soc. Japan **59** (1990), 3514–3519.
- [2] D. J. Korteweg and G. de Vries, On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary waves, Philos. Mag. (5) 39 (1895), no. 240, 422–443.
- [3] R. Hirota, Nonlinear partial difference equations I, Journal of Phys. Soc. Japan 43 (1977), 1424–1433.
- [4] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira, and J. Satsuma, From soliton equations to integrable cellular automata through a limiting procedure, Phys. Rev. Lett. 76 (1996), no. 18, 3247–3250.
- [5] S. Tsujimoto and R. Hirota, *Ultra-discrete KdV equation*, J. Phys. Soc. Japan 67 (1998), 1809–1810.
- [6] G. L. Litvinov and V. P. Maslov, The correspondence principle for idempotent calculus and some computer applications, Idempotency (Bristol, 1994),

- Publ. Newton Inst., vol. 11, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998, pp. 420–443.
- [7] T. Kato, Dynamical scale transform in tropical geometry, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2017.
- [8] T. Tokihiro, *Ultradiscrete systems (cellular automata)*, Discrete integrable systems, Lecture Notes in Phys., vol. 644, Springer, Berlin, 2004, pp. 383–424.
- [9] 時弘哲治「箱玉系の数理」朝倉書店 (2010).
- [10] P. Ferrari, C. Nguyen, L. Rolla, and M. Wang, Soliton decomposition of the Box-Ball System, arXiv:1806.02798
- [11] J. W. Pitman, One-dimensional Brownian motion and the three-dimensional Bessel process, Advances in Appl. Probability 7 (1975), no. 3, 511–526.

番号付き・運搬車付き箱玉系のもう1つの一般化

前田一貴

関西学院大学理工学部

e-mail: kmaeda@kmaeda.net

1 概要

箱玉系 [1] は 2 種類の時間発展方程式を持つことが知られている. 1 つは超離散 KdV 方程式であり、その従属変数は各箱に入っている玉の数を表す. もう 1 つは超離散有限戸田格子であり、その従属変数は各玉列・空箱列の長さを表す [2]. 前者を箱玉系の Euler 表現、後者を有限戸田表現と呼ぶことにする. 箱玉系の拡張系である番号付き箱玉系、運搬車付き箱玉系についても同様のことが知られていたが、最近、講演者はさらに、超離散有限ハングリー戸田格子の非自励化を研究し [3]、導出した方程式が既知の番号付きかつ運搬車付き箱玉系 [4] の有限戸田表現を与えていることを示した.

講演者はさらに、双直交多項式のスペクトル変換の両立条件として得られる超離散有限ハングリー戸田格子のもう1つの非自励化についても研究し[5],これが番号付き箱玉系および運搬車付き箱玉系の両者を含む一般化であるが、既知の番号付きかつ運搬車付き箱玉系とは異なるソリトン・セル・オートマトンの有限戸田表現を与えていることを見出した。また、そのEuler表現も非自励離散 KP格子の簡約化により導出することができる(もちろん簡約の仕方は既知のものとは異なる)。本講演ではこのことについて簡単に説明し、さらに(予稿では割愛するが)Euler表現・有限戸田表現の方程式それぞれに対して解を与える。

2 セル・オートマトン

無限の長さを持つテープの上を一方向に動く有限状態機械を考える. 以下ではMをある正整数とする. テープは無限個のセルに分割され,各セルには0からMまでの整数のどれかが書かれている. ただし,そのうち正整数が書かれているセルは有限個であるとする. テープの上を機械がスタート地点から,残りのセルが全て0で書き込むこともなくなるまで動く過程を何度も行い,この反復の回数を時刻tとする.

機械は \mathbb{Z}^{M+1} の元で表される内部状態をもつ. 時刻t+1への読み書き中にn番目のセルを読み 書きする直前の状態を $(V_n^{(0,t)}, V_n^{(1,t)}, \dots, V_n^{(M,t)})$ とする.初期状態は $(0, S^{(t)}, S^{(t)}, \dots, S^{(t)})$ で与える.ここで,時刻 t 毎に与えるパラメータ $S^{(t)}$ は正整数か $+\infty$ であるとする. $V_n^{(k,t)}$ を k の書き換え可能回数と呼ぶ.

初期状態を持つ機械はスタート地点から順に各セルの整数を読み取っていく.n番目のセルから読み取った整数をkとするとき、

- もし $V_n^{(k,t)} \ge 1$ ならば、セルの上のkをk-1 (k=0のときはM) に書き換え、 $V_{n+1}^{(k,t)} = V_n^{(k,t)} 1, V_{n+1}^{(k-1,t)} = V_n^{(k-1,t)} + 1$ とする. ただし、任意のnについて $V_n^{(-1,t)} = V_n^{(M,t)}$ としている.
- もし $V_n^{(k,t)} = 0$ ならば何もしない.

図1も参照.図2はこのルールによる読み書きの繰り返しを時間発展とみなしたときに,得られるテープの例を示している.図の左側のEuler表現から,箱玉系と類似したソリトンの走る様子・相互作用が見てとれる.

3 Euler 表現

このセル・オートマトンの Euler 表現の時間 発展方程式は次で与えられる:

$$U_n^{(k,t+1)} = U_n^{(k,t)} - X_n^{(k,t)} + X_n^{(k+1,t)},$$
(1a)

$$V_{n+1}^{(k,t)} = V_n^{(k,t)} - X_n^{(k,t)} + X_n^{(k+1,t)},$$
 (1b)

$$X_n^{(k,t)} = \min(U_n^{(k,t)}, V_n^{(k,t)}). \tag{1c}$$

ここで, $U_n^{(k+M+1,t)}=U_n^{(k,t)}$ かつ $V_n^{(k+M+1,t)}=V_n^{(k,t)}$ である.各変数の意味は次の通り.

- $U_n^{(k,t)}$: 時刻 t の n 番目のセルに書かれている k の数. k = 0, 1, ..., M のどれかでのみ 1 で、それ以外の k では 0.
- $V_n^{(k,t)}$: 時刻 t への読み書き中に,機械が n 番目のセルに書かれた整数を読み取る 直前の k の書き換え可能回数.

4 有限戸田表現

このセル・オートマトンの有限戸田表現の時間発展方程式は次で与えられる: k=1,2,...,M

 $\underline{0}$ 11123000 0 $\underline{0}$ 1123000 00 $\underline{0}$ 123000 000 $\underline{1}$ 23000 0001 $\underline{1}$ 3000 00011 $\underline{1}$ 3000 000112 $\underline{0}$ 00 0001123 $\underline{0}$ 000112330 000112330 (0,2,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (2,0,2,2) $\xrightarrow{}$ (2,0,2,2) $\xrightarrow{}$ (2,1,1,2) $\xrightarrow{}$ (2,1,2,1) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (0,1,2,3) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,2) $\xrightarrow{}$ (1,1,2,3) $\xrightarrow{}$ (1,2,3) $\xrightarrow{}$

 $Q_0^1 Q_0^2 Q_0^3 E_0^1 Q_1^1 Q_1^2 Q_1^3 E_1^1 Q_2^1 Q_2^2 Q_2^3$ t = 0: .1222333...11223...133....... 1 3 3 3 2 2 1 3 1 0 2 t = 1: ...1122233....11233...223....2 3 2 4 2 1 2 2 0 2 1 2 3 2 4 1 2 2 0 2 1 0 2:1122233....12233112..... $t = 3: \dots 1122233 \dots 1122 \dots 1333 \dots \dots \dots$ $t = 5: \dots 1122233\dots 22311123\dots$ $t = 6: \dots 1122233.112...12333.\dots 2 3 2 1 2 1 0 3 1 1 3$ $t = 8: \dots 112233.2223.11123.\dots 2 2 2 1 0 3 1 1 3 1 1$ $t = 9: \dots 1122311223\dots 12333\dots 22100$ $t = 10: \dots 112..122333.122233.\dots 21021121122333.122233.\dots 21021231132$ $t = 11: \ldots 133.122223.111223.\ldots 10 2 1 1 4 1 1 3 2 1$ $t = 12: \dots 223.111123\dots 122333\dots 0 2 1 1 4 1 1 3 1 2 3$ $t = 13: \ldots 112.\ldots 12333.1222233.\ldots 2 1 0 5 1 1 3 1 1 4 2$ $t = 15: \dots 223 \dots 11123 \dots 1122333 \dots 0 2 1 4 3 1 1 3 2 2 3$

図 2. 提案するセル・オートマトンの(左)Euler 表現と(右)有限戸田表現の時間発展の対応例. $M=3, S^{(t)}=2$ としている. '0' の代わりにピリオド'.'を用いている.

について

$$\tilde{Q}_{n}^{(k,t)} = \min(Q_{n}^{(k,t)}, A_{n}^{(k,t)}),$$
 (2a)

$$\tilde{Q}_{n}^{(M+1,t)} = \min(B_{n}^{(1,t)}, E_{n}^{(1,t)}),$$
 (2b)

$$Q_n^{(k,t+1)} = Q_n^{(k,t)} - \tilde{Q}_n^{(k,t)} + \tilde{Q}_n^{(k+1,t)}, \tag{2c}$$

$$A_{n+1}^{(k,t)} = A_n^{(k,t)} - \tilde{Q}_n^{(k,t)} + \tilde{Q}_n^{(k+1,t)}, \tag{2d}$$

$$E_n^{(1,t+1)} = E_n^{(1,t)} - \tilde{Q}_n^{(M+1,t)} + \tilde{Q}_{n+1}^{(1,t)},$$
 (2e)

$$B_{n+1}^{(1,t)} = B_n^{(1,t)} - \tilde{Q}_n^{(M+1,t)} + \tilde{Q}_{n+1}^{(1,t)}. \tag{2f}$$

ただし、有限格子境界条件は

$$A_0^{(k,t)} = S^{(t)}, (2g)$$

$$B_0^{(1,t)} = \min(Q_0^{(1,t)}, S^{(t)}),$$
 (2h)

$$E_{N-1}^{(1,t)} = +\infty (2i)$$

である. 各変数の意味は次の通り.

- $Q_n^{(k,t)}$: 時刻 t の n 番目の正整数からなる ブロックに書かれている k の数.
- $E_n^{(k,t)}$: 時刻 t の n 番目と n+1 番目の正整数からなるブロックの間にる 0 が書かれたセルの数.
- $A_n^{(k,t)}$: 時刻 t+1への発展において,機械がn番目の正整数からなるブロックに到達する直前のkの書き換え可能回数.
- $B_n^{(k,t)}$: 時刻 t+1への発展において,機械がn番目の正整数からなるブロックを読み書きし終わった直後の0の書き換え可能回数.

5 既知の一般化箱玉系との関係

M=1とすると,(1) は非自励超離散 mKdV 格子,(2) は非自励超離散有限戸田格子となって,運搬車付き箱玉系の時間発展方程式が得られる.また, $S^{(t)}=+\infty$ とすると自励系,つまり(1) は超離散ハングリー KdV 格子,(2) は超離散有限ハングリー戸田格子となって,番号付き箱玉系の時間発展方程式が得られる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17H02858 の助成を受けたものです.

- [1] D. Takahashi and J. Satsuma, *J. Phys. Soc. Japan* **59** (1990) 3514–3519.
- [2] A. Nagai, D. Takahashi and T. Tokihiro, Phys. Lett. A 255 (1999) 265–271.
- [3] K. Maeda, J. Phys. A: Math. Theor. **50** (2017) 365204.
- [4] G. Hatayama, K. Hikami, R. Inoue, A. Kuniba, T. Takagi and T. Tokihiro, *J. Math. Phys.* **42** (2001) 274–308.
- [5] K. Maeda, *J. Integrable Syst.* **3** (2018) xyy007.

時間2階max方程式の解について

山本 惇太郎、 高橋 大輔

早稲田大学 基幹理工学研究科 数学応用数理専攻

e-mail: jmsa.1245@moegi.waseda.jp

1 はじめに

max 表現は ECA などのセルオートマトンの 状態値を実数に拡張するために用いることがあ る。その結果 0,1 などの離散状態値では見えな い解の仕組みが見えるようになる。以前に時間 1 階空間 3 近傍の max 方程式について解の構造 の報告がなされている [1]。本研究では時間の 階数を上げ時間 2 階の max 方程式について解 の構造を分析した。

2 max 演算の公式

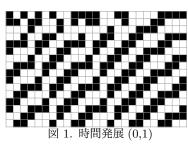
本研究にて用いた max 演算の公式で重要な ものを以下に挙げる [2]。

$$\max(A, \min(A, B)) = A$$
$$\min(A, \max(A, B)) = A$$
$$\max(A_1, \dots, \min(B_1, \dots), \dots) =$$
$$\min(\max(A_1, B_1, \dots), \dots)$$

上記の公式などを用いて複雑な max 方程式の解の表現を簡略化し、その解の構造を解析する。

3 初期値問題

時間 2 階の \max 方程式の例として $u_j^{n+2}=\min(-u_{j-1}^{n+1},-u_j^n)$ を取り上げて説明する。な $\exists u=0,1$ の 2 値に限定する際は従属変数変換 により、-u を 1-u に置き換える。



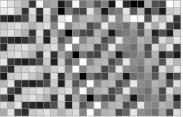


図 2. 時間発展 (実数)

このとき時間発展は初期値を 0,1 に限定した場合は図1のようになり、さらに実数の場合は図2のようになる。初期値からこの式を再帰的に代入し、max 公式で整理していくことでコンパクトな表現の一般解を求めることが可能である。その結果は次のようになる。

$$\begin{split} u_j^2 &= \min(-u_{j-1}^1, -u_j^0) \\ u_j^3 &= \min(-u_{j-1}^2, -u_j^1) \\ &= \min(-\min(-u_{j-2}^1, -u_{j-1}^0), -u_j^1) \\ &= \min(\max(u_{j-2}^1, u_{j-1}^0), -u_j^1) \\ u_j^4 &= \min(-u_{j-1}^3, -u_j^2) \\ &= \min(-\min(\max(u_{j-3}^1, u_{j-2}^0), -u_{j-1}^1), \\ &- \min(-u_{j-1}^1, -u_j^0)) \\ &= \min(\max(-\max(u_{j-3}^1, u_{j-2}^0), u_{j-1}^1), \\ \max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \\ &= \min(\max(\min(-u_{j-3}^1, -u_{j-2}^0), u_{j-1}^1), \\ \max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \\ &= \min(\min(\max(-u_{j-3}^1, u_{j-1}^1), \max(-u_{j-2}^0, u_{j-1}^1)), \\ \max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \\ &= \min(\max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \\ &= \min(\max(-u_{j-3}^1, u_{j-1}^1), \max(-u_{j-2}^0, u_{j-1}^1), \max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \\ &= \min(\max(-u_{j-3}^1, u_{j-1}^1), \max(-u_{j-2}^0, u_{j-1}^1), \max(u_{j-1}^1, u_j^0)) \end{split}$$

 $-\min$ と $-\max$ をそれぞれ \max と \min に置き換え、下線部で \max と \min の入れ替えを行っている。以下同様の手続きで時間発展を考えると、無視できる項を削除することにより、一般解は $n \geq 1$ で以下となる。

$$\begin{split} u_j^2 &= \min(-u_{j-1}^1, -u_j^0) \\ u_j^{3n} &= \min(\max(u_{j-n-1}^1, u_{j-n}^0), -u_{j-n+1}^1) \\ u_j^{3n+1} &= \min(\max(-u_{j-n-2}^1, u_{j-n}^1), \max(-u_{j-n-1}^0, u_{j-n}^1), \\ \max(u_{j-n}^1, u_{j-n+1}^0)) \\ u_j^{3n+2} &= \min(\max(u_{j-n-3}^1, u_{j-n-2}^0, -u_{j-n}^1), \max(-u_{j-n}^0, u_{j-n+1}^1), -u_{j-n-1}^1) \end{split}$$

この周期3で右へずれていく解は時間1階の方程式では知られていない。

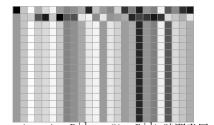


図 3. $\min(\max(-u_{i-1}^{n+1}, -u_i^n), u_i^{n+1})$ 時間発展 (実数)

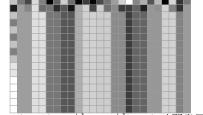


図 4. $\min(\max(-u_{j-1}^{n+1}, -u_j^{n+1}), u_j^n)$ 時間発展 (実数)

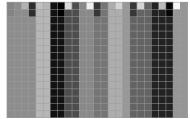


図 5. ECA19 時間発展 (実数)

4 解の例

他の解の例を紹介する。図3は $\min(\max(-u_{j-1}^{n+1}, -u_j^n), u_j^{n+1})$ の時間発展であり、同様に初期値から再帰的に代入し整理すると以下となる。

$$u_j^2 = \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^0), u_j^1)$$
 $u_j^{n+2} = \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1), u_j^0)$ $u_j^3 = \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1), u_j^2)$ n が奇数時は、
$$= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-2}^1), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^0), u_j^1)$$
 $u_j^{n+2} = \min(\max(-u_{j-1}^0, -u_j^0, u_{j-1}^1), u_j^0)$ $u_j^4 = \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^0), u_j^1)$ 図 5 のように ECA においても偶奇で交互に解
$$= \min(\max(\min(u_{j-2}^1, u_{j-1}^1, -u_{j-3}^1), \min(u_{j-2}^1, i_{j-1}^1, i_{j-1}^1), u_j^1)$$
 以決まる時間発展は現れる。このように時間に $u_{j-1}^1, -u_{j-2}^0, \min(u_{j-2}^1, u_{j-1}^0, -u_{j-1}^1, \min(u_{j-1}^1, i_{j-1}^1, i_{j-1}^1), u_j^2)$ う変化するのかを本研究では紹介する。
$$= u_j^3$$
 参考文献

よって一般解は、

$$\begin{split} u_j^2 &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^0), u_j^1) \\ u_j^{n+2} &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-2}^1), \max(-u_{j-1}^1, \\ &- u_j^1, u_{j-1}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^0), u_j^1) (n \geq 1) \end{split}$$

このようにn=2の場合のみ解が異なるケース も現れる。一方で、図4は $\min(\max(-u_{j-1}^{n+1}, -u_{j}^{n+1}),$

 u_i^n) の時間発展であり、整理すると以下となる。

$$\begin{split} u_j^2 &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1), u_j^0) \\ u_j^3 &= \min(\max(-u_{j-1}^2, -u_j^2), u_j^1) \\ &= \min(\max(\min(u_{j-2}^1, u_{j-1}^1), -u_{j-1}^0, \min(u_{j-1}^1, u_{j}^1), -u_j^0), u_j^1) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^0, -u_j^0, u_{j-1}^1), u_j^1) \\ u_j^4 &= \min(\max(-u_{j-1}^3, -u_j^3), u_j^2) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-2}^0, u_{j-1}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-2}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-2}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-1}^0, u_{j}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_j^1, u_{j-1}^0, u_{j}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1, -u_{j-2}^1, u_{j-1}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1, -u_{j-2}^1, u_{j-1}^0), \max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1, u_{j}^0) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1, -u_{j}^1, -u_{j}^1, -u_{j-2}^1), \max(-u_{j-1}^1, -u_{j-1}^1, -u_{j-1}^1, u_{j}^0) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1), u_j^0) = u_j^2 \\ u_j^5 &= \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_{j}^1), u_j^0) = u_j^2 \\ u_j^5 &= \min(\max(-u_{j-1}^2, -u_{j}^2), u_{j}^3) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^2, -u_{j}^2), u_{j-1}^3), \max(-u_{j-1}^0, -u_{j-1}^0, u_{j-1}^1), \max(-u_{j-1}^0, -u_{j}^0, u_{j-1}^1, u_{j}^1), \max(-u_{j-1}^0, -u_{j}^0, u_{j-1}^1, u_{j}^1) \\ &= \min(\max(-u_{j-1}^0, -u_{j}^0, u_{j-1}^1, u_{j}^1), u_j^1) = u_j^3 \end{split}$$

この場合の一般解はn が偶数時は,

$$u_j^{n+2} = \min(\max(-u_{j-1}^1, -u_j^1), u_j^0)$$

n が奇数時は.

$$u_j^{n+2} = \min(\max(-u_{j-1}^0, -u_j^0, u_{j-1}^1), u_j^1)$$

図5のように ECA においても偶奇で交互に解

- [1] T.Ikegami, D.Takahashiand J.Matsukidaira, "On solutions to evolution equations defined by lattice operators", Japan J. Indust. Appl. Math. (2014) 31:211-230".
- [2] 広田良吾・高橋大輔,『差分と超離散』, 共立出版,2003

Laurent 双直交多項式に付随する可積分系とその正値解について

小林 克樹 1 , 辻本 諭 2 , 前田 一貴 3

1.2 京都大学大学院情報学研究科, 3 関西学院大学 理工学部

e-mail: kobayashi.katsuki.74a@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

可積分系と(双)直交関数系の間には密接な関係がある[1,2]. 例えば直交多項式のスペクトル変換から,可積分系の代表である離散戸田方程式が導出されることは良く知られている. その他にも様々な直交性を持つ関数系から,対応する可積分系が導出されている[3]. 本発表では Laurent 双直交多項式を用いて正値性を持った離散可積分系を導出し,その正値解を構成する. またこの可積分系が,ある行列に対する一般化固有値計算アルゴリズムとなっていることを示す. さらにこの可積分系の超離散化とソリトン・セルオートマトン(SCA)の関係について述べる.

2 Laurent 双直交多項式に付随する離散 可積分系

 $\mathbb{C}[z,z^{-1}]$ を \mathbb{C} 上の Laurent 多項式全体からなる線型空間とし, $\mathcal{L}:\mathbb{C}[z,z^{-1}]\to\mathbb{C}$ を線型汎関数とする. このとき多項式列 $\Phi_n(z)$, $\Psi_n(z)\in\mathbb{C}[z]$ (n=0,1,...) で

- 1) $\Phi_n(z)$ および $\Psi_n(z)$ はそれぞれモニック n 次多項式,
- 2) $\mathcal{L}[\Phi_n(z)\Psi_m(z^{-1})] = h_n\delta_{n,m}, \quad h_n \neq 0,$ を満たすものを, \mathcal{L} に関する Laurent 双直交多項式 (LBP) と呼ぶ. 汎関数に対して時間変数 k

$$\mathcal{L}^{(k+1)}[P(z)] = \mathcal{L}^{(k)}[zP(z)],$$

により導入する.

 $\Phi_n^{(k)}(z)$, $\Psi_n^{(k)}(z)$ を $\mathcal{L}^{(k)}$ に関する LBP とすると, これらの多項式は次の関係式をみたす:

$$z\Phi_n^{(k+1)}(z) = \Phi_{n+1}^{(k)}(z) + q_n^{(k)}\Phi_n^{(k)}(z),$$
 (1)

$$\Phi_{n+1}^{(k+1)}(z) = \Phi_{n+1}^{(k)}(z) - e_n^{(k)}\Phi_n^{(k)}(z). \tag{2}$$

関係式(1),(2)の両立条件から非線形な方程式

系,

$$\begin{aligned} q_n^{(k+1)} + e_{n-1}^{(k+1)} &= q_n^{(k)} + e_n^{(k)}, \\ q_n^{(k+1)} e_{n-1}^{(k)} &= q_{n-1}^{(k)} e_{n-1}^{(k+1)}, \\ e_{-1}^{(k)} &= 0, \end{aligned} \tag{3}$$

を得る. (3) に境界条件 $e_{N-1}^{(k)}=0$ を導入し, さらに補助変数 $d_n^{(k)}:=q_n^{(k)}+e_{n-1}^{(k)}$ とおくと, (3) と等価な方程式系

$$d_n^{(k+1)} = q_n^{(k)} + e_n^{(k)},$$

$$e_n^{(k+1)} = e_n^{(k)} \frac{d_{n+1}^{(k+1)}}{d_n^{(k+1)}},$$

$$q_n^{(k+1)} = q_{n-1}^{(k)} \frac{d_n^{(k+1)}}{d_{n-1}^{(k+1)}},$$

$$e_{-1}^{(k)} = e_{N-1}^{(k)} = 0,$$

$$(4)$$

を得る. 我々は方程式系(4)の解の族

$$\tau_n^{(k)} = \sum_{0 \le r_0 < r_1 < \dots < r_{n-1} \le N-1} \prod_{j=0}^{n-1} w_{r_j} z_{r_j}^{k-n+1} \prod_{0 \le i < j \le n-1} (z_{r_j} - z_{r_i})^2,$$
(5)

$$q_n^{(k)} = \frac{\tau_{n+1}^{(k+1)}\tau_n^{(k)}}{\tau_{n+1}^{(k)}\tau_n^{(k+1)}}, \quad e_n^{(k)} = \frac{\tau_{n+2}^{(k+1)}\tau_n^{(k)}}{\tau_{n+1}^{(k+1)}\tau_{n+1}^{(k)}}, \quad d_n^{(k)} = \frac{\tau_n^{(k-1)}\tau_{n+1}^{(k+1)}}{\tau_{n+1}^{(k)}\tau_n^{(k)}},$$

を得た. 解 (5) に含まれるパラメータ w_0 , w_1 , ..., w_{N-1} , z_0 , z_1 , ..., z_{N-1} を全て正に選ぶことによって (4) の正値解が得られる. また z_0 , z_1 , ..., z_{N-1} が $0 < z_0 < z_1 < ... < z_{N-1}$ を満たすとき,

$$\lim_{k \to \infty} q_n^{(k)} = z_{r_{N-1-n}} \tag{6}$$

$$\lim_{k \to \infty} e_n^{(k)} = 0 \tag{7}$$

が示せる.

3 一般化固有値計算アルゴリズム

離散可積分系(4)は二重対角行列に対する一般化固有値計算アルゴリズムとして解釈できる. 関係式(1),(2)はベクトルと行列を用いて,

$$z\mathbf{\Phi}^{(k+1)} = R^{(k)}\mathbf{\Phi}^{(k)} + \mathbf{\Phi_N}^{(k)},$$
 (8)

$$\mathbf{\Phi}^{(k)} = L^{(k-1)}\mathbf{\Phi}^{(k-1)},\tag{9}$$

とかける. ただし,

$$\begin{split} R^{(k)} &:= \begin{pmatrix} q_0^{(k)} & 1 & & & \\ & q_1^{(k)} & 1 & & & \\ & & q_2^{(k)} & 1 & & \\ & & & Q_2^{(k)} & 1 & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & Q_{N-1}^{(k)} \end{pmatrix}, \\ L^{(k)} &:= \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ -e_0^{(k)} & 1 & & & & \\ & & -e_1^{(k)} & 1 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & -e_{N-2}^{(k)} & 1 \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{\Phi}^{(k)} &:= \begin{pmatrix} \Phi_0^{(k)} & & & \\ \Phi_1^{(k)} & & & & \\ \vdots & & \Phi_{N-1}^{(k)} & & & \\ \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Phi}_{\mathbf{N}}^{(k)} &:= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ 0 & & & \\ \vdots & & & \Phi_N^{(k)} \end{pmatrix}, \end{split}$$

であり, $q_0^{(0)}$,..., $q_{N-1}^{(0)}$ および $e_0^{(0)}$,..., $e_{N-2}^{(0)}$ は全て正の実数であるとする. (8), (9) の両立条件は

$$R^{(k+1)}L^{(k)} = L^{(k+1)}R^{(k)}$$
 (10)

とかける. (10) は離散可積分系 (3) と等価である. ここで, 次の一般化固有値問題を考える:

$$\lambda L^{(0)}v = R^{(0)}v, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \ v \in \mathbb{R}^N \tag{11}$$

 $X^{(k)}:=zL^{(k)}-R^{(k)}$ とおくと、、(10)と $\det L^{(k)}=1$ から、、 $\det X^{(k+1)}=\det X^{(k)}$ が示される.これは、、(11) の一般化固有値が(4)による時間発展で保存することを意味する.一方、(6)と(7)から、 $k\to +\infty$ で $R^{(k)}$ の対角成分は左上から $z_{N-1},z_{N-2},...,z_0$ に収束し、 $L^{(k)}$ は単位行列に収束することがわかる.以上より、(11)の一般化固有値 $z_0,z_1,...,z_N-1$ を計算する手続きが与えられた.

4 超離散化

(4) の超離散化により超離散方程式系,

$$D_n^{(k+1)} = \min \left(Q_n^{(k)}, E_n^{(k)} \right),$$

$$E_n^{(k+1)} = E_n^{(k)} + D_{n+1}^{(k+1)} - D_n^{(k+1)},$$

$$Q_n^{(k+1)} = Q_{n-1}^{(k)} + D_n^{(k+1)} - D_{n-1}^{(k+1)},$$

$$E_0^{(k)} = E_{N-1}^{(k)} = +\infty, \quad Q_0^{(k)} = 0,$$
(12)

が得られる. (12) の解は(5) の超離散化によって,

$$T_n^{(k)} = \min_{0 \le r_0 < \dots < r_{n-1} \le N-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} \left(W_{r_j} + (k-n+1) Z_{r_j} \right) + \sum_{0 \le i < j \le n-1} 2 Z_{r_j} \right),$$

$$\begin{split} Q_n^{(k)} &= T_{n+1}^{(k+1)} + T_n^{(k)} - T_{n+1}^{(k)} - T_n^{(k+1)}, \\ E_n^{(k)} &= T_{n+2}^{(k+1)} + T_n^{(k)} - T_{n+1}^{(k+1)} - T_{n+1}^{(k)}, \\ D_n^{(k)} &= T_n^{(k-1)} + T_{n+1}^{(k+1)} - T_{n+1}^{(k)} - T_n^{(k)}. \end{split} \tag{13}$$

と与えられる. 次に超離散方程式 (12) と SCA の関係について説明する. 0 と 1 から成る片側無限列 $u_n \in \{0,1\}$, (n=1,2,...) で, $u_n=0$ $(n\gg 1)$ となるものを考える. 列 u_n において 1 が連続する部分をブロックと呼ぶ. 時間発展 $u_n=:u_n^{(0)}\to u_n^{(1)}$ を以下の規則で定める.

- 1) 左から1番目のブロックの1を,1番目と 2番目のブロックの間にある0と交換で きるだけ交換する。このとき交換できな かった1は保留しておく.
- 2) ステップ1を全てのブロックについて行 う
- 3) 左からi番目のブロックで保留した1をi+1のブロックに全て移す.

図1はこのSCAの時間発展例である.

 $u^{(0)}$: 11110000111000010000000000 $u^{(1)}$: 0000111100011100100000000 $u^{(2)}$: 0000000111001110110000000 $u^{(3)}$: 00000000011011001111000000 $u^{(4)}$: 0000000001001111000011110

このとき,変数 $Q_n^{(k)}$, $E_n^{(k)}$ を

- Q_n^(k):時刻 k における左から n 番目のブロックの玉の個数
- $E_n^{(k)}$:時刻 k における左から n 番目と n+1 番目のブロックの間の空き箱の個数と定めると, 超離散方程式系 (12) は上記 SCAの時間発展を記述していることがわかる.

- [1] V. Spiridonov and A. Zhedanov, Discrete Darboux transformations, the discrete time Toda lattice, and Askey-Wilson polynomials, *Methods Appl. Anal.* **2** (1995), 369–398.
- [2] K. Maeda, Nonautonomous ultradiscrete hungry Toda lattice and a generalized boxball system, *J. Phys. A* **50** (2017), 365204.
- [3] 前田一貴, 三木 啓司, 辻本 諭, 直交多項 式理論からみえてくる可積分系, 日本応 用数理学会論文誌 **23** (2013), 341380.

超収束する HDG 法の開発

及川 一誠

早稲田大学理工学術院

e-mail: oikawa@aoni.waseda.jp

1 はじめに

モデル問題として、以下の連立系の Poisson 方程式を考える.

$$q + \nabla u = 0 \text{ in } \Omega,$$

 $\nabla \cdot q = f \text{ in } \Omega,$
 $u = 0 \text{ on } \partial \Omega.$

ここで, $\Omega \subset \mathbb{R}^d (d=2,3)$ は有界な凸多角形あるいは多面体領域とし, $f \in L^2(\Omega)$ は与えられた関数とする。 Ω の多角形あるいは多面体分割を T_h と表し, T_h の各要素 K の辺あるいは面の集合を \mathcal{E}_h と表す。辺あるいは面の和集合を $\bigcup_{K \in \mathcal{E}_h} e$ (skeleton と呼ぶ)を,本来は区別されるべきであるが,簡単のため同じ記号を用いて \mathcal{E}_h と表す。 区分 Sobolev 空間を $H^k(T_h)$ と表し,skeleton 上の L^2 空間を $L^2(\mathcal{E}_h)$ と表す。

通常の混合有限要素法では、u, q の近似関数 u_h , q_h を導入するが,Hybridizable Discontinuous Galerkin (HDG) 法では,さらにu の \mathcal{E}_h 上へのトレースに対する近似関数 \hat{u}_h (数値トレース)を用いる.HDG 法の近似解は以下の方程式の解として定義される:Find $(q_h,u_h,\hat{u}_h) \in V_h \times W_h \times M_h$ such that, for all $(v,w,\mu) \in V_h \times W_h \times M_h$,

$$(\boldsymbol{q}_h, \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} - (u_h, \nabla \cdot \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{u}_h, \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0,$$

 $-(\boldsymbol{q}_h, \nabla w)_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0,$
 $\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0.$

ただし、 \hat{q}_h は数値流束 (numerical flux) と呼ばれるもので、安定化パラメータ $\tau > 0$ を用いて、以下のように定義される.

$$\widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{q}_h \cdot \boldsymbol{n} + \tau (u_h - \widehat{u}_h). \tag{1}$$

さらに, 内積の記号は

$$(w, v)_{\mathcal{T}_h} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K wv dx,$$
$$\langle w, v \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} wv ds$$

と定義されているものとし,各近似空間は以下 のように定義されているとする.

$$W_h = \{ w \in H^1(\mathcal{T}_h) : w|_K \in W(K) \forall K \in \mathcal{T}_h \},$$

$$V_h = \{ v \in H^1(\mathcal{T}_h)^d : v|_K \in V(K) \forall K \in \mathcal{T}_h \},$$

$$M_h = \{ \mu \in L^2(\mathcal{E}_h) : \mu|_e \in M(e) \forall e \in \mathcal{E}_h \}.$$

ただし、W(K)、V(K) は各要素 K ごとに定義 された有限次元空間、M(e) は各辺あるいは面 ごとに定義された有限次元の関数空間とする. 通常は、一様な k 次多項式が用いられる.

HDG法においては,定式化の際には u_h , \mathbf{q}_h , \widehat{u}_h の 3 つを未知関数として用いるが,各要素ごとに u_h と \mathbf{q}_h は消去することができ,最終的には \widehat{u}_h のみの離散化方程式が得られる(静的縮小法).これにより,係数行列のサイズは不連続Galerkin 法に比べてかなり小さくなる.詳細については [1] あるい [2, 3] などを参照されたい.

2 HDG 法の超収束性

HDG 法はある特定の場合,例えば T_h は三角形分割かつ V_h , W_h , M_h として区分 k 次多項式を用い, $\tau = O(1)$ と選択した場合,以下の意味で超収束性を示すことが知られている [5]: ある射影 Π_V および Π_W が存在し,以下の不等式が成り立つ.

$$\|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}_h\| \le 2\|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{\Pi}_V \boldsymbol{q}\|,$$

$$\|\boldsymbol{\Pi}_W \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_h\| \le Ch\|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{\Pi}_V \boldsymbol{q}\|.$$

この結果はより一般化され,M-decomposition という概念が得られている [4]. M-decomposition 理論は HDG 法が超収束するための十分条件を等式の形で与えており, V_h, W_h, M_h がその等式をみたせば,逐一誤差解析を行うことなく,HDG 法が超収束することがわかる.さらに,与えられた V_h, W_h, M_h に対して,HDG 法が収束しない場合でも,場合によっては,M-decomposition 理論の等式をみたすように V_h を適切に拡大することで新たな超収束する HDG 法を導出することも可能である.

3 Lehrenfeld-Schöberl stabilization

超収束 HDG 法は、上で述べた M-decomposition 理論による手法の他に、安定化項に M_h への L^2 直交射影 P_M を施すことによっても得られることがわかっている。具体的には、数値流束を次のように定義する:

$$\widehat{\boldsymbol{q}}_h^{LS} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{q}_h \cdot \boldsymbol{n} + \tau (P_M u_h - \widehat{u}_h).$$

ただし、安定化パラメータは $\tau = O(1/h)$ と選ぶこととする。この安定化はしばしば Lehrenfeld-Schöberl (LS) stabilization [6] と呼ばれる。これにより、任意の多角形あるいは多面体要素に関して、超収束する HDG 法が得られる。誤差解析は [7] で示されている。 [8] では LS stabilization を一般化したスキームが提案されている。

4 数値流束が未知関数の HDG 法

従来の HDG 法では、ハイブリッドの未知関数を数値トレース \widehat{u}_h に選んでいたが、[9] では、 \widehat{u}_h の代わりに数値流束 \widehat{q}_h を用いる方法が述べられている: Find $(\boldsymbol{q}_h,u_h,\widehat{q}_h)\in \boldsymbol{V}_h\times W_h\times \boldsymbol{N}_h$ such that, for all $(\boldsymbol{v},w,\boldsymbol{\rho})\in \boldsymbol{V}_h\times W_h\times \boldsymbol{N}_h$,

$$(\boldsymbol{q}_h, \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} - (u_h, \nabla \cdot \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{u}_h, \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0,$$
$$-(\boldsymbol{q}_h, \nabla w)_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0,$$
$$\langle \widehat{u}_h \cdot \boldsymbol{n}, \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0.$$

ただし、 $N_h = \{ \boldsymbol{\rho} \in L^2(\Omega)^d : (I - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n}) \boldsymbol{q}_h = 0 \}$ と定義し、 \hat{u}_h は未知関数ではなく、 $\hat{u}_h := u_h + \tau^{-1} (\boldsymbol{q}_h - \hat{\boldsymbol{q}}_h) \cdot \boldsymbol{n}$. と定める.本講演では \hat{u}_h と $\hat{\boldsymbol{q}}_h$ の両方が未知関数であるような HDG 法を提案する:

Find $(\boldsymbol{q}_h, u_h, \widehat{u}_h, \widehat{\boldsymbol{q}}_h) \in \boldsymbol{V}_h \times W_h \times M_h \times \boldsymbol{N}_h$ s.t., for all $(\boldsymbol{v}, w, \mu, \boldsymbol{\rho}) \in \boldsymbol{V}_h \times W_h \times M_h \times \boldsymbol{N}_h$,

$$(\boldsymbol{q}_{h},\boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_{h}} - (u_{h},\nabla\cdot\boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_{h}} + \langle \widehat{u}_{h},\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_{\partial\mathcal{T}_{h}} = 0,$$

$$-(\boldsymbol{q}_{h},\nabla\boldsymbol{w})_{\mathcal{T}_{h}} + \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_{h}\cdot\boldsymbol{n},\boldsymbol{w}\rangle_{\partial\mathcal{T}_{h}} = 0,$$

$$\langle \tau(u_{h}-\widehat{u}_{h}) + (\boldsymbol{q}_{h}-\widehat{\boldsymbol{q}}_{h})\cdot\boldsymbol{n},\mu\rangle_{\partial\mathcal{T}_{h}} = 0,$$

$$\langle \tau(u_{h}-\widehat{u}_{h}) + (\boldsymbol{q}_{h}-\widehat{\boldsymbol{q}}_{h})\cdot\boldsymbol{n},\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_{\partial\mathcal{T}_{h}} = 0.$$

さらに、FreeFem++による数値計算結果についても述べる.

参考文献

[1] B. Cockburn, J. Gopalakrishnan and R. Lazarov, 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, 2017, 27巻, 1号, 36-41, https://doi.org/10.11540/bjsiam.27.1_36.
- [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, 2017, 27巻, 2号, 32-37, https://doi.org/10.11540/bjsiam.27.2_32.
- [4] B. Cockburn, G. Fu and F-J, Sayas, Superconvergence by M-decompositions. Part I: General theory for HDG methods for diffusion. Math. Comp. 86 (2017), 1609–1641.
- [5] B. Cockburn, W. Qiu and K. Shi, Conditions for superconvergence of HDG methods for second-order elliptic problems, Math. Comp. 81 (2012), 1327–1353.
- [6] C. Lehrenfeld, Hybrid discontinuous Galerkin methods for solving incompressible flow problems. Master's Thesis, RWTH Aachen University (2010).
- [7] I. Oikawa, A hybridized discontinuous Galerkin method with reduced stabilization. J. Sci. Comput. 65 (2015), 327–340.
- [8] I. Oikawa, An HDG Method with Orthogonal Projections in Facet Integrals.J. Sci. Comput. 76 (2018), 1044–1054.
- [9] B. Cockburn, Static condensation, hybridization, and the devising of the HDG methods, Building bridges: connections and challenges in modern approaches to numerical partial differential equations, Lect. Notes Comput. Sci. Eng., 114, Springer, 2016, 129–177.

非定常性を考慮した熱弾性場の形状最適化

○片峯 英次 1, 広瀬 智史 2

1 岐阜工業高等専門学校 機械工学科, 2 岐阜工業高等専門学校 専攻科学生

e-mail: katamine@gifu-nct.ac.jp

1 はじめに

熱伝導場と弾性場を連成させた熱弾性場の形状最適化は、工作機械あるいは電子機器等の熱変形を伴う機器の形状設計における重要課題の一つである.

本研究では、これまでに著者らによって検討されてきた定常熱弾性場の形状最適化問題 [1][2][3] を非定常問題へ拡張する。本論文では、任意時間内において剛性が最大となるように形状を決定する問題を取り上げ、平均コンプライアンス最小化問題について定式化を行い、形状更新のための感度となる形状勾配関数を理論的に導出する。導出した形状勾配関数に基づき、力法 [4] (あるいは H^1 勾配法)を適用し、Freefem++を利用して解析した数値解析結果を紹介する。

2 平均コンプライアンス最小化問題

2.1 問題の定式化

 $\mathbb{R}^d(d=2,3)$ の熱弾性場領域 Ω は境界 $\Gamma=\Gamma_\phi\cup\Gamma_q\cup\Gamma_h=\Gamma_P\cup\Gamma_U$ から構成されている. 時間 [0,T] における非定常熱弾性場において, 温度分布 ϕ と熱変位分布 u としたときの剛性最大化を目的とした平均コンプライアンス最小化問題を考える. 領域の大きさの上限値を M に制限した形状最適化問題は次のようになる.

Given M and

$$k, \phi_o, q, h, \phi_f, Q, C, u_o \alpha, P, f$$
find Q

find Ω (:

that minimizes $\int_0^T \left\{ a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(u)) + l_{\varepsilon}(u) \right\} dt$ (3)

subject to

$$\int_{0}^{T} \left\{ b(\phi_{,t},\varphi) + a_{\phi}(\phi,\varphi) - l_{\phi}(\varphi) \right\} dt = 0$$

$$\phi \in \Phi_{t} \quad \forall \varphi \in \Psi_{t}$$
(4)

$$\int_0^T \left\{ a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v)) - a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(v)) - l_{\varepsilon}(v) \right\} dt = 0$$

$$u \in U_t \quad \forall v \in V_t \tag{5}$$

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

式 (4) は熱伝導場,式 (5) は熱弾性場における支配方程式の弱形式であり, φ は随伴温度,v

は随伴変位を表している. 支配方程式における それぞれの項は次のように定義されている.

$$b(\phi_{,t},\varphi) = \int_{\Omega} \phi_{,t} \varphi \, dx, \tag{7}$$

$$a_{\phi}(\phi,\varphi) = \int_{\Omega} k\phi_{,j}\varphi_{,j} \, dx + \int_{\Gamma_{b}} h\phi\varphi \, d\Gamma, \qquad (8)$$

$$l_{\phi}(\varphi) = \int_{\Omega} Q\varphi \, dx + \int_{\Gamma_h} h \phi_f \varphi \, d\Gamma - \int_{\Gamma_q} q\varphi \, d\Gamma,$$
(9)

ここで,

$$a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v)) = \int_{\Omega} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(u) \varepsilon_{ij}(v) dx,$$
(10)

$$a_{\varepsilon\phi}(\phi,\varepsilon(v)) = \int_{\Omega} C_{ijkl}\phi\alpha_{kl}\varepsilon_{ij}(v) dx, \quad (11)$$

$$\varepsilon_{ij}(u) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \tag{12}$$

$$l_{\varepsilon}(u) = \int_{\Omega} f_i u_i \, dx + \int_{\Gamma_P} P_i u_i \, d\Gamma. \tag{13}$$

k は熱伝導率, ϕ_o は温度,q は熱流束,h は熱 伝達率, ϕ_f は既知境界温度,Q は発熱量,C は 剛性テンソル, u_o は変位, α は熱膨張係数テ ンソル,P は表面力,f は体積力を表している.

2.2 形状勾配

この問題は Lagrange 乗数法,あるいは随伴変数法によって制約条件のない停留化問題に書(2) き換えることができる. Lagrange 関数 L を定義し、領域の変動に対する L の導関数 \dot{L} を計算して停留条件を導くと、

$$\int_0^T \left\{ b(\phi_{,t}, \varphi') + a_{\phi}(\phi, \varphi') - l_{\phi}(\varphi') \right\} dt = 0$$
(14)

$$\int_{0}^{T} \left\{ a_{\varepsilon}(\varepsilon(u), \varepsilon(v')) - a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(v')) - l_{\varepsilon}(v') \right\} dt = 0$$
(15)

$$\int_{0}^{T} \left\{ b(\phi'_{,t},\varphi) + a_{\phi}(\phi',\varphi) - a_{\varepsilon\phi}(\phi',\varepsilon(u)) - a_{\varepsilon\phi}(\phi',\varepsilon(v)) \right\} dt = 0$$
(16)

$$\int_{0}^{T} \left\{ a_{\varepsilon}(\varepsilon(u'), \varepsilon(v)) \right\} dt$$

$$- \int_{0}^{T} \left\{ a_{\varepsilon\phi}(\phi, \varepsilon(u')) + l_{\varepsilon}(u') \right\} dt = 0 \quad (17)$$

$$\Lambda \ge 0, \quad \int_{\Omega} dx \le M, \quad \Lambda(\int_{\Omega} dx - M) = 0 \quad (18)$$

ただし,(・) は物質導関数,(・)' は空間座標に固定した分布関数の領域変動に対する導関数 (形状導関数) を表し, Λ は領域制約のための Lagrange 乗数である.ここで,弾性場の支配 方程式 (15) と随伴弾性場の支配方程式 (17) を比較すると,自己随伴関係 u=v が成立し,式 (16) は次のようになる.

$$\int_0^T \left\{ b(\phi'_{,t},\varphi) + a_{\phi}(\phi',\varphi) - 2a_{\varepsilon\phi}(\phi',\varepsilon(u)) \right\} dt = 0 (19)$$

またこの問題に対する形状修正のための分布 系感度を表す形状勾配密度 G は次のように導 出できる.

$$G = G_0 + G_1 \Lambda,$$

$$G_0 = \int_0^T \left\{ 2C_{ijkl} \phi \alpha_{kl} \varepsilon_{ij}(u) + 2f_i u_i - \frac{\partial \phi}{\partial t} \varphi \right.$$

$$\left. -k\phi_{,i} \varphi_{,j} + Q\varphi - C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(u) \varepsilon_{ij}(u) \right\} dt$$
 (21)
$$G_1 = 1$$
 (22)

 G_0 および G_1 はそれぞれ平均コンプライアンス最小化、および領域の大きさ制約に対する形状勾配密度を表す.

このようにして形状勾配関数を導出できれば、 力法を適用することが可能になる.

3 解析例

図1に示す曲がり梁モデルに対して解析を 行った. 熱伝導解析の境界条件は, 既知温度境 界 Γ_{ϕ} を設け、 ϕ =273[K] とし、熱伝達境界 Γ_{h} を設け、熱伝達率 $h=300[W/m^2 \cdot K]$ 、外気温度 623[K] として、その他の境界は断熱境界とし た. 熱弾性解析の境界条件は, 下面境界を完全 拘束とした. 設計境界を穴境界の断熱境界に設 定した. 簡単のため、表面力、体積力は無視 した. 平面ひずみ問題と仮定し、領域の大きさ 制約は、初期形状の面積以下に設定した。材料 特性は縦弾性係数を 210[GPa], ポアソン比を 0.3[-], 熱膨張係数を $\alpha=1.2\times10^{-5}[\mathrm{m/m\cdot K}]$, 熱伝導率を $50[W/m^2 \cdot K]$ とした。時間 [0,T]に関して、 $T=1 \times 10^{-3} [s] (Case:A)$ と $T=1 \times$ 10⁻²[s](Case:B) に対する最適形状を図 2 に示 す. 設定した時間 [0,T] に応じて異なった最適

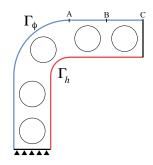
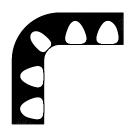
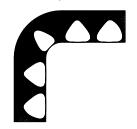


図 1. Numerical model



(a) Case:A $(T=1 \times 10^{-3}[s])$



(b) Case:B $(T=1 \times 10^{-2}[s])$

図 2. Results: Optimum shapes

形状が得られていることが確認できる. 最適形状では, 面積一定の下, 初期値を 100%とした式(3)の平均コンプライアンスの値は, Case:A, Case:B に対して, それぞれ約 45%, 約 30%まで減少し収束した.

謝辞 本研究の一部は平成 29 年度公益財団法 人 小川科学技術財団の助成を受けて行われた.

- [1] E. Katamine et al., International Journal of Computational Methods, Vol.3, No.3 (2006), pp. 279-293.
- [2] 片峯英次, 他 4 名, 日本機械学会論文集 C編, Vol. 77, No. 783, (2011), pp.4015-4023.
- [3] 片峯英次,新井雄斗,日本機械学会論文集, Vol. 83, No. 845, (2017), 13pages.
- [4] 畔上秀幸, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 60, No. 574 (1994), pp. 1479-1486.

Development of Dynamic Loading Module in FreeFem++ for Obtaining a System of Linear Equations

Hiroshi Fujiwara¹, Frédéric Hecht²

¹Kyoto University, ²University Pierre and Marie CURIE e-mail : fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 Introduction

FreeFem++[1] is an integrated numerical computation environment to treat partial differential equations by finite element methods. For a linear PDE written in a weak formulation, simple commands performs (1) mesh generation on the domain, (2) discretization in specified finite element spaces, (3) solving systems of linear equations, and (4) visualization of numerical solutions. In the process, solving the system of linear equations (3) requires large computational resources (time and memory). Although MPI (Message Passing Interface) is equipped with FreeFem++ for the sake of parallel computation, the use of other parallel computation environments is still efficient to solve large scale discretization problems. The present work shows a dynamic loading module technique to obtain the system of linear equations Ax = b generated in FreeFem++ in Harwell-Boeing file format (HB format)[2] which is one of popular formats to store a sparse matrix.

2 Usage of the Proposed Dynamic Loading Module SaveHB

Figures 1 and 2 show typical examples of the proposed module SaveHB to store real and complex problems respectively. After a declaration of a problem as the verf (variational form) type, FreeFem++ links the module file SaveHB.so (Unix and Linux), SaveHB.dylib (MacOSX), or SaveHB.dll (Windows), which should be located in one of directories listed in the environment variable FF_LOADPATH. Finally the generated matrix A and the vector b are saved to the file filename.hb in HB format with the title given by the fourth argument of the method.

☑ 1. Usage of Proposed Method SaveHB

☑ 2. Usage of SaveHB for Complex Formulation

3 Extending FreeFem++ by Dynamic Loading Modules

FreeFem++ provides dynamic loading module mechanism, with which user can extend the functionalities of FreeFem++. A module is supposed to be written in the programming language C++, and to be complied with ff-c++ command in the FreeFem++ package.

Numerous file formats have been proposed to store a matrix in storage. Among them, we adopt HB format since it is suitable for a sparse matrix A and it can store the vector b together in a single file. HB format adopts the compressed column storage (CCS) format [3] as default, while FreeFem++ holds sparse matrices in compressed row storage (CRS) format. Thus it is required to convert CRS into CCS with manipulating data structures. Figure 3 shows both interface to a CRS matrix

```
#include "ff++.hpp"
                               // provided in FreeFem++ distribution
#include "AFunction_ext.hpp" // provided in FreeFem++ distribution
template <typename R>
long SaveHB(string *const &hb_filename, Matrice_Creuse <R> *const &sparse_mat,
            KN_<R> const &b, string *const &hb_title)
  MatriceMorse <R> *A = sparse_mat->A->to_MatriceMorse();
  const int N = A -> N;
                                    // number of unknowns
                                    // number of equations, assert( N == M )
  const int M = A -> M;
  const int NONZEROS = A->nbcoef; // number of non-zero entries in A
                                      // These three present CRS format.
            *const val
                            = A -> a;
  const int *const col_ind = A->cl; // See [3].
  const int *const row_ptr = A->lg; //
  // b->N(); // length of vector b
  // b[i];
             // i-th element of b
  // converting CRS into HB, and saving HB to file in the standard C++
  delete A;
  return ...;
static void Load_Init()
  {\tt Global.Add("SaveHB", "(", new OneOperator4\_<long, string *,}
    Matrice_Creuse <double >*, KN_ <double >,
    string * >(SaveHB));
  Global.Add("SaveHB", "(", new OneOperator4_<long, string *,
    Matrice_Creuse < std::complex <double > >*, KN_ < std::complex <double > >,
    string * >(SaveHB));
LOADFUNC (Load_Init)
```

図 3. Interface to CRS Matrix in FreeFem++ and Adding Methods as Dynamic Loading Module

in FreeFem++ and the constructor to add implemented C++ functions as dynamic loading modules. We also note that array indices in FreeFem++ (A->cl and A->lg in Fig. 3) start from zero as C++ manner, on the other hand they start from one in HB format as Fortran manners.

Saving it in SaveHB.cpp and compiling it as \$ ff-c++ -std=c++11 SaveHB.cpp

the module file SaveHB.so is obtained.

The implemented source code and samples are available in the examples++-load directory in FreeFem++ v3.61-1 or later.

謝辞 This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers 16H02155 and 18K18719.

- [1] F. Hecht, New development in freefem++, J. Numer. Math., Vol. 20 (2012), 251–265.
- [2] I. Duff, R. Grimes and J. Lewis, Users' Guide for the Harwell-Boeing Sparse Matrix Collection, Technical Report TR/PA/92/86, CERFACS (1992).
- [3] R. Barrett et. al., Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, 1994.

半導体ドリフト拡散方程式での指数関数重み係数の要素積分法

鈴木 厚1

1大阪大学 サイバーメディアセンター

e-mail : atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

半導体問題では静電場に対して電子と正孔分布に関するドリフト拡散方程式を扱う.有限体積法と同様の保存則を満すために,混合型有限要素法近似を用いる.電子/正孔密度分布とその勾配の要素剛性行列は静電場に指数関数で依存する係数関数の積分が必要である.FreeFem++が備える多項式オーダーの数値積分公式では近似精度が不足する可能性があるため,指数関数の定積分を用いる計算法を検討する.

2 半導体ドリフト拡散モデル

半導体のドリフト拡散モデル [1] は、静電ポテンシャル φ 、電子密度 n、正孔密度 p に関する連立系であるが、定常状態は無次元化された次の系で記述される.2 次元領域 Ω の境界 $\Gamma = \partial \Omega$ は Dirichelt 条件を課す Γ_D と Neumann 条件を課す Γ_N からなるものとする、 $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. ν を Γ_N での外向き単位法線とする.

$$-\lambda^2 \triangle \varphi = -n + p + C, \qquad (1)$$

$$-\nabla \cdot J_n = 0, \quad J_n = \nabla n - n\nabla \varphi, \tag{2}$$

$$\nabla \cdot J_p = 0$$
, $J_p = -(\nabla p + p \nabla \varphi)$. (3)

境界条件は

$$\begin{split} \varphi &= \varphi_D \text{ on } \Gamma_D \,, & \nabla \varphi \cdot \nu = 0 \text{ on } \Gamma_N \,, \\ n &= n_D \text{ on } \Gamma_D \,, \, \nabla n \cdot \nu = 0, \,\, J_n = 0 \text{ on } \Gamma_N \,, \\ p &= p_D \text{ on } \Gamma_D \,, \, \nabla p \cdot \nu = 0, \,\, J_p = 0 \text{ on } \Gamma_N \,. \end{split}$$

である. C(x,y) は N 型, P 型の半導体で決まる 不純物のドーピング分布であり既知の関数であ る. $\lambda > 0$ は Debye 長と呼ばれる定数である.

3 混合型の弱形式

正孔密度勾配は Slotboom 変数 $\xi = e^{\varphi} p$ を導入すると

$$\nabla \xi = \nabla (e^{\varphi} p) = e^{\varphi} \nabla \varphi \, p + e^{\varphi} \nabla p = -e^{\varphi} J_p$$

となる. $\varphi \in H^1(\Omega)$ を既知として, (2) 式を $u = J_p$ 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

$$\begin{split} H(\mathrm{div};\Omega) &= \left\{ u \in L^2(\Omega)^2 \, ; \nabla \cdot u \in L^2(\Omega) \right\}, \\ V &= \left\{ u \in H(\mathrm{div};\Omega) \, ; \, u \cdot \nu |_{\Gamma_N} = 0 \right\}, \\ Q &= L^2(\Omega) \, . \end{split}$$

部分積分により、 $\forall (v,q) \in V \times Q$ に対して

$$\int_{\Omega} e^{\varphi} u \cdot v - \int_{\Omega} \xi \nabla \cdot v = -\int_{\Gamma_D} \xi_D v \cdot \nu,
\int_{\Omega} \nabla \cdot u \, q = 0$$
(4)

を満たす $(u,\xi) \in V \times Q$ を求める問題になる. $\xi_D = e^{\varphi} p_D$ 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 (4) は $\forall (v,q) \in V \times Q$ に対して

$$\int_{\Omega} e^{\varphi} u \cdot v - \int_{\Omega} e^{\varphi} p \nabla \cdot v = -\int_{\Gamma_D} e^{\varphi} p_D v \cdot \nu,$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot u \, q = 0 \tag{5}$$

を満たす $(u, p) \in V \times Q$ を求めよとなる.

4 混合型有限要素近似

有限要素近似空間は V に 0 次の Raviart-Thomas 要素 RT0, Q に P1 要素を用いることを考える. この要素ペアは ∇ ・に関する下限上限条件を厳密には満さないため, 要素分割に依っては (5) 式から得られる剛性行列が逆を持たない可能性がある. しかし, 像の空間に解を求めることで, チェッカーボード状の核のベクトルを除去できる. $V_h \times Q_h$ には 1 次の RT1 要素 と P1 要素を用いることが望ましいが, 指数関数重みの取扱いは共通するので, 本稿では計算コストの低い RT0/P1 近似について述べる.

K を要素, $\{E_i\}_{i=1,2,3}$ をその辺, \vec{v}_i を E_i の外向き単位法線とする. RT0 要素は各辺に自由度を持つベクトル値の空間であり,

$$RT0(K)=(P0(K))^2+\vec{x}P0(K)\subset (P1(K))^2$$
 .
 $\vec{v}\in RT0(K)$ とすると次が成り立つ

$$\vec{v}|_{E_i} \cdot \nu_i \in P0(E_i), \quad \nabla \cdot \vec{v} \in P0(K)$$
.

RT0 の基底関数は P_i を E_i に対する頂点とすると

$$\vec{\Psi}_i(\vec{x}) = \sigma_i \frac{|E_i|}{2|K|} (\vec{x} - \vec{P}_i)$$

となる. \vec{E}_i を辺 E_i 固有の単位法線として, $\sigma_i = \vec{E}_i \cdot \vec{v}_i \in \{-1,1\}$ であり, |K| は要素の面積, E_i は各辺の長さである. K の面積座標を $\{\lambda_k\}_{k=1,2,3}$ $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1$ とすると $\vec{x} = \sum_k \vec{P}_k \lambda_k$ より, RT0 の要素質量行列は

$$\int_{K} \vec{\Psi}_{j} \cdot \vec{\Psi}_{i} = \sigma_{i} \sigma_{j} \frac{|E_{i}||E_{j}|}{4|K|^{2}} \times \int_{K} \left(\sum_{k} \vec{P}_{k} \lambda_{k} - \vec{P}_{j} \sum_{k} \lambda_{k} \right) \cdot \left(\sum_{l} \vec{P}_{l} \lambda_{l} - \vec{P}_{i} \sum_{l} \lambda_{l} \right)$$

となるため, K での 2 次の多項式の積分となる. 静電ポテンシャル φ を P1 要素で近似する場合, 各頂点 P_i での値を φ_i とすると, $\varphi_h = \sum_{i=1,2,3} \varphi_i \lambda_i$ である. Exponential fitting[1] と呼ばれる近似は係数の要素での平均をとる

$$\left(\frac{1}{|K|}\int_K e^{\varphi_h}\right)\int_K \vec{\Psi}_j \cdot \vec{\Psi}_i \,.$$

これは有限体積法の Schafetter-Gummel スキームで用いられる近似と同種であるが, 本稿では

$$\int_K e^{\varphi_h} \vec{\Psi}_j \cdot \vec{\Psi}_i$$

を直接計算することを考える. この積分値は

$$\int_{K} e^{\varphi_1 \lambda_1 + \varphi_2 \lambda_2 + \varphi_3 \lambda_3} \lambda_l \lambda_m \quad l, m \in \{1, 2, 3\}$$

の和から計算することができる. この値を $m(\{\varphi_i\}_{i=1,2,3},l,m\,;K)$ と書く.

 ψ_i をスカラー値の P1 基底関数とする.

$$\int_K e^{\varphi_h} \psi_j \nabla \cdot \vec{\Psi}_i = \frac{\sigma_i |E_i|}{2|K|} \int_K e^{\varphi_h} \psi_j \nabla \cdot (\vec{x} - \vec{P}_i)$$

は次の値から計算できる

$$b(\{\varphi_i\}_{i=1,2,3}, j; K) = \int_K e^{\varphi_1 \lambda_1 + \varphi_2 \lambda_2 + \varphi_3 \lambda_3} \lambda_j.$$

5 指数関数重み係数の要素積分

定積分を書き下すため、次の表記を準備する.

$$\exp 1(x) = (e^x - 1)/x$$

$$\exp 2(x) = (e^x - 1 - x)/x^2$$

$$\exp 3(x) = (e^x - 1 - x - x^2/2)/x^3$$

$$\exp 2^{(1)}(x) = \frac{d}{dx} \exp 2(x) = \exp 2(x) - 2\exp 3(x)$$

$$1/\exp 1(x) = \frac{x}{e^x - 1}$$
 は Bernoulli 関数と呼ば

れ, Schafetter-Gummel スキームで利用される.

$$\begin{split} \frac{1}{|K|} \int_{K} e^{\varphi_{1}\lambda_{1} + \varphi_{2}\lambda_{2} + \varphi_{3}\lambda_{3}} &= \\ \frac{2e^{\varphi_{1}}}{\varphi_{2} - \varphi_{3}} \left(\exp 1(\varphi_{2} - \varphi_{1}) - \exp 1(\varphi_{3} - \varphi_{1}) \right), \\ m(\{\varphi_{i}\}_{i=1,2,3}, 1, 1; K) &= \\ \frac{4|K|e^{\varphi_{1}}}{\varphi_{2} - \varphi_{3}} \left(\exp 3(\varphi_{2} - \varphi_{1}) - \exp 3(\varphi_{3} - \varphi_{1}) \right), \\ m(\{\varphi_{i}\}_{i=1,2,3}, 1, 2; K) &= \\ \frac{2|K|e^{\varphi_{1}}}{\varphi_{2} - \varphi_{3}} \exp 2^{(1)}(\varphi_{2} - \varphi_{1}) - \\ \frac{2|K|e^{\varphi_{1}}}{(\varphi_{2} - \varphi_{3})^{2}} \left(\exp 2(\varphi_{2} - \varphi_{1}) - \exp 2(\varphi_{3} - \varphi_{1}) \right), \\ b(\{\varphi_{i}\}_{i=1,2,3}, 1; K) &= \\ \frac{2|K|e^{\varphi_{1}}}{\varphi_{2} - \varphi_{3}} \left(\exp 2(\varphi_{2} - \varphi_{1}) - \exp 2(\varphi_{3} - \varphi_{1}) \right) \end{split}$$

となる. これらの計算で $\varphi_2 \simeq \varphi_3$ の場合, 計算精度が落ちるため, 各々の項を $\varphi_3 - \varphi_1$ のまわりで Taylor 展開することで近似計算を行う.

6 FreeFem++での実装

三角形要素分割を mesh Th とすると, RT0 の有限要素空間は fespace Vh(Th, RT0) と記述される. l_i =Th[k][i] を k 番目の要素の頂点 P_i の節点番号, m_i =Vh(k,i) を辺 E_i の大域的番号, 即ち V_h の自由度として基底関数は

$$\vec{\Phi}_{m_i}(\vec{x}) = \operatorname{sgn}(l_{i+2} - l_{i+1})(\vec{x} - \vec{P}_i)/(2|K|)$$

と定義されている. 辺 E_i 固有の法線の向き $\vec{E_i}$ と $\vec{v_i}$ の方向の一致を示す σ_i の代りに大域的な頂点の番号付の情報が用いられている. また辺の長さ $|E_i|$ は上の定義に含まれていないことに注意する.

FreeFem++の要素積分では数値積分公式が用いられており、既定値の積分公式は 7点の積分点を用い5次までの多項式を厳密に積分できる qf5pT である [2]. このため静電ポテンシャル φ_h の値が大きく変化する要素近辺で近似精度が不足する可能性が高いが、本手法はその誤差は生じない.

- [1] F. Brezzi, L.D. Marini, S. Micheletti,P. Pietra, R. Sacco, S. Wang,2005. doi:10.1016/S1570-8659(04)13004-4
- [2] F. Hecht et al., FreeFem++ manual, http://www.freefem.org/ff++

排除体積効果を伴う2体相互作用におけるパターン形成について

由良文孝 1, 田久保直子 2, 林達也 3, 間田潤 4, 栗原裕基 5,6, 時弘哲治 3,6

¹公立はこだて未来大, ²東大アイソトープ総合センター, ³東大数理, ⁴日大生産工,

⁵ 東大医, ⁶CREST

e-mail : yura@fun.ac.jp

1 概要

新生血管は, 追い越しや入れ替わりを伴う複 雑な血管内皮細胞の遊走によって形成されるこ とが、細胞運動のタイムラプス撮影により明ら かになってきた [1]. また講演者らはこれまで に,血管新生を記述する数理モデルも1次元に おいて考察してきた[2]. 本講演では数理モデ ルの2次元への拡張を行い、マウスの大動脈組 織を用いた in vitro 実験により得られる 2 次元 面上での内皮細胞の運動との比較からモデルの パラメータ推定と妥当性を検証した[3]. その 結果, 二体間力を仮定したモデルにより, 仮足 長程度の距離での引力および近距離斥力の存在 が示唆された. 近距離での斥力は排除体積効果 によるものと考えられるため, 本講演では細胞 を質点ではなく楕円形状で近似した離散方程式 モデルを提案し、そこで形成されるパターンと 挙動を紹介する. 特に新生血管に見られる樹状 伸長に類似したパターンへの, 細胞形状に由来 する排除体積の影響を報告する.

2 1次元松家モデル [2] の 2次元化

時刻 t における i 番目の細胞 (細胞 i と呼ぶ) の位置を $\mathbf{z}_i^t = (x_i^t, y_i^t)^T \in \mathbb{R}^2$ 、速度を $\mathbf{v}_i^t = (v_{x,i}^t, v_{y,i}^t)^T \in \mathbb{R}^2$ としたとき (T は転置を表す), 二体力 $\mathbf{F}_{i,j}$ の和として表される次の運動方程式

$$egin{aligned} oldsymbol{z}_i^{t+1} - oldsymbol{z}_i^t &= oldsymbol{v}_i^t, \ oldsymbol{v}_i^{t+1} - oldsymbol{v}_i^t &= -\gamma oldsymbol{v}_i^t + \sum_{j \neq i} oldsymbol{F}_{i,j}^t \end{aligned}$$

において,力の大きさが相対距離のみに依存し 相対ベクトル方向に作用する

$$F_{i,j}^t = F\left(\|\boldsymbol{z}_i^t - \boldsymbol{z}_j^t\|\right) e_{i,j}^t$$

を 2 次元松家モデルと定義する.ここで中心間の単位相対ベクトルを $e_{i,j}^t := (z_i^t - z_j^t)/\|z_i^t - z_j^t\|$ とおいた.

培養された大動脈組織のタイムラプス撮影画像の例を図1に示す.各時刻各細胞の座標位置に対し、2次元松家モデルを仮定すると図2に



図 1. 樹状伸長する血管内皮細胞のタイムラプス撮影画像の例(分枝の一部分を拡大)

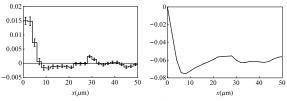


図 2. (左) 最小二乗法により推定された関数 F(x),および (右) その積分ポテンシャル $-\int_0^x F(\mu)d\mu$.

示す関数 F が得られた. およそ $0 \sim 8\mu m$ の領域で斥力, $8 \sim 30\mu m$ の領域で引力を受けていることがわかる. 実際にはそれぞれ, 排除体積に由来する近距離斥力および仮足を通じた細胞間の情報伝達が引き起こす細胞運動の活性化に由来する自己駆動力が原因と考えられる.

3 楕円形状の細胞モデル

血管内皮細胞は仮足をある方向へ長く伸ばす.その伸ばした仮足と他の細胞や細胞外基質との相互作用が,その細胞に自己駆動力を発生させると仮定することは妥当である.この細胞形状に応じた異方性が血管形成に及ぼす影響を取り入れるため,次のモデルを考える.2次元松家モデルでは細胞を質点としているが平面上の楕円形とし,細胞iの長軸半径を a_i ,短軸半径を b_i ,長軸のなす角を $\varphi_i \in [0,\pi)$ とする.この予稿では a_i , b_i は共通 ($\forall i, a_i = a, b_i = b$) とし,扁平率 f:=1-b/a のみへの依存性をみるためab=1 と面積をスケールした.細胞i に付随する楕円上の点は次の媒介変数表示を持つ (R は回転行列):

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{z}_i + R(\varphi_i) \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$$

この楕円上に $D \in \mathbb{Z}_{>0}$, $k \in [0,1,\ldots,D-1]$, $\theta \equiv \theta_k = 2\pi k/D$ として,D 個のサンプリング点をとる.時刻 t において細胞 i が細胞 j から受ける力として,式 (1) に次の 3 種類を取り入れたモデルを提案する:

引力: 中心間距離 $\|m{z}_i^t - m{z}_j^t\|$ が R_a 以下の場合にのみ,中心間力として $m{F}_{i,j}^t = -f_a m{e}_{i,j}^t$

斥力: 細胞jの楕円内部に細胞iのサンプリング 点が存在する場合,中心間力として $\mathbf{F}_{i,j}^t = +f_r \mathbf{e}_{i,j}^t$

回転力: 細胞jの楕円内部にある細胞iのサンプリング点kすべてに対し次の和をとる

$$\varphi_i^{t+1} - \varphi_i^t = -\sum_{k}' f_p \sin 2\theta_k$$

引力と斥力は同一直線上に作用し相殺しうるので、排除体積効果のために $f_r > f_a > 0$ を仮定する。また、楕円は x と y の 2 次式であるから、ある点が細胞内部にあるかどうかは容易に判定ができる。回転力は 2 細胞が接触した際に、長軸が接触を避ける向きへ回転する効果を与えている。D の値は実験した限り次節の結果に対して定性的に大きな影響を与えないため、D=16 と固定した。

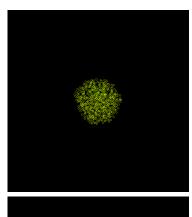
4 細胞パターンの扁平率依存性

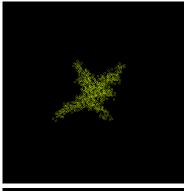
シミュレーション結果を図 3 に示す。初期状態として細胞のない状態から始め,図 3 のそれぞれ中央に 10 ステップごとに細胞を供給した。図は時刻 t=5000 での細胞の分布パターンであり,それぞれ 500 細胞が分布している。いずれもパラメータは $R_a=5, f_a=0.005, f_r=0.02, f_p=0.005, ab=1, \gamma=0.1$ である。細胞の扁平率の変化が細胞の広がり方や分布パターンに大きな影響を及ぼしていることが見て取れる。Box-Counting による次元は上からそれぞれおよそ 1.8, 1.5, 1.2 であり,細胞形状が細長くなるにつれ 1 次元的に成長することを示している。講演時には細胞の向きなどの相関性や,扁平率による運動性の変化などについても紹介する予定である。

参考文献

S. Arima, K. Nishiyama, T. Ko,
 Y. Arima, Y. Hakozaki, K. Sugihara, H. Koseki, Y. Uchijima,
 Y. Kurihara and H. Kurihara, "Angiogenic morphogenesis driven by

- dynamic and heterogeneous collective endothelial cell movement", Development 138(21) 4763–76 (2011). doi:10.1242/dev.068023.
- [2] K. Matsuya, F. Yura, J. Mada, H. Kurihara and T. Tokihiro, "A Discrete Mathematical Model for Angiogenesis", SIAM J. Appl. Math., 76(6), 2243–59 (2016). doi:10.1137/15M1038773.
- [3] N. Takubo, F. Yura, K. Naemura, R. Yoshida, T. Tokunaga, T. Tokihiro and H. Kurihara, "Observation of linear reciprocating movement of individual cells in inhomogeneous collective migration of endothelial cells in angiogenesis", in preparation.





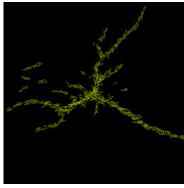


図 3. 時刻 t=5000 での細胞の分布パターン. 扁平率 f はそれぞれ, (上) f=0, (中) f=0.3, (下) f=0.7.

拡散効果を取り入れた病原体・免疫モデルの漸近挙動

佐々木 徹1,鈴木 貴2

¹ 岡山大学 環境生命科学研究科, ² 大阪大学 数理・データ科学教育研究センター e-mail: sasaki@ems.okayama-u.ac.jp

1 概要

Nowak and Bangham [1] のウイルス・ダイナミクス・モデルに空間拡散の効果を取り入れたモデルの解の漸近挙動を考える。このモデルは、未感染細胞、感染細胞、ウイルス、細胞性免疫の相互作用を記述するもので、三つの空間一様な平衡解を持つ。一つ目は、感染が無い状態に対応する平衡点 (E_0) 、二つ目は細胞性免疫の変数が 0 となる平衡点 (E_1) 、最後はすべての変数が正の平衡点 (内部平衡点 $E_2)$ である。基礎再生産数 E_0 が E_0 以下のとき、解は E_0 が E_0 に収束し、内部平衡点 E_0 が存在する時は、解は E_0 に収束し、それ以外の時には E_1 に収束する。

証明は、Sasaki and Suzuki [2] と同様に、Lyapunov 関数と L^p - L^q 評価などを用いて行なう.

2 病原体・免疫モデル

未感染細胞の密度を $u_1(x,t)$, 感染細胞の密度を $u_2(x,t)$, ウイルス密度を $u_3(x,t)$, 細胞性免疫の強さを $u_4(x,t)$ とし, $u=(u_1,u_2,u_3,u_4)$ とする. ここで, $t \ge 0$ は時刻で, 空間変数 x は \mathbf{R}^n の有界な領域 Ω に含まれているとする. また, Ω の境界 $\partial\Omega$ は滑らかとする. 病原体・免疫モデルとして

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = d_1 \Delta u_1 + \lambda - mu_1 - \beta u_1 u_3$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = d_2 \Delta u_2 + \beta u_1 u_3 - au_2 - \kappa u_4 u_2$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} = d_3 \Delta u_3 + aru_2 - bu_3$$

$$\frac{\partial u_4}{\partial t} = d_4 \Delta u_4 + qu_2 u_4 - du_4$$
(1)

を考える. これに対応する空間一様モデルは

$$\frac{\mathrm{d}u_1}{\mathrm{d}t} = \lambda - mu_1 - \beta u_1 u_3$$

$$\frac{\mathrm{d}u_2}{\mathrm{d}t} = \beta u_1 u_3 - au_2 - \kappa u_4 u_2$$

$$\frac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t} = u_3 + aru_2 - bu_3$$

$$\frac{\mathrm{d}u_4}{\mathrm{d}t} = u_4 + qu_2 u_4 - du_4$$
(2)

であるが、その平衡点は (1) の空間一様平衡点 と同じで、感染の無い平衡点 $E_0(u_1^{\circ},0,0,0)$ 、免 疫変数が 0 の平衡点 $E_1(u_1^{\bullet},u_2^{\bullet},u_3^{\bullet},0)$ 、内部平衡点 $E_2(u_1^{\bullet},u_2^{\bullet},u_3^{\bullet},u_4^{\bullet})$ の三つである。ただし、

$$\begin{split} u_1^\circ &= \frac{\lambda}{m}, \ u_1^\bullet = \frac{b}{\beta r}, \ u_2^\bullet = \frac{\beta \lambda r - bm}{\beta ar}, \\ u_3^\bullet &= \frac{\beta \lambda r - bm}{\beta b}, \ u_1^* = \frac{\lambda bq}{bmq + \beta adr}, \ u_2^* = \frac{d}{q}, \\ u_3^* &= \frac{adr}{bq}, \ u_4^* = \frac{1}{\kappa} \left(\frac{\beta \lambda aqr}{bmq + \beta adr} - a \right) \end{split}$$

である.

常微分方程式系 (2) に対しては、Pang、Wang and Wang [3] が Lyapunov 関数を与えている。 関数 Φ を $\Phi(s)=s-\log s-1$ とおくと、平衡点 E_0, E_1, E_2 に対する Lyapunov 関数は、それぞれ

$$\begin{split} U(u) &= u_1^{\circ} \Phi \left(\frac{u_1}{u_1^{\circ}} \right) + u_2 + \frac{1}{r} u_3 + \frac{\kappa}{q} u_4, \\ V(u) &= u_1^{\bullet} \Phi \left(\frac{u_1}{u_1^{\bullet}} \right) + u_2^{\bullet} \Phi \left(\frac{u_2}{u_2^{\bullet}} \right) + \frac{u_3^{\bullet}}{r} \Phi \left(\frac{u_3}{u_3^{\bullet}} \right) \\ &\quad + \frac{\kappa}{q} u_4 \\ W(u) &= u_1^{*} \Phi \left(\frac{u_1}{u_1^{*}} \right) + u_2^{*} \Phi \left(\frac{u_2}{u_2^{*}} \right) + u_3^{*} \Phi \left(\frac{u_3}{u_3^{*}} \right) \\ &\quad + \frac{u_4^{*}}{r} \Phi \left(\frac{u_4}{u_4^{*}} \right) \end{split}$$

で与えられる。これらの Lyapunov 関数の解に沿った導関数は、それぞれ $R_0 \le 1$, $1 < R_0 \le 1 + \beta adr/(bmq)$, $1 + \beta adr/(bmq) < R_0$ の時に非正となる。ここで, $R_0 = \beta \lambda r/(bm)$ は基礎再生産数である

これらの Lyapunov 関数を反応拡散系 (1) に 応用する. ここで, 解の初期値

$$u(x,0) = u_0(x) \tag{3}$$

はなめらかで、非負かつ $u_0 \not\equiv 0$ とする. また、 境界条件として斉次 Neumann 条件

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \tag{4}$$

を課す. ただし, n は境界の外向き単位法線ベクトルである. (1) の解 u(x,t) に対して $\mathcal{U},\mathcal{V},$ \mathcal{W} を

$$\mathcal{U}(u) = \int_{\Omega} U(u(x,t)) dx$$
$$\mathcal{V}(u) = \int_{\Omega} V(u(x,t)) dx$$
$$\mathcal{W}(u) = \int_{\Omega} W(u(x,t)) dx$$

とおくと、その時刻 t に関する導関数は、常微分方程式系 (2) の時と同じ条件下で非正となる。このことから以下が証明される。

命題 1 u は (1), (3), (4) の解とする. このとき, 定数 C が存在して

$$||u_i(\cdot,t)||_{L^1(\Omega)} \le C \quad (t>0, i=1,2,3,4)$$

が成り立つ.

これを用いて, L^p - L^q 評価を繰り返し用いる事より, 次を証明することが出来る.

命題 2 u は (1), (3), (4) の解とする. $p \in [1,\infty)$ に対して、定数 C が存在して

$$||u_i(\cdot,t)||_{L^p(\Omega)} \le C, ||\nabla u_i(\cdot,t)||_{L^p(\Omega)} \le C$$

 $(t>0, i=1,2,3,4)$

が成り立つ.

これにより、軌道のコンパクト性を示す事が出来、Lyapunov 関数を用いた ω -極限集合の議論により以下の定理を示すことが出来る.

定理 3 u は (1), (3), (4) の解とする. このとき,

$$u(\cdot,t) \to \hat{u} \text{ in } C(\bar{\Omega}; \mathbf{R}^4) \text{ as } t \to \infty$$

が成り立つ. ただし, $R_0 \le 1$ のとき $\hat{u} = u^{\circ}$, $1 < R_0 \le 1 + \beta a dr/(bmq)$ のとき $\hat{u} = u^{\bullet}$, $1 + \beta a dr/(bmq) < R_0$ のとき $\hat{u} = u^{*}$ である.

- [1] Martin A Nowak and C. R. M. Bangham, Population dynamics of immune responses to persistent viruses, Science, 272 (1996) 74–79
- [2] Toru Sasaki and Takashi Suzuki, Asymptotic behaviour of the solutions

- to a virus dynamics model with diffusion, Discrete Contin. Dynam. Systems Ser. B, 23 (2) (2018) 525–541
- [3] Hai-yan Pang, Wen-di Wang and Kaifa Wang, Global properties of Virus Dynamics with CTL immune Respons, Journal of Southwest China Normal University, 30 (5) (2005) 796–799

BZ反応振動子系への大域的フィードバック制御

大野 航太 1,3, 小川 知之 1,2,3, 末松 J. 信彦 1,2,3

- 1明治大学大学院先端数理科学研究科,2明治大学総合数理学部,
- ³明治大学先端数理科学インスティチュート (MIMS)

e-mail: kota_ohno@meiji.ac.jp

1 概要

生理学や生態学、化学反応において見られる 多種多様な現象は、反応拡散系を元にした理論 で理解されてきた [1]. しかし振動場で見られ る現象に関しては十分に理解されているとは言 い難い. この問題に対して「フィードバック」 を用いてダイナミクスの理解を試みたい.

振動する化学反応としてよく知られる Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応は様々なパターンダイ ナミクスのモデル実験として扱われるが、特に Ru(bpy)₃Cl₂触媒を用いることで、光刺激によ り振動が抑制される光感受性の系が制御系とし てよく用いられている. Vanag らは光感受性 BZ 反応に対して、振動空間パターンから得た 情報を元に光強度を制御した光刺激を与えると いう大域的なフィードバック制御を導入してい る [2]. 彼らは実験より Standing wave 振動へ の変化を観察しており、また数理モデルにおい ても同様のパターンへの変化を再現したことを 報告しているが、その詳細な解析までは至って いない. そこで我々は Vanag らの様な時空間 の系を単純化した例として、BZ 反応の拡散結 合振動子系において, 理論と実験と繋ぐ学際的 な研究を試みた

理論的な面では、光フィードバック刺激の項を導入した3変数 Oregonator モデルを用いた.パラメータを変えることで3種の同期パターンを観察した。まず1つは「同相同期」である。残り2種は逆相同期した振動パターンであるが、一方は通常の「逆相同期」である。もう一方は、一つの振動子が強い振幅で振動した時に、もう一つの振動子が弱い振幅で振動することを、二つの振動子が互いに繰り返す「交互振動」が見られた。さらに交互振動の周期は、同相同期や逆走同期の周期と比べて2倍に伸びる特徴が見られた。数理モデルの数値分岐解析により、交互振動のパターンは周期倍分岐が関係しており、2種の逆相同期した振動パターンは振動子間の結合強度に依存して現れることが理解された。

実験では BZ 反応溶液を一つの振動子と見な

し、ポンプによって拡散結合した系に対し、光 フィードバック刺激を与えることで、数値計算 結果や分岐構造の変化を再現する様な結果が得 られた.

2 数理モデル

3変数の Oregonator モデルに、フィードバック刺激の効果を次の様に導入した

$$\dot{u}_{i} = \frac{1}{\varepsilon} (qv_{i} - u_{i}v_{i} + u_{i}(1 - u_{i})) + D_{u}(u_{j} - u_{i}),$$

$$\dot{v}_{i} = \frac{1}{\delta} (-qv_{i} - u_{i}v_{i} + fw_{i} + s\phi) + D_{v}(v_{j} - v_{i}),$$

$$\dot{w}_{i} = u_{i} - w_{i} + D_{w}(w_{j} - w_{i}),$$

$$\phi = \frac{w_{1} + w_{2}}{2}.$$

$$(i, j = 1, 2, i \neq j)$$

変数はそれぞれ,活性因子 $u_i = [HBrO_2]$,抑制因子 $v_i = [Br^-]$,酸化された触媒 $w_i = [Ru(bpy)_3^{3+}]$ を表す.また ϕ はフィードバック変数として設定しており, w_i の平均値に等しい.これは実験においても得られる情報は $Ru(bpy)_3^{3+}$ の濃度に相当するものと考えられるからである.また光刺激は抑制因子である Br^- を増やす様に作用する為, ϕ は v の式に作用させた.

この数理モデルの挙動は図1の様なものが得られ、特に図1(a-2)の様な逆相同期した振動が見られた。この逆相同期パターンは、強い振幅と弱い振幅の振動を二つの振動子が交互に繰り返し、かつ周期が同相同期と比べて2倍に伸びている為、交互振動であることが理解された。詳細な分岐構造を調べてみると、交互振動は同相同期から周期倍分岐を起こすことで現れた解であることが分かった。

この分岐構造は拡散結合係数 D_u , D_v , D_w を変化させることで大きく変化する (図 1(b)). 特に拡散係数の比較的小さい範囲では周期倍分岐から伸びる解が逆相同期の解の枝では無いことに加え,同相同期と逆相同期の解の共存領域がs の小さい範囲まで存在する。この時の振動は周期が同位相解とほとんど変わらない通常の逆

相同期である (図 1(b-1)).

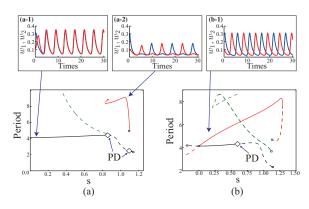


図 1. 数理モデルの数値計算結果と分岐図. (a) D_u , D_v , $D_w=0.3$. (a-1) s=0.0. (a-2) s=1.0. (b) D_u , D_v , $D_w=0.0$. (b-1) s=0.3. 分岐図 (a) (b) において, 黒:同相同期, 赤:逆相同期した解, 緑:別の周期解群, 実線:安定, 破線:不安定をそれぞれ表す.

3 実験

実験では図2の様なシステムを構築した。二つのBZ反応溶液の酸化還元電位を測定し、その数値データから輝度情報を作りLED ライトに送信することで、フィードバック制御された光刺激をBZ反応溶液に返す様なシステムである。輝度情報を作る制御演算として、二つの酸化還元電位の平均値を算出し、同じ輝度情報をLED ライトに送信した。つまり、ある時刻tにおける各BZ溶液の酸化還元電位を $V_i(t)$ (i=1,2) とすると、輝度情報 I(t) は

$$I(t) = \sigma \frac{V_1 + V_2}{2}$$

と表される。この時, σ (≥ 0) はフィードバックの強度を表すパラメータである。この様なシステムで実験を行なった結果が図3である。 $\sigma = 0.2$ と小さい値では同相同期が見られたが, $\sigma = 0.5$ と値を大きくすることで逆相同期した振動へと変化した。その周期を見てみると,同相同期と比べておよそ2倍になり,周期に関して図1(a-2) に相当する様な交互振動が観察された(図3(a-2))。

二つの溶液間の結合強度となるポンプの流量を変えると、見られた同期パターンに変化が生じた。図 3(b) の様に流量を減らすことで周期が倍ではない逆相同期が得られたとともに、 σ の小さい範囲で同相同期と逆相同期が共存する領域が見られた。

以上の実験結果より図 3(a)(b) は、それぞれ図 1(a)(b) に対応すると考えられる。本講演で

はこの分岐構造の変化と、その特徴から説明できる実験結果との比較をより詳細に紹介する.

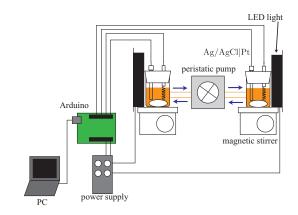


図 2. 光フィードバックシステムの模式図.

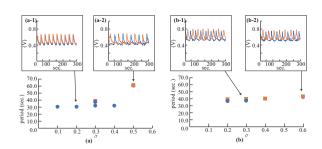


図 3. 実験結果. (a) ポンプ流量 350 mL/h, (a-1) $\sigma=0.2$, (a-2) $\sigma=0.5$, (b) ポンプ流量 150 mL/h, (b-1) $\sigma=0.3$, (b-2) $\sigma=0.6$. \circ :同相同期, \square :逆相同期した振動をそれぞれ表す.

- [1] M.C. Cross and P.C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 65, No. 3, pp. 851–1112, 1993.
- [2] V.K. Vanag, L. Yang, M. Dolnik, A.M. Zhabotinsky, and I.R. Epstein. Oscillatory cluster patterns in a homogeneous chemical system with global feedback. Nature, Vol. 406, No. 6794, pp. 389–391, 2000.

1回繁殖型戦略における周期性と生活環恒常性の進化

今 降助¹

1 宮崎大学工学教育研究部

e-mail: konr@cc.miyazaki-u.ac.jp

1 概要

ヒトの様に一生の間に複数回繁殖する戦略を多数回繁殖型戦略 (iteroparity) という。一方で、多くの昆虫や一年生植物のように、一生の間に1度しか繁殖せず、繁殖後直ちに死亡するような戦略を1回繁殖型戦略 (semelparity) という。いずれの繁殖戦略をとる生物も、その個体群動態はしばしば Leslie 行列モデルと呼ばれる次の差分方程式で記述される。

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = L(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{x}_k \tag{1}$$

 $\zeta \zeta \zeta \zeta, \ x_k = (x_{1,k}, x_{2,k}, \dots, x_{n,k})^{\top},$

$$L(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_{n-1} & f_n \\ s_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_{n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

である. ただし, $f_1, f_2, \ldots, f_n, s_1, s_2, \ldots, s_{n-1}$ は一般にxの関数である. x_i はi 歳の個体の数, f_i はi 歳の繁殖率, s_i はi 歳の生存率を表す. 1 回繁殖型戦略の場合には, $f_1 = f_2 = \cdots = f_{n-1} = 0$ である. $f_1, f_2, \ldots, f_n, s_1, s_2, \ldots, s_{n-1}$ が定数の場合には,(1) は線形の Leslie 行列モデルと呼ばれ,その振る舞いは単純であるが,個体数 x_1, x_2, \ldots, x_n に依存する場合には,(1) は非線形の Leslie 行列モデルと呼ばれ,カオスのような複雑な振る舞いを示しうることが知られている [1]. Bulmer [2] や Hoppensteadt and Keller [3] はこのような非線形の 1 回繁殖型 Leslie 行列モデルを用いて,周期昆虫と呼ばれる昆虫が示す周期性について研究している.

周期昆虫 (periodical insects) とは、寿命の長さが、例えばn年 ($n \ge 2$) に、固定されており、成虫がn年に1度の周期で羽化するような昆虫のことをいう。代表的な周期昆虫はアメリカ東部に生息する周期ゼミであるが、周期ゼミ以外にもさまざまな周期昆虫が知られている [4]. Bulmer [2] は、非線形の1回繁殖型 Leslie 行列モデルを用いて、周期昆虫が周期性を獲得するには、同じ年齢の個体同士の競争よりも、異な

る年齢の個体同士の競争の方が激しいことが重要であることを明らかにした。また、このような年齢特異的な競争の他にも、捕食者飽和と呼ばれる効果が、同様の効果をもたらすことを、Hoppensteadt and Keller [3] が明らかにしている([5] も参照).

周期昆虫の特徴は、Bulmer [2] や Hoppensteadt and Keller [3] が着目した周期性に加え て,寿命の長さが環境に依らず一定に固定され ているという生活環の恒常性も特徴の1つであ る. 周期性と生活環の恒常性は, 一方を仮定す ればもう一方が進化しうることは容易に示せそ うである. 実際, 周期性を仮定すれば, 生活環 の恒常性を失った個体は大多数の個体とは異な る年に羽化してしまうので, 適当な捕食圧の元 では、そのような個体は淘汰されやすいと考え られる. また, 生活環の恒常性を仮定すれば, Bulmer [2] や Hoppensteadt and Keller [3] が 示したように,年齢特異的な種内競争や,捕食 者飽和が周期性を作り出すことが知られてい る. しかしながら、周期性や生活環の恒常性が ない状態から, それの進化を促すメカニズムは 分かっていない. 実際, Bulmer [2] は "There is some difficulty in seeing how the constancy of the life cycle and periodical behavior could have evolved together since each presupposes the other, but I shall not pursue this problem here."と述べており、未解決の問題として残さ れている. 本発表では, 周期性と生活環の恒常 性の進化を考察するための数理モデルを紹介し, 周期性や生活環の恒常性を前提とせずに, それ らの進化を促すメカニズムについて考察する.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K05279 の助成を受けたものである.

参考文献

[1] J. Guckenheimer, G. Oster, and A. Ipaktchi. The dynamics of density dependent population models. *Journal of Mathematical Biology*, Vol. 4, No. 2, pp. 101–

- 147, 1977.
- [2] M. G. Bulmer. Periodical insects. American Naturalist, Vol. 111, pp. 1099–1117, 1977.
- [3] F. C. Hoppensteadt and J. B. Keller. Synchronization of periodical cicada emergences. *Science*, Vol. 194, No. 4262, pp. 335–337, Oct 1976.
- [4] K. Heliövaara, R. Väisänen, and C. Simon. Evolutionary ecology of periodical insects. *Trends Ecol Evol*, Vol. 9, No. 12, pp. 475–480, Dec 1994.
- [5] Robert M. May. Periodical cicadas. *Nature*, Vol. 277, pp. 347–349, 1979.

結晶方位差と三重点による結晶粒界の発展方程式

Epshteyn Yekaterina¹, Liu Chun², 水野 将司 ³

¹The University of Utah, ²Illinois Institute of Technology, ³ 日本大学理工学部 e-mail: ³ mizuno@math.cst.nihon-u.ac.jp

1 結晶粒界モデルの導出

結晶粒界とは、多結晶体の結晶同士の境目のことで、物質の強度、延性、電導性や熱電導率などと関係がある。多結晶体の例は金属や鋼、合金などであり、数学的取り扱いは Mullins と Herring の研究によるところが大きい([1, 2]). とりわけ、Mullins 方程式から導かれる曲率流方程式は、材料工学からの要請のみならず、数学的に興味深い問題であったことから、数多くの研究が行われてきた.

結結つ方らそ方特晶きと晶晶に位れの位異粒であるでの晶定お晶ずがでるであるででの一のめりの人結がでる。

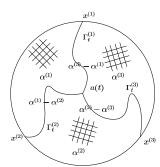


図 1. 結晶粒界のモデルの模式図

たがって、隣り合う結晶の結晶方位の差は、結晶粒界エネルギーを考えたときに考慮に入れるべき状態変数である. なぜならば、結晶中の原子、分子の配列は完全ではなく(格子欠陥という)、結晶方位差は結晶中の原子、分子が完全な配列になることを阻害するからである. しかし、曲率流方程式の非線形性、数学解析の困難さから、結晶方位差はエネルギーに寄与しない仮定をおいて研究が進められてきた. そこで、結晶方位差を考慮に入れた結晶粒界エネルギー

$$E = E(t) = \sum_{j=1}^{3} \int_{\Gamma^{(j)}} \sigma(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta \alpha^{(j)})$$

を考える. ここで, $\Gamma^{(j)}$ (j=1,2,3) は結晶粒界とし,結晶粒界エネルギー密度 $\sigma=\sigma(\mathbf{n},\alpha)$: $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は非負値で \mathbf{n} について正一次斉次, すなわち $\lambda>0$ に対して, $\sigma(\lambda\mathbf{n},\alpha)=\sigma(\mathbf{n},\alpha)$ を仮定する. $\mathbf{n}^{(j)}=\mathbf{n}^{(j)}(s,t)$ は結晶粒界 $\Gamma^{(j)}$ の法ベクトル, $\Delta\alpha^{(j)}(t)=\alpha^{(j-1)}(t)-\alpha^{(j)}(t)$ は結晶方位差である. さらに, 三つの $\Gamma^{(j)}$ は三

重点 $\mathbf{a}(t)$ で交わることを仮定して、もう一方の 端点は Dirichlet 境界条件 $\mathbf{x}^{(j)}$ を課す.この結 晶粒界エネルギー E に対して変分原理から方 程式を導出する (cf. Liu-Kinderlehrer [3]).

粒界 $\Gamma^{(j)}$ の法速度を $v_n^{(j)}$ として

$$v_n^{(j)} = -\mu \frac{\delta E}{\delta \Gamma^{(j)}} \tag{M}$$

を仮定する. $\mu > 0$ はモビリティパラメータである. 結晶粒界エネルギー密度 σ は \mathbf{n} について正一次斉次を仮定したので, \mathbf{n} の偏角を θ とおけば, (M) は Mullins 方程式

$$v_n^{(j)} = \mu(\sigma_{\theta\theta}(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta \alpha^{(j)}) + \sigma(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta \alpha^{(j)}))\kappa^{(j)}$$
となる. ただし, $\kappa^{(j)}$ は $\Gamma^{(j)}$ の曲率である.

結晶方位 $\alpha^{(j)}$ は変分原理

$$\frac{d\alpha^{(j)}}{dt} = -\gamma \frac{\delta E}{\delta \alpha^{(j)}} \tag{O}$$

に従うと仮定する. ただし, $\gamma > 0$ は正定数である. α のみたす方程式は σ_{α} の積分に依存する, 粒界の非局所項が現れる.

三重点は三つの結晶粒界 $\Gamma^{(j)}$ が集中する点であり、応力テンソル $\mathbf{T}^{(j)} := \sigma_{\theta}^{(j)} \hat{\mathbf{n}}^{(j)} + \sigma^{(j)} \hat{\mathbf{b}}^{(j)}$ の和が重要な役割をはたす。ここで、 $\hat{\mathbf{b}}^{(j)}$ は $\mathbf{a}(t)$ から $\mathbf{x}^{(j)}$ へ向かう $\mathbf{a}(t)$ での単位接ベクトル、 $\hat{\mathbf{n}}^{(j)}$ は $\mathbf{n}^{(j)}$ の正規化ベクトルである。応力テンソルがつりあう条件、すなわち $\sum_{j=1}^{3} \mathbf{T}^{(j)} = \mathbf{0}$ を Herring 条件という。この条件は、平衡状態では必要条件として導かれる条件である。他方、動的問題を考えるときは、三重点に何らかの条件を課さなければ方程式が閉じない。我々は、三重点に動的境界条件

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \eta \sum_{j=1}^{3} \mathbf{T}^{(j)} \tag{T}$$

を課す. ただし, $\eta > 0$ は正定数である. 我々の 仮定 (M), (O), (T) からエネルギー消散評価式

$$\frac{d}{dt}E(t) = -\sum_{j=1}^{3} \left(\frac{1}{\mu} \int_{\Gamma^{(j)}} |v_n^{(j)}|^2 + \frac{1}{\gamma} \left| \frac{d\alpha^{(j)}}{dt} \right|^2 \right) - \frac{1}{\eta} \left| \frac{d\mathbf{a}}{dt} \right|^2 \quad \text{(ED)}$$

が得られる. 動的境界条件 (T) を課したことにより, エネルギーの消散率に三重点の時間微分が含んでいることに注意する. また, (M), (O), (T) はマルチスケールの構造を持つことに注意する. 実際に, (M) は粒界の局所的性質, (O) は結晶の大域的性質から得られたものである.

2 結晶成長ネットワークモデル

1節の議論を結晶方位 $\{\alpha^{(k)}\}_k$ $\alpha^{(3)}$ と三重点 $\{\mathbf{a}^{(l)}\}_l$ をもつ結晶 成長ネット ワーク $\{\Gamma_t^{(j)}\}_j$ に拡張する 図 2. 結晶粒界ネットワークの模式図

ことを考える. 以下, 結晶方位 $\alpha^{(k)}$ と単結晶を同一視する. 結晶粒界エネルギーは

$$E(t) = \sum_{j} \int_{\Gamma_t^{(j)}} \sigma(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta^{(j)}\alpha)$$

で与えられる. ここで, $\Delta^{(j)}\alpha$ は結晶粒界 $\Gamma^{(j)}$ に隣りあう結晶の方位差である. 1 節の議論と同様に変分原理を用いると.

$$v_n^{(j)} = \mu(\sigma_{\theta\theta}(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta\alpha^{(j)}) + \sigma(\mathbf{n}^{(j)}, \Delta\alpha^{(j)}))\kappa^{(j)}$$

$$\frac{d\alpha^{(k)}}{dt} = -\gamma \frac{\delta E}{\delta\alpha^{(k)}},$$

$$\frac{d\mathbf{a}^{(l)}}{dt} = \eta \sum_{\mathbf{a}^{(l)} \in \Gamma_t^{(j)}} \mathbf{T}^{(j)}$$
(GBN)

が得られる. ただし, μ , γ , η > 0 は正定数である. 第一式は, Mullins 方程式であり結晶粒界の局所的性質から決まる方程式である. 第二式は, 結晶粒界の大域的性質によって決まるものであり, 粒界結晶エネルギー E の $\alpha^{(k)}$ に関する第一変分は $\alpha^{(k)}$ に隣り合う結晶の結晶方位差で決まる. 例えば, 図 2 において

$$\frac{\delta E}{\delta \alpha^{(7)}} = \sum_{j=1}^{6} \int_{\Gamma_t^{(j)}} \sigma_{\alpha}(\mathbf{n}^{(j)}, \alpha^{(7)} - \alpha^{(j)})$$

となる。第三式は三重点における動的境界条件であり、緩和極限 $\eta \to 0$ をとると Herring 条件となる。この方程式系 (GBN) においても、(ED) と同様のエネルギー消散式が得られる。

3 結晶成長モデルの可解性

これまでの、結晶粒界ネットワークモデルの可解性は、粒界の形状をもとにした方程式、つまり、緩和極限 $\gamma=\eta\to\infty$ をとった平均曲率流のネットワーク解が主に考察されてきた.本研究では、結晶成長における結晶方位差と三重点の効果をみるために、結晶粒界エネルギー密度を $\sigma(\Delta\alpha):=1+\frac{1}{2}(\Delta\alpha)^2$ とおき、緩和極限 $\mu\to\infty$ をとる.すなわち、粒界の形状を考えないことにする.すると、結晶粒界の曲率が 0 となるため、 $\Gamma^{(j)}:\mathbf{a}(t)+s\mathbf{b}^{(j)}(t)$ $(0\leq s\leq 1)$ 、 $\mathbf{b}^{(j)}(t)=\mathbf{x}^{(j)}-\mathbf{a}(t)$ と表示できる.簡単のために、 $\gamma=\eta=1$ とすると、(GBN) から対応する常微分方程式系が得らえる.例えば、図 1 に対応する常微分方程式系は

$$\begin{cases} \frac{d\alpha^{(j)}}{dt} = -(|\mathbf{b}^{(j+1)}| + |\mathbf{b}^{(j)}|)\alpha^{(j)} \\ + |\mathbf{b}^{(j+1)}|\alpha^{(j+1)} + |\mathbf{b}^{(j)}|\alpha^{(j-1)}, \\ \frac{d\mathbf{a}}{dt} = \sum_{j=1}^{3} \left(1 + \frac{1}{2} \left(\Delta\alpha^{(j)}(t)\right)^{2}\right) \frac{\mathbf{b}^{(j)}}{|\mathbf{b}^{(j)}|}, \end{cases}$$

である. $\mathbf{b}^{(j)} = \mathbf{0}$ となるときに, 方程式が意味を持たなくなる. これは, 三重点同士が衝突して, 結晶粒界の位相変化がおこることに対応する. 我々は平衡解に十分近い初期値に対して, 結晶粒界ネットワークの時間局所解を得た.

定理 1. 結晶方位を考えた結晶粒界ネットワークにおいて、初期三重点が平衡解に十分近いとき、(GBN) は一意な時間局所解を持つ.

謝辞 本研究は科研費 (# 18K13446) の助成を 受けたものである.

- [1] C. Herring, Fundamental Contributions to the Continuum Theory of Evolving Phase Interfaces in Solids, Springer, 1999, 33–69.
- [2] W. W. Mullins, Metal surface: Structure, energetic and kinetics, 1963, 17–66
- [3] D. Kinderlehrer, C. Liu, Math. Models Methods Appl. Sci. 11(2001), 713–729.
- [4] Y. Epshteyn, C. Liu, M. Mizuno, in preparation.

ODEとコネクトーム

伊藤 利明 同志社大学

e-mail: toito@mail.doshisha.ac.jp

1 導入

ここでは脳科学, 特に計算脳科学

(Computational Neuroscience)における数値 解法を扱う. 近年の高度な生体計測・医療画 像処理技術開発などから脳神経系全体の巨大 ネットワーク(コネクトーム)が現実の研究 対象になった. このコネクトーム内に流れる 化学的電気信号は、神経細胞(Neuron)に関し て非線形 ODE である Hodgkin-Huxley (HH) モデ ルにより局所的にはうまく扱えるとされる. しかし田モデルはコネクトームに対する数値 解法としては非効率で、そのため高速で信号 の再現性に優れた別の非線形 ODE モデルが提 案された[1]. コネクトームの巨大な非線形 ODE ネットワークの解析的アプローチを困難に している別の要因は、Neuron の非常にバラエ ティーに富む発生電位(電流)波の種類であ る. 先の[1]はモデル式(1)において4つの パラメーター(a, b, c, d)で、この種々の波をお およそ全て再現できる、としている. Vは発生 電位で信号は不連続となる. I は別の発火 Neuron からのシナプス入力の重み合計. UはV の復元変数である.

$$\dot{V} = 0.04V^2 + 5V + 140 - U + I$$

$$\dot{U} = a(bV - U)$$
if $V \ge +30 [mV]$, then
$$V \leftarrow c, U \leftarrow U + d$$
(1)

以下、図1、図2に(1)を用いた典型的な興奮性 Neuron の発火パターンを示す.

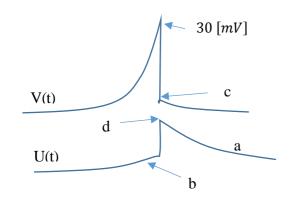


図 1. (1) のパラメーターと発生波形(概形)

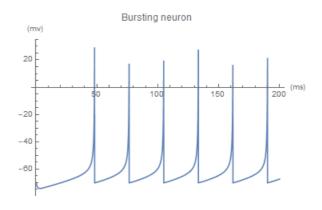


図 2. 興奮性 Neuron の発火パターン

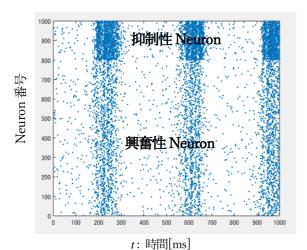
ところで現在適用報告されている神経波の 混在計算はせいぜい2種までであり、特に多様な同期現象に対しては未熟である。色々な 課題が山積みであり、シナプス可塑性 (STDP:Spike-Timing-Dependent Plasticity) に絡む Hebbian、Non-Hebbain な Neuron 間で の扱いや、軸索周辺細胞との関係など、今後 も生体計測分野からの最新の研究報告に合わ せ解析的な手法も修正して行かねばならない 段階である。本研究報告では、特に脳波の発 生が多数の Neuron からなるネットワーク上の 電気信号の同期現象[2]と捉えた数値解法に関 するものである。

2 モデルと計算手法

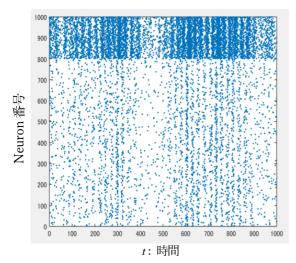
以下の図3は(1)式を用い,文献[1][3]によるプログラムを,数値(時間)積分法の部分を異なるものに換え比較計算した結果である.図3a)は初期値,b)はEuler法,c)は予測子(陽的)法を用いた十分な時間経過後の計算結果である.表示は[1][3]と同じとした. 横軸は時間,縦軸は計算に用いたNeuronの数に対応した番号,発火しているNeuronをプロットした.

各図縦軸の Neuron 番号 800 番までは,興奮性 Neuron,801-1000 番は抑制性 Neuron の状態を示し,2種 Neuron の混合ネットワークと

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集(2018.9.3·5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会



a) 初期状態(低周波での同期).



b) 充分後(高周波での同期).

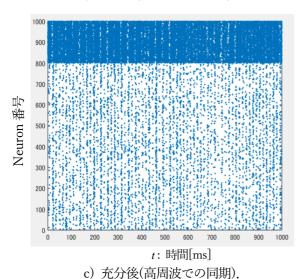


図3. 初期値と計算経過後 a), b) c)

し、各 Neuron は他のランダムに選んだ 100 個の Neuron とシナプス結合し、軸索の長さによる神経信号の遅れや、シナプス可塑性も簡易ながら考慮し計算を行った。

3 計算結果と考察

図3 a) は睡眠状態に表れるデルタ波が 1000 個の Neuron の同期現象として現われる初期状 態設定がされている. この初期状態を用い, b), c)では充分な時間経過後にガンマ波が Neuron の同期現象として再現できている. こ れは[1][3]のアプローチにより脳波を多数の Neuron の同期現象で説明する[2]の計算機によ る再現可能性が示されたことになる. しかし コネクトームを対象とする場合の課題も示さ れた. これはb)とc)の違いである. 別の同期 状態への到達時間と再現される同期の分布 が,数値積分法により幾分異なる.b)は同期 がうなり状に発生し、c)では一様に分布して いる。巨大なネットワークのコネクトーム は、同期が多様なスケール・時間で発生す る. そのため同期の発生タイミングは複合同 期に対し正確でなければ、脳機能の特徴を計 算機で再現できない.

この課題の克服には、巨大な非線形 ODE ネットワークの多重・多様な同期現象を正確に再現できる数値積分法の考案が必要である. また生体計測分野による脳ネットワーク解析からの最新情報も導入しつつマクロモデルとして構成すべきである.本報告はその入り口、紹介程度でしかない.

- [1] E. M. Izhikevich, Simple Model of Spiking Neurons, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol. 14, No. 6, (2003), 1569-1572.
- [2] R. E. Mirollo, S. H. Strogatz, Synchronization of Pulse-Coupled Biological Oscillators, SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 50, No. 6, (1990), 1645-1662.
- [3] E. M. Izhikevich, Polychronization: Computation With Spikes, Neural Computation, (2005).
- [4] E. M. Izhikevich, Dynamical Systems in Neuroscience, MIT Press, 2007.

船体転覆モデルに対するリアプノフスペクトルを用いた解析手法の検討

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

船体転覆現象への知見を得るため、船体横揺 れを表す運動方程式の非線形性を解析すること が本研究の目的である.

船体運動及び転覆現象において、入力となる 波浪に代表される外力と出力となる横揺れとの 間に強い非線形性が生じることが知られている。 この非線形性を定量的に解析することは船舶の 安全性を考えていく上で重要となる。そこで、 この運動を解析的または幾何学的に扱うことに よって解釈する試みがなされてきた [1][2].

本研究においては、復原項に非線形の項を持つ強制ダフィング方程式を船体転覆モデルとして主に扱った。そもそも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できる。

$$I \cdot \frac{d^2 \phi}{dt^2} + N \cdot \frac{d\phi}{dt} + W \cdot GM \cdot \phi \{1 - (\phi/\phi_v)^2\}$$
$$= M_0 + M_r \cos(\omega t + \delta) \quad (1)$$

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) へと簡略化することができる.

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} + \nu \frac{d\psi}{ds} + \psi - \psi^3 = B_0 + B\cos(\Omega s + \varepsilon)$$
(2)

この数理モデルは条件如何でカオス運動や解の 爆発を生じ、非常に複雑な挙動を示す。また、 この解の爆発は船体運動の大傾斜もしくは転覆 に相当する。本研究では、このモデルが持つ非 線形性をカオス解析で知られるリアプノフスペ クトルを用いて解析を行った。

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。

リアプノフスペクトルは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[3]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スペクトル計算法[4]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.なお、本手法では正規直交化にGram-Schmidt法を用いている.

$$\frac{d\psi}{ds} = u$$

$$\frac{du}{ds} = -\nu u - \psi + \psi^3 + B\cos\theta$$

$$\frac{d\theta}{ds} = \Omega$$
(3)

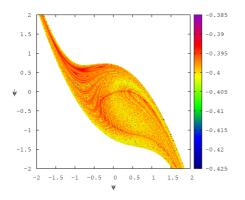
また、数値計算には主に 4 次のルンゲクッタ法を用い、刻み値 dt=0.01 でリアプノフスペクトルを推定した.

その結果、転覆モデルで見られる周期運動とカオス運動のリアプノフスペクトルを正しく推定することができ、理論通りの結果が得られた.また、解の爆発(転覆)が生じる際にはリアプノフスペクトルもほぼ同じ計算時間で値が発散することも確認できた.さらに、計算開始から解の爆発が生じるまでにある程度の時間を有する場合、値が発散する前段階で一度リアプノフ指数のひとつが正の値を取ることも分かった.

以上の結果を基に、リアプノフスペクトルを 後述の初期値平面・制御平面に応用することを 考えた.

3 初期値平面・制御平面への応用

船体転覆モデルは初期値鋭敏性を有し、初期 値毎で転覆の有無に差が生じる.このことを利 用し、転覆領域と非転覆領域で構成される初期 値平面が得られる.具体的には、モデルを解い て転覆したか否かで色分けしてプロットし、こ の工程を初期値を次々と変えて繰り返すことに



 \boxtimes 1. Initial value plane (λ_3 , B = 0.255, $\Omega = 0.63$)

より作成される。白い領域が転覆領域である。制御パラメータについても同様にして、制御平面が得られる。初期値平面は横軸を初期傾斜角 ψ 、縦軸を初期角速度 $\dot{\psi}$ で、制御平面は横軸を入力周波数 Ω 、縦軸を入力振幅Bでそれぞれ表される。

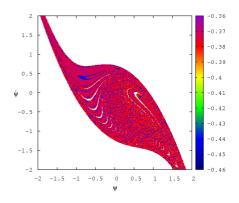
解の爆発が生じるときリアプノフスペクトルも発散することから、 λ_1 、 λ_2 、 λ_3 をそれぞれ初期値平面及び制御平面上の垂直方向へプロットすることで、 λ_i 値の高低差を色で識別した。これによって得られた初期値平面・制御平面のカラーマップから、非転覆領域中にフラクタルなパターンをはじめとする特徴的なパターンが確認された。

4 各平面におけるパターンの分析

これまでに、初期値平面の非転覆領域中に生じる転覆領域のフラクタル的浸食の始まる限界点を、メルニコフの手法を用いることで解析的に見積もる方法が提案されてきた.しかし、浸食が始まる以前の非転覆領域の変化を捉えることは出来ていなかった.

本研究ではカラーマップ化した初期値平面によって、浸食後の転覆領域のパターンが浸食の始まる直前に、非転覆領域中で確認された. つまり、浸食以前の非転覆領域の変化を捉えるに至った(図1,2). このことから、本研究における初期値平面がフラクタル的浸食の始まりを捉えるだけでなく、浸食が生じるメカニズムを調べることにも有効であると考えられる.

カラーマップ化した制御平面についても,非 線形の共振曲線のピーク値と近い挙動を示すパ ターンを確認するに至っている.このパターン は減衰項のパラメータや軟化バネ系,硬化バネ



 \boxtimes 2. Initial value plane (λ_3 , B = 0.256, $\Omega = 0.63$)

系に関わらず確認されいる. 今後はこれらのパターンが形成されるメカニズムや何を示しているのかさらに調べていく必要がある.

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従来法では捉えられなかった、船体転覆モデルにおける非線形性に起因する特徴を捉えることができた。メルニコフの手法など従来法とリアプノフスペクトルで得られるカラーマップ化した初期値平面・制御平面を併用することによって、船体転覆モデルの非線形性への理解をさらに深めていくことができると考える。

- J.M.T. Thompson and M.S. Soliman, Fractal control boundaries of driven oscillaors and their relevance to safe engineering design. Proc. R. Soc. Lond. A 428.1874, (1990), 1-13.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] I. Shimada and 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.

ある遅延微分方程式の陽的な周期解について

中田行彦

概要. 本発表では、ある非線形な遅延微分方程式(分散型の時間遅れをもつ Hutchinson-Wright 方程式)が、平衡点が不安定な場合、周期 2 の周期的解をもつことを示す。Kaplan and Yorke(1974)のアイデアに倣って、ある可積分な二階の常微分方程式から、ヤコビの楕円関数で表される陽的な周期解を構成した。関連する感染症モデルに関する結果にも言及する。

1. Hutchinson-Wright equation with distributed delay

We consider the existence of a periodic solution of the following delay differential equation

(1.1)
$$\frac{d}{dt}x(t) = rx(t)\left(1 - \int_0^1 x(t-s)ds\right),$$

where r is a positive parameter, r > 0. The delay differential equation (1.1) can be seen as a variant of the Hutchinson-Wright equation (1.2). The author's motivation to study (1.1) is that the equation appears as a limiting case of an infectious disease model with temporary immunity, as it is explained below. See also [2, 15] and references therein for studies of logistic equations with distributed delay.

The Hutchinson-Wright equation is a mathematical model for a single species population and is a delayed logistic equation having a form of

(1.2)
$$\frac{d}{dt}x(t) = rx(t)\left(1 - x\left(t - 1\right)\right).$$

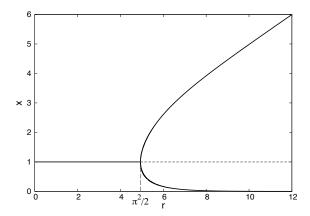
Jones investigated the existence of a periodic solution of Wright's equation in [7, 8] by the fixed-point theorem. Nussbaum then established a general fixed-point theorem and study the existence of periodic solutions for a class of functional differential equations in [12]. Many extensions of the Hutchinson equation (1.2) have been investigated, see [4, 15, 2] and references therein. The Hutchinson-Wright equation still poses mathematical challenges [6, 17].

For the equation (1.1), the existence of periodic solutions does not seem to be well understood. The periodicity, which may explain the recurrent disease dynamics, is a trigger of this study. Differently from the discrete delay case, the distributed delay is an obstacle, when one tries to construct a suitable Poincare map to find a periodic solution. Here we follow the approach by Kaplan and Yorke [9]: we find a periodic solution of a differential equation with distributed delay, considering a system of ordinary differential equations. In the paper we prove the following theorem for the equation (1.1).

定理 1. Let $r > \frac{\pi^2}{2}$. Then the delay differential equation (1.1) has a nontrivial periodic solution of period 2, i.e., x(t) = x(t-2), $t \in \mathbb{R}$, satisfying

$$x(t)x(t-1) = Const, \int_{0}^{2} x(t-s)ds = 2$$

for any $t \in \mathbb{R}$.



 \boxtimes 1.1. Bifurcation of the equilibrium. The equilibrium x=1 is asymptotically stable for $r<\frac{\pi^2}{2}$ and is unstable for $r>\frac{\pi^2}{2}$. At $r=\frac{\pi^2}{2}$ a Hopf bifurcation occurs and the periodic solution appears.

The existence of the periodic solution is proven, solving a corresponding ordinary differential equation, which turns out to be equivalent to the Duffing equation. The periodic solution, explicitly expressed in terms of the Jacobi elliptic functions, appears at $r = \frac{\pi^2}{2}$, as the positive equilibrium (x = 1) loses stability via Hopf bifurcation, see Figures 1.1 and 1.2.

We also discuss the application of the the proof to a class of differential equation, namely

$$\frac{d}{dt}x(t) = -rf\left(\int_0^1 x(t-s)ds\right),\,$$

where f is an odd function satisfying some conditions.

2. An epidemic model with temporary immunity

The delay differential equation (1.1) can be related to an epidemic model that accounts for temporary immunity ([1, 5, 3, 16]). Let us derive the delay differential equation (1.1) as a limiting case of the following SIRS type epidemic model with temporary immunity

(2.1a)
$$\frac{d}{dt}S(t) = -\beta S(t)I(t) + \gamma I(t-\tau),$$

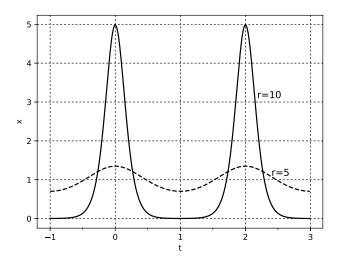
(2.1b)
$$\frac{d}{dt}I(t) = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t),$$

(2.1c)
$$\frac{d}{dt}R(t) = \gamma I(t) - \gamma I(t-\tau).$$

Here S(t), I(t) and R(t) respectively denote the fraction of susceptible, infective and recovered populations at time t. The model (2.1) has three parameters: transmission coefficient $\beta > 0$, the recovery rate $\gamma > 0$ and the immune period $\tau > 0$.

We choose the initial condition such that S(t) + I(t) + R(t) = 1, $t \ge 0$, implying that the total population is 1. Since it also follows

(2.2)
$$R(t) = \gamma \int_0^{\tau} I(t-s)ds, \ t \ge 0,$$



 \boxtimes 1.2. Time profile of the periodic solution for r=5 and r=10.

we derive the following scalar delay differential equation

(2.3)
$$\frac{d}{dt}I(t) = I(t)\left\{\beta\left(1 - I(t) - \gamma\int_0^\tau I(t-s)ds\right) - \gamma\right\}.$$

Letting $x(t) = \frac{I(t)}{I_e}$, where I_e is a nontrivial equilibrium of (2.3) and considering a nondimensional time so that the immune period is 1, we obtain

$$\frac{d}{dt}x(t) = (\beta - \gamma) x(t) \left(1 - \frac{x(t) + \gamma \tau \int_0^1 x(t - s) ds}{1 + \gamma \tau} \right).$$

If we fix $r = \beta - \gamma$ and let $\gamma \tau \to \infty$ then we formally obtain the equation (1.1). Local stability analysis for (2.3) can be found in [5, 3]. See also [14] for the application of the mathematical model to explain the periodic outbreak of a childhood disease.

- Blyuss, K.B., Kyrychko, Y.N., Stability and bifurcations in an epidemic model with varying immunity period.
 B. Math. Biol. 72 (2010) 490–505
- [2] Gopalsamy, K., Stability and oscillations in delay differential equations of population dynamics. Mathematics and its Applications, 74. Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht (1992)
- [3] Gonçalves, S., Guillermo, A., Gomes, M.F.C., Oscillations in SIRS model with distributed delays. Eur. Phys. J. B 81 (2011) 363-371
- [4] Györi, I., A new approach to the global asymptotic stability problem in a delay Lotka-Volterra differential equation. Math. Comp. Mod, 31 (2000) 9–28
- [5] Hethcote, H. W., Stech, H. W., van den Driessche, P. Nonlinear oscillations in epidemic models. SIAM J. Appl. Math. 40 (1981) 1–9
- [6] Jaquette, J., A proof of Jones' conjecture. arXiv preprint arXiv:1801.09806 (2018)
- [7] Jones, G.S., The existence of periodic solutions of $f'(x) = -\alpha f(x-1)\{1+f(x)\}$. J. Math. Anal. Appl. 5, (1962) 435-450

- [8] Jones, G.S., On the nonlinear differential-difference equation $f'(x) = -\alpha f(x-1) \{1 + f(x)\}$. J. Math. Anal. Appl. 4 (1962) 440–469
- [9] Kaplan, J.L., Yorke, J.A., Ordinary differential equations which yield periodic solutions of differential delay equations. J. Math. Anal. Appl. 48 (1974) 317–324
- [10] Lessard, J.P., Recent advances about the uniqueness of the slowly oscillating periodic solutions of Wright's equation. J. Differ. Equ. 248 (2010) 992–1016
- [11] Y. Nakata, An explicit periodic solution of a delay differential equation. J. Dyn. Diff. Eq. (2018): 1-17. https://doi.org/10.1007/s10884-018-9681-z
- [12] Nussbaum, R.D., Periodic solutions of some nonlinear autonomous functional differential equations. Annali di Matematica Pura ed Applicata 101 (1974) 263-306
- [13] Nussbaum, R.D., Periodic solutions of some nonlinear, autonomous functional differential equations. II. J. Diff. Equ. 14.2 (1973) 360-394
- [14] Omori, R., Nakata, Y., Tessmer, H.L., Suzuki, S., Shibayama, K., The determinant of periodicity in Mycoplasma pneumoniae incidence: an insight from mathematical modelling. Sci. Rep. 5:14473 (2015)
- [15] Ruan, S., Delay differential equations in single species dynamics, Delay Differential Equations and Applications 205 (2006) 477–517
- [16] Taylor, M. L., Carr, T. W., An SIR epidemic model with partial temporary immunity modeled with delay. J. Math. Bio. 59 (2009) 841-880
- [17] van den Berg, J.B., Jaquette, J., A proof of Wright's conjecture. Preprint arXiv:1704.00029, 2017.

島根大学総合理工学部数理科学科

Email address: ynakata@riko.shimane-u.ac.jp

ウェーブレット解析による聴性定常反応波形高速加算法の検証

井川 信子 1 , 守本 晃 2 , 芦野 隆 2 1 流通経済大学, 2 大阪教育大学

e-mail: ikawa@rku.ac.jp

1 概要

40-Hz 聴性定常反応(auditory steady-state response, ASSR)は40-Hz サイン波上の振幅変調音刺激によって誘発される聴覚中枢系脳波である(詳細は[1]参照).この脳波を被験者自身できこえを応答するのではない他覚的聴力検査に用いるためには、より迅速で正確な検出が必要である.現在は、検出に長時間を要している.我々はこれまで、ウェーブレット解析を用いるなどで、検出時間の短縮を目指してきたが、本稿では特に、Galambos らによる40-Hz event related potential (40-Hz ERP) に関する報告([2]参照)を応用して、聴性定常反応波形の高速加算処理法を提案する.ウェーブレット解析を用いて、その妥当性と有効性の比較検証を試みた結果について報告する.

2 40-Hz ASSR の測定法

40-Hz ASSR の測定は独自開発装置 (詳細は [3] 参照) による. 正弦波的振幅変調音 (sinusoidally amplitude-modulated tone : SAM) を 刺激音に用い、覚醒時、搬送周波数 (carrier frequency: CF) を 1000 Hz, 変調周波数 (modulation frequency: MF) を40 Hz とした. 計 測波形のサンプリング周波数は1024 Hz, サン プリングポイント 512 点 (500 ミリ秒, 周波 数分解能: 2 Hz) を, 1 epoch とする. 従来は 音刺激開始をトリガとして 1 epoch ごとに脳 波を記録するが、本装置では音刺激を連続して (高い音圧では10秒, 閾値付近では20秒ま たは30秒) 提示し、同時にその間の脳波を測 定した. また, 40-Hz ASSR の反応の有無の判 定は、Fridman らが提案した CSM(component synchrony measure) を計算する位相スペクトル 解析法を用いた. 今回の解析では本装置で収録 し、CSM により反応ありと判定された誘発脳 波と音刺激なしの自発脳波を用いて行った. 解 析時間は10秒の場合である.

3 1次元複素連続ウェーブレット解析

本稿では、一次元複素連続ウェーブレット解析 (the one-dimensional complex continuous wavelet analysis、略して CCWA) を適用する. すなわち、マザーウェーブレット: $\psi \in L^2(\mathbb{R})$: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t) \, dt = 0$. 通常、正規化され、 $\|\psi\| = 1$ で、t = 0 が中心である. a > 0 and $b \in \mathbb{R}$ に対して、次のように定義する.

 $\psi_{a,b}(t)=rac{1}{\sqrt{a}}\,\psi\left(rac{t-b}{a}
ight)$. ただし, $\|\psi_{a,b}\|=1$. (a,b) に対する $x\in L^2(\mathbb{R})$ における連続ウェーブレット変換を次式で定義する.

$$W_{\psi}[x(t)](a,b) = C(a,b) = \langle x, \psi_{a,b} \rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} x(t)\psi_{a,b}^{*}(t) dt,$$

ここで ψ^* は ψ の複素共役を示す. マザーウェーブレットとして, 次式で定義する 複素モルレ (complex Morlet) ウェーブレット関数 $\psi(t)$ を選択する (図 1 に表示する).

 $\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} e^{i\omega_0 t}$, $\psi(t)$ の実部 $\Re \psi(t)$ は t=0 で線対称である. $\psi(t)$ の虚部 $\Im \psi(t)$ は 原点 (0,0) で点対象である. ここで, $\sigma=\frac{\sqrt{3}}{2}$, $\omega_0=2\pi$ とおき次の MATLAB 関数を用いる:

[PSI,X] = cmorwavf(LB,UB,N,FB,FC) ただし, LB=-5, UB=5, N=1000, FB=1.5, FC=1. 以降, 上記 Morlet ウェーブレット関数を用い たウェーブレット解析を単に CCWA というこ とにする.

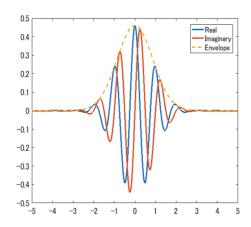
4 加算法の提案と CCWA 比較

従来は、計測脳波を512点ごとに切り出し加算した.

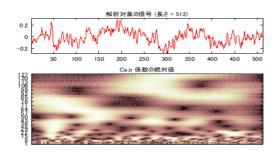
$$ASSR_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} Epoch_k$$

N=19 のとき、CCWA を適用した例を図 2 に表示する. この結果からは 40-Hz ASSR が検出できているとは、判定できない.

一方,我々の提案法はepoch ごとの波形の切り出しを1周期 (40 Hz) シフトして切り出す方



☑ 1. The complex Morlet wavelet.



☑ 2. Example results of conventional averaging.

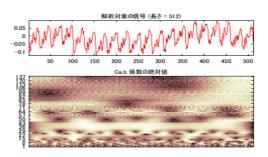
法である. 40-Hz ASSR の成立機序は,Galambos らによる 40-Hz ERP である. 40-Hz ERP は 40-Hz ASSR 同様に中間潜時反応 (middle latency response:MLR) であるので,この反応を 25 ミリ秒ずつ位相を遅らせながら加算すると,40 Hz のサイン波形に類似した反応として得られるだろうということによる.計測波形のサンプリングデータ $D=\{d[t]\mid t=0,1,2,\ldots\}$ and m>1 に対して,

$$\vec{a}_k = (d[26(k-1)], d[26(k-1)+1], \dots,$$

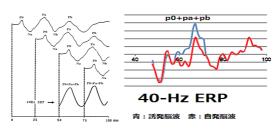
$$d[26(k-1)+511]), k=1,\ldots,m.$$

とするとき, $\mathbf{M} \leq (m-20)$ に対して,提案法の加算式は, $\vec{s}_{\mathbf{M}} = \frac{1}{\mathbf{M}}\sum_{k=21}^{\mathbf{M}+20} \vec{a}_k$. となる.従来法と

同一計測データに適用した結果を図 3 に示す. 周波数 40 Hz 付近に明るい黄色の帯が観察され、顕著な反応が得られた. さらに、Galambos らによる"po+pa+pb"生成法を図 4 の左図に、この方法による"po+pa+pb"を自発脳波 (赤線)と誘発脳波 (青線)から求めた結果を図 4 に重ね書きした. 図 2 の表示では反応判定が難しいが、図 4 では、特に pa 潜時が両者で異なり、確かに反応があるともいえる.



☑ 3. Example results of proposed averaging.



☑ 4. Example results of 40-Hz ERP.

5 まとめ

40-Hz ASSR の発生機序が MLR, すなわち 40-Hz ERP であるから, 40-Hz ASSR において,計測した脳波から epoch ごとの切り出しを 40-Hz ERP のように 1 周期(25 ミリ秒)シフトして加算する本提案手法の適用は妥当とみてよい結果が得られた. 自発脳波にも 40-Hz 成分があり,音刺激により誘発される 40-Hz 成分との違いを説明する鍵が,図 4 にあると思うので,さらなる分析は今後の課題とする.

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.

- [1] 青柳優, 聴性定常反応 (ASSR), Audiology Japan, 49, No.2 (2006), 135–145.
- [2] R. Galambos et al, A 40-Hz auditory potential recorded from the human scalp, Proc.Nati. Acad. Sci. USA, 78.4(1981), 2643–2647.
- [3] 井川, 久保田, 江越, 青柳, 鈴木, 下山, 正弦波的振幅変調音刺激による 40-Hz 聴 性定常反応の短時間抽出法について, 日 本音響学会 2009 年秋季研究発表会講演 論文集 (2009.9), 545-548.

両側四元数フーリエ変換と右側四元数フーリエ変換に関するいくつかの注 意

芦野隆一

大阪教育大学 数理情報

e-mail: ashino@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

1 概要

四元数は非可換なため、四元数値関数のフーリエ変換の定義にはいくつかの流儀がある. 採用するフーリエ変換の定義に応じて、成立する性質が異なる. この講演では、両側四元数フーリエ変換と右側四元数フーリエ変換を紹介し、いくつかの成立する性質の違いについて説明する.

2 四元数の基本的性質

2 次元平面における運動(平行移動と回転) が複素数で表現できるため、ハミルトンは 3 次 元平面における運動(平行移動と回転)を表す ことができる複素数の一般化を考えた。それが、 以下の関係:

$$i\mathbf{j} = -\mathbf{j}\mathbf{i} = \mathbf{k},$$

$$j\mathbf{k} = -\mathbf{k}\mathbf{j} = \mathbf{i},$$

$$k\mathbf{i} = -\mathbf{i}\mathbf{k} = \mathbf{j},$$

$$i^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = i\mathbf{j}\mathbf{k} = -1$$

を満たす 3 つの虚数単位 \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} を持つ四元数 $\mathbb{H} = \{q = q_0 + \mathbf{i}q_i + \mathbf{j}q_j + \mathbf{k}q_k \mid q_0, q_i, q_j, q_k \in \mathbb{R}\}$ である.

四元数 $q \in \mathbb{H}$ に対し、 q_0 を q のスカラー部分と呼び、Sc(q) で表し、 $\mathbf{i}q_1 + \mathbf{j}q_2 + \mathbf{k}q_3$ を q のベクトル部分と呼び、 \mathbf{q} で表す、 積 qp は

$$qp = q_0p_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} + q_0\mathbf{p} + p_0\mathbf{q} + \mathbf{q} \times \mathbf{p}$$
と表せる.ここで,

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{p} = (q_1 p_1 + q_2 p_2 + q_3 p_3),$$

$$\mathbf{q} \times \mathbf{p} = \mathbf{i}(q_2 p_3 - q_3 p_2) + \mathbf{j}(q_3 p_1 - q_1 p_3)$$

$$+ \mathbf{k}(q_1 p_2 - q_2 p_1)$$

である.

四元数 q の共役を,

 $\bar{q}=q_0-\mathbf{i}q_1-\mathbf{j}q_2-\mathbf{k}q_3,\quad q_0,q_1,q_2,q_3\in\mathbb{R}$ で定義する.

$$\overline{q}\overline{p} = \overline{p}\overline{q}$$

が成り立つ. 四元数 q のノルムを

$$|q|=\sqrt{qar q}=\sqrt{q_0^2+q_1^2+q_2^2+q_3^2}$$
で定義する。 $|qp|=|q||p|$ であり, $q^{-1}=rac{ar q}{|a|^2}$

であることがわかる。四元数 q を

$$q = q_+ + q_-, \qquad q_{\pm} = \frac{1}{2} (q \pm \mathbf{i} \, q \, \mathbf{j})$$

と分解できる. ここで,

$$q_{\pm} = \{ (q_0 \pm q_3) + \mathbf{i}(q_1 \mp q_2) \} \frac{1 \pm \mathbf{k}}{2}$$
$$= \frac{1 \pm \mathbf{k}}{2} \{ (q_0 \pm q_3) + \mathbf{j}(q_2 \mp q_1) \}$$

である. これにより,

$$|q|^2 = |q_-|^2 + |q_+|^2$$

が示せる.

3 四元数値関数のフーリエ解析

カラー画像は、Red、Green、Blue の 3 色で表すことができる。そこで、これらの値のなすベクトル (r,g,b) を四元数の (q_i,q_j,q_k) に対応させると、カラー画像は四元数値関数と見なせる ([1] を参照)。このため、四元数値関数の様々なフーリエ解析が考えられてきた。このとき、3 つの虚数単位 \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} の非可換性から、1 変数複素数値関数のフーリエ変換を定義する基本的な波形 $e^{-\mathbf{i}\omega x}$ をどのようにとるべきかが問題となる。ここでは、両側四元数フーリエ変換([2] を参照)と右側四元数フーリエ変換([3] を参照)の定義を紹介し、これらの四元数フーリエ変換に関するいくつかの注意を述べる。

定義 $\mathbf{1}$ (両側四元数フーリエ変換). 四元数値関数 $f \in L^1(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})$ に対して,f の両側四元数フーリエ変換 $\mathcal{F}_{O,b}\{f\}$ を

$$\mathcal{F}_{Q,b}\{f\}(\boldsymbol{\omega})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2}} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\mathbf{i}\omega_1 x_1} f(\boldsymbol{x}) e^{-\mathbf{j}\omega_2 x_2} d\boldsymbol{x}$$

で定義する.

複素数値関数に対する内積をそのまま四元数 値関数に拡張した場合,パーセヴァルの定理は 成立しないが、以下に定義する対称実スカラー 積についてはパーセヴァルの定理が成立する.

定義 **2** (対称実スカラー積). 対称実スカラー 積を

$$egin{aligned} \langle f,g
angle &= rac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \left(\overline{g(oldsymbol{x})} f(oldsymbol{x}) + f(oldsymbol{x}) \overline{g(oldsymbol{x})}
ight) doldsymbol{x} \ &= Sc \int_{\mathbb{R}^2} f(oldsymbol{x}) \overline{g(oldsymbol{x})} \, doldsymbol{x}, \end{aligned}$$

で定義する.

定義 3 (L^p -ノルム).

$$|f| = \sqrt{f_0^2(x) + f_1^2(x) + f_2^2(x) + f_3^2(x)}$$

とおき、 L^p -ノルムを

$$\|f\|_p = \left(\int_{\mathbb{R}^2} |f(\boldsymbol{x})|^p d\boldsymbol{x}\right)^{1/p}, \quad 1 \le p \le \infty,$$

で定義する.

定理 **4** (両側四元数フーリエ変換に関するスカラーパーセヴァルの定理). $f,g \in L^2(\mathbb{R}^2;\mathbb{H})$ に対して,

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})} = \langle \mathcal{F}_{Q,b} \{ f \}, \mathcal{F}_{Q,b} \{ g \} \rangle_{L^2(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})}$$

が成り立つ。特に、f = g のとき、プランシュレルの定理

$$||f||_{L^2(\mathbb{R}^2;\mathbb{H})}^2 = ||\mathcal{F}_{Q,b}\{f\}||_{L^2(\mathbb{R}^2;\mathbb{H})}^2.$$

が成り立つ.

定義 ${\bf 5}$ (右側四元数フーリエ変換). $f\in L^1(\mathbb{R}^2;\mathbb{H})$ に対して,f の右側四元数フーリエ変換 $\mathcal{F}_{Q,r}\{f\}$ を

$$\mathcal{F}_{Q,r}\{f\}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2}} \int_{\mathbb{R}^2} f(\boldsymbol{x}) \, e^{-\mathbf{i}\omega_1 x_1} \, e^{-\mathbf{j}\omega_2 x_2} \, d\boldsymbol{x}$$

で定義する.

定義 $\mathbf{6}$ (右側四元数逆フーリエ変換). $g \in L^1(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})$ に対して,g の右側四元数逆フーリエ変換を

$$\mathcal{F}_Q^{-1}[g](\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2}} \int_{\mathbb{R}^2} g(\boldsymbol{\omega}) e^{\mathbf{j}\omega_2 x_2} e^{\mathbf{i}\omega_1 x_1} d\boldsymbol{\omega}$$

で定義する.

定義 7. X, Y は \mathbb{H} -ベクトル空間とする. 作用素 $T: X \longrightarrow Y$ が,

$$T(\alpha x + \beta y) = \alpha T(x) + \beta T(y), \quad x, y \in X$$

を満たすとき、T は左 \mathbb{H} -線形であるという。左 \mathbb{H} -線形のときには、スカラー α , $\beta \in \mathbb{H}$ を左からのみかけることに注意すると、線形作用素 T のノルム $\|T\|$ や、随伴作用素(または共役作用素) T^* などが、実あるいは複素ヒルベルト空間のときと同様に定義できる。

以下では, $X(\mathbb{H})$ を左 \mathbb{H} -ヒルベルト空間とする.

補助定理 8. S, T は左 \mathbb{H} -ヒルベルト空間 $X(\mathbb{H})$ 上の自己共役作用素とする。このとき、

$$\forall u \in D([A, B]);$$

 $||Tu||||Su|| \ge \frac{1}{2}|([T, S]u, u)|.$

ここで,[A,B] = AB - BA(交換子)である. 定理 9. S,T は左 \mathbb{H} -ヒルベルト空間 $X(\mathbb{H})$ 上の自己共役作用素とする.このとき,

$$\forall a, b \in \mathcal{H}, \ \forall u \in D([A, B]);$$

 $\|(T+a)u\| \|(S+b)u\| \ge \frac{1}{2} |([T, S]u, u)|.$

定理 10 (パーセヴァルの定理).

$$\forall f, g \in L^2(\mathbb{R}^2; \mathbb{H});$$
$$(\mathcal{F}_Q\{f\}, \mathcal{F}_Q\{g\})_{L^2(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})} = (f, g)_{L^2(\mathbb{R}^2; \mathbb{H})}.$$

- [1] Todd A Ell, Stephen J Sangwine, Hypercomplex Fourier transforms of color images, IEEE Transactions on Image Processing, **16**(1), 22–35, 2007.
- [2] M. Bahri and R. Ashino, Duality property of two-sided quaternion Fourier transform, 2018 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition (ICWAPR).
- [3] M. Bahri and R. Ashino, Some useful results associated with right-sided quaternion Fourier transform, 2018 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition (ICWAPR).

2階楕円型作用素に対する逆作用素ノルム評価の改良

渡部 善隆 1, 木下 武彦, 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 Problem

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 complex L^2 -Sobolev space of order m on Ω . We define the Hilbert space

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

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 L^2 -inner product on Ω . Let

$$H(\Delta; L^2(\Omega)) := \{ u \in H_0^1(\Omega) \mid \Delta u \in L^2(\Omega) \}$$

be a Banach space with respect to the graph norm $||u||_{L^2(\Omega)} + ||\Delta u||_{L^2(\Omega)}$. Since Ω belongs to 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.

Consider the linear elliptic operator

$$\mathcal{L}u := -\Delta u + b \cdot \nabla u + cu \tag{1}$$

from $H(\Delta; L^2(\Omega))$ to $L^2(\Omega)$ for $b \in L^{\infty}(\Omega)^d$, $c \in L^{\infty}(\Omega)$ with norms

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

$$||c||_{L^{\infty}(\Omega)} = \underset{x \in \Omega}{\operatorname{ess sup}} |c(x)|,$$

respectively.

The aim of this talk is to provide a computable M > 0 satisfying

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

as well as the invertibility proof of \mathscr{L} . The constant M of (2) stands for an upper bound of the operator norm: $\|\mathscr{L}^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^2,H_0^1)}$.

For example, when one try to find u in $H(\Delta; L^2(\Omega))$ satisfying nonlinear problems:

$$-\Delta u(x) = f(x, u, \nabla u), \quad x \in \Omega$$
 (3)

with certain properties for $f: H_0^1(\Omega) \to L^2(\Omega)$ and apply infinite-dimensional Newton or Newton-Kantrovich-type verification approach for u, an explicit bound M > 0 satisfying (2) plays an essential role [1, 2, 3, 4], and it is desirable to obtain M as small as possible.

2 Proposed approach

The authors have been proposed some numerical verification approaches obtaining M of (2) [1, 5, 6, 7]. They are based on some orthogonal projections to Galerkin approximations in $H_0^1(\Omega)$ with constructive a priori error estimations, and are able to be applied to the case which the operator \mathcal{L} is non-self-adjoint.

The approach in [1, 5] transforms the problem $\mathcal{L}u = g$ for $g \in H^{-1}(\Omega)$ (which is the dual space of $H_0^1(\Omega)$) into an equivalent fixedpoint problem on $H_0^1(\Omega)$ and constructs a validated bound \mathcal{M} satisfying

$$\|\mathscr{L}^{-1}g\|_{H_0^1(\Omega)} \le \mathcal{M}\|g\|_{H^{-1}(\Omega)}, \quad \forall g \in H^{-1}(\Omega).$$
(4)

Then the upper bound for (2) can be implied by $M = C_p \mathcal{M}$, where $C_p > 0$ is the Poincaré or Rayleigh-Ritz constant which satisfies

$$||u||_{L^2(\Omega)} \le C_p ||\nabla u||_{L^2(\Omega)}, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega).$$
 (5)

Although many computer-assisted proofs show the effectivity of the approach in [1, 5], it has a restriction such that the lower bound of M is not less than C_p and does not converge to the exact operator norm of \mathcal{L}^{-1} .

In [7], we present an alternative method to compute M in (2) which is based on the perturbation theory of linear operator. Even though the criterion for the invertibility of \mathcal{L} is the same as [1, 5], it has no limitation such as the lower bound of M is not less than C_p .

In [6] the authors considered another estimation for M of (2). The procedure presented by [6] avoided fixed-point formulation

and H^{-1} -type estimation such that (4), and showed that it is expected to converge, as the Galerkin space increases, to its exact operator norm $\|\mathscr{L}^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^2,H_0^1)}$ under suitable assumptions. However, it is reported on that, for some linear differential operators, the criterion of invertibility for the approach in [6] is harder than the criterion in [1, 5, 7].

This talk presents some improvements for our previous approaches in [6, 7] obtaining (2) as well as an alternative invertivility criterion for \mathcal{L} . Our proposed approaches are based on constructive L^2 -norm estimates of Laplacian for second-order elliptic operators with Dirichlet boundary condition and applications of the authors' previous result related to a posteriori estimates of inverse operators which use projection and a priori error estimations.

謝辞 This work was supported by Grants-in-Aid from the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology of Japan (Nos. 15K05012 and 15H03637) and CREST, JST. The computation was mainly carried out using the computer facilities at Research Institute for Information Technology, Kyushu University, Japan.

- [1] Nakao, M.T., Hashimoto, K. and Watanabe, Y., A numerical method to verify the invertibility of linear elliptic operators with applications to nonlinear problems, Computing, 75 (2005), 1–14.
- [2] Oishi, S., Numerical verification of existence and inclusion of solutions for non-linear operator equations, J. Comput. Appl. Math., 60, 1-2 (1995), 171–185.
- [3] Plum, M., Existence and multiplicity proofs for semilinear elliptic boundary value problems by computer assistance, Jahresber. Dtsch. Math-Ver., 110 (2008), 19–54.
- [4] Plum, M., Computer-assisted proofs for semilinear elliptic boundary value problems, Jpn. J. Ind. Appl. Math., 26,

- 2-3 (2009), 419–442.
- [5] Nakao, M.T., Watanabe, Y., Kinoshita, T., Kimura, T. and Yamamoto, N., Some considerations of the invertibility verifications for linear elliptic operators, Jpn. J. Ind. Appl. Math., 32 (2015), 19–32.
- [6] Watanabe, Y., Kinoshita, T. and Nakao, M.T., A posteriori estimates of inverse operators for boundary value problems in linear elliptic partial differential equations, Math. Comp., 82 (2013), 1543–1557.
- [7] Kinoshita, T., Watanabe, Y. and Nakao, M.T., Some remarks on the rigorous estimation of inverse linear elliptic operators, in: Nehmeier M., et al. (eds.) SCAN 2014, LNCS 9553, pp. 225-235, 2016.

微分方程式の爆発解の精度保証付き数値計算: ケーススタディ — 指数関数非線型項を持つ場合

松江 要1, 高安 亮紀2

 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), 2 筑波大学システム情報系

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

1 始めに

本稿は指数関数非線型項を持つ微分方程式の 爆発解を扱う. 考察の基礎とする方程式は

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + e^u, & (t, x) \in \mathbb{R}_{>0} \times (0, 1), \\ u(0, x) = u_0(x), & x \in (0, 1), \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0, & t \ge 0 \end{cases}$$
(1)

の空間離散近似である. 具体的には, N を区間 [0,1] の分割数として,

$$u'_{1} = N^{2}(-2u_{1} + u_{2}) + e^{u_{1}},$$

$$u'_{i} = N^{2}(u_{i-1} - 2u_{i} + u_{i+1}) + e^{u_{i}}, \quad (2)$$

$$(i = 2, \dots, N - 2)$$

$$u'_{N-1} = N^{2}(u_{N-1} - 2u_{N-2}) + e^{u_{N-1}},$$

を考える. ただし, $'=\frac{d}{dt}$ である. このような指数関数非線型項が寄与するダイナミクスとしては, 固体燃料燃焼の発火過程 (e.g., [1]) や, 化学反応における熱暴走が挙げられる. 特に, 化学反応速度論におけるアレニウス則が, 系の指数関数的非線型項に寄与する.

ごく近年、多項式が無限遠方にて支配的となるベクトル場に対して、爆発解の精度保証付き数値計算や力学系的解釈の理論構築を行ってきた (e.g., [2, 4]). そこでは、ベクトル場の漸近的な意味での**擬斉次性や時間スケール特異点解消**を使って爆発解を幾何学的に解釈し、精度保証計算のテクニックであるリャプノフ追跡により爆発直前の解をtの代わりにリャプノフ関数の値Lによるパラメータ付けを施し、爆発時刻の陽な評価を行っている。指数関数非線型項は、この枠から外れる。にも関わらず、(2)では指数増大項が斉次に現れていることから、従来のアイデアを素直にアレンジすることで従来の議論をそのまま適用し、爆発解の考察を数学的・数値的に行うことが可能となると期待される.

2 特異点解消ベクトル場

先行結果 (e.g., [2]) に従い, 無限遠方を発散 方向も含めてうまく取り扱えるように適切なコ ンパクト化を施す. 今回の場合は, 以下のよう な斉次指向的コンパクト化を施す:

$$u_{N/2} = s^{-1}, \quad u_i = s^{-1}x_i \quad (i \neq N/2). \quad (3)$$

注意 1. 指向的コンパクト化 (3) は,区間の中心点の方向に従っている.この選び方は,(1) の解の(数値的)振る舞い方を反映している.図 1. に,(2) で N=128, $u_0=2.5(1-\cos(2\pi x))$ とした時の計算例を載せている.この図を見ると,中心点にて爆発しているように見える.

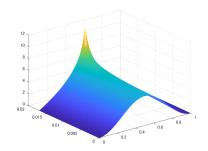


図 1. (2) の爆発解プロファイル例

このコンパクト化により $(u_{N/2}$ -成分における) 無限遠が $\{s=0\}$ なる部分空間に対応する. この部分空間を**地平線**と呼ぶことにする. (3) による変換を受けたベクトル場は, $s\to 0$ で発散する. そこで, 次の時間スケール特異点解消を施す:

$$\frac{d\tau}{dt} = se^{1/s}. (4)$$

この時, τ -時間スケールで次のベクトル場を得る. これは, $\{s=0\}$ も込めて正則なベクトル

場となっている¹:

$$\dot{s} = -N^2 e^{-1/s} (x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - s
\equiv f_{N/2}(s, x),
\dot{x}_i = -N^2 x_i s^{-1} e^{-1/s} (x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1})
- x_i + N^2 s^{-1} e^{-1/s} (x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1})
+ e^{(x_i - 1)/s}
\equiv f_i(s, x) (i \neq 1, N/2, N - 1), (5)
\dot{x}_1 = -N^2 x_1 s^{-1} e^{-1/s} (x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1})
- x_1 + N^2 s^{-1} e^{-1/s} (-2x_1 + x_2)
+ e^{(x_1 - 1)/s}
\equiv f_1(s, x),$$

$$\dot{x}_{N-1} = -N^2 x_{N-1} s^{-1} e^{-1/s} (x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - x_{N-1} + N^2 s^{-1} e^{-1/s} (x_{N-2} - 2x_{N-1}) + e^{(x_{N-1}-1)/s} \equiv f_{N-1}(s, x).$$

ここで、 $=\frac{d}{d\tau}$. ベクトル場 (5) を (2) の特異点解消ベクトル場と呼ぶことにする. (5) の時間大域解に対して、元の微分方程式 (2) の最大存在時間は

$$t_{\text{max}} = \int_0^\infty s^{-1}(\tau) e^{-1/s(\tau)} d\tau$$

で定められる.

3 精度保証付き数値計算

- (5) について、地平線 $\{s=0\}$ 上の平衡点への時間大域解を求めることで、爆発解を求める. 基本的な計算法は、[4] と全く同じである:
- 1) 地平線上の平衡点を求め、その $\{s \geq 0\}$ 内の近傍 N を一つ定めて N 上のリャプノフ関数 L を構成する.
- 2) 初期データを適当に定めて、(5) の初期値 問題を解き、 $\tau = \tau_N < \infty$ で $N \cap \{s > 0\}$ 内に含まれるような解を構成する.
- 3) $t_N := \int_0^{\tau_N} s^{-1}(\tau) e^{-1/s(\tau)} d\tau$ として, $t_{\max} t_N$ の上界 $\overline{t_{\max}}$ を L を使った評価式で計算する.

上記は全て精度保証付き数値計算可能であり (e.g., [4]), これらの計算により $t_{\max} \in [t_N, \overline{t_{\max}}]$ である爆発解を得られる.

実際の計算においては、 $h(s) \equiv s^{-1}e^{-1/s}$ の扱いに気をつけなければならない. この関数は $s \geq 0$ で C^{∞} であるが $(s \to +0$ のとき、 $h(s) \to 0)$, 数値計算ではゼロ除算を伴うため、直接区間演算を実行できない. しかし、 $s \in [0,1]$ において h(s) は s の単調増大関数であるため、 $0 \leq \overline{s} \ll 1$ で h(s) の値は $[0,h(\overline{s})]$ という区間で包含できる. h の微分も同様である. 指数減衰効果により、 \overline{s} がある程度大きくても $h(\overline{s})$ は非常に小さくなることが期待される. 今回 N=8、初期データを $u_0(x)=2.5(1-\cos(2\pi x))$ の空間一様離散化とし、以下の結果を得た. 図 2 も参照せよ:

 $t_{\text{max}} \in 0.01384523095580_{0398}^{5947}$

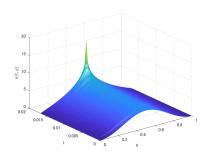


図 2. 数値検証できた (2) の爆発解プロファイル

注意 2. [3]の議論に従うと、今回精度保証計算できた爆発解は $t \to t_{\rm max}$ で次の漸近挙動を持つことが示される:

$$u_{N/2}(t) = C \log\{(t_{\text{max}} - t)^{-1}\}(1 + o(1)).$$

- [1] J. Bebernes and D. Eberly, Mathematical Problems from Combustion Theory, Springer, 1989.
- [2] K. Matsue, *arXiv:1611.06346*, to appear in *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.*
- [3] 松江 要, 日本数学会 2018 年度年会, 2018 年 3 月 18 日.
- [4] A. Takayasu, K. Matsue, T. Sasaki, K. Tanaka, M. Mizuguchi, and S. Oishi, J. Comp. Appl. Math., 314(2017), 10– 29.

 $^{^1}$ ただし、任意の $i=1,\cdots,N-1$ に対して $x_i\leq 1$ を要求される.

フーリエ係数の時間発展方程式に対する解の精度保証付き数値計算

高安 亮紀 1

1 筑波大学システム情報系

e-mail: takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

1 概要

周期境界条件を課した偏微分方程式の初期値 境界値問題をスペクトル法で数値計算する際, 未知関数のフーリエ級数の各係数に関する時間 発展方程式の解を数値計算する.この問題に対 して解の精度保証付き数値計算を実行するには, 点列空間上に定義された可算無限個の常微分方 程式系の初期値問題を厳密に解く必要がある. 本講演では,この常微分方程式系に対する解の 精度保証付き数値計算法を紹介する.

2 フーリエ係数の時間発展方程式

簡単のため,区間 (0,1)上で周期境界条件を課した偏微分方程式の初期値境界値問題を考える.この問題をフーリエ級数を用いるスペクトル法で数値計算する際,方程式の未知関数を

$$u(t,x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k(t) e^{ik\omega x}, \ \omega = 2\pi$$

とフーリエ級数展開した各係数 $(a_k(t))_{k\in\mathbb{Z}}$ をフーリエ係数と呼び (cf. [1,2]), 実際の数値計算ではフーリエ係数の近似を, 最大波数が N として, $(\tilde{a}_k(t))_{k\leq N}$ という形で得る.

さて、ここで $a(t)=(a_k(t))_{k\in\mathbb{Z}}$ とし、対象の偏微分方程式が次のようなフーリエ係数に関する無限次元の常微分方程式系に書き換えられることを仮定する.

$$\frac{d}{dt}a(t) = La(t) + \mathcal{N}(a(t)),$$

ここで L はある閉作用素, \mathcal{N} は点列 a(t) に対する非線形作用素である。本研究ではこのような常微分方程式系に対して時間発展する解を,スペクトル法で得られた近似解の拡張 $\tilde{a}(t):=(\dots,0,0,\tilde{a}_{-N}(t),\dots,\tilde{a}_{N}(t),0,0,\dots)$ を基に, 適切な関数空間 X の下で, 近似解近傍

$$B(\tilde{a}, \alpha) := \{ a \in X : ||a - \tilde{a}||_X \le \alpha \}$$

内での局所一意存在を数値計算によって厳密に 証明する. 基本方針は点列 a に関する作用素方 程式

$$(F(a))(t) := \frac{d}{dt}a(t) - La(t) - \mathcal{N}(a(t)) = 0$$

$$\tag{1}$$

の簡易ニュートン写像

$$(T(a))(t) := a(t) - A(F(a))(t)$$

を考え, a = T(a) をみたす不動点 a が(t に対して一様に)存在することを数値計算により検証する. そのためには

- 検証する関数空間 X を決定
- 簡易ニュートン写像の作用素 A を決定 する必要がある.

3 複素ギンツブルク-ランダウ方程式

本研究の詳細を説明する具体例として, 複素 ギンツブルク-ランダウ方程式

$$u_t = e^{i\gamma} (u_{xx} + u^2), \quad x \in (0,1), \ t \ge 0, \ (2)$$

に周期境界条件を課した初期値問題を考える. 定数 $\gamma \in (0, \pi/2)$, 初期関数は $u(0,x) = 50(1-\cos(2\pi x))$. これは岡本ら [3] によって藤田方程式に対する解の複素時間挙動の一つとして紹介された. フーリエ級数展開により得られる無限次元の常微分方程式系は $k \in \mathbb{Z}$ に対して

$$\frac{d}{dt}a_k(t) = e^{i\gamma} \left[-k^2 \omega^2 a_k(t) + (a(t) * a(t))_k \right]$$
(3)

である. ここで b*c は点列 $b=(b_k)_{k\in\mathbb{Z}}, c=(c_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ に対するコーシー積を表し,

$$(b*c)_k = \sum_{m \in \mathbb{Z}} b_{k-m} c_m, \ k \in \mathbb{Z}$$

で定義される. 掛け算作用素 Lを

$$La := \left(-k^2 \omega^2 a_k\right)_{k \in \mathbb{Z}}$$

と定義すると、作用素方程式 (1) をみたす作用素 F は

$$(F(a))(t) := \frac{d}{dt}a(t) - e^{i\gamma} \left(La(t) + a\left(t\right) * a\left(t\right)\right)$$

$$\tag{4}$$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

と与えられる. 本問題で不動点の存在を検証する関数空間 X は以下の考察により決定する. 方程式 (2) の解はコーシー=コワレフスカヤの定理より解析関数である事が期待できる. 従って, 点列空間 $\ell^1:=\left\{a=(a_k)_{k\in\mathbb{Z}}:\sum_{k\in\mathbb{Z}}|a_k|<\infty\right\}$ を考え, この点列を係数にもつフーリエ級数が解析関数となる Paley-Wiener の結果を利用する. よって, 数値検証する関数空間はバナッハ空間

$$X = C((0, t); \ell^1).$$

このノルムのもとで近似解の近傍

$$B_{(0,t)}(\tilde{a},\alpha) := \left\{ a \in X : \|a - \tilde{a}\|_{C((0,t);\ell^1)} \le \alpha \right\}$$

を定義し、この中の任意の元aに対して、 $\|T(a) - \tilde{a}\|_X (\leq \|a - \tilde{a}\|_X) \leq \alpha$ が成立し、T の縮小性も成立すれば、バナッハの不動点定理から T(a) = a をみたす不動点が $B_{(0,t)}(\tilde{a},\alpha)$ 内に存在することがいえる.

4 作用素 A

簡易ニュートン写像 T(a)=a-AF(a) における作用素 A を決定するには,斉次な初期値問題の解作用素を考える.以後,点列 $c(t)=(c_k(t))_{k\in\mathbb{Z}}$ を単に c と書く.

$$c = (\dots, 0, c_{-N}, \dots, c_{N}, 0, \dots)$$

$$+ (\dots, c_{-N-1}, 0, \dots, 0, c_{N+1}, \dots)$$

$$=: c^{(N)} + c^{(\infty)}$$

と分け、さらに上で定義した \tilde{a} を使って、

$$\left(\tilde{a}*c^{(N)}\right)_k := \sum_{\substack{k_1 + k_2 = k \\ |k_1|, |k_2| \leq N}} \tilde{a}_{k_1} c_{k_2}^{(N)}$$

$$\left(\tilde{a} * c^{(\infty)}\right)_k := \left(\tilde{a} * c\right)_k - \left(\tilde{a} * c^{(N)}\right)_k$$

とする. 作用素 A は関数列 c に対して, 次の斉次な初期値問題

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}c_{k}+e^{\mathrm{i}\gamma}\left\{k^{2}\omega^{2}c_{k}-2\left(\tilde{a}\left(t\right)*c^{(N)}\right)_{k}\right\}=0\\ (|k|\leq N),\\ \frac{d}{dt}c_{k}+e^{\mathrm{i}\gamma}\left\{k^{2}\omega^{2}c_{k}-2\left(\tilde{a}\left(t\right)*c^{(\infty)}\right)_{k}\right\}=0\\ (|k|>N) \end{cases}$$

の解を, $c=A\cdot 0$ と与える解作用である. これは初期値 c(0) に対して c(t)=U(t,0)c(0) と与える発展作用素 U を使うと $A\cdot 0=U(t,0)c(0)$

と表現できる.この初期値問題は有限次元部分と無限次元部分に分けられて, $A\cdot 0=A^{(N)}\cdot 0+A^{(\infty)}\cdot 0=U^{(N)}(t,0)c^{(N)}(0)+U^{(\infty)}(t,0)c^{(\infty)}(0)$ と表せる.従って,有限次元部分 $U^{(N)}$ は常微分方程式の言葉でいう基本解(fundamental solution)で表し,無限次元部分 $U^{(\infty)}$ は $\tilde{a}(t)$ がt変数に依存するため,時間依存する作用素が生成する発展作用素となる.

5 時間局所包含について

不動点形式 a(t) = T(a)(t) に対して, 近似解 $\tilde{a}(t)$ 近傍の評価を得る. 以後, t は固定し, (t) は省略する.

$$\begin{split} T(a) &- \tilde{a} \\ &= T(a) - T(\tilde{a}) + T(\tilde{a}) - \tilde{a} \\ &= a - AF(a) - (\tilde{a} - F(\tilde{a})) - AF(\tilde{a}) \\ &= a - \tilde{a} - A(F(a) - F(\tilde{a})) - AF(\tilde{a}) \\ &= A\left\{A^{\dagger}(a - \tilde{a}) - (F(a) - F(\tilde{a}))\right\} - AF(\tilde{a}) \end{split}$$

ここで A^{\dagger} は $AA^{\dagger}=I$ となる作用素で, 前節で解作用素 A を考える際に定義した斉次な初期値問題の微分作用素に対応する. 上式を関数空間 X のノルムで評価して出てきた不動点の存在条件が数値計算を利用して検証する解の時間局所包含のための十分条件となる.

講演では十分条件の詳細、およびそれを利用した結果について紹介したい.

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:16H03950, 18 K13453) の助成を受けたものである.

- J. S. Hesthaven, S. Gottlieb, and D. Gottlieb, Spectral Methods for Time-Dependent Problems, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press, 2007.
- [2] L. N. Trefethen, Spectral Methods in MATLAB, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.
- [3] C.-H. Cho, H. Okamoto, M. Shōji, A blow-up problem for a nonlinear heat equation in the complex plane of time, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 33, 145– 166 (2016).

3 次元領域における Navier-Stokes 方程式の定常解の検証 Approach to the Stationary Solution Verification for the Navier-Stokes Equation in 3D Domain

Xuefeng LIU¹, Mitsuhiro NAKAO², and Shin'ichi OISHI³

 1 Niigata University, Niigaga, Japan, 2 Kyusyu University, Kyusyu, Japan, 3 Waseda University, Tokyo, Japan

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

The verified computing, as a new approach to investigate the solution existence to nonlinear equation systems, is drawing attention of researchers. In the past decades, there have been several fundamental results as the milestones to the objective of the solution verification for non-linear equations; see [1, 2, 3]. As a success case, the solution verification of Stokes' wave of extreme form is given in [4].

In this talk, we consider the solution verification for the stationary Navier-Stokes equation over a non-convex 3D domain Ω ,

$$-\Delta u + (u \cdot \nabla)u + \nabla p = f$$

$$\operatorname{div} u = 0 \text{ in } \Omega$$

$$u = 0 \text{ on } \partial\Omega$$

The verification is under the frame of Newton-Kantorovich's theorem along with the quantitative error analysis for the finite element methods. Such technique has been successfully applied to various non-linear equations, for example, the semilinear elliptic equation [5].

For the two kernel problem required in applying Newton-Kantorovich's theorem, we take the following schemes.

- To bound the norm of the inverse of a differential operator, the algorithm based on the fixed-point theorem [2] is utilized; a reformulation of this algorithm can be found in [5].
- To give the *a priori* error estimation of the projection from solution existing space to finite element spaces, the hypercircle method [6, 7] is adopted. Particularly,

for the related Stokes equation, the divergence free finite element solution is constructed by using the Scott-Vogelius type FEM over a special mesh proposed in [8].

Verification example

Let $\Omega = (0,2)^3 \setminus [1,2]^3$, $f = (0.95 - y, x - 1, 1 - (z - 1)^2)$. We calculate the approximation solution u_h and then verify the solution existence in the neighbourhood of u_h ; see Figure 1. The following FEM space settings are used in the computation.

- Conforming Lagrange finite element space of degree 2;
- Raviart-Thomas space of degree 1 (piecewise quadratic polynomial);
- Discontinuous element of degree 1 (piecewise linear polynomial).

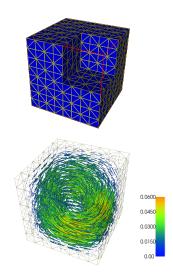


Figure 1: 3D mesh and approximate solution

- [1] M. Plum, Computer-assisted existence proofs for two-point boundary value problems, Computing, 46:1, 19–34, 1991.
- [2] Y. Watanabe, N. Yamamoto, and M. T. Nakao, A numerical verification method of solutions for the Navier-Stokes equations, Reliable Computing, 5(3), 347-357, 1999.
- [3] S. Oishi, Numerical verification of existence and inclusion of solutions for non-linear operator equations, J. Comput. Appl. Math, 60:1, 171–185, 1995.
- [4] K. Kobayashi, Computer-assisted Uniqueness Proof for Stokes' Wave of Extreme Form, Nankai Series in Pure, Applied Mathematics and Theoretical Physics, Vol.10, pp.54-67, 2013.
- [5] A. Takayasu, X. Liu, and S. Oishi, Verified computations to semilinear elliptic boundary value problems on arbitrary polygonal domains, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 4(1), 34-61, 2013.
- [6] X. Liu and S. Oishi, Verified eigenvalue evaluation for the Laplacian over polygonal domains of arbitrary shape, SIAM J. Numer. Anal., 51(3), 1634–1654, 2013.
- [7] F. Kikuchi, and H. Saito, Remarks on a posteriori error estimation for finite element solutions, Journal of Computational and Applied Mathematics, 199, 329–336, 2007.
- [8] S. Zhang, On the P1 powell-sabin divergence-free finite element for the stokes equations, Journal of Computational Mathematics, vol. 26, no. 3,pp. 456–470, 2008.

$A_2^{(2)}$ 型クラスター代数の生成元について

野邊 厚

千葉大学教育学部

e-mail: nobe@faculty.chiba-u.jp

1 概要

ランクnのクラスター代数の生成元の全体Xは、初期種子 $\Sigma_0=(x_0,B_0)$ に対してあらゆる方向のミューテーション μ_k $(k=1,2,\ldots,n)$ を繰り返し適用することで得られるすべての種子 $\Sigma_l=(x_l,B_l)$ に含まれるクラスター変数の和集合として定義される[1]:

$$\mathcal{X} = igcup_{l \in \mathbb{T}_n} oldsymbol{x}_l$$

ここで、 \mathbb{T}_n は各辺が $1,2,\ldots,n$ でラベル付けされた n 正則木である。一般に \mathcal{X} は無限集合となるため、有限型でないクラスター代数に対して \mathcal{X} を具体的に書き下すのは容易ではない。本講演では、クラスター代数のミューテーションを離散力学系の時間発展と見なすことで、とくに $A_2^{(2)}$ 型のクラスター代数に対して、その離散可積分構造を用いて \mathcal{X} を具体的に構成する。

2 $A_2^{(2)}$ 型クラスター代数

n=2 として、初期種子 $\Sigma_0=(\boldsymbol{x}_0,B_0)$ を次のように与える:

$$x_0 = (x_1, x_2), B_0 = \begin{pmatrix} 0 & -4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

k = 1,2 方向のミューテーション μ_k に対して、 クラスターおよび交換行列はそれぞれ次のよう にミューテーションするものとしよう:

$$x_{2m} \xrightarrow{\mu_1} x_{2m+1} \xrightarrow{\mu_2} x_{2m+2},$$

$$B_{2m} \xrightarrow{\mu_1} B_{2m+1} \xrightarrow{\mu_2} B_{2m+2}$$

また、各成分を次のようにおく:

$$\mathbf{x}_l = (x_{1;l}, x_{2;l}), \ B_l = \left(b_{ij}^l\right)$$

このとき

$$B_l = \begin{cases} B_0 & l \text{ even,} \\ -B_0 & l \text{ odd.} \end{cases}$$

であり、対応する一般化 Cartan 行列 $A(B_l)$ は すべての l に対して

$$A(B_l) := \left(2\delta_{ij} - \left|b_{ij}^l\right|\right) = \begin{pmatrix} 2 & -4\\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

のように $A_2^{(2)}$ 型となるため、このクラスター 代数は $A_2^{(2)}$ 型とよばれる。

3 離散可積分系へ

クラスター x_l の k 方向のミューテーションは次のように与えられる:

$$x_{j;l+1} = \begin{cases} \frac{\prod x_{i;l}^{[b_{ik}^l]_+} + \prod x_{i;l}^{[-b_{ik}^l]_+}}{x_{k;l}} & j = k, \\ x_{j;l} & j \neq k, \end{cases}$$

命題 1 $t \geq 0$ に対して、 z^t および w^t を $z^t = x_{1;2t}$ 、 $w^t = x_{2;2t}$ とおく。また、 $z^0, w^0 \in \mathbb{P}^2(\mathbb{C})$ と仮定する。このとき、ミューテーション列 $\mu_1, \mu_2, \mu_1, \mu_2, \dots$ は双有理写像力学系

$$\psi_{\mathrm{vh}}: \mathbb{P}^2(\mathbb{C}) \to \mathbb{P}^2(\mathbb{C});$$

$$(z^t, w^t) \mapsto$$

$$(z^{t+1}, w^{t+1}) = \left(\frac{w^t + 1}{z^t}, \frac{(z^{t+1})^4 + 1}{w^t}\right) \quad (1)$$

ここで

$$(z^{t}, w^{t}) = (x_{1;2t}, x_{2;2t}) \xrightarrow{\mu_{1}} (z^{t+1}, w^{t}) = (x_{1;2t+1}, x_{2;2t+1}) \xrightarrow{\mu_{2}} (z^{t+1}, w^{t+1}) = (x_{1;2t+2}, x_{2;2t+2})$$

であり、 $\mu_2 \circ \mu_1$ を 1 回の時間発展としていることに注意しよう。

双有理写像力学系 ψ_{vh} は離散可積分系である。 実際、 γ_{λ} を次で与えられる平面曲線とする:

$$\gamma_{\lambda} := (f(z, w) = 0),$$

 $f(z, w) := (w + 1)^2 + \lambda z^2 w + z^4,$

ただし、 λ はパラメータである。このとき、 γ_λ は (0,-1) に特異点をもつ特異曲線であるが、 $\psi_{
m vh}$ の不変曲線になっている。

定理 2 特異 4 次曲線 γ_{λ} は双有理写像力学系 ψ_{vh} の不変曲線であり、 λ は保存量である。 \square

曲線 γ_{λ} の特異点を解消するために、点(0,-1)においてブローアップする。

$$\widetilde{\pi}:(u,v)\mapsto(z,w)=(v,uv-1)$$

このとき、γλは狭義引き戻し

$$\widetilde{\gamma}_{\lambda} := \left(\widetilde{f}_0(u, v) = 0\right),$$

$$\widetilde{f}_0(u, v) := u^2 + \lambda(uv - 1) + v^2$$

と例外曲線 v=0 へ写り、双有理写像 $\psi_{\rm vh}$ は次の共役な双有理写像 $\widetilde{\psi}_{\rm dv}$ へ変換される:

$$\widetilde{\psi}_{\text{dv}} = \widetilde{\pi}^{-1} \circ \psi_{\text{vh}} \circ \widetilde{\pi};$$

$$(u^t, v^t) \mapsto (u^{t+1}, v^{t+1}) = \left(\frac{(u^t)^3 + v^t}{u^t v^t - 1}, u^t\right)$$

4 線形化と一般解

命題 3 双有理写像 $\widetilde{\psi}_{\mathrm{dv}}$ は線形化できる:

$$(u^{t+1}, v^{t+1}) = (-\lambda u^t - v^t, u^t)$$

ただし、次のようにおく:

$$\lambda = -\frac{(u^0)^2 + (v^0)^2}{u^0 v^0 - 1}$$

(証明) 不変曲線 $\tilde{\gamma}_{\lambda}$ を用いて

$$\begin{split} u^{t+1} &= \frac{(u^t)^3 + v^t}{u^t v^t - 1} \\ &= \frac{-u^t \left\{ \lambda (u^t v^t - 1) + (v^t)^2 \right\} + v^t}{u^t v^t - 1} \\ &= -\lambda u^t - v^t \end{split}$$

となる。

双有理写像 $\widetilde{\psi}_{\rm dv}$ の線形化とブローダウン $\widetilde{\pi}^{-1}$ により、双有理写像 $\psi_{\rm vh}$ で与えられる力学系の一般解を求めることができる。はじめに

$$\lambda = -\frac{(w^0 + 1)^2 + (z^0)^4}{(z^0)^2 w^0},$$
$$\Lambda = \log(-\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4}) - \log 2$$

とおく。さらに、次のようにおく:

$$\rho_1(t) = \frac{2}{\sqrt{\lambda^2 - 4}}$$

$$\times \left(\frac{w^0 + 1}{z^0} \sinh(\Lambda t) - z^0 \sinh(\Lambda (t - 1))\right)$$

定理 $4 A_2^{(2)}$ 型クラスター代数のミューテーションから導かれる有理写像力学系(1)の一般解は

$$z^{t} = \rho_{1}(t),$$

 $w^{t} = \rho_{1}(t+1)\rho_{1}(t) - 1,$

で与えられる。

5 $A_2^{(2)}$ 型クラスター代数の生成元

もう一つの非自明なミューテーション列

$$\mu_2, \mu_1, \mu_2, \mu_1, \dots$$

は $(z^1, w^0) \mapsto (z^1, w^1) \mapsto (z^2, w^1) \mapsto \cdots$ に対応する。 ρ_1 の z^0 を (z^1, w^0) を用いて書き直し、改めて z^1 を z^0 とおいたものを ρ_2 とする:

$$\rho_2(t) = \frac{2}{\sqrt{\lambda^2 - 4}}$$

$$\times \left(z^0 \sinh(\Lambda t) - \frac{w^0 + 1}{z^0} \sinh(\Lambda (t - 1)) \right)$$

このとき次を得る。

定理 5 $A_2^{(2)}$ 型クラスター代数の生成元全体の集合 \mathcal{X} は次で与えられる:

$$\mathcal{X} = \{ \rho_i(t), \ \rho(t+1)_i \rho_i(t) - 1 \mid t \ge 0, \ i = 1, 2 \}$$

ただし、 $z^0 = x_1$ および $w^0 = x_2$ とおく。

- S. Fomin and A. Zelevinsky, Cluster algebras I: Foundations, J. Amer. Math. Soc. 15 (2002) 497-529.
- [2] A. Nobe, Birational maps conjugate to the rank 2 cluster mutations of affine types and their geometry, arXiv:1801.10320 (2018)

要素指定逆固有値問題に関する一意解のII型離散ハングリー系を用いた解法

上田 純也1, 近藤 弘一1

1 同志社大学大学院理工学研究科

e-mail: ctwc0368@mail4.doshisha.ac.jp

1 はじめに

逆固有値問題 (IEP: Inverse Eigenvalue Problem) とは、すべて、または一部の指定されたスペクトルデータから行列を復元する問題のことである(詳細は [1] を参照). 物理、工学上の応用では、行列の固有値は固有振動数や、共振周波数に相当し、行列の要素はモデルに含まれる素子の物理パラメータに相当する. IEP はモデルの要求仕様から素子の値を定める問題といえる. IEP は問題設定としては単純ではあるが、系統的に研究が始まるのは 1950 年代以降である. 比較的新しい分野であり、今後の発展や応用が期待される分野である. 行列の構造を制約した際には、問題の難易度も大きく変化する. そのため、解決された問題の総数がまだ少ないことが、最大の課題である.

