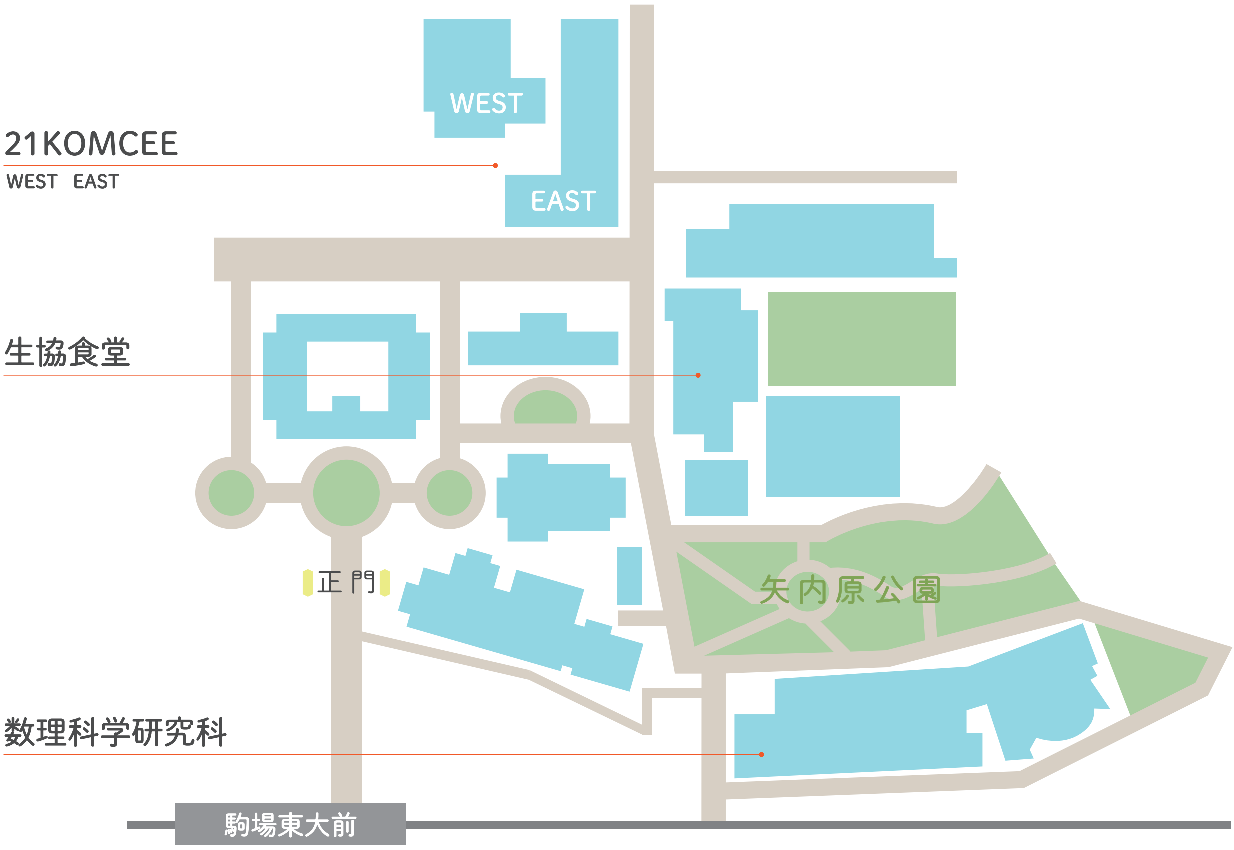
日本応用数理学会 2019 年度年会

東京大学 駒場 I キャンパス

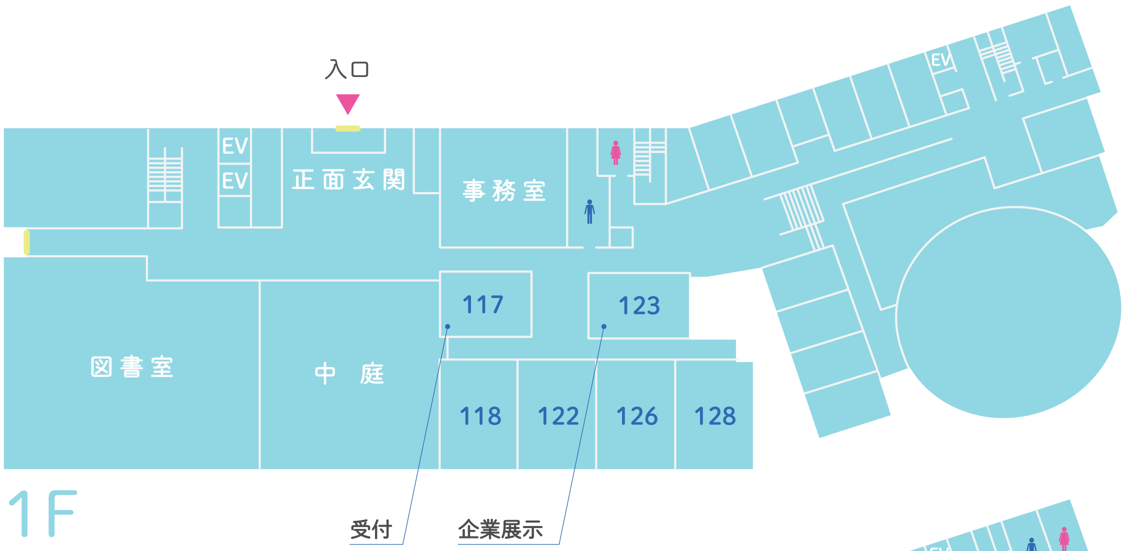
2019 年 9月3日-5日

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics JSIAM

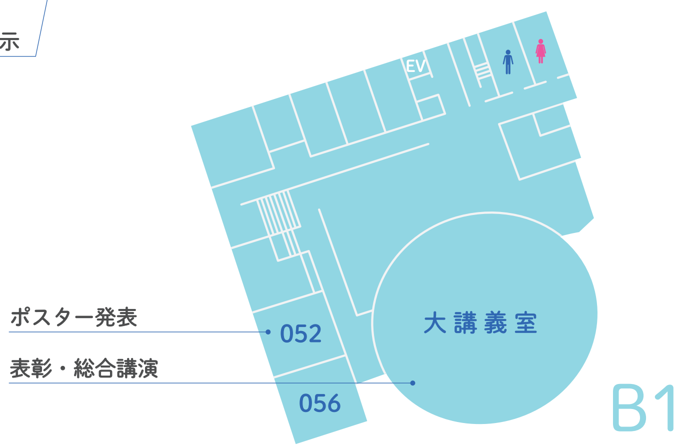
会　場



21KOMCEE
WEST　EAST
WEST
EAST
生協食堂
正 門
矢内原公園
数理科学研究科
駒場東大前

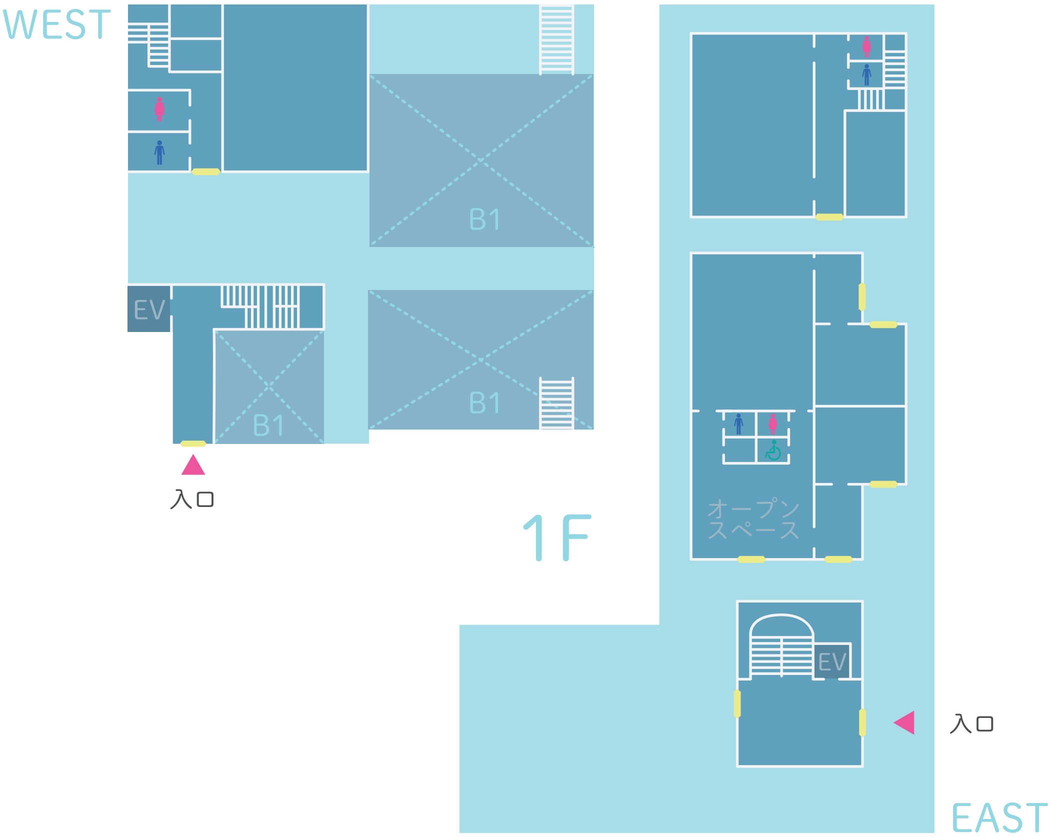


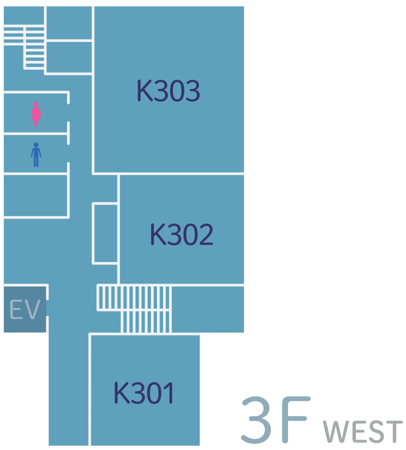
入口
EV
EV
正面玄関
事務室
EV
図書室
中　庭
117
123
118
122
126
128
1F
受付
企業展示

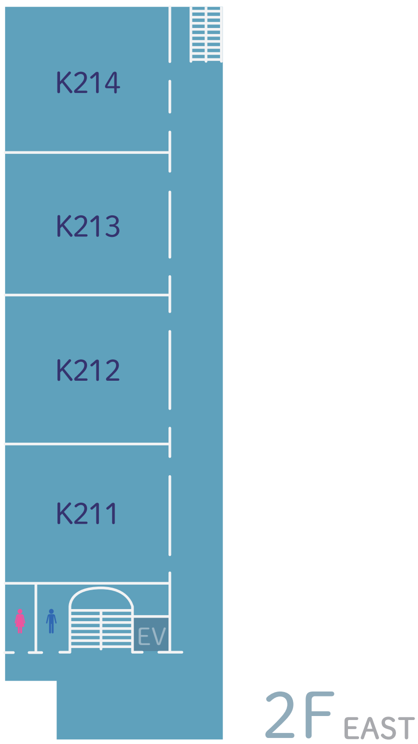


EV
ポスター発表
052
表彰・総合講演
056
大講義室
B1

数理科学研究科


WEST
EV
B1
B1
B1
入口
1F
オープンスペース
EV
入口
EAST


K303
K302
EV
K301
3F WEST


K214
K213
K212
K211
EV
2F EAST

21KOMCEE

日本応用数理学会2019年度年会

https://annual2019.jsiam.org/

東京大学　駒場キャンパスI

2019 年 9 月 3 日（火）〜5 日（木）

受付　　数理科学研究科 117 室

9 月 3 日 8:45〜9 月 5 日 14:00

ご来場の際は，はじめに受付にお越しください．ウェッブで事前に参加申込済みの方は，名札，領収書，パンフレットをお渡しします．当日の参加申込も受付で申し受けます．

企業展示ブース・休憩室　　数理科学研究科 123 室

9 月 3 日 9:00〜9 月 5 日 15:00

次の企業・機関による展示ブースを設けます．休憩所も設け，お飲物を用意しますので，是非ご来場ください．

- 株式会社 HPC テック
- Arithmer 株式会社
- 株式会社インサイト
- 総合研究大学院大学先導科学研究科生命共生体進化学専攻
- シュプリンガー・ジャパン株式会社

口頭講演　　21KOMCEE

9 月 3 日 9:30〜9 月 5 日 17:50

総合講演を除くすべての口頭講演は，21KOMCEE の教室で行われます．
各講演会場では，PC プロジェクタ(VGA 端子と HDMI 端子の両方が使えます)と黒板あるいはホワイトボード，マイクが利用できます．なお，Mini DisplayPort，Thunderbolt や USB-C から VGA/HDMI への変換アダプタは講演者ご自身でご用意ください．
口頭講演の発表時間は，明示がない場合は，質疑応答込みで 20 分とします．

ポスター講演　　数理科学研究科 052・056 室

9 月 4 日 13:00〜14:30

ポスター講演の会場には，コーヒー・お茶・お菓子をご用意します．
ポスター講演用のポスターは A0 サイズ(W841×H1189mm)を想定し，W900×H2100mm のサイズのポスターパネルを用意します．

パネル討論　　正会員 OS「数理資本主義の時代」　21KOMCEE　B(K212)室

9 月 4 日 10:30～11:50

モデレータ：佐古和恵 (NEC，日本応用数理学会前会長)