IEPの解法においては、線形代数学的な手法を利用することが基礎となる。1980年代には、ラックス表示をもつ常微分方程式を利用した解法が提案されている[1]. 近年の研究においては、離散ソリトン方程式の解を利用した解法が提案されている[2,3,4]. 本研究においては、この成果を発展させ、II型離散ハングリー系を利用して、次の要素指定逆固有値問題 (PIEP: IEP with Prescribed entries) の解法を行う。

問題 1 (下ヘッセンベルグ型帯行列の PIEP)

m,N を自然数とし、 $\ell_{\mathrm{ent}}=N(m-1),\ell_{\mathrm{max}}=\ell_{\mathrm{ent}}+m$ とおく、非零な複素定数 $\{\lambda_i\}_{i=1,\dots,m}$ と、非零な実定数 $\{s_\ell\}_{\ell=1,\dots,\ell_{\mathrm{ent}}}$ が与えられているとする。このとき、次の条件 (i) – (iii) をみたす実下ヘッセンベルグ型帯行列 $A\in\mathbb{R}^{m\times m}$ を求めよ。 (i) 行列 A は $A=L^{(0)}L^{(1)}\cdots L^{(N-1)}R^{(0)}$ の形とする。ただし、 $L^{(n)},R^{(0)}$ はそれぞれ下2重対角行列,上2重対角行列

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ e_1^{(n)} & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & e_{m-1}^{(n)} & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q_1^{(0)} & 1 & & \\ & q_2^{(0)} & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & q_m^{(0)} \end{pmatrix}$$

の形であり、全ての要素は非零とする. (ii) 行列 A の固有値は、定数 $\{\lambda_i\}_{i=1,\dots,m}$ と等しい. (iii) 行列 A に含まれる全ての変数 $e_k^{(n)}, q_k^{(0)}$ を

foreach $\ell=1,2,\ldots,\ell_{\max}$ do $k=
u_\ell=\operatorname{floor}((\ell-1)/(N+1))+1;$ $n=\sigma_\ell=\operatorname{mod}(\ell-1,N+1);$ if n=0 then $v_\ell=q_k^{(0)};$ if n>0 then $v_\ell=e_k^{(n-1)};$ の順序で並び替えた変数を v_ℓ ($\ell=1,2,\ldots,\ell_{\max}$) とおくと,要素の一部は $v_\ell=s_\ell$ ($\ell=1,\ldots,\ell_{\mathrm{ent}}$)

問題 1 における行列 A は,帯幅が $\min(N+1,m)+1$ の帯行列である.A に含まれる変数 v_ℓ の個数は ℓ_{\max} であり,A が取り得る自由度は ℓ_{\max} である.条件 (iii) により ℓ_{ent} 個の変数は確定する.残る未知変数は $\ell_{\max}-\ell_{\mathrm{ent}}=m$ 個となり,条件 (ii) により m 個の固有値が指定される.残る未知変数 v_ℓ ($\ell=\ell_{\mathrm{ent}}+1,\ldots,\ell_{\mathrm{max}}$) の一意解の存在性とその求解法を議論する.

2 II 型離散ハングリー系

をみたす.

本研究課題では、II 型離散ハングリー系

$$\begin{split} q_k^{(n+1)} &= q_k^{(n)} + e_k^{(n)} - e_{k-1}^{(n+N)}, \\ e_k^{(n+N)} &= e_k^{(n)} q_{k+1}^{(n)} / q_k^{(n+1)} \end{split}$$

の一般解を求め、初期値と一般解に含まれる任意定数との1対1対応を議論する。その結果として、問題1の一意解に関して、次の定理が得られる。

定理 1 問題 1 の行列 A は,条件

$$au_k^{(n)} \neq 0, \quad (k,n) \in \Omega_1 \cup \Omega_2,$$
 $\Omega_0 = \{(k,n) \mid k=0,1,\ldots,m; \ n=0,1,\ldots,N\},$
 $\Omega_1 = \{(\nu_{Nm+1},n) \in \Omega_0 \mid \sigma_{Nm+1} \leq n \leq N\},$
 $\Omega_2 = \{(k,n) \in \Omega_0 \mid \nu_{Nm+1} < k \leq m, \ 0 \leq n \leq N\}$
をみたすときに限り、一意な解をもつ。ただし、 $au_k^{(n)} = \det(f_{n+i+j-2})_{i,j=1,2,\ldots,k}$ である。数列

$$\{f_n\}_{n=0,...,n_{\max}} \ l t,$$

$$f_n = \begin{cases} 1, & \text{if } 0 \le n < N, \\ -\sum_{i=1}^{\nu'_n} b_i^{(n)} f_{n-iN}, & \text{if } N \le n < Nm, \\ -\sum_{i=1}^m a_i f_{n-iN}, & \text{if } Nm \le n < n_{\text{max}} \end{cases}$$

である. ただし, $\nu'_n = \text{floor}((n-N)/(N+1)) +$ $1, n_{\max} = (N+1)m-1$ とする. 係数 $b_i^{(n)}$ は, $b_0^{(n)} = 1$ であり、 $0 \le n < N$ のとき $b_0^{(n)} = 1$ であり、 $N\leq n< Nm, i=1,2,\dots,\nu_n'$ のとき $b_i^{(n)}=b_i^{(n-1)}-s_{n-N+1}b_{i-1}^{(n)}$ であり、それ以外の 添え字の場合は0とおく。係数 $\{a_i\}_{i=1,...,m}$ は多 項式 $P(z) = \sum_{i=1}^m (z - \lambda_i)$ を展開した $P(z) = z^m + \sum_{i=1}^m a_i z^{m-i}$ の係数とする.

定理 2 定理1が成立するとする. このとき, 未 知の要素 $v_{\ell}(\ell = \ell_{\text{ent}} + 1, ..., (N+1)m)$ は次 で定まる:

$$\begin{aligned} & \text{for each } r = 1, 2, \dots, (N+1)m \text{ do} \\ & k = \nu_r; \ n = \sigma_r; \\ & \text{if } r \leq N \\ & \tau_k^{(n)} = 1; \\ & \text{elseif } N < r \leq Nm \\ & \tau_k^{(n)} = \tau_k^{(0)} \prod_{j=1}^{k} s_{r-(N+1)j+1} \text{ if } n = N; \\ & \tau_k^{(n)} = \tau_{k-1}^{(n+1)} \prod_{j=1}^{k-1} s_{r-(N+1)j+1} \text{ if } n < N; \\ & \text{else} \\ & \tau_k^{(n)} = \det(f_{n+i+j-2})_{i,j=1,2,\dots,k}; \\ & \text{for each } \ell = \ell_{\text{ent}} + 1, \ell_{\text{ent}} + 2, \dots, m \text{ do} \\ & k = \nu_\ell; \ n = \sigma_\ell; \\ & q_k^{(0)} = \frac{\tau_{k-1}^{(0)} \tau_k^{(N)}}{\tau_k^{(0)} \tau_{k-1}^{(N)}} \text{ if } n = 0; \\ & e_k^{(n-1)} = \frac{\tau_{k+1}^{(n)} \tau_{k-1}^{(n+1)}}{\tau_k^{(n)} \tau_k^{(n+1)}} \text{ if } n > 0; \end{aligned}$$

数值例 3

Inputs: 行列サイズ m=4, 行列帯幅 N=3, 指定固有值 $\{\lambda_i\}_{i=1,\dots,4} = \{1,2,3,4\}$, 指定要素 ${s_{\ell}}_{\ell=1,\dots,9} = {4, 1, 6, 7, 9, 10, 9, 10, 10}.$ **Step 1.** 固有多項式 $P(z) = z^4 - 10z^3 + 35z^2 - 10z^2 + 10z^2$ 50z+24 の係数 $\{a_j\}_{j=1,\dots,4} = \{-10, 35, -50, 24\}.$ Step 2. 係数 $\{\{b_j^{(n)}\}_{i=1,\dots,\nu_n'}\}^{n=3,\dots,12} =$ $\{\{1,-4\},\{1,-5\},\{1,-11\},\{1,-18\},\{1,-27,36\},$ $\{1,-46,185\},\{1,-56,365\},\{1,-66,635,-360\}\}.$ Step 3. $\mathcal{E} - \mathcal{X} \times \mathcal{F} \{f_n\}_{n=0,\dots,15} = \{1,1,1,\dots,15\}$ 4, 5, 11, 72, 99, 321, 2572, 3719, 14561, 23376,

33951, 134901, 147244}

Step 4. $au_4^{(0)} = -61225760, au_4^{(1)} = 70249680, au_4^{(2)} = -252748800, au_4^{(3)} = -147018240.$ Step 5. Step 4 の全ての $au_k^{(n)}$ が非零であるの

で行列 A が存在.

Outputs. 未知の要素 $v_{10} = e_3^{(0)} = -2836/7$, $v_{11}\!=\!e_3^{(1)}\!=\!10841/21,\,v_{12}\!=\!e_3^{(2)}\!=\!-17552/105,\,v_{13}\!=\!q_4^{(0)}\!=\!1/15$ が得られ,

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 56 & 23 & 1 & 0 \\ 772 & 454 & 39 & 1 \\ -102096 & -48342 & -3096 & -56 \end{pmatrix}$$

と求まる.

4 まとめ

本発表では,主定理の証明と,計算量を削減 したアルゴリズムについて示す。また、その数 値実験例として、MATLAB 用多倍長演算

https://github.com/amath-doshisha/libis を利用した結果を示す.

- [1] M. T. Chu and G. H. Golub, Inverse Eigenvalue Problems: Theory, Algorithms, and Applications, Oxford Univ. Press, New York, 2005.
- [2] K. Akaiwa, M. Iwasaki, K. Kondo and Y. Nakamura, A tridiagonal matrix construction by the quotient difference recursion formula in the case of multiple eigenvalues, Pacific J. of Math. for Industry, 6 (2014), Article No 10, 9 pages.
- [3] K. Akaiwa, Y. Nakamura, M. Iwasaki, H. Tsutsumi and K. Kondo, A finite step construction of totally nonnegative matrices with specified eigenvalues, Numer. Algor., **70** (2015), 469–484.
- [4] K. Akaiwa, Y. Nakamura, M. Iwasaki, A. Yoshida and K. Kondo, An arbitrary band structure construction of totally nonnegative matrices with prescribed eigenvalues, Numer. Algor., 75 (2017), 1079-1101.

FreeFem++ 講習会:流体構造連成問題 – 弱連成形式での力の釣り合い と領域の変形

鈴木 厚1, 高石 武史2

1大阪大学 サイバーメディアセンター, 2 武蔵野大学

e-mail: 1 atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp, 2 taketaka@musashino-u.ac.jp

流体構造連成問題

非圧縮性流体が占める正方形領域の Ω_F の上 に線型弾性体が占める長方形領域の Ω_S が載っ ている流体構造連成問題を考える (図 1). 弾性 体の両側は固定されており、下面は流体に支え られている。重力により弾性体は変形するが、 流体との境界で流体の応力と弾性体の応力が釣 り合う. 弾性体の変形は未知であるが, 弾性体 にかかる応力を、変形後の領域での Stokes 方 程式の解から得られる応力から計算し、逐次反 復により定常状態の釣り合いを求める.

弾性体方程式の導出では Cauchy 応力テンソ ルを、Piola 変換により写した参照領域での第 二 Piola-Kirchhoff 応力テンソルの線型化によ り、Navier 方程式が得られる.参照領域の境界 での応力は、Piola変換を考慮することで、変形 後の領域の境界の応力の変換により記述できる.

流体の近似解を直接微分し座標変換を考慮す ることで参照領域での応力を計算するものと. 変形後の領域での部分積分を通して応力境界を 課す剛性行列と流体の近似解の積からデータを 取り出すものの二種を概観する.

弾性体方程式と非圧縮流れ方程式

参照領域を Ω_S , $x \in \Omega_S$ での弾性体の変位を $u(x) = (u_1(x), u_2(x))^T$, 変形を $\varphi(x) = x + u(x)$ とする. 変形後の領域は $\varphi(\Omega_S)$ となる. 矩形 の参照領域 Ω_S の境界は 4 つの部分から成る:

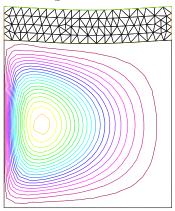


図 1. 弾性体の三角形要素分割と流体の流線

 $\partial\Omega_S=\Gamma_S^{(L)}\cup\Gamma_S^{(B)}\cup\Gamma_S^{(R)}\cup\Gamma_S^{(T)}$. 参照領域での混 合型の境界条件を課す境界値問題は第二 Piola-Kirchhoff 応力テンソル $\Sigma(x) = \nabla \varphi(x)^{-1} T(x)$ により記述される. $E(u(x)) = (\nabla u + (\nabla u)^T + (\nabla u)$ $(\nabla u)^T(\nabla u)/2$ を Green-St Venant 応力テンソ ν , $\lambda \ \, \ell \ \, \mu \ \,$ を Lamé 定数, $\Sigma(x) = \check{\Sigma}(E(u(x))) =$ $\lambda(\operatorname{tr} E) + 2\mu E + O(||E||)$ とすると変位に関す る二階の偏微分方程式は

$$-\nabla \cdot ((1 + \nabla u) \check{\Sigma}(E(u))) = f \text{ in } \Omega_S,$$

$$u = 0 \text{ on } \Gamma_S^{(L)} \cup \Gamma_S^{(R)},$$

$$(I + \nabla u) \check{\Sigma}(E(u))n = 0 \text{ on } \Gamma_S^{(T)},$$

$$(I + \nabla u) \check{\Sigma}(E(u))n = h \text{ on } \Gamma_S^{(B)}$$

となる. n は参照領域の境界での外向き単位 法線である. 弾性体にかかる荷重 f は重力に よるものであるので、重力の係数を g として $f = (0, -q)^T$ である. h は下面で接している流 体から受ける応力である. 線型弾性体近似は歪 みテンソル $e(u) = (\nabla u + (\nabla u)^T)/2$ を用い

$$\begin{split} -\nabla \cdot \left(\lambda \mathrm{tr}\left(e(u)\right)I + 2\mu e(u)\right) &= f \text{ in } \Omega_S, \\ u &= 0 \text{ on } \Gamma_S^{(L)} \cup \Gamma_S^{(R)}, \\ \left(\lambda \mathrm{tr}(e(u))I + 2\mu e(u)\right)n &= 0 \text{ on } \Gamma_S^{(T)}, \\ \left(\lambda \mathrm{tr}(e(u))I + 2\mu e(u)\right)n &= h \text{ on } \Gamma_S^{(B)} \end{split}$$

となる. 弱形式は左右の境界に斉次 Dirichlet 条件を課す関数空間

$$V_S = \left\{ u \in H^1(\Omega_S)^2 \; ; \; u = 0 \text{ on } \Gamma_S^{(L)} \cup \Gamma_S^{(R)} \right\}$$

に対し次を満たす $u \in V_S$ を見つけよ、となる.

$$\begin{split} \lambda \int_{\Omega_S} \nabla \cdot u \, \nabla \cdot v \, dx + 2 \mu \int_{\Omega_S} e(u) : e(v) \, dx = \\ \int_{\Omega_S} f \cdot v \, dx + \int_{\Gamma_S^{(B)}} h \cdot v \, da \quad \forall v \in V_S \, . \end{split}$$

流体との力の釣り合いは変形後の境界 $arphi(\Gamma_S^{(B)})$ で考える必要がある。CofA を行列 A の余因 子行列 $\det A A^{-T}$ とする. $T(x) = \nabla \varphi(x) \Sigma(x)$ は $T^{\varphi}(x^{\varphi}), x^{\varphi} = \varphi(x) \in \varphi(\Omega_S)$ の Piola 変換

$$T(x) = T^{\varphi}(x^{\varphi}) \operatorname{Cof} \nabla \varphi(x)$$

であるため、発散に関して次が成り立つ.

$$\nabla \cdot T(x) = \det \nabla \varphi(x) \nabla^{\varphi} \cdot T^{\varphi}(x^{\varphi}) \quad \forall x^{\varphi} = \varphi(x)$$

 $\nabla \cdot T(x)$ の領域積分に部分積分を適用すると

$$\det(\nabla \varphi(x)) \nabla \varphi(x)^{-T} n \, da = n^{\varphi} \, da^{\varphi}$$

が得られる [1]. 変形後の座標系 $x^{\varphi}=\varphi(x), x\in \Omega$ では外力 $f^{\varphi}(x^{\varphi})$ と境界での応力 $h^{\varphi}(x^{\varphi})$ は

$$f(x) = \det \nabla \varphi(x) f^{\varphi}(x^{\varphi}),$$

$$h(x) = \det \nabla \varphi(x) |\nabla \varphi(x)^{-T} n| h^{\varphi}(x^{\varphi})$$

となる. 変形後の領域では

$$-\nabla^{\varphi} \cdot T^{\varphi} = f^{\varphi} \text{ in } \varphi(\Omega_S),$$

$$u^{\varphi} = 0 \text{ on } \Gamma_S^{(L)} \cup \Gamma_S^{(R)},$$

$$T^{\varphi} n^{\varphi} = 0 \text{ on } \varphi(\Gamma_S^{(T)}),$$

$$T^{\varphi} n^{\varphi} = h^{\varphi} \text{ on } \varphi(\Gamma_S^{(B)})$$

となる. $v^{\varphi}(\varphi(x)) = v(x)$ とすると流体から受ける応力の境界積分に関して次が成り立つ.

流体部分では変形後の領域 Ω_F で Stokes 方程式を考える. 正方形領域の上部が弾性体に接しているためその境界は弾性体の変位により変形している. $\partial\Omega_F = \Gamma_F^{(L)} \cup \Gamma_F^{(B)} \cup \Gamma_F^{(R)} \cup \Gamma_F^{(T)}$ で上部は $\Gamma_F^{(T)} = \varphi(\Gamma_S^{(B)})$ である. (u_F, p_F) を流速, 圧力の変数として, 応力テンソルは $\sigma(u_F, p_F) = 2e(u_F) - p_F I$ であり, 左の側面に流れ u_{F0} を与える Stokes 方程式は

$$\begin{split} -\nabla \cdot \sigma(u_F, p_F) + \nabla p_F &= 0 \text{ in } \Omega_F \\ \nabla \cdot u_F &= 0 \text{ in } \Omega_F \\ u_F &= u_{F0} \text{ on } \Gamma_F^{(L)} \\ u_F &= 0 \text{ on } \Gamma_F^{(B)} \cup \Gamma_F^{(R)} \cup \Gamma_F^{(T)} \end{split}$$

となる. 流体領域上部の境界での応力は n_F を境界 $\Gamma_F^{(T)}$ の外向き単位法線として $\sigma(u_F,p_F)n_F=2e(u_F)n_F-p_Fn_F$ であり, 弾性体との力の釣り合いはつぎのようになる.

$$h^{\varphi} + \sigma(u_F, p_F) n_F = 0$$
 on $\Gamma_F^{(T)} = \varphi(\Gamma_S^{(B)})$.

応力の計算法と FreeFem++ による記述

変形後の領域での応力を参照領域に反映させる二種のアルゴリスムを考える.

アルゴリズム 1 (参照領域での応力に変換) 弾性体の変形は y 方向のみに起こると近似する. $\varphi(x) = x + (0, u_2(x))^T$. この場合

$$\operatorname{Cof} \nabla \varphi(x) = \begin{bmatrix} 1 + \partial_2 u_2 & -\partial_2 u_1 \\ -\partial_1 u_2 & 1 + \partial_1 u_1 \end{bmatrix}$$

であることと、参照領域の境界 $\Gamma_S^{(B)}$ の外向き単位法線が $n=(0,-1)^T$ であることより

 $|\operatorname{Cof} \nabla \varphi(x)n| = |(\partial_2 u_1, (-1 - \partial_1 u_1))^T| = 1$ となり, $h(x) = h^{\varphi}(\varphi(x)), \ x \in \Gamma_S^{(B)}$ を流体の有限要素解 (u_F, p_F) から流速の一階微分をとることで直接計算することができる $([2], \emptyset]$ 9.29). アルゴリズム 2(変形後の領域での境界積分)参照領域の境界 $\Gamma_S^{(B)}$ での境界積分は

$$\int_{\Gamma_S^{(B)}} h \cdot v \, da = -\int_{\Gamma_F^{(T)}} \sigma(u_F, p_F) n_F \cdot v^{\varphi} \, da^{\varphi}$$

となる. 離散版では v(x) は有限要素基底をとるが, $x^{\varphi} = \varphi(x)$ により $\Gamma_S^{(B)}$ の有限要素節点は $\varphi(\Gamma_S^{(B)})$ の有限要素節点に写り, $v^{\varphi}(x^{\varphi})$ は変形後の領域での有限要素基底となる.

流体の応力の境界積分は部分積分により領域 積分に変換できる.

$$\int_{\Gamma_F^{(T)}} \sigma(u_F, p_F) n_F \cdot v_F = 2 \int_{\Omega_F} e(u_F) : e(v_F) - \int_{\Omega_F} \nabla \cdot v_F p_F.$$

ここで、 (u_F, p_F) は境界 $\Gamma_F^{(T)}$ に斉次 Dirichlet 条件を与えて求めた解であり、 v_F は境界 $\Gamma_F^{(T)}$ に自由度を持つ有限要素基底をとる。その基底に関する境界積分の値をまとめた数ベクトルは境界 $\Gamma_F^{(T)}$ の自由度を含めた流体の剛性行列と有限要素解の積から計算できる。

要素分割が弾性体側の $\varphi(\Gamma_S^{(B)})$ と流体側の $\Gamma_F^{(T)}$ で一致するように構成し、共有する節点での弾性体の変位と流体の流速の自由度の対応 関係を Γ_F Free Γ_F ドアロー・アンタリプトで記述する.

- [1] P. G. Ciarlet, Mathematical Elasticity, Vol.1 North-Holland 1988.
- [2] F. Hecht et al., FreeFem++ manual, http://www.freefem.org/ff++

非独立なマーケット・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¹, ○ 谷野 徹²

1 芝浦工業大学システム理工学部,2 芝浦工業大学理工学研究科

e-mail: mf17068@shibaura-it.ac.jp

1 概要

ボラティリティとは株価の変動の大きさを表す指標であり、ファイナンスにおいて重要な量であるが、観測不能であり、株価等の観測可能なデータから推定される。実現ボラティリティ(以下、RV)は分単位のような高頻度データから計算されるボラティリティの推定量でしかし高頻度データはマーケット・マイクロストラクチャ・ノイズ(以下、MN)と呼ばれる観測誤差を含むことが知られており、これから計算される RVも MN の影響を受ける.

これに対し、[NW2015] は、独立な MN を仮定し、RV に含まれる MN によるバイアスのモデルを特定した。彼らの手法により、観測した RV から MN の影響を除き、真のボラティリティの推定・予測を行うことができる。しかしながら、MN は独立ではなく、株価との相関や自己相関を持つことが [HL2006] で報告されており、このタイプの MN の影響を除去することが RV 研究の最も重要な課題の一つとなっている。本講演では、このタイプの MN を仮定し、RV に含まれるバイアスの時系列モデリングを行う。

2 モデルの背景

2.1 実現ボラティリティ

p(t) を時刻 t の資産価格の対数値とし、これが次のモデルに従うとする.

$$dp(t) = \mu(t)dt + \sigma(t)dW(t). \tag{1}$$

W(t) は標準ブラウン運動, $\mu(t)$, $\sigma(t)$ は $\mathcal{F}(t)$ -適合過程とする. ここで,第t 日の**累積ボラティリティ** IV_t (Integrated Volatility,以下, IV) を次で定める.

$$IV_t = \int_{t-1}^t \sigma^2(s) ds.$$

第 t 日に m 個の式 (1) の離散点 $p(t_i)$, $(t_i = t - i/m, i = 1, ..., m)$ を観測しているとする. 第 t

日の実現ボラティリティ $RV_t^{(m)}$ を次で定める.

$$RV_{t}^{(m)} = \sum_{i=2}^{m} (p(t_{i}) - p(t_{i-1}))^{2}.$$

以上の下, 古典的な確率解析から次が知られている.

$$RV_t^{(m)} \to IV_t \text{ in P} \qquad (m \to \infty).$$

2.2 マーケット・マイクロストラクチャ・ ノイズ

以上から、RV は IV の一致推定量となるが、 実際の観測価格 $p^*(t_i)$ は市場のミクロ構造に起 因する観測誤差 MN を含み、式 (1) の p(t) と乖 離する. 観測価格 $p^*(t_i)$ を、

$$p^*(t_i) = p(t_i) + \varepsilon(t_i)$$

と表すと、この $p^*(t_i)$ から計算される $RV_t^{*(m)}$ は MN によるバイアス $u_t^{(m)}$ を含む. さらに統計的な推定誤差を $d_t^{(m)}$ とすると、 $RV_t^{*(m)}$ は次のように表される.

$$RV_t^{*(m)} = RV_t^{(m)} + u_t^{(m)} + d_t^{(m)}.$$

前述したように日中観測回数 $m \to \infty$ のとき,RV は IV に確率収束するが, $u_t^{(m)}$ は m に比例して大きくなる.一方,m を小さく取れば今度は標本数の減少により $d_t^{(m)}$ の分散が大きくなる.

3 RV の時系列モデリング

3.1 p(t) の仮定と IV_t のモデル

Square Root Stochastic Auto-Regressive Variance(以下, SR-SARV) モデルを仮定する.

$$dp(t) = \sigma(t)dW(t), \sigma^{2}(t) = \sigma^{2} + \sum_{i=1}^{p} \omega_{i} P_{i}(f(t)).$$

W(t) は標準ブラウン運動, f(t) は W(t) と独立, $P_i(f(t)), P_j(f(t))$ $(i \neq j)$ はそれぞれ無相関で平均 0, 分散 1 の AR(1) 過程とする. このモデルは $\sigma^2(t)$ を p 個の AR(1) モデルの和で記述する一般的な p-factor モデルであり, p-factor の Heston モデルや GARCH モデル等のよく知られたモデルを含む.

[BS2002] は, d_t が IV_t と独立なホワイトノイズであること示し, [M2003] は, この $\sigma^2(t)$ に対して, IV_t が ARMA(p,p) 表現を持つことを示した. 彼らは,

$$RV_t^{(m)} = IV_t + d_t^{(m)}, IV_t \sim ARMA(p, p)$$

とした状態空間モデルにより, RV から IV をモデルベースで推定・予測する方法を提案・検証している. これを BSM モデルと呼ぶ.

${f 3.2}$ ${f MN}$ の仮定と $u_t^{(m)}$ のモデル

[NW2015] は、MN の存在下での BSM モデルを拡張した.彼らは MN が他の変数と独立な iid ノイズであるという仮定の下、 $u_t^{(m)}$ の自己共分散を求め、MA(1) 表現を持つことを示した.彼らは、

$$RV_t^{(m)} = IV_t + u_t^{(m)} + d_t^{(m)},$$

 $IV_t \sim ARMA(p, p), u_t^{(m)} \sim MA(1)$

とした状態空間モデルにより, RV から MN の影響を除き, IV を推定・予測する方法を提案し, BSM モデルと比較検証している. 以下, これを NW モデルと呼ぶ.

3.3 主結果: 非独立な MN と提案モデル

我々は [HL2006] 型の MN として、(1) 有限次の自己相関、(2) p(t) との相関を仮定し、この仮定の下、 $u_t^{(m)}$ の自己共分散、 $d_t^{(m)}$ との共分散を求め、これから $b_t := u_t^{(m)} + d_t^{(m)}$ が ARMA(p,1)表現を持つ示唆を得た:

$$RV_t^{(m)} = IV_t + b_t,$$

 $IV_t \sim \text{ARMA}(p, p), b_t \sim \text{ARMA}(p, 1).$

これが提案モデルである.

4 実データへの適用とモデル比較

各モデルは観測データ $RV_{1:T}^*$ から, カルマンスムーザ・フィルタによってモデルベースで $IV_{1:T}, u_{1:T}^{(m)}(b_{1:T})$ の推定・予測ができる.

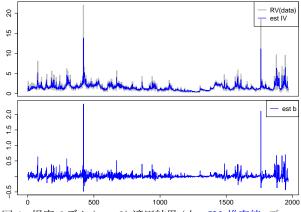


図 1. 提案モデル (p=2) 適用結果 (上: IV_t 推定値, データ RV_t^* , 下: b_t 推定値)

[NW2015] の方法に従い、2000 年から 2007 年の TOPIX の 1 分足価格をデータ、IV の代理変数を 5 分足価格から推定される RV として、提案モデルと NW モデルの IV 推定・予測精度の比較を行ったところ、推定・予測精度共に提案モデルが優位な結果となった。

参考文献

[NW2015] Nagakura, D., Watanabe, T., "A State Space Approach to Estimating the Integrated Variance under the Existence of Market Microstructure Noise", Journal of Finacial Econometrics Vol. 13, No. 1, p45-82, 2015.

[HL2006] Hansen, P.R., Lunde, A., "Realized variance and market microstructure noise", J. Bus Econom. Statist. 24(2), p127-161, 2006.

[BS2002] Barndorff-Nielsen, O.E., Shephard, N., "Econometric analysis of realized volatility and its use in estimating stocastic volatility models", journal of the Royal Statistical Society, series B, Vol. 64, p253-280, 2002.

[M2003] Meddahi, N., "ARMA representation of Integrated and realized variances", Econometrics Journal, Vol. 6, p335-356, 2003.

再生核補間を用いた後退確率微分方程式の数値解析

田中 俊介1, 中野 張1

1 東京工業大学情報理工学院数理・計算科学系

e-mail: tanaka.s.bm@m.titech.ac.jp

1 設定

後退確率微分方程式 (以降 BSDE と呼ぶ) の近似解を求める決定的な解法はまだない。本研究では、再生核補間を用いて近似解を求める。d次元ブラウン運動 B_t で生成されるフィルター付き確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \{\mathcal{F}_t\}_{0 \leq t \leq T}, \mathbb{P})$ を置く。前進要素 X_t を以下のように定義する。

$$dX_t = b(s, X_t)dt + \sigma(s, X_t)dB_t \tag{1}$$

そして、この前進要素を含んだ以下の確率微分 方程式を BSDE と呼ぶ。

$$\begin{cases}
-dY_t = f(t, X_t, Y_t, Z_t)dt - Z_t dB_t \\
Y_T = g(X_T)
\end{cases}$$
(2)

本研究では、関数 b, σ, f, g はリプシッツ条件を満たすと仮定し、この過程の下、(1) と (2) はそれぞれ唯一の解 X_t と Y_t, Z_t が存在する。

また、この BSDE を時間分割数 n で $0 = t_0, t_1, \dots, t_n = T$ のように離散化すると、

$$\begin{cases}
\hat{Y}_{t_{i}} = \mathbb{E}\left[\hat{Y}_{t_{i+1}} + f(t_{i}, \hat{X}_{t_{i}}, \hat{Y}_{t+1}, \hat{Z}_{t_{i}}) h \middle| \mathcal{F}_{t_{i}}\right] \\
\hat{Z}_{t_{i}} = \frac{1}{h} \mathbb{E}\left[\hat{Y}_{t_{i+1}} B_{t_{i}, t_{i+1}} \middle| \mathcal{F}_{t_{i}}\right]
\end{cases} (3)$$

ここで、 $h=T/n, B_{t_i,t_{i+1}}=B_{t_{i+1}}-B_{t_i}$ と定義し、オイラー丸山近似で時間離散化した \hat{X}_{t_i} を用いる。

本研究では、カーネル関数にガウスカーネル $K_{\sigma}(x,y)=\exp\left(-\frac{|x-y|^2}{\sigma}\right)$ を用いて、正則化付き再生核補間を以下のように定義する。選択点 $\Gamma=\{x_1,x_2,\cdots,x_N\}$ に対して、関数fを近似するような関数sは次の問題を解くことで得られる。

$$\underset{s \in \mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_{j=1}^{N} [f(x_j) - s(x_j)]^2 + \lambda ||s||_{\mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})} \right\}$$

ここで、 λ は正則化項、 $\mathcal{N}_{K_{\sigma}}$ はガウスカーネルによって生成される再生核ヒルベルト空間とする。この問題の解は次のように求めることがで

きる。 $f_{\Gamma} = \{f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_N)\}$ として、

$$s^* = I^{\lambda}(f) = \sum_{j=1}^{N} \{ (A + \lambda I)^{-1} (f|_{\Gamma}) \}_j K_{\sigma}(\cdot, x_j)$$

これを用いて、(3) の条件付き期待値の部分を近似する。

2 アルゴリズムの設計

[1] より、以下の定理が示せる。

定理 1 X_t のマルコフ性より、

$$Y_t = u(t, X_t), \quad Z_t = v(t, X_t)$$

を満たす連続関数 $u, v: [0, T] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が存在するが存在する。

これより、(3) は以下のように書き換えることができる。

$$\begin{cases} u_i(x) = \mathbb{E}\left[u_{i+1}(\hat{X}_{t_{i+1}}^{t_i,x}) + f(t_i, x, u_{i+1}(\hat{X}_{t_{i+1}}^{t_i,x}), v_i(x))h\right] \\ v_i(x) = \frac{1}{h}\mathbb{E}\left[u_{i+1}(\hat{X}_{t_{i+1}}^{t_i,x})B_{t_it_{i+1}}\right] \end{cases}$$

ここで、 $u(t_i,x) = u_i(x)$ とする。v も同様。また、 $\hat{X}_{t_i,x}^{t_i,x}$ は時刻 t_i での値 x を表している。

次に点を取る範囲を決めるために、以下の切り取り前進要素を定義する。

- $\bullet \ \tilde{X}_{t_{i+1}} = \tilde{X}_{t_i} + b(t_i, \tilde{X}_{t_i})h + \sigma(t_i, \tilde{X}_{t_i})\tilde{B}_{t_i t_{i+1}}$
- X_{t_i} の範囲: R_{t_i}

$$\begin{cases}
R_{t_{i+1}} = c_0(1+r^m)(1+R_{t_i}) & (c_0 > 0) \\
R_{t_0} > 0
\end{cases}$$

最後に、再生核補間を用いて Y_{t_0} , Z_{t_0} を求めるアルゴリズムを次のように設計する。

$$\begin{cases} \bar{u}_{i}(x) = \mathbb{E}\left[\tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}_{t_{i+1}}^{t_{i},x}) + f(t_{i},x,\tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}_{t_{i+1}}^{t_{i},x}),\tilde{v}_{i}(x))h\right] \\ \tilde{u}_{i}(x) = I^{\lambda}(\bar{u})(x) \\ \bar{v}_{i}(x) = \frac{1}{h}\mathbb{E}\left[\tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}_{t_{i+1}}^{t_{i},x})B_{t_{i}t_{i+1}}\right] \\ \tilde{v}_{i}(x) = I^{\lambda}(\bar{v})(x) \end{cases}$$

期待値はモンテカルロ法 (サンプル数 = 10^5) で求める。本研究の主定理では、

$$\Delta u_i = ||\tilde{u}_{t_i} - u_{t_i}||_{\infty}, \Delta v_i = ||\tilde{v}_{t_i} - v_{t_i}||_{\infty}$$

の評価をする。

3 主結果

まず、主定理を示すための補題を示す。時刻 t_i における選択点 Γ_{t_i} に対して、以下を定義する。

$$h_{\Gamma_{t_i},R_{t_i}} = \sup_{x \in R_{t_i}} \max_{x_j \in \Gamma_{t_i}} ||x - x_j||_2$$

[2]より、次の補題を示す。

補題 2 有界集合 \mathcal{O} と選択点 $\Gamma = \{x_1, \dots, x_N\} \in \mathcal{O}^N$ とする。 $f \in \mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})$ と任意の自然数 k に対して、以下の不等式を満たす $\sigma, h_{\Gamma,\mathcal{O}}, \mathcal{O}$ に依存しない定数 L が存在する。

$$|f(x)-I^{\lambda}(f)(x)| \leq C\sigma^{-k} \exp(\frac{\sigma^2}{8})h_{\Gamma,\mathcal{O}}^{k-\frac{d}{2}}||f||_{\mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})}$$
 ここで、正則化項 λ の値を

$$\sqrt{\lambda} \le (4k)^k \exp(-k)\sigma^{-k} \exp(\frac{\sigma^2}{8})$$

としている。

この補題より、正則化付き再生核補間の誤差評価を考えることができる。

次に、有界集合 \mathcal{O} に対して関数 $f \in L^2(\mathcal{O})$ における積分作用素を以下のように定義する。

$$L_{K_{\sigma}}f(x) = \int_{\mathcal{O}} K_{\sigma}(x, y)f(y)dy$$

[3] より、以下の性質を満たす。

補題 3 上で定義した積分作用素 $L_{K_{\sigma}}$ は以下の性質をもつ。

- 任意の $f \in L^2(\mathcal{O})$ に対して、 $L_{K_{\sigma}}f \in \mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})$
- 任意の $f \in L^2(\mathcal{O})$ と $g \in \mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})$ に対して、 $\langle L_{K_{\sigma}}, g \rangle_{\mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})} = \langle f, g \rangle_{L^2(\mathcal{O})}$
- 任意の $f \in L^2(\mathcal{O})$ に対して、

$$||L_{K_{\sigma}}f||_{\mathcal{N}_{K_{\sigma}}(\mathcal{O})} \leq (\sqrt{\pi}\sigma)^{\frac{d}{2}}||f||_{L^{2}(\mathcal{O})}$$

この性質より再生核ヒルベルト空間 $\mathcal{N}_{K_{\sigma}}$ と L^2 の比較をすることが可能になる。

これまでの仮定、補題を用いて以下の主定理が示せる。

定理 4 誤差 Δu_i , Δv_i に対して、以下の不等式を満たす $h_{\Gamma_{t_i},R_{t_i}}$, R_{t_i} に依存しない定数 C が存在する。

$$\Delta u_i + \sqrt{h} \Delta v_i \le C \left(R_0 r^n e^{-\beta r} + \left\{ 2 + \exp\left(\frac{(\sigma^*)^2}{8}\right) \right\} \sigma^* \right)$$

ここで、 $\sigma^* = h_{\Gamma_{t_i}, R_{t_i}}^{\frac{2k-d}{2k+d+2}} R_{t_i}^{\frac{d+2}{2k+d+2}}$ である。

4 数值結果

一次元 Black-Scholes モデルを考える。まず X_t は次の確率微分方程式とする。

$$\begin{cases} b(t, X_t) = \mu X_t \\ \sigma(t, X_t) = \eta X_t \end{cases}$$

さらに、BSDE を次のように設定する。

$$\begin{cases} f(t,X_t,Y_t,Z_t) = -\left\{yr + \frac{(\mu-r)z}{\sigma} + \min\left(0,y - \frac{z}{\sigma}\right)(R-r)\right\} \\ g(X_T) = \max(0,X_T - K_1) - 2\max(0,X_T - K_2) \\ \mathcal{Z}$$
 この時、変数は次のように設定する。

μ	η	r	R	T	X_0	K_1	K_2
0.05	0.2	0.01	0.06	0.25	100	95	105

選択点 Γ_{t_i} を [80,130] から S 個を選ぶ。結果は 近似解/解析解 で表す。

S	10	20	50	100	300
\tilde{u}_{t_0}	1.0069	1.0039	1.0072	1.0098	1.0023
\tilde{v}_{t_0}	1.101	0.908	1.028	1.208	0.932

5 まとめと今後の課題

数値結果から再生核補間という関数近似で上手く後退確率微分方程式の近似解を求めることができ、正則化を施した再生核補間における誤差評価を理論的に計算することができた。課題としては、この誤差評価通りに近似解が解析解に収束することを確認する必要がある。また、正則化で行列 A を安定化させるのではなく特異値分解を用いて安定させた場合の誤差評価を考えたい。

- [1] N. El Karoui, S. Peng, M. C. Quenez, Backward stochastic differential equations in finance, Math. Finance, 7(1997):1-71.
- [2] H. Wendland, C. Rieger, Approximate Interpolation with Applications to Selecting Smoothing Parameters, Numerische Mathematik, 101(2005):741-742.
- [3] H. Sun, Q Wu, Application of integral operator for regularized least-square regression, Mathematical and Computer Modelling, 49(2009):280.

バーゼルⅢ 適格 Additional Tier1 債券(AT1 債)に対する構造型プライシングモデルの改良と実証分析

杉山 泰平1, 中川 秀敏2

 1 三井住友アセットマネジメント株式会社 , 2 一橋大学大学院 経営管理研究科

e-mail: hnakagawa@hub.hit-u.ac.jp

1 概要

バーゼルⅢ適格 Additional Tier 1債券(AT1 債)は,普通社債に比して高水準のクーポン が設定されている一方, Tier1 資本を補完する 「AT1 資本」として規制自己資本に算入できる という資本性を担保するために,様々な契約条 件が付されている.そのため投資家は,発行体 のデフォルト(債務不履行)リスクに加えて, AT1 債が有する各種契約条件を考慮した上でプ ライシングをおこなうことが求められる.本論 文では, 先行研究を拡張して二種類の強制元本 削減トリガー条項(「財務トリガー(Accounting Trigger)」 および「PONV トリガー (Point Of Non-Viability Trigger)」) を考慮した AT1 債プライシングモデルを設定し,実際に発行さ れている AT1 債の市場価格データを用いた実 証分析の概要を通じて,提案するプライシング モデルの有用性について検討することを主眼と

なお,本稿のフルペーパーが以下 URL で公開されている.詳細はそちらを参考にしていただきたい(URL:https://goo.gl/HGmQVx).

2 プライシングモデルの設定

連続時間 $[0,\infty)$ の設定で,フィルター付き確率空間 $(\Omega,\mathcal{G},(\mathcal{G}_t),\mathbf{Q})$ を導入し,すべての確率過程がフィルトレーション \mathbb{G} -適合であるという前提をおく.また,不完全情報の概念を定式化するため, (\mathcal{G}_t) の部分フィルトレーション (\mathcal{H}_t) も導入する. \mathbf{Q} はリスク中立確率測度を表すと仮定する.

次に,発行体の資産価値を表す確率過程 (V_t) を,時刻 0 における資産価値は以下で与える.

$$dV_t = (r - \delta)V_t dt + \sigma_V V_t dW_t, \ V_0 > 0.$$
 (1)

ここで,r はリスクフリーレート, δ は発行体の資産価値の外部流出率, σ_V は資産価値のボラティリティ, (W_t) は $\mathbf Q$ の下での $(\mathcal G_t)$ -標準ブラウン運動である.また「全ての時点 t>0

において,資産価値 V_t は \mathcal{H}_{t} -可測でない」と 仮定しておく.

デフォルトの閾値を「発行体の負債額面」 $K\in (0,V_0)$ で与えて,デフォルト時刻 au を

$$\tau := \inf\{t > 0 \mid V_t \le K\}. \tag{2}$$

と定義する ($\inf \emptyset = \infty$ とする) .

次に,財務トリガーとは,発行体の CET1 比率(CET1 資本の額をリスクアセット額で割ったもの)が一定水準以下となったときに発動されるイベントと定義する.

 ${
m CET1}$ 比率を表す確率過程 $({
m CET1R}_t)$ は, ${
m R\"{o}sler}$ [1] に倣い,次の式で与えられると仮定する.

$$CET1R_t = e^{c_1} \left\{ \frac{1}{\beta} \left(1 - \frac{K}{V_t} \right) \right\}^{c_2}$$
 (3)

ただし, $c_1 \in \mathbb{R}, c_2 > 0$ は推定すべきパラメータとする.

 ${
m CET1}$ 比率に対する財務トリガー発動の閾値を,正の定数 $K_{
m ACC}$ で表し,財務トリガー抵触時刻 $heta_{
m ACC}$ を

$$\theta_{ACC} := \inf\{t \in \mathcal{T}_{atr} \mid CET1R_t \leq K_{ACC}\}\$$

で定義する.ここで, $\mathcal{T}_{\rm qtr}:=\{0.25k-t_0\mid k\in\mathbb{N}\}$ $(\exists t_0\in[0,0.25))$ を四半期決算発表時点の集合とする.

もう一つの「PONV トリガー」は,実際には監督当局に基づく外生的なイベントであるが,発行体の資産価値が負債価値近くまで低下したことを確認して,監督当局が強制的に発動するイベントと見なす.そこで,正の定数 K_{PONV} $(V_0 > K_{\mathrm{PONV}} \geq K)$ を 発行体の資産価値過程に対する PONV トリガー閾値として,PONV トリガー抵触時刻 θ_{PONV} を以下のように定義する.

$$\theta_{PONV} := \inf\{t > 0 \mid V_t \le K_{PONV}\}.$$

なお,デフォルト時刻 au,財務トリガー抵触時刻 $au_{
m ACC}$,m PONV トリガー抵触時刻 $au_{
m PONV}$ はいずれも (\mathcal{H}_t) -停止時刻であると仮定する.

さて,満期 T の AT1 債に関して, ℓ は時点 t=0 から債券の満期 T までの間の利息の総支払回数, t_i は t=0 から見て i 回目の利息支払い時点, c_i は i 回目の支払利息額,N は債券の元本とする.デフォルト発生またはトリガー抵触発生のいずれかが起こった時点以降は,当該債券からのキャッシュフローは発生せず,元本は 100%削減されると仮定する.なお,AT1 債は通常は満期がない永久債として発行されるが,実際には初回償還可能日に償還されるので,初回償還可能日を満期時点 T と見なしている.

このとき,トリガーや完全情報 / 不完全情報 の設定に応じて AT1 債の理論価格式はいくつかの形で与えられる.例えば「財務トリガーと PONV トリガーの両方を考慮した場合の,不完全情報下での AT1 債のモデル価格式」は,以下で与えられる($\theta_{trigger}:=\min\{\theta_{ACC},\theta_{PONV}\}$ とする).

$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathbf{1}_{\{t \le t_i\}} e^{-r(t_i - t)} c_i \mathbf{Q}(\theta_{\text{trigger}} > t_i \mid \mathcal{H}_t)$$
$$+ \mathbf{1}_{\{t \le T\}} e^{-r(T - t)} N \mathbf{Q}(\theta_{\text{trigger}} > T \mid \mathcal{H}_t).$$

いずれの価格式についても「条件付生存確率」 の計算に帰着されることが分かる.

なお,Frey et al. [2] を参考にして, \mathcal{H}_t 条件下で, V_t-K は対数正規分布 $LN(\log(\tilde{v}_t-K),\sigma_{AN}^2)$ に従うと仮定する($\tilde{v}_t(>K)$ は \mathcal{H}_t -可測な確率変数で,時点 t において観測される発行体の資産価値を表すものとし, σ_{AN} は観測値 \tilde{v} に対して生じる何らかの「ノイズ」を表すパラメータ).

3 実証分析

AT1 債プライシングモデルを用いて,日本と欧州で実際に発行された次の二つの AT1 債のモデル価格を算出し,その特徴について考察する.

一つ目の「MUFG_AT1 債」の主な条件は, 2015 年 3 月 23 日発行,初回償還可能日 2020 年 7 月 15 日,利払い年 2 回,利率は当初年 2.70%(固定金利),財務トリガー閾値 CET1 比率 5.125%, PONV トリガーあり.

二つ目のバンコ・ポプラール(スペイン)の AT1 債「POP_AT1 債」の主な条件は,2015年 2月12日発行,初回償還可能日2020年4月10日,利払い年4回,利率は当初年8.25%(固定金利),財務トリガー閾値 CET1 比率7%,PONV

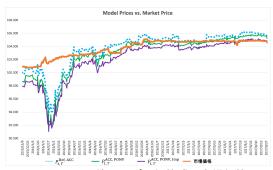


図 1. MUFG_AT1 債のモデル価格式と市場価格の日次推移:財務トリガーのみ・完全情報(上方の青点線),財務&PONV トリガー・完全情報(中央の緑実線),財務&PONV トリガー・不完全情報(下方の紫実線). AT1 債の市場価格は太い橙実線で表示.会計情報ノイズ $\sigma_{\rm AN}=10\%$.

トリガーあり.

本研究では,モンテカルロ・シミュレーションを用いてモデル価格式の中に現れる「条件付生存確率」を算出した.

モデルに含まれるパラメータの設定法やシ ミュレーションのアルゴリズムについては,本 論文を参照されたい.

4 結果

図は,MUFG_AT1 債について,モンテカルロ・シミュレーションで得たモデル価格と市場価格を比較しているグラフである.

モデル価格と市場価格が,ある程度整合的に 推移している状況がいくつか観測された一方で, 両者の水準や推移の様態に大きな乖離が生じて いる局面も見られた.

他の結果や詳しい考察については,本論文を 参照されたい.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17K01248 の 助成を受けておこなわれた.

- Rösler, L. "Stochastic Filtering in Pricing and Credit Risk Management," PhD thesis, TU Wien, 2016.
- [2] Frey, R., Rösler, L. and Lu, D. "Corporate Security Prices in Structural Credit Risk Models with Incomplete Information," Working paper, 2014.

Inequality of Realization of a Stochastic Economic Dynamics based on the Erdős Discrepancy Problem

加藤寛之1

1 嘉悦大学 経営経済学部

e-mail: hiroyuki-kat0@kaetsu.ac.jp

1 Abstract

Since Pikkety (2014) empirically demonstrates the inequality of several sources of income, the theoretical models that provide justification for it are explored in some researches. This paper proposes a stochastic dynamics model in which people who are endowed with different discount factors buy the capital stock periodically and are exposed to randomness at arithmetic progression times. We prove that the realization of a stochastic equilibrium may render the people quite unequal benefits. Its proof is based on Erdős Discrepancy Problem that an arithmetic progression sum of any sign sequence goes to infinity, which is recently solved by Terence Tao (2016). The result in this paper implies that in some cases, the sources of inequality come from pure luck.

2 Model

Let \mathbb{N} denote the set of natural numbers. Denote the stochastic productivity by $a_t \in \{\overline{a},\underline{a}\}$ for $t \in \mathbb{N}$ with $\overline{a} > \underline{a} > 0$. The producers' behavior is described as the following maximization problem.

$$\max_{L_t} a_t L_t - w_t L_t.$$

where L_t means the aggregate labor and w_t is the wage rate.

We normalize $E_P[a_t] = 1$ where P is a probability appropriately defined.

Consumers buy the capital stock and directly obtain the utility from it and supply labor that yields disutility. Let x_t be the quantity of capital and denote the labor supply by $l_t \in [0,1]$ at t. The quantity of initial capital $x_1 > 0$ decays at the depreciation rate of $0 < \delta < 1$. So the stock remains like $x_1, \delta x_1, \delta^2 x_1, \cdots$ as the time passes until the period written by $t = t_1$. Consumers buy the

new capital and replace the old one at $t = t_1 + 1$. We assume that in the period $t = t_1 + 1$ no capital is available. Next, the new capital is installed after one period at $t_1 + 2$. Then by the same manner x_{t_n+2} for $n = 1, 2 \cdots$ decays as $x_{t_n+2}, \delta x_{t_n+2}, \delta^2 x_{t_n+2}, \cdots$ until $t = t_{n+1}$. Consumers buy the new capital and replace the old one at $t = t_{n+1} + 1$, and the new capital is installed after one period at $t_{n+1} + 2$.

In what follows, we assume that the utility function u and disutility one $v: \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ are linear, u(x) = x, $v(l) = \eta l$, $\eta > 0$.

For convenience, we write down the consumers' maximization problem by setting the length of the remaining period of stock, $t_n - (t_{n-1} + 2) =: k_n$, namely the period between the beginning of newly installed capital, $t_{n-1} + 2$ and the end of it, t_n . Note that the period at which no capital is not yet available is written by $t_n + 1 = \sum_{i=1}^{n} (k_i + 2)$. Denote the set of time at which the capital is existent by

$$\mathbb{T} := \mathbb{N} \setminus \Big\{ \sum_{i=1}^{n} (k_i + 2) \mid n = 1, 2, \cdots, \Big\}.$$

Denote the set of nonnegative integers by \mathbb{Z}_+ (namely $\mathbb{N} \cup \{0\}$). Then the consumers' maximization problem is written as follows;

$$\max_{\{k_i\}_{i=1,2,\dots}\subset\mathbb{Z}_+, \{(x_t,l_t)\}_t} \{k_i\}_{i=1,2,\dots}\subset\mathbb{Z}_+, \{(x_t,l_t)\}_t$$

$$E_P\Big[\sum_{n=0}^{\infty} \Big\{\rho^{\sum_{i=1}^n (k_i+2)} \sum_{m=0}^{k_{n+1}} \Big[x_{\sum_{i=1}^n (k_i+2)+1}(\rho\delta)^m - \eta\rho^m l_{\sum_{i=1}^n (k_i+2)+m+1}\Big] - \eta\rho^{\sum_{i=1}^{n+1} (k_i+2)-1} l_{\sum_{i=1}^{n+1} (k_i+2)}\Big\}\Big]$$
subject to

$$S_t \Delta \theta_t = w_t l_t, \quad t \in \mathbb{T}$$
$$x_t + S_t \Delta \theta_t = w_t l_t, \quad t \notin \mathbb{T}$$

where $\sum_{i=1}^{0}$ =: 0, S_t is the price of stock, which are used for financing the capital or saving, and θ_t means the quantity of the stock at

t.

We assume that the price of stock has no trend. $E_P[S_t] = S_1 > 0$ for some $S_1 > 0$. Thus consumers prefer buying at most capital to saving something at the periods in \mathbb{T} due to the linearity of utility, presence of discounting ρ and no trend of stock prices. They save only when being in \mathbb{T} and buy the capital using all the savings and current wages in other than \mathbb{T} . We can see

$$l_t = 0$$
 for $t \in \mathbb{T}$ and $l_t = 1$ for $t \notin \mathbb{T}$.

We further find that the all optimal k_i , $i = 1, 2 \cdots$ must be the same. So we denote them by k^* . It holds that for $n = 1, 2, \cdots$

$$x_{(k^*+2)n+1} = w_{(k^*+2)n} = a_{(k^*+2)n}.$$

By imposing several parametric assumptions, we conclude that $k^* = 0$ for $\rho \in [(\eta + \delta)/(1 - \delta), \overline{\rho})$, $k^* = 1$ for $\rho \in [\rho_1, (\eta + \delta)/(1 - \delta))$, $k^* = 2$ for $\rho \in [\rho_2, \rho_1), \dots, k^* = i$ for $\rho \in [\rho_i, \rho_{i-1}), \dots$

Let $\varphi_i := [\rho_i, \rho_{i-1})$. A consumer who has a discount factor in φ_i selects $k^* = i$, $i = 0, 1, 2, \cdots$. For people who belong to φ_i , the supply of labor is one when $t = (i+2)n, n = 1, 2, \cdots$, which is the unique opportunity of receiving wages and being exposed by uncertainty, for example, φ_0 -people who select $k^* = 0$ supply one labor at $t = 2, 4, \cdots 2n, \cdots, \varphi_1$ -people who select $k^* = 1$ provide one labor at $t = 3, 6, \cdots 3n, \cdots, \varphi_2$ -people who select $k^* = 2$ supply one labor at $t = 4, 8, \cdots 4n, \cdots$, and so on.

3 Realization of Stochastic Process

This section concerns the realization of stochastic capital process. a_t is the exogenous productivity stochastic process each individual consumer face taking value \bar{a} or a.

At this point, we introduce the monumental mathematical theorem, known as Erdős Discrepancy Problem, long time being conjecture from around 1932, proved by Terence Tao in (2016). It states that for any sign sequence

$$f: \mathbb{N} \to \{-1, 1\},$$

$$\sup_{n,d\in\mathbb{N}} \Big| \sum_{j=1}^{n} f(jd) \Big|$$

is infinite. Formally, for any C>0 and f, there exist n and d such that

$$\Big|\sum_{j=1}^n f(jd)\Big| \ge C.$$

We apply this Erdős Discrepancy Problem to the exogenous $\{a_t\}$, which is equal to $\{w_t\}$ in equilibrium. In the model in the previous section, consumers are exposed to randomness periodically, namely, φ_i -people encounter the randomness at (i+2)n, $n \in \mathbb{N}$ periods for $i \in \mathbb{Z}_+$. By redefining $f: \mathbb{N} \to \{\overline{a}, \underline{a}\}$ and reinterpret (i+2)n = d, we can say the following theorem.

Theorem. For arbitrary large number, C > 0, and any realization of $\{a_t\}$, there exists a long period of time, $N \in \mathbb{N}$, and φ_i -people who face the high wages or low wages that outnumbers the other ones by difference C > 0, namely,

 φ_i -people encounter

$$\begin{cases} \#\overline{a} - \#\underline{a} \geq C \text{ (lucky people case)} \\ \text{or} \\ \#\underline{a} - \#\overline{a} \geq C \text{ (unlucky people case)} \end{cases}$$

for
$$t = 1, 2, \dots N$$
.

Roughly speaking, even under random environment, there may be a fixed member of the society who is almost always lucky or unlucky for large period of time.

References

- [1] Piketty, T. Capital in The Twenty-First Century, Translated by Arthur Goldhammer, The Belknap Press of Harvard University Press (2014).
- [2] Tao, T. "The Erdős Discrepancy Problem," *Discrete Analysis*, 1-27 (2016).

Intel AVX-512 命令を用いた複数の整数除算の高速化

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

整数除算は多くのアプリケーションで広く用 いられている演算の一つである. 一般的に除算 は加減乗算に比べて遅いことが知られている. 多くのプロセッサでは整数加減乗算の SIMD 命 令がサポートされているが、整数除算の SIMD 命令をサポートしているプロセッサはほとんど 存在しないのが現状である.

Intel 64 命令セットの div 命令は 128 ビット の被除数と64ビットの除数に対する符号なし 整数除算を行う. Intel SVML (Short Vector Mathematical Library) にはベクトル化された 整数除算の組み込み関数が含まれているが、被 除数および除数は8ビットから64ビットまでで あり、128ビットの被除数と64ビットの除数に 対する符号なし整数除算には対応していない.

また, 逆数を用いて整数除算を求めるアルゴ リズム [1, 2, 3] が提案されているが, ベクトル 化は考慮されていない.

本論文では、Intel AVX-512 命令を用いて複 数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に 対する符号なし整数除算を高速化し, 性能評価 を行った結果について述べる.

2 提案手法

符号なし整数除算は被除数をA,除数をBと すると,商 Q=|A/B| および剰余 R=A- $BQ(0 \le R < B)$ で定義される. 提案手法は複 数の128ビットの被除数と64ビットの除数に 対する符号なし整数除算を再帰除算 [4] により 行う. Algorithm 1 に再帰除算アルゴリズム [5] を示す. 被除数が128ビットで除数および商が 64 ビットの符号なし整数除算は, Algorithm 1 において $\beta = 2^{32}$, n = m = 2, $A < \beta^m B$ と すると,96ビットの被除数と64ビットの除数 に対する符号なし整数除算を2回行うことで計 算することができる.

96 ビットの被除数と64 ビットの除数に対す る符号なし整数除算を行う際には、上位64ビ ットの被除数と上位32ビットの除数に対する 符号なし整数除算で商を近似する. 除数 B が

Algorithm 1 Recursive DivRem [5]

Input: $A = \sum_{i=0}^{n+m-1} a_i \beta^i$, $B = \sum_{i=0}^{n-1} b_i \beta^j$, $\beta^n/2 \leq B < \beta^n, n \geq m$

Output: quotient Q and remainder R of Adivided by B

1: if m < 2 then return $Q := A \operatorname{div} B$, $R := A \mod B$

2: $k \leftarrow \lfloor m/2 \rfloor$, $B_1 \leftarrow B \operatorname{div} \beta^k$, $B_0 \leftarrow B \operatorname{mod} \beta^k$ 3: $(Q_1, R_1) \leftarrow \mathbf{RecursiveDivRem}(A \operatorname{div} \beta^{2k}, B_1)$

4: $A' \leftarrow R_1 \beta^{2k} + (A \mod \beta^{2k}) - Q_1 B_0 \beta^k$

5: **while** A' < 0 **do** $Q_1 \leftarrow Q_1 - 1, A' \leftarrow A' + \beta^k B$

6: $(Q_0, R_0) \leftarrow \mathbf{RecursiveDivRem}(A' \operatorname{div} \beta^k, B_1)$

7: $A'' \leftarrow R_0 \beta^k + (A' \mod \beta^k) - Q_0 B_0$

8: while A'' < 0 do $Q_0 \leftarrow Q_0 - 1$, $A'' \leftarrow A'' + B$

9: **return** $Q := Q_1 \beta^k + Q_0, R := A''$.

 $\beta^n/2 \leq B < \beta^n$ に正規化されている場合,正 確な商を Q とすると商の近似値は Q, Q+1, Q+2のいずれかになる [4]. したがって、剰余 R = A - BQ が $0 \le R < B$ の範囲に収まるよ うに商の近似値を補正することにより正確な商 が得られる.

提案手法に基づく複数の128ビットの被除数 と64ビットの除数に対する符号なし整数除算の ベクトル化の例を図1に示す. 除数の Number of Leading Zero(NLZ)を計算して,被除数と 除数をそれぞれ左に NLZ ビットシフトするこ とで、正規化を行うことができる. この NLZ の計算は Intel AVX-512CD の vplzcnt 命令を 使うことでベクトル化することが可能である.

図1のプログラムでは正規化を行う際に,変 数 an1 への代入において a0[i] >>(64 - s) ではなく(a0[i] >> (63 - s)) >> 1として いる. これは Intel 64 命令セットおよび Intel AVX-512 命令セットの 64 ビットオペランドに 対するシフト命令がシフト幅を下位6ビットし か見ないため s = 0 の場合でもプログラムが 正しく動くようにするためである.

また,64ビットの被除数と32ビットの除数 に対する符号なし整数除算 an1 / b1 および r / b1 を Intel C compiler でコンパイルすると, Intel SVML のベクトル化された整数除算の組 み込み関数が呼び出される.

```
#include <stdint.h>
#include <immintrin.h>
void vdivq(uint64_t *q, uint64_t *a0,
          uint64_t *a1, uint64_t *b)
/* q[:] = (2^64 * a1[:] + a0[:]) / b[:].
   Requires a1[:] < b[:]. */
 uint64_t an0, an1, bn, b0, b1, q0, q1, r, t0, t1; トの被除数と 64 ビットの除数に対する符号な
  int64_t vs[VLEN];
  int i, s;
 for (i = 0; i < VLEN; i += 8)
    _mm512_store_epi64(&vs[i],
    _mm512_lzcnt_epi64(_mm512_load_epi64(&b[i])));
  for (i = 0; i < VLEN; i++) {
    s = vs[i]; bn = b[i] << s;
    an0 = a0[i] << s;
   q1 = an1 / b1; r = an1 - q1 * b1;
   t0 = (r \ll 32) \mid (an0 >> 32);
   t1 = q1 * b0; r = t0 - t1;
    if (t0 < t1) {
     q1--; r += bn;
     if (r >= bn) {
        q1--; r += bn;
    q0 = r / b1; r = q0 * b1;
    t0 = (r \ll 32) \mid (an0 \& 0xFFFFFFFF);
    t1 = q0 * b0; r = t0 - t1;
    if (t0 < t1) {
     q0--; r += bn;
     if (r >= bn) {
        q0--; r += bn;
   }
    q[i] = (q1 << 32) | q0;
```

図 1. 提案手法に基づく複数の 128 ビットの被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算のベクトル化の例

3 性能評価

性能評価にあたっては、複数の128ビットの 被除数と64ビットの除数に対する符号なし整 数除算の性能を,提案手法と Intel 64 命令セッ トの div 命令で比較した.除数は $1 \sim 2^{64} - 1$ の範囲の乱数とし、被除数は $0 \sim 2^{127} - 1$ の 範囲の乱数で商が264-1以下になるものとし た. 256 要素の符号なし整数除算を 100 万回実 行し、その平均の経過時間から1秒あたりの符 号なし整数除算回数 (Mops) を算出した.

評価環境として, Intel Xeon Phi 7250の1 コア、1スレッドを用いた. コンパイラは Intel C compiler 18.0.3.222 を用い, コンパイルオプ ションは "icc -O3 -xMIC-AVX512" を用いた. Intel Xeon Phi 7250 における複数の 128 ビッ

表 1. Intel Xeon Phi 7250 における複数の 128 ビット の被除数と 64 ビットの除数に対する符号なし整数除算の 性能

	性能(Mops)
提案手法	32.763
div 命令	13.985

し整数除算の性能を表1に示す.表1から提案 手法が div 命令よりも約 2.34 倍高速であるこ とが分かる.

まとめ

本論文では、Intel AVX-512 命令を用いて複 an1 = (a1[i] << s) | ((a0[i] >> (63 - s)) >> 1); 数の128ビットの被除数と64ビットの除数に対 する符号なし整数除算を高速化し,性能評価を 行った結果について述べた. 再帰除算アルゴリ ズムを用いるとともにベクトル化を行うことで, Intel 64 命令セットの符号なし整数除算命令に 比べて高速に整数除算が行えることを示した.

> 本研究の一部は、JSPS 科研費 16K00168 の支援によって行われた.

- [1] R. Alverson, "Integer division using reciprocals," in Proc. 10th IEEE Symposium on Computer Arithmetic (ARITH 1991), 1991, pp. 186–190.
- [2] T. Granlund and P. L. Montgomery, "Division by invariant integers using multiplication," in Proc. ACM SIG-PLAN 1994 Conference on Programming Language Design and Implementation (PLDI'94), 1994, pp. 61-72.
- [3] N. Möller and T. Granlund, "Improved division by invariant integers," IEEE Trans. Comput., vol. 60, pp. 165–175, 2011.
- [4] C. Burnikel and J. Ziegler, "Fast recursive division," Max-Planck-Institut Für Informatik, Tech. Rep. MPI-I-98-1-022, 1998.
- [5] R. Brent and P. Zimmermann, Modern Computer Arithmetic. Cambridge University Press, 2010.

多倍長精度浮動小数点演算の並列化

八木 武尊¹,菱沼 利彰²,石渡 恵美子¹,長谷川 秀彦² ¹東京理科大学,²筑波大学

e-mail: hasegawa@slis.tsukuba.ac.jp

1 概要

高精度演算が必要かどうかは、対象とする問題、使用するアルゴリズム、解に要求する精度によって異なる。状況によっては高精度演算の使用が計算時間の浪費になりうるため、まずは高精度演算の有効性をテストすることが重要であろう。GMPのような可変精度演算プログラムは汎用的であるが、プログラム作成の労力が大きいことと、ある精度に限定したプログラムを高速に実行できないという問題がある。

多倍長精度浮動小数点演算は、演算精度が基本となる精度の2倍、4倍などに限定されるが、ハードウェアで実装された高速な浮動小数点数演算が利用できるため、高速に実行できることが多い、基本となる演算が単精度、倍精度、4倍精度と変化すれば、それに応じた多倍長精度演算が容易に実装できる。

われわれは、倍精度浮動小数点数2つを組み合わせた Double-double (DD) 精度[1], 4 つを組み合わせた Quad-double (QD) 精度[2]をScilab と Matlab 上に Multiple Precision Arithmetic Toolbox (MuPAT)として実装した[3]. MuPATは、異なる演算精度を容易に組み合わせて使える環境になっている。本報告では、「DD/QD 演算をどのように高速化するか」について述べる。

2 DD 演算と QD 演算の高速化

Matlab のような対話的環境では、素朴な実装 (Matlab 関数の組み合わせ) はインタプリタ形式での実行となる. ベクトルや行列のような複数要素に同一の演算を施す場合は、その演算を実行する外部関数を作成し、外部関数の実行環境での高速化が現実的である. 一方、単一要素に対する演算は、外部関数を呼び出す際のオーバヘッドのため高速化は困難である.

の高速化の可能性がある.

2.1 FMA

FMA (Fused Multiply and Add) [4] は,倍精度の積演算と和演算の組み合わせ x=a*b+c を 1 演算として実行する演算であり,内積,行列ベクトル積の基本演算などは FMA 演算 1 回で計算できる。メモリアクセスは変わらないが,演算回数が半減し,最大で 2 倍の性能向上が見込める。

DD 加算は倍精度加算 11 回, DD 乗算は倍精度加算 15 回, 倍精度乗算 9 回なので, DD 精度の積和演算には 35 倍精度演算が必要である. そのうち FMA が利用できるのは split 関数内に 1 カ所, twoProd 関数内に 4 カ所あり, FMA を使った DD 精度の積和演算は加算 18 回, 乗算 1 回, FMA 8 回の 27 倍精度演算となる. 35/27 で約 1. 3 倍の高速化が期待できる. QD 精度の積和演算では, 加算 91+171 回, 乗算 46 回の 308 倍精度演算が, 加算 222 回, 乗算 6 回, FMA 40 回の 268 倍精度演算となり,約 1. 1 倍の高速化が期待できる.

2.2 AVX2

Intel AVX2 (Advanced Vector Extensions 2) [4]は、4つの倍精度浮動小数点数演算を同時に実行する命令である。メモリアクセス数は変わらず、4倍の性能向上が見込めるが、常に4つの要素を用意する必要があり、入力データ数が4の倍数でないときに付加的な操作が必要になる。FMA を併用できる.

2.3 OpenMP

OpenMP は共有メモリ上での並列化を可能にする API であり、コアの数だけの性能向上が見込める.実験では1コアに1スレッドを割り当て、スケジューリングタイプを guided とした.

2.4 性能改善

FMA の効果は, DD/QD 演算で約1.1 倍だった. AVX2 の効果は, DD/QD とも行列-ベクトル積と行列積が約4倍, QD の内積が約3.2倍, その他が2倍以下だった. OpenMP の効果は, 行列-ベクトル積はDDが2.6倍, QDが3.1倍, 行列積はDDが3.7倍, QDが3.4倍, 行列和がDD/QD

とも約3倍で、その他は2倍以下だった.

FMA, AVX2, OpenMP のすべてを適用すると, DD 行列和 2.8 倍, DD 行列-ベクトル積 9.9 倍, DD 行列積 16.7 倍, QD 行列和 5.2 倍, QD 内積 5.1 倍, QD 行列-ベクトル積 14.9 倍, QD 行列積 16.1 倍である. 高速化された場合は, 理論ピーク性能の 4~5 割を達成している.

3 DD 演算のさらなる高速化

ベクトルに対する演算が高速化されないのは、メモリからのデータ供給が演算に追いついていないためである. CPU の並列化・高速化はこれからも続くと考えられるが、メモリアクセスの高速化はあまり期待できない. 繰り返し使用するようなプログラムを作成する場合は、多倍長浮動小数点演算をより高速化することが望ましい.

3.1 係数行列の倍精度化

メモリアクセスが高速化のネックとなっているため、係数となる行列を倍精度のままとすることで高速化を図る. 現時点では「計算の高精度高速化」が目標であり、入力の高精度を先送りする. 多くの問題には影響がないが、必要なメモリ量を半分にできる. Bytes per Flops値は2.26から2.09に改善できる.

3.2 疎行列格納形式と BCRS

行列計算の高速化では、演算回数の削減が定石であり、ゼロ要素は格納せず、演算もしないのが一般的である。格納を非ゼロ要素だけにすると、要素へのアクセスにはインデックスを用いたメモリに対する間接参照となる。行列の疎度にもよるが、多くの場合、要素へのアクセスが複雑になるデメリットより、データ量・演算量の削減によるメリットのほうが大きい。

行列を標準的な CRS (Compressed Row Storage) 形式で格納すると、AVX2 用に、不規則に配置された4要素をまとめることが困難となる. AVX2 向けに、4*1、2*2、1*4 の小ブロックからなる BCRS (Blocked CRS)形式を導入する. 4 要素からなるブロックを構成することで、ゼロ要素の部分も格納・演算することになり、最大4倍のメモリ容量と演算が必要になる.

3.3 性能

AVX2 と OpenMP による並列化に効果的だったのは, 4*1 のブロックを用いた BCRS(4,1)である. 転置行列-ベクトル積の場合は, 列方向の並列化を行う必要がある. ゼロ要素の増加によ

る演算量の増加と AVX2 と OpenMP による高速 化のトレードオフは問題による. テスト行列コ レクションによる実験結果では, 要素数は 3 倍 程度まで増えることもあるが, その場合でも倍 精度行列-DD 精度ベクトル積と倍精度転置行列 -DD 精度ベクトル積との性能は約 2~4 倍高速 化できた.

4 まとめ

DD/QD 演算は、データ量に比べて演算量が多く、計算順序を変えることはできないが、複数の要素は独立に計算できる。DD/QD を用いた多倍長精度演算に対して、個々の演算に対する高速化、ベクトルと行列に対する共有メモリ上の並列化を行った。分散メモリ向けの並列化では、使用するノード数とその際のデータ転送が問題になるはずだが、Bytes per Flops の小さい計算なので問題になりにくいと思われる。

ここでの成果を疎行列に対する BiCG 法に適用すると,1 反復の所要時間が倍精度演算の約3倍となるが,アルゴリズムの高精度化によって反復回数1/3 になれば計算時間は同等になる.少ない反復回数なりのメリットもある.また,混合精度演算として,DD/QD 演算の使用を減らすような利用法も現実的である.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17K00164 の助成を受けた.

- [1] D. H. Bailey, High-Precision Floatingpoint arithmetic in scientific computation, Computing in Science and Engineering, Vol. 7 (2005), 54-61.
- [2] Y. Hida, X. S. Li and D.H. Baily, Quad-double arithmetic: algorithms, implementation and application, Tech. Report LBNL-46996, LBNL, Berkeley (2000).
- [3] S. Kikkawa, T. Saito, E. Ishiwata and H. Hasegawa, Development and acceleration of multiple precision arithmetic toolbox MuPAT for Scilab, JSIAM Letters, Vol. 5 (2013), 9-12.
- [4] Intel: Intrinsics Guide, https://software.intel.com/sites/land ingpage/IntrinsicsGuide/.

4倍精度・高次数解法による常微分方程式の数値解法

平山 弘

神奈川工科大学 自動車システム開発工学科

e-mail: hirayama@sd.kanagawa-it.ac.jp

1 概要

ピタゴラス三体問題 (Baurrau's problem) は、1913年に C.Burrau によって研究され、1967年にエール大学の Szebehely[1] らによって、Levi-Civita 変換を利用して数値計算によって解決された。

本論文では、4倍精度演算で、高次(24次)の Taylor 展開法を使えば、特別な変換を使わないで、高精度な計算結果を得ることができることを示す。

2 ピタゴラスの三体問題

ピタゴラスの三体問題とは、辺長 3,4,5 の直 角三角形の頂点の位置に、それぞれの対辺長に 比例する質量 3,4,5 の質点を静止状態で配置し、 その状態を初期条件として、これらの質点が相 互の引力によって、この後どう運動するかを追 及する問題である。

質量 3,4,5 の質点を m_3 、 m_4 、 m_5 とし、その位置をそれぞれ (x_3,y_3) 、 (x_4,y_4) 、 (x_5,y_5) とする。質点の m_i 、 m_j の距離を r_{ij} とすると次の式のようになる。

$$r_{34} = \sqrt{(x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2}$$

$$r_{35} = \sqrt{(x_3 - x_5)^2 + (y_3 - y_5)^2}$$

$$r_{45} = \sqrt{(x_4 - x_5)^2 + (y_4 - y_5)^2}$$

これらを用いると運動方程式は次のようになる。

$$\frac{d^2x_3}{dt^2} = 4(x_4 - x_3)r_{34}^{-3} + 5(x_5 - x_3)r_{35}^{-3}
\frac{d^2y_3}{dt^2} = 4(y_4 - y_3)r_{34}^{-3} + 5(x_5 - x_3)r_{35}^{-3}
\frac{d^2x_4}{dt^2} = 3(x_3 - x_4)r_{34}^{-3} + 5(x_5 - x_4)r_{45}^{-3}
\frac{d^2y_4}{dt^2} = 3(y_3 - y_4)r_{34}^{-3} + 5(x_5 - x_4)r_{45}^{-3}
\frac{d^2x_5}{dt^2} = 3(x_3 - x_5)r_{35}^{-3} + 4(x_4 - x_5)r_{45}^{-3}
\frac{d^2y_5}{dt^2} = 3(y_3 - y_5)r_{35}^{-3} + 4(x_4 - x_5)r_{45}^{-3}$$

初期条件は次のようになる。

$$x_3 = 1$$
, $\frac{dx_3}{dt} = 0$, $y_3 = 3$, $\frac{dy_3}{dt} = 0$
 $x_4 = 1$, $\frac{dx_4}{dt} = 0$, $y_4 = -1$, $\frac{dy_3}{dt} = 0$
 $x_5 = 1$, $\frac{dx_5}{dt} = 0$, $y_5 = -1$, $\frac{dy_3}{dt} = 0$

3 常微分方程式の解の Taylor 展開

ここでは簡単に、常微分方程式の Taylor 展開法について簡単に説明する。高階の常微分方程式は1階微分方程式に書けるので、次のように方程式、初期条件を仮定する。

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)) \qquad \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0$$

ここで、 \mathbf{f} 、 \mathbf{y} は、一般にベクトル関数で、十分なめらかで必要な回数だけ微分可能とする。初期条件の \mathbf{y}_0 は定数ベクトルである。このような微分方程式は、次の Picard の逐次近似法 [2] によって解くことができる。

$$\mathbf{y}_0(x) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{y}_{k+1}(x) = \mathbf{y}_0 + \int_{x_0}^x \mathbf{f}(t, \mathbf{y}_k(t)) dt$$

Taylor 展開式を上の式の被積分関数に代入し、被積分関数を Taylor 展開する。Taylor 級数は、k回目の反復計算の場合、k次まで Taylor 展開 [3] する。そのk次の Taylor 展開を積分し、定数項 \mathbf{y}_0 を加えてk+1次の解を計算する。1回の計算で、最低1次次数の高い解が得られる。

4 4倍精度計算

本計算に使った Microsoft 社製の C++言語は、4倍精度の数値は扱えない。ここでは、Bailey の double-double アルゴリズム [4] で 4 倍精度の計算を行う。double-double アルゴリズムでは,4倍精度浮動小数点数 a(real16) を二つの倍精変数 p(上位データ) および q(下位データ) を用いて a=p+q $(\frac{1}{2}\text{ulp}(p) \geq |q|)$ と表す。

ここで、ulp(x) はxの最小ビット (unit in the last place) を意味する。このとき,p および q は通常の倍精度浮動小数点数である。このため 仮数部の精度は 53bit であり、2 つの倍精度浮動小数点数を利用することで 106bit の精度で

表現できる。そのため、double-double アルゴリズムは IEEE754-2008 の 4 倍精度と比較すると 8bit 分だけ精度が劣る。しかし、IEEE754-2008 の 4 倍精度はソフトウエアで作成されているため、計算速度はハードウエアの計算をする部分が多い double-double 型 4 倍精度数が速く計算が出来るので、実用的な方法であると言われている。

5 三体問題の数値計算

方程式を初期条件をn次の Taylor 級数を利用して解いた。刻み幅hは、最高次数項の係数の絶対値が要求精度 ϵ より小さくなるように決定した。最高次数項の係数がゼロの場合は、その一つ次数の低い項の係数を使う。その項の係数がゼロならば、同様にさらに繰り返す。 a_n がn次の係数とすると、 $|a_n|h^n <= \epsilon$ でなければならない。すなわち、各 Taylor 級数に対して、hを $h=\sqrt[n]{\frac{\epsilon}{|a_n|}}$ として計算する。その中で最小の値をhとする。

今回の計算では、24次の Taylor 展開式 (n=24)を利用し、要求精度 $\epsilon=10^{-28}$ として計算した。その結果の小数点以下 13 桁を表 1 に示す。この計算結果は長沢、桧山 [5] の Levi-Civita 変換を利用して計算した結果より高精度の結果であるが精度の範囲で完全に一致する。

表	1.	3	天体の座標	
1	т.	·	ノトド・ノ圧が	

	式1.6八件の座派				
t	x_3	y_3			
	x_4	y_4			
	x_5	y_5			
0.0	1.00000000000000	3.00000000000000			
	-2.00000000000000	-1.00000000000000			
	1.00000000000000	-1.00000000000000			
20.0	3.0042926366964	0.5119252350247			
	-1.3886265375109	-0.4704760502527			
	-0.6916743520091	0.0692256991874			
40.0	-0.6220036918011	1.8583181578998			
	0.1735445568164	-2.3684104432832			
	0.2343665696275	0.7797374598867			
60.0	0.7438075001181	1.9399479510949			
	0.2640103346863	-0.7316243948700			
	-0.6574927678199	-0.5786692547609			
80.0	12.4474428920319	36.6423087251151			
	-3.5558667150022	-12.3547812055635			
	-4.6237723632174	-12.1015602706182			

6 数值計算検証

この計算結果を確かめるために、最終時間 t の時点で速度を逆転 $(\mathbf{v} = -\mathbf{v})$ させて、同じ経路を逆に計算し、初期値に戻るかを計算した。

初期条件から t=80 まで計算した。最大刻み幅 $h_{max}=0.1362$ 、最小刻み幅 $h_{min}=1.7092\times 10^{-7}$ で 10633 回 Taylor 展開を計算する必要があった。その時点の速度の符号を変えた値を初期値として t=0 まで計算した。この計算には10635 回 Taylor 展開する必要があった。Taylor 展開の計算回数はほぼ同じだが、逆計算の方が2 回多かった。ここで計算した初期値と元の初期値との差は最大で 2.23×10^{-18} で約17 桁一致した。この結果から計算は17 桁程度正しいと思われる。

さらに途中のエネルギーが保存されているかどうかを確かめた。エネルギー $E = -\frac{769}{60} = -12.81666 \cdots$ との相対誤差は、最大で 1.2×10^{-26} であった。ほぼ 25 桁の精度でエネルギーが一定であった。他の計算より精度良くエネルギー保存則が成りたっていることがわかる。

7 結論

常微分方程式の初期値問題では、通常 Runge-Kutta 法を使うがこの方法は、計算次数を自由に選べないため、高次の計算するのが困難である。Taylor 展開法を使えば、容易に高次の計算が可能で計算精度をあげれば、悪条件の方程式も十分な精度で容易に解くことができる。

- [1] Szebehely, V., Burrau's Problem of Three Bodies, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, vol. 58, Issue 1, 60-65(1967)
- [2] 佐野理, キーポイント微分方程式, 岩波 書店, 東京, (1993)
- [3] 平山弘, 小宮聖司、佐藤創太郎、Taylor 級数法による常微分方程式の解法, 日本 応用数理学会、Vol 12. No.1, 1-8,(2002)
- [4] 小武守,長谷川,藤井,西田,反復法ライブ ラリ向け4倍精度演算の実装とSSE2を 用いた高速化,
- [5] 長沢工、桧山 澄子:パソコンで見る天 体の動き、地人書館 (1992)

協力行動に対するクラスタリングの効果

守田 智

静岡大学学術院術院工学領域数理システム工学系列

e-mail: morita.satoru@shizuoka.ac.jp

1 概要

進化ゲームの概念は進化生物学において導入されゲーム理論全般にも組み入れられた. 行動生態学、経済学、心理学など幅広い分野に大きな影響を与えている. 近年になって複雑ネットワーク上の進化ゲームダイナミクスが着目されてきている. その理由は、生物の行動と生物間の関係性との相互作用が重要であると考えられるからである[1,2,3]. また複雑ネットワーク上のダイナミクスの理論は統計物理学の分野においても研究が進んでいる.

本研究では協力行動が関係性によってどのような影響を受けるかを考察する. Nowak と May [4] の先駆的な研究によると格子上の各頂点にプレイヤーを配置して隣接頂点間に囚人のジレンマゲームを行った場合に協力行動が保たれる. これは、協力者同士の固まった配置が利己的な裏切り行為の侵入を妨げるためであると直感的に理解できる. ところが、Hauertと Doebeli [5] は囚人のジレンマゲームを変形したスノードリフトゲームにおいて格子構造が協力行動を抑制する場合もあることを示した. このように空間的構造が協力行動にどのような影響を及ぼすかは必ずしも自明ではない.

そこで本研究ではネットワークのクラスタリング係数と呼ばれる指標に着目する. クラスタリング係数とは個体の隣人を2人選んだときにその2人も隣人同士である比率によって定義され,関係性の固まり具合を数値化したものである. 人間関係がバラバラであればクラスタリング係数が低く0に近い値を持つが,逆に少人数のグループを主体とするような密接な人間関係であれば1に近くなると考えられる. クラスタリング係数を可変としたネットワークモデルによる数値計算とペア近似を駆使した理論解析を行った.

その結果、クラスタリング係数の増加は2戦略が共存するパラメータ領域を狭くすることが示された。すなわち囚人のジレンマゲームにおいてクラスタリング係数は影響を与えないがスノードリフトゲームでは多数派戦略がより有利になることが示された[6].

	С	D
С	b-c	-c
D	b	0

単純化した囚人のジレンマゲーム

	С	D		
С	b - c/2	b-c		
D	b	0		
スノードリフトゲーム				

2 モデル

n個のノードからなるネットワークを考える. クラスタリング係数の影響のみに着目するため各ノードの次数 (隣接ノードの数) はすべて等しくなる場合を考えよう. 2 つのリンクをランダムに選びリンクの置き換えを試み, あらかじめ指定したクラスタリング係数に近づく場合のみ置き換えを実行する. この際, 各ノードの次数は保たれていることに注意する. 十分時間が経過した後の指定したクラスタリング係数を持つネットワークが得られる.

上記のように得られたネットワーク上で囚人のジレンマゲームまたはスノードリフトゲームを行う.各ノードは協力(C)または裏切り(D)の2戦略のうち一方を取る.全隣接ノードとゲームを行い.その平均点により適応度を与える.適応度の低い戦略は適応度の高い戦略に取って変わることになるが、その更新ルールには様々なものが知られている.ここでは代表的なものとして以下の4つの更新ルールを用いる.

- 1. Birth-death (BD): 適応度に比例した確率 でノード x をランダムに選抜する. その隣 接ノード y をランダムに選ぶ. ノード y は ノード x の戦略を採用する.
- Death-birth (DB):一様な確率でノード x をランダムに選抜する. その隣接ノードの中から適応度に比例した確率でノードyをランダムに選ぶ. ノードxはノードyの戦略を採用する.
- 3. Imitation (IM): 一様な確率でノードxを ランダムに選抜する. その隣接ノードとノ

- ードxの中から適応度に比例した確率でノードyをランダムに選ぶ. ノードxはノードyの戦略を採用する.
- Local competition (LC): 一様な確率でノードxをランダムに選抜する. その隣接ノードの中から一様な確率でノードyをランダムに選ぶ. 2 つのノードから適応度に比例した確率で勝者を決め, 敗者は勝者の戦略を採用する.

3 ペア近似解析

平衡状態を近似計算するためペア近似を適用する. p_c と p_d はそれぞれ協力者と裏切り者の平衡状態での割合とする. リンクで結ばれた 2 つのノードの状態は 3 通りあり,それぞれの平衡状態での割合を p_{cc} , p_{cd} , p_{dd} とおく. 協力者の隣が協力者である確率または裏切り者の隣が裏切り者である確率は以下のように定義される. $X=p_{c|c}=p_{cc}/p_c$, $Y=p_{d|d}=p_{dd}/p_d$. このとき p_c , p_d , p_{cc} , p_{cd} , p_{dd} は,XとYで陽に表現できる. さらにトライアドの割合は

 $p_{\angle \text{ccd}} \cong p_{\text{cd}} X/2$ $p_{\angle \text{cdd}} \cong p_{\text{cd}} Y/2$

と近似でき、トライアングルに関しては Kirkwood 近似[7]を適用して

 $p_{\triangle \operatorname{ccd}}: p_{\triangle \operatorname{cdd}} \cong X: Y$

と近似する. その結果, クラスタリング係数を Cとすると戦略の入れ替わりに不可欠な CD ペ アのもう一方のノードに関する条件付確率が

> $p_{c|cd} \cong (1 - C)X + CX/(X + Y)$ $p_{d|dc} \cong (1 - C)Y + CY/(X + Y)$

のように近似できる. これらの近似式を用いると4つの更新ルールそれぞれに対して協力者割合の理論式が求まる. 理論式を数値計算の結果と比較するとよく合致していることが確認できる. これらの計算の詳細は Morita[6]を参照されたい.

いずれの更新ルールに対しても成立する式として以下の関係式が得られる.

 $H = p_{cd}/p_c p_d = 1 - 1/(1 - C)(1 - z)$ この量は隣同士が異なる戦略を持つ傾向を数値化したものでヘテロフィリシティと呼ぶことにする. クラスタリング係数Cが大きくなるとヘテロフィリシティHも増大する. その結果として同じ戦略で固まることができなくなり、2戦略が共存するパラメータ領域が狭くなることがわかる.

4 結論

ネットワーク上のゲームに関してペア近似 を駆使すると平衡状態の解析解が求まる. そ の結果からクラスタリング係数の増加は戦略 のヘテロフィリシティーを増大させ、その結 果として戦略が共存すパラメータ領域が狭く なることが示される. 囚人のジレンマゲーム の場合、共存領域が元々無いためクラスタリ ング係数による影響を受けない. 一方、スノ ードリフトゲームの場合は共存領域の減少に 伴い、少数派であった戦略は絶滅する傾向が ある. このような結果は、仲間内だけに限ら れるようなグループ的な人間関係が多数派を より有利にするかもしれないという興味深い 示唆を与える。しかし、本研究ではネットワ ークは固定して行動によって変化しない状況 のみを扱った. ネットワーク構造と行動の共 進化的な研究は今後の課題としたい.

- [1] M. A. Nowak, Evolutionary Dynamics: Exploring the Equations of Life, Harvard University Press, Cambridge, (2006).
- [2] E Lieberman, C Hauert, MA Nowak, Evolutionary dynamics on graphs, Nature 433. (2005), 312-316.
- [3] G. Szabo and G. Fath, Evolutionary games on graphs, Physics Reports 446. (2007), 97-216.
- [4] M. A. Nowak and R. M. May, Evolutionary games and spatial chaos, Nature 359. (1992), 826-829.
- [5] Ch. Hauert and M. Doebeli, Spatial structure often inhibits the evolution of cooperation in the snowdrift game, Nature 428. (2004), 643-646.
- [6] Satoru Morita, Evolutionary game on networks with high clustering coefficient, Nonlinear Theory and Its Applications IEICE 7. (2016), 110-117.
- [7] J. G. Kirkwood, statistical mechanics of fluid mixtures, J. of Chem. Phys. 3. (1935), 300-313.

二重比例法による議席配分のシミュレーション分析

諸星 穂積

政策研究大学院大学

e-mail: morohosi@grips.ac.jp

1 はじめに

二重比例 (biproportinal) 法は, [1, 2] で提案 された選挙区ごとの政党への議席配分を行う方 法である. 通常の議席配分法は, 人口または得 票数の非負ベクトル $\mathbf{p} = (p_i)$ から議席数を表 す非負整数ベクトル $\mathbf{a} = (a_i)$ を求める. 二重 比例法では、選挙区毎の政党の得票数を表す非 負行列 $V = (v_{ij})$ (行を選挙区,列を政党とす る)から議席数(当選者数)を表す非負整数行 列 $X=(x_{ij})$ を求める.本稿では、二重比例法 による配分を一つの理想的な比例配分法だと考 えて、実際の議席数との比較を行うことで得ら れた知見を報告する. 利用したデータは、衆議 院に小選挙区比例代表並立制が導入された後, 1996 年以降の総選挙の結果である. 今回の発 表では、比例ブロックについて分析を行った. 図1は、この期間に継続して存在していた主な 政党の得票と議席を示す.

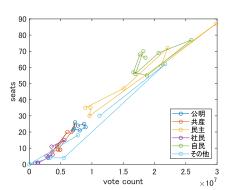


図 1. 主な政党の得票数と議席数 (1996-2017)

2 二重比例法について

通常利用される除数法による配分では、丸め関数 $d(\cdot)$ により $a_i=d(p_i/D)$ とする。除数 D は総議席数が h になる条件 $\sum_{i\in I}a_i=h$ を満たすように決める(I は選挙区または政党の集合).二重比例法の場合は、行和(各選挙区の定数) r_i と列和(各政党の当選者数) c_j が与えられ($\sum_{i\in I}r_i=\sum_{j\in J}c_j$ を仮定),各行各列に対して 2 種類の除数ベクトル $\lambda=(\lambda_i)$ と $\mu=(\mu_j)$ を, $\sum_{j\in J}d(p_{ij}/\lambda_i\mu_j)=r_i, \forall i\in I$ (I は選挙区の集合),かつ $\sum_{i\in I}d(p_{ij}/\lambda_i\mu_j)=c_j$,

表 1. シミュレーションの設定

	集計単位		
	ブロック	全国	
Jefferson	現行	(1)	
Webster	(2)	(3)	

 $\forall j \in J$, (J は政党の集合), となるように決めた上で, $x_{ij} = d(v_{ij}/\lambda_i\mu_j)$ とする. 計算法については [3] 参照してほしい.

3 シミュレーションの説明

現在の衆議院比例代表では、Jefferson 法をブロック毎に適用して各政党の当選者数を決めている。本稿では、表1に示す(1)~(3)の仮想状況を考えて現実の結果と比較を行った。3つの設定の詳細は以下の通りである。1)比例代表をブロック毎ではなく、全国での得票に基いてJefferson 法で政党の議席数を決め、Jefferson 法による二重比例法で各ブロックに配分する。2)ブロック毎での当選者をWebster 法で計算する。3)全国での得票に基いてWebster 法で政党の議席数を決め、Webster 法による二重比例法で各ブロックに配分する。

3.1 シミュレーション (1) の結果

この結果からブロック化によりどのような効果が生じるかを見ることができる。図 2 に,主な政党毎に実際の当選者数と,シミュレーションで求まった数との差を示した。図を見ると,

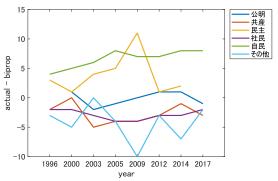


図 2. 全国集計した場合の政党議席数と実数との差

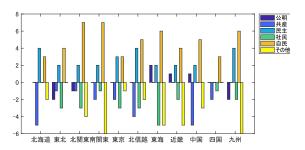


図 3. ブロック別の各政党の議席数と実数との差

自民と民主がブロック集計により議席を多く得ているのに対して,共産,社民やその他の政党はかなり少ない配分になっている.

次にブロック毎の様子を見るために,同じ計算結果をブロック別に各政党で合計したのが図3である. どのブロックでもだいたい傾向は一緒で,違いはあまり認められない.

3.2 シミュレーション (2) の結果

現行の Jeffersion 法を Webseter 法に変えて ブロック毎に各政党の議席数を計算したものが 図 4 である. グラフを比較すると(1)の結果 と似ている.

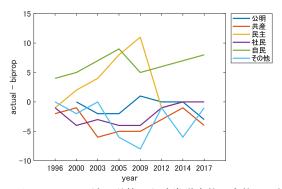


図 4. Webster 法で計算した政党議席数と実数との差

3.3 シミュレーション (3) の結果

最後に、全国集計した政党別の得票数を基に Webster 法でブロックに配分した場合を計算した.(2)と(3)の結果はよく似ており、Webster 法ではブロックを使っても全国集計と似た結果になるようである.

4 まとめ

現行と3つの仮想的配分との違いを簡単に見るため、以下のような距離を計算した.各

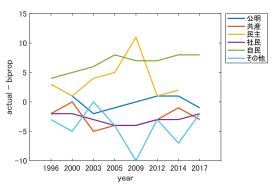


図 5. 全国集計を Webster 法で計算した結果

年kの総議席数 h_k と2つ配分法 $X = (x_{ij}^{(k)}),$ $X' = (x_{ij}^{(k)'})$ に対して距離 Δ_k を

$$\Delta_k = \sum_{i \in I, j \in J} |x_{ij}^{(k)} - x_{ij}^{(k)'}| / h_k$$

で定義し、8回の選挙の Δ_k の平均を求めた.計算結果を表 2 に示す.現行(Jefferson 法をブロック毎に適用)と (1) の比較からブロック化の影響が大きいことがわかる.また他の仮想的方法からも離れている. (2) と (3) の比較より、Webster 法は Jefferson 法に比べるとブロック化の影響は小さいようである.

表 2. 手法による議席数の差を表す距離 Δ

	現行	(1)	(2)	(3)
現行		0.127	0.129	0.142
(1)			0.070	0.066
(2)				0.055

3種のシミュレーションと比較しただけであるが、現行の比例代表制は偏りの大きい制度になっているように思われる。他の配分法との比較は今後の課題としたい。

- [1] M. L. Balinski, G. Demange, An axiomatic approach to proportionality between matrices, *Math Oper Res*, Vol. 14(1989), pp. 700–719.
- [2] M. L. Balinski, G. Demange, Algorithms for proportional matrices in reals and integers, *Math Program*, Vol. 45(1989), pp. 193–210.
- [3] F. Pukelsheim, *Proportinal Representation*, Springer, 2014.

選挙キャンペーンの決定と有権者の教育水準に関する因果関係の測定について

中川 訓範¹ ¹ 静岡大学

e-mail: nakagawa.kuninori@shizuoka.ac.jp

投票は0か1の二項選択であることが多い。 たとえば、特定の案件について是非を問う住民 投票などが、その典型である。特定の案件とは、 たとえば、市町村合併などが典型的な事例であ る。その際に賛成派と反対派による激しい闘い が起こることもある。こういった状況では両者 は分極化している。通常の選挙においては、こ のような状況が頻繁に起こるわけではないが、 トランプ大統領が当選した2016年のアメリカ大 統領選挙はトランプ氏が大統領になることの是 非を問うような投票となってしまい、賛成派と 反対派に有権者が分極化された。このような状 況はアメリカにおいても憂慮されているようで、 様々な研究がおこなわれている。例えば、トラ ンプ氏に投票する有権者の地理的な分布などは 近年の GIS の進展により詳細な分析が行われて いる。分析の切り口は様々であるが、経済学分野 からの切り口は貿易である。トランプ大統領は、 最近の中国との間で起こっている関税による経 済制裁でも明らかなように貿易について特定の 見解を有している。たとえば、Raul Hinojosa Ojeda, Maksim Wynn and Zhenxiang Chen (2016) はトランプ支持者が多く居住するカウ ンティはメキシコからの移民の影響が相対的 に低いことを明らかにしている。トランプ大 統領に限らず、貿易の問題は政治的な問題と化 すことが多く、有権者の激しい分極化を引き起 こすことがある。たとえば、Christian Dippel, Stephan Heblich, and Robert Gold (2015) は ドイツにおける極右政党の得票は貿易の自由化 による当該地域へのインパクトに相関すること を明らかにしている。Autor, David H., David Dorn, Gordon H. Hanson, and Kaveh Majlesi (2016) は中国との貿易によって直接的な競争 にさらされている地域では共和党が強くなって いることを明らかにしている。

ところで、Autor et al. (2016)の中で、彼らは"A decreased likelihood that moderate politicians win congressional elections in such locations."という表現を使っている。平たく言え

ば、当該地域ではまともな政治家が当選しに くくなっていると述べているわけだが、この原 因は誰にあるのだろうか。最も直接的な見解 は、有権者にあるという見解である。政治学者 の Arthur Lupia は 2016 年に"Uninformed: Why People Seem to Know So Little about Politics and What We Can Do about It "とい う著作を出した。この Uninformed という語に 込められている意味は、有権者が分かっていな いということである。そして、それに対する対 処として Civic Education の重要性を説いてい る。この分かっていないという語には規範的な 判断を伴うニュアンスが込められているように 感じるが、この使い方はおそらく政治学固有の ものであろう。というのも、経済学においては、 Uninformed という言葉に規範的なニュアンス はなく、市場の情報(これは多くの場合、価格 情報を指す)を知らないという事実を指す。こ の反対語が Informed である。これは取引され る財に関する価格を含めた様々な情報を知って いるという意味である。消費者は Informed で ある状況の典型が完全完備情報の市場であり、 完全競争市場では一般に一物一価が成立する。 したがって、経済学的な関心は、市場に Uninformed な主体がいる場合に、一物一価がどの ように崩れるかである。一物一価が成り立た ない状況の理論的な分析はSalop and Stiglitz (1977) や Varian (1980) などがよく知られてい る。前者は地理的要因によって情報が分断され る状況に注目し、後者は異なる2つのタイプの 主体がいることに注目する。いずれも、その結 果、一物一価が成り立たなくなる状況を示して いる。

以上で見てきたように、経済学と政治学では Uninformed という言葉の意味は若干異なる用 いられ方をしているが、いずれにしても、この Uninformed とその対概念である Informed の 2つのタイプが存在するという仮説が、近年の 分極化した選挙を説明する有効な概念であるこ とは間違いないと考えられる。 本研究では、まず最初に Uninformed な主体がいる選挙で起こる状況について経済学的な側面からの理論的考察を行なう。次に均衡分析の枠組みの中で、Lupia が提案する Civic Education を分析可能な枠組みとして構成することについて考える。最後に、そのモデルに対して計量的な手法を適用して実証する試みについて報告する。

- [1] Raul Hinojosa Ojeda, Maksim Wynn and Zhenxiang Chen, Donald Trump's False Narrative on Mexican Migration and Trade: A Geopolitical Economic Analysis, North American Integration and Development Center, University of California Los Angeles, 2016.
- [2] Christian Dippel, Stephan Heblich, Robert Gold, Globalization and Its (Dis-)Content: Trade Shocks and Voting Behavior, NBER Working Paper No.21812, 2015.
- [3] Autor, David H., David Dorn, Gordon H. Hanson, and Kaveh Majlesi, Importing Political Polarization? The Electoral Consequences of Rising Trade Exposure, NBER Working Paper No.22637, 2016.
- [4] Arthur Lupia, Uninformed: Why People Seem to Know So Little about Politics and What We Can Do about It, Oxford University Press, 2016.
- [5] Steven Salop and Joseph Stiglitz, Bargains and Ripoffs: A Model of Monopolistically Competitive Price Dispersion, Review of Economic Studies, 44/3, 493-510, 1977.
- [6] Hal R. Varian, A Model of Sales, American Economic Review, 70/4, 651-659, 1980.

議席配分方式の偏りについて

一森 哲男1

1 大阪工業大学

e-mail: tetsuo.ichimori@oit.ac.jp

1 はじめに

アメリカ合衆国憲法では,下院議員は州の人 口に比例して配分されることが明記されてい る. ただし、州には最低1人の下院議員が保証 される、1790年に1回目の国勢調査が実施さ れ,その結果に基づき,ジェファソンは議席を 配分した. その際, 人口3万3千人当たり1議 席の割合で議席を配分した. 例えば, 人口が9 万9千人の州には3議席を与えるが、人口13 万人の州にも3議席しか与えない.人口13万 人を共通の除数3万3千で割り算をすると、商 は3.93となるが、小数点以下の端数を切り捨 てて、3議席が与えられる. そのため、この配 分方式はジェファソン方式とか切捨方式と呼ば れる. 商が1.99 ならば1議席, 商が9.99 なら ば9議席が与えられるので、前者は商の約半分 しか議席に変換されないのに、後者は9割近く が議席になる. つまり, 人口の多い州(大州) が有利となる. ジェファソン方式は大州に有利 と批判され,新しい配分方式が模索された.ア ダムズは商の端数の切り上げを考えたが、今度 は人口の少ない州(小州)が有利となる. そこ で、ウェブスターは商の端数を四捨五入するこ とにより、大州と小州のバランスを取ることに した.

ウェブスターの時代,彼の方式が大州・小州 間のバランスを取ることは, 直感的であり, あ まり理論的なものとは言えない. それにもかか わらず, ウェブスター方式は長年, 偏りのない 方式と思われてきたのも事実である. 1910年 頃、国勢調査局のヒルが新しい配分方式を考案 していたが、10年後、数学者のハンティントン は議席配分方式をウェブスター方式からヒル方 式に変更するように強く求めた. ウィルコック スはそれを阻止するため, ヒル方式は小州に有 利な偏りを有するが、ウェブスター方式にはそ のような偏りがないことを実証した. やがて, バリンスキーとヤングはウィルコックスの考え を理論的に証明した. しかしながら, ウェブス ター方式の偏りを平均ゼロにするには奇妙な仮 定が必要となった.

2 ウィルコックスの偏り

州の数を s, 議席の総数を h, 州 i の人口を p_i , 総人口を $\pi = \sum_{i=1}^s p_i$ とすると,州 i の取り分,つまり,完全比例の議席数は $q_i = hp_i/\pi$ と書ける.また, π/h を基準人数と言うが,これは取り分の値が 1 に相当する.

配分方式の与える議席配分の偏りを計算する には,人口の極端に少ない州を除去してから, 偏りを求める必要がある. アメリカの人口は現 在 3 億人を超えており、下院議員の定数は 435 人に固定されている. すると, 1 議席当たりの 人口は 70 万人ほどになる. だから, 人口が 7 百人の州でも配分される議席数は1であり,人 口が7千人でも、7万人でも、70万人でも1議 席が配分される. つまり、70万人以下では人 口と議席数が比例しない. そこで, ウィルコッ クスは基準人数より少ない人口の州, 言い換え れば、取り分が1未満の州を偏りの計算から除 外した. 残りの州全体の人口の平均値を求め, 平均より人口の多い州を大州、小さい州を小州 と定義した. 大州グループ全体の取り分と議席 数,小州グループ全体の取り分と議席数を比較 し,配分方式の偏りを求めた.多くの過去の人 口分布と配分結果からウェブスター方式の偏り が他の除数方式より小さいと主張した[1].

3 バリンスキーとヤングの偏り

非負の整数上で定義される除数方式の丸め関数を d(k) とする。すなわち,d(0)=0, $k\leq d(k)\leq k+1$ ($k\geq 1$)を満たす関数 d(k)を考え,記号 [x] (これはガウスの記号ではない)を定義する。d(n-1)< x< d(n)を満たす正の整数 n が存在すれば [x]=n とする。また,x=d(n) ならば [x]=n または [x]=n+1 とする。人口ベクトル (p_1,\ldots,p_s) と除数方式の除数 λ を適当に定めたとき, $a_i=[p_i/\lambda]$ ($1\leq i\leq s$)かつ, $\sum_{i=1}^s a_i=h$ を満たす議席配分ベクトル (a_1,\ldots,a_s) を定める配分方式を除数方式 d(k) と呼ぶ。

バリンスキーらは理論的にウェブスター方式 d(k) = k + 0.5 の偏りが平均的にゼロであること

を示すために以下のことを仮定した。除数方式の除数 λ の値を固定したとき,配分 (a_1,\ldots,a_s) が定まったとする。つぎに人口をランダムに変化させる。このとき,商 p_i/λ が $d(a_i-1) \leq p_i/\lambda \leq p(a_i)$ を満たし,かつ, $p_i/\lambda \geq 0.5$ を満たす一様乱数と仮定する。

また、実証的にウェブスター方式の偏りが他の有名な除数方式より、偏りが小さいことを示すため、取り分が0.5より小さな州を偏りの計算から除外した. さらに、除外されなかった州の上位3分の1を大州、下位3分の1を小州と定義した[2].

ここで、0.5という数字は彼らにとって都合 の良い数字となっている. そもそも, 一般には 商と取り分は同じ値ではないので,両者の下限 を同一の0.5と仮定するのも妙である.仮に商 と取り分の値が一致しても,配分を定める除数 の値はある程度の範囲が許されているので、商 の値もある程度の範囲が許されている. すると, ある州は偏りの計算に入れられたり,入れられ なかったりするので、実証的な偏りの計算では 偏りの値が一義的に定まらなくなる. その危険 性を避けるため、実証的な偏りの計算では、商 を取り分に置き換えたと推察される. さらに, 取り分の下限 0.5 は、ヒル方式の違憲性を問う 裁判でも議論の対象となった. 結論はでなかっ たものの、裁判官は下限は0.5から1.5の間であ ればどのような値でも妥当であると述べたが, 下限の値を特定にすることはできなかった.

4 著者の偏り

配分 (a_1,\ldots,a_s) に対する偏りを

$$\sum_{i=1}^{s} [q_i] - h$$

と定義する. 配分方式の偏りの定義を,

$$\sum_{i=1}^{s} q_i = h, \ q_i \ge r(i = 1, \dots, s)\}$$

を満たす取り分の集合 Q(r) にわたる平均値とする. ここで、取り分の下限 r は $0.5 \le r \le 1.5$ を満たす. 配分方式 M の持つ固有の偏りを

$$B(\mathbf{M}, r) = \sum_{i=1}^{s} \mathbf{E}[[q_i]] - h$$

と定義する[3].

5 安定しない偏り

ウィルコックスは計算から除去する州の基準 を、時代とともに変更をするなどしており、彼 の主張が常に正しいとは言えない。実際、彼の 定義通りに計算すると、ウェブスター方式の偏 りがヒル方式のそれよりも大きい場合がある。 バリンスキーらの計算も、商の分布の範囲を変 えたり、計算から除外する州の取り分の下限を 変更すると、ヒル方式の偏りがウェブスター方 式の偏りよりも小さくなる。つまり、理論的に も実証的にも、配分方式の偏りに関する結果は 安定しない。一方、著者の偏りの定義は安定し ており、常に、ウェブスター方式の偏りが小さ くなる。

一見,これで問題解決のようであるが,実は,これらの偏りの計算では,アメリカで使われた議員定数hと州の数sが使われており,これまでの(h,s)の値では,この結論は妥当であるが,実は,著者の偏りはhとsとrの関数であり,r=1に固定し,hをsに近づけると,偏りが最小になるのはヒル方式であったり,アダムズ方式であったりする.例えば,我が国の参議院議員の配分の場合h=73,s=45であり,r=1とした結果をながめてみると,ヒル方式の配分結果が最も妥当なように思える.

著者は取り分の下限はr=1と考えるが、すべての(h,s)に対して、平均的な意味で、偏りを小さくする配分方式は定めることはできないと考える.

国勢調査が10年に一度であることから,1人が経験できる議席配分は数回しかなく,そのため,永遠の時間を要する平均的に好ましい性質にはあまり意味があるとは思えない.偏りの大きさでベストな配分方式を決定することは無理と思われる.

- [1] W. Willcox, The Apportionment Problem and the Size of the House: A Return to Webster, *Cornell Law Quarterly*, Vol. 35 (1950), 367–389.
- [2] M. Balinski and P. Young, Fair Representation, Yale University Press, 1982.
- [3] 一森哲男, ダイバージェンスを最小にする議席配分方式について, 情報処理学会論文誌, Vol. 56 (2015), 1442–1450.

複素モーメント型教師あり次元削減法

e-mail: imakura@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本講演では、高次元特徴量を持つデータのクラスタリングやクラシフィケーション手法として、行列のトレースの最大化・最小化に基づく次元削減法のアイディアを基盤とした新しい複素モーメント型の教師あり次元削減法を提案する. 提案法は、分類性能の改善を目的とし、行列のトレースと二乗誤差を組み合わせた新しい目的関数を導入する. また、複数固有ベクトルを含む複素モーメント型部分空間上の最小化問題として定式化される.

2 行列トレースに基づく次元削減法

学習データ数をn, 特徴量次元をmとし,学習データセットを $X=[x_1,x_2,\ldots,x_n]\in\mathbb{R}^{m\times n}$ とする.この時,m次元の学習データの特性を反映した $\ell(< m)$ 次元の低次元データ $Y=[y_1,y_2,\ldots,y_n]\in\mathbb{R}^{\ell\times n}$ を構築する線形の次元削減手法について考える.線形の次元削減法において,低次元データY は線形写像 $B\in\mathbb{R}^{m\times \ell}$ を用い

$$Y = B^{\mathrm{T}} X$$

のように構築される. 代表的な B の計算法としては、教師なし学習(学習データの正解ラベルを用いない)の PCA, LPP [1] および教師あり学習(正解ラベル情報を利用する)の FDA, LFDA [3], SELF [4], LADA [5] などがある.

次元削減法はそれぞれ、対称行列 $A_1 \in \mathbb{R}^{m \times m}$ および正定値対称行列 $A_2 \in \mathbb{R}^{m \times m}$ を定義し、射影行列 B は行列のトレースの最小化問題

$$\min_{B \in \mathbb{R}^{m \times \ell}} \operatorname{Tr} \left(B^{\mathsf{T}} A_1 B \right) \quad \text{s.t.} \quad B^{\mathsf{T}} A_2 B = I$$

または最大化問題

$$\max_{B \in \mathbb{R}^{m \times \ell}} \operatorname{Tr} \left(B^{\mathsf{T}} A_1 B \right) \quad \text{s.t.} \quad B^{\mathsf{T}} A_2 B = I$$

として定式化され,一般化固有値問題

$$A_1 \mathbf{t}_i = \lambda_i A_2 \mathbf{t}_i \tag{1}$$

のℓ個の固有ベクトルとして求解される.

3 複素モーメント型教師あり次元削減法

本節では、2節で示された行列のトレースの最小化/最大化に基づく次元削減法を基盤とし、分類性能改善のため正解ラベル情報 $Z \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$ を用いた新しい次元削減法の概略を記す.

なお,提案法の詳細および数値実験結果は当 日示す.

3.1 基本的アイディア

行列 A_1, A_2 を次元削減法で用いられる行列 とする. また, \mathcal{T}_{Ω} を一般化固有値問題 (1) の区間 $\Omega = [a,b] \subset \mathbb{R}$ 内部の固有値に対応する不変部分空間であるとする.

$$\mathcal{T}_{\Omega} := \operatorname{span}\{t_i | \lambda_i \in \Omega\}, \quad d := \dim(\mathcal{T}_{\Omega}).$$

ここで、 $d > \ell$ とし、区間 Ω の端点 a,b に固有値が無いものとする、線形写像 $B \in \mathbb{R}^{m \times \ell}$ の計算法として、行列トレースおよび二乗誤差を用いた以下の最小化問題を導入する。

$$\min_{B=[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\dots,\boldsymbol{b}_\ell],\boldsymbol{b}_i\in\mathcal{T}_{\Omega}} E(B),$$

$$E(B) = (1-\mu)\operatorname{Tr}\left(B^{\mathrm{T}}f(A_1)B\right)$$

$$+\mu\|Z-B^{\mathrm{T}}X\|_{\mathrm{F}}^2$$
s.t. $B^{\mathrm{T}}A_2B = I.$ (2)

行列 B の各列ベクトルは部分空間 \mathcal{T}_{Ω} の A_2 直 交基底である.ここで, $\mu \in \mathbb{R}$ は重みパラメータ,関数 $f(\cdot)$ は有理型関数である.

不変部分空間 T_{Ω} に対し、以下の定理が成り立つ [2].

定理 $\mathbf{1}$ パラメータ $L,M\in\mathbb{N}_+$ を $LM\geq d=|\{\lambda_i|\lambda_i\in\Omega\}|$ とする. 複素モーメント型部分空間を

$$S_{\Omega} := \mathcal{R}(S), \quad S := [S_0, S_1, \dots, S_{M-1}],$$

 $S_k := \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k (zA_2 - A_1)^{-1} A_2 V dz, \quad (3)$

と定義する. ここで, $V \in \mathbb{R}^{m \times L}$ とし Γ を領域 Ω を囲む複素平面上の閉曲線であるとする. この時, $\operatorname{rank}(S) = d$ の時, 以下が成り立つ.

$$S_{\Omega} = \mathcal{T}_{\Omega} := \operatorname{span}\{t_i | \lambda_i \in \Omega\}.$$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

高い認識性能を実現するための提案法の基本アイディアは以下のように概要される.

- 最小化問題 (2) の目的関数として、従来 の次元削減法で用いられる行列トレース と正解データを用いた二乗誤差の項を用 いる
- 目的関数の最小化を,多量の固有ベクトルを含む複素モーメント型部分空間上で行う.

3.2 アルゴリズムの導出

行列 $U \in \mathbb{R}^{m \times d}$ を部分空間 \mathcal{T}_{Ω} の A_2 直交基底を列に持つ A_2 直交行列とする.

$$U = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \dots, \boldsymbol{u}_d], \quad \boldsymbol{u}_k \in \mathcal{S}_{\Omega}, \quad U^{\mathrm{T}} A_2 U = I$$

ここで, $d = |\{\lambda_i | \lambda_i \in \Omega\}|$ を区間 Ω 内部の固
有値数とする.この時,行列 B は

$$B = UC$$
, $C^{\mathrm{T}}C = I$, $C \in \mathbb{R}^{d \times \ell}$

と書くことができる. また, $\operatorname{Tr}(A^{\mathrm{T}}A) = \|A\|_{\mathrm{F}}^2$ を用いると

$$||Z - B^{T}X||_{F}^{2} = ||Z - C^{T}U^{T}X||_{F}^{2},$$

$$\operatorname{Tr}(B^{T}f(A_{1})B) = \operatorname{Tr}(C^{T}f(U^{T}A_{1}U)C)$$

$$= ||f(T)^{1/2}C||_{F}^{2},$$

が成り立つ. ただし, $T=U^{\mathrm{T}}A_1U$ である. また, $\|A\|_{\mathrm{F}}^2+\|B\|_{\mathrm{F}}^2=\|[A;B]\|_{\mathrm{F}}^2$ を用いると, 提案法の最小化問題 (2) は直交制約付きの最小二乗問題

$$\begin{aligned} & \min_{C} F(C), \quad F(C) = \\ & \left| \left| \left[\begin{array}{c} \mu^{1/2} Z^{\mathrm{T}} \\ O \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \mu^{1/2} X^{\mathrm{T}} U \\ (1-\mu)^{1/2} f(T)^{1/2} \end{array} \right] C \right| \right|_{\mathrm{F}}^{2} \\ & \text{s.t.} \quad C^{\mathrm{T}} C = I \end{aligned} \tag{4}$$

として書き換えることができる.

直交制約付きの最小二乗問題 (4) は unbalanced orthogonal Procrustes (UOP) 問題と呼ばれ, 反復法によって解くことができる [6].

実用上,周回積分(3)はN点台形則等の数値積分によって近似される.

$$\widehat{S} := [\widehat{S}_0, \widehat{S}_1, \dots, \widehat{S}_{M-1}],$$

$$\widehat{S}_k := \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j A_2 - A_1)^{-1} A_2 V.$$

ここで, (z_j, ω_j) , $j=1,2,\ldots,N$ は積分点と対応する重みである.また,数値安定性改善のため,行列 \hat{S} の A_2 内積空間上での特異値分解に基づく低ランク近似

$$\widehat{S} = [\widehat{U}, \widehat{U}'] \begin{bmatrix} \widehat{\Sigma} \\ \widehat{\Sigma}' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{W}^{\mathrm{T}} \\ \widehat{W}'^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \approx \widehat{U} \widehat{\Sigma} \widehat{W}^{\mathrm{T}},$$

$$\widehat{U}^{\mathrm{T}} A_2 \widehat{U} = I, \quad \widehat{W}^{\mathrm{T}} \widehat{W} = I,$$

を用いる. この時, UOP 問題 (4) は

$$\begin{split} & \min_{C} \widehat{F}(C), \quad \widehat{F}(C) = \\ & \left| \left| \left[\begin{array}{c} \mu^{1/2} Z^{\mathrm{T}} \\ O \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \mu^{1/2} X^{\mathrm{T}} \widehat{U} \\ (1-\mu)^{1/2} f(\widehat{T})^{1/2} \end{array} \right] \widehat{C} \right| \right|_{\mathrm{F}}^{2} \\ & \text{s.t.} \quad \widehat{C}^{\mathrm{T}} \widehat{C} = I. \end{split}$$

のように書き換えられる. ここで, $\widehat{T}=\widehat{U}^{\mathrm{T}}A_1\widehat{U}$ であり、写像行列は $B=\widehat{U}\widehat{C}$ である.

- [1] X. He, P. Niyogi, Locality preserving projections, In Advances in Neural Information Processing Systems, (2004), 153–160.
- [2] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, Relationships among contour integral-based methods for solving generalized eigenvalue problems, Jpn. J. Ind. Appl. Math., 33 (2016), 721–750.
- [3] M. Sugiyama, Dimensionality reduction of multimodal labeled data by local fisher discriminant analysis, J. Mach. Learn. Res., 8 (2007), 1027–1061.
- [4] M. Sugiyama, T. Ide, S. Nakajima, J. Sese, Semi-supervised local fisher discriminant analysis for dimensionality reduction, Machine Learning, 78 (2010), 1–2.
- [5] X. Li, M. Chen, F. Nie, Q. Wang, Locality adaptive discriminant analysis, In Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence, (2017) 2201–2207.
- [6] H. Park, A parallel algorithm for the unbalanced orthogonal Procrustes problem, Parallel Computing, 17 (1991), 913–923.

相互作用型の残差スムージングによる積型 BiCG 法の収束性改善

相原 研輔1

1 東京都市大学

e-mail: aiharak@tcu.ac.jp

1 はじめに

大規模な非対称疎行列を係数に持つ連立一 次方程式 Ax = b, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ に 対して,双共役勾配 (BiConjugate Gradient, BiCG) 法は代表的な基幹解法のひとつである. これを改良した自乗共役勾配(Conjugate Gradient Squared, CGS) 法は,多く問題で BiCG 法の約2倍の速さで収束する有効な解法である が、残差ノルムが大きく振動する場合がある. 一般に, 残差ノルムが振動すると丸め誤差が拡 大し, 収束速度の低下や近似解精度の劣化に繋 がることが知られており、できる限り滑らかな 収束性を得ることが重要となる [1]. CGS 法か ら派生した安定化双共役勾配(BiCG STABilized, BiCGSTAB) 法は, BiCG 法の残差に 1 次の安定化多項式を作用させることで、比較的 滑らかな収束性を示す. 現在, BiCGSTAB 法 などの積型 BiCG 法は、広く利用されている. ただし, これらは残差ノルムの振動そのものを 抑える手法ではないため、収束振る舞いは問題 に依存する傾向があり,振動による収束性の悪 化は解消しきれない課題である.

一方,残差ノルムの振動を直接的に抑える手法として,残差スムージング [2] がある.これは,反復法で得られる近似解と残差の列をそれぞれ $\{x_k\}$, $\{r_k\}$ とするとき,次の関係を満たす新たな近似解 x_k^{S} と残差 r_k^{S} を生成するものである.

$$\boldsymbol{x}_{k}^{\mathrm{S}} = (1 - \eta_{k}) \boldsymbol{x}_{k-1}^{\mathrm{S}} + \eta_{k} \boldsymbol{x}_{k},$$

$$\boldsymbol{r}_{k}^{\mathrm{S}} = (1 - \eta_{k}) \boldsymbol{r}_{k-1}^{\mathrm{S}} + \eta_{k} \boldsymbol{r}_{k}.$$
 (1)

ただし、 $x_0^{\rm S}=x_0$ 、 $r_0^{\rm S}=r_0$ である。また、 η_k はパラメータであり、これを適切に与えると、スムージング後の残差ノルム $\|r_k^{\rm S}\|$ は、元の残差ノルム $\|r_k\|$ よりも小さくなり、かつ単調減少する。しかし、浮動小数点演算において、スムージング前後での収束速度は大きくは違わず、また近似解の精度も同程度になることが明らかにされている [3]。そのため、従来の残差スムージングは、残差ノルムの振る舞いを滑らかにするものの、数値的な意味で収束性を改善するも

のではないという認識が一般的である.これに対して、最近、残差スムージングの新しい計算スキームが提案された [4].これは、スムージング前後の反復列を相互作用させることで、行列ベクトル積から発生する丸め誤差の蓄積を抑え、数値的な収束性を改善するものである.特に、CGS 法に適用すると、少ない計算コストで近似解の精度を大幅に改善できることが示されている.

本発表では、文献 [4] の手法を BiCGSTAB 法など他の積型 BiCG 法に適用することを考える. 特に、CGS 法の場合とは異なり、素朴に適用すると 1 反復あたりの行列ベクトル積の計算回数が増加してしまうため、それを回避する効率的な実装法を提案する.

2 相互作用型の残差スムージング

元の近似解と残差は,適当な係数 α_{k-1} を伴って,次のように更新されるとする.

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1} p_{k-1},$$

 $r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} A p_{k-1}.$ (2)

このとき、相互作用型の残差スムージング [4] は以下のように実装される.

まず,ベクトル $\alpha_{k-1} p_{k-1}$ を用いて,補助ベクトル v_k^{S} を次のように計算する.

$$v_k^{S} = (1 - \eta_{k-1})v_{k-1}^{S} + \alpha_{k-1}p_{k-1}.$$
 (3)

ただし、 $m{v}_0^{\mathrm{S}} = m{0}$ である、次に、スムージング 後の近似解と残差を、漸化式

$$\mathbf{x}_{k}^{\mathrm{S}} = \mathbf{x}_{k-1}^{\mathrm{S}} + \eta_{k} \mathbf{v}_{k}^{\mathrm{S}},$$

$$\mathbf{r}_{k}^{\mathrm{S}} = \mathbf{r}_{k-1}^{\mathrm{S}} - \eta_{k} A \mathbf{v}_{k}^{\mathrm{S}}$$
(4)

によって求める. ここで、(4) と (1) により生成される近似解と残差は、数学的に等価である. そして、(4) で得られるスムージング後の残差 $r_k^{\rm S}$ を用いて、元の残差 r_k を

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{S}} - (1 - \eta_k) A \boldsymbol{v}_k^{\mathrm{S}} \tag{5}$$

と計算し、反復過程で使用する. なお、実装では元の近似解と残差の更新 (2) は不要となる.

以上の計算スキーム (3)–(5) は, Zhou-Walker による実装法[5]を改良したものであるが、従 来とは明確な違いがある.まず, Zhou-Walker による実装法では、 Av_k^{S} に相当するベクトルを 漸化式によって計算するが、(4)ではベクトル v_k^{S} に A を陽に掛ける. これにより, 近似解の 精度に影響する residual gap (漸化式から求ま る残差と真の残差の差)の大きさが、元の漸化 式(2)を用いた場合よりも小さく見積もられる [4]. また, (5) が新たに導入されている. 通常, スムージング後のベクトルは元の反復過程に影 響を与えることはないが,(5)を用いることで, スムージング前後の反復列が相互作用する. こ れにより, 行列ベクトル積から発生する丸め誤 差を評価すると, 残差に混入する局所的な誤差 が元の漸化式(2)を用いた場合よりも相対的に 小さくなる [4].

3 BiCGSTAB 法への適用

本稿では、新しい残差スムージング (3)–(5) を BiCGSTAB 法に適用する.

BiCGSTAB 法の残差 r_k は,安定化多項式 $\phi_{k+1}(\lambda)=(1-\omega_k\lambda)\phi_k(\lambda)$ と,BiCG 法の残差 r_k^{bicg} の積として, $r_k:=\phi_k(A)r_k^{bicg}$ と定まる.この残差の更新は, r_k^{bicg} を更新して中間的な残差 $r_k'=\phi_k(A)r_{k+1}^{bicg}$ を求める過程と,1次多項式を掛けて $r_{k+1}=(I-\omega_kA)r_k'$ とする過程に別けられ,それぞれ BiCG part と polynomial part と呼ばれる.すなわち,適当な補助ベクトル u_k を用いて,次のように更新される.

$$\mathbf{r}'_{k} = \mathbf{r}_{k} - \alpha_{k} A \mathbf{u}_{k}, \quad \text{(BiCG part)}$$

 $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}'_{k} - \omega_{k} A \mathbf{r}'_{k}. \quad \text{(polynomial part)}$ (6)

ただし、 α_k は BiCG 法の残差多項式を定める ひとつの係数であり、通常は初期シャドウ残差 \tilde{r}_0 に対して $\alpha_k = (r_k, \tilde{r}_0)/(Au_k, \tilde{r}_0)$ と計算する. また、係数 ω_k は $\|r_{k+1}\|_2$ を最小化するように $\omega_k = (r'_k, Ar'_k)/(Ar'_k, Ar'_k)$ と計算する.

各 part に対して,(3)-(5) を適用できる.しかし,行列ベクトル積を伴うベクトル Au_k , Ar'_k は,アルゴリズム中の他の部分でも使用される.したがって,(5) を含めると行列ベクトル積は通常の 2 倍(1 反復あたり 4 回)必要となり,このままでは実用的ではない.そこで,行列ベクトル積数の増加を防ぐ工夫を行う.

係数 ω_k を求めるために、行列ベクトル積 Ar'_k は欠かせないため、残差スムージングをBiCG

part に対してのみ適用する. 具体的には, (6) を BiCG part の残差を基準に縮約し,

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}'_{k} &= \mathbf{r}'_{k-1} - A\mathbf{p}_{k}, \\
\mathbf{p}_{k} &:= \omega_{k-1}\mathbf{r}'_{k-1} + \alpha_{k}\mathbf{u}_{k}
\end{aligned} (7)$$

として考える. そして,(7) により生成される 残差列 $\{r'_k\}$ に対して,(3)–(5) を適用する.

ここで、文献 [1] に倣い、さらに次の工夫を行う。反復を開始する前に行列ベクトル積 $A^{\top}\tilde{r}_0$ を一度だけ計算して保持しておき、係数 α_k の分母は $(u_k, A^{\top}\tilde{r}_0)$ と求める。また、補助ベクトル u_k の更新にベクトル Au_k が必要となるため、(5) の形式で r'_k が計算された後に、 $Au_k = (r_k - r'_k)/\alpha_k$ と逆算する。結果として、1 反復あたりに必要な行列ベクトル積は、 $Av_k^{\rm S}$ と Ar'_k の2回となり、効率よく実装することができる。以上のアイデアは GPBiCG 法に対しても適用できる。数値実験結果は当日に報告する。

謝辞 本研究の一部は米山涼介氏,石渡恵美子教授(東京理科大学)との共同研究による成果[4]に基づくものであり,多くのご支援を頂きました両名に深くお礼申し上げます。また,本研究のきっかけを与えて下さった阿部邦美教授(岐阜聖徳学園大学)に深く感謝の意を表します。なお,本研究は科学研究費補助金(若手研究:JP18K18064)の助成を受けています。

- G.L.G. Sleijpen and H.A. van der Vorst, Reliable updated residuals in hybrid Bi-CG methods, Computing, 56 (1996), 141–163.
- [2] W. Schönauer, Scientific Computing on Vector Computers, Elsevier, Amsterdam, 1987.
- [3] M.H. Gutknecht and M. Rozložník, Residual smoothing techniques: do they improve the limiting accuracy of iterative solvers?, BIT, 41 (2001), 86–114.
- [4] 米山 涼介, 相原 研輔, 石渡 恵美子, CGS 系統の反復法に対する近似解精度の改善 に向けたスムージング技術の再考, 日本 応用数理学会論文誌, **28** (2018), 18–38.
- [5] L. Zhou and H.F. Walker, Residual smoothing techniques for iterative methods, SIAM J. Sci. Comput., 15 (1994), 297–312.

Block BiCGSTAB 法の近似解高精度化と数値的安定化

多田野 寬人 1,2, 倉本 亮世 2

1 筑波大学計算科学研究センター, 2 筑波大学大学院システム情報工学研究科

e-mail: tadano@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

ブロッククリロフ部分空間反復法は,複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式:

$$AX = B, \ A \in \mathbb{C}^{n \times n}, \ X, B \in \mathbb{C}^{n \times L}$$
 (1)

の数値解法の1つであり、反復回数、計算時間の面でクリロフ部分空間反復法よりも優れた性能を示すことがある。一方、右辺ベクトル数が多い場合は、近似解の精度低下や、数値的不安定性により残差が発散・停滞することがある。

本研究では、ブロッククリロフ部分空間反復 法の1つである Block BiCGSTAB 法 [1] の近似 解精度低下の原因を解析する。また、同法の近 似解と残差の group-wise 更新 [2] による精度向 上法、及び数値的安定性向上法を提案する。

2 Block BiCGSTAB 法と近似解精度低下

 $X_{k+1} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ を Block BiCGSTAB 法で生成される連立一次方程式 (1) の (k+1) 番目の近似解とし, $R_{k+1} \equiv B - AX_{k+1} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ を対応する残差とする.これらは,以下の漸化式:

$$X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k + \zeta_k T_k, \tag{2}$$

$$R_{k+1} = R_k - (AP_k)\alpha_k - \zeta_k(AT_k)$$
 (3)

で求められる.ここで, P_k , $T_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は補助行列, $\alpha_k \in \mathbb{C}^{L \times L}$ はある直交条件より定まる行列で, $\zeta_k \in \mathbb{C}$ は残差ノルム $\|R_{k+1}\|_F$ が小さくなるように決められるパラメータである.

理論的に、漸化式 (3) で計算される残差と、真の残差 $B - AX_{k+1}$ は等しい。しかしながら、数値計算においては両者の間に差が生じることがあり、これが近似解精度低下の原因となる。式 (2), (3) を展開すると、以下の式が得られる.

$$X_{k+1} = X_0 + \sum_{i=0}^{k} (P_i \alpha_i + \zeta_i T_i), \qquad (4)$$

$$R_{k+1} = R_0 - \sum_{i=0}^{k} \left[(AP_i)\alpha_i + \zeta_i(AT_i) \right]. \quad (5)$$

真の残差 $B - AX_{k+1}$ は、式 (4), (5) より

$$B - AX_{k+1} = R_{k+1} + E_{k+1}$$

$$E_{k+1} \equiv \sum_{i=0}^{k} \left[(AP_i)\alpha_i + \zeta_i (AT_i) \right] - A \sum_{i=0}^{k} \left(P_i \alpha_i + \zeta_i T_i \right)$$
(6)

となる。但し, $E_{k+1} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は誤差行列である。 $\|R_{k+1}\|$ が十分小さくても数値的に $E_{k+1} \neq O$ である場合は, $\|B - AX_{k+1}\| \approx \|E_{k+1}\|$ となる。 一般に, $(AP_i)\alpha_i$ の計算誤差が $\|E_{k+1}\|$ の増加に大きな影響を及ぼす.

3 近似解と残差の group-wise 更新による Block BiCGSTAB 法の近似解精度向上

式 (6) より、誤差行列 E_{k+1} は反復毎に蓄積し、行列 $(AP_i)\alpha_i$ の計算誤差が大きな影響を及ぼす。本研究では、近似解と残差を group-wise 更新 [2] することで近似解精度向上を図る

 $s\ (\geq 1)$ 反復分の近似解更新量をグループ化する。反復番号 k を k=ms+j とおく。但し, $m\equiv \lfloor k/s \rfloor,\ 0\leq j\leq s-1$ である。補助行列 $U_q^{(l,s)}\in \mathbb{C}^{n\times L}$ を,以下で定義する。

$$U_q^{(l,s)} \equiv \sum_{i=0}^{q-1} (P_{ls+i}\alpha_{ls+i} + \zeta_{ls+i}T_{ls+i}).$$

このとき,近似解 X_{ms+i+1} は

$$X_{ms+j+1} = X_0 + \sum_{l=0}^{m-1} U_s^{(l,s)} + U_{j+1}^{(m,s)}$$

$$= X_{ms} + U_{j+1}^{(m,s)}.$$
(7)

残差 R_{ms+j+1} は、以下の漸化式で計算する.

$$R_{ms+j+1} = R_{ms} - AU_{j+1}^{(m,s)}. (8)$$

残差 R_{ms+j+1} の計算では、複数反復分の近似解 更新量 $U_{j+1}^{(m,s)}$ に対して A を乗じることで $(AP_i)\alpha_i$ の計算を回避している。式 (8) を展開すると、

$$R_{ms+j+1} = R_0 - \sum_{l=0}^{m-1} AU_s^{(l,s)} - AU_{j+1}^{(m,s)}.$$
 (9)

真の残差 $B - AX_{ms+i+1}$ は、式(7),(9)より

$$B - AX_{ms+j+1} = R_{ms+j+1} + G_{ms+j+1},$$

$$G_{ms+j+1} \equiv \sum_{l=0}^{m-1} AU_s^{(l,s)} + AU_{j+1}^{(m,s)}$$

$$- A\left(\sum_{l=0}^{m-1} U_s^{(l,s)} + U_{j+1}^{(m,s)}\right)$$

となる。但し, $G_{ms+j+1} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は誤差行列である。もし, $s \to \infty$,m = 0 の場合は

$$G_{j+1} = AU_{j+1}^{(0,\infty)} - AU_{j+1}^{(0,\infty)} = O$$

となり、誤差行列は発生しない。一方、sが大きい場合は、残差の収束性が悪化することがある。

4 提案法における数値的安定性の改善

右辺ベクトル数Lが多い場合は,反復過程で現れる $n \times L$ 行列を構成する列ベクトル間の線形独立性が数値的に失われ,残差の収束性が悪化することがある.残差を構成する列ベクトルを正規直交化することで,残差の収束性が改善することが知られている [3].

残差 R_k を $R_k = R_k' \xi_k$ と thin QR 分解する. 但し, $R_k' \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は列直交行列, $\xi_k \in \mathbb{C}^{L \times L}$ は上三角行列である.これを式 (8) に適用すると,

$$R'_{ms+j+1}\tau_{j+1}^{(m,s)} = R'_{ms} - AV_{j+1}^{(m,s)}.$$
 (10)

但し, $au_{j+1}^{(m,s)} \equiv \xi_{ms+j+1} \xi_{ms}^{-1} \in \mathbb{C}^{L \times L}$, $V_{j+1}^{(m,s)} \equiv U_{j+1}^{(m,s)} \xi_{ms}^{-1} \in \mathbb{C}^{n \times L}$ である.式(10)の右辺を thin QR 分解することで, R'_{ms+j+1} と $au_{j+1}^{(m,s)}$ が得られる. X_{ms+j+1} は以下の漸化式で求められる.

$$X_{ms+j+1} = X_{ms} + V_{j+1}^{(m,s)} \xi_{ms}.$$

5 数值実験

残差の thin QR 分解を適用した提案法と Block BiCGSTAB 法の性能を比較する。テスト問題は,格子量子色力学計算で現れる連立一次方程式 [4] である。行列 A は n 次単位行列 I と n 次疎行列 D により, $A = I - \kappa D$ で構成される。 κ は実パラメータで, $\kappa = 0.1359$ とした。行列のサイズは n = 1,572,864,非零要素数は 80,216,064 である。初期解 X_0 は零行列,右辺項は $B = [e_1,e_2,\ldots,e_L]$ とした。但し, e_j $(j=1,2,\ldots,L)$ は n 次元基本ベクトルである。右辺ベクトル数は L=20,提案法の

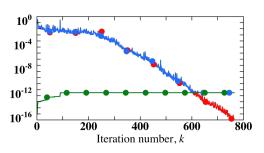


図 1. Block BiCGSTAB 法の結果. locklime: 相対残差 / ルム $||R_k||_{\mathrm{F}}/||B||_{\mathrm{F}}$, locklime: 真の相対残差 / ルム $||B-AX_k||_{\mathrm{F}}/||B||_{\mathrm{F}}$, locklime: 誤差行列の相対 / ルム $||E_k||_{\mathrm{F}}/||B||_{\mathrm{F}}$.

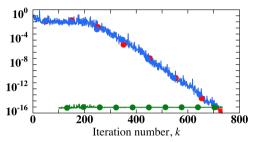


図 2. 提案法の結果。lacklosepsilon:相対残差ノルム $\|R_k\|_{\mathrm{F}}/\|B\|_{\mathrm{F}}$,lacklosepsilon:真の相対残差ノルム $\|B-AX_k\|_{\mathrm{F}}/\|B\|_{\mathrm{F}}$,lacklosepsilon:誤差行列の相対ノルム $\|G_k\|_{\mathrm{F}}/\|B\|_{\mathrm{F}}$.

パラメータsはs=100とした。thin QR 分解には Cholesky QR 法を用い,反復の停止条件は $\|R_k\|_F/\|B\|_F \le 10^{-16}$ を満たした場合とした.

Block BiCGSTAB 法では反復開始直後から誤差行列の相対ノルムが増加し、最終的に 3.1×10^{-12} となった。真の相対残差ノルムも 3.1×10^{-12} で停滞した(図 1 参照)。一方、提案法では 100 回目の反復までは誤差行列の相対ノルムは 0 であり、最終的に 9.0×10^{-16} となった。真の相対残差ノルムも 9.0×10^{-16} まで減少し、近似解精度が大幅に向上した(図 2 参照)。

- [1] A. El Guennouni, K. Jbilou and H. Sadok, A block version of BiCGSTAB for linear systems with multiple right-hand sides, Electron Trans. Numer. Anal., **16** (2003), 129–142.
- [2] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst, Reliable updated residuals in hybrid Bi-CG methods, Computing, 56 (1996), 141–163.
- [3] A. A. Dubrulle, Retooling the method of block conjugate gradients, Electron Trans. Numer. Anal., **12** (2001), 216–233.
- [4] CCS Matrix Forum, http://ccsmf.ccs.tsukuba.ac.jp

一般化非定値固有値問題へのシルベスター慣性則

中務 佑治¹, Noferini Vanni²

¹国立情報学研究所,²University of Essex

e-mail: nakatsukasa@nii.ac.jp

1 概要

シルベスターの慣性則は通常対称固有値問題に対して定義され、合同変換が(正、負、0)固有値の数を保つことである。実数区間内の固有値数を計算する等に応用できる。一般化固有値問題に対しても,一つの行列が正定値であれば同じ結果が適用できる。本研究では正定値であれば同じ結果が適用できる。本研究では正定値でない一般化固有値問題に対しても近い結果が成り立つことを示す。具体的には、合同変換は(正、負、0)の固有値数を保存しないが、これらが変化する度合いには非自明な上限下限が存在することを示す。

2 シルベスターの慣性則

 $A = A^* \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を対称行列とする (複素エルミートでも同様, 簡単のため以下対称と呼ぶ). A の慣性指数 (inertia) [1] は

$$(n_{+}(A), n_{0}(A), n_{-}(A)) \in \mathbb{N}^{3}$$
 (1)

で定義される. ここで $n_+(A)$, $n_0(A)$, $n_-(A)$ は それぞれ A の正, 負, 0 固有値の数を表す. 当然

$$n_{+}(A) + n_{0}(A) + n_{-}(A) = n,$$

 $n_{+}(A) + n_{-}(A) = \operatorname{rank}(A)$

が成り立つ. また, A の signature を $s(A) = n_+(A) - n_-(A)$ で定義する.

定理 1 (シルベスターの慣性則 [2]) $A = A^*, B = B^* \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を対称行列とする. $A \succeq B$ が合同 であること,つまり正則行列 $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ が存在して $A = X^*BX$ と書けることと $A \succeq B$ の 慣性指数が一致することは等価である.

シルベスターの慣性則は LDL^T 分解によって 正負 0 固有値の数を求める他,実区間内にある 固有値の数を求める問題などに広く応用される. また,特異値を高い相対精度で計算するアルゴ リズム開発の基礎にもなっている [3, Ch. 5].

3 一般化固有値問題へのシルベスターの 慣性則

シルベスターの慣性則は対称正定値一般化固 有値問題 $Ax = \lambda Bx, B \succ 0$ に対しても同様に 成り立つ. つまり, (A, B) の慣性指数と A の 慣性指数は一致する. これは, 対称行列 $B^{-1/2}$ を両側から掛けることから簡単に示される.

本研究では、シルベスターの慣性則を定値でない、一般の対称一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ に拡張することを考える。シルベスターの慣性 則がそのまま成り立たないことは (A,B) が複素固有値を持ちえることから簡単に分かり、この事実は拡張が不可能であることも示唆する。しかし、例えば B が定値に近い場合(負の固有値を少ししか持たない場合)に、シルベスターの慣性則に近い結果が成り立つことを示す。具体的には、合同変換は(正、負、0)の固有値数を保存しないが、これらが変化する度合いに成立する非自明な上限下限を導く.

3.1 シルベスターの慣性則, 別証明

出発点は、シルベスターの慣性則を通常とは異なる方法で証明することである.ひとまず $B\succ 0$ とする.具体的には、Rellich の固有関数と呼ばれる A-tB の固有値を t の関数として考える. $B=I, B\succ 0$ の場合について図 1-2で表す.これらの関数の根が (A,B) の固有値であることが言える.これをもとに、簡単な解析から (A,B) の固有値と A の固有値(t=0 での高さ)の慣性指数が一致することが示される.

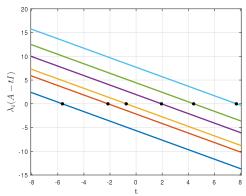


図 1. 6×6 行列 A-tI の Rellich の固有関数. 黒点は A の固有値であり、グラフと x 軸の交点である. 慣性指数は (3,0,3) である. are (3,0,3) in both figures.

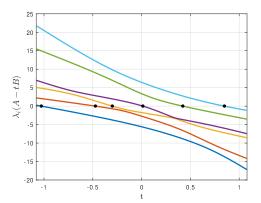


図 2. A-tB に対して上図と同様. 同じく黒点は (A,B) の固有値であり、グラフと x 軸の交点である. 慣性指数 は (3,0,3) である.

この証明の利点は、Bが正定値でない場合にも拡張可能なことである。

定理 2 A,B を $n \times n$ 対称行列とし,B は n-k 個の正固有値を持つとする.すると (A,B) の実固有値数 $n_R(A,B)$ は

$$n - 2k \le n_R(A, B) \le n \tag{2}$$

を満たす. 更に, $n-k \ge |n_-(A)-n_+(A)| = |s(A)|$ とすると,

$$n_{+}(A) - k \le n_{+}(A, B) \le n_{+}(A) + k,$$

 $n_{-}(A) - k \le n_{-}(A, B) \le n_{-}(A) + k$ (3)

が成り立つ.

定性的には、B が正定値に近いと、Rellich の固有関数は「大体減少関数」になっていて、t=0 での慣性指数 (A の固有値) と (A,B) の固有値の慣性指数も大体一致する、という議論になる、図 3 で一例を示す。

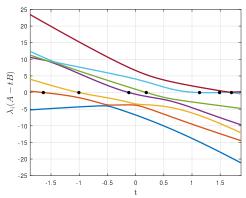


図 3. A-tB の Rellich 固有関数. B の慣性指数は (6,0,1).

また, (A,B) の区間 (a,b) 内にある実固有値の数を見積もりたい場合は、上の結果を二つの

一般化固有値問題 (A-aB,B) と (A,bB) に当てはめることで、非自明な上界、下界を得ることができる.

また、同様の議論で同様の結果を多項式固有値問題、非線形固有値問題へも拡張することができる。図4で二次 hyperbolic 固有値問題に理論を適用した際の様子を表す。

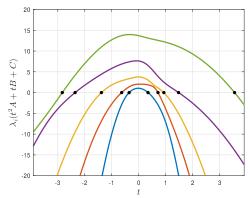


図 4. $P(t) = At^2 + Bt + C$ の Rellich 固有関数. n 個の正負固有値が存在することが A, C の慣性指数から分かる.

また、対称行列組の合同正準形(Canonical form under congruence)[4]をもとに同様の結果を導くことも可能である.一般的な主張と証明などの詳細は、[5]を参照されたい.

- [1] R. A. Horn and C. R. Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, second edition, 2012.
- [2] J. J. Sylvester. A demonstration of the theorem that every homogeneous quadratic polynomial is reducible by real orthogonal substitutions to the form of a sum of positive and negative squares. *Philosoph. Mag.*, 4(32):138142, 1852.
- [3] James Demmel. Applied Numerical Linear Algebra. SIAM, Philadelphia, USA, 1997.
- [4] P. Lancaster and L. Rodman. Canonical forms for Hermitian matrix pairs under strict equivalence and congruence. SIAM Rev., pages 407–443, 2005.
- [5] Yuji Nakatsukasa and Vanni Noferini. Inertia laws and localization of real eigenvalues for generalized indefinite eigenvalue problems. arXiv:1711.00495, 2017.

船速最適化を実現する船舶スケジューリングに対する高速な列生成アルゴ リズム

田中 未来1, 小林 和博2

1 統計数理研究所, 2 東京理科大学

e-mail: mirai@ism.ac.jp, kkoba@rs.tus.ac.jp

1 概要

燃料消費量の最小化を実現するための船舶スケジューリングを扱う.特に,各船舶が処理する輸送依頼の順番と,港間の船速を同時に求める方法を与える.問題全体を集合分割問題して定式化するが,その制約行列の列を動的に生成する.列を生成する際に,計算時間を短縮するためのアルゴリズムを提案する.

2 船速最適化を考慮した船舶スケジュー リング

船舶スケジューリングは、複数の船舶を用い て複数の輸送依頼を処理するスケジュールを作 成する問題である。制約を満たすスケジュール の中で,利益を最大化したり移動距離や費用を 最小化することが目的である. ここでは、全て の船舶の燃料消費量の合計を最小化すること を目的とする. 船舶はスケジュールの中で港か ら港に航行するが、この際に燃料を消費する. その消費量は、航行速度、すなわち船速に依存 する. したがって、おなじ2港間を航行すると しても船速を適切に設定することで燃料消費量 を低く抑えることができる. 本研究では、スケ ジューリングの際の決定変数として, 輸送依頼 を処理する順序に加えて, スケジュール内での 2港間の移動速度も決定変数とする. 船舶のス ケジュールのことを, 運航ルートまたはルート ともいうことにする.

Norstad ら [1] は、船速最適化を船舶スケジューリングにおいて考慮するためのメタ解法を提案した、具体的には、船舶スケジューリングを解くためのメタ解法の近傍評価の際に、近傍解における最適船速を求める方法を提案している。

3 0-1 整数最適化問題への定式化

輸送依頼の集合をC, 船舶の集合をV, 船舶 $v \in V$ の実行可能ルートの集合を R_v とする. また, 船舶 v によるルート r を採用するときに 1, そうでないときに 0 をとる 0-1 変数を x_{rv} ,

輸送依頼 $i \in C$ が採用されるどのルートにも含まれないときに 1, そうでないときに 0 をとる 0-1 変数を y_i とする. さらに,船舶 v によるルート r を採用するときの費用を c_{rv} , 輸送依頼 $i \in C$ をどの船舶でも処理しないときのペナルティを P, 輸送依頼 i がルート r に含まれるときに 1, それ以外のとき 0 をとる定数を $a_{i,rv}$ とする. このとき,船舶スケジューリングは次の 0-1 整数最適化問題として定式化できる.

$$\min \sum_{v \in V} \sum_{r \in R_v} c_{rv} x_{rv} + \sum_{i \in C} P y_i,$$
s.t.
$$\sum_{v \in V} \sum_{r \in R_v} a_{i,rv} x_{rv} + y_i = 1 \ (\forall i \in C), \quad (1)$$

$$\sum_{r \in R_v} x_{rv} \le 1 \ (\forall v \in V), \quad (2)$$

$$x_{rv} \in \{0, 1\} \ (\forall r \in R_v, \forall v \in V),$$

$$y_i \in \{0, 1\} \ (\forall i \in C).$$

これは、集合 C を分割する集合分割問題に条件 (2) を追加したものとみることができる.

4 実行可能ルートの生成

3 で述べた定式化では、船舶vの実行可能ルートの集合 R_v を用いた. しかし、その要素数は膨大で全ての要素の列挙はできない. そこで、必要な要素だけを生成する. そのために、部分問題と呼ぶ最適化問題を解き、各 R_v の要素を反復的に生成する. こうして生成したルートからなる集合を \tilde{R}_v とし、 R_v を \tilde{R}_v で置き換えることで近似最適解を得る. 上記の問題において、 R_v をその部分集合 \tilde{R}_v で置き換え、さらに 0-1 変数を連続緩和したものを、限定主問題 (RMP) と呼ぶことにする. 反復的に列を生成することによるアルゴリズムを Algorithm 1 に示す.

5 部分問題

部分問題は、各船舶 $v \in V$ に対して、有向グラフ上の最適化問題として定式化される. まず、各輸送依頼 $i \in C$ に対応して、積みを表す

Algorithm 1 列生成アルゴリズム

 $\tilde{R}_v = \emptyset \ (\forall v \in V)$

すべての $v \in V$ に対して部分問題を解く.

while 費用が負の最適解がある do

費用が負である最適解を $ilde{R}_v$ に加える。限定主問題を解く.

すべての $v \in V$ に対して部分問題を解く.

end while

(RMP) に変数の 0-1 条件を追加し、解く.

ノード p(i) と揚げを表すノード d(i) を定義する. p(i) からなる集合を P とし、d(i) からなる集合を D とする. それらに加えて初期状態を表すノード s と最終状態を表すノード t も定義する. こうして定義したノードの集合を N と表す. また、始点 s から各ノード $p(i) \in P$ に枝 (s,p(i)) を定義する. また、各ノード $d(i) \in D$ から終点 t に向けて枝 (d(i),t) を定義する. さらに、輸送依頼 i を処理した直後に輸送依頼 j を処理するとき枝 (d(i),p(j)) を定義する. こうして定義した枝の集合を E と表す.

枝 (p(i),d(i)) に対しては,距離 d(p(i),d(i)) を定義する.これは,輸送依頼 i の積港から i の揚港への距離を表す.同様に,枝 (d(i),p(j)) の距離 $d_{d(i),p(j)}$ を,輸送依頼 i の揚港から輸送依頼 j の積港への距離を表す.

船速vのときの単位時間あたりの燃料消費量をvの関数としてf(v)と表すと,枝(p(i),d(j))の表す航行の際のコストは, $f(v_{ij})\cdot(d_{ij}/v_{ij})$ で表される.他の枝も適宜コストを定義すると,部分問題は次の最適化問題となる:

$$\min \sum_{(i,j)\in A} f(v_{ij}) \cdot \frac{d_{ij}}{v_{ij}} - \sum_{i\in C} \lambda_i x_{p(i),d(i)} + \pi_v$$

s.t.フロー保存則 $(\forall (i,j) \in E)$,

 $v_{\min} x_{ij} \le v_{ij} \le v_{\max} x_{ij} \ (\forall (i,j) \in E),$

$$T_i + \frac{d_{ij}}{v_{ij}} x_{ij} \le T_j + (1 - x_{ij}) M$$

 $(\forall (i,j) \in E),$

 $e_i \le T_i \le \ell_i \ (\forall i \in N),$ $x_{ij} \in \{0,1\} \ (\forall (i,j) \in E).$

ここで, T_i はノードi でのサービス開始時刻を表す連続変数, v_{\min} と v_{\max} はそれぞれ船速の最小値と最大値,M は十分に大きな値, e_i と ℓ_i はそれぞれノードi のサービスの最早開始時

刻と最遅開始時刻を表す. また, λ_i は限定主問題における制約 (1) に対する双対変数, π_v は制約 (2) に対する双対変数の値とする.

6 高速な列生成アルゴリズム

関数 f(v) が v の 3 次関数だと、部分問題は混 合整数2次錐最適化問題となりソルバで解くこ とができるが、計算時間が長くかかる場合があ る. そこで、より高速な列生成アルゴリズムを 提案する. このアルゴリズムでは、船速最適化 問題 (SOP(P)) とルート最適化問題 (ROP(P))を交互に解く. SOP(P) は,ルートP上の船速 を最適化する問題である. 一方, $ROP(\mathcal{P})$ は, 目的関数における v_{ij} を $\operatorname{argmin} f(v)$ に、制約条 件における v_{ij} を v_{max} に固定したものであり, P に含まれないルートの中で,緩和目的関数 が最小のものを求める問題である. SOP(P) は 小さな SOCP, $ROP(\mathcal{P})$ は小さな MIP であり, ソルバで高速に解くことができる. $ROP(\mathcal{P})$ は 部分問題の緩和問題である. 提案する高速な列 生成アルゴリズムを Algorithm 2 に示す.

Algorithm 2 高速な列生成アルゴリズム

 $\bar{\theta} := \infty$

while True do

 $\mathrm{ROP}(\mathcal{P})$ を解き,得られたルート P を表す変数を x_{ij}^* ,最適値を $\tilde{\theta}$ とする. $\tilde{\theta} > \bar{\theta}$ なら終了,そうでなければ P に 対する SOP を解き,その最適値を $\tilde{\theta}^*$, $\bar{\theta} = \max\{\bar{\theta}, \tilde{\theta}^*\}$ とする. \mathcal{P} にルート P を追加する.

end while

(RMP) に変数の 0-1 条件を追加し、解く.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17K01271 および 16K16357 の助成を受けたものである.

参考文献

I. Norstad, K. Fagerholt and G. Laporte, Tramp ship routing and scheduling with speed optimization, Transportation Research Part C, Vol. 19, (2011), 853–865.

東上の DR-劣モジュラ性による部分空間選択

中島 蒼 1,2, 前原 貴憲 2

¹ 東京大学, ² 理研 AIP

e-mail : so_nakashima@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 導入

部分空間選択はデータに基づき良い部分空間を選ぶ最適化問題である. 具体的には, $\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$ を \mathbb{R}^d の線型部分空間のなす族, $f:\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)\to\mathbb{R}$ を目的関数, $\mathcal{F}\subset\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$ を制約条件としたとき,

$$\begin{array}{ll}
\text{maximize} & f(X) \\
\text{subject to} & X \in \mathcal{F}
\end{array} \tag{1.1}$$

と定式化される.この問題は特徴選択の一種で,主成分分析(Principal Component Analysis; PCA)や疎辞書選択を含んでいる.PCAが具体例であることは, $\{u_i\}_{i\in I}\subset\mathbb{R}^d$ をデータ, Π_X を部分空間 Xへの射影,Fをk次元以下の部分空間とし,

$$f(X) = \sum_{i \in I} \|\Pi_X u_i\|^2$$
 (1.2)

と定義すると、(1.1) は PCA の定式化の一つになっていることから分かる。(1.2) は貪欲法で最大化できることが知られている。

我々は「部分空間選択は一般には非凸で難しいにもかかわらず、なぜ PCA や疎辞書選択は 貪欲法で解けるのか?どのような目的関数と制約なら貪欲法で解けるのか?」という興味を持った。これらの問いには、 $\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$ を離散化した上で、劣モジュラ性やその変種を用いた解答が与えられてきた [1-4]. 本研究では、東論を用い $\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$ を直接扱うことで、より適用範囲の広い解答を与える。部分空間の族 $\mathcal{L}(\mathbb{R}^d)$ は \land を共通部分、 \lor を直和とすることでモジュラ束をなす。

2 東上の **DR**-劣モジュラ性

通常, 東上には以下の不等式で劣モジュラ性が定義される.

$$f(X) + f(Y) \ge f(X \land Y) + f(X \lor Y). \tag{2.1}$$

しかし (1.2) は近似的にもこの定義を満たさないという問題がある. そこで本研究では, 別のよく使われている劣モジュラ性である DR-劣

モジュラ性 [5,6] に注目する.整数束上の関数 $f: \mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ が DR-劣モジュラであるとは,

$$f(X + e_i) - f(X) \ge f(Y + e_i) - f(Y)$$
 (2.2)

が全ての $X \leq Y$ (全ての成分で不等号が成立) と $i \in \{1, 2, ..., d\}$ で成り立つことをいう. ここで e_i は第 i 成分方向の単位ベクトルである.

本研究では DR-劣モジュラ性を一般の東上に拡張することを試みる. 以降 \mathcal{L} を束とし,最小元士を持つことを仮定する. $a \in \mathcal{L}$ が \vee 既約元であるとは,最小元ではなく, $a = X \vee Y$ ならば a = X か a = Y が成り立つことをいう. \vee 既約元 a が $X \in \mathcal{L}$ に対して許容的であるとは, $a \not\leq X$ で,任意の a' < a が $a' \leq X$ を満たすことをいう. $X \in \mathcal{L}$ に対し許容的な要素の集まりを adm(X) と表す.このとき,(2.2) は自然に拡張できる.

定義 1 (強 DR-劣モジュラ). $f: \mathcal{L} \to \mathbb{R}$ が強 DR-劣モジュラであるとは、すべての $X,Y \in \mathcal{L}$, $a \in \operatorname{adm}(X), b \in \operatorname{adm}(Y)$ で $X \le Y$ と $a \le b$ を 満たすものに対し、以下が成り立つことをいう.

$$f(X \lor a) - f(X) > f(Y \lor b) - f(Y).$$

分配束において定義1と同値なものが与えられている[7]. しかし(1.2)はこの定義を満たさないという問題が再び生じる. そこで,強DR-劣モジュラを弱化した次の定義を導入する.

定義 **2** (下方 DR-劣モジュラ). $f: \mathcal{L} \to \mathbb{R}$ が下 方 DR-劣モジュラであるとは, すべての $X \le Y$ と $b \in \operatorname{adm}(Y)$ に対し, 以下が成り立つことをいう.

$$f(Y \vee b) - f(Y)$$

 $\leq \max_{b' \colon Y \vee b = Y \vee b'} \min_{a \in \operatorname{adm}(X), a \leq b'} f(X \vee a) - f(X).$

定義 **3** (上方 DR-劣モジュラ). $f: \mathcal{L} \to \mathbb{R}$ が上 方 DR-劣モジュラであるとは、すべての $X,Y \in \mathcal{L}$ と $a \in \operatorname{adm}(X)$ で $X \lor a \le Y$ を満たすもの に対し、以下が成り立つことをいう.

$$f(X \vee a) - f(X)$$

 $\geq \max_{b \geq a} \min_{\mathring{Y}: b \in \operatorname{adm}(\mathring{Y}), Y = \mathring{Y} \vee b, X \leq \mathring{Y}} f(Y) - f(\mathring{Y})$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

上方かつ下方 DR 劣モジュラであることを, 方向性 DR-劣モジュラと呼ぶ. 方向性 DR-劣モ ジュラは PCA・疎辞書選択・カット関数の拡 張を扱える豊かな関数クラスである.

3 近似最大化アルゴリズム

方向性 DR-劣モジュラ関数は貪欲法で近似最大化できる. 以下 $\mathcal L$ をモジュラ束とし, r をその高さ関数とする. 高さ制約 $\mathcal F=\{l\in\mathcal L\mid r(l)\leq k\}$ を考える.

定理 4. 単調下方 DR-劣モジュラ関数を高さ制 約 F の下で最大化する問題を考える. アルゴリズム 1 はこの問題の 1-1/e-近似アルゴリズムである.

この定理は、PCA が貪欲法で最大化できることを、方向性 DR-劣モジュラの観点から説明している.

アルゴリズム 1 単調高さ制約に対する貪欲法

- 1: $X = \bot$
- 2: **for** i = 1, ..., k **do**
- 3: Let $a_i \in \underset{a \in \text{adm}(X), X \vee a \in \mathcal{F}}{\operatorname{argmax}} f(X \vee a)$
- 4: $X \leftarrow X \lor a_i$
- 5: end for
- 6: return X

本研究では他にも以下のような状況で近似最 大化アルゴリズムを与えた.

- 一般の東上の単調下方 DR-劣モジュラ関数の高さ制約最大化.
- 一般の東上の単調下方 DR-劣モジュラ関数のナップザック制約最大化.
- モジュラ東上の方向性 DR-劣モジュラ関数の無制約最大化.

詳細は [8] を参照されたい.

4 まとめ

本研究では方向性 DR-劣モジュラという東上の新しい劣モジュラ性を定義した.この関数クラスは PCA などを扱える豊かなものであり、種々の制約下で近似最大化ができることを証明した.

参考文献

[1] A. Das and D. Kempe, Submodular meets spectral: Greedy algorithms for

- subset selection, sparse approximation and dictionary selection, in: *Proc. of ICML'11*, pp. 1057–1064, 2011.
- [2] E. R. Elenberg, R. Khanna, A. G. Dimakis, and S. Negahban, Submodular meets spectral: Greedy algorithms for subset selection, sparse approximation and dictionary selection, arXiv preprint arXiv:1612.00804, 2016.
- [3] R. Khanna, E. R. Elenberg, A. G. Dimakis, J. Ghosh, and S. Negahban, On approximation guarantees for greedy low rank optimization, in: *Proc. of ICML'17*, pp 1837–1846, 2017.
- [4] A. Krause and V. Cevher, Submodular dictionary selection for sparse representation. in: *Proc. of ICML'10*, pp 567–574, 2010.
- [5] T. Soma and Y. Yoshida, A generalization of submodular cover via the diminishing return property on the integer lattice. in: *Proc. of NIPS'15*, pp 847–855, 2015.
- [6] T. Soma and Y. Yoshida, Non-monotone DR-submodular function maximization. in: *Proc. AAAI'17*, vol. 17, pp. 898–904, 2017.
- [7] C. Gottschalk and B. Peis, Submodular function maximization over distributive and integer lattices, arXiv preprint, arXiv:1505.05423, 2015.
- [8] S. Nakashima and T. Maehara, Subspace selection via DR-submodular maximization over lattices, arXiv preprint, arXiv:1805.07455, 2018.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

展開型マッチングゲームにおける部分ゲーム完全均衡

河瀬 康志 1, 山口 勇太郎 2, 横井 優 3

1 東京工業大学, 2 大阪大学, 3 国立情報学研究所

 $e-mail: kawase.y.ab@m.titech.ac.jp, yutaro_yamaguchi@ist.osaka-u.ac.jp, yokoi@nii.ac.jp\\$

1 概要

本研究では、求人者と求職者の間のマッチング市場を、展開型ゲームとして定式化する.具体的には、逐次的にジョブオファーを受ける求職者が、競合相手の戦略を考慮しながら自身の戦略を決定する状況を扱う.各求職者が均衡戦略に従った際に結果として得られるマッチング(SPEマッチング)の性質を解析し、その計算複雑度についての特徴付けを与える.また、得られるSPEマッチングが安定マッチング[1]となるように、ジョブオファーの順序を適切に設計できることを示す.本稿の内容は[2]に基づく.

2 モデル

展開型マッチングゲーム (I,σ) は,マッチングインスタンス $I=(P,Q,E,(\succ_r)_{r\in P\cup Q})$ とオファー順 σ : $\{1,2,\ldots,|E|\}\to E$ によって構成される.ここでP,Q はそれぞれ求人者,求職者の集合, $E\subseteq P\times Q$ はオファー候補の集合を表す.各求人者 $p\in P$ (求職者 $q\in Q$) は求職者 (求人者) についての選好をもち,例えば $q\succ_p q'$ によって「p が q を q' より好む」ことを表す.求人者たちは, σ に従い,好ましい候補者から順にオファーをする.すなわち,各 $p\in P$ に関して, $q\succ_p q'$ ならば $\sigma^{-1}((p,q))<\sigma^{-1}((p,q'))$ を満たす.各求職者は各オファーを受けた際,受理するか否かを即時に決めねばならず,その決定はその後覆すことはできない.

本ゲームは求職者たちをプレイヤーとする展開型ゲームで表される. ゲームの各ラウンドは一つのオファー $e=(p,q)\in E$ に対応する. オファーを受けた q は、ACCEPT か REJECT のどちらかのアクションを選ぶ. ACCEPT が選ばれた場合, p と q はマッチして, p と q およびそれらに関わるオファー全てが削除されたものが部分ゲームとして得られる. REJECT が選ばれた場合, オファー e=(p,q) のみが削除されたものが部分ゲームとして得られる. プレイヤー q は, e=(p,q) に対して ACCEPT を選ぶと, p とマッチできることが確約される一方, 将来起こり得る他のオファーを受けるチャンスを失う.

各ラウンドにおいてプレイヤーが最適戦略に従うという仮定の下では、後ろ向き帰納法によって、最適戦略を一意に決定できる。全プレイヤーの最適戦略を表した戦略プロファイルを部分ゲーム完全均衡 (SPE) と呼ぶ.

例 1. 求人者 p_1, p_2, p_3 と求職者 q_1, q_2, q_3 のオファー候補に対する選好を、それぞれ

 $p_1: q_1$ $q_1: p_2 \succ_{q_1} p_1$ $p_2: q_2 \succ_{p_2} q_1 \succ_{p_2} q_3$ $q_2: p_3 \succ_{q_2} p_2$ $p_3: q_3 \succ_{p_3} q_2$ $q_3: p_2 \succ_{q_3} p_3$

とし、オファー順 σ を下記の順で定める:

 $(p_1, q_1), (p_2, q_2), (p_2, q_1), (p_2, q_3), (p_3, q_3), (p_3, q_2).$

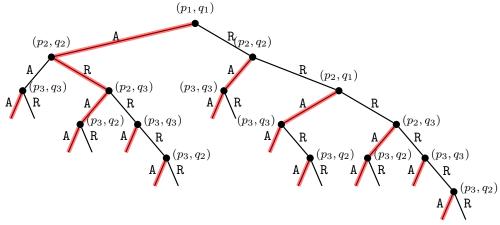


図 1. 例 1 のゲーム木による表現. 赤い枝は SPE 戦略を表す.

ゲーム中では $\sigma(1)$, $\sigma(2)$,...の順でオファーがなされる.ただし,ある段階でマッチした求人者・求職者に関わるオファーは,その後スキップされる.図 1 は,上記のゲームを根付き木で表現したものである.SPEの下では,ゲームは根から赤線に沿って進行し,結果としてマッチング $\{(p_1,q_1),(p_2,q_3),(p_3,q_2)\}$ が得られる.ここで, (p_2,q_1) がブロッキングペアとなるため,このマッチングは安定でないことに注意されたい.

ゲーム (I,σ) において,全プレイヤーが SPE に従った際に結果として得られるマッチングを **SPE マッチング**と呼び,SPE (I,σ) と記す.本 研究では,この SPE マッチングを解析する.

3 部分ゲーム完全均衡の計算複雑度

与えられたゲーム (I,σ) の SPE において,最初のオファー $\sigma(1)$ が受理されるか否かを判定する問題を SPEM と呼ぶ.この SPEM を解くことと,SPE マッチングの計算をすることは,計算複雑度の意味で等価である.正整数 s,t に対して,(s,t)-SPEM を,入力に以下の制限を課した SPEM の部分クラスとする:各求人者 $p \in P$ は高々s 人にしかオファーせず,各求職者 $q \in Q$ は高々t 人からしかオファーを受けない.本研究では,以下の二分定理を与えた.

定理 2. 判定問題 (s,t)-SPEM は, $s \le 2$ もしくは $t \le 2$ ならば多項式時間可解であり,それ以外の場合は PSPACE 完全である.

この定理の証明のために, 本研究では

- $s \le 2$ もしくは $t \le 2$ の場合に SPE(I, σ) を効率的に求めるアルゴリズムとして, Sequentially Fixing Deferred Acceptance (SFDA) を提案してその正当性を示し,
- PSPACE 完全問題 QUANTIFIED 3SAT が (3,3)-SPEM に帰着できることを示した.

アルゴリズム SFDA は、ゲーム (I,σ) を入力 とし、以下の手順を繰り返す:

- 1) $I \cap Q$ 側最適安定マッチング M を計算し,
- 2) $\sigma^{-1}(e)$ が最小の $e = (p,q) \in M$ をとり,
- 3) (I,σ) を, p,q とそれらに関わるオファー を除去した部分ゲームに置き換える.

繰り返しの各段階で選ばれた e の集合が SFDA の出力であり、 $s \le 2$ もしくは $t \le 2$ という条件の下では、これは SPE(I, σ) と一致する.

4 安定マッチングを導くオファー順序

中央機関によって統制がなされる 2 部マッチング市場では、マッチングの公平性の尺度として安定性が用いられることが一般的である [3]. しかし、各求職者が逐次的・戦略的に動く本研究のモデルでは、均衡において得られるマッチングは必ずしも安定性を満たさない (例 1 参照). また、本モデルでは、固定された I に対して σ を変化させると、 $SPE(I,\sigma)$ も変化し得る.

本研究では,適切なオファー順を設定することによって,均衡におけるマッチングを安定に導くことが可能であることを示した.

定理 3. 任意の $I=(P,Q,E,(\succ_r)_{r\in P\cup Q})$ に対して、 $\mathrm{SPE}(I,\sigma)$ が Q 側最適安定マッチングとなるようなオファー順 $\sigma\colon\{1,2,\ldots,|E|\}\to E$ を多項式時間で構成できる.

所望のオファー順 σ は以下のように構成できる。まず,IのQ側最適安定マッチングMを計算し,各求人者にとってMでのマッチ相手よりも好ましい候補者へのオファーを集め,それらを任意の順で σ の先頭から並べてIから除去する。その後,求人者を以下のように順序付け,それに沿って残りのオファーを並べる:現状のインスタンスに求職者志向 DA アルゴリズム [1] を適用したときに,最終的なマッチ相手となる求職者からのプロポーズを最も早く受ける求人者pを残りの中でのトップとし,pとマッチ相手およびそれらに関わるオファーを除去したインスタンスに対して同じ手順を繰り返す.