パネリスト：守谷学 (経産省)，八丁地園子(津田塾大学)，若山正人(九州大学)，会場の皆様

正会員 OS「数理資本主義の時代」のご講演者のお二人に若山氏（九州大学副学長）を加えパネル討論を行います．会場の皆さんのご参加も歓迎します．

キャリアデザインのためのランチミーティング　数理科学研究科コモンルーム

9 月 4 日 12:00～13:00

年会参加者であればどなたでも参加できます．若手研究者・女性研究者の意見交換の場としてご利用ください．軽食を提供いたします．事前登録および参加費は不要です．

表彰式・総合講演　数理科学研究科大講義室

9 月 4 日 14:45～17:10

懇親会　駒場食堂 2 階ダイニング銀杏

9 月 4 日 18:00～20:00

広告　本冊子の 33 ページ以降

- 株式会社とめ研究所
- 株式会社イー・マーケティングス HPCWire Japan
- Arithmer 株式会社

各種会合

JSIAM Letters 編集委員会	9 月 3 日	12:30～13:20	21KOMCEE A(K211)
JJIAM 刊行会	9 月 3 日	12:30～13:20	数理科学研究科 122 室
「応用数理」編集委員会	9 月 3 日	18:00～10:00	数理科学研究科 122 室
研究部会連絡会	9 月 5 日	12:00～13:00	21KOMCEE A(K211)

Wifi

1. 駒場キャンパス構内では eduroam が利用できます．
2. 21KOMCEE 内では，UTokyo-Guest という SSID に接続することで，ソフトバンクモバイル社提供の東大内ゲスト向けサービスを受けることができます．詳細は，接続時に表示される案内に従ってください．（このサービスは，数理科学研究科棟内では利用できません．）
3. eduraom のゲストアカウントを若干数用意しています．詳しくは，受付にお問い合わせください．

プログラム

9月3日

	A (K211)	B (K212)	C (K213)	D (K214)	E (K301)	F (K302)	G (K303)
09:30 10:50		[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 (1) [*p.7*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (1) [*p.7*]	[一般講演] 数理モデリング (1) [*p.7*]	[研究部会 OS] 折紙工学 (1) [*p.8*]		
11:00 12:20	[研究部会 OS] 数理政治学 [*p.8*]	[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 (2) [*p.8*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (2) [*p.9*]	[正会員 OS] ブロックチェーンと数理ファイナンス [*p.9*]	[研究部会 OS] 折紙工学 (2) [*p.9*]	[研究部会 OS] CAE モデリングとデータ活用 [*p.10*]	[一般講演] 応用数理 (1) [*p.10*]
12:30 13:20	JSIAM Letters 編集委員会						(JJIAM 刊行会 @ 数理科学研究科 122 室)
13:30 14:50	[研究部会 OS] 数理設計 (1) [*p.10*]	[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 (3) [*p.11*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (3) [*p.11*]	[研究部会 OS] ウェーブレット (1) [*p.11*]	[正会員 OS] 応用力学系 (1) [*p.12*]	[研究部会 OS] 応用カオス (1) [*p.12*]	[正会員 OS] 量子ウォークとその周辺 (1) [*p.12*]
15:00 16:20	[研究部会 OS] 数理設計 (2) [*p.13*]	[正会員 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (1) [*p.13*]	[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (1) [*p.13*]	[研究部会 OS] ウェーブレット (2) [*p.14*]	[正会員 OS] 応用力学系 (2) [*p.14*]	[正会員 OS] 乱数生成と評価 (1) [*p.14*]	[正会員 OS] 量子ウォークとその周辺 (2) [*p.15*]
16:30 17:50	[正会員 OS] 応用論理学 [*p.15*]	[正会員 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (2) [*p.15*]	[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (2) [*p.16*]	[研究部会 OS] 数理ファイナンス (1) [*p.16*]	[正会員 OS] 応用力学系 (3) [*p.16*]	[正会員 OS] 乱数生成と評価 (2) [*p.17*]	[一般講演] 数値計算の応用 [*p.17*]
18:00 19:00	「応用数理」編集委員会 @ 数理科学研究科 122 室						

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月4日

	A (K211)	B (K212)	C (K213)	D (K214)	E (K301)	F (K302)	G (K303)
09:00 10:20	[正会員 OS] 現象の数理モデリングとその数理解析 [*p.17*]	[研究部会 OS] 産業における応用数理 [*p.18*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (1) [*p.18*]	[研究部会 OS] 数理ファイナンス (2) [*p.18*]	[一般講演] 微分方程式 [*p.19*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (4) [*p.19*]	[正会員 OS] FreeFEM の開発と利用 [*p.19*]
10:30 11:50	[正会員 OS] 皮膚の数理科学を目指して [*p.20*]	[正会員 OS] 数理資本主義の時代 [*p.20*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (2) [*p.20*]	[研究部会 OS] 数理ファイナンス (3) [*p.21*]			
12:00 13:00	キャリアデザインのためのランチミーティング @ 数理科学研究科 2 階コモンルーム						
13:00 14:30	ポスター講演 @ 数理科学研究科 052・056 室						
14:45 15:05	表彰式 @ 数理科学研究科大講義室						
15:20 16:10	総合講演 (1) @ 数理科学研究科大講義室 [*p.21*]						
16:20 17:10	総合講演 (2) @ 数理科学研究科大講義室 [*p.21*]						

駒場東大前ランチマップ

http://www.infsup.jp/lunch.html

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月5日

	A (K211)	B (K212)	C (K213)	D (K214)	E (K301)	F (K302)	G (K303)
09:00 10:20	[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (1) [*p.22*]	[正会員 OS] 多倍長精度浮動小数点演算の高速化手法と応用 (1) [*p.22*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (3) [*p.22*]	[研究部会 OS] 数理医学 [*p.23*]	[一般講演] 数理モデリング (2) [*p.23*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (5) [*p.23*]	[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (1) [*p.24*]
10:30 11:50	[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (2) [*p.24*]	[正会員 OS] 多倍長精度浮動小数点演算の高速化手法と応用 (2) [*p.24*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (4) [*p.25*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (1) [*p.25*]	[一般講演] 数理モデリング (3) [*p.25*]	[研究部会 OS] 応用カオス (2) [*p.26*]	[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (2) [*p.26*]
12:00 13:00	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.26*]	[正会員 OS] 感染症の数理モデル [*p.27*]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (1) [*p.27*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (2) [*p.27*]	[一般講演] 応用数理 (2) [*p.28*]	[研究部会 OS] 応用カオス (3) [*p.28*]	[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (3) [*p.28*]
15:00 16:20	[研究部会 OS] 離散システム (1) [*p.29*]	[研究部会 OS] 機械学習 [*p.29*]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (2) [*p.29*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (3) [*p.30*]		[一般講演] 応用数理 (3) [*p.30*]	[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (4) [*p.30*]
16:30 17:50	[研究部会 OS] 離散システム (2) [*p.31*]	[正会員 OS] FreeFEM チュートリアル [*p.31*]	[研究部会 OS] 応用可積分系 (3) [*p.31*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (4) [*p.32*]		[一般講演] 応用数理 (4) [*p.32*]	

9月3日 09:30–10:50

B (K212)

[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 (1)

1. ◎超特異性判定アルゴリズムの効率化とその暗号応用

○橋本 侑知 (東京大学), 高島 克幸 (三菱電機　情報技術総合研究所)

2. ◎同種写像問題に対する代数的求解法の解析と計算量評価

高橋 康 (富士通研究所), ○工藤 桃成 (神戸市立工業高等専門学校), 池松 泰彦 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所), 安田 雅哉 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所), 横山 和弘 (立教大学)

3. ◎同種写像暗号 CSIDH の Edwards 曲線による構成について

○守谷 共起 (東京大学大学院情報理工学系研究科 修士 2 年), 小貫 啓史 (東京大学大学院情報理工学系研究科 特任研究員), 高木 剛 (東京大学大学院情報理工学系研究科 教授)

4. IoT デバイス上の Ring-LWE 暗号実装における考察

武田 岬 (NEC 通信システム), ○田中 覚 (東京都立産業技術高等専門学校), 布田 裕一 (東京工科大学)

C (K213)

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (1)

1. 直交選点有限要素法による非定常 2 基質制限移流拡散反応方程式 (生物膜モデル) の定式化と基質消費およびフラックスの計算

○大久保 孝樹 (函館高専　社会基盤工学科)

2. ◎ N 次元半線形熱方程式の球対称解に対する新しい質量集中型有限要素近似

○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)

3. ◎一般化 Robin 境界条件に対する不連続 Galerkin 法

○千葉 悠喜 (東京大学大学院数理科学研究科)

4. ◎軸対称液滴シミュレーションにおけるメッシュ制御への信号処理的方法

○古賀 一基 (京都大学)

D (K214)

[一般講演] 数理モデリング (1)

1. 平坦時空における Einstein 方程式の 2 次摂動の数値計算

○土屋 拓也 (八戸工業大学), 米田 元 (早稲田大学)

2. 相対論的天体力学の 1 体問題に関するある近似解法

○鈴木 隆治 (浜松市天文台宇宙論勉強会)

3. 漸化式による常微分方程式の Taylor 級数解による数値解法の性能

○平山 弘 (神奈川工科大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 09:30–10:50

E (K301)

[研究部会OS] 折紙工学(1)

1. ◎ねじり折りの剛体可折性とねじり折りを用いた剛体平織りの数え上げ

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

2. ◎表裏対称な折り紙を対象とした単一視点形状モデリング

○加藤 優弥 (筑波大学), 金森 由博 (筑波大学), 三谷 純 (筑波大学)

3. 紙材料モデルを用いた折紙形状の折りたたみシミュレーション

○戸倉 直 (トクラシミュレーションリサーチ)

4. ◎平織りの技法を用いた伸縮可能な構造の提案

○山本 陽平 (筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻　計算幾何学とグラフィックス研究室), 金森 由博 (筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻　計算幾何学とグラフィックス研究室), 三谷 純 (筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻　計算幾何学とグラフィックス研究室)

9月3日 11:00–12:20

A (K211)

[研究部会OS] 数理政治学

1. 参議院選挙区にみる閾値と偏りの関係

○諸星 穂積 (政策研究大学院大学)

2. 研究開発投資の「選択と集中」について

石井 良輔 (帝京大学), ○中川 訓範 (静岡大学)

3. オンライン上の情報伝播シミュレーションと再現性向上のための拡張

○竹内 謙太郎 (静岡大学)

B (K212)

[研究部会OS] 数論アルゴリズムとその応用(2)

1. 偶数位数を持つ有限体上楕円曲線の2次の指標

○白勢 政明 (公立はこだて未来大学)

2. 互いに3-同種な楕円曲線から定まる直積型クンマー曲面上の楕円曲線束について

○内海 和樹 (立命館大学)

3. ◎円分関数体の相対類数の行列式公式にあらわれる行列式の値の大きさについて

○青山 大輝 (富山大学大学院理工学教育部), 木村 巌 (富山大学大学院理工学研究部)

4. 正則連分数展開に基づく短い周期のTausworthe発生法

○原瀬 晋 (立命館大学理工学部)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 11:00–12:20

C (K213)

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (2)

1. ◎有限要素解の局所事後誤差評価と応用について

○中野 泰河 (新潟大学大学院　自然科学研究科), 劉 雪峰 (新潟大学大学院　自然科学研究科)

2. Error analysis of Crouzeix-Raviart finite element method without the shape regularity condition

○石坂 宏樹 (愛媛大理工), 土屋 卓也 (愛媛大理工)

3. 創成解による板・シェル問題の妥当性確認

○山田 貴博 (横浜国立大学)

4. 非同次項を持つ２階線形常微分方程式の固有値問題の数値解法

○石川 英明 (なし)

D (K214)

[正会員 OS] ブロックチェーンと数理ファイナンス

1. スマートコントラクト：金融工学の観点からの課題【30 分】

○関根 順 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

2. 暗号学と金融工学の融合とその社会実装について【30 分】

○桑原 一郎 (Crypto Garage)

3. トークナイゼーションのモデル化に関する一考察

○佐古 和恵 (ＮＥＣ), 福岡 俊樹 (Crypto Garage/ FINPLANET), 桑原 一郎 (Crypto Garage)

E (K301)

[研究部会 OS] 折紙工学 (2)

1. ◎曲線折りを含む展開図からの 3 次元形状復元を目的とした Ruling 配置の推定

○佐々木 好祐 (筑波大学), 金森 由博 (筑波大学), 三谷 純 (筑波大学)

2. 折紙工法で得られる輸送箱の振動遮断に関する検討

○阿部 綾 (明治大学), 崎谷 明恵 (明治大学), 屋代 春樹 (明治大学), 寺田 耕輔 (奈良工業高等専門学校), 萩原 一郎 (明治大学)

3. 美しく折畳めスプリングバックしないペットボトルの開発

○楊 陽 (明治大学), 陳 暁詩 (明治大学), 奈良 知恵 (明治大学), 萩原 一郎 (明治大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

F (K302)

[研究部会 OS] CAE モデリングとデータ活用

1. 機械学習による設計探査技術の開発【16 分】

○片岡 一朗 (日立製作所), 野中 紀彦 (日立製作所)

2. 機械学習による構造解析のためのデータ設計【16 分】

○和田 義孝 (近畿大学)

3. 図形処理における近似算法による構造厳密性の保証【16 分】

○今井 敏行 (和歌山大学システム工学部)

4. CG の形状操作技術を利用した有限要素メッシュの変形【16 分】

○松本 隆希 (立命館大学), 小林 美蘭 (立命館大学), 藤田 宜久 (立命館大学), 仲田 晋 (立命館大学)

5. 交通シミュレーションの機械学習【16 分】

○山田 知典 (東京大学)

G (K303)

[一般講演] 応用数理 (1)

1. ◎エボラ病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)

2. ◎ Comparison of the deterministic and stochastic models of data-diffusion

○ Watanabe Itsuki (Waseda University)