謝辞 本研究の一部は、JSPS 科研費 JP16H06931、 JP16K16005、JP18K18004、および、JST ACT-I JPMJPR17U7、および、JST CREST JP-MJCR14D2 の支援を受けたものである.

- [1] D. Gale and L. S. Shapley. College admissions and the stability of marriage. *American Mathematical Monthly*, 69(1):9–15, 1962.
- [2] Y. Kawase, Y. Yamaguchi, and Y. Yokoi. Subgame perfect equilibria of sequential matching games. arXiv:1804.10353, 2018.
- [3] A. E. Roth and M. Sotomayor. Two-sided Matching: A Study in Game-Theoretic Modeling and Analysis. Cambridge University Press, 1991.

非可換な変数をもつ多項式行列の行列式の次数の計算について

平井 広志

東京大学大学院情報理工学系研究科

数理情報学専攻

e-mail: hirai@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 イントロダクション

本発表では,変数 $x=(x_1,x_2,\ldots,x_m)$ と体 \mathbb{K} 上の n 次正方行列 A_0,A_1,\ldots,A_m によって,

$$A = A_0 + A_1 x_1 + \dots + A_m x_m \tag{1}$$

とかける行列 A のランク計算とその拡張につい て論じる.この問題は,あるクラスの組合せ最 適化問題の代数的一般化とみなせる. 例えば, カラークラスのサイズが等しい2部グラフGを 考えるとき ,G の各枝 $e_k = ij \ (k = 1, 2, \dots, m)$ に対して,行列 A_k を(i,j)要素が1,それ以外 をゼロと定める.そして A_0 はゼロ行列とする. すると, A のランクは, G の最大マッチング数 に一致する.したがって,この場合は,Aのラ ンクはマッチングアルゴリズムによって多項式 時間で計算可能である. J. Edmonds は, これ を一般化して,(1)のような変数付き行列のラ ンクは多項式時間で計算できるか,という問題 を提示している(Edmonds 問題, 1967年). 素 朴にやると, x_i たちをシンボリックに扱わなけ ればならず指数時間かかってしまう. もしも, 各変数 x_i に , \mathbb{K} の元を代入すれば , 代入後の Aのランクは,ガウスの消去法によって効率的に 計算できる. 派のサイズが十分大きければ,そ れは高い確率で,(代入前の)Aのランクである う.この考えに基づき, L. Lovász は, A のラ ンクを求める乱択多項式時間アルゴリズムを与 えている(1979年).しかし,決定性多項式時 間アルゴリズムは、限られたクラスの行列にし か知られておらず,その存在性は,理論計算機 科学における重要な未解決問題となっている.

2 非可換ランク

最近,この問題が興味深い展開を見せている. 上の議論では,変数 x_i たちが互いに可換であるものとして,A を多項式環 $\mathbb{K}[x]$ 上の行列とみなし,そのランクは,有理関数体 $\mathbb{K}(x)$ 上で考えていた.しかし,変数 x_i たちが互いに非可換であるとして,A を自由環 $\mathbb{K}\langle x\rangle$ 上の行列とみることもできる.すると, $\mathbb{K}\langle x\rangle$ は,自由 斜体 $\mathbb{K}(\langle x \rangle)$ と呼ばれる斜体 (= 任意の非ゼロな元が逆元をもつ可換とは限らない環) に埋め込まれる.この斜体上で, A のランクが定義できて,これを非可換ランクという.

Garg et al. [1] は, $\mathbb{K}=\mathbb{Q}$ のとき,Ivanyos et al. [2] は, \mathbb{K} が一般の場合に,非可換ランクが多項式時間で計算できることを証明している.前者は,Gurvits の作用素スケーリングに基づくもので,後者は,Wong 列と呼ばれる 2 部マッチングの交互道のベクトル空間アナログに基づくもので,どちらも大変興味深い.ここで,鍵となるのは,Fortine-Reutenaur [3] による非可換ランクが次の最適化問題の最適値に一致するというものである:

Min.
$$2n-r-s$$
 (2)
s.t. $(PA_kQ)_{ij}=0$ $(0 \le k \le m, 1 \le i \le r, 1 \le j \le s),$ $P,Q:\mathbb{K}$ 上の正則行列.

一般にランク \leq 非可換ランクであるが,(2) がランクの上界を与えることをみるのは容易い. 上述の2 部グラフの場合は,ランクと非可換ランクが一致し,問題(2) は,最大マッチング数の公式 $(K\ddot{o}nig-Egerv\acute{a}ry$ の公式)を与える.

一方,これらの研究の流れとは独立に,行列のブロック三角化の文脈から,Hamada-Hirai [4]は,(2)を考察し,ベクトル部分空間のなすモジュラ束上の劣モジュラ最適化として定式化することで新しいアルゴリズムを与えている.

3 本研究の動機

組合せ最適化理論においては「重み付き」の問題を考えることは自然である.例えば,上述の2 部グラフG において,各枝e に非負整数重み c_e が与えられていると仮定する.そして,重みが最大の完全マッチングを求めたいとしよう.この場合も,完全マッチングの最大重みは以下のような代数的な解釈を持つ.変数t を用意し,上で定義した A_k に $t^{c_{e_k}}$ をかける.そし

て,A を $\mathbb{K}(x)[t]$ 上の正方行列とみなす.このとき,最大重みは,行列式 $\det A$ の t に関する最大次数 $\deg \det A$ に一致する.このような行列式の次数を用いる解釈は,より一般的な重み付き線形マトロイド交差問題においても可能である.したがって,式 (1) において,各 A_k を t に関する正方多項式行列としたときに, $\deg \det A$ の計算は,重み付きの組合せ最適化問題の線形代数バージョンといってよいだろう.

では, x_i たちが互いに非可換,t とは可換,とし,A を $\mathbb{K}\langle x\rangle$ 上の t に関する多項式行列とみたときに,非可換ランクに対応するべき「行列式の次数の非可換版」を考えることは自然であるう.本研究ではそれを以下のように定義する. $\mathbb{F} = \mathbb{K}(\langle x\rangle)$ を自由斜体とし,t に関する多項式環 $\mathbb{F}[t]$ の有理関数斜体(Ore 商環) $\mathbb{F}(t)$ を考える.そして,A を斜体 $\mathbb{F}(t)$ 上の行列とみて,斜体上の行列式概念である Dieudonné 行列式 Det A を考える.Det A の値は,乗法群 $\mathbb{F}(t)\setminus\{0\}$ の元をその交換子群で割ったものであるが,交換子の次数はゼロであることから,Det A の次数 \deg Det A の計算であり,以下の成果を得た [5].

4 本研究の成果

Fortine-Reutenaur の非可換ランクの公式の拡張として, $\deg \operatorname{Det} A$ の値が,以下の最適化問題の最適値に一致することを示した.

Min.
$$-\deg \det P - \deg \det Q$$
 (3)
s.t. $\deg(PA_kQ)_{ij} \leq 0$
 $(0 \leq k \leq m, 1 \leq i, j \leq n),$
 $P, Q : \mathbb{K}(t)$ 上の正則行列.

一般に deg det < deg Det であるが , 問題 (3) が deg det の上界を与えることは , 組合せ緩和による deg det 計算の文脈 [6] で知られていた . 非可換ランクの問題 (2) がモジュラ東上の劣モジュラ関数の最小化とみなせたことの拡張として , 問題 (3) が「一様モジュラ束の L 凸関数」という離散凸関数の最小化とみなせることを示した . これにより , L 凸関数に対する最急降下法が適用できる . ここで , 最適性のチェック , すなわち , 最急降下方向を見つける問題は , 問題 (2) に帰着することを示した . したがって , 問題 (2) を解くアルゴリズムをサブルーチンとすることで deg Det が計算できる . サブルーチンの

呼出し回数に対して,Aのスミス・マクミラン標準形を用いた精密な評価を与えた.このアルゴリズムは, $\deg \det$ を計算する組合せ緩和アルゴリズム [6] (の変種)の拡張となっている.

 A_0 を除く A_k がすべて $\mathbb{K}(t)$ 上でランクが 1 のとき, $\deg \det A = \deg \operatorname{Det} A$ となることを示した.これは,ランクと非可換ランクが一致する場合の自然な拡張である.これによって,線形マトロイドの最小重み基,重み付き 2 部マッチング,重み付き線形マトロイド交差,混合多項式行列の $\deg \det$ 計算などが $\deg \operatorname{Det}$ 計算と解釈できることになった.さらに,貪欲アルゴリズム,ハンガリー法なども上述の最急降下法の立場から自然に解釈できることを示した.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP26280004, および, JP17K00029 の助成を受けたものです.

- [1] A. Garg, L. Gurvits, R. Oliveira, and A. Wigderson: Operator scaling: theory and applications. (2015), arXiv:1511.03730.
- [2] G. Ivanyos, Y. Qiao, and K. V. Subrahmanyam, Constructive noncommutative rank computation in deterministic polynomial time over fields of arbitrary characteristics. *Computational Complexity*, to appear.
- [3] M. Fortin and C. Reutenauer, Commutative/non-commutative rank of linear matrices and subspaces of matrices of low rank. Séminaire Lotharingien de Combinatoire 52 (2004), B52f.
- [4] M. Hamada and H. Hirai: Maximum vanishing subspace problem, CAT(0)-space relaxation, and block-triangularization of partitioned matrix, 2017, arXiv:1705.02060.
- [5] H. Hirai: Computing degree of determinant via discrete convex optimization on Euclidean building, preprint, 2018, arXiv:1805.11245.
- [6] K. Murota: Matrices and Matroids for Systems Analysis. Springer-Verlag, Berlin, 2000.

Max-Plus 代数からトロピカル幾何へ, 最近の進展と工程計画問題への応用

小林 正典1

1 首都大学東京・大学院理学研究科・数理科学専攻

e-mail: kobayashi-masanori@tmu.ac.jp

1 はじめに

工程計画問題では最短完了時間として自然に Max-Plus 代数が現れる(例えば [1]).各作業 i には着手から完了までにかかる時間として非負 実数 t_i が定まっており,作業には順序が定まっていて各作業は直前の作業がすべて完了しないと着手できないとする.このとき,作業 i に着手できる時間は直前の作業たちの最短完了時間の最大値になり,それに t_i を加えたものが作業 i の最短完了時間である.帰納的に,各作業(したがって全行程)の最短完了時間は, t_i たちから最大値と加法で表すことができる.Max-Plus 代数では分配法則が成り立つので,最短完了時間は t_i たちの Max-Plus 代数による多項式として表せる.現れる項は,最初の作業 u から最後の作業 y までの経路と一対一に対応する.

通常の多項式の零点集合は超曲面という図形になる。トロピカル多項式に対してもトロピカル超曲面が定義され、最短完了時間の場合には、トロピカル超曲面の補集合の連結成分が、あるただ一つのクリティカルパスを与える組 (t_i) の集合に一致する。すなわち、トロピカル超曲面はクリティカルパスの相転移の遷移面にあたる。

2 トロピカル幾何

今世紀初め、Max-Plus 代数に対応する代数 幾何を Sturmfels と Mikhalkin が提唱し「トロ ピカル幾何」と名付けた. 対象となるトロピカ ル多様体には以下で述べる特性がある([2]等).

2.1 代数多様体の極限

Max-Plus 代数は通常の加法と乗法からトロピカル化の手法でも得られる。トロピカル化は、Bergman 扇、Maslov の脱量子化、差分方程式の超離散化、といった様々な起源をもつ。座標 x_1,\ldots,x_n が実数 t (t>1) のべき乗であるとき、関数 $f(x_1,\ldots,x_n)$ に対しトロピカル化 trop f を trop $f:=\lim_{t\to\infty}\log_t|f|$ と定める。 $X_i:=\operatorname{trop}(x_i)$ とするとき、 $\operatorname{trop}(x+y)=$

 $\max\{X,Y\}$, $\operatorname{trop}(xy)=X+Y$ となり,Max-Plus 代数が対応して現れる.ただしこのままでは係数が自明なものしか出ないので,係数体として t の Laurent 級数体やその拡大である Hahn 級数の体 K を用いる.最大値と加法の分配法則は,通常の(非負実数に対する)加法と乗法の間の分配法則からトロピカル化により直ちに従う.0 には $-\infty$ が対応するので,数体系としてトロピカル半体 $T:=R\cup\{-\infty\}$ を考える.

n 変数トロピカル Laurent 多項式 F に対し,「トーラス」 \mathbf{R}^n におけるトロピカル超曲面 V(F) を F のグラフが折れる点の集合として定義する. $P \in V(F)$ とは,F(P) を最大値として与える項(= P の重みによる F の先頭項)が複数あることと同値である.この定義は幾何的には次で正当化される.

定理 1 (Kapranov) K 係数 Laurent 多項式 f に対し、 $\operatorname{trop} V(f) = V(\operatorname{trop} f)$ が成り立つ.

2.2 組合せ論的構造

V(F) には次のように自然に重複度付き多面体複体の構造が入り、概形がわかる.

べき指数に対し、そのFにおける係数を対応させる写像 $Z^n \to T$ を考える。 $R^n \times T$ においてグラフの凸包をとり、上側にある面を射影することで、Fの Newton 多面体の正則多面体分割を得る。双対として、各面での双対扇を貼り合わせてできる多面体複体をとると、余次元1骨格の台がV(F)である(n次元面はV(F)の補集合の連結成分の閉包である)。V(F)に含まれる余次元1の面には双対線分の格子長を重複度として与える。定義は予稿では省略するが、V(F)の重複度付き複体としての特徴付けが次のように与えられている。

定理 2 (Mikhalkin) トロピカル超曲面=法有 理的で釣合条件を満たす純余次元 1 の有限多面 体複体の台.

2.3 可視化が容易

実代数多様体は身近な問題との関係が付きやすいが、それにも関わらず代数幾何学ではまず複素多様体を考える.理由の一つは精密な交点理論が成り立つことである.例えば複素射影平面において次の定理が成り立つ.

定理 3 (Bézout の定理) 射影平面において, d 次曲線と d' 次曲線の交点は, 重複度をこめて ちょうど dd' 個ある. ただし無限個の点で交わるときは一方の式を少し変形するものとする.

トロピカル平面曲線に対しても,適切に交点や交点数が定まり同様の定理が成り立つ [Sturmfels][梶原].同じ交点数が半分の次元の図形で定まるので,直観的に計算しやすい.Mikhalkinは複素平面曲線の個数の数え上げ問題を平面の折れ線図形の数え上げに帰着して別証明を与えた.

3 工程計画問題への応用

この節では Max-Plus 代数の幾何との対応を 用いた応用に関する小田切真輔氏(秀明大学) との共同研究([3]等)について述べる.

プロジェクトネットワーク P の最短完了時間 F は,P の各極大経路上のコストの和を項とするトロピカル多項式である.F の Newton 多面体を N とする.

補題 4 P の極大経路はある非負点で単独でクリティカルパスになる.次の一対一対応がある。 $\{P$ の極大経路 $\} \leftrightarrow \{F$ の項 $\} \leftrightarrow \{N$ の頂点 $\}$

事故や改善により t_i が変化すると、クリティカルパスも変化することがある。現在のクリティカルパスから次に別のクリティカルパスに遷移するとき、対応する (t_i) の領域同士はその二つだけで隣接する点をもつ。双対ではパスに対応するNの頂点同士が辺でつながれていて、さらに隣接点のすべての座標が非負であることを意味する。これを辺とするグラフをPの極大経路の「隣接グラフ」と呼び、クリティカルパスの遷移のしやすさを表していると考える。2つの極大経路が交差するときクロス構造と呼ぶ

定理 5 N の 2 頂点に対し、次が成り立つ。(1) N の辺で結ばれない \iff 対応する極大経路にクロス構造が存在する。(2) 隣接グラフの辺で結ばれない \iff 対応する極大経路に広義クロス構造が存在する。

一般に凸多面体の 2 頂点の隣接判定は 0/1 多面体と雖も NP 困難であることが知られている. しかし本問題では多項式時間での隣接判定アルゴリズムを見出したので,これによりプロジェクトネットワークの性質を調べることを考える. 0/1 多面体 Δ に対し,あるアフィン部分空間との交わりとして表せる格子多面体を Δ の切片ということにする.

定理 6 (3 次元以下の切片の分類) 最短完了時間の Newton 多面体の 3 次元以下の切片は次の何れかである:頂点,正則線分,正則三角形,矩形,四面体,四角錐,三角柱,直方体.

対応するネットワークの幾何的分類も行った: $u \ge y$ を加えた上で、クロス構造に対し共通中間元を追加・消去する操作と、順序を保つグラフの台のホモトピー同値とを加えて分類した。これによりクリティカルパスの遷移の肝となるネットワーク構造が見て取れる.

4 展望

近年では、トロピカル化として副次的に現れる図形でなく、最初からトロピカル多様体を定義して使うことが多い。コンパクトリーマン面と同様の Riemann-Roch の定理が、トロピカル化を経由せず、一般の距離付きグラフに対して示された [Baker-Norine][Gathmann-Kerber][Mikhalkin-Zharkov]。さらに、コンパクトリーマン面に倣ったモジュライの構成やゴナリティの研究が進んでおり、トロピカル多様体を用いて、位相幾何的情報にとどまらず深い代数幾何的情報を取り出すことができるのではないかと期待される。

- B. F. Heidergott, G. J. Olsder, J. van der Woude, Max Plus at Work, Modeling and Analysis of Synchronized Systems: a Course on Max-Plus Algebra and Its Applications, Princeton, 2005.
- [2] D. Maclagan and B. Sturmfels, Introduction to Tropical Geometry, Graduate Studies in Mathematics 161, AMS, 2015.
- [3] M. Kobayashi and S. Odagiri, Tropical geometry of PERT, Journal of Mathfor-Industry, Vol. 5 (2013B-8), pp. 145-149.

Max-Plus 代数のダイナミクス

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 はじめに

Max-Plus 代数は大きい方の数を返す max 演算を和,通常の数の四則演算の和'+'を積とする代数であり,離散事象システム,トロピカル幾何,古典・量子可積分系など,いくつかの分野で重要な数学のツールや題材を提供している.我々の研究グループでは,デジタル版のソリトン系が Max-Plus 代数によって記述され,しかもその系が超離散化と呼ぶ極限操作によって差分ソリトン系から導出できるという文脈でしばしば研究されている [1]. そこで重要となるのは,極限公式

$$\lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \log(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon}) = \max(A, B)$$

と、max, min 演算に関する数多くの公式, たとえば

$$\max(A, B) + C = \max(A + C, B + C),$$

$$\max(A, \min(A, B)) = A$$

などである. 以下でいくつかの具体例を紹介する.

2 ソリトン方程式

ソリトン性を保ったまま戸田格子方程式

$$\frac{d^2u_j}{dt^2} = e^{u_{j+1}} - 2e^{u_j} + e^{u_{j-1}}$$

の時間変数を差分化すると

$$\Delta_n^2 \log(1+u_j^n) = \Delta_j^2 \log(1+\delta^2 u_j^n)$$

となり、 $u_j^n=e^{U_j^n/\varepsilon}-1$ 、 $\delta=e^{-1/2\varepsilon}$ の変換を経て $\varepsilon\to +0$ の超離散極限を取ると

$$\Delta_n^2 U_j^n = \Delta_j^2 \max(0, U_j^n - 1)$$

という Max-Plus 方程式が得られる [2]. この方程式も完全ソリトン性を保っており, 1 ソリトン解は

$$U_i^n = \Delta_i^2 \max(0, kj - \omega n + c)$$

という形式で表され、図1の3ソリトン解のように多ソリトン解も導出できる. Max-Plus 方程式の特徴として、変数や定数を整数に限定すると解も整数で閉じることができる.

4 11 3
4 1 1
13221
13 2 21
22.1112
31 . 2 3
4 . 11 21
13 . 2 12
4122
1431
4000
0.004
3 . 231
04 444
3 1122
21 2 . 31
3 2 . 13
21 11 . 22
12
12

図 1. 超離散戸田格子方程式の 3 ソリトン解の例

3 最適速度モデル

超離散極限や Max-Plus 代数は、一般的な数学的枠組みを提供しているだけであり、適用のしやすさ・しにくさはあるが、対象とする系の物理的性質などとは基本的には無関係である.

交通流の自然渋滞形成の数理モデルとして有 名なものに,最適速度モデル

$$\ddot{x}_k = A\{V(x_{k+1} - x_k) - \dot{x}_k\}$$

がある.この方程式を超離散化するには,次式のように「超離散化でき,かつ,連続系の近似となるような」差分化を行う[3].

$$\Delta_n^2 x_k^n = A\{ \log(1 + \delta^2 V(x_{k+1}^n - x_k^n)) - \log(1 + \delta(e^{x_k^n - x_k^{n-1}} - 1)) \}$$

差分方程式が重要なポイントで,あとは変数変 換と極限によって超離散方程式

$$\Delta_n^2 X_k^n = A\{\widetilde{V}(X_{k+1}^n - X_k^n) - \max(0, X_k^n - X_k^{n-1})\}$$

を導くのみである. 図 2 に上式の数値計算例を示す.

4 可解カオス

超離散化で用いられる指数関数型の従属変数変換 $u=e^{U/\varepsilon}$ は差分方程式の正値性を要求す

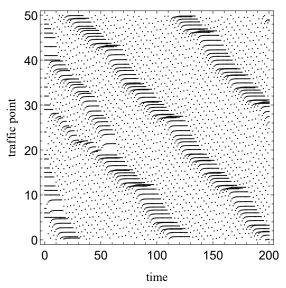


図 2. 超離散 OV モデルの解の例

る. これがしばしば悩みの種となり、「正の問題」と呼ばれる. それをうまく解決した例のひとつが Schröder 写像

$$z_{n+1} = \frac{4z_n(1-z_n)(1-k^2z_n)}{(1-k^2z_n^2)^2}$$

の超離散化であり,変数変換

$$\frac{z_n}{1-z_n} = e^{X_n/\varepsilon}, \quad \sqrt{1-k^2} = e^{-1/2\varepsilon}$$

と極限 $\varepsilon \to +0$ によってテント写像

$$X_{n+1} = 1 - 2\left|X_n - \frac{1}{2}\right|$$

が得られ、解 $z_n = \operatorname{sn}^2(2^n u_0, k)$ も $X_n = 1 - 2|\{2^n \nu_0\} - \frac{1}{2}|$ に変換される [4].

5 Max 方程式

超離散化は微分-差分-超離散の対応を考える 上では必要であるが、Max 演算で作られる方 程式はそれ自体が面白く、常に超離散化の枠組 みが必要というわけではない. たとえば

$u_{j-1}^n u_j^{n-1} u_j^n$	111	110	101	100
u_j^{n+1}	1	0	1	0
	011	010	001	000
	0	0	1	0

というルール表で与えられる時間 2 階のセル オートマトンは

$$u_j^{n+1} = \min(\max(u_{j-1}^n, \overline{u_j^{n-1}}), u_j^n)$$

という \max 方程式でも定義できる [5]. $(\overline{u}$ は 1-u を表す.) さらに,この方程式の初期値問題を解くと,解は O(n) の複雑度の式

$$u_{j}^{n} = \min(u_{j}^{1}, \\ \max(\overline{u_{j}^{0}}, u_{j-1}^{1}), \\ \dots, \\ \max(\overline{u_{j}^{1}}, \dots, \overline{u_{j-n+3}^{1}}, u_{j-n+2}^{1}), \\ \max(\overline{u_{i}^{1}}, \dots, \overline{u_{i-n+3}^{1}}, \overline{u_{i-n+2}^{0}}, u_{j-n+1}))$$

で表せる. u=0,1 に限定すると元の 2 進のルール表の解となるが、u が実数でも \max 方程式の解であり、2 進の系を特別な場合として含む実数の系が得られたことになる. 図 3 に解の例を示す.

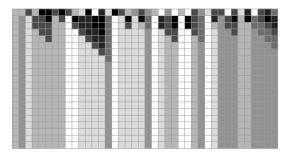


図 3. max 方程式の実数解の例

- [1] 広田良吾, 高橋大輔, 差分と超離散, 共立 出版, 2003.
- [2] J. Matsukidaira, J. Satsuma, D. Takahashi, T. Tokihiro, M. Torii, Toda-type Cellular Automaton and its N-soliton solution, Phys. Lett. A 225 (1997) pp.287-295.
- [3] D. Takahashi, J.Matsukidaira, On a discrete optimal velocity model and its continuous and ultradiscrete relatives, JSIAM Letters vol.1 (2009) pp.1-4.
- [4] K. Kajiwara, A. Nobe, T. Tsuda, Ultradiscretization of solvable onedimensional chaotic maps, J. Phys. A: Theor. Math., 41 (2008) 395202 (13pp).
- [5] 山本惇太郎, 時間 2 階空間 2 近傍 max 方程式の厳密解について, 早稲田大学基幹理工学部応用数理学科 2017 年度卒業論文.

流体構造連成解析のためのメッシュ制御技術の開発

山田 知典1

1東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻

e-mail: tyamada@sys.t.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

1990 年代後半の汎用 3 次元 CAD ソフトウェアの普及と計算機性能の向上に伴い,製造業における CAE の適用範囲は格段に拡大してきた. 1998 年に発足したメッシュ生成研究部会はそのような時代背景のもと,解析の実行自体は数日で可能であるにもかかわらず,一方で,人手を必要とし,数か月かかることもあった CAE のモデリングプロセスを高度化することを目的として設立された. 当時 CAE モデリングは世界的にも注目を集めており,メッシュ生成手法のみならず,き裂進展解析を対象としたメッシュレス法[1],自由表面を有する流れ解析を対象とした粒子法[2]などの多くの新たな手法が提案され. 近年では実用化の域に達している.

次なるCAEのターゲットとして自動車の騒音解析等の現実問題の流体構造連成解析が注目を集めている[3]. 救援活動等に利活用が期待されている小型人工飛翔体の設計を目的とした羽ばたき運動の解析[4]は大領域変動を伴う問題であり、CAE モデリング技術の進展が必要不可欠な課題である. ここでは羽ばたき翼の界面付近に複雑な流れ場が発生し、流れとの相互作用により構造の運動や変形が変化するようなシミュレーションとなり、界面付近の解析精度を上げるため、ALE 法に代表される界面追跡法を用いて有限要素解析を行うことが多い. その際にメッシュの歪みが大きくなり、その結果として解析が破綻するケースが存在するのである.

大領域変動を伴った流体構造連成解析を実用的に行うためには、解析中のメッシュの歪みを防止する合理的なメッシュ制御技術が必要不可欠であるが、メッシュ制御法に関する既存手法としては、例えば擬似弾性体スムージングに基づいた Jacobian-based stiffening technique (JBST) [5] などが存在する. 擬似弾性体スムージングでは、流体領域のメッシュを擬似的に弾性体とみなし、界面の変位を強制変位として与えて解析を行うことで、界面の移動に追従した流体領域メッシュの制御を行う手法

である. JBST ではさらに各要素の Jacobian を用いて、各要素の硬さを決定する. これにより界面近傍の小さなメッシュの歪みを界面から離れた位置にある大きなメッシュが吸収するような効果が得られる. 本稿では近年の CAE 技術の新たな課題である大領域変動を伴った流体構造連成解析を対象として JBST に改良を施した新しいメッシュ制御手法[6]の適用について述べる.

2 メッシュ制御手法の概略

擬似弾性体スムージングでは,流体領域のメッシュ移動量を擬似的に次式であらわされる 線形弾性体の支配方程式に対し,連成界面の変位を強制変位として付与して解くことで決定する.

$$\nabla \cdot \mathbf{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Omega_f \tag{1}$$

ここで、 σ は応力テンソル、fは外力ベクトル、 Ω_f は流体領域を表す。境界条件は、界面上の節点に対するDirichlet境界境界 Γ_D のみ与えるため、外力は存在せず、境界条件は次式により与えられる。

$$\mathbf{y} = \mathbf{d}$$
 on Γ_D (2)

ここで, **y**は変位ベクトル, **d**は界面上の強制変位ベクトルを表す.

有限要素解析では式(1)を弱形式化し,次式のように要素ごとの要素剛性マトリクスを全体剛性マトリクスに足し合わせていくことで離散的に解く.

$$\int_{\Omega_f} [\cdots] d\Omega_f = \sum_e \int_{\Xi} [\cdots]^e J^e d\Xi$$
 (3)

ここで、 $[\cdot\cdot\cdot]$ は簡易的に被積分関数を表したものであり、 Ξ は有限要素解析領域全体を表す。また、右辺のeは要素番号を表す。 J^e は、局所座標系を全体座標系に変換するための Jacobian と呼ばれる値であり、2次元解析においては、各要素の面積に一致する。

JBST では、この Jacobian を制御指標として 用いて各要素の硬さ次式により決定するが、新 しい最低要素高制御 [6]では要素の最低高さ を制御指標として用いる.

$$\sum_{e} \int_{\Xi} [\cdots]^{e} J^{e} d\Xi \rightarrow \sum_{e} \int_{\Xi} [\cdots]^{e} J^{e} \left(\frac{1}{J^{e}}\right)^{\chi} d\Xi \tag{4}$$

ここで、γはメッシュの硬さとそれぞれの制御 指標との関係を表し、JBST を例として考えると、 γを大きく設定するほど面積の大きなメッシュ がより柔らかく, 小さなメッシュがより硬くな るような効果が得られる.

流体構造連成解析におけるメッシュ制 御事例

前章で述べたメッシュ制御手法を用いて2次 元の羽ばたき運動に適用した事例を示す. 図 1 に解析領域の概略図を示す. 中央に位置する翼 (構造体)の左側端部を前縁として,前縁に対 して移動と回転の2種類の運動を付与した. 比 較のため解析は JBST と最低要素高制御で行っ た.

解析中の流体の圧力場に注目すると JBST に よる結果では図2の左に示すように、渦の形状 が円ではなくアスペクト比が非常に悪い要素 が存在する影響により,不揃いに鋭くなってい ることがわかる. このような状況は他の時刻ス テップにおいても確認され、圧力場が異なるた めに両手法では渦の挙動とそれに伴う翼の変 形挙動に違いが生じることも確認できた.

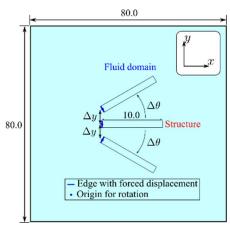


図1.解析領域概略図

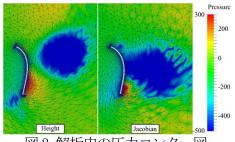


図2.解析中の圧力コンター図

4 おわりに

本稿では近年の CAE 技術の新たな課題である 大領域変動を伴った流体構造連成解析のメッ シュ制御手法について述べた. 現在, 機械学習 技術の発展により、CAE を学習データの生成器 として利活用する期待が高まっており、現実世 界にある複雑形状構造物を複合現象を考慮し てロバストにシミュレートすることが必要不 可欠となっている. CAE モデリング技術にはよ り一層の高度化が必要となるであろう.

- [1] T. Belytschko, Y. Lu, L. Gu, Element - free Galerkin methods, IJNME, 37 (1994), 229–256.
- [2] S. Koshizuka, Y. Oka, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, Nuclear science and engineering, 123(1996), 431-434.
- [3] S. Yoshimura, T. Yamada, Parallel partitioned simulations of real world's coupled problems, Proceedings of Indian National Science Academy, 82 (2016), 147–162.
- [4] T. Yamada, G. Hong, S. Kataoka, S. Yoshimura, Parallel partitioned coupling analysis system for largescale incompressible viscous fluidstructure interaction problems, Computers & Fluids, 141(2016), 259-268.
- [5] K. Stein, T. E. Tezduyar, R. Benny, Mesh moving techniques for fluidstructure interactions with large displacements, Transactions of the ASME, 70 (2003), 58-63.
- [6] T. Yamada, Y. Yamaomto, G. Hong, S. Yoshimura, A mesh moving technique with minimum-height-based stiffening for fluid-structure interaction analysis, Mechanical Engineering Letters, 3(2017), p. 16-0657.

き裂進展予測サロゲートモデルの構築

和田 義孝1

¹近畿大学理工学部機械工学科 e-mail: wada@mech.kindai.ac.jp

1 はじめに

ILSVRC 2012 におけるディープラーニング (深層学習) [1]の有効性が画像認識において 示されその可能性に多くの人々が期待する状況になって久しい. しかし, 計算力学や CAE と いった分野こそ, ディープラーニングとの親和性が高いと期待するもののその応用方法・利用方法については先行研究事例が少ない. 一方で, もともと多くのデータを必要とする分野(材料設計,流体工学等)においては特徴量を抽出する多次元非線形マッピングの技術としてディープラーニングの利用例が複数報告されている[2]. 本研究では重合メッシュ法によるき裂進展データを大量に生成し,何をどのように学習するのがサロゲートモデルの構築に有効なのかを裂進展挙動を通して考察する.

2 CAE におけるサロゲートモデル

工学応用への問題を考えると、学習データをどのように準備するのかが最大の問題となる.物理現象は空間、物性、物理量(変位、速度、ひずみ、応力、温度等)が入力または出力されることになる。物理量を学習(測定)する位置の取扱いを一般化しなければ座標系依存の学習となる。そこから法則を見出すことは困難である。形状が決まっているのであれば、ノーマライズを行うことが入力のパラメータを減じることになる。ただし、ノーマライズを行った係数は学習対象となる。また荷重に関しても同様で特に弾性問題であれば単位力を想定して学習させる。

サロゲートモデルは代替モデルとして物理現象を模擬するモデルである.したがって、微分方程式を完全に代替するものではない.これまでパラメトリックに問題を解いていた場合、変数を可能な限り限定することにより現象の傾向を把握していた.例えば、ニューラルネットワークを使ったサロゲートモデルであれば多数の変数を用いて学習し、より自由度の高いサロゲートモデルの構築が可能となる.しかし、例えば非線形問題においては解析結果の取得

に時間が必要であることと解析精度の低さが問題である.繰返しの応力ひずみ関係はヒステリシスループを示し1つのひずみ(変位)に対して複数の応力(荷重)状態を示す.確実に学習できるとすれば降伏局面や背応力自体を学習させることである.しかし,実際の降伏現象は等方硬化,移動硬化の混合で生じているうえに降伏局面が連続であるとは限らない.ディープラーニングによる学習はそういったモデル化が困難な現象に対して学習できる可能性がある.

3 き裂進展におけるサロゲートモデル

疲労き裂進展を具体事例としてディープラーニング技術を適用し、き裂進展挙動が予測できるかどうかを検証した。3つのフェーズを想定し、フェーズ1は応力拡大係数から進展方向ベクトルおよび進展速度を学習、フェーズ2はき裂先端近傍応力、変位から進展方向ベクトルおよび進展速度を学習、フェーズ3は初期き裂中心位置を原点としき裂先端位置およびき裂が向いている方向ベクトルから進展方向ベクトルおよび進展速度を学習である。実用上はき裂先端の位置および進展方向のベクトルから学習できることが望ましい。

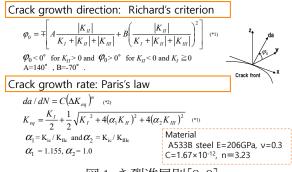


図1き裂進展則[8,9]

疲労き裂進展解析は、弾性計算(ポアソン方程式)、応力拡大係数、等価応力拡大係数、き 裂進展速度、き裂進展方向を微小ステップで解析を行いその履歴(積分)として最終的なき裂進展形状が計算される。図1に等価応力拡大係 数,き裂進展速度およびき裂進展方向を決定する経験則による式を示す[3-5].ディープラーニングによりこれら式を陰的に再構成されるかどうかが工学分野における応用のための提示すべき具体例である.

4 サロゲートモデルの評価

学習データは重合メッシュ法(以下 s-FEM)に よるき裂進展解析[5]を用い約5,000 におよぶ データを生成した. データをもとに、ノイズ混 入, ノード停止などのテクニックを用いて総学 習数12万回を行った. 図2にき裂進展速度の 学習結果を示す. またその具体的な予測された 数値を表1に示す. s-FEMによるき裂進展解析 と同様にシミュレーションによるき裂進展速 度の予測は1サイクル当たりの進展量ではない. 理由は、1 サイクル当たりの進展量は 10-12 のオ ーダーのため、最小メッシュサイズあたりに何 サイクル必要か計算することで、き裂進展数値 シミュレーションを連続的に行う. 図3から, き裂進展開始直後では大きな差異が左右のき 裂先端部位でみられる. しかし, き裂進展が進 むにつれ s-FEM の結果と一致する. 荷重方向に 対して斜めに存在するき裂が繰返し荷重を受 けると急激にその向きを変え、その後ほぼ水平 に進展する. つまり、き裂の向きを変える学習 が少ない. 進展方向を変える学習データ数は全 体の学習データ数の4%程度にしか過ぎない.

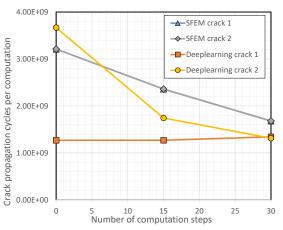


図2 き裂進展数予測結果と重合メッシュ法に よる結果の比較

本適用例は、CAE アプリケーション自体をデータ生成のための手法として利用することの提案である.近年の配列計算機環境およびクラウドによる並列計算サービスの利用を考えれ

ばパラメトリックにバッチ処理を実行する技術的困難さはほとんどない.このような,状況を踏まえてCAEアプリケーションにデータを生成されば,意図的に境界領域(考えている解空間の端)およびデータ数の取得が相対的に少なくなる箇所(本適用例ではき裂進展直後)を適切に理解しデータの密度を適正化(必要なデータの密度の均質化)が可能となる.



図3 裂進展予測結果と重合メッシュ法による き裂進展(正解):黒・初期き裂,赤・重合メ ッシュ法,青・ニューラルネットワークによる 予測

5 おわりに

ディープラーニングおよびそれらを実用化するための技術集積により実用化が進行しており、様々な分野の知見を適用することによりより効果的・効率的なサロゲートモデルの構築が可能となると考えられる.一方で現象の分析と効果的な学習パラメータ選定など知見の獲得が急務である.

参考文献

- [1] A. Krizhevsky, et al., ImageNet Classification with Deep Convolutional, Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS 2012), 2012
- [2] 日本機械学会第30回計算力学講演会講演論文集,大阪,2017
- [3] H. A. Richard, M. Fulland, M. Sander S. N., Fatigue Fract. Eng. Mater Struct., Vol. 28, pp. 3-12, 2005
- [4] P. C. Paris and F. Erdogan, J. bas. Eng. Mater. Trans. ASME, Ser. D, 85, pp. 528-533, 1963
- [5] 菊池,和田ら、重合メッシュ法を用いた 疲労き裂進展シミュレーション(第2報二 つの段違いき裂の相互作用の検討)、機論 A,74巻,745,2008

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

粒子法による流体解析のための粒子・ポリゴン境界表現の開発

室谷 浩平

鉄道総合技術研究所

e-mail: murotani.kohei.03@rtri.or.jp

1 概要

粒子法が開発された当初は、「固体壁を固体壁粒子のみで計算する方法」が提案され、現在でも最も広く使われている固体壁の計算手法である。「固体壁を固体壁粒子のみで計算する方法」は、複雑な形状の固体壁であっても精度良く計算できるメリットがあるが、固体壁に一様なサイズの粒子を配置するため、計算コストが大きくなるデメリットがある。CAEの普及に伴い、実物大の機械や構造物を丸ごと解析することが要求されるようになり、解析モデルが大規模になってきた。計算コストを抑えるために、固体壁の部分に固体壁ポリゴンを用いることで、計算コストを抑える試みが行われるようになっている[1]。

「固体壁を固体壁ポリゴンのみで計算する方法」は、固体壁をポリゴンで扱うため固体壁の部分に固体壁粒子が不要になり、本来計算に必要とされる流体粒子のみ計算すればよくなる。そのため、計算コストが大幅に低くなるメリットがあるが、複雑な形状の固体壁では、固体壁を計算するアルゴリズムが複雑になるデメリットがある。

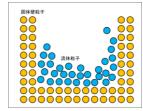
本研究では、「固体壁に固体壁粒子と固体壁ポリゴンを併用する方法」を用いることにより、精度良く、低計算コストで、単純なアルゴリズムで計算することができる方法を提案する。

2 粒子法の境界表現

流体シミュレーションにおいて、流体と接する固体壁に境界条件を設定する必要がある。流体シミュレーションとして粒子法を用いた場合、流体と接する固体壁を表現するために、図1のような「固体壁を固体壁粒子の集まりとして扱う方法」と図2のような「固体壁を固体壁ポリゴンで扱う方法」が存在している。流体シミュレーションにおける粒子法では、計算対象の粒子を中心とした影響半径内に入る粒子の物理量を積分する必要がある。「固体壁を固体壁粒子のみで計算する方法」の場合は、固体壁付近の流体粒子は、影響半径内に入る固体壁内

部の物理量を積分する必要があるため、影響半 径内に入る固体壁粒子を積分点とみなして、固 体壁粒子がもつ物理量の重み付加算を行う。固 体壁内部の物理量は流体部分の物理量から決 まるため、固体壁粒子を配置して物理量を与え る必要なく、流体部分の物理量から固体壁内部 の積分ができる。この原理をもちいるのが、「固 体壁を固体壁ポリゴンのみで計算する方法」で ある。「固体壁を固体壁ポリゴンのみで計算す る方法」の場合、流体粒子の影響半径内に固体 壁ポリゴンの面が唯一であれば、アルゴリズム は単純であり精度良く計算できる。これは、固 体壁ポリゴンの面の十分に内部に限られる。一 方で、流体粒子の影響半径内に固体壁ポリゴン の頂点や辺が含まれるような場合、固体壁ポリ ゴン面が2つ以上存在するため、固体壁ポリゴ ンを計算するアルゴリズムが複雑になる。

本研究では、図3にしめすように、固体壁の大部分を占める固体壁ポリゴンの面の十分内部には、計算コストの低い「固体壁ポリゴン」を配置し、固体壁ポリゴンを用いた場合にアルゴリズムが複雑になる固体壁ポリゴンの辺や頂点の部分には、精度が良く、計算が単純である「固体壁粒子」を配置することで、計算コストが低く、アルゴリズムが単純で、精度が良い「固体壁に固体壁粒子と固体壁ポリゴンを併用する方法」を提案する。



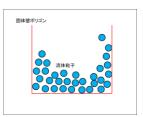


図1. 固体壁粒子

図2. 固体壁ポリゴン

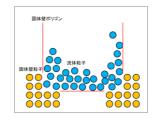


図3. 固体壁粒子と固体壁ポリゴンの併用

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

3 解析例

本研究では、レール上に配置された水膜の上を転がる車輪が通過した際の水膜の挙動を解析するために用いる。図4は、車両が20m/s(72km/h)で等速に移動している状態を考え、レール上に配置された水膜の上を転がる車輪が通過した際の水膜の挙動を有限要素法により解析した例である。車輪とレールのモデル形状は新幹線用に準拠し、接触部分の要素サイズをレール側は3mm、車輪側は6.2277mmとした。なお、車輪とレールの接触部分は、弾塑性解析の結果により動的に変形するものとする。

図5は、車輪とレール間の水膜の挙動解析の車輪とレールを全て固体壁粒子で表現して解析を実施した場合の概念図である。粒子の直径を0.05mmとすると、流体粒子は2560万粒子、車輪とレールの固体壁粒子は9280万粒子となった。図6は、車輪とレール間の水膜の挙動解析の車輪とレールに固体壁粒子と固体壁ポリゴンを併用する方法で表現して解析を実施した場合の概念図である。粒子の直径を0.05mmとすると、流体粒子は2560万粒子、車輪とレールの固体壁粒子は930万粒子となった。図7は、レールを固体壁粒子と固体壁ポリゴンを併用する方法で表現した例である。

本解析例では、車輪とレールに固体壁粒子と 固体壁ポリゴンを併用する方法を用いること で、全て固体壁粒子を用いた場合と比べて、固 体壁粒子を1/10程度に減らすことに成功した。

4 今後の課題

本研究では、車輪とレールに固体壁粒子と固体壁ポリゴンを併用する方法を開発し、全て固体壁粒子を用いた場合と比べて、固体壁粒子を1/10程度に減らすことに成功した。今後は、効果的な応用例へ適用していきたい。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17K05152 の助成 を受けたものです.本論文の結果の一部は,理 化学研究所のスーパーコンピュータ「京」と名 古屋大学 FX100 を利用 して得られたものです (課題番号:hp170067, hp180014).

参考文献

[1] 原田隆宏,越塚誠一,島崎克教,MPS 法における壁境界計算モデルの改良,日本計算工学会論文集,No.20080006,(2008).

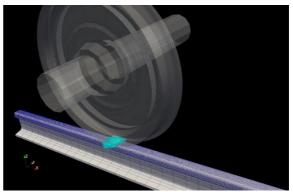


図4. 水膜の上を転がる車輪が通過した際の水 膜の挙動を解析の全体図

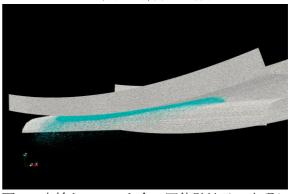


図5. 車輪とレールを全て固体壁粒子で表現した解析を実施した場合

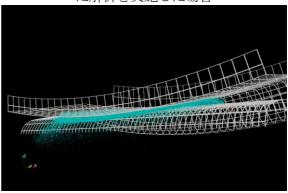


図6. 車輪とレールに固体壁粒子と固体壁ポリ ゴンを併用する方法で表現した解析

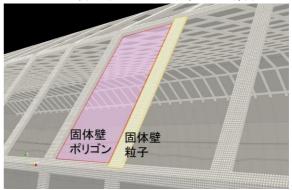


図7. レールを固体壁粒子と固体壁ポリゴンを 併用する方法で表現した例

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

Bezier 曲線を生成元とした Voronoi 図の正確な隣接関係の決定

辻野 弘章¹, 今井 敏行²

1和歌山大学大学院システム工学研究科,2和歌山大学システム工学部

e-mail: s185024@center.wakayama-u.ac.jp

1 概要

本研究では、Bezier曲線を生成元とした Voronoi 図 (勢力圏分割) の各勢力圏の正確な隣接関係 を、生成元の点列近似を用いることで求める.近似算法であるため、計量情報の正しさは無視するが、位相情報すなわち隣接関係の正確性は保証する.

2 準備

2.1 Voronoi 図

平面上に n 個の点 $P_i(x_i, y_i)(i = 1, 2, \cdots, n)$ が与えられたとき,点 P_i の勢力圏 $V(P_i)$ を点 P と点 P_i のユークリッド距離を表す $d(P, P_i)$ を用いて表すと

$$V(P_i) = \bigcap_{j \neq i} \{P | d(P, P_i) < d(P, P_j)\}$$
 (1)

となる [1]. この $V(P_i)(i=1,2,\cdots,n)$ による分割の図を Voronoi 図と呼ぶ. Voronoi 図の辺のことを Voronoi 辺と呼び,Voronoi 辺と Voronoi 辺の交点を Voronoi 点と呼ぶ. n=30の時の Voronoi 図の例を図 1 に示す.

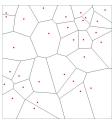


図 1. Voronoi 図の例

2.2 Bezier 曲線

Bezier 曲線は、線分上に内分点を繰り返しとることにより得られる曲線であり、Adobe の Illustrator のようなグラフィックデザインソフトや広く工業製品などで使用されている曲線の表現法の一つである。非常に自由度の高い曲線で制御点を操作することで様々な曲線を描画でき

る. ベジェ曲線での次数 A は, A = (制御点の個数 - 1) となる. 図 2 に 3 次の Bezier 曲線の例を示す.



図 2. 3 次の Beier 曲線の例

2.3 Voronoi 図の隣接関係について

本研究で正確に求める隣接関係を表す情報は, 以下の2つの情報である.

- 1) どの勢力圏同士が隣り合っているか.
- 2) 各 Voronoi 点がどの 3 つの生成元に囲まれているか

3 先行研究

本章では、先行研究として線分と円の Voronoi 図の隣接関係決定に関する研究について述べる.

3.1 線分と円の Voronoi 図の隣接関係決 定の研究

線分と円のVoronoi 図の隣接関係決定に関する研究でそれぞれに用いられた手法の考え方は同じで、明らかに生成元同士が離れている部分では粗く生成元上に点を取り、より生成元同士が近い部分では、細かく点を取る.従来手法[2]では、生成元上に隙間なく点を敷き詰め求めたことにより計算時間がかかっていた.しかし、このようにすることにより従来手法よりも生成元上にとる点の数を減らし、求めることができる.これを満たすために、まず線分の場合両端の点、円の場合中心点をそれぞれ用いて Voronoi 図を求める.そして図3において「生成元1、生成元2とのみ交わり、生成元3、生成元4とは離れている空円が描ければその境界線の隣接関係は正しい[3]」という判定条件を用いて隣接関

係が正しいかどうかの判定を行う. 誤った隣接 関係と判定されたとき, Voronoi 点から最も近 い生成元上の位置に新たな点の付加を行い,付 加した点も含めて再び求め Voronoi 図の書き換 えを行う. 書き換えたものに対し,再び判定を 行い,すべての境界線上で隣接関係が正しいと 判定されるまで,点の付加, Voronoi 図の書き 換え,判定を繰り返す. 以上の処理を行い求 められた隣接関係のみ正しい線分の Voronoi 図 と円の Voronoi 図を図 4 に示す.

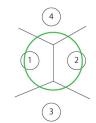


図 3. 判定条件の簡略図

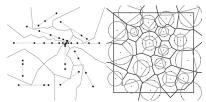
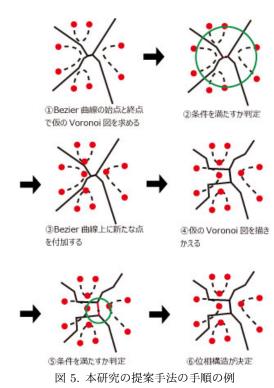


図 4. 隣接関係のみ正しい線分と円の Voronoi 図の例

4 提案手法

本研究で用いる手法は, 先行研究の手法を Bezier 曲線に対応するよう応用したものであ る. つまり、Bezier 曲線上にとる点の数を従来 手法よりも減らし、点の Voronoi 図の作成アル ゴリズムを用いて隣接関係を求める. 以下の図 5に手順の例を示す. はじめに, 生成元として与 えられた Bezier 曲線の始点と終点の制御点のみ で Voronoi 図を求める. この時に求められた隣 接関係が正しいか決定していない Voronoi 図を 仮の Voronoi 図と呼ぶ、そして、仮の Voronoi 図の隣接関係が正しいかどうかを, 第3節で示 した, 「生成元1,生成元2とのみ交わり,生 成元3,生成元4とは離れている空円が描けれ ばその境界線の隣接関係は正しい[3]」という条 件を用いて判定を行う. 交差判定を行い, 条件 を満たさなかった場合、生成元の Bezier 曲線の 中央付近上に新たに点の付加を行う. 新しく付 加した点も含めて、仮の Voronoi 図を求めなお す. 求めなおした仮の Voronoi 図で再び判定を する. すべての境界線上で条件を満たすか判定

をし、条件を満たせばそこで隣接関係が決定する.すべての境界線上で条件が満たされるまで、再帰的に生成元上に点の付加と仮の Voronoi 図の求めなおしを行うことで、隣接関係の決定を正確に行う.



5 まとめ

本研究では、Bezier 曲線が生成元の Voronoi 図の隣接関係のみを点列近似を用いることで求める。ただし、近似計算のため、Voronoi 点の座標などの計量情報の正確性は無視し、位相情報のみ正確に求める。本研究の手法で Voronoi 図を求めた場合、生成元である Bezier 曲線上に付加する点の数は従来手法よりも減少すると考えている。その結果、計算時間も向上すると想定される。

本研究の一部は、科学研究補助金の助成を受けている.

- [1] 計算幾何学と地理情報処理 (伊理正夫 監修, 越塚武志 編集, 共立出版, 1986)
- [2] 計算幾何学(杉原厚吉,朝倉書店,2013)
- [3] 位相的に厳密な円や線分の Voronoi 図の 統一的近似構成 (今井敏行, 和歌山大学, 日本応用数理学会 2016 年度年会講演予 稿集, 2016)

視体積交差メッシュの接続性計算

森口 昌樹

明治大学 先端数理科学インスティテュート

e-mail: moriguchi@meiji.ac.jp

1 はじめに

視体積交差法とは複数のシルエット(形状の輪郭を表す2次元図形)から3次元形状を構築するための基本的手法で、シルエットを逆投影して得られるボリュームの交差形状を抽出するものである。本研究では、その交差形状を視体積交差メッシュと呼ぶ。視体積メッシュは3次元形状の再構成[1]やシャドウアートの構築[2]などに利用されている。

Keiren らは、入力図形が三つのとき、視体積交差メッシュの複雑度や接続性を計算するアルゴリズムの計算量を解析している [3]. そして、「視体積交差メッシュの計算を避けることで、接続性を効率的に計算することができるか」という未解決問題を記述している.

本研究では、入力図形が二つの視体積交差 メッシュに限定して、交差形状の接続性を効率 的に計算する手法を提案する。提案手法は、計 算位相幾何学の二つのツール

- merge 木 (Reeb グラフと類似した概念)
- persistence pairing

を利用する.

2 視体積交差メッシュ

本研究では,入力は二つの線画 D_1 , D_2 と仮定する.線画とはある平面上の直線分の集合である.また,投影法は垂直投影を仮定し,二つの視線を v_1 と v_2 とする(D_1 は v_1 と垂直な平面にのっており, D_2 は v_2 と垂直な平面にのっている).また, $v_1 \times v_2$ の方向に h 軸をとる. D_1 , D_2 は以下の仮定を満たすとする.

- D_1 を h 軸に直交射影した像と D_2 を h 軸に直交射影した像は一致する.
- *D*₁, *D*₂ はそれぞれ連結である.

このとき, D_1 を v_1 方向に逆投影した形状を C_1 , D_2 を v_2 方向に逆投影した形状を C_2 とすると,

 $C_1 = \{x + tv_1 \mid x \ \text{td} \ D_1 \bot \mathcal{O}$ 点, $t \ \text{td}$ 実数 \}

 $C_2 = \{ x + t v_2 \mid x \text{ は } D_2 \bot o \land t \text{ は 実数 } \}$

視体積交差メッシュは $C_1 \cap C_1$ と表される(入力は線画と仮定しているので,一般に,図 1 のようにワイヤーフレームとなる).

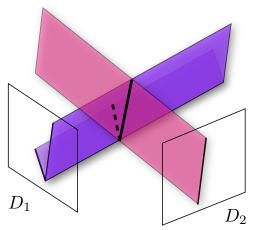


図 1. 線画 D_1 と線画 D_2 の視体積交差メッシュ (太線)

 D_1 または D_2 が非連結なとき、視体積交差メッシュは必ず非連結になる。 D_1 , D_2 が上記の仮定(連結かつ "高さが等しい")を満たしても、視体積交差メッシュは非連結になることがある。 視体積交差メッシュの連結性を効率的に計算することが、本研究の目的である。

3 接続性の効率的計算法

入力のサイズ(二つの線画の頂点数の和)をnで表すと,視体積交差メッシュの計算には $O(n^2)$ の時間複雑度と $O(n^2)$ の空間複雑度がかかる。そのため,視体積交差メッシュを陽に構築してから接続性を計算すると $O(n^2)$ 時間と $O(n^2)$ 空間が必要になる.

入力図形が二つのときは、merge 木 [4] と persistence pairing [5] を用いることで、視体積交差メッシュを陽に計算しなくても視体積交差メッシュの接続性を判定することができる.

- 1) +h 方向に D_1 の merge 木を計算する.
- 2) D_1 の merge 木の極小点と鞍点を persistence pairing により対応づける.
- 3) -h 方向に D_2 の merge 木を計算する.

- 4) D_2 の merge 木の極大点と鞍点を persistence pairing により対応づける.
- 5) D_1 の merge 木の各 pair(極小点を m_1 , 鞍点を s_1 とする)と D_2 の merge 木の各 pair(極大点を m_2 ,鞍点を s_2 とする)に 対して

$s_2 < m_1 \le m_2 < s_1$

を満たす pair の組が存在するか判定する.

そして、逆方向 (-h方向の D_1 の merge 木、+h方向の D_2 の merge 木)に対しても同様の計算を行う。 どちらの方向にも条件を満たす pair の組が存在しなければ、またそのときに限り、視体積交差メッシュは連結となる。

上記のように、視体積交差メッシュの接続性は区間の交差計算により判定することができる。 区間は O(n) 個あるので、素朴な算法だと交差 計算に $O(n^2)$ 時間かかってしまう。しかし、領 域木 (range tree) [6] を利用すると、 $O(n \log n)$ 時間と $O(n \log n)$ 空間で接続性を判定できる。

4 錯視立体への応用

変身立体 (ambiguous cylinder) [7] は錯視立 体の一種で、

● 二つの特定の視点から観察すると、全く 異なる形に見える

という境界曲線を持つ "円柱" である. 変身立 体の境界曲線は、円柱の側面に遮蔽されないよ うに構築しなければならない.

二つの入力線画の視体積交差メッシュが連結なときは、以下の方法で連結な変身立体を作成できる。ただし、二つの入力線画を D_1 , D_2 , 視線を v_1 , v_2 とし、円柱の軸方向を $d=\alpha_1v_1+\alpha_2v_2$ とする(α_1 , α_2 は正の実定数)。

- 1) D_1 と D_2 の視体積交差メッシュを構築する.
- 2) 視体積交差メッシュを d 方向に押し出す. 押し出し操作によって得られた形状を C で表そう.C が D_1 , D_2 に対する変身立体になっている:C を v_1 方向から観察すると,C の境界曲線は D_1 に見え,遮蔽もされない.同様に,C を v_2 方向から観察すると,C の境界曲線は D_2 に見え,遮蔽もされない.

この作成法は [7] の作成法よりも入力線画に 対する条件が弱いので、より多くの入力線画に 対して変身立体を作成できる.

5 まとめ

本研究では、入力図形が二つのとき、視体積交差メッシュの接続性を効率的に計算する手法を提案した。視体積交差メッシュを陽に計算せずに接続性を計算することで、効率的に計算することができた。また、連結な視体積交差メッシュを用いた、変身立体の作成法も提案した。 入力図形が三つ以上の視体積交差メッシュに対して効率的な接続性計算法を提案することは、今後の課題である。

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費 JP16H01728, JP16K00024, JP17K14580 の助成を受けて行 われた.

- [1] A. Laurentini, The visual hull concept for silhouette-based image understanding, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 16(2):150–162, 1994.
- [2] N. J. Mitra and M. Pauly, Shadow Art, *ACM Transactions on Graphics*, 28(5):156.1–156.7, 2009.
- [3] J. Keiren, F. van Walderveen, and A. Wolff, Constructability of trip-lets, In Proc. of the 25th European Workshop on Computational Geometry, 251–254, 2009.
- [4] H. Carr, J. Snoeyink, and U. Axen, Computing contour trees in all dimensions, Computational Geometry: Theory and Applications, 24(2):75–94, 2003.
- [5] A. J. Zomorodian, Topology for Computing, Cambridge University Press, 2005.
- [6] M. de Berg, O. Cheong, M. van Kreveld, and M. Overmars, Computational Geometry: Algorithms and Applications, 3rd edition, Springer-Verlag, 2008.
- [7] K. Sugihara, Ambiguous cylinders: A new class of impossible objects, Computer Aided Drafting, Design and Manufacturing, 25(3):19–25, 2015.

多倍長計算環境 exflib の最新計算環境への対応と普及

藤原 宏志 1

1 京都大学大学院 情報学研究科

e-mail: fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

本講演では,計算科学の可能性を拡げ得る多倍長計算環境の中から,講演者らが開発を進める exflib [2] を対象とし,その普及と教育での利用に重要な簡便なインターフェースの開発,および並列計算環境への対応の現状を報告する.

科学・技術数値計算では種々の近似がなされるが,2 進法に基く電子計算機上では,(0 の近傍にない)実数とその演算は

$$(-1)^s \times 2^e \times \left(1 + \sum_{i=1}^p \frac{b_i}{2^i}\right), \quad s, b_i \in \{0, 1\}$$

の形の数の演算で近似される.これを浮動小数点演算といい,符号 s,指数 e および小数部 $1.b_1b_2\cdots b_p$ の組により近似する.なお小数部に mantissa の語をもちいる文献もあるが,浮動 小数点演算における学術用語としては誤用であることが幾つかの文献で指摘されており(例えば [3, p.214], [4, p.14]),本稿でも小数部と記す.小数部の p は計算に先立って決められるが,今日の殆どの計算機が準拠する IEEE754では,基本的に p=23 の単精度,p=52 の倍精度のふたつを定めており,これらはそれぞれ 10 進で約 7.2 桁,16.0 桁に相当する.

上述のとおり,浮動小数点演算では実数値を 有限桁で近似しており,丸め誤差とよばれる誤 差が混入する.一般的に丸め誤差は十分小さい と思われ,数値解析の中心的話題となることは 少ないものの,その混入が意図しない結果を引 き起こすことが従来より指摘されている [5].さ らに先端の計算科学ではしばしば,不安定性を 有する問題や,特異性の高精度な数値的取り扱いが必要となり,丸め誤差の影響で計算が破綻 する場合がある.これに対して,実数の近似精 度を任意に設定して丸め誤差の影響を軽減し得 る多倍長計算の有効性が示されている.

このような問題の中でも特に講演者を含む 研究グループでは,逆問題に現れる函数方程式の高速・大規模計算のために多倍長計算環境 exflib の設計と実装,およびそれをもちいた解析を進めてきた [6, 7].これら逆問題は一般に

Hadamard の意味で非適切 (ill-posed) であり,数値計算においては安定性の欠如のために,附帯データや離散化の誤差のみならず,計算過程で混入する丸め誤差も急激に増大し,数値計算が破綻する.exflib では丸め誤差が増大しても必要な桁まで達しないよう,小数部に予め充分な精度を確保することで仮想的に丸め誤差のない数値計算を実現し,これにより IEEE754では困難だった特異性の定量的高精度な取り扱い[8] や,不安定スキームの定性的数学理論[9]を実現してきた.

今日,科学・技術向きの計算環境では倍精度 の利用が前提とされることが多く, 多倍長計算 の利用に際しては,改めて利用方法の習得が 必要となる. 多倍長計算の普及には(1) 簡便 なインターフェースの提供,(2)特殊函数の実 装,(3) 高速化が重要と考えられるが,講演者 は exflib の開発にあたり(1) について, C++ 言語や FORTRAN95 におけるクラスや演算子 オーバーロードの機能による改善を図った. 一 方で,数値計算の利用の現場では商用ソフトウ エア MATLAB も広く利用されており,多倍長 計算の普及と(浮動小数点演算に関する丸め誤 差の影響に関する)教育にはこれへの対応が有 効と考え,実装を進めている.また互換性のあ る GNU Octave にも対応し,多倍長計算を容 易に利用できる環境を目指している.また,近 年ではマルチコア CPU が普及し, PC 単体で も OpenMP によって並列計算が容易に実現で きるようになっている.これにより exflib でも, 個々の四則演算ではなく,ループを含む計算全 体の高速化が可能となっており , 上述の (3) の 改善を進めている.

これらの環境はいずれもホームページ [2] よりダウンロードして利用可能である.

2 MATLAB への対応

提案する実装は,MATLABのクラス機能を利用して多倍長数の型 exfloat を実装しており,ユーザはデータ構造の詳細を知らずとも多倍長数を利用することができる.また exfloat型は演算子オーバーロードの機能により,四則

演算や基本的な組み込み関数について,exflibのインターフェースを直接呼び出すことなく,MATLABの組み込み型と同様に演算の記述が可能であり,容易に既存のプログラムを移植することを目指している.

exflib の演算の中心部分はアセンブリ言語または C 言語で記述されており, MATLAB Executable (MEX) 機能を利用して MATLAB から利用することが可能である. 現在までに四則演算, 比較, 10 進での入出力, 連立方程式の求解などの機能を有している. 一方, 複素数型, 丸め方向の制御, 特殊函数, 行列の種々の分解は今後実装の予定である.

表 1 に, MATLAB の対応する多倍長計算機能 Variable Precision Arithmetic (VPA) と提案する環境で,連立一次方程式の求解の速度比を示す. 10 進 100 桁では 15 倍から 20 倍以上,500 桁では 4 倍以上の高速化を実現している.

表 1. Computational Time in Solving Linear Equation Ax=b.

				un	it : sec.
			MATLAB		C++
digits	size	VPA	proposed	ratio	exflib
100	100	1.9	0.12	16	0.0066
	200	13	0.73	17	0.056
	400	101	5.1	20	2.0
	800	838	37	22	16
	1000	1647	71	23	31
500	100	2.5	0.53	4.6	0.018
	200	17	3.9	4.4	1.4
	400	129	30	4.3	11
	800	1032	237	4.4	89
	1000	2008	462	4.3	176

また, GNU Octave は多くの部分で MAT-LAB と互換性をもっており,上述と同様の MEX をもちいて exflib の利用を可能としている.

3 OpenMP への対応

OpenMP では,主として for 文(C++言語), DO 文(FORTRAN) にディレクティブを付与する並列計算が多い.exflib をもちいる場合も, reduce 修飾詞を付与する場合を除き,組み込みの型と同様の記法により for, DO 文の並列実行を可能としている.今後,GNU Octave においても並列化を試みる予定である.

講演では利用例やデモンストレーションを含めて紹介する予定である

謝辞 本研究の推進にあたり,磯祐介教授(京都大学)から貴重なご助言を頂きました.また本研究の一部はJSPS科研費26400198,16H02155,18K18719の助成を受けたものです.

- [1] IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic, IEEE Std 754-1985 (1985).
- [2] http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac. jp/~fujiwara/exflib
- [3] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming, Vol. 2, Seminumerical Algorithms Third ed., Addison-Wesley, 1998.
- [4] J. M. Muller et al., Handbook of Floating-Point Arithmetic, Birkhäuser, 2010.
- [5] G. E. Forsythe, Pitfalls in Computation, or why a Math Book isn't Enough, The American Mathematical Monthly, Vol. 77, pp.931–956, 1970.
- [6] 藤原宏志,多倍長計算の逆問題,非適 切問題への適用,応用数理,Vol. 16 pp. 63-68, 2006.
- [7] 藤原宏志,多倍長計算による高精度計 算の実現に向けて,応用数理,Vol. 21, pp. 247-258, 2011.
- [8] H. Fujiwara, High-Accurate Computation of One-Loop Integrals by Several Hundred Digits Multiple-Precision Arithmetic, 3rd Computational Particle Physics Workshop, PoS(CPP2010)013, 2011.
- [9] N. Higashimori, H. Fujiwara, and Y. Iso, Convergence of finite difference schemes applied to the Cauchy problems of quasi-linear partial differential equations of the normal form, Advances in Difference Equations and Discrete Dynamical Systems, pp. 113– 124 (2017).

PEZY-SC2上における倍々精度 Rgemm の実装と評価

菱沼 利彰 1, 中田 真秀 2

¹ 株式会社 PEZY Computing, ² 理化学研究所

e-mail: hishinuma@pezy.co.jp

1 はじめに

計算科学において,数値演算に用いられる倍精度浮動小数点数は演算精度が原因で解が得られなかったり計算時間が増大することがある.これまで様々な高精度演算手法を用いて誤差の影響を低減し,応用が行われてきた[1].今後,計算機の進化に伴う解くべき問題の大規模化,および小規模でも数値的に難しい問題を解くため,高精度演算の需要は高まると考えられる.

比較的低コストかつ高速に高精度演算が実現可能な、倍々精度演算を用いる手法がある。倍精度浮動小数点数を2つをベクトルのように用いてほぼ四倍精度を実現できる[2].2つの倍精度浮動小数点数について加算および乗算を行うと一般に誤差が入る浮動小数点数同士の加算、乗算および、誤差は倍精度演算だけで厳密に評価でき、これを利用して倍精度演算20から40回程度で処理できるため古くから広く用いられている[3]。また、現在でもライブラリの開発[2]や、アクセラレータ等による高速化[4,3]が行われている。

我々は、MIMD型メニーコアプロセッサPEZY-SC2向けに高精度演算ライブラリQD[2]の倍々精度演算機能を移植し、最適化を行い、倍々精度行列-行列積の性能評価を行い、倍々精度演算のピーク性能の74%程度の結果を得た.

2 倍々精度ライブラリ pzqd

2.1 PEZY-SC2 のアーキテクチャ

PEZY-SC2 は MIMD アーキテクチャを採用しており、2048 個のコアが自身のプログラムカウンタをもつことで各コア 8 スレッドを別々に動作させることが可能である。GPU などと比べて条件分岐などによる性能劣化が起こりにくい。また、加算と乗算を 1 命令で行うことができる MAD 命令が使用可能である。

各コアにはスクラッチパッドメモリが搭載されており、スレッドごとのスタック領域が確保され、余剰領域をユーザがコア内共有のローカルメモリ空間として使用可能である.

2.2 倍々精度ライブラリ pzqd の実装

PEZY-SC2 上で動作するプログラムの開発には、OpenCL ライクなプログラミング環境である PZCL を使用する. PZCL ではデバイスで動作するカーネルプログラムと、データ転送やカーネル呼び出しなどの制御を行うホストCPU 用のホストプログラムを分けて作成する.

我々は開発中の SDK の C++の構文を利用し、QD のヘッダで定義された倍々精度の数学関数・算術演算の演算子などをカーネルプログラムで利用できる pzqd ライブラリを開発した.

これにより,ホストプログラムから転送された QD ライブラリの倍々精度型を,カーネルプログラムから扱うことができる.

3 数值実験

3.1 実験環境

我々は実験にあたり Intel Xeon D-1571 をホスト CPU とした 1984 コアモデルの PEZY-SC2 プロセッサを使用した. PEZY-SC2 の倍精度ピーク性能は $0.7~[{\rm GHz}] \times 1984~[{\rm cores}] \times 2~({\rm MAD 演算}) = 2777~{\rm GFLOPS}$ で,DDR4 2400 MHz,64 GBメモリ(メモリ帯域 76 GB/s)と,40 MBの LLC メモリ,コアあたり 20 KBのスクラッチパッドメモリを搭載している.

OS は CentOS 7.2, ホストプログラムのコンパイラは gcc 4.8.5, カーネルプログラムのコンパイラは pzSDK4.0 + LLVM 3.6.2 を用いた.

比較対象として, Intel Xeon E5-2618L@2.3 GHz, 8core, 64GB を用いた.

3.2 PEZY-SC2 における Rgemm

倍々精度の Rgemm の核となる倍々精度積和 演算は倍精度加算 35 回,乗算 9 回から構成される。 PEZY-SC2 のピーク性能は MAD 命令 で計算するが倍々精度演算は加算と乗算の回数 が不均一なため,(35+9)/2=22 サイクルでは処理できず,全ての乗算に対して MAD 命令 を利用したとしても 35 サイクルかかる。従っ て倍々精度の積和演算は $2777/35 \times 22 = 1745$ GFLOPS をピーク性能とした.

また、比較対象の CPU は AVX2 を用いない場合、理論ピーク性能は 73.6 GFLOPS で、上述の倍々精度演算の加算、乗算の不均一さを考慮すると、46 GFLOPS が倍々精度演算のピーク性能となる.

行列-行列演算の高速化のために 2 × 2 のブロック化を行い,ブロック化した小行列と倍々精度演算に必要な中間変数をすべてローカルメモリ空間に確保するようにした.

このとき,行列サイズが大きくなると必要なデータサイズが増大し,ローカルメモリ空間のサイズを超えてしまうケースがあったため,SDKにスレッド数を減らす機能を実装しスタック領域を減らすことで,1スレッドが使えるローカルメモリ空間のサイズを増やせるようにした.

3.3 実験結果

図 1 に倍々精度 Rgemm の性能を示す.ホスト CPU と PEZY-SC2 間のデータ転送時間は含めていない.ローカルメモリを使用しない場合の結果を "no localmem" に示した.また,実験に用いた行列は乱数で生成された正方密行列である. 縦軸は性能で演算量は $44 \times N^3$ として求めた. 横軸は行列サイズである.

このとき、高速化のために倍々精度の加算、乗算をすべてインライン展開しているが、スタックサイズが増大するため8スレッドではローカルメモリ空間にデータが置けず、行列サイズ1900までしか計算できない。そのため、pzqdライブラリでは行列サイズに合わせてスレッド数を変えるようにした。

また、CPUではブロック化、ループアンローリングを施したコードを OpenMP で 16 スレッド並列したものを用いた.

実験の結果、スレッド数、ローカルメモリ空間の使用の有無にかかわらず CPU より高速で、ローカルメモリ空間を使わない場合は性能は150GFLOPS 程度だが、ローカルメモリを用いることで、8 スレッドで最大で1291 GFLOPSで、ピーク性能の74%、倍々精度換算で約53 GFLOPSとなった。行列サイズ600でも894 GFLOPS出ており、小さいサイズの問題でも性能が高い。4 スレッドにすることで行列サイズに関わらず計算できるようになるが、8 スレッドと比べて10%から20%遅い。

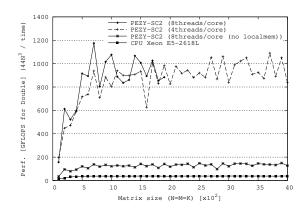


図 1. 倍々精度 Rgemm の性能 (カーネルのみ)

4 結論

我々はMIMD型メニーコアプロセッサ "PEZY-SC2" 上に高精度演算ライブラリ QD の倍々精度演算機能を移植し、それを用いて倍々精度Rgemm を実装し、性能評価を行った。

スレッド数を減らしてローカルメモリ空間に 倍々精度演算に必要な中間変数や行列のブロック化をした小行列などを入れることで, どの 行列サイズでも計算できるようになり, 性能は 倍々精度換算で最大 58GFlops, 倍精度換算で 1291 GFlops, ピーク性能の 74 %程度の結果 が得られた.

今後の課題として、スタックサイズの削減や、8スレッドでも計算できるサイズを大きくしていくことが考えられる.

- [1] D. H. Bailey, High-Precision Floating-Point Arithmetic in Scientific Computation, computing in Science and Engineering, pp.54-61, 2005.
- [2] Y. Hida, QD library, http: //crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/ mpdist/ and reference therein.
- [3] M. Nakata, et al., "A fast implementation of matrix-matrix product in double-double precision on NVIDIA C2050 and its application to semidenite programming", ICNC2012, pp.68-75, 2012.
- [4] D. Mukunoki, et al., "Implementation and Evaluation of Quadruple Precision BLAS Functions on GPUs", PARA2010, pp.249-259, 2010.

コピュラを用いた VaR の推定について

○ Molina Barreto Andres Mauricio¹, 石村 直之 ²

1中央大学大学院商学研究科,2中央大学商学部

e-mail: ammolinaba@unal.edu.co, naoyuki@tamacc.chuo-u.ac.jp

1 はじめに

Value at risk (VaR) は、定量的にリスクを表す量として導入された。その概念が理解しやすいこともあり、現在では、リスク管理において基本的かつ重要な指標の一つとしてよく用いられている (例えば [1] 参照).

一方, コピュラ (copula) あるいはコピュラ関数は, リスク要因の間の, 主に非線形の関係を扱う手法として近年大いに研究されている. リスク管理では, 各リスク要因の関係が重要であり, よって VaR にコピュラを用いることは自然な発想と考えられる.

この講演では、コピュラを用いた VaR の推定 手法について考察する. 先行研究の一つに H.P. Palaro and L.K. Hotta [2] があるが、計算の詳 細は不明である. ここでは簡便な計算手法を提 案し、株式指数の portfolio に対する実際のデー タの VaR 推定の計算を実行した.

2 準備

まず VaR について復習しておく.

X を確率変数とし, $F_X(x) = P(X \le x)$ を 分布関数,また $F_X^{(-1)}(t) = \min\{x \mid F_X(x) \le t\}$ をその逆関数とする.このとき, $0 < \alpha \le 1$ に 対して水準 α の VaR_{α} とは

$$\operatorname{VaR}_{\alpha}(X) := F_X^{(-1)}(\alpha)$$

により定められる. 一方, conditional VaR と呼ばれる $CVaR_{\alpha}$ は

$$\text{CVaR}_{\alpha}(X) := \frac{1}{\alpha} \int_{0}^{\alpha} F_{X}^{(-1)}(t) dt$$

により定められる.

次にコピュラ (copula) について復習しておく. 定義. $I^2:=[0,1]\times[0,1]$ で定義され I:=[0,1] に値をもつ関数 C がコピュラであるとは,次の条件を満たすときにいう.

(i) 任意の $(u,v) \in I^2$ に対して

$$C(u,0) = C(0,v) = 0,$$

 $C(u,1) = u, C(1,v) = v.$ (1)

(ii) $u_1 \leq u_2$, $v_1 \leq v_2$ を満たす任意の $(u_i, v_i) \in I^2$ (i = 1, 2) に対して

$$C(u_1, v_1) - C(u_1, v_2) - C(u_2, v_1) + C(u_2, v_2) \ge 0.$$
(2)

条件(2)は the 2-increasing condition と呼ばれている. コピュラは定義から連続である.

次の定理は A. Sklar により最初に見いだされ、コピュラの応用上の柔軟性を示すものである。 定理 (Sklar's theorem). H を 2 変数の同時分布で、その周辺分布を F、G とする. すなわち

$$\lim_{x \to \infty} H(x, y) = G(y), \quad \lim_{y \to \infty} H(x, y) = F(x).$$

このとき, $\operatorname{Ran} F \times \operatorname{Ran} G$ において一意に定まるコピュラC で

$$H(x,y) = C(F(x), G(y)) \tag{3}$$

を満たすものが存在する. 逆に, C を任意のコピュラとし, F, G を分布関数としたとき, 上の (3) で定められた H は, 周辺分布が F, G である同時分布となる.

このSklarの定理により、同時分布は、コピュラと周辺分布に分割されることが示された.

もしF, Gが独立ならば, C(u,v) = uvとなり, これは積コピュラであり, コピュラの典型例の一つである.

この講演では、次の SJC(symmetrized Joe-Clayton) コピュラも用いる. 例として挙げておく

$$C_{SJC}(u, v \mid \tau_U, \tau_L) = \frac{1}{2} C_{JC}(u, v \mid \tau_U, \tau_L)$$

+ $\frac{1}{2} C_{JC}(1 - u, 1 - v \mid \tau_L, \tau_U) + u + v - 1.$

ただし、 $0 < \tau_U, \tau_L < 1$ であり

$$C_{JC}(u, v \mid \tau_U, \tau_L) = 1 - ((1 - (1 - u)^{\kappa})^{-\gamma} + (1 - (1 - v)^{\kappa})^{-\gamma} - 1)^{-1/\gamma})^{1/\kappa}$$

は Joe-Clayton コピュラ,また

$$\kappa = \frac{1}{\log_2(2 - \tau_U)}, \quad \tau = -\frac{1}{\log_2 \tau_L}.$$

3 モデル

時系列 $\{X_{i,t}\}_{i=1,2}$ に対するモデルは AR(1)-GARCH(1,1), あるいはその類似 AR(1)-TGARCH(1,1) を用いる([2,3] 参照).

$$\begin{split} X_{i,t} &= \mu_i + \phi_i X_{i,t-1} + \varepsilon_{i,t} \\ \varepsilon_{i,t} &= \sigma_{i,t} \eta_{i,t} \qquad (i = 1, 2) \\ \sigma_{i,t}^2 &= \alpha_i + \beta_i \varepsilon_{i,t-1}^2 + \gamma_i \sigma_{i,t-1}^2. \end{split}$$

ここで、 $\{\eta_{i,t}\}_{i=1,2}$ は平均0分散1の white noise 過程であり、定数 α_i 、 β_i 、 γ_i は $\beta_i + \gamma_i < 1$ を満たす、 μ_i 、 ϕ_i は parameter である.データから推定することになる.

4 数値計算の実行

水準 α のt-1における VaR_{α} は、簡単のため単純平均をとった

$$Z_t = \frac{1}{2}X_{1,t} + \frac{1}{2}X_{2,t}$$

としたとき

$$P(Z_t \le z^*) = \alpha$$

を満たす z^* として得られる。ただし, $P(Z_t \le z)$ の計算は,コピュラを含んだ積分として与えられ,ここの計算手法が問題となる.

計算は Matlab を用いて行われた.

5 おしまいに

VaR を求めることは実務的にも重要であり、解析的なものから実用的なものまで多くの手法が提出されている。本講演では、コピュラ関数を含む場合に、株式指数の portfolio に対する VaR の推定を、簡便な計算手法によって実行した。我々の手法は実際に有効であることが確かめられた。他のデータを用いて、この手法の有効性を確認することが今後の課題の一つである。

謝辞 第2著者の研究は、科研費基盤研究(C) (15K04991) の研究活動の一環である.

参考文献

- [1] Darrell Duffie and Jun Pan, An overview of Value at risk, Journal of Derivatives, Vol. 4 (1997), 7–49.
- [2] Helder Parra Palaro and Luis Koodi Hotta, Using conditional copula to estimate Value at Risk, Journal of Data Science, Vol. 4 (2006), 93–115.

[3] Dean Fantazzini, Dynamic copula modelling for Value at Risk, Frontiers in Finance and Economics, Vol. 5 (2008), 72–108.

最大値に依存する金融商品のリスク計算について

中津 智則

芝浦工業大学

e-mail: nakatu.tomonori@gmail.com

1 概要

株価モデルを確率微分方程式の解とした時、その解の最大値に依存する金融商品(例えばルックバックオプションやバリアオプション)のリスク計算は非常に重要な問題である。この問題は [1] によってデルタとガンマと呼ばれるリスクが、[4] によってベガと呼ばれるリスクがそれぞれ考察されている。

上記の論文では確率微分方程式の係数が時間に依存しないもののみが扱われているが、より現実的な Local Volatility モデルでは、係数が時間に依存する確率微分方程式を扱うことが自然である。本講演では [1] と [4] の結果の一部を、係数が時間に依存する確率微分方程式の場合に拡張した結果を紹介する。

2 デルタの計算

X t

$$X_t = x_0 + \int_0^t b(s, X_s) ds + \int_0^t \sigma_1(s) \sigma_2(X_s) dW_s$$

の解とし、時刻tにおける株価 S_t を

$$S_t = e^{X_t}$$

で定義する。

仮定

- (A1) 一様に $b(t,\cdot) \in C_b^1(\mathbb{R};\mathbb{R})$ である。
- (A2) $\sigma_1(\cdot) \in C^0(\mathbb{R}_+; \mathbb{R}), \sigma_2(\cdot) \in C_b^2(\mathbb{R}; \mathbb{R})$ であり、さらにある C > 0 が存在し $|\sigma_1(t)\sigma_2(x)| \geq C$ が任意の $(t,x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$ に対して成り立つ。
- (A3) $f(\cdot,\cdot) \in C_b^1(\mathbb{R}^2_+;\mathbb{R}_+)$ であり、ある $a_0 > 0$ が存在し、 f(x,y) = 0 が全ての $x < a_0, y \geq 0$ に対して成り立つ。

注意 1. (A3) のペイオフ関数 f のサポートに関する条件は以下の部分積分公式を導く為の技術的な条件であり、例えばバリアオプションはバリアを株価の初期値よりも高く設定するのでサポート条件は実用的には問題がない。

定理 2. ある確率変数 H が存在し

$$\frac{\partial}{\partial x_0} E^P \left[f \left(\max_{0 \le t \le T} S_t, S_T \right) \right]$$
$$= E^P \left[f \left(\max_{0 \le t \le T} S_t, S_T \right) H \right]$$

が成り立つ。

注意 3. 右辺にはペイオフ関数の微分が現れない(部分積分公式)。

例えば $f(x,y) = \mathbf{1}_{[U,\infty)}(x)(y-K)_+$ の場合、素朴に微分を計算するとインディケーター関数の微分(デルタ関数)が現れ、計算が安定しなくなる。

3 ベガの計算

Local Volatility モデルでは Volatility は定数ではなく、関数 (Volatility surface) で与えられる為、ベガを計算する為には関数の方向微分を計算する必要がある。株価過程を

$$\begin{cases} dS_t^{\varepsilon} = b(t, S_t^{\varepsilon})dt + \sigma_1(t)(\sigma_2 + \varepsilon \hat{\sigma}_2)(S_t^{\varepsilon})dW_t \\ S_t^{\varepsilon} = S_0 \end{cases}$$

とし、(ある $\varepsilon_0 > 0$ が存在し $\varepsilon \in (-\varepsilon_0, \varepsilon_0)$ とする。)

$$\Pi^{\varepsilon} = E^{P} \left[f \left(\max_{0 < t < T} S_{t}^{\varepsilon}, S_{T}^{\varepsilon} \right) \right]$$

と定義し、 $\frac{\partial \Pi^{\varepsilon}}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon=0}$ を計算する。 仮定

- (B1) 一様に $b(t,\cdot) \in C_b^1(\mathbb{R};\mathbb{R})$ である。
- (B2) $\sigma_1(\cdot) \in C^0(\mathbb{R}_+; \mathbb{R}), \sigma_2(\cdot), \hat{\sigma}_2(\cdot) \in C_b^2(\mathbb{R}; \mathbb{R})$ であり、さらにある C > 0 が存在し $\sigma_1(t)(\sigma_2(x) + \varepsilon \hat{\sigma}_2(x)) \ge C$ が任意の $(t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \ \succeq \varepsilon \in (-\varepsilon_0, \varepsilon_0)$ に対して成り立つ。
- **(B3)** $f(\cdot, \cdot) \in C_b^1(\mathbb{R}_+^2; \mathbb{R}_+)$ である。
- 注意 4. \bullet $\frac{\partial \Pi^{\varepsilon}}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon=0}$ は Volatility surface が $\sigma_1(t)\sigma_2(x)$ から $\sigma_1(t)\hat{\sigma}_2(x)$ の方向へ動い た時のリスクを表している。(つまり、時間の関数は固定して空間の関数の変化の みをとらえている。)

以下のベガに対する式は部分積分公式ではない。その為、ペイオフ関数 f に対するサポート条件は必要なくなる。

定理 5. ある確率変数 H_1, H_2, H_3 が存在し

$$\begin{split} \frac{\partial \Pi^{\varepsilon}}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0} &= E^{P} \left[\partial_{1} f \left(\max_{0 \leq t \leq T} S_{t}^{0}, S_{T}^{0} \right) H_{1} \right] \\ &+ E^{P} \left[\partial_{2} f \left(\max_{0 \leq t \leq T} S_{t}^{0}, S_{T}^{0} \right) H_{2} \right] \\ &+ E^{P} \left[f \left(\max_{0 \leq t \leq T} S_{t}^{0}, S_{T}^{0} \right) H_{3} \right] \end{split}$$

が成り立つ。

注意 6. この式はベガが 3 つのリスクに分解されるということを示している。

- [1] Gobet, E., Kohatsu-Higa, A., Computation of greeks for barrier and lookback options using Malliavin calculus., Electron. Commun. Probab. 8, 51-62 (2003).
- [2] Hayashi, M., Kohatsu-Higa, A., Smoothness of the distribution of the supremum of a multi-dimensional diffusion process., Potential Anal. 38(1), 57-77 (2013).
- [3] Nakatsu, T., Integration by parts formulas concerning maxima of some SDEs with applications to study on density functions., Stoch. Anal. Appl. **34**(2), 293-317 (2016).
- [4] Nakatsu, T., Volatility risk structure for options depending on extrema., J. Comput. Finance 21(3), 105-122 (2017).
- [5] Nualart, D., The Malliavin Calculus and Related Topics, 2nd edition. Probability and its Applications (New York)., Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [6] Shigekawa, I., Stochastic analysis. Translations of Mathematical Monographs, vol. 224., American Mathematical Society, 2004.

A Study on Ruin Probability of a Mortgage Loan with Risk Factors

Jirô Akahori¹, Corina Constantinescu², Yuri Imamura^{1,2}
¹Ritsumeikan University1, ²University of Liverpool2, ^{1,2}Tokyo University of Science e-mail: imamuray@rs.tus.ac.jp

1 Introduction

In the present paper we study a mathematical model of mortgage loan with risk from lender's side. The model is inspired by a framework to hedge the so-called "double debt problem", introduced by Hisashi Ohgaki [1]. After the Great East Japan Earthquake, a lot of people who lost their houses are still kept under the due of the mortgage loan, which made their recovery rather difficult. It is commonly called double debt problem. As Japan is exposed to the risk of further big earthquakes in the future, Ohgaki proposed a practical framework within the regime of Japanese system, where the mortgage loan is combined with, like a CAT bond, a marketized earthquake insurance.

Aiming to evaluate the risks associated with his model, the present paper studies "ruin probability" of the loan based on a model that can be seen as an exponentiation of Cramér-Lundberg model, which is a classical model of non-life insurance (see e.g. [2]).

Consider an initial loan u given to a cohort of borrowers (as mortgages) that are paying it back continuously at a constant rate c. Further, consider that disasters occur at random times T_i and after each disaster i only a ratio e^{-X_i} percentage of borrowers are left to repay the loan. Thus, as time passes and disaster occur we have fewer and fewer borrowers paying back the loan (at the same rate c.) We define ruin as the event of the cash contribution process U_t never reaching u", meaning that the borrowers will never fully repay the loan. Thus probability of ruin $\psi(u)$ will be the probability of the process U_t never crossing the level u, and the "survival probability" will mean crossing level u for the first time.

2 A Mortgage Loan with Risk Factors

Let (T_i, X_i) , $i = 1, 2 \cdots$ be a marked point process and c be a positive constant. In our model, the cash flow process of the mortgage loan at time t is given by

$$U_{t} = c \sum_{n=0}^{\infty} 1_{[T_{n}, T_{n+1}]}(t) \{ (t - T_{n}) e^{-\sum_{i=1}^{n} X_{i}} + \sum_{i=1}^{n} (T_{i} - T_{i-1}) e^{-\sum_{k=1}^{i-1} X_{k}} \},$$

where we regard T_i as the occurrence time of the *i*-th disaster and X_i as the rate of the borrowers who survived the *i*-th disaster, with the requirement $X_i > 0$ (it cannot be zero).

Let τ_u be the first hitting time of u > 0, meaning the time the process U (which starts at zero) reaches u for the first time, which means the time the loan has been paid back in full. We shall study the "probability of non-ruin" or probability of full loan repayment

$$\psi(u) := P(\tau_u < \infty),$$

and its "probability of ruin", or probability of loan default

$$\phi(u) := P(\tau_u = \infty) = 1 - \psi(u),$$

where τ_u is the first hitting time of U at u > 0.

3 Ruin Probability of a Mortgage Loan

Let $W_i = T_i - T_{i-1}$. We assume that (W_i, X_i) , $i = 1, \dots$, are independent and they all have a common joint distribution with $(W_1, X_1) = (W, X)$. For a bounded measurable function h, we set

$$\mathcal{K}h(u) := E\left[1_{\{cW < u\}}h(e^X(u - cW))\right].$$

Then clearly \mathcal{K} defines a linear transformation on $L^{\infty}(\mathbf{R}_{+})$.

Theorem 1 The survival probability ψ satisfies the equation

$$\psi = \psi_0 + \mathcal{K}\psi,$$

where

$$\psi_0(u) := P(cW \ge u), \quad u \in \mathbf{R}_+.$$

Lemma 2 Suppose that X is non-zero with positive probability. Then the linear operator \mathcal{K} is bounded with $\|\mathcal{K}\|_p < 1$ for any $p \geq 1$.

Lemma 3 Suppose that the first moment of W is finite. Then $\psi_0 \in \cap_{p \geq 1} L^p(\mathbf{R}_+)$.

Theorem 4 Under the assumptions of Lemmas 2 and 3, we have that

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{K}^n \psi_0 \in L(\cap_{p \ge 1} L^p(\mathbf{R}_+)),$$

and

$$\phi = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{K}^n \psi_0.$$

Proposition 5 We assume that X and W are independent and the laws of X and W are Exponentially distributed with parameter α and λ , respectively. Then ϕ is given by

$$\phi(u) = \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} \int_0^{\frac{\lambda u}{c}} z^{\alpha} \exp(-z) dz.$$

.....

- [1] Hisashi Ohgaki, 将来の二重債務問題をいかに回避するか: リスク・エクスチェンジ市場の創設にむけて, 立命館法学, 13-3 (2013), pp. 219–295
- [2] Thomas Mikosch, Non-Life Insurance Mathematics: An Introduction with the Poisson Process, 2nd eds, Springer, 2009

非線形固有値問題に対する block Arnoldi 法

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 : 1123581321 abc@keio.jp , 2 nodera@math.keio.ac.jp

1 はじめに

非線形固有値問題を考える.ただし,扱う行列はパラメーターに依存する.例えば,多項式固有値問題から生じる高次な微分方程式がある.この微分方程式は固体力学や流体力学などで登場する.本発表は,この解法としてArnoldi法を発展させた infinite Arnoldi法, それをブロック化した block infinite Arnoldi法, リスタートを用いた restarted block infinite Arnoldi法について考える.その目的は反復回数の減少,計算時間の短縮,メモリの節約である.

最初に、先行研究である infinite Arnoldi 法と, block infinite Arnoldi 法とそのリスタートの有効性について述べる. 以下のような非線形固有値問題:

$$M(\lambda) x = 0, \quad \Omega \subset \mathbb{C}, \quad M: \Omega \to \mathbb{C}^{n \times n}$$
 (1)

に対して、固有値と固有ベクトル (λ, x) を求めることを考える.

$$(\lambda, x) \in \Omega \times \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$$

式 (1) の固有値問題を解くための解法として Trefethen [1, pp. 250–255] で記載されている Arnoldi 法がある. これを発展させた方法として Jarlebring [2] で提案された infinite Arnoldi 法 がある. 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, Saad [3, pp. 125-162] で提案された Block Arnoldi 法や, Van Beeumen [4] で提案された low-rank infinite Arnoldi 法がある. これは infinite Arnoldi 法を改良した算法 であるが, すべての非線形固有値問題には適用できない.

Infinite Arnoldi 法は次の節で定義する作用素 Bを用いて計算することになる.一方,block infinite Arnoldi 法はブロック化して計算することで反復回数の減少や計算時間の短縮を見込める手法である.さらにリスタートを行うことで,計算量の減少が期待出来る可能性がある.そこで本発表では,restarted block infinite Arnoldi 法を提案し,数値実験によりその有効性について述べる.

2 線形作用素固有値問題

最初に,作用素 \mathcal{B} を導入して,線形な固有値問題の形式に(1)を変形する.行列 B_i, M_i を $n \times n$ 行列として

$$B(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} B_i \frac{\lambda^i}{i!}, M(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} M_i \frac{\lambda^i}{i!}$$

$$B(\lambda) := \frac{1}{\lambda} M(0)^{-1} \left(M(0) - M(\lambda) \right)$$

と置くと次式が得られる.

$$B(\lambda) x = \frac{1}{\lambda} x \tag{2}$$

このとき、作用素 \mathcal{B} を導入すると、 (2) の解 (λ,x) を求めることと、 $\mathcal{B}\phi=\frac{1}{\lambda}\phi$ の解 (λ,ϕ) を求めることは同値である.これは文献 [4] を 参照しほしい.

3 線形作用素を用いた Arnoldi 法

ここからは、式 (2) の解 (λ,x) を求める代わりに、 $\mathcal{B}\phi = \frac{1}{\lambda}\phi$ の解 (λ,ϕ) を求めることを考える. Infinite Arnoldi 法では、作用素 \mathcal{B} を用いると、クリロフ部分空間は次式のように記述できる.

$$\mathcal{K}_k(\mathcal{B}, \phi) := \operatorname{span}\{\phi, \mathcal{B}\phi, \cdots, \mathcal{B}^{k-1}\phi\}$$

作用素 \mathcal{B} を行列形式で表し,N を反復回数とする.ここで, $x_i \in \mathbb{C}^{n \times 1} \ (0 \leq i \leq N-1)$, $y_i \in \mathbb{C}^{n \times 1} \ (0 \leq i \leq N)$ を用いると,次式が得られる.

$$\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 & B_1 & \cdots & B_{N-1} & B_N \\ I & & & & & \\ & \frac{I}{2} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \frac{I}{N} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ 0 \end{pmatrix}$$

前の反復で生成された固有ベクトルにこの作用素を作用させた時の流れが図 1 のようになる. これを展開して数式で表すと,次式のようになる.

$$\begin{cases} \left[y_1 \cdots y_N \right] = \left[\frac{x_0}{1} \cdots \frac{x_{N-1}}{N} \right] \\ y_0 = \sum_{i=0}^{N-1} B_i x_i \end{cases}$$

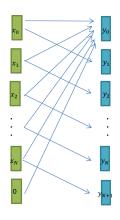


図 1. Finite Arnoldi method

Block infinite Arnoldi 法はこれをブロック化をしたもので、rをブロックサイズと置くと、 $X_i \in \mathbb{C}^{nr \times r} (0 \leq i \leq N-1), Y_i \in \mathbb{C}^{nr \times r} (0 \leq i \leq N)$ のようにになる。さらに、M=Nrと置くと、次式が得られる。

$$\left(\begin{array}{c} Y_0 \\ \vdots \\ Y_{N-1} \\ Y_N \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc} B_0 & B_1 & \cdots & B_M \\ I & & & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & \frac{I}{M} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} X_0 \\ \vdots \\ X_{N-1} \\ 0 \end{array} \right)$$

この後で、左辺の行列をブロック形式のままで直交化する。さらに、これを QR 分解することで、ブロック化された固有ベクトルと、 $r \times r$ のブロックでブロック化されたヘッセンベルグ行列が生成される。これを次の反復で使う。

4 リスタート

リスタートは次のように行う。最初に Arnoldi 法で求め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。収束してる固有値を行列 S の左上に移動させるために、 Direct swapping algorithm [5] を用いて変形する。ここで、収束している固有値の個数を s 個とすると、 $S_{11} \in \mathbb{C}(s \times s)$ となり、 $S_{22} \in \mathbb{C}((k-s) \times (k-s))$ 、 $S_{33} \in \mathbb{C}((m-k) \times (m-k))$ となる。この $m \times m$ 上三角行列の右下の部分を切り取ると次式が得られる。

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ 0 & S_{22} & S_{23} \\ 0 & 0 & S_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ 0 & S_{22} \end{pmatrix}$$
(3)

ただし、式 (3) は $k \times k$ の上三角行列であり、 2×2 ブロック対角行列である式 (3) の右側の小行列のみを用いることになる. これをヘッセンベルグ行列の代わりに用いて、次の反復を行えばよい.

表 1. infinite Arnoldi 法のブロック化とリスタート

Algorithm	実行時間 (s)	反復回数(it)
IA	2.33	30
BIA	2.09	20
RIA	2.10	30
RBIA	1.38	20

5 数值実験

 $A_0, A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{1000 \times 1000}$ を三重対角行列とし、次の $M(\lambda)$ を係数とする問題を考える[4].

$$M(\lambda) = A_0 + \lambda A_1 + A_2 \lambda^4 + A_3 \sin(\lambda)$$

数値実験は linux(CentOS 6.9) を用いて CPU: Intel(R) Core(TM) i7-4790 CPU @ 3.60GHz, メモリ: 32GB を使用し, MATLAB 2017b を用いて計算を行った. この問題に対する実験結果を上の表 1 に示す. この表には, 収束した固有値が 10 個出てくるまでの計算時間, 反復回数を記述した. 表の上から, Infinite Arnoldi 法, Block infinite Arnoldi 法, Restarted infinite Arnoldi 法, Restarted block infinite Arnoldi 法である. それぞれの計算時間, 反復回数を表している. この表から計算時間, 反復回数共に, Restarted block infinite Arnoldi 法が最も良いことがわかる.

- [1] Trefethen L. N. and Bau, D., "Numerical Linear Algebra," SIAM, 1997.
- [2] Jarlebring, E., Michiels, W. and Meerbergen, K., "A linear eigenvalue algorithm for the nonlinear eigenvalue problem," Springer, Numerische Mathematik, Vol. 122, pp. 169–195, 2012.
- [3] Saad, Y., "Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems," SIAM, 2011.
- [4] Van Beeumen, R., Jarlebring, E. and Michiels, W., "A rank-exploiting infinite Arnoldi algorithm for nonlinear eigenvalue problems," Numerical Linear Algebra and Applications, Vol. 23, pp. 607–628, 2016.
- [5] Bai, Z. and Demmel, J. W., "On swapping diagonal blocks in real Schur form," Linear Algebra and its Applications, Vol. 186, pp. 73–95, 1993.

少数のレゾルベントの線形結合の多項式をフィルタとして用いた 一般固有値問題の解法

村上 弘1

1 首都大学東京

e-mail: mrkmhrsh@tmu.ac.jp

1 概要

複素エルミート対称定値一般固有値問題の固有対で固有値が指定区間にあるものをフィルタを用いて解く.フィルタはうまく調整された「少数のレゾルベントの線形結合の多項式」とするが,ここでは設計と構成の簡易さから多項式にはチェビシェフ多項式を用いる.レゾルベントの作用を与える連立1次方程式を直接法を用いて解く場合には,その演算量の大部分を行列分解が占めるので,用いるレゾルベントの数を少なくすることが演算量の面からは有利になる.

2 はじめに

係数行列 $A \ge B$ が複素エルミート対称で B は正定値である一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ が 与えられたとき,固有値が区間 [a,b] にある固有対をフィルタ対角化法を用いて求める(この固有値問題の固有値はすべて実数なので, $A \ge B$ が実対称の場合のフィルタ解法と類似性が高い).いまシフト ρ のレゾルベントを $R(\rho) \equiv (A-\rho B)^{-1}B$ とする.レゾルベントの縦ベクトルの組 V への作用 $X=R(\rho)V$ は,係数が $C(\rho)=A-\rho B$ で,右辺の組が BV の連立 1 次方程式 $C(\rho)$ X=BV を解くことで実現する.

虚数シフトのレゾルベント 16~32 個の線形結合で非常に良い特性の楕円フィルタが得られる. もしも連立 1 次方程式を直接法で解くのであればレゾルベントの数の半分の行列分解が要る $(A \ \ \, B \ \, O)$ であるのでシフトが複素共役対の関係にある行列の分解はその片方があれば良く、必要な行列分解の数は 8~16 個になる).

必要な行列分解の数を減らすために、フィルタの構成として「実数シフトのレゾルベント1つの多項式」あるいは「複素共役な虚数をシフトとするレゾルベント2個の項の和の多項式」を採用すれば、必要な行列分解の数は1つになるが急峻な遮断特性を得ることが難しい。そこでここではフィルタの構成を「少数のレゾルベントの線形結合の多項式」とすることを試みる.

3 実数シフトのレゾルベント1つの多項 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とする). 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 $\mathcal{F}=Q(\mathcal{R}(\rho))$ ならば,固有対 (λ,\mathbf{v}) に対しては $\mathcal{F}\mathbf{v}=f(\lambda)\mathbf{v}$ であり,伝達関数は $f(\lambda)=Q(1/(\lambda-\rho))$ で λ の有理関数である.

 $\lambda \in [a,b]$ と $t \in [0,1]$ の間の 1 次変換 $\lambda = a + (b-a)t$ で λ の正規化座標 t を定義する。定義域 $[0,\infty)$ でパラメタ $\mu > 1$ と $\sigma > 0$ を持つ 1 次有理関数を $x(t) \equiv (\mu + \sigma)/(t + \sigma)$ とする。正規化座標 t で $f(\lambda)$ を表した有理関数 $g(t) \equiv f(\lambda)$ が,n 次多項式 P を用いて g(t) = P(x(t)) と表わされるなら $f(\lambda) = P(\ell/(\lambda - \rho))$ であり,フィルタは $\mathcal{F} = P(\ell \mathcal{R}(\rho))$ となる,ここで $\ell \equiv (\mu + \sigma)(b-a)$, $\rho \equiv a - (b-a)\sigma$ である。多項式 P とパラメタ μ と σ をうまく調整して,フィルタ \mathcal{F} が固有値が区間 [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 有理関数を合成した伝達関数

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。そうして通過域 [0,1] での g(t) の最大値は 1 に規格化し,最小値を g_p とする。また阻止域 $[\mu,\infty)$ での |g(t)| の最大値を g_s とする。これら g_p と g_s を伝達率の閾値と呼ぶ.

関数合成に用いる実有理関数 h(t) は、定義域が $[0,\infty)$ で以下の 3条件を満たすとする。ただし $\pm\infty$ も関数値に含める。 1) [0,1] を [0,1] 全体に写す。 2) $(1,\mu')$ で単調増加で、h(1)=1, $h(\mu')=\mu$. 3) $[\mu',\infty)$ では $|h(t)+\sigma|\geq |\mu+\sigma|$. h(t) を g(t) に合成した関数 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。いま 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、伝達率の閾値 g_p と g_s は g'(t) と g(t) で共通で、遷移域の幅は g(t) では $\mu-1$, g'(t) では $\mu'-1$ となる. さらに h(t) が偶関数であれば g'(t) も偶関数になるので、定義域や各区域を原点対称に拡大できる.

電気回路理論の4種類の典型フィルタの型 Butterworth, Chebyshev, Inverse-Chebyshev および Elliptic のうちで、今回は最後の Elliptic 型を除いた3種類の構成法を模倣する関数の合 成を「簡易構成」の伝達関数に対して行なう.

合成用の関数 h(t) は t の k 次の有理関数で, k が偶数のときには偶関数で通過域は [-1,1], k が奇数のときにはその通過域を [0,1] とする.

$$h(t) = \begin{cases} t^k & \text{(B-合成)} \\ \{1 + T_k(2t-1)\}/2 & \text{(C-合成, } k \text{ が奇数)} \\ \{1 + T_k(t)\}/2 & \text{(C-合成, } k \text{ が偶数)} \\ \{1 + T_k(\mu')\}/\{1 + T_k(\mu'/t)\} & \text{(I-合成)} . \end{cases}$$

5 合成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 $\mathcal{X}' = c_{\infty} I + \sum_{j=1}^k \ell_j \mathcal{R}(\rho_j)$ となり、フィルタは $\mathcal{F}' = P(\mathcal{X}')$ によって与えられる.

実関数 x'(t) の実数の極には実数のシフトのレ ゾルベントが対応し、複素共役な虚数の極の対 には複素共役な虚数シフトのレゾルベントの項 の対が対応する. いまたとえば作用素 χ' の式 中に複素共役な虚数の対ρとρをそれぞれシフ トに持つレゾルベントの項の対 $\ell \mathcal{R}(\rho)$ と $\bar{\ell} \mathcal{R}(\bar{\rho})$ が含まれるとする. それらの作用の計算に於い $C(\rho) \equiv A - \rho B \ Earthur, \ \nu + \rho B$ のレゾルベントは $\mathcal{R}(\rho) = C(\rho)^{-1}B$ であるが, なので、シフト $\bar{\rho}$ のレゾルベントは $\mathcal{R}(\bar{\rho})$ = $C(\rho)^{-H}B$ となる. いま $C(\rho)$ の LU 分解が既に $C(\rho) = LU$ と構成されていれば、関係 $C(\bar{\rho}) =$ $C(\rho)^H$ により $C(\bar{\rho})$ の LU 分解は $C(\bar{\rho}) = U^H L^H$ となり、分解計算を省ける(ピボット選択付き の LU 分解を用いる場合にも同様に省ける).

シフト ρ が実数の場合には, $C(\rho)$ は複素エルミート対称なので,改訂コレスキー分解 $C(\rho)=LDL^H$ を用いて(困難が生じなければ)解ける.

よって行列分解の計算は、シフト ρ が実数または虚部が正の複素数の係数行列 $C(\rho)$ についてだけで良く、虚部が負のものについては省ける。すると今回の典型的な3種類の関数合成の

場合には、必要な行列分解の数は、kが奇数のときはシフトの虚部が正のもの (k-1)/2 個とシフトが実数のもの 1 個であり、k が偶数のときはシフトの虚部が正のもの k/2 個となる。そうしてフィルタは k が奇数のときは(実数のシフトが固有値と近づかないように)下端固有対用、k が偶数のときは(虚数のシフトは固有値から必ず離れているので)中間固有対用である。

6 合成された簡易構成の伝達関数

「簡易構成」の伝達関数(T_n は n 次 Chebyshev 多項式)は $g(t) = g_s T_n(2x(t)-1)$, $x(t) = (\mu+\sigma)/(t+\sigma)$ である.これに k 次($k \geq 2$)の有理関数 h(t) を合成して,伝達率の閾値 g_p , g_s を保って,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.合成された 伝達関数は $g'(t) = g_s T_n(2x'(t)-1)$, $x'(t) = (\mu+\sigma)/(h(t)+\sigma)$ となる.標準のパラメタの 3 つ組 (n,μ,σ) を指定すると,g(t) と g'(t) が共有する閾値 g_s と g_p は以下の式で計算できる. $\int g_s \leftarrow 1/\cosh(2n\sinh^{-1}\sqrt{\mu/\sigma})$,

 $\begin{cases} g_{\rm s} \leftarrow 1/\cosh\left(2n\sinh^{-1}\sqrt{\mu/\sigma}\right), \\ g_{\rm p} \leftarrow g_{\rm s}\cosh\left\{2n\sinh^{-1}\sqrt{(\mu-1)/(\sigma+1)}\right\}. \end{cases}$

7 合成された簡易構成のフィルタの設計

合成前の簡易型フィルタ F の伝達関数の式を $g(t)=g_sT_n(2x(t)-1)$, $x(t)=(\mu+\sigma)/(t+\sigma)$ と する. これは標準パラメタの 3 つ組 (n,μ,σ) を 指定すれば決まる. 合成用の有理関数 h(t) が指定されていれば、合成された簡易型の伝達関数 g'(t)=g(h(t)) も決まる. しかし標準パラメタの組よりも形状パラメタの組 (μ,g_p,g_s) の方が特性の把握には便利である. そこで合成の種類 (B,C,I) とその次数 k を先に指定して、g'(t) の形状が与えられた形状パラメタの組になるべく近くなるように標準パラメタの組を求める.

8 合成された簡易構成のフィルタの作用の実装

作用素 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とする. Y'=2X'-I とおくと、合成された簡易構成のフィルタは $\mathcal{F}'=g_{\rm s}T_n(\mathcal{Y}')$ である. そこで以下の 3 項漸化式で $V^{(j)}\equiv T_j(\mathcal{Y}')V$ を計算する.

 $\begin{cases} V^{(0)} = V, & V^{(1)} = \mathcal{Y}'V, \\ V^{(j)} = 2\mathcal{Y}'V^{(j-1)} - V^{(j-2)} & (j \geq 2 \text{ のとき}). \end{cases}$ するとフィルタ \mathcal{F}' の複素縦ベクトルの組 $V \sim$ の作用は、V から漸化式を用いて求めた $V^{(n)}$ を用いれば $\mathcal{F}'V = g_{\rm s} V^{(n)}$ により与えられる.

対称固有値問題を解く反復射影法に対して収束を保証するリスタートにつ いて

相島 健助1 1 法政大学

e-mail: aishima@hosei.ac.jp

1 概要

本発表では、対称固有値問題 $Ax = \lambda x$ の数 値解法について議論する. 応用上, A が疎行 列で大きい方(または小さい方)からいくつか の固有値と対応する固有ベクトルを必要とされ る場合は多く, そのような場合に有力な手法が Rayleigh-Ritzの技法である. これは部分空間へ の直交射影に基づく解法の総称であり、Krylov 部分空間を用いる場合が Lanczos 法である.

この Rayleigh-Ritz の技法を用いる反復法に おいては, 実用上は計算量の削減および安定 化のため, リスタートと呼ばれる技法が導入さ れることが多いが,これにより収束の理論保証 が困難になる. これに対し Crouzeix, Philippe. Sadkane は, Lanczos 法, Davidson 法を含む枠 組みで収束証明を与えている[1]. さらに、本稿 の著者の最近の研究により、上の収束定理の証 明に基づき, Jacobi-Davidson 法 [2] 等に対し収 束を理論保証する定理が与えられている[3,4].

上記の収束理論は、A の大きい方(または 小さい方) からいくつかの固有値を計算する アルゴリズムに対するものである. これらの固 有値は, 固有値分布を考えたときに実軸の両端 に存在することに着目し,外部固有値と呼ばれ る. これに対し、本稿では、内部固有値、特に ある指定した実数に近い固有値を計算すること を考える. この場合, シフト付きの逆反復法と Rayleigh-Ritz の技法を用いるのが基本的な方 針になるが, 逆反復法に関する計算が重いため 工夫を施すことが多い. その中で有力な方針の 一つが、調和 Ritz 値を用いる計算手法である.

本稿では、Rayleigh-Ritzの技法に対する最 新の結果 [3, 4] の収束証明を, 調和 Ritz 値を用 いるアルゴリズムに応用し収束定理を与える.

Rayleigh-Ritz の技法

Rayleigh-Ritz の技法とは、部分空間を生成 し, 直交射影に基づき固有対を近似的に求める 手法の総称である. この技法において計算する Ritz 値, Ritz ベクトルを合わせてよく Ritz 対

と呼び、これにより求めるべき固有対を近似す る. 基本的には外部固有値に対応する固有対の 計算に用いられる.

Rayleigh-Ritz の技法は部分空間におけるあ る意味での最適な近似固有対を与えることから, 反復射影法におけるリスタートの導入の際にも よく用いられる. そのリスタート付きの反復法 は抽象化した形で以下のように記述される.

[Ritz対によるリスタート付き反復法]

- 1: ある m 次元部分空間の正規直交基底を (反復的に) 生成 $V_m^{(0)} = [v_1^{(0)}, \dots, v_m^{(0)}]$
- 2: **for** $\ell := 0, 1, \dots, do$
- $B^{(\ell)} = V_m^{(\ell)}^{\mathrm{T}} A V_m^{(\ell)}$
- $B^{(\ell)}$ の固有値 $\theta_1^{(\ell)} \geq \cdots \geq \theta_m^{(\ell)}$ と 固 有ベクトル $w_1^{(\ell)}, \dots, w_m^{(\ell)}$ を計算
- k 本の Ritz ベクトル $u_i^{(\ell)} \,=\, V_m^{(\ell)} w_i^{(\ell)}$ (i = 1, ..., k) を計算
- $[v_1^{(\ell+1)},\dots,v_k^{(\ell+1)}]=[u_1^{(\ell)},\dots,u_k^{(\ell)}]$ を計算し新しい基底 $V_m^{(\ell+1)} = [v_1^{(\ell+1)}, \dots, v_m^{(\ell+1)}]$ を得る
- 8: end for

上の反復法はリスタート付き Lanczos 法お よび Jacobi-Davidson 法などの有力な固有値計 算アルゴリズムを含む枠組みと解釈でき、収束 性解析としては, 部分空間がある種の条件を満 たすときに Ritz 対は固有対に収束することが 証明されている. 詳細は Crouzeix, Philippe, Sadkane による [1] および著者による [3, 4] を 参照されたい. なお [1,4] の収束解析は固有値 への収束は保証するものの、それらが大きい方 から k 個の固有値になっていることは保証しな い. これに対してリスタート付き Lanczos 法に 関しては,大きい方から k 個の固有値への収束 が [3] にて証明されている.

3 調和 Ritz 値に基づく反復法

以下の議論では、前節の議論における外部固 有値では無く, 内部固有値の計算手法を考える. この場合は、Rayleigh-Ritzの技法とやや異な る以下の一般化固有値問題

$$V_m^{\mathrm{T}} A^2 V_m w = \theta V_m^{\mathrm{T}} A V_m w$$

の解を近似解とする. 上式において V_m を AV_m が正規直交基底となるように取り替えると

$$(AV_m)^{\mathrm{T}} A^{-1} (AV_m) w = \theta^{-1} w$$

のように変形できる. したがって上式は A^{-1} に 対する Rayleigh-Ritz の技法と解釈でき、形式 上Ritz値の逆数の計算に相当することから調和 Ritz値と呼ばれる. 以下ではこの式の $u = V_m w$ を調和 Ritz ベクトル, (θ, u) を調和 Ritz 対と 呼ぶことにする. A^{-1} を陽に計算する必要が無 いことがこの手法の計算上の長所である. 調和 Ritz対を用いるリスタート付きの反復法は以下 のように定義される.

[調和 Ritz 対によるリスタート付き反復法]

- 1: ある m 次元部分空間の基底を(反復的 に) 生成 $V_m^{(0)} = [v_1^{(0)}, \dots, v_m^{(0)}]$, ただし $V_m^{(0)} A^2 V_m^{(0)} = I$ となるように設定
- 2: **for** $\ell := 0, 1, \dots, \mathbf{do}$ 3: $B^{(\ell)} = V_m^{(\ell)^T} A V_m^{(\ell)}$
- 調和 Ritz 値, つまり $B^{(\ell)}$ の固有値の 逆数の内で最大のもの $heta_1^{(\ell)}$ と対応する 固有ベクトル $w_1^{(\ell)}$ を計算
- 調和 Ritz ベクトル $u_1^{(\ell)} = V_m^{(\ell)} w_1^{(\ell)}$ を 5:
- 計算 $v_1^{(\ell+1)} = u_1^{(\ell)}$ $v_2^{(\ell+1)}, \dots, v_m^{(\ell+1)}$ を計算し新しい基底 を生成 $V_m^{(\ell+1)}=[v_1^{(\ell+1)},\dots,v_m^{(\ell+1)}],$ ただし $V_m^{(\ell+1)}A^2V_m^{(\ell+1)}=I$ となるよ うに設定
- 8: end for

収束性解析

本節にて調和 Ritz 対によるリスタート付き 反復法の収束性を示す定理を与える. 下記の定 理において $\operatorname{span}\{V_m^{(\ell+1)}\}$ は $V_m^{(\ell+1)}$ の列ベクト ルの張る部分空間を表す.

定理 1 調和 Ritz 対によるリスタート付き反復 法において、初期行列 $V_m^{(0)}$ は $\theta_1^{(0)} > 0$ となる ように得られているとする. 任意の ℓ に対し て、ある $\widetilde{v}^{(\ell+1)} \in \operatorname{span}\{V_m^{(\ell+1)}\}$ が以下の条件

$$K_{1} \leq |u_{1}^{(\ell)^{\mathrm{T}}} A (A - \theta_{1}^{(\ell)} I) \widetilde{v}^{(\ell+1)}| \quad (1)$$

$$\|(A - \theta_{1}^{(\ell)} I) \widetilde{v}^{(\ell+1)}\| \leq K_{2} \quad (2)$$

を満たすような正の実数 K_1 , K_2 が存在すると き $\theta_1^{(\ell)}$, $u_1^{(\ell)}$ は A の固有対に収束する.

上の定理において、 $\widetilde{v}^{(\ell+1)} \in \operatorname{span}\{V_m^{(\ell+1)}\}$ を

$$\widetilde{v}^{(\ell+1)} = (A - \theta_1^{(\ell)} I)^{-1} u_1^{(\ell)} \tag{3}$$

で与えると,条件式 (1) に関して $|u_1^{(\ell)}|^T A(A |\theta_1^{(\ell)}I)\widetilde{v}^{(\ell+1)}| = |u_1^{(\ell)}^{\mathrm{T}}Au_1^{(\ell)}| = 1/\theta_1^{(\ell)}$ วัง 6

$$|u_1^{(\ell)^{\mathrm{T}}} A(A - \theta_1^{(\ell)} I) \widetilde{v}^{(\ell+1)}| \ge \theta_1^{(0)^{-1}},$$

また, 条件式 (2) に関して

$$\|(A - \theta_1^{(\ell)}I)\widetilde{v}^{(\ell+1)}\| = \|u_1^{(\ell)}\| \le \|A\|^{-2}$$

である. したがって, $K_1 \leq 1/\theta_1^{(0)}$ かつ $||A||^{-2} \leq$ K_2 となるような K_1, K_2 が必ず存在するので, 収束が理論保証される.式(3)により部分空間 を構成する代表的なアルゴリズムには, 内部固 有値を計算するための調和 Ritz 対を用いるリ スタート付き Jacobi-Davidson 法 [2, §5] があ る. ただし, 上の計算は (3) を厳密に行う条件 下での収束を示しているが、この種の線形方程 式を内部反復に用いる固有値計算アルゴリズム においては、線形方程式の解は GMRES 法等 の反復法を適当な条件により停止することで得 られる近似解で置き換えるのが標準的である. 上の主定理がこのような場合も含めて収束を理 論保証している点は特筆に値する.

- [1] Crouzeix, M., Philippe, B., Sadkane, M.: The Davidson method, SIAM J. Sci. Comput. **15**, 62–76 (1994)
- [2] Sleijpen, G.L.G., van der Vorst, A.: A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 17, 401–425 (1996)
- [3] Aishima, K.: Global convergence of the restarted Lanczos and Jacobi-Davidson methods for symmetric eigenvalue problems, Numer. Math., 131, 405-423 (2015)
- [4] Aishima, K.: On convergence of iterative projection methods for symmetric eigenvalue problems, J. Comput. Appl. Math., 311, 513-521 (2017)

実対称疎行列に対する効率的三重対角化アルゴリズム

廣田 悠輔 1

1 東京電機大学 未来科学部 情報メディア学科

e-mail: hirota@mail.dendai.ac.jp

1 はじめに

本発表では、与えられる $n \times n$ 実対称疎行列 A を以下のように変換(三重対角化)することを考える.

$Y^{\top}AY = T.$

ここで、Y は $n \times n$ 直交行列、T は $n \times n$ 実対称三重対角行列である.

三重対角化は行列の固有値問題求解の1ス テップとして用いられる重要な行列計算である [1, pp. 458-476]. しかしながら, Householder 法をはじめとする既存の三重対角化手法は,対 角要素、副対角要素以外の要素を消去する過程 で新たな非ゼロ要素が生じるため, Aが疎行列 であってもその非ゼロ要素のパターン(疎構造) を十分に活かせないという問題がある. 半帯幅 が小さい帯行列に対しては、新たに生じた非ゼ ロ要素を都度消去して疎構造を保つ, 効率的な 三重対角化の方法 [2, 3] が提案されている. し かしながら, 一要素であっても対角要素から遠 い(行,列インデックスの差の絶対値が大きい) 非ゼロ要素が存在する場合には半帯幅が大きな 値となり, 効率の良い三重対角化ができない. このため, 多くの疎行列は帯行列向けの方法に よって効率的に三重対角化することは難しい.

本発表では実対称疎行列に対する新しい三重 対角化アルゴリズムを提案する.提案法はある 種の疎構造をもつ行列に対して効率的に機能す る.また,提案法を元にした,一般の実対称疎 行列の効率的な三重対角化に向けた展望につい ても述べる.

2 疎行列の三重対角化アルゴリズム(提 案法)

提案するアルゴリズムは、Bischof らによって提案された、帯行列からより半帯幅の小さい帯行列への変換(帯-帯変換)アルゴリズム [3] を元にしている。Bischof らの帯-帯変換アルゴリズムは、半帯幅pから半帯幅q(p > q)の帯行列へ変換するとき、

半帯幅6から半帯幅3への変換

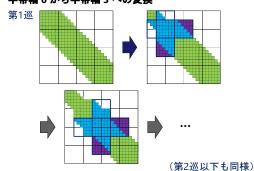


図 1. Bischof の帯-帯変換の流れ、着色部は行列の非ゼロ要素を示す。

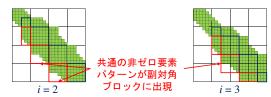


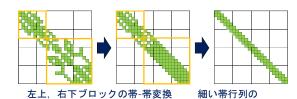
図 2. Bischof の帯-帯変換の途中状態(第 i 巡開始時の 疎構造)

- 1) 第iブロック列,ブロック行の帯幅削減を行い,
- 2) それによって生じた非ゼロ要素 (バルジ) の消去を左上から右下に向かって行う

という手順(図 1)を $i=1,2,\ldots,N$ (N=n/(p-q))と繰り返すことで,左上から帯幅の縮小を行う.もちろん,アルゴリズムの変形によって帯幅の縮小が右下から左上に向かうようにすることも可能である.

提案法は、Bischof らの帯-帯変換アルゴリズムの第i巡の消去開始前の疎構造が、図2のように密な対角ブロックと、長方形と三角形を組み合わせた副対角ブロックからなるという点に着目している。与えられる行列が図2のような疎構造をもつ場合には、その行列は帯-帯変換の途中状態であるとみなしてBischof らの帯-帯変換アルゴリズムを途中から適用できる。途中(第M巡)からアルゴリズムを適用する場合の計算量は、最初から帯-帯変換を行う場合の $(M/N)^2$ であり、大幅に計算量が削減される。

本研究では、この事実に着目し、図2のような疎構造をもつ実対称疎行列に対する効率的な 三重対角化アルゴリズムを提案する.提案法の



三重対角化 図 3. 提案する疎行列の三重対角化

概要を以下示す.

- 1) 行列 A の疎構造を調べ,図 3 左のように 半帯幅 $p_{\rm U}$ から半帯幅 $q_{\rm U}$ への変換途中の 疎構造をもつ左上部(左上橙囲み),半 帯幅 $p_{\rm L}$ から半帯幅 $q_{\rm L}$ への変換途中の疎 構造をもつ右下部(右下橙囲み), $k \times k$ の三角構造を右上にもつ非対角部に分け る.ただし, $k < q_{\rm L}$ かつ $k < q_{\rm U}$.
- 2) 左上部を半帯幅 q_U の帯行列に変換する. その後,左上部を半帯幅 q_U の帯行列か ら半帯幅 k の帯行列に変換する.
- 3) 右下部を半帯幅 q_L の帯行列に変換する. その後,右下部を半帯幅 q_L の帯行列から 半帯幅 k の帯行列に変換する.
- 4) 半帯幅 k の帯行列を三重対角化する.

手順 2), 3) の帯-帯変換は, $k \le q_L$ かつ $k \le q_U$ であるので, 非対角部に新たな非ゼロ要素を作ることなく行える. また, 手順 2), 3) は独立に行える.

提案法は帯-帯変換を繰り返し行う.このため,三重対角化を固有値問題の直接解法の一部として使う場合には,固有ベクトルの逆変換についても繰り返し行う必要がある.したがって,求める固有ベクトル数mが極めて多い場合に計算量が大きく増大する欠点がある.しかしながら, $1 \ll m \ll n$ (例えば $m = \sqrt{n}$)の場合には,固有値問題に対する反復法を用いる場合と比べ,提案法による三重対角化に基づく固有値解法は有用であると考えられる.

提案法の詳細および数値実験による性能評価 結果は会議当日に示す.

3 一般の実対称疎行列の効率的な三重対 角化に向けた展望

第2節で述べた提案法が効率的に機能するのは図3左のような疎構造をもつ行列に対してのみである.一般の実対称疎行列に対して提案法を効率的に機能させるには、図4のように、変換後の行列が望ましい疎構造をもつように適

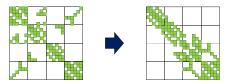


図 4. 一般の疎行列に対する置換行列による前処理

当な置換行列 P を用いて $P^{\top}AP$ と相似変換を行う.

置換行列により望ましい疎構造をもつ行列に変換するという考えは、実対称正定値疎行列に対して Cholesky 分解を行う際と同様である. しかしながら、Cholesky 分解では置換後の行列の profile [4, pp. 127–134] が Cholesky 分解の計算量を推定する良い指標となることが知られているのに対して、疎行列の三重対角化ではそのような指標が確立されていない. このため、置換を決定するための新たな最適化指標が必要である.

最適な置換により疎行列の三重対角化の計算量を最小化したとしても、Aを密行列として扱って三重対角化する場合と比べて計算量が削減されるとは限らない.加えて、提案法は最適化された密行列計算ライブラリを十分に活用できるとは限らず、密行列の三重対角化ほどの高い性能が実現できない可能性がある.したがって実用性の観点からは、行列の疎構造に応じてより効率的なアルゴリズムを判定する技術の開発もまた重要である.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K18061 の助成 を受けている.

- [1] G.H. Golub, and C.F. Van Loan, Matrix Computations Fourth Edition, Johns Hopkins University Press, 2012.
- [2] K. Murata, and K. Horikoshi, A New Method for the Tridiagonalization of the Symmetric Band Matrix, Information Processing in Japan, Vol. 15 (1975), 108–112.
- [3] C.H. Bischof, B. Lang, and X. Sun, A Framework for Symmetric Band Reduction, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 26 (2000), 581–601.
- [4] T.A. Davis, Direct Methods for Sparse Linear Systems, SIAM, 2006.

荻田・相島の固有ベクトル反復改良法における重複固有値の扱いについて

白間 久瑠美 1, 工藤 周平 1,2, 山本 有作 1

1 電気通信大学, 2 現所属 理化学研究所計算科学研究センター

e-mail: yusaku.yamamoto@uec.ac.jp

1 はじめに

実対称行列の全固有値・固有ベクトルを求め る問題は、量子化学をはじめとして様々な科学 技術計算で生じる基本的な問題である. この問 題に対し, 荻田と相島は最近, 全固有ベクトル の近似値が与えられたときに, 反復改良によっ てより精度の高い固有ベクトルを求める新しい アルゴリズムを提案した[1,2]. 本アルゴリズ ムは、対象とする固有値が単純固有値か重複固 有値かを計算途中で判定して計算式を使い分け る構造になっており、両方の場合について、局 所的2次収束性が保証されている.

しかし実際の計算では、単純固有値と重複固 有値との正確な判別は難しく, 互いに近接した 単純固有値を重複固有値と見誤って処理を行う ことが起こりうる. このような状況では、収束 性が悪化し, 固有ベクトルの修正量が単調減少 しなかったり,多数の反復が必要となる現象が 見られる[3].

そこで本発表では、荻田・相島のアルゴリズ ムにおける重複固有値の扱いを見直し, 収束性 を改善する手法を提案する[4]. 我々の手法で は、 反復改良の各ステップで前処理を行うこと により, 重複固有値か否かの判定を不要にする ことが特徴である.

以下では、まず荻田・相島の固有ベクトル反 復改良法とそこでの重複固有値の扱いについて 紹介した後、提案手法について説明する.

2 荻田・相島の固有ベクトル反復改良法

 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を実対称行列、A の固有ベクトル 行列の1つとその近似行列をそれぞれ $X, \hat{X} \in$ $\mathbb{R}^{n\times n}$ とする. また, 行列 $E\in\mathbb{R}^{n\times n}$ を

$$X = \hat{X}(I + E) \tag{1}$$

により定義し, $\epsilon := ||E||_2 < 1/\sqrt{2}$ が成り立っ ていると仮定する. 荻田・相島のアルゴリズム では、Eの近似値 \tilde{E} を求め、式(1)式に代入す ることで、Xのより良い近似値X'を算出する. まず、真の固有ベクトル行列 X は次の式を

満たすことに注意する.

$$X^{\top}X = I, \tag{2}$$

$$X^{\top}AX = D. \tag{3}$$

ただし, I は単位行列, D は固有値を対角成分 に持つ対角行列である. 式(2), (3)に(1)を代 入して整理すると、次の式が得られる.

$$\hat{X}^{\top}\hat{X} = (I+E)^{-\top}(I+E)^{-1}, \quad (4)$$

$$\hat{X}^{\top} A \hat{X} = (I + E)^{-\top} D (I + E)^{-1}.$$
 (5)

ここで、 $||E||_2 < 1/\sqrt{2}$ より、 $(I+E)^{-1}$ をノイ マン展開して式(4),(5)に代入すると,

$$E + E^{\top} = I - \hat{X}^{\top} \hat{X} + \Delta_1, (6)$$

$$D - DE - E^{\top}D = \hat{X}^{\top}A\hat{X} + \Delta_2. \tag{7}$$

ただし、 Δ_1 、 Δ_2 は剰余項であり、 $\Delta_1 = O(\epsilon^2)$ 、 $\Delta_2 = O(\|A\|_2 \epsilon^2)$ である. 式(6), (7) で Δ_1 , Δ_2 を無視して得られる行列方程式の解を \tilde{D} , \tilde{E} と すると,

$$\tilde{E} + \tilde{E}^{\top} = I - \hat{X}^{\top} \hat{X} =: R, (8)$$

$$\tilde{D} - \tilde{D}\tilde{E} - \tilde{E}^{\top}\tilde{D} = \hat{X}^{\top}A\hat{X} = S$$
 (9)

 $\tilde{D} = \operatorname{diag}(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \dots, \tilde{\lambda}_n)$ とおき、式 (8), (9) を要素毎に書くと次のようになる.

$$\tilde{e}_{ij} + \tilde{e}_{ji} = r_{ij}, \qquad (10)$$

$$\tilde{\lambda}_i \delta_{ij} - \tilde{\lambda}_i \tilde{e}_{ij} - \tilde{\lambda}_j \tilde{e}_{ji} = s_{ij}.$$
 (11)

ただし、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである. 式 (10), (11) でi = j とおくと,

$$\tilde{e}_{ii} = \frac{r_{ii}}{2}, \tag{12}$$

$$\tilde{e}_{ii} = \frac{r_{ii}}{2}, \qquad (12)$$

$$\tilde{\lambda}_i = \frac{s_{ii}}{1 - r_{ii}} \qquad (13)$$

が得られる.

 $\tilde{\lambda}_i$ $(i=1,\ldots,n)$ は A の固有値 λ_i の近似値 と見なせるから, 荻田・相島のアルゴリズムで は,これらを用いて単純固有値と重複固有値を 判別する. 具体的には、ある基準値 $\delta > 0$ を定 めて、 $|\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j| > \delta$ のとき λ_i と λ_j とは異なる 固有値であると判定し、式(10)、(11) より、

$$\tilde{e}_{ij} = \frac{s_{ij} + \tilde{\lambda}_j r_{ij}}{\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_i} \quad (i \neq j)$$
 (14)

と計算する.一方, $|\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j| \leq \delta$ のときは, $\tilde{\lambda}_i$ と $\tilde{\lambda}_j$ とは重複固有値であると判定する.この場合は,重複固有値に属する固有空間内部での固有ベクトルの回転の自由度を利用して, $\tilde{e}_{ij} = \tilde{e}_{ji}$ という条件を付け加え,これと (10) より,

$$\tilde{e}_{ij} = r_{ij}/2 \tag{15}$$

と計算する.

ただし、この判定法では、 λ_i と λ_j とが近接する単純固有値であっても重複固有値と判定され、後者の処理が採用される可能性がある。この場合、本来存在しない回転自由度を使って $\tilde{e}_{ij}=\tilde{e}_{ji}$ という条件を課していることになり、それにより収束が阻害されることがある.

3 提案手法

この問題を解決するため, 重複固有値であ るか否かの判定を不要にする前処理法を提案 する[4]. もともと、上記の判定を行う理由は、 $|\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_i| \leq \delta$ のときに式 (14) を使うと、右辺の 分母が 0 に近くなり、計算が不安定になるから である. しかし,式(10),(11)に立ち戻って考 えると、もし $r_{ij}=0$ かつ $s_{ij}=0$ ならば、 $\tilde{\lambda}_i$ 、 λ_i が何であっても, $\tilde{e}_{ij} = \tilde{e}_{ji} = 0$ を解として採 用することができ、安定に計算を進めることが できる. そこで、ある基準値 $\alpha < 1$ を決めてお き, 反復前に各 i,j $(i \neq j)$ に対して \tilde{e}_{ij} , \tilde{e}_{ji} を仮に計算して、 $|\tilde{e}_{ii}| \geq \alpha$ あるいは $|\tilde{e}_{ii}| \geq \alpha$ ならば、 \hat{X} の第i列と第j列との間で線形変換 を行って $r_{ij} = r_{ji} = 0$ かつ $s_{ij} = s_{ji} = 0$ とな るようにする. それには、 $R \geq S$ 0.2×2 主座 小行列を同時対角化すればよい.

より一般的に、 $|\tilde{e}_{i_k j_k}| \geq \alpha$ あるいは $|\tilde{e}_{j_k i_k}| \geq \alpha$ ん $(i_k \neq j_k)$ となる添字ペアの集合を $\mathcal{P} = \{(i_k, j_k)\}_{k=1}^m$ とする.このとき, \hat{X} の列の間で線形変換を行って $r_{i_k j_k} = r_{j_k i_k} = 0$ かつ $s_{i_k j_k} = s_{j_k i_k} = 0$ か となるようにしたい.いま,ペア (i_k, j_k) とペア $(i_{k'}, j_{k'})$ が共通の添字を含むとき,それらに対応する 2 つの線形変換は同じ列に作用するから,それらを独立に行ったのでは R と S の要素を正しく消去できない.この場合には,列集合 $\{i_k, j_k\} \cup \{i_{k'}, j_{k'}\}$ に

対していっぺんに線形変換を行う必要がある. 一般には、線形変換の対象となる列番号の集合 $(\bigcup_{k=1}^m \{i_k\}) \cup (\bigcup_{k=1}^m \{j_k\})$ を, $(i,j) \in \mathcal{P}$ のとき i と j が同じ部分集合に属するように,最も細かい部分集合 $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \ldots, \mathcal{J}_p$ に分け, $\ell = 1, 2, \ldots, p$ に対して,行・列集合 \mathcal{J}_ℓ に対応する R と S の主座小行列を同時対角化する.

具体的には、 \hat{X} から \mathcal{J}_{ℓ} に属する列の集合を抜き出してできる $n \times |\mathcal{J}_{\ell}|$ 行列を $\hat{X}_{\mathcal{J}_{\ell}}$ とし、

$$\bar{R}_{\mathcal{J}_{\ell}} = \hat{X}_{\mathcal{J}_{\ell}}^{\top} \hat{X}_{\mathcal{J}_{\ell}}, \quad S_{\mathcal{J}_{\ell}} = \hat{X}_{\mathcal{J}_{\ell}}^{\top} A \hat{X}_{\mathcal{J}_{\ell}}$$
 (16)

とおくと, $I_{|\mathcal{J}_\ell|} - \bar{R}_{\mathcal{J}_\ell}$, $S_{\mathcal{J}_\ell}$ はそれぞれ R,S の行・列集合 \mathcal{J}_ℓ からなる主座小行列である.ここで,実対称定値一般化固有値問題

$$S_{\mathcal{J}_{\ell}} Z_{\mathcal{J}_{\ell}} = \bar{R}_{\mathcal{J}_{\ell}} Z_{\mathcal{J}_{\ell}} \Lambda_{\mathcal{J}_{\ell}} \tag{17}$$

を解くと、固有ベクトル行列は $Z_{\mathcal{J}_\ell}^\top \bar{R}_{\mathcal{J}_\ell} Z_{\mathcal{J}_\ell} = I_{|\mathcal{J}_\ell|}$ を満たすように($\bar{R}_{\mathcal{J}_\ell}$ 直交)取れるから、式 (17) に左から $Z_{\mathcal{J}_\ell}^\top$ をかけると、

$$Z_{\mathcal{J}_{\ell}}^{\top} S_{\mathcal{J}_{\ell}} Z_{\mathcal{J}_{\ell}} = Z_{\mathcal{J}_{\ell}}^{\top} \bar{R}_{\mathcal{J}_{\ell}} Z_{\mathcal{J}_{\ell}} \Lambda_{\mathcal{J}_{\ell}} = \Lambda_{\mathcal{J}_{\ell}}$$
 (18)

となり、 $\bar{R}_{\mathcal{J}_{\ell}}$ 、 $S_{\mathcal{J}_{\ell}}$ は $Z_{\mathcal{J}_{\ell}}$ により同時対角化される。したがって、 $i,j\in\mathcal{J}_{\ell}$ 、 $i\neq j$ なる i,j に対しては、 $\tilde{e}_{ij}=\tilde{e}_{ji}=0$ としてよい.

提案手法に関する数値実験結果については, 当日報告する.

- T. Ogita and K. Aishima: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition adaptively using higher-precision arithmetic, *Technical Report*, METR 2016-11, The University of Tokyo, 2016.
- [2] T. Ogita and K. Aishima: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, May 2018.
- [3] 白間 久瑠美: 時間依存固有値問題のための固有値追跡手法, 平成 29 年度情報数理工学コース卒業論文, 電気通信大学, 2018.
- [4] 白間 久瑠美, 工藤 周平, 山本 有作: 荻田・相島の固有ベクトル反復改良法に基づく実対称行列の固有値分解追跡手法, submitted.

On a construction of Ramanujan graphs

佐竹 翔平1

¹ 神戸大学 大学院システム情報学研究科 e-mail: 155x601x@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

Ramanujan グラフは, ある程度の「連結性」の高さが保証され, 一方で辺数が頂点数に比べ大きくならない正則グラフである. このグラフは実際のネットワークで求められる条件を満たすよいグラフとして Lubotzky, Phillips, Sarnak によって提案された. その構成は一つの重要な問題であるが, 先行結果の多くは純粋数学の非初等的な結果に依存している. 本講演では, 比較的初等的な Ramanujan グラフの構成について述べる.

2 Ramanujan グラフとその背景

本稿では、多重辺やループを持たない有限グ ラフを扱う. また, V(G), E(G) でグラフ G の 頂点集合, 辺集合を表す. グラフの構造などの 情報を得るために、様々な角度からの研究が行 われているが、代数的なアプローチの一つとし て,グラフの頂点同士の隣接関係を記述する隣 接行列がしばしば着目される. ここで, グラフ G に対して、隣接行列 $A(G) = (a_{u,v})_{u,v \in V(G)}$ はu, v間に辺があれば $a_{u,v} = 1$, そうでなけ れば $a_{u,v} = 0$ として定義される. また, A(G)の固有値の集合を $\operatorname{Spec}(G)$ で表す. k-正則グ $\supset TG$ (各頂点に k 本の辺が接続する) の場 合, A(G) の任意の固有値は区間 [-k,k] に値を 取り、特にkを絶対値が最大の固有値としても つことが、Perron-Frobenius の定理から示され る. いま,

$$\lambda(G) := \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \operatorname{Spec}(G), |\lambda| \neq k\}$$

と定義する. $\lambda(G)$ は, G をネットワークとしてみなしたとき, G が「よい」ネットワークであるかどうかを測る 1 つの重要な指標とみなせる. 実際に, ネットワークの良さとして求められる性質として, 例えば直径 (G 内の最長道の長さ) が短いこと, また断線に対する堅牢性などが挙げられる. そのため, 拡大定数とよばれる G 内の局所的な「連結性」を測る指標がなるべく大きな値をとることが望ましいが, 実際

には直径も拡大定数も $\lambda(G)$ を用いて, それぞれ上と下からおさえられることが以下の定理からわかる.

定理 1 (Chung [1]). G は n 頂点を持つとし、 diam(G) で G の直径を表す. このとき、

$$\operatorname{diam}(G) \le \frac{\log(n-1)}{\log k - \log \lambda(G)}.$$

定理 2 (cf. 平松-知念 [2]). G の拡大定数を $c(G) := \min_U |N_G(U)|/|U|$ で定義する. ただ し, U は $1 \leq |U| \leq n/2$ なる頂点部分集合を 動くとし, $N_G(U)$ は U のある頂点に G 内で隣接するような $V(G)\setminus U$ 内の頂点の集合とする. このとき,

$$c(G) \ge \frac{1}{2} \Big(1 - \frac{\lambda(G)}{k} \Big).$$

以上の定理から、 $\lambda(G)$ が次数 k に比して小さな値をとる G がよいネットワークとなることがわかる。その一方で、Alon-Boppana の不等式とよばれる $\lambda(G)$ の漸近的な下界が成り立つこともまた知られている。

定理 $\mathbf 3$ (Alon-Boppana の不等式 cf. [3])、 $\{G_i\}_{i\in\mathbb N}$ を $|V(G_i)|\to\infty$ $(i\to\infty)$ なる k-正則連結グラフの無限列とする. このとき.

$$\liminf_{i \to \infty} \lambda(G_i) \ge 2\sqrt{k-1}.$$

この漸近的な下界に対する "extremal" なグラフとして, A. Lubotzky, R. Phillips, P. Sarnak によって定義されたのが Ramanujan グラフである.

定義 4 (Lubotzky-Phillips-Sarnak [3]). k-正則 グラフ G が $\lambda(G) \leq 2\sqrt{k-1}$ をみたすとき, G を Ramanujan グラフとよぶ

我々はいま巨大なネットワークに興味があるので、Ramanujan グラフの無限系列を構成する問題が重要になる. さらに、頂点数に比して辺数が少ない疎なネットワークがほしいので、固定された次数に対する Ramanujan グラフの無限列の構成が目標となる. そのような Ramanujan

グラフの無限列の存在性は、二部グラフの場合には、任意の次数kに対して非明示的に示されている([4]). また、明示的構成により、いくつかの系列が整数論の高度な結果を用いて与えられている。(例えば [3], [5] など). しかし、それは非常に限られた次数と頂点数のパラメータについてしか与えられていないのが現状である.一方で、少し条件を緩くして、頂点数にともなうある程度の次数の増大を許容して、明示的に無限列を与えた先行研究は多い(例えば、[6]、[7]など). ここでの一つの有効な構成法はうまいCayley グラフを構成することである.

定義 5. Γ を 1_{Γ} を単位元にもつ群とする. このとき, 逆元について閉じている $S \subset \Gamma \setminus \{1_{\Gamma}\}$ に対して, 以下で定義されるグラフ $Cay(\Gamma, S)$ を Γ 上の S に関する Cayley グラフという.

$$V(Cay(\Gamma, S)) := \Gamma,$$

 $E(Cay(\Gamma, S)) := \{ \{x, y\} \mid xy^{-1} \in S \}.$

定義から $Cay(\Gamma, S)$ は |S|-正則グラフとなる. また、有限可換群上の Cayley グラフについては、簡単な計算から、その隣接行列の固有値が Γ の指標和の形で書けることが示せる.

命題 6. Γが有限可換群であるとき,

ただし, Γ の指標とは Γ から複素乗法群 \mathbb{C}^* への準同型写像を指す.

よって、有限可換群上の Cayley グラフを考えるとき、その指標和を評価することで、Ramanujan グラフであるかどうかが判定できる.

3 主結果と関連する注意

以下では、著者の主結果である次数の増大を 許すような Ramanujan グラフの新しい無限列 を与える. まず、構成において着目する Galois 環の定義を述べる. Galois 環は符号理論や情報 通信等で注目されてきた有限可換環である.

定義 7 (cf. [8]). p を素数, $e,r \ge 1$ を自然数とする. monic なr 次多項式 $h \in \mathbb{Z}_{p^e}[x]$ は, $x^{p^r}-1$ を割り切り, かつ法p において原始的であるとし, ξ をh の解とする. このとき, $GR(p^e;r) = \mathbb{Z}_{p^e}[\xi]$ を位数 p^{er} , 標数 p^e の Galois 環とよぶ.

また、 ξ で生成される乗法部分群T の位数は p^r-1 である (例えば [8] を参照). 以下では、

 $GR(p^e;r)^+$ は $GR(p^e;r)$ のなす加法群とする. 以下が、本稿における主定理である.

定理 8. p=e=2 とする. このとき, 任意の $r\geq 2$ に対して, $H_{4,r}:=Cay(GR(4;r)^+,T\cup(-T))$ は頂点数 4^r の $(2^{r+1}-2)$ -正則な Ramanu-jan グラフである.

命題 6 と $GR(4;r)^+$ の指標和の初等的な評価によって、定理が示される. また、r が奇数のとき、 $H_{4,r}$ の内周 (グラフ内の最短閉路の長さ)が 4 であることも、[9, Theorem 4.2] などから得られる.

- F. R. K. Chung, Diameters and eigenvalues, *J. Amer. Math. Soc.*, Vol. 2 (1989), 187–196.
- [2] 平松豊一, 知念宏司, 有限数学入門 有限 上半平面とラマヌジャングラフ, 牧野書 店, 2003.
- [3] A. Lubotzky, R. Phillips, P. Sarnak, Ramanujan graphs, *Combinatorica*, Vol. 8 (1988), 261–277.
- [4] A. W. Marcus, D. A. Spielman, N. Srivastava, Interlacing families I: Bipartite Ramanujan graphs of all degrees, Ann. of Math. (2), Vol. 182 (2015), 307–325.
- [5] M. Morgenstern, Existence and explicit constructions of q+1 regular Ramanujan graphs for every prime power q, J. Combin. Theory Ser. B, Vol. 62 (1994), 44-62.
- [6] W.-C. W. Li, K. Feng, Character sums and abelian Ramanujan graphs, J. Number Theory, Vol. 41 (1992), 199– 217.
- [7] A. Terras, Fourier Analysis on Finite Groups and Applications, Cambridge University Press, 1999.
- [8] Z.-X. Wan, Finite Fields and Galois Rings. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2012.
- [9] J. H. van Lint, R. M. Wilson, A Course in Combinatorics, Second edition, Cambridge University Press, 2001.

完全多部四点木システムからの系統樹構築

平井 広志 1, 岩政 勇仁 1

1 東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻

e-mail: {hirai, yuni_iwamasa}@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

有限集合 $[n] := \{1,2,\ldots,n\}$ に対する**系統 樹**とは,木 T = (V,E) であって,T の葉の集合が [n] であり,任意の葉でない頂点 $v \in V \setminus [n]$ の次数が 3 以上のものである.葉を生物種と対応させ、葉でない頂点を種分化と対応させることで,系統樹は生物の進化の過程を表現する木構造となる.系統樹の部分的な情報が複数与えられたとき,それらに整合する [n] に対する系統樹を構築する問題は,系統学において基本的でかつ重要なものとして挙げられる.

2 QUARTET COMPATIBILITY

本研究では、四点木 (quartet tree) の集合 (= 四点木システム) が「部分的な情報」として与えられたとき、それに整合する系統樹を(存在するならば)構築する Quartet Compatibility という問題を考える。問題の正確な定義を以下で行う。

図1にあるように、四点からなる集合 $\{a,b,c,d\}$ に対する系統樹は四種類存在する。a b b, c b d がそれぞれ共通の頂点に接続している系統樹(図1の一番左の系統樹)を ab||cd と表す。また、「ab||cd もしくは5頂点のスターグラフのどちらか」という状態を ab|cd で表す。ab||cd, ac||bd, ad||bc, ab|cd, ac|bd, ad|bc のそれぞれのことを、 $\{a,b,c,d\}$ に対する**四点木**という。

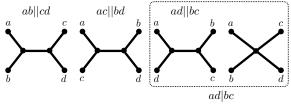


図 1. $\{a,b,c,d\}$ に対する系統樹. ab||cd,ac||bd,ad||bc は それぞれ左から一番目,二番目,三番目の系統樹に対応する. ad|bc は,点線で囲まれた右の二つの系統樹に対応する.

四点木は、より大きな系統樹の部分構造を表現するのに用いられる。 [n]($\ni a,b,c,d$) に対する系統樹 T が四点木 ab||cd を表示するとは、T における a-b パスと c-d パスが交わらないことをいう。つまり、T を $\{a,b,c,d\}$ に「制限」し

たとき、ab||cd となるともいえる。また同様に、T が ab|cd を表示するとは、T における a-b パスと c-d パスが高々一点で交わることをいう。つまり、T を $\{a,b,c,d\}$ に「制限」したとき、ab|cd となるともいえる。具体例は図 2 を参照されたい。四点木システム Q に含まれる任意

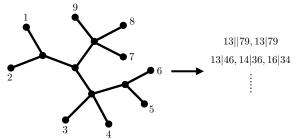


図 2. {1,2,...,9} に対する系統樹 T の例. この T は 13||79,13|79,13|46,14|36,16|34 を表示する.

の四点木をTが表示するとき、TがQを表示するという。

QUARTET COMPATIBILITY は以下のように 定式化される.

Given: 四点木システム Q

Problem: Qを表示する系統樹が存在する か判定せよ。存在するとき、その系統樹 を出力せよ。

QUARTET COMPATIBILITY は計算生物学だけでなく、理論計算機科学分野においても盛んに研究されている。Steel [1] により QUARTET COMPATIBILITY の NP 困難性が示されたのを皮切りに、効率的なヒューリスティクス、近似アルゴリズム、FPT アルゴリズムの研究が数多くなされている。

一方, QUARTET COMPATIBILITY が多項式時間で解けるような四点木システム Qのクラスに関する結果は非常に少なく, Bandelt–Dress [2] や Bryant–Steel [3] によるものしか知られていなかった.

3 主結果

本研究では、四点木システム *Q* のクラスを 新たに二つ導入し (complete *A*-partite 性, full *A*-partite 性), それらに対して QUARTET COM- PATIBILITY が多項式時間で解けることを示した.

定理 1 入力の四点木システムが complete A-partite もしくは full A-partite であるとき,QUAR-TET COMPATIBILITY は $O(|A|n^4)$ 時間で解ける.

ここで、 $\mathcal{A} := \{A_1, A_2, \dots, A_r\} \ (|A_i| \geq 2)$ は [n] の分割である。以下では、complete/full \mathcal{A} -partite 性を定義する。

まず、準備として四点木システム Q の full 性と complete bipartite 性を定義する. Q が [n] 上で full であるとは、任意の異なる 4 点 $a,b,c,d \in [n]$ に対して、ab||cd,ac||bd,ad||bc のいずれか一つが Q に含まれる、もしくは ab|cd, ac|bd, ad|bc が全て Q に含まれることをいう。 Bandelt—Dress [2] は、入力 Q が [n] 上で full のとき、QUARTET COMPATIBILITY が多項式 時間で解けることを示した。 Q が [n] の二分割 $\{A,B\}$ ($|A| \geq 2 \leq |B|$) に対して complete bipartite であるとは、以下が成り立つことをいう:「任意の異なる $a,a' \in A,b,b' \in B$ に対して、Q が ab||a'b',ab'||a'b,aa'|bb' のうちいずれか一つを含む、また、Q に含まれる全ての四点木は上記の形をしている。」

complete/full A-partite 性を定義する. $A := \{A_1, A_2, \ldots, A_r\}$ $(|A_i| \geq 2)$ を [n] の分割とする. Q が **complete** A-partite であるとは, $\{A_i, A_j\}$ に対する complete bipartite な Q_{ij} を用いて, $Q = \bigcup_{1 \leq i < j \leq r} Q_{ij}$ と表せることをいう.また,Q が full A-partite であるとは,complete A-partite な Q_0 , A_i 上で full な Q_i $(i \in [r])$ を用いて, $Q = Q_0 \cup Q_1 \cup \cdots \cup Q_r$ と表せることをいう.

4 応用

full な四点木システムは,以下のようにして自然に生じる. [n] に対する系統樹Tの各枝長が非負であるとし, $\delta(a,b)$ をT における a-b 間の距離として定義する。何らかの単一の手法で生物種間の「距離」を測ることで δ を推定したとする。このとき, $ab||cd \in Q \Leftrightarrow \delta(a,b) + \delta(c,d) < \min\{\delta(a,c) + \delta(b,d),\delta(a,d) + \delta(b,d)\}$ としてfull な四点木システム Q を構成できる。 δ を正しく推定できたとき,そこから構成される Q を表示する系統樹は,T に限られることが知られている [2]. この T は,Bandelt—Dress のアルゴリズムにより多項式時間で構築できる。

一方, complete/full A-partite な四点木シス テムは,以下のようにして自然に生じる.生物 種の集合 [n] を r 個のグループ A_1,A_2,\ldots,A_r に分割する. 予算や技術的な要因から, 異なる グループに含まれる生物種間の距離を異なる手 法で測らざるを得ないとする.このとき,異な る手法で測った距離の大小比較は意味を為さな いことが予想される. つまり、 $\binom{r}{2}$ 個の距離関数 $\delta_{ij}: A_i \times A_j \to \mathbf{R}_+ \ (1 \le i < j \le r)$ を推定でき るが、 $\delta_{ij}(a,b) < \delta_{i'j'}(a',b') (\{i,j\} \neq \{i',j'\})$ は「a-b間より a'-b' 間の距離の方が長い」こと を意味しない. しかし, $a, a' \in A_i, b, b' \in A_i$ に 対して、 $ab||a'b' \in \mathcal{Q}_0 \Leftrightarrow \delta_{ij}(a,b) + \delta_{ij}(a',b') <$ $\delta_{ij}(a,b') + \delta_{ij}(a',b), \ aa'|bb' \in \mathcal{Q}_0 \Leftrightarrow \delta_{ij}(a,b) +$ $\delta_{ij}(a',b') = \delta_{ij}(a,b') + \delta_{ij}(a',b)$ とすることで, complete A-partite な四点木システム Qo を構 成することができる.

また,各ブロック A_i に含まれる生物種間の距離もそれぞれ異なる手法で測定できるとする.つまり, δ_{ij} に加えて,r 個の距離関数 δ_i : $A_i \times A_i \to \mathbf{R}_+$ $(i=1,2,\ldots,r)$ が与えられている.このとき,先に述べたように各 δ_i から A_i 上で full な四点木システム Q_i を構成できる.よって, $Q=Q_0\cup Q_1\cup\cdots\cup Q_r$ として,full A-partite な四点木システム Q を構成できる.このようにして得られた四点木システム Q_0 や Q を表示する系統樹は,我々のアルゴリズムにより多項式時間で構築できる.

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 JP26280004、 JP17K00029 と特別研究員奨励費の助成をうけた。

- [1] M. Steel. The complexity of reconstructing trees from qualitative characters and subtrees. *Journal of Classification*, 9:91–116, 1992.
- [2] H.-J. Bandelt and A. Dress. Reconstructing the shape of a tree from observed dissimilarity data. *Advances in Applied Mathematics*, 7:309–343, 1986.
- [3] D. Bryant and M. Steel. Extension operations on sets of leaf-labelled trees. Advances in Applied Mathematics, 16:425–453, 1995.

最小スパナー問題の困難性と固定パラメータ容易性

小林 佑輔 1

1 京都大学

e-mail : yusuke@kurims.kyoto-u.ac.jp

1 概要

正整数 t に対し、グラフ G の部分グラフ Hが t スパナーであるとは、任意の 2 頂点間の Hにおける距離が, G における距離の高々 t 倍で 抑えられていることをいう. 本稿では与えられ たグラフの中で最小辺数の t スパナーを見つけ る問題を扱い、この問題を最小 t スパナー問題 と呼ぶ. 一般グラフにおける最小 t スパナー問 題は, t > 2 の場合に NP 困難である [1, 2]. そ の一方で、平面グラフにおける最小tスパナー 問題は、Brandes-Handke [3] によって、t > 5の場合に対してのみ NP 困難性が示されてお $0, t \in \{2, 3, 4\}$ の場合の計算複雑度は未解決 であった. 本研究では, $t \in \{2,3,4\}$ の場合に, 平面グラフにおける最小 t スパナー問題が NP 困難であることを示す. また, この証明の中で, 次数の制限されたグラフにおける最小 t スパ ナー問題の NP 困難性も得られており、これは 既存の次数制限を改善するものである. さらに、 取り除く辺数をパラメータとした最小 t スパ ナー問題に対して、固定パラメータアルゴリズ ムを与える.

2 最小 t スパナー問題の困難性

本研究では、各辺の長さが 1 である無向グラフのみを扱う。グラフ G=(V,E) とその頂点 $u,v\in V$ に対して、u と v 間の最短パスの長さを $d_G(u,v)$ と表す。正の整数 t に対して、G の部分グラフ $H=(V,E_H)$ が t スパナーであるとは、 $d_H(u,v)\leq t\cdot d_G(u,v)$ が任意の $u,v\in V$ に対して成立することをいう。なお、t が非整数である場合にも t スパナーを考えることはできるが、t スパナーは必ず [t] スパナーでもあることが確認できるため、以下では t が正整数の場合のみを考える。本研究では、与えられたグラフ中で最小辺数のスパナーを見つける問題、すなわち、正の定数 t に対して以下の問題を扱う。

最小 t スパナー問題

入力: グラフ G = (V, E).

問題: G の t スパナー $H = (V, E_H)$ のうち,

辺数 $|E_H|$ が最小となるもの.

t=1 の場合は、単に G の多重辺を取り除いて得られるグラフが最適解となるので、この問題は自明に解くことができる。そのため、以下では $t\geq 2$ の場合のみを考える。一般グラフにおける最小 t スパナー問題は任意の $t\geq 2$ に対して NP 困難であることが知られているため [1,2], この問題に対してはグラフクラスを制限した際の多項式時間可解性が盛んに研究されている [4,5].

本研究では、まず入力グラフが平面的な場合の最小 t スパナー問題を扱う。 1997 年にBrandes-Handke [3] によって、 $t \geq 5$ の場合に対しては、平面グラフ上の最小 t スパナー問題の NP 困難性が示されている。 それ以来、 $t \in \{2,3,4\}$ の場合の計算複雑度は未解決であった。本研究の一つ目の成果は以下の定理を示したことである、

定理 1 任意の整数 $t \ge 2$ に対して, 平面グラフ上の最小 t スパナー問題は NP 困難である.

この定理の証明においては、平面グラフ G=(V,E) における最小の t スパナーが、その双対グラフ $G^*=(V^*,E^*)$ におけるある種の最小支配集合と対応していることを示すことが鍵となっている. G における t スパナーは E の部分集合であるのに対して、 G^* における支配集合は V^* の部分集合、すなわち、G の面の集合に対応している. この意味で、G における t スパナーと G^* における支配集合は一見すると全く無関係に見えるため、これらの集合の対応を示したことは、それ自体興味深い結果であると言える.

他の興味深いグラフクラスとしては、次数の制限されたグラフが挙げられる. Cai-Keil [6] は、最小2スパナー問題が、入力グラフの次数が高々4の場合には線形時間で解ける一方で、最大次数が高々9の場合にはNP困難であることを示した. また、最小3スパナー問題が、入力グラフの次数が高々3の場合には多項式時間で解ける一方で、最大次数が高々8の場合に

は NP 困難であることを示した. 我々の定理 1 の証明においては, 次数が制限されたグラフを用いているため, 既存の次数の制限を以下のように改善することができる.

定理 2 最小 2 スパナー問題は, 最大次数 8 の 平面グラフにおいても NP 困難である.

定理 $3 t \in \{3,4\}$ に対して, 最小 t スパナー問題は, 最大次数 6 の平面二部グラフにおいても NP 困難である.

3 固定パラメータ容易性

本研究の二つ目の成果は、最小 t スパナー問題をパラメータ化した問題を扱い、固定パラメータアルゴリズムを与えたことである。一般に、t スパナーは連結グラフとなり $\Omega(|V|)$ 本の辺を持つため、最小 t スパナーの辺数を問題のパラメータとするのは適切ではない.この問題に対しては、最小 t スパナーを得るために取り除いた辺の数がパラメータとして自然に考えられる.すなわち、以下の問題が考えられる.

パラメーター化最小 t スパナー問題

入力: グラフ G = (V, E).

パラメータ: 正整数 k.

問題: $|E'| \ge k$ を満たす辺集合 $E' \subseteq E$ で, $H = (V, E \setminus E')$ が G の t スパナーとなるもの, もしくはそのような E' が存在しないと出力.

本研究では、この問題に対する固定パラメータアルゴリズムを与えた。ただし、アルゴリズムが固定パラメータアルゴリズムであるとは、その計算時間がある関数 f を用いて、 $f(k)(|V|+|E|)^{O(1)}$ で抑えられることをいう。より正確には、我々の結果は以下の通りである。

定理 4 t を正整数とする. パラメーター化最小 t スパナー問題に対して, 計算時間が $O(k(k^2t(t+1))^{k+1} + |V||E|)$ となるアルゴリズムが存在 する.

アルゴリズムの概略は以下の通りである. その正当性の証明等は本稿では省略する.

アルゴリズム

Step 1. 各辺 $e \in E$ に対して以下を行う: e の両端点を結ぶ G - e における最短パスを計算し、その長さが t+1 以上であれば、e をグラフ G から取り除く.

Step 2. 残った辺の数が $k^2t(t+1)$ 以上であ

れば、必ず条件を満たす E' が存在する (そのような E' を見つける多項式時間アルゴリズムも存在する).

Step 3. 残った辺の数が $k^2t(t+1)$ 未満であれば, 全探索によって条件を満たす E' が存在するか否かを判定する.

4 まとめ

本研究では、平面グラフと次数制限付きグラフにおける最小 t スパナー問題の NP 困難性を示した。依然として計算複雑度が未解決な問題の一例としては、最大次数が $k \in \{5,6,7\}$ の場合の最小 2 スパナー問題が挙げられる。また、取り除く辺数をパラメータとした固定パラメータアルゴリズムの研究は、本研究で扱った最小 t スパナー問題に限らず、他のネットワークデザイン問題においても興味深い課題であると考えられる。

謝辞 本研究は, JST, ACT-I および 科研費 JP16K16010, JP16H03118 の支援を受けた.

- [1] L. Cai. NP-completeness of minimum spanner problems. *Discrete Applied Math.*, 48(2):187–194, 1994.
- [2] D. Peleg and A.A. Schäffer. Graph spanners. *J. Graph Theory*, 13(1):99–116, 1989.
- [3] U. Brandes and D. Handke. NP-completeness results for minimum planar spanners. In *Proc. WG 1997*, pages 85–99, 1997.
- [4] G. Venkatesan, U. Rotics, M.S. Madanlal, J.A. Makowsky, and C. Pandu Rangan. Restrictions of minimum spanner problems. *Information and Computa*tion, 136(2):143–164, 1997.
- [5] W. Duckworth, N.C Wormald, and M. Zito. A PTAS for the sparsest 2-spanner of 4-connected planar triangulations. J. Discrete Algorithms, 1(1):67-76, 2003.
- [6] L. Cai and M. Keil. Spanners in graphs of bounded degree. *Networks*, 24(4):233–249, 1994.

数理計画問題におけるmax-plus代数の活用 〜制御工学から組合せ最適化まで〜

五島 洋行¹ ¹法政大学 e-mail: goto-h@hosei.ac.jp

1 概要

Max-plus 代数[1], [2]は,複数事象の同期,並列実行,容量制約,非競合性,などの制約や特徴を持つ離散事象システムの記述と解析に適した演算系である。本稿では基本的な日程計画問題への適用から,各種のスケジューリング問題への応用,組合せ最適化問題との融合まで,数理計画問題における max-plus 代数の活用例をいくつか紹介する.

実数全体を \mathbb{R} で表し、 $\mathbb{R}_{max} = \mathbb{R} \cup (-\infty)$ とする.二つのスカラ量 $x,y \in \mathbb{R}_{max}$ に対して、加算 \oplus および乗算 \otimes をそれぞれ $x \oplus y = \max(x,y), x <math>\otimes y = x + y$ と定義する.それぞれの演算子に対するゼロ元および単位元は $-\infty$ および0であり,各々 ϵ および ϵ と書く.ベクトルや行列の加算および乗算も通常の代数系と同じように定義し、 \mathbb{R}_{max} を各要素に持つベクトルは小文字・太字・斜体,行列は大文字・太文字・斜体で表記する.

2 日程計画問題への適用

タスクの一覧と実行時間,先行タスクが表 1 にように与えられたプロジェクトの日程計画を考える.状態をノード,タスクをエッジで表現した AOA(Activity on Arrow)ネットワーク構造は,図 1 のように表せる.プロジェクトの開始時刻をt=u,終了時刻をy,ノードiにおける最早結合点時刻を x_i とすると, x_i は次のように表せる.

 $x_1 = u$, $x_2 = x_1 + d_A$, $x_3 = x_2 + d_C$, $x_4 = \max(x_2 + d_B, x_3 + 0)$, $x_5 = x_4 + d_D$, $y = x_5$ 複数タスクの同期は \max 演算,時間の経過は+演算で表現され,それぞれ演算子 \oplus , \otimes で置き換えると,

 $x_1 = u$, $x_2 = x_1 \otimes d_A$, $x_3 = x_2 \otimes d_C$, $x_4 = x_2 \otimes d_B \oplus x_3$, $x_5 = x_4 \otimes d_D$, $y = x_5$ となり, これらは x_i とuに関して線形な形をしている. 右辺に現れる x_j を x_i (i < j)に代入する

表 1. 四つのタスクからなるプロジェクトの構成

タスク名	所要日数	先行タスク	
A	$d_{ m A}$		
В	$d_{ m B}$	A	
С	$d_{ m C} \ d_{ m D}$	A	
D	$d_{ m D}$	B, C	
A B D			
$1) \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 5$			

図1. 4タスクプロジェクトの AOA 表現

ことを繰り返すと、次のように行列表現できる.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e \\ d_A \\ d_A \otimes d_C \\ d_A \otimes (d_B \oplus d_C) \\ d_A \otimes (d_B \oplus d_C) \otimes d_D \end{bmatrix} \otimes u, \ y = [x_5]$$

一般的には、タスク数nのプロジェクトに対し、タスクの先行制約を $F \in \mathbb{R}_{\max}^{n \times n}$ 、所要日数を $d \in \mathbb{R}_{\max}^{n}$ 、 $P = \operatorname{diag}(d) \in \mathbb{R}_{\max}^{n \times n}$ 、最上流タスクの位置を表す入力ベクトルを $b \in \mathbb{R}_{\max}^{p \times 1}$ 、最下流タスクの位置を表す出力ベクトルを $c \in \mathbb{R}_{\max}^{1 \times q}$ 、タスクの開始時刻を $u \in \mathbb{R}_{\max}^{p}$ と書くとき、各タスクの最早終了時刻 $x \in \mathbb{R}_{\max}^{n}$ と最早完了時刻 $y \in \mathbb{R}_{\max}^{q}$ は次のように表せる.

 $x-d=F\otimes x\oplus b\otimes u, y=c\otimes x$ 第1式左辺のdを右辺に移項し、右辺第1項のxに右辺全体を代入することを繰り返すと、下記のような表現形が得られる.

 $x = A \otimes b \otimes u$, $A = (P \otimes F)^* \otimes P$ 演算子*はクリーネ閉包(Kleene star)と呼ばれ, $X^* = e \oplus X \oplus X^{\otimes 2} \oplus \cdots$

で定義される。隣接行列Xが有向グラフで,閉路なしまたは重みが非負のみの閉路を持つ場合, X^* は有限項数の和で計算できる。紙面の制約上詳細は割愛するが,二つの線形方程式

 $x = A \otimes b \otimes u$, $y = c \otimes x$ に対して双対な方程式

$$x' = (c \otimes A) \setminus y, \ u' = b \setminus x'$$

は、各タスクの最早開始時刻とプロジェクトの最早開始時刻を与える。これらを用いると、各タスクの余裕時間など、PERT(Performance Evaluation and Review Technique)の日程計画問題と同様な計算が、max-plus代数系では簡素な代数演算で行える。演算子\は疑似的な左除算を表すが、詳細は[2]、[3]などを参照されたい。

3 制御理論的な応用

古典的な PERT では、開始状態と終了状態をそれぞれ一つのノードで表す1入力1出力系を扱うが、max-plus 代数を用いれば、多入力多出力系や、同一ジョブを繰り返し実行する生産システムなどの記述も容易である。イベントカウンタと呼ばれる初期状態からの事象の発生回数をkとすると、事象の最早および最遅生起時刻は、次のような方程式系で記述できる。

$$x(k) = A \otimes x(k-1) \oplus B \otimes u(k)$$

$$y(k) = C \otimes x(k)$$

$$x'(k) = A \setminus x'(k+1) \wedge C \setminus y(k)$$

$$u'(k) = B \setminus x'(k)$$

 $1 \cdot 2$ 番目の方程式は、それぞれ状態方程式および出力方程式と呼ばれ、現代制御理論の状態空間表現と類似している。状態方程式は、k-1番目の状態とk番目の入力からk番目の状態を予測する式であり、この関係を繰り返し用いることで、k+1番目以降の事象の状態や出力時刻が予測できる。

モデル予測制御の枠組みを援用した応用例を一つ挙げる。予測ホライズンと呼ばれる予測区間 $N_P(\ge 1)$ に対し,k+i ($0 \le i \le N_P-1$)番目の出力目標時刻 $\mathbf{r}(k+i)$ を定め,さらに出力予測時刻 $\mathbf{y}(k+i)$ に対する遅延ペナルティや運用コストを考慮した評価関数を定め,評価関数を最小化するように最適な入力時刻 $\mathbf{u}(k+i)$ やタスクの実行時間 $\mathbf{d}(k)$ を調整したりする。このような応用により,外乱に対して頑健な JIT (Just In Time)スケジューリングが実現できる.

4 組合せ最適化問題との融合

スケジューリング問題への応用に関する実務的な要請として、タスクの実行時間が確率的に変動する、タスクを実行できるリソースが限られる、複数のリソースの一つを選択的に利用

する、場合の考慮などがある。これらは純粋な max-plus 代数のみでは記述が困難であり、何ら かの仮定や拡張、変換などが必要になる。

実行時間の確率変動に関しては、一般的な確 率分布の場合はタスク数分の多重積分が必要 である. 良く知られた確率分布を仮定する場合 でも、タスクの直列/並列な配置で解析的に解 けるクラスが異なるため, 両者とも現実的なア プローチとはいえない. そこで著者らが近年着 目してきた手法は、Critical Chain Project Management (CCPM)[4]と呼ばれる手法で、複数 タスクの確率変動分を仮想な確定的タスクで 置き換え、メイクスパン最小化を目指す. 最適 化問題として捉えると, タスクの実行順序選定 やボトルネックの検出に組合せ最適化が現れ る NP 困難問題であるが、近年の汎用ソルバー の性能向上により、タスク数が少ない場合は厳 密解を求めることも可能になっている. 最適化 問題は max-plus 代数のみでは記述不可能であ るが、最早・最遅時刻を求める主要な部分は max-plus 代数で記述できる.

複数リソースの選択に関しては、選択に関する min 演算と同期に関する max 演算が混在する場合があり、扱いにくい、しかし max, min 演算のいずれも、目的関数の設定が不要な制約充足問題に帰着可能である。(max, min, +)で記述できる max-min-plus-scaling system は、これまでのところ手計算で解析できる規模に限られていたが、汎用ソルバーの進歩により、モデリングと解析の枠組みが整理され、より大きなサイズのシステムが扱えるようになることが期待される。

- [1] B. Heidergott, G. J. Olsder and L. Woude, Max Plus at Work: Modeling and Analysis of Synchronized Systems. Princeton University Press, 2006.
- [2] F. Baccelli, G. Cohen, G. J. Olsder and J. P. Quadrat, Synchronization and Linearity. John Wiley & Sons, 1992. (http://maxplus.org)
- [3] 五島洋行, Max-Plus 代数を用いて日程計 画問題を考える, 計測と制御, 52 (2013), 1083-1089.
- [4] L. Leach, Critical Chain Project Management, Third Edition, Artech House, 2014.

Max-Plus 代数とスケジューリング問題

久保 奨¹, 西成 活裕²

1独立行政法人統計センター,2東京大学先端科学技術研究センター

e-mail : boku446@gmail.com

1 概要

フローショップスケジューリング問題に対して、Max-Plus 代数における行列を使った新たな定式化を与えた.これにより、線形代数との関係性等を用いて、見通し良く計算することが可能になる.また、メイクスパンを最小にする同一並列2機械問題の数学的構造が、Max-Plus代数における"代数方程式"を解くことで明らかにできることが分かった.

2 Max-Plus 代数

Max-Plus 代数 $(\mathbb{R}, \oplus, \circ)$ は次のように定義される. $\mathbf{0} = -\infty$, $\mathbf{1} = 0$ として,

- $\bar{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \mathbf{0}$
- $a, b \in \mathbb{R}$ に対して,

 $a \oplus b := \max[a, b], \quad a \circ b := a + b.$

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]参照).