3. ゲル基質上の上皮細胞シートが引き起こす浸透圧勾配依存的なドーム形成とその数理モデル

○秋山 正和 (明治大学・先端数理科学インスティテュート), 石原 (石田) すみれ (北海道大学・大学院先端生命科学研究院・細胞ダイナミクス科学研究室), 須志田 隆道 (サレジオ工業高等専門学校・情報工学科), 古澤 和也 (福井工業大学・環境情報学部・環境・食品科学科), 名黒 功 (東京大学・大学院薬学系研究科・細胞情報学教室), 立野 浩輝 (東京大学・大学院薬学系研究科・細胞情報学教室), 芳賀 永 (北海道大学・大学院先端生命科学研究院・細胞ダイナミクス科学研究室)

4. 温度変化に対する体内時計の安定化と波形の歪みについての数理的研究

○儀保 伸吾 (理化学研究所数理創造プログラム), 黒澤 元 (理化学研究所数理創造プログラム)

A (K211)

[研究部会 OS] 数理設計 (1)

1. カンファレンス行列を使った実験数を圧倒的に低減する研究方法

○森 輝雄 (森技術士事務所)

2. ◎時間発展方程式を用いたトポロジー最適化

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

3. 自動車のシャシー用部品を対象としたひずみエネルギー最小化問題に対するトポロジー最適化解析

○岸田 真幸 (長岡技術科学大学技術科学イノベーション専攻), 嶋田 雅也 (長岡技術科学大学機械創造工学課程), 高橋 陽也 (長岡技術科学大学機械創造工学専攻), 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), 加藤 遼 (オイレス工業株式会社), 小林 正成 (オイレス工業株式会社)

4. 高精度逆問題解析に援用可能な波動方程式の順問題に対する直接的数値解法の開発

○代田 健二 (愛知県立大学), 曽我部 知広 (名古屋大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 13:30–14:50

B (K212)

[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 (3)

1. ◎ F4-style アルゴリズムを基にした MQ 問題の求解

○伊藤 琢真 (情報通信研究機構 / 首都大学東京大学院博士 1 年), 篠原 直行 (情報通信研究機構), 内山 成憲 (首都大学東京)

C (K213)

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (3)

1. ◎双対性による関数近似公式および数値積分公式の収束解析

○早川 知志 (東京大学), 田中 健一郎 (東京大学)

2. p 乗根の合成有理関数による二重指数関数近似

Gawlik Evan S (ハワイ大学マノア校), ○中務 佑治 (オックスフォード大学、国立情報学研究所)

3. 振動積分に対する佐藤超函数論に基づく数値計算法

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

4. シンプレクティック数値積分法とリュービルの定理

○佐々 成正 (原子力機構)

D (K214)

[研究部会 OS] ウェーブレット (1)

1. On Directional Frames Having Lipschitz Continuous Fourier Transforms

藤ノ木 健介 (東海大学), ○橋本 紘史 (筑波大学), 木下 保 (筑波大学)

2. 四元数線形正準変換

○芦野 隆一 (大阪教育大学)

3. ◎ p 進数体上の複素数値関数に対する Stockwell 変換【特別講演 40 分】

○鈴木 俊夫 (流通経済大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月3日　13:30–14:50

E (K301)

[正会員OS] 応用力学系 (1)

1. Rigorous numerics in combustion problem : premixed stationary flames in weak thermal expansion setting

○松江　要 (九州大学 IMI / I2CNER), Matalon Moshe (University of Illinois at Urbana-Champaign)

2. シンプレクティック数値積分法に対する影のハミルトニアンの存在・非存在について

○谷口 隆晴 (神戸大学，JST さきがけ)

3. ポテンシャル系の孤立不変集合のコホモロジーの評価

○柴山 允瑠 (京都大学)

4. Topological computation analysis of meteorological time-series data

○森田 英俊 (京都大学), 稲津 將 (北海道大学), 國府 寛司 (京都大学)

F (K302)

[研究部会OS] 応用カオス (1)

1. サービスECにおける人々の予約行動パターンに基づく需要予測モデル

○新谷 健 (京都大学大学院情報学研究科), 梅野 健 (京都大学大学院情報学研究科)

2. ◎安定分布による暗号通貨の価格変動分布解析とその評価手法

○柿中 晋治 (京都大学情報学研究科), 梅野 健 (京都大学情報学研究科)

3. 周波数多重を用いたワイヤレスグループ電力伝送方式

○中澤 勇夫 (京都大学大学院), 梅野 健 (京都大学大学院)

4. 進化計算によるレザバーネットワークの機能分化

○山口 裕 (福岡工業大学), 津田 一郎 (中部大学)

G (K303)

[正会員OS] 量子ウォークとその周辺 (1)

1. グラフの変形を用いた量子ウォークのユニタリ同値性

○瀬川 悦生 (横浜国立大学)

2. ウォークによるレコメンデーションモデル

○高橋 佐良人 (横浜国立大学　理工学府　博士課程後期)

3. ◎確率セルオートマトンによって表現される粒子系の漸近分布の評価

○延東 和茂 (早稲田大学)

4. ◎超離散量子ウォークの保存量と定常状態

○渡邉 扇之介 (小山高専), 福田 亜希子 (芝浦工大), 瀬川 悦生 (横浜国立大), 佐藤 巌 (小山高専)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 15:00–16:20

A (K211)

[研究部会 OS] 数理設計 (2)

1. 電磁場の固有値移動に関する形状最適化問題と導波管への応用

村木 健太 (名古屋大学), 佐竹 正義 (SOKEN), ○畔上 秀幸 (名古屋大学)

2. H1 勾配法に基づく複数材料を考慮したロバストトポロジー最適化

○新谷 浩平 (名古屋大学), 畔上 秀幸 (名古屋大学)

3. 最適密度分布と時間発展 変分不等式問題

○海津　聰

4. 回転物体を有する流路における形状最適化

○尾関 優汰 (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), 片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校　機械工学科)

B (K212)

[正会員 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (1)

1. GPU による階層型行列計算法の高速化に向けた多数の小密行列ベクトル積計算の最適化

○大島 聡史 (名古屋大学), 山崎 市太郎 (サンディア国立研究所), 伊田 明弘 (東京大学), 横田 理央 (東京工業大学)

2. ◎ Tensor コアを用いた TSQR

○大友 広幸 (東京工業大学情報理工学院情報工学系), 横田 理央 (東京工業大学学術国際情報センター)

3. 修正グラムシュミット法による BLR 行列の近似 QR 分解

○伊田 明弘 (東京大学)

4. 超並列電子状態計算に対するベイズ推定型計算性能解析

○星 健夫 (鳥取大学), 角田 皓亮 (鳥取大学), 田中 和幸 (鳥取大学), 深谷 猛 (北海道大学), 山本 有作 (電気通信大学)

C (K213)

[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (1)

1. 情報セキュリティへの符号理論の応用【招待講演 60 分】

○萩原 学 (千葉大学大学院理学研究院)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 15:00–16:20

D (K214)

[研究部会 OS] ウェーブレット (2)

1. Haar-Like 直交変換による非線形画像近似

○藤ノ木 健介 (東海大学)

2. 平行移動回転ありの画像分離問題における重みの推定方法について

○守本 晃 (大阪教育大学), 芦野 隆一 (大阪教育大学), 萬代 武史 (大阪電気通信大学)

3. 周波数領域でコンパクトサポートを持つ自由な形状に設計されたウェーブレットを基礎にしたタイトウェーブレットフレームの構築【特別講演 40 分】

○戸田 浩 (豊橋技術科学大学), 章 忠 (豊橋技術科学大学)

E (K301)

[正会員 OS] 応用力学系 (2)

1. 変分原理の周期解の分岐への応用

○藤原 俊朗 (北里大), 福田 宏 (北里大), 尾崎 浩司 (東海大)

2. ◎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　パート 2 適用例

○本永 翔也 (京都大学大学院情報学研究科), 矢ヶ崎 一幸 (京都大学大学院情報学研究科)

3. 摂動を受けるレイリー・ベナール対流に現れるカオス的混合と分岐構造

○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)

4. 成分濃縮ネットワークでの平衡解と素子形状最適化

○渡邊 辰矢 (茨城大学理学部), 松本 壮平 (産総研集積マイクロシステム研究センター), 小野 直樹 (芝浦工業大学工学部)

F (K302)

[正会員 OS] 乱数生成と評価 (1)

1. 乱数の特殊性に見る生成器の統計検定に関する考察

○奥富 秀俊

2. 乱数性の劣る 2 値系列を用いた乱数検定の特徴付けと類似性の評価について

○山口 明宏 (福岡工業大学), 斉藤 朝輝 (公立はこだて未来大学)

3. NIST の二重検定におけるサンプルサイズ

○原本 博史 (愛媛大学教育学部)

4. 複数項目のカイ二乗検定の独立化

○岩崎 淳 (京都大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9 月 3 日 15:00–16:20

G (K303)

[正会員 OS] 量子ウォークとその周辺 (2)

1. 辺符号グラフ上の量子ウォーク

○吉江 佑介 (東北大学情報科学研究科), 久保田 匠 (東北大学情報科学研究科), 瀬川 悦生 (横浜国立大学環境情報研究院), 谷口 哲至 (広島工業大学電子情報工学科)

2. 量子乱数と量子ウォークの関係性

○鹿野 豊 (慶應義塾大学・チャップマン大学)

3. 二刀流? 量子ウォークと無限粒子系【特別講演 40 分】

○今野 紀雄 (横浜国立大学大学院 工学研究院)

9 月 3 日 16:30–17:50

A (K211)

[正会員 OS] 応用論理学

1. チュートリアル　AND-OR 木の探索コスト

○鈴木 登志雄 (首都大学東京　理学研究科　数理)

2. 重み付き AND-OR 木の固有分布について【招待講演 40 分】

○田中 一之 (東北大学理学研究科)

3. ソロベイ還元と連続性

○鈴木 登志雄 (首都大学東京　理学研究科　数理)

B (K212)

[正会員 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (2)

1. 相対的高メモリバンド幅環境における密行列固有値ソルバの実装方式について

○片桐 孝洋 (名古屋大学)

2. Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実現と評価

○高橋 大介 (筑波大学)

3. メニィコアクラスタ向け並列多重格子法

○中島 研吾 (東京大学情報基盤センター・理化学研究所計算科学研究センター)

4. 倍精度と単精度を用いた混合精度 GMRES(m) 法の収束性に関する実験的評価

○深谷 猛 (北海道大学), グドール 聖哉 (北海道大学), 張 臨傑 (中国海洋大学), 岩下 武史 (北海道大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月3日 16:30–17:50

C (K213)

[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (2)

1. ◎ Leanを用いた単一削除符号の形式化に向けて

○近藤 裕樹 (千葉大学大学院融合理工学府), 萩原 学 (千葉大学大学院理学研究院)

2. Mizarによる離散確率分布の統計的識別不能性の形式化

○岡崎 裕之 (信州大学), 布田 裕一 (東京工科大学), 師玉 康成 (信州大学)

3. ◎状態の更新を含むプロトコ ルの形式化の検討

○野口 凌雅 (茨城大学), 花谷 嘉一 (株式会社 東芝), 米山 一樹 (茨城大学)

D (K214)

[研究部会 OS] 数理ファイナンス (1)

1. Stochastic modelling with randomised Markov bridges

○関根 順 (大阪大学)

2. ◎ Ito Calculus in Risk Theory

○宮城 惠 (立命館大学大学院), 赤堀 次郎 (立命館大学), Constantinescu Corina (Liverpool University)

3. Stochastic Hamiltonian Systems for Economic Growth Models

○鈴木 康太 (立命館大学大学院理工学研究科), 赤堀 次郎 (立命館大学大学院理工学研究科)

E (K301)

[正会員 OS] 応用力学系 (3)

1. ◎時間遅れ滑らか依存性：時間遅れがもたらす平滑化効果と反応の時間的順序

○西口 純矢 (東北大学 材料科学高等研究所)

2. 半古典位相縮約理論による量子同期現象の解析

○加藤 譲 (東工大), 中尾 裕也 (東工大)

3. ◎ Pitchfork bifurcations and linear stability of solitary waves in coupled nonlinear Schrdinger equations

矢ヶ崎 一幸 (京都大学), ○山添 祥太郎 (京都大学)

4. Bifurcations and stability for one-parameter families of symmetric periodic orbits in reversible systems

○矢ヶ崎 一幸 (京都大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

F (K302)

[正会員 OS] 乱数生成と評価 (2)

1. ◎ Quantum Computer Status Check via Output Random Number Sequence

鹿野 豊 (慶應義塾大学理工学研究科), ○田村 賢太郎 (慶應義塾大学理工学研究科)

G (K303)

[一般講演] 数値計算の応用

1. 地震波動伝播シミュレーションのための拡散効果を伴う修正波動方程式の混合型有限要素法

○今井 隆太 (みずほ情報総研株式会社), 賀須井 直規 (みずほ情報総研株式会社), 山田 雅行 (株式会社ニュージェック), 羽田 浩二 (株式会社ニュージェック), 藤原 広行 (国立研究開発法人防災科学技術研究所)

2. 拡散テンソルトラクトグラフィへの応用のためのフィザルムソルバの拡張

○増谷 佳孝 (広島市立大)

3. 神経スパイクモデルの連立微分方程式系の数値解法について

○伊藤 利明 (同志社大学)

4. ◎非分解型解法における抵抗境界条件と冠動脈分岐流量の分配

○宇田 智紀 (東北大学材料科学高等研究所)

A (K211)

[正会員 OS] 現象の数理モデリングとその数理解析

1. ◎ Existence and non-existence of the asymmetrical rotating solution of the reaction-diffusion particle model

長山 雅晴 (北海道大学 電子科学研究所), 後藤田 剛 (名古屋大学 多元数理科学研究科), ○岡本 守 (北海道大学 理学院数学専攻)