また、Max-Plus 代数における方程式(以下「Max-Plus 代数方程式」という.)

$$\begin{cases} \bigoplus_{k=0}^{m} A_{2k} \circ X^{n-2k} = \bigoplus_{k=0}^{m-1} A_{2k+1} \circ X^{n-(2k+1)}, \\ n = 2m; \\ \bigoplus_{k=0}^{m} A_{2k} \circ X^{n-2k} = \bigoplus_{k=0}^{m} A_{2k+1} \circ X^{n-(2k+1)}, \\ n = 2m+1, \end{cases}$$

ここで、 $A_0 \in \mathbb{R}$, $A_i \in \mathbb{R}$ $(i \in \{1,...,n\})$, の解は簡単に求まることが知られている。例えば、不等式 $A_n \circ A_{n-1}^{-1} \le \cdots \le A_2 \circ A_1^{-1} \le A_1$ が成り立つとき、解の集合は、

$$\{A_n \circ A_{n-1}^{-1}, \dots, A_2 \circ A_1^{-1}, A_1\}$$
.

3 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 $p_{i,j} \geq 0$ $(i \in \{1,2,...,m\}; j \in \{1,2,...,n\})$ とする、

ここでは、全機械においてジョブを処理する順序が同じである順列フローショップを扱う、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.

$$C_{i,\sigma(k)}=\left(C_{i-1,\sigma(k)}\oplus C_{i,\sigma(k-1)}\right)\circ p_{i,\sigma(k),}$$
 (1)
ここで, $C_{0,j}=C_{i,\sigma(0)}=\mathbb{1}(=0)$ である.

3.1 ジョブを行列に対応させた定式化

 $C'_j = (C_{1,j} \ C_{2,j} \dots C_{m,j})^T$ とする. このとき, 式 (1) は以下のように書ける [2].

$$\mathbf{C}'_{\sigma(n)} = J_{\sigma(n)} \circ \cdots \circ J_{\sigma(1)} \circ \mathbf{C}'_{0}, \qquad (2)$$

ここで

$$J_{j} = \begin{pmatrix} p_{1,j} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ p_{1,j} \circ p_{2,j} & p_{2,j} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ p_{1,j} \circ \cdots \circ p_{m,j} & \cdots & p_{m,j} \end{pmatrix},$$

 $m{C}_0' = (1 \dots 1)^T$ である.メイクスパン(全ジョブの処理が終わるまでの時間)は,ベクトル $m{C}_{\sigma(n)}'$ の第 m 成分.

ざらに、no-wait や blocking のフローショップ については、別の行列 J_j を考えればよい(no-wait については既存研究あり [3]).

3.2 機械を行列に対応させた定式化

 $C_i^{\sigma} = \begin{pmatrix} C_{i,\sigma(1)} & C_{i,\sigma(2)} \dots C_{i,\sigma(n)} \end{pmatrix}^T$ とする. このとき、式 (1) は以下のようにも書ける [4].

$$\boldsymbol{C}_{m}^{\sigma} = M_{m}^{\sigma} \circ \cdots \circ M_{1}^{\sigma} \circ \boldsymbol{C}_{0}^{\sigma}, \tag{3}$$

ここで、 M_i^{σ}

$$= \begin{pmatrix} p_{i,\sigma(1)} & & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & \ddots & & & \\ p_{i,\sigma(1)} \circ \cdots \circ p_{i,\sigma(n)} & & & \cdots & p_{i,\sigma(n)} \end{pmatrix},$$

 $C_0^{\sigma} = (\mathbb{1} \dots \mathbb{1})^T$ である. メイクスパンは, ベクトル C_m^{σ} の第 n 成分.

さらに、no-idle や busy のフローショップに ついては、別の行列 M_i^{σ} を考えればよい.

3.3 線形代数との関係

メイクスパンを最小にするフローショップ問題は、式(2)及び(3)の演算を普通の行列計算と見なして、 $C'_{\sigma(n)}$ 又は C^{σ}_m のp-ノルムを最小にする置換 σ を見つける問題に対応する。Max-Plus代数は、超離散化・トロピカル化を通じて、非負で減法なしの普通の実数の代数と対応付けられる点に留意。

4 同一並列2機械問題

同一並列 2 機械問題は,2 個の同一機械,n 個のジョブからなる.各ジョブはどちらかの機械で処理されればよく,その処理時間を $p_j > 0$ $(j \in \{1,2,...,n\})$ とする.このとき,メイクスパン C_{\max} は, $a_i \in \{0,1\}$ として

$$C_{\max} = p_1^{a_1} \circ \cdots \circ p_n^{a_n} \oplus p_1^{1-a_1} \circ \cdots \circ p_n^{1-a_n}.$$

メイクスパンの最小値が, $(p_1 \circ \cdots \circ p_n)^{1/2}$ (普通の代数では,全 p_j の和の半分)に等しくできるかを判定したい.そこで,メイクスパンの最小値が $(p_1 \circ \cdots \circ p_n)^{1/2}$ に等しいとして方程式を立てると,Max-Plus 代数方程式が出てくる.例えば,n=5のときには, $p_1 \geq \cdots \geq p_5$ として, p_1 の Max-Plus 代数方程式

 $p_1^{10} \oplus p_1^8 \left(p_2^2 p_3^2 p_4^2 p_5^2 \right) \oplus p_1^6 \left(p_2^4 p_3^4 p_4^4 \right) \\ \oplus p_1^4 \left(p_2^6 p_3^6 p_4^2 p_5^2 \right) \oplus p_1^2 \left(p_2^8 p_3^8 \oplus p_2^8 p_3^4 p_4^4 p_5^4 \right)$

- $\oplus p_2^6 p_3^6 p_4^6 p_5^6$
- $= p_1^9 (p_2 p_3 p_4 p_5) \oplus p_1^7 (p_2^3 p_3^3 p_4^3 p_5)$
 - $\oplus \ p_1^5 \left(p_2^5 p_3^5 p_4^3 p_5\right) \oplus p_1^3 \left(p_2^7 p_3^7 p_4 p_5 \oplus p_2^7 p_3^5 p_4^3 p_5^3\right)$
 - $\oplus p_1 (p_2^7 p_3^5 p_4^5 p_5^5)$

を得る (\circ を略. 以下同様). この解は, $p_3 \leq p_4p_5$ のとき, $\{p_2p_3p_4p_5, p_2p_3p_4p_5^{-1}, p_2p_3p_4^{-1}p_5, p_2p_3^{-1}p_4p_5, p_2^{-1}p_3p_4p_5\}$, $p_3 > p_4p_5$ のとき,

 $\{p_2p_3p_4p_5, p_2p_3p_4p_5^{-1}, p_2p_3p_4^{-1}p_5, p_2p_3p_4^{-1}p_5^{-1}\}$. このように、与えられた最大の p_1 が他の p_j から成る係数のMax-Plus代数方程式の解となるかどうかを判定する問題に等しいことが判明した。この方程式は計算量は膨大であるものの機械的に導出でき、その解も機械的に求まる。nが大きくても同様の計算はできる.

なお、この問題は、分割問題(n 個の自然数を 2 つのグループに分け、各グループ内の数の和が等しくなるようにできるかどうかを判定する問題)と一致し、NP 完全であることが知られている。今回示した我々の手法は、有名な未解決問題である P 対 NP 問題に新たな視点を与えるものと考える。

5 まとめ

いくつかのフローショップ問題を、Max-Plus 代数の行列を用いて定式化できた.ここでは紹介できなかったが、この定式化により、既存結果の拡張や別証明を与えることもできる.また、メイクスパン最小の同一並列2機械問題では、Max-Plus代数方程式を調べることで、その構造を明らかにできることが分かった.

以上のように、Max-Plus 代数は、(一部の) スケジューリング問題に対して有用である.他のフローショップ問題を始め、様々なスケジューリング問題について、Max-Plus 代数を用いて分析することが今後の課題である.

- [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] Vo N.-V., Lenté C., Equivalence between two flowshops problems: Maxplus approach, in: Proc. of 2nd International Conference on Operational Research and Enterprise Systems, pp. 322–325, 2013.
- [4] Kubo S., Nishinari K., Applications of max-plus algebra to flow shop scheduling problems, Discrete Applied Mathematics, 247C (2018), 278–293

Max-Plus 代数における行列の核とその基底の特徴づけ

西田 優樹 ¹

1 同志社大学大学院理工学研究科数理環境科学専攻

e-mail: cyjc1901@mail4.doshisha.ac.jp

1 概要

Max-Plus 代数とは、実数に負の無限大を加えた集合上に、加法⊕として max をとる演算、乗法⊗として和をとる演算を定義した冪等半環である。 Max-Plus 代数上での線形空間やその基底は通常の線形代数の場合に倣って定義できるが、それらが持つ性質の中には Max-Plus 代数に特有のものも存在する。その特徴的な例の1つとして、有限生成線形空間の基底が極といわれる元によって一意的に定まることが挙げられる [1]。そのため、Max-Plus 線形代数における重要な問題は線形空間の極を求めることであり、生成系が与えられている場合 [1]、不等式系で定義される空間の場合 [2] など、場合に応じて種々のアルゴリズムが提案されている。

ここでは、線形空間として Max-Plus 行列の (トロピカル幾何学の意味での) 核に注目する. 行列のサイズが (n-1) 行 n 列の場合は、Max-Plus 代数における Cramer の公式によって核に含まれるベクトルの 1 つが計算でき、特にすべての (n-1) 次小行列が非特異であれば、核はそのベクトルのみで生成されることが知られている [3]. 本講演では一般のサイズの行列を扱い、(n-1) 次小行列に特異なものがあってもとの行列が退化している場合にも Cramer の公式を用いて行列の核の基底を特徴づけることができることを述べる.

2 Max-Plus 代数

実数全体の集合 \mathbb{R} に $-\infty$ をつけ加えた集合を \mathbb{R}_{\max} と表す. $a,b\in\mathbb{R}_{\max}$ に対して加法 \oplus と乗法 \otimes を以下のように定義する:

$$a \oplus b = \max\{a, b\}, \quad a \otimes b = a + b.$$

このとき \mathbb{R}_{\max} は加法 \oplus について冪等な半環になり、これを Max-Plus 代数という.

次に Max-Plus 代数上の行列を考える. \mathbb{R}_{\max} の元を成分にもつ $m \times n$ 行列の全体を $\mathbb{R}_{\max}^{m \times n}$ と表す. 特に $\mathbb{R}_{\max}^{n \times 1} = \mathbb{R}_{\max}^{n}$ 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)
$$A = (a_{ij}), B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{m \times n}$$
 に対して $A \oplus B = (a_{ij} \oplus b_{ij}).$

2) $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{l \times m}, B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{m \times n}$ に対して

$$A \otimes B = \left(\bigoplus_{k=1}^{m} a_{ik} \otimes b_{kj}\right).$$

3) $A=(a_{ij})\in\mathbb{R}_{\max}^{m\times n},c\in\mathbb{R}_{\max}$ に対して

$$c \otimes A = (c \otimes a_{ij}).$$

3 Max-Plus 線形空間

本講演では、Max-Plus 代数上の線形空間として、 \mathbb{R}^n_{\max} の部分空間のみを考えることにする.ここで、 $V \subset \mathbb{R}^n_{\max}$ が \mathbb{R}^n_{\max} の部分空間であるとは、以下が成り立つことを意味する:

- 1) $v, w \in V$ に対して $v \oplus w \in V$.
- 2) $v \in V, c \in \mathbb{R}_{\max}$ に対して $c \otimes v \in V$.

部分空間の基底についてはいくつかの定義の 仕方が知られているが、ここでは [1] に沿って 議論を進める.部分空間 $V \subset \mathbb{R}^n_{\max}$ の部分集合 $S = \{u_i \mid i \in I\} \subset V$ が V を生成するとは、任 意の $v \in V$ が

$$v = \bigoplus_{i \in I} c_i \otimes u_i \quad (c_i \in \mathbb{R}_{\max})$$

と表せることである. また,Sが一次従属であるとは,ある $u_i \in S$ が

$$u_j = \bigoplus_{i \neq j} c_i \otimes u_i \quad (c_i \in \mathbb{R}_{\max})$$

と表せることである.ただし,いずれの場合も c_i は有限個を除いて $-\infty$ である.Sが一次従属でないとき,一次独立であるという.さらに,Sが一次独立でかつ部分空間 V を生成するとき,Sは V の基底であるという.部分空間の基底は定数倍を除いて一意的に決まり,以下のように特徴づけられる.まず,ベクトル $v \in V$ が部分空間 $V \subset \mathbb{R}_{\max}$ の極であるとは, $v = v_1 \oplus v_2$ かつ $v_1, v_2 \in V$ であれば $v = v_1$ または v_2 が成り立つことである.

命題 1 ([1]) 部分空間 $V \subset \mathbb{R}_{\max}$ が有限生成であるとき、V の極の全体 E は V を生成する、特に、E に「 $v \sim w \Leftrightarrow$ ある $c \in \mathbb{R}$ があって $v = c \otimes w$ 」として同値関係を入れたとき、その同値関係による同値類の完全代表系は S の基底である.

4 Max-Plus 行列の核と Cramer の公式

どの列も有限な成分を含むような行列 $A=(a_{ij})\in\mathbb{R}_{\max}^{m\times n}$ に対して,斉次線形方程式 $A\otimes x={}^t(-\infty,\dots,-\infty)$ は自明な解しか持たない。そこで,行列 A の核 $\ker(A)$ を,すべての $i=1,\dots,m$ について $a_{i1}\otimes x_1\oplus\dots\oplus a_{in}\otimes x_n$ が 2 つ以上で同時に実現されるような $x\in\mathbb{R}_{\max}^n$ の全体として定義する.このように行列の核をトロピカル幾何学の意味で定義すると,通常の線形代数との様々な類似が成り立つ.例えば,正方行列 $P=(p_{ij})\in\mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ の行列式を

$$\det(P) = \bigoplus_{\sigma \in S_n} (p_{1\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes p_{n\sigma(n)})$$

と定義すれば、Max-Plus 代数における Cramer の公式が成り立つ.

命題 $\mathbf{2}$ ([3]) $A \in \mathbb{R}_{\max}^{(n-1) \times n}$ に対して, A からj 列目を除いた行列を $A^{(j)}$ とし,

$$x^{\operatorname{Cram},A} = {}^{t} \Big(\det(A^{(1)}), \cdots, \det(A^{(n)}) \Big)$$

とする. このとき, $x^{\text{Cram},A} \in \ker(A)$ であり, 特に $A^{(1)},\ldots,A^{(n)}$ がすべて非特異であるとき,

$$\ker(A) = \{c \otimes x^{\operatorname{Cram}, A} \mid c \in \mathbb{R}_{\max}\}\$$

である. ここで、行列が非特異であるとは行列式がただ1つの置換で実現されていることをいう.

5 Max-Plus 行列の核の基底

Max-Plus 代数上の行列 $A=(a_{ij})\in\mathbb{R}_{\max}^{m\times n}$ に対して, $\ker(A)$ は \mathbb{R}_{\max}^n の有限生成部分空間 であるから,その基底を考えることができる.このとき,基底に含まれるすべての成分が有限 であるベクトルは以下で特徴づけられる.

定理 3 $A \in \mathbb{R}_{\max}^{m \times n}$ に対して $\ker(A)$ の 1 組の基底 B を固定する.

- 1) m < n-1 のとき, $B \cap \mathbb{R}^n = \emptyset$.
- 2) $m \ge n-1$ のとき、すべての $v \in B \cap \mathbb{R}^n$ に対して、A から n-1 個の行を取り出

した $(n-1) \times n$ 行列 \tilde{A} と $c \in \mathbb{R}$ があって, $v = c \otimes x^{\operatorname{Cram}, \tilde{A}}$ と表せる.

例 4 正方行列

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 4 & -5 & 0 \\ 0 & 2 & -4 & 0 \\ -3 & -2 & -4 & 0 \\ 1 & -1 & -4 & 0 \end{pmatrix}$$

を考える. このとき, ker(A) の 1 組の基底は

$$\{{}^{t}(-1,-2,4,0),{}^{t}(-\infty,-4,4,0),{}^{t}(-3,-\infty,4,0)\}$$

である. 図 1 はこれらの基底の図形的な意味を表している. いま, 行列 A の 1, 2, 3 行目からなる行列を \tilde{A} とすると,

$$\det(\tilde{A}^{(1)}) = 0, \det(\tilde{A}^{(2)}) = -1,$$

$$\det(\tilde{A}^{(3)}) = 5, \det(\tilde{A}^{(4)}) = 1$$

だから ${}^t\!(-1,-2,4,0)=1\otimes x^{\operatorname{Cram},\tilde{A}}$ となっている.

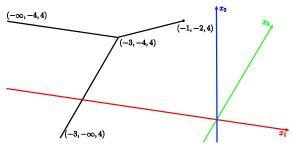


図 1. 例 4 の ker(A) と $x_4 = 0$ の共通部分

- [1] Peter Butkovič, Hans Schneider, and Sergei Sergeev. Generators, extremals and bases of max cones. *Linear Al*gebra and its Applications, 421(2):394– 406, 2007.
- [2] Xavier Allamigeon, Stéphane Gaubert, and Éric Goubault. Computing the vertices of tropical polyhedra using directed hypergraphs. *Discrete and Computational Geometry*, 49(2):247–279, 2013.
- [3] Jürgen Richter-Gebert, Bernd Sturmfels, and Thorsten Theobald. First steps in tropical geometry. *Contemporary Mathematics*, 377:289–318, 2005.

ゼータ関数の普遍性について

松本 耕二1

¹ 名古屋大学大学院多元数理科学研究科 e-mail: kohjimat@math.nagoya-u.ac.jp

1 Voronin の定理

Riemann ゼータ関数とは、無限級数

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \tag{1}$$

によって定義される複素変数 s の関数であって、この定義式の形では $\Re s>1$ でしか収束しないが、全平面に解析接続され、s=1 での 1 位の極を除けば正則となる。そして、 $\Re s>1$ で成り立つもうひとつの表示、すなわち Euler 積表示

$$\zeta(s) = \prod_{p} \left(1 - \frac{1}{p^s}\right)^{-1} \tag{2}$$

(積はすべての素数pにわたる)を介して、素数分布論と深く結びついている。そのため、Riemannゼータ関数は整数論の解析的研究において中核的な役割を果たす、極めて重要な研究対象である。

素数分布論は整数論の中では小さな一分野に 過ぎないが、整数論の他の分野においても、そ れぞれその分野にふさわしい、Riemann ゼー 夕関数の種々の一般化や類似物が導入され、盛 んに研究されている。

Riemann ゼータ関数は、しかしまた、非常に難しい研究対象でもある。例えばその零点分布について考えると、 $\Re s>1$ では Euler 積表示から零点を持たず、すると $\zeta(s)$ と $\zeta(1-s)$ を結びつける関数等式と呼ばれる基本的な等式によって、 $\Re s<0$ での零点の位置も確定できる。しかし、残された $0\leq \Re s\leq 1$ における零点分布の研究は極端に困難である。この範囲の零点の実部がすべて 1/2 であろう、というのが有名な Riemann 予想である。この予想の真偽は整数論に決定的な重要性を持つので、予想に向けて膨大な研究が行われてきたが、未だに解決の目処が全く立っていないのはよく知られているところである。

関数等式から従う対称性により、Riemann 予想を証明するためには、 $0 \le \Re s \le 1$ の右半分、つまり $1/2 < \Re s \le 1$ において $\zeta(s) \ne 0$ であ

ることを示せば良い。その右端である $\Re s=1$ の線上で $\zeta(s)\neq 0$ であることはすでに 19 世紀 に示された。(この事実は素数定理と同値である。)しかし、それから 100 年以上を経た今日に おいても、その線の左側で $\zeta(s)\neq 0$ であることが示された領域はごく狭く、現状では $\Re s>\rho$ で $\zeta(s)\neq 0$ が成り立つような $\rho<1$ の存在を示すことさえできていない。

Riemann 予想はなぜこれほどにも困難なのであろうか。その困難さの背景を、ある意味で示していると思われるのが、Voronin の普遍性定理と呼ばれる、次の定理である。

定理 1 (Voronin (1975)) K を $1/2 < \Re s < 1$ のコンパクトな部分集合で、その補集合が連結なものとする。関数 f(s) は K 上で定義され、連続で零点を持たず、さらに K の内部では正則とする。このとき、任意の $\varepsilon > 0$ に対して、

$$A(T; f, \varepsilon)$$

$$= \left\{ \tau \in [0, T] : \sup_{s \in K} |\zeta(s + i\tau) - f(s)| < \varepsilon \right\}$$

とおけば、

$$\liminf_{T \to \infty} \frac{1}{T} \mu(A(T; f, \varepsilon)) > 0$$

が成り立つ。ただし $\mu(\cdot)$ は 1 次元 Lebesgue 測度。

 $A(T;f,\varepsilon)$ に属する τ によって、 $\zeta(s+i\tau)$ は f(s) を K 上一様近似する。つまり上の定理は、「勝手な正則関数を $\zeta(s)$ の平行移動によって一様近似できる」という、目覚ましい結果なのである。

上の定理を見て、勝手な連続関数を多項式で近似する Weierstrass の定理、あるいはその複素版である、Mergelyan の定理 (Kが複素平面内のコンパクト集合で、補集合が連結なものとすれば、K上連続で Kの内部で正則な任意の関数は多項式で一様近似できる)を想起される方もいらっしゃるであろう。しかし Weierstrassや Mergelyan の定理においては、近似の度合いに応じて選ばれる多項式も変わってくるのに

対して、 Voronin の定理では $\zeta(s)$ という単一の関数でいかなる近似も賄える、というのが驚嘆すべき点であろう。

2 普遍性

普遍性という概念は、本来はゼータ関数とは 無関係に、解析学の中で抽出されたものである。 その源流を辿れば、条件収束するが絶対収束は しない無限級数は、和の順序を変更することで、 与えられた任意の値に収束したり、あるいは発 散したりするようにできる、という Riemann の古典的な定理にまで遡ることができる。

この定理の「任意の値」を「任意の連続関数」に置き換えたのが Fekete (1914/15) の結果である。彼がその存在を証明した実無限級数 $\sum_{n=1}^{\infty}a_nx^n$ は、[-1,1] 上定義された勝手な実数値連続関数 f で、f(0)=0 を満たすものに対して、適当に正の整数列 m_1,m_2,\ldots をとれば、[-1,1] 上で一様に

$$\sum_{n=1}^{m_k} a_n x^n \to f(x) \quad (k \to \infty)$$

が成り立つ、という性質を持つ。

続いて Birkhoff は、整関数 $\psi(z)$ で、「任意の整関数 f(z) に対し、複素数列 a_1,a_2,\ldots を適当に選べば、 \mathbf{C} の任意のコンパクト集合上で一様に $\psi(z+a_k)\to f(z)$ $(k\to\infty)$ となる」という性質を持つものの存在を証明した。この種の現象を、Marcinkiewicz は一般に「普遍性」と呼んだのである。

しかし、Voronin の定理以前は、普遍性を持つ数列や関数は、極めて人工的に作られたものだった。Riemann ゼータ関数のような「自然な」関数が普遍性を持つ、という発見は、当時非常に衝撃的だったのである。

3 Bohr の値分布論

しかしそうは言っても、Voronin の定理も、やはり全くの「無」から突然生み出されたわけではない。その前史として、Bohr に始まる、 $\zeta(s)$ の値分布論の詳しい研究があることを述べておこう。 1914 年、Bohr と Courant は、任意の $\sigma \in (1/2,1]$ に対し、集合 $\{\zeta(\sigma+it): t\in \mathbf{R}\}$ は \mathbf{C} 内で稠密であることを証明した。翌年には Bohr は、 $\log \zeta(\sigma+it)$ も同様の性質を持つことを示した。

この種の結果の証明の出発点は $\zeta(s)$ の Euler 積表示 (2) である。集合 $\{\log p\}$ (p は素数全体

をわたる)が \mathbf{Q} 上一次独立であることにより、Kronecker-Weyl の近似定理の応用として結論が得られるのである。

Voronin は普遍性定理を証明する少し前に、 この Bohr らの結果の一般化として、任意の $\sigma \in (1/2,1]$ に対し、

$$\{(\zeta(\sigma+it),\zeta'(\sigma+it),\ldots,\zeta^{(m-1)}(\sigma+it)): t \in \mathbf{R}\}$$

が C^m で稠密であることを示した。これはすでに普遍性定理にかなり近づいた結果である。 C 上での Bohr らの結果を高次元化したのが上の Voronin の結果であるとするならば、言わば「関数空間上での稠密性」を意味する普遍性定理は自然な次の段階とみなせるであろうし、実際に上の Voronin の定理から、「弱い形の普遍性」なら(関数の Taylor 展開を考えるだけで)比較的容易に導出することができる。

一方 Bohr 自身は、彼が得た結果の別方向への発展として、1930 年代になって(Jessen との共著で)次のような定理に到達している。 ${f C}$ 内の勝手な Jordan 可測集合 A に対して、

$$V(T,A) = \{ \tau \in [0,T] : \log \zeta(\sigma + i\tau) \in A \}$$
 とおくとき、

定理 2 (Bohr-Jessen の極限定理) 任意の $\sigma > 1/2$ に対して、極限値

$$W(A) = \lim_{T \to \infty} \frac{V(T, A)}{T}$$

が存在し、それはある密度関数によって積分表示できる。

今日ではこの定理は確率測度の弱収束の言葉で定式化することが多い。すなわち、A を C の Borel 部分集合とし、

$$P_{T,\sigma}(A) = \frac{1}{T}\mu(\{\tau \in [0,T] : \zeta(\sigma + i\tau) \in A\})$$

で ${\bf C}$ 上の確率測度を定義すれば、これは $T \to \infty$ のときある確率測度 P_{σ} に弱収束する。

Bohr-Jessen の定理は美しい定理なので、種々の一般化や精密化が今日でも研究されている。 伊原康隆と筆者による M 関数の理論などもその一例である。しかしここでは、普遍性に深く 関わる方向として、Bagchi の研究を紹介する。

1980 年代になって Bagchi はこうした極限 定理を、関数空間上に持ち上げることに成功し た。以下、 $D=\{s:1/2<\Re s<1\}$ とし、D 上の正則関数の全体(にコンパクトー様収束位相を入れたもの)を H(D) と書く。空間 S の Borel 部分集合の全体を $\mathcal{B}(S)$ で表す。 \mathbf{C} 内の単位円周を γ と書き、 $\Omega=\prod_p\gamma_p$ (ただしすべての p について $\gamma_p=\gamma$)とおくと、これはコンパクト位相 Abel 群になるので、全測度が 1 の Haar 測度 m_H が存在する。これによって $(\Omega,\mathcal{B}(\Omega),m_H)$ は確率空間となる。 Ω の元 ω の γ_p への射影を $\omega(p)$ と書き、

$$\zeta(s,\omega) = \prod_{p} (1 - \omega(p)p^{-s})^{-1}$$

と定義すると、これは D 上、almost all ω に対して収束し、H(D) 値の確率変数となる。 P_{ζ} をその分布、すなわち

$$P_{\zeta}(A) = m_H(\zeta^{-1}(A)) \quad (A \in \mathcal{B}(H(D)))$$

で定まる H(D) 上の確率測度とする。また

$$P_T(A) = \frac{1}{T}\mu(\{\tau \in [0,T]: \zeta(s+i\tau) \in A\})$$

もやはり H(D) 上の確率測度を定めるが、

定理 3 (Bagchi) $T \to \infty$ の時、 P_T は P_ζ に 弱収束する。

Bagchi によるこの定理の証明は、まず $\zeta(s)$, $\zeta(s,\omega)$ をそれぞれ近似する有限級数を考え、それらに対して特性関数を explicit に計算して弱収束する測度の存在を示し、さらに確率論の Prokhorov の定理やエルゴード理論の Birkhoff-Khinchin の定理を援用する、かなり込み入ったものである。

Bagchi はこの定理を梃子にして、確率論的な色彩の、普遍性定理の別証明を与えた。普遍性定理の証明は Voronin の原証明など二、三のものが知られているが、現在おそらくもっとも標準的なのはこの Bagchi の方法なので、次節でそのアイデアを簡単に紹介する。

4 Bagchi による普遍性定理の証明

Bagchi の証明のもうひとつの鍵となっているのは、「稠密性補題」と呼ばれる次の命題である。 $s \in D$ と $a_p \in \gamma$ に対し、

$$f_p(s) = -\log(1 - a_p p^{-s})$$

とおく。

補題 $\mathbf{4}$ (Bagchi) $\sum_{p} f_{p}(s)$ の形の、H(D) で収束する無限級数の全体がなす集合は、H(D) で稠密である。

この証明も、整関数論や Hilbert 空間論、Hardy 空間論などの解析的手法に加えて、素数分布論 で知られている事実

$$\sum_{p \le x} \frac{1}{p} = \log \log x + c_1 + O\left(e^{-c_2\sqrt{\log x}}\right) \quad (3)$$

も用いるなど、簡単なものではないが、ここで は省略する。

H(D) の元 φ で、その任意の近傍 G に対し $P_{\zeta}(G)>0$ となるものの全体を測度 P_{ζ} の support といい、 S_{ζ} と書く。すると補題 4 から、次の結果が得られる。

補題 5 S_{ζ} は D で零点を持たない φ すべてと $\varphi \equiv 0$ からなる。

そこで f(s) を定理 1 で与えられた関数とし、 まず f(s) が D 全体に解析接続されてそこで 零点を持たない場合を考える。条件

$$\sup_{s \in K} |g(s) - f(s)| < \varepsilon$$

を満たす $g \in H(D)$ の全体を G と書けば、G は f の開近傍で、定理 3 より

$$\liminf_{T \to \infty} P_T(G) \ge P_{\zeta}(G) \tag{4}$$

が成り立つ。一方、f についての仮定と補題 5 により $f \in S_{\zeta}$ だから、support の定義により $P_{\zeta}(G) > 0$ を得る。このことと (4) から定理 1 の結論を得る。一般の場合には、f(s) を近似 する多項式を Mergelyan の定理で作ってやる ことにより、すでに述べた場合に帰着すること ができる。これで定理 1 が証明された。

5 一般化と応用

冒頭で述べたように、今日では Riemann ゼータ関数の多種多様な一般化や類似物が導入され、整数論やその他諸分野で研究が進められている。こうした種々のゼータ関数、L 関数に対しても普遍性が成り立つかどうか調べる、というのは自然な問題意識であろう。

Riemann ゼータ関数の普遍性の証明では、その Euler 積表示 (2) が重要な役割を果たしていた。表示 (2) において、 $X=p^{-s}$ とおけば各因子は X の一次式である。このような形の Euler

積を一次の Euler 積と呼び、その場合(例えば Dirichlet の L 関数)には $\zeta(s)$ の場合の普遍性 の証明がさほどの困難なく一般化できる。

しかし、応用上重要な多くのゼータ関数、L 関数は高次の Euler 積を持つ。その典型例は二次の Euler 積表示を持つ、 $SL(2, \mathbf{Z})$ およびその合同部分群の保型 L 関数である。この場合の普遍性は、positive density method と呼ばれる新機軸を導入することにより、Laurinčikas と筆者によって証明された。この方法を用いて、現在では一般の高次 Euler 積の場合でも普遍性を示す手法は基本的には確立されている、と言って良い。

しかし実は、Euler 積を持たないゼータ関数についても普遍性が示せる場合がある。この方向ではなお多くの困難が残されている。例えばHurwitz ゼータ関数

$$\zeta(s,\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+\alpha)^{-s}$$

の普遍性は、 α が有理数と超越数の場合には証明されたが、代数的無理数の場合は未解決である。Linnik や Ibragimov は、"reasonable" なゼータ関数はすべて普遍性を持つであろう、と予言しているが、その予言の成否を確かめるにはまだ時間がかかりそうである。

さらに、複数個のゼータ関数、L 関数による同時近似(同時普遍性)という方向もあり、Voronin 以来研究が行われて来たが、Laurinčikasと筆者による保型 L 関数の同時普遍性、次いで見正秀彦による混合普遍性の発見などを契機として、近年大きく発展している。

普遍性定理の応用についても述べておこう。 Riemann ゼータ関数が代数的微分方程式の解 にはならないことは Hilbert も述べているが、 それを含む、より広く深い結果が普遍性定理か ら簡単に導出できる。上述した Hurwitz ゼータ 関数の普遍性からは、Hurwitz ゼータ関数の零 点分布の大域的な情報が得られる。普遍性と密 接に関係する、強回帰性の言葉による Riemann 予想の同値条件も Bagchi によって示され、近 年になって中村隆や Pańkowski によって進展さ せられている。見正秀彦と名越弘文による、二 次体の類数への応用も興味深い。Dirichlet 多 項式の挙動について Ramachandra が提起し た予想を、普遍性を用いて否定的に解決した Andersson の仕事もある。物理学者によって書 かれた、物理学への応用を扱った論文もある。

普遍性定理は、 $\zeta(s+i\tau)$ ($\tau \in \mathbf{R}$) の軌道が関数空間内で稠密であることを主張するものなので、大変エルゴード的な香りのする結果である。この視点をより積極的に捉えた、エルゴード的普遍性、という概念も近年 Steuding によって提唱された。エルゴード理論や力学系の観点から Riemann 予想に迫ろう、というアプローチは普遍性とは異なる立場からも Deninger らによって進められて来たが、普遍性はこうした方向性の研究にも重要な示唆を与えることになるのかもしれない。

注意 参考文献は特に本文中で引用してはいないが、標準的な教科書やサーベイ論文などを挙げておいた。ご参考になれば幸いである。

- [1] A. Laurinčikas, Limit Theorems for the Riemann Zeta-Function, Kluwer, 1996.
- [2] A. Laurinčikas and R. Garunkštis, The Lerch Zeta-function, Kluwer, 2002.
- [3] 松本耕二、ゼータ関数の確率論的値分布論、数学 53 (2001), 279-296.
- [4] K. Matsumoto, A survey on the theory of universality for zeta and L-functions, in "Number Theory: Plowing and Starring through High Wave Forms" (Proc. 7th China-Japan Sem.), M. Kaneko et al. (eds.), World Scientific, 2015, pp. 95-144.
- [5] J. Steuding, Value-Distribution of L-Functions, Lecture Notes in Math. 1877, Springer, 2007.
- [6] S. Takanobu, Bohr-Jessen Limit Theorem, Revisited, MSJ Memoirs 31, Math. Soc. Japan, 2013.

制限された空間での弾性薄膜の破壊

赤堀 裕介, 增田 千紘, 田中 良巳 横浜国立大学

e-mail: akahori-yusuke-ns@ynu.jp

1 はじめに

紙やポリマーのシートは曲げやすく、伸びにくい材料である。紙を机の上で裂く時のように、平坦な基板面上に、数 cm の切れ込みを入れシートを置き、左右に引っ張ると変形が平面に留まらずに山のように跳ね上がりが生じる。この操作を高さが数 mm 程度の空間で行うと、跳ね上がりが抑制され、シワ状のパターンが形成されることを見出した(図 1)。さらに、この時シートの引き裂きに必要な荷重は、跳ね上がりを拘束しない場合に比べ、著しく増加することが分かった。本研究の目的は、この現象についての力学的・幾何学的メカニズムを解析していくことである。

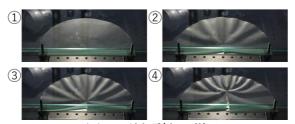
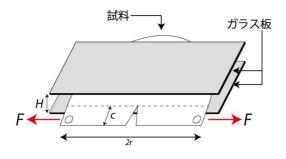


図 1. 引き裂きの様子

2 実験方法

弾性シートを半円と長方形から成る形状に切り出し、2 枚のガラス板とスペーサーを用いて作った空間内でシートを引き裂く(図 2)。シートは、r/c=3.5 の比率で、相似的にサイズを変えた5 種類の試料を用意した(r=49, 63, 77, 91, 105 mm)。空間の高さ(抑え高さ)H は 1, 2, 3, 4, 5, 10 mm と設定し、高さを制限しない場合とも比較した。各サイズ、の条件でシートに発生するシワの観察や、ロードセルによる引き



裂き荷重の計測を行った。実験には電動 図 2. 実験系の概略

スライダ(Oriental Motor 社製, EAS シリーズ) を使用し、等速で左右から引き裂きを実行した。 シートの材料として、一般的な印刷用紙(日本 製紙製)を用いた。

3 実験結果

高さの制限がない場合とある場合 (H=1 mm) の,引き裂き荷重の振る舞いを比較したものが図3である (横軸は,試料を左右に引張る変位)。用いた試料のサイズはどちらもr=105 mm である。引き裂き荷重の最大値 F_{max} は,制限なしの時に1.75 N,制限あり (H=1 mm) の時に約20.7 N となった。

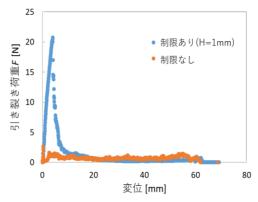


図3.引き裂き荷重の比較

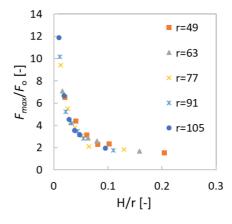


図4.最大引き裂き荷重と試料サイズ rの関係

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

試料の各サイズについて抑え高さ H を変えながら最大引き裂き荷重 F_{max} をまとめたものが図 4 である。ここで,高さ H は試料のサイズ r で除し, F_{max} は制限がない時の最大引き裂き荷重 F_0 で除して,規格化を行った。

また、それぞれの抑え高さHについて、 F_{max} とrの関係を示したものが図5である。

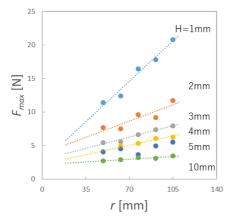


図 5. 試料のサイズと最大引き裂き荷重の関係

4 考察

まず図 4 から、H/r に対して F_{max}/F_0 が概ね一本のカーブに乗っていることが見て取れる。図 5 において、H を固定した場合に r と F_{max} には線形の関係が見て取れ、試料のサイズが大きいほど引き裂き荷重は大きくなることを示している。

図 4 の挙動は、``形状パラメータ''H/r が一定であれば、システムサイズrを変化させても引き裂きに必要な荷重 F_{max} は一定であることを示す。象徴的に書くと

 $F_{\text{max}} \sim \{ システムサイズ \}^0$ が我々の結果の骨子である。

一方,線形破壊力学では,き裂を含む弾性体の破壊強度を応力拡大係数に基づいて評価する[1]。中央に亀裂を持つ有限のサイズを持つ帯板に関する解析結果によれば,帯板を引張荷重で破壊するのに必要な集中荷重 P_{\max} と板の幅W との間に P_{\max} \propto $W^{1/2}$ の関係が知られている[1]。

すなわち

 $P_{\text{max}} \propto \{ システムサイズ \}^{1/2}$

となる。

のに対して、本研究の実験系では弾性シートが 面外変形を起こしている。これによって上下の 拘束壁と接触を介した力学的な相互作用(シワ の発生や複数方向への曲げ)が生じることが、 通常の線形破壊力学の予測との違いを生む原 因だと思われる。

破壊力学は平面応力状態を前提にしている

今後,面外変形に由来する拘束壁との接触が どのように、引き裂き荷重の増大に繋がるのか をより詳細に調査していく予定である。現在目 指しているのは、シートが上下方向に及ぼす荷 重の計測、シートと上ガラス板との接触面積の 計測などである。

参考文献

[1] 岡村弘之,線形破壊力学入門,培風館,1976.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

Maxwell 型と Zener 型の粘弾性き裂進展モデルについて

e-mail: taketaka@musashino-u.ac.jp

1 粘弾性体のき裂進展

高分子材料は加工のしやすさ、耐食性など多くの利点を持つが、その変形については非線形弾性体としての扱いが必要であり、耐久性に関して破壊の様子を調べるには複雑なモデルが必要とされている.一方、粘弾性体として高分子材料をとらえると、弾性バネと粘性を持つダッシュポット(ダンパー)を模式的に組み合わせて単純化したモデルとして考えることができる.

高石と木村によって導出されたフェーズフィールドを用いたき裂進展モデルは、き裂の進展に伴う計算領域の変更が不要であるなど数値計算に適した多くの性質を持っており、破壊靭性分布に対応したき裂進展などが再現できるが[1]、田中のアイデアを元にこのモデルのベースとなる Bourdin-Francfort-Marigo のエネルギー表式[2] にダッシュポットの粘性を表す内部歪み変数を導入することで、Maxwell 流体におけるき裂進展現象を扱うモデルを導出できることを示した[3]. このモデルではき裂の進展に関して粘性係数の閾値が現れることを確認されているが、非常にゆっくりした変形で無限に引き延ばされてしまい、工業的に利用されている高分子材料とは異なる特性を示してしまう.

そこで、このモデルを Zener 型に置き換えることで、実際の固体高分子材料により近い特性を持った材料でのき裂進展を扱うモデルを導出した.

2 Maxwell モデルと Zener モデル

粘弾性体においてモード III(面外変形) でのき 裂進展を考える. $x\in\Omega$ において、変位 $u(x,t)\in\mathbb{R}$ 、フェーズフィールド $z(x,t)\in\mathbb{R}$ に加え、内 部歪 $e(x,t)\in\mathbb{R}^2$ を導入する.

弾性係数 μ のバネと、粘性係数 η のダッシュポットにおいて、応力 (stress) σ 、歪 (strain) $\varepsilon = \nabla u$ はそれぞれ次の方程式を満たす、

[バネ]
$$\sigma = \mu \varepsilon$$
 [ダッシュポット] $\sigma = \eta \dot{\varepsilon}$

Maxwell モデル (図 1(a)) では,バネとダッシュポットが直列に結合しているため, $e := \varepsilon_2$

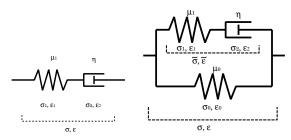


図 1. (a) Maxwell model and (b) Zener model.

とおくことで応力を生み出す歪が内部歪みに よって緩和される $(\varepsilon \to \varepsilon - e)$ と考え,系の自 由エネルギーを

$$\mathcal{E}(u,z,e) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1-z)^2 \mu_1 |\nabla u - e|^2 dx$$
$$+ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma \left(\epsilon |\nabla z|^2 + \frac{1}{\epsilon} z^2 \right) dx \tag{1}$$

と書ける. 一方, Zener モデル (図 1(b)) では, 直列に結合したバネとダッシュポットに対して, さらに並列にバネが結合している. このモデルでは, ゆっくりしたタイムスケールでは柔らかいバネ μ_0 の性質が現れ, ダッシュポットの応答よりも速いタイムスケールでは硬いバネ $\mu_1(>\mu_0)$ の性質が現れる. 従って,素子全体にかかる応力 σ とダッシュポットによる歪 (内部歪) e に関して次の式が導かれる.

$$\begin{cases}
\sigma = \mu_0 \nabla u + \mu_1 (\nabla u - e) \\
\eta \dot{e} = \mu_1 (\nabla u - e)
\end{cases} (2)$$

通常のバネと、応力を生み出す歪が内部歪みによって緩和される $(\varepsilon \to \varepsilon - e)$ バネの 2 種類がつながっていると考え、系の自由エネルギーを

$$\mathcal{E}(u, z, e) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1 - z)^2 \left(\mu_0 |\nabla u|^2 + \mu_1 |\nabla u - e|^2 \right) dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma \left(\epsilon |\nabla z|^2 + \frac{1}{\epsilon} z^2 \right) dx$$
(3)

とすると、エネルギー勾配流の式としてu,z,e

の時間発展方程式が導かれる.

$$\begin{cases}
\alpha_u \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla \cdot \left((1-z)^2 (\mu_0 \nabla u + \mu_1 (\nabla u - e)) \right) \\
\alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} &= \epsilon \nabla \cdot (\gamma \nabla z) - \frac{\gamma}{\epsilon} z + 2(1-z)w(u, e) \\
\alpha_e \frac{\partial e}{\partial t} &= \mu_1 (1-z)^2 (\nabla u - e) \\
w(u, e) &= \frac{1}{2} \left(\mu_0 |\nabla u|^2 + \mu_1 |\nabla u - e|^2 \right)
\end{cases}$$

ここで、 $\alpha_e = \eta$ で、 $\mu_0 \to 0$ で Maxwell モデ ルとなる.

このモデルを 3 次元弾等方性体の方程式に拡張する. $\varepsilon_{ij}[u] = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right), C^m_{ijkl} = \lambda_m \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_m(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ とすると,系の自由エネル

$$\mathcal{E}(u, z, e) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1 - z)^{2} \left(C_{ijkl}^{0} \varepsilon_{kl}[u] \varepsilon_{ij}[u] + C_{ijkl}^{1} (\varepsilon_{kl}[u] - e_{kl}) (\varepsilon_{ij}[u] - e_{ij}) \right) dx$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma \left(\epsilon |\nabla z|^{2} + \frac{1}{\epsilon} z^{2} \right) dx,$$
(5)

となる. このとき, エネルギー勾配流の式とし てu,z,eの時間発展方程式が導かれる:

$$\begin{cases}
\alpha_{u} \frac{\partial u_{i}}{\partial t} = \\
\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left((1-z)^{2} \left(C_{ijkl}^{0} \varepsilon_{kl}[u] \varepsilon_{ij}[u] \right. \\
+ C_{1ijkl} (\varepsilon_{kl}[u] - e_{kl}) (\varepsilon_{ij}[u] - e_{ij}) \right) \right) \\
\alpha_{z} \frac{\partial z}{\partial t} = \\
\epsilon \nabla \cdot (\gamma \nabla z) - \frac{\gamma}{\epsilon} z + 2(1-z)w(u,e) \\
\alpha_{e} \frac{\partial e_{ij}}{\partial t} = \\
(1-z)^{2} C_{ijkl}^{1} (\varepsilon_{kl}[u] - e_{kl}) \\
w(u,e) = \\
\frac{1}{2} (1-z)^{2} \left(C_{ijkl}^{0} \varepsilon_{kl}[u] \varepsilon_{ij}[u] \right. \\
+ C_{ijkl}^{1} (\varepsilon_{kl}[u] - e_{kl}) (\varepsilon_{ij}[u] - e_{ij}) \right)$$
Concluding remarks

3 Concluding remarks

Zener 型の粘弾性素子を考えることで、現実 の工業的材料に近い設定でのき裂進展を扱うこ とができるようになった. Zener モデルでは2 種類の周波数応答を持つ粘弾性体を表現してい る(図2)が、更に複雑な周波数応答へとモデル

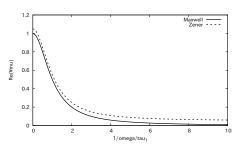


図 2. Frequency responce of Maxwell model and Zener model, where $\mu_0 = 0.05, \mu_1 = 1.0$.

を拡張することは容易である.

$$\mathcal{E}(u, z, e) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (1 - z)^{2} \left(C_{ijkl}^{0} \varepsilon_{kl}[u] \varepsilon_{ij}[u] + \sum_{n} C_{ijkl}^{n} (\varepsilon_{kl}[u] - e_{kl}^{n}) (\varepsilon_{ij}[u] - e_{ij}^{n}) \right) dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma \left(\epsilon |\nabla z|^{2} + \frac{1}{\epsilon} z^{2} \right) dx,$$

$$(7)$$

その一方で,数値計算において桁違いのタイム スケールを表現する場合は計算手法に工夫が必 要になる. 今後はどのような数値計算手法が有 効であるか確認しながら, 実際に近い周波数応 答でのき裂進展現象が再現できるか確かめてい きたい.

謝辞 本研究にあたり, 有益な議論をいただい た横浜国立大田中氏および金沢大木村氏に感謝 する. 本研究は戦略的イノベーション創造プロ グラム (SIP) の補助を受けて行われた.

- [1] T.Takaishi and M.Kimura, Phase field model for mode III crack growth, Kybernetika, 45 (2009), 605–614.
- [2] B. Bourdin, G. A. Francfort and J.-J. Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, J. Mech. Phys. Solids, 48 (2000), 797–826.
- [3] 高石武史, 田中 良巳, Maxwell 粘弾性き 裂モデルとその数値シミュレーション,計 算工学講演会論文集, 22 (2017), D-04-5.

MRE のための 3 次元粘弾性方程式に対するマルチスケール係数同定法

前川 秀1

1 京都大学 情報学研究科

e-mail: smaekawa@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本講演では、MREの実現のために、time harmonic な粘弾性方程式の係数同定逆問題に対して新しい係数同定法を提案し、その有効性を数値計算により示す。

MRE[1] とは,生体の剛性率の非侵襲的な測定法として提案された技術であり,癌の早期発見や肝硬変の進行度診断のためにその実現が期待されている.MRE は,単振動する振動子により生体表面で加振し,それにより励起された生体中を伝播する波を MR 装置により観測し,そのデータを元に剛性率を算出する.time harmonic な粘弾性方程式がこの生体中を伝播する波の数理モデルとされ,MRE はこの方程式の係数同定逆問題に相当する.

しかしながらこの問題の数値計算には困難が 伴い、剛性率分布が単純な問題設定であっても 望ましい結果が得られなかった.本研究ではこ の困難さの原因が係数の近似空間の次元の高さ にあると考え、大まかな係数推定(次元の低い 近似空間)から始めて徐々に細かく同定(近似 空間の次元を高く)すれば高精度な係数同定が 可能になるのではないかと着想した.

この着想に基づき,本講演ではマルチスケールな係数同定法を提案する.本手法は係数の近似空間の増大列をとり,各近似空間での係数同定結果から次の近似空間における初期推定を与えるものである.また,2次元問題に対しては,本手法により高精度な同定結果を得ている.本講演では,本手法が3次元問題に対しても有効であることを数値計算により示す.

2 time harmonic な粘弾性方程式の係 数同定逆問題

 $\Omega\subset\mathbb{R}^d,\ d=2,3$ を凸多角形領域 (d=2 の場合) もしくは凸多面体領域 (d=3 の場合) とし, $u_j,\ j=1,\dots,d$ を Ω 上の複素数値関数とする.また, μ を剛性率, ρ を密度, ω を加振周波数として,time harmonic な粘弾性方程式は以下のように記述される.

$$-\rho\omega^2 u_j = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left((\mu + i\omega\eta) \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \right)$$
$$+ \frac{\partial}{\partial x_j} (\lambda \operatorname{div} u) \quad \text{in } \Omega \ (j = 1, \dots, d),$$
$$+ 请思条件$$

ここで, $u=(u_1,\ldots,u_d)$ が粘弾性波を表している.MRE は,与えられた観測値 u_0 から剛性率 μ を再構成する問題として定式化される.

この再構成のために,X を L^∞ の適当な部分集合とし, u_G を係数推定 $G=(\mu,\lambda,\eta)$ のもとでの粘弾性波として,次の最小化問題

minimize
$$J'(G) = \frac{\|u_G - u_0\|^2}{2\|u_0\|^2}$$

を考える . 各係数には物理的要請により正値性などの制約条件が課されるため , このままでは一般的な勾配法が適用できない . そこで適当な変数変換 F と \mathbf{L}^∞ の有限次元線型空間 Y を与え , $X=F^{-1}(Y)$ とおいた最小化問題

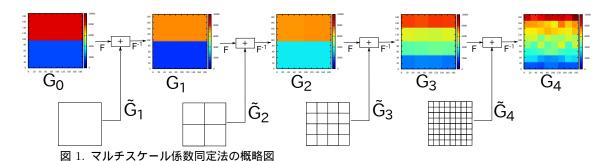
$$\underset{G \in Y}{\text{minimize}} J(G) = \frac{\|u_{F^{-1}(G)} - u_0\|^2}{2\|u_0\|^2}$$
 (1)

を考え,次のアルゴリズムに従い解く.

- 1) 観測値 u_0 と初期推定 G_0 を与える.
- 2) 係数推定 G から $u_{F^{-1}(G)}$ を計算する.
- (3) J(G) が十分小さければ終了する.
- 4) Gを更新し,2)へ戻る.

実用上は,例えば癌の早期発見などでは生体組織の剛性率の局所的な変化を捉えることが重要である.そのためには $\dim Y$ を十分大きく設定する必要があり,このような場合には通常望ましい数値計算結果は得られない.この困難の解決のために,本講演では次節で述べるマルチスケール係数同定法を提案する.

3 マルチスケール係数同定法



 L^∞ の有限次元線型空間の増大列 $Y_k,\ k=0,\ldots,N$ をとる.本講演で提案するマルチスケール係数同定法とは,次のアルゴリズムに従

- い最小化問題1を解く手法である.
- 1) 観測値 u_0 と初期推定 G_0 を与える .k=0 とおく .
- 2) 最小化問題

$$\underset{G \in Y_k}{\text{minimize}} J(G) = \frac{\|u_{F^{-1}(G)} - u_0\|^2}{2\|u_0\|^2},$$

を,上述のアルゴリズムに従い解く.

- 3) J(G) が十分小さければ終了する.
- 4) kの値を1つ増やし,2)へ戻る.

例えば Ω を正方形として, Ω を格子状に 2^k 個の正方形に分割し,その上の局所定数関数全体を Y_k とした場合の本手法の概略図を図1に示す.

2次元問題に対しては,本手法により高精度な同定結果を得ている.本講演では,本手法が3次元問題に対しても有効であることを数値計算により示す.

.....

参考文献

[1] R. Muthupillai, et al., Magnetic Resonance Elastography by Direct Visualization of Propagating Acoustic Strain Waves, Science, Vol. 269 (1995), 1854–1857.

共通ヌルクラインに基づく地震の最終滑り量の予測不能性

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いては、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)が重要な役割を果たしていると考えられる。それら二つの素過程のうちどちらが支配的となるか、という観点は相転移としてとらえられるが、その転移点近傍で物理量同士の冪的振る舞いが見出されている[1].この数理的結果が物理的・地震学的に示唆することは何か、過去の発表者のモデルを基に考察を行った。特に地震の最終滑り量の「数学的予測」と「物理的予測」の違いは強調されなければならない。加えて、数理モデルの応用としてLotka-Volterraモデルの特別なケースも考察した。

2 定式化及び相転移の発現

動的地震滑り過程において、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]. 一次元系を仮定すると、その支配方程式系は

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

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

である [1]. 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, $h(\phi)$ は空隙発展則を記述する関数である。空隙が地震滑り過程の間には回復しないという条件から ϕ の非負関数とする。更に $g(\phi) \equiv 1-\beta h(\phi)$ とし,g(0) < 0 を仮定する。正規化の定義から g(1) = 1 である。この系の解空間においては、点 (1,1) に点状のアトラクタが, ϕ 軸上 $\{\phi_r|0 \le \phi_r \le \phi_c\}$ の範囲に線状のアトラクタが専性じる $(g(\phi_c) = 0)$. 後者は v = 0 が両方程式の共通のヌルクラインであることから生じる。

どちらのアトラクタが出現するかという観点は、一種の相転移ととらえられる。もしthermal pressurization が支配的となれば、滑り速度は一定の値に達し、高速相が出現したとみなせる。これは数学的には点状アトラクタに対応する。

一方 dilatancy が支配的となれば、滑りは自発的に停止し、停止相が現れたと考えられる.これは線状アトラクタの発現である.

これら二相に対して、どちらが発現するかを 決める臨界初期滑り速度 v_c を見出すことがで きた [1].

$$v_c = \beta e^{-\beta A(0)} [B(\phi_c) - B(0)] - e^{\beta [A(\phi_c) - A(0)]} + 1$$
(3)

ここで $A(\phi) \equiv \int^{\phi} d\phi^* / [1 - g(\phi^*)], \ B(\phi) \equiv \int^{\phi} e^{\beta A(\phi^*)} d\phi^*$ である。初期滑り速度を v_0 とすると, $v_0 - v_c$ が正(負)ならば高速相(停止相)すなわち点状(線状)アトラクタが発現する。本研究では停止相すなわち線状アトラクタのみを考えるため, $v_0 - v_c = -\delta v < 0$ を仮定する($\delta v \ll 1$).

3 普遍性ー冪則ー

ここで $\phi|_{t=0}=0$ という条件に着目する.これは,解軌道の始点が線状の集合となることを意味している.すなわち線状アトラクタに吸収される解軌道に関しては,軌道の始点と終点の集合がともに線状の連続的な分布になる.点 $(0,v_c)$ から出発して線状アトラクタの右端の点 $(\phi_c,0)$ に至る軌道が点状・線状アトラクタに吸収される領域を分けるセパラトリクスであるとし,点 $(0,v_c-\delta v)$ から出発する軌道の終点が $(\phi_c-\delta\phi,0)$ になるとする $(0<\delta\phi\ll1)$.この時, δv と $\delta\phi$ の間に以下の冪則が成り立つことが見出されている[1]:

$$\delta \phi = (\delta v)^{1/2} \sqrt{\frac{2e^{\beta(A(0) - A(\phi_c))}}{\beta g'(\phi_c)}}.$$
 (4)

加えて、初期滑り速度が v_c (v_0) の時の最終滑り量を u_c (u_0) とする.この時、 $\delta u \equiv u_c - u_0$ と δv の間にも $\delta \phi = h(\phi_c)\delta u = (1-g(\phi_c))\delta u/\beta = \delta u/\beta$ から

$$\delta u = (\delta v)^{1/2} \sqrt{\frac{2\beta e^{\beta(A(0) - A(\phi_c))}}{g'(\phi_c)}}.$$
 (5)

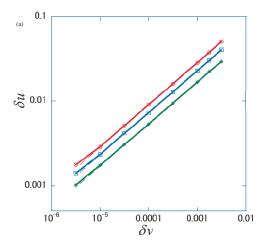
という冪則が成立する.

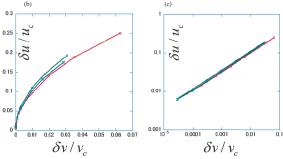
例えば, Suzuki and Yamashita (2014) のモデル [3]

$$\dot{v} = v(1 - v) - S_u(1 - \phi)v, \tag{6}$$

$$\dot{\phi} = T_a(1 - \phi)v,\tag{7}$$

を用いると $(S_u, T_a$ は正定数), $\delta u/u_c$ は $\delta v/v_c$ の 1 0 倍程度まで大きくなる場合があることが分かった(図 1). これは δv 中の不確定性が δu 中のそれに対して大きく拡大されることを意味し, δu ひいては地震の最終滑り量の正確な予測が大変困難であると示唆する.





4 地震学的考察

ここで、物理的にどちらの相が発現するのを予測できるのか考えてみたい.式 (3) より、 β 、 v_0 そして $g(\phi)$ が相の予測には必要であり、これらが分かれば数学的にはその予測が可能であることが分かる.しかし物理的視点から考えてみると、 $g(\phi)$ が空隙発展則 $h(\phi)$ に依存することは重要である.空隙発展則は確立したものは得られておらず、まだ不確定な点が含まれてお

り、そのため相の発現の物理的予測は難しいであろうと結論付けられる.

加えて、 δv も物理的不定性を持っていることも強調したい.特にそれが初期流体圧 p_0 に依存することが重要である.断層岩中の流体圧変化は例えば含水鉱物の脱水反応等の化学反応によって引き起こされるであろうと考えられている [4].従ってそれは微視的現象であり、地震学的データからの定量的見積もりは大変困難であると言える.最終滑り量は流体圧分布の反映でありそれゆえその正確な予測が困難であると言える.

5 数学的応用

最後に、本研究の取り扱いが他の系にも適用可能であることを議論する。特にここでは競争Lotka-Volterra(競争LV)モデルを扱う。競争LVモデルはある共通の資源に関して競争する種同士の数の動態を記述するものである。本研究で構築された枠組みはその特殊な系を表現できる。具体的には有毒種とそれを捕食する種の共存であり、発表ではこの系でどちらの種が生き残るのか、定量的な評価ができることを示す。

- [1] Suzuki, T., Emergence and seismological implications of phase transition and universality insystem with interaction between thermal pressurization and dilatancy, Phys. Rev. E, 96 (2017), 023005, doi:10.1103/PhysRevE.96.023005.
- [2] Rice, J.R., Heating and weakening of faults during earthquake slip, J. Geophys. Res., 111 (2006), B05311, doi:10.1029/2005JB004006.
- [3] Suzuki, T. and T. Yamashita, Effects of shear heating, slip-induced dilatancy and fluid flow on diversity of 1-D dynamic earthquake slip, J. Geophys. Res. Solid Earth, 119 (2014), doi:10.1002/2013JB010871.
- [4] Dobson, D. P., P. G. Meredith and S. A. Boon, Simulation of Subduction Zone Seismicity by Dehydration of Serpentine, Science, 298 (2002), 1407– 1410

血管新生における血管内皮細胞の基本動態に関する数理モデル

林 達也 1,5 , 由良 文孝 2 , 間田 潤 3 , 時弘 哲治 1,5 , 礪波 一夫 4 , 栗原 裕基 4,5 1 東京大学大学院数理科学研究科、 2 はこだて未来大学複雑系知能学科、 3 日本大学生産工学

部, 4 東京大学大学院医学系研究科, 5JST, CREST

e-mail: thayashi@ms.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

血管新生とは,既存の血管から新しい血管網をつくりだす現象である.既存の血管の基底膜や壁細胞の一部が溶融し,そこから漏出した血管内皮細胞が複雑な運動を行いながら初期の血管形態を構築する.特に,新しく生じた血管の伸長方向では,その先端付近に位置する内皮細胞が次々と入れ替わり(cell-mixing),非常に複雑な運動を行うことが知られている[1].最近,線維芽細胞や遺伝子ノックアウト処理を行った内皮細胞との比較によって,内皮細胞の基本動態として,2細胞間では,細胞接着により方向性を維持する直進運動,および,相互作用により運動の速度を亢進する回転運動の存在が示唆された.

本講演では、内皮細胞の直進運動と回転運動 を再現する数理モデルについて紹介し、2細胞 の動態解析での観測結果と数値シミュレーショ ン結果について比較検討を行う.

2 血管内皮細胞動態の数理モデル

2細胞の動態解析は、シャーレ内のコラーゲン培養地上の血管内皮細胞が、細胞分裂によって2細胞に分離した後の運動を観測しており、実質的に2次元系と見なすことができるため、血管内皮細胞の異方性を考慮し、各細胞を平面上の楕円として表現する。また、細胞間の接触によって接着分子が誘起されることを考慮して、遺伝子発現状況を細胞の位相として表現する。従って、内皮細胞の状態は、細胞の位置、速度、向き、位相、によって指定される。時刻tにおけるi番目の内皮細胞(以下、細胞iと呼ぶ)の位置を $\mathbf{r}_i^t \in \mathbb{R}^2$ 、速度を $\mathbf{v}_i^t \in \mathbb{R}^2$ 、向きとして、長軸の水平方向に対する回転角を $\psi_i^t \in [0, \pi)$,位相を $\phi_i^t \in [0, 2\pi)$ とする(i=1, 2).

細胞間の相互作用としては、松家らのモデル[2]と同様に、「仮足長程度の領域での引力」および「排除体積効果による斥力」を取り入れ、内皮細胞の動態のモデルとして次の運動方程式

を考察した.

$$\boldsymbol{v}_{i}^{t+1} = \boldsymbol{v}_{i}^{t} + M(\phi_{i}^{t})^{-1} \tilde{\boldsymbol{f}}_{i}^{t+1}$$
(1a)

$$\tilde{\boldsymbol{f}}_{i}^{t+1} \coloneqq -\gamma(\phi_{i}^{t}) \boldsymbol{v}_{i}^{t} + \boldsymbol{F}_{i,j}^{t} + \boldsymbol{D}_{i}$$

$$\boldsymbol{r}_{i}^{t+1} = \boldsymbol{r}_{i}^{t} + \boldsymbol{v}_{i}^{t+1}$$
(1b)

$$\phi_{i}^{t+1} = \phi_{i}^{t} - \gamma_{1} \sin \phi_{i}^{t}$$

$$+\Lambda(\|\boldsymbol{r}_{i}^{t} - \boldsymbol{r}_{j}^{t}\|)(\lambda \sin(\phi_{i}^{t} - \phi_{j}^{t}) + \omega_{0}) + \xi_{i}$$

(1c)

$$\psi_{i}^{t+1} = \psi_{i}^{t} - \gamma_{2} \sin \left[2\left(\psi_{i}^{t} - q(\boldsymbol{v}_{i}^{t+1})\right)\right]$$

(1d)

以下,各式内の記号について説明する.

質量 $M(\phi_i^t)$

 $M(\phi_i^t)$ は細胞の動きにくさを表すパラメータであり,位相 ϕ_i^t の関数とする.今回は,ステップ関数 $\theta(x)$ を用いて $M(\phi_i^t)^{-1} = \frac{1-\theta(\sin\phi_i^t-\varepsilon)}{m_0}$ とした. m_0, ε は正の定数である.

外力 $\tilde{\boldsymbol{f}}_{i}^{t}$

 $\gamma(\phi_i^t)$ は摩擦力であり,接着力が強いとき細胞は動かなくなる効果を与える.そのため,今回は, $\gamma(\phi_i^t)M(\phi_i^t)^{-1}=\gamma+(1-\gamma)\theta(\sin\phi_i^t-\varepsilon)$ とした.また, \mathbf{D}_i は自己駆動力であり,楕円の向き ψ_i^t の方向に働く.

 $F_{i,i}^t$ は 2 細胞間に働く相互作用である.

$$\boldsymbol{F}_{i,j}^{t} := \sum_{i \neq j} \left(\boldsymbol{F_{a}}_{i,j}^{t} + \boldsymbol{F_{r}}_{i,j}^{t} \right)$$
 (2)

 $m{F_{a_{i,j}}}$ は引力, $m{F_{r_{i,j}}}$ は斥力を表し,以下のように定める.

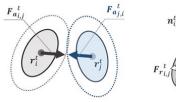
・引力 $F_{ai,j}^{t}$ について (図 1[a])

各細胞ごとに引力領域 (破線の楕円) を定め、細胞 i と細胞 j の引力領域が交わるとき、細胞 i に働く引力は中心力として $\mathbf{F}_{a_{i,j}}^{t} = f_{a} \frac{\mathbf{r}_{j}^{t} - \mathbf{r}_{i}^{t}}{\|\mathbf{r}_{j}^{t} - \mathbf{r}_{i}^{t}\|}$ で与える $(f_{a} > 0)$.

・斥力 $F_{r_{i,j}}^t$ について (図 1[b])

この場合も各細胞ごとに斥力領域 (内側の楕円) を定め、細胞 *i* と細胞 *j* の斥力領域が交わ

るとき、細胞iが細胞jから受ける斥力 $\mathbf{F}_{\mathbf{r}_{i,j}}^t$ は、交点 \mathbf{p}_0 における楕円の内側を向く法線ベクトル $\mathbf{n}_{i,j}^t(\mathbf{p}_0)$ を用いて、 $\mathbf{F}_{\mathbf{r}_{i,j}}^t=f_r\frac{\mathbf{n}_{i,j}^t(\mathbf{p}_0)}{\|\mathbf{n}_{i,j}^t(\mathbf{p}_0)\|}$ とする $(f_r>0)$.



[a] 引力と引力領域(破線の楕円)

[b] 斥力と斥力領域(内側の楕円)

図 1. 2 細胞間の相互作用,実線の楕円が内皮細胞を表す. [a] 引力領域が交わると,中心間に引力が働く. [b] 斥力領域が交わると,交点 p_0 の法線方向に斥力が働く.

(1c) 式において, γ_1 は正の定数, λ は結合定数, ω_0 は角振動数, ξ_i はノイズ項である. $\Lambda(\|{m r}_i^t-{m r}_j^t\|)$ は2細胞の中心間の距離によって定まり,今回は, $\Lambda(\|{m r}_i^t-{m r}_j^t\|)=\theta(r_0-\|{m r}_i^t-{m r}_j^t\|)$ とした. r_0 は細胞間距離の閾値である.(1d) 式では, γ_2 は正定数, $q({m v}_i^{t+1})$ は速度 ${m v}_i^{t+1}$ のなす角度である.(1d) 式は,細胞が速度の方向を向こうとする効果を示している.

3 数値シミュレーション結果

細胞を表す楕円の長径をa, 短径をbとし,引力 (斥力) が生じる楕円領域の長径と短径を各々 $a_1(a_2)$, $b_1(b_2)$ とする.次の2つの場合 (i) $\lambda=0.0$ と (ii) $\lambda=0.3$ の結果を示す.どちらも λ 以外のパラメータは,a=2.5, b=1.75, $a_1=2.5a$, $b_1=2.5b$, $a_2=1.0a$, $b_2=0.5b$, $\gamma=0.01$, $\gamma_1=0.1$, $\gamma_2=0.1$, $\omega_0=0.015$, $r_0=5.0a$, $m_0=1.0$, $\varepsilon=0.2$, $f_a=0.0005$, $f_r=0.005$, $\|\boldsymbol{D}_i\|=0.0001$ とした.

(i) (1c) 式の結合定数 λ が $\lambda = 0.0$ の場合

これは、細胞同士が近くにいても、位相が同期しない、つまり細胞接着による遺伝子発現が起こらないことに相当する。このとき、2つの細胞は楕円軌道を描くように運動することがわかる (図 2).



図 2. 黒い線および緑の線は楕円の中心の軌跡.

(ii) $\lambda = 0.3$ の場合

細胞同士が十分に近ければ、逆位相同期が起こり、細胞の運動が周期的に変化する.このとき、お互い進行方向を揃えながら交互に直進するような運動が見られる(図3).

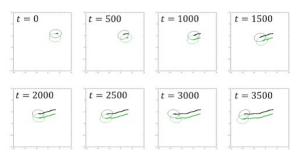


図3.500ステップごとの各時刻における細胞の運動の様子.黒い線および緑の線は楕円の中心の軌跡.

図 3 では,角速度を $\omega_0 = 0.015$ としていたが, $\omega_0 = 0.007$ すると逆相同期の周期が大きくなり,その場合には図 4 のように片方の細胞に沿ってもう一方の細胞が周るような運動が見られる.

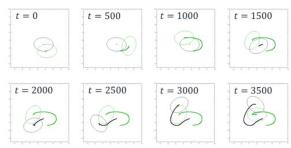


図 4. 500 ステップごとの各時刻における細胞の運動の様子. t=0 から t=1500 までは緑の楕円が黒い楕円に沿って運動し, t=2000 から黒い楕円が緑の楕円に沿って運動する.

- [1] Arima, S., Nishiyama, K., Ko, T., Arima, Y., Hakozaki, Y., Sugihara, K., Koseki, H., Uchijima, Y., Kurihara, Y., and Kurihara, H., Angeogenetic morphogenesis driven by dynamic and heterogeneous collective endothelial cell movement, Development, 138(21), 47634776 (2011).
- [2] Matsuya, K., Yura, F., Mada, J., Kurihara, H., and Tokihiro, T., A Discrete Mathematical Model for Angiogenesis, SIAM J. Appl. Math., 76 (6), 2243-59 (2016).

NF-κB 非古典的経路における振動現象の数理的解析

畑中 尚也1, 井上 純一郎2, 鈴木 貴3

¹ 大阪大学基礎工学研究科 システム創成専攻 数理科学領域, ² 東京大学医科学研究所 癌細胞 増殖部門 分子発癌分野, ³ 大阪大学数理・データ科学教育研究センター

e-mail: n-hatanaka@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

NF- κ B は免疫反応,炎症,細胞増殖などの様々な生体内の機能の制御に関与している転写因子である。NF- κ B には5つのサブユニットがあるが,それらのホモまたはヘテロ二量体を形成し機能する.通常 NF- κ B はその阻害剤である $I\kappa$ B(Inhibitor of NF- κ B) と結合することによって,細胞質に係留され不活性な状態に保たれているが、そこへ刺激が入ると $I\kappa$ B の分解が誘導され,NF- κ B が核移行し転写を活性化する.

NF- κ B の活性化経路は機能的に 2つに分類される.一つ目は古典的経路といい,主に炎症反応や細胞死の抑制に関与している. TNF- α などの炎症性サイトカインにより IKK 複合体が活性化し, $I\kappa$ B のリン酸化,分解を誘導し,NF- κ B(RelA/p50) が活性化する.核内に移行した NF- κ B はサイトカイン産生やアポトーシス抑制等を促進する.

もう一方は非古典的経路といい,リンパ組織の形成や破骨細胞の分化に関与している.非古典的経路において NF- κ B は RelB/p100 で構成されている.p100 は $I\kappa$ B と同じ機能を持っているため,RelB の核内移行を阻害している.LTa1b2等の刺激が与えられると NIK、IKKa が活性化され,活性化した IKKa によって p100 の部分分解が誘導される.その結果 RelB/p52 は核内へ移行しリンパ組織の形成や破骨細胞の分化を促進する.

また、NF- κ B シグナル伝達経路における重要な性質として細胞質-核間の振動現象がある、NF- κ B の標的遺伝子の中には NF- κ B の核内濃度が振動し、活性化が維持されることで初めて発現誘導するものも存在する.

古典的経路においては様々な解析が行われており、数理モデルも多数報告されている.しかし非古典的経路においては、1細胞レベルでの実験が困難であり、明らかになっていない点も多い.さらに、古典的経路ではほぼすべての細胞で同一の振動が確認されるのに対し、非古典

的経路では細胞によって NF-κB が振動せずに 1度だけ核移行するものや核内に維持される細 胞,無反応な細胞も存在している (図1). 本研 究では非古典的経路の数理モデルを作成し,振 動機構と細胞ごとに異なる挙動の原因の解明を 試みる.

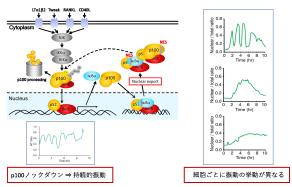


図 1. NF-κB 非古典的経路の概略図

2 結果

2.1 p100 ノックダウンモデル

NF- κ B 非古典的経路において、p100 が RelB の核内移行を阻害していることから、p100 を Jックダウンすれば RelB が核内に維持される と予想される. しかし p100 を Jックダウンした細胞では無刺激時でも RelB が自律的に振動することが実験で確認されている. すなわち、RelB には持続的に振動する性質があり、p100 が RelB を細胞質に留めることで振動を制御していると考えられる. また、RelB が核から細胞質へ移行するためには $I\kappa$ B と結合することが不可欠であることも確認されている. そこでまず p100 を Jックダウンした状態、すなわち p52/RelB と $I\kappa$ B で構成されるシステムをモデル化 (p100 Jックダウンモデル) することで振動現象の本質となる構造を捉える (図 2).

平衡点の安定性解析と数値シミュレーションを行った結果,このモデルは安定なリミットサイクルを持つことが確認された. p100 をノックダウンすると刺激が無くても持続的に振動

するのはこのためである (図 3). また,モデル 構築の課程で,p100 ノックダウンモデルが安 定なリミットサイクルを持つためには核に入っ た p52/RelB が $I\kappa$ B の生成を促進し $I\kappa$ B によっ て p52/RelB が細胞質に引き戻されるというフィードバックループの構成が必要不可欠である ことが分かった.

しかしながら、実験では $I_{\kappa}B$ が分解され生成されるような濃度の増減は明確には確認されていない。したがって、非古典的経路においては $I_{\kappa}B$ と p52/RelB の結合の可否を制御する因子が存在の存在が推測される。その因子には次のような性質を持つことが考えられる。(1) p52/RelB によって転写誘導される (2) $I_{\kappa}B$ と結合することで $I_{\kappa}B$ を p52/RelB と結合できる状態へ変化させる。

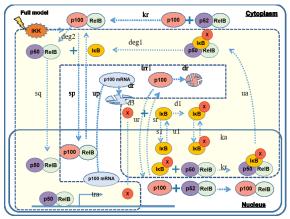


図 2. 非古典的経路のモデル図: 点線で囲った箇所が p100 ノックダウンモデルを表している

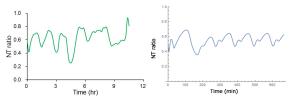


図 3. p100 ノックダウンモデルにおける RelB の挙動

2.2 全経路モデル

続いて非古典的経路の全反応を含めたモデル(全経路モデル)を構築するために,p100ノックダウンモデルの拡張を行う.非古典的経路において細胞ごとに挙動が異なること関しては,p100をノックダウンすると持続的に振動することから,振動する状態が基本的な状態であると考えた.そして,パラメータや初期条件など,RelBの挙動に影響を与える原因を分析した.

全経路モデルでは活性化されたIKKの濃度は時間とともに減衰していく.この活性化IKKに注目しモデルの解析を行った結果,活性化IKK濃度をパラメータとしてHopf分岐が生じていることが確認された.すなわち,活性化IKKの減衰に従って遷移的に安定なリミットサイクルが出現しており,それよってRelBの振動が引き起こされる.この振動はリミットサイクルの周期や振幅に依存するため,反応係数に変化がなければ周期や振幅などの挙動に変化は現れない.

次に、RelB の挙動に影響を与えるパラメータを見つけるために、各パラメータに対する感度解析を行った(図4).この感度解析では、それぞれのパラメータを 1/10 倍から 10 倍まで変化させたときの挙動の変化を数値シミュレーションによって確認している.その結果、幾響を与えることが確認された. RelB の細胞ごとの挙動の変化は一定の割合で生じているため、環境的な要素もしくは細胞間の相互作用によっていくつかのパラメータが制御されていることが予測される. 具体的なパラメータやその挙動の変化に関しては本講演の中で詳しく述べる.

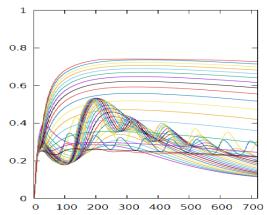


図 4. 細胞内の RelB の総量を変化させた際の挙動の変化

謝辞 本研究はJSPS科研費 JP17H06329, JP16H06576, 研究拠点形成事業(A. 先端拠 点形成型) の助成を受けたものである.

数理解析を用いた中心体複製の開始制御機構の解明

中村 貴紀 1、西住 紀子 1、中澤 嵩 2、森 竜樹 3、鈴木 貴 2、武川 睦寛 1

- 1. 東京大学 医科学研究所 分子シグナル制御分野
- 2. 大阪大学 数理・データ科学教育研究センター
- 3. 大阪大学 基礎工学研究科

e-mail: naka-tk@ims.u-tokyo.ac.jp

細胞内にはミトコンドリア、小胞体などの 様々な細胞内小器官が存在しており、細胞の 恒常性維持に関与することが報告されてい る。微小管重合中心としての機能を持つ中心 体は、1対の母および娘中心小体と蛋白質複 合体 PCM によって構成される細胞内小器官 の 1 つである (図 1)。中心体は細胞分裂期 において双極性の紡錘体極として染色体 (DNA)の均等分配を担うことにより娘細胞 に正確な遺伝情報を受け継ぐ機能を持つ。中 心体数の異常は染色体の不均等分配(染色体 の異数性、欠損、転座等)を誘発して癌の悪 性化を招くだけでなく 1,2、小頭症の大きな要 因となることが知られている³。このため正 常細胞では細胞周期を通して中心体複製は 一度だけ起こる様に厳密に制御されており、 中心体数は1または2個に保持される。

Polo-like kinase 4 (PLK4) は細胞周期 S 期において母中心小体の基底部に局在して ⁴、中心体蛋白質 STIL などをリン酸化することにより、娘中心小体の複製を担う鍵分子であることが知れている ⁵ (図2)。しかし翻訳された細胞質の PLK4 が中心小体複製の場となる母中心小体の基底部に輸送される詳細な分子制御機構に関しては未だ不明な点が多く残されてい

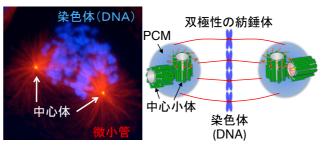


図1: 中心体(1対の中心小体+PCM)は細胞分裂 期において染色体(DNA)の均等分配を担う。

る。そこで今回我々は中心体複製に先行して 起こる中心体複製鍵分子 PLK4 の中心体移 行機構の解明を試みた。

まず我々は PLK4 の系統的欠損変異体を 作成してその細胞内局在を観察することに より PLK4 の中心体移行に必要な領域 (Centrosome localization site (CLS)と命名) を特定した。次に CLS と特異的に結合する 分子を質量分析により網羅的に解析したと ころ、中心体蛋白質 CEP152, CEP192 や微 小管輸送に関わる分子など PLK4 の中心体

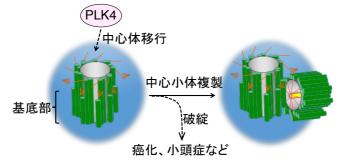


図2: PLK4は母中心小体の基底部に集積して、娘中心小体 を複製する鍵分子である。中心体複製の破綻は癌化、 小頭症の発症に寄与する。

輸送に関わる分子を複数同定することに成功した。更に PLK4 が多量体形成することにより CLS 結合分子と PLK4 の結合が亢進して PLK4 の中心体輸送が誘導されることも明らかにした。これらの実験結果を基に更に PLK4 の中心体移行機構に関する数理モデルを確立させて有限要素法を用いた数理シミュレーションを行った 6。その結果この PLK4 の中心体移行機構に関わる分子の発現異常が PLK4 の中心体輸送量を撹乱して中心体の過剰複製を惹起し、癌などの発症に寄与することを明らかにしたので、併せて報告したい。

謝辞

本研究は、日本学術振興会 科研費 新学術 領域研究「数理解析に基づく生体シグナル伝 達システムの統合的理解(数理シグナル)」、 拠点形成事業(A. 先端拠点形成型)、若手研究 および住友財団 基礎科学研究助成、上原記 念生命科学財団 研究奨励助成のサポートの 基に行ったものである。この場を借りて御礼 申し上げます。

- Ganem, N. J., Godinho, S. A. & Pellman, D. A mechanism linking extra centrosomes to chromosomal instability. *Nature* 460, 278–282 (2009).
- Janssen, A., van der Burg, M., Szuhai, K., Kops, G. J. P. L. & Medema, R. H. Chromosome segregation errors as a cause of DNA damage and structural chromosome aberrations. *Science* 333, 1895–1898 (2011).

- Marthiens, V. et al. Centrosome amplification causes microcephaly. Nat Cell Biol 15, 731–740 (2013).
- Nakamura, T., Saito, H. & Takekawa,
 M. SAPK pathways and p53
 cooperatively regulate PLK4 activity
 and centrosome integrity under stress.
 Nature Communications 4, 1775
 (2013).
- Ohta, M. et al. Direct interaction of Plk4 with STIL ensures formation of a single procentriole per parental centriole.
 Nature Communications 5, 5267 (2014).
- Hecht, F. New development in freefem.
 Journal of Numerical Mathematics 20,
 251–265 (2012).

Hyperbolic symmetrization of Heston type diffusion

Yuuki Ida and Tsuyoshi Kinoshita

In this talk, in view of application to pricing of Barrier options under a stochastic volatility model, we study a reflection principle for the hyperbolic Brownian motion, and we have already done numerical simulation of SABR model transformed by Hyperbolic Brownian motion. We give some results of numerical simulation for Heston model.

1 Introduction

In mathematical finance, Heston model is given by this stochastic differential equation:

$$dS_t = \mu S_t dt + \sqrt{\nu_t} S_t dW_t^S$$

$$d\nu_t = \kappa (\theta - \nu_t) dt + \xi \sqrt{\nu_t} dW_t^{\nu}$$
(1)

where W^S and W^{ν} are Wiener process provided with the correlation ρ . S is an asset price, ν denotes the volatility of S, θ and κ is constant, ξ is the volatility of volatility.

2 Hyperbolic reflection principle

A hyperbolic Brownian motion is the unique solution to

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dW_t^1 \\ dY_t = Y_t dW_t^2, \end{cases}$$

where W^1 and W^2 are independent Brownian motion. It is well known that the hyperbolic Brownian motion and hyperbolic Brownian motion with Möbius transformation have same distribution, that is:

Proposition 2.1. Let $f(z) = \frac{az+b}{cz+d}$ with $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in SL(2,\mathbb{R})$. Then $(f(X_t,Y_t))$ and (X_t,Y_t) are equivalent in law provided that $f(X_0,Y_0) = (X_0,Y_0)$.

This proof is the following from [2].

We consider the Heston model in this form:

$$dX_t = \sqrt{Y_t} dW_t^1 + \mu_1(X_t, Y_t) dt,$$

$$dY_t = \sqrt{Y_t} dW_t^2 + \mu_2(X_t, Y_t) dt$$
(2) [Hes1]

where W^1 and W^2 are independent Brownian motion. If we use complex coordinate, the SDE (2) is rewritten as

$$dZ_t = \sqrt{\operatorname{Im}(Z_t)} dW_t^{\mathbb{C}} + \mu(Z_t) dt, \tag{3}$$

where $W^{\mathbb{C}} := W^1 + iW^2$ and $\mu(Z) = \mu_1(\operatorname{Re}(Z), \operatorname{Im}(Z)) + i\mu_2(\operatorname{Re}(Z), \operatorname{Im}(Z))$. In generally, we consider the next SDE defined on upper half plane:

$$dZ_t = \sigma(Z_t)dW_t^{\mathbb{C}} + \mu(Z_t)dt.$$

Theorem 2.1. Let π forms $\Phi_A \circ \Phi_0$ where $A \in SL(2,\mathbb{R})$ and $\Phi_0(z) = -\bar{z}$, suppose that σ and μ satisfies

$$\sigma(z) = \frac{\sigma(z)}{(c\Phi_0 \circ \pi^2(z) + d)},$$

$$\mu(z) = \frac{\Phi_0 \circ \mu \circ \pi(z)}{(c\Phi_0 \circ \pi(z) + d)^2},$$
(4) [Hy]

then (2) has a unique weak solution and then $(\pi(Z_t))$ and (Z_t) have the same law as a stochastic process, provided that $Z_0 \in \text{Inv}_{\pi}$.

References

- [1] Imamura, Y., Ishigaki, Y. and Okumura, T. (2014) "A numerical scheme based on semi-static hedging strategy", *Monte Carlo Methods and Applications*. 20(4), 223–235.
- [2] Ida Y., Kinoshita T. and Matsumoto T. (2018) "Symmetrization associated with hyperbolic reflection principle", *Pacific Journal of Mathematics for Industry*. 10:1.

一次元におけるバリア・オプション型期待値の計算方法について

浅野 了

東京工業大学

e-mail: asano.r.aa@gmail.com

1 概要

本講演では、資産価格過程が一次元の確率過程で表される場合の、バリア・オプション型期待値の計算手法について紹介する。具体的には、資産価格過程 $X^x(t)$ が次の伊藤型確率微分方程式(SDE)に従うと仮定する:

$$X^{x}(t) = x + \sum_{i=0}^{d} \int_{0}^{t} V_{i}(X^{x}(s)) dW^{i}(s). \quad (1)$$

ここで $x\in\mathbb{R}$ 、 $W^0(s)=s$ であり、 $W=(W^1,\ldots,W^d)$ は d 次元標準 Brown 運動である。また、 $V_i:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ は \mathcal{C}^∞ 級のベクトル場であるとする。今、 $\beta:[0,T]\to\mathbb{R}$ をバリアを表す連続な関数として $\tau_{X^x}(\beta)$ を次のように定義する:

$$\tau_{X^x}(\beta) \stackrel{\text{def}}{=} \inf \{ t \ge 0 \, | \, X^x(t) \ge \beta(t) \} \,.$$

このとき、本研究の目的はペイオフ関数 $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対してバリア・オプションの価格に対応する期待値

$$p = \mathbb{E}\left[1_{[0,T]}\left(\tau_{X^x}(\beta)\right) f\left(X^x(T)\right)\right]$$

の計算手法を確立することである。本講演では 特にドリフト項が affine 型、すなわち

$$V_0(y) = \mu y + \nu \quad (\mu \neq 0, \ \nu \in \mathbb{R})$$

で与えられる場合を取り扱い、この場合に価格pが計算可能な別表現を持つことを示す。なお、バリア・オプションの価格の近似を取り扱った先行研究として、[1]、[2]、[3]、[4] がある。[1] は過程が多次元での Euler—丸山法による弱近似誤差の理論的評価をしている。また、[2] は一次元において killing function と楠岡近似を用いて数値計算を行なっている。[3] は一次元において反射原理を用いて新しい数値計算手法を導入しており、[4] はその反射原理を多次元へ一般化している。

2 期待値の別表現の導出

 X^x は強 Markov 過程であるから、フィルトレーションの時刻 $\tau_{X^x}(\beta)$ において条件付期待

値を取ることで価格pが次の表現を持つことがわかる:

$$p = \mathbb{E}\left[1_{[0,T]}\left(\tau_{X^x}(\beta)\right) g\left(\beta\left(\tau_{X^x}(\beta)\right)\right)\right]. \quad (2)$$

ここで、 $g(t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}\left[f\left(X^{\beta(t)}(T-t)\right)\right]$ である。 今、過程 \hat{X} を

$$\widetilde{X}(t) \stackrel{\text{def}}{=} (\mu X^x(t) + \nu) e^{-\mu t}.$$

のように定義する。このとき、伊藤の公式より

$$\widetilde{X}(t) = \widetilde{x} + \sum_{i=1}^{d} \int_{0}^{t} \widetilde{V}_{i}\left(s, \widetilde{X}(s)\right) dW^{i}(s)$$

となる。ここで $\widetilde{x} \stackrel{\text{def}}{=} \mu x + \nu$ であり

$$\widetilde{V}_i(t,y) \stackrel{\text{def}}{=} \mu e^{-\mu t} V_i \left(\frac{e^{\mu t}}{\mu} y - \frac{\nu}{\mu} \right)$$

である。以下では $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}=\widetilde{X}$ と表記する。特に $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}$ は local martingale である。 $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}$ を用いれば $\tau_{X^x}(\beta)$ は、 $\widetilde{\beta}(t)\stackrel{\mathrm{def}}{=}(\mu\beta(t)+\nu)\,e^{-\mu t}$ として

$$\tau_{X^x}(\beta) = \tau_{\widetilde{X}^{\widetilde{x}}}\left(\widetilde{\beta}\right)$$

と書ける。

今、次の仮定を置く。

仮定 1. $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}$ の二次変動過程 $\langle \widetilde{X}^{\widetilde{x}} \rangle (t)$ は

$$\left\langle \widetilde{X}^{\widetilde{x}} \right\rangle (+\infty) = \int_{0}^{+\infty} \left| \widetilde{V} \left(s, \widetilde{X}^{\widetilde{x}}(s) \right) \right|^{2} ds = +\infty$$

を満たす。ここで $\widetilde{V}=(\widetilde{V}_1,\ldots,\widetilde{V}_d)$ であり、 $v=(v_1,\ldots,v_d)\in\mathbb{R}^d$ に対し $|v|^2=\sum_{i=1}^d|v_i|^2$ である。

この仮定の下で、 $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}$ に次の定理 (time change) を適用することができる。

定理 2 ([5, Chapter V Theorem 1.6]). M(t) を初期値 x の実数値 local martingale とし、 $\langle M \rangle$ ($+\infty$) = $+\infty$ を満たすと仮定する。この とき、あるフィルトレーションに関する初期値 x の 1 次元標準 Brown 運動 $B^x(t)$ が存在し

$$M\left(t\right) = B^{x}\left(\left\langle M\right\rangle \left(t\right)\right)$$

を満たす。

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

以下では $B^{\widetilde{x}}$ を $\widetilde{X}^{\widetilde{x}}$ に対応するBrown 運動とする。

定理 3. $\tau_{X^x}(\beta)$ は

$$\sigma_{B^{\widetilde{x}}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \gamma_{B^{\widetilde{x}}} \left(\tau_{B^{\widetilde{x}}} \left(\widetilde{\beta} \circ \gamma_{B^{\widetilde{x}}} \right) \right)$$

に一致する。ここで $\gamma_{B^{\widetilde{x}}}:[0,+\infty)\to\mathbb{R}$ は時間 依存の確率的ベクトル場

$$U_{B^{\widetilde{x}}(s)}(\gamma) \stackrel{\text{def}}{=} \left| \widetilde{V} \left(\gamma, B^{\widetilde{x}}(s) \right) \right|^{-2}$$

によって定まる積分曲線である。すなわち

$$\gamma_{B\widetilde{x}}(t) = \int_0^t U_{B\widetilde{x}(s)} \left(\gamma_{B\widetilde{x}}(s) \right) ds.$$

最後に、表現(2)より次の定理を得る。

定理 4. X^x と独立な 1 次元 Brown 運動 B^x を 用いて、p は次のように表現される:

$$p = \mathbb{E}\left[1_{[0,T]}\left(\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right) f\left(X^{\beta\left(\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right)}\left(T - \sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right)\right)\right].$$

3 楠岡近似への応用

ここでは楠岡近似の中でも二宮—Victoir 近似(NV 近似) [6] への応用を紹介する。過程 X^x に対する NV 近似過程 $X^{x,(\mathrm{NV})}_{\Delta T}$ は、区間 [0,T]の等分割 $t_k=\frac{kT}{N},\,k=0,1,\ldots,N$ に対して以下のように定義される:

$$X_{\Delta(T)}^{x,(\text{NV})}(t_0) = x,$$

$$X_{\Delta(T)}^{x,(\text{NV})}(t_{k+1}) =$$

$$\Lambda_k \exp\left(\frac{T}{2N}\hat{V}_0\right) \exp\left(\sqrt{\frac{T}{N}}\,\zeta_k^1 V_1\right) \dots$$

$$\dots \exp\left(\sqrt{\frac{T}{N}}\,\zeta_k^d V_d\right) \exp\left(\frac{T}{2N}\hat{V}_0\right) X_{\Delta(T)}^{x,\,(\mathrm{NV})}(t_k)$$

$$+ (1 - \Lambda_k) \exp\left(\frac{T}{2N}\hat{V}_0\right) \exp\left(\sqrt{\frac{T}{N}}\,\zeta_k^d V_d\right) \dots$$

$$\cdots \exp\left(\sqrt{\frac{T}{N}}\,\zeta_k^1 V_1\right) \exp\left(\frac{T}{2N}\hat{V}_0\right) X_{\Delta(T)}^{x,\,(\mathrm{NV})}(t_k),$$

ここで、 $\{\Lambda_k, \zeta_k | k=0,1,\dots,N-1\}$ は独立な確率変数族であり、 Λ_k は等確率の Bernoulli分布、 ζ_k は d 次元標準正規分布にそれぞれ従う。また、 \hat{V}_0 は SDE (1) を Storatonovich 型に変換した時のドリフト項である。 $\exp(V)y$ は常微分方程式 $y(t)=y+\int_0^t V(y(s))ds$ の解 y(t) の t=1 における値 y(1) である。NV 近似はその離散的な定義によりバリア・オプションの近似に適用することはできない。しかし、定理 4の表現を使うことでバリア・オプションに適合した NV 近似を定義することができる。

命題 5.

 $p_N^{(NV)} \stackrel{\text{def}}{=}$

$$\mathbb{E}\left[1_{[0,T]}\left(\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right)f\left(X_{\Delta\left(T-\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right),\left(\mathrm{NV}\right)}^{\beta\left(\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right),\left(\mathrm{NV}\right)}\left(T-\sigma_{B^{\widetilde{x}}}\right)\right)\right].$$

とすると、 $f \in \mathcal{C}_b^{\infty}(\mathbb{R} \to \mathbb{R})$ に対してある正の 定数 C が存在し、次の不等式が成り立つ:

$$\left| p - p_N^{\text{(NV)}} \right| \le \frac{C}{N^2}, \quad N \in \mathbb{Z}_{\ge 1}.$$

4 数値計算例

数値計算例として、解析解が与えられる Black-Sholes モデルに対して楠岡近似を適用した場合の収束誤差を提示する。

- [1] Emmanuel Gobet. Weak approximation of killed diffusion using euler schemes. Stochastic processes and their applications, 87(2):167–197, 2000.
- [2] Shigeo Kusuoka, Mariko Ninomiya, and Syoiti Ninomiya. Application of the kusuoka approximation to pricing barrier options. In *Proceedings of the ISCIE International Symposium on Stochastic Systems Theory and its Applications*, volume 2016, pages 171–180. The ISCIE Symposium on Stochastic Systems Theory and Its Applications, 2016.
- [3] Yuri Imamura, Yuta Ishigaki, and Toshiki Okumura. A numerical scheme based on semi-static hedging strategy.

 Monte Carlo Methods and Applications, 20(4):223–235, 2014.
- [4] Jiro Akahori and Yuri Imamura. On a symmetrization of diffusion processes. Quantitative Finance, 14(7):1211–1216, 2014.
- [5] Daniel Revuz and Marc Yor. Continuous martingales and Brownian motion, volume 293. Springer Science & Business Media, 2013.
- [6] Syoiti Ninomiya and Nicolas Victoir. Weak approximation of stochastic differential equations and application to derivative pricing. Applied Mathematical Finance, 15(2):107–121, 2008.

二回積分型カーネル関数を用いた偏微分方程式の数値解法について

家田 雅志

みずほ第一フィナンシャルテクノロジー株式会社

e-mail: mieda.acad@gmail.com

1 はじめに

偏微分方程式の数値解法としてカーネル関数、特に動径基底関数 (RBF) の線型結合を用いるメッシュフリー法がよく知られている。メッシュフリー法は広範に応用できる数値計算手法であるが、数理ファイナンスに現れるポートフォリオ最適化に現れる Hamilton-Jacobi-Bellman方程式など解く際には二階微分の近似が問題となり数値解を安定して得ることが難しいように見受けられる。そこで、本講演では二階微分をRBFで近似する方法を提案する。これを用いて、同じ数理ファイナンスで現れ解析解の存在する Black-Scholes 方程式を解き微分係数の近似精度や境界条件が与えられていない場合の振る舞いについて解析解との比較を中心に議論する。

2 メッシュフリー法概要

次のような放物型偏微分方程式を考える。

$$\begin{cases}
-\partial_t V(t,x) \\
+F\left(t,x,V(t,x),DV(t,x),D^2V(t,x)\right) = 0, \\
(t,x) \in [0,T) \times \mathbb{R}^d, \\
V(t,x) = f(x), \ x \in \mathbb{R}^d
\end{cases}$$

ただし、 $F:[0,T]\times\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}\times\mathbb{R}^d\times\mathbb{S}^d\to\mathbb{R}$ 、 \mathbb{S}^d は $d\times d$ 実対称行列、D は空間変数 x に対する偏微分作用素である。紙面の関係上、非常に大雑把な説明にはなるがメッシュフリー法では $t_k=kh,\,k=0,\cdots,n,\,h:=T/n,\,\xi_j^k\in\mathbb{R},\,\bar{x}_j\in\mathbb{R}^d,\,j=1,\cdots$ として、偏微分方程式の解 V を

$$V(t_k, x) \simeq \sum_{j=1}^{N} \xi_j^k \Phi(x, \bar{x}_j)$$

により近似する。ここで、 $\Phi: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ はカーネル関数と呼ばれるものである。RBF

本稿に示されている意見は、筆者個人に属し、筆者の 所属する組織の公式見解を示すものではない。また、あ りうべき誤りはすべて筆者個人に属する。 はカーネル関数として良い性質を有しており、 メッシュフリー法において採用されるケースが 多い。つまり

$$\Phi(x, \bar{x}_j) = \phi(\|x - \bar{x}_j\|)$$

である。本講演では、multi-quadratic (MQ) RBF [1]

$$\phi(\|x - \bar{x}_j\|) = \sqrt{1 + \frac{\|x - \bar{x}_j\|^2}{\varepsilon^2}}, \ \varepsilon > 0,$$

を中心に議論を行う。

なお、メッシュフリー法の詳細については [2][3] などを参照されたい。

3 Black-Scholes 方程式

まず、MQ RBF を用いてヨーロピアン・コール・オプション価格の満たす Black-Scholes 方程式

$$\begin{cases} F = rV - x\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{2}x^2\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \\ f(x) = (x - K)_+ \end{cases}$$

を解いた結果を示す。 ただし、r>0は無リスク金利、K>0は行使価格であり、d=1と設定した。数値計算結果は次頁の図 $1\sim$ 図 3の通りである。赤色一点鎖線が解析解、青色実践が MQRBF を用いた数値解である。両端に近づくにつれデルタやガンマの計算精度に大きな劣化が見受けられる。

4 二回積分型カーネル関数

前述の通り、微分の推定誤差は非線形偏微分 方程式と解く際に深刻な問題となる。これを改

$$\begin{cases} V(t,0) = 0 \\ V(t, x_{\text{max}}) = x_{\text{max}} - Ke^{-r(T-t)} \end{cases}$$

を与える。この場合には計算領域両端での計算結果も改善する。

本来のオプション価格算出であれば、定義域を $[0,x_{\max}]$ として境界条件

善するべく、下記のように2階微分を MQRBF で近似する方法を考える。

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(t_k, x) \simeq \sum_{j=1}^N \xi_j^k \sqrt{1 + \frac{(x - \bar{x}_j)^2}{\varepsilon^2}},$$

これを与えるカーネル関数は

$$\Phi(x, \bar{x}_j) = \frac{\left(-2\varepsilon^2 + (x - \bar{x}_j)^2\right)\sqrt{1 + \frac{(x - \bar{x}_j)^2}{\varepsilon}}}{6} + \frac{\varepsilon(x - \bar{x}_j)\sinh^{-1}\left(\frac{x - \bar{x}_j}{\varepsilon}\right)}{2}$$

である。上記のカーネル関数を用いた数値計算結果は図1~図3の緑色破線である。計算領域両端に注目すれば近似精度の向上を確認することができる。

5 数値計算結果

表 1. 計算条件

20 1. 11 34 76 11		
計算領域	[0.01, 30]	
行使価格 K	10	
満期 T	1Y	
無リスク金利 <i>r</i>	5%	
ボラティリティ σ	20%	
空間グリッド数 N	50	
時間グリッド数 n	1000	
MQ パラメーター ε	2.4	

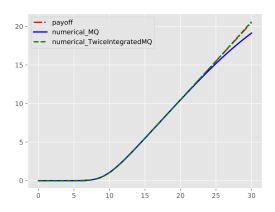


図 1. ヨーロピアン・コール・オプション価格計算結果

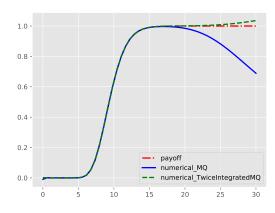


図 2. ヨーロピアン・コール・オプション・デルタ $\frac{\partial V}{\partial x}$ 計算結果

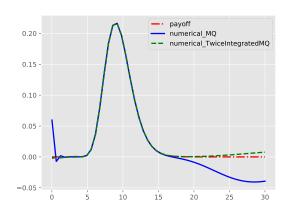


図 3. ヨーロピアン・コール・オプション・ガンマ $\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}$ 計算結果

- [1] R.L. Hardy. Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method 20 years of discovery 19681988. Computers & Mathematics with Applications, 19(8-9):163–208, 1990.
- [2] Yumiharu Nakano. Convergence of meshfree collocation methods for fully nonlinear parabolic equations. Numerische Mathematik, 136(3):703–723, jul 2017.
- [3] Alonso Peña. Option Pricing with Radial Basis Functions: A Tutorial. Wilmott Magazine, (3):50–62.

日本のクレジット市場における信用サイクルの変動要因

廣中 純

野村アセットマネジメント株式会社 e-mail: jhironaka0817@gmail.com

1 研究テーマ

市場で観測可能なファクター[マクロ経済要因(GDP成長率,金利,株価等)および過去の信用イベントの影響(企業の倒産件数)]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)とを考慮した,信用イベント(格付機関による発行体格付の変更)の発生しやすさ(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,すなわち,信用サイクル(金融機関による信用供与額の増減)の説明を試みる.

2 研究の動機

銀行等の金融機関は、自己資本比率の国際的 な基準を定める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 して自己資本の質及び量の改善を要請している. 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.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,金 融機関が投資対象の信用リスク判断の基準の 1 つとする格付機関による格付は、短期的な景気 変動に格付水準が左右されない TTC 格付へと移 行している. また, 昨年12月に公表されたバーゼ ルⅢの最終規則では、信用リスクのあるポート フォリオのリスク・ウエイト管理に、格付機関に よる格付を従来に増して考慮すべき方針が示さ れた.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っていく 必要があると考える. 本研究にて提案する信用 イベント発生強度モデルは、バーゼルⅢ最終規

則の主旨に則った信用リスク管理手法を提示するものであると考える.

3 研究の内容

本研究では、Yamanaka et al. (2012)や Azizpour et al. (2018)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(マクロ経済要因+過去の信用イベントの影響)と市場で直接観測できないファクター(frailty)とを考慮した、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のクレジット市場全体の信用サイクルの代理変数であると仮定し, 「マクロ要因+ frailty(CIR 過程)+ 過去の信用イベントの影響(Hawkes 過程)」の3ファクターから構成されるモデル(下記)を構築する.

$$\lambda_t^i = exp\left(a_0 + \sum\nolimits_{k=1}^d a_k X_{k,t}\right) + bY_t + \delta \sum\nolimits_{n \leq N_t^i} exp\left(-\kappa(t-T_n^i)\right) \ell(R_n^i)$$

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

$$h_t^i = \frac{\mathbb{E}_{\theta}^* \left(\lambda_t^i exp \left(\int_0^t log \left(\lambda_{s-}^i \right) dNs + \int_0^t \left(1 - \lambda_s^i \right) ds \right) |\mathcal{G}_t \right)}{\mathbb{E}_{\theta}^* \left(exp \left(\int_0^t log \left(\lambda_{s-}^i \right) dNs + \int_0^t \left(1 - \lambda_s^i \right) ds \right) |\mathcal{G}_t \right)} \;, \quad a.s.$$

について,異なるファクターの組み合わせから なる4つのモデル

- $2 \lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^d a_k X_{k,t})$
- $4) \lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^d a_k X_{k,t}) + bY_t$

を想定し、各モデルのパラメーターおよび標準 誤差の推定や、強度 h_t の時間変更に対する適合 度検定を,格上げ・格下げ・デフォルトの各モデルに対して行い,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・格下げ強度の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、 2)3ファクターの全てを含むモデルは、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)過去 の信用イベントの影響およびfrailtyはともに、 モデルのパラメーター推定値に大きく影響を 及ぼすと考えられる点を挙げることができる。 なお、マクロ要因を表す変数としてマネーサプライや非流動性指標等を、過去の信用イベントの影響を表す変数としてマネーサプライや非流動性指標等を、過去の信用イベントの影響を表す変数として企業の倒産件数を 各々追加・変更したことにより、モデルのパラメーターの推定精度がより向上した。

次に,上述の信用イベント発生強度モデルに 基づき,信用サイクルの変動要因を考察する.日 本のクレジット市場における信用サイクルの 代理変数である総与信・GDP 比率に影響を及ぼ す可能性があると考えられる「過去の信用イベ ントの影響」および「frailty」のうち、frailty と信用サイクルとの関連性について、1)レジー ム・スイッチモデルによる, frailty と信用サイ クルのレジーム推移の比較,2)信用サイクルを 構成する要素(GDP,総与信)を線形ガウス状態 空間モデル(2次のトレンドモデル)で表現した 場合の各成分[水準(level)成分・傾き(slope) 成分]とfrailtyとの間で,グレンジャーの意味 での因果性の存在の有無,および3)インパルス 応答関数による, 信用サイクルの構成要素にシ ョックを与えた場合における frailty の変化の 推移, の3点について検証を行なった.

まず 1) については、frailty と総与信・GDP 比率のレジームの推移の傾向はほぼ同様であ ることが示された. その要因については更に精 緻な検証を要する.

次に 2) については、GDP の水準成分から frailty に対して、5%有意水準にてグレンジャーの意味での因果性があると考えられる.また、総与信額の傾き成分から frailty、および総与信・GDP 比率の水準成分・傾き成分から frailty に対して、各々1%有意水準にてグレンジャーの

意味での因果性があると考えられる. なお frailty から GDP, 総与信額および総与信・GDP 比率の原系列および各成分に対しては, グレンジャーの意味での因果性は確認できなかった.

最後に 3) については、GDP、総与信額および 総与信・GDP 比率の各傾き成分が frailty に及 ぼす影響は長期間にわたると想定される.

4 今後の課題

下記の点について検証を試みる.

- (1) GDP と総与信額の経時的な変化や景気の変動に伴う,中長期的な frailty の振る舞いと信用サイクルとの関連性
- (2) 信用サイクルの転換点(景気拡大や景気後 退の転換点)における本モデルの有効性の 検証
- (3) 本モデルのシステミック・リスク指標への 適用可能性の検証

- [1] Yamanaka, Sugihara and Nakagawa,
 "Modeling of Contagious Credit Events
 and Risk Analysis of Credit
 Portfolios, Asia Pacific Financial
 Markets, vol. 19, (2012) 43-62
- [2] Azizpour, Giesecke and Schwenkler, "Exploring the Sources of Default Clustering", Journal of Financial Economics 129 (2018), 154-183
- [3] Duffie, Eckner, Horel and Saita, "Frailtycorrelated defaults", Journal of Finance, vol. 64(2009), 2089-2123
- [4] Koopman, Krassel, Lucas and Monteiro "Credit cycles and macro fundamentals", Journal of Empirical Finance (2009), vol. 16, 42-54
- [5] 金子拓也・中川秀敏「信用「信用ポートフォリオのリスク計量:金利変化見通しと個別企業価値変動を考慮したトップダウン・アプローチ」,Discussion Paper Series No. 2010-J-13,日本銀行金融研究所

反応拡散方程式に対する修正 Strang splitting 解法について

中野 航輔 1 , 宮武 勇登 2 , 剱持 智哉 1 , 曽我部 知広 1 , 張 紹良 1 名古屋大学工学研究科, 2 大阪大学サイバーメディアセンター

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

1 はじめに

本研究では、Dirichlet 境界条件下で、次の反 応拡散方程式の数値解法を考える:

$$u_{t}(x,t) = u_{xx} + f(u, u_{x}),$$

$$x \in (0,1), \ t > 0,$$

$$u(0,t) = \alpha_{0}, \ u(1,t) = \alpha_{1},$$

$$u(x,0) = u_{0}(x).$$
(1)

この方程式を数値計算する際、空間変数を標準的な差分法で離散化して、時間発展に陽的 Runge-Kutta 法などの陽解法を適用すると、拡散項 u_{xx} の影響から安定な数値計算は難しい、そこで本研究では、分解解法(splitting 解法)、特に Strang splitting と呼ばれる解法 [1] に着目する(分解解法全般については [2] が詳しい).

Strang splitting 解法では、方程式を2つの方程式に分解する.分解には任意性があるが、通常は拡散項などの線形項とそれ以外に分解するのが標準的であるから、ここでは次の分解を考える:

$$u_t = u_{xx}, (2)$$

$$u_t = f(u, u_x). (3)$$

時間刻み幅を Δt として,方程式 (1) に対する数値解を $u^{(n)} \approx u(n\Delta t)$ と表す.また,分解後の方程式 (2),(3) の Δt 時間発展写像をそれぞれ $\varphi^a_{\Delta t}$, $\varphi^b_{\Delta t}$ と表す.Strang splitting 解法では,方程式 (1) に対する数値解の時間発展を次のように定義する:

$$u^{(n+1)} = \varphi^a_{\Delta t/2} \circ \varphi^b_{\Delta t} \circ \varphi^a_{\Delta t/2}(u^{(n)}).$$

Strang splitting 解法は,通常,2次精度の近似であり,実際の数値計算においては,2次精度が担保される範囲で, $\varphi^a_{\Delta t}$, $\varphi^b_{\Delta t}$ には適切な近似を用いる.

Dirichlet 境界条件が斉次($\alpha_0 = \alpha_1 = 0$)の場合,Strang splitting 解法は時間離散化に関して 2次精度だが,Dirichlet 境界条件が非斉次($\alpha_0 \neq 0$ または $\alpha_1 \neq 0$)の場合,2次精度より精度が劣化する.本研究では,この精度劣化に対する改善法を提案する.

2 f が u のみに依存する場合

方程式(1)のfがuのみに依存する場合,すなわち

$$u_t = u_{xx} + f(u) \tag{4}$$

については、Einkemmer-Ostermann [3] により精度の劣化を改善する手法が提案されており、以下にその概略を述べる.

まず,方程式 (4) を境界条件が斉次となるように書き換える.そのために,次の Laplace 方程式を考える:

$$z_{xx}(x) = 0, \quad x \in (0, 1),$$

 $z(0) = \alpha_0, \quad z(1) = \alpha_1.$

Laplace 方程式の解 $z(x) = \alpha_0(1-x) + \alpha_1 x$ を用いて、新たに変数 $\tilde{u} = u - z$ を定義すると、方程式 (4) は \tilde{u} に関して

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx} + f(\tilde{u} + z), \qquad (5)$$

$$\tilde{u}(0, t) = \tilde{u}(1, t) = 0$$

となり境界条件が斉次の方程式に書き換えられる

次に,方程式(5)を2つの方程式に分解することを考える.例えば,元の方程式を拡散項とそれ以外に分けた次の分解が自然であろう:

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx},\tag{6}$$

$$\tilde{u}_t = f(\tilde{u} + z). \tag{7}$$

しかし、それぞれの方程式を斉次の Dirichlet 境界条件下で解くことを考えると、例えば境界において方程式 (7) の左辺は 0、右辺は $f(z)(\neq 0)$ となり両辺が整合しない。実際、これが要因となり、Strang splitting 解法を用いても 2 次精度は達成されない。そこで、この不整合さを改善するために、分解 (6)、(7) の代わりに次の分解を考える:

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx} + f(z), \tag{8}$$

$$\tilde{u}_t = f(\tilde{u} + z) - f(z). \tag{9}$$

それぞれの方程式を斉次の Dirichlet 境界条件下で解くことを考えると、例えば境界において方程式 (9) の左辺と右辺はともに 0 となり両辺が整合する。実際、この分解に対して Strang splitting 解法を適用すると、2 次精度が達成される.

3 f が u_x にも依存する場合

本研究では、Einkemmer-Ostermann [3] に よるアイデアを、方程式 (1) のように f が u_x にも依存する場合へ拡張することを考える。

まず,前節と同様に Laplace 方程式の解 z(x) を用いて,新たに変数 $\tilde{u}=u-z$ を定義すると,方程式 (1) は,

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx} + f(\tilde{u} + z, \tilde{u}_x + z_x), \qquad (10)$$

$$\tilde{u}(0, t) = \tilde{u}(1, t) = 0$$

に書き換えられ、境界条件が斉次になる. 次に方程式(10)の分解を考える.素朴な分解

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx},\tag{11}$$

$$\tilde{u}_t = f(\tilde{u} + z, \tilde{u}_x + z_x) \tag{12}$$

を考えた場合,前節と同様に,それぞれの方程式を斉次のDirichlet境界条件下で解くことを考えると,例えば境界において方程式 (12) の左辺は 0,右辺は $f(z)(\neq 0)$ となり両辺が整合しない.実際,これが要因となり,Strang splitting解法を用いても 2 次精度は達成されない.そこで,この不整合さを改善するために,次の分解を考える:

$$\tilde{u}_t = \tilde{u}_{xx} + f(z, \tilde{u}_x + z_x), \tag{13}$$

$$\tilde{u}_t = f(\tilde{u} + z, \tilde{u}_x + z_x) - f(z, \tilde{u}_x + z_x).$$
 (14)

実際、それぞれの方程式を斉次の Dirichlet 境界条件下で解くことを考えると、例えば境界において方程式 (14) の左辺と右辺はともに 0 となり両辺が整合する.この分解 (13)、(14) に基づいて Strang splitting 解法を適用した数値例を次節で紹介する.また比較のため、分解 (11)、(12) に基づいて Strang splitting 解法を適用した結果も示す.

4 数值実験

本節では、数値実験の例題として Burgers 方程式($f(u,u_x)=uu_x$)を扱う、解の初期値は $u_0(x)=\sin^2(\pi x)+1$,境界条件は $\alpha_0=\alpha_1=1$

とする. 空間は等間隔分割に基づく中心差分を 用いて離散化し,様々な時間刻み幅 Δt で計算 した. 図 1 は t=0.1 における L^{∞} ノルムに よる相対誤差をプロットしたものである. 分解 (11), (12) に基づく結果は,1 次精度解法の振 る舞いに近く,前節で述べたように精度の劣化 が確認できる. それに対して,提案法である分 解 (13), (14) に基づく結果では 2 次精度が確認 できる. この例では,空間 1 次元の問題でかつ $\alpha_0 = \alpha_1$ の場合を考えたが, $\alpha_0 \neq \alpha_1$ の場合や さらに空間 2 次元の問題の場合にも同様の結果 が得られている.

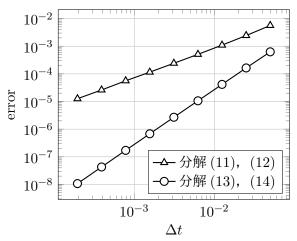


図 1. 分解 (11), (12) および分解 (13), (14) に基づいて Strang splitting 解法を適用したときの t=0.1 における L^∞ ノルムによる相対誤差.

謝辞 本研究は科研費 16K17550 および 16KT0016 の援助のもとに行われたものである.

- G. Strang: On the Construction and Comparison of Difference Schemes. SIAM J. Numer. Anal., 5 (1968), 506–517.
- [2] R. I. McLachlan and G. R. W. Quispel: Splitting methods. Acta Numer., 11 (2002), 341–434.
- [3] L. Einkemmer and A. Ostermann: Overcoming order reduction in diffusion-reaction splitting. Part 1: Dirichlet boundary conditions. SIAM J. Sci. Comput., 37 (2015), A1577–A1592.

滑らかな領域上のRobin 境界条件を持つPoisson 方程式に対するNitsche 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: ¹ychiba@ms.u-tokyo.ac.jp, ²norikazu@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

近年, 血流などの流体シミュレーションにお いて,流体とその周りの構造の相互作用を含め て計算を行う FSI モデルの解析が盛んに行わ れている. 特に, 血管のように壁が薄い円筒領 域を液体が流れる問題では、壁の厚さ方向の値 が同じと見なして計算を行う reduced-FSI モデ ルを用いて計算を行っている.また、滑らかな 領域上の問題を数値計算で近似解を計算する場 合,有限要素法では領域を多角形や多面体で近 似して計算を行っている. このとき, 領域の近 似の仕方によっては元の問題と異なる問題の近 似解を求めてしまうことがある. 特に, 境界条 件に微分が含まれる問題では、より一層の注意 が必要である.標準的な有限要素法では、様々 な境界条件の下で滑らかな領域に対する数値解 の誤差について解析されており、近年では、[1] のように、reduced-FSI モデルの解析につなが る動的境界条件の解析も行われている.一方, Nitsche 法や不連続 Galerkin 法 (DG 法) ではそ のような解析が行われていない.

本研究は、reduced-FSI モデルへの DG 法の 適用を最終目標として、滑らかな領域上の Robin 境界条件を持つ Poisson 方程式に対し、Nitsche 法の適用とその解析を行う.

2 モデル方程式とスキーム

 $\Omega \subset \mathbb{R}^d (d=2$ または 3) とし,その境界 $\Gamma = \partial \Omega$ は十分滑らかだとする.次の Poisson 方程式を考える.

$$\begin{cases} -\Delta u &= f & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} + \frac{1}{\varepsilon} u &= \frac{1}{\varepsilon} u_0 + g & \text{on } \Gamma \end{cases} . \tag{1}$$

ここで、 $f \in L^2(\Omega)$, $u_0 \in L^2(\Gamma)$, $g \in H^{1/2}(\Gamma)$ であり、 ε は正定数である。(1) において $\varepsilon \to 0$ とすると Diriclet 境界条件であり、 $\varepsilon \to \infty$ とすると Neumann 境界条件である。

領域 Ω に以下の仮定をする. (cf. [2])

仮定 1. 局所座標系 $\{(U_r, y_r, \phi_r)\}_{r=1}^M$ が存在し,

次を満たす.

- (1) $\{U_r\}$ は $\Gamma = \partial \Omega$ の開被覆である.
- (2) $y_r = (y_{r1}, \dots, y_{rn-1, y_{rn}}) = (y'_r, y_{rn})$ は元 の座標 x を回転させたものである.
- (3) $\Delta_r := \{y'_r \in R^{n-1} : |t'_r| < \alpha\}$ 上で ϕ_r は 滑らかであり、そのグラフは $\Gamma \cap U_r$ である.

ここで、 α は適当な正定数である.

 Γ のコンパクト性より、ある $h_0>0$ が存在して、任意の $x\in\Gamma$ に対し、ある r が存在して $B(x,h_0)\subset U_r$ となる. Γ との符号付き距離関数 d(x) を次のように定める.

$$d(x) = \begin{cases} -\operatorname{dist}(x, \Gamma) & \text{if } x \in \Omega\\ \operatorname{dist}(x, \Gamma) & \text{if } x \in \Omega^c \end{cases}$$

 $\Gamma(\delta) := \{x \in \mathbb{R}^n \colon |d(x)| < \delta\}$ とする. δ が十分小さいならば、次を満たす関数 $\pi \colon \Gamma(\delta) \to \Gamma$ が存在する.

$$x = \pi(x) + d(x)\nu(\pi(x))$$

ただし、 ν は Γ 上の外向き単位法線ベクトルである.

 T_h を計算領域 Ω_h の正則な三角形分割とし、 \mathcal{E}_h を対応する $\Gamma_h = \partial \Omega_h$ の分割とする. 以下の条件を満たすと仮定する.

仮定 2. 1) メッシュサイズ h について $h < \min\{h_0, 1\}$ となる.

- (2) $r=1,\ldots,M$ に対し, $\Gamma_h\cap U_r$ が関数 ϕ_{rh} のグラフにより表現される.
- 3) $E \in \mathcal{E}_h$ の頂点がすべて Γ 上にある.

h を十分小さくとることで $\Gamma_h \subset \Gamma(\delta)$ 上 π が 定義でき,E と $\pi(E)$ が同じ開近傍 U_r に含まれる.このとき, $\pi|_{\Gamma_h}$ は逆写像 $\pi^*(x) = x + t^*(x)\nu(x)$ を持ち, $\|t^*\|_{0,\infty,\Gamma} \leq C_{0E}h^2$ となる.

滑らかな領域 $\widetilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$ を $\Omega, \Omega_h, \Gamma(C_{0E}h^2)$ を含むように選び, $P \colon H^s(\Omega) \to H^s(\widetilde{\Omega})$ を有界な拡張作用素とする. $\widetilde{f} = Pf \in H^2(\widetilde{\Omega})$ とし,

 u_0, g はそれぞれ $\widetilde{\Omega}$ 上の関数 $\widetilde{u}_0, \widetilde{g} \in H^3(\widetilde{\Omega})$ の Γ への制限であるとする. また, (1)の解 $u \in H^4(\Omega)$ とする.

有限要素空間 V_b を次のように定める.

$$V_h := \{ \chi \in C(\overline{\Omega}) \colon \chi|_T \in \mathcal{P}^1(T) \, \forall T \in \mathcal{T}_h \}$$

このとき、射影 Π_h : $H^2(\Omega_h) \to V_h$ が存在し、 $T \in \mathcal{T}_h$, $m = 0, 1, 2, w \in H^2(T)$ に対し、次を満たす.

$$|w - \Pi_h w|_{m,T} \le Ch^{2-m} ||w||_{2,T}$$

(1) に対する Nitsche 法のスキームを次のように定める.

Find
$$u_h \in V_h$$
 s.t.
 $a_h(u_h, \chi) = l_h(\chi) \quad \forall \chi \in V_h$ (2)

ここで,

$$a_{h}(w,v) = (\nabla w, \nabla v)_{\Omega_{h}}$$

$$+ \sum_{E \in \mathcal{E}_{h}} \left\{ -\frac{\gamma h_{E}}{\varepsilon + \gamma h_{E}} \left(\langle \frac{\partial w}{\partial \nu_{h}}, v \rangle_{E} + \langle w, \frac{\partial v}{\partial \nu_{h}} \rangle_{E} \right) \right.$$

$$+ \frac{1}{\varepsilon + \gamma h_{E}} \langle w, v \rangle_{E} - \frac{\varepsilon \gamma h_{E}}{\varepsilon + \gamma h_{E}} \langle \frac{\partial w}{\partial \nu_{h}}, \frac{\partial v}{\partial \nu_{h}} \rangle_{E} \right\}$$

$$\begin{split} l_h(v) &= (\tilde{f}, v)_{\Omega_h} \\ &+ \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \biggl\{ \frac{1}{\varepsilon + \gamma h_E} \langle \tilde{u}_0, v - \gamma h_E \frac{\partial v}{\partial \nu_h} \rangle_E \\ &+ \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \gamma h_E} \langle \tilde{g}, v - \gamma h_E \frac{\partial v}{\partial \nu_h} \rangle_E \biggr\} \end{split}$$

であり、 $h_E = \text{diam}E$ 、 ν_h は Γ_h の外向き単位 法線ベクトル、 $\gamma > 0$ は十分小さな定数である.

3 スキームの解析

 $H^s(\Omega_h)\,(s>3/2)$ に対し、以下の 2 つの J ルムを定める.

$$||v||_h^2 := ||\nabla v||_{0,\Omega_h}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_h} \frac{1}{\varepsilon + h_E} ||v||_{0,E}^2$$

$$\left\| v \right\|_{h,*}^2 := \left\| \nabla v \right\|_{0,\Omega_h}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_*} \frac{1}{\varepsilon + h_E} \left\| v \right\|_{0,E}^2$$

双線形形式 a_h について次が成り立つ.

補題 1. $w, v \in H^s(\Omega_h)$, (s > 3/2) に対し,

$$a_h(w,v) \leq C \|w\|_{h_*} \|v\|_{h_*}$$

が成り立つ. さらに, γ が十分小さいならば, $\chi \in V_h$ に対し,

$$a_h(\chi,\chi) \geq C \|\chi\|_h^2$$

が成り立つ.

補題 2. u, u_h をそれぞれ (1), (2) の解とする. このとき, γ が十分小さいならば, 以下が成り立つ.

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{h,*} \le C \left[\inf_{\xi \in V_h} \|\tilde{u} - \xi\|_{h,*} + \sup_{\chi \in V_h} \frac{|a_h(\tilde{u}, \chi) - l_h(\chi)|}{\|\chi\|_h} \right]$$

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{0,\Omega_h} \le C \left[\|\tilde{u} - u_h\|_{0,\Omega_h \setminus \Omega} + h \|\tilde{u} - u_h\|_{h,*} + \sup_{z \in H^2(\Omega)} \|z\|_{2,\Omega}^{-1} \left(\|z - \Pi_h z\|_{h,*} \|\tilde{u} - u_h\|_{h,*} + |a_h(\tilde{u}, \Pi_h z) - l_h(\Pi_h z)| \right) \right]$$

ただし, $\tilde{u} = Pu$, $\tilde{z} = Pz$ である.

これらより,以下の誤差評価が成り立つ.

定理 1. 補題 2の仮定のもとで以下が成り立つ.

$$\begin{split} \|\tilde{u} - u_h\|_{h,*} & \leq Ch(\|u\|_{3,\Omega} + \|\tilde{u}_0\|_{1,\widetilde{\Omega}} + \|\tilde{g}\|_{1,\widetilde{\Omega}}) \\ \|\tilde{u} - u_h\|_{0,\Omega_h} & \leq Ch^2(\|u\|_{4,\Omega} + \|\tilde{u}_0\|_{3,\widetilde{\Omega}} + \|\tilde{g}\|_{3,\widetilde{\Omega}}) \\ \text{ただし,} \quad \tilde{u} &= Pu \ \text{である}. \end{split}$$

講演時に簡単な証明およびいくつかの数値例を示す.

謝辞 本研究は,博士課程教育リーディングプログラム, JST, CREST (JPMJCR15D1),科研費(課題番号:15H03635)の助成を受けた.

- [1] B. Kovács, and C. Lubich, Numerical analysis of parabolic problems with dynamic boundary conditions *IMA Journal of Numerical Analysis*, 37(1), 2017, 1–39
- [2] T. Kashiwabara, I. Oikawa, and G. D. Zhou, Penalty method with P1/P1 finite element approximation for the Stokes equations under the slip boundary condition, Numerische Mathematik, 134(4), 2016, 705–740

離散化誤差を考慮した常微分方程式の初期値推定について

松田 孟留1, 宮武 勇登2

1東京大学大学院情報理工学系研究科,2大阪大学サイバーメディアセンター

e-mail: matsuda@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

常微分方程式で記述される現象において,観測データをもとに初期値を推定するのはデータ同化の基本的な問題である [1, 2]. この問題に対して,Runge-Kutta 法などで得られる数値解を観測データに当てはめる方法が考えられるが,数値解に含まれる離散化誤差が推定精度に与える影響は明らかでない. たとえば,偏微分方程式の空間離散化として現れるような高次元の常微分方程式においては計算コストの観点から時間刻みを十分小さくとれないため,離散化誤差を無視できないと考えられる.

そこで本研究では、初期値推定の問題を重みつき最小二乗推定として定式化し、重みと初期値の推定を交互反復する手法を提案する.提案手法は、離散化誤差が大きいと考えられるデータ点に対する重みを小さくし、数値解がより信頼できるデータ点に対する重みを大きくすることで、初期値推定におけるバイアスを軽減する.

2 問題設定

以下では,例として1変数の線形常微分方 程式

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \lambda x$$

において観測データ

$$y_k \sim N(x_k, \tau^2) \ (k = 1, \cdots, n)$$

をもとに初期値 $\theta = x(0)$ を推定する問題を考える.ここで $x_k = x(kh)$ とおいた.また, $N(x_k, \tau^2)$ は平均 x_k ,分散 τ^2 の正規分布を表し,ここでは τ^2 は既知とする.

厳密解 $x(t) = \exp(\lambda t)\theta$ をデータに当てはめる場合の最尤推定量(=最小二乗推定量)は

$$\hat{\theta}_{\text{exact}} = \arg\min_{\theta} \sum_{k=1}^{n} (y_k - \exp(\lambda t)\theta)^2$$
$$= \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k \exp(\lambda kh)}{\sum_{k=1}^{n} \exp(2\lambda kh)}$$

で与えられる. この推定量の標本分布は

$$\hat{\theta}_{\mathrm{exact}} \sim \mathrm{N}\left(\theta, \tau^2 \left(\sum_{k=1}^n \exp(2\lambda k h)\right)^{-1}\right)$$

であり,不偏推定量になっている.

実際には厳密解を用いることはできないので、数値解で代用することになる。たとえば、時間刻み幅を h とした陽的 Euler 法の数値解 $x_{\text{Euler}}(kh) = (1+\lambda h)^k \theta$ をデータに当てはめる 場合の最尤推定量(=最小二乗推定量)は

$$\hat{\theta}_{\text{Euler}} = \arg\min_{\theta} \sum_{k=1}^{n} (y_k - (1 + \lambda h)^k \theta)^2$$

$$= \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k (1 + \lambda h)^k}{\sum_{k=1}^{n} (1 + \lambda h)^{2k}}$$

で与えられる. この推定量は

$$E[\hat{\theta}_{Euler}] \neq \theta$$

よりバイアスをもつ.このように数値解に含まれる離散化誤差を無視してデータに当てはめると,推定量にバイアスが生じて推定精度が落ちる.そこで,離散化誤差を考慮することでより精度が良い推定量を構成するのが本研究の目的である.

3 確率的数值解法

前節で数値解に基づいた最尤推定量はバイアスをもつことを見たが、ベイズ統計の枠組みでも同様の問題が生じる. すなわち、数値解に基づいた尤度を用いて事後分布を構成すると真の値に集中しない. この問題に対処するために、確率的数値解法という方法が近年さかんに研究されている [3,4]. これは、数値解法の各ステップで数値解に確率的な摂動を加えることで、離散化誤差に由来する不確定性を表現するものである. すなわち、一段解法 Ψ_h に基づく確率的数値解法は、 $\xi_k \sim N(0,\sigma^2)$ を用いて

$$X_{k+1} = \Psi_h(X_k) + \xi_k$$

と定義される. 確率的数値解法で多数のシミュレーションを行い離散化誤差を見積もることで,

事後分布を構成する際の尤度をロバストにできる.この方法によって事後分布が真の値に集中しない問題が軽減されることが実験的に確認されている[3].

[3] では点推定については論じられていないが、確率的数値解法によって自然に初期値推定量を構成することができる。たとえば、陽的Euler 法に基づく確率的数値解法を用いた推定量は

$$\hat{\theta}_{\text{pEuler}} = \frac{\sum_{k=1}^{n} v_k^{-1} y_k (1 + \lambda h)^k}{\sum_{k=1}^{n} v_k^{-1} (1 + \lambda h)^{2k}},$$

$$v_k = \tau^2 + \sigma^2 \frac{(1+\lambda h)^{2k} - 1}{(1+\lambda h)^2 - 1}$$

で与えられ、 $\hat{\theta}_{\text{Euler}}$ に比べてバイアスが軽減される。しかし、この推定量で摂動の分散 σ^2 をどう設定するかは明らかでなく、また多数のシミュレーションを行うために多くの計算量を要する。

4 提案手法

本研究では、前節で考えた確率的数値解法に よる初期値推定量が

$$\hat{\theta}_{\text{pEuler}} = \arg\min_{\theta} \sum_{k=1}^{n} v_k^{-1} (y_k - (1 + \lambda h)^k \theta)^2$$

という重みつき最小二乗推定量として解釈できることに着目し、新たな初期値推定量を提案する.一般に、重み $w=(w_k)$ に対応する重みつき最小二乗推定量

$$\hat{\theta}_w = \arg\min_{\theta} \sum_{k=1}^n w_k (y_k - (1 + \lambda h)^k \theta)^2$$

において、離散化誤差が大きいデータ点に対する重みを小さくし、数値解がより信頼できるデータ点に対する重みを大きくすれば、より良い推定量が得られることが期待される。そこで提案手法では、推定量 $\hat{\theta}_w$ の平均二乗誤差が最小になる重み w_* を「最適な重み」と定義し、初期値 θ と最適な重み w_* の推定を交互に反復する。ここで、重みの更新は二次計画問題を解ることに帰着し、効率的に計算することができる。また、提案手法は確率的数値解法と異なり多数のシミュレーションを要さない。数値実験の結果、提案手法は確率的数値解法を用いた推定量よりも推定精度が良いことが確認できた。

- [1] F-X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects. *Tellus*, Vol. 38A, pp. 97–110, 1986.
- [2] J. O. Ramsay, G. Hooker, D. Campbell and J. Cao. Parameter estimation for differential equations: a generalized smoothing approach. *Journal of Royal Statistical Society B*, Vol. 69, pp. 741–796, 2007.
- [3] P. R. Conrad, M. Girolami, S. Sarkka, A. M. Stuart and K. Zygalakis. Statistical analysis of differential equations: introducing probability measures on numerical solutions. Statistics and Computing, Vol. 27, pp. 1065– 1082, 2017.
- [4] H. C. Lie, A. M. Stuart and T. J. Sullivan, Strong convergence rates of probabilistic integrators for ordinary differential equations, arXiv:1703.03680.

微分代数方程式に対する離散勾配法の構築

佐藤 峻

東京大学

e-mail: shun_sato@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

微分代数方程式 (DAE: Differential-Algebraic Equation) は常微分方程式 (ODE: Ordinary Differential Equation) の一般化であり,各種の現象のモデリングにおいて自然に現れる.拘束条件付き機械系はその好例であり,力学的エネルギー保存則が成立するため,この性質を受け継いだ数値解法が構築・利用されている.この研究は,ODE における保存的数値解法に関する豊富な研究の観点からも自然なものであるが,DAE における研究は未だ黎明期にあり各論に止まっている.本発表では,ある種の仮定の下で,拘束条件と保存則を同時に保つ離散勾配法を統一的に構築できることを示す.本発表の内容は [1] の一部である.

2 DAEの基礎事項

本稿では,以下の形式のDAEを考える:

$$A\dot{z} = f(z) \tag{1}$$

 $(z:[0,T) \to \mathbb{R}^d, \, A \in \mathbb{R}^{d \times d}, \, f:\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d)$.ここで,z はz の時間微分を表す.また,DAE(1)の微分指数が(一様に)1 であると仮定する.DAEの微分指数に関する詳細は [2] に譲ることとするが,以下,この仮定の意味を説明する.

まず,DAE(1)は拘束条件を陽にはもたないが,陰的にもつことを示す.行列 A の像空間 $\mathrm{range}(M)$ の直交補空間の正規直交基底 $\{b_i\}_{i=1}^\ell$ を束ねて行列 $B=(b_1,\ldots,b_\ell)$ を構成する.このとき,DAE(1)の解 z について $0=B^\top M\dot{z}=B^\top f(z)$ が成立することに注意すると,拘束条件 $G(z)=B^\top f(z)=0$ をもつことが分かる.

つまり,DAE(1)の全ての解軌道は多様体 $\mathcal{M}=\{z\in\mathbb{R}^d\mid G(z)=0\}$ に含まれる.微分指数が (-様に)1 であるときには,さらに, $G(z_0)=0$ を満たす全ての $z_0\in\mathbb{R}^d$ に対して, z_0 を初期値とする軌道が一意的に定まる.

3 ODEにおける離散勾配法

 ODE における勾配流は $\dot{z} = S(z)
abla V(z)$ と書かれ, $S(z) \in \mathbb{R}^{d imes d}$ が歪対称行列であれば関

数 $V: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ は不変量である:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}V(z) = \langle \nabla V(z), \dot{z} \rangle$$
$$= \langle \nabla V(z), S(z)\nabla V(z) \rangle = 0.$$

ここで, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ は \mathbb{R}^d における通常の内積である. このとき,離散勾配法 $(z^{(n)} \approx z(n\Delta t))$

$$\frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}\,\overline{\nabla}V(z^{(n+1)}, z^{(n)})$$

は離散保存則 $V(z^{(n+1)})=V(z^{(n)})$ を満たす [3] . ここで , $\overline{S}=\overline{S}(z^{(n+1)},z^{(n)})$ は S の歪対称性を保つ近似であり , $\overline{\nabla}V$ は以下のように定義される離散勾配である (各種の構成法が存在する) .

定義 1. 関数 $V:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ に対して,以下の 2 つの性質を満たす連続関数 $\overline{\nabla}V:\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ を離散勾配という:

- $V(z) V(z') = \langle \overline{\nabla} V(z, z'), z z' \rangle$;
- $\overline{\nabla}V(z,z) = \nabla V(z)$.

離散保存則は,離散勾配の1つ目の性質 (離散連鎖律) と \overline{S} の歪対称性を用いて連続版と全く同様に証明される.

4 DAE における勾配流

詳細は割愛するが,[1]では,

$$A\dot{z} = S(z)\nabla V(z) \tag{2}$$

という形の DAE 版の勾配流を提案し,V が不変量になるための (A,S) についての)十分条件を導いた.実は,任意の関数 V を対象にして十分条件を導くことは困難であり,以下で定義する「プロパー」という仮定を置くことで困難は解消される (命題~4 の証明参照).

定義 2. 関数 $V: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が $\nabla V(z) \in \operatorname{car}(A) := \operatorname{null}(A)^{\perp} \ (z \in \mathcal{M})$ を満たすとき,DAE (1) に対してプロパーであるという.

注意 3. プロパーな関数は通常の関数の部分集合に過ぎないが , DAE (1) の不変量を考える上ではこれで十分である:任意の不変量 \tilde{V} に対して M 上での値が等しいプロパーな不変量 V が存在する ([1, Proposition 4.2] に依る).

関数 V がプロパーであるとき, $A^\dagger S$ の歪対称性により,保存則は特徴付けられる $(A^\dagger:A$ の Moore-Penrose 一般逆行列).

命題 4. 関数 V がプロパーであり, $A^{\dagger}S(z)$ が任意の $z\in\mathcal{M}$ に対して歪対称であるとする.このとき,V は保存量である.

証明 Moore-Penrose 一般逆行列の性質より , DAE (2) の解 z に対して , ある $e:[0,T) \to \mathrm{null}(A)$ が存在して $\dot{z}=A^\dagger S(z)\nabla V(z)+e$ と書ける.よって , V の時間変化について ,

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} V(z) &= \langle \nabla V(z), \dot{z} \rangle \\ &= \langle \nabla V(z), A^\dagger S(z) \nabla V(z) \rangle + \langle \nabla V(z), e \rangle \end{split}$$

が成り立つ . 最右辺について , 第 1 項は $A^\dagger S(z)$ の歪対称性から , 第 2 項は $\nabla V(z) \in \operatorname{null}(A)^\perp$ から 0 であるため , 命題は成立する .

5 指数1のDAE に対する離散勾配法

勾配流 (2) における勾配を単に離散勾配に置き換えるだけでは,離散保存則は成立しな(1) の題 (2) の離散版を目指す際には,以下の (2) 点に注意が必要である:

(A) 多様体 *M* の存在:

 $A^\dagger S(z)$ の歪対称性など, \mathcal{M} 上でのみ成立する条件が存在する.このため,数値解が \mathcal{M} に属していなければ,同様の議論はできない.

(B) プロパー性 $\nabla V(z) \in \operatorname{car}(A)$: 「(P) 関数 V がプロパーであり $z,z' \in \mathcal{M}$ のとき , $\overline{\nabla}V(z,z') \in \operatorname{car}(A)$ 」は一般の離散勾配において成立しない.このため,数値解が \mathcal{M} に属していると仮定しても,この点に関しては不十分である.

5.1 (A)の対策:再定式化

勾配流 (2) に単に離散勾配を用いた場合には,数値解は多様体 \mathcal{M} から離れてしまう.これを解決するために,以下のような拘束条件を陽に表現する再定式化を行う:

$$\begin{cases} A\dot{z} = S(z)\nabla V(z) + \sum_{i=1}^{\ell} c_i b_i, \\ G(z) = 0. \end{cases}$$
 (3)

ここで, c_i は新たに導入した変数であるが,厳密解においては恒等的に0 になる「指数1」という仮定は,拘束条件を陽に表現する再定式化を行うために必要である.

5.2 (B)の対策:特殊な離散勾配

実は,各種の標準的な手法によって構築される離散勾配は性質 (P) を満たさない.このため,[1, Section 7.1] にて,新規にその候補の一例 $\overline{\nabla}_P V$ を与え,さらに V が狭義凸や 2 次の場合にはそれが連続写像になり,実際に離散勾配を形成することを指摘した.連続性は結果として得られるスキームの適合性の十分条件であるが,実際には z=z' の近傍で $\overline{\nabla}_P V(z,z')$ が連続であればよい.この意味では,より一般の V に関しても(極めて例外的な状況を除けば)問題ないと考えられる.

5.3 提案手法と離散保存則

定式化(3)を基に,離散勾配法を定義する:

$$\begin{cases} A \frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S} \, \overline{\nabla}_{\mathbf{P}} V + \sum_{i=1}^{\ell} c_i^{(n+1)} b_i, \\ G(z^{(n+1)}) = 0. \end{cases}$$
(4)

ここで, $\overline{S}=\overline{S}(z^{(n+1)},z^{(n)})$ は $z,z'\in\mathcal{M}$ に対して $A^{\dagger}\overline{S}(z,z')$ が歪対称になるように定める (例: $\overline{S}(z,z')=(S(z)+S(z'))/2)$. このとき,以下の定理が成立する(証明は $A^{\dagger}b_i=0$ に注意すると命題 4 と同様である).

定理 $\mathbf{5}.\ z^{(n)}\in\mathcal{M}$ であるとき , 離散勾配法 (4) の解 $z^{(n+1)}$ は以下を満たす:

- 拘束条件 $G(z^{(n+1)}) = 0 \Leftrightarrow z^{(n+1)} \in \mathcal{M}$;
- 離散保存則 $V(z^{(n+1)}) = V(z^{(n)})$.

謝辞 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.

- [1] S. Sato: Linear gradient structures and discrete gradient methods for conservative/dissipative differential-algebraic equations, arXiv eprint, arXiv:1805.04824, 2018.
- [2] U. M. Ascher and L. R. Petzold: Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations, SIAM, Philadelphia, PA, 1998.
- [3] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, and N. Robidoux: Geometric integration using discrete gradients, Philos. Trans. R. Soc. Lond. A Math. Phys. Eng. Sci., 357:1021–1045, 1999.

ProVerif を用いた TLS1.3 ハンドシェイクプロトコルの形式検証

荒井 研一1, 岡崎 裕之2, 布田 裕一3

1長崎大学大学院工学研究科,2信州大学大学院理工学系研究科,

3 東京工科大学コンピュータサイエンス学部

e-mail: k.arai@cis.nagasaki-u.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る. ProVerif は 多くの暗号プロトコルに対してセキュリティ上 の欠陥を発見することに成功している [3].

一方,TLS(Transport Layer Security) はインターネット上で安全な通信を提供するための暗号プロトコルであり,ハンドシェイクプロトコルは相手認証及び暗号化通信を確立するために必要なセキュリティパラメータのネゴシエーションを行うプロトコルである.TLS 1.3 は IETF(Internet Engineering Task Force) において 2014 年より標準化の議論が進められており,2018 年 3 月に draft-28[4] が標準規格として承認された.

講演者らは、これまでに ProVerif を用いて TLS 1.3 ハンドシェイクプロトコルを形式的に 記述し、その安全性検証を draft-06 から継続 的に行ってきた [5, 6, 7]. 本講演では、講演者 らのこれまでの取り組みを紹介する.

謝辞 本研究成果は、CELLOS (Cryptographic protocol Evaluation toward Long-Lived Outstanding Security) の活動に基づいて得られたものです。本研究を進めるに当たり専門知識をご提供いただいた CELLOS メンバの皆様に感謝いたします。本研究の一部は JSPS 科研費 JP17K00182、JP15K00183 の助成を受けたものです。

- [1] B.Blanchet(Project leader), "ProVerif: Cryptographic protocol verifier in the formal model." Available at http://prosecco.gforge.inria.fr/ personal/bblanche/proverif/.
- [2] B.Blanchet, B.Smyth, and V.Cheval, "ProVerif 2.00: Automatic Cryp-

- tographic Protocol Verifier, User Manual and Tutorial." Available at http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif/manual.pdf.
- [3] 情報通信研究機構 (NICT), "Crypto-graphic Protocol Verification Portal." http://crypto-protocol.nict.go.jp/index.html.
- [4] E.Rescorla, "The Transport Layer Security (TLS) Protocol Version 1.3. Internet-Draft 28 (work in progress)," March, 2018. https://tools.ietf.org/html/draft-ietf-tls-tls13-28.
- [5] 荒井 研一,渡辺 大,櫻田 英樹, "ProVerif による TLS1.3 ハンドシェイ クプロトコルの形式検証," コンピュー タセキュリティシンポジウム 2015 論文 集,2015(3),pp.1003-1010,2015.
- [6] 荒井 研一, 徳重 佑樹, 櫻田 英樹, "ProVerif による TLS 1.3 ハンドシェイ クプロトコルの形式検証(その 2)," 2016 年 暗号と情報セキュリティシンポ ジウム (SCIS2016), 1A1-4, 2016.
- [7] 荒井 研一, 岡崎 裕之, 布田 裕一, "ProVerif における phase について," 2017年 暗号と情報セキュリティシンポ ジウム (SCIS2017), 2A1-1, 2017.



ProVerifの検証過程の可視化

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

本研究では、一般にブラックボックスである 安全性検証ツールの検証過程を可視化すること で検証結果の理解に貢献することを目的とする。 本稿では、安全性検証ツールとして ProVerif [1] を対象とし、検証過程で生成される情報 (以降、 内部情報) の抽出と可視化の手法を提案する。内 部情報の抽出では、処理の順序や論理的構造を 木構造として表現する。可視化には、ソフトウェ アバージョン管理可視化ツール Gource [2] を用 いてアニメーションとして表示する。ProVerif のバージョンは 1.92、Gource のバージョンは 0.43 とする。そして、暗号プロトコルの検証過 程を可視化した結果を示す。

2 検証過程可視化の枠組み

検証過程の可視化システムは、ProVerif の検 証過程抽出機能と視覚的表現表示機能を実現す るプログラムから構成される (図 1 参照).

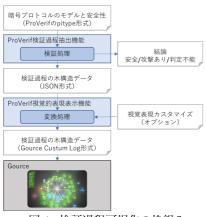


図 1. 検証過程可視化の枠組み

ProVerif の検証過程抽出機能を実現するプログラム (以降, proverif-visual) は, 検証対象とする暗号プロトコルのモデルと安全性の記述を ProVerif の入力形式の一つである pitype 形式でうけとり, 検証処理で生成される情報 (以降, 内部情報)を, 処理の順序や論理的構造を木構造として保持した JSON 形式のファイルとして出力する. これは, ProVerif に対し, 検証処理で内部情報を出力するように改変を加え

る形で実現する。ProVerif の視覚的表現表示機能を実現するプログラム (以降, proverif-jsongource) は, proverif-visual が出力した JSON 形式のデータがもつ木構造をディレクトリツリーに対応付け, Gource へ与えるファイル更新のログ形式 (GCL, Gource Custom Log 形式)に変換し, 出力する。GCL 形式は複数の行から構成され, 各行が各更新ログを表す。各ログは, "|"で区切られた timestampe, username, type (追加 A, 変更 M, 削除 D), file, color のフィールドからなり, 最後のフィールドは省略可能である。Gource は, GCL 形式のログを入力として受け取り, ディレクトリツリーの変化をアニメーションとして表示する。

3 検証過程可視化の方針

ProVerifの検証処理 ProVerifの検証処理では、入力とした暗号プロトコルのモデルと安全性(Query)の記述から、表1に示すようにルール (Horn 節)が生成され、それらを元に新たなルールが合成され、冗長なルールが削除される。そして、生成・合成されたルールを元に Queryが満たされるか否かが判定される。なお、停止性の確保のため、ユーザ指定によるルールの近似を許している[3].

表 1. ProVerif 1.92 の主要な検証処理とその内容

検証処理	内容
main	(main.ml:anal_file) 暗号プロトコルのモデルの記述を読み
	込み抽象構文木を生成する。
traslation	(pitransl.ml:transl, pitranslweak.ml:transl) # f, £
	ての宣言, phase, 型ごとにルールを生成する。その際, 他の ルールから導出可能なルールおよびトートロジを消去し, ルー
	ル番号を振り直す。そして、プロセス記述からのルールを生成
	する。
interference	(main.ml:interference_analysis) 生成されたルールを元
analysis	に closing 処理を行う. closing 処理の完了したルールセット
	のうち結論が bad のルールを全て抽出する。抽出結果からルール第世のよう
	ル導出の history を使い、導出に至るまでの fact とルールの 組み合わせを fact_tree というデータ構造にする。reduction
	処理を行い、プロセストレースを構成できた場合、その結果を
	元にクエリが false か否かを判定し、結論を出力する。
closing	(rules.ml:completion) ルールを合成し、新しいルールを生
	成する。まず、ルールセットとルールキューを空とし、前ステッ
	プで得た各ルールを最適化を施しながらルールキューに追加す
	る. 最適化とは、トートロジの消去や成立しない制約をもつルールの消去、重複した hypothesis の削除などであり、最適化
	後のルールがすでにルールセットに入っているか導出可能な場
	合は、ルールセットに追加しない。すでにルールセットに入っ
	ているルールのうち、新たに加えるルールから導出できるもの
	は削除する。追加したルールとルールセットにあるルールから、
	新たなルールを合成し、ルールキューに追加する。ルールキュー
	への追加がなくなり、ルールキューが空になるまでくり返すこ
reduction	とによりすべての合成可能な組合せを合成する。
reduction	(reduction.ml:do_reduction, reduction_bipro.ml:do_reduction)
	与えられた fact_tree に対応する攻撃トレースが実現
	可能かどうか再構成を試みる。プロセスの様々な実行トレース
	のうち、fact_tree 内のすべての変数が攻撃者のもつ知識で
	bind できるものがあるか調べる.

Gourceでの可視化 Gourceによる可視化では、各処理ステップでルールが作成・削除されることを、ファイル更新者がディレクトリツリーを構築・削除することで表す。ルールが合成された場合には、合成元となったルールのディレクトリツリーを合成後の子孫にコピーして残す。ルールを表すディレクトリツリーの構成とルールとの対応を表2に示す。Queryの判定で攻撃が発見された場合、その判定の元となるルールのディレクトリツリー(全体の部分木)の色を変更させることで強調する。また、近似されたルールは色を変更させることで他と区別できるようにする。

表 2. ProVerif 1.92 の主要な検証処理を表すディレクトリッリーの構成

7 7 7 7 1	
構成要素	ルールとの対応
ディレクトリ	ルール番号を名前とする。
ファイル「ルール」	ルール番号をファイル名とし、history 情報 (どの宣
	言から生成されたかなど)を拡張子としてもつ.
ファイル「結論」	ルールの結論部分の term を名前としてもつ.
ファイル「前提」	ルールの前提部分の term を名前としてもつ.
ファイル「制約」	ルールに制約がある場合に、それを名前としてもつ。

可視化機能の実現 このような可視化を可能とするため、proverif-visual は、ProVerif の各処理ステップにおいて、ルールの生成、合成、削除、あるいは Query 判定をした際に、処理ステップとルールの情報を JSON 形式で出力する。そして、proverif-json-visual では、JSON形式がもつ処理ステップとルールの情報 (生成、合成、削除、Query 判定) から、Gource 入力形式である GCL 形式のログを出力する.

4 検証過程可視化の例

ProVerif は TLS1.3 や QUIC など様々な暗号 プロトコルの安全性検証に利用されている [4]. 本稿では、Cryptographic Protocol Verification Portal [5] に掲載された形式検証ツールの代表 適用例の Yahalom-BAN simplified について実 行速度を以下に示す. Yahalom-BAN simplified は, 共通鍵暗号の鍵サーバを用いた相互認証・ 鍵交換プロトコルであり、ProVerif により、攻 撃として乱数 (ノンス) の共有に失敗させ、一 方になりすます手法が発見されている. 実行 環境のプロセッサは 1.7 GHz Intel Core i7 で あり、10 回実行した平均で proverif-visual は 3.72 秒, proverif-json-gource は 17.72 秒であっ た。なお、検証過程の最初に生成されたルール (initial clauses) は41個, その後のルール合成 による新たなルールの追加は3,042回,新たに

追加されたルールから導出できるルールの削除は 1,153 回,これらに対応するファイル更新ログは 575,756 個である.その可視化画面を図 2 に示す.



図 2. ProVerif1.92 の検証処理の translation が終わり, interference analysis の closing が実行されている時点の可視化画面. 合成されたルールを緑のディレクトリ、その元となっているルールを青のディレクトリツリーで表示し, ルール削除ではディレクトリツリーを赤と紫で強調した後, 削除している.

今後の課題として、ProVerif による検証の 停止性に向けた対策の検討が挙げられる。例 えば、強制停止するまでに抽出した内部情報か ら原因を特定し、pitype 形式の記述の工夫や、 ProVerif の検証に適した暗号プロトコル設計 の検討、検証処理の改善を目指す。

- [1] B.Blanchet, ProVerif: Cryptographic protocol verifier in the formal model, http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif/(2018年8月3日).
- [2] A.Caudwell, Gource a software version control visualization tool, http://gource.io/(2018年8月3日).
- [3] B.Blanchet, An efficient cryptographic protocol verifier based on Prolog rules, in: Proc. of CSFW '01, pp.82–96, 2001.
- [4] H.Sakurada, K.Yoneyama, Y.Hanatani, and M.Yoshida, Analyzing and fixing the QACCE security of QUIC, in: Proc. of SSR 2016, pp.1–31, 2016.
- [5] NICT, Cryptographic Protocol Verification Portal, http: //crypto-protocol.nict.go.jp/ (2018年8月3日).

Scyther tool の検証過程の可視化

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

本研究では、一般にブラックボックスである 安全性検証ツールの検証過程を可視化すること で検証結果の理解に貢献することを目的とする。 本稿では、安全性検証ツールとして Scyther [1] を対象とし、検証過程で生成される情報 (以降、 内部情報) の抽出と可視化の手法を提案する。内 部情報の抽出では、処理の順序や論理的構造を 木構造として表現する。可視化には、ソフトウェ アバージョン管理可視化ツール Gource [2] を用 いてアニメーションとして表示する。Scyther のバージョンは 1.1.3、Gource のバージョンは 0.43 とする。そして、暗号プロトコルの検証過 程を可視化した結果を示す。

2 検証過程可視化の枠組み

検証過程の可視化システムは、Scyther の検 証過程抽出機能と視覚的表現表示機能を実現す るプログラムから構成される。

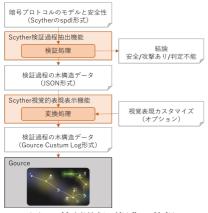


図 1. 検証過程可視化の枠組み

Scyther 検証過程抽出機能を実現するプログラム (以降, scyther-visual) は、検証対象とする暗号プロトコルのモデルと安全性の記述をScyther の入力形式である spdl 形式でうけとり、検証処理の内部情報を、処理の順序や論理的構造を木構造として保持した JSON 形式のファイルとして出力する。これは、Scyther に対し、検証処理で内部情報を出力するように改変を加える形で実現する。

Scyther 視覚的表現表示機能を実現するプログラム (以降, scyther-json-gource) は, scyther-visual が出力した JSON 形式のデータがもつ木構造をディレクトリツリーに対応付け, Gource へ与えるファイル更新のログ形式 (GCL, Gource Custom Log 形式) に変換し出力する. GCL形式は複数の行から構成され, 各行が各更新ログを表す. 各ログは, "|"で区切られた times-tampe, username, type (追加 A, 変更 M, 削除 D), file, color のフィールドからなり, 最後のフィールドは省略可能である. Gource は, GCL形式のログを入力としてうけとり, ディレクトリツリーの変化をアニメーションとして表示する.

3 検証過程可視化の方針

Scyhter の検証処理 Scyther の spdl 構文で は、暗号プロトコルのモデルは、プロトコルの 実行主体である複数の Role がメッセージをや り取りし、協調してプロトコルを実行する形態 をとる. 個々の Role の動作は、メッセージの送 信・受信・Claim からなる Trace と呼ばれるイ ベントの列として構成される.安全性は Claim イベントとして扱われ、検証処理は各 Claim に対して個別に行われる. Scyther の検証過程 の各状態は Trace の集合からなる Pattern で 表される. Initial Pattern は、Cliam が属する Trace から、送信・受信イベントのみを選択し て作成される Trace と, Intruder の初期知識 を表す Trace から構成される. Pattern を構成 する Trace に属する受信イベントは、受け取る メッセージの形式を表す Term をもつ. ある受 信イベントに対し、対応する送信イベントが同 一の Pattern に属する別の Trace のいずれに も存在しない場合、その受信イベントが受け取 るメッセージの形式を表す Term は Unbound な Term と言う. ある Pattern に属する全て の Unbound な Term の集合をその Pattern の Goal と言う. ある Pattern の Goal が空の場 合, その Pattern を Realizable な Pattern と 言う. Scyther の検証処理では、 Goal に含ま れる Unbound な Term を Select し, Binding する試みを繰り返す

Gource での可視化 Gource による可視化では、Select と Binding 試行を、ファイル更新者がディレクトリツリーを構築することで表す。全ての Goal が Bound された場合、すなわち、攻撃が発見された場合(Realizable Pattern)、その判定の元となる Select と Binding 試行の組み合わせ (パス) の色を変更させることで強調する.

可視化機能の実現 このような可視化を可能とするため、scyther-visual は、各処理ステップにおいて、処理内容(Select、Co(Old)、Co(New)、DeEx、DeNew など、表 1 参照)とその対象の情報(Term)を JSON 形式で出力する。そして、scyther-json-visual は、ファイル更新ログにおいて、処理ステップ名をユーザ名として、処理内容とその対象の情報をディレクトリとその直下のファイルに反映する(表 2 参照)。

表 1. Scyther v1.1.3 の主要な検証処理とその内容

X 1. bey ther VI.I.S O L & & Kill College CO 11		
検証処理	内容	
Select	Goal に含まれる Unbound な Term を 1 つ選び, Bindng 試行の対象とする.	
Co(Old)	Construction(Old). Binding 試行の 1 つ. Unbound な Term に対応する Term を送信する Send イベントをもつ既存 の Intruder の Trace を探す.	
Co(New)	Construction(New). Binding 試行の 1 つ. Unbound な Term に対応する Term を構成するような Intruder による Trace を構成する。新規 Trace の構成により, 新しい Unbound な Term が Goal に追加されることがある。	
DeEx	Decryption chain from Existing. Binding 試行の 1 つ. Unbound な Term に対応する Term を送信する Send イベントをもつ既存の通常の (Intruder によるものではない) Trace を探す.	
DeNew	Decryption chain from New, Binding 試行の 1 つ, Unbound な Term に対応する Term を送信する Send イベントをもつ新規の Trace を構成する、新規 Trace は、対応する Send Event を含む Run のうち、先頭から対応する Send Event までの Event から成る、新規 Trace の構成により、新しい Unbound な Term が Goal に追加されることがある。	

表 2. Scyther v1.1.3 の主要な検証処理を表すディレク トリツリーの構成

構成要素	ルールとの対応
ディレクトリ	Select か Binding 試行の種別を名前とする.
Claim ファイル	Claim イベントの情報を名前としてもつ.
Term ファイル	Select で選択された Term を名前としてもつ.
Goal ファイル	ルールの前提部分の Term を名前としてもつ.
Message ファイル	Binding 成功や失敗,繰り返し処理の枝切り (Pruned)に関するメッセージを名前としてもつ.

4 検証過程可視化の例

Scyther は、ISO/IECで規定されたエンティティ認証 (ISO/IEC 9798) など暗号プロトコルの安全性検証に利用されている [3]. 本稿では、Cryptographic Protocol Verification Portal [4] に掲載された形式検証ツールの代表適用例のYahalom-BAN simplified を選び、実行速度を示す、Yahalom-BAN simplified は、共通鍵暗号の鍵サーバを用いた相互認証・鍵交換プロト

コルであり、Scyther により、攻撃として通信相手を認証できないようにし、一方になりすます手法が発見されている。実行環境のプロセッサは $1.7~\mathrm{GHz}$ Intel Core i7 であり、 $10~\mathrm{Im}$ 万した平均で scyther-visual は $2~\mathrm{fm}$ 26.96 秒、scyther-json-gource は $2~\mathrm{fm}$ 25.62 秒、検証過程に対応するファイル更新のログ数は 3,074,318 個であった。

その可視化画面を図2に示す.

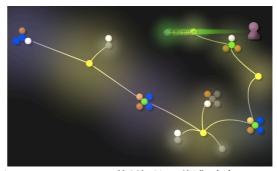


図 2. Scyther v1.1.3 の検証処理の可視化画面. Binding 試行が実行されるごとにディレクトリツリーが深くなり, 失敗した試行は灰色で表示されディレクトリツリーは深くならない.

今後の課題として、Scyther による検証の停止性に向けた対策が挙げられる。例えば、強制停止するまでに抽出した内部情報から原因を特定し、spdl 形式の記述の工夫や、Scyther の検証に適した暗号プロトコル設計の検討、検証処理の改善を目指す。

- [1] C.J.F.Cremers, The Scyther tool, https://www.cs.ox.ac.uk/people/cas.cremers/scyther/(2018年8月3日).
- [2] A.Caudwell, Gource a software version control visualization tool, http://gource.io/(2018年8月3日).
- [3] D.Basin, C.Cremers, and S.Meier, Provably repairing the ISO/IEC 9798 standard for entity authentication, Journal of Computer Security, Vol.21, No.6, pp.817–846, 2013.
- [4] NICT, Cryptographic Protocol Verification Portal, http: //crypto-protocol.nict.go.jp/ (2018年8月3日).

データ同化のためのアジョイント法の性能モデル構築の試み

藤川 隼人1, 片桐 孝洋2, 永井 亨2, 荻野 正雄2

1 名古屋大学大学院 情報学研究科, 2 名古屋大学 情報基盤センター

e-mail: fujikawa@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

データ同化の手法としてアジョイント法が知られている。アジョイント法の実装ではステンシル計算が行われることがあるが、その計算に時空間ブロッキング[1]を行うことで高性能化する手法が提案されている[2].

本研究は、時空間ブロッキングの実行性能解析を行い、実行時間に関する性能モデル(以降、単に性能モデルと呼ぶ)を提案することを目的とする.性能モデルは、計算時間の上限と下限を見積もるのに必要であり、オートチューニングに利用することができる.本稿では、アジョイント法の計算の一部であるforward modelの計算のみを取り扱い、空間ブロッキングのみのモデル評価を行った.

2 性能モデルの提案

ステンシル計算の性能モデルに関する先行研究として、7点ステンシル計算の空間ブロッキング時の性能モデル[1]がある。本研究では、この先行研究をもとに性能モデルを提案する。いま、アジョイント法の問題の要素数をE、性能モデルに用いるベンチマークのループ長をW、アクセスの最初にメインメモリからキャッシュラインにデータを持ってくる際のコストを $C_{first}[sec]$ 、データプリフェッチ時の立ち上がりコストは短く無視できるものとして、データ読み込み時のコストを $C_{stream}[sec]$ とすると、全体のコスト $C_{total}[sec]$ は

 $C_{total} = C_{first} + ([E/W] - 1) * C_{stream}$ となる. また,今回は解析対象のプログラムの 仕様上、E = Wとなっているため,

$C_{total} = C_{first}$

としてモデル評価を行った.

計算時間の上限と下限は、ステンシル計算に 必要な格子点に対するデータアクセス時に、どれ だけキャッシュミスをしているかで設定する. 下限 は、どの格子点もキャッシュミスをしないときであり、 読み込み 1 回書き込み1回の合計 2 回となるため、 コストは $2C_{total}$ となる.一方、上限は、計算対象の 格子点の左右の格子点の読み込み時にキャッシュミスするときで、読み込み 3 回、書き込み 1 回の 合計 4 回となるため、 $4C_{total}$ とした.

ベンチマークとして、先行研究で用いている Stream ベンチマーク[3]に変更を加えたものを用いた。図 1 に性能モデル評価に使用したベンチマークを示す。Stream ベンチマークからの変更点は、OpenMP によるループのスレッド並列化を行ったこと、および、アジョイント法の時間ステップ数(STEP_NUMBER)の分 Stream ベンチマークをループとして実行するようにしたことである。スレッドごとに固定の空間ブロッキングサイズを設定する実装のため、スレッド数を変化させることにより、空間ブロッキングの性能モデルとした。ベンチマークの計算時間を C_{first} として、上限と下限を算出した。

3 性能モデルの評価

```
!$omp parallel private(i)
do k=1, STEP_NUMBER, 1
!$omp do
do i=1, STREAM_ARRAY_SIZE, 1
A(i) = SCALAR*B(i) + C(i)
enddo
!$omp end do
enddo
!$omp end parallel
```

図 1. 性能モデルに使用したベンチマーク

性能モデルの評価をするために、名古屋大学 情報基盤センターに設置されている Fujitsu PRIMEHPC FX100 (以降, FX100) 及び Fujitsu PRIMERGY CX400 (以降, CX400) を用いた. また, 問題設定条件を表 1 に示す.

表 1. 問題設定条件

STEP_NUMBER	128
STREAM_ARRAY_SIZE	1600×1600
計測スレッド数(FX100)	1,2,4,8,16,
	20,25,32
計測スレッド数(CX400)	1,2,4,8,14,16,
	20,25,28

性能モデルの評価の結果として、FX100 と CX400 での計測結果を、それぞれ図 2、図 3 に示す. なお、アドジョイント法の計算のうち、Forward 計算部分のみ測定している. 図 2、図 3 では、測定した実際の forward 計算時間(実時間)が赤色のグラフで示されている. また、ベンチマークから算出した下限が青色のグラフ、上限が緑色のグラフで示されている.

図 2 から, FX100 においては, スレッド数が 8 を超えると実時間が下限を下回る. 計算時間 が最速となるスレッド数が, 実時間では 16 スレッドであるが, 性能モデルでは 4 スレッドであり異なる.

図3から、CX400においては、スレッド数が25、28の時に実時間が上限を上回る.計算時間が最速となるスレッドは、実時間でも性能モデルでも28スレッドであり、最速時間の予測の観点では性能モデルはよい精度を示している.

性能モデルの予測精度という観点で見ると, FX100 も CX400 でも実時間が下限と上限の範囲内から外れる点があり, 高精度な性能モデルとは言い難いが, 性能傾向を良く表せばよいという尺度もあり, 評価尺度の検討が必要である. なお, 性能モデルの定量的な誤差評価結果は, 当日に発表する.

まとめとして、性能パラメータを変化させた 時の性能傾向をつかむという観点で見ると、最 速となるスレッド数が28で一致したCX400で は、性能傾向がつかめていると言える.

4 おわりに

今回提案した性能モデルでは、FX100、CX400 どちらにおいても実時間が上限と下限の間に収まらなかった. 高精度な性能モデルの観点では、再検討が必要である. しかし、主にオートチューニングで用いられる最適パラメータの選択のための性能傾向をつかむという観点で見ると、CX400では最適なスレッド数が

選択できた. 今後の課題として, FX100 で最適なスレッド数が得られない原因の究明と, 性能モデルの改善を行う.

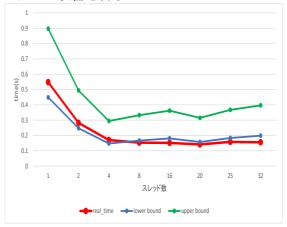


図 2.FX100 での計測結果

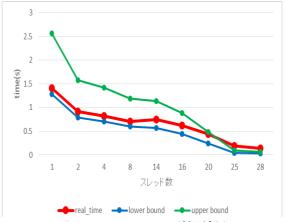


図 3.CX400 での計測結果

謝辞 本研究の一部は、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)による.

- [1] K. Datta, et.al., Stencil computation optimization and auto-tuning on state-of-the-art multicore architectures, Proc. of the 2008 ACM/IEEE conference on Supercomputing (2008)
- [2] 池田ほか, 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, 情報処理学会研究報 告, Vol.2016-HPC-157, No.17 (2016)
- [3] J. McCalpin. Memory bandwidth and machine balance in current high performance computers. IEEE TCAA Newsletter (1995)

OpenMPの対象ループとスレッド数を変更する自動チューニング手法の評価

櫻井 刀麻¹, 片桐 孝洋², 永井 亨², 荻野 正雄² ¹名古屋大学大学院 情報学研究科, ²名古屋大学 情報基盤センター

e-mail: sakurai@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 概要

近年の計算機はマルチコア化が進んでおり、メモリやキャッシュの構造の違いや GPU の有無など、アーキテクチャが多様化している.数値計算のソフトウェアが高い性能を発揮するにはソフトウェアのチューニングが重要となるが、計算機環境に合わせた最適化はハードウェアの専門知識も必要となり、手間と時間がかかる.さらに、ある計算機環境に特化したチューニングを行ったプログラムは他の環境では性能が低下する可能性があり、再びチューニングが必要となる.また、コンパイラ最適化はソフトウェア開発者にとって十分でないことが多い.

この一方 ppOpen-AT[1]は自動チューニング言語で、プログラムに自動チューニング機能を付けるディレクティブを提供する. 本報告はOpenMP の対象ループを変更するループ変換と、OpenMP のスレッド並列数をプログラム実行中に変更する実装の性能評価を行い、ppOpen-ATの機能として提案することを目的とする.

2 自動チューニング言語 pp0pen-AT

ppOpen-AT は、次世代の科学技術アプリケーションの開発・実行環境 ppOpen-HPC[2]の自動チューニング機構として開発された自動チューニング言語である.ppOpen-AT は、Fortran90とC言語のプログラムにディレクティブで最適化候補の生成を指示し、プリプロセッサを使用することで自動チューニング機能を付加したコードを出力する.最適化候補のコード生成機能としてループアンローリングや、ループ融合(collapse)、ループ分解(split)、および、演算順序変更機能を提供している.

3 OpenMP の並列対象ループの変更

3.1 提案手法

2 重以上の多重ループを OpenMP でスレッド 並列化する場合において、OpenMP のディレクティブの移動により並列化の対象ループを変更 するループ変換をppOpen-AT の新機能として提 案する.

3.2 実験

提案手法の評価を行うため、pp0pen-AT のループ変換と提案手法で同じループを変換し、それぞれの性能を比較する. 計算機環境として、名古屋大学情報基盤センターのスーパーコンピュータ Fujitsu PRIMERGY CX400/2550、東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS を使用した. それぞれ1ノードで使用可能なスレッド数のうち最速の結果を使用し、pp0pen-AT による変換と提案手法による変換がオリジナルのループに比べて何倍速くなったかを評価した. ここでは、FX100の結果を図1に示す.

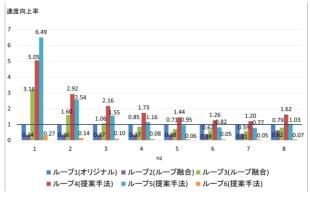


図1 変換による速度向上率 (FX100) 図1の結果では,提案手法によるループ4が, すべての行列サイズ nz においてオリジナルの 実行時間より速くなっている.

4 OpenMP のスレッド数の動的な変更

4.1 提案手法

ppOpen-AT による自動チューニングでは性能パラメタを設定し、計算機に合わせた最適なパラメタを選択する。ここではチューニング対象部分のOpenMPのスレッド数を性能パラメタとする方法を提案する。スレッド数の変更にはサブルーチンomp_set_num_threadsを使用した。

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

4.2 実験

チューニングの対象となる部分のスレッド 並列数を動的に変更し、性能向上に効果がある かを検証する.

使用するプログラムは有限差分法による地 震波シミュレーションコード Seism3D [3] を 原型とする ppOpen-APPL/FDM-AT ver. 1.0.0 で ある. 計算機環境は名古屋大学情報基盤センタ 一設置の FX100 の8 ノードを使用した.

ppOpen-APPL/FDM にはいくつか計算が集中するカーネルがあるが、今回は実行時間の約35%を占める計算を行う update_stress をチューニングの対象とする. 対象の計算を行う前後で、サブルーチン omp_set_num_threads を使用してスレッド数を変更し、計算後に再びスレッド数をもとに戻し、時間を計測する方法で行なった. このときスレッド数を変更しない従来法と実行時間を比較し、速度向上率のグラフを作成し、図2に示す. スレッド数はそれぞれのプロセス数で使用できる最大値とした. 提案手法では最大のスレッド数から使用可能なすべてのスレッド数に変えて実行したうちで最速の結果を使用した.

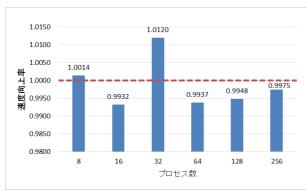


図2 スレッド数変更による全体の速度向上率本実験ではスレッド数変更により、変更しない従来法と比較して、8プロセスで約1.0014倍、32プロセスで約1.012倍の速度となった.しかし、それ以外のプロセス数ではスレッド数の変更により速度向上が得られず、速度が上がったプロセスでも上昇幅は僅かであった.

5 まとめ

本研究では複雑化する計算機環境に合わせた自動チューニングを行うため、従来のppOpen-AT に実装されていない自動チューニング機能を検討し、予備評価を行った.

OpenMP の並列対象を変えるループ変換手法

の予備評価では3つの計算機環境を用いて実験を行い、変換前のループや、ppOpen-AT の collapse により変換したループより高速となる場合があることを確認した.

OpenMP のスレッド数をプログラム中で変更するチューニングの予備評価では、プロセス数を変えて測定を行った中のいくつかの場合で、従来の固定スレッド数での実行より高速となった。今回はppOpen-APPL/FDM 中の多数あるカーネルのうち update_stress のみを対象カーネルとしてスレッド数を変更した。しかし、その他のカーネルごとに最適となるスレッド並列数があるはずである。そのため、提案手法が有効となる可能性がある。

謝辞 本研究の一部は、科学技術研究費補助金、基盤研究(B)、「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)による.

- [1] 片桐孝洋, "ppOpen-AT: ポストペタスケール時代の数値シミュレーション基盤ソフト," 数理解析研究所講究録 第 1791 巻(2012), pp. 107-111
- [2] K. Nakajima, M. Satoh, T. Furumura, H. Okuda, T. Iwashita, H. Sakaguchi, T. Katagiri, M. Matsumoto, S. Ohshima, H. Jitsumoto, T. Arakawa, F. Mori, T. Kitayama, A. Ida and M. Y. Matsuo, "ppOpen-HPC: 0pen Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications Post-Peta-Scale on Supercomputers with Automatic Tuning (AT), "Optimization in the Real World, Mathematics for Industry 13 (2016), K. Fujisawa et al. (eds.), Springer, pp. 15-35
- [3] F. Mori, M. Matsumoto, T. Furumura, Performance of FDM Simulation of Seismic Wave Propagation using the ppOpen-APPL / FDM Library on the Intel Xeon Phi Coprocessor, Springer LNCS (2014)

医用画像処理に用いられる大変形微分同相写像のMPI並列化とコード最適化

中島 大地¹,田村 友輝²,物部 峻太郎²,本谷 秀堅²,片桐 孝洋³,本谷 秀堅²,永井 亨³,荻野 正雄³
¹名古屋大学大学院 情報学研究科情報システム学専攻,²名古屋工業大学大学院 情報工学専攻,³名古屋大学 情報基盤センター

e-mail: nakajima@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 概要

医用画像処理では、3次元画像を扱う特性上データ容量と計算量が多くなるため、演算時間の短縮が必須である。本研究では、医用画像処理を行うプログラムであるNIXコードの並列化とコード最適化を行うことで実行時間の短縮を目指す。実行時間の大きな割合を占める、反復計算である大変形微分同相写像(Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping)に対する並列化とコード最適化を行った。並列化には MPI (Message Passing Interface)、OpenMPを用いた。コード最適化には、ループ融合手法を用いての性能向上を行った。NIXコードの並列化とコード最適化の効果を検証するため、名古屋大学設置の Fujitsu PRIMEHPC FX100 (以降 FX100)を用いて性能評価を行った。

2 NIXコード

NIX コードは名古屋工業大学,本谷研究室によって開発された C++言語で記述されたプログラムである. NIX コード[1]は大変形微分同相写像 (Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping) に基づいたアルゴリズムにより実施される. 微分同相写像は,準写像,逆写像も連続かつ滑らかな 1 対 1 の写像を意味しており,NIX コードでは LDDMM より,2 つの 3 次元の画像データを入力すると,画像データ内の指定領域を厳密に関連付けしたうえで,LDDMM 計算が実施される.

LDDMM 計算においては膨大な計算量を必要とするため、並列性を高めた効率的な計算実行が望ましい。そこで反復計算部分である、以下の4ステップにおいての並列性の向上を行い、また計算量的に最も多くの割合を占める、以下のステップ III の計算部分のコード最適化を行った。

- I. ヤコビアンの計算
- II. Backward Integration

- III. 速度の更新
- IV. oと位置情報の更新

3 並列化

NIX コードには、MPI と OpenMP による並列化を実装した、MPI による並列化として、以下の手順を新たに実装した.

- I. MPI の送受信をするためのメモリの確保
- II. MPI プロセスごとに、ループの長さを調整し計算を実施
- III. 計算したデータを送信バッファに格納
- IV. 送信するデータを、MPI_ALLGATHER を 用いて送受信
- V. 送信したデータを受信バッファに格納 し利用

以上の手順を行うことで、異なるプロセス間での通信を行い、並列化が可能となる. OpenMPによる並列化は for ループの並列化(parallel for 指示節の記載)を施した. 異なるスレッド間で、タスクを分散させることにより、並列化が可能となる.

4 最適化

ループ融合は、複数のループを1つにして、 ループ長を増やすコード最適化手法の1つで ある. ループ融合は3重ループを1重ループ化 することや、2重ループ化することで実装され る. 実装例を図1,2にまとめる.

ループ融合によりループ長が伸びることで 高スレッド実行時の負荷分散の均等化と、コン パイラによる最内ループのプリフェッチ処理 の増進といった、速度向上に資するメリットが 得られる.

図 1. コード最適化前

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

for(unsigned int kk=xyzhead; kk<=xyztail; kk++) {
 unsigned int i = kk / yz;
 unsigned int j = (kk / z) % y;
 unsigned int k = kk % z;
//演算処理}

図 2. コード最適化後

5 性能評価

ここでは、NIX コードにおいて、従来法(コード最適化なし)、提案法 1(2 重ループ融合)、および、提案法 2(3 重ループ融合)、の 3 つの実装方式を実装し、MPI プロセス 1-32 までの台数効果を調査することで性能評価を行った.

評価環境

性能評価にもちいた FX100 のスペックを表 1 に示す. なお, ノード形状は mesh とし, 利用 コア数は 32 とした.

表 1 FX100 のスペック

ハードウェア構成		
CPU		
プロセッサ	Fujitsu SPARC64 XIfx	
動作周波数	2.2GHz	
コア数/ノード	32(+2 アシスタントコ	
	ア)	
演算性能/ノード	1. 126 TFLOPS	
全体性能		
総ノード数	2880	
総理論演算	3. 2FLOPS	
ソフトウェア構成		
開発環境	富士通 Fortran, C/C++	
	, XPFortran コンパイラ	
MPI 通信ライブラリ	富士通MPI	

問題設定

本実験では問題サイズ (3 次元画像サイズ) XxYxZ を 100x100x100, 反復計算回数を 200 回 に固定し実験を行った.

結果

MPI プロセス数の増加による実行時間を図3に示す. 図3より,従来法,提案法1,2はMPI プロセス数1の時と比較して,台数効果により最大で1.355,1.657,1.437倍の高速化が示された.

また従来法と比較して,提案法1,2はMPIプロセス数1の時0.88倍の低速化と1.04倍の高

速化を示したが, MPI プロセス数 20 においては, それぞれ最大 1.15 倍 1.18 倍高速化されたこと が示された.

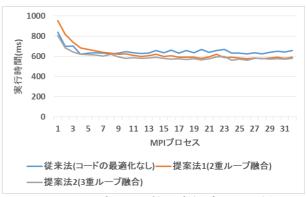


図3. MPI プロセス数と実行時間の関係

6 まとめ

性能評価により、MPIプロセス数の増加による台数効果および、最適化による影響を確認することができた。また最適化によるスケーラブルな高速化には、MPIプロセス数の増加が必要となることが確認された。最適化は、ループ長が長くなるため、MPIプロセスを増加させることにより、負荷分散の均等化され高速化されたと考えられるが、より詳しい評価が必要となる。

現状のNIX コードの実装では、MPI による通信時間の割合は、全体の実行時間に対して1割を占める. そのため、通信実装の最適化を施すことによる、さらなる実行時間の短縮が今後の課題となる.

謝辞

本研究の一部は、科学研究費補助金新学術領域研究(研究領域提案型)(課題番号:17H05290)、および、科学研究費補助金基盤研究(B)(課題番号:18H03262)による.

参考文献

[1] Takahiro Katagiri, Tomoya Ikeda,
Hidekata Hontani, Creation of
Large-scale and High-Performance
Technology for Processes of
Multidisciplinary Computational
Anatomy by Utilizing Supercomputers

日本応用数理学会 2018年 年会 講演予稿集(2018.9.3·5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

有限要素解析由来の疎行列に対する FPGA を用いた線形ソルバのハードウェア化

井原 遊1, 橋本 学1, 奥田 洋司1

1 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 人間環境学専攻

e-mail: ihara@multi.k.u-tokyo.ac.jp

1 背景

数値計算技術の発展により、コンピュータを活用した構造解析等の CAE の製品開発や研究における重要性は増しており、より精緻なモデルの解析を志向するようになっている.

線形ソルバは,有限要素解析を始めとした数値解析において,計算負荷の大半を占める処理である.その解法に注目すると,反復法は,直接法と比較して,解くべき方程式の自由度の増加に対して,計算リソース消費量の増加が緩やかで,並列効率が得やすいことから[1],特に大規模並列解析では多用される.

近年の CPU の演算性能の向上は、コア数の増加による影響が大きく、並列化が出来なければ十分にリソースを活用することが出来ない、反復法の場合は、1台に搭載可能なメモリ量も増え、メモリの制約なく、今までに以上に規模の大きな問題が解けるようになっているが、直接法の場合は、行列の自由度の増加による $o(n^3)$ の演算量の増加 [2] と、並列効率向上の困難さから、規模の大きな問題への適用は簡単ではない

近年の計算機性能は、メモリの帯域幅に比べて、CPU演算性能の向上が著しい. 共役勾配法を用いた線形ソルバでは、疎行列ベクトル積がホットスポットである。積和演算が1回であり、計算強度が低く、メモリ帯域幅によって律速される. ルーフラインモデル[3]によると、メモリが早くならない限り、性能向上は望めない。

近年では、回路の集積度の向上により、FPGAで様々なアプリケーションに用いることができるようになりつつある。FPGAでは、任意に演算装置を配置することができ、メモリの転送速度に応じて、必要な分の演算機を、適切なバランスで設計できる。

本研究は,有限要素解析由来の疎行列に対して,有利となる計算機に必要な設計を提案する.

2 FPGA による演算

FPGAは、ルックアップテーブルとフリップフロップ回路から構成される論理セルを中心に

数万から数百万個集積した集積回路である.このルックアップテーブルに入出力の対応を保存すること,すなわちビットストリームを読みこむで,論理回路を表現することができる. AND, OR 等の論理回路が表現出来ると,論理回路の組み合わせで,加算器等を実装し,算術演算が可能となる.

3 FPGAによるベクトル積演算

Aを疎行列,xを入力ベクトル,yを出力ベクトルとし, $y = Ax\{A \in \mathbf{R}^{n \times n}, x \in \mathbf{R}^{n}, y \in \mathbf{R}^{n}\}$ を疎行列ベクトル積として,行列 A の非ゼロ要素数を nz とする.ここで、

A は,非構造格子から得られる疎行列を前提とし、1節点3自由度であることから、 3×3 ブロック列圧縮形式 (BCCS) で保持し,x,y は配列とする。以下のように1次元の配列でデータを保持する.

- 1) col(n): row の各列の先頭位置
- 2) row(nz): val に格納された成分の行番号
- 3) val(9nz): A の非ゼロ要素の値
- 4) x(3n): xベクトル
- 5) y(3n): yベクトル

配列 val は、1 節点 3 自由度であるため $3 \times 3 = 9$ 倍のデータ量となる。

保存容量の観点から外部 RAM を用いなくと も保存できるものはベクトルx,yや、col に限られる。参照及び書換の頻度の高いベクトルx,yを FPGA 内のブロック RAM に保存し、データ量が多く参照が一度の行列 A は、外部 RAM に保存する。

- 1) col(n): 外部 RAM
- 2) row(nz): 外部 RAM
- 3) val(9nz): 外部 RAM
- 4) x(3n): ブロック RAM
- 5) y(3n): ブロック RAM

ソフトウェアプログラミングと同様に,以下 の繰り返し処理を行うことになる.

- 1) n, nz の値を読み, col 配列を, n 回分ア ドレスを演算してアクセスする.
- 2) row について, その先頭のアドレスを col の値から演算し, 個数分取り出す.
- 3) val(9nz): row の $9(=3 \times 3)$ 倍分をアドレスを指定して読み出す.
- 4) $\mathbf{x}(3n)$: x をブロック RAM から取り出し、 val に掛け合わせながら、
- 5) y(3n): y をブロック RAM から読み出し, Ax の演算結果を足し合わせる.

積和の演算回路だけであり、その規模は大きくない.ボトルネックとなる部分は、外部メモリからの読込速度に律速されると予測される.

4 演算性能の見積もり

Arria 10 SoC 開発キット [4] では,DDR4-2400メモリを搭載可能である.従って,19.2GB/s $(2 \times 64 \text{bits} \times 1.2 \text{GHz})$ の帯域が得られる.

立方体を x,y,z 軸それぞれに 49, 49, 39 分割 し,六面体一次要素から構成される,100,000 節点,93,639 要素の有限要素解析から得られる疎行列を考えると,大半の節点は,隣接節点が 6 とし,col,row は 32 ビット,x,y,val を 64 ビットとすると,行列のデータ量は,n=100,000, $nz \simeq (6+1) \times n \simeq 700,000$ であることから,

- x,y: $3n \times 8$ (bytes) $\simeq 2.4$ (MB)
- col: $n \times 4(\text{bytes}) \simeq 0.4(\text{MB})$
- row: $nz \times 4(\text{bytes}) \simeq 2.8(\text{MB})$
- val: $9nz \times 8(bytes) \simeq 50(MB)$

となる. 疎行列 A を DDR4 メモリに乗せることができ,x,y は,ブロック RAM に足りる. 演算数は,val に対して,積和演算を,630 万回必要となる。理想的にはデータは 3 ミリ秒で転送されるため,各クロックで演算が出来るとすると,300MHz で動作させるには,7 個の積和回路を並べれば良い.論理セルが十分に余るため,さらに演算器を並べてることでクロックを下げることもできる.

5 まとめと今後の展望

本研究では、有限要素解析由来の疎行列について、FPGAを用いて専用演算機を検討した. 見積もりした演算性能は、シングルチャネル

のDDR4メモリの帯域が上限となるため、一般的なPCの半分の性能となる。現状のFPGAでは、メモリ帯域が狭く、CPUと比較して、FPGA

だけで現実的に十分なパフォーマンスを得ることは困難である.一般に、FPGAは多段パイプラインを組めることから、演算強度の高いほうが有用性を高めやすい.ただし、このような演算強度が低い問題に対しては、動作クロックを抑えることで、消費電力で有利となりうる.ックを調整して、対ピーク性能が100%に近い要のなるように、演算機を作ることができ、必要のおい電力を削減するという考え方である。一般にCPUを用いた疎行列ベクトル積演算では、対ピーク性能で1%以下になる。これはCPU時間のほとんどでデータを待っている状態が細切れに続くため、アイドル状態とは異なり、消費電力は削減が困難である。

今後の展望として、今回の設計では十分に論理セルが余るため、前処理や内積演算などの前後の処理をハードウェア化することや、ビット幅を任意に変えられる特徴を生かしてデータ圧縮することが考えられる。近く広帯域の HBMメモリ搭載の FPGA がリリースされることから、FPGA でも利用の場合でも性能向上が期待できる。実用性からは、メモリチャネルをピン数上限まで増やしたカスタム FPGA の作成や、その設計を元にした ASIC 化などをすることで、反復法線形ソルバに特化したハードウェアを開発することができると考えられる。また、メモリ容量の制約はあるものの、より演算強度の高い直接法への適用も考えることができる。

- [1] Yousef Saad. Iterative methods for sparse linear systems. Siam, 2003.
- [2] 渡部 善隆, 連立1次方程式の直接法とソフトウェア, http://ri2t.kyushu-u.ac.jp/~watanabe/RESERCH/MANUSCRIPT/KOHO/WSMP/main.pdf.
- [3] Williams, Samuel, Andrew Waterman, and David Patterson. Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures, Communications of the ACM, 52.4 (2009), 65–76.
- [4] Intel Arria 10 Device Overview, https://www.altera.com/en_US/ pdfs/literature/hb/arria-10/a10_ overview.pdf.

動弾性境界積分方程式法の almost O(N)法

佐藤 大祐1,安藤 亮輔1

1 東京大学大学院地球惑星科学専攻

e-mail: (著者順に) dice@eps.s.u-tokyo.ac.jp, ando@eps.s.u-tkyo.ac.jp

1 序論

動弾性の境界積分方程式法では、本来は積分方程式の計算量と積分核格納メモリ (以下併せてコスト)とが $\mathcal{O}(N^2M)$ で激増する。(N は境界要素数、M は時間ステップ数)。先行研究 [2] は、波動方程式のグリーン関数の平面波展開による高速多重極展開を用い、原理的にはこれらが $\mathcal{O}(N\log N)$ (almost $\mathcal{O}(N)$) に削減可能であることを示した。しかし、破壊問題での積分方程式でのように積分核が複雑となると、上記手法の適用は自明でない。積分核は数十行に及び、パルス的な時間依存性とはならない項も生じうる (例えば [3]) からである。

我々は、複雑な積分核に対しても適用可能な almost $\mathcal{O}(N)$ コストのアルゴリズム (高速領域 分割階層型行列法、FDP=H-matrix 法) を構築 した [4]。この手法は、階層型行列 (H-matrix) 法 [5] と高速領域分割 (FDP) 法 [1] とに基づく。 本研究で我々は、その手法概要を述べ、例題への適用で手法の有効性を示す。

2 動弾性破壊問題での境界積分方程式法

一様等方弾性体中の、動的境界値問題を考える。位置 \mathbf{x} , 時刻 t の変位 $u(\mathbf{x},t)$ は、以下の弾性方程式に従う。

$$\partial_t^2 u_i(\mathbf{x}, t) = \partial_b \sigma_{ab}(\mathbf{x}, t), \tag{1}$$

$$\sigma_{ab}(\mathbf{x}, t) = C_{abcd} \partial_c u_d(\mathbf{x}, t),$$
 (2)

ここで、 $\sigma_{ab}(\mathbf{x},t)$ は位置 \mathbf{x} 、時刻 t での応力テンソルの ab 要素で、 C_{abcd} は弾性係数テンソルの abcd 要素。弾性係数テンソルは、等方媒質中で $C_{abcd}=\lambda\delta_{ab}\delta_{cd}+\mu(\delta_{ac}\delta_{bd}+\delta_{ad}\delta_{bc})$ となる。ここで λ,μ はそれぞれラメの第一・第二係数、 δ_{ab} はクロネッカーのデルタ。破壊問題では、無限遠では放射条件が、断層面 (Γ) 上では以下の混合応力境界条件が課される。

$$T_a(\boldsymbol{\xi}, \tau) = f_a(\boldsymbol{\xi}, \tau)$$
 (断層破壊時) (3)

$$\Delta \dot{u}(\boldsymbol{\xi}, \tau) = 0 \quad (非破壞時), \tag{4}$$

ここで $T_a(\boldsymbol{\xi}, \tau)$ 、 $\Delta u(\boldsymbol{\xi}, \tau)$ はそれぞれ位置 $\boldsymbol{\xi}$, 時刻 τ での断層面上の牽力、食い違い変位の時

間偏微分 (すべり速度)。 f_a は、破壊面での応力値を決める適当な関数であり、断層の破壊・非破壊判定とともに、位置 ξ 、時刻 τ ごとに適当な応力条件に基づいて決まる。牽力は、応力と位置 ξ の断層法線ベクトル $n_b(\xi)$ に対し、 $T_a(\xi,\tau)=\sigma_{ab}(\xi,\tau)n_b(\xi)$ を満たす。

この問題の応力の非超特異積分方程式は、テンソルのコンポーネント依存性が省略される限りで以下のように記述される [3]。

$$T(\mathbf{x},t) = \int_{\Gamma} d\Sigma(\boldsymbol{\xi}) \int d\tau K(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t-\tau) \Delta \dot{u}(\boldsymbol{\xi},\tau),$$

ここで、*K* は対応する積分核。この積分方程式を、我々は応力評価に選点法を用い、すべり速度を区分一定補間し、以下のように離散化する。

$$T_{i,n} = \sum_{j,m} = K_{i,j,m} D_{j,n-m},$$
 (5)

ここで、 $T_{i,n}$ は要素 i の時間ステップ n での応力、 $D_{j,n-m}$ は要素 j の時間ステップ n-m でのすべり速度、 $K_{i,i,m}$ は対応する積分核。

3 FDP=H-matrix 法の概要

まず FDPM により、積分核で P,S 波の寄与を表す項が有限となる時間 (ドメイン F)、それに挟まれる時間 (ドメイン I)、S 波以降の時間 (ドメイン S) へと、畳み込みの時間積分領域が分割される。ドメイン I,S ではカーネルが時間 依存性を表す項と空間依存性を表す項の積に分解され、高速化・メモリ削減が行われる [1]。

その後各ドメインに対して H-matrix 法が適用され、カーネルのメモリ消費が削減される。またドメインFに沿ってカーネルは幾何減衰するため、ドメインFに沿って H-matrix 法が効率的に機能する。このドメインFに沿った H-matrix 法が FDP=H-matrix 法が almost $\mathcal{O}(N)$ を達成できる主要な理由である [1]。数値的な近似であるため、複雑な積分核にも適用できる。

この他に、ドメイン分割時刻に対する近似とドメイン I での時間方向の近似とを組み合わせており、FDP=H-matrix 法は高精度を保ったまま $almost \mathcal{O}(N)$ のコストを達成している [4]。

4 数值計算結果

数値計算結果比較の一例を図1に示す。面外問題の平面断層での断層滑りに対するシミュレーション結果を、オリジナルとFDP=H-matrix法とで比べている。このシミュレーションでは、均一な応力場の断層面上に準静的にシングルフォース力源を印加して自発的な破壊を開始させた。元の解では破壊が力源印加箇所から左右対称に破壊が進展している。元の解での時空間発展は、FDP=H-matricesを適用した際にも保持されている。その誤差は、シミュレーションの各時刻で一様に、0.3パーセント程度に抑えられた。

また、計算結果でのコストのスケーリング例を示したのが、図2である。総メモリ消費量と時間ステップあたりの平均計算時間とを、境界要素数の関数としてプロットした。これらは元々は $O(N^2M)$ であったが、FDP=H-matrix 法では $O(N\log N)$ (より正確には $O(N\log (N/N_*)),N_*$ は定数)へと削減されている。

5 結論

我々は、クラック問題に [4] で提案された動弾性境界積分方程式法の $almost \mathcal{O}(N)$ コストのアルゴリズムを適用する流れを説明した。二次元面外問題へのアルゴリズム適用により、精度とコストの両面で有効性が示された。

- [1] Ryosuke A., Fast domain partitioning method for dynamic boundary integral equations applicable to non-planar faults dipping in 3-d elastic half-space, Geophysical Supplements to the Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 207 (2016), 833–847.
- [2] Ergin A. A., Shanker B., Michielssen E., The plane-wave time-domain algorithm for the fast analysis of transient wave phenomena, IEEE Antennas and Propagation Magazine, 41 (1999), 39– 52
- [3] Tada T., Stress Green's functions for a constant slip rate on a triangular fault,

- Geophysical Journal International, 164 (2006), 653–669
- [4] Sato D., Ando R., in prepartion
- [5] Hackbusch W., A sparse matrix arithmetic based on-matrices. Part I: Introduction to-matrices, Computing, 62 (1999), 89–108

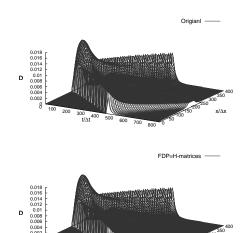


図 1. 解の比較の一例。すべり速度 D の空間 x、時間 t 依存性を示す。上パネルが元の解で、下パネルが FDP=H-matrix 法を用いた場合の解である。

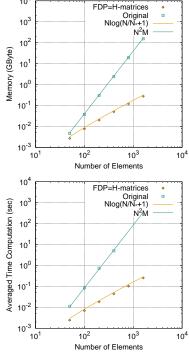


図 2. コスト比較の一例. 上下パネルはそれぞれメモリ消費および計算時間の要素数依存性を表す。

境界要素法における

重心要素を用いない Calderón の前処理に関する一考察

新納 和樹1,大塚 悠貴1,西村 直志1

1 京都大学情報学研究科

e-mail: niino@i.kyoto-u.ac.jp

1 序論

近年境界要素法の前処理として, Calderón の 前処理を始めとする積分作用素や微分作用素の 性質を利用した前処理の研究が盛んに行われて いる. これらの前処理では,一般に悪条件であ ることが知られている作用素に対して、滑らか さの異なる積分作用素や微分作用素を乗ずるこ とで. 作用素の積がコンパクト作用素を除いて 有界となるようにすることで前処理を行う. こ の前処理法で得られた作用素の満たす式から前 処理行列を構成するためには、 滑らかさの異な る二つの作用素をそれぞれ離散化し、得られた 二つの行列の積を計算する必要がある. 滑らか さの異なる作用素はそれぞれ異なる滑らかさの 基底(例えば区分一定要素と区分線形要素など) で離散化するのが自然である一方で, それらの 行列の積を計算する必要があるため、行列のサ イズは同じでなければならないという矛盾が存 在する. この問題への対処法として, メッシュ の重心分割を用ることで、滑らかさが異なるが 数が等しい2種類の基底を構成する方法が知ら れているが、メッシュの分割が必要であるため 計算量が増大する問題がある.

そこで本稿では Laplace 方程式に対する境界 要素法における前処理を例にとり, 部分積分を 用いることで上記の問題を解決する手法につい て論ずる.

定式化

方程式の Dirichlet 問題: $\Delta u = 0$ in Ω . u =q on Γ を考える. この問題に対応する境界積 分方程式は

$$S\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{1}{2}g + \mathcal{D}g \tag{1}$$

で与えられる. ここにnは Γ 上の外向き単位法 線ベクトル, $Sv = \int_{\Gamma} G(x-y)v(y)dS_y$, $\mathcal{D}v =$ $\int_{\Gamma} \frac{\partial G(x-y)}{\partial n_y} v(y) dS_y, G(x,y) = 1/(4\pi |x-y|) \operatorname{C}$ ある.

Calderón の前処理とその離散化

積分作用素 S は以下で与えられる Calderón の式を満たすことが知られている.

$$\mathcal{NS} = -\frac{1}{4}\mathcal{I} + \mathcal{D}^*\mathcal{D}^* \tag{2}$$

ここに、I は単位作用素,

$$\mathcal{N}v = \oint_{\Gamma} \frac{\partial^2 G(x-y)}{\partial n_x \partial n_y} v(y) dS_y$$
$$\mathcal{D}^*v = \int_{\Gamma} \frac{\partial G(x-y)}{\partial n_x} v(y) dS_y$$

である. \mathcal{D}^* はコンパクト作用素であるため, 式 (2) より NS は良条件であることがわかる.

NSが良条件であることより, (1) の代わりに

$$\mathcal{NS}q = \mathcal{N}(\frac{1}{2}g + \mathcal{D}g)$$

を解くことで前処理となることがわかる. 作用 素Nは超特異積分作用素である一方、Sは弱い 特異性を持つのみであるため、それぞれの作用 素を Galerkin 法で別々に離散化する場合,例 えばNを区分線形要素,Sを区分一定要素で 離散化するのが自然である. 一方, それらの行 列の積を考えなければならないため、離散化し て得られる行列のサイズは等しくなければなら ない. そこで本稿では以下に示す方法で作用素 NS の離散化を行う.

まず № の超特異積分の計算でよく使われる 滑らかな境界 Γ に囲まれた領域D内でのLaplace 方法を用いて、作用素Nに含まれる微分の一 つを作用素 S に移すことで $\mathcal{N}Sv = \widetilde{\mathcal{D}}^1\widetilde{\mathcal{D}}^2v$ と なる. ここに

$$\widetilde{\mathcal{D}}^{1}v = \int_{\Gamma} e_{ijk} n_{j}^{x} \frac{\partial}{\partial x_{k}} G(x, y) v_{i}(y) dS_{y}$$

$$\widetilde{\mathcal{D}}^{2}v = \int_{\Gamma} e_{ijk} n_{j}^{x} \frac{\partial}{\partial x_{k}} G(x, y) v(y) dS_{y}$$

である. また e_{ijk} は3階の交代記号であり,重 複する添字に対しては総和規約をとるものと

 $\widetilde{\mathcal{D}}^1$ はベクトル値関数からスカラー値関数への写像であり, $\widetilde{\mathcal{D}}^2$ はスカラー値関数からベクトル値関数への写像であることに注意すると,作用素 $\widetilde{\mathcal{D}}^1\widetilde{\mathcal{D}}^2$ を以下に示す行列に離散化することが自然であると考えられる.

$$T_0^{-1}\widetilde{D}^1T_r^{-1}\widetilde{D}^2$$

ここに行列 $\tilde{D}^1, \tilde{D}^2, T_0, T_r$ は, $t_i^{(0)}$ を区分一定基底, t_i^{RWG} を Rao-Wilton-Glisson 基底 [1] として

$$(\widetilde{D}^{1})_{ij} = \int_{\Gamma} n^{x} \times t_{i}^{\text{RWG}}(x)$$

$$\cdot \int_{\Gamma} n^{x} \times \nabla G(x, y) t_{j}^{(0)}(y) dS_{y} dS_{x}$$

$$(\widetilde{D}^{2})_{ij} = \int_{\Gamma} t_{i}^{(0)}(x) \int_{\Gamma} n^{x} \times \nabla G(x, y)$$

$$\cdot \left(n^{y} \times t_{j}^{\text{RWG}}(y) \right) dS_{y} dS_{x}$$

$$(T_{0})_{ij} = \int_{\Gamma} t_{i}^{(0)}(x) t_{j}^{(0)}(x) dS_{x}$$

$$(T_{r})_{ij} = \int_{\Gamma} t_{i}^{\text{RWG}}(x) \cdot t_{j}^{\text{RWG}}(x) dS_{x}$$

である.

4 数值計算結果

本研究では,以下の4種類の解法について数値計算を行った.

approach 1 式(1)を区分一定基底で離散化 し、前処理なしで解く解法

approach 2 式 (1) に Calderón の式に基づ く右前処理を行ない,区分線形基底で離 散化する解法 [2]

approach 3 3節の左前処理を行う解法 **approach 4** 3節の左前処理において,作用 素 \mathcal{N} を $\mathcal{N}+c\mathcal{I}$ に変え, \mathcal{N} の定数関数 に対する非自明性を取り除く解法 [2]

ただし approach 4 においては,h をメッシュの三角形の代表辺の長さとして, $c=\frac{0.1}{h}$ とした.反復法は全てリスタート無しの GMRES であり,許容誤差は 10^{-6} である.また各解法における T_0 , T_r といった Gram 行列の逆行列の計算には,実装を容易にするために直接法を用いた. Ω を半径 0.25 の球とし,Dirichlet 条件 $u=x_1^3-3x_1x_2^2$ を与える問題を様々なメッシュ(要素数 N_e)で解いた際の,それぞれの解法による解ベクトルの l_2 誤差を Fig. 1 に,GMRES の

反復回数を Fig. 2 にそれぞれ示す. 要素数が増加すると解の精度が良くなる一方で, Calderónの前処理を施した解法では反復回数が安定して削減できていることがわかる.

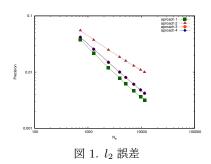


図 2. 反復回数

5 結論

本論文では、Laplace 方程式における Calderón の前処理の分割メッシュを用いない離散化法に ついて考察を行った。 Laplace 方程式においては approach 1 と提案手法である approach 3,4 の間に大きな違いは無いが、本稿で提案したアイデアは特に approach 1 のような前処理が不可能である Maxwell 方程式における Calderón の前処理において重要であることが期待される。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 (JP18K18063) の助成 を受けたものです.

- [1] S. Rao, D. Wilton, and A. Glisson. Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape. *IEEE Transactions* on Antennas and Propagation, Vol. 30, No. 3, pp. 409–418, 1982.
- [2] 大塚悠貴, 新納和樹. 3 次元 Laplace 方程式に対する境界要素法における分割メッシュを用いない Calderon の前処理について. 計算工学講演会論文集, Vol. 23, , 2018.

波動方程式の transmission 問題における時間域境界積分法の安定性について

三澤 亮太 1 , 福原 美桜 2 , 新納 和樹 2 , 西村 直志 2 京都大学工学研究科 2 京都大学情報学研究科 e-mail: nchml@i.kyoto-u.ac.jp

1 序論

境界積分法 (境界要素法) は波動問題の有力な数値計算法と考えられているが,波動方程式を時間域で扱った場合の安定性については未だに完全には解明されていない. 例えば,変分法に基づく定式化や, CQM に基づく方法,選点法を用いた特別な問題などで安定性の証明が得られる場合もあるが([1] における文献参照),実用性の高い時間基底関数を用いた選点法における安定性の理解は十分に進んでいない.

一方, 櫻井・杉浦法[2]の登場以来, 境界積分法の非線形固有値問題を解くことが容易になった. 本報告では, 2次元波動方程式の transmission問題における境界積分法の安定性を非線形固有値問題に帰着させて議論する.

2 定式化

 D_2 を \mathbb{R}^2 の有界領域, $D_1=\mathbb{R}^2\setminus \bar{D}_2$ とする.各領域 D_{ν} は弾性係数 s_{ν} ,密度 ρ_{ν} の物質で満たされているとする $(\nu=1,2)\cdot D_{\nu}$ で 2 次元波動方程式

$$\Delta u - \frac{1}{c_{\star}^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad \text{in } D_{\nu} \times \{t > 0\}$$

 $\Gamma = \partial D_2$ で境界条件

$$\begin{array}{ll} u^+ &= u^- & (=u) \\ s_1 \frac{\partial u^+}{\partial n} &= s_2 \frac{\partial u^-}{\partial n} & (=q) \end{array} \text{ on } \Gamma \times \{t > 0\}$$

各領域での適切な斉次初期条件および D_1 において散乱波 $u^{\mathrm{sca}}=u$ - u^{inc} に対する放射条件を満たす u を求める transmission 問題を考える.ここに $c_{\nu}=\sqrt{\frac{s_{\nu}}{\rho_{\nu}}}$ は波速,上付きの +(-) は $D_1(D_2)$ から Γ への極限値,n は D_1 方向を向いた Γ 上の単位法線ベクトルである.

上記の問題の積分方程式は種々知られているが、そのうち PMCHWT 定式化は次のように書かれる.

$$\begin{pmatrix} -(D^{1} + D^{2}) & \frac{1}{s_{1}}S^{1} + \frac{1}{s_{2}}S^{2} \\ -(s_{1}N^{1} + s_{2}N^{2}) & D^{T1} + D^{T2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ q \end{pmatrix} = b$$
(1)

ここに, $b=(u^{
m inc},\,s_1\frac{\partial u^{
m inc}}{\partial n})^T$ であり, $S^{
u},\,D^{T
u},\,D^{
u},\,N^{
u}$ は次の積分作用素である.

$$\begin{split} S^{\nu}q(x,t) &:= \int_0^t \int_{\Gamma} G^{\nu}(x-y,t-s)q(y,s) \ dS_y ds \\ D^{\nu}q(x,t) &:= \int_0^t \int_{\Gamma} \frac{\partial G^{\nu}}{\partial n_y}(x-y,t-s)q(y,s) \ dS_y ds \\ D^{T\nu}q(x,t) &:= \int_0^t \int_{\Gamma} \frac{\partial G^{\nu}}{\partial n_x}(x-y,t-s)q(y,s) \ dS_y ds \\ N^{\nu}q(x,t) &:= \int_0^t \int_{\Gamma} \frac{\partial^2 G^{\nu}}{\partial n_x \partial n_y}(x-y,t-s)q(y,s) \ dS_y ds \end{split}$$

また, G^{ν} は 2 次元波動方程式の基本解,q は u の法線微分である.

3 時間域の積分方程式とその安定性

空間方向に離散化した時間域境界積分方程式

$$f(t) = \int_0^t K(t-s)u(s) \ ds \tag{2}$$

について考える.ここに K は $N\times N$ の正方行列,u,f は N 次のベクトルである.(2) において未知関数 u(s) を時間内挿関数 $\phi_m(s)$ を用いて離散化すると,次の代数方程式を得る.

$$f(n\Delta t) = \sum_{m=1}^{n} \int_{0}^{n\Delta t} K(n\Delta t - s)\phi_m(s) \ ds \ u_m$$
(3)

$$\phi_m(s) = \phi_{\Delta t}(s - m\Delta t) \quad (\phi_{\Delta t}(k\Delta t) = \delta_{k0})$$

ここに Δt は時間増分,n は時間ステップ数, δ_{ij} は Kronecker の delta である.通常時間域の境界積分法では(3)の形の代数方程式を u_n $(n=1,2,\cdots)$ について逐次解くことになる.

K(t) の Fourier 変換を $\hat{K}(\Omega)$ と書くと,式 (3) の安定性は,次の非線形固有値問題の解から定まる.

$$0 = \sum_{m = -\infty}^{\infty} \frac{1}{\Delta t} \hat{K} \left(\Omega - \frac{2m\pi}{\Delta t}\right) \hat{\phi}_{\Delta t} \left(\Omega - \frac{2m\pi}{\Delta t}\right) u$$
(4)

すなわち,(3) を満たす非ゼロの u が存在するような $\Omega\in\mathbb{C}$ を求め, $\operatorname{Im}\ \Omega>0$ を満たす固有値があれば,(3) は不安定,全ての固有値が $\operatorname{Im}\ \Omega\leq0$ を満たせば(3) は安定である.

4 数値計算

式(4)の安定性解析を一般の離散化行列に適 用するのは不可能ではなくても煩雑である.そ こで $,\Gamma$ が単位円周のとき ,時間方向にだけ離散 化を行った半離散化を仮定すると, 例えば一重 層ポテンシャルのとき , \hat{K} として $J_n(k)H_n^{(1)}(k)$ $(0 \le n \le N)$ を考えればよい.ここに N は十 分大きい数であり , $J_n(k)$, $H_n^{(1)}(k)$ はそれぞれ Bessel 関数, Hankel 関数である.この様にし て単位円周上の各ポテンシャルから導かれる積 分方程式の安定性を検討したところ,次のそれ ぞれの形の積分方程式に時間方向に区分線形基 底を用いて離散化したものの数値的安定性が確 認された.(1)1 重層ポテンシャルの時間微分, (2) 1 重層ポテンシャルの法線微分の内外極限, (3) 2 重層ポテンシャルの内外極限, (4) 2 重層 ポテンシャルの法線微分の時間積分.そこで, これらのポテンシャルのみから構成される境界 積分方程式は数値的に安定との予想を立て,数 値計算を行った.

上記の4つのポテンシャルのみを用いて書き 換えた PMCHWT 定式化は次のようになる.

$$\begin{pmatrix} -(D^1 + D^2) & \frac{1}{s_1} \dot{S}^1 + \frac{1}{s_2} \dot{S}^2 \\ -(s_1 M^1 + s_2 M^2) & D^{T1} + D^{T2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{u} \\ q \end{pmatrix} = b'$$
(5)

ここに $b'=(\dot{u}^{
m inc},\,s_1 rac{\partial u^{
m inc}}{\partial n})^T$ であり , $M^
u$ は $N^
u$ の時間積分である .

本研究では,時間域の積分方程式(1),(5)の空間方向の離散化は区分一定要素,時間方向の離散化は区分線形要素で行い,選点法を用いた.境界 Γ は単位円とし,入射波は以下の x_1 軸正方向に進む平面波とした.

$$u^{\text{inc}} = \begin{cases} 0 & (c_1 t - x_1 - t_0 \le 0) \\ \frac{(c_1 t - x_1 - t_0)^2}{2} & (c_1 t - x_1 - t_0 > 0) \end{cases}$$

ここに, $t_0=1+2\Delta t$ である.また境界の分割数を 100,時間増分を $\Delta t=\frac{2\pi}{100}$ とし時間ステップ数 n=1000 まで計算した.

定数を $s_1=1$, $\rho_1=1$, $s_2=0.2$, $\rho_2=0.37$ とし,時間域の積分方程式を解いた.図 1,図 2 はそれぞれ通常の PMCHWT((1)),新しい PMCHWT((5))を解いた結果である.ここに横軸は境界の分割点,縦軸はqの値であり,図は時間ステップ 10 ステップごとの値を重ねてプロットしたものである.図から,従来の PMCHWT は不安定であるが,新しい定式化では安定化が

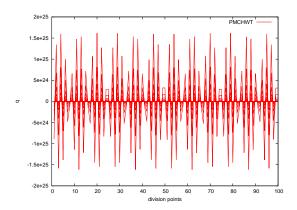


図 1. 境界積分方程式 (1) の解 q

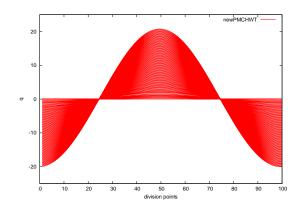


図 2. 境界積分方程式 (5) の解 q

実現していることがわかる.このことは固有値解析からも示すことができる.また,円以外の境界でも同様な安定化が実現できた.

5 結論

本研究では,2次元波動方程式の transmission 問題における時間域境界積分法の安定性について検討した.新しい定式化を用いると,従来不安定であった算法でも安定性が実現できることが数値計算により確認できた.今後の課題として,空間方向にも離散化した積分方程式の固有値を求める方法の検討が挙げられる.

謝辞 本研究は科学研究費 18H03251 の補助を 受けた.

- [1] F.J. Sayas, Retarded Potentials and Time Domain Boundary Integral Equations. Springer, 2010
- [2] J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, and K. Kimura. JSIAM Letters., Vol. 1, pp. 52–55, 2009.

蕁麻疹の謎を解いた一行の方程式

李 聖林 1,2, 秀 道広 3, 高萩 俊輔 3、柳瀬 雄輝 3

¹ 広島大学理学部 数学科, ²JST さきがけ, ³ 広島大学医学部 皮膚科

e-mail: seirin@hiroshima-u.ac.jp

1 概要

医学的に蕁麻疹は膨疹、すなわち紅斑を伴う 一過性、限局性の浮腫が病的に出没する疾患と して定義され、多くは痒みを伴う皮膚病の一つ である。蕁麻疹は、ありふれた疾患でありなが らその病態には未知の部分が多く、症状の現れ 方、および治療の内容も症例により大きな違い がある [1]。その仕組みにおいても未だに知ら れてない事が多く、皮膚マスト細胞が何らかの 機序により脱顆粒し、皮膚組織内に放出された ヒスタミンを始めとする化学伝達物質が皮膚微 小血管と神経に作用して血管拡張(紅斑)、血漿 成分の漏出(膨疹)、および痒みを生じると考え られている(図1)。しかし、その根本となる仕 組みについてはほとんど解っていない。特に、 医療の現場では、同じ仕組みに基づいてるはず の蕁麻疹が患者において様々な形として現れる 症例が多く観察されているが、その原因や仕組 みについては全く謎のままに残されている。

本講演では、極めて限られた臨床データと 患者の定性的な蕁麻疹データに基づいて数理モデルを構築し、数理モデルを通じて今まで医学 的に全く考えられなかった蕁麻疹発症の分子レベルでの仕組みを提案する。極めて複雑に見える蕁麻疹の様々な形が如何にシンプルな数理モデルで再現できるかを示し、皮膚医学における 数理モデルの新しい可能性について議論する。

2 数理モデル

蕁麻疹発症の仕組みを捉えるため、以下のような最も簡単なモデル(と言えよう)を構築 した。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u + f(u) - g(u) + \mu - \alpha_0 u.$$

ここで、 $u(\mathbf{x},t)$ は空間 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^2$ と時刻 t におけるヒスタミン濃度、 D_u は拡散係数、 μ はマスト細胞からのヒスタミンの基本放出率、 α_0 はヒスタミンの基本消滅率で、モデルのパラメーターはすべて正の定数である。 f(u) と g(u) は、

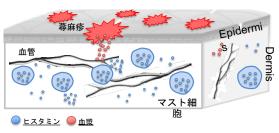


図 1. 蕁麻疹の発症の模式図

それぞれマスト細胞から制御されるヒスタミン のある二つの効果を表す関数である [2]。

3 結果と数値計算の結果例

本研究では、蕁麻疹の8つのパターン形成を一つのモデルから再現することに成功した。その例の一つを図2で示した。また、臨床データからヒスタミンの拡散係数を定量化し、蕁麻疹の広がるダイナミクスを定量的にみることにも成功した[2]。

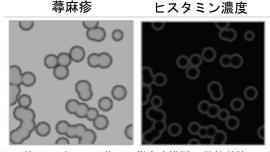


図 2. 数理モデルから導いた蕁麻疹模様の数値計算の一例

4 結論

本研究は、医学的に未解明であった蕁麻疹の 根本的な仕組みを、完全な発想転換に基づく数 理モデルの構築アプローチを通じて提示するこ とに成功した。本研究は、皮膚医学における数 学の新しい役割と可能性を提示しただけではな く、シンプルな反応拡散方程式が如何に多様な パターンダイナミクスを持つことが可能である かを改めて示せた研究でもある。今後のパター ン形成研究における新たな展開を期待する。 **謝辞** 本研究は、科研費若手 B (16K17643) と JST さきがけ(JPMJPR16E2)のサポートを 受けています。

- [1] 秀 道広 et al. 蕁麻疹診療ガイドライン, 日皮会誌:121(7), 1339–1388, 2011.
- [2] S. Seirin-Lee, Y. Yanase, S. Takahagi, M. Hide, Multifarious Eruptions of Urticaria Solved by A Simple Mathematical Equation Describing Activation-Inhibition Loop on Skin Mast Cells, in preprint.

MCC Polar Cytoskeleton's Self-organization Simulations using Active Hydrodynamics in a Hexagonal Cell with PCP boundary conditions

Franco-Medrano Fermin ^{1,2}, 鈴木貴 ¹, 小西聡史 ², 矢野智樹 ², 月田早智子 ² ¹ 大阪大学数理データ科学教育センター, ² 大阪大学大学院医学系研究科 e-mail: franco@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 Abstract

Multiciliated Cells' (MCCs) cytoskeleton, in particular microtubules, tend to align in a series of grids and stripes, passing through several stages. MCC's ciliar basal bodies (BBs) tend position themselves following the alignment of the cytoskeleton. Moreover, the BBs' tend to orient their basal feet (BF) towards the cytoskeleton bundles at an angle. In order to model the alignment and orientation of BBs we first model the alignment stages of the cytoskeleton. Real cells have a changing irregular shape, approximately hexagonal. So far, other existing simulations do not account for the cell shape, difficult to handle by the method of Finite Differences. The Finite Element Method is suitable to handle different shapes and fine emerging structures in the solutions. We propose a model for the cytoskeleton dynamics using Active Hydrodynamics Equations with a polarity field and solve it using the FreeFEM++ language for simulation. The simulations results show agreement on the timescales of the alignment process observed in experimental results.

2 Introduction

The cytoskeleton behaves like a polar active viscous fluid because of the polymerization/depolymerization and motor-induced dynamic remodeling of cytoskeletal filaments (microtubules). In [1] the authors proposed the following model for the cytoskeleton dynamics:

$$\vec{u} = \nu_1 \nabla^2 \vec{u} + \nu_2 \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) + \kappa_c \nabla \left(\frac{c}{1+c}\right),$$
 (1)

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \nabla^2 c - \nabla \cdot (c\vec{u}) + \kappa_p - c, \qquad (2)$$

where \vec{u} is the cytoskeleton velocity vector (2D), c the cytoskeleton concentration (scalar), ν_1 the shear viscosity coefficient, ν_2 the bulk viscosity coefficient, κ_c the contractile strength coefficient, κ_p the polymerization / depolymerization ratio, τ the dimensionless time and c_* the characteristic concentration. The meaning of the terms in the above equations is that $\nu_1 \nabla^2 \vec{u}$ is the shear viscosity, $\nu_2 \nabla (\nabla \cdot \vec{u})$ the bulk viscosity, $\kappa_c \nabla \left(\frac{c}{1+c}\right)$ the cytoskeleton contractile force, $-\vec{u}$ a friction term, $\nabla^2 c$ the concentration diffusion, $-\nabla \cdot (c\vec{u})$ the concentration convection and $\kappa_p - c$ the polimerization-depolimerization.

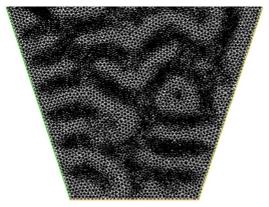
3 Polarized cytoskeleton model

In [2] the theory of an active gel is introduced to describe the polar behavior of the cytoskeleton. We adapt such an approach to the present case obtaining the following equation:

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial \tau} = \left(\frac{c_* - c}{c_*} + \beta \|\vec{p}\|^2 - v^2(\nabla \cdot \vec{p})\right) \vec{p}
+ K\nabla^2 \vec{p} - \frac{v}{2} \nabla \left(v \|\vec{p}\|^2 - \frac{c}{\kappa_p}\right), \quad (3)$$

where \vec{p} is the cytoskeleton polarity vector (2D), β is a stability coefficient, v is the polarity field velocity and K the Frank constant (splay). The meaning of the terms in the RHS of Eq. (3) is that the first term is the order parameter of polarized states for non-equilibrium flows, the second term is a viscouslike term and the third term is a pressure-like term. Equation (3) is added to the previously described system formed by Eqs. (1) and (2) to form the complete system describing the concentration, velocity and polarity of the cytoskeleton. In order to solve this system, we

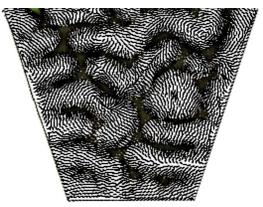
derive from them the weak form equations and rewrite them in the FreeFEM++ language for simulating with finite elements. For the simulations, both the space (see Fig. 1) and time discretizations were made adaptive to $c|\vec{u}|$ and the Courant number, respectively.



 \boxtimes 1. Adaptive mesh for frame 443 ($\tau = 44.3$). Lower half only for space reasons.

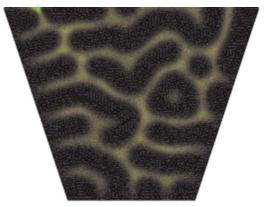
4 Results and discussion

The simulations were performed on a closed Hexagonal domain with a 1:2 width to height ratio. An early period ($\tau < 10$) was considered with no boundary condition for the concentration as well as a late period ($\tau \geq 10$) with an upper boundary value of $c(\tau = 10) = \kappa_p$ and asymptotically increasing to $10\kappa_p$ and a lower boundary value of $c(\tau = 10) = \kappa_p$ asymptotically decreasing to $\kappa_p/1.25$. A no slip condition $\vec{u} = 0$ at all boundaries at all times was imposed. The parameters used were ν_1 0.01, $\nu_2 = 0.03$, $\kappa_p = 3.5$, $\kappa_c = 13.5$, $\beta = K =$ 1×10^{-6} , $v = 1 \times 10^{-3}$ and $c_* = \kappa_p$. The optimum Courant number for the time adaptation was set to 0.1 as a target for adapting the time step. A number of mesh triangles of about 17k for the early stage and 40k for the late stage was set. The linear symmetric velocity equation was solved with the Conjugate Gradient method and the nonlinear asymmetric concentration equation as well as the polarity equation were solved using the sparse solver UMFPACK. The microtubules concentration observed in the final stage of the analyzed simulation (Fig. 3) corresponds approximately to a partial alignment stage. More computing power and parameter calibration is needed to



 \boxtimes 2. Simulation snapshot frame 443 ($\tau=44.3$) of the cytoskeleton polarized by regions. Lower half only for space reasons.

achieve full alignment. The cytoskeleton polarity (Fig. 2) tends to orient itself parallel to the longest stripe structures but this varies by area since the alignment is only partial.



⊠ 3. Simulation snapshot frame 443 ($\tau = 44.3$) of the cytoskeleton concentration. Lower half only for space reasons.

謝辞 This research is partially supported by the CREST-JST Biodynamics project.

- [1] E. Herawati, D. Taniguchi, H. Kanoh, K. Tateishi, S. Ishihara, and S. Tsukita." Multiciliated Cell Basal Bodies Align in Stereotypical Patterns Coordinated by the Apical Cytoskeleton." J Cell Biol 214, no. 5 (2016): 57186.
- [2] M.C. Marchetti, J.F. Joanny, S. Ramaswamy, T.B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R.A. Simha. "Hydrodynamics of Soft Active Matter." Reviews of Modern Physics 85, no. 3 (2013): 114389.

Modeling Immunity

HyungJu Hwang

1. Chemotactic effect in immune system

We study how chemotaxis affects the immune system by proposing a minimal mathematical model described in Fig. 1, a reaction-diffusion-advection system, describing a cross-talk between antigens and immune cells via chemokines.

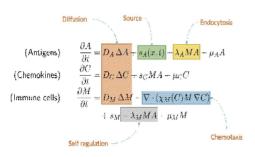


Fig. 1 A model for the immune system induced by chemotaxis

represents the concentration, C is the chemokine concentration and M is the immune cell density or activity. Fig. 2 shows a simplified network of interactions between antigens and immune cells chemokines. We explain about interaction in our presentation more in detail.

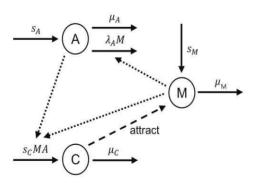


Fig. 2 Network of interactions between antigens and immune cells with chemokines

First, we discuss about the global-in-time

well-posedness in one and two dimensional Second, domains. we consider the instability and local bifurcations of our system with control parameter We will show some numerical results about local bifurcations in our presentation. From the analytical and numerical results for our model, we explain not only the effective attraction of immune cells toward the site of infection, but also hypersensitivity when chemotactic strength is greater than some threshold.

2. Th cell regulation

CD4 + T cells are immune cells that play a major role in the immune system. They are also called as T helper (Th) cells because they help the other immune cells' immune responses by releasing cytokines. Airway sensitization polyinosinic:polycytidylic acid (poly I:C) are known to induce T helper cell responses. With a low dose of poly I:C, Th1 responses are induced while a high dose I:C poly induces Th17-Th2-dominant responses. Fig.3 shows a diagram for relations between the model components and then we suggest an ODE model equation as Fig. 4.

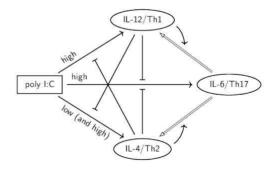


Fig. 3 A diagram for relations between the model components. Solid lines are foractivation (arrow tips) and inhibition (bar tips), and double lines are for conversion between Th cell types

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}H_1}{\mathrm{d}t} &= \frac{f_1(\alpha)}{1+k_1H_2^2} + b_1H_1H_{17} - \mu_1H_1 \\ \frac{\mathrm{d}H_{17}}{\mathrm{d}t} &= \frac{f_{17}(\alpha)}{1+k_3H_1^2+k_4H_2^2} - \frac{(b_1H_1+b_2H_2)H_{17}}{(b_1H_1+b_2H_2)H_{17}} - \mu_{17}H_{17} \\ \frac{\mathrm{d}H_2}{\mathrm{d}t} &= \frac{f_2(\alpha)}{1+k_2H_1^2} + b_2H_2H_{17} - \mu_2H_2, \end{split}$$

Fig. 4 The model equations for T helper cells.

Here H_i , i=1,17,2 are activities of Th1, Th17 and Th2 cells respectively, α is the value of poly I:C dose and the functions

$$f_i(\alpha) = p_i + \frac{v_i \alpha}{h_i + \alpha}, \quad i = 1, 17, 2,$$

with p_i representing the basal rate of production, v_i being the maximum rate of production by the activation of poly I:C, and h_i being the amount of poly I:C that produces half of the maximum. The analysis of the model shows the bistability of Th phenotypes when dose of poly I:C is high. The model also predicts switching behaviors between Th1 and Th2 phenotypes in the presence of stochasticity, which cannot be observed by the system of ordinary differential equations.

3. Cell immunity

To understand the effect of heterogeneity and spatial aspects of host cells on the viral infection, we develop an experimental model system and its corresponding mathematical model. A virus is a small pathogen that replicates only inside the living cells. An infected cell produces more viral protein and generic material instead of its usual products and new viruses are released from the cell. in this process, the host cell may be destroyed so that these cause some diseases. The life cycle of viruses is described in Fig. 5.

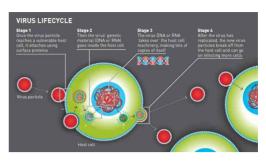


Fig. 5 Life cycle of viruese. 1. Attatchment, 2. Internalization to the cell, 3. Replication by using the machinery and metabolism of a host cell, 4. Release

(Source:http://www.bbc.co.uk/science/0/21143412)

We did an experiment. Two different types of cells, one is more resistant to infection, and the other is more sensitive to infection, arranged on square plate with four different pattern. After printing cells to the plate, we put the influenza A viruses to the plate. After certain period, remove whole medium and then measure the amount of intracellular virus RNA. Then we see that there are more viral loads on more heterogeneous (larger chessboard size) pattered plain. About this experimental result, although there is the previous ODE model, we suggest a new PDE model for represent this experiment to consider the spatial effect and improve the heterogeneity of cells. And we see that the numerical results with our PDE model almost agree with the exprimental result and we will show these results in presentation.

$$\text{(Type i normal cells)} \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} = \underbrace{s\left(1 - \frac{W}{K}\right)N_i}_{\text{growth}} - \underbrace{k_{NV}V_EN_i}_{\text{infection}} + \underbrace{k_{AI}AI_j}_{\text{recovery}} - \underbrace{\mu_NN_i}_{\text{death}}$$

$$\text{(Type i infected cells)} \quad \frac{\partial I_i}{\partial t} = \underbrace{k_{NV}V_EN_i}_{\text{infection}} - \underbrace{k_{AI}AI_i}_{\text{recovery}} - \underbrace{\lambda_i \frac{V_{I,i}}{L+I_i}I_i}_{\text{activation}} - \underbrace{\mu_IN_i}_{\text{death}}$$

$$\text{(Type i activated cells)} \quad \frac{\partial A_i}{\partial t} = \underbrace{\lambda_i \frac{V_{I,i}}{1+I_i}I_i}_{\text{activation}} - \underbrace{\mu_AA_i}_{\text{death}} - \underbrace{d_VA_iV_{I,i}}_{\text{degradation}} - \underbrace{k_CV_{I,i}}_{\text{release from I}}$$

$$- \underbrace{\left(k_{AI}A + \lambda_i \frac{V_i}{1+I_i} + \mu_I\right)V_{I,i}}_{\text{by the change of I}}$$

$$\text{(Intra. virus in A_i)} \quad \underbrace{\frac{\partial V_{A,i}}{\partial t}}_{\text{replication}} = \underbrace{\alpha_AA_i}_{\text{degradation}} - \underbrace{\frac{k_CV_{A,i}}{degradation}}_{\text{release from A}} + \underbrace{\lambda_i \frac{V_i}{1+I_i}V_{I,i} - \mu_AV_{A,i}}_{\text{by the change of A}}$$

$$\text{(Extracellular virus)} \quad \underbrace{\frac{\partial V_E}{\partial t}}_{\text{release from I}} = \underbrace{\frac{\partial \Delta V_E}{\partial t} - \frac{k_Vk_N V_EN}{t} + \underbrace{k_CV_I}_{\text{release from I}}}_{\text{release from I}} + \underbrace{k_CV_A}_{\text{release from I}}$$

Fig. 6 New PDE Model

Risk-sensitive asset management with lognormal interest rates

畑 宏明

静岡大学教育学部

e-mail: hata@shizuoka.ac.jp

1 先行研究と本研究の目的

リスク鋭感的ポートフォリオ最適化問題を 扱った研究はたくさんあるが、それらの中で特 に明示的に解析された先行研究として、次があ げられる。

- 線形 Gauss 型モデル [2, 4, 5, 6, 10]
- Cox-Ingersoll-Ross interest rate モデル [3, 7]
- Wishart 行列確率ファクターモデル [8]
- 飛躍型 Wishart 行列確率ファクターモデル [9]

本講演では、対数正規金利過程を用いたリスク 鋭感的ポートフォリオ最適化問題を扱う。この 問題は標準的なリスク鋭感的確率制御問題に 定式化される。動的計画アプローチを用いて、 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式を導出し、こ の方程式の明示解を得る。さらに、この明示解 を用いて、最適戦略を構成し最適値を得る。

2 概要

次の市場モデル $(S^0$ は銀行預金過程、S は 危険資産価格過程、Y はファクター過程) を考える。

$$dS_t^0 = S_t^0 r(Y_t) dt, \quad S_0^0 > 0,$$

$$dS_t = S_t \{ \mu(t, Y_t) dt + e dw(t) \}, \quad S_0 > 0,$$

$$dY_t = b(Y_t) dt + c(Y_t) dw_2(t), \quad Y_0 = y \in \mathbf{R}.$$

ここで、 $w(t) = (w_1(t), w_2(t))$ は 2 次元標準ブラウン運動である。今回、次の条件を仮定する。

- **(A1)** $\mu(t,y) := r(y) + \lambda(y)$.
- (A2) $r(y) := y, \ \lambda(y) := \lambda_0 + \lambda_1 y,$ $e := \left(\sqrt{1 - \rho^2}, \rho\right), b(y) := by \text{ and } c(y) := cy \text{ with } \rho \in [-1, 1], b, \lambda_0, \lambda_1, \in \mathbb{R}, c > 0,$ and $Y_0 = y > 0.$

 π_t を危険資産への投資比率 (投資戦略) とすると、投資家の資産価値過程 X_t^π は次を満たす。

$$\frac{dX_t^{\pi}}{X_t^{\pi}} = (1 - \pi_t) \frac{dS_t^0}{S_t^0} + \pi_t \frac{dS_t}{S_t}, \quad X_0^{\pi} = 1.$$

本講演では、次の有限時間範囲のリスク鋭感的ポートフォリオ最適化問題を扱う。

(RS)
$$\Gamma_T(\gamma) := \sup_{\pi \in \mathcal{A}_T} \frac{1}{\gamma} \log E\left[(X_T^{\pi})^{\gamma} \right]$$

ここで、 A_T は許容な投資戦略全体。本講演ではリスク回避的設定の場合を扱う。つまり、次を仮定する。

(A3) $\gamma \in (-\infty, 0)$.

基本的な解法の手順は次のようになる。

- 〈1〉動的計画原理を用いて、形式的に (以下で与えられている)HJB 方程式 (1) を導出する。(※ HJB 方程式 (1) の $\sup_{\pi \in \mathbb{R}^m}$ において、 \sup を達成する $\check{\pi}$ は最適投資戦略の候補になる。)
- 〈2〉HJB 方程式 (1) に最適戦略の候補 π を代 入した方程式 (2)(以下で与えている) の 解の存在を証明する。
- 〈3〉方程式(2)を用いて、Verification Theorem (最適戦略の候補 ň が本当に最適戦略 であることを保証する定理)を証明する。

動的計画原理から、(RS) に関連する HJB 方程式は次のようになる。

$$-\partial_t v = \frac{c(y)^2}{2} \left\{ \partial_{yy} v + \gamma \left(\partial_y v \right)^2 \right\}$$

$$+ \sup_{\pi \in \mathbb{R}} \left[\left\{ b(y) + \gamma \rho c(y) \pi \right\} \partial_y v + r(y) \right]$$

$$+ \lambda(y) p - \frac{1 - \gamma}{2} p^2 , \quad v(T, y) = 0,$$

$$(1)$$

つまり、次のようになる。

$$-\partial_t v = \frac{c(y)^2}{2} \partial_{yy} v + \{b(y) + \frac{\gamma \rho}{1 - \gamma} c(y) \lambda(y) \} \partial_y v + \frac{kc(y)^2}{2} (\partial_y v)^2$$
(2)
+ $r(y) + \frac{\lambda(y)^2}{2(1 - \gamma)}, \quad v(T, y) = 0.$

ただし、

$$k = k(\gamma) := \frac{\gamma(1 - \gamma + \gamma \rho^2)}{1 - \gamma} < 0,$$

今、次を定義する。

$$\begin{split} \alpha_1 &:= -\sqrt{-\frac{\gamma}{1-\gamma}} |\lambda_1| < 0, \\ \alpha_0 &:= -\frac{1}{\alpha_1} \left\{ \frac{b}{c} \left(\alpha_1 - \frac{\gamma \rho \lambda_1}{1-\gamma} \right) + k + \frac{\gamma}{1-\gamma} \lambda_0 \lambda_1 \right\}, \quad [3] \\ \widehat{\chi} &:= \frac{1}{k} \left\{ \frac{\alpha_0^2}{2} + \frac{\gamma}{2(1-\gamma)} \lambda_0^2 + \left(\frac{b}{c} - \frac{c}{2} \right) \left(\alpha_0 - \frac{\gamma \rho \lambda_0}{1-\gamma} \right) \right\}, \\ \widehat{\xi}(y) &:= \frac{1}{kc} \left\{ \left(\alpha_1 - \frac{\gamma \rho \lambda_1}{1-\gamma} \right) y + \left(\alpha_0 - \frac{\gamma \rho \lambda_0}{1-\gamma} \right) \log y \right\}, \\ G(t,y) &:= \frac{1}{k} \left\{ -\frac{\delta^2}{2} c^2 t - \frac{1}{c} \left(\alpha_0 - \frac{\gamma \rho \lambda_0}{1-\gamma} \right) \log y \right\} + \frac{1}{k} \log \int_{\mathbb{R}} dz \int_0^\infty du \exp \left[-\frac{1}{c} \left(\alpha_1 - \frac{\gamma \rho \lambda_1}{1-\gamma} \right) \right] \\ \cdot \frac{ye^z}{1 - \frac{\alpha_1}{c} yu} + \left\{ -\frac{1}{c} \left(\alpha_0 - \frac{\gamma \rho \lambda_0}{1-\gamma} \right) + \delta \right\} z \right] \\ \cdot \left(1 - \frac{\alpha_1}{c} yu \right)^{\frac{1}{c} \left(\alpha_0 - \frac{\gamma \rho \lambda_0}{1-\gamma} \right)} \eta_{c^2 t}(u, z), \\ \eta_t(u, z) &:= \frac{1}{2u} \exp \left(-\frac{2(1 + e^z)}{u} \right) \theta_{4e^{z/2}/u}(t/4), \\ \theta_r(t) &:= \frac{r}{\sqrt{2\pi^3 t}} e^{\frac{\pi^2}{2t}} \int_0^\infty e^{-\frac{\xi^2}{2t}} e^{-r \cosh \xi} \\ \cdot \sinh \xi \sin \left(\frac{\pi \xi}{t} \right) d\xi, \\ \delta &:= \frac{1}{c^2} \left(b + c\alpha_0 - \frac{c^2}{2} \right). \end{split}$$

このとき、次の結果が得られる。

定理 1 (A1) \sim (A3) を仮定する。このとき、次の結果が得られる。

1. (2) は正の明示解 $\hat{v}(t,y)$ をもつ。

$$\widehat{v}(t,y) = \widehat{\chi} \cdot (T-t) + \widehat{\xi}(y) + G(T-t,y).$$

2. (RS) の最適戦略

$$\widehat{\pi}_t = \frac{1}{1 - \gamma} \left\{ \lambda(y) + \gamma \rho c(y) \partial_y \widehat{v}(t, y) \right\}$$

で構成され、 $\Gamma_T(\gamma) = \hat{v}(0,y)$ が成り立つ。

参考文献

[1] H. Hata, Risk-sensitive asset management with lognormal interest rates, preprint (2018).

- [2] T.R. Bielecki, S. R. Pliska, Risk sensitive dynamic asset management, J. Appl. Math. Optim. 39, 337–360 (1999).
- [3] T.R. Bielecki, S.R. Pliska, S.J. Sheu, Risk-sensitive portfolio management with Cox-Ingersoll-Ross interest rates: the HJB equation, *SIAM J. Cont. and Optim.* **44**(5), 1811–1843 (2005).
- [4] W.H. Fleming, S.J. Sheu, Optimal long term growth rate of expected utility of wealth, *Ann. Appl. Probab.* **9**(3), 871–903 (1999).
- [5] W.H. Fleming, S.J. Sheu, Risk-sensitive control and an optimal investment model, Math. Finance 10, 197–213 (2000).
- [6] W.H. Fleming, S.J. Sheu, Risk-sensitive control and an optimal investment model. II, *Ann. Appl. Probab.* **12**(2), 730–767 (2002).
- [7] H. Hata, J. Sekine, Solving long term optimal investment problems with Cox-Ingersoll-Ross interest rates, Adv. Math. Econ., 8, 231–255 (2006).
- [8] H. Hata, J. Sekine, Risk-sensitive asset management with Wishart-autoregressive-type factor model, Journal of Mathematical Finance 3(1A), 222–229 (2013).
- [9] HATA, H. and SEKINE, J. (2017) Risk-sensitive Asset Management with Jump-Wishart-autoregressive-type Factor Model", Asia-Pacific Financial Markets 24(3) 221–252 (2017).
- [10] K. Kuroda, H. Nagai, Risk sensitive portfolio optimization on infinite time horizon, Stoch. Stoch. Rep. 73, 309–331 (2002).

Bitcoin におけるマイニング業者の収益に関するモデリング

安田 和弘¹ ¹ 法政大学

e-mail: k_yasuda@hosei.ac.jp

1 概要

2008 年に、Satoshi Nakamoto によって [1] の論文が公開され、Bitcoin のアイデアが世の 中に知られた. その後, 2009 年から Bitcoin の 運用が開始されている. Bitcoin の決済システ ムを支える技術として, ブロックチェーン技術 があり、その維持にはマイニングと呼ばれる作 業が必要である. 本講演では、そのマイニング を業とするマイニング業者の収益に関するモデ ル化を行い, 各モデルの特徴等を述べていく. モデルとしては、2種類考える、1つ目は、損 害保険数理を用いたアプローチで、特に損害保 険会社の収益を表すモデルとして知られている Lundberg モデルに帰着させ、性質等を考察す る.2つ目は、数理ファイナンスを用いたアプ ローチで, アジア型オプションで現れる平均株 価に帰着させ、Yor[2]の結果を用いて性質等を 考察する.

2 Bitcoin とブロックチェーン

2008年に、Satoshi Nakamoto によって [1] の 論文が公開され、Bitcoin のアイデアが世の中 に知られた. その後, 2009 年から Bitcoin の運 用が開始されている. それからおおよそ 10 年が 経ち, 仮想通貨 Bitcoin に対して賛否あるもの の, 少なからず注目され, 社会にもいくらか取 り入れられている. その Bitcoin の決済を支え る技術として, [1] ではブロックチェーンと呼ば れる分散型台帳技術を提案している. 金融機関 等における決済や取引履歴の管理は,通常,当 該金融機関が中央に位置し、金融機関がコスト をかけてすべてを管理している. しかしブロッ クチェーンでは,全く異なるアイデアが提案さ れている. ピア・トゥー・ピア型 (P2P) のネット ワークで、Bitcoin 取引の情報を共有している. そのため, データの改ざんや紛失に強いシス テムを可能にしている. そのブロックチェーン を支えるのに、マイニングが必要である.マイ ニングを行っている人や業者のことをマイナー と呼ぶ、マイナーは、現在の Bitcoin 取引履歴 を束ね、また過去のブロックと紐づけをした新

しいブロックの作成をし,成功したときに報酬 を得ている (Proof of Work, PoW). ブロック の作成に必要な作業は, コンピュータを用いた 膨大な単純作業で約10分に1ブロック作られ るように設計されている. ブロックの作成に成 功するかどうかは、競争となっているため、マ イナーは非常に多数のコンピュータを用いてマ イニングを行っている. したがって, マイナー にとってコンピュータを稼働させるための電気 代が大きなコストとなっている. また、報酬は Bitcoinで払われ、約4年ごとに半分になるよう に設計されている。2018年7月では、1ブロッ ク作成毎に12.5BTCが払われている. 仮に, 得 たBTCを即座に換金するとしたら,2018年7 月では1BTCが約75万円付近で取引されてい るため、約10分毎に競争に勝ったマイナーに 9,375,000円が払われていることになる. ここ では、後のモデリングに必要な情報に留めてあ るが、その他は昨今、多数出版されている書籍 や Web ページなどを参照されると良い. また, Bitcoin 関係のデータは、BLOCKCHAIN[3] か ら得られる.

3 最低の Bitcoin 価格を設定したモデル

本節では、考察する期間中の最低 Bitcoin 価格を設定したモデルを提案する.

- ▼イニングの初期費用を x₀円,
- 1単位時間辺りのコストをc円,
- 報酬額を aBTC,
- 最低 Bitcoin 価格を ℓ円,
- 最低 Bitcoin 価格を上回る収入を Y_i 円,
- 時刻tまでにマイニングに勝った回数を N_t 回

とする. ただし, x_0 , c, a, ℓ はすべて正の定数とし, $\{N_t\}$ は強度 $\lambda(>0)$ のポアソン過程, $\{Y_i\}$ は $\exp(1/\mu)$ ($\mu>0$) に従う独立確率変数列で N_t とも独立とする. このとき, 時刻 t におけるマイニング業者の損益は

$$X_t = -x_0 - ct + \sum_{i=1}^{N_t} a(\ell + Y_i)$$

とモデル化できる.この右辺の符号を反転させたモデルが,損害保険数理で研究されているサープラス過程の特に Lundberg モデルである.1903 年に Lundberg [4] で考えられ始めて以降,長く研究対象となっている.Asmussen et al. [5] では,Lundberg モデルに関する結果が多く紹介されており,本講演でも損害保険数理で得られている結果からマイニング業者の損益 X_t に関する性質を紹介する.特に,上記の設定では $\varepsilon(x_0,\ell) := \mathbb{P}_{x_0,\ell}(X_t \geq 0)$ となる確率が具体的に計算することが可能である.

次に、ここでのモデルにおける最大の難点である、時刻 t までのマイニングに勝った時刻において Bitcoin 価格が ℓ 円以上であることについて触れておく、ここでは Bitcoin の価格過程として数理ファイナンスでも用いられる Black-Scholes モデル

$$dS_t = mS_t dt + \sigma S_t dB_t, S_0 = s$$

を想定する。ただし,m は実数で Bitcoin 価格の期待成長率, σ は正の定数で Bitcoin 価格のボラティリティ, $\{B_t\}$ はブラウン運動,s は時刻 0 における Bitcoin 価格で ℓ 以上とする。また,マイニングにどのタイミングで勝てるか不明であるため,時刻 t まで S_t が常に ℓ 円以上である確率を考える。 S_t に Black-Scholes モデルを想定しているため, $\mathbb{P}(\inf_{0 \le u \le t} S_u \ge \ell)$ を具体的に求めることが可能である.

講演では,以上のことを用いて確率

$$\varepsilon(x_0, \ \ell) \times \mathbb{P}\left(\inf_{0 \le u \le t} S_u \ge \ell\right)$$

について理論,数値の両面から考察する.これは,時刻tにおけるマイニング業者の損益が正である確率の下限を与えるものである.

4 平均収入を用いたモデル

前節のモデルは、Bitcoin 価格が ℓ 円以上であるとし、各回の収入が独立同分布であることを仮定した. しかし、現実的には Bitcoin 価格は確率過程であり、これらの仮定を満たさない、その点を考慮したモデルを次に提案する. ここでは、次のことを仮定する.

- *a*(*t*)BTC を時刻 *t* の報酬額とする.
- 時刻 t までに勝つ回数 N_t は,平均回数 $[\lambda t]$ で近似する.ただし, $[\cdot]$ はガウス記号とする.

- 時刻 t まで $t/[\lambda t] \approx 1/\lambda =: \Delta$ 間隔でマイニングに勝つとする.
- $0 \le i < [\lambda t]$ に対して、 $a((i+1)\Delta)S_{(i+1)\Delta}\Delta$ $\approx \int_{i\Delta}^{(i+1)\Delta} a(u)S_u du$ と近似する.

以上のことを加味すると、マイニング業者の損 益を

$$X_t \approx -x_0 - ct + (\lambda t) \frac{1}{t} \int_0^t a(u) S_u du$$

と近似的に考えられる.これは,時刻 t までの 平均収益 $\frac{1}{t}\int_0^t a(u)S_u du$ に平均勝ち数 λt を掛け たかたちで収入部分を近似している.報酬額を 表す関数 a(t) は,[1] で提案されている通りで あれば階段関数であるべきであるが,ここでは $a(t)=a_0e^{-a_1t}$ とする.ただし, a_0 , a_1 は正の 定数とする. $a_1=0.17$ 程度に選ぶと 4 年で報酬額が半減する.

上記のモデルを想定したとき, $\frac{1}{t}\int_0^t a(u)S_u du$ は数理ファイナンスにおけるアジア型オプションに現れる式の類似の式であり, S_t に Black-Scholes モデルを仮定したとき,ブラウン運動に対するスケール則を用いることで Yor[2] の結果に帰着させられ,分布がある程度解析的に得られる(Jeanblanc et al. [6] の Cor.6.6.2.4).

講演では、上記のモデルに対しても理論、数値の両面から考察した結果を述べる.

- [1] S. Nakamoto, Bitcoin: A Peer-to-Peer Electronic Cash System, 2008, https: //bitcoin.org/bitcoin.pdf
- [2] M. Yor, On some exponential functionals of Brownian motion, Adv. Appl. Prob., Vol. 24, pp. 509–531, 1992.
- [3] BLOCKCHAIN, https://www.blockchain.com/
- [4] F. Lundberg, Approximerad framstallning av sannolikhetsfunktionen, Återförsäkring av kollektivrisker, Akad. Afhandling. Almqvist och Wiksell, Uppsala, 1903.
- [5] S. Asmussen and H. Albrecher, Ruin Probabilities (Second Edition), World Scientific, 2010.
- [6] M. Jeanblanc, M. Yor and M. Chesney, Mathematical Methods for Financial Markets, Springer, 2009.

連続制御と確率インパルス制御の混合制御問題に対する数値計算アルゴリズムの数値実験を通じた比較

内藤 瞭介1,安田 和弘2

¹ 法政大学大学院理工学研究科, ² 法政大学 e-mail: ryousuke.naito.6g@stu.hosei.ac.jp

1 概要

連続制御と確率インパルス制御という2つの 確率制御を混合した制御問題を考える.ファイ ナンスにおいて確率制御論は,デリバティブの ヘッジ問題やポートフォリオ最適化などに用い られる数学的手法で,数理ファイナンス分野に おいて重要な役割を果たしており,研究が活発 に行われている.

本研究では、上述の複数制御を持つ混合制御 に対する数値計算アルゴリズムを考察する.連 続制御は間接的に制御過程の方向性に寄与し, 確率インパルス制御は直接,制御過程に寄与す る. 確率インパルス制御では、行使する境界お よび行使幅を決める必要がある. これらの最適 制御は、連続制御に関しては HJB 方程式から、 確率インパルス制御は QVI から特徴づけられ る. 後者は、微分方程式の自由境界値問題と関 係する. 本講演では、この問題に対して2つの 数値計算アルゴリズムの比較を数値的に行う. 1つ目のアルゴリズムは, [1] で提案されている 確率インパルス制御だけの時に適用可能なアル ゴリズムを、混合制御問題に拡張した [2] で提 案されたアルゴリズムを用いる。2つ目のアル ゴリズムは[3]で述べられているアルゴリズム を用いる.

ファイナンスにおける混合制御の応用例としては、中央銀行による為替レートの制御などがある.インパルス制御は、直接為替レートに影響を与える為替介入を意味し、介入するタイミングと介入幅を決める必要があり、連続制御では、金利平価説に基づいた、金利を制御することで、間接的に為替レートに影響を与える.

2 問題設定

制御過程として次の確率過程を考える.介入 がない時.

$$dX_t = (\mu + \kappa \alpha_t)dt + \sigma dW_t,$$

介入がある時は.

$$X_{\tau_i} = X_{\tau_i -} + \xi_i.$$

とし、 $X_0=x$ とする。ただし、 μ 、 κ は実数、 σ は正の定数, W_t はブラウン運動とする。為替レートの制御としてとらえると, X_t は対数為替レート, τ_i は i 番目の介入時期, ξ_i は i 番目の介入幅, μ は期待成長率, σ はボラティリティ,x は初期対数為替レート, $\alpha(t)=\log(\frac{r_t}{r})$ とし, \bar{r} はターゲット金利, r_t は実際の金利, κ は金利による制御の度合いのパラメータである。

ここではコストとしてランニングコストと介入コストを考える. I を定義関数とする. 無限満期を考え、 λ を割引レートとし、コスト関数はそれらを累積したものの期待値

$$J(x; \alpha, T, \xi) = E \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} f(X_t, \alpha_t) dt + \sum_{n=1}^\infty e^{-\lambda \tau_n} G(\xi_n) I_{\{\tau_n < \infty\}} \right]$$

と定義する. ただし, ランニングコストは.

$$f(x,\alpha) = (x - \rho)^2 + c\alpha^2$$

とし, ρ は対数為替レートのターゲットレートを表し, c は正の定数とする. 介入コストは,

$$G(\xi) = \begin{cases} K + k\xi, & (\xi > 0 \text{ od } \xi) \\ \min(K, L) & (\xi = 0 \text{ od } \xi) \\ L - l\xi, & (\xi < 0 \text{ od } \xi) \end{cases}$$

とし, K,L は固定コストを表し, k,l は比例コストを表す.

この時, A(x) は admissible 戦略の集合とすると, 価値関数は次のように定義される.

$$V(x) = \inf_{(\alpha, T, \xi) \in \mathcal{A}(x)} J(x; \alpha, T, \xi).$$

3 HJBQVI

本講演で扱う混合制御問題の解の特徴付けとして、HJBQVIを考える。HJB方程式で連続制御を特徴付け、QVIで確率インパルス制御を特徴付ける。HJBQVIとは、

$$\min \left\{ \inf_{\alpha \in U} \{ \mathcal{L}^{\alpha} v(x) + f(x, \alpha) \}, Qv(x) - v(x) \right\}$$

= 0.

ただし, $\mathcal{L}^{\alpha}v(x)$, Qv(x) はそれぞれ,

$$\mathcal{L}^{\alpha}v(x) = \frac{1}{2}\sigma^{2}v''(x) + (\mu + \kappa\alpha)v'(x) - \lambda v(x),$$
$$Qv(x) = \inf_{\xi} \{v(x+\xi) + G(\xi)\}.$$

4 数値計算アルゴリズム

4.1 1つ目のアルゴリズム

1つ目のアルゴリズムは [2] で提案されたアルゴリズムである.このアルゴリズムは, [1] で提案された確率インパルス制御のみの場合に適用可能なアルゴリズムを拡張したものである.

d < D < U < u とし、d, u を介入境界、D, U は介入結果とする.このとき,Qv(d)-v(d)=0 かつ $\xi = D-d$ (同様に u, U も)より、

$$v(d) = v(D) + K + k (D - d), \forall x \le d \quad (1)$$

$$v(u) = v(U) + L + l (u - U), \forall x \ge u \qquad (2)$$

が成り立つ. また, $\mathcal{L}^{\alpha}v(x)+f(x,\alpha)=0$ より, $\alpha=-\frac{\kappa}{2c}v'(x)$ を得る. これを, $\mathcal{L}^{\alpha}v(x)+f(x,\alpha)=0$ に代入して得られる非線形微分方程式を $\bar{\mathcal{L}}v(x)=0$ とする. 得られる微分方程式が非線形となったため,[1] で提案されているアルゴリズムを直接適用することが出来ない. [2] では,非線形項を線形に近似し,[1] の方法を適用しやすい式に変形したアルゴリズムを提案している. 非線形項を線形に近似した微分方程式を $\tilde{\mathcal{L}}v(x)=0$ とする. $\tilde{\mathcal{L}}v(x)=0$ は,有限差分法を用いて数値解を得ることが可能となる.

- 1) 初期境界 $d_0 < D_0 < U_0 < u_0$ を設定し、 $\mathcal{L}^0 v(x) + f(x,0) = 0$ $(x \in (d_0,u_0))$, $(1)_{d_0}$, $(2)_{u_0}$ を解き $v_0(x)$ を得る.ここで、 式番号の右下の添え字はそれぞれ $d = d_0$, $u = u_0$ とした各式を用いるという意味である.n = 0 とする.
- 2) $v_n(x)$ の傾きが -k のところを d_{n+1} , l のところを u_{n+1} とし, $d_{n+1} < D_n < U_n < u_{n+1}$ に対して, $\tilde{\mathcal{L}}v(x) = 0$ $(x \in (d_{n+1}, u_{n+1}))$, $(1)_{d_{n+1}}$, $(2)_{u_{n+1}}$ を解き $\bar{v}_n(x)$ を得る.
- 3) 次のように D_{n+1} , U_{n+1} を得る.

$$D_{n+1} = \arg \min_{x \in (d_{n+1}, u_{n+1})} \left\{ \bar{v}_n(x) + kx \right\},$$

$$U_{n+1} = \arg \min_{x \in (d_{n+1}, u_{n+1})} \left\{ \bar{v}_n(x) - lx \right\}.$$

 $d_{n+1} < D_{n+1} < U_{n+1} < u_{n+1}$ に対して, $\tilde{\mathcal{L}}v(x) = 0 \ (x \in (d_{n+1}, u_{n+1})), \ (1)_{d_{n+1}},$ $(2)_{u_{n+1}}$ を解き $v_{n+1}(x)$ を得る。n = n+1とし,2) に戻る.

4.2 2つ目のアルゴリズム

2つ目のアルゴリズムは, [3] の Section 9.4 で紹介されている Howard アルゴリズムを用いる方法を用いる. ここでは介入境界, 介入幅,連続制御の3つの戦略を数値的に更新する.

[3]を参考に、アルゴリズムの概略を紹介する.

- 1) 初期関数 $v_0(x)$ を設定する. n=0 とする.
- 2) $v_n(x)$ に対して、次の方法で戦略を更新。

$$\alpha_{n+1}^{x} \in \operatorname{Arg} \min_{\alpha} \left\{ \mathcal{L}^{\alpha} v_{n}(x) + f(x, \alpha) \right\},$$

$$\xi_{n+1}^{x} \in \operatorname{Arg} \min_{\xi} \left\{ v_{n}(x+\xi) + G(\xi) \right\},$$

$$T_{n+1} = \left\{ x \in \mathbb{R}; \mathcal{L}^{\alpha_{n+1}^{x}} v_{n}(x) \right\}$$

$$> v_{n}(x+\xi_{n+1}^{x}) + G(\xi_{n+1}^{x}).$$

ここで、 T_{n+1} は行使領域を表す.

3) 2) で得られた戦略を用いて,

$$v_{n+1}(x) = \mathcal{O}_{T_{n+1},\alpha_{n+1},\xi_{n+1}} v_{n+1}(x)$$

の解 $v_{n+1}(x)$ を得る. n = n+1 として 2) に戻る. ただし,

$$\mathcal{O}_{T_{n+1},\alpha_{n+1}^x,\xi_{n+1}^x}v_{n+1}(x) = \begin{cases} \mathcal{L}^{\alpha_{n+1}^x}v_n(x) + f(x,\alpha_{n+1}^x) \\ x \in \mathbb{R}\backslash T_{n+1}, \\ v_n(x+\xi_{n+1}^x) + G(\xi_{n+1}^x) \\ x \in T_{n+1}. \end{cases}$$

講演では、これら2つのアルゴリズムの特徴や比較を行う.

- H. Feng and K. Muthraman, A Computational Method for Stochastic Impulse Control Problems, Math. Oper. Res., Vol.35, pp.830-850, (2010).
- [2] 内藤 瞭介, 安田 和弘, 連続制御と確率インパルス制御の混合制御問題に対する数値計算アルゴリズムの提案, 応用数理学会第14回研究部会連合発表会, 2018.
- [3] B. Øksendal and A. Sulem, Applied Stochastic Contorol of Jump Diffusions, Springer, 2000.

二項モデル下における Predictable Forward Performance Processes を用いた期待効用に関する数値的考察

著者 佐藤 大地1, 安田 和弘2

所属 1 法政大学大学院理工学研究科, 2 法政大学

e-mail: daichi.sato.6w@stu.hosei.ac.jp

1 概要

Angoshtari, Zarihopoulou and Zhou [1] で は,新しいフォワードパフォーマンス過程とし て可予測フォワードパフォーマンス過程 (Predictable forward performance processes, PFPP) を導入し,数理ファイナンスにおける多期間最 適投資戦略を与えている. 従来の動的計画法 (Dynamic programming, DP) の多期間最適投 資戦略では、時刻0の時点で満期までのすべて の市場の在り方を決め、その設定の下で最適戦 略を得ることとなる.しかし、現実的には満期 までに市場の状況は当初想定した在り方とは変 わってしまう. また, 投資家のリスク許容度も 当初から一貫したものを考えることになるが, 現実的には富の状況によりリスク許容度も変化 するものと考えられる. PFPP は、各時刻にお いて直近の1期間に対してある条件を満たす最 適投資戦略を得て, それを満期まで繰り返すこ とで投資戦略を考えていくため, 各時刻におけ る市場の状況や富の在り方を投資戦略に加味す ることが可能となる. 本講演では, 市場に二項 モデルを想定し,多期間期待効用最大化問題を 考え、PFPP と従来の DP の戦略等との比較を 数値実験を通して行う.

2 可予測フォワードパフォーマンス過程 を用いた最適投資戦略

本節では, [1] で与えられている可予測フォワードパフォーマンス過程 (PFPP) を用いた最適戦略について述べていく. 定式化や結果はすべて [1] で与えられたものである.

 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ を確率空間, $\{\mathcal{F}_t\}_{t\geq 0}$ をフィルトレーションとする。 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ を富過程とする。 $\mathcal{X}(t,x)$ を, $X_t=x$ で,任意の $s\geq t$ に対して X_s が \mathcal{F}_s -可測である許容可能な富過程 $\{X_u\}_{u\geq t}$ 全体の集合とする。

定義 1 1) 関数 $U: \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ が効用関数とは, $U \in C^2(\mathbb{R}^+)$ であり,U' > 0,U'' < 0 で,稲田条件 $\lim_{x \to 0^+} U'(x) = \infty$,

 $\lim_{x\to\infty} U'(x) = 0$ を満たすものとする. 効用関数全体の集合をUとする.

2) 任意の σ - 加法族 $\mathcal{G} \subseteq \mathcal{F}$ に対して,U: $\mathbb{R}^+ \times \Omega \to \mathbb{R}$ が \mathcal{G} -可測効用関数とは,任意の $x \in \mathbb{R}^+$ に対して $U(x,\cdot)$ が \mathcal{G} -可測で,a.s. ω に対して $U(\cdot,\omega)$ が効用関数であるときをいう. \mathcal{G} -可測効用関数全体の集合を $\mathcal{U}(\mathcal{G})$ とする.

2.1 可予測フォワードパフォーマンス過程

離散時間 $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots$ とし、 $X_n = X_{t_n}, \ \mathcal{F}_n = \mathcal{F}_{t_n} \ (n = 0, 1, \dots)$ とする.

定義 2 ([1] の Definition 1) 各時間の確率的な関数の集合 $\{U_0, U_1, U_2 \cdots\}$ が $\{\mathcal{F}_t\}$ に関して可予測フォワードパフォーマンス過程 (PFPP) であるとは次の 3 つの条件を満たすことである.

- 1) U_0 は確定的な効用関数で、 $n \ge 1$ に対して $U_n \in \mathcal{U}(\mathcal{F}_{n-1})$ を満たす.
- 2) 任意のx > 0と (許容可能な) 富過程 $X = \{X_n\}_{n=0}^{\infty} \in \mathcal{X}(0,x)$ が,

$$U_{n-1}\left(X_{n-1}\right) \ge E_{\mathbb{P}}\left[U_n\left(X_n\right)|\mathcal{F}_{n-1}\right]$$

を満たす.

3) 任意の初期資産x > 0 に対して,

$$U_{n-1}(X_{n-1}^*) = E_{\mathbb{P}}[U_n(X_n^*)|\mathcal{F}_{n-1}]$$

を満たす (許容可能な) 富過程 $X^* = \{X_n^*\}_{n=0}^{\infty} \in \mathcal{X}(0,x)$ が存在する.

注意 3 2), 3) を合わせると、PFPP を得るには期間 $[t_{n-1},t_n)$ において 1 期間逆投資問題

$$U_{n-1}(x) = \sup_{X_n \in \mathcal{X}(t_{n-1}, x)} E_{\mathbb{P}}[U_n(X_n) | \mathcal{F}_{n-1}]$$
(1)

を解くことが求められる.

2.2 1期間逆投資問題と最適戦略

ここでは二項モデルに対する 1 期間逆投資問題を,[1] に従って述べていく。[1] ではより一般の場合で定式化しているが,簡単のため二項モデルの上昇率や下落率などを定数とした場合で述べていく。また,安全資産の金利は 0 とし,以下では期間 $[t_0,t_1)$ を考える。

二項モデルの上昇率をu>1, 下落率を0< d<1, また上昇(下降)する確率を0< p<1, (1-p) とし,収益率をR とする.この時,リスク中立確率は $q=\frac{1-d}{u-d}, 1-q=\frac{u-1}{u-d}$ となる. $\rho^u=q/p$, $\rho^d=(1-q)/(1-p)$ とし,プライシングカーネールを

$$\rho_1 = \rho^u \mathbf{1}_{R=u} + \rho^d \mathbf{1}_{R=d}$$

とする. ただし、1は定義関数とする.

初期の富を $X_0 = x > 0$ とし、リスク資産への投資額を π とすると、時刻 t_1 での富は $X_1 = x + \pi(R-1)$ となる、ただし、

$$\underline{\pi}(x) := -\frac{x}{x-1} < 0, \ 0 < \frac{x}{1-d} =: \overline{\pi}(x)$$

として、非破産制約が $\underline{\pi}(x) < \pi < \overline{\pi}(x)$ と課す、このとき、許容可能なポートフォリオは

$$\mathcal{A}(x) = \{ \pi \in \mathbb{R} : \ \underline{\pi}(x) < \pi < \overline{\pi}(x), \ x > 0 \}$$

とする. このとき,(1)の1期間逆投資問題は,初期効用関数 U_0 が与えられたときの

$$U_0(x) = \sup_{\pi \in \mathcal{A}(x)} E_{\mathbb{P}} \left[U_1 \left(x + \pi \left(R - 1 \right) \right) \right] \quad (2)$$

を満たす効用関数 U_1 を探す問題に帰着する.

逆マージナル関数の集合を $\mathcal{I} = \{I \in C^1(\mathbb{R}^+): I' < 0, \lim_{y \to \infty} I(y) = 0, \lim_{y \to 0^+} I(y) = \infty\}$ とする. U と I は $I = (U')^{-1}$ を満たし,U は I が逆マージナル関数であるための必要十分条件である. $U_0, U_1 \in \mathcal{U}$ が (2) の関係を満たす時,逆マージナル I_0, I_1 は次の線形関係式で表されることが [1] の Theorem 3 で示されている.

$$I_1(ay) + bI_1(y) = (1+b)I_0(cy); \quad y > 0.$$
 (3)

ただし, $a = \frac{1-p}{p} \frac{q}{1-q}$, $b = \frac{1-q}{q}$, $c = \frac{1-p}{1-q}$.
[1] の Theorem 4 では,得られた I_1 から U_1 を求めると.

$$U_1(x) = U_0(c) + E_{\mathbb{P}} \left[\int_{I_1(\rho_1 U_0'(c))}^x I_1^{-1}(\xi) d\xi \right]$$

(x>0, c>0) と表される効用関数となり,(2) の関係を満たすことが示され,また,このときの最適な富 $X_1^*(x)$ と最適投資額 $\pi^*(x)$ は,

$$X_1^*(x) = X^{*,u}(x)\mathbf{1}_{R=u} + X^{*,d}(x)\mathbf{1}_{R=d},$$

$$\pi^*(x) = \frac{X^{*,u}(x) - X^{*,d}(x)}{u - d}$$

となる.ただし, $X^{*,u}(x)=I_1\left(\frac{q}{p}U_0'(x)\right)$, $X^{*,d}(x)=I_1\left(\frac{1-q}{1-p}U_0'(x)\right)$ とする.

[1] の Section 6 では、追加の条件を課すことで方程式 (3) を解く方法も例示されている.

3 数值実験

本講演では,以下のようなべき効用の場合の 数値実験を行った.

$$U_0(x) = \left(1 - \frac{1}{\theta}\right)^{-1} x^{1 - \frac{1}{\theta}}.$$

ただし, x > 0, $1 \neq \theta > 0$, $\theta \neq -\log_a b$, a, b, c > 0. この場合, 戦略等が明示的に与えられることが [1] の Corollary 9 で示されている. 方程式 (3) の解 I_1 は, $\delta = \frac{1+b}{c^{\theta}(a^{-\theta}+b)}$ とすると,

$$I_1(y) = \delta y^{-\theta}, \qquad y > 0$$

と求まり、式(2)を満たす次の時刻の効用関数 U_1 は、

$$U_1(x) = \delta^{\frac{1}{\theta}} U_0(x), \qquad x > 0$$

で得られる. またこのときの最適投資額は,

$$\pi^*(x) = \frac{\delta(p/q)^{\theta} - 1}{u - 1}x, \qquad x > 0,$$

となる.

これらの結果を用いた戦略や満期における期待効用と、例えば[2]に書かれている DPを用いた、二項モデルにおけるべき型の期待効用最大化問題に対する最適戦略や満期における富に対する期待効用の数値的な比較を講演では行う.

- [1] B. Angoshtari, T. Zarihopoulou and X.Y. Zhou, Predictable Forward Performance Processes: The Binominal Case, arXiv:1611.04494v3, May 22, 2018.
- [2] A. Pascucci, W.J. Runnggaldier, Financial Mathematics: Theory and Problems for Multi-period Models, Springer, 2012.

非双曲型平衡点を持つ力学系における Lyapunov 関数の 精度保証による構成について

寺坂 元1, 中村 正男1, 新田 光輝1, 山本 野人1

1 電気通信大学大学院情報理工学研究科

e-mail: t1731113@edu.cc.uec.ac.jp(寺坂 元)

1 概要

連続力学系の双曲型平衡点の近傍では二次形式による Lyapunov 関数が構成可能であり,精度保証に依る構成法もいくつか知られている.これに対し,非双曲型平衡点の近傍では,二次形式の Lyapunov 関数は原理的に構成することができない.本講演では,固有空間に基底を取り直し,そこから高次項を切り捨てた系を構成する.その系から Lyapunov 関数を構成,元の力学系への適用を試みる.

2 問題設定

ここでは以下の自励系を対象とする:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad 0 < t < \infty \qquad (1)$$

$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n.$$

また, f(u) は考えている領域で $C^r(r \ge 1)$ 級とし, 平衡点 u^* が存在するものとする.

3 Lyapunov 関数の定義と構成について

 $m{u}$ の解軌道を $\varphi(t,m{u})$ とする. $m{u}^*$ の近傍 $D_L \subset \mathbb{R}^n$ での Lyapunov 関数とは、次の条件を満たす C^1 級関数 $L:D_L \to \mathbb{R}$ を指す [1].

$$1.\boldsymbol{u} \in D_L \setminus \{\boldsymbol{u}^*\}$$
 について $\dot{L}(\varphi(t,\boldsymbol{u})) < 0$
 $2.L(\boldsymbol{u}^*) = 0, \dot{L}(\boldsymbol{u}^*) = 0$

双曲型平衡点ならば、拡張 Lyapunov 関数の候補を f のヤコビ行列 Df をもとに二次形式

$$L(\mathbf{u}) = (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*)^T Y (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*)$$
 (Y は対称行列)

で構成し、精度保証を用いて定義域を検証できる [2]. その一方で、非双曲型平衡点ならば同様の方法では Lyapunov 関数を構成できない、本研究の目的は非双曲型平衡点に対して局所的に Lyapunov 関数となる関数を構成することである.

4 非双曲型平衡点に対する考察

(1) について、平衡点 u^* が非双曲型であり、 u^* まわりの線形化行列が n_+ 個の正の固有値と n_- 個の負の固有値、 n_0 個の実部 0 の固有値を持つとする. このとき、 u^* を原点に座標変換し、固有空間に基底を取り直せば、(1) は次のように表せる [3].

$$\begin{cases} \dot{x} = Ax + g(x, y), \\ \dot{y} = By + h(x, y) + k(x, y). \end{cases}$$
(2)

 $m{x} \in \mathbb{R}^{n_++n_-}, m{y} \in \mathbb{R}^{n_0}, A \in \mathbb{R}^{(n_++n_-)\times(n_++n_-)}$ は実部 0 でない行列, $B \in \mathbb{R}^{(n_0)\times(n_0)}$ は全ての 固有値の実部が0 の行列, $\deg(m{g}) \geq l, \deg(m{h}) = m, \deg(m{k}) \geq m+1(l, m \geq 2)$ である。(2) において, $m{g}, m{k}$ を切り捨てた系を考える。

$$\begin{cases} \dot{x} = Ax, \\ \dot{y} = By + h(x, y). \end{cases}$$
 (3)

(3) を簡約系と呼ぶことにする. 簡約系について, 行列 A をもとに二次形式を構成し, さらに Lyapunov 関数となるよう x,y についての項を加える. これが元の系 (1) でも Lyapunov 関数となっていることを精度保証で確かめる.

5 数值例

以下の非双曲型の平衡点をもつ例題 [4] を対象とした.

$$\begin{cases} \dot{U} = V, \\ \dot{V} = \frac{1}{d} \left\{ P(U, C)V - Q(U, C)U \right\}, \\ \dot{C} = \frac{1}{\sigma}UC^2 \end{cases}$$
 (4)

$$P(U,C) = \frac{2}{\sigma}UC^2 - \sigma$$
$$Q(U,C) = -\frac{2}{\sigma^2}U^2C^3 + 1 - U$$

 d, σ はパラメータであり、今回は $d=2, \sigma=3$ とする.

(4) には平衡点 $(1,0,0),(0,0,C^*)$ $(C^*$ は任意の実数) が存在する。ヤコビ行列の固有値については

$$(1,0,0): \lambda = 0, \frac{-\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 + 4d}}{2d}.$$
$$(0,0,C^*): \lambda = 0, \frac{-\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 - 4d}}{2d}.$$

となり、どちらも非双曲型である. これらの平 衡点に対して Lyapunov 関数の構成を試みた.

5.1 平衡点 (1,0,0) に対する構成

U-1=S として座標変換を行い、次の簡約系を考える。

$$\begin{cases}
\begin{pmatrix} \dot{S} \\ \dot{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1/d - \sigma/d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S \\ V \end{pmatrix} \\
\dot{C} = C^2/\sigma
\end{cases} (5)$$

既存の方法 [2] により二次形式を構成し、Lyapunov 関数の要件を満たすため単項式 -C を加える.

$$L_1(S, V, C) = (S V)Y_1 \begin{pmatrix} S \\ V \end{pmatrix} - C \qquad (6)$$

$$\begin{pmatrix} Y_1 = \begin{pmatrix} -0.7276 & -0.7276 \\ -0.7276 & 0.7276 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

(6) が元の系 (4) で (U, V, C) = ([0.875, 1.125], [-0.125, 0.125], [-0.125, 0.125]) の領域で Lyapunov 関数となることを確認できた.

検証方法については、Lの時間微分

$$\dot{L}_1 = (U - 1 \ V)(G^T Y_1 + Y_1 G) \left(\begin{array}{c} U - 1 \\ V \end{array} \right) - \frac{UC^2}{\sigma}$$

$$G = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ R & \frac{1}{d}P(U,C) \end{pmatrix},$$

$$R = \frac{1}{d}\{P_u(U,C)V - Q_u(U,C)U - Q(U,C)\}$$

が (1,0,0) 以外で負値となる領域を特定すればよい。そのためには,二次形式である第一項の負定値を区間演算による精度保証を用いて検証する。

5.2 平衡点 (0,0,C*) に対する構成

まず $C^* = 0$ の場合に焦点をあて、次の簡約系を考える.

$$\begin{cases}
\begin{pmatrix} \dot{U} \\ \dot{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1/d & -\sigma/d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} \\ \dot{C} = C^2 U/\sigma \end{cases} (7)$$

5.1 節と同様にして二次形式を構成し、さらに 多項式を加える. 導出については本講演にて報 告する.

$$L_2(U, V, C) = (U \ V)Y_2 \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} - \frac{1}{3\sigma}C^3U^5$$
(8)
$$\begin{pmatrix} Y_2 = \begin{pmatrix} 7.0000 & 9.0000 \\ 9.0000 & 13.0000 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

(8) 式が元の系 (4) で (U, V, C) = ([-0.125, 0.125], [-0.125, 0.125], [-0.125, 0.125]) の領域で Lyapunov 関数となることを確認できた.

検証方法については,

$$\dot{L}_2 = (U\ V)\left(G^T Y_2 + Y_2 G - H\right) \left(\begin{array}{c} U \\ V \end{array}\right) - \frac{1}{\sigma} C^4 U^6$$

$$\left(\begin{array}{cc} H = \frac{5C^3}{6\sigma} \left(\begin{array}{cc} 0 & U^3 \\ U^3 & 0 \end{array}\right) \end{array}\right)$$

について,5.1節と同様に二次形式である第一項の負定値性を精度保証を用いて示せればよい.

- [1] C. ロビンソン, 〔國府寛司, 柴山健伸, 岡宏枝 訳〕 "力学系 上・下", シュプリンガー・フェアラーク東京株式会社, 2001.
- [2] 樋脇知宏, "力学系の不動点近傍のための 精度保証法", 平成 28 年度電気通信大学 大学院情報理工学研究科博士論文, 2017.
- [3] 小川知之, "非線形現象と微分方程式 パターンダイナミクスの分岐解析", サイエンス社, 2010.
- [4] 熊菜摘,"数理生物学に現れる反応拡散 方程式の進行波解の存在について",平 成 29 年度電気通信大学情報理工学研究 科修士論文,2018.

精度保証付き数値計算による高次元力学系の安定・不安定多様体の捕捉に ついて

新田 光輝¹, 山本 野人¹

1 電気通信大学

e-mail: knitta@uec.ac.jp

1 はじめに

近年、精度保証付き数値計算を力学系分野に応用した研究が盛んに行われており、Lyapunov 関数の構成やホモクリニック軌道やヘテロクリニック軌道の存在証明などがその例である[1]。

そこで、本講演では、高次元の力学系の不安定多様体や安定多様体の精度保証による検証法を提案する。これは、Brouwerの一致点定理を基に、写像度[2]を利用した新しい精度保証法であり、高次元力学系のホモクリニック軌道やヘテロクリニック軌道の精度保証への応用が期待される。また、実際に R4 の連続力学系に対して本手法を適用し、数値実験を行う。

2 問題設定

次の自励系常微分方程式

$$\frac{d\textbf{x}}{dt} = \textbf{f}(\textbf{x}), \ \textbf{x}, \textbf{f} \in \mathbb{R}^n, \ t \in \mathbb{R}$$
 (1) により記述される連続力学系を考える。また、この系が

- 双曲型平衡点 x* を持つこと
- x^* における Jacobi 行列が実部負の固有値を ν 個、実部正の固有値を $n-\nu$ 個持つこと

を仮定する。特に 2 つ目の仮定は x^* の安定多様体の次元が ν 、不安定多様体の次元が $n-\nu$ であるということを意味している。

3 Lyapunov 関数

Lyapunov 関数とは平衡点 x^* の近傍で定義される次の条件

$$L(\boldsymbol{x}^*) = 0, \frac{dL}{dt}(\boldsymbol{x}^*) = 0$$
$$\frac{dL}{dt}(\boldsymbol{x}) < 0, \ \forall \boldsymbol{x} \in D_L \setminus \{\boldsymbol{x}^*\}$$

を満たす関数 L であり、平衡点周辺における解析において有効な道具であると言われている。本研究では x^* 周辺における二次形式により記述される Lyapunov 関数を精度保証により構成し [3]、これを利用している。

4 ホモクリニック軌道の存在検証のため の精度保証法の構成方針

2節の問題設定の下、式(1)で表される連続 力学系のホモクリニック軌道の精度保証法の構 成方針について記述する。

- 1) 考えている系に $n-\nu$ 個のパラメータを導入し、パラメータ領域 $D_p \subset \mathbb{R}^{n-\nu}$ を設定する。また、パラメータに依らないn次元空間中の ν 次元領域 γ を設定する。なお、平衡点x* はパラメータに依存しないものとする。 γ の定め方は講演時に述べる。
- 2) 平衡点 x^* 近傍に精度保証により Lyapunov 関数を構成し、これを用いて γ 上の不安 定多様体の点 $x_0 \in \gamma$ の同定を行う。
- 3) x_0 を初期点とし、Lyapunov 関数の 0 レベルセットである $L^{-1}(0)$ に至るまでの軌道 $\varphi(T(x_0),x_0)$ を精度保証を用いて計算し、連続写像

 $H:D_p\ni p\mapsto \varphi(T(\boldsymbol{x}_0),\boldsymbol{x}_0)\in L^{-1}(0)$ を構成する。。

4) パラメータを変化させると $\varphi(T(x_0), x_0(p))$ が変化する。 $H(p) = x^*$ を満たすある $p \in D_p$ が存在することを Brouwer の一 致点定理により示す。そのためには写像 度の計算が必要になるが、これについても講演時に述べる。

以上が検証できれば、不安定多様体上の点から 出発し、平衡点に至る軌道、すなわちホモクリ ニック軌道を持つようなパラメータの存在範囲 の同定を行うことができることになる。

本講演では上記手順の1,2を行う精度保証法 を提案する。

5 不安定多様体の捕捉手順

以下では不安定多様体の捕捉を行う精度保証 法について記述する。なお、ここで言う捕捉と は γ における不安定多様体の通過範囲を同定す ることを意味する。 B_0, B_1 を ν 次元単位球、 S_0, S_1 をその境界とし、以下の手順を実行する。

- 1) 通常の浮動小数点演算により近似ホモクリニック軌道を計算し、近似ホモクリニック軌道上の点のうち、 γ に属する点を \tilde{x} とする。その時のパラメータを $\tilde{p} \in D_p$ とする。
- 2) γ 上に中心 \tilde{x} 、半径 r の ν 次元球 $B(\tilde{x},r)$ を考え、 $\Phi_0: B_0 \to B(\tilde{x},r)$ を考える。こ のとき、 Φ_0 は同相写像となる。
- 3) $B(\tilde{x},r)$ の境界 ∂B を適当な区間

 $[\partial B_1], [\partial B_2], \dots, [\partial B_k]$

に分割し、各区間毎に常微分方程式を時間逆向きに $L^{-1}(0)$ まで計算する。軌道計算による $B(\tilde{x},r)$ と $L^{-1}(0)$ の対応を

$$F_1: B(\tilde{\boldsymbol{x}},r) \to L^{-1}(0)$$

とすると、 F_1 は初期点に関して連続写像となる。

4) ある超平面 $\Gamma_A \subset \mathbb{R}^{\nu}$ を考え、射影

$$P_A:\mathbb{R}^n\to\Gamma_A$$

を考える。ただし、

$$P_A \boldsymbol{x} = P_A \boldsymbol{x}^* \Rightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^*$$

を満たすように Γ_A , P_A を定める。 Γ_A , P_A の具体的な構成法は講演時に述べる。

5) 平衡点の Γ_A への射影を

$$\boldsymbol{y}^* := P_A \boldsymbol{x}^* \in \Gamma_A$$

とし、中心 $m{y}^*$ 、半径 ϵ の u 次元球 $B(m{y}^*,\epsilon)\subset\Gamma_A$ を考え、連続写像

 $F_2: \Gamma_A \ni P_A F_1(\boldsymbol{x}) \mapsto \boldsymbol{y} \in B(\boldsymbol{y}^*, \epsilon)$ を定義する。ただし、 F_2 は retraction となるように定める。 F_2 の具体的な構成法は講演時に述べる。

- 6) $\Phi_1: B(\boldsymbol{y}^*, \epsilon) \to B_1$ を、 \boldsymbol{y}^* を B_1 の中心 に移す同相写像とする。
- 7) 連続写像 F を $\Phi_0, F_1, P_{\Gamma_A}, F_2, \Phi_1$ の合成 として

 $F=\Phi_1\circ F_2\circ P_{\Gamma_A}\circ F_1\circ \Phi_0$ により定義する。その定義域を S_0 に制限した写像を F_S とすると、 F_S は $S^{\nu-1}$ 上の連続写像である。

8) 連続写像 F_S に対して、 $F_S(S_0) \subset S_1$ かつ $\deg F_S \neq 0$ が満たされることを精度保証により検証する [4]。

以上が確認できれば Brouwer の一致点定理により、F は平衡点 x^* の P_A による射影を像と

する写像 G と一致点を持つ。このことから

$$F_2 \circ P_A \circ F_1(\boldsymbol{x}) = P_A \boldsymbol{x}^*$$

となる $x_0 \in B(\tilde{x}, \epsilon)$ が存在する。さらに F_2 が retraction であることから

$$P_A \circ F_1(\boldsymbol{x}_0) = P_A \boldsymbol{x}^*$$

が言え、 P_A の定め方より

$$F_1(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{x}^*$$

で、 F_1 は解軌道に沿った写像であるから x_0 は不安定多様体上の点となる。また不安定多様体の通過領域 X_0 は

$$X_0 = B(\tilde{\boldsymbol{x}}, r)$$

となる。また、上記の手順で構成した F はパラメータに関しても連続となることが示せる。 実際の計算では $D_p \subset [D_p]$ なる区間 $[D_p]$ を用いて計算することにより、 $\forall p \in D_p$ をパラメータとする系の不安定多様体の通過範囲を同定できる。

上記の手順を実際に ℝ⁴ の連続力学系に対して適用し、不安定多様体の捕捉を行った。その結果については講演時に述べる。

6 まとめと今後の課題

高次元力学系の不安定多様体の捕捉を行うための精度保証法を提案した。今後の課題として、

- 平衡点がパラメータに依存する場合に本 手法を拡張すること
- 高次元力学系におけるホモクリニック軌 道の存在検証を行うための精度保証法を 完成させる

などが挙げられる。

- [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", 修士論文, 電気通信大学, 2016.
- [2] 河田敬義,"位相数学",共立出版,1956.
- [3] Kaname Matsue, Tomohiro Hiwaki, Nobito Yamamoto. "On the construction of Lyapunov functions with computer assistance", Journal of Computational and Applied Mathematics, vol319, 2017, pp385-412
- [4] 新田光輝, 松江要, 小林健太, 山本野人, "精度保証付き数値計算による写像度の 計算手法の提案", 第46回数値解析シン ポジウム予稿集, 2017.

有限要素法による高次元半線形熱方程式の球対称解の数値解析

中西 徹1,齊藤 宣一2

¹ 東京大学大学院数理科学研究科博士課程 1 年,² 東京大学大学院数理科学研究科 e-mail: ¹nakanish@ms.u-tokyo.ac.jp, ²norikazu@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 講演概要

2 はじめに

非線形偏微分方程式では、空間の次元に関係した様々な臨界指数が研究されている。空間4次元以上の問題を数値計算することは現実的には難しいが、問題に球対称性を仮定すれば、数値計算でも任意の N を扱うことができ、解析的な研究の有力な手段となりうる。今回は、次の偏微分方程式を考える。

$$\begin{cases} U_t = \Delta U + f(U), & (t, \vec{x}) \in (0, T) \times \Omega \\ U = 0, & (t, \vec{x}) \in (0, T) \times \partial \Omega \\ U(0, \vec{x}) = U_0(\vec{x}), & \vec{x} \in \overline{\Omega}. \end{cases}$$

ここで、 $U:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ 、 $\Omega\subset\mathbb{R}^N(N\geq 2)$ は滑らかな領域とし、 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ は C^1 級の関数で、 $f(s)\geq 0$ $(s\geq 0)$ なるものとする.

U を極座標変換した関数をu とすると,方程式 (P) の球対称解が満たす方程式は,次のようになる.

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + \frac{N-1}{x} u_x + f(u), & (t, x) \in (0, T) \times I \\ u_x(t, 0) = u(t, 1) = 0, & t \in (0, T) \\ u(0, x) = \phi(x), & x \in \overline{I}. \end{cases}$$

ただし、 $x=|\vec{x}|$ 、 $\Omega=B(1)=\{\vec{x}\in\mathbb{R}^N; |\vec{x}|\leq 1\}$ 、I=(0,1)、 $u(t,x)=U(t,\vec{x})$ 、 $\phi(x)=U_0(\vec{x})$ 、 $x\in \overline{I}$ とする.

本研究では(S)の近似スキームを考える。特に、(S)に対する全離散有限要素スキームを提案し、

- 正値性の保存
- f が大域的に Lipschitz 連続の場合の収束 解析・誤差解析

• $f(s) = u|u|^{\alpha} (\alpha > 0)$ の場合の収束解析・ 誤差解析

などについての解析結果を報告する。線形非同次の場合(すなわち,f=f(t,x) が既知関数の場合)については,Eriksson-Thomée [1,2] で半離散(対称・非対称)有限要素スキームの収束解析が報告されている。本研究は,[1,2] の非線形問題への拡張と言える。非線形($f(u)=u|u|^{\alpha}$)であっても,差分法については,収束性が報告されている([3])。なお,(P) に対しては, $N\leq 3$ の場合に,有限要素スキームが研究されている([4])。

3 高次元半線形熱方程式の球対称解に対 する近似スキーム

I=(0,1) とおく。節点 $0=x_0< x_1<\cdots< x_j<\cdots< x_m=1$ を導入して, $I_j=(x_{j-1},x_j)$, $h_j=x_j-x_{j-1}$, $h=\max_{1\leq j\leq m}h_j$ とおく。そして,次の P1-有限要素空間を考える:

$$S_h(I) = \{ v \in H^1(I) \mid v \text{ は } I_j \bot$$
一次以下の
多項式 $(j = 1, \dots, m), \ v(1) = 0 \}$

次に,(S) に対する有限要素スキームを 2 つ提案する.(S) の両辺に x^{N-1} と $\chi \in \dot{H}^1 = \{v \in H^1(I) \mid v(1) = 0\}$ を掛けて,I 上で部分積分した式を考えることによって次のスキームが考えられる.

定義 3.1 (標準的対称有限要素スキーム)

Find $u_h^n (\approx u(t_n, \cdot)) \in S_h(I) (n \ge 0)$ s.t.

$$\begin{cases} \left(x^{N-1} \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\tau_n}, \chi \right) + A(u_h^{n+1}, \chi) \\ = (x^{N-1} f(u_h^n), \chi), \quad \forall \chi \in S_h(I), \\ u_h^0 = v_h. \end{cases}$$

対称形式 A を $A(u,v)=(x^{N-1}u',v')$ によって定める。また,各 τ_j は時間刻み幅で, $t_n=\sum_{j=0}^{n-1}\tau_j(< T)$ $(n \ge 1)$ と置いている (但し, $t_0=0$ とする)。

(S) の両辺に x と $\chi \in \dot{H}^1$ を掛けて,I 上で部分積分した式を考えることによって,次のスキームが考えられる.

定義 3.2 (標準的非対称有限要素スキーム)

Find $u_h^n (\approx u(t_n, \cdot)) \in S_h(I)$ s.t.

$$\begin{cases} \left(x\frac{u_h^{n+1}-u_h^n}{\tau_n},\chi\right) + B(u_h^{n+1},\chi) = (xf(u_h^n),\chi) \\ u_h^0 = v_h, \quad \forall \chi \in S_h(I) \end{cases}$$

ここで、非対称形式 B を B(u,v)=(xu',v')+(2-N)(u',v) によって定める。N=2 のときは、B は対称形式となる。

4 主結果

ここでは、標準的対称 (非対称) 有限要素スキーム (FEM) の正値性・収束解析・誤差解析について結果を述べる.

定理 4.1 (標準的対称 FEM の正値性)

標準的対称有限要素スキームにおいて、 $au_n \geq \frac{1}{4}h^2$ を仮定する.このとき、 $v_h \geq 0$ ならば、 $u_h^n \geq 0$ $(n \geq 1)$ が成り立つ. \square

定理 4.2 (標準的対称 FEM の収束性 I)

f が大域的 Lipschitz 連続のとき、(S) の解が $[0,T] \times [0,1]$ で十分に滑らかならば、次の誤差 評価が成り立つ:

$$\sup_{t_n \in [0,T]} \|x^{\frac{N-1}{2}} (u_h^n - u(t_n))\|_{L^2(I)} \le C(h^2 + \tau).$$

ただし、C = C(T, M, K) は h に依存しない定数、M は f のリプシッツ定数、K は u の滑らかさに依存する定数である。また、初期値は $v_h = \Pi_h \phi$ と選んでいる ($\Pi_h \phi$ は ϕ の Lagrange 補間である).

定理 4.3 (標準的対称 FEM の収束性 II)

 $f(u)=u|u|^{\alpha}$ ($\alpha>0$) とする. N<4 とし, $\tau h^{-N/2}\leq c_1h^{\sigma}$ を満たす正定数 c_1,σ の存在を仮定する. このとき, (S) の解が $[0,T]\times[0,1]$ で十分に滑らかならば,次の誤差評価が成り立つ:

$$\sup_{t_n \in [0,T]} \|x^{\frac{N-1}{2}} (u_h^n - u(t_n))\|_{L^2(I)} \le C(h^2 + \tau).$$

ただし、 $C = C(T, \alpha, K)$ は h に依存しない定数、K は u の滑らかさに依存する定数で、初期値は $v_h = \Pi_h \phi$ と選んでいる.

定理 4.4 (標準的非対称 FEM の収束性 I)

f が大域的 Lipschitz 連続のとき、 $v_h = P_B \phi$ とする。ただし、 $P_B v \in S_h(I)$ は、 $B(P_B v - v, \chi) = 0$ 、($\forall \chi \in S_h(I)$) をみたす関数である。さらに、 $\delta = \sup_{t_k \in [0,T]} |\tau_k - \tau_{k+1}|$ とおく。(S) の解が $[0,T] \times [0,1]$ で十分に滑らかならば、次の誤差評価が成り立つ:

$$\sup_{t_n \in [0,T]} \|u_h^n - u(t_n)\|_{L^{\infty}(I)}$$

$$\leq C \left(\log \frac{1}{h}\right)^{\frac{1}{2}} \left(h^2 + \tau + \frac{\delta}{\tau}\right).$$

ただし、C = C(T, M, K) は h に依存しない定数,M は f のリプシッツ定数,K は u の滑らかさに依存する定数である.

定理 4.5 (標準的非対称 FEM の収束性 II)

 $f(u) = u|u|^{\alpha}$ ($\alpha > 0$) とする. $v_h = P_B \phi$ と選ぶ. さらに、時間一様メッシュ $\tau = \tau_n$ を考える. このとき、(S) の解が $[0,T] \times [0,1]$ で十分に滑らかならば、次の誤差評価が成り立つ:

$$\sup_{t_n \in [0,T]} \|u_h^n - u(t_n)\|_{L^{\infty}(I)} \le C \left(\log \frac{1}{h}\right)^{\frac{1}{2}} (h^2 + \tau).$$

ただし、 $C = C(T, \alpha, K)$ は h に依存しない定数,K は u の滑らかさに依存する定数である.

- K. Eriksson and V. Thomée, Galerkin methods for singular boundary value problems in one space dimension, Math. Comp. 42 No.166 (1984) 345– 367.
- [2] Vidar Thomée, Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems Second Edition, Springer. §18 Singular Problem 305-315.
- [3] Y. G. Chen, Blow-up solutions to a finite differential analogue of $u_t = \Delta u + u^{1+\alpha}$ in N-dimensional balls, Hokkaido Math. J. **21** (1991) 447–474.
- [4] 中川友康, 牛島照夫, 爆発型半線型熱 方程式の数値解析 (発展系と自由境界 問題), 数理解析研究所講究録 (1976), **264**, 85-102

数値積分を用いる Lagrange-Galerkin スキームの収束性

内海 晋弥 1, 田端 正久 2

1早稲田大学, 2九州大学(名誉教授)

e-mail: su48@fuji.waseda.jp

1 はじめに

本報告では、Navier-Stokes (NS) 問題のため の数値積分を用いる Lagrange-Galerkin (LG) スキームの収束性を述べる.

LG スキームは流れ問題のための強力な数値計算手法である.しかし、従来のスキームは、合成関数を含む項の積分のために、スキームに忠実な実装は困難であった.[1]では、厳密に実装できるスキームが開発され、収束性が示され、この問題が解決された.一方で、その合成関数を含む項の積分を数値積分に置き換えたスキームは広く使われていたが、その収束性は示されていない.[1]においては、時間刻みの選択によっては不安定になることが報告されている.一方で、時間刻みを小さくすると安定性が回復することも観察された.

本報告では、そこで観察されたことを定式化する。要素の内部に積分点を持つ数値積分公式を考え、時間刻みが小さいときに、スキームの解の収束性を示す。

2 準備

 $(u,p):\Omega\times(0,T)\to\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}$ を未知関数とする NS 問題

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u - \nu \Delta u + \nabla p &= f, \\ (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ \nabla \cdot u &= 0, \qquad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ u &= 0, \qquad (x, t) \in \partial \Omega \times (0, T), \\ u(\cdot, 0) &= u^0, \qquad x \in \Omega \end{split}$$

を考える. ここに, Ω は \mathbb{R}^d (d=2,3) の多角形または多面体領域, T>0 は終了時刻, $\partial\Omega$ は Ω の境界, $\nu>0$ は粘性係数を表す定数, $f:\Omega\times(0,T)\to\mathbb{R}^d$ と $u^0:\Omega\to\mathbb{R}^d$ は与えられた関数である.

双線形形式 a と b を

$$a(u, v) \equiv \nu(\nabla u, \nabla v), \quad b(v, q) \equiv -(\nabla \cdot v, q)$$

で定める. ここで (\cdot,\cdot) は $L^2(\Omega)^i$, $i=1,d,d\times d$

の内積を表す.また集合 K における L^2 内積 e, $(\cdot,\cdot)_K$ と書く.

 $\Delta t > 0$ を時間刻みとする. $w: \Omega \to \mathbb{R}^d$ に対して写像 $X_1(w): \Omega \to \mathbb{R}^d$ を次で定める:

$$(X_1(w))(x) \equiv x - w(x)\Delta t.$$

また、記号 $N_T \equiv \lfloor T/\Delta t \rfloor$ 、 $t^n \equiv n\Delta t$ 、 $\psi^n \equiv \psi(\cdot,t^n)$ を用いる。。 は関数の合成とする.すなわち、 $(g\circ f)(x)\equiv g(f(x))$ である.

 $\{\mathcal{T}_h\}_h$ を一様正則な三角形分割列とし、 $V_h \times Q_h \subset H_0^1(\Omega)^d \times L_0^2(\Omega)$ を P_2/P_1 有限要素空間とする.

 $g:K \to \mathbb{R}$ を連続関数, $K \in \mathcal{T}_h$ を要素とする. $\int_K g \ dx$ の 数値積分 $I_h[g;K]$ を

$$I_h[g;K] \equiv \max K \sum_{i=1}^{N_q} w_i \ g(a_i),$$

で定める.ここで、 N_q は積分点数で、 $(w_i, a_i) \in \mathbb{R} \times K$ $(i=1,\ldots,N_q)$ は重みと積分点の組である.

3 スキームとその収束性

NS 問題 (1) のための, 数値積分を用いる LG スキームを考える.

スキーム $\mathbf{LG'}$. u_h^0 を u^0 の近似とする. $n=1,\ldots,N_T$ に対して、次を満たす $\{(u_h^n,p_h^n)\}_{n=1}^{N_T}\subset V_h\times Q_h$ を求めよ:

$$\frac{1}{\Delta t}(u_h^n, v_h)
- \frac{1}{\Delta t} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} I_h[(u_h^{n-1} \circ X_1(u_h^{n-1})) \cdot v_h; K]
+ a(u_h^n, v_h) + b(v_h, p_h^n)
= (f^n, v_h), \quad \forall v_h \in V_h, \quad (2a)$$

本スキームを以下の仮定 H の下で考える.

 $\forall q_h \in Q_h.$ (2b)

- **H.** 数値積分公式 I_h は以下を満たす:
- (i) 各積分点に対して $a_i \in \text{int}(K)$.
- (ii) 各重みに対して $w_i > 0$.

 $b(u_h^n, q_h) = 0,$

(iii) I_h は 6 次以上の公式である.

例えば 9 次の 21 点公式 [2] は仮定 H を満たす. 仮定 H の下, Δt が小さければ,各積分点 a_j とその移動先 $[X_1(u_h^{n-1})](a_j)$ は同じ要素にあるので,Taylor 展開により,(2a) は次の (3a) に書き換えられる:

$$\frac{1}{\Delta t} \left(u_h^n - u_h^{n-1}, v_h \right) + \left((u_h^{n-1} \cdot \nabla) u_h^{n-1}, v_h \right)
- \frac{\Delta t}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left((u_h^{n-1})^T (\nabla^2 u_h^{n-1}) u_h^{n-1}, v_h \right)_K
+ a(u_h^n, v_h) + b(v_h, p_h^n)$$

$$=(f^n, v_h), \quad \forall v_h \in V_h,$$
 (3a)

$$b(u_h^n, q_h) = 0, \quad \forall q_h \in Q_h.$$
 (3b)

ここで、 $\nabla^2 u_h^{n-1}$ は Hesse 行列である. (3) を スキーム SDE と呼ぶ.上記の条件下でスキーム LG' と同値である.

定理. NS 問題 (1) の解 (u,p) は十分滑らかとする. (u_h,p_h) をスキーム LG'の解とする. u_h^0 を $(u_0,0)$ の Stokes 射影の第一成分とし,数値積分公式 I_h は仮定 H を満たすとする.このとき,正定数 c_0 , h_0 , c が存在し, $h \in (0,h_0]$ と $\Delta t < c_0 h$ を満たす h と Δt に対して

 $||u_h - u||_{\ell^{\infty}(H^1)}, ||p_h - p||_{\ell^2(L^2)} \le c(h^2 + \Delta t)$ が成り立つ.

4 数值結果

[1] と同じ高レイノルズ数のテスト問題を扱う.

例. NS 問題 (1) において $\Omega \equiv (0,1)^2, T = 1,$ $\nu = 10^{-4}$ とする. 関数 f と u^0 は厳密解が

$$u_1(x,t) = \phi(x_1, x_2, t),$$

$$u_2(x,t) = -\phi(x_2, x_1, t),$$

$$p(x,t) = \sin(\pi(x_1 + 2x_2) + 1 + t),$$

となるように与える. ここで.

$$\phi(a, b, t) \equiv -\sin(\pi a)^2 \sin(\pi b)$$

$$\times \{\sin(\pi (a+t)) + 3\sin(\pi (a+2b+t))\}$$

である.

N を $\bar{\Omega}$ の各辺の分割数とし、FreeFem++ [3] でそれに対応するメッシュを作成した.

 $N \ \ \, \Delta t \ \,$ を変化させて,スキーム SDE で計算し, $\ell^{\infty}(H_0^1)$ ノルムで計ったときの u の相対

誤差と $\ell^2(L^2)$ ノルムで計ったときの p の相対 誤差を表 1 にまとめた. 「発散」とは計算途中で 相対誤差が 10^{10} 以上になったことを表す. いずれの N にも発散となる Δt があるが, Δt を 小さくすると安定に計算できることが観察できる. $\Delta t < O(h)$ の下での収束が観察できる.

表 1. 相対誤差				
N	Δt	$\ell^{\infty}(H_0^1)(u)$	$\ell^2(L^2)(p)$	
8	0.002000	発散	発散	
8	0.001000	1.82e + 1	1.80e + 0	
8	0.000500	1.36e + 1	1.25e + 0	
8	0.000250	1.46e + 1	1.28e + 0	
16	0.001000	発散	発散	
16	0.000500	2.00e+0	7.63e-2	
16	0.000250	1.81e + 0	6.57e-2	
16	0.000125	1.75e + 0	6.27e-2	
32	0.000500	発散	発散	
32	0.000250	4.29e-1	8.34e-3	
32	0.000125	2.18e-1	5.65e-3	
64	0.000250	発散	発散	
64	0.000125	7.32e-2	4.70e-3	

注意. 1. 定理は, スキーム SDE で同じ収束結果を示すことで得られる.

2. 高レイノルズ数でないとき (例えば, $\nu = 10^{-1}$). 容易に良好な計算結果が得られる.

5 おわりに

要素の内点に積分点を持つ数値積分公式を考え、時間刻みが小さいとき、Lagrange-Galerkin スキームの収束性を述べた。定理に整合する数値結果を得た。定理に出現する定数は粘性係数 ν に依存するので、この依存性に注目した解析は課題として残っている。

- [1] M. Tabata and S. Uchiumi, Math. Comp., Vol. 87 (2018), 39– 67.
- [2] M. E. Laursen and M. Gellert, Int. J. Numer. Meth. Engng, Vol. 12 (1978), 67–76.
- [3] F. Hecht, J. Numer. Math., Vol. 20 (2012), 251–265.

Gröbner 基底を用いた同種写像核計算

高橋 康1,安田 雅哉2

1 九州大学大学院数理学府 2 九州大学 IMI 研究所,福岡県福岡市西区元岡 744 番地 e-mail: ma217039@math.kyushu-u.ac.jp, yasuda@imi.kyushu-u.ac.jp

1 概要

超特異楕円曲線間の同種写像核計算問題 (CSSI, Computational SuperSingular Isogeny 問題)に対しては現在,量子計算機でも指数 時間の攻撃法しか知られていない. そのため, CSSI 問題を安全性の根拠とする暗号方式であ る同種写像暗号は, 耐量子暗号の一つとして期 待されている. 本稿では、CSSI 問題に対する Gröbner 基底計算を用いた新しい求解方法を提 案する. さらに、Jao らの提案した同種写像暗 号(SIKE [1]) に対して、提案した CSSI 問題 求解法を用いた解読実験結果を報告する.

2 CSSI 問題と Vélu の公式 [2]

素数 p > 7 に対し、 $q := p^n \ (n \in \mathbb{N})$ とする. 有限体 \mathbb{F}_a 上で式 $y^2 = x^3 + ax + b (4a^3 + 27b^2 \neq$ 0) で定義される楕円曲線を E/\mathbb{F}_q と表し、その \mathbb{F}_q -有理点群を $E(\mathbb{F}_q)$ (単位元は \mathcal{O}) と表す.

2つの \mathbb{F}_a 上楕円曲線 E, \tilde{E} に対し, $E(\bar{\mathbb{F}}_a)$ か ら $\tilde{E}(\bar{\mathbb{F}_q})$ への写像 ϕ が有理写像かつ群準同型 であるとき, ϕ を E から E への同種写像と 呼び、 E,\tilde{E} は同種であるという. また、l:= $\#\ker(\phi) < \infty$ のとき, ϕ を l-同種写像と呼ぶ.

同種な2つの \mathbb{F}_q 上楕円曲線EとEに対し, E から \tilde{E} への l-同種写像 ϕ はただ一つ存在す る. ここで, $q+1-\#E(\mathbb{F}_q)\equiv 0 \pmod{p}$ の とき,Eを超特異楕円曲線と呼ぶとすると,次 の問題が考えられる.

 \mathbf{CSSI} 問題. 2 つの \mathbb{F}_q 上超特異楕円曲線 E, \tilde{E} と自然数lに対し、Eから \tilde{E} へのl-同種写像 ϕ , 又はその $\ker(\phi)$ を求めよ.

この問題に対しては, claw finding algorithm [3] が現在最も有効であるが、量子計算 機でも $O(p^{1/6})$ の時間が必要である [4].

ここで、楕円曲線 E/\mathbb{F}_q とその有限部分群 K (#K =: l) に対し、 $\ker(\phi) = K$ をみたす l-同種写像 $\phi: E \to \tilde{E}$ と楕円曲線 \tilde{E}/\mathbb{F}_q はた だ一つ存在し、この ϕ と \tilde{E} は次で与えられる (以下, E上の点Sのx座標を x_S で表す).

命題 (Vélu の公式 [2]). 楕円曲線 $E/\mathbb{F}_q:y^2=$

 $x^3 + ax + b$ とその部分群 K (#K =: l) が与え られているとき、多項式 $D_l(x), N_l(x)$ を

$$D_{l}(x) := \prod_{S \in K \setminus \mathcal{O}} (x - x_{S})$$

$$= x^{l-1} - s_{1}x^{l-2} + s_{2}x^{l-3} - \dots + s_{l-1}, \quad (1)$$

$$\frac{N_{l}(x)}{D_{l}(x)} = lx - s_{1} - (3x^{2} + a)D'_{l}(x)/D_{l}(x)$$

$$-2(x^{3} + ax + b) \left(D'_{l}(x)/D_{l}(x)\right)' \quad (2)$$

$$= x + h_{1}/x + h_{2}/x^{2} + h_{3}/x^{3} + \dots \quad (3)$$

と定める. すると, $\ker(\phi) = K$ をみたす E か ら \tilde{E} へのl-同種写像 ϕ は、

$$\phi(x,y) = \left(N_l(x)/D_l(x), y\left(N_l(x)/D_l(x)\right)'\right)$$

と表せる。また, $\tilde{E}/\mathbb{F}_q: y^2 = x^3 + \tilde{a}x + \tilde{b}$ とすると, $\tilde{a} = a - 5h_1$, $\tilde{b} = b - 7h_2$ である.

提案手法の概要

本稿では、上記の Vélu の公式から連立方程 式を作成し、Gröbner 基底による連立方程式求 解を用いて CSSI 問題を解く手法を提案する. 以下では d = (l-1)/2 とし,

$$F_l(x) := x^d + t_1 x^{d-1} + t_2 x^{d-2} + \dots + t_d$$

は $D_l(x) = F_l^2(x)$ をみたす多項式とする.こ のとき, t_2, \ldots, t_d は Alg 1 により $a, b, \tilde{a}, \tilde{b}, t_1$ を 用いて表せる [5]. すなわち, ϕ を表す多項式 $D_l(x), N_l(x)$ は $a, b, \tilde{a}, \tilde{b}, t_1$ を用いて表せる. 故 に、l-同種写像 ϕ は、 t_1 の値を計算することで 求まる. 従って, 命題 2 から Alg 2 を用いると t_1 を計算できるため、 ϕ も計算可能である.

$oxed{\mathbf{Algorithm}} \mathbf{1} \; t_i$ 計算アルゴリズム [5]

INPUT: $l \in \mathbb{Z}, E, \tilde{E}/\mathbb{F}_q$ の係数 $a, b, \tilde{a}, \tilde{b}$

OUTPUT:
$$t_2, \ldots, t_d \in \mathbb{F}_q[t_1]$$

1. $h_k = \frac{3}{(k-2)(2k+3)} \sum_{i=1}^{k-2} h_i h_{k-1-i}$
 $-\frac{2k-3}{2k+3} a \cdot h_{k-2} - \frac{2k-6}{2k+3} b \cdot h_{k-3}$
より h_1, \ldots, h_{l-1} を計算.

- 2. 式 (1)-(3) より s_2, \ldots, s_{l-1} を s_1 で表す.
- 3. $D_l = F_l^2$ で t_2, \ldots, t_d を t_1 で表し、出力.

Algorithm 2 t_1 計算アルゴリズム [6]

INPUT: $l \in \mathbb{Z}$, $E, \tilde{E}/\mathbb{F}_q$ の係数 $a, b, \tilde{a}, \tilde{b}$ OUTPUT: $t_1 \in \mathbb{F}_q$

- 1. Alg 1 を用いて t_2, \ldots, t_d を t_1 で表す.
- 2. $\Phi_x := N_l(x)/D_l(x) \in \mathbb{F}_q[t_1, x]$ を計算.
- 3. $(x^3 + ax + b) (\Phi'_x)^2 (\Phi_x)^3$ $- \tilde{a} (\Phi_x) - \tilde{b} \mathcal{O} x$ に関する 係多項式 $c_0, c_1, \dots, c_m \in \mathbb{F}_q[t_1]$ を計算.
- 4. 連立方程式 $c_i = 0$ の根rを計算し、出力.

注意. 実際に Alg 1, Alg 2 により t_1 を計算する と、Alg 2 の 4 行目に時間がかかる。そのため、十分 t_1 の候補が絞られる最小の方程式の取り方を考える必要がある。そこで、Alg 2 の 3 行目で作られる多項式の低次の項には、高次の項の情報も含まれていると予想し、 $c_0 = 0, \ldots, c_4 = 0$ のみを用いて連立方程式求解を行った。

4 提案手法による SIKE 解読実験

2011 年 Jao らは,CSSI 問題の計算困難性に基づく同種写像暗号 (SIKE [1]) を提案した.そこで,今回提案した CSSI 求解法を用いて SIKE の解読実験を行った(実験環境:Intel Core i7-6600U@2.60GHz,MAGMA Ver. 2.20.10).本実験では,SIKE が量子計算機に対して 82-bit 安全性を持つパラメータ $p=2^{250}3^{159}-1,q=p^2,E/\mathbb{F}_q:y^2=x^3+x$ を用いた.

表 1. $l=3^e$ 次 CSSI 問題に対する t_1 の計算時間(秒)及 びそのうちの Alg 1 の計算時間と Alg 2 の計算時間(秒)

e	合計時間	Alg1 step	Alg2 step
2	0.047	_	0.047
3	0.516	0.016	0.500
4	5.406	0.391	5.015
5	83.078	31.546	51.532

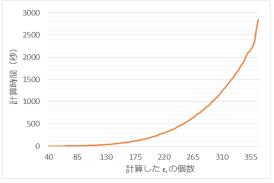


図 1. $p=2^{250}3^{159}-1, q=p^2, E/\mathbb{F}_q: y^2=x^3+x$ としたときの Alg 1 による t_i の計算時間

5 まとめと今後の課題

表 1 より同種写像の次数 $l=3^5$ の CSSI 問題は現実的な時間で解けることが分かった. しかし,次数 $l=3^6$ の CSSI 問題に対しては, 12GB のメモリを用いて 60 時間計算しても解くことができなかった. この主な原因は二つ考えられる.

一つ目は、同種写像の次数が大きくなると、全ての t_i を t_1 で表す計算に多くの時間がかかるからである(図 1 参照).二つ目は、 t_i を全て t_1 で表せたとしても、大きなi に対しての t_i の次数は t_1 変数に関して大きくなるため、連立方程式構成ステップで次数の大きな多項式の演算が必要となるからである.

従って今後は、一部の t_i のみを t_1 で表して Alg1の4行目で多変数の連立方程式を解く手法や、より少ない数の方程式 c_i から連立方程式を構成する手法を考え、どこまで効率化できるか考察する必要がある.

- [1] Feo, L.D., Jao, D. and Plût, J.: Towards quantum resistant cryptosystems from supersingular elliptic curve isogenies, PQCrypto 2011, Lecture Notes in Compututer Science, 7071, pp.19-34, Springer, 2011.
- [2] Vélu, J.: Isogénies entre courbes elliptiques, Communications de l'Académie Royale des Sciences de Paris, 273, pp.238-241, 1971.
- [3] Tani, S.: Claw finding algorithms using quantum walk, Theoretical Computer Science, 410, pp.5285-5297, 2008.
- [4] Galbraith, S.D., Vercauteren, F.: Computational problems in supersingular elliptic curve isogenies, IACR Cryptology ePrint Archive 2017, 774, 2017
- [5] Bostan, A., Morain, F., Salvy, B. and Schost, É.: Fast algorithms for computing isogenies between elliptic curves, Mathematics of Computation, 77, pp.1755-1778, 2008
- [6] 横山和弘,野呂正行「楕円曲線の同種写像の公式計算」数理解析研究所講究録第 1955巻,pp.146-157,2015

DeepLLL の改良と BKZ への組込みの提案

中邑 聡史1,安田 雅哉2

¹ 九州大学大学院数理学府, ² 九州大学 IMI 研究所

e-mail: ma218048@math.kyushu-u.ac.jp

1 概要

格子暗号の安全性を支える最短ベクトル問題 (Shortest Vector Problem, SVP) の近似解の求解法として, LLL[1] や BKZ[2] などが代表的である. LLLの拡張である DeepLLL[2] を BKZ に組込んだ"DeepBKZ"[3][4] を用いた Darmstadtの SVP チャレンジの更新記録が SCIS2018 で報告されている.本稿では、DeepLLL の簡約条件を強めた改良 DeepLLL と BKZ に組込んだ改良 DeepBKZ を提案する. 改良方式の有効性を検証するため、格子基底簡約で見つけた短い格子ベクトルとその実行時間について、既存DeepLLL と改良版、既存 DeepBKZ と改良版のそれぞれを比較する.

2 数学的準備

格子 [5] $n \in \mathbb{N}$ に対して, \mathbb{R}^n の一次独立なべクトル $\mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{b}_n$ の整数係数による線形結合全体の集合 L を \mathbb{R}^n 上の n 次元格子と呼ぶ.格子 L の基底行列 $B = (\mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{b}_n)$ に対して,格子 L の体積を $\operatorname{vol}(L) = \det |B|$ で定める.格子基底 $\{\mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{b}_n\}$ に対して, $\{\mathbf{b}_1^*,\dots,\mathbf{b}_n^*\}$ を Gram-Schmidt の直交化ベクトルとする. $(\mathbf{b}_1^* = \mathbf{b}_1,\mathbf{b}_j^* = \mathbf{b}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mu_{i,j} \mathbf{b}_j^*, \ \mu_{i,j} = \langle \mathbf{b}_i,\mathbf{b}_j^* \rangle / \|\mathbf{b}_j^*\|^2)$ 任意の $1 \leq i \leq n$ に対して, π_i を \mathbb{R} -ベクトル空間 $\langle \mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{b}_{i-1} \rangle_{\mathbb{R}}$ の直交補空間への直交射影とする.(ただし, π_1 は恒等写像とする.) 集合 $\pi_k(L)$ は基底 $\{\pi_k(\mathbf{b}_k),\dots,\pi_k(\mathbf{b}_n)\}$ を持つ (n-k+1)-次元格子であり,射影格子と呼ぶ.その部分格子である基底 $\{\pi_k(\mathbf{b}_k),\dots,\pi_k(\mathbf{b}_l)\}$ を持つ (l-k+1)-次元格子を $L_{[k,l]}$ と表す.

基底簡約と条件 基底 $\{\mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{b}_n\}$ と ユニモジュラ行列 U に対して, $\{\mathbf{b}_1U,\dots,\mathbf{b}_nU\}$ も基底となる.基底簡約ではこの性質を利用し,最短ベクトル問題を解くために短く互いに直交に近い基底に取り替えていく.アルゴリズム評価のために,基底簡約の出力基底の先頭ベクトル \mathbf{b}_1 に対して,Hermite factor $\gamma:=\|\mathbf{b}_1\|/\mathrm{vol}(L)^{\frac{1}{n}}$ がよく用いられる.

格子 $L \subset \mathbb{Z}^n$ の基底 $\{\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_n\}$ が,簡約パ

ラメータ $\frac{1}{4}$ < δ < 1 に対して条件 (1),(2) を 満たす時,基底 { $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_n$ } は δ -LLL 簡約さ れているといい,条件 (1),(3) を満たす時は δ -DeepLLL 簡約されているという.

- $(1) |\mu_{i,j}| \le \frac{1}{2} (1 \le j < i \le n).$
- (2) $\delta \|\mathbf{b}_{i-1}^*\|^2 \le \|\pi_{i-1}(\mathbf{b}_i)\|^2 \ (2 \le i \le n).$
- (3) $\delta \|\mathbf{b}_i^*\|^2 \le \|\pi_i(\mathbf{b}_k)\|^2$ $(1 \le i < k \le n)$. また, $2 \le \beta \le n$ に対して条件 (1),(4) を満たす時は β -BKZ 簡約されているという.
- (4) $1 \le \forall k \le n$ に対して、ベクトル \mathbf{b}_k^* が格子 $L_{[k,l]}$ 上の非零な最短ベクトルである. $(l = \min(k + \beta 1, n))$

3 改良 DeepLLL の提案と比較報告

新しい条件 改良 DeepLLL では, DeepLLL 簡 約条件である (3) を強めた (3') に変更する.

(3') $\delta \|\mathbf{b}_i^*\|^2 \le \|\pi_i(\mathbf{b}_k + a\mathbf{b}_l)\|^2$

 $(\forall a \in \mathbb{Z}, \ 1 \le i < l < k \le n)$

 $A = \|\pi_i(\mathbf{b}_l)\|^2, B = \sum_{j=i}^l \mu_{k,j} \mu_{l,j} \|\mathbf{b}_j^*\|^2$ ($\lfloor x \rceil : x$ に近い整数) とすると,

 $\|\pi_i(a\mathbf{b}_l+\mathbf{b}_k)\|^2 = A(a+\frac{B}{A})^2 - \frac{B^2}{A} + \|\pi_i(\mathbf{b}_k)\|^2$ となるため $a = -\lfloor \frac{B}{A} \rfloor$ の時に (3') の右辺は最小となる。したがって, $a = -\lfloor \frac{B}{A} \rfloor$ に対して $\delta \|\mathbf{b}_i^*\|^2 \leq \|\pi_i(\mathbf{b}_k+a\mathbf{b}_l)\|^2$ が成り立つことは任意の a について成り立つことと同値である。

改良 DeepLLL このアルゴリズムでは,

step1: DeepLLL アルゴリズム

step2: $a = -\lfloor \frac{B}{A} \rfloor \neq 0$ となる a を見つけ i 番目 に $\mathbf{b}_k + a\mathbf{b}_l$ を挿入し、 \mathbf{b}_k を取り除く. という 2 つのステップを繰り返し行う。step2 でそのような a が見つからなければこのアルゴリズムは停止し、出力基底は簡約条件を満たす。Darmstadt SVP challenge[6] seed0-9 を用いたDeepLLL との比較結果を表 1 に示す。

表 1. 平均停止時間と $(\gamma^{\frac{1}{n}})$ の平均) 比較

n	DeepLLL	改良 DeepLLL
100	44.5 秒	46.5 秒
	(1.011084)	(1.011032)
120	712.2 秒	768.1 秒
	(1.010802)	(1.010722)

4 改良 DeepBKZ の提案と比較報告

BKZ内で呼ぶLLLの代わりに改良DeepLLLを組込む「改良DeepBKZ」を提案する.

改良 DeepBKZ アルゴリズム (簡易版)

Input: 基底 $\{\mathbf{b}_1,\ldots,\mathbf{b}_n\}$, ブロックサイズ β

Output: β -BKZ 簡約された基底 $\{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$

1: $j \leftarrow 0, z \leftarrow 0$

2: **while** z < n - 1 **do**

3: $j \leftarrow j \mod (n-1)+1, k \leftarrow \min(j+\beta-1, n)$ $h \leftarrow \min(k+1, n)$

4: 部分射影格子 $L_{[j,k]}$ 上の最短な非零ベクトル $\pi_k(\mathbf{v})$ を見つける.

5: **if** $\|\mathbf{b}_{k}^{*}\| > \|\pi_{k}(\mathbf{v})\|$ **then** $z \leftarrow 0$

6: k番目に v を挿入し一次従属性を取り除く.

7: else $z \leftarrow z + 1$

8: 基底 **b**₁ ... **b**_h に対し改良 **DeepLLL** 簡約

9: end while

表 2, 図 1, 図 2 に Darmstadt SVP challenge seed0-9 の平均停止時間, β を 20 から 44 まで 2 ずつ上げた時の $\gamma^{\frac{1}{n}}$ の平均を示す。early-abort[7] を採用する。(BKZ 内の繰り返し回数を

 $N = \left\lfloor 10 \left(\frac{n}{\beta} \right)^2 \left(\log n + \log \log \max \frac{\|\mathbf{b}_i^*\|}{\operatorname{vol}(L)^{\frac{1}{n}}} \right) \right
ceil$ までに制限する。)

5 考察

今回提案した改良 DeepLLL では,DeepLLL とあまり変わらない停止時間で短い基底ベクトルを見つけることが出来た.(表 1)さらに改良 DeepBKZ でも,DeepBKZ と比べて時間はかかったが,短い基底ベクトルを見つけることに成功した.(表 2,図 1,2)

図 1. n=120, x 軸(β :ブロックサイズ), y 軸($\gamma^{\frac{1}{n}}$ の 平均(Darmstadt SVP challenge seed0-9))

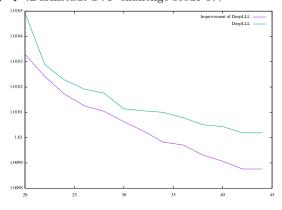


図 2. n=125, x 軸(β :ブロックサイズ), y 軸($\gamma^{\frac{1}{n}}$ の 平均(Darmstadt SVP challenge seed0-9))

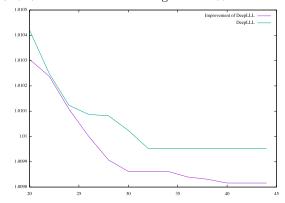


表 2. n=120(図 1), n=125(図 2)の時のブロックサイズ $\beta=44$ までの平均停止時間比較

n	DeepBKZ	改良 DeepBKZ
120	9434 秒	13621 秒
125	17170秒	31107 秒

- [1] Lenstra, A. K., Lenstra, H. W., & Lovasz, L., Factoring polynomials with rational coefficients. Mathematische Annalen, 261(4), 515-534,1982
- [2] Schnorr, C. P., & Euchner, M. Lattice basis reduction: Improved practical algorithms and solving subset sum problems. Mathematical programming, 66(1-3), 181-199,1994
- [3] 山口純平, 安田雅哉, DeepLLL 簡約基底の解析と DeepBKZ の高速計算法の提案, SCIS2018.
- [4] Yamaguchi, J. & Yasuda, M., Explicit formula for Gram-Schmidt vectors in LLL with deep insertions and its applications, NuTMiC 2017, LNCS 10737, Springer, pp. 142-160, 2017.
- [5] Bremner, M. R., Lattice basis reduction: An introduction to the LLL algorithm and its applications, CRC Press, 5–54, 2011
- [6] SVP Challenge, https://www.latticechallenge.org/svp-challenge/.
- [7] Chen, Y. & Nguyen, P. Q. BKZ2.0: Better lattice security estimates, ASI-ACRYPT 2011, LNCS 7073, Springer, pp. 1-20 2011.

無誤差変換技法を用いた陽的補外法の精度改善

幸谷 智紀1

1静岡理工科大学

e-mail: kouya.tomonori@sist.ac.jp

1 初めに

今回解くべき常微分方程式の初期値問題を下記のように表記する.

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(\alpha) = \mathbf{y}_{\alpha} \end{cases}$$
(1)
積分区間: $[\alpha, \beta]$

常微分方程式 (ODE) の初期値問題において, 高精度な近似解を効率的に得るためには高次解 法を使用することが望ましい.しかし,多倍長 精度演算を用いると計算時間が増大するため, 通常の IEEE754 演算を用いて精度を補填する Møller 法の利用が提案されている [1].しかし, 精度の改善が必ずしも可能になるわけではない.

今回我々は QD ライブラリ [2] で提供される 4倍精度 (Double-Double, DD) 演算を用いて実 装した補外法と,BLAS1 ベースの 2 重精度演算 [3] を取り込んだ補外法を実装し,その性能 評価を行った.その結果,ODE の関数 $\mathbf{f}(t,\mathbf{y})$ を倍精度のまま利用し,それ以外の部分に 2 重 精度演算を行ったものが最も効率的な計算を実行でき, \mathbf{M} øller 法より精度の改善が図れることが判明した.本稿ではその結果について述べる.

2 陽的補外法のアルゴリズム

ODE(1) に対し、各離散点 $t_{\text{old}} \in [\alpha, \beta]$ の近似解 $\mathbf{y}_{\text{old}} \approx \mathbf{y}(t_{\text{old}})$ から、次の離散点 t_{next} の近似値 $\mathbf{y}_{\text{next}} \approx \mathbf{y}(t_{\text{next}})$ を,陽的中点法を用いた補外法(陽的補外法)を用いて計算することを考える.

補外法の初期系列 \mathbf{T}_{i1} を計算するための補助数列を $\{w_i\}$,最大段数 L とし,停止条件として相対許容度 ε_R ,絶対許容度 ε_A を与える.今回は補助数列としては下記の 2 つを使用する.

Romberg 数列: $2, 4, 8, ..., 2^i, ...$

調和数列: 2,4,6,8,...,2(i+1),...

初期系列 \mathbf{T}_{i1} (i=1,2,...,L) の計算は,下記 のように最初の \mathbf{y}_1 を陽的 Euler 法で計算した 後,以降は陽的中点法を用いて行う.

- 1. $h := (t_{\text{next}} t_{\text{old}})/w_i \longrightarrow t_k := t_{\text{old}} + kh \in [t_{\text{old}}, t_{\text{next}}]$
- 2. $t_0 := t_{\text{old}}, \ \mathbf{y}_0 \approx \mathbf{y}(t_0)$
- 3. 陽的 Euler 法: $\mathbf{y}_1 := \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$
- 4. 陽的中点法: $\mathbf{y}_{k+1} := \mathbf{y}_{k-1} + 2h\mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k)$ $(k = 1, 2, ..., w_i 1)$
- 5. 初期系列をセット: $\mathbf{S}(h/w_i) := \mathbf{y}_{w_i}$

初期系列 $\mathbf{T}_{i1} := \mathbf{S}(h/w_i)$ を用いて近似解の次数を高めていく補外過程は次のようになる.

- 1. $\mathbf{T}_{11} := \mathbf{S}(h/w_1)$
- 2. i = 2, ..., L

$$\mathbf{T}_{i1} := \mathbf{S}(h/w_i)$$

For $j = 2, ..., i$
補外過程:

$$\mathbf{R}_{ij} := \left(\left(\frac{w_i}{w_{i-j+1}} \right)^2 - 1 \right)^{-1}$$

$$\times \left(\mathbf{T}_{i,j-1} - \mathbf{T}_{i-1,j-1} \right)$$

$$\mathbf{T}_{ij} := \mathbf{T}_{i,j-1} + \mathbf{R}_{ij}$$

収束チェック:

$$\|\mathbf{R}_{ij}\| \le \varepsilon_R \|\mathbf{T}_{i,j-1}\| + \varepsilon_A$$

 $\longrightarrow \mathbf{y}_{\text{next}} := \mathbf{T}_{ij}$

- 3. $\mathbf{y}_{\text{next}} := \mathbf{T}_{LL}$ (収束しない場合)
- 3 無誤差変換 BLAS1 を用いた陽的補外 法のアルゴリズム

通常の丸め誤差を伴う倍精度四則演算を \oplus , \otimes , \ominus , \oslash と表現する.これに対して,倍精度加算の結果 $s:=a\circ b$ に含まれる誤差項 e を正確に表現することのできる演算を無誤差変換(演算)と呼ぶ.代表的なものとして,QuickTwoSum($|a|\geq|b|$ の場合のみ) と TwoSum,TwoDiff,TwoProd,FMA 演算に対する FMAerror がある.これらの演算を用いて,AXPY 演算と SCAL 演算を無誤差変換アルゴリズム化する.倍精度四則演算,QuickTwoSum,TwoSum,TwoDiff,TwoProd,FMAerror はベクトルの要素ごとに実行するものとする.

$$\begin{aligned} &(\mathbf{y}, \mathbf{e_y}) := \mathrm{AXPYerror}(\alpha, e_{\alpha}, \mathbf{x}, \mathbf{e_x}, \mathbf{y}, \mathbf{e_y}) \\ &(\mathbf{y}, \mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}) := \mathrm{FMAerror}(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ &\mathbf{e_y} := \mathbf{e_1} \oplus \mathbf{e_2} \oplus \alpha \otimes \mathbf{e_x} \oplus e_{\alpha} \otimes \mathbf{x} \oplus \mathbf{e_y} \\ &\mathbf{return} \ &(\mathbf{y}, \mathbf{e_y}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &(\mathbf{x}, \mathbf{e_x}) := \mathrm{SCALerror}(\alpha, e_\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{e_x}) \\ &(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) := \mathrm{TwoProd}(\alpha, \mathbf{x}) \\ &\mathbf{w}_2 := \alpha \otimes \mathbf{e_x} \oplus e_\alpha \otimes (\mathbf{x} \oplus \mathbf{e_x}) \oplus \mathbf{w}_2 \\ &(\mathbf{x}, \mathbf{e_x}) := \mathrm{QuickTwoSum}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) \\ &\mathbf{return} \ (\mathbf{x}, \mathbf{e_x}) \end{aligned}$$

 $\mathbf{f}(t_k, \mathbf{y}_k) := \mathbf{f}_k$ を誤差評価付きの $\mathbf{f}(t_k + e_{t_k}, \mathbf{y}_k + \mathbf{e}_{\mathbf{y}_k}) = \mathbf{f}_k + \mathbf{e}_{\mathbf{f}_k}$ に変更したとすると,無誤差変換アルゴリズムを用いた陽的補外法は次のようになる.

陽的 Euler 法:

$$\begin{split} &(\mathbf{y}_1, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_1}) := (\mathbf{y}_0, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_0}) \\ &(\mathbf{y}_1, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_1}) := \mathrm{AXPYerror}(h, e_h, \mathbf{f}_0, \mathbf{e}_{\mathbf{f}_0}, \mathbf{y}_1, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_1}) \end{split}$$

陽的中点法:

$$(\mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_{k+1}}) := (\mathbf{y}_{k-1}, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_{k-1}})$$

$$(\mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_{k+1}}) := \text{AXPYerror}(2 \otimes h, 2 \otimes e_h, \mathbf{f}_k, \mathbf{e}_{\mathbf{f}_k}, \mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{e}_{\mathbf{y}_{k+1}})$$

補外過程は次のようになる.準備として,係数は DD 演算を行って $(c_{ij},e_{c_{ij}}):=1/((w_i/w_{i-j+1})^2-1)$ としておく.

$$\begin{split} &(\mathbf{U}_{1},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{1}}) := (\mathbf{T}_{i,j-1},e_{\mathbf{T}_{i,j-1}}) \\ &(\mathbf{U}_{2},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{2}}) := (\mathbf{T}_{i-1,j-1},\mathbf{e}_{\mathbf{T}_{i-1,j-1}}) \\ &(\mathbf{U}_{3},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{3}}) := \mathrm{AXPYerror}(-1,0,\mathbf{U}_{1},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{1}},\mathbf{U}_{2},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{2}}) \\ &(\mathbf{U}_{3},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{3}}) := \mathrm{SCALerror}(c_{ij},e_{c_{ij}},\mathbf{U}_{3},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{3}}) \\ &(\mathbf{T}_{ij},\mathbf{e}_{\mathbf{T}_{ij}}) := \mathrm{AXPYerror}(1,0,\mathbf{U}_{3},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{3}},\mathbf{U}_{1},\mathbf{e}_{\mathbf{U}_{1}}) \end{split}$$

4 性能評価

AMD Ryzen 1700 (3GHz, 8 cores), GCC 5.4.0, QD 2.3.17, LAPACK 3.8.0 という計算環境の下で性能評価を行った. 比較した陽的補外法は, Double-double 精度 (DD), 倍精度 Møller法 (double_møller), 倍精度 EFT(DEFT, $\mathbf{f} + \mathbf{e_f}$ を利用), そして $\mathbf{e_f} := 0$ とした倍精度 EFT(DEFT2) である. 特に断らない限り $\varepsilon_R = \varepsilon_A = 0$ とした.

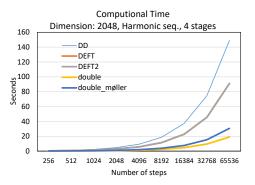
使用した問題は下記の斉次線形 ODE(n=2048) である.

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y_1 \\ -2y_2 \\ \vdots \\ -ny_n \end{bmatrix} \begin{pmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T, t \in [0, 1/4]$$

この場合、関数 \mathbf{f} の各要素 f_i $(i=1,2,\ldots,n)$ の誤差評価付きの計算は次のようになる.

$$(f_i, e_{f_i}) := (-iy_i, -ie_{y_i})$$
 (2)

性能評価の結果をを図1に示す.計算時間はDDが最も大きく、次いでDEFTとDEFT2が同程度、倍精度 Møller がそれに続き、倍精度演算が最も少ない.それに対し、相対誤差は、ちょうど逆の順になり、Møller 法は精度改善の効果が薄いのに対し、DEFT、DEFT2 は倍精度演算ギリギリの精度を維持できていることが分かる.



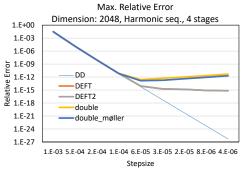


図 1. 線形 ODE の計算時間 (上) と相対誤差 (下)

従って、無誤差変換技法を用いることで、Møller 法より高い精度向上を達成でき、DD演算を用 いるより短い計算時間で済むことが判明した. より詳細な性能評価結果は講演時に示す.

- [1] M.Murofushi and H.Nagasaka, The relationship between the round-off errors and Møller's algorithm in the extrapolation method, Annals Num., 1994.
- [2] Yozo Hida, Xiaoye S. Li, and David H. Bailey, Quad-double arithmetic: Algorithms, implementation, and application, Technical Report LBNL-46996, 2000.
- [3] S.M. Rump, Error-Free Transformations and ill-conditioned problems, In Proceedings of the "International workshop on verified computations and related topics", 2009.

Enclosing the Hermitian positive definite solution of the conjugate discrete-time algebraic Riccati equation

Shinya Miyajima

Faculty of Science and Engineering, Iwate University

e-mail: miyajima@iwate-u.ac.jp

1 Introduction

Consider the conjugate discrete-time algebraic Riccati equation

$$\mathcal{R}(X) := X - A^H \overline{X} (I + G\overline{X})^{-1} A - H = 0,$$

where $A, G, H \in \mathbb{C}^{n \times n}$ are given, $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ is unknown, G and H are Hermitian positive definite (HPD), I, A^H and \overline{X} denote the $n \times n$ identity matrix, conjugate transpose of A, and complex conjugate of X, respectively. Investigating $\mathcal{R}(X) = 0$ is a parallel study of the conjugate nonlinear matrix equation $X + A^H \overline{X}^{-1} A = Q$, which has an application in the study of modern quantum theory by means of consimilarity. The solution of interest in $\mathcal{R}(X) = 0$ is the HPD solution X_+ . In [1], conditions for the existence and uniqueness of X_{+} are elegantly derived, a fast iterative algorithm for computing X_{+} is proposed, and it is shown that the speed of convergence can be of any desired order.

The work presented in this talk addresses the problem of verified computation for X_+ , specifically, computing an interval matrix which is guaranteed to contain X_+ . To the author's best knowledge, the verification algorithm designed specifically for $\mathcal{R}(X) = 0$ has not been written down in literature. As mentioned in [1, Section 1], $\mathcal{R}(X) = 0$ can be transformed into the standard discrete-time algebraic Riccati equation (DARE)

$$A_1^H X A_1 - X - A_1^H X (G_1^{-1} + X)^{-1} X A_1 + H_1 = 0,$$

where $A_1 := \overline{A}\Delta_{G,\overline{H}}A$, $G_1 := \overline{G} + \overline{A}\Delta_{G,\overline{H}}G\overline{A}^H$, $H_1 := H + A^H\overline{H}\Delta_{G,\overline{H}}A$ and $\Delta_{G,\overline{H}} := (I + G\overline{H})^{-1}$, which is a special case of the DARE treated in [2, 3, 4]. Therefore, a solution to $\mathcal{R}(X) = 0$ can be enclosed by computing intervals containing A_1, G_1^{-1} and H_1 , and applying a known algorithm in the DARE [2, 3, 4].

On the other hand, the algorithms in [2, 3] do not verify that the contained solution is Hermitian, so that we can not assert that the solution is X_+ . If we apply the algorithms in [4], we can prove the Hermitian property. By incorporating a known verification algorithm for the positive definiteness, therefore, we can assert that the solution is X_+ . Alternatively, this approach fails in many cases.

The purpose of this talk is to propose an iterative verification algorithm for X_+ . This algorithm requires only $\mathcal{O}(n^3)$ operations per iteration, and moreover verifies the uniqueness of the contained solution. In order to reduce the computational cost, we use the Perron-Frobenius theory.

For $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$, let M_{ij} and $\rho(M)$ be the (i,j) element and spectral radius of M, respectively, $|M| := (|M_{ij}|)$, $||M|| := \max_{i,j} |M_{ij}|$, and $M \succ 0$ denote M is HPD. For $M, N \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $M \leq N$ means $M_{ij} \leq N_{ij}$, $\forall i,j$. Let ./ be the pointwise division. Define $\Delta_{G,X} := (I + GX)^{-1}$, $T_X := \Delta_{G,\overline{X}}A$, $\widehat{T}_X := \overline{T}_XT_X$, $\mathbb{N}_n := \{X \in \mathbb{C}^{n \times n} : X \text{ is nonsintular}\}$ and $\mathbb{H}_n := \{X \in \mathbb{C}^{n \times n} : X^H = X\}$.

2 Verification theory

We firstly consider computing an interval matrix X containing a solution X_* of $\mathcal{R}(X) = 0$. Verifying $X_* = X_+$ and the uniqueness will be discussed later. Let $X_a \in \mathbb{H}_n$ be a numerical solution of $\mathcal{R}(X) = 0$ such that $I + G\overline{X}_a \in \mathbb{N}_n$. The Fréchet derivative $\mathcal{R}'_{X_a}(E)$ of \mathcal{R} at X_a applied to the matrix E can be written as $\mathcal{R}'_{X_a}(E) = E - T^H_{X_a}\overline{E}T_{X_a}$. If $\mathcal{R}'_{X_a}(E)$ is invertible, we can define the Newton operator $\mathcal{N}(X) := X - (\mathcal{R}'_{X_a})^{-1}(\mathcal{R}(X))$, and $\mathcal{N}(X) = X$ is a fixed point equation for X. For computing X, we thus verify the invertibility of $\mathcal{R}'_{X_a}(E)$ and inclusion $\{\mathcal{N}(X) : X \in \mathcal{N}(X) : X \in \mathcal{N}(X)$

 $\langle X_a, \Theta \rangle \} \subseteq \langle X_a, \Theta \rangle$ for given $\Theta \in \mathbb{R}^{n \times n}$ with $\Theta > 0$. If these are true, the Brouwer's fixed point theorem implies $X_* \in \langle X_a, \Theta \rangle$, so that $X_* = \mathcal{N}(X_*) \in \{\mathcal{N}(X) : X \in \langle X_a, \Theta \rangle \}$. Hence, an interval matrix including $\{\mathcal{N}(X) : X \in \langle X_a, \Theta \rangle \}$ can be regarded as X.

We verify the invertibility of $\mathcal{R}'_{X_a}(E)$ by the following idea: It is invertible if and only if there uniquely exists $E \in \mathbb{C}^{n \times n}$ such that $\mathcal{R}'_{X_a}(E) = M$ for arbitrarily given $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$. In view of [1, Lemma 2.2], we can prove the existence and uniqueness if $\rho(\widehat{T}_{X_a}) < 1$. From [1, Theorem 2.1], we have $\rho(\widehat{T}_{X_a}) < 1$. Therefore, if X_a is not too far from X_+ , we can expect $\rho(\widehat{T}_{X_a}) < 1$.

Lemma 1 If $X_a \in \mathbb{H}_n$, $\widehat{\mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ and $v \in \mathbb{R}^n$ satisfy $I + G\overline{X}_a \in \mathbb{N}_n$, $\widehat{\mathcal{T}} \geq |\widehat{T}_{X_a}|$, $\widehat{\mathcal{T}}^T v \leq \lambda v$, $\lambda < 1$ and v > 0, then the above $\mathcal{R}'_{X_a}(E)$ is invertible.

We verify the inclusion $\{\mathcal{N}(X): X \in \langle X_a, \Theta \rangle\}$ $\subseteq \langle X_a, \Theta \rangle$ by computing a superset of $\{\mathcal{N}(X): X \in \langle X_a, \Theta \rangle\}$. The superset can be computed by the following idea: The equality $\mathcal{N}(X) = X - (\mathcal{R}'_{X_a})^{-1}(\mathcal{R}(X))$ is equivalent to $\mathcal{R}'_{X_a}(\mathcal{N}(X)) = \mathcal{R}'_{X_a}(X) - \mathcal{R}(X)$. Thus, $\{\mathcal{N}(X): X \in \langle X_a, \Theta \rangle\}$ is the set of all solutions to the parameterized equation $\mathcal{R}'_{X_a}(N_X) = \mathcal{R}'_{X_a}(X) - \mathcal{R}(X)$, where $N_X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ is unknown and $X \in \langle X_a, \Theta \rangle$ is the parameter. Hence, the superset can be obtained by enclosing the solution set. The solution set can be enclosed with only $\mathcal{O}(n^3)$ operations.

Lemma 2 Let $\mathcal{N}(X)$ be as the above, X_a , $\widehat{\mathcal{T}}$, λ and v be as in Lemma 1, and $\Theta \in \mathbb{R}^{n \times n}$ with $\Theta > 0$ be given. With all the assumptions in Lemma 1, suppose $I + G\overline{X} \in \mathbb{N}_n$, $\forall X \in \langle X_a, \Theta \rangle$, and $J, \Gamma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ satisfy $J \geq |\mathcal{R}(X_a) + T_{X_a}^H \overline{\mathcal{R}(X_a)} T_{X_a}|$ and $\Gamma \geq |\Delta_{G,\overline{X}}G|$, $\forall X \in \langle X_a, \Theta \rangle$. Define $K := |T_{X_a}|^T \Theta \Gamma \Theta |T_{X_a}| + \widehat{\mathcal{T}}^T \Theta \Gamma \Theta |\widehat{\mathcal{T}}$, $\sigma := \|(J + K)./(vv^T)\|$ and $\Omega := J + K + (\sigma \lambda^2/(1 - \lambda^2))vv^T$. Then, $\{\mathcal{N}(X) : X \in \langle X_a, \Theta \rangle\} \subseteq \langle X_a, \Omega \rangle$.

Lemmas 1 and 2 yield a theory for enclosing a solution X_* to $\mathcal{R}(X) = 0$.

Lemma 3 Under the conditions in Lemma 2, let X_a be as in Lemma 1, Θ and Ω be as in

Lemma 2, $\Omega_S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ be given and X_* be a solution to $\mathcal{R}(X) = 0$. If $\Omega \leq \Omega_S \leq \Theta$, then $\langle X_a, \Omega_S \rangle \ni X_*$.

We finally establish a theory for verifying $X_*^H = X_*$ and the uniqueness. If $X_*^H = X_*$ is proved, we can narrow the enclosure such that $X_* \in \langle X_a, S \rangle$, where $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ is defined by $S_{ij} = \min((\Omega_S)_{ij}, (\Omega_S)_{ji})$. We can verify $X_* \succ 0$ by checking $X \succ 0$, $\forall X \in \mathbb{H}_n \cap \langle X_a, S \rangle$ via a known algorithm.

Theorem 1 Let X_a be as in Lemma 1, Ω_S and X_* be as in Lemma 3, and S be as the above. With all the assumption in Lemma 3, suppose $\widehat{\mathcal{T}}_S \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda_S \in \mathbb{R}$ and $v_S \in \mathbb{R}^n$ satisfy $\widehat{\mathcal{T}}_S \geq |\widehat{T}_X|$, $\forall X \in \langle X_a, \Omega_S \rangle$, $\widehat{\mathcal{T}}_S v_S \leq \lambda_S v_S$, $\lambda_S < 1$ and $v_S > 0$. Then, $X_*^H = X_*$ and X_* is the unique solution contained in $\langle X_a, \Omega_S \rangle$. Moreover, $X_* \in \langle X_a, S \rangle$.

Numerical results will be given at the talk.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number JP16K05270.

- [1] M.M. Lin and C.-Y. Chiang, An accelerated technique for solving one type of discrete-time algebraic Riccati equations, J. Comp. Appl. Math., 338 (2018), 91–110.
- [2] W. Luther, W. Otten and H. Traczinski, Verified calculation of the solution of continuous- and discrete time algebraic Riccati equation, Schriftenreihe des Fachbereichs Mathematik der Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, SM-DU-422, 1998.
- [3] W. Luther and W. Otten, Verified calculation of the solution of algebraic Riccati equation, in: T. Csendes (Ed.), Developments in Reliable Computing, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp. 105–118, 1999.
- [4] S. Miyajima, Fast verified computation for stabilizing solutions of discrete-time algebraic Riccati equations, J. Comp. Appl. Math., 319 (2017), 352–364.

新しいタイプの2次と3次IMEX RK公式

大野 博1

1 茨城大学

e-mail: hiroshi.ono.siam@vc.ibaraki.ac.jp

1 はじめに

常微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}(t)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t)) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}(t)), & t \in [t_0, T], \\ \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0, \end{cases}$$

の数値解法を考える. ただし, 関数 f(y) と g(y) は, $\mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ という写像で必要な所まで滑らかとする. f は non-stiff , g は stiff 部分を表す. このような微分方程式系の多くは, 偏微分方程式を空間方向について離散化し, 時間方向の常微分方程式に変換したときに現れる [4].