2. ◎細胞の大きさと形状を残す空間離散モデルの連続化の提案と応用

石井 宙志 (北海道大学), 栄 伸一郎 (北海道大学), 佐藤 純 (金沢大学), ○田中 吉太郎 (はこだて未来大学), 八杉 徹雄 (金沢大学)

3. LIF モデルに対する Fokker-Planck 方程式における時間周期的な運動を示す空間非一様解

○池田 幸太 (明治大学), Salort Delphine (Sorbonne Universite), Roux Pierre (Universite Paris-Sud and Sorbonne Universite)

4. Existence and stability of symmetric solutions of a variational problem for plane curves

上坂 正晃 (東京大学), 上田 肇一 (富山大学), ○中村 健一 (金沢大学), 長山 雅晴 (北海道大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月4日 09:00–10:20

B (K212)

[研究部会 OS] 産業における応用数理

1. シミュレーションデータを用いた基礎方程式の推定

○小野 謙二 (九州大学), 櫻井 大督 (九州大学), 古賀 壱成 (プログレス・テクノロジーズ)

2. 構造解析向け超並列固有値ソルバの大規模実応用モデルにおける性能評価

○二村 保徳 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学), 畠澤 作二郎 (エムエスシーソフトウェア株式会社)

3. NMF 型 DNN 計算法とその応用

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

4. 1周期未満波形からの時間周波数解析

○石山 文彦 (NTT)

C (K213)

[研究部会 OS] 計算の品質 (1)

1. ◎非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算の数値的比較

○南畑 淳史 (中央大学), 荻田 武史 (東京女子大学), 大石 進一 (早稲田大学)

2. ◎発表題目：Gauss の超幾何微分方程式のモノドロミー行列に対する精度保証付き数値計算

○井上 直也 (筑波大学大学院システム情報工学研究科), 石毛 利昌 (千葉大学大学院理学研究科), 高安 亮紀 (筑波大学システム情報系)

3. ◎大規模並列環境における実対称標準固有値問題の精度保証法

○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. 3つの行列の積に対する無誤差変換と固有値問題への応用

○尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学)

D (K214)

[研究部会 OS] 数理ファイナンス (2)

1. Conic finance に基づくポートフォリオ構築

○中川 秀敏 (一橋大学大学院経営管理研究科)

2. 位置情報分析による人口統計を活用した、J-REIT 投資戦略の有効性について

○金子 拓也 (KDDI 総合研究所, ICU), 木村 塁 (KDDI 総合研究所), 美嶋 勇太朗 (KDDI 総合研究所)

3. ハル・ホワイトモデルに対するフォワード・スターティング・オプション価格計算

畑 宏明 (静岡大学), ○安田 和弘 (法政大学), 劉 念麟 (東京理科大学)

4. 2重待ち行列モデルについての1コメント

○岸本 一男 (東京理科大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月4日 09:00–10:20

E (K301)

[一般講演] 微分方程式

1. 分布型の遅れをもつ微分方程式の解の爆発について

石渡 恵美子 (東京理科大学), ○石渡 哲哉 (芝浦工業大学), 中田 行彦 (島根大学)

2. 曲線短縮問題に現れる準線形放物型偏微分方程式に対する爆発解の漸近挙動に関する一考察

○穴田 浩一 (早稲田大学高等学院), 石渡 哲哉 (芝浦工業大学), 牛島 健夫 (東京理科大学)

3. 爆発解の漸近オーダーの推定法 ー Benford の法則の応用 ー

○小澤 一文 (秋田県立大学名誉教授)

4. ◎ドラッグ・デリバリー・システムを表現するモデル方程式の時間大域解の漸近的挙動

○岩崎 悟 (大阪大学)

F (K302)

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (4)

1. ◎枢軸選択付き QR 分解を用いた行列の低ランク近似アルゴリズムの打ち切り誤差の解析

○河村 遼 (東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻須田研)

2. On the Limit cycle behavior in Homothermal Maintenance of Skunk cabbage

○ Erdenebaatar Turtogtokh (Iwate University), Shuji Kawasaki (Iwate University), Kikukatsu Ito (Iwate University)

3. ◎局所 Lyapunov 関数を用いたホモクリニック軌道の精度保証法

○新田 光輝 (電気通信大学), 山本 野人 (電気通信大学), 松江 要 (九州大学)

G (K303)

[正会員 OS] FreeFEM の開発と利用

1. 接触角度を持つ自由表面問題の有限要素解法と近似界面の Euler 標数の計算

○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

2. ◎ A study of the toughness of epoxy resins: phase field modeling of fracture.

○ Xie Shuangquan (Tohoku University, AIMR), Nishura Yasumasa (Tohoku University, AIMR), Takaishi Takeshi (Musashino University), Agaki Kazuto (Tohoku University, AIMR), Avalos Edgar (Tohoku University, AIMR)

3. Stokes 方程式の滑り境界値問題に対する Crouzeix-Raviart 非適合有限要素法について

○及川 一誠 (一橋大学大学院経営管理研究科), 柏原 崇人 (東京大学大学院数理科学研究科), 周 冠宇 (東京理科大学)

4. FreeFEM を用いた数値シミュレーション教育の現状と課題

○中澤 嵩 (大阪大学 MMDS)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月4日 10:30–11:50

A (K211)

[正会員 OS] 皮膚の数理科学を目指して

1. ◎表皮構造の数理モデリング

〇大野 航太 (北海道大学 電子科学研究所), 小林 康明 (北海道大学 電子科学研究所), 長山 雅晴 (北海道大学 電子科学研究所)

2. 表皮内タイトジャンクション形成の数理モデル

〇小林 康明 (北大電子研), 後藤田 剛 (名古屋大多元数理), 長山 雅晴 (北大電子研)

3. 数理モデルを利用したヒト培養表皮モデルの高機能化

〇熊本 淳一 (北海道大学 電子科学研究所), 長山 雅晴 (北海道大学 電子科学研究所), 傳田 光洋 (株式会社資生堂 グローバルイノベーションセンター)

4. Both spatial and temporal patterns of sensory afferents activity may explain the geometric perception in the fishbone tactile illusion

〇仲谷 正史 (慶應義塾大学), 上坂 正晃 (北海道大学), 最上 紗也子 (慶應義塾大学), 趙 子夏 (北海道大学), 須志田 隆道 (北海道大学), 北畑 裕之 (千葉大学), 長山 雅晴 (北海道大学)

B (K212)

[正会員 OS] 数理資本主義の時代

1. 報告書『数理資本主義の時代』のご紹介

〇守谷 学 (経産省)

2. 企業と数学【招待講演】

〇八丁地 園子 (津田塾大学)

3. パネル討論【40 分】

〇佐古 和恵 (NEC), 守谷 学 (経産省), 八丁地 園子 (津田塾大学), 若山 正人 (九州大学)

C (K213)

[研究部会 OS] 計算の品質 (2)