研究の背景を説明するために次の定義1を与 える.

定義 1 3 つの数字の組 (\hat{s}, \bar{s}, p) を次のように 定義する. \hat{s} は陰的解法部分の段数, \bar{s} は陽的解法部分の段数, \bar{s} は陽的解法部分の段数, p は数値解法全体の次数を表す.

1997 年から、IMEX RK 法 (implicit-explicit Runge-Kutta methods) の陰的解法部分が A-安 定やL-安定性をもつ公式が提案された. U.Ascher らが, forward Euler 法と backward Euler 法を 組み合わせた forward-backward Euler(1,1,1) 公式や修正オイラー法と1段 midpoint 公式を 組み合わせた IMEX-midpoint(1,2,2) 公式など を提案した [1]. S.Boscarino らは, implicitly stiffly accurate(ISA) > globally stiffly accurate(GSA) な (4,4,2) 公式と (4,5,2) 公式と (7,8,3) 公式を提案した [2]. G.Izzo らは、A-安定や L-安 定な (6,6,3) 公式と (8,8,4) 公式を提案した [4]. 我々は, 国際会議 ANODE 2018で, IMEX RK 法の絶対安定領域の陰的部分を A-安定に固定 したときの陽的部分の絶対安定領域を正確に描 く方法を提案し、(1,3,2) 公式と (2,4,3) 公式の 絶対安定領域の面積とパラメータの関係を示し た[5].

ここでの目的は, 上記の (1,3,2) 公式と (2,4,3) 公式について, 精度がよい公式を決定する.

2 IMEX RK法

N を自然数, ステップ幅を $h=(T-t_0)/N$ としたとき, 各時刻は $t_i=t_0+ih,\ i=0,1,\cdots,N$ とかける. s 段 IMEX RK 法は次のように定義する [2,4].

$$Y_{i} = \mathbf{y}_{n} + h \sum_{j=1}^{i-1} \overline{a}_{ij} F_{j} + h \sum_{j=1}^{i} a_{ij} G_{j},$$

$$i = 1, 2, \cdots, s \qquad (2)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_{n} + h \sum_{j=1}^{s} \overline{b}_{j} F_{j} + h \sum_{j=1}^{s} b_{j} G_{j}.$$

ただし、 $F_j = \boldsymbol{f}(Y_j)$ 、 $G_j = \boldsymbol{g}(Y_j)$ とする [2, 3, 4].

3 IMEX RK 法の絶対安定領域

テスト方程式を次のようにする.

$$y' = \lambda_0 y + \lambda_1 y, \quad \lambda_0, \ \lambda_1 \in \mathbb{C}.$$
 (3)

上記のテスト方程式を(2) に適用すると, 次の安定性関数 $R(z_0, z_1)$ が得られる.

$$y_{n+1} = R(z_0, z_1)y_n.$$
 (4)

$$R(z_0, z_1)$$

$$= 1 + (z_0 \overline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}} + z_1 \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}) (\mathbf{I} - z_0 \overline{A} - z_1 A)^{-1} \mathbf{e}$$

$$= \frac{P(z_0, z_1)}{(1 - \lambda z_1)^s}.$$

ただし, $P(z_0, z_1)$ は z_0 と z_1 の多項式である. $z_0 = h\lambda_0$, $z_1 = h\lambda_1$ である. 上記の安定性関数から IMEX RK 法の絶対安定領域が定義できる.

定義 2 *IMEX RK* 法の絶対安定領域を次のように定義する.

$$\mathcal{A} = \{(z_0, z_1) \in \mathbb{C}^2 : |R(z_0, z_1)| \le 1\}.$$

陰的部分の絶対安定領域を A-安定や L-安定に 固定して, 陽的部分の絶対安定領域を見るため に, 次の定義を与える. 定義 3 次の領域 S が空集合でない $IMEX\ RK$ 法を A-安定な $IMEX\ RK$ 法とよぶ.

$$\mathcal{S} = \left\{ z_0 \in \mathbb{C} : |R(z_0, z_1)| \leq 1 \text{ for } \forall z_1 \in \mathbb{C}^- \right\}.$$

また, A-安定な IMEX RK 法に次の条件を付け加えたものを, L-安定な IMEX RK法とよぶ.

$$\lim_{\Re(z_1) \le 0, |z_1| \to \infty} |R(z_0, z_1)| = 0.$$

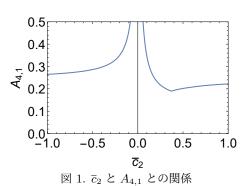
4 (2,4,3) IMEX RK 公式

A-安定な (2,4,3) IMEX RK 公式を以下に示す [5].

$$\begin{array}{rcl} Y_1 & = & \boldsymbol{y}_n \\ Y_2 & = & \boldsymbol{y}_n + h \overline{c}_2 \boldsymbol{f}(Y_1) \\ Y_3 & = & \boldsymbol{y}_n + h \left(\left(\frac{3 + \sqrt{3}}{6} - \overline{a}_{3,2} \right) \boldsymbol{f}(Y_1) \right. \\ & & + \overline{a}_{3,2} \boldsymbol{f}(Y_2) + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \boldsymbol{g}(Y_3) \right) \\ Y_4 & = & \boldsymbol{y}_n + h \left(\left(\overline{a}_{3,2} - \frac{3 - \sqrt{3}}{6} \right) \boldsymbol{f}(Y_1) \right. \\ & & - \overline{a}_{3,2} \boldsymbol{f}(Y_2) + \frac{3 - \sqrt{3}}{3} \boldsymbol{f}(Y_3) \\ & & - \frac{\sqrt{3}}{3} \boldsymbol{g}(Y_3) + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \boldsymbol{g}(Y_4) \right) \\ \boldsymbol{y}_{n+1} & = & \boldsymbol{y}_n + \frac{h}{2} \left(\boldsymbol{f}(Y_3) + \boldsymbol{f}(Y_4) + \boldsymbol{g}(Y_3) + \boldsymbol{g}(Y_4) \right). \end{array}$$

2 つの自由パラメータ $\bar{a}_{3,2}$, \bar{c}_2 がある. A-安定な公式の絶対安定領域 S が広くなる条件 $\bar{a}_{3,2}\bar{c}_2=0.156$ を使う.

このときの主要離散化誤差の大きさ $A_{4,1}$ と \overline{c}_2 との関係を図1に示す.



5 数值例

図 1 より、離散化誤差の大きさが小さくなるのが $\bar{c}_2=0.3$ 付近であることを以下の数値例を使って確かめる.

例 1 (Burgers equation) $\nu = 0.0001 \, \text{と} \nu = 0.1 \, \text{の外力が働くバーガース方程式を考える [6].}$

$$u_t = \nu u_{xx} + uu_x + \varphi(t, x),$$

$$-1 \le x \le 1, \ 0 \le t \le 2.$$

ただし,

$$\varphi(t,x) = r(x)\sin t,$$

$$r(t) = \begin{cases} 0, & -1 \le x \le -\frac{1}{3} \\ 3(x+\frac{1}{3}), & -\frac{1}{3} \le x \le 0 \\ \frac{3}{2}(\frac{2}{3}-x), & 0 \le x \le \frac{2}{3} \\ 0, & \frac{2}{3} \le x \le 1 \end{cases}.$$

とする. 初期条件は次のものを使う

$$u(0,x) = \sin \pi(x+1).$$

謝辞 茨城大学には、この研究をするために必要な文献を提供してもらい、Mathematicaを使わせてもらったことに感謝する.

- [1] U.Ascher, S.Ruuth, B.Wetton: Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential euations, Appl. Numer. Math. 25 (1997), 151–167.
- [2] S.Boscarino, L.Pareschi: On the asymptotic properties of IMEX Runge-Kutta schemes for hyperbolic balance laws, J. Comp. Appl. Math. 316 (2017), 60–73.
- [3] J.C.Butcher: Numerical methods for ordinary differential equations, John Wiely & Sons, 2003.
- [4] G.Izzo, Z.Jackiewicz: Highly stable implicit-explicit Runge-Kutta methods, Appl. Numer. Math. 113 (2017), 71–92.
- [5] H.Ōno: Stability properties for implicit-explicit Runge-Kutta methods, Auckland Numerical Ordinary Differential Equations Conference, 2018.
- [6] B.Soleimani, R.Weiner: Superconvergent IMEX peer methods, Appl. Numer. Math. 130 (2018), 70–85.

シミュレーションプログラムの微分可能化と自動微分したプログラムの動 作確認

堀端 康善

法政大学 理工学部

e-mail: horibata@hosei.ac.jp

1 はじめに

ソースプログラムを微分し、タンジェントプログラムとアジョイントプログラムを生成する。 微分には、自動微分ツール TAPENADE[1] を 使用する。

気象データ同化を、大規模非線形最適化問題として定式化すると、最適化アリゴリズムで探索のたびに目的関数の勾配を必要になる。アジョイントプログラムを利用すると、この勾配を高速に計算できる。しかし、生成したアジョイントプログラムを使い、数値実験したが、最適化の結果は決して満足できるものではなかった[2]。アジョイントプログラムが不完全であったためと推測する。

本論文は、ソースプログラムを微分するときの問題点を改善し、内積テストを行い[1]、生成したプログラムの動作確認を行う。

2 ソースプログラム

ソースプログラムは大気の流れをシミュレーションする。大気速度,圧力,温位,水蒸気,雨粒,雲粒,サブグリッドスケールの運動エネルギーについての時間発展型の支配方程式を差分法で積分する[3]。

ダウンバーストのシミュレーション結果を示す。シミュレーション領域は両水平方向に $20 \mathrm{km}$, 鉛直方向に $10 \mathrm{km}$ である。簡単のため,初期状態は等温位($\theta_0=300K$)であり,相対湿度は 0,無風であるとする。雨粒の球状に分布させ,ダウンバーストを発生させる。6 分間にわたり,大気の運動をシミュレーションする。格子間隔は $\Delta x=\Delta y=1250 m$, $\Delta z=625 m$,時間刻み幅は $\Delta t=5 s$ とする。

図 1 は、ダウンバースト発生 6 分後の大気速度である。雨粒の蒸発により、周囲の大気から熱が奪われ、冷たくなった空気は重くなり、下降気流が発生する。4 分後には、最大 21 m/s にもなる。下降気流は地面に当たると、水平方向に拡がる。その速度は 6 分後には 17 m/s になる。

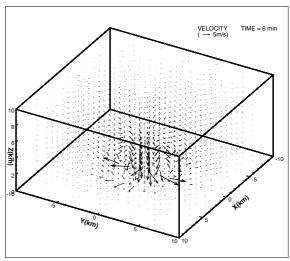


図 1. ダウンバースト発生 6 分後の大気速度

3 微分と動作確認

3.1 微分可能化

ソースプログラムには次のような実行文がある。

$$a = b ** 0.525$$

これを、タンジェントモードで自動微分すると、次の実行文が生成される。

$$ad = 0.525 bd/b ** 0.475$$

したがって、x が 0 のとき、ゼロ除算が起きる。 [2] では、ゼロ除算を回避するために、ラグランジュ補間を用いる。3 次の多項式で 4 点を補間し、区間 $0 \le x \le 1.5 \times 10^{-2}$ 全体を近似する。 x の最大値は約 1.5×10^{-2} である。

本論文では、エルミート補間を使いx=0の近傍のみ近似する。次の2点の間を補間する。

$$x_1 = 0.0$$
 $x_2 = 10^{-4}$

各点での関数値には、関数 $x^{0.525}$ の値を使用する。 すなわち

$$y_1 = 0.0$$
 $y_2 = x_2^{0.525}$

 x_1 での微分係数 y_1' を 0 とし, x_2 での微分係数 y_2' には,関数 $x^{0.525}$ の微分係数値を使う。

$$y_1' = 0.0$$
 $y_2' = 0.525x_2^{-0.475}$

3次の多項式で、これらの関数値と微分係数値を補間する。図 2 は、関数 $x^{0.525}$ とエルミート補間で近似した場合を比較する。この近似を使っても、関数 $x^{0.525}$ を使った場合に比較して、シミュレーション結果にほとんど影響しない。

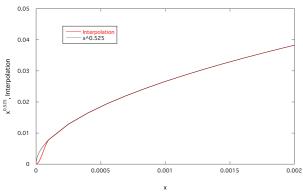


図 2. 関数 $x^{0.525}$ の一部をエルミート補間で近似

3.2 微分したプログラムの動作確認

ベクトル独立変数 $X \in R^m$ が与えられると、ソースプログラムはベクトル関数 $Y = F(X) \in R^l$ を計算する。自動微分で生成したプログラムは、独立変数 X が与えられたとき、関数 F の微分係数を計算する。タンジェントプログラムは、入力 \dot{X} に対し、 $\dot{Y} = F'(X) \times \dot{X}$ を出力する。アジョイントプログラムは、入力 \bar{Y} に対し、 $\bar{X} = F'^*(X) \times \dot{Y}$ を出力する。ここで、F'(X) は関数 F(X) のヤコビ行列である。スカラー変数 h の関数 g を

$$q(h) = F(X + h\dot{X})$$

と定義すると, 次式が得られる。

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{F(X + \epsilon \dot{X}) - F(X)}{\epsilon} = g'(0)$$
$$= F'(X) \times \dot{X} = \dot{Y}$$
(1)

したがって、プログラム F を X と $X + \epsilon \dot{X}$ について 2回実行することにより、タンジェントプログラムの出力 \dot{Y} を近似できる。

 \dot{Y} をアジョイントプログラムの入力 \dot{Y} にすると、次式が得られる。

$$(\bar{X} \cdot \dot{X}) = (F'^*(X) \times \dot{Y} \cdot \dot{X})$$

$$= \dot{Y}^* \times F'(X) \times \dot{X}$$

$$= \dot{Y}^* \times \dot{Y} = (\dot{Y} \cdot \dot{Y}) \qquad (2)$$

2 で紹介した計算結果について、3 種類の / ルムを計算する。X は大気速度,圧力,温位,水蒸気,雨粒,雲粒,渦粘性係数の初期値,Y はそれらの変数の 6 分後の値である。そして,m=l=37632 である。計算結果を表 1 に示す。タンジェントノルム $(\dot{Y}\cdot\dot{Y})$ とアジョイントノルム $(\dot{X}\cdot\dot{X})$ は 15 桁すべてが一致する。差分近似 $(F(X+\epsilon\dot{X})-F(X))/\epsilon$ のノルムはタンジェントノルムと最初の 6 桁まで一致する。

表 1.3 種類のノルムの比較 ($\epsilon = 10^{-10}$)

$F(X + \epsilon \dot{X}) - F(X))/\epsilon$	0.153194571523625D+21
のノルム	
$(\dot{Y}\cdot\dot{Y})$	0.153194435697253D+21
$(\bar{X}\cdot\dot{X})$	0.153194435697253D+21

4 おわりに

ソースプログラムの微分可能性を向上させ、 微分したプログラムについて内積テストを行っ た。タンジェントノルムとアジョイントノルム は完全に一致、差分近似ノルムは最初の6桁が 一致する。生成したプログラムは正確である。

- [1] L. Hascoet, V. Pascual, TAPENADE 2.1 user's guide, INRIA, France, 2004.
- [2] Y. Horibata, Meteorological data assimilation using an adjoint program generated by automatic differentiation, Proceedings of the 7th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS Congress 2016), June 5-10, 2016, Crete Island, Greece, pp. 8275-8282, 2016.
- [3] Y. Horibata, H. Oikawa, Numerical Simulation of Downbursts Using a Terrain-following Coordinate Transformation, Proc. of the Second European Computational Fluid Dynamics Conference, Stuttgart, Germany, pp. 1002-1009, 1994.

筋肉における確率的挙動を示す分子モータと連続体の力学的連成の数理について

鷲尾 巧

所属 東京大学 フューチャーセンター推進機構, (株) UT-Heart 研究所 e-mail: washio@ut-heart.com

1 概要

筋収縮はサルコメアと呼ばれる長さ2µm程度の構成単位の中に含まれる太いフィラメントと細いフィラメント間の滑り運動により実現されている.この滑り運動は熱揺らぎのもとで確率的に動作する分子モータの10nm程度のパワーストローク運動の繰り返しによる.ここでは、分子モータのパワーストローク運動とサルコメアの運動、引いてはよりマクロな連続体としての筋肉の運動を結び付ける計算手法について考察する.

2 分子モータとサルコメアの連成モデル

図1に分子モータと半サルコメアモデルを示す。 サルコメアに対しては対称性を仮定してその半分のモデルを扱うことにする。分子モータに関してはレバーアームのストローク長 $x_{\alpha,\beta}$ とロッドの伸び $\xi_{\alpha,\beta}$ (α :モータ番号, β :フィラメント番号)は,熱揺らぎによるランダム力Rのもと細いフィラメントに結合している際には

$$\begin{cases} \gamma_{X} \dot{x}_{\alpha,\beta} + \frac{\partial \varphi_{PS}}{\partial x} (x_{\alpha,\beta}) + \frac{dW_{\text{rod}}}{d\xi} (\xi_{\alpha,\beta}) - R_{X,\alpha,\beta} = 0 \\ \xi_{\alpha,\beta} - t_{A,\alpha,\beta} \xi_{\alpha,\beta} - x_{\alpha,\beta} + z - t_{A,\alpha,\beta} z = 0 \end{cases}$$
(1)

に、結合していない際には

$$\begin{cases} x_{\alpha,\beta} = 0 \\ \gamma_D \,\dot{\xi}_{\alpha,\beta} + \frac{dW_{\text{rod}}}{d\xi} (\xi_{\alpha,\beta}) - R_{D,\alpha,\beta} = 0 \end{cases}$$
 (2)

で表されるランジュバン方程式に従うものとする. ただしランダム力は以下の条件を満たす.

$$\begin{cases} \langle {}^{t}R_{\Theta,\alpha,\beta} \rangle = 0 \\ \langle {}^{t}R_{\Theta,\alpha,\beta}, {}^{t'}R_{\Theta,\alpha,\beta} \rangle = \sqrt{2\gamma_{\Theta}k_{B}T} {}^{t-t'}\delta \end{cases}, \Theta = X, D \qquad (3)$$

ここで k_B はボルツマン定数、Tは温度である。 φ_{PS} はパワーストロークを引き起こす自由エネルギー関数であり、 W_{rod} はロッドのバネ部のひずみエネルギーである。 $t_{A,\alpha,\beta}$ はヘッドが結合したときの時間で、(1)式2行目の制約条件はフィラメントの滑り(zの変化)に依存してストローク長 $x_{\alpha,\beta}$ とロッドの伸び $\xi_{\alpha,\beta}$ が変化することを示している。簡単のため半サルコメアモデルがバネ定数 K_Z のバネに接続されているとすると以下のつり合い式が成立する。

$$\gamma_Z \, \dot{z} + K_Z \, z - T_{\text{act}} = 0 \tag{4}$$

ここで T_{act} は結合した分子モータが生成するアクティブな張力であり、 \overline{SA} をフィラメントー本あたりの断面積とするとき以下で与えられる.

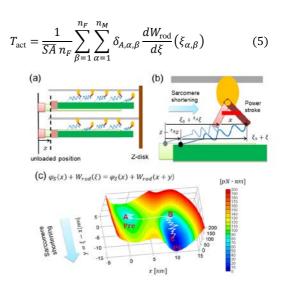


図1 半サルコメアモデル(a), 分子モータモデル(b), ポテンシャル関数(c)

2 多重時間ステップカップリング法

筋肉の運動を解析する際には、前述のサルコメアモデルを線維方向に沿って埋め込みマクロな有限要素法と連成させて解く必要がある。このような大規模な計算では並列化が必須である。ランジュバン方程式(1)、(2)は通常 Δt =1ns 程度の時間刻みを必要とするため、マクロな連続体問題も同じ時間刻み幅で解いた場合には同期や通信によるオーバーヘッドが計算時間のほとんどを占めるようになってしまう。そこで連続体問題はより粗い時間刻み $\Delta T = n\Delta t$ で安定に解く解法が必要となる。ここでは簡単のため式(4)で表されるサルコメア運動方程式との連成問題の解法を考える。

時刻Tから時刻 $T + \Delta T$ への進み方について考える。まずは、滑りZについて、以下のように外挿してランジュバン方程式(1)、(2)を陽解法で解く。

 $^{T+k\Delta t}z = ^{T}z + k\Delta t^{T}\dot{z}$, $k = 1, \dots, n$

その後に仮のアクティブ応力 $^{T,\Delta T}ar{T}_{act}$ を以下のように定める.

$${}^{T,\Delta T}\overline{T}_{\rm act} = \frac{1}{\overline{SA} \cdot n \cdot n_F} \sum_{k,\alpha,\beta} {}^{T+k\Delta t} \delta_{A,\alpha,\beta} \frac{dW_{\rm rod}}{d\xi} ({}^{T+k\Delta t} \xi_{\alpha,\beta})$$

さらにアクティブ剛性 $^{T,\Delta T}K_{\rm act}$ を以下のように 定める.ここで $k_{A,\alpha,\beta}$ は分子モータが結合した ステップ番号で,時刻Tより以前に結合している 場合にはゼロを代入する.

$$\begin{split} T_{,\Delta T} K_{\rm act} &= \frac{2}{\overline{SA} \cdot n^2 \cdot n_F} \sum_{k,\alpha,\beta} T_{+k\Delta t} \delta_{A,\alpha,\beta} \big(k \\ &- k_{A,\alpha,\beta} \big) \frac{d^2 W_{\rm rod}}{d\xi^2} \big(T_{+k\Delta t} \xi_{\alpha,\beta} \big) \end{split}$$

上記の剛性を利用して仮のアクティブ応力を 以下のように時刻 $T + \Delta T$ での滑り速度で修正し たものを真のアクティブ応力として式(4)を陰解法 で解く.

$$^{T+\Delta T}T_{\rm act} = ^{T,\Delta T}\bar{T}_{\rm act} + \frac{\Delta T}{2}^{T,\Delta T}K_{\rm act}(^{T+\Delta T}\dot{z} - ^{T}\dot{z})$$

図2に上記アルゴリズムを適用してサルコメアの自励振動を再現した例を示す.ここでは, $\Delta T = \Delta t = 1$ nsと同じ時間ステップ幅を適用した場合(a)と大きく異なるステップ幅 $\Delta T = 5 \times 10^6 \Delta t = 5$ msを適用した場合(b)を比較している.フィラメント数 n_F が小さい場合は,ランダム力の影響で振動が不規則になり,両者の解に食い違いが現れるが, ΔT が大きな場合でも振動の特性は捉えられている.フィラメント数 n_F が大きくなると振動が規則的になり,両者の解は ms オーダーの比較ではよく一致している.このような解法を実際の心臓の拍動に適用した例については参考文献[1]をみられたい.

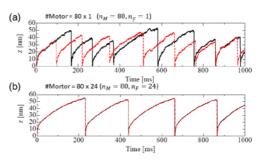


図 2 サルコメア自励振動のシミュレーション結果 (a) n_F =1, n_M =80 (b) n_F =24, n_M =80 黒: $\Delta T=\Delta t=1$ ns, 黒: $\Delta T=5\times 10^6 \Delta t=5$ ms

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

 T. Washio et al., Coupling Langevin dynamics with continuum mechanics: Exposing the role of sarcomere stretch activation mechanisms to cardiac function, Front. Physiol. 9, 333 (2018).

圧力 Poisson 問題と対応する Stokes 問題の境界条件

松井 一徳

金沢大学 自然科学研究科 数物科学専攻 e-mail: first-lucky@stu.kanazawa-u.ac.jp

1 概要

MAC 法や射影法,粒子法などの非圧縮粘性 流体に対する数値計算解法では,圧力を計算す る技法として非圧縮性の代わりに圧力 Poisson 方程式が用いられている.圧力 Poisson 方程式 を解くためには適当な境界条件を課す必要があ り,本来の問題の方程式からすると多過ぎる境 界条件が課されることとなる.本講演では,定 常 Stokes 問題を用いてこの問題について調べ た結果を数値計算例と合わせて述べる.

2 Stokes 問題と圧力 Poisson 問題

 Ω を \mathbb{R}^3 内の有界開領域で境界 Γ はリプシッツ連続とする. また, Γ_1 を Γ の開部分集合, $\Gamma_2 := \Gamma \setminus \Gamma_1$ で $|\Gamma_1|, |\Gamma_2| > 0$ を満たすものとする. (ただし,病的なものは考えないものとする.) 次の Stokes 問題について考える.

$$\begin{cases}
-\Delta u^S + \nabla p^S = F & \text{in } \Omega, \\
\text{div } u^S = 0 & \text{in } \Omega, \\
+ \text{ boundary condition for } u^S \text{ and } p^S.
\end{cases}$$
(S)

ここで $F \in L^2(\Omega)^3$, $\operatorname{div} F \in L^2(\Omega)$ とする. 第一式の発散を取ると、

$$\operatorname{div} F = -\Delta(\operatorname{div} u^S) + \Delta p^S = \Delta p^S.$$

を得る。この方程式は圧力 Poisson 方程式と呼ばれる [1,2]. 圧力 Poisson 方程式を用いて,次の問題を考えることができる。

$$\begin{cases}
-\Delta u^{PP} - \nabla(\operatorname{div} u^{PP}) + \nabla p^{PP} = F & \text{in } \Omega, \\
-\Delta p = -\operatorname{div} F & \text{in } \Omega, \\
u^{PP} = 0, & \frac{\partial p^{PP}}{\partial \nu} = g^b & \text{on } \Gamma_1, \\
T_{\nu}(u^{PP}, p^{PP}) = t^b, & p^{PP} = p^b & \text{on } \Gamma_2, \\
\end{cases}$$
(PP)

ここで ν は境界の単位法線ベクトルを表しており, $g^b \in L^2(\Gamma_1), t^b \in H^1(\Omega)^3, p^b \in H^1(\Omega)$,

$$T_{\nu}(u^{PP}, p^{PP})_{i}$$

$$= \sum_{j=1}^{3} \left(\frac{\partial u_{i}^{PP}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}^{PP}}{\partial x_{i}} \right) \nu_{j} - p^{PP} \nu_{i}$$

(i = 1, 2, 3) とする.

また,第一式の $-\nabla(\operatorname{div} u^{PP})$ は応力境界条件 を課すために加えた項である. この問題 (PP) を 圧力 Poisson 問題と呼ぶこととする. この問題 はまず圧力ポアソン方程式を解くことで $p^{PP} \in$ $H^1(\Omega)$ をまず得ることができ、得た p^{PP} を用 いて第一式を u^{PP} についてのポアソン方程式 と見ることで $u^{PP} \in H^1(\Omega)^3$ を得ることができ る. (S) の代わりに (PP) を解くというアイデ アは、Navier-Stokes 方程式の圧力の数値解を 得る際に便利なために、MAC 法や射影法、粒 子法などでよく使われている. もちろん一般に $\operatorname{div} u^{PP}$ は 0 ではないので (S) の解とはならな いのたが、工学などでは物理的に自然な境界条 件を課すために問題ないものとして扱われてい る. 本講演では、(S) と (PP) との比較からそ のことについて観察する.

3 応力境界条件

(S) の境界条件として

$$u^S = 0$$
 on Γ_1 ,
 $T_{\nu}(u^S, p^S) = t^b$ on Γ_2 (1)

を課すと、解 $(u^S, p^S) \in H^1(\Omega)^3 \times L^2(\Omega)$ が一意に存在することが知られている。これらの解に対して次が成り立つことを示した。

定理 1. $u^S \in H^2(\Omega)^3, p^S \in H^2(\Omega)$ を仮定すると、次を満たす定数 $c = c(\Omega)$ が存在する.

$$||u^{S} - u^{PP}||_{H^{1}(\Omega)^{3}} + ||p^{S} - p^{PP}||_{H^{1}(\Omega)}$$

$$\leq c \left(\left\| \frac{\partial p^{S}}{\partial \nu} - g^{b} \right\|_{L^{2}(\Gamma_{1})} + ||p^{S} - p^{b}||_{H^{1/2}(\Gamma_{2})} \right).$$

このことから g^b と p^b をうまく取った場合には,(PP) の解は (S)+(1) の解の良い近似になっていると言える.

4 圧力に対する Dirichlet 境界条件

(S) の境界条件として

$$u^S = 0$$
 on Γ_1 ,
 $u^S \times \nu = 0$, $p^S = p^0$ on Γ_2 (2)

を課すと、 Γ が $C^{1,1}$ 級または Ω が凸多面体のとき、解 $(u^S, p^S) \in H^1(\Omega)^3 \times L^2(\Omega)$ が一意に存在することが知られている [3]. この境界条件は血管内での血流を取り扱う際に自然な境界条件の 1 つである [4]. これらの解に対して次が成り立つことを示した.

定理 2. $u^S \in H^2(\Omega)^3, p^S \in H^2(\Omega)$ を仮定すると、次を満たす定数 $c = c(\Omega)$ が存在する.

$$\begin{split} & \|u^{PP} - u^S\|_{H^1(\Omega)^3} \\ \leq c \left(\left\| g^b - \frac{\partial p^S}{\partial \nu} \right\|_{L^2(\Gamma_1)} + \|t^b - T^S_\nu\|_{H^{1/2}(\Gamma_2)^3} \right). \end{split}$$

ただし $T_{\nu}^{S} = T_{\nu}(u^{S}, p^{S})$ とする.

5 数值計算例

具体的に Stokes 問題と圧力 Poisson 問題の間にどれほどの差があるのかを見るために、Y字型領域 (図 1) で, Γ_0 では固定境界条件 $u^S=0$ を課し Γ_1 から Hagen—Poiseuille 流れで流入し Γ_2 と Γ_3 から traction-free 境界条件 $T_{\nu}(u^S,p^S)=0$ で流出するような流れを考える.この境界条件の下でまず Stokes 問題を P2-P1 要素で解き,得られた圧力解を p^S とする.新たに次の境界条件

$$\frac{\partial p^{PP}}{\partial \nu} = 0 \text{ on } \Gamma_0, \quad p^{PP} = \frac{1}{|\Gamma_i|} \int_{\Gamma_i} p^S \text{ on } \Gamma_i,$$

(i=1,2,3) を加えて、P1-P1 要素で圧力 Poisson 問題を解く.講演の中で FreeFem++[5] を用いて得た結果 (図 2, 3) についての考察を述べる.

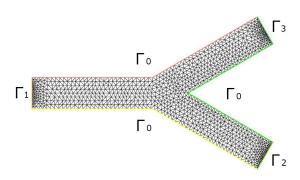


図 1. Y 字型領域

参考文献

[1] K. Matsui and A. Muntean. Asymptotic analysis of an ε -Stokes problem connecting Stokes and pressure-

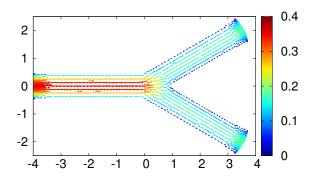


図 2. Stokes 問題の流速解 (色は流速の大きさを表している)

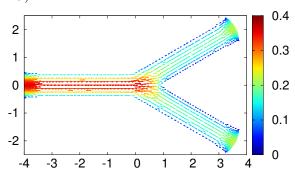


図 3. 圧力 Poisson 問題の流速解 (色は流速の大きさを表している)

Poisson problems. Accepted for publication in Adv. Math. Sci. Appl. arXiv preprint arXiv:1712.02588, 2017.

- [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. 2: 107–142, 2004.
- [3] C. Conca, F. Murat, and O. Pironneau. The Stokes and Navier-Stokes equations with boundary conditions involving the pressure. *Jpn. J. Math.*, 20(2): 279–318, 1994.
- [4] S. Bertoluzza, V. Chabannes, C. Prud'homme and M. Szopos. Boundary conditions involving pressure for the Stokes problem and applications in computational hemodynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 322:58–80, 2017.
- [5] F. Hecht. New development in FreeFem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4): 251–265, 2012.

剪断流における不変解の高レイノルズ数漸近展開解析

出口 健悟1

1モナシュ大学数学科

e-mail: authors1@e-mailaddress

1 概要

流れ場のレイノルズ数依存性は、流体力学における最大の関心の一つである。例えば剪断流中の乱流場が比較的きれいなスケーリング則をもつことが、Navier-Stokes 方程式を基礎とした数値シミュレーションにより知られている。しかし、その理論的根拠は乏しい。

高レイノルズ数での漸近状態を調べるには、原理的には速度場をレイノルズ数で適当にスケールしてやればよい。しかし、数学的にはこのスケーリングは Navier-Stokes 方程式と整合していなければならない。方程式をリスケールし、微小パラメータを消去する数学的手法として、接合漸近展開が知られている。この方法は古典的ではあるが、非常に煩雑で、乱流状態に対して実行することはほぼ不可能であろう。しかしながら、以下に示すように、比較的単純な構造を持つ不変解に対しては適用することが可能である。剪断流においては不変解の多くは不安定であるが、それらは Navier-Stokes 方程式を力学系と見なした時に相空間内で重要な役割を果たすことが近年指摘されている(1)。

2 二次元進行波解

平面ポアズイユ流に空間二次元の線形不安定が発達することはよく知られており、微小擾乱からの乱流遷移を理解するための理想的な試験場として頻繁に用いられてきた。Orszagによる精密な数値計算法の確立以前に Lin が導出した接合漸近展開の結果^②は、線形中立曲線の極めてよい近似を与える。ここでは接合漸近展開解析の非線形への拡張を行い、有限レイノルズ数で得られた非線形進行波解との比較を行う。

粘性を無視した場合、線形安定性は Rayleigh

方程式で記述出来る。中立波の速度と、背景速度場が一致する臨界層においてこの方程式は確定特異点を持つ。線形臨界層内においては粘性効果を用いて流れ場の特異性を回避出来るが、それは同時に外側での中立波の位相にずれをもたらし、壁での境界条件を満たすことができなくなる。このずれは臨界層で背景速度場が変曲点を持たない限り存在し、そのため平面ポアズイユ流では中立点は単純にRayleigh 方程式から見つけることはできない。Lin は臨界層が壁付近にある場合には位相のずれの影響が小さくなることを見いだし、さらにこのときに中立の漸近解が構成できることを示した。ずれの影響が十分小さければ、それは壁面のすぐ隣に現れる Stokes 層を介して解消できる。

非線形効果は臨界層において最も強く現れ る。それは中立波の振幅が大きくなると粘性効 果を卓越し、Kelvin の猫目渦が形成される。猫 目渦は Eular 方程式の解であり、振幅がそれほ ど大きくない場合には解析解を求めることが できる⁽³⁾。ここで問題となるのは、よく知られ るように Eular 方程式を解くに際し渦度の流 れ関数依存性が自由度として残されることで ある。この自由度は高次の粘性の効果を取り込 んだ上で、可解条件を用いて消去されなければ ならない。流線が閉じている領域では、この条 件は Prandtl-Batchelor の定理と同値になり、 そこでは渦度が一定となる。さらに粘性の効果 で生じる位相のずれが Stokes 層で解消される という接合条件から、レイノルズ数を完全にス ケールアウトした閉じた系が得られる。

得られた漸近解は、振幅がそれほど大きくない時には、Newton 法で得られた進行波解と極めてよい一致をすることが確かめられた⁽⁴⁾。しかしながら、振幅がさらに大きくなると、漸近

解は破綻するようである。これは猫目渦の厚みが増大し、壁面境界層と Rayleigh 領域を介さず直接相互作用するためである。臨界層型の漸近解が破綻しても、有限レイノルズ数で計算された進行波解は存在し続ける。その流れ場には Prandtl-Batchelor 領域を覆うように剥離した境界層が見られ、そのためさらに複雑な局所解析と接合条件が必要となると予想される。興味深いことに、これは二次元乱流シミュレーションで得られる渦構造に酷似している⁽⁵⁾

3 三次元進行波解

三次元の流れ場を考えた時には、さらに面白いことが起こる。臨界層での特異性により増幅された中立波は、レイノルズ応力の形で縦渦を駆動し、それによりさらに背景速度場が変化する。これは中立波から背景速度場へのフィードバック効果を取り込むことが可能であることを意味し、これにより平面クエット流のように基本流が安定であったとしても、中立波の生成が起こりうる。VWI (vortex-wave interaction)と呼ばれるこの漸近解®は、亜臨界遷移を生じる流れの相空間内において層流、乱流アトラクターの間に位置する進行波をよく近似する物。

三次元漸近解がその振幅が大きくなると破綻するという点は、二次元の場合と同様である。破綻が起きた後の有限レイノルズ数での進行波解をみると、やはり平均渦度、速度が一定となる Prandtl-Batchelor 領域が発達し、壁面近傍での境界層と直接相互作用を起こしているように見える。このような流れ場はまさに乱流を特徴づけるものであるが、はたして乱流アトラクターの骨格となりうる進行波解あるいは周期解が存在し、かつその漸近展開解析が可能であるのだろうか?もしそうなら、乱流壁面剪断率のレイノルズ依存性などを理論的に導くことも不可能でないように思える。

3 おわりに

不変解の漸近展開理論は、複雑な流れ場に現れる素過程を最小の仮定を用いて第一原理から導出する、という点においては、ある程度成功しているといえる。 煩雑な漸近展開理論を近似に用いる理由は、それが「真の解との残差が流れ場の全域で小さくなることを、レイノルズ

数が大きいという仮定のみを用いて示すことができる」という点につきる。そのため、モデル方程式系を閉じるための人工的仮定は必要でないし、シミュレーションで得られたデータなども全く利用しない。しかしながら、完全に発達した乱流状態の定量的な記述には、さらなる研究が必要である。

謝辞 以上は Prof. Philip Hall と Dr Andrew Walton との共同研究の結果を含む。

- [1] Kawahara, G., Uhlmann, M. and van Veen, L., The significance of simple invariant solutions in turbulent flows. Annu. Rev. Fluid Mech. 44 (2012), pp. 203-225.
- [2] Lin C. C., The theory of Hydrodynamic Stability. Cambridge University Press (1955).
- [3] Smith F. T., and Bodonyi, R. J.,

 "Nonlinear critical layers and their
 development in streaming flow
 instability" J. Fluid Mech. 118 (1982),
 pp. 165-185.
- [4] Deguchi, K. and Walton A. G.,
 "Bifurcation of nonlinear
 Tollmien-Schlichting waves in a
 high-speed channel flow" J. Fluid Mech.
 843 (2018), pp. 53-97.
- [5] Jimenez, J., "Transition to turbulence in two-dimensional Poiseuille flow" J. Fluid Mech. 218 (1990), pp. 265-297.
- [6] Hall, P. and Sherwin, S., "Streamwise vortices in shear flows: harbingers of transition and the skeleton of coherent structures" J. Fluid Mech. 661 (2010), pp. 178-205.
- [7] Deguchi, K. and Hall, P., "On the instability of vortex-wave interaction states" J. Fluid Mech. 802 (2016), pp. 634-666.
- [8] Deguchi, K. and Hall, P., "The high Reynolds number asymptotic development of nonlinear equilibrium states in plane Couette flow" J. Fluid Mech. 750 (2014), pp. 99-112.

半導体の抵抗率測定法の開発に現れるいつくかの応用数学の問題

The mathematics models in the semiconductor resistivity measurement

劉 雪峰

新潟大学大学院自然科学研究科

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

1 Introduction

To measure the resistivity of semiconducor materials is one of fundamental problems in the production of semiconductor field. Cooperatred with NAPSON company, which develops resistivity measurement machine, the author has been studying mathematical models of resistivity measurement method and proposed new computation algorithm to calculate several fundamental quantities required by the resistivity measurement.

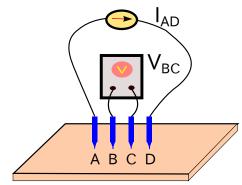
In this research, it is interesting to find that, to solve the problem of resistivity measurement, various mathematical theories and computation techiques are needed. For example, the function analysis theory of Sobolev spaces, the theory of Harmonic functions, the Dirc delta function will be used to investigate the affection of contact area of probes. Also, to give trustable computation results, quantitative error estimation of finite element method and verified computation method are indispensable.

2 Problem description

The four-point probe method is widely used in the resistivity measurement. The principle of the four-point probe method is illustrated in Figure 1, where the equidistant four probes A, B, C and D are aligned on the surface of a semiconductor object and a constant current I_{AD} is imposed on (A,D) pair and the floating potential V_{BC} between (B,C) pair is measured. Suppose the semiconductor object has a constant resistivity ρ . The resistivity of the semiconductor object is expected to be calculated by using V_{BC} and I_{AD} ,

$$\rho = F(\frac{V_{BC}}{I_{AD}}) = F_c \cdot \frac{V_{BC}}{I_{AD}},$$

where the function F_c is a function to be determined and F_c is called by "correction factor". The factor F_c is dependent on the geometric shape of the object, the position of the probes and the distance among the points A, B, C and D. The objective of this research is to develop an efficient algorithm to calculate the value of factor F_c .



 \boxtimes 1. Four-point probe method for semiconductor resistivity measurement

3 Various mathematical models upon physical assumptions

The mathematical models to discuss vary upon the assumptions adopted in setting up models of the four-probe method.

Below, we show several reasonable assumptions (models) and discuss the relation between each other.

3.1 Preparation

Let Ω be the domain of the semiconductor object. Let Γ_A and Γ_D be the contact area of probe between the semiconductor and the probe A, D, respectively. The potential inside the semiconductor object is denoted by Φ .

3.2 Model A

Basic assumption Suppose that the probes contact with the surface of material at points with zero contact area. That is, $|\Gamma_A| = |\Gamma_D| = 0$. Alghough this is not available in practical measurement, it works as an ideal model to solve the problem. Such a model has been widely used in many resistivity measurement products and was discussed in [?].

The equation of potential Φ is given by

$$\Delta\Phi(\mathbf{r}) = 2\rho I_{AD} \left(\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_D) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)\right)$$

where δ is the Dirac delta function in \mathbb{R}^3 . Also, on the boundary, we have,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$$
 on $\partial \Omega$.

3.3 Model B

Basic assumption Suppose that the contact area between probes and the material is not zero. In this case, we further introduce two assumptions about the current on the contact area.

- Assumption B1 The current *I* on contact area of each probe is uniform. This is assumption is reasonable when the contact area is very small.
- Assumption B2 The potential Φ has the same value on the contact area of each probe. This assumption is more close to the practical physical conditions.

Under different assumptions, we will obtain different models and equations.

Model B1:

$$\begin{cases} -\Delta \Phi = 0 \text{ in } \Omega \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0 \text{ on } \partial \Omega / (\Gamma_A \cup \Gamma_D) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} = \frac{\rho I}{|\Gamma_A|} \text{ on } \Gamma_A \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} = -\frac{\rho I}{|\Gamma_D|} \text{ on } \Gamma_D \end{cases}$$

Model B2:

$$\begin{cases} -\Delta \Phi = 0 & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial \Omega / (\Gamma_A \cup \Gamma_D) \\ \Phi = c & \text{on } \Gamma_A \\ \Phi = 0 & \text{on } \Gamma_D \end{cases}$$

where c is the potential to be determined by the given current I_{AD} .

In the investigation of the behavior of solutions to each model when the contact area tends to zero, by using the theories of function analysis of Sobolev space, we can prove that both the solution of mobel B1 and the one of model B2 will converge to the solution of A. We have also confirmed the behavior of convergence of solutions from numerical simulation. Both the theoretical analysis and numerical computation have validated the choice of model A in practical measurement is reasonable. (In many resistivity measurement machines, the radius of the head of probes is about 0.01mm.)

Also, to give more reasonable model for the practical measurement, one can also assume that the distribution of resistivity is not uniform. Then the optimization model will be needed to find the distribution of resistivity by using more measurements results on the whole surface of the material. Such a model will be tried in our future work.

参考文献

[1] Masato Yamashita and Masahiro Agu, Geometrical Correction Factor for Semiconductor Resistivity Measurements by Four-Point Probe Method, Japanese Journal of Applied Physics, 23(11) (1984), pp.1499-1504.

半導体製造プロセスにおける悪条件線形方程式の解法

木村 泰己¹, 松縄 哲明¹, 三本木 省次¹ 東芝メモリ株式会社

e-mail: taiki2.kimura@toshiba.co.jp

1 概要

集積回路の製造工程においては、微細な回路パターンを基板に転写するリソグラフィー工程を高速かつ高精度にシミュレーションする必要がある。ここで用いられているシミュレーションモデルは線形方程式で定式化されるが、計測できる実験結果に制約がある為、悪条件になる。従って、いかに精度よく悪条件線形方程式の推定解を得るかが課題となっている。本発表では、特異値分解による打ち切り最小二乗解が良好な結果を示した事、また、特異値分解の高速化にはRSVDが有効であった事を報告する。

2 背景

リソグラフィーとは, 所望の回路パターンを 基板上に転写する工程である. 具体的には、光 源,マスク(回路パターンに対応する遮光版), 投影レンズ系で構成される露光装置を用いて, マスクの回折光を投影レンズ系で集光し、基板 上に塗布されたフォトレジストと呼ばれる光 に反応する化学材料を感光させる事により,回 路パターンを基板上に転写する、半導体チップ 全体の回路パターンの転写不良を事前に予測 し修正する為には、高速かつ高精度なシミュレ ーションモデルが必要である. 光源から発せら れた光が、マスク、投影レンズ系を経て、フォ トレジストに照射されるまでの過程は、高速か つ高精度な計算手法が確立されている[1]. し かしながら、最終段階の、感光、現像を経て、 基板上に回路パターンが形成されるまでのレ ジストプロセスと呼ばれる工程を高速かつ高 精度にシミュレーションするモデルは確立さ れておらず、研究の対象となっている.

3 レジストモデル

レジストモデルは、一定の閾値(現像閾値)において、実験と一致する輪郭(等高線)が得られるレジスト像分布R(x,y)を求める形に定式化される。従来は、ガウス関数を用いたレジストモデル(ガウシアンモデル)が広く使われてきた。光が照射されるとフォトレジスト中に酸が

発生、拡散する、酸の濃度分布が現像閾値以上 (または以下)の個所が現像時に溶解(または凝 固)し、マスクに対応する回路パターンが形成 される. このモデルでは酸の拡散がランダムだ と仮定している. すなわち, この時間発展は最 終的に酸の初期分布とガウス関数の畳み込み 積分で表される.酸の初期分布は光学像強度分 布(基板上に照射された光の強度分布)に比例 するとみなすと、レジスト像分布は光学像強度 分布とガウス関数の畳み込み積分になる. この 方法は、厳密に拡散方程式を解く必要がなく, 高速に計算可能なため広く用いられている. し かしながら、一部の回路パターンで精度不足と なる問題がある. そこで新たに、レジスト像分 分核K(x,y)との畳み込み積分で表現し、その積 分核を実験結果から推定する手法を開発した.

$$R(x,y) = A(x,y) \otimes K(x,y)$$
 (1)
畳み込み積分は連立一次方程式

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{2}$$

の形式で表現できる.ここで行列 A は,各行べクトルが,ある点を中心に切り出した光学像強度分布で構成され,その各行ベクトルと積分核である列ベクトル x との内積が,ある点のレジスト像分布つまり畳み込み積分の値になる.実験結果とシミュレーション結果を一致させる為には,実験で得られる回路パターンの輪郭上の点で計算したレジスト像分布の値が現像閾値と一致している必要がある.従って列ベクトル b の成分は現像閾値となる.

実験で観測できるのは、基板上に転写された 回路パターン、つまりレジスト像分布を一定の 現像閾値で2値化した輪郭しかなく、レジスト 像分布全体を観測する事は出来ない。この制約 により、(2)式は悪条件となり簡単に意味のあ る解を求める事が出来ない。そこで解決策とし て、特異値分解による打ち切り最小二乗解[2] を用いた。また特異値分解は RSVD (Randomized Singular Value Decomposition)を用いて高速 化を図った。

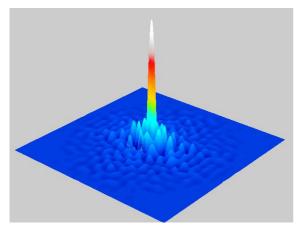
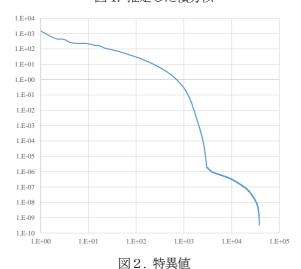


図1. 推定した積分核



4 実験結果

行列Aの大きさがMxN=170,108×38,025 のとき,特異値分解の計算時間は 23938 秒 (Intel Xeon Gold 6136 3.00GHz)で、有効な特 異対は約2.5%であった.シミュレーションの性 能は、全計測点での輪郭の予測誤差の二乗平均 平方根 RMS (Root Mean Square)を用いて評価し た. 結果は RMS=2nm と従来のガウシアンモデル の RMS=5nm から改善した. 図1に推定した積分 核(最小二乗解)を示す. 推定した積分核の外形 は、中心から遠ざかるにつれて減衰しており、 ガウス分布から大きく逸脱しておらず物理的 に妥当な結果だと考えられる. また図2に特異 値のグラフを示す. グラフが示す様に 1000 付 近から特異値が急減に減少しており悪条件で あることがわかる. 有効な特異対の数が少ない ので、RSVD を適用し高速化を図った結果、計算 時間が583秒と大幅な短縮が可能であった。な お RSVD では使用する特異値の数の 2 倍の特異 値を計算した.

5 まとめ

レジストモデルを光学像強度分布と任意形状の積分核との畳み込み積分で精度よく表現できる事が分かった.特異値分解による打ち切り最小二乗解が良好な結果を示した.また特異値分解の高速化にはRSVDが有効であった.

- [1] 渋谷眞人,大木裕史,回折と結像の光学,朝倉書店,2005年.
- [2] 関原謙介, 統計的信号処理, 共立出版, 2011 年

名古屋大学情報基盤センターにおけるスーパーコンピュータ民間利用制度 の展開と課題

片桐 孝洋¹, 田島 嘉則², 毛利 晃大², 山田 一成², 高橋 一郎², 荻野 正雄¹, 永井 亨¹, 服部 昌祐²

1名古屋大学情報基盤センター,2名古屋大学情報連携統括本部

e-mail: katagiri@cc. nagoya-u. ac. jp

1 概要

スーパーコンピュータは学術研究の発展だけではなく、ものつくりや新素材開発などの業競争力の強化にとっても重要な基盤となっている.

このような背景から、名古屋大学情報基盤センター(以降、本センター)では、社会貢献の一環として、先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス(文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業・平成 19~20年)や、先端的大規模計算利用サービス(文科省先端研究施設共用促進事業・平成 21年~22年)として民間企業の研究課題に対してスーパーコンピュータの提供を行ってきた[1].

本センターでは、これら事業の終了後においても、社会貢献の一環として産業利用の取り組みを継続しており、自主事業として民間利用サービスを推進している.

民間企業が様々な課題を解決し、イノベーションに資する成果を創出し、我が国の国際競争力を高めていくためには、産業界のニーズに適した利用形態を提供することが重要になると考えている.

本発表では、本センターのスーパーコンピュータ民間利用[2]の制度の紹介、および、平成27年度以降に開始されたセンター独自の民間利用制度の利用状況について紹介する.

2 名古屋大学におけるスーパーコンピュータ民間利用制度

[概要]

本センターでは、現システムは、平成27年9月に実施した計算資源の大幅な増強(Phase2(最終フェーズ))によって、京コンピュータ型のFujitsu PRIMEHPC FX10から最新鋭の同型スーパーコンピュータであるFujitsuPRIMEHPC FX100へとシステム更新を行うことで、大規模な計算資源の確保を行った。そのため、民間企業等に提供可能な資源量を増加させ

るとともに,新しい制度である,成果非公開型の民間利用制度を新たに開始した.このことで,企業ニーズに適した民間利用サービスへと発展させてきた.

[民間利用制度]

平成30年度現在,本センターの民間利用制度の形態は以下の2つがある.

● 成果公開型:

申込書,誓約書,および概要を提出後,専門 委員会による審議を経て,承認される.採択後, 企業名と課題が公開される.

平成 30 年度では、基本負担金 $(1 \ \Box, 180,000$ 円、10 ユーザまで)を負担することにより、1 口当たり 60,000 ポイントの計算資源が与えられる。また、4 月~6 月の利用に関しては、1 口あたりの資源量に加え、18,000 ポイントが追加付加される。

終了後,利用報告書を提出しなくてはならない.利用報告は HP で公開されるが,最大で2年間の公開延期が可能である.

● 成果非公開型

申込書,誓約書,および概要を提出後,非公 開審査ワーキンググループによる審議を経て, 承認される,企業名と課題名は公開されない.

平成30年度では、利用登録10件につき年額300,000円(1口)とし、1口当たり50,000ポイントの計算資源が与えられる.

終了後,利用報告書を提出しなくてはならない. ただし,この利用報告書は公開されない. 利用方法については,通常の利用方法に加えて,以下の利用がある.

トライアルユース

1ヶ月間の無料アカウントが発行され、試用 する制度である.民間利用においては、通常の 利用方法と同様の審査手順を経て、利用承認が なされる.

平成 29 年度から,大学等の教員と共同研究 契約を民間の技術者・研究者が共同研究契約を 結ぶ場合,その研究目的の利用において,かつ

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

学術利用に限る目的でスーパーコンピュータ を利用する(ただし,スーパーコンピュータの 申込時の代表者は大学等の教員が行う)場合は, その申込のメンバーに含まれる民間の技術 者・技術者に,利用者資格を付与する利用規定 改正が行われた.この規定改定により,民間利 用に関し,以下の形態での利用が可能となった.

● 教員との共同研究における利用

上記利用の説明の前に、図1に、民間利用のシナリオを示す.

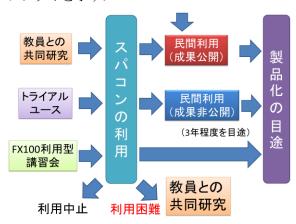


図1. 民間利用の利用シナリオ

図1では、民間利用を行う場合は、すでに示した民間利用制度に加えて、アカウント付きの講習会(ハンズオン講習会)の利用もできる。このアカウント付きの講習会である「FX100利用型講習会」では、平成30年度においては、「MPIプログラミング講習会(初級)」および「ライブラリ利用講習会(初級)」の2つが行われている。これらの講習会は、企業の技術者・研究者でも受講でき、かつ本センターのスーパーコンピュータのアカウントを有しない人も受講可能である。

そこで、この並列プログラミング講習会を通じて、トライアルユースの申込の前段階においても、スーパーコンピュータを活用して研究開発ができるかどうかを、フィージビリティ・スタディすることができる.

また図1では、民間利用制度の活用期間は、同一課題において約3年程度を目途に支援することにしている。各課題は、製品開発前の試作までのものを主な支援対象にしている。

社会貢献の観点から,先進的な産業利用に資する課題,および,大規模化・並列化に資する課題で,その知見を有しないが独自開発を目指す「萌芽的な」研究開発を行う企業を積極的に

支援する.

3 統計データ

本センターにおける民間利用制度に関する 統計データを示す.

図2に、平成26年度からの民間利用申込数を載せる。平成27年度では、成果公開型と成果非公開型を実施しているが、ここでは総数を示している。



図2 民間利用の申込数

図2から、平成27年度から徐々に民間利用が活性化している。

4 おわりに

本発表では、名古屋大学情報基盤センターに おける民間利用制度を紹介した.

スーパーコンピュータの民間利用では、企業内の制約から利用できるかどうかという技術的課題に加えて、センター側においても、限られた計算機資源と機能(特にセキュリティ)と人的資源のなかで、採択企業に対してどれだけ支援ができるか、という課題がある。採択企業とセンター側において双方にメリットがあり、さらには、社会貢献としての本事業の目的に見合う運営を考慮した事業推進が望まれている。

参考文献

[1] 名古屋大学情報基盤センター, スーパーコンピュータシステム.

http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/

[2] 名古屋大学情報基盤センター, 民間利用の 紹介

http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/riyou/industry/

On Optimal Thresholds for Pairs Trading in One-Dimensional Diffusion Model

関根 順^{†*}, 深澤 正彰[†], 前田 ひとみ[†] [†] 大阪大学大学院基礎工学研究科 e-mail: *sekine@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 序

ペアトレーディングでは、2 資産 (対数) 価格のスプレッドの時系列が平均回帰的な動きをするような「ペア」を見つけ出し着目し、

- スプレッドが開いたときに高い値を付けた資産を売り、安い値を付けた資産を買う、
- スプレッドが閉じたときに、それぞれの ポジションを解消し利益を確定させる、

といった取引を繰り返す.本研究では、スプレッド過程をエルゴード的な1次元拡散過程でモデル化し、取引を定めるスプレッドの「最適な」 閾値を求めることを行った.

2 設定

連続時間金融市場モデルの中に 2 種類資産価格過程 $(P_t)_{t\geq 0}$, $(Q_t)_{t\geq 0}$ が与えられている. また,

$$X_t := \log P_t - \beta \log Q_t - \lambda, \quad t \ge 0$$

 $(\beta, \lambda \in \mathbb{R})$ と記し、これがフィルター付き確率 空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0})$ 上で以下の確率微分方程式を満たすとする.

$$dX_t = \mu(X_t)dt + \sigma(X_t)dW_t \quad t \ge 0, \quad X_0 \in E$$

ここで $(W_t)_{t\geq 0}$ は \mathcal{F}_{t} -ブラウン運動でE:=(l,r) $(-\infty \leq l < 0 < r \leq \infty)$ は状態空間である. また $\mu,\sigma:E\to\mathbb{R}$ は連続関数で $\sigma(x)^2>0$ $\forall x\in E$ とする. さらにスケール関数, スピード 測度をそれぞれ

$$s(x) := \int_0^x \exp\left\{-2\int_0^y \left(\frac{\mu}{\sigma^2}\right)(z)dz\right\} dy,$$

$$m(dx) := \frac{2}{\sigma(x)^2} \exp\left\{2\int_0^x \left(\frac{\mu}{\sigma^2}\right)(y)dy\right\} dx,$$

と定める.

仮定 1. $s(l+)=-\infty,\ s(r-)=+\infty,\ and$ $m(E)<\infty.$

仮定 2. -l = r > 0. μ は奇関数, σ^2 は偶関数.

仮定1より X は再帰的で不変確率測度

$$\bar{m}(dx) := \frac{1}{m(E)} m(dx) \tag{1}$$

を持つエルゴード的な拡散過程である. また仮定 2 より m は E 対称な分布を持つ. 仮定 1-2 を満たす拡散過程の例を挙げる.

例 1 (Ornstein-Uhlenbeck 過程). $\sigma \in \mathbb{R}_{++}$, $\mu(x) := -\kappa \sigma^2 x$, $\kappa \in \mathbb{R}_{++} := (0, \infty)$, $E := \mathbb{R}$. すなわち

$$dX_t = -\kappa \sigma^2 X_t dt + \sigma dW_t.$$

この場合

$$s'(x) := e^{\kappa x^2}, \quad m(dx) := \frac{2}{\sigma^2} e^{-\kappa x^2} dx.$$

で定常分布は正規分布.

例 2 (Pearson 拡散過程). $\mu(x):=-\kappa\gamma^2x$, $\sigma(x):=\gamma\sqrt{\delta+x^2}$, $\kappa,\gamma,\delta\in\mathbb{R}_{++}$, $E:=\mathbb{R}$. すなわち

$$dX_t = -\kappa \gamma^2 X_t dt + \gamma \sqrt{\delta + X_t^2} dW_t.$$

この場合

$$s'(x) = (\delta + x^2)^{\kappa}, \ m(dx) := \frac{2}{\gamma^2} (\delta + x^2)^{-(1+\kappa)} dx,$$

で定常分布は t-分布.

例 3 (Jacobi 拡散過程). $\mu(x):=-\kappa\gamma^2x$, $\sigma(x):=\gamma\sqrt{\delta^2-x^2}$, $\kappa,\gamma,\delta\in\mathbb{R}_{++}$, $E:=(-\delta,\delta)$. すなわち

$$dX_t = -\kappa \gamma^2 X_t dt + \gamma \sqrt{\delta^2 - X_t^2} dW_t.$$

この場合

$$s'(x) = (\delta^2 - x^2)^{-\kappa},$$

$$m(dx) := \frac{2}{\gamma^2} (\delta + x)^{\kappa - 1} (\delta - x)^{\kappa - 1} dx,$$

で定常分布は β-分布.

3 ある最小到達時刻の期待値

 $y \in E$ に対して、最小到達時刻を

$$\tau_y := \inf \{ t \ge 0 | X_t = y \}$$

 $(\inf \emptyset = +\infty)$ と記すと以下が得られる.

定理 1. 仮定 1,2 の下で $l < -\beta < \alpha < \beta < r$ に対して

$$\mathbb{E}_{\beta} [\tau_{\alpha}] + \mathbb{E}_{\alpha} [\tau_{-\beta} \wedge \tau_{\beta}] = \frac{m(E)}{2} \{ s(\beta) - s(\alpha) \}.$$
ただし $\mathbb{E}_{x} [(\cdots)] := \mathbb{E}[(\cdots)|X_{0} = x].$

4 最適ペアトレーディング

2つの閾値レベル $a > 0, b \in [-a, a]$ から定まる以下のトレーディングを考える.

- (A) $X_{t_1} = a$ (あるいは $X_{t_1} = -a$) のとき, 資産 P を 1\$ショート (あるいはロング) し, 資産 Q を β \$ロング (あるいはショート) する. $X_t > b$ (あるいは $X_t < -b$) である限りポジションを維持.
- (B) $X_{t_2} = b$ (あるいは $X_{t_2} = -b$) $(t_2 > t_1)$, のときポジションを清算し利益を確定させる. 次回の (A) ステップまで待機.
- (A)-(B) の 2 ステップを経て得られる利益は

$$a-b-c$$

となることが示される. ただしここで c>0 は取引コストである. 以後このトレーディング: (A)-(B) を繰り返す. $T_0=0$ とし, T_n をn 回目トレーディングが完了した時刻とする.

$$S_n := T_n - T_{n-1}, \quad n \in \mathbb{N}$$

は独立同分布確率変数列となることに注意.

 $N_t := \max \{ n \in \mathbb{N} \mid T_n \leq t \}$, $t \geq 0$, とすると、時刻 0 から t までの累積収益は

$$(a-b-c)N_t$$
.

と表される. したがって, 長時間平均収益が

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}(a-b-c)N_t=\frac{a-b-c}{\mathbb{E}[S_1]}=:L(a,b)\quad\text{a.s.}$$

と表されることが再生過程に関する強大数の法則を用いて示される. ここで定理1を用いると

$$\begin{split} L(a,b) = & \frac{a-b-c}{\mathbb{E}_a[\tau_b] + \mathbb{E}_b[\tau_a \wedge \tau_{-a}]} \\ = & \frac{2(a-b-c)}{m(E)\left\{s(a) - s(b)\right\}}, \end{split}$$

と表されることに注意. 我々は閾値を適切に選 んで長時間平均収益を最大化する問題:

$$\max_{(a,b)\in\mathcal{A}} L(a,b),$$

ただし

$$\mathcal{A} := \left\{ (x, y) \in E^2 \mid -x \le y \le x - c \right\}$$

を考える. 以下の仮定を置く.

仮定 3. $x\mu(x) < 0 \ \forall x \in E \setminus \{0\}.$

仮定 4.
$$r = \infty$$
 ならば $\lim_{x \to r} s'(x) = \infty$.

注意 1. 例 1-3 は仮定 1-4 を満たす.

定理 2. 仮定 1-4 を置く.

$$h(a) := s(a) - \left(a - \frac{c}{2}\right) s'(a), \quad a \ge 0.$$

と定義する.

$$h(a^*) = 0$$
 かつ $a^* \in \left(\frac{c}{2}, r\right)$

を満たす定数 $a^* > 0$ が唯一定まり

$$\max_{(a,b)\in\mathcal{A}} L(a,b) = L(a^*, -a^*)$$

$$= \frac{2\left(a^* - \frac{c}{2}\right)}{m(E)s(a^*)} = \frac{2}{m(E)s'(a^*)}$$

が成り立つ.

- [1] Bertram, W. K. "Analytic solutions for optimal statistical arbitrage trading." *Physica A*, **389** (2010), 2234–2243.
- [2] Fukasawa, M., H. Maeda, and J. Sekine "On optimal thresholds for pairs trading in one-dimensional diffusion model." *Preprint* (2018).
- [3] Krauss, C. "Statistical arbitrage pairs trading strategies: review and outlook." *Journal of Economic Surveys*, **31**(2) (2017), 513–545.
- [4] ZENG, Z. AND C.-G. LEE "Pairs trading: optimal thresholds and profitability." *Quantitative Finance*, **14**(11) (2014), 1881–1893.

An expansion of BSDE to study arbitrage free price of xVA.

田中 章博1

1 大阪大学基礎工学研究科

e-mail: tnkaki2000@gmail.com

1 Introduction

デリバティブの評価では、信用評価調整に加えて、資金調達コスト等の各種コストを評価調整することが市場慣行になりつつある。これらの評価調整は、xVAやtotal valuation adjustmentと呼ばれ、実務において、これらは段階的に対応が進められている。本報告では、取引当事者双方のデフォルト、資金調達コスト、担保コストを加味した、M.Bichuch、A. Capponi、A. Sturm氏の論文[1]で論じられているモデル設定下での後退確率微分方程式(以下、BSDE)を取り扱い、[1]の結果である無裁定価格に関する結果を再考、正当化した結果の報告を最初に行う。次に、論文[2]の手法を用いて、設定したBSDEを線形BSDEで近似することで、実務における段階的な対応と無裁定価格の関係について紹介する.

2 Model Setting

 (Ω, \mathcal{G}, Q) を確率空間とする. 測度 Q の下で Brown 運動 W_t が与えられており、 $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$ は Brown 運動から生成され,usual condition を 満たし,デフォルトイベントと独立であると仮 定する. また,デフォルト時刻を τ_I, τ_C とし、それぞれ独立である定数 $h_i^Q, i \in \{I,C\}$ をパラメータとする指数分布に従う確率変数とする. $H_t^i = 1_{\{\tau_i < t\}}, i \in \{I,C\}$ とし, H_t^i から生成される filtration を $(\mathcal{H}_t)_{t\geq 0}$ とし,enlarged filtration を $\mathcal{G}_t = \mathcal{F}_t \lor \mathcal{H}_t$ とする. ここで,添え字 I,C で投資家,カウンターパーティを表す.本報告では,ペイオフ関数 Φ のヨーロピアンタイプのオプションを考える. S_t で株価過程, $P_t^i, i \in \{I,C\}$ で投資家,カウンターパーティの債券過程を表し,次の SDE で定義されているとする:

$$dS_t = r_D S_t dt + \sigma S_t dW_t$$

$$dP_t^i = r_D P_t^i dt - P_{t-}^i d\omega_t^i.$$

ここで, ω_t^i は, \mathcal{G}_t – マルチンゲールで, $\omega_t^i = H_t^i$ – $\int_0^t (1-H_s^i) h_i^Q ds$ で定義されているとする. 加えて, 運用調達 (r_f) , レポ取引 (r_c) , 担保取引 (r_c)

に関する各現金勘定をそれぞれ,

$$B_t^{r_j} := B_t^{r_j}(\xi^j) = \exp(\int_0^t r_i(\xi_s^j) ds), j \in \{f, r, c\}$$

で定義されているとする. ここで, $r_i(x)=r_i^-1_{\{x<0\}}+r_i^+1_{\{x>0\}}$ とし運用調達間で適用金利が異なるものとする. 戦略 $\varphi=(\xi,\xi^I,\xi^C,\xi^f,\xi^r,\xi^c)$ に対して,総資産過程 $V_t(\varphi)$ を

$$V_{t}(\varphi) = \xi_{t} S_{t} + \xi_{t}^{I} P_{t}^{I} + \xi_{t}^{C} P_{t}^{C} + \xi_{t}^{f} B_{t}^{r_{f}} + \xi_{t}^{r} B_{t}^{r_{r}} - \xi_{t}^{c} B_{t}^{r_{c}}$$

で表し,self-financing condition を

$$\begin{cases} dV_{t}(x_{0}, \varphi) &= \xi_{t} dS_{t} + \xi_{t}^{I} dP_{t}^{I} + \xi_{t}^{C} dP_{t}^{C} \\ &+ \xi_{t}^{f} dB_{t}^{r_{f}} + \xi_{t}^{r} dB_{t}^{r_{r}} - \xi_{t}^{c} dB_{t}^{r_{c}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} V_{0}(x_{0}, \varphi) &= x_{0} \\ \xi_{t} S_{t} &= -\xi_{t}^{r} B_{t}^{r_{r}} \\ \xi_{t}^{c} B_{t}^{r_{c}} &= -\alpha \hat{V}_{t} \end{cases}$$

とする. ここで $\hat{V}_t = E[e^{-r_D(T-t)}\Phi(S_T)|\mathcal{F}_t]$. このとき, 無裁定価格を次で定義する.

定義 2.1 ターミナル時刻でのペイオフ $\Phi(S_T)$ のデリバティブ価格 $p \in R$ に対して、ある ad-missible で、self-financing な戦略 φ が存在して、 $Q(V_{\tau}(p,\varphi) \geq \theta(S_{\tau})) = 1$,且つ $Q(V_{\tau}(p,\varphi) > \theta(S_{\tau})) > 0$ をみたすとき、デリバティブ価格は、裁定であるという。 もし admissible で、self-financing な戦略で裁定条件をみなすものが存在しない場合、デリバティブ価格は無裁定であるという。ここで、 $\theta(S_{\tau})$ は closeout 価格であり、

$$\theta(S_{\tau}) = 1_{\{\tau < T\}} \{\hat{V}_{\tau} + 1_{\{\tau_{C} < \tau_{I}\}} L_{c} ((1 - \alpha)\hat{V}_{\tau})^{-} - 1_{\{\tau_{I} < \tau_{C}\}} L_{I} ((1 - \alpha)\hat{V}_{\tau})^{+} \} + 1_{\{\tau = T\}} \Phi(S_{T}), L_{I}, L_{C} \in [0, 1].$$

で定義される.

また、self-financing condition から、ペイオフ Φ のオプションに関して、 $\tau = \tau_I \wedge \tau_C \wedge T$ をター

ミナル時刻とする次の BSDE が導出される:

$$\begin{cases} V_t^{\pm} = f^{\pm} \left(t, V_t^{\pm}, Z_t^{\pm}, Z_t^{I, \pm}, Z_t^{C, \pm} : \hat{V} \right) dt \\ -Z_t^{\pm} dW_t - Z_t^{I, \pm} d\omega_t^I - Z_t^{C, \pm} d\omega_t^C \\ V_{\tau}^{\pm} = \theta(S_{\tau}). \end{cases}$$

ここで, V^+ はオプションの売り、 V^- はオプションの買いであり、

$$f^+(t,v,z,z^I,z^C:\hat{V})$$
 $= -\{r_f^+(v+z^I+z^C-\alpha\hat{V}_t)^+$
 $-r_f^-(v+z^I+z^C-\alpha\hat{V}_t)^ +(r_D-r_r^-)\sigma^{-1}z^+-(r_D-r_r^+)\sigma^{-1}z^ -r_Dz^I-r_Dz^C+r_c^+(\hat{V}_t)^+-r_c^-(\hat{V}_t)^-\},$
 $f^-(t,v,z,z^I,z^C:\hat{V})$
 $=-f^+(t,-v,-z,-z^I,-z^C:-\hat{V})$
であり、 $x^+=\max(x,0),x^-=\max(0,-x)$ である.当該,BSDE の解の存在, (f,θ) に対する Comparison 定理については,一定の仮定の下で論文 $[3]$ と同様に示せる.

3 Expansion of BSDE

 (y,z,z^I,z^C) について、線形な関数 f_0^\pm と Lipschitz 連続な関数 $f_1^{\pm,r},f_1^{\pm,r}$ に対して、

$$f^{\pm} = f_0^{\pm} + \epsilon_r f_1^{\pm,r} + \epsilon_f f_1^{\pm,r}$$

に分解できるとする.例えば, $r_i^\pm=r_i\mp\epsilon_i s_i$ とおくことで分解できる. $f_0,f_1^{\pm,i}$ に対して,以下の BSDE を考える:

$$\begin{cases} V_t^{0,\pm} &= f_0^{\pm} \left(t, V_t^{0,\pm}, \bar{Z}_t^{0,\pm} : \hat{V} \right) dt \\ &- Z_t^{\pm} dW_t - Z_t^{I,\pm} d\omega_t^I - Z_t^{C,\pm} d\omega_t^C \\ V_{\tau}^{0,\pm} &= \theta(S_{\tau}). \end{cases}$$

さらに、この解 $(V^{0,\pm},Z^{0,\pm},Z^{0,I,\pm},Z^{0,C,\pm})$ を用いて定義される BSDE を考える:

$$\begin{cases} V_t^{1,\pm} &= f_0^{\pm} \left(t, V_t^{1,\pm}, \bar{Z}_t^{1,\pm} : 0 \right) dt \\ &+ \epsilon_r f_1^{\pm,r} \left(t, V_t^{0,\pm}, \bar{Z}_t^{0,\pm} : \hat{V} \right) dt \\ &+ \epsilon_f f_1^{\pm,f} \left(t, V_t^{0,\pm}, \bar{Z}_t^{0,\pm} : \hat{V} \right) dt \\ &- Z_t^{1,\pm} dW_t - Z_t^{1,I,\pm} d\omega_t^I - Z_t^{1,C,\pm} d\omega_t^C \\ V_{\tau}^{1,\pm} &= 0. \end{cases}$$

ここで, $\bar{Z}_t^{k,\pm} = (Z_t^{k,\pm}, Z_t^{k,I,\pm}, Z_t^{k,C,\pm}), k \in \{0,1\}$ とおく、このとき, [3] で定義の norm のもと,|| $V^{\pm} - V^{0,\pm}$ || $_{\beta} = O(\epsilon_r \vee \epsilon_f)$, || $V^{\pm} - V^{0,\pm} - V^{1,\pm}$ || $_{\beta} = O(\epsilon_r^2 \vee \epsilon_f^2)$ となる.

4 Result

仮定 **4.1** 上述の各金利に対して, $r_r^+ \leq r_f^+ \leq r_r^-$, $r_f^+ \leq r_f^-$, $r_f^- - r_D \leq h_I \wedge h_C$, $r_c^+ \leq r_c^-$ とする.

定理 **4.2** 仮定 *4.1* を満たし、 Φ を polynomial growth とする. このとき、ペイオフ $\Phi(S_T)$ のデリバティブに対して、ある定数 π^+ 、 π^- 、 $\pi^- \le \pi^+$ が存在して、 $[\pi^-,\pi^+]$ 内に含まれる価格は、無裁定な価格である. 特に、 $\pi^+ = V_0^+$ 、 $\pi^- = V_0^-$ である.

上記は[1]の結果より,やや弱い仮定となっている. また,BSDEの近似に関して次が示せる.

定理 4.3 定理 4.2 の仮定を満たすとする $.r_f \in [r_f^+, r_f^-], r_r \in [r_r^+, r_r^-]$ に対して, f^\pm を上述のように分解したとき, $V_0^{0,-} \leq V_0^{0,+}$ であり, $V_0^{0,-}, V_0^{0,+} \in [V_0^-, V_0^+]$ となる.

系 4.4 $r_D \in [r_f^+, r_f^-], r_D \in [r_r^+, r_r^-]$ を仮定したとき, r_D に関して、 f^\pm を分解すれば, $V_0^{0,-} \leq V_0^{0,+}$ であり, $V_0^{0,-}, V_0^{0,+} \in [V_0^-, V_0^+]$ となる.

限られた紙面の関係上、大雑把に述べると、 r_D は、上述において担保計算に使用されている金利、すなわち、公平な第三者が割引に用いる金利であること、また系 4.4 の V_0 を具体的に計算すると $V_0 = \hat{V}_0 + \text{CVA} - \text{DVA}$ となり、系 4.4は、少なくとも所謂 CVA、DVA を調整した価格が無裁定価格を満たすことに必要であることを表している.

- [1] M Bichuch, A Capponi, and S Sturm, Arbitrage free XVA, Mathematical Finance Vol.28 (2018), 582-620.
- [2] M. Fujii and A. Takahashi, Analytical approximation for non-linear FB-SDEs with perturbation scheme. Int. J. Theor. Appl. Finance Vol15 (2012) 1250034.
- [3] N. EL Karoui, S. Peng and M.C. Quenez. Backward stochastic differential equations in finance, Mathematical Finance Vol.7 (1997), 1-71.

代用電荷法による複素平面から3次元曲面への写像

岡野 大1

1 愛媛大学大学院理工学研究科

e-mail: okano@cs.ehime-u.ac.jp

1 はじめに

本報告では、複素平面中の単連結領域 D か ら、与えられた単連結の3次元閉曲面 Sへの連 続で滑らかな写像を得る方法の開発を目標とし た試みについて述べる. 具体的な目的としては. 2次元データの立体物表面あるいは3次元モデ ル表面への貼り付け、 例えばコンピュータグラ フィクスでのテクスチャマッピング手法の提案 等を想定している.

そこで、極小曲面の計算法に関するアイディ アからヒントを得て、Dにおけるベクトル調和 関数 [X,Y,Z] を D から 3 次元空間への写像と して利用することを考える. 具体的には、写像 先の閉曲面 S の境界が 1 つの有限な閉曲線 Cであるような場合を想定し、D の境界とC との 対応関係を決めれば、調和関数 X, Y, Z を定 めることができるので、これを利用する. 例え ばD を単位円板,C を周期 2π の周期関数を用 いて、

$$C = \{ [x(t), y(t), z(t)] \mid x(t+2\pi) = x(t),$$

$$y(t+2\pi) = y(t), z(t+2\pi) = z(t) \}$$
 (1)

と表して、これをDの境界との対応に用いて

$$X(e^{it}) = x(t), Y(e^{it}) = y(t), Z(e^{it}) = z(t)$$

 $0 < t \le 2\pi$ (2)

とすれば Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問 題の解として、様々な解法で X,Y,Z を求める ことができる. もちろん, こうして得た3次元 曲面が S と必ずしも一致するわけではないが、 領域を分割しそれぞれに境界の対応関係を選択 することで、ある程度広い範囲の S に対して目 的の写像が得られることを期待する.

代用電荷法の適用

前節のDおよびSについて,境界同士の対応 が適切に選択された場合を想定し、3 つの調和 関数 X, Y, Z を境界値問題 (2) の近似解として 定めるために代用電荷法を適用する. 代用電荷 法は Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題に

対する近似解法である.とくに、滑らかな境界 条件における高い近似精度で知られている. [1] ここでは、前節のXの計算について説明する.

代用電荷法では、問題領域 D(ここでは単位円 板) の外部に電荷点と呼ぶ特異点 u_1,\ldots,u_N を 持つ対数ポテンシャルと定数関数の線形結合、

$$X(w) = Q_0 + \sum_{j=1}^{N} Q_j \log |w - u_j|, \qquad (3)$$

で、近似解を構成する、未定係数 Q_0, Q_1, \ldots, Q_N は電荷と呼ばれ、不変性条件(4)と境界条件(2) を緩和した拘束条件(5)を満たすように定める.

$$\sum_{j=1}^{N} Q_j = 0 \tag{4}$$

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

$$X(v_k) = Q_0 + \sum_{j=1}^{N} Q_j \log |v_k - u_j| = x(\arg v_k)$$

$$k = 1, \dots, N, v_k \in \partial D(D$$
 の境界). (5)

ここで, v_1, \ldots, v_N を拘束点と呼ぶ.

連立一次方程式を与える電荷点・拘束点の配 置により近似解の精度は左右される. 一般に適 切な電荷点・拘束点を選択することは難しいが、 問題領域の境界が円形であれば、境界に等間隔 に採った拘束点と、境界の同心円上に等間隔に 採った電荷点を中心から見た偏角が一致するよ うにして得られる等角同相配置が有効であるこ とが知られている.

一方で、本報告で想定する問題では、 ∂D の写 像が、予め定められた3次元閉曲線Cに一致す ることが期待される. これは、拘束点列に対応 する点列が C 上で十分に密に分布することを 要請する. したがって、境界の対応関係の選択 においては、C上の一様点に対応する拘束点を 選ぶことが妥当であり、高精度な近似解を得る ことを優先した電荷点・拘束点配置を採ること はできない.

3 計算例

長径・短径比が 2:1 の楕円短径の方向の中点 で90°に折り曲げたような境界閉曲線 Cを用 いた計算例を示す.

問題領域 D として複素平面中の単位円板を用い、単位円周上の等間隔点を C の半分ずつの楕円周において離心角が等分になるような分点に写されるという境界対応関係を設定して計算している.

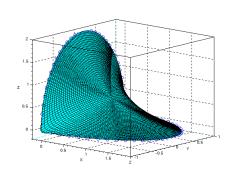
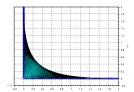


図 1. ベクトル調和関数 [X,Y,Z] を用いて得た曲面

図1では、結果として得られた曲面上に、元の円板上の同心円と中心点からの放射線の像を描いて表現している。おおよそ一様に、平面が3次元曲面に写像されていることが判る。

次に、 ∂D 上の拘束点の配置を変えて C との境界同士の対応関係を変更した場合の曲面の様子を示す。図 2 では、左図に楕円の(折り曲げ



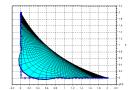


図 2. 境界同士の対応関係を変更した場合

られる前の長径方向)端点に密に拘束点を配置した場合,右図に C の折り曲げられた角点付近に密に拘束点を配置した場合を示す. 得られる曲面の違いを示すと同時に,極端な拘束点配置を採ることで代用電荷法による境界条件の近似精度が落ちてしまっている様子が判る.

4 おわりに

複素平面中の領域の境界と、3次元閉曲線との対応関係から導かれるベクトル調和関数の近似計算により、平面から3次元曲面への写像を得ることができた.調和関数の近似計算に代用電荷法を用いることで、簡易な計算である程度の精度の写像が得られる一方で、境界の対応関係によっては精度が落ちることも明らかになった.講演では、数値計算例等をもとに現状での

問題点について説明する. また, 時間が許せば 以下にを以下に述べるこの手法の発展の展望に ついても示したい.

4.1 極小曲面の数値計算への応用

与えられた 3 次元閉曲線を「張る」面積最小の曲面を求める、Plateau 問題、いわゆる極小曲面は、本報告で扱っているベクトル調和関数による写像として得られることが知られている。ベクトル調和関数は ∂D と C との対応で決めることができるので、この対応関係を曲面の最小値を与えるように定めることができれば、本報告で提案する方法を極小曲面の計算方法として用いることができる。これは、本報告で述べた手法のもう一つの研究目的でもある。

そもそも代用電荷法を利用した極小曲面の計算法を開発するというアイディアが土屋らによる極小曲面に関する研究 [2] の過程で提案されたものである.

4.2 多面体への平面図形の写像

「はじめに」で述べた目的の一つであるテクスチャマッピング手法を念頭に、多面体への投影に前節までの方法を利用することを考える。 複素平面中の領域 D からベクトル調和関数 [X,Y,Z] を用いた写像は与えられた ∂D と閉曲線 C との境界同士の対応において最小の面積を実現するので、C が 1 つの平面中にあれば、D の [X,Y,Z] による写像は、C を張る平面を成すことになる。したがって、複数の平面に囲まれた立体、いわゆる多面体の表面への平面図形の投影において、ベクトル調和関数を用いることが考えられる。

- [1] 岡本久, 桂田祐史. ポテンシャル問題の 高速解法. 応用数理, Vol. 2, No. 3, pp. 2-20, 1992.
- [2] Aymeric Grodet and Takuya Tsuchiya. Adaptive mesh refinement technique for the classical plateau problem. 第 45 回数 値解析シンポジウム講演予稿集, pp. 17–18. 第 45 回数値解析シンポジウム実行委員会, 2016.

代用電荷法における Fekete 点の近似

平野 広明¹, 田中 健一郎²

1 東京大学, 2 東京大学

e-mail : $hiroaki_hirano@mist.i.u-tokyo.ac.jp$

1 概要

偏微分方程式の数値解法の一つ, 代用電荷法 (基本解近似解法) における拘束点の配置問題を 取り扱う. 代用電荷法は, Laplace 方程式の境 界値問題などのポテンシャル問題によく用いら れ, 実装の容易さや計算量の少なさなどの簡便 さを特徴とする. 代用電荷法では, 電荷点, 拘 束点と呼ばれる2種類の点配置を決める必要が ある. これらの点配置は解の精度に大きな影響 を与えるが、一般領域の場合には実用的で高精 度かつ理論的に精度が保証された点配置が知ら れていない. 拘束点については, 理論的に精度 が保証された点配置として一般化された Fekete 点が知られているが、Fekete 点の簡単な求め方 は知られていない. 本研究では、Fekete 点を求 める問題を D-optimal design を求める問題で 近似し、さらに問題を緩和してから最適化を行 い, 近似的に Fekete 点を求める手法を提案す る. 求めた点を拘束点として代用電荷法を適用 した数値実験結果を示し, 近似精度に関して述 べる.

2 代用電荷法

領域を $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ とし、境界を $\partial \Omega$ とする、領域 Ω の閉包を $\overline{\Omega}$ で表す、本研究では、

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{in } \Omega, \\ u = f & \text{on } \partial \Omega \end{cases}$$
 (1)

で表される,2 次元領域 Ω における Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題を考える.代用電荷法では,解を

$$u_N(x) = \sum_{k=1}^{N} Q_k \log|x - y_k|$$
 (2)

という形で近似する。ここで, y_1,\dots,y_N は電荷点と呼ばれ, $\mathbb{R}^2\setminus\overline{\Omega}$ 上に定められる。係数 $Q_1,\dots,Q_N\in\mathbb{R}$ は,拘束点 x_1,\dots,x_N を $\partial\Omega$ 上 に配置し拘束点上での条件 $u_N(x_j)=f(x_j),j=1,\dots,N$ を用いて求める。係数を求める際に現れる行列を $A=(\log|x_j-y_k|)_{1\leq i,k\leq N}$ とおく。

3 一般化された Fekete 点

理論的に高精度な拘束点としては、一般化された Fekete 点 [1] が知られている.

 y_1, \ldots, y_N を固定したとき,

maximize
$$|\det A|$$
 (3)
subject to $x_1, \dots, x_N \in \partial \Omega$

の最適解 x_1, \ldots, x_N を(代用電荷法における)一般化された Fekete 点と呼ぶ.以下では,単に Fekete 点と呼ぶことにする.一様ノルムで 誤差を測るとき,Fekete 点を拘束点とする代用電荷法による近似誤差は,代用電荷法による最良近似誤差の N+1 倍で上から抑えられると いう性質がある.この性質により, $|\det A|$ の最大化によって高精度な点配置が得られること が理論的に裏付けられている.しかし,Fekete 点の簡単な求め方は知られていない.

4 提案手法

 $|\det A|$ の最大化は困難なため, $\det A$ の近似を考える.以下,適宜 \mathbb{R}^2 を \mathbb{C} と同一視する.電荷点を $y_k=\mathrm{e}^{(2\pi k i/N)}/\varepsilon, k=1,\ldots,N$ に固定する.つまり,電荷点を半径 $1/\varepsilon$ の円周上に配置する.ただし, ε は $\sup_{x\in\partial\Omega}|x|\cdot\varepsilon<1$ を満たすものとする.ここで,対数関数のフーリエ級数を有限項で打ち切るという近似 [2] を利用する.

$$\varphi_k(r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}) = \begin{cases} 1 & \text{(if } k = 1), \\ r^{\frac{k}{2}}\cos\frac{k}{2}\theta & \text{(if } k : \mathrm{even}), \\ r^{\frac{k-1}{2}}\sin\frac{k-1}{2}\theta & \text{(if } k \geq 3, \, k : \mathrm{odd}) \end{cases}$$

とすると、十分大きなNに対して

$$F := \left(\begin{array}{ccc} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_1(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(x_1) & \cdots & \varphi_N(x_N) \end{array} \right)$$

の行列式 $|\det F|$ を最大化すれば,近似的に $|\det A|$ を最大化できる.

 $|\det F|$ の最大化のために、 $\det \left(FF^{\top}\right) = (\det F)^2$ の最大化をする. $\varphi(x_k) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_k) & \cdots & \varphi_N(x_k) \end{pmatrix}^{\top}$ とおくと、 $FF^{\top} = \sum_{k=1}^N \varphi(x_k)\varphi(x_k)^{\top}$ と表せる. ここで、 FF^{\top} が拘束点 x_k ごとに定まる行列の和で表せていることがわかる.

さらに,境界を離散化して拘束点の候補点集合 $\{x_1',\dots,x_M'\}$ から拘束点を N 点選ぶことを考える.ここで, $M\gg N$ とする.また,候補点 x_1',\dots,x_M' は,境界 $\partial\Omega$ 上で添字の番号順に並んでいるとする.候補点集合から拘束点を選ぶ問題は D-optimal design を求める問題になり,NP 困難である [3].

そこで, さらに問題を緩和し

maximize
$$\det\left(\sum_{k=1}^{M} w_k \varphi(x_k') \varphi(x_k')^{\top}\right)$$
 subject to
$$\sum_{k=1}^{M} w_k = N,$$

$$0 \le w_k \le 1 \ (k = 1, \dots, M)$$

を解くことを考える。この問題の目的関数は対数をとると凹関数になるので,この問題は元の最適化問題よりも解きやすい問題である。この問題を解いて得られた w_k を添字の番号の順に並べ, w_k が極大となるkに対応する候補点 x_k' を(w_k が大きい順に)N点選び,拘束点として採用する。

5 数值実験

 $|\det A|$ の最大化の問題 (3) に対する近似問題 (4) を数値的に解き拘束点を得て、代用電荷法を適用した数値実験結果を示す.

例として,極座標を用いて

$$r \le \sqrt{\cos(2\theta) + \sqrt{2 - \sin^2(2\theta)}}$$
 (5)

で表される非凸曲線領域(Cassini 曲線の内部領域) Ω を考える。電荷点は半径 R=5 の円周上に等間隔に配置した。拘束点の候補点数は M=1000 であった。拘束点数を N=28 としたときに得られた点配置と,境界条件 $f(x,y)=\cos x-x^2y$ に対する近似誤差を図 1 に示す。それぞれ,偏角が等間隔である点配置と比較している。提案手法により得られた点配置は比較対象よりも高精度であることが示されている。

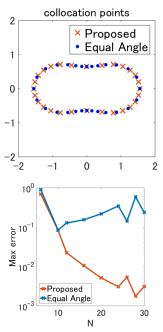


図 1. 非凸曲線領域において得られた点配置 (N=28) と境界条件 $f(x,y)=\cos x-x^2y$ に対する誤差(それぞれ,偏角が等間隔な点配置と比較)

6 まとめ

本研究では代用電荷法における高精度な拘束点配置を得るため、一般化された Fekete 点を近似的に求める手法を提案した. 行列を展開することで目的関数の近似を行い、さらに境界の離散化、問題の緩和を行って近似的な最適化問題を構成し、高精度な拘束点配置を得るという手法である. 数値実験では、得られた拘束点配置に対して代用電荷法を適用すると、素朴な点配置よりも高精度であることがわかった. 理論的な誤差評価や 3 次元の場合への適用が今後の課題である.

- [1] 杉原正顕, 調和関数の近似について (数値解析の基礎理論とその周辺), 数理解析研究所講究録, 676(1988), 251-261.
- [2] Pedro R. S. Antunes, Reducing the ill conditioning in the method of fundamental solutions, Advances in Computational Mathematics, 44(2018), 351–365.
- [3] William J. Welch, Algorithmic complexity: three NP- hard problems in computational statistics, Journal of Statistical Computation and Simulation, 15(1982), 17–25.

再生核ヒルベルト空間における関数近似のための標本点生成法について

田中 健一郎1

1 東京大学 大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻

e-mail: kenichiro@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

正定値核によるデータや関数値の補間は、様々な分野で基礎的な手法として用いられている。 正定値核には再生核ヒルベルト空間 (RKHS) が対応することが知られており、この空間において、補間の近似精度を数学的に評価することができる。そして、このような数学的評価に基づくと、補間に用いる標本点を、近似精度が向上するように生成することができる。この標本点生成については、先行研究では貪欲法が考案され使用されていることが多い [1]. 一方、本研究では,近似や緩和を用いて、標本点を求める問題を凸最適化問題に帰着し、それを解くことで全体的なバランスの良い標本点を生成する方法を提案する.

2 再生核ヒルベルト空間における補間

 $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ を領域とし, $K: \Omega \times \Omega \to \mathbf{R}$ を連続対称正定値核とする.そして $\mathcal{H}_K(\Omega)$ を K に対応する Ω 上の再生核ヒルベルト空間とし, $\langle \; , \; \rangle_{\mathcal{H}_K(\Omega)}$ を $\mathcal{H}_K(\Omega)$ の内積とする.このとき,次の再生性が成立する.

$$\forall f \in \mathcal{H}_K(\Omega), \quad f(x) = \langle f, K(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{H}_K(\Omega)}.$$

関数 $f \in \mathcal{H}_K(\Omega)$ に対し、補間

$$s_f(x) := \sum_{j=1}^n c_j K(x, x_j), \qquad x \in \Omega \subset \mathbf{R}^d,$$

を考える.ここで $\mathcal{X}_n := \{x_1, \dots, x_n\} \subset \Omega$ を標本点の集合とする.係数 c_i は補間条件

$$s_f(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

から決める. このとき s_f は, 線形方程式

$$\mathcal{K}u(x) = k(x),$$

で決まる関数 $u(x) := (u_1(x), \dots, u_n(x))^T$ で

$$s_f(x) = \sum_{j=1}^n f(x_j) u_j(x),$$

と別の形に表せる.ここで $\mathcal{K} := (K(x_i, x_j))_{ij}$, $k(x) := (K(x, x_1), \dots, K(x, x_n))^T$ である. 再生性から, $f \in \mathcal{H}_K(\Omega)$ の補間誤差が以下のように評価されることが知られている [2].

$$|f(x) - s_f(x)| \le ||f||_{\mathcal{H}_K(\Omega)} P_{K,\mathcal{X}_n}(x).$$

ここで P_{K,\mathcal{X}_n} は power function と呼ばれ,

$$P_{K,\mathcal{X}_n}(x) := \sqrt{K(x,x) - k(x)^T \mathcal{K}^{-1} k(x)}$$
で与えられ, \mathcal{X}_n の要素を零点に持つ.

3 Fekete 型標本点

 $\mathcal{H}_K(\Omega)$ での補間の最悪誤差は $\max_{x\in\Omega} P_{K,\mathcal{X}_n}(x)$ である。良い標本点集合 \mathcal{X}_n を得るにはこれを最小化するものを求めればよいが,この最小化問題は難しい。そこでこの問題を直接扱うことは避けて,最悪誤差のある上界を最小化することを考える。正整数 ℓ に対して

$$\kappa_{\ell} := \max_{\mathcal{X}_{\ell} = (x_1, \dots, x_{\ell}) \subset \Omega} \det(K(x_i, x_j))_{ij}$$

と定めると、Schur complement を用いて

$$P_{K,\mathcal{X}_n}(x)^2 = \frac{1}{\det \mathcal{K}} \det \begin{bmatrix} K(x,x) & k(x)^T \\ k(x) & \mathcal{K} \end{bmatrix}$$
$$\leq \frac{\kappa_{n+1}}{\det \mathcal{K}}$$

という評価ができる。そこで以下 $\det \mathcal{K}$ の最大化問題を考える。これの最大化元となる点集合を Fekete 型標本点と呼ぶことにする。

4 Fekete 型標本点を求める近似的方法

以下,正定値核 Kが Mercer 級数展開

$$K(x,y) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \, \varphi_i(x) \, \varphi_i(y), \qquad (1)$$

を持つ場合を考える.ここで $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots > 0$ であり, $\{\varphi_\ell\}$ は $L^2(\Omega)$ の正規直交系である.このとき,(1) の級数を n 項で打ち切ったもので行列 K の各成分を近似することで

$$\mathcal{K} \approx \left(\sum_{\ell=1}^{n} \lambda_{\ell} \, \varphi_{\ell}(x_{j}) \, \varphi_{\ell}(x_{i})\right)_{ij} =$$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

 $\Phi_n(x_1,\ldots,x_n)^T \operatorname{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_n) \Phi_n(x_1,\ldots,x_n)$ となる.ここで

$$\Phi_n(x_1, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_1(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_n) \end{bmatrix}$$

である. これにより

$$\det \mathcal{K} \approx (\lambda_1 \cdots \lambda_n) (\det \Phi_n(x_1, \dots, x_n))^2$$

が得られる.

以上より、Fekete 型標本点を近似的に与える 問題として

max.
$$(\det \Phi_n(x_1, \dots, x_n))^2$$

subj. to $(x_1, \dots, x_n) \in \Omega^n$.

が考られる.この目的関数は $\det(\Phi_n\Phi_n^T)$ と等しく, Φ_n の各列ベクトルを $\phi_n(x_i)$ と表せば

$$\det(\Phi_n \Phi_n^T) = \det\left(\sum_{i=1}^n \phi_n(x_i) \phi_n(x_i)^T\right)$$

と表せる. この問題はまだ難しいので、十分多くの候補点 $y_1, \ldots, y_m \in \Omega$ $(n \ll m)$ を予めとり、これらから n 点を選ぶ近似的な問題

max.
$$\det \left(\sum_{j=1}^m w_j \, \boldsymbol{\phi}_n(y_j) \boldsymbol{\phi}_n(y_j)^T \right)$$

subj. to $w_i \in \{0,1\}, w_1 + \cdots + w_m = n$.

を考える.これは experimental design 問題の一種であり,難しい組合せ最適化問題である.そこで本研究では,最終的に,制約 $w_j \in \{0,1\}$ を緩和して $0 \le w_j \le 1$ とした問題を考える.このとき目的関数は (w_1,\ldots,w_m) に関して対数凹になるので,凸最適化アルゴリズムにより数値解が求められる.実際,緩和問題は二次錘計画 (SOCP) 問題に帰着できることが知られている [3].この SOCP を用いて解を求め,それを 0-1 の解に変換することで標本点を求める.

5 数值実験例

ここでは $\Omega = [-1,1] \subset \mathbf{R}, K(x,y) = \mathrm{e}^{-(x-y)^2}$ という例について,計算結果を示す.図 1 に n=6 の時の power function,図 2 に n ごとの power function の最大値を示した.共に,既存の貪欲解法(P-greedy)[1] と比較した.より

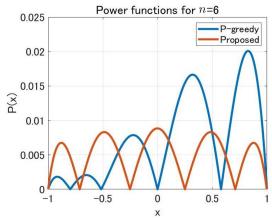


図 1. n=6 の時の power function.

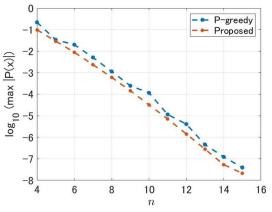


図 2. power function の最大値.

詳しい計算結果やそれらに対する考察, また他の例については, 当日講演で述べる.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17K14241 の助成を 受けた.

- S. De Marchi, R. Schaback and H. Wendland: Near-optimal dataindependent point locations for radial basis function interpolation. Adv. Comput. Math. 23 (2005), pp. 317–330.
- [2] H. Wendland: Scattered data approximation. Cambridge University Press, 2004.
- [3] G. Sangol and R. Harman: Computing exact *D*-optimal designs by mixed integer second-order cone programming. The Annals of Statistics 43 (2015), pp. 2198–2224.

連分数を用いた数値解析接続と Fourier 変換への応用

緒方 秀教1

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

1 連分数による解析接続

本講演では、 冪級数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{1}$$

で与えられた複素解析関数 f(z) を,連分数に変換して数値的に解析接続する方法を提案する.

冪級数 (1) は一般に円板領域 |z| < R (R は 収束半径) で収束するが,z が円周 |z| = R に近いと収束は遅くなる.一方,f(z) を連分数

$$f(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2 z}{1 + \frac{a_3 z}{1 + \cdots}}}$$
(2)

と表すと、これは一般に全複素平面に半直線状のカットを入れた領域で収束し有理型関数を与える。したがって、f(z)を連分数 (2) の形に変換することにより、もとの冪級数の収束円 |z| < R からより広い領域で f(z) を数値計算できる、すなわち、f(z) を数値的に解析接続できると期待される。実際、f(z) に対する連分数解析接続の指数関数的収束を示す次の定理 1 が、[1] の定理 12.5d の証明を注意深く読めば得られる。

定理 1 解析関数 f(z) の連分数表示 (2) において、係数 a_n に対し極限値 $a=\lim_{n\to\infty}a_n$ が存在するとする、領域 S を

$$S = \left\{ z \in \mathbb{C} \left| \arg \left(z + \frac{1}{4a} \right) \neq \arg \left(-\frac{1}{4a} \right) \right. \right\}$$

で定め、T を S の任意のコンパクト部分集合とする。このとき、任意の $\epsilon > 0$ に対し m を十分大きく取れば、連分数

$$f_m(z) = \frac{a_{m+1}z}{1 + \frac{a_{m+2}z}{1 + \ddots}}$$

は

誤差 =
$$O((\theta + \epsilon)^n)$$

でT上一様収束する. ここで,

$$\theta = \sup_{z \in T} \frac{|s_1(z)|}{|s_2(z)|},$$

 $s_{1,2}(z)$ は 2次方程式 $s^2 + s - az = 0$ の根で $|s_1(z)| < |s_2(z)|$ なるものとする.

もとの冪級数 (1) の係数 c_n から連分数 (2) の係数 a_n を求めるには、商差法 [1] を用いる。ただし、商差法は数値的に不安定であるので、実際の計算では多倍長演算を用いる。

2 Fourier 変換への応用

前節で示した数値解析接続の応用として, Fourier 変換

$$\mathcal{F}[f](\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i \xi x} dx.$$
 (3)

の数値計算を考える. (3) の振動積分は, f(x) が $x \to \pm \infty$ での減衰が遅い時, 従来の数値積分公式では計算が難しい. これに対して, 前節の数値解析接続と佐藤超函数論を用いた数値計算法を提案する.

まず、Fourier 変換(3)は佐藤超函数論では次のように表される[2].

$$\begin{split} \mathscr{F}[f](\xi) \\ &= \lim_{\epsilon \to 0+} \left\{ \int_{-\infty}^{0} f(x) \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}(\xi + \mathrm{i}\epsilon)x} \mathrm{d}x \right. \\ &+ \int_{0}^{\infty} f(x) \mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i}(\xi - \mathrm{i}\epsilon)x} \mathrm{d}x \right\}. \end{split}$$

これより, $\mathscr{F}[f](\xi)$ は次式で計算できることがわかる.

$$\mathscr{F}[f](\xi) = \lim_{\epsilon \to 0+} \left\{ F_{+}(\xi + i\epsilon) - F_{-}(\xi - i\epsilon) \right\},$$

$$F_{+}(\zeta) = \int_{-\infty}^{0} f(x) e^{-2\pi i \zeta x} dx \quad (\operatorname{Im} \zeta > 0),$$

$$F_{-}(\zeta) = -\int_{0}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i \zeta x} dx \quad (\operatorname{Im} \zeta < 0).$$

したがって、 $F_{\pm}(\zeta)$ の Taylor 級数を複素平面の上/下半平面で計算して実軸上に解析接続すれ

表 1. 数値解析接続の誤差の減衰率

\overline{z}	1	2	1+i
誤差 (実験)	$O(0.17^n)$	$O(0.27^n)$	$O(0.23^n)$
誤差(理論)	$O(0.17^n)$	$O(0.26^n)$	$O(0.23^n)$

ば、Fourier 変換 $\mathscr{P}[f](\xi)$ が計算できる. $F_{\pm}(\zeta)$ を与える積分は、被積分関数が無限遠で指数関数的に減衰するので、従来の数値積分公式で簡単に計算することができる.

3 数值例

解析関数

$$f(z) = \frac{\log(1+z)}{z} = 1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{3} - \cdots$$

に対し、本発表で提案した方法で解析接続を行い誤差を調べた.数値計算はC++プログラムを用い、exflibを用いて 10 進 100 桁の多倍長演算で行った.連分数を打ち切った項数n に対する誤差の振る舞いを図1 および表1 に示す。ただし、表1 における理論誤差評価で、定理1 におけるコンパクト集合T として1 点集合 $T=\{z\}$ (z は数値解析接続を計算する点)をとった。これらが示す数値実験結果より、解析接続の誤差は指数関数的に減衰していることがわかる。表には定理1 から得られる理論誤差評価も併せて示したが、数値実験結果と極めてよく符合していることがわかる。

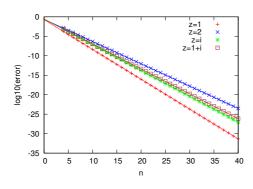


図 1. 数値解析接続の誤差.

次に、Fourier変換の数値例として次の3個の 関数のFourier変換を本方法を用いて計算した.

- (1) $\mathscr{F}[\tanh(\pi x)](\xi) = -i\operatorname{cosech}(\pi \xi),$
- (2) $\mathscr{F}[(1+x^2)^{-\nu-1/2}](\xi)$ = $\frac{2\pi^{\nu+1/2}}{\Gamma(\nu+1/2)}|\xi|^{\nu}K_{\nu}(2\pi|\xi|) \quad (\nu=1.5),$

(3)
$$\mathscr{F}[\log |x|](\xi) = -\gamma \delta(\xi) - \frac{1}{2|\xi|}$$
.

図 2 に、本方法で計算した上記の Fourier 変換 -の誤差を示す.図より、本方法により Fourier -変換が高精度で計算できること、そして、3 個の例のうち特に $\mathscr{F}[\tanh(\pi x)](\xi)$ に対して本方 -法による計算精度が高いことがわかる.

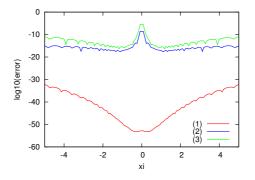


図 2. Fourier 変換の誤差.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K05267 を受けている.

- P. Henrici, Computational Complex Analysis, Vol. 2, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [2] U. Graf, Introduction to Hyperfunctions and Their Integral Transforms An Applied and Computational Approach, Birkhäuser, Basel, 2010.

Coppersmith アルゴリズムを用いた Nemec らによる素因数分解法について

菊地修1,内山成憲1

1 首都大学東京

e-mail: kikuchi-osamu@ed.tmu.ac.jp

1 はじめに

Nemec らは、Infineon Technologies が製造した IC カードで使用されている RSA 暗号の秘密 鍵の構造を解析し、その法である合成数を素因 数分解する方法を昨年提案した [1]。この方法 では、合同方程式の絶対値が十分小さい整数解 を求める Coppersmith アルゴリズムが使用されている。ここでは、上記の素因数分解アルゴリズムを実装し、その効果について考察する。

2 Nemec らの素因数分解法について

2.1 Coppersmith アルゴリズム

ここでは、[1] の素因数分解法で中心的役割を果たす Coppersmith アルゴリズムの概要を述べる。このアルゴリズムは、合成数 N(素因数は未知) と整数係数モニック多項式 f(x) が与えられたとき

$$f(x_0) \equiv 0 \pmod{b} \ (|x_0| \le X)$$
 (1)

を満たすすべての解 x_0 を求めるものである。 $(|x_0|$ は x_0 の絶対値、Xは解の上界、bはNの約数で、 $b \geq N^\beta$ 、 $0 < \beta \leq 1$ を満たす)。このアルゴリズムは、入力サイズの多項式時間で実行可能である。

アルゴリズムの概略は次で与えられる: f(x) と N を用いて (1) と同じ解を持つ多項式を複数構成し、それらの係数を並べたベクトルに基づく格子を生成する。この格子の基底に対してLLL アルゴリズムを適用し、得られたベクトルから解を得る。(詳細は [2] の $\S10$ を参照)。

2.2 素因数分解法の概要

Nemec らは、Infineon Technologies が製造している IC カードで使用されている RSA の鍵について解析を与えた [1]。 具体的には、RSA で使用する N,p (p は N の素因子) に対して、小さい素数 r をいくつか用意する。 N mod r や p mod r の分布を調べることで、その分布が

一様でないこと等から、N の素因子 p,q が次の (2) で表せることを推測した。

$$p = k_p \times M + (65537^{a_p} \mod M)$$
 (2)

ただし、 $k_p \in \mathbb{Z}$ 、 $0 \le a_p < ord_M$ (65537)、M = s#(s 以下の素数の積、s は N のビット数に対して決まる自然数)、 ord_M (65537) は M を法とする 65537 の位数。N のビット数によって M の値は異なり、例えば N が 512 ビットの場合は M = 167# とできる。このとき、 k_p は p, M よりも十分小さいことに注意する。

素因数分解の方針としては、まずaを適当な自然数として、多項式

$$f(x) = x + (M_N \times (65537^a \mod M) \mod N)$$
 を考え $(M_N = M^{-1} \mod N)$ 、 $f(x)$ と N に Coppersmith アルゴリズムを適用して、 N の 約数を法とする解が得られるか調べる、というものである。

Nemec らの素因数分解法は、この方針で、適切なaであれば(1)を満たす解が得られるため、適切な $a=a_p$ が見つかるまでaを動かして上記の操作を繰り返し、合同式の解である(2)の k_p が求められれば、素因子pが得られる、というものである。

上記の操作の実行時間は、適切なaを探す繰り返しの部分、すなわち $ord_M(65537)$ の大きさに依存するため、Nemecらは、Mを適切なMの約数M'に置き換え、pが次の(3)で表せることにも注意している。

$$p = k_p' \times M' + (65537^{a_p'} \mod M')$$
 (3)

ただし、M' は $M'>N^{\frac{1}{4}}$ を満たす必要があり、このとき $ord_{M'}(65537)$ は小さくなると期待される。[1] では、実際のデータを用いて上記のアルゴリズムを実装し、その効果を確かめている。

3 提案アルゴリズム

[1] に基づき、素因数分解アルゴリズムを Sage-Math で実装した。ここでは、その概要と実装

表 1. 実行結果

N	M	M'	m	$ord_M(65537)$	$ord_{M'}(65537)$	平均時間	最悪時間
512bit	219bit	140bit	5	2.4×10^{18}	1.2×10^{6}	3289 秒	7197 秒

上の注意点について述べる。

まず、Nemec らによるアルゴリズムの詳細は 次の Algorithm 1 で与えられる。

Algorithm 1 N の素因数分解

Input: N,M',m,t (= m + 1)

▷ m,t:格子の次元パラメータ

Output: N の素因子

1: $c' \leftarrow \text{Log}_{65537} N \mod \phi(M')$

▷ Pohlig-Hellman Algorithm を使用

2: $ord' \leftarrow ord_{M'}(65537)$

3: **for** a' in $\left[\frac{c'}{2}, \frac{c'+ord'}{2}\right]$ **do**

4: $f(x) \leftarrow x + ((M'^{-1}mod \ N) \times (65537^{a'}mod \ M') \ mod \ N)$

5: $(\beta, X) \leftarrow (0.5, \frac{2 \times N^{0.5}}{M'})$

6: Sol_set $\leftarrow CSmith(f(x), N, \beta, m, t, X)$

7: **if** Sol_set $\neq \phi$ **then**

8: **for** k' in Sol_set **do**

9: $p' \leftarrow k' \times M' + (65537^{a'} \mod M')$

if $N \mod p' = 0$ then

11: $\mathbf{return} \ p'$

次に、実装上の注意点を述べる。今回の実装では、[1] のパラメータを以下のように変更した。(N:512 ビット、p, q は同じサイズ、p > q) (a) β を 0.5 から 0.499 に変更:

 $\beta=0.5$ の場合、p>q としたとき、Coppersmith アルゴリズムで法 q における解が得られないケースがある。 $q>N^{\beta}$ を満たす β として、今回は 0.499 ととった。

- 今回は 0.499 ここった。 (b) X を $\frac{2\times N^{0.5}}{M'}$ から $\frac{N^{0.501}}{M'}$ に変更: 今回 $p < N^{0.501}$ を満たし、(3) より $k_p' < \frac{p}{M'} < \frac{N^{0.501}}{M'}$ となるため。
- (c) M' の下限値を $N^{\frac{1}{4}}$ から $2N^{\alpha-\beta^2+\varepsilon}$ に変更 $(\alpha=0.501,\beta=0.499,\varepsilon=\frac{\beta}{28})$:
- (b) での変更に伴い、解の上界 $X=\frac{N^{\alpha}}{M'}$ を、 [2] での上界 $\frac{1}{2}N^{\beta^2-\varepsilon}$ 以下になるようにとった。 $\frac{N^{\alpha}}{M'}\leq \frac{1}{2}N^{\beta^2-\varepsilon}$ より、M' の下限値を得る。
- (d) Algorithm 1 の 10 行目の条件を「N mod p'=0」から「gcd(p',N)>1」に変更:

これにより、p' が N の約数にならない場合でも、p' と N が共通因子を持っていれば素因数を求めることができる。

4 実装結果及び考察

今回、[3] の Resources 欄にある Infineon Technologies のデータを用いた。ランダムに 512 ビットの N を 50 個選んで数値実験し、M' の大きさや最適な次元パラメータ m、 $ord_{M'}(65537)$ の値 $(ord_{M'}(65537)/2$ がループの最大回数になる)、平均時間、最悪時間を求めた。実行結果は表 1 のようになった。

· 計算機環境

CPU: Intel Core i7-4770 3.40GHz

Memory: 10GB, OS: Windows10 64bit

M'の条件を [1] から変更したが、 $ord_{M'}$ (65537) の値は [1] と変わらなかった。N が 512 ビットの場合、速ければ 30 秒ほどで、最悪でも 2 時間ほどで素因数分解できた。

5 まとめ

本稿では、Nemec らの素因数分解法を実装することでその効果を確かめ、また、いくつかのパラメータの取り方について注意を与えた。アルゴリズムの中では、Coppersmith アルゴリズムを呼び出すループの回数が多いため、そこに時間がかかってしまう。今後の課題の一つとしては、M'をどう選ぶか、つまり M'の最適化が挙げられる。

- [1] M. Nemec et al., The Return of Coppersmith's Attack: Practical Factorization of Widely Used RSA Moduli, in: CCS '17 Proc. of the 2017 ACM SIGSAC Conference on Computer and Communications Security, pp. 1631-1648, 2017.
- [2] Phong Q. Nguyen et al., The LLL Algorithm : Survey and Applications, Springer-Verlag, 2010.
- [3] Measuring Popularity of Cryptographic Libraries in Internet-Wide Scans [ACSAC 2017], https://crocs.fi.muni.cz/public/papers/acsac2017.

多項式 $x^2 + 5x + 5$ に関する 2次 Frobenius 擬素数について

長島 早紀¹, 篠原 直行², 内山 成憲¹ ¹ 首都大学東京, ² 情報通信研究機構 e-mail: nagashima-saki@ed.tmu.ac.jp

1 はじめに

任意に与えられた自然数n が素数であるか否かを効率よく判定するアルゴリズムはいくつか提案されているが、計算量が $O((\log n)^3)$ かつ確定的なアルゴリズムは知られていない。したがって、そのようなアルゴリズムを構築することはこの分野の最終的な課題の1つと考えられる。

AKS 法は唯一の多項式時間の素数証明アルゴリズムである. しかし、その計算量は $\widetilde{O}((\log n)^6)$ であり、実用的なアルゴリズムであるとは言い難いものである. そこで、計算量の小さい素数判定アルゴリズムを改良することにより、素数証明アルゴリズムを構築することは、とても有効な手法である.

確率的な素数判定法の1つである、2次 Frobenius test から、素数証明アルゴリズムを構築することを目標に、多項式 x^2+5x+5 に関する2次 Frobenius 擬素数について考察する. 現在、5を法として2、3と合同な合成数で、さらに $f(x)=x^2+5x+5$ に関する2次 Frobenius 擬素数であるものは知られていない. 以降簡単のため、そのような擬素数の集合を fpsp2(-5,5) と書く. さらにそれが2つの素数の積で表される場合は fpsp2.2(-5,5) と書く. fpsp2(-5,5) が空集合であることを証明できれば、5を法として2、3と合同な奇数に対し、計算量が $O((\log n)^3)$ である素数証明アルゴリズムが構築できる.

篠原は fpsp2_2(-5,5) の元となる合成数を探索するアルゴリズムを考察し, $(\frac{5}{p})=1$ かつ $p<10^9$ なる素数は fpsp2_2(-5,5) の元の素因子になりえないことを数値実験的に示した [1]. 本稿では, $(\frac{5}{p})=1$ かつ $p>10^9$ の場合について検証した結果について述べる.

2 準備

定理 $\mathbf{1}$ ([2]). a,b を $\Delta = a^2 - 4b$ が平方数とならないような整数とする. 素数 n が $\gcd(n,2b\Delta) = 1$ を満たすとする. $f(x) = x^2 - ax + b$ であるとき、

$$x^{n} = \begin{cases} a - x \pmod{(f(x), n)}, & (\frac{\Delta}{n}) = -1\\ x \pmod{(f(x), n)}, & (\frac{\Delta}{n}) = 1 \end{cases}$$
(1)

が成立する. ((-) はヤコビ記号)

定義 **2** ([1]). a,b を $\Delta = a^2 - 4b$ が平方数とならないような整数とする. $\gcd(n,2b\Delta) = 1$ を満たす合成数 n が, (1) を満たすとき, n を $f(x) = x^2 - ax + b$ に関する 2 次 Frobenius 擬素数という. 以後簡単のために, (a,b) に関する Frobenius 擬素数と呼び, それら全てからなる集合を fpsp(a,b) と書く. さらに, fpsp(a,b) の元で $(\frac{\Delta}{n}) = -1$ を満たすもの全てからなる集合を fpsp(a,b) と書く.

定義 3 ([1]). n を奇合成数とし、その素因数分解を $n=\prod_{i=0}^{k+l}p_i^{e_i}$ と表す. $f(x)=x^2-ax+b$ とし、(a,b) は $\Delta=a^2-4b$ が n と互いに素な整数の組とする. このとき (n,a,b) に関する以下の条件を (ICF2) と呼ぶ;

(ICF2-1) 各 $i \in [1, k]$ に対して、 $m_i \mid \gcd(\frac{n}{p_i} - 1, p_i^2 - 1)$ となる m_i が存在して、 $m_i \nmid p_i - 1$ 、 $\Phi_{m_i}(x) \equiv 0 \pmod{(p_i^{e_i}, f(x))}$.

 $(ICF2-2)\sum_{i=1}^{k} e_i \equiv 1 \pmod{2}.$

(ICF2-3) 各 $i \in [k+1, k+l]$ に対して, $f(x) \equiv (x-c_i)(x-c_i^n) \pmod{p_i^{e_i}}$ となる c_i が存在する.

(ICF2-4) 各 $i \in [k+1, k+l]$ に対して、 $m_i \mid \gcd(\frac{n^2}{p_i^2}-1, p_i-1)$ となる m_i が存在して、 $m_i \nmid n-1$, $\Phi_{m_i}(x) \equiv 0 \pmod{(p_i^{e_i}, x-c_i)}$.

定理 $\mathbf{4}([1])$. $n \in \operatorname{fpsp}(a,b)$ であることと, (n,a,b) に対して (ICF2) が成り立つことは同値である.

3 pq型のGrantham's Problem

以下,
$$f(x) = x^2 + 5x + 5$$
 とする.

問題 5. (Grantham's Problem [1],[2],[3])

$$n \equiv \pm 2 \pmod{5}, \ x^{n+1} \equiv 5 \pmod{(n, f(x))}$$
(2)

となる奇合成数 n は存在するか?

この場合, $\Delta=5$ であり, $n\equiv\pm2\pmod{5}$ であるので, $\binom{\Delta}{n}=-1$ である. そのため, $\binom{2}{n}$ を満たす奇合成数 n が存在するならば, n は fpsp2(-5.5) の元である.

ここでは、2 つの素数の積で表される n で、fpsp2(-5,5) の元であるものが存在すると仮定する。 すなわち、 $p \equiv \pm 1 \pmod{5}$ 、 $q \equiv \pm 2 \pmod{5}$ であり、pq が fpsp2(a,b) の元となるp,q が存在すると仮定する。以降、このような数 pq の集合を fpsp2.2(-5,5) と書く。

定理 $\mathbf{6}$ ([1]). p,q を $(\frac{5}{p}) = 1$, $(\frac{5}{q}) = -1$ である素数とする. このとき, $f(x) \equiv (x - c_1)(x - c_2)$ (mod p) である c_1, c_2 が存在する. $x \in \mathbb{F}_q[x]/(f(x))$ の位数を m_q とする. このとき,

 $n = pq \in \operatorname{fpsp2-2}(-5,5)$ であることと以下の条件を満たすことは同値である:

$$\begin{split} p \equiv 1, 9 \pmod{40}, \ q \equiv \pm 2 \pmod{5}, \\ m_q \mid p-1, \end{split}$$

 $c_1^q \equiv c_2 \pmod{p}, c_2^q \equiv c_1 \pmod{p}.$

4 アルゴリズム

定理 6 に基づいて, pq 型の奇合成数 n で (2) を満たすものを探索するアルゴリズムを以下に示す.

Input: None

Output: pq (但し, $pq \in fpsp2_2(-5,5)$ が存在する場合.)

[Step1] p の候補を求める

1. $p \equiv 1,9 \pmod{40}$ となる素数 p を求める.

2. $x^2 - 5x + 5 \equiv (x - c_1)(x - c_2) \pmod{p}$ となる c_1, c_2 を求める.

 $3. c_1 \in \mathbb{F}_p$ の乗法位数 m_p 求める.

 $4. c_1^t \equiv c_2 \pmod{p}, c_2^t \equiv c_1 \pmod{p}$ を満たす整数 t を求める. 存在しなければ $1 \land$.

[Step2] *q* の候補を求める

 $5. q \equiv t \pmod{m_p}, q \equiv \pm 2 \pmod{5}$ となる q を求める. 存在しなければ 1 へ.

6. $x \in \mathbb{F}_q[x]/f(x)$ の乗法位数 m_q を計算する. 7. $m_q \mid p-1$ を満たすならば pq を返し, 満たさないならば 1 へ.

篠原は $fpsp2_2(-5,5)$ の元となる合成数を探索するアルゴリズムについて考察し,素数 pで,

5 を法として 1 または 4 と合同 かつ $p < 10^9$ なるものは fpsp2.2(-5,5) に含まれる合成数の素因子になりえないことを数値実験により示した [1].

5 結果と考察

 $[0,10^{10}]$ 内のすべての素数 p に対して数値実験を行ったところ,p の候補となりうるのは,521,221401,1644512641 の 3 つのみであった.これらの各 p に対して pq \in fpsp2_2(-5,5) となる q が存在しないことを以下に説明する.各 (p,t,m_p) は (521,181,260),(221401,17549,36900),(1644512641,152977919,822256320) であること

(1644512641,152977919,822256320) であることから、どの組についても $t \equiv \pm 1 \pmod{5}$ かつ $5 \mid m_p$ が成り立つ.そのため、アルゴリズムの [Step2] より、q は $q \equiv t \equiv \pm 1 \pmod{5}$ 及び $q \equiv \pm 2 \pmod{5}$ を満たさなければならず、そのような q は存在しない.

事実 7. n = pq で p と q は $(\frac{5}{p}) = 1$, $(\frac{5}{q}) = -1$ を満たすものとする. このとき, n が fpsp2_2(-5,5) の元であるならば, $p > 10^{10}$ である.

6 まとめ

実験により、 $p < 10^{10}$ の範囲では n = pq が fpsp2_2(-5,5) の元となりうる p の候補の存在を確認することはできなかった.今後の課題としては、探索範囲を広げることや、fpsp2_2(-5,5) に含まれる合成数の素因子に関する条件の絞り込み等が挙げられる.また、候補となる p に対する t と m_p に対して、 $t \equiv \pm 1 \pmod{5}$ かつ $5 \mid m_p$ であることを証明することができれば、(2) を満たす pq 型の合成数 n は存在しないと証明することができる.

- [1] N. Shinohara, "Inefficacious Conditions of the Frobenius Primality Test and Grantham's Problem", IEICE Trans.Fundamentals, Vol.E91-A, No.11 (2008), pp.3325-3334.
- [2] R. Crandall and C. Pomerance, Prime Numbers, Springer, 2001.
- [3] J. Grantham, "Frobenius pseudoprimes", Mathematics of Computation, Vol. 70, No.234 (2001), pp.873-891.

F4-style アルゴリズムの実装について

緑川 輝¹, 篠原 直行², 内山 成憲¹ ¹ 首都大学東京, ² 情報通信研究機構 e-mail: midorikawa-hikaru@ed.tmu.ac.jp

1 はじめに

耐量子計算機暗号は量子計算機が実用化されても安全性を保てると期待される暗号であり、その代表的なものとして多変数公開鍵暗号が挙げられる。多変数公開鍵暗号は与えられた多変数連立方程式が解かれると解読されてしまう。その安全性を調べるために、MQChallengeというコンテストが行われており、6種の2次の多変数連立方程式が与えられている。グレブナー基底の計算等によってそれらを解く研究が進められている。グレブナー基底を効率よく計算するアルゴリズムとして F4-style のアルゴリズムが知られている [1]、[2]、本稿では、F4-style アルゴリズムの計算に現れる多項式を可能な限り正規化しておくことで、全体の計算コストを削減する方法を提案する。

2 準備

多項式環Rを $R = \mathbb{F}_q[x_1,\ldots,x_n]$ とする.

定義 $\mathbf{1}$ ([1]). $f \in R$ に対し、f に現れる項全体の集合を $\mathbf{T}(f)$ で表し、その中で最も項順序の大きな項を頭項と呼び、 $\mathbf{HT}(f)$ で表す。その係数を頭係数と呼び、 $\mathbf{HC}(f)$ で表す。それらにより構成される単項式を頭単項式と呼び、 $\mathbf{HM}(f) = \mathbf{HT}(f) \cdot \mathbf{HC}(f)$ で表す。また、 $F \subset R$ に対して $\mathbf{HT}(F) := \{\mathbf{HT}(f) : f \in F\}$ と定める。

定義 $\mathbf{2}$ ([1]). $f,g \in R$ に対し、 $\exists t \in \mathrm{T}(f), \mathrm{HT}(g) | t$ のとき、f は g で単項簡約可能といい、f の項 t の係数を c として、 $h = f - \frac{t \cdot c}{\mathrm{HM}(g)} g$ を f の g による単項簡約という.

定義 3. $f \in R$ と多項式の集合 $G \subset R$ に対し, f が G のどの要素によっても単項簡約できない とき, f は G に関して正規形であるといい, 単 項簡約を繰り返して正規形を得ることを正規化 という. 得られた正規形を r としたとき,この 操作を

$$f \xrightarrow{*} r$$

と表す. また G が正規形であるとは, $\forall g \in G$ が $G \setminus \{g\}$ に対して正規形であることをいう.

定義 4 ([1]). $f,g \in R$ に対し、f,g の S 多項式を Spoly $(f,g) = \frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(f),\operatorname{HT}(g))}{\operatorname{HM}(f)} f - \frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(f),\operatorname{HT}(g))}{\operatorname{HM}(g)} g$ とする.

定義 5. ([1]). L を R の有限次元線形部分空間とする.L の基底で,頭項がすべて異なり,かつ各頭項は他の基底に現れないようなものを $LB(L, \prec)$ と書く.

定義 6. g_s を多項式とし、i < j のもとで、F(k; i, j)、M(k; i, j)、B(k; i, j) を以下で定義する.

 $F(k;i,j) \ \Leftrightarrow \ k < i, lcm(g_j,g_k) = lcm(g_i,g_j),$

 $M(k; i, j) \Leftrightarrow k < j, HT(g_k)|lcm(g_i, g_j)$ $\hbar > lcm(g_i, g_k) \neq lcm(g_i, g_j),$

定理 7. 次は同値である.

- (1) 多項式の集合 $G = \{g_1, \dots g_s\}$ がイデアル I の \prec に関するグレブナー基底である.
- (2) F(k;i,j), M(k;i,j), B(k;i,j) を満たす k が存在しないすべての組 $\{i,j\}$ に対し以下が成り立つ:

$$Spoly(g_i, g_j) \xrightarrow{*} 0.$$

これは、計算するべきS多項式を減らすのに 有用である.以下の定理も同様である.

定理 8. $f, g \in R$ に対し、gcd(HT(f), HT(g)) = 1 ならば以下が成り立つ:

$$Spoly(f,g) \xrightarrow{*} 0.$$

3 F4-style アルゴリズム

本稿では [1] に記載されている下記の F4-style のアルゴリズムをもとにアルゴリズムの改良と数値実験を行った.

Input: 有限多項式集合 F,項順序 \prec Output: $\langle F \rangle$ の \prec に関するグレブナー基底 G 1: $g_1 \leftarrow F$ の要素; $F \leftarrow F \setminus \{g_1\}$

6行目,18行目の Update は 定理 7,定理 8 を 利用して無駄なペアを削除する関数である [1]. また,13 行目の $Red(S_p,G,\prec)$ とは, S_p に属する各多項式を G で正規化するのに十分な多項式の集合である.

4 提案手法

22: return G

F4-style アルゴリズムの $15\sim20$ 行目で,G に新しい多項式 g_{m+1} を付け加える操作をしている。ここで G を正規化することで項順序が小さい部分に非零な係数が集まり密な状態になり,項順序が大きい部分は疎な状態にる効果が期待される。これらはグレブナー基底計算の高速化に寄与すると考えられる。

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 challenge¹ TYPE III に相当). また,ここで用いる多項式は [p.6,[3]] に従って生成する. 従来の方法と提案手法を実装しグレブナー基底の計算時間,メモリサイズを測定した. 問題として,7, 8, 9 変数のものをそれぞれ 15 個ずつ生成し実験した.

計算機環境

CPU:Intel Core i7-4770 3.40GHz

Memory:12GB

OS:Windows10

表 1. 正規化した場合としない場合の平均計算時間 (s) の比較

変数	正規化なし	正規化あり
7	3.80	2.09
8	56.3	14.9
9	460.5	109.0

表 2. 正規化した場合としない場合の平均メモリサイズ (KByte) の比較

変数	正規化なし	正規化あり
7	22.6	18.8
8	351.9	49.2
9	222.2	100.2

表 1 より, 正規化ありの場合, 正規化なしの場合に比べて $1.8 \sim 4.2$ 倍程度高速になることがわかった. 変数の個数が増えるほどその影響は顕著である. また表 2 より, メモリサイズについても, 正規化ありの場合, 正規化なしの場合と比べて $15\% \sim 85\%$ 程度削減できることがわかる. しかし, これは平均であり, 問題によってばらつきが大きかった. 問題によってはわずかではあるがメモリサイズが増加してしまう例もあった.

6 まとめ

計算の途中で多項式集合 G を正規化することで,グレブナー基底計算が高速になることが期待できる。また,計算に必要なメモリサイズも削減できることが予想される。

- [1] 野呂正行, 横山和弘, グレブナー基底の 計算 基礎編 計算代数入門, 東京大学出 版会, 2003 年.
- [2] J. C. Faugére, A new efficient algorithm for computing Gröbner bases (F4), Journal of Pure and Applied Algebra 139, 1-3 (June 1999), 61-88.
- [3] 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.

¹https://www.mqchallenge.org/

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

$\mathbb{Q}(\sqrt{-23})$ に虚数乗法を持つ楕円曲線を用いた特別な整数に対する素数証明アルゴリズム

小貫 啓史1

1 首都大学東京

e-mail: onukihiroshi@yahoo.co.jp

1 概要

本稿では Abatzoglou らによる楕円曲線を用いた特別な形の整数に対する素数証明アルゴリズム構築の定式化 [1] を類数 3 以上の場合に拡張する方法について述べる. またその方法を用いて $\mathbb{Q}(\sqrt{-23})$ に虚数乗法を持つ楕円曲線を用いた素数証明アルゴリズムについて解説する.

2 背景

n+1もしくはn-1の素因数分解が予め部分 的にわかっている整数について,一般の整数より も高速な素数証明アルゴリズムが知られている. 中でも Mersenne 数に対する Lucas-Lehmer テ スト, Fermat 数に対する Pepin テストがよく知 られている. 近年、これらの数および類似した 数に対して楕円曲線を用いた新しい判定方法が Gross[2], Denomme ら [3], Tsumura[4] によっ て構築された. これらの方法の計算量は古典的 な方法と同程度であると評価できる. これらの 方法は素数証明対象となる数をそのノルムとす る虚二次体の元xに対してx-1の素イデアル 分解が部分的にわかっていることを利用するも のである. Abatzoglou らはこれらの方法によ り古典的な方法が適用できない数に対する素数 証明アルゴリズムを構築した[1,5]. また、彼ら はこれらの方法を定式化し,ある制限の下で類 数が2以下の虚二次体に虚数乗法を持つ楕円曲 線を用いてアルゴリズムを構成した場合で古典 的な方法が適用できないものは本質的に彼らの 構築した2つしかないことを示した[1]. しか し、類数が3以上となる場合においては彼らの 定式化を用いて素数証明アルゴリズムを構築す る際にある技術的な困難があり、彼らはこれを 未解決問題とした。

3 Abatzoglou らの定式化

まず[1]の定式化について概説する.

定義 1. E を数体 M 上定義された楕円曲線, J を \mathcal{O}_M のイデアルで E の判別式を割らないも

のとする.このとき $P \in E(M)$ が J を法として強非零とは,J と互いに素な \mathcal{O}_M の元 z で $P = (x:y:z) \in E(\mathcal{O}_M)$ と表せることをいう.

K を虚二次体, E を K を含む数体 M 上定義された楕円曲線で \mathcal{O}_K に虚数乗法を持つものとする. $\gamma,\alpha_1,\ldots,\alpha_s$ を \mathcal{O}_K の非零元とし, $\alpha_1\cdots\alpha_s$ の素イデアル分解がわかっているとする

 $k = (k_1, \ldots, k_s) \in \mathbb{N}^s$ に対して

 $\Lambda_k = \gamma \alpha_1^{k_1} \cdots \alpha_s^{k_s}, \pi_k = 1 + \Lambda_k, F_k = N_{K/\mathbb{Q}}(\pi_k)$ と定義する. $F_k > 16N_{K/\mathbb{Q}}(\gamma^2)$ が成り立つことと E の判別式と F_k が互いに素であることを仮定する. 1 つ目の仮定は $\pi_k - 1$ のおよそ半分のサイズ以上の素イデアル分解が既知であることを意味している. \mathfrak{p}_k を \mathcal{O}_M のイデアルであって, $N_{M/K}(\mathfrak{p}_k) = \pi_k \mathcal{O}_K$ を満たすものとする. \mathfrak{p}_k が素イデアルであるとき, E, P の \mathfrak{p}_k を法とした還元をそれぞれ \tilde{E} , \tilde{P} とかく. さらにk が以下の仮定を満たすように選ばれているとする.

仮定 **2.** \mathfrak{p}_k が素イデアルであるとき以下が成り立つ:

- (i) \tilde{E} の Frobenius 自己同型は $[\pi_k]$;
- (ii) \mathcal{O}_K の素イデアル λ で $\alpha_1 \cdots \alpha_s$ を割るものに対して $\tilde{P} \notin [\lambda] \tilde{E}(\mathcal{O}_M/\mathfrak{p}_k)$.

この仮定の下で以下が成り立つ.

定理 3 (Theorem 3.5 of [1]). 以下は同値:

- (a) \mathfrak{p}_k は素イデアル;
- (b) $[\Lambda_k]P \equiv O_E \pmod{\mathfrak{p}_k}$, かつ, \mathcal{O}_K の素 イデアル λ で $\alpha_1 \cdots \alpha_s$ を割るものに対し て, $\left[\frac{\Lambda_k \mathcal{O}_K}{\lambda}\right] P$ の元で \mathfrak{p}_k を法として強非 零なものが存在する.

この定理は \mathfrak{p}_k の素イデアル性を P の \mathfrak{p}_k を法とした算術により調べることができることを意味している.

定理3を具体的な素数証明アルゴリズムとするためには仮定2を満たすkの条件を決定しな

くてはならない. そのためには \mathfrak{p}_k の具体的な表示を知る必要があるが, Abatzoglou らは類数が 3 以上の場合に \mathfrak{p}_k を見つけることができず, これを未解決問題とした (Remark 4.12 of [1]).

4 類数3以上への拡張

K を虚二次体, H を K の Hilbert 類体とする. K の類数を h_K とかく. α を

$$X^{h_k} + c_m X^m + \dots + c_0 = 0,$$

$$c_0, \dots, c_m \in \mathcal{O}_K, m < h_k/2$$

の根とし, $H=K(\alpha)$ となっていると仮定する. γ,β を \mathcal{O}_K の非零元とし, β の素イデアル分解 がわかっているとする. 正の整数 k に対して

$$p_k = 1 - \gamma \beta^k \alpha,$$
 $\pi_k = \mathrm{N}_{H/K}(p_k),$ $F_k = \mathrm{N}_{H/\mathbb{Q}}(p_k) = \mathrm{N}_{K/\mathbb{Q}}(\pi_k).$ と定義する. このとき, α の定義より

$$\pi_k = 1 + c_m \gamma^{h_K - m} \beta^{(h_K - m)k} + \cdots + c_0 \gamma^{h_K} \beta^{h_K k}$$

$$= 1 + \beta^{(h_K - m)k} (c_m \gamma^{h_K - m} + \cdots + c_0 \gamma^{h_K} \beta^{mk})$$

となる. $m < h_k/2$ であることから十分大きなk に対して上の式より $\pi_k - 1$ の半分以上のサイズの素イデアル分解が既知となる. したがって上述の設定に対して [1] の方法を適用することができる.

S $K=\mathbb{Q}(\sqrt{-23})$ の場合

上記の方法を用いて $K=\mathbb{Q}(\sqrt{-23})$ の場合 について素数証明アルゴリズムを構成する方法 について説明する.

 $K=\mathbb{Q}(\sqrt{-23})$ とし、H を K の Hilbert 類体とする。 α を $X^3-X-1=0$ の根とするとき、H は K 上 α で生成される。 $\tau=\frac{1+\sqrt{-23}}{2}$ とする。このとき正の整数 k に対して以下を定義する:

$$\begin{array}{rcl} p_k & = & 1 - (1+\tau)^k \alpha, \\ \pi_k & = & \mathrm{N}_{H/K}(p_k) = 1 - (1+\tau)^{2k} - (1+\tau)^{3k}, \\ F_k & = & \mathrm{N}_{H/\mathbb{O}}(p_k) = \mathrm{N}_{K/\mathbb{O}}(\pi_k). \end{array}$$

さらに K に虚数乗法を持つ楕円曲線 E とその点 P を以下で定義する:

$$E : y^2 = x^3 + Ax + B^2,$$

 $P = (0, B).$

ここで A, B は \mathcal{O}_H の元で E が K に虚数乗法 を持つようにとるものとする. これらの設定の下で,仮定 2 を満たす k の条件は \mathfrak{p}_k を法とした Legendre 記号を計算することで求めることができ, $k\pmod{1320}$ で決まることがわかる. そのような $k\pmod{1320}$ 全体の集合を S とおく. このとき以下が成り立つ.

定理 4. $k \pmod{1320} \in S$ のとき以下は同値:

- (a) F_k は素数;
- (b) $[2^{6k-1}c_k]P$ が p_k を法として強非零かつ $[2^{6k}c_k]P \equiv O_E \pmod{p_k}$.

これによって F_k の素数判定を $P\pmod{p_k}$ の算術によって行うことができる. さらに

$$\mathcal{O}_H/p_k\mathcal{O}_H\cong \mathbb{Z}/F_k\mathbb{Z}$$

であることから $P \pmod{p_k}$ の算術を整数の剰余計算によって行うこともできる.

- [1] A. Abatzoglou, A. Silverberg, A. V. Sutherland, and A. Wong, A framework for deterministic primality proving using elliptic curves with complex multiplication, Math. Comp. 85 (2016), pp. 1461–1483.
- [2] B. H. Gross, An elliptic curve test for Mersenne primes, J. Number Theory 110 (2005), no. 1, pp. 114-119.
- [3] R. Denomme and G. Savin, Elliptic curve primality tests for Fermat and related primes, J. Number Theory 128 (2008), no. 8, pp. 2398-2412.
- [4] Y. Tsumura, Primality tests for $2^p \pm 2^{(p+1)/2} + 1$ using elliptic curves, Proc. Amer. Math. Soc. 139 (2011), no. 8, 26972703.
- [5] A. Abatzoglou, A. Silverberg, A. V. Sutherland, and A. Wong, Deterministic elliptic curve primality proving for a special sequence of numbers, Open Book Ser., vol. 11, Math. Sci. Publ., Berkeley, CA, 2013, pp. 1–20.

SKT 交差拡散定常極限方程式の解の多重度と安定性の数値解析

森 竜樹¹, 鈴木 貴², 四ツ谷 晶二³

¹ 阪大·基礎工, ² 阪大·MMDS, ³ 龍谷大·理工

e-mail: 1t-mori@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 導入

1979年に Shigesada-Kawasaki-Teramoto (J. Theor. Biol., 1979) により提案された交差拡散の効果を含んだ 2 種競争系

$$\begin{cases} u_t = \Delta[(d_1 + \alpha_{11}u + \alpha_{12}v)u] \\ +u(a_1 - b_1u - c_1v) & \text{in } \Omega \times (0, \infty), \\ v_t = \Delta[(d_2 + \alpha_{21}u + \alpha_{22}v)v] \\ +v(a_2 - b_2u - c_2v) & \text{in } \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), \ v(x, 0) = v_0(x) & \text{in } \Omega \end{cases}$$

について考える. ただし, u=u(x,t), v=v(x,t) は未知関数. $d_i,\alpha_{ij},a_i,b_i,c_i$ (i,j=1,2), は正定数, $\Omega\subset\mathbb{R}^N$ $(N\geq 1)$ は滑らかな境界 $\partial\Omega$ を持つ有界境域, ν は境界 $\partial\Omega$ 上での外向き単位法線ベクトルである. 初期値 $u_0(x)$ と $v_0(x)$ は非負である.

交差拡散の項による効果は2種類の生物個体群らが、互いの個体数密度が少ない方向に移動しようとするものである。この効果によって2種の生物群が空間上で棲み分けを起こすかどうかがこの問題の興味深いところである。

次のパラメータの比の大小関係によって解の 挙動が大きく変化する.

$$A := \frac{a_1}{a_2}, \quad B := \frac{b_1}{b_2}, \quad C := \frac{c_1}{c_2}.$$

B > C の場合を弱競争系 (week competition), B < C の場合を強競争系 (strong competition) と呼ぶ、本研究では B < C の場合について考える.

定常問題は

$$\begin{cases} \Delta[(d_1 + \alpha_{11}u + \alpha_{12}v)u] \\ +u(a_1 - b_1u - c_1v) = 0 & \text{in } \Omega, \\ \Delta[(d_2 + \alpha_{21}u + \alpha_{22}v)v] \\ +v(a_2 - b_2u - c_2v) = 0 & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega, \\ u(x,0) = u_0(x), \ v(x,0) = v_0(x) & \text{in } \Omega \end{cases}$$

となる. 空間 1 次元で拡散係数が十分小さいとき, Mimura (Hiroshima Math. J., 1981) をはじめとし, Kan-non (Hiroshima Math. J., 1993) 達により特異摂動法を用いて定常解の存在, 安定性が数学的に詳しく調べられている.

Lou-Ni (J. D. E., 1996, J. D. E., 1999) は,一般の拡散係数と高次元の場合の考察を開始した.この研究の中で交差拡散の効果をみるために $\alpha_{11}=\alpha_{21}=\alpha_{22}=0$ とする.ここで, $r:=\alpha_{12}/d_1$ を導入すると時間発展問題は

$$(\text{TP}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{N}}) \begin{cases} u_t = d_1 \Delta[(1+rv)u] \\ +u(a_1 - b_1 u - c_1 v) \text{ in } \Omega \times (0, \infty), \\ v_t = d_2 \Delta v \\ +v(a_2 - b_2 u - c_2 v) \text{ in } \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 \text{ on } \partial \Omega \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), v(x, 0) = v_0(x) \text{ in } \Omega \end{cases}$$

となり、対応する解が正値の定常問題は

$$(S_r^N) \begin{cases} d_1 \Delta[(1+rv)u] \\ +u(a_1-b_1u-c_1v) = 0 & \text{in } \Omega, \\ d_2 \Delta v \\ +v(a_2-b_2u-c_2v) = 0 & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial \Omega, \\ u(x) > 0, \ v(x) > 0 & \text{in } \Omega \end{cases}$$

となる. (TP_r^N) と (S_r^N) の解構造解明の第一歩として,交差拡散の効果を表わすパラメータ r を $r \to \infty$ とし,極限方程式を導出した. (TP_r^N) の正値解に対応する時間発展極限問題は

$$(\text{TP}_{\infty}^{\text{N}}) \begin{cases} \frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega} \frac{\tau(t)}{v} dx \right\} \\ = \int_{\Omega} \frac{\tau(t)}{v} \left(a_1 - b_1 \frac{\tau(t)}{v} - c_1 v \right) dx, \\ v_t = d_2 \Delta v \\ + v(a_2 - c_2 v) - b_2 \tau(t) \text{ in } \Omega, \\ \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial \Omega \times (0, \infty), \\ v(0, t) = v_0(x) > 0 \end{cases}$$

である. このとき $u(x,t) := \tau(t)/v(x,t)$ である. 定常極限方問題は

$$(\mathbf{S}_{\infty}^{\mathbf{N}}) \begin{cases} \int_{\Omega} \frac{1}{v} \left(a_1 - b_1 \frac{\tau}{v} - c_1 v \right) dx = 0, \\ d_2 \Delta v \\ + v(a_2 - c_2 v) - b_2 \tau = 0 & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial \Omega, \\ v(x) > 0 & \text{in } \Omega \end{cases}$$

となる. このとき, $u(x):=\tau/v(x)$ である. 本研究では特に空間 1 次元 (N=1) で $\Omega:=(0,1)$ とした

$$(\text{TP}_{\infty}^{1}) \begin{cases} \frac{d}{dt} \left\{ \int_{0}^{1} \frac{\tau(t)}{v} dx \right\} \\ = \int_{0}^{1} \frac{\tau(t)}{v} \left(a_{1} - b_{1} \frac{\tau(t)}{v} - c_{1} v \right) dx, \\ v_{t} = d_{2} v_{xx} \\ + v(a_{2} - c_{2} v) - b_{2} \tau(t) & \text{in } (0, 1), \\ v_{x}(0, t) = 0, \ v_{x}(1, t) = 0 \ t \in (0, \infty), \\ v(0, t) = v_{0}(x) > 0 \end{cases}$$

および、vが単調増加の場合に注目した

$$(\mathbf{S}_{\infty}^{1}) \begin{cases} \int_{0}^{1} \frac{1}{v} \left(a_{1} - b_{1} \frac{\tau}{v} - c_{1} v \right) dx = 0, \\ d_{2} v_{xx} \\ + v(a_{2} - c_{2} v) - b_{2} \tau = 0 & \text{in } (0, 1), \\ v_{x}(0) = 0, \quad v_{x}(1) = 0, \\ v(x) > 0, \quad v_{x}(x) > 0 & \text{in } (0, 1) \end{cases}$$

について考える.

2 主結果

C/B > 7/3 において、 (S_∞^1) の非定数定常解の個数高々2 個と予想されていたが、極めて小さい d_2 について詳細に調べると非定数定常解が最大3 個現れるパラメータ領域が存在することを数値的に確認した. (S_∞^1) の解 $(v(x), \tau)$ の線形安定性については (TP_∞^1) に対応する線形化固有値問題

(L)
$$\begin{cases} \tau \int_{0}^{1} \frac{\psi}{v^{2}} \left(-a_{1} + \frac{2b_{1}\tau}{v} \right) dx - b_{1}\tau \eta \int_{0}^{1} \frac{1}{v^{2}} dx \\ = \sigma \eta \int_{0}^{1} \frac{1}{v} dx - \sigma \tau \int_{0}^{1} \frac{\psi}{v^{2}} dx, \\ d_{2}\psi_{xx} + (a_{2} - 2c_{2}v)\psi - b_{2}\eta = \sigma \psi \operatorname{in}(0, 1), \\ \psi_{x}(0) = \psi_{x}(1) = 0 \end{cases}$$

を数値的に解いて調べた. ここで, σ は固有値, $(\psi(x), \eta)$ は固有関数である.

図 1, 2 は C/B > 7/3 の場合の (S^1_∞) の非定数定常解の存在・非存在領域と多重度を図示したものである. d_2 が極めて小さいとき, 解の多重度について複雑な状況が起こる.

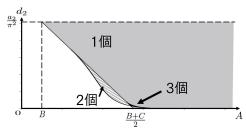


図 1. C/B > 7/3 の場合の解の多重度.

拡大図

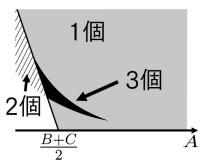


図 2. 解が 3 個現れる領域の部分拡大図.

図 3 は C/B > 7/3 の場合の (S^1_∞) の非定数 定常解の数値的安定性を図示したものである. 青色の領域では局所安定で, 赤色の領域では不 安定である.

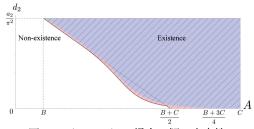


図 3. C/B > 7/3 の場合の解の安定性.

解の形状や数値計算法などの詳細については 講演時に述べる.

3 謝辞

本研究は, 大阪大学 国際共同研究促進プログラム タイプ A (生命現象を記述する非線形偏微分方程式系の数学解析と数理) の助成を受けたものである.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

反応拡散方程式系を用いた細胞膜と細胞質における2つの極性パターン形成メカニズムの解明

中原智弘1,李聖林1,2

 1 広島大学大学院 理学研究科, 2 JST さきがけ

e-mail: tomohiro.nakahara.2a@gmail.com

1 概要

初期発生過程における非対称細胞分裂は細胞 分化の根幹となる仕組みの一つであり、そのメ カニズムの解明は発生生物学における重要な課 題の一つである。非対称細胞分裂の初期段階に 細胞は自らが持つたんぱく質を左右非対称に局 在させ極性パターンを形成する。このような細 胞極性は娘細胞の大きさ、運命を決定するため 重要なプロセスであり、非対称細胞分裂のメカ ニズム解明には細胞極性のメカニズムを解明が 欠かせない。

細胞極性のメカニズム解明のために、モデル生物である線虫胚の非対称細胞分裂における極性形成は多く研究されてきた。線虫の受精卵では細胞膜において PAR たんぱく質が極性を形成することが知られている。また、細胞膜での PAR 極性の形成と同時に細胞質では MEX-5/6 が極性を形成することが観察されており、Anterior たんぱく質(PAR-3,PAR-6)とは同位相に、Posterior たんぱく質(PAR-1,PAR-2)とは逆位相に極性を形成する(図 1)。さらには MEX-5/6 が細胞膜での PAR たんぱく質の極性形成に影響を与えることも実験から明らかになった [1]。

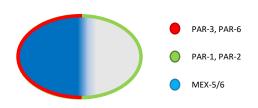


図 1. 細胞膜と細胞質での極性

しかし、これまでの理論研究のほとんどは PAR たんぱく質にのみ注目しており、PAR たんぱく質と MEX-5/6 の相互関係について考察 したものはない。また、実験においても MEX-5/6 がどのように細胞膜での PAR 極性の形成を制御しているかについては明らかにされてい

ない。

本講演では、細胞膜でのPAR極性と細胞質でのMEX-5/6の極性形成を同時に考察した数理モデルを構築し、さらに構築した数理モデルとPhase-field 法を融合させることで細胞の形を自由自在に反映できる数理モデルを構築する。細胞膜だけでなく細胞質、細胞全体におけるたんぱく質の極性形成のより核となるメカニズムを解明する。

2 数理モデル

 $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ を細胞質、 $\partial \Omega (\equiv \Gamma)$ を細胞膜とする。複数のたんぱく質のダイナミクスを捉えるために以下のような移流反応拡散方程式系を実験の結果をもとに構築した。

$$\begin{split} &\frac{\partial[A_m]}{\partial t} + \nabla_{\Gamma} \cdot (\mathbf{v}_m[A_m]) = D_m^A \nabla^2[A_m] + F_{\mathrm{on}}^A(\mathbf{X}, t)[A_c] - F_{\mathrm{off}}^A(\mathbf{X}, t)[A_m] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \\ &\frac{\partial[A_c]}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_c[A_c]) = D_c^A \nabla^2[A_c] \quad \mathbf{X} \in \Omega \\ &D_c^A \frac{\partial[A_c]}{\partial \mathbf{n}} = -F_{\mathrm{on}}^A(\mathbf{X}, t)[A_c] + F_{\mathrm{off}}^A(\mathbf{X}, t)[A_m] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \\ &\frac{\partial[P_m]}{\partial t} + \nabla_{\Gamma} \cdot (\mathbf{v}_m[P_m]) = D_m^P \nabla_{\Gamma}^2[P_m] + F_{\mathrm{on}}^P(\mathbf{X}, t)[P_c] - F_{\mathrm{off}}^P(\mathbf{X}, t)[P_m] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \\ &\frac{\partial[P_c]}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_c[P_c]) = D_c^P \nabla^2[P_c] \quad \mathbf{X} \in \Omega \\ &D_c^P \frac{\partial[P_c]}{\partial \mathbf{n}} = -F_{\mathrm{on}}^P(\mathbf{X}, t)[P_c] + F_{\mathrm{off}}^P(\mathbf{X}, t)[P_m] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \\ &\frac{\partial[M_f]}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_c[M_f]) = D_f \nabla^2[M_f] \quad \mathbf{X} \in \Omega \\ &D_f \frac{\partial[M_f]}{\partial \mathbf{n}} = G_f(\mathbf{X}, t)[M_s] - G_s(\mathbf{X}, t)[M_f] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \\ &\frac{\partial[M_s]}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_c[M_s]) = D_s \nabla^2[M_s] \quad \mathbf{X} \in \Omega \\ &D_s \frac{\partial[M_s]}{\partial \mathbf{n}} = -G_f(\mathbf{X}, t)[M_s] + G_s(\mathbf{X}, t)[M_f] \quad \mathbf{X} \in \partial \Omega \end{split}$$

ここで $[A_m](\mathbf{X},t), [A_c](\mathbf{X},t)$ は空間 $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^n$ と時間 t における Anterior たんぱく質(PAR-3, PAR-6)の細胞膜と細胞質での濃度を表す。同様に、 $[P_m](\mathbf{X},t), [P_c](\mathbf{X},t)$ は Posterior たんぱく質(PAR-1, PAR-2)の細胞膜と細胞質での濃度を表す。 $[M_f](\mathbf{X},t), [M_s](\mathbf{X},t)$ は細胞質における MEX-5/6 の濃度を表す。ただし、MEX-5/6 は細胞質において拡散の大きさの異なった形態で存在するため、 $[M_f]$ は拡散の速い形態、 $[M_s]$ は拡散の遅い形態の濃度を表す。 $D_m^A, D_c^A, D_m^P, D_c^P, D_f, D_s$ はそれぞれ拡散係数である。また \mathbf{n} は細胞質から細胞膜向きの法線ベクトルで

ある。

 $F_{\mathrm{on}}^{A}(\mathbf{X},t), F_{\mathrm{on}}^{P}(\mathbf{X},t)$ は Anterior たんぱく質 と Posterior たんぱく質の細胞質から細胞膜への移動率を表す on-rate 関数であり、 $F_{\mathrm{off}}^{A}(\mathbf{X},t)$, $F_{\mathrm{off}}^{P}(\mathbf{x},t)$ は細胞膜から細胞質への移動率を表す off-rate 関数である。on-rate 関数と off-rate 関数にはたんぱく質同士による制御の効果が反映されている。 $G_{f}(\mathbf{x},t),G_{s}(\mathbf{x},t)$ は PAR たんぱく質による MEX-5/6 の制御の効果を表す関数である。

線虫の受精卵では細胞極性の形成時に、アクトミオシンの収縮に伴い細胞の表層と細胞質で移流が起こる。 $\mathbf{v}_m(\mathbf{X},t)$ は細胞膜での移流の速度を表し、 $\mathbf{v}_c(\mathbf{x},t)$ は細胞質での移流の速度を表す。

この移流反応拡散方程式系に Phase-field 法を以下のように融合させることで細胞の形を反映した数理モデルを構築した。

$$\begin{split} &\frac{\partial B(\phi)[A_m]}{\partial t} + \nabla \cdot (B(\phi)\mathbf{v}_m[A_m]) = D_m^A \nabla \cdot (B(\phi)\nabla[A_m]) + B(\phi)F_{on}^A(\mathbf{X},t)[A_c] - B(\phi)F_{off}^A(\mathbf{X},t)[A_m] \\ &\frac{\partial \phi[A_c]}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\mathbf{v}_c[A_c]) = D_c^A \nabla \cdot (\phi\nabla[A_c]) - B(\phi)F_{on}^A(\mathbf{X},t)[A_c] + B(\phi)F_{off}^A(\mathbf{X},t)[A_m] \\ &\frac{\partial B(\phi)[P_m]}{\partial t} + \nabla \cdot (B(\phi)\mathbf{v}_m[P_m]) = D_m^P \nabla \cdot (B(\phi)\nabla[P_m]) + B(\phi)F_{on}^P(\mathbf{X},t)[P_c] - B(\phi)F_{off}^P(\mathbf{X},t)[P_m] \\ &\frac{\partial \phi[P_c]}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\mathbf{v}_c[P_c]) = D_c^P \nabla \cdot (\phi\nabla[P_c]) - B(\phi)F_{on}^P(\mathbf{X},t)[P_c] + B(\phi)F_{off}^P(\mathbf{X},t)[P_m] \\ &\frac{\partial \phi[M_f]}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\mathbf{v}_c[M_f]) = D_f \nabla \cdot (\phi\nabla[M_f]) + B(\phi)G_f(\mathbf{X},t)[M_s] - B(\phi)G_s(\mathbf{X},t)[M_f] \\ &\frac{\partial \phi[M_s]}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\mathbf{v}_c[M_s]) = D_s \nabla \cdot (\phi\nabla[M_s]) - B(\phi)G_f(\mathbf{X},t)[M_s] + B(\phi)G_s(\mathbf{X},t)[M_f] \end{split}$$

ここで ϕ は Phase-field 関数であり、 $\phi=1$ となる空間を細胞質、 $\phi=0$ となる空間を細胞の外、 $0<\phi<1$ となる空間を細胞膜とする。 $B(\phi)$ は ϕ に依存した関数であり、 $\phi=0,1$ で $B(\phi)=0$ となり $0<\phi<1$ では $0< B(\phi)<1$ となる(図 2)。

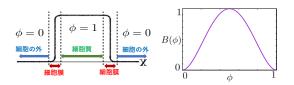


図 2. ϕ と $B(\phi)$ に関する図

3 極性パターン形成と結果

本研究では構築した数理モデルを用いることで、細胞膜での PAR 極性と細胞質での MEX-5/6 の極性の形成に成功した(図3)。さらに以下のような結果を得た [2]。

MEX-5/6の極性はPAR極性に必ずしも必要ではない。

- MEX-5/6 は Anterior たんぱく質を抑制 することで PAR 極性ドメインの長さを 制御する。
- MEX-5/6の極性形成において、MEX-5/6 の拡散の遅い形態から速い形態への変換 が重要である。
- 移流は MEX-5/6 の遅い形態から速い形 態への変換を活発にする。
- 極性の始まる位置は PAR 極性と MEX-5/6 極性の形成に影響を与える。

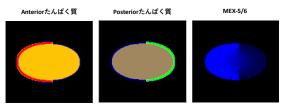


図3. 数値計算から得られた細胞極性

4 結論

本研究ではPAR たんぱく質だけでなく細胞質のMEX-5/6にも注目し数理モデルを構築することで、細胞膜での極性形成と細胞質での極性形成を同時に考察することができた。このことにより、これまで明らかにされていなかった細胞全体での極性形成のよりコアなメカニズムについて提案できた。また、細胞の形を反映した数理モデルを用いたことから細胞質におけるたんぱく質のより正確なダイナミクス、細胞の形の影響などを捉えることができた。本研究のモデリング手法はどんな細胞の形でもそれを反映した上で分子のダイナミクスを考察できるため、極性パターン形成研究の分野における反応拡散方程式のさらなる応用が期待される。

- [1] Adrian A. Cuenca, Aaron Schetter, Donato Aceto, Kenneth Kemphues, Geraldine Seydoux, Polarization if the C. elegans zygote proceeds via distinct establishment and maintenance phase, Development 130, 2002, 1255-1265.
- [2] Tomohiro Nakahara, Sungrim Seirin-Lee, The role of cytoplasmic proteins on cell polarity of asymmetric cell devision, *in preprint*

ルジャンドル陪関数の変形と応用12

田川 昭夫

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

1 はじめに

ルジャンドル陪関数Pn+m.mを、 比例する関数、(定数係数の定義が異なる) $(\sin \theta)^m * Rn.m(x) に変形する。$ x=cos & Rn.m(x)は、n次の多項式で、 最高次xⁿの定数係数を、1/n!で決める。 & Rn.m = Rn-1.m+1 の式を得る。[1] 等速運動をする球体の流れの解を求める。 軸対称の定常流として、ナビエストークス式を、 ストークス近似する。今回は、 △{rotV}=0の式からベクトルポテンシャルを 計算して、渦流の解Vを求める。次に、このV を代入して、二次慣性項VXrot{V}の grad成分が造る圧力P3を計算する。 2 ストークス近似の解は、∆{rotV}=0 ナビエストークスの式で、定常流のとき、 = $\eta * \Delta[V]$ - gradP。(Xはベクトルの外積) ストークス近似式は、慣性項をOとおいて、 Δ {V} = 1 / η *gradP_o 連続の式divV=0の条件をつけると、 $\Delta s[P] = 0$ が必要になる。rotをとると、 $rot\{\Delta\{V\}\} = \Delta\{rotV\} = 0_{\circ}$ $rotV=Bn*E\phi$ 、 $Bn=func.(r、<math>\theta$ のとき、 ベクトル演算子 △の
の成分について $\Delta s\{Bn\}-Bn/\alpha^2=0$, ($\alpha=r*sin\theta$) 解は、 $Bn=(a/r)^(n+2)*sin \theta*Rn.1$ 。 スカラーのラプラス式 △s{Un.m}=0の解を

Un.m= $(a/r)^(n+m+1)*$ Rn.m*($\sin \theta$) m* $\cos \phi \ge t \delta$. Bn=Un.1/cos ϕ が証明できる。 渦流VnのベクトルポテンシャルをAnとする。 $Vn = rot\{An\}_{\circ}$ 連続の式は自動的に満足される。rotをとる。 $rot{Vn} = rotrot{An} = Bn*E \phi_o$ $(An)r=(An)\theta=0$ $(An) \phi \neq func.(\phi)$ のとき、 $div\{An\} = 0$ 。 $rotrot{An}=Bn*E \phi の式は、$ $\Delta s\{(An) \phi\} - (An) \phi / \alpha^2 = -Bn_o$ スカラーの式となる。 解は、 $(An) \phi = r^2/(4n+2) * Bn$ 。 別の方法での渦流の解は、[2] Vn=Cbn*r/a*Un+1*Er+Can/a* (n+1)*grad {r^2*Un+1}。(Cbnは定数。 $Can = -(n-1)/\{(n+1)(4n+2)\}*$ Cbn)。(An) φにCbn / aを乗算した解、 Vn=rot{An}と一致する。 $rotrot{Vn} = rot{Bn*E}\phi$ - (n+1)*grad {Un+1.0}も得る。Vnが、 div {Vn} = 0でgrad {Φ}の形を含むとき、 ーrotrot{Vn}は、全粘性圧力を与える。 渦流の解は、ベクトルポテンシャルAnから、 すべて計算できる。n=0の解は、 ストークス流れの渦流成分を与える。 ストークス流れの解き方は、 $(F=6\pi n)$ 今回の方法が最短と考える。

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集(2018.9.3·5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

3 二次慣性項の造る圧力P3の式

二次慣性項をHとおく。 $H = - \rho * VXrotV$ 。 (rotV) $\phi = Bn$ 、

(rotV)r=(rotV) θ =0とする。

grad dに直交するgrad Aについて。

β=r*cos θとおくと、

E φ=grad βXgrad のが成り立つ。

これと、ベクトルの三重積の公式より、

 $-H/\rho = (V \cdot \operatorname{grad} \alpha) * \operatorname{Bn*grad} \beta$

 $-(V \cdot \operatorname{grad} \beta) * \operatorname{Bn*grad} \alpha$

Bnがストークス近似解のBnのとき、

 $grad\{Un\}=$

an*Bn*grad α +bn*Un+1*grad β [2]

の関係式で、Bn*grad αを消去できる。

Un.0=Unと表す。an=-(2n+1)/a。

 $bn = -(n+1)(2n+1)/a_0$

div ϵ ≥ δ ≥ δ an* δ [P3/ ρ] =

(grad(V•gradUn)•grad ₿

- (grad (V•grad β)•gradUn)を得る。

ストークス近似式の渦流の解で、

Vp=grad{r^2*Up+1}の造る圧力P3は、

an* Δ s{P3/ ρ } =

 $bn/2*\Delta s\{r^2*Up+1*Un+1\}$

+bn(2p+1)*Up+1*Un+1

△s{P3}∝Up+1*Un+1 の項がある。

ポアソン方程式の右辺に、Rp+1.0*Rn+1.0 の2次項が現れる。

4 Δs{Φ}=Up*Unを解く

F=r*Up、G=r*Unとおき、

L= △s {F*G}を計算する。

 $L=F*\Delta_S\{G\}+G*\Delta_S\{F\}$

 $+2 \delta \delta \{F\} * \delta \delta \{G\} + 2(1-x^2) \delta \delta \{F\}$

 $*\delta \& \{G\}/r^2$.

L=(2pn-2p-2n)Up*Un

+2Bp-1*Bn-1。

先の、grad {Un} =

an*Bn*grad α +bn*Un+1*grad β

の関係式で、Bp-1*Bn-1 を消去する。

 $\Delta s\{Up-1*Un-1\}=$

 $2*(grad{Up-1}\cdot grad{Un-1}) =$

2bp-1*bn-1*Up*Un

+2ap-1*an-1*Bp-1*Bn-1 を代入する。

ポアソン方程式の解は。

 $(2p+2n)*Up*Un=a^2*\Delta s\{Up-1*Un-1\}$

 $/\{(2p-1)(2n-1)\}-\Delta s\{r^2*Up*Un\}$

p=0のとき、

 $\Delta s\{r*Un\} = -2n*Un/r_{\circ}$

従来の解と一致する。

5 まとめ

ルジャンドル陪関数Pn+m.mの変形で、rot等の微分演算が簡略化されると考える。

- [1] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用, 日本応用数理学会 2010 年度年会講演予稿 集, pp. 317 - 318
- [2] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用 11, 日本応用数理学会 2016 年度年会講演 予稿集

文字列の非可換位相半群上の偏微分方程式と生物群集の動態解析

小谷野 $仁^1$, 澤田 和典 2 , 山本 \mathbb{A}^1 , 山田 拓司 1 東京工業大学生命理工学院, 2 株式会社ぐるなび

e-mail: koyano.h.aa@m.titech.ac.jp

1 配列の集団の時間発展の数理モデル

1つの環境中の生物群集は、群集中の他の個 体や周囲の環境と相互作用しながら時間発展し ていく. 我々はこのダイナミクスに興味がある. アルファベット $A = \{a, c, g, t\}$ 上の文字列が なす非可換位相半群を A* によって表す. そう すると、DNA や遺伝子の配列は A* の元であ り、生物群集が持つ DNA やある遺伝子の全体 (母集団) の分布は、A* 上の確率関数として表 される. そこで、生物群集をそれが持つ DNA の集団や 16S リボソーム RNA 遺伝子の集団と して捉えることにより、生物群集の時間発展の 数理モデリングにアプローチする. 進化学では、 太古の地球の海底熱水孔域に, 現存の生命の共 通祖先 (の DNA) が誕生したと考えられてい る. その後, 地球上の悠久の生命史の中で生命 は多様化し、現在の地球上には多様な生命、或 いは同じことであるが、多様な DNA が存在す る. この過程は、地球上の DNA の集団が、A* の1点である共通祖先のDNAから、配列中に 確率的に起こる突然変異と環境から掛かる淘汰 圧の下で、世代交代の度に A* の中で広がって いったことと見なせる. そこで、[1] では、拡散 方程式をモチーフにして, A* 上で, 1 つの環境 中の生物群集が持つ DNA の集団が、確率的な 突然変異と環境からの淘汰圧の下で時間発展し ていく様子、すなわち DNA の集団の進化を記 述する

$$\begin{split} \frac{\partial q(s,t)}{\partial t} &= -c(s,t) + b(s,t)(1-\pi)^{\ell(s)} \\ &+ \sum_{1 \le d \le \infty} \sum_{s' \in V(s,d)} b(s',t) \frac{\ell(s')C_d\pi^d(1-\pi)^{\ell(s')-d}}{|V(s',d)|} \end{split}$$

という形の偏微分方程式を導出した (記号の詳細は略). また,モデルの数理解析を行って,集団が分化して新しい種が作られるための条件や,集団が平衡状態を維持し,長期間に渡って変化しないでいるための条件を示した.

2 配列の集団への淘汰圧の統計的推定

進化学における淘汰圧は、力学における力のように観測できるものではないが、それを推定

したいという欲求は、進化学や生態学において は自然なものとしてある. これまで、数値とし て表される形質に対しては、その測定値に基づ いて環境から集団中の個体に掛かる淘汰圧を推 定する方法が色々と考えられ, 実際に淘汰圧を 推定した事例研究も多くなされてきたが、微生 物学においてこれらの方法を用いることはでき ない. DNA やある遺伝子の配列に対して淘汰 圧を推定することが、全ての生物に適用できる 統一的ですっきりした接近法であるが、このよ うな方法はこれまで考えられてこなかった. ま た, A* 上には, これまで, 実数の集合 ℝ 上の正 規分布や自然数の集合 № 上の 2 項分布のよう なパラメトリックな分布は導入されていなかっ たが、[2] では、その混合モデルを用いて、ある 環境中の配列の集団にその環境から掛かる淘汰 圧の分布を表すように設計された

$$q_d(s;\lambda,\rho) = \frac{1}{(\rho+1) \left| \partial U_d(\lambda,d(s,\lambda)) \right|} \left(\frac{\rho}{\rho+1} \right)^{d(s,\lambda)}$$

という形の確率関数を持つ分布を A^* 上に導入し (記号の詳細は略), その基本的な性質を調べることから始めて, その混合モデルのパラメーターを推定する方法を開発し, [3,4] において証明された結果を応用して, 統計的漸近理論の枠組みでその方法に対して数理的基礎付けを与えた後, 数値実験を行ってその有効性を確かめた.

3 環境微生物のダイナミクスへの応用

本発表において、我々は、まず、上記の2つの研究の結果を簡単に述べた後、それらにおいて開発した理論モデルと統計的方法を組み合わせ、Brassica rapa subvar. hiroshimana Kitam. という植物の周辺環境を人工的に高塩環境に改変した前後の2時点においてその環境中の微生物群集から収集された16SリボソームRNA遺伝子の環境標本を用いて、その集団の時間発展の数値実験を行った結果を示す.

4 配列の集団の動態解析の統計的方法

粒子の運動や細胞の遊走の研究では、対象は 3 次元 Euclid 空間 \mathbb{R}^3 の点として扱われる. つ

まり、用いられているのは、時間と共に空間 \mathbb{R}^3 の点がどのように移動していくのかを調べる, という枠組みである. 我々は、環境を改変するこ とにより、微生物群集がどのように時間変化し ていくのか、変化の特徴に興味がある. 今、微生 物群集をそれが持つ 16S リボソーム RNA 遺伝 子の集団と捉えている. 特に、1 つの環境中には 同一の 16S リボソーム RNA 遺伝子が多数存在 するので、微生物群集を 16S リボソーム RNA 遺伝子の配列の集まりと各配列の相対頻度とし て表現するという立場を取っている. これは、 微生物群集を、アルファベット $A = \{a, c, g, t\}$ 上の文字列の位相半群 A* 上の確率分布 (A* は 離散的なので、確率関数)として捉えているこ とに他ならない. つまり, 第1節において述べ たように、"1 つの微生物群集 = A^* 上の 1 つ の確率関数"である. (実際には粒子や細胞が移 動しない点も含めて)空間のありとあらゆる点 の集まりが \mathbb{R}^3 であった. 同様に考えると、(架 空のものまで含むが) ありとあらゆる微生物群 集の集まりは、 A^* 上の確率関数の集合 (\mathcal{P} と書 く)ということになる. そこで, 微生物群集の 動態を, 時間が経過するに従って, 空間 \mathcal{P} の点 がどのように動いていくのか、動き方にどのよ うな特徴があるのかを調べる、という枠組みで 研究することを考える. \mathbb{R}^3 は, 代数の立場から 見ると内積空間であり、解析の立場から見ると 距離空間であって、移動距離 (1. 総移動距離, 2. 変位), 速さ (3. 最大値, 4. 最小値, 5. 平均), 速 さのばらつき (6. 範囲, 7. 標準偏差, 8. 変動係 数), 移動方向 (9. (x, y) 平面上の平均方向, 10. z 軸方向の平均方向), 及び直進度 (11. 方向持 続性、12. 平均合成長) などの運動解析の基本 的な物理量は、これらの空間の構造(加法、スカ ラー乗法, 内積, ノルム, 及び距離) を用いて定 義されている. 集合 \mathcal{P} は、[5] によって \mathcal{P} 上に 導入された β 多様性という距離によって距離空 間をなすが、加法、スカラー乗法、及び内積は定 義されないので、少なくとも自明な仕方でア上 に上記の 9, 10, 及び 12 に対応する量を定義す ることはできない. しかし, 距離のみを用いて 定義される他の量の対応物は、ア上に導入する ことができる. 但し, 1 つの環境中の生物群集 が持つ全ての 16S リボソーム RNA 遺伝子を 収集することは絶対に不可能であるから、空間 における粒子や細胞の位置に基づいて計算され る上記の12個の物理量と異なり、導入された 量は,直接観測できる,或いは観測されたもの

から直接計算できるものではなく、収集された 16S リボソーム RNA 遺伝子の環境標本から推定するしかない、本発表では、我々は、運動解析に倣って、動態解析の基本的な特徴量を \mathcal{P} 上に導入し、これらの推定量を構成して、それらの統計的性質を調べ、その後、開発した統計的方法を、第 3 節でその動態をコンピューターの中で求めた、 $Brassica\ rapa\ subvar.\ hiroshimana\ Kitam.$ の周辺環境中の微生物群集に応用した結果を述べる.

- [1] H. Koyano and K. Yano. Evolutionary model of a population of DNA sequences through the interaction with an environment and its application to speciation analysis. arXiv:1706.01182 [q-bio.PE].
- [2] H. Koyano, M. Hayashida, and T. Akutsu. Optimal string clustering based on a Laplace-like mixture and EM algorithm on a set of strings. arXiv:1411.6471 [math.ST].
- [3] H. Koyano and H. Kishino. Quantifying biodiversity and asymptotics for a sequence of random strings. *Physical Review E*, 81(6):061912, 2010.
- [4] H. Koyano, M. Hayashida, and T. Akutsu. Maximum margin classifier working in a set of strings. Proceedings of the Royal Society A, 2016.
- [5] H. Koyano, T. Tsubouchi, H. Kishino, and T. Akutsu. Archaeal β diversity patterns under the seafloor along geochemical gradients. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 119(9):1770–1788, 2014.

有限領域に閉じ込められた樟脳粒の自己駆動運動

小谷野 由紀¹, 末松 J. 信彦^{2,3}, 北畑 裕之¹

1 千葉大学大学院理学研究院, 2 明治大学大学院先端数理科学研究科,

³明治大学先端数理科学インスティテュート (MIMS)

e-mail: y.koyano@chiba-u.jp

1 緒言

自発的に自由エネルギーを運動エネルギーへ変換し運動する粒子は自己駆動粒子と呼ばれ、水面に浮かべた樟脳粒はその一例である[1]. 樟脳粒は樟脳分子を水面に拡散し、水面に樟脳分子濃度場を形成する. 樟脳分子は界面活性剤としてはたらくため表面張力が空間的に不均一となり、樟脳粒は表面張力場の異方性に従って動く. 樟脳分子の拡散ダイナミクスは反応拡散系と捉えることができ[2]、これまで様々な研究がなされてきた[3,4]. 筆者らはこれまで、1次元有限区間に閉じ込められた場合、2次元で無限系の場合について解析を行ってきた[5,6]. 本研究では、これまでの研究の拡張として、2次元円形領域に閉じ込められた樟脳粒の運動の分岐解析を行った.

2 数理モデル

図 1 に示すように、半径 R の 2 次元円形の水面に樟脳粒を閉じ込めた系を考える。樟脳粒の運動に関する数理モデルは樟脳粒の位置の時間発展を記述する 2 階常微分方程式と、水面の樟脳分子濃度の時間発展を記述する偏微分方程式からなる [2]. ここでは無次元化によって含まれるパラメータの個数を最小にしたモデルを紹介する。 2 次元極座標における樟脳粒の重心位置 $\rho = (\rho(t), \phi(t))$ の時間発展方程式は、

$$\sigma \frac{d^2 \boldsymbol{\rho}}{dt^2} = -\xi \frac{d\boldsymbol{\rho}}{dt} + \boldsymbol{F} \tag{1}$$

と与える。パラメータ $_{\sigma}$ と $_{\xi}$ は樟脳粒の単位面積あたりの質量および水面をすべるときの抵抗係数である。ここで、表面張力由来の駆動力 $_{F}=F(c;\rho)$ は樟脳粒の周囲にかかる表面張力を線積分で足しあわせる:

$$F = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{S} \int_{\partial \Omega} \gamma \left(c(\boldsymbol{\rho} + \epsilon \boldsymbol{n}) \right) \boldsymbol{n} d\ell.$$
 (2)

ここで、n は樟脳粒の周囲 $\partial\Omega$ での法線ベクトルであり、S は樟脳粒が水面と接する面積であ

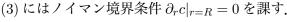
る. 一方,樟脳分子の濃度場 $c=c(\boldsymbol{r},t)$ の時間発展方程式は,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)c - c + f \quad (3)$$

と与える。ここで円形領域の任意の位置を $r=(r,\theta)$ と表し、樟脳粒からの供給を f と定義した:

$$f(\mathbf{r}; \boldsymbol{\rho}) = \delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}). \tag{4}$$

 $\delta(\cdot)$ はディラックのデルタ関数を表す。また、



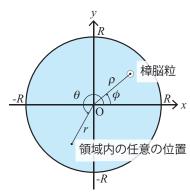


図 1. 系の概略図. 粒子の重心位置と、領域内の任意の点を 2 次元極座標でそれぞれ、 $\rho=(\rho,\phi)$ と $r=(r,\theta)$ と表現する.

3 濃度場の縮約

樟脳粒を円形領域の中心位置に固定すると、水面上に系の中心に関して軸対称な定常濃度場が形成される。このときの定常濃度場は駆動力を生じないが、樟脳粒の位置をずらす、速度を与えるなどの摂動を加えると濃度場が非対称になり駆動力を生む。そこで、樟脳粒の系の中心からのずれや、速度、加速度は十分に小さいとして、濃度場を定常濃度場周りで展開し、駆動力を計算する。そのようにして得られた駆動力は樟脳粒の位置や速度、加速度の関数となるので、(1)に代入することで樟脳粒の位置と速度についての力学系を得る。

まず、濃度場を縮約する。境界条件を満たす 解を構築することは難しいので、2次元極座標

において,動径方向は第1種ベッセル関数で, 角度方向は三角関数で展開する。ここで、動径 方向は濃度場の境界条件を満たす基底のみで展 開する、波数空間に移行すると、グリーン関数 $g_{mn}(t)$ を容易に求めることができる。ここで、 m, n は動径、角度方向の波数である。 グリー ン関数を用いると、任意の樟脳分子濃度場はそ の時間積分として得ることができる。樟脳分子 濃度場は供給元である樟脳粒の軌道に依存する が、現在の濃度場に大きく寄与するのは現在時 刻の近傍の軌道である. そこで時間について濃 度場の展開を行うと, 現在の位置, 速度, 加速 度などの軌道の時間微分を用いて表現される濃 度場を得る[7]. ここで、時間微分の高次項は 無視する。展開された濃度場を実空間に戻して 駆動力を計算すると、樟脳粒の位置ρに関する 2階の常微分方程式を得る:

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}} = A\boldsymbol{\rho} + (B - \Xi)\dot{\boldsymbol{\rho}} + C|\boldsymbol{\rho}|^2\boldsymbol{\rho} + H|\dot{\boldsymbol{\rho}}|^2\boldsymbol{\rho} + J(\boldsymbol{\rho}\cdot\dot{\boldsymbol{\rho}})\boldsymbol{\rho} + K|\dot{\boldsymbol{\rho}}|^2\dot{\boldsymbol{\rho}} + N|\boldsymbol{\rho}|^2\dot{\boldsymbol{\rho}} + P(\boldsymbol{\rho}\cdot\dot{\boldsymbol{\rho}})\dot{\boldsymbol{\rho}}.$$
(5)

ここで、各項の係数 A, B, C, H, J, K, N, P は樟脳粒が浮かべられた水面の半径 R と質量密度 σ の関数、 Ξ は σ の関数であり、解析的に求まる.

4 分岐解析

縮約方程式 (5) において,慣性項と位置の1次の項 $\ddot{\rho} = A\rho$ を主要項とみなして解析を行った.ここで, $A = A(R,\sigma)$ は R(>0) や $\sigma(>0)$ に依らず負なので,主要項によって単振動が引き起こされる.縮約方程式 (5) において,主要項以外の1次の項は $(B-\Xi)\dot{\rho}$ である.線形安定性解析により $B>\Xi$ のとき,静止状態 $(\rho,\dot{\rho})=(\mathbf{0},\mathbf{0})$ が不安定化し,自発的な運動が見られることがわかった.静止状態が不安定化する条件の下で弱非線形解析を行うと [8],スーパークリティカルホップ分岐を通じて,

$$K + N < 0, \quad K - N + J < 0,$$
 (6)

のときに安定な微小半径の回転解が,

$$3K + N + J < 0, \quad K - N + J > 0,$$
 (7)

のとき安定な微小振幅の振動解が現れることが明らかとなった。ここで回転解と振動解はそれぞれ, $\rho=0$ を中心とした等速円運動と振動運動を指す。条件式(6),(7)が満たされるかどう

か調べると、水面半径 R がある臨界水面半径 R_0 より小さいときに安定な回転運動の存在条件 (6) が満たされることがわかった.

謝辞 本研究は物質・デバイス領域共同研究拠点 の共同研究プログラム(20181023)及び JSPS 科研費 JP17J05270 の助成を受けています.

- S. Nakata, Y. Iguchi, S. Ose, M. Kuboyama, T. Ishii and K. Yoshikawa, Self-rotation of a camphor scraping on water: New insight into the old problem, Langmuir, 13, (1997), 4454–4458.
- [2] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi and Y. Hayashima, A theoretical and experimental study on the unidirectional motion of a camphor disk, Physica D, 194, (2004), 151–165.
- [3] M. Mimura, T. Miyaji and I. Ohnishi, A billiard problem in nonlinear and nonequilibrium systems, Hiroshima Math. J., 37, (2007), 343–384.
- [4] S-I. Ei, K. Ikeda, M. Nagayama and A. Tomoeda, Reduced model from a reaction-diffusion system of collective motion of camphor boats, Math. Bohem. 8, (2015), 847-856.
- [5] Y. Koyano, T. Sakurai and H. Kitahata, Oscillatory motion of a camphor grain in a one-dimensional finite region, Phys. Rev. E, 94, (2016), 042215.
- [6] Y. Koyano, M. Gryciuk, P. Skrobanska, M. Malecki, Y. Sumino, H. Kitahata and J. Gorecki, Relationship between the size of a camphor-driven rotor and its angular velocity, Phys. Rev. E, 96, (2017), 012609.
- [7] T. Ohta, T. Ohkuma and K. Shitara, Deformation of a self-propelled domain in an excitable reaction-diffusion system, Phys. Rev. E, 80, (2009), 056203.
- [8] Y. Koyano, N. Yoshinaga and H. Kitahata, General criteria for determining rotation or oscillation in a two-dimensional axisymmetric system, J. Chem. Phys., 143, (2015), 014117.

円環水路上に現れる樟脳円板のクラスター運動に対する数学解析

岡本 守1,後藤田 剛2,長山 雅晴2

- 1 北海道大学理学院博士課程,
- 2 北海道大学電子科学研究所附属社会創造数学研究センター

1 概要

集団運動が観察される自己駆動粒子系として、 樟脳等の界面活性剤を利用した実験系が注目されている [1,2,3,4,5,6]. これらの実験系では 渋滞様の集団運動など [4,5],多様な集団運動 が観察されている. この中で、円環水路上で樟 脳円板は単純かつ高い対称性を持った系である が、種々の集団運動を生じることが知られている [5,6]. 特に2枚の樟脳円板に対して、水面 の樟脳分子濃度を記述した反応拡散方程式と樟 脳円板の運動方程式を組み合わせたモデル方程 式に対する計算機援用解析によって、集団運動 の出現機構が分岐論的に調べられている [6].

今回,特に2枚の樟脳円板が近接した状態で等速運動を行うことに注目した[6]. 同種の集団運動は樟脳船を用いた実験系でも報告されており[3],背景に界面活性剤系に共通する構造が存在することが予想される. 今回,樟脳円板の実験系を想定したモデル方程式を解析した. 結果として,樟脳円板が円環水路上の非対称な位置にある等速運動解について,その存在と非存在に関する十分条件が得られ,表面張力をモデル化した関数の凸性に強く依存することが判明した.

2 モデル方程式

解析は以下の方程式系に対して行った。ここで, $x_i(i=1,2)$ は樟脳円板の重心,u は樟脳分子膜濃度である:

$$\mu \frac{dx_i}{dt} = \frac{\gamma(u(t, x_i + r)) - \gamma(u(t, x_i - r))}{2r}, (1)$$
$$\gamma \in C^2.$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + \sum_{i=1}^2 F(x; x_i, r),$$

$$x \in [0, L) \setminus \{x_i \pm r\},$$

$$F(x; x_i, r) = \begin{cases} 1 & x \in [x_i - r, x_i + r], \\ 0 & x \notin [x_i - r, x_i + r]. \end{cases}$$
(2)

ただし, $u \in C([0,\infty) \times [0,L))$, $u(\cdot,t) \in C^1([0,L))$ とし, 円環水路上の運動を考えるため, u(t,L) =

u(t,0), $u_x(t,L)=u_x(t,0)$ としてu に周期境界条件を課し,各 $x_i(t)$ は周長 L の円周上で定義されるものとする [6]. μ,r は正値のパラメータで,それぞれ樟脳円板に働く粘性抵抗,樟脳円板の半径に相当する.物理的な制約から 4r < L を満たし,樟脳分子膜の濃度から表面張力を与える関数である γ は狭義に単調減少であるとする.また,各樟脳円板は任意の時刻で接触しないものとする.

3 解の分類

モデル方程式 (1), (2) に対して動座標変換 $(t,x)\mapsto (\tau,z)=(t,x-ct)$ を行うと,次の動座標方程式が得られる:

$$\mu \frac{dz_i}{d\tau} = \gamma(u(z_i + r, \tau)) - \gamma(u(z_i - r, \tau)) - \mu c,$$
(3)

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + c \frac{\partial u}{\partial z} - u + \sum_{i=1}^{N} F(z; z_i, r), \quad (4)$$

$$F(z; z_i, r) = \begin{cases} 1, & z \in [z_i - r, z_i + r], \\ 0, & z \notin [z_i - r, z_i + r]. \end{cases}$$

ここで,動座標方程式での定常解を速度 c の 等速運動解と呼ぶ.等速運動解の中で,特に $|z_1(\tau)-z_2(\tau)|=L/2$ となっているものを対称 等速運動解と呼び, $|z_1(\tau)-z_2(\tau)|\neq L/2$ と なっているものを非対称等速運動解と呼ぶ.

4 主結果

定理 1 (対称等速運動解の存在について) 任意 の $r>0, L>0, c\geq 0$ と,任意の単調減少関数 $\gamma\in C^2$ に対して,ある $\mu>0$ が存在して,パラメータ (r,L,μ) のモデル方程式は速度 c の対称等速運動解を持つ.特に, $c\neq 0$ ならば, μ は一意に定まる.

定理 2 (非対称等速運動解の非存在について)

1) 任意のパラメータ (r, L, μ) に対して、モデル方程式は速度 0 の非対称等速運動解を持たない.

2) $\gamma'' \ge 0$ である時,任意のパラメータ (r, L, μ) と任意の c > 0 に対して,モデル方程式 は非対称等速運動解を持たない.

定理 3 (非対称等速運動解の<u>存在</u>について) ある r>0, L>0 と $\gamma\in C^2$ が以下を満たすと する:

$$\begin{split} \left(\frac{1}{2} + \frac{L}{8r^2(L - 4r)}\right) \gamma' \left(\frac{4r}{L}\right) \\ < \frac{L - 4r}{L} \gamma'' \left(\frac{4r}{L}\right) < \gamma' \left(\frac{4r}{L}\right). \end{split}$$

この時、十分大きなc>0に対して、ある $\mu>0$ が一意に存在して、パラメータ (r,L,μ) に対して、速度 c の非対称等速運動解が存在する.

5 証明の概略

基本的な観察として、任意 $r>0, L>0, c\geq 0$ に対して、方程式 (4) の定常解が存在して、 $d:=|z_1-z_2|$ をパラメータとして具体的に表示できることが分かる。方程式 (4) の定常解 U を方程式 (3) に代入することで、動座標方程式全体の定常解の存在は、以下の方程式に帰着される:

$$\mu = \frac{\gamma(U(2r)) - \gamma(U(0))}{c},$$

$$0 = \gamma(U(2r)) - \gamma(U(0))$$

$$- \gamma(U(d+2r)) + \gamma(U(d)).$$
(6)

方程式 (5) から,即座に μ の一意性に関する結果が得られる.方程式 (6) の右辺を d の関数と見て符号を考え,中間値の定理を適用することで,非対称等速運動解の存在に関する結果が得られる.また,上式の右辺を更に積分形に書き直すことで,以下の同値な二つの方程式が得られる:

$$\int_{U(0)}^{U(2r)} \gamma'(U)dU = \int_{U(d)}^{U(d+2r)} \gamma'(U)dU,$$

$$\int_{U(0)}^{U(d)} \gamma'(U)dU = \int_{U(2r)}^{U(d+2r)} \gamma'(U)dU,$$

U の具体的な表示から得られる U(0), U(2r), U(d), U(d+2r) の大小関係,および γ の単調性と凸性を用いてこれらの積分の値を評価することで,非対称等速運動解の非存在に関する結果が得られる.

6 結論

我々は樟脳円板を考えたモデル方程式が非対称等速運動解を持つためには表面張力関数 γ の凸性が重要な影響を与えることを示した。この結果は、実験系で観察された集団運動を再現する数理モデルを構築するために重要な情報である。今後、同様の条件が非対称性の高い樟脳船を考えたモデル方程式についても得られるかを考えていきたい。

- S. Nakata, M. Nagayama, H. Kitahata, N. J. Suematsue and T. Hasegawa, Physicochemical design and analysis of self- propelled objects that are characteristically sensitive to environments, Phys. Chem. Chem. Phys., 17(2015), 10326–10338,
- [2] S. Soh, M. Branicki, and B. A. Grzybowski, Swarming in Shallow Waters, J. Phys. Chem. Lett., 2(2011), 770–774
- [3] M. I. Kohira, Y. Hayashima, M. Nagayama, and S. Nakata, Synchronized Self-Motion of Two Camphor Boats, Langmuir, 17(2001), 7124-7129,
- [4] N. J. Suematsu, S. Nakata, A. Awazu, and H. Nishimori, Collective behavior of inanimate boats, Phys. Rev. E, 81(2010), 056210,
- [5] Y. S. Ikura, E. Heisler, A. Awazu, H. Nishimori, and S. Nakata, Collective motion of symmetric camphor papers in an annular water channel, Phys. Rev. E, 88(2013), 012911.
- [6] K. Nishi, K. Wakai, T. Ueda, M. Yoshii, Y. S. Ikura, H. Nishimori, S. Nakata, and M. Nagayama, Bifurcation phenomena of two self-propelled camphor disks on an annular field depending on system length, Phys. Rev. E, 92(2015), 022910.

流体力学を伴う液滴の自発運動と相互作用

義永 那津人 ^{1,2}

 1 東北大学 材料科学高等研究所(WPI-AIMR), 2 産総研 数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ (MathAM-OIL)

e-mail: yoshinaga@tohoku.ac.jp

1 概要

液滴の表面張力の勾配によって周囲の流体運動が生じる現象はマランゴニ効果と呼ばれている。液滴と流体に加えて、表面張力を変化させる化学物質の場が存在し、液滴が化学反応によってその化学物質を生成する非平衡状態において、液滴は自発的に運動し変形する。ここでは、流体方程式と反応拡散方程式を用いてこの現象を記述し、弱非線形解析によって、液滴の自発運動速度と形に関する閉じた方程式を導出する。また、二つの液滴の間に働く相互作用について議論する。

2 アクティブマター

自発的に運動する粒子や液滴の運動メカニズ ムの解明と、それらの集団運動についての研究 はアクティブマターと呼ばれ、最近、精力的に 研究されている。これらは、鳥や魚の群れがど のように協同的に振る舞うのかについての普遍 的な原理を理解するための試みとして始まった ものである。生命現象では、生体分子が、ATP の加水分解のエネルギーを消費しながら動的に 構造を形成したり、細胞が運動しながら組織と してその機能を発揮することなどに見られる。 これらの現象は平衡状態から遠く離れており、 自由エネルギーを最小化することによって定常 状態を実現する勾配系とは本質的に異なったダ イナミックスを示す。従って、これらの系では 時間発展方程式そのものを直接解析する必要が ある。

これまで、自発運動のモデルは数多く提案されてきており、最も単純なものでは相互作用する質点として記述される。このようなモデルでは、各粒子がなぜ運動するのかという点に関してはじめからモデルに組み込まれていて、その起源を議論することはできない。一方で、例えば、水の中を運動する微生物がなぜ動くのかという問いに答えるためには、微生物に外力がかかっておらず、押されたり引かれたりことなく、「泳いでいる」ことを適切にモデル化する必要

がある。微生物のモデルは squirmer と呼ばれ、最も単純なモデルでは球状の粒子と周囲の流体からなるシステムを考える。流体は Stokes 方程式に従い、速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ と圧力場 $p(\mathbf{x})$ は

$$\eta \Delta \mathbf{v} - \nabla p = 0 \tag{1}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0 \tag{2}$$

に従う。ここで、 η は流体の粘性であり、(1) の 1 項目はベクトル場に作用するラブラス作用素である。また、(2) によって流体は非圧縮であることを仮定している。境界条件は、よく用いられるすべりなし、 $\mathbf{v}(\mathbf{r}_s)=\mathbf{U}+\mathbf{\Omega}\times\mathbf{R}$ 、ではなく

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_s) = \mathbf{v}_s + \mathbf{U} + \mathbf{\Omega} \times \mathbf{R} \tag{3}$$

を用いる。ここで、 \mathbf{r}_s は粒子表面の位置、 \mathbf{U} と $\mathbf{\Omega}$ は剛体並進運動および剛体回転運動である。 微生物の個性はスリップ速度 \mathbf{v}_s の関数系を変えることによって表現することができる [1,2]。

3 マランゴニ効果

マランゴニ効果は古くから知られた現象であり、界面張力の不均一性によって駆動される流れと、それに伴う液滴の運動である。界面張力の不均一性は、濃度勾配や温度勾配によって引き起こされる。そもそも、界面張力とは力学的には界面に働く収縮力である。これは界面に沿って界面を小さくするように働くストレスであり、流体運動を作り出す。この現象における流体運動は(1)と(2)によって記述され、境界条件は、界面での速度場が連続性

$$\mathbf{v}^{(i)}(\mathbf{r}_s) = \mathbf{v}^{(o)}(\mathbf{r}_s) \tag{4}$$

と、速度場の微分に対応する

$$\mathbf{n} \cdot \sigma^{(i)}(\mathbf{r}_s) - \mathbf{n} \cdot \sigma^{(o)}(\mathbf{r}_s) = \nabla_s (\gamma \mathbf{t})$$
 (5)

を用いる。n と t は界面上での単位法線ベクトルと単位接線ベクトルである。ここで、

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \eta \left(\partial_i v_j + \partial_j v_i\right) \tag{6}$$

は粘性ストレスであり、上付きの添字は液滴の 内側と外側を表す。

球の場合には、与えられた不均一な表面張力に対して速度場を具体的に計算することができ、その結果を用いて、液滴の運動速度を計算することができる。例えば、空間的に線形な温度、あるいは濃度勾配中に液滴が存在する場合には、対応する表面張力から液滴の運動速度は、三次元では

$$u = -\frac{2\gamma_c c_1 R}{9n^{(i)} + 6n^{(o)}} \tag{7}$$

である。ここで、 c_1 は線形の濃度勾配の傾き、 γ_c は濃度に対する表面張力の比例係数、また、 $\eta^{(i)}$ と $\eta^{(o)}$ はそれぞれ液滴の内外の粘性である。

4 化学反応によって駆動される液滴間の 相互作用

上述のマランゴニ効果による運動は、不均一な界面張力が与えられている場合、どのような運動が実現するのかということだった。化学反応を持つ液滴では、不均一な表面張力をあらかじめ与える必要はなく、自発的に対称性を破って運動する現象が起きる。このような現象は、古くは反応性液滴モデルとして提案されたものであり [3]、最近になって分岐現象の一種として捉えられるようになった [4,5,6]。本研究では以下のような濃度場 $c(\mathbf{x})$ のモデルを考える [7]。

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = D\nabla^2 c - \kappa (c - c_{\infty}) + \sum_{i=1}^{2} S_i$$
(8)

$$S_i = A_i \Theta \left(R_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{G_i}| \right) \tag{9}$$

ここで、左辺二項目は速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ による移流の効果を表す。右辺は、拡散係数 D による拡散項、減衰係数 κ による緩衝効果、そして三項目は化学反応による、液滴から濃度場の生成、あるいは消費を表す。ここで、 $\Theta(x)$ は階段関数である。 $\mathbf{r}_{G,i}$ は、i 番目の液滴の重心座標で、 A_i は、i 番目の液滴内部での化学物質の生成レートである (i=1,2)。液滴の内外の流れ場は上述の \mathbf{S} Stokes 方程式と、マランゴニ効果に対する境界条件で記述され、液滴はこの流れに乗って運動、変形する。

液滴の周囲の化学物質場を液滴速度に関して 展開を行うことで、1番目の液滴速度 ${f u}^{(1)}$ に関 する運動方程式が導出でき、

$$m\frac{d\mathbf{u}^{(1)}}{dt} = (\tau - 1)\mathbf{u}^{(1)} - g|\mathbf{u}^{(1)}|^2\mathbf{u}^{(1)} + (\mathbf{u}_c + \mathbf{u}_h), \qquad (10)$$

となる。ここで、 m, τ, g は、[4] で導出された 3 次元空間での液滴一体の自己推進運動に関する実数係数である。 $\mathbf{u}_c, \mathbf{u}_h$ はそれぞれ濃度場を介した相互作用、流体力学相互作用の寄与である。

謝辞 本研究は、京都大学の藪中俊介氏および Bristol 大学の Tanniemola B. Liverpool 氏と共 同で行ったものである。

- [1] N. Yoshinaga. Simple models of self-propelled colloids and liquid drops: From individual motion to collective behaviors. *J. Phys. Soc. Japan*, 86 (2017), 101009.
- [2] N. Yoshinaga and T. B. Liverpool. Hydrodynamic interactions in dense active suspensions: From polar order to dynamical clusters. *Phys. Rev. E*, 96 (2018), 020603(R).
- [3] AA Golovin, Y.P. Gupalo, and Y.S. Ryazantsev. Chemothermocapillary effect for the motion of a drop in a liquid. Soviet Physics Doklady, 31 (1986), 700.
- [4] S. Yabunaka, T. Ohta, and N. Yoshinaga. Self-propelled motion of a fluid droplet under chemical reaction. J. Chem. Phys., 136 (2012), 074904.
- [5] N. Yoshinaga, K. H. Nagai, Y. Sumino, and H. Kitahata. Drift instability in the motion of a fluid droplet with a chemically reactive surface driven by marangoni flow. *Phys. Rev. E*, 86 (2012), 016108.
- [6] N. Yoshinaga. Spontaneous motion and deformation of a self-propelled droplet. *Phys. Rev. E*, 89 (2014), 012913.
- [7] S. Yabunaka and N. Yoshinaga. Collision between chemically driven self-propelled drops. J. Fluid Mech., 806 (2016), 205–233.

単一自己駆動粒子が呈する準周期的な運動の数理解析

池田 幸太1, 宮路 智行2, 北畑 裕之3, 小谷野 由紀3, 義永 那津人4

1明治大学総合数理学部,2明治大学先端数理科学インスティテュート,

³ 千葉大学大学院理学研究院, ⁴ 東北大学 WPI-AMR / 産総研 MathAM-OIL

e-mail: ikeda@meiji.ac.jp

1 概要

単一の自己駆動粒子は外力や外場との相互作用を通じて,振動,回転,準周期的な運動といった,様々な種類の運動を呈することが知られている.本研究では単一の自己駆動粒子が満たすべき数理モデルを一般的に扱う.適当な条件下で不変多様体を構成し,多様体上の低次元力学系を解析することで,準周期的な運動に相当する解が安定的に存在することを示す.

2 単一の自己駆動粒子の運動

自己駆動粒子は、生物、無生物に関わらず、広い分野において存在する [1]. 粒子は周りの環境との間における相互作用を通じて状態を変化させ、停止や運動を行う. 自己駆動粒子の運動メカニズムを理論的に解明するため、様々な数理モデルが提唱されている [2]. 先行研究で提唱されている数理モデルは個々の現象を説明するために構築されているため、一見すると全く異なる数理モデルに見えるものの、本質的には同等なメカニズムを持つことが少なくない. そこで、特定の現象に特化せず、一般的な状況を想定した数理モデルが [3] で提唱された.

$$\mathbf{r}'' = -\mathbf{r} + b\mathbf{r}' + c|\mathbf{r}|^2\mathbf{r} + k|\mathbf{r}'|^2\mathbf{r}' + h|\mathbf{r}'|^2\mathbf{r}$$
$$+ n|\mathbf{r}|^2\mathbf{r}' + j(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')\mathbf{r} + p(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')\mathbf{r}'$$

ここで、時刻 t における粒子の位置と速度は \mathbf{r} 、 \mathbf{r}' で表され、 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) = (x_1(t), x_2(t))$ 、 $\mathbf{r}' = (v_1(t), v_2(t))$ と表記するものとする. (1) に含まれるパラメータは全て実数である. (1) は、単一の自己駆動粒子の運動が軸対称性を満たし、分岐点近傍等の適当な条件下で得られる標準的な方程式である. 数理モデル間に共通したメカニズムに注目し、普遍性を論じることが理論研究において重要であるという考えの下、本研究では (1) を扱うことにする.

小谷野らは (1) における解の定性的な振る舞いが, いくつかの型に分類できることを数値シミュレーションにより示した [3]. 特に, 以下の仮定 (A) の下で「回転解」,「振動解」と呼ば

れる 2 種類の周期解が (1) に存在することが分かっている.

$$b > 0, k < 0, n < 0, c = p = h = 0$$
 (A)

ここで回転解とは, $|\mathbf{r}(t)|$, $|\mathbf{r}'(t)|$ が 0 でない定 数で, かつ $\mathbf{r}(t) \cdot \mathbf{r}'(t) \equiv 0$ を満たすものを指す. また、振動解とは、 $\mathbf{r}(t)$ が $\mathbf{r}'(t)$ と常に平行であ るものを指す. なお (A) を仮定した場合, (1) における回転解は $\mathbf{r}'' = -\mathbf{r}$ を満たさなければ ならないため、周期は 2π である、同様に、(A) を仮定し、さらに |j| が十分小さい場合、振動 解として $\mathbf{r}'' = -\mathbf{r}$ を満たすものだけが存在す ることが数値計算結果から示唆されるため、振 動解の周期も 2π であると考えて良いだろう. さらに、回転解と振動解は k-n+j=0 を満 たすパラメータ付近で安定性が切り替わり、こ れらの解をつなぐように準周期的な挙動を示す 解が出現することも指摘されている. 本研究で は,回転解,振動解,準周期的な解の性質を調べ. (1) における分岐構造を明らかにすることを目 的とする. そのため, 先行研究と同様に, 以下 (A) を仮定する. すると, b > 0 により自明な 平衡点 $\mathbf{r} = 0$ は不安定であることに注意する.

3 RVF系

(1) は (x_1, x_2, v_1, v_2) に対する 4 次元力学系であるが、極座標変換を用いることで 3 次元力学系を導くことができる。まず以下のように極座標に変換する。

$$\begin{cases} x_1 = r \cos \theta, \\ x_2 = r \sin \theta, \end{cases} \begin{cases} v_1 = v \cos \psi, \\ v_2 = v \sin \psi. \end{cases}$$
 (2)

次に、以下の変数 (R,V,F) を導入する.

$$R=r^2, \quad V=v^2, \quad F=rv\cos(\theta-\psi)$$
 (3) すると (R,V,F) は

$$\begin{cases} R' = 2F, \\ V' = 2(-F + bV + nRV + jF^2 + kV^2), \\ F' = V - R + bF + (n+j)RF + kVF \end{cases}$$

(1)

を満たすことが分かる. この式を RVF 系と呼ぶ. また, $\Theta_+ = \theta + \psi$ は

$$\Theta'_{+} = \frac{v}{r}\sin\theta + \frac{r}{v}\sin\theta - \frac{j}{2}r^{2}\sin 2\theta \qquad (4)$$

を満たすので、RVF 系の解 (R, V, F) の挙動が 分かれば、(4) から Θ_+ の挙動を決定すること ができる.この事実から、(1) と RVF 系は本質 的には同値な力学系と言って良い.

分岐解析ソフトウェア AUTO [4] を用いて RVF 系の大域的な分岐構造について調べたところ,我々は図 1 を得た. (1) における回転解と振動解を結ぶ, RVF 系における周期解の族が存在することが分かる. ここで (a), (c) に注目すると,n が k=-5 に近い範囲で周期解の族が存在している. これらの場合,j は 0 に近い値が用いられていることに注意する. また,周期解の周期を調べると, π からわずかにずれている. 前述の通り回転解と振動解の周期は 2π と考えて良いため, RVF 系における周期解は (1) における準周期的な解に相当すると考えて良いだろう.

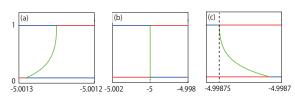


図 1. RVF 系における分岐図. 横軸は n, 縦軸の値は $\min_t R(t)/\max_t R(t)$ である. したがって, 縦軸の値が 0, 1 となる RVF 系の解は, (1) における振動解, 回転 解に相当する. 図中の赤線は安定解, 青線は不安定解を 意味する. また, 緑線は RVF 系における周期解を表す. b=1,k=-5 とし, (a) では j=-0.001, (b) では j=0, (c) では j=0.001 である.

次に図 1 の (b) に注目すると, n=-5 に RVF 系の周期解が集中して存在していることが分かる. この事実は以下の議論により理解できる. RVF 系において k=n, j=0 を代入すると, $E_0=\{(R,V,F)\mid b+nR+nV=0\}$ が RVF 系における不変集合であることが分かる. また, RVF 系を E_0 上に制限して考えると,

$$\begin{cases} (R-V)' = 4F, \\ F' = -(R-V) \end{cases}$$
 (5)

が成り立つ. (5) に周期 π を持つ周期解が 1 パラメータ族として存在することは容易に分かる. これが図 1 の (b) の結果と符合する.

以上の数値計算結果と考察を基にして, 本研究では, 与えられた b > 0, n < 0 に対して

 $\varepsilon_1 = j$, $\varepsilon_2 = k - n$ が 0 に十分近い場合にのみを考慮し, RVF 系における周期解の存在と安定性を示すことを目標とする. 本研究で得られた結果を以下に簡潔にまとめる.

- 定理 $\mathbf{1}$ (i) $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ が 0 に十分近いとき, RVF 系は E_0 に十分近い 2次元不変集合 E を持つ.
- (ii) $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ のとき, $(R, V, F) \in E_0$ かつ |(R, V, F) + (b/2n, b/2n, 0)| < -b/n を満たす RVF系の周期解は安定である.
- (iii) $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ が 0 に十分近いとき, E 上に制限された RVF 系に対してポアンカレ写像 P を定義できる. P は $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ で $P=P_0+P_1\varepsilon_1+P_2\varepsilon_2+\cdots$ と展開でき, P_i (i=0,1,2) は具体的に計算可能である. これにより, RVF 系における周期解の存在と安定性を決定することができる.

- [1] T. Miura and R. Tanaka, In Vitro vasculogenesis models revisitedmeasurement of VEGF diffusion in matrigel, Mathematical Modelling of Natural Phenomena, 4, No.04 (2009), 118–130.
- H. Kitahata and K. Yoshikawa, *Chemo-mechanical energy transduction through interfacial instability*, Physica D: Nonlinear Phenomena, 205, No.1-4 (2005), 283–291.
- [3] Y. Koyano, N. Yoshinaga and H. Kitahata, General criteria for determining rotation or oscillation in a two-dimensional axisymmetric system, The Journal of Chemical Physics, 143, No.1 (2015), 014117.
- [4] E. J. Doedel and B. E. Oldeman, AUTO-07P: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations, Concordia University, Montreal, Canada (2012).

車載用HVAC用モータの音響シミュレーション

柘植 竜也¹, 大澤 司², 池田 和正³ ^{1,2,3}株式会社 デンソー

e-mail: tatsuya_tsuge@denso.co.jp

1 背景と目的

車載用 HVAC モータの電磁騒音(以下、磁気音)は、ステータとロータの間に働く電磁気力により、共振が励起され発生する.しかし、アウターロータ型モータのロータから放射される磁気音は、ロータの共振周波数と異なる周波数で観測される.これを周波数変調現象という.本研究では、この周波数変調現象をシミュレーションする手法を提案し、その妥当性を検証する.

2 磁気音の計算手法

2.1 ロータ磁気音座標変換の基礎理論[1]

ロータ側面の振動は、波数 m, 共振周波数 f_c [Hz] で振動する定在波である時、式(1)で表される.

$$V(\theta,t) = V_0 e^{i \cdot m\theta} \frac{e^{-i \cdot 2\pi f_c t} + e^{i \cdot 2\pi f_c t}}{2} \quad (1)$$

ここで、 V_o は最大速度 [m/s]、 θ は空間位相 [rad] を表す。また、定在波は進行波と後退波の和として表している。式(1)で振動しているロータが回転数 α_o [RPS]で回転すると、固定座標系における振動速度は式(2)で表される。

$$V(\theta,t) = V_0 e^{i \cdot m(\theta - 2\pi\alpha_0 t)} \frac{e^{-i \cdot 2\pi f_c t} + e^{i \cdot 2\pi f_c t}}{2}$$

$$= V_0 e^{i \cdot m\theta} \frac{e^{-i \cdot 2\pi (f_c + m\alpha_0)t} + e^{i \cdot 2\pi (f_c - m\alpha_0)t}}{2}$$
(2)

進行波の周波数は $f_c + m\alpha_o$ 後退波の周波数は $f_c - m\alpha_o$ となり周波数変調している。また変調の程度は、波数 $m \times$ 回転数 α_o となる。

2.2 従来の磁気音計算手法[2]

従来法では、周波数軸にてロータが受ける力を過渡磁界計算で求め、振動計算に受渡しロータ表面の振動速度を求め、これを音響計算に受渡し、ある観測点の音圧を求めていた。従来手法では、磁界計算はラグランジェ型で計算し、

振動計算・音響計算はオイラー型で周波数応答 計算をしているため、ロータの回転運動を扱う ことができないことがわかった. 従来の計算手 法を図1に示す.



図1. 従来の計算手法のフロー

2.3 新規計算手法[3]

ロータ回転運動を扱うために、全ての計算を時間軸で計算する手法を検討する。音響計算ソフトには時間軸で計算する機能が備わっていないため、周波数軸で計算する新たな計算手法を構築した。図2に新たに構築した計算手法のフローを示す。このフローではロータの回転運動を扱えるよう、過渡応答磁界計算一過渡応答振動計算一(回転座標系から固定座標系へ物理量を変換)ー周波数応答音響計算を連携する計算手法を構築した。座標変換では、過渡応答振動計算で求めたロータ表面の振動速度の結果を、時間ステップごとに音響計算の固定座標へ振動速度を受け渡す。また、この振動速度は時刻暦なので、周波数音響計算をするために、フーリエ変換する。

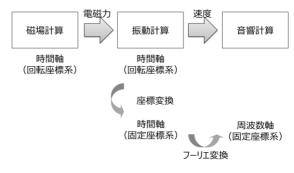


図2. 新規計算手法のフロー

3 新規手法の計算結果

実験と同様に 2430 Hz に円環2次のロータ共振を持つよう,振動計算モデルを作成した.上記モデルに,回転数 3036 rpm 時の過渡応答磁界計算で求めた電磁力を入力し,ロータ座標系におけるロータ側面の振動速度を求めた.周波数-振動速度特性を図3に示す.

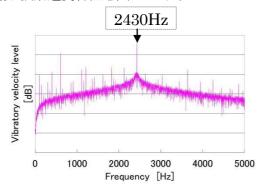


図 3.ロータ 3036rpm 時の振動速度計算

振動計算で求めたロータ振動速度を、回転座標系から固定座標系に変換し、次に時間軸から周波数領域に変換し、音響計算の入力とした。この振動速度によりロータ側面部放射された音の周波数-音圧レベル特性は、図4のとおりである。計算結果は実験結果と高い相関を示しており、提案手法の妥当性が検証された。

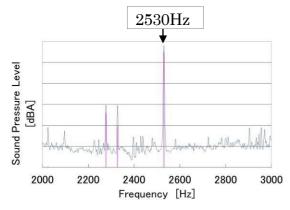


図 4.ロータ 3036rpm 時の音圧の計算結果と 実験結果

また、2530Hz のピークにおけるロータ周りの空間 の音圧分布を図5に示す.

図4に示す通り音圧の最大ピークは、振動計算で得られた図3に示す2430Hzではなく、100 Hz 大きい2530 Hzである. ロータの回転方向と等しい円環2次モードの振動を受け、式(2)で示したように座標変換されることで、100Hz(≒モード形状の波数2×回

転数 50.6 rps) 周波数変調した音が放射されている. また, 図 5 に示す通り, 放射される音も円環 2 次の進行波となっている.

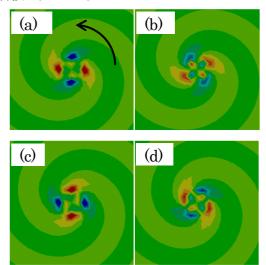


図 5. ロータ 2530Hz での空間音圧分布 (a)phase = 0° (b)phase = 90° (c)phase = 180° (c)phase = 270°

4. まとめ

ロータ磁気音の周波数変調を再現するため、過渡応答磁界計算ー過渡応答振動計算ー周波数応答音響計算を連携した新しい計算手法を提案した. 提案手法を用いた計算結果を、基礎理論、および実験結果と比較し、計算手法の妥当性を検証した.

参考文献

- [1] 池田 和正, 瀬村 純一, 大澤 司: アウターロータ型モータの音発生メカニズム, 自動車技術会学術講演会予稿集(2014), 20145870
- [2] 根本 佳奈子, 齋藤 泰行, 鈴木 康介: イン バータモータの電磁振動解析, 日本機械学会 論文集(B編) 78巻, 789号, p.993-997(2012)
- [3] 大澤 司,池田 和正,大塚 雅史,柘植 竜也: アウターロータ型モータの音響解析,自動車 技術会学術講演会予稿集(2015), 20156169

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

自動車の電動化に向けた開発・製造における熱流体シミュレーション

堀之内 成明1, 佐藤 範和1, 稲垣 昌英1, 牧野 総一郎1

1株式会社 豊田中央研究所

e-mail: horinouchi@mosk.tytlabs.co.jp

1 概要

自動車の開発においては、古くからボディや シャシーを対象とした構造・振動・騒音に関す るシミュレーション, エンジン, 空力, 空調な どを対象とした熱流体に関するシミュレーシ ョン、鋳造、鍛造などの材料加工プロセスに関 するシミュレーションなどが取り組まれてき ており、ハードウェアの進展とともに近年もま すます発展している.

一方,昨今の車両電動化に関しては,各種電 動ユニットの小型化や高集積化を達成するた めに求められる冷却や静粛性の問題がクロー ズアップされている. また, パワーデバイスの 製造や材料の熱処理のプロセスでは、装置内部 において原料ガスの熱流動や化学反応が絡ん だ複雑な現象を呈しており、その現象を解明し た上で、原理原則に基づき装置や工程の革新へ つなげることが求められている. このことは, エレクトロニクスや生産技術の分野への対象 の拡がりに伴い、現象の複雑さの増大に対応し 得るマルチフィジックスシミュレーションの 取組みが重要になってきていることを示して いる。

本稿では、上記に関して、当社で取り組んで きた代表的な研究事例を紹介する.

2 伝熱性能向上のためのシミュレーショ

自動車の電動化が進めば、空調や電子デバイ ス冷却などに関して,より高効率な熱交換が求 められる. 伝熱に関するシミュレーションにお いて, 実問題を対象とした乱流伝熱場に対する 汎用的な乱流熱伝達モデルの構築は長年の課 題であるが、近年では計算機の進展と相まって、 実用的な対象に対しても LES (Large Eddy Simulation) を用いた非定常温度場の計算が 試みられるようになってきた. 当社においても, 速度場用に開発してきた LES 用の SGS (Sub-Grid Scale) モデルである混合時間スケ

ール (MTS: Mixed-Time-Scale) モデルを温度 場用に拡張[1]し、広範囲のプラントル(Pr)数流 体に対して、従来の SGS モデルに比べて高い計 算精度を得ることが可能となってきた.

ここでは、この SGS モデルと独自離散化スキ ームを導入した LES に基づき、片側の壁面にデ ィンプルを配したチャネル流路(図 1)における 伝熱促進効果を検討した. 既往研究では、平滑 面流路における伝熱性能(流動抵抗(圧力損失 係数)に対する熱伝達率(ヌセルト数)の比) に比べて、ディンプル付き流路における伝熱性 能の方が大きくなるケースがあるという実験 結果が報告されており、新規な伝熱促進アイテ ムとして期待も大きいが、そのメカニズムが十 分に解明されているわけではない. 本研究[2]で は、幾つかのレイノルズ数とプラントル数の組 合せで計算を行い、流れ場・温度場の非定常的 な振る舞いや平均的なプロファイルを確認し ながら, 平滑面に対する伝熱性能の向上割合 (性能向上率)を検証した. その結果, 窪み内 部で生成される渦構造が、窪み内縁部や窪みの ない平坦部における熱伝達率を変化させ(図2).

あるレイノルズ数とプラントル数の組合せに おいては、性能向上率が1を超えることがある こと(図3)を見出した.

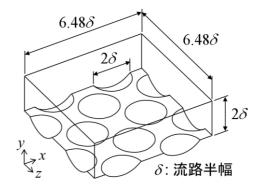


図1. ディンプル付きチャネル流路の概観

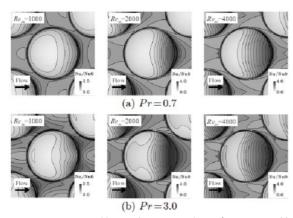


図2. レイノルズ数とプラントル数の違いによる熱 伝達率(局所ヌセルト数)の違いの様子

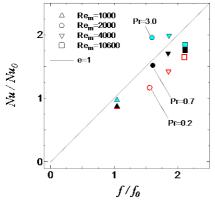


図3.平滑面に対する伝熱性能の向上割合の分布

3 製造プロセスのための熱流体シミュレーション

パワーデバイスや金属加工などの様々な製造プロセスには、加熱と化学反応や物質の相変態を伴ういわゆる「熱処理」と呼ばれるプロセスが数多く存在しているが、このプロセスを効率化し、加熱時の CO₂排出を制御・抑制することが、非常に重要な技術課題となってきている.そのためには、このプロセス、すなわち装置内において、どのように熱や反応が変化し、それが何に影響を受けやすいかを理解する必要がある.

そこで、前述の伝熱シミュレーションのために開発した乱流、および乱流伝熱向けの独自の LES の手法に、気相、ならびに表面反応の簡略 反応モデルを組み込んだガス流れ・温度・化学 反応連成シミュレータを構築した^[3].これにより、熱処理装置内における成膜時の結晶成長や 物質の相変態が、ガス流動パターンや温度分布、 原料濃度等へどのように依存しているかを高 精度に予測することが可能となった.

4 まとめと今後

熱流体の分野を中心に自動車の電動化に関する取組みを紹介した. 単純な熱流れの現象だけでなく, 化学反応等を含むマルチフィジックスのシミュレーションが求められ, そのためのモデル化や算法の開発が急務である.

なお、これらは順問題としてのアプローチであるが、モノづくりという観点では、逆問題として所望の性能・機能を満足する形状や機構を数理的に導くことがゴールと言える。世の中でも、特に構造・機構の分野を中心に最適設計やモデルベース設計への注目が集まりつつあるが、熱流体の分野においても、今後は、順問題と逆問題に関わる数理的手法をうまく融合させることにより、より効率的、かつ独創的なモノづくりに発展させることが課題である。

- [1] 稲垣昌英,服部博文,長野靖尚,種々の Pr 数流体に適応できる混合時間スケール 温度場 SGS モデル,日本機械学会論文集 B編, Vol. 76, No. 764 (2010), 608-617.
- [2] N. Sato, M. Inagaki, K. Kaneda, N. Horinouchi, A. Ota, Numerical investigation of the effect of Prandtl number on heat transfer in a dimpled-channel flow, Int. J. Heat Fluid Flow, Vol. 68 (2017), 139-150.
- [3] S. Makino, M. Inagaki, K. Nakashima, T. Kozawa, N. Horinouchi, A simplified reaction model and numerical analysis for Si deposition from the SiHC13-H2 system in vertical rotating disk reactors, Journal of Crystal Growth, Vol. 454 (2016), 156-163.

マルチコア・メニーコア計算機環境における Chebyshev 基底通信削減 CG 法の性能評価

大島 聡史¹, 藤井 昭宏², 田中 輝雄², 深谷 猛³, 須田 礼仁⁴ ¹ 九州大学, ² 工学院大学, ³ 北海道大学, ⁴ 東京大学

e-mail: ohshima@cc.kyushu-u.ac.jp

1 概要

大規模な問題や複雑な問題を解くためには、 計算ノードを多数用いた大規模分散並列計算環 境が必要である。しかし多数のプロセスによる 集団通信は長い時間を要するため、大規模計算 における性能向上阻害要因となることがある。

一方、多くのアプリケーションにおいて連立一次方程式 Ax = b を解くことが必要とされており、正定値対称な行列を係数に持つ場合は反復解法である共役勾配法(Conjugate Gradient Method、以下 CG 法)が広く用いられている。CG 法は 1 反復中に 1 回の疎行列ベクトル積 (SpMV) と 3 回のベクトル加算および 2 回の内積計算を必要とする。CG 法で用いる係数行列をブロック行分割で分散環境向けにMPI 並列化すると、1 反復あたり 2 回の集団通信 (MPI_Allreduce) が必要となる。そのため使用する MPI プロセス数が増えると集団通信の占める時間の割合が大きくなる。

そこで、CG 法の集団通信を削減する様々な 手法が提案されてきた。本稿ではそれらをまと めて通信削減 CG 法と呼ぶ。本稿ではいくつか の通信削減 CG 法の特徴と違いを示し、最新の マルチコア・メニーコア計算機環境における性 能評価結果を紹介する。

2 通信削減 CG 法

これまでに様々な通信削減 CG 法が提案されてきた。Chronopoulos らは、CG 法の計算順序を変えることで、内積計算に必要な MPI_Allreduceを 1 反復あたり 2 回から 1 回にまとめる CG法 (本稿では C-CG 法と呼ぶ)を提案した [1]。Hoemmen は、Krylov 部分空間を多項式基底でまとめて生成する Communication-avoiding CG法 (CA-CG法)を提案した [2]。須田らは、CA-CG法の一種として、Chebyshev 多項式を基底として Krylov 部分空間をまとめて生成する Chebyshev 基底共役勾配法 (CBCG法)を提案した [3]。CBCG法は、CG法が 1 反復に 2 回必要とした MPI_Allreduceを、k 反復に 2 回

へと削減することができる。さらに熊谷らは、CBCG法におけるk反復に2回のMPI_Allreduceをk反復に1回へと減らしたCBCGR法を提案した[4,5]。またDemmelらは、通信削減CG法によって必要となるKrylov部分空間の基底の計算に必要な通信回数を削減するMatrix Powers kernel (MPK)を提案した[6]。MPKはCA-CG法、CBCG法、CBCGR法に対して適用可能であるが、通信回数を削減する代わりにプロセス間での重複計算を追加で行わねばならない。

熊谷らは CBCG 法、CBCGR 法、CBCGR-MPK 法の性能を京コンピュータや FX10 上で評価している [4,5]。一方、本研究では計算と通信の性能バランスが異なる新しい世代の計算機環境において性能評価を行い、CBCG 法の効果を評価しようとしている。

3 性能評価

CG 法、C-CG 法、CBCG 法、CBCGR 法、CBCGR-MPK 法の性能を、名古屋大学情報基盤センターに設置されている FX100、九州大学情報基盤研究開発センターに設置されている ITO、JCAHPC に設置されている Oakforest-PACS の 3 システムにて比較する。対象プログラムは C 言語で記述されており、OpenMP および MPI にて並列化されている。FX100 では富士通コンパイラ及び富士通 MPI を、ITOでは Intel コンパイラ 18.0 および MVAPICH2.2を、OFPでは Intel コンパイラ 18.1 および Intel MPI をそれぞれ利用した。OFP では MC-DRAM のみを使用し、スレッド数は常に 64 とした。ITOでは2ソケット搭載されている CPUのうち NIC に近い1ソケットのみを使用した。

計算対象となる行列については、不均質な多 孔質媒体中の地下水の流れを Poisson 方程式に よって解く問題 [7] から得られる行列を用いる。 対象領域の大きさは 120x120x120、未知数の数 は 1,728,000 である。

図1に1反復相当あたりの実行時間 (主要な計算部と通信部の合計時間) を示す。CBCG法・

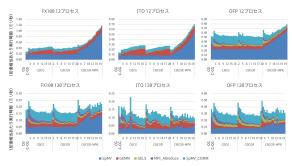


図 1.1 反復相当あたりの実行時間

CBCGR 法・CBCGR-MPK 法は k 反復あたりに 2回および 1 回の MPI_Allreduce を行うアルゴリズムであるため、k 反復あたりの実行時間を k で割ったものを 1 反復相当あたりの実行時間とみなす。横軸に付記された整数は、 $\lceil k$ 反復あたりに $\{2,1\}$ 回」の k の値 (2 から 20)を示している。MPI プロセス数 (= ノード数) は 12 および 120 とした。

実行結果から、12プロセス実行においては、 CG 法・C-CG 法の MPI_Allreduce の時間が短 く、CBCG法・CBCGR法・CBCGR-MPK法を 適用しても GEMM などの時間の増加分に打ち 消されて実行時間が削減できていないことがわ かる。120プロセス実行の場合は、MPI_Allreduce の短縮分が GEMM などによる実行時間増加分 に勝っており、CBCG 法や CBCGR 法にて k を 大きくした場合に CG 法・C-CG 法よりも実行 時間を短くすることができた。一方、CBCGR-MPK 法はkの値を大きくすると多くの重複計 算が必要となり、SpMV の時間が増加して全体 の実行時間を押し上げている。また、FX100や ITO や OFP と比べて性能グラフが綺麗な曲線 を描いており性能の傾向がわかりやすかった。 これは FX100 の性能のばらつきが他環境より も小さいことによるものと思われる。

4 今後の展望

これまでの性能評価により対象3環境における性能の傾向が明らかになりつつある。今後は問題サイズやプロセスサイズを変えての性能比較や、実行時間のモデル化や定式化、大きな割合を占めている計算部や通信部の高速化の検討などを考えている。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 16H02823(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) の助成を受けた

ものです。プログラムの提供や助言をいただいた熊谷洋佑氏に感謝します。本研究ではFX100 (名古屋大学情報基盤センター)、ITO (九州大学情報基盤研究開発センター)、Oakforest-PACS (JCAHPC) を活用させていただいています。

- [1] A. T. Chronopoulos, C. W. Gear: S-step Iterative Methods for Symmetric Linear Systems, Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 25, Issue 2, pp.153–168, 1989.
- [2] Mark Hoemmen: Communication-avoiding Krylov Subspace Methods, PhD Thesis, University of California at Berkeley, 2010.
- [3] 須田礼仁, 本谷徹: チェビシェフ基底共 役勾配法, 情報処理学会ハイパフォーマ ンスコンピューティングと計算科学シン ポジウム, Vol. 2013, p.72, 2013.
- [4] 熊谷洋佑,藤井昭宏,田中輝雄,深谷猛, 須田礼仁: 共役勾配法への種々の通信削 減手法の適用と評価,情報処理学会論文 誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.9, No.3, pp.1-13, 2016.
- [5] Yosuke Kumagai, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, Yusuke Hirota, Takeshi Fukaya, Toshiyuki Imamura, Reiji Suda: Performance Analysis of the Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method on the K Computer, Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM) 2015, Springer LNCS vol.9573, pp.74–85, 2016.
- [6] James Demmel, Mark Hoemmen, Marghoob Mohiyuddin, Katherine Yelick: Avoiding communication in sparse matrix computations, 2008 IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing, pp.1–12, 2008.
- [7] Kengo Nakajima: OpenMP/MPI Hybrid Parallel Multigrid Method on Fujitsu FX10 Supercomputer System, 2012 IEEE International Conference on Cluster Computing Workshops, pp.199–206, 2012.

GPU における SELL 形式疎行列ベクトル積の性能評価

佐藤 駿一1, 高橋 大介2

1 筑波大学大学院システム情報工学研究科,2 筑波大学計算科学研究センター

e-mail: ssato@hpcs.cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

疎行列ベクトル積は科学技術計算で広く使われる重要な計算である。そのため、疎行列ベクトル積において、疎行列の格納形式を自身の構造に応じて変更することによる高速化の影響は大きい。近年 GPU を用いた疎行列ベクトル積に関する研究が盛んに行われており、様々な格納形式が提案されている[1].しかし、著者らの知る限り、全ての疎行列に対して実行性能が最も高くなる格納形式は存在しない。また、疎行列格納形式の中にはSELL(Sliced-ELLPACK)形式[2]のようにチューニング可能なパラメタが存在するものもある。本稿ではSELL形式疎行列ベクトル積の性能評価を行い、疎行列の構造に関する疎行列ベクトル積の傾向を述べる。

2 疎行列ベクトル積

疎行列ベクトル積は $M \times N$ の疎行列 A, N 行のベクトル x, M 行のベクトル y を用いて式 (1) で表される.

$$y = Ax \tag{1}$$

疎行列ベクトル積は疎行列を係数行列に用いる 連立一次方程式,固有値問題,偏微分方程式な どに用いられる.科学技術計算で広く用いられ, 様々なアプリケーションにおいて重要な計算で ある.それゆえ,高速化が望まれている.

疎行列ベクトル積を素朴に計算した場合,疎 行列の構成要素の大部分がゼロ要素であるため, 不必要な計算,記憶領域の使用が発生する.疎 行列ベクトル積は疎行列の格納形式を自身の構 造に適するように変更することにより,この不 必要な計算,記憶領域の使用を削減できる.

3 SELL 形式疎行列ベクトル積

SELL 形式は、任意のスライスサイズを決め、そのスライスサイズ毎に疎行列を行方向に分割し、分割した疎行列毎に ELL (ELLPACK) 形式を適用する格納方法である. SELL 形式はスライスサイズ S と以下の3つの配列を用いて実装される.

 Algorithm 1 SELL 形式疎行列ベクトル積の

 擬似コード

```
1: function SELL(S,alpha,val,column,sliced_start,
    x.beta.y
        s \leftarrow 0
        while s < N - 1 do
 3:
            for r \leftarrow s to s + S do
 4:
                i \leftarrow sliced\_start[s/S] + r - s
 5:
                while i < sliced\_start[s/S + 1] do
 6:
 7:
                     y[r] \leftarrow alpha \times x[column[i]] \times
                             val[i] + beta \times y[r]
 8:
 9:
                end while
10:
            end for
11:
            s \leftarrow s + S
12:
        end while
13:
14: end function
```

- val:部分行列毎の非ゼロ要素の値を保持 する配列
- column: 部分行列毎の非ゼロ要素の列方 向の添字を保持する配列
- sliced_start: column において各部分行列の先頭が格納されている要素の添字を保持する配列

Algorithm 1 に SELL 形式疎行列ベクトル積の 擬似コードを示す.

4 性能評価

本稿では NVIDIA の Volta 世代 GPU に対して CUDA を用いて SELL 形式疎行列ベクトル積を実装し、NVIDIA により提供されている cuSPARSE と、近年提案された高速な疎行列ベクトル積ライブラリである nSPARSE[3] を比較対象とし、性能評価を行った、評価環境を表 1 に示す、また、使用した疎行列の一覧を表 2 に示す、

SELL 形式疎行列ベクトル積を行う際に 2 つのパラメタが用いられる。部分行列の行数を表すパラメタ S と各部分行列のスレッド数を表すパラメタ T である。これらのパラメタに関して, $1 \le S \le T \le 1024$ (S, T は 2 のべき乗)の範囲でパラメタチューニングを行った。

図1にパラメータチューニングの実行結果を

表 1. 評価環境

GPU	NVIDIA Tesla V100		
コア数	5120		
動作周波数	$1.370 \mathrm{GHz}$		
理論性能	7.00TFLOPS(倍精度)		
メモリ	16GB (HBM2)		
メモリバンド幅	$900 \mathrm{GB/s}$		
コンパイラ	nvcc 9.1.85		
コンパイラオプション	-arch=sm_70 -O3 -lcusparse		
ライブラリ	cuSPARSE (CUDA 9.1.85) , nSPARSE		

表 2. 性能評価に用いた疎行列

疎行列	行数	非ゼロ要素数 (nnz)	nnz/行数
G3_circuit	1,585,478	7,660,826	4.83
ecology2	999,999	4,995,991	5.00
$thermomech_dM$	204,316	1,423,116	6.97
$parabolic_fem$	525,825	3,674,625	6.99
StocF-1465	1,465,137	21,005,389	14.34
Dubcova3	146,689	3,636,649	24.79
af_0_k101	503,625	17,550,675	34.85
Geo_1438	1,437,960	63,156,690	43.92
$Fault_639$	638,802	28,614,564	44.79
msdoor	415,863	20,240,935	48.67

示す. 縦軸はパラメタSとTの値(基数2の対数)を,横軸はパラメタチューニングに用いた疎行列を示す. また,疎行列は非ゼロ要素数/行数が昇順となるように並べられている.

最適なパラメタSとTの組み合わせは疎行列毎に異なる。しかし,疎行列の非ゼロ要素数/行数に応じてT/Sの値が似た値をとる傾向が確認された。

図2に性能評価の実行結果を示す. 縦軸は実行性能を, 横軸は性能評価に用いた疎行列を示す. また, 疎行列は非ゼロ要素数/行数が昇順となるように並べられている.

疎行列 G3_circuit から parabolic_fem において、CUDA を用いて実装を行った SELL 形式疎行列ベクトル積の性能が他の2つの実装に比べて高い傾向が確認された.一方,疎行列 StocF-1465 から msdoor においては、nSPARSE を用いた疎行列ベクトル積の実装が最も高速である傾向が示された.

5 まとめ

本稿では GPU 上で SELL 形式疎行列ベクトル積に対して、cusPARSE と nsPARSE を比較対象として性能評価を行った。sell 形式疎行列ベクトル積のパラメタチューニングを行い、非ゼロ要素数/行数の値により最適なパラメタの比(T/S)が似た値をとる傾向があることが

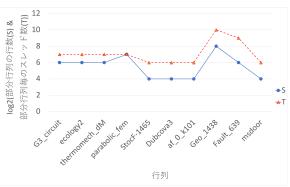


図 1. SELL 形式疎行列ベクトル積の最適なパラメタ

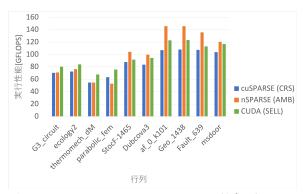


図 2. cuSPARSE, nSPARSE, CUDA で記述した SELL 形式疎行列ベクトル積の性能評価

確認された.性能評価の際,非ゼロ要素数/行数に応じて性能の良い格納形式が異なることが示された.

- [1] S. Filippone, V. Cardellini, D. Barbieri, and A. Fanfarillo, "Sparse Matrix-Vector Multiplication on GPGPUs," *ACM Trans. Math. Softw.*, vol. 43, pp. 30:1–30:49, 2017.
- [2] A. Monakov, A. Lokhmotov, and A. Avetisyan, "Automatically Tuning Sparse Matrix-Vector Multiplication for GPU Architectures," in *Proc. 5th International Conference on High Performance and Embedded Architectures and Compilers (HiPEAC 2010), Lecture Notes in Computer Science*, vol. 5952. Springer-Verlag, 2010, pp. 111–125.
- [3] Y. Nagasaka, A. Nukada, and S. Matsuoka, "Adaptive Multi-level Blocking Optimization for Sparse Matrix Vector Multiplication on GPU," Procedia Computer Science, vol. 80, pp. 131–142, 2016.

ディープラーニングを用いた数値計算ライブラリにおける反復解法の 前処理選択の検討

山田 賢也¹, 片桐 孝洋², 永井 亨², 荻野 正雄²
¹名古屋大学大学院情報学研究科, ²名古屋大学情報基盤センター

e-mail: yamada@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

疎行列は数値計算の様々な分野で取り扱われており、疎行列を対象とする数値計算ライブラリが広く利用されている。ここで、数値計算ライブライブラリには実装選択に関するチューニングパラメタが多く存在するが、最適実装の選択は実行を伴う経験に基づいて行われることが多く、時間的コストが高くなりやすい問題がある。この問題を解決するために Cui ら[1]は、行列の構造に基づく特徴画像を生成し、機械学習モデルとしてディープラーニングを使用して最適実装選択を行う方法を提案した。しかしこの研究は SpMV 実装を対象としたものであり、数値計算ライブラリ自体を対象とした研究は少ない。

そこで、本研究では Cui らの手法を拡張して 数値計算ライブラリの前処理選択に適用し、自 動的に実装選択を行う方法を提案した. 数値実 験による検証の結果、79.5%の精度で最適な前 処理を予測することができた.

2 データ及びライブラリ

2.1 数値計算ライブラリ Xabclib

本研究では疎行列を対象とした数値計算ライブラリである Xabclib [2]を利用する. 特に,連立1次方程式の数値解を反復法の GMRES 法で求める Xabclib_GMRES を対象とした. 今回は本手法の効果の検証のために Xabclib_GMRES の数あるチューニングパラメタの中でも前処理法に絞って検証を行った.

2.2 利用する疎行列

本研究で利用する疎行列データは、フロリダ 大学疎行列コレクション[3]中の正方行列すべ てとする. ただし、実際の数値実験は、設定し た条件を満たさない疎行列は使用するデータ セットから外して行っている.

3 実験手順

本研究では、文献[4]の3章の実験手順と同様の手順で実験を行った。ただし、当該文献で

はSpMV 実装も予測の対象として含んでいるが、 今回は前処理実装予測に絞った検証のため、一 部の機械学習等に関する設定が異なっている.

なお最終的に数値実験に使用した疎行列の数は 1030 個であり、ディープラーニングの入力として使用した特徴画像のサイズは 64×64ピクセルの画像である.

4 結果と評価

4.1 実験環境

Xabclib_GMRES の実行は、名古屋大学情報基盤センター設置のFujitsu PRIMEHPC FX100を使用した。ディープラーニングのフレームワークはTensorFlow[5]を使用した。機械学習には畳み込み層とプーリング層のペアが2組、全結合層2層、ソフトマックス層からなる構造の畳み込みニューラルネットを使用した。

4.2 実験結果

予測精度に関し、提案手法による実験の結果 最適な前処理を 79.5%の精度で予測することが できた.加えて、表 1 にそれぞれの前処理にお ける予測精度を示す.なお、表 1 内の最適は各 前処理が最適である疎行列の数を示し、正答は 各前処理が最適である疎行列に対して前処理 予測を行った際に、予測した前処理が最適なも のと一致した疎行列の数を示す.

表 1. 各前処理の予測精度

前処理	精度(%)	最適(個)	正答(個)
None	85.8	316	271
Gauss-	80. 7	218	176
Seidel	00.1	210	110
Jacobi	30.0	20	6
ILU(0)	82. 3	79	65
ILU(0)_	52. 7	74	39
Diagonal	02.1	• 1	00
ILUT	81. 1	323	262

図1は各前処理が最適な選択である疎行列の

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

うち,今回使用したモデルによる予測で最適で あることの予測に成功した疎行列の一例を特 徴画像で示している.

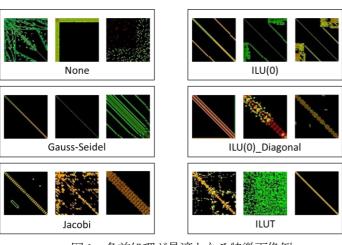


図1. 各前処理が最適となる特徴画像例

4.3 評価

結果より、79.5%の精度で最適なものを選択できた.個々の前処理について考えると30.0%から85.8%の精度で最適なものを選択できた.この結果より、今回提案したディープラーニングによる最適前処理予測手法はある程度有効であると考えられる.ただし、現在の実験の段階では学習モデルや特徴画像生成方法を精査できておらず、さらなる精度の向上のためにはこれらの精査が必要であると考えられる.

また、今回の実験で最適前処理選択が成功した行列の例を結果の一部として示したが、今後これらに対しての考察も必要となると考えられる。特に、これらに加えて、最適なものを予測できなかった疎行列の特徴画像とそれらの元々の行列形状等を比較することで特徴画像の生成方法の改善点が得られる可能性がある。

5 おわりに

本論文では、Cui らによる SpMV 実装に対するディープラーニングを用いた最適実装選択の手法を拡張した手法を提案し、数値計算ライブラリの前処理選択に対して提案手法を適用し評価を行った。提案手法の特徴は、特徴画像生成の際にフルカラー画像を用いることでCui らの手法では行列サイズのみの1種類しか挿入できなかった情報を行列サイズ、疎度、非ゼロ要素の値の3種類に増やすことを可能にした点と、非ゼロ要素を可能な限り最大限特徴画像に情

報として反映させた点である.

フロリダ大学疎行列コレクションを用いた 実験の結果,提案手法において最適な前処理を 79.5%の精度で選択でき,前処理毎の精度では 最大で85.8%の精度が得られた.これらの観点 から,数値計算ライブラリにおける前処理予測 に対してもディープラーニングによる機械学 習は有効であると考えられる.また,特徴画像 の生成手法,CNNの構造及び学習設定に対する 改善点もある.これらの要素はまだ精査できて おらず,これらの変更を行った場合の評価は今 後の課題である.

謝辞 本研究の一部は、科学技術研究費補助金、 基盤研究(B)、「機械学習技術の活用による職 人的プログラミングの知能化」(課題番号: 16H02822)、および基盤研究(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)による. また、本研究に関して貴重な助言を賜りました、 東北大学 滝沢寛之 教授に深く感謝致します. 加えて Xabclib の利用に関し、日立製作所の櫻 井隆雄氏に深く感謝致します.

参考文献

- [1] Hang Cui, Shoichi Hirasawa, Hiroyuki Takizawa and Hiroaki Kobayashi, A Code Selection Mechanism Using Deep Learning, 2016 IEEE 10th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip, pp. 385-392, 2016.
- [2] 自動ブロック化・通信最適化ライブラリ ABCLib Xabclib プロジェクト, http://www.abc-lib.org/Xabclib/index-j.html.
- [3] The SuiteSparse Matrix Collection, https://sparse.tamu.edu.
- [4] 山田 賢也, 片桐 孝洋, 永井 亨, 荻野 正雄, 疎行列形状のカラー画像を入力としたディープラーニングによる数値計算ライブラリの自動チューニング方式, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC), 2017-HPC-162 (24), pp. 1-8, 2017.
- [5] TensorFlow-an open-source software library for Machine Intelligence, https://www.tensorow.org/.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

Oakforest-PACS上におけるSA-AMG法の高並列環境下に向けたHybrid並列化に関する分析

野村 直也1, 中島 研吾1

1東京大学

e-mail: naoya_nomura@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

大規模問題を解く際、スーパーコンピュータのような超並列計算機が必須である。このような環境では、通信が実行時間大半を占めてしまうことがあり、通信の削減が大きな課題である。近年の並列計算機は、メニィコアプロセッサを結合したクラスタ形式が主要形態のひとつである。そのような環境では、メッセージパッシング(MPI)と、スレッド並列(OpenMP)を併用したHybrid並列が適すると言われている。

一方、大規模連立一次方程式 Ax=b を高速に解く手法としてMultigrid 法が提案されている. Multigrid 法は係数行列 A から階層的に粗いレベルの行列を生成し、各波長成分を効率よく減衰させることによって、高い収束性を実現している. Multigrid 法には様々な派生形が存在しており、本研究ではその中の SA-AMG (Smoothed Aggregation - Algebraic Mulrigrid) 法[1]を対象としている.

本研究では、JCAHPC が運営を行っている Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム上にて、SA-AMG 法を対象に Hybrid 並列の適用を行った。そして、フラット MPI と比較を行うことで、Oakforest-PACS 上における、Hybrid 並列化による実行時間や並列化効率についての分析を行った。Oakforest-PACS は、1 計算ノード内にメニーコア型プロセッサである Intel® Xeon Phi^Mプロセッサを1 基搭載し、各ノードを Omni-Path で接続された、超並列クラスタ型コンピュータである。Oakforest-PACS上で Hybrid 並列を適用することで、フラットMPI と比べ、通信の効率化による並列化効率の向上や、実行時間改善がみられると期待できる。

2 SA-AMG 法

SA-AMG 法は、問題行列から次元数の小さい (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.解法部は構築部で生成された行列を用い、緩和法を用いて問題を解く.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細いレベルと呼ぶ.

3 Hybrid 並列とマルチカラーリング

Hybrid 並列は、プロセス並列とスレッド並列を併用した並列プログラミングモデルである. クラスタ型コンピュータでは、ノード間の通信を MPI、ノード内を OpenMP で計算を行うようにすることで、通信の抑制が期待される.

Hybrid 並列の適用の際には、スレッド並列化 部分において, データの依存性を考慮しなけれ ばならない、そこで本研究では、マルチカラー オーダリングを行い, データ依存性の問題への 対処を行った.マルチカラーオーダリングは、 依存性を持たない要素群に対し同じ色に色付 けを行うことで, 色内で依存性を持つことなく, 同時に独立に並列処理を行えるようにする手 法である. マルチカラーオーダリングは多くの 手法が提案されており、本研究ではその中でも Cuthill-Mckee 法[2]をもとにした修正 Cuthill-Mckee 法(以下,修正 CM 法)を用いた. この手法の概要に関して、図1に示す、さらに 本研究では上記に加え、Cyclic に色付けを行い、 色数を抑えるような実装を行った. 以下この手 法により色数を抑えた手法を (min) と表記し、 数値実験の比較対象とする.

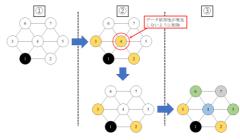


図 1. 修正 CM 法の概要

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

4 数值実験評価

本研究では 0akforest-PACS を使用し、さらに 3 次元弾性体問題を使用した。また AMGS ライブラリ[3]を使用し、解法部では SA-AMG 前処理付 CG 法を使用している。さらに解法部の各レベルで、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、Hybrid並列とフラットMPIの比較、および分析を行った.実験では問題サイズを 60°に設定した.比較対象を表 1に示す.実験 1の実行時間を図 2に示す.図 2より、今回の実験環境では、Hybrid並列はフラットMPIよりも遅いが、色数制限により実行時間が改善することがわかった.次に、実行時間についてさらに分析を行う.ここで、CG 法の前処理のSA-AMG 法に着目する.図 3は、SA-AMG 法の実行時間の内訳を示す.図 2 および図 3 より、全体の実行時間で SA-AMG 法、特にスムーザの計算時間が大きく占めるが、色数制限により計算時間を削減できることがわかった.

表 1. 比較対象

	表記	詳細		
	フラットMPI	1ノード使用,		
実		1ノード内 64 プロセス起動		
	1n1p64t	〃 1プロセス起動,		
		1プロセス当 64 スレッド起動		
験 1	1n2p32t	″ 2プロセス起動,		
1		〃 32 スレッド起動		
	1n4p16t	<i>"</i> 4プロセス起動,		
		〃 16 スレッド起動		
	フラットMPI	6 ノード, ノード内 32 プロセス		
実	6n6p36t	〃 6プロセス起動,		
験		1プロセス当 36 スレッド起動		
2	6n12p18t	<i>"</i> 12 プロセス, <i>"</i> 18 スレッド		
	6n24p9t	<i>"</i> 24プロセス, <i>"</i> 9スレッド		

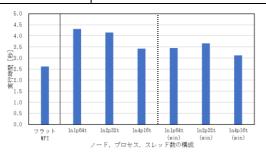


図 2. 収束までの実行時間(実験 1)

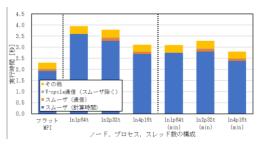


図3. 解法部内の実行時間内訳(実験1)

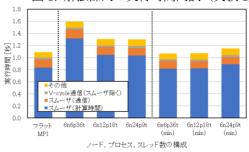


図 4. 解法部内の実行時間内訳 (実験 2)

次に、実験2のSA-AMG法に着目した実行時間を図4に示す。図4より、並列度を増やすことで、Hybrid並列の通信時間がフラットMPIと同等か、それ以下に抑えられることがわかった。

5 おわりに

本研究では、Oakforest-PACS 上にて、SA-AMG 法に Hybrid 並列の適用、およびフラット MPI と比較を行うことで、Hybrid 並列化による実行時間や並列化効率についての分析を行った。本研究より、Hybrid 並列はフラット MPI と比べ、スムーザによる計算コストが大きくなり、全体の実行時間もそれにつれて遅くなってしまっていることがわかった。しかし、カラーリングを工夫することで、スムーザの計算時間を抑えられることがわかった。計算コスト増大の要因として、OpenMP のバリア同期コストが考えられる。今後の課題として、バリア同期コストの分析、および他環境での調査を行う必要がある。

- [1] Vanek, P., et al.,: "Convergence of Algebraic Multigrid Based on Smoothed Aggregation", Numerische Mathematik 2001, vol 88, pp. 559-579, (2001).
- [2] E. Cuthill and J. McKee, "Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices," in Proc. of 24th national conference. ACM, 1969, pp. 157-172.
- [3] AMGS Library: http://hpcl.info.kogakuin.ac.jp/lab/s oftware/amgs

微圧縮超弾性体の大変形問題に対する近傍問題の構成

山田 貴博 横浜国立大学

e-mail: tyamada@ynu.ac.jp

1 はじめに

ゴム材料等を表すために用いられる超弾性体は、実際の材料試験結果を反映して微圧縮性材料としてモデル化されることが多い。本研究では、このような材料の大変形問題に対する数値計算手法の検証 (verification) を考える.

検証は与えられた数理モデルに対して数値計算コードが適切な解を与えていることを評価するものであり、その代表的な手法の一つに人工的な解により設定された問題を考える創成解の方法 (Method of Manifactured Solutions, MMS) がある。筆者等は、完全な非圧縮性の超弾性体の大変形問題に対して創成解の方法が適用できることを示した [1]. 創成解の方法が適用できることを示した [1]. 創成解の方法では、非圧縮性が成立する創成解の変位場を比較的単純な形で構成するため、物理的には不自然な問題設定となることが多い。また、微圧縮性材料では、応力状態に応じた体積変形を考慮した変位場を構成することが必要となるが、このような変位場を陽な形で与えることは困難である。

そこで本研究では近似解から滑らかな関数で 表現された近傍解を構成し, 近傍解を厳密解と する問題により検証を行う近傍問題法 (Method of Nearby Problems, MNP)[2] を適用すること を考える. 筆者等が固体力学の問題に対してこ でまで提案してきた近傍問題法 [3] では、変位 成分毎にソボレフ空間 H1 における内積を用い てBスプライン関数により表された関数へ投影 を行っていたため、微圧縮性の問題に適用した 際、過大な体積ひずみエネルギが生じる近傍解 が生成され、物理的に不合理な体積力を与える 検証用の問題となることが明らかとなった[4]. そこで本研究では、近傍解の生成において体積 変形に関するペネルティ項を付加する投影手法 を適用することにより、微圧縮超弾性体を扱う ことが可能な近傍問題の構成手法を提案する.

2 超弾性体に対する近傍問題法

本研究では、履歴不依存な超弾性体の準静的 大変形応力解析の問題を考える。直交座標系で 問題を記述することとし、領域Ωによって表さ れる初期形状における座標を X とする物質点の変位 u(X) を未知関数とする。このとき,現形状におけるつり合い方程式の弱表現は,仮想変位 η を用いて以下のように表される。

$$\int_{\Omega} \mathbf{P}(\mathbf{u}) : \nabla_{0} \boldsymbol{\eta}^{h} dX$$

$$= \int_{\omega} \mathbf{b}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^{h} dy + \int_{\gamma_{t}} \overline{\mathbf{t}}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^{h} ds \quad (1)$$

ここで、P(u) は変位 u は超弾性構成則によって決定される第 1 種 Piora-Kirchhoff 応力を表し、 $(\nabla_0 \eta)_{ij} = \partial \eta_i/\partial X_j$ は仮想変位 η の初期形状 X に対する微分である。また、 ω は現形状における領域、b は体積力、 \bar{t} は ω の境界 γ の一部 γ_t に作用する表面力である。基本境界条件については、境界 γ の一部 γ_u において、次式が課せられる。

$$u|_{\gamma_u} = \overline{u}, \qquad v|_{\gamma_u} = 0$$
 (2)

 $tilde{tile}, \ \overline{\gamma_u \cup \gamma_t} = \gamma, \quad \gamma_u \cap \gamma_t = \emptyset \ variable{tile}$ values of $\gamma_u \cap \gamma_t = 0$ v

近傍問題法では、対象問題の近似解から、投影操作等により高次連続な関数で表される近傍解を構成する。そして、近傍解を支配方程式に代入することにより、その解が満足する体積力や境界条件を求める。いま、近傍解 u^{np} が弱解であると仮定し、仮想変位 η に対して有限要素近似 η^h を適用すれば、次式が成立する。

$$\int_{\Omega} \mathbf{P}(\mathbf{u}^{np}) : \nabla_{0} \boldsymbol{\eta}^{h} dX$$

$$= \int_{\omega} \boldsymbol{b}^{np}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^{h} dy + \int_{\gamma_{t}} \overline{\boldsymbol{t}}^{np}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^{h} ds \quad (3)$$

ここで、 b^{np} 、 \overline{t}^{np} は、それぞれ近傍問題の体積力、表面力である。式 (3) の右辺は、近傍解 u^{np} 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、近傍解 u^{np} に対する外力の等価節点力は、式 (3) の左辺から計算できることとなる [1]. 以上の定式化は、弱形式化を基礎とすることから、基本境界条件を厳密に満足する変位場を用いる必要があることに注意しなければならない。

3 近傍解の構成

近傍問題法では,近傍問題に対する近似解 \tilde{u}^h と近傍問題の厳密解 u^{np} の比較を行うことから,有限要素近似解より滑らかな関数として u^{np} を構成する方が都合が良い。そこで本研究では,2階導関数まで連続となる3次Bスプライン関数で近傍解を構成することとする。

変形前形状の領域 Ω に対して, Ω を内包する長方形領域を設定し,長方形領域に対して 1次元一様 3次 B スプライン関数のテンソル積として近似基底を構成する。固体の問題に対する自然な関数空間はソボレフ空間 $H^1(\Omega)$ であることから,従来の研究 [3,4] では各変位成分毎に近似解 u_i^h を $H^1(\Omega)$ の内積を用いてスプライン関数で表される近似空間に投影し,近傍解を構成してきた。しかしながら,この手法を微圧縮性の問題に適用した場合,変位成分間の関係が考慮されていないことから,体積変形は拘束されることなく,結果として過大な体積ひずみエネルギが生じる近傍解が生成されることが明らかとなった。

そこで本研究では、近似解における体積変形 と近傍解における体積変形を関連付けるペナル ティ法を考慮した次の汎関数の最小化問題とし て近傍解の構成を定式化する.

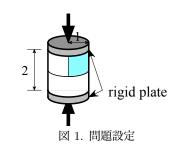
 $\Pi(\boldsymbol{u}^{np})$

$$= \int_{\Omega} \left\{ ||\boldsymbol{u}^{np} - \boldsymbol{u}^{h}||^{2} + \sum_{i=1}^{3} \left| \left| \frac{\partial \boldsymbol{u}^{np}}{\partial X_{i}} - \frac{\partial \boldsymbol{u}^{h}}{\partial X_{i}} \right| \right|^{2} + \frac{\alpha}{2} (J^{np} - \bar{J}^{h})^{2} \right\} dx \quad (4)$$

ここで、 $||\cdot||$ はベクトルのノルム、 α はペナルティ係数である。また、 J^{np} 、 \bar{J}^h は、それぞれ近傍解と対象とする問題の近似解における変形前後の体積比である。圧力を独立変数とするu-p混合型定式化に基づき微圧縮性の問題を取り扱う場合、変位場から計算される変形前後の体積比は弱形式により拘束されたものであり、局所的には精度の高いものとはなっていない。そこで本研究では、近傍解を構成する際に用いる変形前後の体積比として、体積変形成分に対する構成則を用いて圧力場から算出したものを用いる。

4 数值計算例

円筒形ブロックの圧縮問題に本研究で提案する近傍解の構成手法を適用する. 問題は, 図1



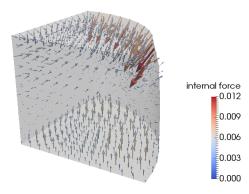


図 2. 近傍問題の等価節点力

のように剛な板を介して軸方向圧縮を与える条件とし、端部には軸方向に強制変形を与え、軸 直角方向の変位は拘束した。また、計算領域は 対称性を利用し、8分の1部分を考える。

近傍問題における内力の等価節点力を図2に示す。等価節点力は端部にのみ存在し、物体内部にはほとんど等価節点力は存在せず、物理的に妥当な問題が構成されていることも分かる。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 16H03914 の助成 を受けたものである.

- [1] 山田貴博, 超弾性体の大変形問題に対する圧力安定化四面体 1 次要素, 土木学会論文集 A2 (応用力学), 73 (2017), L405-L415
- [2] C.J. Roy, A. Raju and M.M. Hopkins: Estimation of Discretization Errors using the Method of Nearby Problems, AIAA Journal, 45, 1232-1243, 2007.
- [3] 南澤宏紀,山田貴博,高橋凌,大田周吾, 松井和己: 弾塑性有限要素解析における 近傍問題法,応用力学シンポジウム講演 概要集, 2016.
- [4] 高橋凌,山田貴博,松井和己:超弾性体の大変形解析に対する近傍問題法,計算工学講演会論文集 22, 2017.

オフセット角度を用いた断層画像再構成における厳密解の構成法

神田 直大 1,2, 高梨 宇宙 2

1 芝浦工業大学, 2 理化学研究所

e-mail: naohiro.kanda@riken.jp

1 概要

CTスキャナは断層画像診断において強力な ツールであり、現在では医学だけでなく、産業 分野においても欠かすことのできない技術と なっている. X線を用いた投影画像の集合から 断層画像を得るアイデアは、1960年代に Cormack と同時期に英 EMI 社の Housfield によっ て実現され、1971年ロンドンのアトキンソン モーレー病院にて臨床試験が行われた.一方 で、投影画像集合 P から断層像 T の再構成を 可能とする原理は 1917 年に Radon によって 与えられていた [1]. これは逆変換が積分変換 として与えられ、T↔P に一対一対応を保証す るが、現実の測定は離散化したデータしか得 られないため,原理をそのまま適用すること はできない. 臨床試験の後, Gordon, Bender, Herman らによって代数的再構成法 (Algeblaic Reconstruction Technique)[2] が開発されたが, 現在では Ramachandran, Lakshminarayanan によるフィルタ逆投影法 (Filterd Back Projection)[3] が主流を占めている. 一方で X 線 CT よりも画素数の少ない PET や SPECT におい ては、ARTによる再構成が行われているが、い ずも逐次代入計算に基づいており, 再構成画像 の一意性が保たれていない. 近年の計算機の進 歩により、高画素数 X 線 CT においても ART の利用が再び脚光を浴びてきている[4]が、単純 な離散化法に従う限り逐次代入計算を避けられ ず, 計算量が膨大になるだけでなく再構成画像 の一意性が放棄される. 本研究で我々は、デー タサンプリング方法を改良することにより,厳 密な逆変換を得る一つの方法を提案する.

2 ラドン変換

X線CTスキャナをはじめとする断層画像再構成において、その背後で用いられているのは、任意の2次元平面内でのラドン変換である。これは次のような積分変換の形で与えられる。

$$P(s,\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(x,y)\delta(s - x\cos\theta + y\sin\theta)dxdy$$
(1)

ここで F(x,y) は二次元平面内で定義される性質の良い関数である。この変換の歴史は古く、1917年の J. Radon の研究に始まり、同じ論文の中で、Radon はその逆変換についても既に与えている [1]. 現代においては、X 線 CT スキャナのみにとどまらず、トモグラフィと呼ばれる多くの測定手法の基礎となっている。

トモグラフィは,何らかの物理的手法により $P(s,\theta)$ を得ることに対応する測定を行った後, そこから F(x,y) を求める逆問題である. ラド ン変換及びその逆変換は, 数学的には連続関数 に対する変換として定義されており、もしも全 ての s, θ について $P(s,\theta)$ が得られるのであれ ば、ラドン逆変換により直ちにF(x,y)が求ま る. しかし現実的な測定においては、このよう なことは不可能である. すなわち, 実際には離 散的な測定を行うことしかできず、結果として 有限個の $P(s,\theta)$ を得ることしかできない. そ こで実際の断層画像再構成においては, 興味の ある対象領域を有限個のピクセルに分けて考え, 各ピクセルの内部ではF(x,y)は一定の値を持 つと近似する. そして有限回の測定から得られ た有限個の $P(s,\theta)$ から、有限個の F(x,y) を 求める逆問題を考えることになる.

3 離散ラドン変換と画像再構成

以下ではX線CT スキャナを具体例として考えていく、この場合、逆問題は、物体を透過した後のX線強度の減少量から、物体内部のX 吸収係数を決定する問題となる.

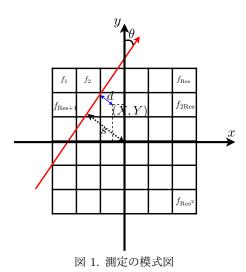
任意のx-y平面と、原点のまわりで時計回り に θ だけ回転させた直交座標(t,s)を考えると

き, t軸方向のラドン変換は

$$P(s,\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} F(s\cos\theta + t\sin\theta, -s\sin\theta + t\cos\theta)dt$$
(2)

と表せる.

似的に



ここで考える領域を $N\times N$ のピクセルに分け、これを $1\sim N^2$ までの番号でラベルし、各ピクセルの中では吸収係数 F_i $(i=1,\cdots N^2)$ は一定として考える.このような設定において、X 線の軌跡は、例えば s,θ の関数 $\ell(s,\theta)$ と表すことができる.ここで測定は $\theta=0\sim\pi$ までを N 分割して行われ,また等間隔に並んだ N 本の X 線が各 θ ごとに t 軸方向に照射されるとする.この $\ell(s,\theta)$ はまた,適当に並べ替えることで ℓ_i

と表すこともでき、離散化したラドン変換は近

$$P_i = \sum_{j=1}^{N^2} W_{ij} F_j \quad (i, j = 1, \dots, N^2)$$
 (3)

と行列の形で表せる。ここで P_i は各 X 線の測定によって得られる,観測値であり,また W_{ij} は重みを表す $N^2 \times N^2$ の行列であり,対応するピクセルを (幅のある)X 線が掃く面積に応じて値を変えるなどされる。ここでは簡単に X 線が対応するピクセルを通過した場合には 1 ,それ以外の場合には 0 とする。

もし W_{ij} の逆行列が求まれば、直ちに全ての F_i が求まる。ところが、このような幾何学的配置に基づく測定を通じて得られる行列 W_{ij} は逆行列を持たないことが経験的に知られている。

実際,単純な N=2 の場合などであれば, F_i に不定性があることが直接確かめられる. 実際の測定では, θ 方向の刻み方を N 以上にとり (従って W_{ij} は長方行列型となり), 状況に応じて種々の近似法によって F_i を求めていく.

4 オフセット角度を用いた画像再構成法

今回我々は、オフセット角度を用いた測定方 法による画像再構成を提案する. ここでオフ セット角度とは測定開始時における角度のこと である. $\theta = 0 \sim \pi$ の範囲を N 分割していた ところを、 $\theta = \alpha \sim \pi + \alpha \ (0 < \alpha < \pi)$ の範囲 を N 分割する測定に変える. 各 N の値に対し τ , オフセット角度 α を変化させることにより, W_{ij} の階数が変化する.このとき lpha を適切に選 ぶことによって、N=4の場合を除き、正方行 列 W_{ij} は正則なものとなることを N=130 ま での複数の N について数値計算によって確認 した. 特に N=2 の場合については容易に直 接確認できる. また W_{ij} が正則となる α の値 は、Nによって異なるが、我々は数値計算の結 果から、N と α についての関係式についても 提案する.

- J. Radon On the Determination of Functions from their Integrats along Certain Manifolds, Bar. Verh. Sachs Aksd. Wiss 69 (1917), 262-277.
- [2] R. Gordon, R.Bender, G.T.Herman Algeblaic Reconstruction Techniques (ART) for Three Dimensional Electron Microscopy and X-ray photography, J. Theoro. Biol. 29 (1970), 471-481.
- [3] G.N.Ramachandran, A.V.Laksminarayanan Three Dimensional Reconstruction from Radiographics and Electron Micrographs: Application of Convolutions instead of Fourier Transformations Proc. Natl. Acad.Sci, USA, 68 (1971), 2236-2240.
- [4] Adaptive Statistical Iterative Reconstruction, (http://www3.gehealthcare.com/en/products/categories/molecular_imaging/pet-ct/pet-ct_applications/asir #)

抵抗率測定に使用される四探針法の数理モデルの解析:Hypercircle 法による有限要素解の誤差評価

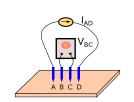
中野 泰河1, 劉 雪峰2

- 1 新潟大学大学院 自然科学研究科 数理物質科学専攻 数理科学コース
- 2 新潟大学大学院 自然科学研究科

e-mail: f18a055k@mail.cc.niigata-u.ac.jp, xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 概要

四探針法は半導体材料の抵抗率を測定するために使用される方法である^[1]. 抵抗率測定に関する模式図と実際の測定器を以下の図1と図2に示す.





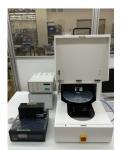


図 2. 抵抗率測定器

本研究では探針と材料の接触条件に関して幾つかの物理的な仮定に応じて, 微分方程式の境界値問題による数学的モデルを提案した. さらに, 各数学的モデルに応じて Hypercircle 法による有限要素解の誤差評価を行った.

2 数学的モデル

本研究で提案した数学的モデルはいずれも, 電位(u)に関する微分方程式によって表される.

材料が占める領域を Ω とし,探針A,Dの接触する面を Γ_A,Γ_D とする。 $V^h(\subset H^1(\Omega))$ は Ω 上の適合有限要素空間とし,関数空間U,Vについては表1に示される。このとき,電位(u)が満たす変分式と有限要素法での近似 (u_h) は以下のようになる.

Find $u \in U$ s.t.

$$(\nabla u, \nabla v)_{\Omega} = \langle f, v \rangle \ \forall v \in V \tag{1}$$

Find $u_h \in V_h$ s.t.

$$(\nabla u_h, \nabla v_h)_{\Omega} = \langle f, v_h \rangle \ \forall v_h \in V_h$$
 (2)

以降で述べる Hypercircle 法では混合有限要素法による近似解の構成も必要である。以下の式で $\Sigma^h \times V^h$ を混合有限要素空間とし、 $(p_h, u_h) \in$

 $\Sigma^h \times V^h$ をそれぞれ電位の勾配 (電流) と電位 の近似とすると、混合有限要素法による定式化 は以下のようになる.

$$\begin{cases} (\text{div } q_h, u_h)_{\Omega} + (p_h, q_h)_{\Omega} = \langle g, q_h \rangle \\ (\text{div } p_h, v_h)_{\Omega} = 0 \end{cases}$$

ここで $(q_h, v_h) \in \Sigma^h \times V^h$ はテスト関数である。 表1に各数学的モデルを比較したものを示す。 ただし表内の p,q については Hölder 共役な指数とする。

3 有限要素解の誤差評価

四探針法に関わる数学的モデルでは非凸な領域が考えられるため,一般に解の正則性を保証できないことがある.

そこで本研究では各モデルについて Hypercircle 法 $^{[2]}$ を応用して,以下の誤差評価を検討した.

- 1) 大域的な適合有限要素解の誤差評価
- 2) 局所的な適合有限要素解の誤差評価
- 3) 探針 B, C 間の電位差の誤差評価

Hypercircle 式とは u を厳密解とし、任意の $v_h \in V^h$ と div $p_h = 0$ を満たす p_h に対して、以下の Hypercircle 式が得られる.

$$||\nabla u - \nabla v_h||_2^2 + ||\nabla u - p_h||_2^2 = ||\nabla v_h - p_h||_2^2$$

3.1 大域的な適合有限要素解の誤差評価

定理 1 (大域的な適合有限要素解の誤差評価) u_h を電位 u の有限要素近似として,次の誤差評価が成立する.

$$||\nabla u - \nabla u_h||_2 \le ||\nabla u_h - p_h||_2$$

 $||u-u_h||_2 \le \sqrt{C_0^2 h^2 + \kappa_h} \cdot ||\nabla u - \nabla u_h||_2$ ただし定数 C_0 は具体的な値を持ち,h はメッシュサイズとする.定数 κ_h は以下のように定

モデル	点電荷モデル	Neumann モデル	Dirichlet モデル	
探針の接触条件	点	面	面	
物理的な仮定	電流と等価な点電荷	接触面上均一な電流	接触面上均一な電位	
·Poisson 方程式		· Laplace 方程式	· Laplace 方程式	
数学的モデルの特徴	· 斉次 Neumann 境界值問題	· 非斉次 Neumann 境界值問題	· 非斉次 Dirichlet-Neumann 境界值問題	
	· Dirac の δ 関数			
関数空間 U	$U = W^{1,p}(\Omega)$	$U = H^1(\Omega)$	$U = \{ v \in H^1(\Omega) v = 1 \text{ on } \Gamma_A, v = 0 \text{ on } \Gamma_D \}$	
	, ,	, ,	(
関数空間 V	$V = W^{1,q}(\Omega)(q > 3)$	$V = H^1(\Omega)$	$V = \{ v \in H^1(\Omega) v = 0 \text{ on } \Gamma_A \cup \Gamma_D \}$	
	, , , , ,	` '		
汎関数 $\langle f, v_h \rangle$	$2\rho I(v_h(D) - v_h(A))$	$\rho I(\int_{\Gamma_A} \frac{v_h}{ \Gamma_A } ds - \int_{\Gamma_D} \frac{v_h}{ \Gamma_D } ds)$	0	
汎関数 $\langle g, q_h \rangle$	0	0	$\int_{\Gamma_A} q_h \cdot n \ ds$	

義される.

$$\kappa_h := \max_{\substack{f_h \in X^h \\ p_h \in \Sigma^h \\ \text{div } p_h + f_h = 0}} \frac{\min_{\substack{v_h \in V^h \\ p_h \in \Sigma^h \\ \text{div } p_h + f_h = 0}} \frac{||\nabla v_h - p_h||_2^2}{||f_h||_2^2}$$

ここで X^h は各要素で区分的な一次多項式全体の空間とする.

3.2 局所的な適合有限要素解の誤差評価

四探針問題において探針 B,C 間の電位差を評価する場合,局所的な誤差評価も必要となる.本研究では L^2 / ルムに対して重み関数を導入し (図 3 を参照) 局所的な誤差評価を得た.

定義 2 (重み付き L^2 ノルム) $\alpha \in W^{1,\infty}(\Omega)$ を非負の重み関数とする。このとき重み付き L^2 ノルム以下で導入する。

$$||f||_{\alpha}:=\sqrt{\int_{\Omega}f^{2}\alpha\ d\Omega}$$
 (= $||f\sqrt{\alpha}||_{2}$) 図 3. 重み関数のイメージ

定理 3 (Hypercircle 法による局所誤差評価) 重み付き L^2 / ルムによる以下の誤差評価が得 られる

$$||\nabla u - \nabla v_h||_{\alpha}^2 + ||\nabla u - p_h||_{\alpha}^2 \le ||\nabla v_h - p_h||_{\alpha}^2 + 2 \cdot ||\nabla \alpha||_{\infty} \cdot ||u - v_h||_2 \cdot ||\nabla u - p_h||_2$$

大域的な誤差評価と比較すると局所的な誤差 評価は、より高い精度の抵抗率の測定が可能と なる.

3.3 探針 B, C 間の電位差の誤差評価

本研究で提案した Dirichlet, Neumann モデルの解は調和関数となるので、平均値に関する性質 [3] が利用できる.この性質と前節で述べた局所的な誤差評価を利用して、探針 B,C 間の電位差の誤差評価が可能となる.詳細については、発表時に説明する予定である.

- [1] 山下正人,四探針法の抵抗率補正係数,富山大学教育学部紀要B(理科系), No45(1994), 23-32
- [2] Xuefeng Liu, Shin'ichi Oishi, Verified eigenvalue evaluation for the Laplacian over polygonal domains of arbitrary shape, SIAM J Numer Anal, Vol.51(3)(2013), 635–752.
- [3] Lawrence C.Evans, Partial Differential Equations, American Mathematical Society, 1998.

抗原・抗体の体内動態の定量的解析に向けたモデルパラメータの多様性に 対する考察

小松 瑞果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, ²JST さきがけ

e-mail: m-komatsu@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

アレルギーは、体内に侵入した抗原と呼ばれ る異物に, 免疫細胞や, その生産物である抗体 などが作用することによって生じる化学物質に よって引き起こされる疾患である. このような 一連の免疫応答は、体内のあらゆる臓器で生じ うるため, アレルギーは全身性疾患であると言 われている.従って、アレルギーを全身スケー ルでモデル化し、その包括的な理解を試みるこ とは、重要だと考えられるが、そのようなモデ ル化はあまり行われていない. 一方で, 全身ス ケールでの体内現象のモデル化手法は、特に、 薬学分野において、比較的発展している[1].ア レルギーに対しても同様のアプローチを導入し, さらに、アレルギーの本質、つまり、免疫機能 の異常のメカニズムを捉えるような解析手法を 発展させることは有意義だと考えられる.

このような考えのもと、筆者らは、抗原・抗体 の体内動態を全身スケールでモデル化し[2]、モ デルパラメータの推定手法を提案した[3]. 免疫 機能の異常を捉えるには、まず、複数人から得 た, 免疫機能に関係しうる何らかの実験データ を比較し、「個性」に相当するものを定量化する 必要がある。モデルを用いると、そのパラメー タの値を用いて個性の定量化が可能となる. し かしながら、本研究が扱う問題においては、パ ラメータが被験者に対して一意に定まらず, そ のため、「個性」に相当するものの定量化が、容 易ではない. 以上を踏まえ, 本稿では, [2] のモ デルに対して推定された複数のパラメータの候 補に対する解析法とその結果について述べる.

抗原・抗体の体内動態モデルとパラメー 夕推定

本節では,[2]で提案されたモデルとパラメー タ推定手法の概要を述べる. このモデルは, 抗 原が経口摂取により体内に侵入し、その後生じ うる,吸収,分布,代謝,排泄という生理学的 プロセスと, 免疫応答をコンパートメントモデ ルによって記述したものである. 詳細は[2]に 譲るが、モデルが定める方程式は、以下の微分 代数方程式となる:

$$\frac{dx_1}{dt} = -p_f \left(\frac{x_1}{V_1} - \frac{x_3}{V_2}\right) - ak_f \left(\frac{x_1}{V_1} - \frac{x_5}{V_3}\right) - x_{16},$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -p_c \left(\frac{x_2}{V_1} - \frac{x_4}{V_2}\right) - bk_c \left(\frac{x_2}{V_1} - \frac{x_6}{V_3}\right)$$

$$-v \frac{\frac{x_2}{V_1}}{\frac{x_2}{V_1} + m} + x_{16},$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \alpha x_0 \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt} f(t) - g(t)$$

$$+ p_f \left(\frac{x_1}{V_1} - \frac{x_3}{V_2}\right) - t_f \left(\frac{x_3}{V_2} - \frac{x_5}{V_3}\right)$$

$$-k_a \frac{x_3}{V_2} - x_{17},$$

where

where
$$f(t) = \begin{cases} \left(\frac{1}{1 + \exp(-\tau t)} - 0.5\right) \exp\left(-\frac{1}{w_1^2}(t - \beta)^2\right) \\ (t < \beta) \end{cases}$$

$$exp\left(-\frac{1}{w_r^2}(t - \beta)^2\right) \qquad (t \ge \beta)$$

$$g(t) = \frac{1}{2} \begin{cases} \frac{V_0}{K} + \alpha x_0 \frac{1}{\int_0^{\infty} f(t) dt} f(t) + G \end{cases}$$

$$-\left\{ \left(\frac{V_0}{K} + \alpha x_0 \frac{1}{\int_0^{\infty} f(t) dt} f(t) + G\right)^2 \right.$$

$$-4\alpha x_0 \frac{1}{\int_0^{\infty} f(t) dt} f(t)G \end{cases}$$

$$\frac{dx_4}{dt} = g(t) + p_c \left(\frac{x_2}{V_1} - \frac{x_4}{V_2}\right) - t_c \left(\frac{x_4}{V_2} - \frac{x_6}{V_3}\right)$$

$$- v_1 \frac{\frac{x_4}{V_2}}{\frac{x_4}{V_2} + m_1} + x_{17},$$

$$\frac{dx_5}{dt} = ak_f \left(\frac{x_1}{V_1} - \frac{x_5}{V_3}\right) + t_f \left(\frac{x_3}{V_2} - \frac{x_5}{V_3}\right) + k_f$$

$$\left(\frac{x_7}{V_4} - \frac{x_5}{V_3}\right) + k_f \left(\frac{x_9}{V_5} - \frac{x_5}{V_3}\right) - x_{18},$$

$$\frac{dx_6}{dt} = bk_c \left(\frac{x_2}{V_1} - \frac{x_6}{V_3}\right) + t_c \left(\frac{x_4}{V_2} - \frac{x_6}{V_3}\right) + x_{18},$$

$$\frac{dx_7}{dt} = -k_f \left(\frac{x_7}{V_4} - \frac{x_5}{V_2}\right) - x_{19},$$

$$\frac{\mathrm{d}x_8}{\mathrm{d}t} = -k_c \left(\frac{x_8}{V_4} - \frac{x_6}{V_3}\right) - v \frac{\frac{x_8}{V_4}}{\frac{x_8}{V_4} + m} + x_{19},$$

$$\frac{\mathrm{d}x_9}{\mathrm{d}t} = -k_f \left(\frac{x_9}{V_5} - \frac{x_5}{V_3}\right) - k_e \frac{x_9}{V_5} - x_{20},$$

$$\frac{\mathrm{d}x_{10}}{\mathrm{d}t} = -k_c \left(\frac{x_{10}}{V_5} - \frac{x_6}{V_3}\right) - v_k \frac{\frac{x_{10}}{V_5}}{\frac{x_{10}}{V_5} + m_k} + x_{20}$$

$$\frac{\mathrm{d}x_{10+n}}{\mathrm{d}t} = -x_{15+n} \qquad (n = 1, 2, 3, 4, 5),$$

$$Kx_{2n-1}x_{10+n} - x_{2n}V_n = 0$$

$$(n = 1, 2, 3, 4, 5).$$

ここで、モデル変数は、 x_1 から x_{20} であり、そ れぞれ, 抗原や抗体の各コンパートメントにお ける物質量を表す. また, $V_n(n=1,2,3,4,5)$, K, G は定数、それ以外の文字は全てパラメー タであり、それぞれ生理学的・免疫学的な意味 をもつ. 従って, ある被験者に対する実験デー タに対して、これらのパラメータを推定するこ とで、その被験者の生理学的・免疫学的機能が 定量化される.一般的に,元来複雑である,物 質の体内動態を全身スケールでモデル化するた めには、多くのパラメータ必要になる.一方で、 体内動態に関するデータは, 倫理的観点から, 得ることが難しい、そのため、本研究が扱うよ うな問題においては、パラメータに対しデータ が不足しやすく, 従って, パラメータ推定の解 が一意に定まらないことがあり得る. 言い方を 変えると, ある被験者に対する実験データから 求まるパラメータ候補の集合は、多様体となり 得る. このような場合, この被験者の「個性」 について議論するにあたり、推定の解が描く多 様体から,何らかの特徴を取り出すというプロ セスが必要である.

提案モデルに対しては、ある実験データに関し、被験者ごとにパラメータの候補が複数得られている[3]. パラメータの候補は、直感的には、多様体からサンプルされた点の集合だと捉えることができる.

3 多様な推定解の解析

本節では、提案手法により推定された複数のパラメータの解析方法のアイデアを述べる. 基本的なアイデアは、これらパラメータの候補のうち、誤差が十分小さいものについて、各パラメータの変動係数を求めることである. この値は、推定における最小化問題の目的関数である、誤差関数の値の十分小さな変化に対して、各パラメータがどの程度ばらついているかを表す.

これは、見方を変えると、各パラメータが、実験データとどの程度対応づくかを表す指標だと捉えることができる。つまり、この値が小さければ、そのパラメータは、被験者に依存する実験データを特徴づけていると考えられる。実際に、得られた複数のパラメータに対し、上述の解析を行うと、パラメータ $w_{\rm I}$ 、 β 、 $w_{\rm r}$ の変動係数が、非常に小さいことが分かった。さらに、これらを軸とするパラメータ空間上に推定された解を描くことで、被験者間の違いが可視的に示された(図 1 左).

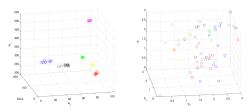


図 1. パラメータの変動係数による個体差の可視化結果 の比較

このことから、被験者によって異なる多様体における特徴、つまり、被験者の「個性」に相当すると考えられるパラメータを、本研究によって定量的に求めることができたといえる.詳細と、具体的な結果については、講演の際に報告する.

謝辞 本研究は科学研究費補助金(基盤研究(C),課題番号 26400200) および JST さきがけ (JPMJPR16EC) の支援を受けている.

- Peters, S. A., Physiologically-based pharmacokinetic(PBPK) modeling and simulations: principles, methods, and applications in the pharamaceutical industry. Wiley, NJ, 2011.
- [2] 小松瑞果,谷口隆晴,Husbyらの実験データに対するアレルギー発症メカニズムの解析に向けた抗原・抗体の体内動態モデルの構築,日本応用数理学会論文誌,投稿中.
- [3] 小松瑞果, 谷口隆晴, 体内動態に対する コンパートメントモデルのモデルパラ メータ推定手法について, 第47回数値解 析シンポジウム予稿集 (2018), 62-65.

アンケートデータを用いた交流ネットワーク推定手法

佐藤 智久 1 , 谷口 隆晴 1,2 , 增本 康平 3 , 近藤 徳彦 3 , 岡田 修一 3

¹ 神戸大学大学院システム情報学研究科, ²JST さきがけ

3 神戸大学大学院人間発達環境学研究科

e-mail: t-satoh@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

高齢化地区に生じる諸問題を解決するためには、その地域内での支え合いが重要であり、その地域での交流の様子を知ることは大切である。本研究では、交流の様子を推定するための簡単な方法として、アンケートによる交流人数の調査と、それに基づくネットワーク構造推定法を提案する。特に、交流人数などといった数字を回答するアンケートでは、結果が5の倍数など、きりのよい数字に偏りやすい。これをヒーピングと呼ぶ。本発表では、ヒーピングによる影響の除去についても考慮する。

2 アンケートデータからのネットワーク の推定

本研究では,アンケートデータから交流の様 子を推定することを目標とする. 具体的には, 研究の対象とするコミュニティのメンバーを頂 点に対応させ,メンバー同士の間に交流があ るときに枝を対応させる. ただし, 枝に向きは つけないものとする. これにより、単純無向グ ラフが定まり、本稿ではこれをネットワークと 呼ぶことにする. ここで, 全てのメンバーの間 の交流の有無を調べることは, プライバシーの 観点からも難しい. そこで、代わりに全てのメ ンバーに対して,何名との交流があるかという 人数だけを調査するものとする.これにより, 各頂点に接続している枝の本数が分かるため, ネットワークの次数分布が分かる. 与えられた 次数列をもつネットワークを効率良くサンプリ ングする方法として, Blitzstein と Diaconis の アルゴリズム [1] が知られている. アルゴリズ ムの概要を Algorithm 1 に示す. 本研究では, 基本的には,このアルゴリズムを用いてネット ワーク構造, 具体的には, 連結成分の数の期待 値などを推定する.

3 ヒーピングによる影響の除去

前述のように,人は数字を回答する場合,き りの良い数字を選ぶ傾向があり,これをヒーピ **Algorithm 1** Blitzstein と Diaconis のアルゴ リズム

1: 次数列 $d=(d_1,\ldots,d_n)$ を入力する.

2: while $d \neq 0$ do

0 でない d_i のうち最も小さい d_i を選ぶ.

4: while $d_i \neq 0$ do

5: 頂点 v_i と頂点 v_j を辺で繋ぐことが可能な v_j の中から 1 つを次数 d_j に比例する確率で選ぶ.

7: end while

8: end while

ングと呼ぶ、交流の人数に関するアンケートの回答もこの影響を受けるため、それを除去するための補正が必要である。本研究では、Crawford ら [2] によるモデルを用いて補正を行う。Crawford らのモデルでは、ヒーピングに加えて、回答者が真の値を正確に記憶していないことによる誤差も考慮される。xをアンケートに対する真の回答とし、yを実際に得られた回答とする。xは、何らかの確率モデルに従うと仮定し、この確率モデルのパラメータを、以下のヒーピングのダイナミクスモデルを記述するパラメータと合わせて推定することで、xの分布を推定する。

Crawford らのモデルでは、ヒーピングの結果、回答は、あるいくつかの整数 m_j $(j=1,\ldots,n)$ の倍数にされやすいと仮定されており、y の値は、x を初期値とし、推移パラメータ λ_k,μ_k を

$$\lambda_k = \theta_{\text{disp}}(1+k) + \theta_{\text{heap}} \sum_{j=1}^n v_j(x) (k \mod m_j)$$

$$\mu_k = \theta_{\text{disp}}k + \theta_{\text{heap}} \sum_{j=1}^n v_j(x)(-k \mod m_j)$$

とした出生死滅過程で定まると仮定する.ここで θ_{disp} , θ_{heap} はそれぞれ拡散とヒーピングの強さを表すパラメータである.また, $v_j(x)$ については,[2] で提案されているものを用いた場

合,パラメータが一意に定まらない場合があった.そこで,本研究では, $v_j(x)$ として以下の関数を用いる. m_j $(j=1,\dots,n-1)$ に対して,区間 $[\gamma_{2j-1},\gamma_{2j})$ を用意し,また m_n に対して半区間 $[\gamma_{2n-1},\infty)$ を用意する.x が含まれる区間の数を c とし, v_j を

$$v_j(x) = \begin{cases} \frac{1}{c} & (c \neq 0) \\ 0 & (c = 0) \end{cases}$$

と定義する.

前述のとおり、ヒーピングの影響を除去するためには、モデルパラメータの推定が必要であるが、本研究では、モデルのパラメータ推定には ABC-MCMC を用いた [3]. ABC-MCMC の詳細については公演時に説明する.

4 解析結果

図1に示されている、交流の人数に関するアンケートデータを用い、実際にネットワークを推定する。まず、Crawford らのモデルを用いてデータを補正する。真の分布として Poisson分布を仮定し、ヒーピングする倍数は5と10の倍数であると仮定する。また、各パラメータの初期値として

 $\lambda = 7$.

 $\theta_{\rm disp} \sim {
m Inverse-Gamma}(2,1)$, $\theta_{\rm disp} \sim {
m Inverse-Gamma}(3,4)$, $\gamma_j \sim {
m Uniform}(0,150)$,

と設定した. また、 λ は Poisson 分布のパラメータである.

パラメータを推定すると、 λ の推定値として $\lambda = 2.76 \pm 0.58$ が得られた。そこで、パラメータ $\lambda = 2.76$ をもつ Poisson 分布を真の回答と考え、図 1 の総回答数である 638 回のサンプリングを行うことで、次数列を作成した。

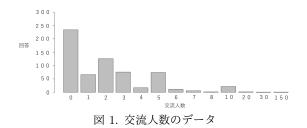
この次数列を用い、Blitzstein と Diaconis の アルゴリズムによって 1000 回、ネットワークを 作成し、ネットワーク特徴量の推定を行った. ここで、Algorithm 1 では、次数 d_j に比例する確率で頂点を選び、枝を発生させているが、これは、なるべく大きい連結成分をもつネットワークを発生させるようにするためである。実際、多くの応用では、そのようなネットワークが好ましいが、今回は、高齢化問題の解決に向けて、交流の様子を推定するために用いる。そ

のため,交流の程度については悪い場合を想定 したほうが良く,連結性については過小評価さ れることが望ましい.

そこで、枝を接続する頂点の選び方として、次数 d_j に比例する確率で選ぶ以外に、次数 d_j に反比例する確率で選ぶ、最も次数の小さい頂点の中から一様な確率で選ぶ、といった3つの異なる方法でネットワークを作成した。連結成分の数の平均 μ_c 、標準偏差 σ_c 、連結成分のサイズの平均 μ_s 、標準偏差 σ_s を表1に示す。方法によって、かなりの差があるが、いずれの場合も、ある程度の連結性をもつことが推測される。

表 1. 連結成分の数とサイズの推定値

	μ_c	σ_c	μ_s	σ_s
次数に比例	46.9	0.071	13.6	0.020
次数に反比例	79.9	0.072	8.00	0.008
最小の次数	134	0	4.76	0



謝辞 本研究は JST さきがけ (JPMJPR16EC) の支援を受けている.

- [1] J. Blitzstein and P. Diaconis, A sequential importance sampling algorithm for generating random graphs with prescribed degrees, Internet Math., Vol. 6, (2011), 489–522.
- [2] F. W. Crawford, R. E. Weiss, and M. A. Suchard, Sex, lies and self-reported counts: Bayesian mixture models for heaping in longitudinal count data via birth-death processes, Ann. Appl. Stat., Vol. 9, (2015), 572–596.
- [3] 小林弦矢, ABC サンプラーの最近の発展について, 日本統計学会誌, Vol. 41 (2011), 155–180.

An HFE-based variant of a key exchange protocol employing multivariate polynomial maps

Shuhei Nakamura¹, Masaru Ito¹, Koichiro Akiyama², Noriko Hirata-Kohno¹ Nihon University, ²Toshiba Corporation R&D Center e-mail: nakamura.shuhei@nihon-u.ac.jp

1 Introduction

It is one of current major problems in cryptography to establish a post-quantum cryptosystem. In view of the hardness in finding solutions to a system of multivariate polynomial equations, the cryptosystem using polynomial maps is expected to be a good candidate resistant to quantum computers.

In this talk, we introduce a new key exchange protocol using multivariate HFE-based polynomial maps. We give a security proof against passive observers with honest party, provided the hardness in solving a system of polynomial equations conducted by the protocol. Additionally, we examine our protocol employing HFE-based trapdoors, in order to discuss the availability of our protocol.

The novelty relies on the use of several HFE_v and HFE_v -based polynomials, instead of usual invertible polynomial maps as is suggested in [1] and [2].

This research was supported by a Grant-in-Aid for Scientific Research (C), JSPS Kakenhi, Grant Number 26520208.

2 Polynomial Maps

Let R be a domain. Denote by $R[\underline{x}] = R[x_1, \ldots, x_n]$ the polynomial ring of n variables over R. A polynomial map is a map $\underline{\psi} = (\psi_1, \ldots, \psi_n) : R^n \to R^n$ of the form

$$(a_1, \ldots, a_n) \mapsto (\psi_1(a_1, \ldots, a_n), \ldots, \psi_n(a_1, \ldots, a_n))$$
 1) Alice sends Diophantine equations $f_1(\underline{x}) =$

with $\psi_1, \ldots, \psi_n \in R[\underline{x}]$. Therefore, a polynomial map is viewed as an element of the Cartesian product $R[\underline{x}]^n$. The degree of a polynomial map $\underline{\psi} = (\psi_1, \ldots, \psi_n)$ is defined by

$$\deg \psi = \max\{\deg \psi_1, \dots, \deg \psi_n\}$$

where $\deg \psi_j$ is the total degree of the polynomial ψ_j $(1 \leq j \leq n)$. A polynomial map of degree one is called an *affine map*.

For polynomial maps $\underline{\psi} = (\psi_1, \dots, \psi_n)$ and $\underline{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_n)$, we define the composed map $\underline{\psi} \circ \varphi$ by

$$\underline{\psi} \circ \underline{\varphi} = (\psi_1(\varphi_1, \dots, \varphi_n), \dots, \psi_n(\varphi_1, \dots, \varphi_n)).$$

The Hidden Field Equations (HFE)-based polynomial maps are often used in multivariate cryptography (e.g. HFE-, HFEv-). Let

$$P(X) := \sum_{i,j} \alpha_{i,j} X^{q^i + q^j} + \sum_{i} \beta_i X^{q^i} + \gamma \text{ on } \mathbb{F}_{q^n}.$$

Then $\Phi^{-1} \circ P \circ \Phi : \mathbb{F}_q^n \to \mathbb{F}_q^n$ is a quadratic polynomial map where $\Phi : \mathbb{F}_q^n \to \mathbb{F}_{q^n}, (a_1, \dots, a_n) \mapsto a_1\theta_1 + \dots + a_n\theta_n$ and $\{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ is a basis of \mathbb{F}_{q^n} over \mathbb{F}_q .

3 Our Key Exchange Protocol

In this section, we propose a new key exchange protocol with parameters q, n, m, d, l using polynomial maps. Our protocol allows to use non-bijective polynomial maps in contrast to the protocol of [1]. We adapt here several polynomials $f_1(\underline{x}), \dots, f_l(\underline{x})$ so as to increase the number of parameters of our protocol, referring that the ideal generated by $f_1(\underline{x}), \dots, f_l(\underline{x})$ is not a principal ideal domain.

Alice and Bob are going to agree to a common key through an insecure communication channel.

- 1) Alice sends Diophantine equations $f_1(\underline{x}) = \cdots = f_l(\underline{x}) = 0$ to Bob keeping a solution $\underline{\sigma} \in \mathbb{F}_q^n$ secret.
 - (a) Generate polynomials $f_1(\underline{x}), \ldots, f_l(\underline{x}) \in \mathbb{F}_q[\underline{x}]$ having a solution $\underline{\sigma}(\in \mathbb{F}_q^n)$ as follows. Choose $\underline{\sigma} \in \mathbb{F}_q^n$ and polynomials $f'_1(\underline{x}), \ldots, f'_l(\underline{x}) \in \mathbb{F}_q[\underline{x}]$ uniformly at random. Then we put $f_i(\underline{x}) := f'_i(\underline{x}) f'_i(\underline{\sigma})$ for $i = 1, \ldots, l$.

- (b) Send $f_1(\underline{x}), \ldots, f_l(\underline{x})$ to Bob.
- 2) Bob sends polynomial maps $\underline{g}(\underline{x})$ and c(x) to Alice.
 - (a) Generate a bijective affine map $\underline{g}(\underline{x}) \in \mathbb{F}_q[\underline{x}]^n$, a polynomial map $\underline{\psi}(\underline{x}) \in \mathbb{F}_q[\underline{x}]^n$ with $\deg \psi = m$ to be feasibly inverted and polynomial maps $\underline{r}_i(\underline{x}) \in \mathbb{F}_q[\underline{x}]^n$ of $\deg r_i = m d$ uniformly at random.
 - (b) Compute the polynomial map $\underline{c}(\underline{x}) = \psi(g(\underline{x})) + f_1(\underline{x})r_1(\underline{x}) + \cdots + f_l(\underline{x})r_l(\underline{x}).$
 - (c) Send $g(\underline{x})$ and $\underline{c}(\underline{x})$ to Alice.
- 3) Alice generates a common key $\underline{s} \in \mathbb{F}_q^n$ and sends a value $\underline{u} \in \mathbb{F}_q^n$ to Bob.
 - (a) Compute $\underline{g}(\underline{\sigma}) = \underline{s}$ and use it as the common key.
 - (b) Compute $\underline{c}(\underline{\sigma}) = \underline{u}$ and send it to Bob.
- 4) Bob computes the set, denote by S, of elements \underline{x} in $\underline{\psi}^{-1}(\underline{u})$ such that $f_i(\underline{g}^{-1}(\underline{x})) = 0$ for all $1 \leq i \leq l$. If #S = 1 holds, Bob obtains the common key \underline{s} because $S = \{\underline{s}\}$. Otherwise retry the procedure of the key exchange from the step 1.

Some modifications will be available to make the protocol flexible (e.g., Minus variant). Especially, we intend to consider a variant of our protocol employing an HFE-based polynomial map as ψ and examine its success rate.

4 Security proof

We show its security against the Key Recovery Attack by Honest Passive Observer (KRA-HPO). Namely, the attacker does *not* interfere with the communication between Alice and Bob. To formulate the security model, we denote by $\operatorname{Exp}_{\Sigma,\mathscr{A}}(k)$ the experiment of a key recovery attack \mathscr{A} against our key exchange protocol Σ which inputs security parameter k of Σ and outputs the result $r \in \{0,1\}$ representing the failure (r=0) or the success (r=1) of the attack \mathscr{A} . Then we say that the protocol Σ is secure in the sense of KRA-HPO if

$$Adv_{\Sigma,\mathscr{A}}(k) = Pr \left[r = 1 \mid r \leftarrow \operatorname{Exp}_{\Sigma,\mathscr{A}}(k) \right]$$

is a negligible function in the security parameter k.

Definition 4.1. The *Polynomial Map Equation (PME) problem* is a problem of finding a solution to the system of Diophantine equations

$$\begin{cases}
f_1(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\
\vdots \\
f_l(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\
c_1(x_1, \dots, x_n) &= u_1 \\
\vdots \\
c_n(x_1, \dots, x_n) &= u_n
\end{cases}$$
(1)

with the input $(f, g, \underline{c}, \underline{u})$ observed by Σ .

Considering the experiment $\operatorname{Exp}^{\operatorname{PME}}_{\mathscr{B}}(k)$ of a probabilistic algorithm \mathscr{B} for solving the PME problem, we define a hardness assumption (the *PME assumption*) of solving the PME problem as follows: The advantage

$$Adv_{\mathscr{B}}^{\mathrm{PME}}(k) := Pr\left[r = 1 \mid r \leftarrow \mathrm{Exp}_{\mathscr{B}}^{\mathrm{PME}}(k)\right]$$

is a negligible function in the security parameter k, for all \mathcal{B} .

Theorem 4.2. Under the PME assumption, the key exchange scheme Σ is secure in the sense of KRA-HPO. In particular, if there is a probabilistic polynomial time algorithm $\mathscr A$ that breaks the scheme Σ in the sense of KRA-HPO, then there exists an algorithm $\mathscr B$ that solves the PME problem in probabilistic polynomial time such that

$$Adv_{\mathscr{B}}^{\mathrm{PME}}(k) = Adv_{\Sigma,\mathscr{A}}(k).$$

References

- [1] Akiyama, K. and Hirata-Kohno, N., A Key Exchange Protocol using Polynomial Map (in Japanese). Symposium on Cryptography and Information Security, 2017, The Institute of Electronics, Information and Communication Engineers.
- [2] Akiyama, K., Nakamura S., Ito M. and Hirata-Kohno, N., A key exchange protocol relying on polynomial maps. Preprint.

Circulant UOV/Rainbow 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

UOV [1, 2] と Rainbow [3] は多変数の 2 次 多項式を用いた署名方式である.構成のシンプ ルさとその安全性から,十分実用的であると考 えられており, 実際に NIST の Post-Quantum Cryptography 標準化プロジェクト [4] におい て提案された方式のうちいくつかは UOV と Rainbow を基にして構成されている. Circulant UOV [5] & Circulant Rainbow [6] は, Peng と Tang によってごく最近提案された UOV と Rainbow を基にした署名方式である.係数に 特殊な構造を入れることで,署名生成を高速に でき, さらに, 既存の UOV や Rainbow に対す る攻撃法に対しても十分な安全性が保たれると 考えられている.しかしながら,これらの方式 で用いられる多項式の構造を詳しく調べると、 実は Kipnis-Shamir の攻撃 [7, 2] に対して安全 でないことがわかった. 本稿では, これらの方 式の脆弱性を説明する.

2 UOV

 $o,v\geq 1$ を $v\geq o$ なる自然数,n:=o+v,q を素べき,k を位数 q の有限体とする.2 次写像 $G:k^n\to k^o$ を次のように定める.

$$\mathbf{x} = {}^t(x_1, \dots, x_n),$$
 $G(\mathbf{x}) = {}^t(g_1(\mathbf{x}), \dots, g_o(\mathbf{x})),$
 $g_l(\mathbf{x}) = \sum_{1 \le i \le o} x_i \cdot (x_{o+1}, \dots, x_n \,$ の線形式)

 $+(x_{o+1},\ldots,x_n$ の 2 次式), $(1 \le l \le o)$. 署名方式 UOV [1,2] は次のように構成される.

秘密鍵: 可逆なアフィン写像 $S:k^n \to k^n$.

公開鍵: 2 次写像 $F := G \circ S : k^n \to k^o$.

署名生成: メッセージ $\mathbf{m}={}^t(m_1,\ldots,m_o)\in k^o$ に対して,ランダムに $u_1,\ldots,u_v\in k$ を生成し,

$$g_1(y_1, \dots, y_o, u_1, \dots, u_v) = m_1,$$
: (1)

$$g_o(y_1,\ldots,y_o,u_1,\ldots,u_v)=m_o$$

をみたす $^t(y_1,\ldots,y_o)\in k^o$ をみつける.メッセージ ${f m}$ に関する署名は

 $\mathbf{s} = S^{-1t}(y_1, \dots, y_o, u_1, \dots, u_v) \in k^n$ である. 署名認証: $F(\mathbf{s}) = \mathbf{m}$ を確認する.

2次式 g_1,\ldots,g_o の作り方から,(1) は y_1,\ldots,y_o に関する連立線形方程式なので,署名は $O(n^3)$ 程度の計算量で生成できることがわかる.

o=v の場合,UOV は Kipnis-Shamir の攻撃 [7,2] で解読できる.実際に, G_l を $g_l(\mathbf{x})$ の係数行列,つまり $g_l(\mathbf{x})={}^t\mathbf{x}G_l\mathbf{x}+(線形式)$ となるような $n\times n$ (対称)行列とすると, $G_l=\begin{pmatrix} 0_o & * \\ * & *_v \end{pmatrix}$ と表される.このことから,o=v なら任意の $1\leq l_1, l_2\leq o$ に対して

$$G_{l_1}^{-1}G_{l_2} = \begin{pmatrix} *_o & * \\ 0 & *_v \end{pmatrix}$$

となるので, $SS_1=\begin{pmatrix}*_o&*\\0&*_v\end{pmatrix}$ をみたす可逆なアフィン写像 S_1 を,公開鍵 F の情報のみで,多項式時間でみつけることができる.いったんこのような S_1 をみつけることができたら,署名偽造は容易である.

v>o の場合,直接的に Kipnis-Shamir の攻撃を適用することはできないが,多少のアレンジを加えることで同様の S_1 をみつけることができる [2] . ただし,計算量は $O(q^{v-o}\cdot(\mathrm{polyn.}))$ であり,v を o よりも十分に大きく(通常は 2 倍以上)とることで,安全性を確保できると考えられる.

3 Circulant UOV

Circulant UOV [5] は UOV で用いられる 2 次式 $g_1(\mathbf{x}),\dots,g_o(\mathbf{x})$ の係数の取り方を工夫したものである.便宜上,係数行列 G_l を $v \times o$ 行列 A_l と $v \times v$ 行列 B_l を用いて $G_l = \begin{pmatrix} 0_o & ^tA_l \\ A_l & B_l \end{pmatrix}$ と分割する.通常,UOV では A_l,B_l の取り方はランダムである.一方で,Circulant UOV では A_2 を A_1 の列をひとつずつずらしたもの, A_3 は A_2 の列を一つずつずらしたもの,… というように A_l を選ぶ.つまり,o 個の列ベクトル

$$\mathbf{a}_1,\dots,\mathbf{a}_o\in k^v$$
 を使って A_1,\dots,A_o は $A_1=(\mathbf{a}_1,\dots,\mathbf{a}_0), \ A_2=(\mathbf{a}_o,\mathbf{a}_1,\dots,\mathbf{a}_{o-1}), \ dots \ A_o=(\mathbf{a}_2,\dots,\mathbf{a}_o,\mathbf{a}_1)$

とあらわされる . このように A_1, \dots, A_o を選ぶと , 署名生成の際にあらわれる連立線形方程式 (1) が

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_o \\ \alpha_o & \alpha_1 & \dots & \alpha_{o-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_2 & \alpha_3 & \dots & \alpha_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_o \end{pmatrix}$$

という形になる . このような連立方程式は $O(n^2)$ 程度の計算量で解けることが知られており [8] , (1) と比較して大幅に計算量を縮小することができることがわかる .

4 Circulant UOV の安全性

前述したように,v=o の場合, $G_{l_1}^{-1}G_{l_2}=\begin{pmatrix} *_o & * \\ 0 & *_v \end{pmatrix}$ となるので,Kipnis-Shamir の攻撃 [7] で UOV を多項式時間で解読できる.v>o の場合, $G_{l_1}^{-1}G_{l_2}$ はこのような形にはならないため,解読にはより大きな計算量が必要になる.ただし,これは A_l , B_l をランダムに選んだ場合であり,特殊な選び方をした場合には注意深くその構造を調べる必要がある.

Circulant UOV では , 前節のように A_1, \dots, A_o を選んでいる . このような A_1, \dots, A_o の間には $A_l = A_1 \sigma^{l-1}$

という関係がある.ここで, σ は巡回置換を与える $o \times o$ 行列である. A_l がこのように選ばれているため,v > o であるにもかかわらず, $G_{l_1}^{-1}G_{l_2} = \begin{pmatrix} *_o & * \\ 0 & *_v \end{pmatrix}$ が成り立つことがわかる.なので,v = o の場合と同様に, $SS_1 = \begin{pmatrix} *_o & * \\ 0 & *_v \end{pmatrix}$ をみたす S_1 を多項式時間で見つけることができる.以上より,Circulant UOV は Kipnis-Shamir の攻撃に対して全く安全でないことがわかった.

5 Circulant Rainbow の安全性

Rainbow [3] は UOV を多層化 (多くの場合 2 層化) したもので, Circulant UOV と同じ

ように Circulant Rainbow [6] も構成できる. Rainbow でも Kipnis-Shamir の攻撃に対する 安全性を考慮してパラメータを選ばなければ ならないが,やはり Circulant UOV と同様に Circulant Rainbow でも, Kipnis-Shamir の攻撃で,署名偽造に十分な秘密鍵の情報を得ることができる.そのため, Circulant Rainbow も 安全ではないことがわかる.

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.

- [1] J. Patarin, The Oil and Vinegar Signature Scheme, the Dagstuhl Workshop on Cryptography, 1997.
- [2] A. Kipnis, J. Patarin, L. Goubin, Unbalanced oil and vinegar signature schemes, Eurocrypt'99, LNCS 1592 (1999), pp.206–222, extended in citeseer/231623.html, 2003-06-11.
- [3] J. Ding, D. Schmidt, Rainbow, a new multivariate polynomial signature scheme, ACNS'05, LNCS **3531** (2005), pp.164–175.
- [4] https://csrc.nist.gov/Projects/
 Post-Quantum-Cryptography/
 Post-Quantum-Cryptography-Standardization
- [5] Z. Peng, S. Tang, Circulant UOV: a new UOV variant with shorter private key and faster signature generation, KSII Transactions on Internet and Information Systems, 12 (2018), pp. 1376-1395.
- [6] Z. Peng, S. Tang, Circulant Rainbow: A new Rainbow variant with shorter private key and faster signature generation, IEEE Access 5 (2007), pp. 11877 - 11886.
- [7] A. Kipnis, A. Shamir, Cryptanalysis of the oil and vinegar signature scheme, Crypto'98, LNCS 1462 (1998), pp.257– 267.
- [8] I. Kra, S. R. Simanca, On circulant matrices, Notices AMS, 59 (2012), pp. 368-377.

Superspecial Trigonal Curves of Genus 5

工藤 桃成 1,2, 原下 秀士 3

¹ 神戸市立工業高等専門学校, ² 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, ³ 横浜国立大学 e-mail: m-kudo@math.kyushu-u.ac.jp (工藤) harasita@ynu.ac.jp (原下)

1 Introduction

代数幾何学とその関連分野において,特殊な代数多様体の探索・決定は古くから重要な研究課題である.特に,超特別曲線と呼ばれる代数曲線は,曲線やアーベル多様体全体のなす空間(モジュライ空間)の構造を調べる手がかりとなるだけでなく,暗号・符号分野などにおいて最適な曲線パラメータとしても活用されうる.本研究では,超特別曲線の探索・決定問題を計算問題に帰着させ,代数学・数論およびその応用全般における様々な計算技法を用いることで,計算問題の解決を目指す.

以下では特に断らない限り,曲線といえば 1 次元の非特異射影代数多様体を意味する.標数 p>0 の体 K 上の代数曲線 C が超特別曲線 (superspecial curve) であるとは,K 上のある超特異楕円曲線 E が存在して,代数閉包 \overline{K} 上で $J(C)\cong E^g$ が成り立つことである.ここで J(C),g はそれぞれ代数曲線 C の Jacobi 多様体,種数を表す.以降, $K=\mathbb{F}_q$ (元数 q の有限体)とする.ここで q は K の標数 p の 冪である.このとき,次のような問題が考えられる:

問題 1 (有限体上の超特別曲線の決定問題) 与えられた (g,q) に対して,有限体 $K=\mathbb{F}_q$ 上の種数 g の超特別曲線は存在するか.存在するならば,K (または \overline{K}) 上の同型類を全て列挙せよ.

種数 g が 3 以下の場合は,アーベル多様体の理論を有効に用いることが出来るため,問題 1 に関する多くの先行結果がある (e.g., [3], [4]). しかしながら $g \geq 4$ では,p や q に関して統一的な結果は得られていない.種数が g = 4 の場合は,近年の講演者らの研究 [5], [6] によって,いくつかの小さい q に対して問題 1 を解決することに成功した.

次に考えられるのは g=5 の場合である. 先行研究 [1], [2] によって,超特別曲線が存在すれば $p\geq 7$ であることが示されるが,問題 1 における同型類の列挙に対する一般的な結果は得られていない.

2 主結果

本研究では,種数 g=5 の trigonal 曲線の場合において,問題 1 をある計算問題に帰着させ,Gröbner 基底計算などの計算技法を用いることで次の定理 2-4 を得た.ここで代数曲線 C が trigonal であるとは,次数 3 の射 $\pi:C\to\mathbb{P}^1$ が存在することである.

定理 2 ([7], Theorem A) 標数 p = 7 においては、種数 g = 5 の trigonal な超特別曲線は存在しない.

定理 3 ([7], Theorem B) (1) 有限体 \mathbb{F}_{11} 上の種数 g=5 の trigonal な超特別曲線は、射影平面 $\mathbb{P}^2=\operatorname{Proj}(\overline{\mathbb{F}_{11}}[x,y,z])$ 内の特異曲線 C'=V(F) の正規化 C に \mathbb{F}_{11} 上で同型である.ここで F は $\mathbb{F}_{11}[x,y,z]$ の既約 5 次形式であり,

$$xyz^3 + a_1x^5 + a_2y^5$$
 $(a_1, a_2 \in \mathbb{F}_{11}^{\times})$

または

$$(x^{2} - 2y^{2})z^{3} + ax^{5} + bx^{4}y + (9a)x^{3}y^{2} + (4b)x^{2}y^{3} + (9a)xy^{4} + (3b)y^{5}$$
$$((a, b) \in \mathbb{F}_{11}^{2} \setminus \{(0, 0)\})$$

のいずれかの形である.

(2) (1) における超特別曲線 C の \mathbb{F}_{11} (resp. $\overline{\mathbb{F}_{11}}$) 上の同型類は 4 個 (resp. 1 個) である.

定理 4 ([7], Theorem C) 有限体 \mathbb{F}_{13} 上の種数 g=5 の trigonal な超特別曲線は存在しない.

定理 3(2) における超特別曲線の各同型類の代表元 C について、特異モデル C' の定義多項式 F を得ているが、ここでは省略している.

3 証明のアイデア(計算問題への帰着)

まず、次の補題 5 によって、種数 g=5 の trigonal 曲線のモデルを与える.

補題 5 ([7], Lemma 2.2.1) 有限体 $K = \mathbb{F}_q$ 上の種数 q = 5 の trigonal 曲線 C は、射影 平面 $\mathbb{P}^2 = \operatorname{Proj}(\overline{K}[x,y,z])$ 内の特異 5 次曲線 C' = V(F) の正規化に K 上で同型である. ここで, F は K[x,y,z] の既約 5 次形式である. また, C' の特異点はただ 1 つであり, それは重複度 2 の K 有理点 [0:0:1] である. さらに, 次が成り立つ:

- (1) 特異曲線 C' が [0:0:1] において節点 (node) を持つとき, $F=xyz^3+f$ または $F=(x^2-\epsilon y^2)z^3+f$ ($\epsilon\in K\smallsetminus (K^\times)^2$) の形である.ただし,5 次形式 f に現れるどの項も z^3 で割り切れない.
- (2) 特異曲線 C' が [0:0:1] において尖点 (cusp) を持つとき, $F=x^2z^3+f$ の形である.ただし,5 次形式 f に現れるどの項も z^3 で割り切れず,かつ y^3z^2 の係数は 0 でない.

逆に,(1) や(2) における既約5 次形式F に対して,V(F) の正規化は種数5 のtrigonal 曲線である.

次に,種数 5 の trigonal 曲線が superspecial であることの判定法を与える.ここでは簡単のため,補題 5 における (1) $F = xyz^3 + f$ または (2) $F = x^2z^3 + f$ の場合のみ取り扱う.(1) $F = (x^2 - \epsilon y^2)z^3 + f$ の場合における判定法については,[7, 2.2節] で与えている.定義方程式が与えられている非特異曲線について,その超特別性を判定する方法は先行研究 [5], [6] において提案されている.しかしながら今の場合,C は特異曲線 C' の正規化であるので,これらの手法を適用できないことに注意する.

命題 6 ([7], Corollary 2.3.2) 記号は補題 5 のものとし, $F = xyz^3 + f$ または $F = x^2z^3 + f$ の形とする.特異曲線 $C' = V(F) \subset \mathbb{P}^2$ の正規化 C が超特別曲線であることの必要十分条件は, F^{p-1} における次の 25 個の単項式の係数が全て 0 になることである: $x^{pi-i'}y^{pj-j'}z^{pk-k'}$ (ただし (i,j,k) および (i',j',k') は (3,1,1), (1,3,1), (2,2,1), (2,1,2), (1,2,2) のいずれかである).

いま、補題 5 と 命題 6 によって、種数 5 の trigonal 曲線の場合における問題 1 は計算問題 に帰着された.具体的には、補題 5 (1), (2) の形の 5 次形式 $F \in K[x,y,z]$ の集合 $\mathcal F$ で次の 1) -4) を満たすものを求めればよいことがわかる:

- 1) 各 $F \in \mathcal{F}$ は命題 6 の条件を満たす.
- 2) 各 $F \in \mathcal{F}$ は \overline{K} 上で既約である.
- 3) 各 $F \in \mathcal{F}$ に対して、V(F) は [0:0:1] をただ 1 つの特異点に持つ.
- 4) 集合 \mathcal{F} の相異なる元の組 (F_1, F_2) に対して, $V(F_1)$ と $V(F_2)$ の正規化をそれぞれ C_1 , C_2 とする.このとき, C_1 と C_2 は K 上で同型でない.

講演では、上記 1) -4) を満たす \mathcal{F} を求めるための具体的な計算戦略・効率化や、得られる超特別曲線の自己同型群などについて概説する予定である.

なお、本研究でこれまでに得られた超特別曲線は、第一著者のホームページにデータベースとして公開されている(URLについては、紙面の都合上、本予稿ではなく講演中に紹介する).

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17K05196 の助成を受けたものです.

- [1] Ekedahl, T.: On supersingular curves and abelian varieties, *Math. Scand.*, **60**, pp. 151–178, 1987.
- [2] Fuhrmann, R. and Torres, F.: The genus of curves over finite fields with many rational points, *Manuscripta Math.*, 89, pp. 103–106, 1996.
- [3] Hashimoto, K.: Class numbers of positive definite ternary quaternion Hermitian forms, *Proc. Japan Acad. Ser. A Math. Sci.*, **59** (1983), no. 10, 490–493.
- [4] Ibukiyama, T.: On rational points of curves of genus 3 over finite fields, *To-hoku Math. J.*, 45, pp. 311–329, 1993.
- [5] Kudo, M. and Harashita, S.: Enumerating Superspecial Curves of Genus 4 over Prime Fields, arXiv: 1702.05313 [math.AG], 2017.
- [6] Kudo, M. and Harashita, S.: Superspecial curves of genus 4 in small characteristic, Finite Fields and Their Applications, 45, pp. 131–169, 2016.
- [7] Kudo, M. and Harashita, S.: Superspecial trigonal curves of genus 5, 2018, arXiv: 1804.11277 [math.AG].

De Sitter 時空における Klein-Gordon 方程式の解の伝播について

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 概要

曲がった時空中においては、偏微分作用素が 時空の影響を受けるため発展方程式がその時空 の曲がり具合の影響を受ける. De Sitter 時空 は Einstein 方程式の厳密解の一つで、 曲がった 時空を表し、宇宙初期のインフレーションを記 述する時空であると考えられている. この時空 において、相対論的波動方程式として最も簡単 な発展方程式の1つである Klein-Gordon 方程 式を例としてその挙動を調べることで、時空の 変化が発展方程式にどのような影響を与えるの かを考察する. 理論的 (解析的) な研究として [1, 2, 3]y などがあるが、実際には非線形偏微分 方程式である対象の Klein-Gordon 方程式を詳 細に調べることは困難であり、数値計算による 定量評価が必要だと考えられる. 今回, [4] の続 きとして、波形の伝播が空間膨張の値(符号)に よりどのように変化を受けるのかを考察する.

2 De Sitter 時空中での Klein-Gordon 方程式

De Sitter 時空中における, ポテンシャル $V'(\phi)$ をもつスカラー場 ϕ の n 次元 Klein-Gordon 方程式は

$$\partial_t^2 \phi + nH\partial_t \phi - c^2 e^{-2Ht} (\partial_i \partial^i \phi) + V'(\phi) = 0.$$

となる. ここで, c は光速を表す. また, H は Hubble 定数とよばれ, H>0 では空間の膨張を H<0 では空間の収縮を表す. この方程式の Hamilton 関数は ψ を ϕ の共役運動量として

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}c^2 e^{-nHt} \psi^2 + \frac{1}{2}e^{(n-2)Ht} \delta^{ij}(\partial_i \phi)(\partial_j \phi) + V(\phi), \tag{2}$$

で与えられる. 次で定まる量

$$H_C = \int \mathcal{H} d^n x,\tag{3}$$

は平坦な時空 (H=0) においては保存量となっている. そのため, H_C が初期値から変化しな

いことが数値計算が成功するための1つの必要条件と考えることができる。 平坦でない時空 $(H \neq 0)$ においては上記 H_C は保存量とはならないため、その代わりとして

$$\tilde{H}_C \equiv H_C - \int \partial_t H_C dt,$$
 (4)

を数値計算が成功したと判断する1つの必要条件と考えることにする.

3 数值計算

以下, n=3 のときにおいて非線形項を

$$V(\phi) = \frac{c^2}{2}e^{3Ht}\phi^2 + \frac{\lambda}{p+1}e^{3Ht}|\phi|^{p+1}$$

として初期値を

$$\phi(x) = A\cos(2\pi x), \quad (0 \le x \le 1) \tag{5}$$

$$\dot{\phi}(x) = 2\pi A \sin(2\pi x), \quad (0 \le x \le 1) \tag{6}$$

とした[5].

平坦な時空 (H=0) における H_C の数値結果は次のものである.

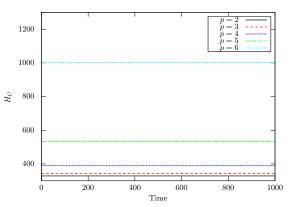


図 1. H = 0, $\lambda = 1$, A = 4 のときの H_C の値.

この結果から、上記の線がすべて水平であることから H_C が初期から変化していないことがわかり、数値計算自体は成功していると判断する. このときの波形 ϕ は p=5 の場合が以下の通りである.

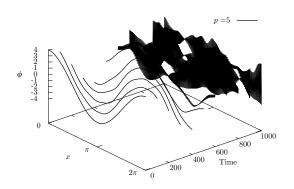


図 2. H=0, $\lambda=1$, A=4, p=5 のときの波形 ϕ .

t=500 以降では振動が生じ、波形が崩れていることがわかる.

膨張する時空における \tilde{H}_C の数値結果は次のものである (膨張する場合は H_C が理論上保存量とならないため、代わりに保存量となる \tilde{H}_C を用いている).

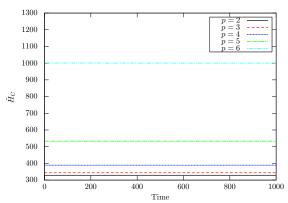


図 3. $H=10^{-3}$, $\lambda=1$, A=4 のときの \tilde{H}_C の値.

この結果から、上記の線がすべて水平であることから \hat{H}_C が初期から変化していないことがわかり、数値計算自体は成功していると判断する. このときの波形 ϕ は p=5 の場合が以下の通りである.

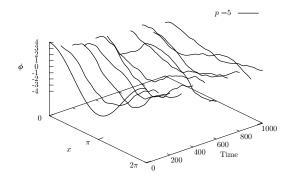


図 4. $H=10^{-3},\,\lambda=1,\,A=4,\,p=5$ のときの波形 $\phi.$

H=0 の場合の波形と比べると、振動は生じておらず計算が安定化していることがわかる。これらの結果から、H の増加は波形に安定性を与えることが示唆され、H<0 の収縮する場合では波形が崩れ不安定化し、blowup する結果が予想される。講演では、H<0 の結果を含めた波形を紹介し、宇宙の膨張収縮と発展方程式の初期値問題の関連性について議論する予定である。

- [1] P. D'Ancona, A. Di Giuseppe, Global existence with large data for a nonlinear weakly hyperbolic equation, Math. Nachr. **231** (2001), 5–23.
- [2] 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.
- [3] K. Yagdjian, Global existence of the scalar field in de Sitter spacetime, J. Math. Anal. Appl. 396 (2012), no. 1, 323–344.
- [4] 土屋拓也, 中村誠, "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", 日本応用数理学会 2017 年年会.
- [5] T. Tsuchiya and M. Nakamura, "On the numerical analysis of the Cauchy problem for semi-linear Klein-Gordon equations in the de Sitter spacetime", submitted.

非局所境界条件にむだ時間を含む双曲型システムに対する状態推定

丸山 颯天1, 佐野 英樹1, 若生 将史1

1神戸大学大学院システム情報学研究科

e-mail : $184 \times 027 \times @stu.kobe-u.ac.jp$, sano@crystal.kobe-u.ac.jp, wakaiki@ruby.kobe-u.ac.jp

1 概要

本講演では、非局所境界条件にむだ時間要素をもつ1階双曲型システムに対し、オブザーバ構成法を述べる。たとえば、線形化されたKermack-McKendrickモデルにおいて潜伏期間を考慮したモデルは、このクラスの双曲型方程式に含まれる。偏微分方程式に対するバックステッピング法を用いて、無限次元のオブザーバが設計できることを示す。

2 はじめに

本講演では,遅延フィードバックを有する 1 階双曲型偏微分方程式をとりあげる.これは,偏微分方程式の状態 u(t,x) に対して,空間全体にわたって重み付けされた積分値が,ある遅延時間を経て境界にフィードバックされるような偏微分方程式である.ここでの目的は,区間 [0,L] を空間領域としたときの x=L での値,すなわち u(t,L) のデータのみを使って,u(t,x) $(0 \le x \le L)$ を推定するようなオブザーバを設計することである.

オブザーバの設計にはバックステッピング法を用いる.一般に、偏微分方程式で記述されるシステムに対してオブザーバを設計するためには、システムの固有値・固有関数に関する情報が必要であるが、ここで扱う1階双曲型システムに対してはそれらを求めることは困難である.それに対して、M. Krstic らは2000年代半ばにそれらの情報を必要としないバックステッピング法を用い、誤差システムを安定化させるバックステッピングオブザーバを提案した.

ここでは遅延フィードバックを有する1階双曲型偏微分方程式について考える.境界条件に含まれるむだ時間要素を輸送方程式で置き換え,結合双曲型偏微分方程式の形で書き表す.そして,バックステッピング法を用い,任意の初期値に対して誤差システムが漸近安定になるようなオブザーバゲインを求める.最後に数値実験を通して,元の一階双曲型システムが安定,不安定のそれぞれの場合に対して,オブザーバとして正しく機能しているかどうか検証する.

3 バックステッピングオブザーバ

以下の1階双曲型システムを考える.

$$\begin{cases} u_t(t,x) = -u_x(t,x) - \gamma(x)u(t,x) \\ u(t,0) = \int_0^L \tilde{\beta}(x)u(t-\tau,x)dx \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in [0,L] \end{cases}$$
 (1)

ここで、 $\tilde{\beta}(x):=S_0\beta(x)$ であり、 $\tau>0$ はむだ時間である。特に $\gamma\in C[0,L]$ 、 $\beta\in C^1[0,L]$ 、 $\beta(0)=0$ を仮定する。 (1) は次の結合双曲型偏微分方程式と等価である.

$$\begin{cases} u_{t}(t,x) = -u_{x}(t,x) - \gamma(x)u(t,x) \\ u(t,0) = v(t,0), \quad x \in (0,L) \\ v_{t}(t,x) = v_{x}(t,x) \\ v(t,\tau) = \int_{0}^{L} \tilde{\beta}(x)u(t,x)dx, \ x \in (0,\tau) \end{cases}$$
 (2)

(2) の状態 u(t,x) を推定するために以下の方程式を考える.

$$\begin{cases} \hat{u}_{t}(t,x) = -\hat{u}_{x}(t,x) - \gamma(x)\hat{u}(t,x) \\ +g(x)\{u(t,L) - \hat{u}(t,L)\} \\ \hat{u}(t,0) = \hat{v}(t,0), \quad x \in (0,L) \\ \hat{v}_{t}(t,x) = \hat{v}_{x}(t,x) \\ +h(x)\{u(t,L) - \hat{u}(t,L)\} \\ \hat{v}(t,\tau) = \int_{0}^{L} \tilde{\beta}(x)\hat{u}(t,x)dx, \ x \in (0,\tau) \end{cases}$$

 $\tilde{u} := u - \hat{u}, \ \tilde{v} := v - \hat{v}$ とおくと, (2), (3) から誤差システムは以下のように表される.

$$\begin{cases} \tilde{u}_t(t,x) = -\tilde{u}_x(t,x) - \gamma(x)\tilde{u}(t,x) \\ -g(x)\tilde{u}(t,L) \end{cases} \\ \tilde{u}(t,0) = \tilde{v}(t,0), \quad x \in (0,L) \\ \tilde{v}_t(t,x) = \tilde{v}_x(t,x) - h(x)\tilde{u}(t,L) \\ \tilde{v}(t,\tau) = \int_0^L \tilde{\beta}(x)\tilde{u}(t,x)dx, \ x \in (0,\tau) \end{cases}$$

バックステッピング法を用いるため, (4) について積分変換を

$$w(t,x) = \tilde{v}(t,x) - \int_0^L k(x,y)\tilde{u}(t,y)dy$$
(5)
$$0 \le x \le \tau, \ 0 \le y \le L$$

と定める.

以下の手順により g(x) と h(x) は求まる. **Step 1.** 次の偏微分方程式の解 k(x,y) を求める.

$$\begin{cases} k_x(x,y) = k_y(x,y) - \gamma(y)k(x,y) \\ k(x,0) = 0 \\ k(\tau,y) = \tilde{\beta}(y) \end{cases}$$
 (6)

Step 2. 次の偏微分方程式が漸近安定となるように g(x) を決定する.

$$\begin{cases} \tilde{u}_t(t,x) = -\tilde{u}_x(t,x) - \gamma(x)\tilde{u}(t,x) \\ -g(x)\tilde{u}(t,L) \end{cases} (7)$$

$$\tilde{u}(t,0) = \int_0^L k(0,y)\tilde{u}(t,y)dy$$

Step 3. 次の式を用い、ゲインh(x)を求める.

$$h(x) = k(x, L) + \int_0^L k(x, y)g(y)dy$$
 (8)

4 数值実験

L=3, $\tau=0.25L=0.75$, $\gamma(x)=C(定数)$, $\tilde{\beta}(x)=x(L-x)$ を与え,g(x), h(x) を求める. この場合,途中で $e^{s\tau}$ の逆ラプラス変換を行う必要があるので, $e^{s\tau}$ をテイラー展開し近似解を得た.Fig.4-1 と Fig.4-2 は,C=0.2 (システムが不安定) としたときの g(x), h(x) のグラフである. $g_n(x)$ と $h_n(x)$ はそれぞれ, $e^{s\tau}$ のテイラー展開を n 次で打ち切って近似したときの g(x), h(x) の値を示している.Fig.4-3 の数値実験には $g_3(x)$, $h_3(x)$ を用いた.Fig.4-4 についても同様にゲインを求め,数値実験を行った.

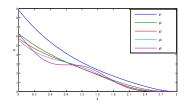


Fig.4-1: $g_n(x)(n = 1, 2, 3, 4, 5)$.

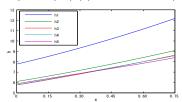


Fig.4-2: $h_n(x)(n = 1, 2, 3, 4, 5)$.

Fig.4-3 と Fig.4-4 は, それぞれ, C = 0.2 (システムが不安定) のとき, C = 2.0 (システムが

安定)のときの、真の値と推定値の誤差のグラフである.いずれの場合も(3)式がオブザーバとして正しく機能していることがわかる.

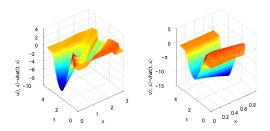


Fig.4-3: $u(t,x) - \hat{u}(t,x) (0 \le t \le 4.5, 0 \le x \le 3), v(t,x) - \hat{v}(t,x) (0 \le t \le 4.5, 0 \le x \le 0.75).$

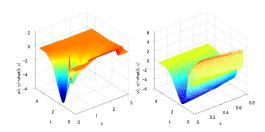


Fig.4-4: $u(t,x) - \hat{u}(t,x)(0 \le t \le 4.5, 0 \le x \le 3), v(t,x) - \hat{v}(t,x)(0 \le t \le 4.5, 0 \le x \le 0.75).$

謝辞

本研究は,科学研究費補助金(基盤研究(C), 課題番号15K04999)の助成を受けている.

- [1] 稲葉 寿 (編著), 感染症の数理モデル, 培風館, 2008.
- [2] M. Krstic and A. Smyshlyaev. Boundary Control of PDEs: A Course on Backstepping Designs. SIAM, Philadelphia, 2008.
- [3] M. Krstic and A. Smyshlyaev. Backstepping boundary control for firstorder hyperbolic PDEs and applications to systems with actuator and sensor delays. System and Control Letters, Vol. 57, pp. 750–758, 2008.
- [4] 井角文哉,線形化された感染症伝播モデルに対するバックステッピングオブザーバ,神戸大学工学部情報知能工学科 2014 年度卒業論文.
- [5] 仲村拓海,潜伏期間を有する感染症伝播 モデルにおけるオブザーバ設計法,神戸 大学工学部情報知能工学科 2016 年度卒 業論文.

Voronoi 格子上における離散 Green-Gauss 公式を介した離散変分とその応用

降籏 大介

大阪大学サイバーメディアセンター e-mail: furihata@cmc.osaka-u.ac.jp

1 概要

偏微分方程式の数値解析における構造保存数値解法の重要な一つのポイントは、1次元問題ならば部分積分、多次元問題ならば Green-Gauss 則の離散化にある. なぜならこの公式は、局所的操作たる微分と大域的操作の積分をつなぐことで、実際の多くの実問題で登場するエネルギーなどの汎関数に対する関数での"変分"という概念を成立させる数学的な「要」となっているからである.

しかし、対象空間領域が多次元の場合、非直交、非構造格子に基づいてこの Green-Gauss 則を離散化することは数学的に大変困難である. これは、そのままでは、構造保存数値解法においては参照点配置が直交格子点に限定されてしまうという、大変強い制限を意味する.

これまでこの困難に対しては対象領域を直方 領域に写像する手法 (Yaguchi [1]) や有限要素 法に基づく手法 (Matsuo [2]) などのアプロー チが存在するが、本研究は空間領域に対して Voronoi 格子に基づいて有限差分・体積法的な 離散近似を行い、その上に離散 Green-Gauss 則を見出す手法をとる.

この手法についてはいままでもいくつかシンプルかつ美しい離散 Green-Gauss 則を見出してそれらを応用することで構造保存数値解法を設計してきたが、格子を一種類しか用いない、つまり、反変基底と共変基底の区別をしない議論に基づいていたため、共変基底と反変基底が同時に登場する Green-Gauss 則の離散化において数学的に歪な形式になっている不自然さが否めなかった.

この状況に対し、Voronoi 格子に対する対の格子(共変微分/反変基底をのせるための格子なので、反変格子と呼んでおく)を Voronoi 格子の edge から自然に導かれる菱形格子にとることで数学的に大変自然な Green-Gauss 則表現を導出することに成功した. この応用により、より幅広い問題で変分計算の自然な離散化が可能になり、構造保存数値解法の設計が可能に

なる.

本講演は、Voronoi 格子および反変格子上での有限差分/体積法における離散 Green-Gauss 則が大変素直に表現できること、数学的に優れた性質を持つこと、その格子上で離散変分計算が自然に導出されること等を示し、そしてその応用として、離散変分導関数法という構造数値解法が成立することを示すものである.

2 Voronoi 格子上での差分・有限体積作 用素

まず、Voronoi 格子点の集合を $\{x_1, x_2, \cdots\}$ とし、格子点 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 $l_{ij} = ||x_i - x_j||$ 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 n_{ij} に対し、単純であるが重要な関係式として

$$\boldsymbol{n}_{ij} = \frac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{l_{ij}} \tag{1}$$

が成り立つ. この式は離散微分作用素の優れた 数学的性質を支える本質的なものである.

そして、Voronoi 格子点 x_* の隣接点添字集合を N_i として、Voronoi 格子上で、一般にスカラー関数 $\phi(x)$ を考えよう. このとき、たとえば Voronoi 格子上で離散 Laplacian を次のように定義する.

$$\Delta_{\mathrm{d}} \, \phi(\boldsymbol{x}_i) = \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{i \in N_i} \left(\frac{\phi(\boldsymbol{x}_j) - \phi(\boldsymbol{x}_i)}{l_{ij}} \right) \, r_{ij}.$$

なお、「格子上で」定義されるということはこれは格子による区分定数関数であることに注意 しておこう.

この定義は数学的に自然で、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.なお、この性質は格子が Voronoi 格子であることに由来するため、他の非構造格子では一般に成り立たない.

そして、勾配等を乗せるための反変格子について定義しよう. まず、接境界面 $\partial\Omega(i,j)$ を考

える。そして、この隣接する Voronoi 母点 x_i , x_j と接境界面 $\partial\Omega(i,j)$ の頂点の凸包から構成 される領域を Voronoi 反変領域 $\Omega^{(i,j)}$ と定義 する (この全体を Voronoi 反変格子と呼んでおこう).

この定義に基づいて、例えばスカラー関数 $\phi(x)$ に対する離散勾配を Voronoi 反変領域 $\Omega^{(i,j)}$ 上で次のように定義する (ただし、 $\Omega^{(i,j)}$ に含まれる Voronoi 母点を x_i, x_i として).

$$\operatorname{grad}_{\operatorname{d}} \phi|_{\Omega^{(i,j)}} = \left\{ rac{\phi(\boldsymbol{x}_j) - \phi(\boldsymbol{x}_i)}{l_{ij}}
ight\} \, \boldsymbol{n}_{ij}.$$

このように、取り扱う変数の共変、反変性に 応じてふたつの格子を適切に選択することで、 (以下のように)より自然な離散化が可能になる.

3 Voronoi 格子上の Green-Gauss 則

例として Voronoi 格子と Voronoi 反変格子 の上に見出される Green-Gauss 則を一つ紹介 しておこう. まず、領域 $\Omega \in \mathbf{R}^n$ と Voronoi 母点 $\{x_i\}$ に対して $P_{\Omega} = \{i \mid x_i \in \Omega\}, \overline{P_{\Omega}} = \{(i,j) \mid i,j \in P_{\Omega}, j \in N_i\}, \overline{\partial \Omega} = \{(i,j) \mid i \in P_{\Omega}, j \in N_i, j \notin P_{\Omega}\}$ と定義しておく.

定理 1 (Voronoi 共変・反変格子上 Green-Gauss 則)

上記の領域 $\Omega \in \mathbf{R}^n$ を考える. このとき、Voronoi 格子上の関数 f,h の値 $f_i = f(\mathbf{x}_i), h_i = h(\mathbf{x}_i)$ に対して次の式が成り立つ.

$$\begin{split} \sum_{i \in P_{\Omega}} f_{i} \, \Delta_{\mathrm{d}} \, h_{i} \, |\Omega_{i}| \\ &= - \sum_{(i,j) \in \overline{P_{\Omega}}} \mathrm{grad}_{\mathrm{d}} f|_{\Omega^{(i,j)}} \, \mathrm{grad}_{\mathrm{d}} h|_{\Omega^{(i,j)}} \, n |\Omega^{(i,j)}| \\ &- \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \overline{\partial \Omega}} \mathrm{grad}_{\mathrm{d}} f|_{\Omega^{(i,j)}} \, \mathrm{grad}_{\mathrm{d}} h|_{\Omega^{(i,j)}} \, n |\Omega^{(i,j)}| \\ &+ \sum_{(i,j) \in \overline{\partial \Omega}} \left(\frac{f_{i} + f_{j}}{2} \right) \left(\frac{h_{j} - h_{i}}{l_{ij}} \right) r_{ij}. \end{split}$$

面白いことに、この式の右辺の第 1 項 + 第 2 項は定義域が 1 次元のときの積分近似式である台形則の多次元版に相当しており、素直な一般化になっていることが理解される.

なお、上記の Green-Gauss 則の証明は容易で、格子点添字の数え方を操作するだけである.

4 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 離散ポテンシャル汎関数を

$$P(u)_i = \frac{1}{2}p u_i^2 + \frac{1}{4}r u_i^4,$$

 $D(u)_{i,j}=-rac{1}{2}q \ \mathrm{grad_d} u|_{\Omega^{(i,j)}} \ \mathrm{grad_d} u|_{\Omega^{(i,j)}}$ はよって

$$\sum_{i \in IN} P(u)_i |\Omega_i| + \left(\sum_{(i,j) \in \overline{P\Omega}} + \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \overline{\partial\Omega}} \right) D(u)_{i,j} n |\Omega^{(i,j)}|$$

と定義すると、離散変分導関数が先の定理の Green-Gauss 則に基いて

$$\begin{split} \frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u,v)}_{i} &= p \, \frac{u_{i}+v_{i}}{2} + r \, \frac{u_{i}^{3}+u_{i}^{2}v_{i}+u_{i}v_{i}^{2}+v_{i}^{3}}{4} \\ &+ q \, \Delta_{\mathrm{d}} \left(\frac{u+v}{2}\right)_{i} \end{split}$$

と計算でき、構造保存な数値スキームが

$$\frac{u_i^{(m+1)} - u_i^{(m)}}{\Delta t} = \Delta_d \left(\frac{\delta G_d}{\delta (u^{(m+1)}, u^{(m)})} \right)_i$$

として得られ、これによって構造保存な数値計算が可能になる.ただし、 $u_i^{(m)}$ は Voronoi 領域 Ω_i 上の時間ステップ m での関数 u(x,t) の近似値である.

当日の講演ではこれらの内容およびその証明、数値計算結果等を示す.

- [1] T. Yaguchi, T. Matsuo, and M. Sugihara, "An Extension of the Discrete Variational Method to Nonuniform Grids," *J. Comput. Phys.*, **229** (2010), 4382–4423.
- [2] T. Matsuo, "Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivative for nonlinear evolution equations," J. Comput. Appl. Math., 218 (2008), 506–521.

量子システムの理論的な最適制御問題について研究

王 全芳1

¹香港中文大学, 機械と自動化系 e-mail: quanfangwang@hotmail.com

I 概要

量子システムは放物型の系で記述される偏微分方程式なので、この講演はこれらの非線型系の最適制御を考える. 量子システムの理論的な制御のみを取り扱うことにする.つまり、変分法の方法で、複数の関数空間で、弱解と最適解の存在性と一意性を証明するつもりです. 特に、具体的な方程式の例を挙げて、これらの制御問題を解決できることを示します. 物理分野と違って、応用数学の立場で、量子システムの最適制御問題を解くことは理論的に実現して見いだします. さらに、今までこの研究方向で得られたいくつの結果を報告させていただきたいです.

2 量子システムの紹介

量子システムの研究は各分野でよく考えられました. 例えば,物理と化学の領域で,たくさんの研究機構と研究者たち,いろいろのかたちの量子実験を行いまして,すばらしい結果を得られました. そこで、我々は興味あるのは湯川秀樹先生の素粒子に関する量子システムの最適制御問題である. まず,この問題の物理モデルを紹介する. 空間 \mathbf{R}^3 において,n+m個素粒子(n個核子 ψ^i ,m個中間子 ϕ^j)に支配されるYukawa相互作用による量子システムを考える(cf. [1]). 仮定 Ω を座標変数 $x=(x_1,x_2,x_3)$ の属する空間集合として, $\Omega\in\mathbf{R}^3$ は有界な開集合である. 時間 $t\in[0,T]$ かつT>0, $Q=(0,T)\times\Omega$ と記す.n+m個素粒子の波動関数は Klein-Gordon-Schrodinger連立方程式で表す

$$\begin{cases} \mathbf{i}\hbar \sum_{i=1}^{n} \psi_{t}^{i} + \frac{\hbar^{2}}{2M} \sum_{i=1}^{n} \psi_{xx}^{i} + \mathbf{i}\alpha \sum_{i=1}^{n} \psi^{i} \\ +g \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \phi^{j} \psi^{i} + e \sum_{i=1}^{n} u \psi^{i} = 0, \\ \frac{1}{c^{2}} \sum_{j=1}^{m} \phi_{tt}^{j} - \sum_{j=1}^{m} \phi_{xx}^{j} + \left(\frac{m_{0}c}{\hbar}\right)^{2} \sum_{j=1}^{m} \phi^{j} \\ +\gamma \sum_{j=1}^{m} \phi_{t}^{j} = g \sum_{i=1}^{n} |\psi^{i}|^{2} + e' \sum_{j=1}^{m} v \phi^{j}, \\ (\psi^{i}, \phi^{j}, \phi^{j}_{t})|_{t=0} = (\psi_{0}^{i}, \phi^{j}_{0}, \phi^{j}_{1}), \end{cases}$$

$$(1)$$

ここで、 \hbar は(reduced)Planck定数. Mは核子の質量であり、 m_0 は中間子の質量である. そこで、cは光の速度、iは複素空間Cの虚部の単位である. α , γ は正値の定数で、拡散係数と衰減係数となります. 複素関数 $\psi^i(t,x)$ はi番

目の核子の確率密度を表す.実関数 $\phi^j(t,x)$ はj番目中間子の確率密度を表す.

3 数学の定式化

仮定 $\Omega\subset \mathbf{R}^3, x=(x_1,x_2,x_3)\in \Omega$ 、実関数 $\phi^j(t,x)$ に対して、二つのヘルベト空間 $H=L^2(\Omega)$ と $V=H^1_0(\Omega)$ を通常のノルムと内積で定義する(cf.[2]). その埋め込みはGelfand空間 $V\hookrightarrow H\hookrightarrow V'$ となり、連続、稠密かつコンパクトである.複素関数 $\psi^i(t,x)$ に対して、 $L^2(\Omega)$ と $H^1_0(\Omega)$ に対応する二つの複素関数空間 $\mathbb{L}^2(\Omega)$ と $\mathbb{H}^1_0(\Omega)$ を定義する.

 $\mathbb{L}^2(\Omega)=\{\psi^i|\psi^i=\psi^i_1+\mathbf{i}\psi^i_2,\psi^i_1,\psi^i_2\in L^2(\Omega)\}.$ その内積 $(\psi^i,\phi^j)_{\mathbb{L}^2(\Omega)}$

$$= ((\psi_1^i, \phi_1^j)_{L^2(\Omega)} + (\psi_2^i, \phi_2^j)_{L^2(\Omega)}) + \mathbf{i}((\psi_2^i, \phi_1^j)_{L^2(\Omega)} - (\psi_1^i, \phi_2^j)_{L^2(\Omega)}).$$

ノルムは $\|\psi^i\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}=(\|\psi_1^i\|_{L^2(\Omega)}^2+\|\psi_2^i\|_{L^2(\Omega)}^2)^{\frac{1}{2}}$ で与える。定義

 $\mathbb{H}^1_0(\Omega)=\{\psi^i|\psi^i=\psi^i_1+\mathbf{i}\psi^i_2,\psi^i_1,\psi^i_2\in H^1_0(\Omega)\}.$ 内積 $(\psi^i,\phi^j)_{\mathbb{H}^1_0(\Omega)}=(\psi^i_1,\phi^j_1)_{H^1_0(\Omega)}+(\psi^i_2,\phi^j_2)_{H^1_0(\Omega)}.$ この内積による誘導されたノルムは

$$\|\psi^i\|_{\mathbb{H}^1_0(\Omega)} = (\|\psi^i_1\|^2_{H^1_0(\Omega)} + \|\psi^i_2\|^2_{H^1_0(\Omega)})^{\frac{1}{2}}.$$

同じく, (\mathbb{V},\mathbb{H}) はGelfand複素空間 \mathbb{V} \hookrightarrow \mathbb{H} \hookrightarrow \mathbb{V}' ,その埋め込みは複素位相で連続,稠密かつコンパクトである. つぎは, $\psi = (\psi^1,\psi^2,\cdots,\psi^n)$ と $\phi = (\phi^1,\phi^2,\cdots,\phi^m)$ を記す.

定義 1 [解空間] 波動関数 $(\psi(u),\phi(u))$ に対して、次のように定義される一つの空間は解空間である:

$$W(0,T) = \{(\psi, \phi) | \psi \in \mathbb{V}^n, \psi' \in \mathbb{V}'^n, \\ \phi \in V^m, \phi' \in H^m, \phi'' \in V'^m \}.$$

もし $(m{\psi},m{\phi}),(ilde{m{\psi}}, ilde{m{\phi}}),\in W(0,T)$, その内積は次のように定義する.

$$egin{aligned} \left((oldsymbol{\psi},oldsymbol{\phi}), (ilde{oldsymbol{\psi}}, ilde{oldsymbol{\phi}}) &= (oldsymbol{\psi}, ilde{oldsymbol{\psi}})_{\mathbb{V}} + (oldsymbol{\psi}', ilde{oldsymbol{\psi}})_{\mathbb{V}} + (oldsymbol{\phi}', ilde{oldsymbol{\phi}})_{H} + (oldsymbol{\phi}'', ilde{oldsymbol{\phi}})_{V'}. \end{aligned}$$

さらに、そのノルムは次のように定義できる

$$\begin{split} \|(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\phi})\|_{W(0,T)} &= \left(\|\boldsymbol{\psi}\|_{L^2(0,T;\mathbb{V})}^2 + \|\boldsymbol{\psi}'\|_{L^2(0,T;\mathbb{V}')}^2 \right. \\ &+ \|\boldsymbol{\phi}\|_{L^2(0,T;V)}^2 + \|\boldsymbol{\phi}'\|_{L^2(0,T;H)}^2 + \|\boldsymbol{\phi}''\|_{L^2(0,T;V')}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \end{split}$$

したがって,W(0,T)はヘルベト空間になる.

定義 2 [弱解] もし関数 $(\psi(u),\phi(u))$ はW(0,T) に属して、かつ次の弱形式を満たす場合、 $(\psi(u),\phi(u))$ はKlein-Gordon-Schrodinger方程式(1)の弱解と呼ばれる

$$\begin{cases} \int_0^T\!\!\int_\Omega [-\mathbf{i}\hbar\psi\mu_t - \frac{\hbar^2}{2M}\psi_{\boldsymbol{x}}\mu_{\boldsymbol{x}} + \alpha\psi\mu + g\phi\psi\mu \\ + eu\psi\mu] d\boldsymbol{x} dt = \int_\Omega \mathbf{i}\hbar\psi_0\mu(0) \,d\boldsymbol{x}, \\ \int_0^T\!\!\int_\Omega [\frac{1}{c^2}\phi\nu_{tt} + \phi_{\boldsymbol{x}}\nu_{\boldsymbol{x}} + (\frac{m_0c}{\hbar})^2\phi\nu + \beta\phi_t\nu \\ - g|\psi|^2\nu - ev\phi\nu] d\boldsymbol{x} dt = \int_\Omega \phi_1\nu(0) - \phi_0\nu_t(0) d\boldsymbol{x}, \\ \forall \mu \in C^1(0,T;\mathbb{V}^n), \forall \nu \in C^2(0,T;V^m) \end{cases}$$

任意の $\mu(T)=0, \nu(T)=\nu_t(T)=0$ に対して、ほとんどすべでの所 $t\in[0,T]$ で成り立つ.

定理 3 [弱解の存在性] 仮定 $\psi_0\in\mathbb{V}^n,\phi_0\in V^m$ と $\phi_1\in H^m$ が与えられば, Klein-Gordon-Schrodinger 量子システム(1)は一意な弱解 (ψ,ϕ) が存在する.

4 理論制御問題

仮定制御変数uの空間を $\mathcal{U}=\mathcal{V}^2=L^2(0,T)^2$ と表す、 \mathcal{U}_{ad} は \mathcal{U} に含まれる閉凸な許容集合とする、 K-G-S量子制御系(1)のコスト関数J(u)を次のように与える。

$$J(\boldsymbol{u}) = \epsilon_1 \|\mathcal{C}\psi_{1f}(\boldsymbol{u}) - \psi_{1\text{target}}\|^2$$

$$+\epsilon_1 \|\mathcal{C}\psi_{2f}(\boldsymbol{u}) - \psi_{2\text{target}}\|^2 + \epsilon_1 \|\mathcal{C}\phi_f(\boldsymbol{u}) - \phi_{\text{target}}\|^2$$

$$+\epsilon_2 (\mathcal{N}\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u})_{\mathcal{U}}, \quad \forall \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}_{ad},$$
(3)

ここで、 $\psi_{\text{target}} = \psi_{1\text{target}} + \mathbf{i}\psi_{2\text{target}} \in \mathbb{H}^n$ 、 $\phi_{\text{target}} \in H^m$ は目標状態、 $\psi_f(\mathbf{u}) = \psi_{1f}(\mathbf{u}) + \mathbf{i}\psi_{2f}(\mathbf{u})$ 、 $\phi_f(\mathbf{u})$ は終点 t_f での最終観測状態。 $\epsilon_1 \succeq \epsilon_2$ はシステムコストと制御コストの評価に重みを与える定数である。 $\mathcal{C} \in \mathcal{L}(W(0,T),H)$ は観測作用素、 $\mathcal{N} \in \mathcal{L}(\mathcal{U},\mathcal{U})$ は対称正値作用素、詳しい形式は

 $(\mathcal{N}\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_{\mathcal{U}}=(\boldsymbol{u},\mathcal{N}\boldsymbol{u})_{\mathcal{U}}=(\mathcal{N}u,u)_{\mathcal{V}}+(\mathcal{N}v,v)_{\mathcal{V}}.$ 定理3から,任意な $\boldsymbol{u}\in\mathcal{U}$ に対して,制御系(1)は一つの解 $(\psi^i(\boldsymbol{u}),\phi^j(\boldsymbol{u}))\in W(0,T)$ が存在することをわかる.非線形写像 $\boldsymbol{u}\to(\psi,\phi):\mathcal{U}\to W(0,T)$ は制御空間から解空間への連続写像になる.

最適制御というのは、 \mathcal{U}_{ad} において、コスト関数J(u)を最小となるuを求め、そのuの特徴を見い出すことである。 すなわち、次のの二つの問題を分けて考える.

1番目はコスト
$$J(m{u}^*)=\inf_{m{u}\in\mathcal{U}_{ad}}J(m{u})$$
を満たす最適制御 $m{u}^*=(u^*,v^*)$ を求める.

2番目は u^* を特徴づけられる.

このような u^* は制御系(1)の最適制御と呼ばれる.

定理 4 [最適制御の存在性] 仮定 $\psi_0\in\mathbb{V}^n$, $\phi_0\in V^m$ と $\phi_1\in H^m$ が与えられば, \mathcal{U}_{ad} は \mathcal{U} の閉凸な許容集合

とする. 量子システム(1)はコスト関数(3)に対して,少なくとも一つの最適制御 $\mathbf{u}^* = (u^*, v^*)$ が存在する.

定理 5 [Euler-Lagrange最適化システム] 仮定 $\psi_0 \in \mathbb{V}^n, \phi_0 \in V^m$ と $\phi_1 \in H^m, \mathcal{U}_{ad}$ は \mathcal{U} の閉凸な許容集合とすれば、量子システム(1)はコスト関数(3)に対する最適解 $m{u}^* = (u^*, v^*)$ は次の連立Euler-Lagrangeシステムと不等式で特徴付けられる:

$$\begin{cases} \mathbf{i}\hbar\psi_{t} + \frac{\hbar^{2}}{2M}\psi_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} + \mathbf{i}\alpha\psi + g\phi\psi = eu^{*}\psi \text{ in } Q. \\ \frac{1}{c^{2}}\phi_{tt} - \phi_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} + (\frac{m_{0}c}{\hbar})^{2}\phi + \beta\phi_{t} \\ = g|\psi|^{2} + ev^{*}\phi \text{ in } Q. \\ (\psi, \phi, \phi_{t})|_{t=0} = (\psi_{0}, \phi_{0}, \phi_{1}) \text{ in } \Omega. \end{cases}$$

$$(4)$$

$$\mathbf{x}, \qquad \left\{ \begin{array}{l} (\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\phi}_t)|_{t=0} = (\boldsymbol{\psi}_0, \boldsymbol{\phi}_0, \boldsymbol{\phi}_1) \text{ in } \Omega. \\ \\ \mathbf{i}\hbar \mathbf{p}_t + \frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{p} \boldsymbol{x} \boldsymbol{x} + \mathbf{i}\alpha \mathbf{p} + g \boldsymbol{\psi} \mathbf{q} + g \boldsymbol{\phi} \mathbf{p} = 0 \text{ in } Q, \\ \\ \frac{1}{c^2} \mathbf{q}_{tt} - \mathbf{q} \boldsymbol{x} \boldsymbol{x} + (\frac{m_0 c}{\hbar})^2 \mathbf{q} + \beta \mathbf{q}_t = 2g |\boldsymbol{\psi}| \mathbf{p} \text{ in } Q, \quad \text{(5)} \\ i \mathbf{p}(T) = \mathcal{C}^* \Lambda (\mathcal{C} \boldsymbol{\psi}_f(\boldsymbol{u}^*) - \boldsymbol{\psi}_{\text{target}}) \text{ in } \Omega. \\ \mathbf{q}(T) = 0, \ \mathbf{q}_t(T) = \mathcal{C}^* \Lambda (\mathcal{C} \boldsymbol{\phi}_f(\boldsymbol{u}^*) - \boldsymbol{\phi}_{\text{target}}) \text{ in } \Omega. \\ \\ \int_Q \mathbf{p}(\boldsymbol{u}^*) (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*) \, d\boldsymbol{x} dt + + \int_Q \mathbf{q}(\boldsymbol{u}^*) (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*) d\boldsymbol{x} dt \\ + (\mathcal{N} \boldsymbol{u}^*, \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^*)_{\mathcal{U}} + \geq 0, \ \forall \boldsymbol{u} = (u, v) \in \mathcal{U}_{ad}, \quad \text{(6)} \end{array}$$

ここで、 $\mathcal{C}^*\in\mathcal{L}(H,W(0,T))$ は \mathcal{C} の共役(随伴)作用素, $\Lambda\in\mathcal{L}(H)$ はH上での標準同型写像である。 $(\mathbf{p},\mathbf{q})\in W(0,T)$ は最適状態システム(4)の随伴システム(5)の弱解であり、それぞれは(4)の弱解 $(\psi,\phi)\in W(0,T)$ に対応する。 よく知られるように、(6)は最適解 $\mathbf{u}^*=(u^*,v^*)$ の最適必要条件である。

5 結論

この研究では、量子制御系の最適制御問題を調査しました.原子核における核子と中間子に表すKlein -Gordon-Schrodinger方程式の例をとして、理論の面での研究を行いました.最適解と最適制御の存在性を証明した.量子システムの将来研究においては、関連する分野との共同研究を計画する.

謝辞

平成30年度日本応用数学学会年会の委員会の皆さまに感謝の意を表す. この機会に、今まで量子制御に関する研究に支持するとコメントをくださいました世界各地の大学と研究所の方々に感謝します.

- [1] H. Yukawa, On the interaction of elementary particle I, Japan Physics and Mathematics Journal, (1935), 48-56.
- [2] J. L. Lions, Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations, Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1971.

統計多様体上の状態空間モデルを用いた発展型ネットワーク解析

小松 瑞果1,谷口 隆晴1,2,大川 剛直1,3

¹ 神戸大学大学院システム情報学研究科, ²JST さきがけ, ³JST CREST

e-mail: yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp

1 概要

近年のセンサデバイスの発達により、様々な データが取得できるようになっている。例とし て、GPSを用いた位置情報の取得など、人や動 物などの行動に関わるデータから, 交流の様子 を調べるという研究が行われている。本研究で は、放牧牛の飼育・管理の負担を、情報・通信技 術を用いて軽減することを目標に、GPS データ から作成した,放牧牛の交流の様子を表すネッ トワークデータの解析を行う。特に、GPS に よるデータは5秒間隔で取得できているため、 ネットワークデータも時系列的に得られている. 例えば、図1に示されているものは、3時間ご との放牧牛の位置や行動に基づいて作成された ネットワークである。本研究では、このような 時系列的なネットワークデータに対して, 時系 列解析の技術を導入することを目標とする.

時間発展型ネットワークに対する統計モデルとしては、例えば、Temporal Exponential Random Graph Model (TERGM, [1]) が知られている。これは、Exponential Random Graph Model (ERGM, [2]) と呼ばれる、静的ネットワークに対する指数分布族を、時間発展型ネットワークに拡張したものである。これに対し、本研究では、時間変化する実数列に対する、古典的な時系列解析の技術を自然に応用できるような枠組みの構築を目指す。TERGM のような、ネットワークに特化した方法は、データへ

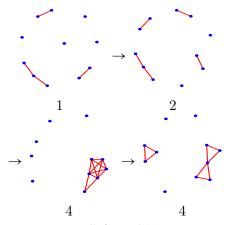


図 1. GPS データから作成した発展型ネットワークの例

の当てはまりも良いと思われるが、一方で、何 か解析をしたい場合、そのモデルに合わせた解 析法を考案する必要がある。それに対し、古典 的な時系列解析の技術を自然に応用できるよう なモデルが構築できれば、解析手法の構築や解 析結果の解釈を、古典的なやり方と同様に行う ことができ、効率的である。そのためには、古 典的な時系列解析で用いられている統計モデル を、そのまま発展型ネットワークに適用できる ような枠組みがあれば良い。そこで、本研究で は、発展型ネットワークに対する状態空間モデ ルを考える。

2 モデルのアイデアと概要

提案モデルのアイデアは下記のとおりである. まず、前述の ERGM をはじめとして、静的なネットワークに対しては、様々な統計モデルが既に提案されている。そこで、そのようなモデルを用いた階層型モデルを考える。具体的には、まず、静的ネットワークに対する統計モデルを1つ固定し、次に、このモデルのパラメータに関する状態空間モデルを導入する。

ここで、状態空間モデルはモデルパラメータに対して記述される. そのため、モデルパラメータの集合に定まる自然な幾何学の下で定義されることが望ましい. 情報幾何学という学問としてよく知られているように、モデルパラメータの集合に対しては、Riemann計量をはじめ、自然な幾何学的構造が定まる. 特に、パラメータの集合が定める多様体を統計多様体と呼ぶ. 前述のように、この多様体上には Riemann 幾何学の構造が入る. 他にも、特別な性質を持つが、それについては [4] などを参照されたい. 本研究では、これらの幾何学的構造を考慮したモデルを考える.

Riemann 多様体上の時系列モデルに関する 既存研究としては、例えば、Xavier らによる Riemann 多様体上の AR モデルが知られてい る [3]. このモデルのアイデアを、簡単に、下 記に述べる。通常の \mathbb{R}^n 上の AR モデルは、

$$x_k = A_1 x_{k-1} + \cdots + A_p x_{k-p} + \varepsilon_k$$

のような形である。ここで、各 A_j は n 次正方行列であり、 ε_k はノイズを表す項である。このモデルでは、加算や行列演算が用いられており、このままでは、多様体上のモデルに拡張ができない。これに対し、Xavier らのモデルでは、上記のモデルが

$$\Delta x_k = A_1 \Delta x_{k-1} + \dots + A_p \Delta x_{k-p} + \tilde{\varepsilon}_k,$$

$$x_k = x_{k-1} + \Delta x_k$$

のような形に書き換えられることに着目する. 上記のモデルは,線形空間上のモデルであるが,各 Δx_k は x_k または x_{k-1} における接空間の元であると考えることができる.すなわち,この形にすることで, Δx_k の属する接空間という線形空間上に時系列モデルを導入し,そのように定められた速度 Δx_k で x_k を動かす,というモデルが構築できる.このようなモデルであれば,多様体上でも定義可能である.

本研究では、同様の考え方に基づき、Riemann 多様体上の状態空間モデルを考える。線形空間 上の状態空間モデルは

$$x_k = f_k(x_k, v_k), \quad y_k = g_k(x_k, w_k)$$

のような形のモデルである. x_k は内部状態を表 す変数であり、 y_k は観測されたデータを表す。 f_k , g_k は内部状態の変化や観測プロセスに関す るモデルであり、 v_k 、 w_k は、それらに含まれる 確率的な要素を表す. これは、線形空間上で定 義された通常のARモデルを含んでいる。AR モデルの場合と同様の考え方に基づくと、モデ ル化するべきなのは、変化量の動きである.変 化量は接空間上の量であるため、接空間という 線形空間の上でモデル化することにより、線形 空間上のモデルやそれに関する技術について, 自然に拡張できる。特に、確率的な要素につい ては, 正規分布を用いてモデル化する場合が多 い、しかし、多様体上の正規分布は、研究がさ れてはいるものの煩雑である。例えば、多様体 上の点同士を加算することはできないため、正 規分布のパラメータの一つである, 平均の定義 も困難になる [5]. これに対し、接空間上でモ デルを考えることで,このような煩雑さは解消 される.

いま、時間ステップ $_k$ におけるネットワークを N_k 、モデルのパラメータを θ_k を書くことにする。また、パラメータの定める多様体をMと書く。 θ_k の変化量を $\Delta\theta_k \in T_{\theta_k} M$ とし、 v_k

を確率的な要素を表す変数とする. 時間発展型 ネットワークに対する状態空間モデルを

$$\Delta \theta_k = f_k(\Delta \theta_k, v_k), \quad \theta_{k+1} = \operatorname{Exp}_{\theta_k} \Delta \theta_k,$$

 $\mathcal{N}_k \sim \operatorname{P}(\theta_k)$

のように定める。ここで Exp_{θ_k} は指数写像を表す。これは,直感的には, θ_k を $\Delta\theta_k$ の方向に,測地線にそって時間発展させる写像である.発表では,特にこのようなモデルのうち,線形で正規分布型のもの

$$\Delta \theta_k = A_k \Delta \theta_k + \varepsilon_k, \quad \theta_{k+1} = \operatorname{Exp}_{\theta_k} \Delta \theta_k,$$

 $\mathcal{N}_k \sim P(\theta_k).$

に対し、パラメータ推定法などについて考察する。ただし、 ε_k は確率的要素を表し、正規分布に従うものとする。

謝辞 本研究は科学研究費補助金(基盤研究(C), 課題番号 26400200) および JST さきがけ (JPMJPR16EC) の支援を受けている.

- [1] Hanneke, S. and Xing, E. P., Discrete Temporal Models of Social Networks, in: Statistical Network Analysis, Models, Issues, and New Directions, pp. 115–125, 2007.
- [2] Lusher, D., Koskinen, J and Robins, G., Exponential Random Graph Models for Social Networks: Theory, Methods, and Applications, Cambridge University Press, New York, 2012.
- [3] Xavier, J. and Manton, J. H., On the Generalization of AR Processes To Riemannian Manifolds, in: 2006 Proc. IEEE Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process., 4 pages, 2006.
- [4] Amari, S., Information Geometry and Its Applications. Applied Mathematical Sciences, 194, Springer, Tokyo, 2016.
- [5] Pennec, X., Probabilities and statistics on Riemannian manifolds: Basic tools for geometric measurements, in: Proc. of Nonlinear Signal and Image Processing (NSIP'99), pp. 194–198, 1999.

Benford の法則に従う分布の構成

小澤 一文1

1 秋田県立大学名誉教授

e-mail: kazufumi.ozawa@gmail.com

1 はじめに

最近、Benford の法則という統計学の法則が注目されている。この法則は、数値を広範な分野から集め科学的表記法で表したとき、先頭の値が小さい数値ほど高い確率で現れるという統計学的現象である。最初に天文学者 S. Newcomb [1]によって 1881 年に発見され、その後、技術者 F. Benford [2] の調査研究によって確固たる法則となった。この法則は、科学技術の世界だけでなく、会計学、経済学など多くの分野に現れ、また広く応用されているようになった [3].

Benford の法則は近似的な法則であるが、本発表では、完全に Benford の法則に一致する R+上の滑らかな確率分布を数値解析の理論を用いて構成する.

2 Benford の法則

Benford の法則とは, 実数値確率変数 *X* の科学的表記法 (10 進浮動小数点表示)

$$X = S(X) \cdot 10^{m},$$

$$S(X) = \pm d_{0}.d_{1}d_{2}..., \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$1 \le d_{0} \le 9, \quad 0 \le d_{i} \le 9, \quad (i = 1, 2, ...)$$
(1)

において、仮数部 S(X) の先頭桁 d_0 が $d(d=1,\ldots,9)$ となる確率が

$$\mathbb{P}(d_0 = d) = \log_{10}((d+1)/d) \tag{2}$$

となる法則である [1, 2]. この確率をヒストグラムで表すと図 1 のようになる.

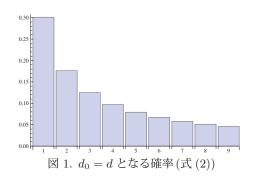
ここでは, この法則を区間 [1, 10) の実数に拡張した法則 (強 Benford の法則と呼ばれている)

$$\mathbb{P}(1 \le S(X) < s) = \log_{10} s, \ 1 < s \le 10 \ (3)$$

を考える. なお,数列 (X_n) に関しては,この 定義の代わりに

$$\lim_{N \to \infty} \frac{\#\{n \le N; 1 \le S(X_n) < s\}}{N} = \log_{10} s$$
(4)

を採用する. 数列 $(\alpha^n)_{n=1}^\infty$ は、 $\log_{10} \alpha$ が無理数のとき Benford の法則に従うことが知られている [4,5].



3 Benford の法則に従う確率分布

以下では確率変数 X は正の値とし、底を b (≥ 2) とする.ここで $\log_b X$ を整数部 M と小数部 F に分ける:

$$M = \lfloor \log_b X \rfloor, \quad F = \{\log_b X \}$$

これらの記号を用いると, b進科学的表記法は

$$X = S(X) \cdot b^M, \quad S(X) = b^F \tag{5}$$

となる. Benford の法則は確率変数 F が区間 [0,1) で一様分布することと等価であるから, F の分布を考察する.

ここで新しい確率変数 $Y = \ln X$ を導入する. そうすると, $0 < f \le 1$ に対して $0 \le F < f$ となる確率は

$$\mathbb{P}\left(0 \le F < f\right) = \sum_{m = -\infty}^{\infty} \mathbb{P}\left(b^m \le X < b^{m+f}\right)$$

$$= \sum_{m = -\infty}^{\infty} \mathbb{P}\left(m \ln b \le Y < (m+f) \ln b\right)$$

$$= \sum_{m = -\infty}^{\infty} \int_{m \ln b}^{(m+f) \ln b} P_Y(y) \, \mathrm{d}y \tag{6}$$

で表される. ここで $P_Y(y)$ は Y の確率密度関数とする. 次に,式 (6) が項別微分可能と仮定し,f で微分しF の確率密度関数を $P_F(f)$ を求めると

$$P_F(f) = \ln b \sum_{m=-\infty}^{\infty} P_Y((m+f) \ln b) \qquad (7)$$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

を得る. これは、刻み幅を $h = \ln b$ としたとき の積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_Y(y) \, \mathrm{d}y = 1 \tag{8}$$

の台形近似である. $P_F(f)\equiv 1$ となれば Benford の法則が正確に成り立つので、台形近似 (7) が積分 (8) と一致すれば、仮数部 S(X) の分布は Benford の法則に完全に一致することになる.

区間 $(-\infty,\infty)$ 上の積分と台形近似が等しくなる関数のクラスおよび刻み幅の条件に関して、以下の結果が知られている:

定理 1 (Sugihara [6]) \mathbb{C} 上で定義された関数 f(z) が,条件

$$1) \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \, \mathrm{d}x \right| < \infty$$

- (z) f(z) はすべての $z \in \mathbb{C}$ で正則 (整関数)
- 3) f(z) it exponential type A(A > 0)

を満たすとき、 $0 < h < 2\pi/A$ で

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(kh)$$
 (9)

となる.

この 3 つの条件を満たす関数として $\mathrm{sinc}\,(z)$ がある. $f(z) = \mathrm{sinc}\,(z)$ の場合 A=1 となるので、 $0 < h < 2\pi$ に対して

$$h\sum_{k=-\infty}^{\infty} \operatorname{sinc}(kh) = \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sinc}(x) dx (= \pi)$$

となる. $P_Y(y)$ は確率密度関数であるから、これら3つの条件の他に、条件

$$P_Y(y) \ge 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} P_Y(y) \, \mathrm{d}y = 1$$

を満たす必要がある. この条件と上の3つの条件を満たすものに、例えば

$$P_Y(y) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1 - \cos y}{y^2} \tag{10}$$

$$P_Y(y) = \frac{1}{\pi} \cdot \operatorname{sinc}(y)^2 \tag{11}$$

などが考えられる. 関数 (10) と (11) の場合は, それぞれ A=1,2 となるので,

$$0 < h = \ln b < 2\pi$$
, $0 < h = \ln b < \pi$

において、それぞれ台形公式が正確な積分値を 与える、すなわち、

$$1 < b < e^{2\pi} \approx 536$$
, $1 < b < e^{\pi} \approx 23.1$

という範囲で Benford の法則が正確に成り立つことになる。こうして得られた $P_{V}(y)$ から

$$P_X(x) = x^{-1}P_Y(\ln x), \qquad 0 < x < \infty$$
 (12)

とすれば、 $P_X(x)$ は仮数が 10 進法で Benford の法則に従う \mathbb{R}^+ 上の滑らかな分布になる. なお、正規分布、Cauchy 分布など既存の連続分布では、仮数部 S(X) が Benford の法則を満たさないことが知られている [4].

4 おわりに

本発表では仮数 S(X) が Benford の法則を満たす \mathbb{R}^+ 上の滑らかな連続分布を導いた. これらの分布を用いた乱数の生成法については今後の課題とする.

- [1] S. Newcomb, Note on the Frequency of Use of the Different Digits in Natural Numbers, Amer. J. Math. 4 (1881), 39– 40.
- [2] F. Benford, The Law of Anomalous Numbers, Proceedings of the American Philosophical Society **78** (1938), 551– 572.
- [3] A.E. Kossovsky, Benford's Law, Theory, the General Law of Relative Quantities, and Forensic Fraud Detection Applications, World Scientific, 2014.
- [4] A. Berger, T.P. Hill, An Introduction to Benford's Law, Princeton Univ. Press, 2015.
- [5] S.J. Miller ed., Benford's Law: Theory and applications, Princeton Univ. Press, 2015.
- [6] M. Sugihara, A class of functions for which the trapezoidal rule gives the exact value of integral over the infinite interval, J. Comp. Appl. Math. 20 (1987), 387–392.

双対平坦空間における次元削減について

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

主成分分析 (PCA) では、データに含まれる情報量が次元毎の分散の合計として捉えられ、これが低次元で最大になるような軸を見出そうとする. 見方を変えれば、等価な方法として、情報量は重心からの2乗ユークリッド距離の合計として表され、内積行列の固有値分解を通して低次元での情報量を最大化しようとする古典的多次元尺度構成法 (cMDS) がある.

ユークリッド距離は点間の離れの程度を表すが、機械学習等の分野では、より一般化されたものとして Bregman ダイバージェンスがしばしば用いられる. Bregman ダイバージェンスは、2乗ユークリッド距離や Kullback-Leibler ダイバージェンスなどを特殊な場合として含む. 情報幾何的観点では、Bregman ダイバージェンスは双対平坦空間を導入する過程で自然に導入される.

応用例としては、Bregman ダイバージェンスに基づくクラスタリングが定式化されている [1]. そこではクラスターの重心に関する性質が研究されており、これに関連して Bregman 情報量と呼ばれる量が導入されている。 Bregman 情報量は Bregman ダイバージェンスの平均であり、分散や相互情報量といった概念の一般化であることが指摘されている。一方で Bregman 情報量は、古くから研究されている Jensen-Shannon ダイバージェンスや Burbea-Rao ダイバージェンスと等価であることも指摘されている [2].

Bregman 情報量が分散の一般化であることから、これに対応して PCA や cMDS のような次元削減を考えるのは自然なことである。これらの従来の手法の特徴の一つは、元のデータから Gram 行列を構成することの容易さである。PCA や cMDS を双対平坦空間に拡張するにあたっての課題として、このような行列をいかに構成するかという問題が考えられる。本研究の目的の一つは上記課題を克服し Bregman 情報量に対する次元削減を定式化することである。

2 ダイバージェンスの準局所的記述

ベクトル η の凸関数 $\phi(\eta)$ からルジャンドル変換 $\phi(\eta) = \theta^i \eta_i - \psi(\theta), \ \theta^i = \partial \phi/\partial \eta_i = \partial^i \phi, \ \eta_i = \partial \psi/\partial \theta^i = \partial_i \psi$ によって双対なベクトル θ , 凸関数 $\psi(\theta)$ が導入される.Bregman ダイバージェンス $d_{\iota\kappa}$ とその双対なダイバージェンス $d_{\iota\kappa}$ が以下によって導入される:

$$d_{\iota\kappa} = \phi(\eta^{\iota}) - \phi(\eta^{\kappa}) - (\eta_i^{\iota} - \eta_i^{\kappa})\partial^i\phi(\eta^{\kappa}), \quad (1)$$

$$d_{\iota\kappa}^* = \psi(\theta_{\iota}) - \psi(\theta_{\kappa}) - (\theta_{\iota}^i - \theta_{\kappa}^i) \partial_i \psi(\theta_{\kappa}). \quad (2)$$

これらの間には双対性 $d_{\iota\kappa}^* = d_{\kappa\iota}$ が成り立つ. 双対平坦空間に n 個の点 $n^{\iota}(\iota = 1, \dots, n)$

双対平坦空間にn個の点 $\eta^{\iota}(\iota=1,\cdots,n)$ があるとする。ここで,上記とは別の点 η^{0} の周りでのダイバージェンスの展開を考える。点 η^{ι} を相対座標 $x^{\iota}=\eta^{\iota}-\eta^{0}$ で表すことにする。 $d_{\iota\kappa}$ を x^{ι},x^{κ} を 2次まで展開することで,点 η^{0} の周りの小さい領域では, $d_{\iota\kappa}$ は2乗ユークリッド距離 $d_{\iota\kappa}=g^{ij}(x_{\iota}^{\iota}-x_{\iota}^{\kappa})(x_{\jmath}^{\iota}-x_{\jmath}^{\kappa})/2$ と見なせる。これはダイバージェンスの接空間近似に相当するが,次の次数まで展開すると以下を得る[3]:

$$d_{\iota\kappa} = \frac{g^{ij}}{2} (x_i^{\iota} - x_i^{\kappa}) (x_j^{\iota} - x_j^{\kappa}) + T^{ijk} \left(\frac{x_i^{\iota} x_j^{\iota} x_k^{\iota}}{6} + \frac{x_i^{\kappa} x_j^{\kappa} x_k^{\kappa}}{3} - \frac{x_i^{\iota} x_j^{\kappa} x_k^{\kappa}}{2} \right)$$
(3)

ここで g^{ij} , T^{ijk} はそれぞれ点 η^0 におけるリーマン計量 $g^{ij} = \partial^i \theta^j = \partial^i \partial^j \phi$ と 3 次テンソル $T^{ijk} = \partial^i \partial^j \theta^k = \partial^i \partial^j \partial^k \phi$ の値をとる.

次に双対座標 θ_{ι} の展開を考える。今度は相対座標を $z_{\iota}=\theta_{\iota}-\theta_{0}$ と記す。接平面では $z_{\iota}=g^{ij}x_{j}^{\iota}$ となるが,次の次数まで展開すると以下を得る [3]:

$$z_{\iota}^{i} = \left(g^{ij} + T^{ijk} x_{k}^{\iota}/2\right) x_{j}^{\iota}.\tag{4}$$

上記のように接空間近似の次の次数まで考慮 することを「準局所」的記述と呼ぶことにする.

3 内積によるダイバージェンスの構成

ユークリッド空間では内積は2乗距離に容易 に変換されるが,このような変換の双対平坦空 間での一般化を考え、ダイバージェンス $d_{\iota\kappa}$ を 内積によって表すことを目指す。接空間近似の 範囲では、ある ι,κ の対に対しただ 1 つの内積 を考えていたが、準局所的記述では、使用する 座標に応じて 3 通りの内積が考えられる:

$$\langle x^{\iota}, x^{\kappa} \rangle_{\eta} = g^{ij} x_i^{\iota} x_i^{\kappa}, \tag{5}$$

$$\langle x^{\iota}, z_{\kappa} \rangle = g^{ij} x_{i}^{\iota} x_{i}^{\kappa} + T^{ijk} x_{i}^{\iota} x_{i}^{\kappa} x_{k}^{\kappa} / 2, \tag{6}$$

$$\langle z_{\iota}, z_{\kappa} \rangle_{\theta} = g^{ij} x_{i}^{\iota} x_{i}^{\kappa} + T^{ijk} x_{i}^{\iota} x_{i}^{\kappa} (x_{k}^{\iota} + x_{k}^{\kappa})/2.$$
 (7)

これらを $a_{\iota\kappa} = \langle x^{\iota}, x^{\kappa} \rangle_{\eta}, \ b_{\iota\kappa} = \langle x^{\iota}, z_{\kappa} \rangle, \ c_{\iota\kappa} = \langle z_{\iota}, z_{\kappa} \rangle_{\theta}$ と書くと, ダイバージェンス (3) は以下のようになる:

$$d_{\iota\kappa} = \frac{1}{3}a_{\iota\iota} + \frac{1}{6}c_{\iota\iota} + \frac{1}{6}a_{\kappa\kappa} + \frac{1}{3}c_{\kappa\kappa} - b_{\iota\kappa}.$$
 (8)

このように双対平坦空間でも,準局所的記述に よればダイバージェンスが内積によって構成さ れる.

4 Bregman 情報量のスペクトル分解

上記の関係 (8) は、Bregman 情報量の表式を もたらす。まず点 η_0 が $\sum_{\iota=1}^n x^{\iota} = 0$ のように中 心化されているとして、これを η -中心化と呼ぶ。 すると Bregman 情報量は $I_{\eta} = \sum_{\iota=1}^n d_{\iota 0}/n$ と 表される。行列 $A = (a_{\iota \kappa}), B = (b_{\iota \kappa}), C = (c_{\iota \kappa})$ を導入して、特異値分解 $A = V\Lambda_a V', B =$ $W\sqrt{\Lambda_a\Lambda_c}V', C = W\Lambda_c W'$ を考える。すると Bregman 情報量 I_{η} は A, C の固有値の加重平 均として表される:

$$I_{\eta} = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(A/3 + C/6) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\Lambda_a/3 + \Lambda_c/6).$$
 (9)

これは Bregman 情報量のスペクトル分解であり、分散のスペクトル分解である PCA や cMDS の一般化と見なせる.

次に、 θ -中心化 $\sum_{\iota=1}^n z_\iota = 0$ を考える.この場合もう一つの Bregman 情報量 $I_\theta = \sum_{\iota=1}^n d_{0\iota}/n$ が考えられる.これは以下のように表される:

$$I_{\theta} = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(A/6 + C/3) = \frac{1}{n} \operatorname{tr}(\Lambda_a/6 + \Lambda_c/3).$$
 (10)

A,C の値はどちらの中心化が行われるかに依存することに注意.

このように Bregman 情報量のスペクトル分解には 2 通りある.式 (9)(10) から分かるように, Λ_a (Λ_c) は Λ_c (Λ_a) Bregman 情報量 I_η (I_θ) に対して 2 倍の寄与を持っている.

5 半正定値計画としての内積行列の算出

前節までは行列 A,B,Cの値をどのように得るか触れていなかった。ここで Bregman ダイバージェンスからこれらの値を求める問題を考える。同様の問題は半正定値計画問題 (SDP) に帰着させる方法として定式化されており [4],ここでも同様の方法を採用する。まず η -中心化が行われる場合を考えると A,B,C の値は次のような SDP を設定することで得られる:

$$\min \qquad \operatorname{tr} (A + C - 2B) \tag{11}$$

s.t.
$$\frac{a_{\iota\iota}}{3} + \frac{c_{\iota\iota}}{6} + \frac{a_{\kappa\kappa}}{6} + \frac{c_{\kappa\kappa}}{3} - b_{\iota\kappa} = d_{\iota\kappa}, (12)$$

$$\sum_{\iota=1}^{n} \sum_{\kappa=1}^{n} a_{\iota\kappa} = 0, \tag{13}$$

$$\left(\begin{array}{cc} A & B \\ B' & C \end{array}\right) \ge 0.$$
(14)

ここで制約 (13) が η-中心化を表す.

次に θ-中心化を考える. この場合, 制約 (13)

が
$$\sum_{\iota=1}^n\sum_{\kappa=1}^nc_{\iota\kappa}=0$$
 に置き換わるがそれ以外は (11) - (14) と同じ SDP を設定すればよい.

6 測地線についての考察と展望

Bregman ダイバージェンスは測地線に密接に関連しているが、 d_{i0} について対称部一定の下で反対称部を極値にする x^i は自己双対な測地線を示すことが (3)(4) から分かる。自己双対な測地線とそれに直交する測地線はダイバージェンスの分解に利用できることから、これに基づく次元削減の定式化が今後の課題である.

- [1] Banerjee, A. et al.: Clustering with Bregman divergences. J. Machine Learning Research 6, 1705–1749 (2005)
- [2] Nielsen, F., Nock, R.: Sided and symmetrized Bregman centroids, IEEE Transactions on Information Theory 55, 2882–2904 (2009)
- [3] Kumagai, A.: Multidimensional scaling in dually flat spaces. Japan J. Indust. Appl. Math. **32**, 51–63 (2015)
- [4] Kumagai, A.: Extension of classical MDS to treat dissimilarities not satisfying axioms of distance, Japan J. Indust. Appl. Math. 31, 111–124 (2014)

強化学習による囚人のジレンマを考慮した戦略を持つマルチエージェント システムの提案

内海 友貴 1, 李 磊 2

1 法政大学大学院理工学研究科, 2 法政大学理工学部

e-mail: ¹tomotaka.utsumi.8v@stu.hosei.ac.jp, ²lilei@hosei.ac.jp

1 概要

マルチエージェントシステムにおいて単体のエージェントが合理性を求めて行動を選択してしまうことで、集団としては最適な行動を取ることが出来ない場合がある。エージェント同士の行動の競合により作業効率の低下といった不利益を生じさせるといった例が考えられる。これは囚人のジレンマと呼ばれる問題の例であり、人間の振る舞いを模倣するエージェントが最適行動の学習をする際に考慮しなければならない問題点である。

本研究では、予め戦略を持たせその後強化学習により他者を意識し集団で利益が出る最適な行動が出来るマルチエージェントシステムの提案を目的とする.

2 N 人繰り返し囚人のジレンマ

表 1. 囚人のジレンマ利得表

自分/相手	D	C
D	P/P	T/S
С	S/T	R/R

N人繰り返し囚人のジレンマ (N-persons Iterated Prisoner's Dilemma:NIPD) は二人以上のプレイヤーで複数回 PD を行う派生問題であり、三人以上の場合に状態空間が大きくなり計算量が大きくなる問題である. エージェント数を N とし、各回の自分が行動を選択する時にそれまでの相手および自分の選択した行動を記憶し、過去の履歴に依存して自分の次の行動を決

定する.C を選択した自分以外のエージェントを k とし, その場合に自分が C を選択した場合の利得を C_k , D を選択した場合の利得を D_k とする. 囚人のジレンマの条件より四つの条件式(1),(2),(3),(4) が成り立つ.

$$D_k > C_k \tag{1}$$

$$C_k > C_{k-1}, \quad D_k > D_{k-1}$$
 (2)

$$(k+1)C_k + (N-k-1)D_{k+1} > kC_{k-1} + (N-k)D_k$$
(3)

$$C_{N-1} > D_0 \tag{4}$$

条件式 (1),(2),(3),(4) を満たす N 人の利得表を表 2. に示す.

四つ利得値のパラメータ, $C_0=S$, $C_{N-1}=R$, $D_0=P$, $D_{N-1}=T$ と X,Y を利得の重みとした. N=2 の場合二人の利得表と同じ四つのパラメータ,R,P,S,T で表すことが出来る. (i=1,2,…,N-2)

表 2. N 人囚人のジレンマ利得表

自分/自分以外の С	0	i	•••	N-1
С	S	$C_{i-1} + X$	•••	R
D	P	$D_{i-1} + Y$	•••	T

$$X = (C_{N-1} - C_0)/(N-1)$$

$$Y = (D_{N-1} - D_0)/(N-1)$$

3 進化型 IPD

進化型 IPD のモデルは,Lindgen が戦略を生物遺伝子に見立て,1次元のバイナリ文字列で表し平均利得値を評価関数とし遺伝的アルゴリズムに従って戦略を進化させるモデルである.選択により次世代に残す戦略を決定し,進化や退化,突然変異により戦略を自動進化させる.[2][3][4]

3.1 進化型 IPD による戦略生成の流れ

- 1:戦略を遺伝子とした初期集団の生成
- 2:ジレンマゲームによる平均利得の計算
- 3:平均利得から次世代集団の選択
- 4:突然変異(点変異,複写変異,分離変異)
- 5: 2:に戻る(指定世代数まで繰り返す)

4 Q 学習

Q 学習は強化学習アルゴリズムの一つで、ある状態において確率的に行動を選択し報酬を得る。 囚人のジレンマ問題の適用として、森山の提案を元に学習プログラムを構築した.[5] 離散時間 t における現在の状態 s_t を知覚し行動可能な $a_t = C$, D を選択する.行動選択後に報酬 r_{t+1} を受けとり新しい状態 s_{t+1} を知覚する。報酬関数の価値を学習率 α (0< α <1), 報酬の減衰を割引率 γ (0< γ <1) として定める。行動価値関数 Q 値の更新式は、式 (5) で示す。

$$Q_{t+1}(s_t, a_t) = Q(s_t, a_t) + \alpha \delta_t \qquad (5)$$

$$\delta_t = r_t + \gamma \ maxQ(s_t, a) - Q(s_t, a_t)$$

5 全体の処理の流れ

エージェントに対し、ベースとなる戦略を持たせ行動価値を学習させ長期の最適行動を行うことを実現させる.また学習回数50まで戦略に従う行動をとる.この戦略に従う行動を取る期間を戦略従属回数と呼ぶことにする.

step1:進化型 IPD による複雑戦略を持つ個体 の生成

step2:step1 後の個体から学習用個体を抽出 step3:Q 学習

step4:step3を指定ゲーム数繰り返す

6 提案手法の適用

N=2,3,4,5,6,7,8 において 10000 世代数経た後の進化型 IPD で生成したエージェントから,Q 学習で用いるエージェントを抽出し Q 学習をさせた.後の 行動価値 Q_C と Q_D とCの選択確率を求める数値実験をそれぞれ 50 回試行した.

6.1 実験結果

数値実験における Q 学習の best と worst を表 3 に示す. また各 N=2,3,4,5,6,7,8 の学習成功率およびその集団における Q_C の最大値と最小値を表 5 に示す.

ここで学習成功率は 行動価値 $Q_C > Q_D$ かつ C の選択確率 60% 以上を学習成功とした.

表 3. Q 学習結果

		Q_C	Q_D	Cの選択確率
	best	3.15	1.25	80%
ĺ	worst	0	1.25	28.3%

表 4. 各 N における学習結果

	Programme and a programme and				
N	学習成功率	最大値	最小値		
2	46%	3.15	3.15		
3	25%	3.15	1.80		
4	24%	3.15	3.15		
5	20%	3.1	2.40		
6	28%	3.15	3.15		
7	16%	3.15	2.24		
8	5%	2.38	1.31		

7 終わりに

本研究では,進化形 IPD によりエージェントに対して予め戦略を持たせその後強化学習を行った.N=2以上になると Q 学習に安定性が欠けることがわかった. 今後の課題として戦略の推定の追加と安定性の向上を行う予定である.

- [1] Axelrod,R:,The Evolution of Cooperation(1984), 松田耕治 (訳)"つきあい方の科学", ミネルヴァ書房,1998
- [2] Lindgen,K:,Evolutionary Phenomena in Simple Dynamics, Artificial Life II, Addison-Wesley,(1990), pp295-312
- [3] 池田隆文, 伊庭斉志,n 人繰り返し 囚人のジレンマゲーム戦略の GA による進化", 情報処理学会研究報 告,No.1,(2002),pp191-198
- [4] 糸井良太, 田中美栄子,"進化型繰り返し 囚人のジレンマにおける最適戦略の探 究", 情報処理学会研究報告,No.1,,(2012) pp1-6
- [5] 森山甲一、"四人のジレンマゲームにおける Q 学習による協調の維持"、コンピュータソフトウェア、Vol25、No4、(2008)pp145-153

サッカーのパス回しによってつくられるネットワークの成長について

山本 健1, 成塚 拓真2

¹ 琉球大学理学部, ² 中央大学理工学部 e-mail: yamamot@sci.u-ryukyu.ac.jp

1 サッカーのパス回しネットワーク

近年,スポーツにおいて詳細なデータの取得および分析が大いに発展している[1].しかし,現時点では実用的な応用への研究が中心的であり,数理的な構造に関する研究は未発達である.

本研究では、サッカーの試合において、選手 間のパス回しによってつくられるネットワーク (グラフ) の時間変化に着目する. ネットワー クの頂点はゴールキーパーを除く N=10 人の 選手であり、チームごとに別個のネットワーク を考える、選手間にパスが通ると辺が引かれ、 1回パスが通るたびに辺の重みが1ずつ大きく なるとする. 辺は向き(どの選手からどの選手 ヘボールが送られたか)をもつとするのが自然 である. パスが増える過程に焦点を絞るため. チームごとにパスが通るたびに1ずつ増えてい く離散的な時刻tを導入する。以下では、単に "時刻"といえばこの離散的な時刻を指すもの とする. 時間の進み方はチームごとに異なり, 多くのパスが成功しているチームほど時間が速 く進むことになる.

2 モデル化と解析

実際のサッカーのパス回しは選手の状況判断に基づく複雑なものである。しかし本研究では、すでに多くのパスが通った経路がより選ばれやすいという "優先的選択"の効果を取り入れたシンプルな確率モデルを考察する。時刻 t までに選手 i から j へのパスが通った回数(有向辺 $i \to j$ の重み)を $w_{i \to j}(t)$ とおき,時刻 t でパス $i \to j$ が選択される確率が $1 + \alpha w_{i \to j}(t)$ に比例すると仮定する。 $\alpha \geq 0$ は優先的選択の強

さ(パスの偏り)を表すパラメータである.実際, $\alpha=0$ ならばどのパスが選ばれる確率も一定であるのに対して, α が大きいとパスが通った回数 $w_{i\rightarrow j}$ が大きい辺が選ばれやすくなる.

時刻 t で重みがゼロでない有向辺の数(異なるパスの種類)を m(t) とおく、図 1 に m(t) の数え方を例示する、パスの向きを考慮するので、図の t=3 においてパス $3\to 2$ は $2\to 3$ と区別され,m(3)=3 となる、一方,t=4 では t=2 と同じパス $2\to 3$ が出されたため,m は増加せず m(4)=3 のままである、この m(t) が本研究における中心的な量である。

本研究の確率モデルでは,m(t) は確率変数 である.m(t) の期待値 $\bar{m}(t)$ の時間変化は

$$\bar{m}(t+1) = \bar{m}(t) + \frac{M - \bar{m}(t)}{M + \alpha t}$$

という差分方程式で表される. ただし, M=N(N-1) は N 頂点の有向グラフでとりうる異なる辺の総数を表す. 初期条件 $\bar{m}(0)=0$ を満たす解として,

 $\bar{m}(t)$

$$= M \left[1 - \frac{\Gamma(M/\alpha)}{\Gamma((M-1)/\alpha)} \frac{\Gamma((M-1)/\alpha + t)}{\Gamma(M/\alpha + t)} \right]$$
(1)

が得られる (Γ はガンマ関数). 差分方程式を連続近似すると,

$$\frac{d\bar{m}(t)}{dt} = \frac{M - \bar{m}(t)}{M + \alpha t}$$

という微分方程式となり、 $\bar{m}(0) = 0$ を満たす

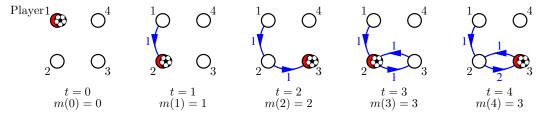
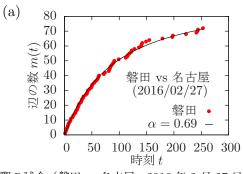


図 1. m(t) の数え方の例. パス $2 \to 3$ と $3 \to 2$ は区別するので、時刻 t=3 では m(3)=3 に増える. 時刻 t=4 ではすでに存在するパス $2 \to 3$ が選択されたので、m は増加せず m(4)=3 のままである. 各有向辺のそばにある数字は辺の重みである.



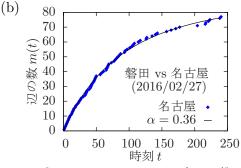


図 2. 実際の試合(磐田 vs 名古屋, 2016 年 2 月 27 日)の m(t) と式 (1) によるフィッティング. (a) 磐田のデータ $(\alpha=0.69)$, (b) 名古屋のデータ $(\alpha=0.36)$.

解は

$$\bar{m}(t) = M \left[1 - \left(1 + \frac{\alpha t}{M} \right)^{-1/\alpha} \right]$$

である。差分方程式の解 (1) において M が大きいとしてガンマ関数に Stirling の近似を適用すると,この連続近似解と同じ形が導かれる。すなわち,ここでの連続近似(t を連続変数とみなすこと)は M が大きい(つまり,N が大きい)場合に妥当であるといえる。

3 実データとの比較

以上の結果をJリーグの試合データと比較する。図 2 はジュビロ磐田 vs 名古屋グランパスエイトの試合(2016 年 2 月 27 日)のパスデータから作成した m(t) のグラフである。ホームチームの磐田が (a), アウェイチームの名古屋が (b) である。実線は式 (1) の $\bar{m}(t)$ でフィッティングした結果であり, $\alpha=0.69$ (磐田)および $\alpha=0.36$ (名古屋)であった。両チームとも式 (1) のグラフとよく一致していることが分かる。また,磐田の α の値の方が大きいことから,磐田の方が特定の選手間のパスに偏っている傾向があるといえる。

4 まとめ

本研究では、サッカーのパス回しに対して、すでにパスが通った選手間のパスが選ばれやすいという優先的選択の効果を取り入れたモデルを考えた。このモデルは攻めの方向や選手の空間的な配置、および相手チームの存在など、直接的に考慮していない要素が多数ある(部分的には優先的選択の中に含まれているといえるかもしれない)。つまり、現実のサッカーを極度に単純化しているのであるが、それでも式(1)は実際のサッカーの試合のデータとよく一致する。この結果から、サッカーのパス回しにおい

て優先的選択が重要な特徴であるということが 示唆される. また, チームのパスの出し方が 1 つのパラメータ α で表せることから, チームの パフォーマンスを評価する指標としての応用も 期待される.

謝辞 本研究は中山隼雄科学技術文化財団の助成を受けたものである. Jリーグの試合データはデータスタジアム株式会社の許諾を得て使用した.

参考文献

[1] J. Gudmundsson, M. Horton, Spatiotemporal analysis of team sports, ACM Computing Surveys, 50 (2017), 22.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3-5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

ブロックチェーンセッションへのイントロ

佐古 和恵

NEC セキュリティ研究所

e-mail: k-sako@ab.jp.nec.com

1 ブロックチェーン技術の概要

ブロックチェーン技術は、ビットコイン[1] において、複数のデータ管理者でデータを台帳 で管理するために使われている技術である。単 独のデータ管理者がデータを台帳で管理する 場合、それぞれのデータにデジタル署名が付与 されていても、どのデータを台帳にいれるかの 判断はそのデータ管理者の胸先三寸で決まっ てしまう。また、一旦台帳に組み込んでも、デ 一タ管理者が後日消去して「なかったこと」に してしまうことも可能である。そこで、複数の 管理者が台帳に書き込む権限を所有し、さらに 相互監視や計算パワーの制限によって、一度台 帳に組み込まれたデータをなかったことにで きないしくみが、ブロックチェーン技術として 研究されている。特に、ビットコインでは、デ ータ管理者になるのに誰かの許可がいるわけ ではなく、誰でもデータ管理者になれる permissionless blockchain が採用されている。 一方、多くの permissionless blockchain に起 因するデメリットを鑑み、事前に決められた特 定の複数のデータ管理者でデータを管理する permissioned blockchain も検討されている。

2 ブロックチェーンのしくみ

一度台帳に組みこまれたデータが改ざんされないために、ハッシュチェーンと呼ばれる技術が 1991 年に提案されている[2]。これは、台帳にデータを追記するときに、それまでの台帳のハッシュ値に今回追記するデータを含めたデータを作成し、そのハッシュ値を公開することにより、改ざんを抑止するものである。改ざんされた場合には、公開されたハッシュ値と異なるため、検出することができる。また、過去のハッシュ値を含むため、どの状態の台帳に追記したかも明確になる。

しかし、ハッシュチェーンでは、どのデータを台帳に書き込むかを決めるのは単独のデータ管理者である。そこで、ブロックチェーンでは、どのデータを台帳に書き込むかを決める権限を複数の管理者が保有する。Permissioned

blockchain では、事前に指名されたデータ管理者が、相互に確認しあってどのデータを追記するかを決めている。 Permissionless blockchain では、不特定多数のデータ管理者が存在するので、相互に確認しあうことができない。そこで、Proof of Work と呼ばれる、暗号パズルを早く解いた人がどのデータを書き込むかを決められる方式が採用されている[3]。

また、スマートコントラクトとして、台帳に書き込まれたデータが、事前に決められたルールに従って処理されたものであることを、データ管理者が相互に確認できるしくみも検討されている。

3 応用数理とブロックチェーン

従来のITシステムが、単独のデータ管理者に全幅の信頼をおいて構成され、データ管理者が実際どう処理しているかがブラックボックスであることが多いのに比べ、複数のデータ管理者が相互に監視するブロックチェーンのしくみにより、透明なITシステムが構築できる可能性が広がった。ブロックチェーンを活用した設計が、望ましい社会システムにどこまで近づいているのか、応用数理の観点で理論的に検証・検討することが重要であると考える。金融アセットとして、政治システムとして、不正を防止するセキュリティシステムとして、様々な分野への応用が広がる中、日本応用数理学会の様々な知見を活用して、多面的に議論を深めていきたいと思う。

謝辞 本会員オーガナイズドセッションを企画するにあたって、「数理ファイナンス」、「数理政治学」、「数理的技法による情報セキュリティ」、「産業における応用数理」の各研究部会にご協力いただいたことを感謝します。

参考文献

[1] Satoshi Nakamoto, Bitcoin: A Peer-to-Peer Electronic Cash System, https://bitcoin.org/bitcoin.pdf

- [2] Stuart Haber and W.S. Stornetta, How to Time-Stamp a Documeent Journal of Cryptology, Vol. 3, Issue 2, pp. 99-111, 1991
- [3] 佐藤、長谷川、佐古、他「ブロックチェーン技術の教科書」C&R 研究所、2018.
- [4] 松尾、楠、崎村、佐古他「ブロックチェーン技術の未解決問題」日経 BP, 2018.

政治学から見たブロックチェーン

岸本 一男1

1 筑波大学名誉教授

e-mail: kishimot@sk.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

(広義の)ブロックチェーンは、例えば、日本ブロックチェーン協会 [1]では「電子署名とハッシュポインタを使用し改竄検出が容易なデータ構造を持ち、且つ、当該データをネットワーク上に分散する多数のノードに保持させることで、高可用性及びデータ同一性等を実現する技術を広義のブロックチェーンと呼ぶ.」と定義している。ビットコイン [2] にその出発点を持つこの概念は、その有効性も理論的裏付けも、必ずしも学術的に確立されたものではなく、またその実用上の信頼性についても、理論的と言うよりはビットコインの存続によって実証的に示されつつあるという段階である.

政治学の視点からこのブロックチェーンを眺めるというのが本発表での発表者に与えられている役割である.ブロックチェーン技術の通貨以外の分野への応用は、例えば「ブロックチェーン2.0」と呼ばれている[3].ビットコインは所有と所有の移転の履歴の保証を中央管理と独立に行おうというものなので、政治学の本流に直球で当てはまる応用例は素直には思い当たらない.発表者の思い当たる範囲で、関係する可能性のあるものを列挙したい.

2 記録

ある時点である文書が存在したことを保証することは、ブロックチェーンで素直に実現できる. 論文や特許等での先取権獲得ではこれが有効に機能すると思われる. 一方、土地の登記等においては、記録だけでは記録の正当性の根拠を示すことができないので、そのままでは利用できないと思われる.

単なる記録を超えて、ビットコインに見られるような売買歴を示すには、土地固有の複雑さへの対応が必要となる。ビットコインはビットコインの外の世界と無関係に存在するが、土地は実体があるので、登記上の土地と現実の土地が一致する保証はない。ブロックチェーンにはその不整合を解決する方法は含まれていない。

公文書, 稟議書, 決裁文書等を確実に保存し

て改竄が無いことを保証することは可能であるので,必要がある場合には利用できる.

3 公正な選挙

記録の保証がブロックチェーンの素直な応用として思い当たる一方で,理論的に特にチャレンジングで無いのに対し,公正な選挙の問題は,ブロックチェーンと直接的な連関は霧の中であるが,精神的な意味では関連し,かつチャレンジングな問題に見える.

公正な選挙という用語は、一票の重みが等しいという意味に用いられる場合も多い.しかし、本稿では、有権者の投票が、正しく集計され、そのことを万人が納得するという側面から、公正さを眺める.

投票が正しく受理され、正しく集計されるというのは、選挙の自明な前提なので、社会科学としての政治学での議論では正面から取り上げられることは少ない. しかし、独裁国家、あるいは民主主義が十分成熟していない国においては、この仮定は必ずしも成立しない可能性も考慮しなくてはならないかもしれない. 民主国家とされる国においてさえ、選挙に敗れた側が「選挙に不正があったので無効だ」と選挙後に訴える例は決して無いわけではない.

この点では、情報セキュリティ分野での電子 投票の議論で、既に深い結果が得られている。 本稿は、それに加えて、一点「選挙管理委員会、 あるいは集計者たちが、協力して特定候補者の 応援をする可能性も排除できない」という視点 を取り込む必要があることを指摘する。本稿の 議論は純粋に理論上の関心によるものであるが、 現実にも、例えば、独裁者が自己の権力を確立 しようとする国民投票を行う場合になどにあり 得ることかもしれない。

4 記名投票

まず記名投票から議論する. 記名投票は,日本の国政選挙においては,1889年の衆議院議員選挙法で用いられ1900年に廃止されるまでは有効であった. 記名投票においては,選挙管理委員会は,有権者リストとその投票内容をす

べて公表すれば、個々の有権者は自分自身の投票が正しく記載されているか否かを確認することができる. すべての有権者が自分自身の投票が正しく反映されていると確認できれば、選挙管理委員会が集計においてミスあるいは不正をした可能性は排除される.

投票者側の不正も考える必要がある。選挙結果が出た後で、選挙を無効にしたい一部有権者グループが、彼らが投票においてはAと記載して、選挙管理委員会も正しくAと公表したのに、「自分たちはBと記載したのに、選挙管理委員会が改ざんしてAとした」と組織的に訴えたとき、その改ざんが行われていないことを証明できなくてはならない。

この議論は、既に電子投票の議論で扱われており、選挙管理委員会およびすべての個々の有権者が独自の公開暗号鍵を持っていれば、改ざんが行われていないことを証明することができる.従って、記名投票においては、この意味で集計の正しさを検証することが可能である.

5 無記名投票

当選者が、当選後に自己の支持者に便宜を図り、反対者に不利益を与える可能性を排除するために、無記名投票が広く用いられている.電子投票の研究はこの場合を扱っており、岡本[4,p.146]は、無記名選挙が満たすべき要件として次の4点を整理している(整理法は他にもあり得る):

- 1) 無証拠性:投票者は,自分の投票が公表された投票リストに掲載されているか否かを確認することができる.
- 2) 無記名性:投票者の投票が公表された投票リストに掲載されない場合は,当該投票者は,投票内容を明かすことなく異議申し立てをすることができる.
- 3) 公平性:投票締切前に投票内容の一部が 公表されることがない.
- 4) 匿名通信路: インターネットなどでの発信 元アドレスが送信先に伝えられてしまう と, 匿名性が保証されないかもしれない.

既存の研究は多くの条件のもとで,この問題を 解決している.

しかし、現在まで著者が理解した範囲では、 これらの議論の多くは、選挙管理委員会の機能 を幾つかに分割し、分割された組織間での連携 はないと仮定しているように思われる。例えば、 独裁者が行政を握っており、その体制下で投票を行うならば、それらの組織が形式上分割されていても、互いに裏で連携を取って、あたかも一体であるかのごとくに振る舞う可能性は無視できないと思われる。例えばミックスネット [5]での匿名通信路の実現は、「みんなぐる」の場合は不成立だと思われる。では、選挙管理委員会がある独裁者の指示の下に一体となって不正を働く場合に、無記名選挙での公正な選挙を実現できるであろうか?

6 ブロックチェーン

ブロックチェーンは、選挙の枠組みと直ちに整合を取ることは難しい仕組みである.しかし、ブロックチェーンは「中央集権」を排除している.一方、選挙管理委員会の組織的なバイアスを疑った場合、「中央集権機能」を前提としない仕組みが適当かもしれない.

ここからは夢想であるが、この点から、換骨 奪胎した拡張ブロックチェーンを定義して、そ の上で、公正な無記名投票を実現する、そのよ うな(拡張)ブロックチェーンの定式化はでき ないものであろうか?

- [1] JBA, 「ブロックチェーンの定義」を公開しました,2016 年 10 月 3日, http://jba-web.jp/archives/2011003blockchain_definition (2018年8月5日閲覧).
- [2] Nakamoto, Satoshi, Bitcoin: A Peerto-Peer Electronic Cash System, 24 May 2009, https://bitcoin.org/bitcoin.pdf (2018年8月5日閲覧).
- [3] 東 晃慈, ブロックチェーン2.0プロジェクト(ビットバンク株式会社&『ブロックチェーンの衝撃』編集委員会, ブロックチェーンの衝撃, 日経 B P社, 2016, pp.237-248 所収).
- [4] 岡本龍明, 暗号と情報セキュリティ, 日 経BP社, 1998.
- [5] David Chaum, Untraceable electronic mail, return addresses, and digital pseudonyms, CACM, Vol.24(1981), pp.84-90.

仮想通貨,スマートコントラクト,リスクの計量化:数理ファイナンスの立場から

関根 順

大阪大学大学院基礎工学研究科

e-mail: sekine@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 序

仮想通貨を一つの「資産クラス」と見做して 投資対象とする試み、ブロックチェーンを基盤技 術としたスマートコントラクトの開発など「仮 想通貨・ブロックチェーン」に関連した金融実 務界での様々な取り組みが見られる.本講演で は、「数理ファイナンス的」観点からこのよう な取り組みのいくつかを紹介し、さらに今後の 課題・チャレンジについて考察する.

2 仮想通貨:一資産クラスとして

金融資産運用の現場では、多種多様な投資対象(資産クラス)が例えば分散投資の観点から重要視される. Burnisk and White (2017)の中では、新たな資産クラスとして見た仮想通貨(bitcoin)の特徴が分析されている. その中では例えば

- 他の資産クラスと比較的低相関・逆相関 を持つ傾向が多いこと.
- Sharpe 比:

期待収益率 – 無リスク金利 ボラティリティ

がより高いこと,

が挙げられている(講演内でより詳しく紹介する). 仮想通貨に関する更なる実証分析は興味深く思われる. もし他の資産クラスと異なる(値動きの)特徴を持つことが明らかになれば、次は仮想通貨を資産クラスの一つに組み入れたポートフォリオ最適化(平均・分散最適ポートフォリオ、最小分散ポートフォリオ、その他の"スマートベータ"ポートフォリオなど)のパフォーマンス分析が期待できる.

3 スマートコントラクト

スマートコントラクトにおいては、例えば、 契約内容と執行条件を事前に定義しておき、条件に合致したイベントが発生すると自動執行する.取引の自動化に伴う決済時間の短縮、不正 防止、仲介者を介さないことでの取引コスト削 減などのメリットが期待される. 金融取引においては、(現物のやりとりを行う)スポット取引のみならず、(将来の証券価格や金利などに依存したキャッシュフローが発生する)デリバティブ取引に関するスマートコントラクトの実現が強く望まれる.

4 スマートデリバティブコントラクト:一 考察

2008年のリーマン・ショックに始まった世界的金融危機以後,デリバティブ取引においては

- ◆ 各種金利(無リスク金利, デフォルトリスクを反映した金利, 原資産を調達する金利, 貸出・借入金利 etc.) の区別すること,
- 取引相手のデフォルトリスク(カウンターパーティリスク)および自分自身のデフォルトリスクも考慮し,担保付取引を行うこと。

などが標準となっており、これらに伴う価値調整 (value adjustment) が総称されて XVA と呼ばれている. XVA 計算は、数理ファイナンス理論の中では BSDE(Backward Stochastic Differential Equation) の解として表現され (例えば [2] 参照)、これを(金融実務で必要とされている)高次元の状態変数の下で数値計算することは大変計算コストを要する. それに加えて

ネッティング(複数のデリバティブコントラクトを「合算」「相殺」させるプロセス

も考慮する必要があり、問題は一層複雑・煩雑になる. 現在、金融実務では簡便法で代用しているようであるが、それでも依然として XVA 計算は高い計算負荷を抱えるプロセスとなっている. このようなプロセスをスマートデリバティブコントラクトでどう実現していくかは大きなチャレンジの一つであると思われる.

本講演では、https://www.xva-blockchain.com/で紹介されている取り組みや、Fries and

Kohl-Landgraf (2018) の内容を紹介しつつ, 今後の課題について考察したい.

- [1] Chris Burnisk and Adam White,
 "Bitcoin: Ringing the Bell
 for a New Asset Class", research white paper, Jan. 2017.
 http://research.ark-invest.com/
 bitcoin-asset-class/
- [2] Maxim Bichuch, Agostino Capponi, and Stephan Sturm, "Arbitrage-free XVA", Mathematical Finance, 2018, 28, 582–620.
- [3] Christian P. Fries and Peter Kohl-Landgraf, "Smart Derivative Contracts: Detaching Transactions from Counterparty Credit Risk – Specification, Parametrisation, Valuation –" working paper, Apr. 2018. https://papers.ssrn.com/sol3/ papers.cfm?abstract_id=3163074

スケーラビリティと分散化について

岡本 龍明

日本電信電話株式会社(NTT)セキュアプラットフォーム研究所

e-mail: tatsuaki.okamoto@gmail.com

1 はじめに

ブロックチェーンや仮想通貨を公開化された 形で多数の参加者が利用するときの大きな問題としてスケーラビリティがある。これは、すべてのトランザクションの承認合意を一本のブロックチェーンを用いて分散環境の下で行うときに必然的に発生する問題である。このような問題は集中管理の下では発生せず、ある意味でスケーラビリティと分散化はトレードオフの関係にあるとも言える。この問題について、現在行われている取り組みを参考に考察を行う。

2 ブロックチェーンのスケーラビリティ 問題

ビットコインは、1 ブロックのサイズが限定されており(多くの場合、数 100 から数 1000 個のトランザクションを含む)、10 分に 1 個のブロックが作られるので、1 ブロックに数 1000 個のトランザクションを含むとしても 1 秒で数件程度のトランザクションしか処理できないことになる。たとえば、世界中で使われているクレジットカードは 1 秒間に数万件のトランザクションを処理していると言われており、現在のトランザクション処理速度ではビットコインを現在のクレジットカードのような形で利用することはできない。

3 対処策

上記のスケーラビリティ問題の解決に向けた 取り組みとしては以下のようなアプローチが試 みられている。

- [レイヤー2技術]本体のブロックチェーン(レイヤー1)の外側で高速にトランザクションを行う。以下のような種類がある。
 - [サイドチェーン] Plasma など
 - [状態チャンネル]ビットコインの ライトニングネットワーク、Raiden など
- [レイヤー1技術]本体のブロックチェー

ンの中で高速化を行う。以下のような種 類がある。

- [シャーディング] Ethereum シャーディング, Ziliqa など
- [合意形成] PoS (Ethereum Casper, Tendermint など), DPoS (EOS, Lisk, ARK など), PoI (NEM など)
- [その他] 有向非循環グラフ (DAG) の 利用 (IOTA, Nano など)

以上の技術を簡単に説明すると、本体チェーンのトランザクション処理速度が限定されていることを前提に、その外側(レイヤー2)において、本体チェーンで担保された契約の条件の下で、オフライン的にマイクロペイメントなどの処理を高速に行うアプローチがレイヤー2技術である。

それに対して、本体チェーン(レイヤー 1)のトランザクション処理能力そのものを向上させようとするアプローチがレイヤー 1 技術である。これには大きく 2 つのアプローチがあり、その一つはシャーディングとよばれているものである。これは、ブロックチェーンに含まれるトランザクションの検証作業を現在はすべてのノードが行っているのに対して、シャーディングではノード群ごとに分担して行う。つまり、検証作業を分散化することによる処理効率の改善がシャーディングのめざすところである。

もう一つのアプローチが、合意形成アルゴリズムに関するものである。ビットコインなどで使われている合意形成方法は、PoW (Proof of Work)に基づくものであるが、大規模な計算を要するためにブロック生成時間が長く、承認できるトランザクションの数に限界があった。それに対して、PoS (Proof of Stake)に基づく方法では、このような計算を必要としないため、承認プロセスがシンプルでブロック生成時間が短いという長所がある。つまり、より高速なトランザクション処理が可能になるのである。PoSに基づく方法の中でも、DPoS (Delegated PoS) は、何らかの形で選出された代表者がこの承認作業をすることにより、より高速なトラ

ンザクション処理をめざしている。

一方、DAG を用いたアプローチは、ブロックチェーンを用いたものとは異なっている。ブロックチェーンでは、承認されたトランザクションは、1本のチェーンに含まれる。それに対して、DAG によるアプローチでは、1つのトランザクショントランザクションは承認する2つのトランザクションをポイントすることで、有効非サイクルグラフ(DAG)が作られる。つまり、トランザクションのまとめたブロックを作らずに、直接トランザクション間で承認を行うことにより、ブロックを作るオーバーヘッドを抑え、より高速なトランザクション処理をめざすものである。

4 非中央集権化とのトレードオフ

仮想通貨の中でも、Ripple などでは、各トランザクションの承認を中央集権的な方法で行っている。PoW や PoS のような合意形成は、ある種の多数決投票により非中央集権的に行うものであり、何らかの形の投票行為が必要となることが、トランザクション処理にそれなりの時間を要することになる。ところが、中央集権的な手段でこのような民主的な合意形成は必要なく、ある権限をもった管理者が独裁的に承認を行うため、極めて高速なトランザクション処理が可能となる。

このような方法を政治体制に例えると、PoWやPoSによる合意形成は、すべての市民がそれぞれの政治案件に対して直接投票して賛否を決定する直接民主主義に近いと言えるかもしれない。ある意味で、より理想に近い政治体制かもしれないが、問題はその効率にある。意思決定に参加する市民の数が多くなればなるほど、合意しなければいけない1件の政治案件に要する処理時間が大きくなるのだ。

一方、そのような直接民主主義の効率の問題を解決するために導入された政治体制が、間接民主主義である。まず市民は政治の意思決定をする代表を選び、その代表が投票等の手段を用いて意思決定を行うのである。この方法により、直接民主主義よりもより効率よく多くの政治案件の処理が可能となる。この体制に近い形でトランザクションの承認処理を行っている仮想通貨(プロックチェーン)は、DPoSに基づく方法であろう。

シャーディングは、政治体制的には(地方) 分権に相当するように思われる。つまり、分散 化の役割を担っていると考えていいだろう。

DAGによるアプローチは、それに相当する 政治体制は無いように思われるが、あえて言う と、口コミによる評価システムのようなものか もしれない。非中央集権化の観点では、直接民 主主義に近いものかもしれないが、仮想通貨の IOTA などによる実験システムでは、コーディ ネーターとよばれる裁定補助機関が存在し、完 全な意味での非中央集権とは言えないという批 判がある。しかし、システムの規模が大きくな れば、コーディネーターは必要なくなるとされ ている。

効率だけを考えれば、最も効率のよい政治体制は独裁政治であろう。多くの政治案件に対して、極めて高速で処理することが可能となる。この体制に近い形でトランザクションの承認処理を行っている仮想通貨としては、Ripple などである。一方、多くの利用者の合意のもとで政策決定させようと思えば、投票などの手段で多くの人の意見集約する必要がある。

以上述べたように、トランザクション処理の 効率化と非中央集権化との間にはトレードオフ がある。

ブロックチェーンの設計においてどのレベル の非中央集権化を行うかは、その応用がどの程 度の効率を必要としているか、どのような人に よりトランザクションの承認決定が行われるべ きか、という観点で決めることになるだろう。

密テンソルに対する ALS 法の実装方法に関する考察

深谷 猛1

1 北海道大学

e-mail: fukaya@iic.hokudai.ac.jp

1 はじめに

これまで、様々なデータの分析や圧縮などに、 特異値分解をはじめとする行列分解が利用され てきたが、近年、より複雑なデータを取り扱う ための手法として、テンソル分解が注目されて おり、例えば、脳科学分野などで活用例が報告 されている [1]. 今後、IT技術の更なる進歩に より、取得できるデータがより大量・複雑にな ることが予想されるが、そのようなデータに対 して効率的にテンソル分解を行うためには、テ ンソル分解の計算の高速化が必要である.

テンソル分解の計算手法に関しては、現状、数理的な視点での研究が活発に行われている。 テンソル分解の現状については、文献 [2] 等でよく概観されている。一方、行列計算手法の研究の歴史を見ると、数理的な視点に加えて、高性能計算の視点に基づく計算手法の改良等も、その高速化に重要な貢献を果たしてきた。実際、計算機アーキテクチャは複雑・多様化の一途をたどっており、現実的な計算時間に大きな影響を与えている。

以上の状況を踏まえると、テンソル分解の計算手法を高性能計算の観点からも検討することは重要な課題である.しかし、現状、テンソル分解の主要カーネルのスレッド並列化手法 [3] など、初期段階の研究が行われている状況である.そこで、今回、主要なテンソル分解の一つである CP 分解の代表的な計算手法である ALS 法について、最近の計算機アーキテクチャの観点から、その実装方法を議論する.なお、テンソル分解で取り扱うテンソルは疎であることも多いが、今回は議論の第一段階として、密である場合を想定して、話を進める.

2 CP 分解と ALS 法

 ${
m CP}$ (CANDECOMP/PARAFAC)分解 [4] は,テンソルをランク 1 のテンソルの和として(近似的に)分解するものである. 具体的には,K 階のテンソル $\pmb{\chi} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_K}$ を

$$m{\chi} pprox \sum_{r=1}^R m{a}_r^{(1)} \circ m{a}_r^{(2)} \circ \cdots \circ m{a}_r^{(K)}$$

と分解する.ここで, $R \in \mathbb{N}$, $\boldsymbol{a}_r^{(k)} \in \mathbb{R}^{I_k}$ であり,。はベクトルの外積(outer product)である.以降, $[\boldsymbol{a}_1^{(k)} \ \boldsymbol{a}_2^{(k)} \ \cdots \ \boldsymbol{a}_R^{(k)}] =: \mathbf{A}^{(k)} \in \mathbb{R}^{I_k \times R}$ と表記する.

CP 分解の代表的な計算手法として、ALS 法(Alternating Least Square 法,交互最小二乗法) [5,6] が知られている。ALS 法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す。ここで、* は Hadamard 積、 \odot は Khatri-Rao 積、 \mathbf{V}^{\dagger} は \mathbf{V} の擬似逆行列である。また、 $\mathbf{X}_{(k)}$ は \mathbf{X} をモード k で展開(行列化)したものである。

3 ALS 法の計算コストの分析

ALS法の1反復の計算の主要部(Algorithm 1の4と5行目)について、計算コストを分析する. 現在の計算機においては、演算コストとメモリアクセスコストの両方を考える必要があるため、これらを表 1 に整理する. 5 行目は Khatri-Rao 積(KR 積)と行列化したテンソルと KR 積の結果の積(MT × KR 積)に分けており、 \mathbf{V}^{\dagger} に関する部分は無視した. データ量はテンソルや行列の要素数をカウントし、処理の途中で一時的に必要となる領域は含んでいない. byte/flop 値は倍精度型(8byte)を使用するとして算出した. なお、処理の並列化は一切考慮していない. また、Khatri-Rao 積の計算は定義に従って、最終結果の各要素を安直に計算した場合を示している.

まず、表 1 より、K が増えた場合、演算回数とデータ量の両面で 4 行目よりも 5 行目の方がコストが大きく増加する。よって、後者の計算コストが支配的である。

5行目の処理については,多くの場合 $K \leq 10$ 程度であるため,現在の一般的な計算機環境におけるメモリバンド幅と演算性能の比(BF 値)が 0.5 以下(0.1 強であることが多い)ということを踏まえると,KR 積の計算は基本的にメモリバンド幅律速となることが予想できる.一方,MT × KR 積の部分は,R がある程度大きければ演算律速となり,そうでなければメモリバンド幅律速となる.また,K に関わらず,N

Algorithm 1 ALS for CP decomposition

Input: $\mathfrak{X} \in \mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_K}$, $R \in \mathbb{N}$.

- 1: initilize $\mathbf{A}^{(k)} \in \mathbb{R}^{I_k \times R}$ for $k = 1, \dots, K$.
- 2: repeat
- 3: **for** k = 1, ... K **do**
- 4: $\mathbf{V} \leftarrow \mathbf{A}^{(1)^{\top}} \mathbf{A}^{(1)} * \cdots * \mathbf{A}^{(k-1)^{\top}} \mathbf{A}^{(k-1)} * \mathbf{A}^{(k+1)^{\top}} \mathbf{A}^{(k+1)} * \cdots * \mathbf{A}^{(K)^{\top}} \mathbf{A}^{(K)}$
- 5: $\mathbf{A}^{(k)} \leftarrow \mathbf{X}_{(k)} \left(\mathbf{A}^{(K)} \odot \cdots \odot \mathbf{A}^{(k+1)} \odot \mathbf{A}^{(k-1)} \odot \cdots \odot \mathbf{A}^{(1)} \right) \mathbf{V}^{\dagger}$
- 6: normilize columns of $\mathbf{A}^{(k)}$ (storing norms as λ)
- 7: end for
- 8: until fit ceases to improve or maximum iterations exhausted

Output: $\lambda, A^{(1)}, A^{(2)}, ..., A^{(K)}$

表 1. ALS 法 1 反復の主要部における演算回数,データ量,および byte/flop 値($I_1=I_2=\cdots=I_K=N$ の場合).

処理	4 行目	5 行目	
		KR 積	MT × KR 積
演算回数	$(K-1)NR^2 + (K-2)R^2/2$	$(K-2)N^{K-1}R$	$2N^KR$
データ量(load)	(K-1)NR	(K-1)NR	$N^K + N^{K-1}R$
データ量(store)	$R^2/2$	$N^{K-1}R$	NR
byte/flop 値(概算)	8/R	8/(K-2)	4/R

が大きくなるほど、KR 積よりも $MT \times KR$ 積のコストが相対的に大きくなることが分かる.

4 効率的な実装に向けて

前節で述べたように、ALS 法を実装する場合、Khatri-Rao 積の計算とその結果と行列化したテンソルの積の計算を効率的に実装することが重要である。そして、これらの処理では、一定のデータの再利用性があるものの、現在の計算機のBF値を考慮すると、演算コストだけでなく、メモリアクセスコストについても、十分注意を払う必要があることが分かった。演算パターンとしては、BLAS(行列積)が利用できる部分もあるが、データの再配置等が場合によって必要となるため、十分な検討が必要である。また、今回は議論していないが、処理の並列性についても考慮することが求められる。

発表当日は,実際に計算機上で実施したベンチマークの結果等も報告する予定である.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K18058 の助成 を受けています.

参考文献

[1] A. Cichocki, R. Zdunek, A. Phan, and S. Amari, Nonnegative matrix and tensor factorizations: applications to ex-

- ploratory multi-way data analysis and blind source separation Wiley, 2009.
- [2] T. Kolda and B. Bader, Tensor decompositions and applications, SIAM Review, Vol. 51, No. 3 (2009), pp. 455–500.
- [3] K. Hayashi, G. Ballard, Y. Jiang, and M. Tobia, Shared memory parallelization of MTTKRP for dense tensors arXiv, No. 1708.08976 (2017), 12pp.
- [4] H. Kiers, Towards a standardized notation and terminology in multiway analysis, J. Chemometrics, Vol. 14 (2000), pp. 105–122.
- [5] J. Carroll and J. Chang, Analysis of individual differences in multidimensional scaling via an n-way generalization of "Eckart-Young" decomposition, Psychometrika, Vol. 35 (1970), pp. 283–319.
- [6] A. Harshman, Foundations of the PARAFAC procedure: models and conditions for an "explanatory" multimodal factor analysis, UCLA working papers in phonetics, Vol. 16 (1970), pp. 1–84.

大規模な数値線形代数の問題における精度保証付き数値計算

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 はじめに

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ー極限への挑戦,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」というプロジェクトを東京女子大学,早稲田大学,名古屋大学,芝浦工業大学の4つのグループが連携して推進している。実用的な精度保証付き数値計算環境を大規模分散並列計算機環境用に構築することを目標の1つに掲げている。本発表では,芝浦工業大学グループが主に担当している数値線形代数に関するプロジェクトの進捗状況を報告し,京コンピュータと Fujitsu FX100 を用いた数値実験結果について紹介する.

2 プロジェクトの進捗状況

現在, 芝浦工業大学グループでは

- 高精度数値線形代数アルゴリズムとその 実装
- 基本計算ライブラリの精度保証化
- テスト行列の生成法

の研究を主に推進している.以下,各項目の近 況について報告する.

2.1 高精度数値線形代数アルゴリズムとその実装

本節では、高精度数値線形代数アルゴリズム に関して、連立一次方程式の精度保証付き数値 計算法について述べる.

IEEE 754 [1] により定義された浮動小数点数の集合を \mathbb{F} とする。連立一次方程式を $Ax=b,\ A\in\mathbb{R}^{n\times n},\ b\in\mathbb{R}^n$ とし,その近似解を $\hat{x}\in\mathbb{F}^n$ とする。このとき, $\|RA-I\|<1$ となる行列 $R\in\mathbb{R}^{n\times n}$ が存在すれば,

$$\|\hat{x} - A^{-1}b\| \le \frac{\|R(A\hat{x} - b)\|}{1 - \|RA - I\|}$$
 (1)

が成立する. 数値計算環境では, $A \in \mathbb{F}^{n \times n}, b \in \mathbb{F}^n$ とし, 多くの場合では, 数値的に得られた

表 1. ノード時間の比(京コンピュータ)

行列の次元	使用ノード数	計算時間の比
30万	400	7.07
60万	1600	6.32
120万	6400	5.33
240万	25600	4.07

表 2. ノード時間の比 (FX100)

公2. 7 中間間の超(171100)			
行列の次元	使用ノード数	計算時間の比	
12万	36	5.12	
24 万	144	4.75	
36 万	324	4.51	
48万	576	4.12	

A の近似逆行列を $R \in \mathbb{F}^{n \times n}$ とする. 式 (1) に基づく精度保証は多く提案されており、現在までに、[2, 3] の手法を PBLAS と ScaLAPACK を用いて実装した.

精度の良い近似解を得て、タイトな誤差上限を高速に得ることを考える。高信頼な近似解の導出には、残差反復法を用いる。残差反復法では、近似解 \hat{x} に対して残差 $b-A\hat{x}$ を計算する必要があるが、この計算に高精度計算が必要である。ここでは、文献 [4] で述べられている高精度計算法を行列・ベクトル積に拡張し、並列分散環境用に実装し、PBLASの pdgemv と同じ仕様で用いられるようにした。また、計算値とその誤差上限を同時に出力できる。

これより、数値実験結果について述べる.連立一次方程式の数値解を求めるために要した時間と精度保証法[3]に要した時間の比を示す.表1は京コンピュータを、表2はFujitsu FX100を使用した実験結果である.精度保証は近似計算を得るコスト(演算回数)の9倍程度を要するが、実測は9倍も要さない.この大きな要因はLU分解と行列積の性能の差である.

2.2 基本計算ライブラリの精度保証化

数値線形代数の問題を精度保証する上で、区間演算は必須である. PBLAS にサポートされ

ている関数を区間演算に対応させる仕様の定義(Interval PBLAS)と、それに基づく実装を行った。現在、入力を中心・半径型区間とする、レベル1のルーチンを区間演算に対応させた。ベクトルxとyの内積計算を例にすると、void pddot_の引数は

int *n, double *alpha,
double *x, int *ix,*jx,*descx,*incx,
double *y, int *iy,*jy,*descy,*incy

であり、ベクトルのサイズ、結果を格納する変数、ベクトルとその分散情報を与える。ベクトルxの中心、半径をそれぞれxm、xr、ベクトルyの中心、半径をそれぞれym、yr とした、pddot_の区間版である ipddot_は、引数を

char *flagx, char *flagy,
int *n, double *mid, double *rad,
double *xm, *xr, *ym, *yr,
int *ixm, *jxm, *descxm, *incxm,
int *ixr, *jxr, *descxr, *incxr,
int *iym, *jym, *descym, *incym,
int *iyr, *jyr, *descyr, *incyr

のように設計している(関数の引数はこの順番で設計していない). flagx, flagy はベクトルxとyがそれぞれ点ベクトルか区間ベクトルかを表し,P (Point) か I (Interval) で設定する.

2.3 テスト行列の生成法

連立一次方程式や固有値問題を解く際に、テスト行列が必要となる。MATLABの randsvdのように、直交行列を用いて、特異値分解の形式から行列を生成した場合、問題によっては近似計算に必要な計算時間よりもテスト行列の生成に要する計算時間が長くなる場合がある。よって、コレスキーQR法などを用いたテスト行列の生成や、文献[5]にある高速生成法の実装を行っている。また、真の固有値が事前にわかる行列の高速生成法[6]についても分散並列環境で実装を行う予定である。

3 まとめと今後

現在までに、連立一次方程式の精度保証法に 関連する基本的な実装を終えた.今後は行列方 程式への対応、低メモリ実装、より悪条件な問 題に対応するための高精度行列積計算アルゴリ ズム [7] の実装, Interval PBLAS の完成に向けて研究を推進する.

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, hp180222). Fujitsu FX100 は名古屋大学情報基盤センターにあるものを使用した. 本研究に関する一部のコードの実装を行ってくれた、芝浦工業大学の寺尾剛史氏、落合涼太氏(卒業生)、坂本篤志氏、小林亮太氏に感謝します.

- [1] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 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] S. Oishi and S.M. Rump, Fast verification of solutions of matrix equations, Numer. Math., Vol. 90 (2002), 755–773.
- [4] T. Ogita, S.M. Rump and S. Oishi, Accurate sum and dot product, SIAM Journal on Scientific Computing (SISC), Vol. 26 (2005), 1955–1988.
- [5] K. Ozaki, T. Ogita: Generation of Linear Systems with Specified Solutions for Numerical Experiments, Reliable Computing, Vol. 25 (2017), 148–167.
- [6] 尾崎克久,荻田武史,真の特異値や固有値がわかるテスト行列の生成法,平成29年日本応用数理学会年会,武蔵野大学(2017/09/07).
- [7] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi and S.M. Rump, Error-free transformations of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications, Numerical Algorithms, Vol. 59 (2011), 95–118.

タイルサイズチューニングのためのタイル OR アルゴリズムの性能モデル

鈴木智博1,高柳雅俊1

1 山梨大学大学院総合研究部工学域

e-mail: stomo@yamanashi.ac.jp

1 概要

タイルアルゴリズムによる QR 分解は4つの 基本演算(カーネル)をタスクとしたタスク並 列型プログラムとして実装される。実装の性能 はタイルサイズに大きく依存するが、タスク間 のデータ依存を監視しながら動的なタスクスケ ジューリングを行うので性能モデルの構築が難 しい。今回、回帰分析によりカーネル単体の性 能モデルを構築し、実際の行列分解プログラム にこれらを組み込むことで簡易な性能モデルを 構築した。

2 タイル QR

行列分解のブロックアルゴリズムは、行列を 横方向にブロック幅 b のパネルに分割し(図1 右上)、パネル毎に分解、更新を行う。タイルア ルゴリズムでは、行列を b×b の小行列(タイ ル)に分割し(図1右下)、1または2タイル毎 に分解、更新を行う。タイルサイズを適切に選 択することで、細粒度タスクを大量に生成し、 負荷不均衡を抑制することを目的としている。 ただし、タスク間にデータ依存があるので、こ れを監視しながらタスクスケジューリングを行 う必要がある。

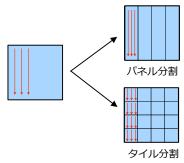


図 1. Panel and tile partitioning

Listing 1 にタイル QR アルゴリズムの擬似 コードを示す。p、q はそれぞれタイル行数、タイル列数を表す。ただし、 $p \geq q$ とする。各タイルは A(i,j) で参照される。OpenMP 4.0 からtask 構文に depend 節が導入され、in、inout、out の三種類のデータ依存が記述可能となった。Listing 1 のように、制御文による静的なタスク

実行コードにデータ依存を記述することで、動 的なタスクスケジュールが可能となる。

Listing 1. Tile QR right-looking variant with task construct

```
#pragma omp parallel {
  #pragma omp single {
    for (int k=1; k \le q; k++) {
      #pragma omp task \\
      depend(inout:A(k,k)) depend(out:T(k,k))
      GEQRT(A(k,k),T(k,k));
      for (int j=k+1; j <= q; j++) {
        #pragma omp task \'
        depend(in:A(k,k),T(k,k)) \setminus
        depend(inout:A(k,j))
        \texttt{LARFB}(\texttt{A}(\texttt{k},\texttt{k})\,,\texttt{T}(\texttt{k},\texttt{k})\,,\texttt{A}(\texttt{k},\texttt{j}))\,;
      for (int i=k+1; i<=p; i++) {
        #pragma omp task \\
        depend(inout:A(k.k)) \
        depend(out:A(i,k),T(i,k))
        TSQRT(A(k,k),A(i,k),T(i,k));
        for (int j=k+1; j <= q; j++) {
          #pragma omp task \'
          depend(in:A(i,k),T(i,k)) \\
          depend(inout:A(k,j),A(i,j))
          SSRFB(A(i,k),T(i,k),A(k,j),A(i,j));
}
```

GEQRT カーネルは対角タイル A(k,k) のブロック QR 分解と変換行列の生成を行う。変換行列は A(k,k) の零化された下三角部分と、T(k,k) に保存される。LARFBカーネルは GEQRTカーネルが生成した変換行列を用いて後続タイル (1つ)の更新を行う。TSQRTカーネルは対角タイルとその下のタイル (A(i,k)) のブロックQR 分解と変換行列の生成を行う。SSRFBカーネルは TSQRT カーネルが生成した変換行列を用いて後続タイル (2つ)の更新を行う。

各カーネルはブロックアルゴリズムで実装されているため、タイルサイズ同様に、(内部)ブロック幅も性能に影響するパラメータである。 p=q のとき、各カーネルの呼び出し回数は、GEQRT p 回、LARFB、TSQRT p(p-1)/2 回、SSRFB p(2p-1)(p-1)/6 回であり、タイルサイズを適切に選択した場合は SSRFB カーネルの実行時間が支配的となる。

3 カーネルの性能モデル

タイルサイズを $b \times b$ 、(内部) ブロック幅をs として、タイル QR カーネルの実行時間の回帰モデルを構築する。まず、説明変数の候補をパラメータb、sの3次項b³、b²s、b²、s³ と 2次項b³/s、b²、bs、s² とする。前者は flop count、後者はメモリアクセスによる実行時間への寄与を想定している。

想定されるパラメータ空間内でカーネルの実行時間は大きく変動するので、そのまま目的変数として用いるのは適当でないと判断し、 b^3 をこれで除した値を目的変数とした。これにより、説明変数の候補は s/b、 s^2/b^2 、 s^3/b^3 、 1/s、1/b、 s/b^2 、 s^2/b^3 となる。各候補同士の相関を調べると、s/b、 s^2/b^2 、 s^3/b^3 、 s^2/b^3 の間に強い相関(相関係数 r>0.9)があった。説明変数の多重共線性を除くため、 s^2/b^2 、 s^3/b^3 、 s^2/b^3 を候補から除外した。

以上より、カーネルの実行速度の回帰モデル を以下とした。

$$\frac{b^3}{T_k(b,s)} = \frac{\alpha}{1 + \beta \cdot s/b + \gamma \cdot 1/s + \delta \cdot 1/b + \varepsilon \cdot s/b^2}$$

次に、タイルサイズ b を [80, 1024] の区間で 16 刻みで変化させ、各カーネルの実行時間を 測定した。 ブロック幅 s については b%s=0、ただし、 $10 \le s \le b/2$ とした。 Intel Core i7-6900K (8 core, 3.2GHz) における SSRFB カーネルの実行時間の測定結果を図 2 に示す。各カーネルの実装は Intel MKL 2018 でコンパイルされた PLASMA ライブラリ(Ver. 17.1)[1] のものを用いた。図 2 において、縦軸は「 b^3 /実行時間」、横軸はタイルサイズを表す。

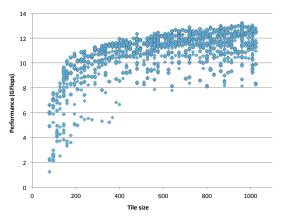


図 2. PLASMA SSRFB kernel performance

1 組の (b,s) につき実行時間を 5 回測定し、 2640 組のデータを得た。これを用いて (1) に対

して R の nls 関数により非線形回帰分析を行った。その結果、係数 β の p 値は 0.0259 であったため、(1) から s/b の項を除いたモデルで再度分析を行った。得られた SSRFB カーネルモデルの係数を以下に示す。

表 1. Estimation result of parameters

α	13.93	δ	49.2
β		ε	62.9
γ	4.23		

他のカーネルについても同様に係数の決定を 行った結果、GEQRT カーネル、LARFB カーネル については p 値が比較的大きい係数があり、こ の2つのカーネルについては説明変数を一つ減 らしたモデルを採用した。

4 タイル **OR** の性能モデル

上で作成したカーネル単体の性能モデルを、Listing 1 のカーネル呼び出し部分に組み込むことで、タイル QR の性能モデルとした。

 $b = \{160, 240, 320, 400, 480, 560, 640\}$ 、s = b/4 とした場合の性能モデルとタイル QR プログラムの性能の実測値との差を図 3 に示す。

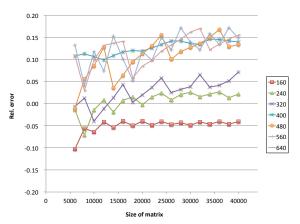


図 3. Relative error between model and measured value

図3より、タイルサイズが大きい場合にモデルは実際の性能よりも高速となっている。これはスレッド間で共有される L3 キャッシュの影響がモデルに反映されていないことが原因だと推測している。

参考文献

[1] PLASMA. (2017) Accessed 2018-08-02. [Online]. Available: https://bitbucket.org/icl/plasma

EigenExaへのオンライン自動チューニング活用の試みについて

今村俊幸¹

¹理化学研究所計算科学研究センター e-mail: imamura.toshiyuki@riken.jp

1 概要

我々はエクサスケール規模の次世代スパコンでの実用を目指した固有値計算ライブラリEigenExa[1]を開発している。現状、「京」など超並列環境では通信コストが並列性の阻害要件となっており、本研究においてベイズなどの統計により適切な通信方法をオンライン推定し実行時のシステムに適した通信最適化を試みる。特にATMathCoreLib[2]を使ったソフトウェアフレームワークと構築、予備実験について講演時に報告する。

2 はじめに

スーパーコンピュータ「京」をはじめとして、 数万ノードから構成される並列計算機では通 信が大きな問題になりつつある。本文執筆時点 で世界最速である米国のSummit[3]は、1ノー ド当たりの演算能力が約43TFLOPS(オークリ ッジ研究所の公開ページの数値 200PFLOPS/4608 より算出)である。一方、ノー ド間ネットワーク性能は200GB/s にとどまって いる。東大・筑波大で共同運用されている Oakforest-PACS(OFP)においても3046GFLOPS /node:25GB/s であり、京コンピュータが 128GFLOPS/node: 20GB/s であることを考えても 近年のスパコンはノード間通信よりも単体ノ ード性能に重きが置かれてた設計になってい ることがわかる。これは、並列計算や並列アル ゴリズムを設計実装する上での極めて重大な 問題点の存在を意味している。つまり、アルゴ リズム上の数式に明確に表れない行間もしく は抽象的に示された通信コストが支配的にな るのである。単体ノードの性能向上に従って単 体ノード内で閉じた計算が可能にあればいい のだが、高性能メモリは極めて高価で大容量を 搭載することが困難である。また、搭載メモリ が増加すれば、ノード間通信すべき情報量も増 えるため、ノード間通信を中心とした並列アル ゴリズム設計に移っていくことは間違いない であろう。一方で、通信は並列プログラム構築 時の問題として扱ってしまいがちであるが、応 用数理もしくは統計数理的な最適化技術と連携することで単なる工学的な問題ではなく、一種の最適化問題として扱うこともできる。本稿の目的は、須田らによって開発されたベイズ推定による離散パラメータの最良推定を可能とする ATMathCoreLib を用いて、数理的アプローチで適切な通信方法をオンライン推定する試みについて議論をすることにある。

3 EigenExa

EigenExa は著者を中心として理研が開発する「京」並びにポスト「京」コンピュータ上で高性能計算を可能とする固有値計算ライブラリである。2012年に version1.0 を公開して以降、「京」コンピュータ以外のスパコンへの対応もしつつ、これまで大きな性能改善事項は

「通信コストの削減」を中心に進めてきた。実際、ParCo16で発表した省通信型のHouseholder 三重対角化アルゴリズム CAHTR(3)は、通信コストを15%以上削減し、性能向上に寄与してきた。今回の報告で対象とするのは、Cuppen の分割統治法に代表される(二分木)再帰構造のアルゴリズム中に現れる特定ノードが保持する情報集約、つまり非均一な集団的通信操作の最適化である。

Cuppen の分割統治法は

$$T = T_1 \oplus T_2 + \rho e_{k,k+1} e_{k,k+1}^{\mathsf{T}}$$

の直和と1階摂動の分解を再帰的に施し、小規模な三重対角行列の固有ベクトルを左右より乗じて

$$Q^{\top}TQ = D + \rho u_k u_k^{\top}$$

対角行列+1 階摂動問題に帰着する。これらを 分解の逆方向に進行する。ここで並列計算にお いて下の階層で計算されたインターフェイス ベクトルuに関する情報を他のプロセスに通知 する必要がある。実際はブロードキャストなど の操作で全プロセスに通知する。インターフェ イスベクトルuは

$$u = (Q_1^{\top} e_k) \oplus (Q_2^{\top} e_{k+1})$$

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集 (2018.9.3·5, 名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

の構造から、実際、前半の計算結果(u1)を保持するプロセス、後半(u2)を保持するプロセスから該当箇所の結果を送受信する。MPI等で定められている通常の集団通信の範囲に収まっていないため、複数の実装方式が考えられる。

- 1) 特定プロセス(root)に u1, u2 を集め, u として並べ直した後でブロードキャスト (MPI Bcast)する
- 2) u1, u2 の元々のオーナー以外は 0 クリア して、全プロセスでリダクション (MPI_Allreduce(SUM))する
- 3) u1, u2 を行方向にブロードキャストし、 列方向にリダクションする
- 4) u1, u2 それぞれのオーナーが所属する列 内でリダクションし、行方向にブロード キャストする
- 5) 4)の手法のリダクションに代わりギャザー(MPI_Allgather)を行い並べ直した後で、行方向にブロードキャストする
- 6) 3)の後半に現れるリダクションに代わり ギャザーを発行する

など少なくとも6通りの通信方法が考えられる。これらは、「ベクトルロの長さ」、「プロセス数」に応じていずれの方法が最良か、異なることが事前実験で分かっている。また、京コンピュータのように2次元マッピング後の相対的なトポロジーが相似であるという性質を使えば、連続通信の初期の状態を除きほぼ通信のバラツキはある種の確率分布に従うと仮定してもよい(初期段階の性能はシステム側のバッファ準備や通信路の確保などに起因する)。

4 ATMathCoreLib によるオンライン推定

須田らによって開発されたATMathCoreLibは、離散パラメータに基づくある種の最適化問題を有限回数の試行(サンプリング)の範囲で最良ベイズ推定によって、適切なパラメータをオンラインで推定できるツールである。

藤井らの実験[4]を例にとれば、マルチグリッド前処理による MGCG には各種のパラメータが存在し、それらの選択により性能が数倍の範囲で変動する。MGCG 法は反復の初期過程でパラメータを試行できるため、適切な試行により最良パラメータを最終的に得る仕組みを入れ込むことができる。ATMathCoreLib は指定された

試行回数の中で、確度と regression のバランスを取りながら最良パラメータを決定する。

我々は、上記 EigenExa の分割統治法の u の 通信方法について、(プロセス数、ベクトル長、通信方法) の 3 組のインデックスをもつ離散事象に対してプロセスとベクトル長を固定したときに最良パラメータを決定する、オンライン推定問題を ATMathCoreLib を用いて実装する。実際、EigenExa は初期化の段階で何回かの試行ができるが、利用者が指定する問題サイズが確定しないので、ベクトル長が長い場合の試行回数を十分に取れない欠点が存在する。一方で、数値計算ライブラリは同一のユーザーがほぼ同サイズの問題を同一プロセス数で求解するという特性を持つため、利用者の呼び出し回数が増えれば増えるほどその精度が高まるようにライブラリを設計すればよい。

5 まとめ

通信コストを逐次試行を行いながら推定精度を上げるオンラインチューニングの考え方についてまとめた。発表当日は、ATMathCoreLibによるオンラインチューニング予備実験といくつかの性能評価も報告する。

謝辞 ATMathCoreLib の使用にによるオンライン自動チューニングのアイディアは須田・藤井両氏からアドバイスを受けた。EigenExa はCREST JST (ポストペタスケールシステムソフトウェア)の支援に引き続き、現在「京」高度利用化ならびにポスト「京」開発補助金の支援を受け開発している。

- [1] EigenExa Homepage, http://www.r-ccs.riken.jp/labs/lpnctr t/projects/eigenexa/
- [2] 須田礼仁, 自動チューニング数理基盤ライブラリ ATMathCoreLib, 情報処理学会研究報告 HPC-129-14, 2011 年 3 月
- [3] Oak Ridge National Laboratory, Summit Homepage, https://www.olcf.ornl.gov/summit/.
- [4] 藤井昭宏,田中輝雄,ATMathCoreLibを用いた代数的多重格子法の階層的パラメタ最適化.第 22 回計算工学講演会,2017 年

MPS法による静水圧問題における重心ボロノイ分割を用いた粒子位置の提案

長谷川 颯¹, 荻野 正雄², 片桐 孝洋², 永井 亨²¹名古屋大学大学院情報学研究科, ²名古屋大学 情報基盤センターe-mail: hasegawa@hpc.itc.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

MPS法[1][2]は、Moving Particle Simulation 法の略であり、粒子法の代表的手法1つである. 圧縮性流体を取り扱うために提案された SPH 法に対して、粒子法で非圧縮性流体を取り扱えるように提案されたものである. 主に流体解析や構造解析に用いられている. ほかの手法に比べて、計算格子を作成する必要がない、大変形や破壊に適用しやすい、といったメリットを持つために現在までに自由表面を有する流れや剛体と流体の連成問題、布のシミュレーションなどの、流体や個体の複雑な動きを扱うモデルが研究されている.

MPS 法の計算精度に影響を与える要因の1つとして、粒子の初期位置がある.初期位置は格子状に配置する方法が主流であるが、曲面や斜面の取り扱いが困難となる.他の粒子法であるSPH 法向けには、SPH 法のスキームに基づいて初期粒子位置の不均一さを評価し、それを最小化するように粒子を移動させる手法が提案されている[3].しかし、同手法を用いる前に、幾何形状の情報のみから格子状よりも適切な初期粒子位置を生成できることが望まれる.また、MPS 法では計算中に流体として移動する粒子の負荷分散について着目しているものはあるが、初期位置について着目しているものはあるが、初期位置について着目しているものは少ない.

そこで本研究では、ボロノイ分割に基づいて 粒子の初期位置を設定する方法を提案する. ボロノイ分割は、流体力学(気象分野)、水文学、 計画学、画像処理等の分野で広く利用されてきた. 特に重心ボロノイ分割[4]に着目する. これにより、曲面・斜面に対して、格子状に配置したものよりも滑らかになることが期待される. 今回は2次元問題を対象とし、壁面が曲線である容器での静水圧問題について、重心ボロノイ分割で移動させた初期位置に対して MPS 法のコードで流れ解析を行い、格子状に粒子を生成し解析した場合と比較した

2 重心ボロノイ分割

ボロノイ図は、ある距離空間上の任意の位置に配置された複数個の点(母点)に対して、同一距離空間上の他の点がどの母点に近いかによって領域分けされた図のことである。ここで重心ボロノイ分割とは、分割後の領域の重心と母点が一致するボロノイ分割のことで、母点が最も効率的に分布したときの分割方法とみなすことができる。これは、一般的なボロノイ分割から、次の1)と2)を繰り返すことで得られる。

- 1) ボロノイ分割した後の,各領域の重心を求める.
- 2) 母点を重心に移動して、もう一度ボロノイ 分割する.

重心ボロノイ分割はこれを重心が移動しなくなるまで繰り返すことで得られる配置となる.

ここで、重心の移動を続けるかどうかの判定は、以下を満たす点 1 つでも存在したかどうかで行った.

$$\frac{|x_0 - x_c|}{1.0e^{-4}|x_0|} > 0 \text{ or } \frac{|y_0 - y_c|}{1.0e^{-4}|y_0|} > 0$$

x₀: 元の母点のx座標 x_c: 重心のx座標 y₀: 元の母点のy座標 y_c: 重心のy座標

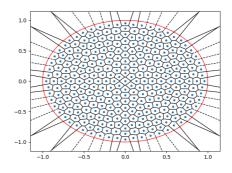


図1. 重心ボロノイ分割後

図 1 は実際に実装プログラムで重心ボロノイ 分割をおこなった後の図である. 図 2 の境界に

近い粒子について着目してみると,曲面に対して滑らかに表現できているのが分かる.

また今回の実装では赤線の境界外に重心移動 しない粒子を配置することで重心ボロノイ分 割を実装している. それにより様々な形状にお いて実装が簡単に行うことができる.

3 静水圧問題への適用

今回,図2で示すような壁面に曲面を持つ容器にて実験を行った.ここで青点は水粒子,澄点は壁粒子,赤点はダミー壁粒子を示す.ダミー壁粒子とは圧力を通さない壁粒子のことである.図3は図2の配置に対して重心ボロノイ分割を適応した図である.今回はこの初期配置に対してMPS法を適用し、水粒子の圧力分布を調べた.MPS法コードは文献[2]付録mps.cベースに作成したものを利用した.mps.cは圧力ポアソン方程式を陰的に解く半陰解法のMPS法を採用しており、自由表面を伴う非圧縮性粘性流れ問題を解く流体シミュレーションのCコードである.

図4,5は格子状配置,提案配置それぞれについて MPS 法を適用した結果である.図5より,水粒子に着目してみると,提案配置でも静水圧問題が解けているといえる結果が得られた.しかし格子状配置と比較すると,提案配置は精度が良いとは言えない結果となってしまった.

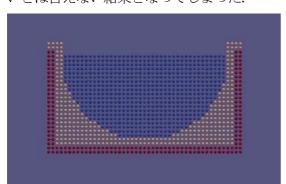


図 2, 格子状配置

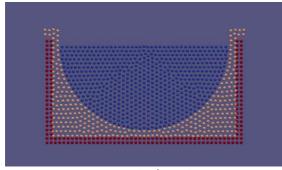


図3,提案配置

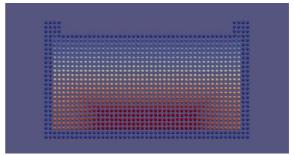


図 4、格子状配置の静水圧分布

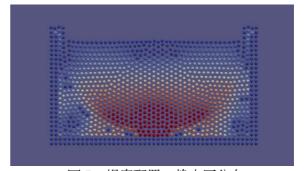


図 5, 提案配置の静水圧分布

4 まとめ

提案配置により、曲面・斜面に対して、格子 状に配置したものよりも滑らかに表現するこ とができ、その静水圧分布についてもほとんど 正しく計算が行えた.しかし計算精度について みると格子状配置よりも良い結果とはいえな い.よって今回提案した配置についてはさらな る検証が必要である.

謝辞:本研究の一部は,科学研究費基盤 (B) 17H02829 の支援を受けたものである. 参考文献

- [1] 越塚誠一, 粒子法, 丸善, 2005
- [2] 越塚誠一, 柴田和也, 室谷浩平, 粒子法入 門, 2014
- [3] A. Colagrossi, B. Bouscasse, M. Antuono, and S. Marrone, "Particle packing algorithm for SPH schemes", Computer Physics Communications, 183 (2012), pp. 1641-1653.
- [4] [4 Q. Du, V. Faber, and N. Gunzburger, "Centroidal Voronoi tessellations: Applications and algorithms", SIAM Rev., 41, 4 (1999), pp. 637-676.

日本応用数理学会 2018 年 年会 講演予稿集(2018.9.3·5,名古屋) Copyright (C) 2018 一般社団法人日本応用数理学会

2層渦あり流れの数値シミュレーション

東海林まゆみ(日本女子大学) 岡本久(学習院大学)

概要

重力波、重力・表面張力波、表面張力波の2層渦あり流れの分岐問題を考える。様々な研究がなされている渦なし流れに対して、渦あり流れに関する研究結果はまだ少ない。ここでは上層と下層でそれぞれ異なる渦度(定数)の2層流を考える。渦あり流れでは、よどみ点出現の有無が重要な概念となる。上層、下層の深さと渦度に対応するパラメータを様々に変えたとき、分岐解の形状や分岐構造がどのように変化するか、よどみ点がどのようなしくみで出現するか、を数値シミュレーションによって調べた。

1 定式化

考えている進行波とともに動く動座標系を x-y とし、自由境界が y=h(x) (ただし h(x) は左右対称な L-周期関数) で与えられているとする。このとき x-y 座標系での定常問題を考えることになり、流れ関数 ψ を用いて下記のように記述される。

$$-\triangle \psi = F(\psi) \qquad (-d < y < h(x), -L/2 < x < L/2)$$

$$\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + g(y+d) - \sigma \frac{h_{xx}}{(1+h_x^2)^{3/2}} = Q \qquad (y=h(x)),$$

$$\psi_2 = 0 \qquad (y=h(x)),$$

$$\psi_1 = -p_0 \qquad (y=-d).$$

ここで g は重力定数、 p_0 は与えられる正の定数、Q は未知の定数、 $\sigma \ge 0$ は表面張力係数を表す定数である。F は渦度関数であるが区分的に異なる定数の場合を考える。重力・表面張力波の場合には、これは 2 つの分岐パラメータを持つ分岐問題であり、解構造はかなり複雑になることが考えられる。

ここでは 2 層流の場合を扱うので、下層と上層の流体部分をそれぞれ Ω_1,Ω_2 とおき、渦度関数を

$$F(\psi) = \begin{cases} \gamma_1 & \text{in } \Omega_1, \\ \gamma_2 & \text{in } \Omega_2, \end{cases}$$

とする。 γ_1,γ_2 は値の異なる定数とし、 Ω_1,Ω_2 の平均深さをそれぞれ d_1,d_2 $(d=d_1+d_2)$ とする。このとき 2 つの分岐パラメータを持つ分岐問題を解くことになるが、定数パラメータ $d_1,d_2,\gamma_1,\gamma_2,p_0$ を様々に変化させたとき、未知関数 $h(x),\psi(x,y)$ と未知の定数 Q の解構造がどのようになるかを調べたい。

2 問題点と数値計算法

この問題は多層流の場合について [2] や [3] 等で数学的に論じられているが、数値計算結果が示された例はまだなく具体的な解の様子についてはまだ何も分かっていない。 2 層流の場合ですら、関係する定数の自由度が多すぎて分岐解の構造を数学的に論じることは非常に難しい。そこで本研究は、組織的に系統立てた数値シミュレーションを行い、具体的な解構造を調べようというものである。

数値計算するうえで難しい点のひとつは境界形状が未知、ということである。一層流の場合にはこれを克服する方法として、 Zeidler や Simmen & Saffman のアイデアを用いることができる ([1])。しかし2層流の場合にはこれらの方法を適用することはできない。もうひとつの難点は、よどみ点が現れる場合にも適用可能なアルゴリズムを用いることが必須である。何故なら渦あり流れの問題では、よどみ点の出現の有無は重要な概念である。現在までに重力波の場合にはよどみ点が現れることがわかっている ([1],[5], etc.)。しかし表面張力が働く場合にはよどみ点の有無に関してまだ何もわかっていない。これを計算するには新たなアルゴリズムが必要となる。

今回用いた数学的な定式化は主として [2]、[4] に従った。数値計算法は h(x) に間しては Fourier 級数展開法、 ψ に関しては差分法を用いた。具体的には流れ関数 ψ を、 $\psi(x)=\psi_1(x)$ in Ω_1 、 $\psi(x)=\psi_2(x)$ in Ω_2 とおき、 ψ_1,ψ_2 が各領域で前出の支配方程式を満たす条件に加えて、 Ω_1 と Ω_2 の境界で ψ_1 と ψ_2 が滑らかに繋がる条件を考慮して解いた。この計算法は、重力波、重力・表面張力波、表面張力波のすべての場合に適用できる。これらの場合について数値実験を行った。いずれの場合もパラメータ値の組み合わせによって、よどみ点が現れる場合、現れない場合、一瞬だけ現れる場合、などがあることがわかった。

- [1] H. Okamoto and M. Shōji, The Mathematical Theory of Bifurcation of Permanent Progressive Water-Waves, World Scientific, (2001).
- [2] A. Constantin and W. Strauss, Periodic traveling gravity water waves with discontinuous vorticity, *Arch. Rat.Mech. Anal.*, **202**, (2011), 133–175.
- [3] C. I. Martin and B.-V. Matioc, Existence of capillary-gravity water waves with piecewise constant vorticity, *J. Diff. Equations* **256**, (2014), 3086–3114.
- [4] C. I. Martin and B.-V. Matioc, Gravity water flows with discontinuous vorticity and stagnation points, *Commun. Math. Sci.*, **14**, (2016), 415–441.
- [5] R. Ribeiro–Junior, P. A. Milewski, and A. Nachbin, Flow structure beneath rotational water waves with stagnation points, *J. Fluid Mech.* **812**, (2017), 792–814.

粒子法シミュレーションのキャビテーション気泡における圧縮破壊現象へ の応用

西 圭祐1

¹ 同志社大学大学院生命医科学研究科 e-mail: ctub1040@mail4.doshisha.ac.jp

1 諸言

流体の流れから生じた圧力差により, 短時間 で気泡の発生・消滅が起きる現象をキャビテー ション現象という. キャビテーションの発生は, プロペラやスクリューなどの水中推進機構に対 して、性能を抑制し、コロージョンと呼ばれる 圧壊現象を引き起こす可能性がある. 一方で は, 医療や工業分野において様々な応用例があ る為,これまでもキャビテーション現象に関す る研究が理論および実験によって数多くなされ ている[1]. しかし、格子や要素に基づく研究は 多く存在するものの、キャビテーション現象に おいては複数の流体成分の複雑な界面の変化を 伴う為、解析が困難である、したがって、本研 究ではラグランジュ的な解析手法である粒子法 を用いた. 具体的には、粒子法の中でも MPS 法を, 圧縮性流体の解析に対応させた越塚ら [2] の手法を拡張した. キャビテーション現象の中 でも, 固体壁近傍の気泡の非球状収縮 [3] につ いて,複数の条件下でのシミュレーション結果 を報告する.

2 支配方程式とその離散化

支配方程式は,連続式,ナビエストークス方程式,エネルギ式,状態方程式を用いた.

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\nabla p + \frac{p}{\rho}\nabla\rho + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} + \boldsymbol{f} \qquad (1)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{2}$$

$$\frac{De}{Dt} = -p\nabla \cdot \boldsymbol{u} + \frac{K}{\rho}\nabla^2 T + \Phi \qquad (3)$$

$$p = RT \tag{4}$$

ここで、u は速度、t は時間刻み幅、p は圧力を密度で除した値、 ρ は密度、 ν は動粘性係数、f は外力、e は内部エネルギー、K は熱伝導係数、T は温度、 Φ は散逸関数を示す。

本研究では、三次元モデルによるシミュレーションを行った。垂直方向の下面は壁、上面は内部の値を補間して仮想する境界に、側面は周期境界条件を付与した。壁面について、圧力計算を適切に行うため、壁面粒子の圧力は重み関数を用いて、周囲の流体粒子の重み平均により導出した[2].

$$p_i = \sum_{j \neq i} [p_j w(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)] \tag{5}$$

上面の境界については,風上差分法を用いて計算を行った.

$$\phi_i^{n+1} = (1-c)\phi_i^n + c\phi_{i-1}^n \tag{6}$$

c はクーラン数で, $c=u\Delta t/\Delta x$ である.変数 の右肩の添え字 n などはステップ数を示し,i は粒子番号を示す.

本研究では、水と気泡という密度差の大きい二つの流体を同時に解く必要があり、統一的な計算を行う上で、従来の方法では計算に不安定性が生じる為、流体の種類に応じて異なるパラメータを与え計算を行った。加えて、圧縮性を考慮する必要がある為、非圧縮性流体アルゴリズムである MPS 法を式(3)、(4) を用いて拡張することで、以下のポアソン方程式を支配方程式から導出し、ガウスの消去法を用いて解いた。

$$\left(\Delta t^{2} \nabla^{2} - \frac{1}{(\gamma - 1)p_{i}^{(*)}}\right) p_{i}^{(k+1)} \\
= \frac{n_{i}^{(*)} - n_{i}^{(k)}}{n_{i}^{(k)}} - \frac{1}{(\gamma - 1)} \tag{7}$$

 γ は比熱比, n_i は粒子i における粒子数密度である. 圧力と粒子数密度の添え字 (k) はステップ数を示し, (*) は半陰解法における陽解法のみの計算での仮粒子移動後を表す.

3 数值実験

本シミュレーションのパラメータは以下 Tab.1 の値を用いて計算を行った.

Tab. 1. Parameters of cavitating simulation

Particle distance	4.0 * 10-	4 [m]
Initial time step	1.0 * 10-	7 [s]
Water kinematic viscosity	8.04 * 10	$-7[m^2/s]$
Bubble kinematic viscosity	1.58 * 10	$-5[m^2/s]$
Water density	996.0	$\left[kg/m^{3}\right]$
Bubble density	1.16	$\left[kg/m^{3}\right]$
Water thermal conductivity	0.59	[W/mK]
Bubble thermal conductivity	0.024	[W/mK]
Temperature	300.0	[K]
Gas constant	461.70	[J/kg K]
Heat capacity ratio	1.40	[-]

固体壁近傍のキャビテーション気泡の振る舞いについてシミュレーションを行った。ここで,Rを気泡径,sを気泡中心から壁面の距離とし,気泡の径と中心から壁面の距離の比 $r=R/s=0.5\sim2.0$ で変化させた際の非球状収縮について,実験の結果と比較した。

実験結果について,富田ら [4] の研究結果を Fig.1 に示す.フレーム毎の時間間隔は $2[\mu s]$ であり,フレームの横長は 1.4[mm] である.

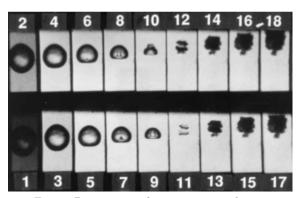
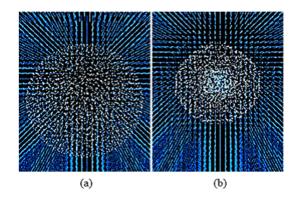


Fig. 1. Parameters of cavitating simulation

同様の条件で r=1.5 としたときの,シミュレーション結果を,気泡中心に縦方向に切断した断面図にて示す (Fig.2).なお,フレーム毎の時間間隔は $8[\mu s]$ で,上側が壁面である.



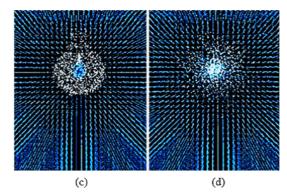


Fig. 2. Parameters of cavitating simulation

4 考察

Fig.1の実験結果とFig.2のシミュレーション結果を比較すると、非球状収縮の様子は概ね一致している。だたし、実験結果で気泡内部に侵入するマイクロジェットを、数値解では厳密に再現できず、これは気泡を構成する粒子数が少ないことが原因の一つとして考えられる。また、シミュレーションでは、気泡の形状変化が表れる前に、側面の境界に波が到達してしまい、周期境界条件によって干渉しあっている事が考えられ、今後改善が必要である。

5 結言

本稿では、固体壁近傍での気泡非球状変化について、粒子法を用いた数値シミュレーションを行い、実験結果と比較・考察した。粒子法を用いることで複雑な気泡表面の変化を表現することが可能であるものの、実験結果と比較すると、精度向上に改善の余地がある。発生したマイクロジェットについての考察も、今後の研究課題の一つである。

- [1] W. Lauterborn and H. Bolle, Journal of fluid mechanics, vol. 72, pp. 391-399 (1975).
- [2] J. Arai and S. Koshizuka, Japan society for computational engineering and science, vol. 2008, pp. 20080008, (2008).
- [3] Milton. S. Plesset and Richard. B. Chapman, Journal of fluid mechanics, vol. 47, part 2, pp. 283-290 (1971).
- [4] Y. Tomita and A. Shima, Acustica, 71, No.3, pp. 161171 (1990).

Stokes-Darcy 方程式に対する処罰法と不連続 Galerkin 近似

周 冠宇¹, 柏原 崇人², 及川 一誠³, Chung Eric⁴, Shiue Ming-Cheng⁵

¹ 東京理科大学, ² 東京大学, ³ 早稲田大学, ⁴The Chinese University of Hong Kong, ³National

Chiao Tung University

e-mail: zhoug@rs.tus.ac.jp

1 はじめに

領域 $\Omega^{\mathrm{S}} \subset \mathbb{R}^d$ (d=2,3) 上で Stokes 流れを 考えよう.

$$-\nabla \cdot \sigma(u^{S}, p^{S}) = f^{S} \qquad \text{in } \Omega^{S}, \qquad (1a)$$

$$\nabla \cdot u^{S} = 0$$
 in Ω^{S} , (1b)
 $u^{S} = 0$ on Γ^{S} (1c)

$$u^{\rm S} = 0$$
 on $\Gamma^{\rm S}$ (1c)

ここで、 (u^{S}, p^{S}) は Stokes 流れの流速と圧力, $\sigma(u^{\mathrm{S}}, p^{\mathrm{S}}) := -p^{\mathrm{S}}I + 2\nu \mathbb{E}(u^{\mathrm{S}}) \left(\mathbb{E}(v) := \frac{\nabla v + \nabla^{\top}v}{2}\right)$ は応力テンソルを表す。 f^{S} は外力、 ν は粘性係 数である。一部の境界 $\Gamma^{S} \subset \partial \Omega^{S}$ で、Dirichlet 境界条件 (1c) を課し、残りの境界 $\Gamma := \partial \Omega^{S} \backslash \Gamma^{S}$ は Darcy 領域 Ω^{D} の境界となり ($\partial\Omega^{\mathrm{D}} = \Gamma$, 図 1), インタフェース境界条件 (3) を課す.

Darcy の法則によって、 Ω^{D} 上の流速 u^{D} と 圧力 p^D は次の方程式を満たす.

$$\nabla \cdot u^{\mathcal{D}} = g^{\mathcal{D}} \qquad \text{in } \Omega^{\mathcal{D}}, \qquad (2a)$$

$$u^{\rm D} = -K\nabla p^{\rm D}$$
 in $\Omega^{\rm D}$, (2b)

ここで、外力 g^D は $\int_{O^D} g \ dx = 0$ を満たし、 $K \in \mathbb{R}^{d \times d}$ は正定値対角行列である.

さらに、Γで次のBeavers-Joseph-Saffmanの インタフェース境界条件を課す.

$$u^{S} \cdot n^{SD} + u^{D} \cdot n^{DS} = 0, \tag{3a}$$

$$-\tau_n(u^{\mathcal{S}}, p^{\mathcal{S}}) = p^{\mathcal{D}},\tag{3b}$$

$$-\tau_T(u^{S}) = \alpha \nu^{-\frac{1}{2}} K^{\frac{1}{2}} u_T^{S} \qquad (3c)$$

ここで、 $\alpha > 0$ は定数、 n^{SD} は Γ 上の Ω^{D} 向き 単位法線ベクトルである.

$$\tau_n(u^{\mathrm{S}}, p^{\mathrm{S}}) := \sigma(u^{\mathrm{S}}, p^{\mathrm{S}}) n^{\mathrm{SD}} \cdot n^{\mathrm{SD}},$$

$$\tau_T(u^{\mathrm{S}}) := \sigma(u^{\mathrm{S}}, p^{\mathrm{S}}) n^{\mathrm{SD}} - \tau_n(u^{\mathrm{S}}, p^{\mathrm{S}}) n^{\mathrm{SD}}$$

は応力ベクトルの法線成分と接線成分、 $u_T^S :=$ $u^{S} - u^{S} \cdot n^{SD} n^{SD}$ は流速 u^{S} の接線成分を表す.

上のStokes-Darcy 方程式に対して、様々な数 値方法が提案されている. Lagrange multiplier を導入して、インタフェース境界条件 (3a) を

次の弱形式に変形し、離散化を行うのは一つの 代表的な手法である [3].

$$\langle u^{\mathbf{S}} \cdot n^{\mathbf{SD}} + u^{\mathbf{D}} \cdot n^{\mathbf{DS}}, \mu \rangle = 0 \quad \forall \mu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$$
 (4)

 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は $H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma)$ と $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$ の dual-product を表 す.しかし、(4)について良い離散化式の提案 と誤差解析は容易ではない。既存の方法では, Stokes と Darcy の流速が異なる有限要素を利 用するので、Lagrange multiplier と試験関数 μ の有限要素を適当に選ばないと数値スキームの 妥当性を失う恐れがある。しかも、ほんとんど の先行研究は折れ線のインタフェース境界を扱 い、滑らかなΓについて解析理論は非常に乏し い. もう一つの広く応用される方法は domain decomposition 法であり、Γで適当な境界条件 を加えて、領域 Ω^{S} と Ω^{D} 上で Stokes と Darcy の流れを別々で計算し、反復法によって、(3)を 満たす解に収束することが示された。ただし、 収束条件は加えた境界条件とパラメータに依存 する [1]. 方程式 (2) を圧力の楕円型方程式に変 形して, (1)-(3) と同値する問題を解く方法も 提案されている[2].

本研究では、インタフェース境界条件(3a)に 対して,Lagrange multiplier 不要な手法,処 罰法を提案し, 収束性と処罰パラメータの関係 を調べる。 さらに、有限要素法を処罰問題に適 用し、離散化スキームの安定性と誤差評価を考 察する。我々は流速・圧力に対して、全体の領 域 $\Omega := \Omega^S \cup \Omega^S \cup \Gamma$ で有限要素空間を考え る. 圧力と接線流速は Γ 上で不連続であるた め、DG法を用いて離散化を行う。境界に適合 する三角形メッシュ分割によって、滑らかな Γ は折れ線・多面体の表面 Γ_h によって近似する. そのため、数値スキームは連続の法線方向 n^{SD} を使用せず、 Γ_h 上の非連続的な法線方向 n_h を 採用する。この領域・境界・法線方向の摂動に よって生じる誤差について、2次元と3次元の 場合に分けて、最適な誤差評価が得られた。

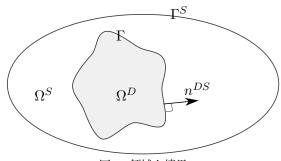


図 1. 領域と境界

2 処罰法

次の関数空間と記号を導入しておこう.

$$X = \{ v = (v^{S}, v^{D}) \mid v^{S} \in H^{1}(\Omega^{S})^{d},$$

 $v^{S}|_{\Gamma^{S}} = 0, \ v^{D} \in H(\text{div}; \Omega^{D}) \}$

$$M = \{q = (q^{\mathbf{S}}, q^{\mathbf{D}}) \mid q^{\mathbf{i}} \in L^2(\Omega^{\mathbf{i}}), \ \mathbf{i} = \mathbf{S}, \ \mathbf{D}\}$$
$$\llbracket v \rrbracket_{\Gamma} := v^{\mathbf{S}} \cdot n^{\mathbf{SD}} + v^{\mathbf{D}} \cdot n^{\mathbf{DS}}$$

は Γ 上でvの法線成分のジャンプを表す.

$$\tilde{X} := \{ v \in X \mid \llbracket v \rrbracket_{\Gamma} \in L^2(\Gamma) \}$$

 $(\cdot,\cdot)_{\omega}$ は $L^{2}(\omega)$ の内積を表し、次の双線型形式を定義する。任意の $u,v\in X,p\in M$ に対して、

$$a(u,v) := 2\nu(\mathbb{E}(u^{\mathcal{S}}), \mathbb{E}(v^{\mathcal{S}}))_{\Omega^{\mathcal{S}}} + (K^{-1}u^{\mathcal{D}}, v^{\mathcal{D}})_{\Omega^{\mathcal{D}}}$$
$$+ \alpha\nu^{-1}(K^{\frac{1}{2}}u_{\varepsilon T}^{\mathcal{S}}, v_{T}^{\mathcal{S}})_{\Gamma},$$

$$b(v, p) := -(\nabla \cdot v^{\mathbf{S}}, p^{\mathbf{S}})_{\Omega^{\mathbf{S}}} - (\nabla \cdot v^{\mathbf{D}}, p^{\mathbf{D}})_{\Omega^{\mathbf{D}}}.$$

処罰パラメータ ε $(0<\varepsilon\ll 1)$ を導入し、次の処罰問題を考えよう。 $(u_{\varepsilon},p_{\varepsilon})\in \tilde{X}\times M$ は処罰問題の流速と圧力として、次の方程式を満たす。

$$a(u_{\varepsilon}, v) + b(v, p_{\varepsilon}) + \varepsilon^{-1}(\llbracket u_{\varepsilon} \rrbracket_{\Gamma}, \llbracket v \rrbracket_{\Gamma})_{\Gamma}$$

= $(f^{S}, v)_{OS} \quad \forall v \in \tilde{X},$ (5a)

$$b(u_{\varepsilon}, q) = (g^{\mathcal{D}}, q)_{\Omega^{\mathcal{D}}} \quad \forall q \in M,$$
 (5b)

上式に $v = u_{\varepsilon}$ を代入して、強圧性 (Korn の不等式) により、流速 u_{ε} の安定性が得られる.

$$||u_{\varepsilon}^{\mathbf{S}}||_{H^{1}(\Omega^{\mathbf{S}})} + ||u_{\varepsilon}^{\mathbf{D}}||_{L^{2}(\Omega^{\mathbf{D}})} + \varepsilon^{-1}||[u_{\varepsilon}]|_{\Gamma}||_{L^{2}(\Gamma)} \leq C_{f^{\mathbf{S}},g^{\mathbf{D}}}.$$
(6)

したがって、 $\varepsilon \to 0$ のとき、 $[u_{\varepsilon}]_{\Gamma} \leq C\sqrt{\varepsilon} \to 0$. つまり、 Γ 上で流速 u_{ε} の法線成分のジャンプが 0 に収束し、 $(u_{\varepsilon}, p_{\varepsilon})$ は Stokes-Darcy 方程式(1)-(3) の解 (u, p) に収束する. 一方で、処罰問題の強解 $(u_{\varepsilon}, p_{\varepsilon})$ は Γ 上で次の Robin 型境界条件を満たす。

$$-\tau_n(u_{\varepsilon}^{\mathrm{S}}, p_{\varepsilon}^{\mathrm{S}}) = \varepsilon^{-1} \llbracket u_{\varepsilon} \rrbracket_{\Gamma}, \tag{7a}$$

$$-\tau_n(u_{\varepsilon}^{\mathrm{S}}, p_{\varepsilon}^{\mathrm{S}}) = p_{\varepsilon}^{\mathrm{D}},\tag{7b}$$

$$-\tau_T(u_{\varepsilon}^{S}) = \alpha \nu^{-\frac{1}{2}} K^{\frac{1}{2}} u_{\varepsilon T}^{S}$$
 (7c)

(7a) と inf-sup 定理によって, $\|p_{\varepsilon}\| \leq O(\varepsilon^{-\alpha})$ ($\alpha > 0$). 要するに,処罰パラメータ ε が小さくすると,圧力の安定性が失う可能性がある. 実は,次の安定性定理が示された.

定理 1 $f^S \in (H^1(\Omega^S)^d)', g^D \in L^2(\Omega^D)$ とする. 処罰問題 (5) は well-posed であり、 $(u_{\varepsilon}, p_{\varepsilon})$ が次の評価を満たす.

$$||u_{\varepsilon}^{S}||_{H^{1}(\Omega^{S})} + ||u_{\varepsilon}^{D}||_{L^{2}(\Omega^{D})} + ||p_{\varepsilon}||_{L^{2}(\Omega)} + \varepsilon^{-1}||[u_{\varepsilon}]|_{\Gamma}||_{L^{2}(\Gamma)} \le C_{f^{S}, q^{D}}.$$

$$(8)$$

処罰法の収束性について,次の誤差評価が得られた.

定理 2 Stokes-Darcy 方程式 (1)-(3) の解 (u,p) が次の正則性を満たすと仮定する.

$$u^D \cdot n^{DS} \in L^2(\Gamma), \quad \tau_n(u^S, p^S) = p^D \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$$
 このとき,

$$||u_{\varepsilon}^{S} - u^{S}||_{H^{1}(\Omega^{S})} + ||u_{\varepsilon}^{D} - u^{D}||_{L^{2}(\Omega^{D})} \le C\varepsilon,$$

$$||p_{\varepsilon}^{i} - p^{i}||_{L^{2}(\Omega^{i})/\mathbb{R}} \le C\varepsilon, \quad i = S, D.$$

3 不連続 Galerkin 近似

(講演スライドを参照.)

- [1] Y. Cao, M. Gunzburger, X. He and X. Wang, Robin-Robin domain decomposition methods for the steady-state Stokes-Darcy system with the Beavers-Joseph interface condition, Numer. Math., 117. (2011), 601–629.
- [2] V. Girault and B. Rivière, DG approximation of coupled Navier-Stokes and Darcy equations by Beaver-Joseph-Saffman interface condition, SIAM J. Numer. Anal., 47. (2009), 2052–2089
- [3] D. Vassilev and I. Yotov, Coupling Stokes-Darcy flow with transport, SIAM J. Sci. Comput., 31. (2009), 3661–3684.

べき型の非線形性を持つ確率微分方程式の爆発解の数値解析

〇梁 英哲 1 , 石渡 哲哉 2

1 芝浦工業大学大学院 理工学研究科 修士 2 年, 2 芝浦工業大学 システム理工学部

e-mail: mf17072@shibaura-it.ac.jp

1 概要

べき型の非線形性をもつ確率微分方程式の爆発問題と、その数値解法を考える.

$$dX(t) = aX(t)^{p}dt + X^{q}dW(t).$$
 (1)

ここで, p > 1, q > 0, $\alpha > 0$ とする. 方程式 (1) はある臨界指数より大きい場合は, 確率 1 で爆発解を持つことが知られている [1].

本研究では、未解決であった臨界の場合に特定の条件下での確率1での解の爆発を示し、爆発解にBrown運動を用いた表現を与えた.具体的な解を得ることで、爆発時刻をあるサンプルに依らない値を用いて特徴付けることができた.また、方程式(1)に対する数値スキームを提案し、数値実験において上記の特徴づけの有効性を確認できた.

2 べき型の SDE に対する数理解析

(1) は、一次元伊藤型確率微分方程式である. [1], [2] によると p>2q-1 (優臨界) が成り立つとき、X(t) は確率 1 で爆発解となることが述べられている. p<2q-1 (劣臨界) の場合の結果はなく、数値的には爆発は起こり得ないと予想される.

2.1 臨界のときの爆発解について

臨界の場合, 次の条件 (A) を仮定すると以下 の定理が成り立つ.

条件(A)

$$p = 2q - 1, \quad \alpha = \frac{q}{2}.$$

Theorem 1 条件 (A) を仮定すると, べき型確率微分方程式 (1) は確率 1 で爆発解を持ち, 解は以下のように書き下すことができる.

$$X(t) = \left(\frac{X_0^\lambda}{1 - \lambda X_0^\lambda W(t)}\right)^{1/\lambda}, \quad \lambda = q - 1 (>0).$$

また、 $M:=1/\lambda\beta X_0^\lambda$ とすると、解は時刻 $T_\omega:=\inf_t\{\omega\in\Omega\mid W(t)>M\}$ で発散する. T_ω

は Brown 運動の M への初到達時刻であり、確率 1 で有限であることが知られている. よって、X(t) は確率 1 で爆発解となる.

3 数值解析

ODE の爆発解の簡単な例として以下を挙げる.

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt}(t) = X^p(t), \\ X(0) = \alpha > 0. \end{cases}$$
 (2)

(2) を陽的オイラー法で離散化する. 離散化した時刻 t_n における $X(t_n)$ の近似値を X_n と置き, 小区間の幅 $h_n := t_n - t_{n-1}$ を任意の正定数 τ を用いて $h_n := \tau/|X_n|^{p-1}$ とするとスキームは以下のようになる.

$$X_{n+1} = X_n + h_n X_n^p \tag{3}$$

このとき, 数値解の発散: $\lim_{n\to\infty} X_n = \infty$ および, 数値爆発時間の有限性: $T_{\tau} = \lim_{n\to\infty} t_n < \infty$ が示され, 有限時間爆発を数値計算によって再現することができる.

この方法を確率微分方程式へ適用する.Brown 運動の増分は独立標準正規乱数列 ξ_i を用いて, $\Delta W_n = \sqrt{h_k} \xi_n$ と近似する. 確率微分方程式の離散化には以下の Euler-Maruyama Scheme を用いる.

$$X_{n+1} = X_n + f(t_n, X_n)h_n + g(t_n, X_n)\Delta W_n.$$

3.1 Groisman-Rossi の方法 (p 乗の方法)

可変刻み幅を用いた確率微分方程式の数値計算方法は(P.Groisman, J.D.Rossi et al, 2005, [1])の先行研究による結果が存在する. (1) に対して刻み幅を $h_n = \tau/|X_n|^p$ ととる以下のスキームが提案されている.

$$X_{n+1} = X_n + \alpha X_n^p \frac{\tau}{|X_n|^p} + X_n^q \Delta W_n, \quad (4)$$

3.2 提案の方法 (p-1乗の方法)

本研究においては、ODE と同じく刻み幅に $h_n = \tau/|X_n|^{p-1}$ を用いる.このとき、スキームは以下の様になる.

$$X_{n+1} = X_n + \alpha X_n^p \frac{\tau}{|X_n|^{p-1}} + X_n^q \Delta W_n.$$
 (5)

[1] において, p 乗の方法における数値解の線形増大性が示されている. これに比べて, p-1 乗の方法における数値解は等比数列的な増大が予想されるので,(4) に比べ計算コストの縮小が期待できる. また, 数値爆発時刻の有限性に関して以下の定理を示した.

Theorem 2 (数値爆発時刻の有限性) ある, $\gamma > 1$ が存在して、 $\limsup_{n \to \infty} \frac{\gamma^n}{X_n} < \infty$ ならば、 $T_\tau := \sum_{i=1}^\infty h_i < \infty$ が成り立つ.

Proposition 3 (数値解の発散)

臨界 (p = 2q - 1) の場合, 提案の方法における数値解 X_n は, 指数オーダーで発散する.

よって、Theorem 2と合わせて臨界の場合の数値解の有限時間爆発が得られる.

4 数值実験結果

p-1乗の方法を用いて数値実験を行った. テスト方程式は $X(t)=X^3(t)dt+X^2(t)dW(t),$ $X_0=1$ を用い, 数値パラメータは $\tau=10^{-6}$ とした.

p=3のとき、条件 (A) より M=1 となるので W(t) の 1 への初到達時刻が真の爆発時刻となる。また、数値計算では数値解が $X_n>1000$ となった最初の時刻を数値爆発時刻とする。下図は、4 本の数値解と近似 Brown 運動 W_n をそれぞれプロットしたものである。

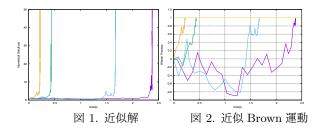


図.1 より、解の爆発が数値計算によって再現され、図.2 より数値爆発時刻において W_n が M=1 へ収束するような挙動が確認できた.

表 1. 数値爆発時刻と近似 Brown 運動

Sample No.	$T_{ au}$	W_n
1	2.381679	0.994899
2	0.439451	1.003542
3	1.670763	1.012586
4	0.221565	0.999176

次に、サンプル数を N=1000 とし、 $X_n>L$ となった最初の時刻を数値爆発時刻 T_τ とする、 $L=10^k$ とおき、k を段階的に大きくとると、 T_τ における W_n の平均値が M に収束をしているような挙動が見て取れた、実験結果は講演にて詳しく述べる。

5 まとめと今後の課題

数値実験によってべき型確率微分方程式の爆発時刻の, *M* を用いた特徴づけの有効性を確認し以下の予想を得た.

予想 4 (数値爆発時刻の収束性)

L>0 に対して、計算終了条件を $X_n>L$ と 設定する. このとき、 $|W_n-M|\to 0$ $(\tau\searrow 0, L\nearrow\infty)$ が成り立つ.

また,このほかに数値解の正値性に対する考察や,既存の方法との数値計算コストの比較に対する数値実験を行なったので講演にて結果を報告する.

主結果

- 条件(A)の下での爆発解の導出および M
 を用いた爆発時刻の特徴付けの提案.
- 数値実験を用いた, 提案の方法における 爆発時刻の特徴付けの有効性の確認.
- 数値解の有限時間爆発の証明.

- P. Groisman, J. D. Rossi. Numerical analysis of Stochastic differential equations with explosions, Stocha analysis and applications, 23, 809-825, 2005
- [2] P. Groisman, J. D. Rossi. Explosion time in stochastic differntial equations with small diffusion. Electoric journal of differential equations, Vol 2007(2007), No. 140, pp1-9

ドロネー分割と階層的クラスタリングに基づく サッカートラッキングデータの解析

成塚 拓真 1*, 山崎 義弘 2†

1 中央大学 理工学部, 2 早稲田大学 先進理工学部

e-mail: *narizuka@phys.chuo-u.ac.jp, †yoshy@waseda.jp

1 はじめに

サッカー、バスケットボール、バレーボール、 ラグビー、ホッケーといった対戦型集団スポー ツは、共通して、有限のフィールドで特定の時 間内に、構成要素である選手が二つの部分系に 分かれて競合している系と見なすことができる。 選手はルールに従って、環境の影響や対戦相手 の予期せぬ動きなどの不確定な要因を伴いなが ら、ある目的を実現しようと運動する。そして、 世界中様々な場所で異なる構成要素によって、 こうした系が多数実現していると考えれば、対 戦型集団スポーツから試合やチームの詳細に依 らない再現性ある共通の構造を抽出できるので はないかと期待できる。本発表では、対戦型集 団スポーツの代表例ともいえるサッカーに着目 し、特に、チームのフォーメーション形成につ いての解析結果を報告する [1]。

サッカーでは一般に、フォーメーションを「4-4-2 や [3-5-2] といった数列で表すこと が多い(それぞれの数字は「DFの数 -MFの 数 -FW の数」を表している)。このような数 列による表記は各チームの大まかな特徴を表す には便利であろう。しかしながら、試合中の局 面(攻撃時や守備時など)と選手の役割・配置 変化を考える際には、簡単すぎるように思われ る。これまでに、フォーメーションをより詳し く解析するため、いくつかの手法が提案されて きた。例えば、重心系におけるヒートマップを 基にした方法が提案されている [2]。この手法 は、フォーメーションという漠然とした概念を 定量化する上で有用である。しかし、ある時間 間隔での平均位置を基にした手法であるため、 フォーメーションの数秒単位での時間変化や異 なる時刻間のフォーメーションを比較するのは 難しい。そこで本発表では、ドロネー分割に基 づく新たなフォーメーションの解析手法を提案 する。なお、本稿に示した結果は、データスタ ジアム社から提供いただいた 2016 年度 J1 リー グ 1st ステージ 第1節 「磐田 vs 名古屋」のト ラッキングデータを用いて得られたものである。

2 ドロネー分割に基づく フォーメーションの定義

先ず、フォーメーションを選手どうしの相対的な位置関係と捉える。そして、各選手に対して 2次元平面上の特定の領域を「支配領域」として割り当て、その領域の隣接関係を基にしてフォーメーションを定義する。支配領域には様々な定義が考えられるが、ここでは各選手をノードとしたボロノイ領域を用いる [3]。これにより、ボロノイ領域の隣接関係はドロネー分割によって与えられる。特に、任意のノード同士のボロノイ領域が隣接する場合に 1、隣接しない場合に 0 を割り当てることにより、フォーメーションは隣接行列 A によって表される。

このように、フォーメーションを隣接行列によって定義すると、フォーメーションの時間変化や異なる時刻間での定量的な比較が可能となる。実際、例えばP人で構成された系を考え、時刻t、t'における隣接行列A(t)、A(t')に対して、それらの非類似度 $D_{tt'}$ を

$$D_{tt'} = \sum_{j=1}^{P} \sum_{k=1}^{P} \left[A_{jk}(t) - A_{jk}(t') \right]^2$$
 (1)

とする。このとき、 $D_{tt'}$ が小さいほど類似したフォーメーションといえる。実際、図 1 は $D_{tt'}=0$ となる二つの時刻のフォーメーションであるが、各選手の相対的な位置関係は全く同じであることが確認できる。また、このときのチームの広がり(慣性半径)は二つの時刻で全く異なることから、本手法により、各チームの慣性半径に依らず、選手同士の相対的な位置関係だけを抽出することができる。

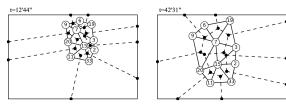


図 1. $D_{tt'}=0$ となる異なる 2 つの時刻におけるフォーメーション

3 階層的クラスタリングの適用

上記のように定義したフォーメーションに対して、次の手順 $(1)\sim(5)$ で階層的クラスタリングによるフォーメーションの分類を行う。先ず、(1) 数秒ごとにドロネー分割を行い、(2) 式 (1) の $D_{tt'}$ を要素とする非類似度行列 D を用いて、Ward 法による階層的クラスタリングを実施する。その結果、図 2(a) のようなデンドログラムが得られる。そして、(3) 特定の数 $(N_c$ 個)のクラスターを抽出するため、エルボー法によりデンドログラムをある高さ h_c でカットする(図 2(b))。このようにして、様々な時刻のドロネー分割(フォーメーション)を含む N_c 個のクラスターが得られる。

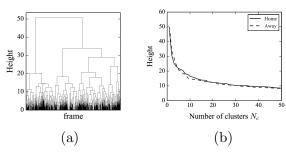


図 2. 名古屋(前半データ)のクラスタリング結果。(a) デンドログラム、(b) クラスター併合距離とクラスター 数の関係。

同一のクラスター内には類似したフォーメーションが含まれることになることから、(4)クラスター内の全てのドロネー分割を慣性半径で規格化した上で重心系に変換し、さらに、(5)各選手の平均位置からの標準偏差によってポジションを可視化する(図3)。図3はサイズの大きい上位3クラスターまでを示しており、試合中に頻繁に現れるフォーメーションを可視化した図となっている。この図から、各クラスター(フォーメーション)の違いが主に中央に位置する2選手の位置の入れ替わりに対応していることが確認できる。

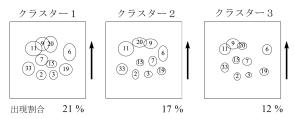


図 3. 名古屋(前半データ)のクラスタリング結果。サイズの大きい上位3クラスター(矢印は攻撃方向、番号は各選手の背番号)。

4 さいごに

本研究では、フォーメーションという概念を ドロネー分割の隣接行列によって明確に定義し た。具体的な応用例として、階層的クラスタリ ングによるフォーメーションの分類結果につい て述べたが、今後、クラスター間の相関構造や ネットワーク解析などを行うことによって試合 の局面変化などの動的な性質を定量化できる可 能性がある。本手法がチームスポーツの集団運 動を特徴付ける上での基礎的な方法論となるこ とを期待している。

謝辞 本研究で用いたデータを提供していただいたデータスタジアム株式会社様に深く感謝致します。本研究は情報・システム研究機構の新領域融合研究プロジェクト「社会コミュニケーション」データ中心科学リサーチコモンズ事業「人間・社会データ」の支援を受けたものです。

- [1] 成塚拓真, 山崎義弘, ドロネー分割と階層的クラスタリングを用いた集団スポーツにおけるフォーメーション解析手法の提案, 統計数理 (特集「スポーツ統計科学の新たな挑戦」), 65巻 (2017), 299-307.
- [2] A. Bialkowski, P. Lucey, P. Carr, Y. Yue, S. Sridharan, and I. Matthews, Large-Scale Analysis of Soccer Matches using Spatiotemporal Tracking Data, in: 2014 IEEE International Conference on Data Mining, pp. 725-730, 2014.
- [3] 杉原厚吉, 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.

構造情報処理の厳密性を保証する近似図形処理フレームワーク

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 概要

図形処理を構造に関する情報処理に特化することで,近似アルゴリズムで厳密性を保証できることを示す.この図形処理フレームワークで,厳密性を確保したまま,アルゴリズム構築の容易性と比較的な高速性を確保できる.

2 構造情報と計量情報

計算機で保持される幾何情報は、面や辺の数、 それらの隣接・接続情報といった構造にかかわ る情報(構造情報)と辺の長さや角の大きさと いった寸法にかかわる情報(計量情報)に分か れる. 大雑把に言って, 幾何情報のうち離散値 を持つのが構造情報、連続値を持つのが計量情 報である[1]. 計量情報と構造情報では,構造 情報が先である。例えば辺なら、それがあるこ とが分かって初めてその長さが意味を持つから である。効率的な算法は、不要な計算を省くこ とで達成される. 一般的に, 近似をしたら近似 解しか得られないという常識がある. しかし構 造情報は離散値をとる. したがって、近似算法 でも構造情報なら厳密解が得られる可能性があ る. 厳密な構造情報が得られてから、計量情報 は必要な精度で計算すればよい.

本研究においては幾何処理の分野で近似算法により厳密解を求める処理の枠組みを作りを目指している。ここでは、生成元が線分や円の勢力圏図構成を点列で近似した勢力圏図構成算法で厳密解を求める方法を例にその枠組みを示し、それを一般化する。

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.

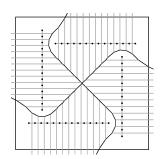


図 1. 一様近似による勢力圏図

例えば図1くらいの点の数でも中央部分で領域の隣接関係が正しくない. 構造情報を厳密に求めるだけなら多くの部分で粗い近似をする. 詳細な近似が必要なのは, 図形のごく一部の, 構造情報の決定が困難な場合に限られる. 詳細な近似が必要な部分が少ないため高速性の確保が期待できる. これが本研究の特色となっている.

- 3 本研究の枠組みとしての基本算法 構成算法の基本的な形は、次のとおりである。
 - 0. 初期近似をする
 - 1. 構造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.

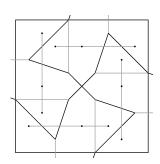


図 2. 構造的に正しい勢力圏図

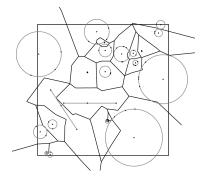


図 3. 円と線分の勢力圏

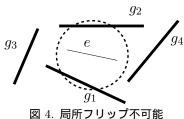
初期近似においては、線分や円を数点で近似する. 構造情報の正しさは、現在得られている領域の境界辺が、すべて局所的に存在するといえるか判定して調べる. 存在するといえないときに、判定に影響するところに点を付加する. 局所的に存在すると全域でいえれば構造情報は

正しい. 図1に対して,図2の点数で正しい構造情報が得られる.

円と線分の勢力圏分割も基本的に同様に得られる(図3,無限に伸びる辺を省略).

4 構造的に正しいことの確認と局所的高 精度化

構造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,円の勢力圏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4).



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 のみで勢力圏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、この勢力圏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勢力圏図であることは同値である」 [2] ことを利用する.点列で近似した勢力圏図の境界辺 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

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.追加はこの4点のみで,局所的に精度を上げたことになる.原理的には,厳密に求めた勢力圏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.

可能である.

5 勢力圏での汎用性への課題

円や線分の勢力圏図を,点の勢力圏図構成ア ルゴリズムを近似アルゴリズムとして用いる利 点のひとつは、厳密構成アルゴリズムを新規に 考案するのに比べて容易なことにある.現状で は,円や線分と空円の交差判定や,追加のため の射影点を求めることは, 円と線分で別処理に なる.アルゴリズムの新規考案より容易ではあ るが、汎用的な図形処理のフレームワークの観 点からは,別処理は少ない方がよい.勢力圏分 割の生成元の一般化としては,自由曲線として Bezier 曲線の扱いに取り組んでいるが , Bezier 曲線は線分を含むので,線分を別処理しなくて 済む、円も含むよう NURBS 曲線での統一的 な扱いも検討中である.これらの統一的な処理 は,空円と曲線の交差判定と局所的な高精度化 の2問題からなるが、この部分にも本研究の、 構造情報が厳密な近似処理が有効であることが 分かってきている . ただし , 円や線分に特化し た場合に比べて,速度的には劣り,トレードオ フが発生する.

6 図形処理の枠組みとしてのまとめ

本手法を図形処理の枠組みとしてとらえた場合,次の4条件が満たされていればよい.

- (1) 近似アルゴリズムとなる基本図形に対するアルゴリズムがある.
- (2) 局所的な構造情報のチェックが存在し,局所的に構造が正しい,正しくない,わからないと判定できる.
- (3) 局所的構造が正しいことが全域で成立したら全域で構造情報が正しいといえる.
- (4) 局所的に構造が正しいかわからないときに , 高精度化の方法が存在する .

常にこのような条件が満たされるとは限らないが,この観点から図形処理を見直すと広範囲で適用可能なものが見いだされると予想している.

本研究の一部は科学研究費補助金による.

- [1] 杉原厚吉, 計算幾何学, 朝倉書店, 2013.
- [2] 今井敏行, 渡辺秀臣, 点 Voronoi 図による 線分 Voronoi 図の位相的に正しい近似構 成法, 日本応用数理学会 2005 年度年会講 演予稿集 (2005), 206-207.

IMEX RK 法の絶対安定領域の描画法

大野 博1

1 茨城大学

e-mail: hiroshi.ono.siam@vc.ibaraki.ac.jp

1 はじめに

常微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}(t)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t)) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}(t)), \\ \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0, \quad t \in [t_0, T] \end{cases}$$
(1)

の数値解法を考える. ただし, 関数 f(y) と g(y) は, $\mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ という写像で必要な所まで滑らかとする. f は non-stiff , g は stiff 部分を表す. このような微分方程式系の多くは, 偏微分方程式を空間方向について離散化し, 時間方向の常微分方程式に変換したときに現れる [4].

研究の背景を説明するために次の定義 1 を与える.

定義 1 3 つの数字の組 (\hat{s}, \bar{s}, p) を次のように 定義する. \hat{s} は陰的解法部分の段数, \bar{s} は陽的解法部分の段数, \bar{s} は陽的解法部分の段数, p は数値解法全体の次数を表す.

1997 年から、IMEX RK 法 (implicit-explicit Runge-Kutta methods) の陰的解法部分が A-安定やL-安定性をもつ公式が提案された. U.Ascher らが、forward Euler 法と backward Euler 法を組み合わせた forward-backward Euler(1,1,1) 公式や修正オイラー法と 1 段 midpoint 公式を組み合わせた IMEX-midpoint(1,2,2) 公式などを提案した [1]. S.Boscarino らは、implicitly stiffly accurate(ISA) や globally stiffly accurate(GSA) な (4,4,2) 公式と (4,5,2) 公式と (7,8,3) 公式を提案した [2]. G.Izzo らは、A-安定や L-安定な (6,6,3) 公式と (8,8,4) 公式を提案した [4].

2 IMEX RK法

N を自然数, ステップ幅を $h=(T-t_0)/N$ としたとき, 各時刻は $t_i=t_0+ih,\ i=0,1,\cdots,N$ とかける. s 段 IMEX RK 法は次のように定義

する [2, 4].

$$Y_{i} = \mathbf{y}_{n} + h \sum_{j=1}^{i-1} \overline{a}_{ij} F_{j} + h \sum_{j=1}^{i} a_{ij} G_{j},$$

$$i = 1, 2, \cdots, s \qquad (2)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_{n} + h \sum_{j=1}^{s} \overline{b}_{j} F_{j} + h \sum_{j=1}^{s} b_{j} G_{j}.$$

ただし, $F_j = \boldsymbol{f}(Y_j)$, $G_j = \boldsymbol{g}(Y_j)$ とする [2, 3, 4].

3 IMEX RK 法の絶対安定領域

テスト方程式を次のようにする.

$$y' = \lambda_0 y + \lambda_1 y, \quad \lambda_0, \ \lambda_1 \in \mathbb{C}.$$
 (3)

上記のテスト方程式を(2) に適用すると,次の安定性関数 $R(z_0, z_1)$ が得られる.

$$y_{n+1} = R(z_0, z_1)y_n.$$
 (4)

$$R(z_0, z_1)$$

$$= 1 + (z_0 \overline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}} + z_1 \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}) (\mathbf{I} - z_0 \overline{A} - z_1 A)^{-1} \mathbf{e}$$

$$= \frac{P(z_0, z_1)}{(1 - \lambda z_1)^s}.$$

ただし, $P(z_0, z_1)$ は z_0 と z_1 の多項式である. $z_0 = h\lambda_0$, $z_1 = h\lambda_1$ である. 上記の安定性関数から IMEX RK 法の絶対安定領域が定義できる.

定義 2 *IMEX RK* 法の絶対安定領域を次のように定義する.

$$\mathcal{A} = \{(z_0, z_1) \in \mathbb{C}^2 : |R(z_0, z_1)| \le 1\}.$$

陰的部分の絶対安定領域を A-安定や L-安定に 固定して, 陽的部分の絶対安定領域を見るため に, 次の定義を与える.

定義 3 次の領域 S が空集合でない $IMEX\ RK$ 法を A-安定な $IMEX\ RK$ 法とよぶ.

$$S = \left\{ z_0 \in \mathbb{C} : |R(z_0, z_1)| \le 1 \text{ for } \forall z_1 \in \mathbb{C}^- \right\}.$$

また、A-安定な $IMEX\ RK$ 法に次の条件を付け加えたものを、L-安定な $IMEX\ RK$ 法とよぶ.

$$\lim_{\Re(z_1) \le 0, |z_1| \to \infty} |R(z_0, z_1)| = 0.$$

4 絶対安定領域の極座標表示

4.1 (1,1,1) IMEX RK 公式

L-安定な (1,1,1) IMEX RK 公式

$$\begin{aligned} Y_1 &=& \boldsymbol{y}_n + h\lambda \boldsymbol{g}(Y_1) \\ \boldsymbol{y}_{n+1} &=& \boldsymbol{y}_n + h(\boldsymbol{f}(Y_1) + \boldsymbol{g}(Y_1)) \end{aligned}$$

について考える. この絶対安定領域 $\mathcal S$ の境界線は, $-1+\rho\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},\,\theta\in[-\pi,\pi)$ とかける [5]. ただし, ρ は

$$\rho = \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{(1-\lambda)^2}{2\lambda - 1}\sin^2\theta}}.$$

である. この曲線は, 楕円に類似した形をしていることが分かる. 楕円の離心率に相当するところが $(1-\lambda)^2/(2\lambda-1)$ となる. 離心率は [0,1) をとなるが, この境界線では, $[0,\infty)$ となる. また, 楕円の $\cos\theta$ に相当するところが $\sin^2\theta$ となっている. この境界線を図1にいくつか描いてみる. 図1より, $\lambda=1/2$ のときは

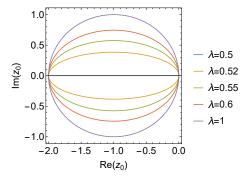


図 1. $\lambda = 0.5 \sim 1$ の安定領域

実軸上の長さ2の線分となる。また、 $\lambda = 1$ のとき安定領域は最大になり、その境界線は円となる。

4.2 (1,2,2) IMEX RK 公式

A-安定な (1,2,2) IMEX RK 公式

$$egin{array}{lcl} Y_1 & = & m{y}_n \ Y_2 & = & m{y}_n + rac{h}{2}(m{f}(Y_1) + m{Y_2}) \ m{y}_{n+1} & = & m{y}_n + h(m{f}(Y_2) + m{g}(Y_2)) \end{array}$$

について考える. この絶対安定領域 $\mathcal S$ の境界線は, $-1+\rho \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}, \, \theta \in [-\pi,\pi)$ とかける [5]. ただし, $\rho=1/|\cos\theta|$ である. 図 2 にこの安定領域を描く.

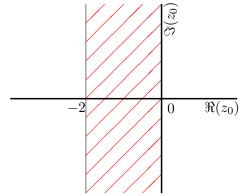


図 2. (1,2,2) IMEX RK の安定領域

5 さらなる安定領域にいて

Mathematica のバージョン 11.0 で s=4 まで安定領域を描けたが, バージョン 11.3 でどこまで描けるか確かめる.

謝辞 茨城大学には、この研究をするために必要な文献を提供してもらい、Mathematica を使わせてもらったことに感謝する.

- [1] U.Ascher, S.Ruuth, B.Wetton: Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential euations, Appl. Numer. Math. 25 (1997), 151–167.
- [2] S.Boscarino, L.Pareschi: On the asymptotic properties of IMEX Runge-Kutta schemes for hyperbolic balance laws, J. Comp. Appl. Math. 316 (2017), 60–73.
- [3] J.C.Butcher: Numerical methods for ordinary differential equations, John Wiely & Sons, 2003.
- [4] G.Izzo, Z.Jackiewicz: Highly stable implicit-explicit Runge-Kutta methods, Appl. Numer. Math. 113 (2017), 71–92.
- [5] H.Ōno: Stability properties for implicit-explicit Runge-Kutta methods, Auckland Numerical Ordinary Differential Equations Conference, 2018.

感染症数理モデルにおける確率最適制御

加藤京士

東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学系

担当教員: 中野張准教授

e-mail: katou.k.ai@m.titech.ac.jp

1 はじめに

世界では発展途上国を中心に未だに結核、マラリアなどが流行し、また日本でもインフルエンザが毎年問題になっている。このような感染症の広がり方を数理モデルを用いて確率微分方程式で表し、数学的に考えていく。本研究では大きく分けて二つのことを行った。

まず一つ目に、実データをもとに数理モデルにおけるパラメータ推定を行った。次に、推定されたモデルを使って、感染症を流行させないためにワクチンをどのくらいの人に打つのが最適かを確率最適制御問題として扱った。

数学的思考を重視しつつ、解析的に解けていない部分を近年の数値解法に基づき扱う。

2 SVIRモデル

研究の導入として、本研究で扱った感染症数理モデルがどのようなものかを説明する。今回は感染症数理モデルの一つとして [1] にあるSVIR モデルを扱った。

SVIR モデルにおいては人口を 4 種類に分割する。感受性者 (Susceptible)、感染者 (Infected)、免疫保持者 (Removed)、ワクチン済の者 (Vaccinated) の 4 種類である。ここで β を一人の感染者と会った時に感受性者が感染する割合、 γ を感染者が治って免疫保持者になる割合、 μ を人が亡くなる割合、また生まれる割合、 ρ をワクチンの効果 (つまり $\rho=1$ のときワクチンの効果なし)とする。また、 $\alpha(t)$ を時間 t における感受性者のうちからワクチンを打つ割合とする。このとき、SVIR モデルのダイナミクスは図 1 のようになる。

全人口を定数とする。つまり

$$S(t) + V(t) + I(t) + R(t) = const. \quad \forall t \ge 0$$

とする。また、W を一次元ブラウン運動、 σ を ブラウン運動の強さとする (例えば $\sigma=0$ のと きは決定論モデルとなる) と、SVIR モデルは

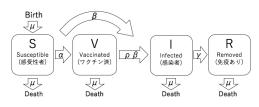


図 1. SVIR モデル

次のように表せる。

$$dS(t) = (\mu - \mu S(t) - \beta I(t)S(t) - \alpha(t)S(t))dt$$
$$- \sigma S(t)I(t)dW(t)$$

$$dV(t) = (\alpha(t)S(t) - \rho\beta V(t)I(t) - \mu V(t))dt$$
$$-\rho\sigma V(t)I(t)dW(t)$$

$$dI(t) = (\beta S(t)I(t) + \rho \beta V(t)I(t) - \gamma I(t) - \mu I(t))dt + \sigma(S(t) + \rho V(t))I(t)dW(t)$$

$$dR(t) = (\gamma I(t) - \mu R(t))dt$$

3 パラメータ推定

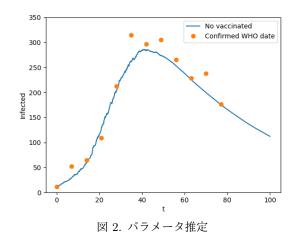
まず、ワクチンを打たないとした場合 (つまり $V=0,\alpha=0$) にこれらパラメータ β,σ,γ,μ はどのような値となるのか、WHO のエボラウイルスの流行のデータ [2] を用いて考えていく。一般化モーメント法 [3] を用いる。数値的に実験した結果推定されたパラメータは次のようになった。

$$\mu = 0, \beta = 0.0004, \gamma = 0.0027, \sigma = 0.04$$

実データとの当てはまりは図2のようになった。横軸が時間、縦軸が感染者数である。また、ドットがWHOの実データ、実線が本研究でパラメータ推定したものを数理モデルに当てはめたものである。

4 確率最適制御

次に、ワクチンのコストを減らしつつ感染症を流行させないために、打つべき最適なワクチンの割合を求め、もし最適にワクチンを打ったとしたらどのように感染が広がっていくのかを



考えていく。扱っている問題は以下である。J,Uを次のようにおく。(ここで \bar{lpha},c は定数)

$$J(t, x; \alpha) = E_{t,x} \left[\int_{t}^{T} (\alpha^{2}(s) + cI(s)) ds \right]$$

$$U(t,x) = \inf_{0 \le \alpha \le \bar{\alpha}} J(t,x;\alpha) = J(t,x;\alpha^*)$$

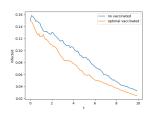
このとき、次の α^* を求めたい。

$$\alpha^*(t) = \arg\inf_{\alpha} J(x; \alpha(t))$$

U は次の Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式により特徴付けられる。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + (\alpha^*)^2 + cI + F^T \frac{\partial U}{\partial X} F + \frac{1}{2} G^T \frac{\partial U}{\partial t} G = 0$$
$$U(T, x) = 0$$

この偏微分方程式を [4] における選点法を用いて数値的に解いていく。最適にワクチンを打った時の数値結果は図 3,4 のようになる。図 3 において青線はワクチンを打たない場合、オレンジ線はワクチンを最適に用いた場合の感染者の推移を表している。また、図 4 は最適なワクチン割合の推移を示している。



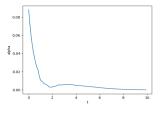


図 3. 感染者の推移

図 4. 最適なワクチン割合

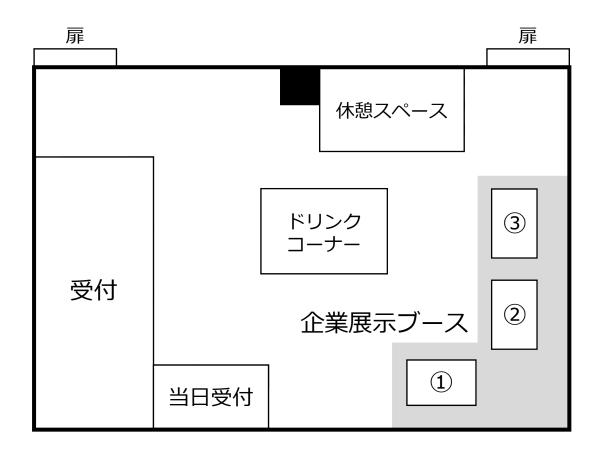
5 まとめ

本研究では、既存の数理モデルを用いて解析 的に解けていない部分を数値解析により扱うこ とを中心に行った。実際のデータを基盤に、パ ラメータ推定として一般化モーメント法、確率 最適制御において選点法を用いることにより数 値的な解を出すことができた。

今後の研究として他の実データ、モデルにおいて同様のことが可能か確かめたい。

- [1] Peter J.Witbooi, Grant E. Muller, and Garth J.Van Schalkwayk. Vaccination Control in a Stochastic SVIR Epidemic Model.
- [2] Amira Rachah, Delfim F. M. Torres. Mathematical Modelling, Simulation, and Optimal Control of the 2014 Ebola Outbreak in West Africa.
- [3] Stefano M.lacus. Simulation and Inference for Stochastic Differential Equations. Springer. pp.178-188. 2008
- [4] Yumiharu Nakano. Convergence of meshfree collocation methods for fully nonlinear parabolic equations. 2016.

受付・企業展示ブース配置図



出展企業一覧

- ① シュプリンガー・ジャパン株式会社
- ② 株式会社HPCテック
- ③ ダイキン工業株式会社

スーパーコンピュー ハイパフォーマンス・コ TANT BOE OSUMMIX nRick Perry E Eth THE

JAPA

http://www.hpcwire.jp HPCの生み50年(第166回)-2009

- ニュース記事
- 連載「HPC の歩み 50 年」
- 連載「わがスパコン人生」
- 調達情報
- イベント情報
- 国内スパコンリスト

ニュースレター配信 コンテンツを

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〜
- ◆ソフトウェアリサーチャー(研究職)採用中
- ◆日本応用数理学会 2018 年度 年会にご参加のあなたへ

【当社の紹介】

- 1 知能情報処理技術に関する最先端ソフトウェア研究開発
 - ・自動運転、ビッグデータ解析等に用いられるコア技術。
 - ・画像処理、信号処理、数値解析、自然言語処理、検査・計測・ロボット、データマイニング、深層学習 他
- 2 社員、組織文化風土

物理学、数学、情報、機械、電気・電子、生物、化学等、多様な分野の博士課程出身のエンジニアが多数活躍

- ・エンジニアの4割が博士号取得者、8割が博士課程出身
- ・難解な技術課題を解決するアルゴリズムの研究開発、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の集団
- ・知能情報処理技術、つまり最先端技術の集団であると共に、それを確固たるものにすべく 日夜切磋琢磨する集団
- 3 博士課程での研究で培った力、知識、技術を使って社会に役立つソフトウェアを創りだす
 - •課題追及力

研究課題の設定や課題解決の豊富な経験

• 論理的思考力

論文作成等を通じて培った論理的思考力

・実用的な数学の経験

統計やシミュレーション、データ解析等

画像処理やデータマイニングなどの先端技術は数学がベース

・プログラミング技術は研修等で習得

【博士採用情報】

業務内容 最先端ソフトウェアの研究開発

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、

組込み制御などの新アルゴリズム研究開発。

採用条件 ライフワークとして、研究開発への意欲が強い方。

博士号の取得、大学院での専攻分野、プログラミング経験はいずれも不問。

募集期間 随時

勤務地 希望考慮(原則住居の移動を伴う転勤なし)

・当社オフィス/京都本社・京阪奈・名古屋・横浜・東京・筑波

・全国の当社ラボ周辺の各客先プロジェクト所在地

応募等
採用条件、その他の詳細について当社HPを参照のうえ、

応募フォームよりご応募下さい。

http://www.tome.jp/recruit/new_grad_d.html

連絡先 管理企画部 人事グループ 吉田・福原

e-mail: saiyou@tome.jp

面白い事をやって社会や生活を変える

粒子法流体解析ソフトウェア



Particleworks®

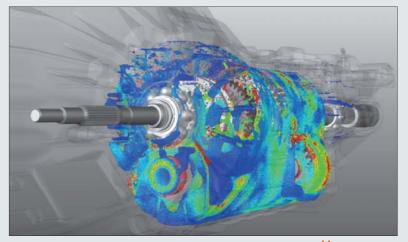
Particle-based simulation software for CAF

- 飛散など激しく大変形する自由表面解析に大きな効果
- メッシュ作成が不要で、プリ処理工数を大幅に削減
- 機構-粒子法、粒子法-粉体など様々なマルチフィジックスに対応
- CPUマルチコア演算、マルチGPU演算対応で圧倒的なパフォーマンス
- 国産ソフトウェアならではの手厚いサポートと顧客の要望を反映させた機能開発

自動車業界向けアプリケーションとしては、エンジンオイルのかき上げなどで既に実用レベルで、多くの企業で効果を上げています。格子法では解けない、激しく飛散するような流体現象を高速かつ安定的に解析します。

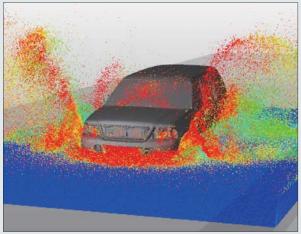
冠水路解析•被水解析事例

Particleworksと機構解析ソフトを連携させることにより冠水時・被水時の車両挙動を含めた流体挙動の解析が可能です。



トランスミッションのオイルかき上げ

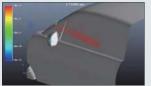
提供:株式会社ユニバンス様 伏 UNIVANCE



This model has been developed by The National Crash Analysis Center (NCAC) of The George Washington University under a contract with the FHWA and NHTSA of the US DOT.

業界別Particleworks適用例		
自動車	ギアオイルかき上げ解析、オイルタンク・スロッシング 解析、冠水路・被水解析、タイヤの着水、泥はね、エアレー ション、塗装プロセス、ワイパー水ふき問題	
素材	樹脂射出成形解析、複合材料の流れ解析、塗装噴霧解析	
化 学	気泡解析(気液2相流)、高粘性攪拌解析、混練解析	
エネルギー	燃料電池解析、冷却水スロッシング解析、LOCA解析	
機械	切削屑洗い出し解析、金属冷却解析、スクラップシュート解析	
電機	はんだ、鋳造等解析	
防災/土木建築	津波遡上解析、土石流解析、コンクリート挙動解析	
医療	錠剤形状の最適化解析、口内洗浄解析、血液流れ解析	

溶剤流出解析、食材練り混ぜ解析



サイドミラー周りの水流れ解析



3D地図を用いた河川氾濫解析



高粘性撹拌解析



金属の切削切粉解析



食品/消費財

プロメテック・ソフトウェア株式会社 URL: www.prometech.co.jp E-mail: sales@prometech.co.jp



Dual-CPU & x4 GPU搭載水冷サーバー

RC GPU Server NAMI4= 1



キャスター付きミドルタワーケース

ハイエンド水冷サーバーRC Server Calm III シリーズと同様のエンタープライズ水冷冷却機能を各所に宿した Single or Dual CPU & 1~4GPU搭載可能モデル。 GPU性能を極限まで引き出し静粛性※1もキープします。

RC GPU Server nami4- II スペック		
ケース	5Uラックマウントケース/キャスター付きミドルタワーケース共用	
サイズ	H W D:448 × 219 × 586 (mm) _{жяр—в}	
CPU	Intel® Xeon® Processor(Skylake−SP) AMD EPYC™ 最大2基	
冷却装置	CPU冷却ウォータージャケット搭載(水冷方式) (メンテナンスフリー)	
MEMORY	最大2048GB	
GPU	TESLA P100/P40 /Geforce GTX 1080Ti /TITAN X等 最大 4基	
セッティング	CUDAセッティング/各Deep Learningツールセッティング	
騒音※1	43db以下(GPUを除く本体部分)	



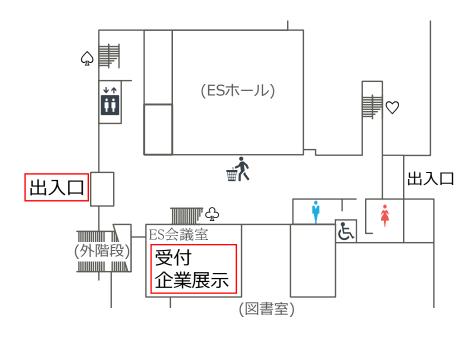
リアルコンピューティング株式会社

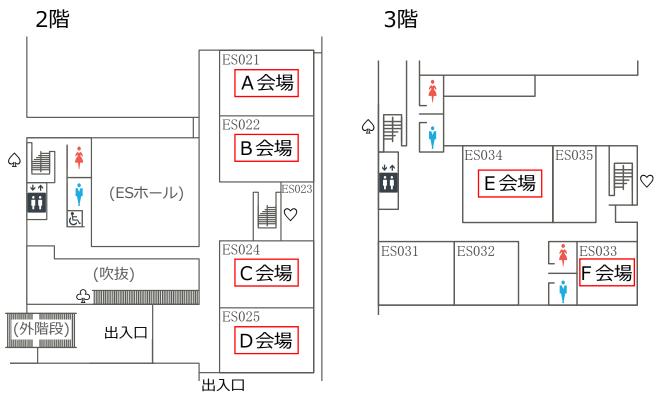
〒135-0041 東京都江東区冬木11-17 イシマビル1F/2F tal: 03-5621-7911 fay:03-5621-7919

.

Memo

ES総合館 案内図





会場利用の際の注意

- ES総合館エントランス・豊田講堂エントランスを除いて,会場内での飲食は原則禁止となっております. ご理解の程,よろしくお願いします.
- 建物内のゴミ箱は利用せず、学会指定のゴミ捨て場 (ES総合館1階) をご利用ください.
- 名古屋大学では eduroam が利用可能ですが、ゲスト用 Wi-Fi をご希望の方は受付までお越しください。