1. 二重指数関数型数値積分公式の理論誤差評価の改善

〇岡山 友昭 (広島市立大学), 黒木 治世 (エネルギア・コミュニケーションズ)

2. Henon 方程式の非対称解に対する精度保証付き数値計算

〇浅井 大晴 (早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 数学応用数理専攻), 田中 一成 (早稲田大学 理工学術院総合研究所 数理科学研究所), 大石 進一 (早稲田大学 理工学術院)

3. ◎チェビシェフ級数を用いたタイムステッピングによる常微分方程式系の精度保証付き数値解法

〇船越 康太 (筑波大学), 高安 亮紀 (筑波大学)

4. BBM 方程式の高精度解法の比較

〇安田 英典 (城西大学理学部)

〇：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月4日 10:30–11:50

D (K214)

[研究部会 OS] 数理ファイナンス (3)

1. 二項モデルにおける DP を用いた期待効用と PFPP を用いた期待効用の比較（II)

○佐藤 大地 (法政大学理工学研究科), 安田 和弘 (法政大学)

2. ◎ Option Price under Exchangeable Binomial Model

○千葉 優 (立命館大学大学院 理工学研究科基礎理工学専攻), 赤堀 次郎 (立命館大学), 琉 佳勲 (立命館大学), 仙葉 雄基 (立命館大学)

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 II

○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. バリア・オプションの Greeks の準解析的計算方法

○石谷 謙介 (首都大学東京)

9月4日 15:20–16:10

数理科学研究科大講義室

総合講演 (1)

1. 東京大学大学院数理科学研究科社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」が目指すもの

○中川 淳一 (東京大学大学院数理科学研究科)

9月4日 16:20–17:10

数理科学研究科大講義室

総合講演 (2)

1. 離散的かつ非有限生成な全自己同型群をもつ滑らかな射影代数 多様体の一構成

○小木曽 啓示 (東京大学大学院数理科学研究科)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 09:00–10:20

A (K211)

[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (1)

1. ◎ space-time 境界要素法による 1 次元波動方程式の数値計算

○森 理人 (京都大学), 新納 和樹 (京都大学), 西村 直志 (京都大学)

2. 2 次元波動方程式の種々の時間域積分方程式による解法とその解の性質について

福原 美桜 (京大情報), 三澤 亮太 (京大工), 新納 和樹 (京大情報), ○西村 直志 (京大情報)

3. ブロック反復法を用いた Characteristic Basis Function Method に関する一考察

○田中 泰 (京都大学大学院　情報学研究科、三菱電機株式会社), 新納 和樹 (京都大学大学院　情報学研究科), 西村 直志 (京都大学大学院　情報学研究科), 瀧川 道生 (三菱電機株式会社), 米田 尚史 (三菱電機株式会社), 宮下 裕章 (三菱電機株式会社)

4. 非圧縮性 Navier–Stokes 方程式に対する粒子法における安定化項の考察

○井元 佑介 (京都大学高等研究院), 浅井 光輝 (九州大学大学院工学研究院)

B (K212)

[正会員 OS] 多倍長精度浮動小数点演算の高速化手法と応用 (1)

1. 素粒子物理学における Feynman 積分の数値計算

○湯浅 富久子 (高エネルギー加速器研究機構), 石川 正 (高エネルギー加速器研究機構), 台坂 博 (一橋大学), 中里 直人 (会津大学), de Doncker Elise (Western Michigan University)

2. 行列対数関数に対する二重指数関数型公式における積分区間の設定方法について

○立岡 文理 (名古屋大学), 曽我部 知広 (名古屋大学), 宮武 勇登 (大阪大学), 張 紹良 (名古屋大学)

3. ユーザー側から見た多倍長精度数値計算環境の現在【招待講演 40 分】

○幸谷 智紀 (静岡理工科大学)

C (K213)

[研究部会 OS] 計算の品質 (3)

1. On the approximation of eigenvalue problems associated with partial differential equations: examples and counterexamples 【招待講演 40 分】

○ Boffi Daniele (Department of Mathematics, University of Pavia)

2. ポアソン方程式の解の関数値に関する事後誤差評価

○劉 雪峰 (新潟大学・大学院自然科学研究科)

3. H_0^1 射影誤差に対する 2 次の誤差評価の最良定数の包含方法について

○木下 武彦 (九州大), 渡部 善隆 (九州大), 山本 野人 (電通大), 中尾 充宏 (早稲田大)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 09:00–10:20

D (K214)

[研究部会 OS] 数理医学

1. ニワトリ胚中胚葉細胞集団の動的な移動秩序形成

○田崎 創平 (特定国立研究開発法人理化学研究所)

2. 直鎖状ユビキチン鎖を足場とした免疫シグナル制御に関する数理モデル解析

○及川 大輔 (大阪市立大学大学院医学研究科分子病態学)

3. T 細胞における LUBAC を介した NF-κ B 活性化機構の数理的解析

○畑中 尚也 (大阪大学数理・データ科学教育研究センター)

4. ガン免疫の環境依存型モデル EDM における局所消滅性に関する評価

○道工 勇 (埼玉大学教育学部数学教室)

E (K301)

[一般講演] 数理モデリング (2)

1. ランダム二分木の分岐構造と中心極限定理・大偏差原理

○山本 健 (琉球大学理学部)

2. 漢字の形に関するベキ乗則について

太田 守洋 (琉球大学大学院理工学研究科), ○山本 健 (琉球大学理学部)

3. ◎ 1 次元 3 状態自由量子ウォークの 3 つの基本性質について

○劉 家欣 (愛媛大学), 黒田 久泰 (愛媛大学)

F (K302)

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (5)

1. ◎ Lagrange 力学におけるエネルギー保存数値解法の一般的記述について

○石川 歩惟 (神戸大学), 谷口 隆晴 (神戸大学, JST さきがけ)

2. ◎ Hamilton 系に対する SAV 法

○劔持 智哉 (名古屋大学大学院工学研究科)

3. ◎動的境界条件を伴う Cahn-Hilliard 系に対する構造保存スキームの解析について

○奥村 真善美 (大阪大学), 深尾 武史 (京都教育大学), 降籏 大介 (大阪大学), 吉川 周二 (大分大学)

4. ◎再生核近似を用いた前進後退確率微分方程式の数値解析

○田中 俊介 (東京工業大学情報理工学院数理・計算科学系)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 09:00–10:20

G (K303)

[正会員OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (1)

1. ◎メッシュレス法における境界条件の取り扱いが解析精度に及ぼす影響

○藤田 宜久 (立命館大学), 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), 仲田 晋 (立命館大学)

2. 2次元定常電磁波散乱問題へのCollocation EFGM-BEMの適用

○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)

3. Data driven derivation of partial differential equations

○リュウ ウ (京都大学), 小山田 耕二 (京都大学), 坂本 尚久 (神戸大学), 水野 翔太 (京都大学)

9月5日 10:30–11:50

A (K211)

[研究部会OS] 連続体力学の数理 (2)

1. Mathematical analysis of reservoir computing

○本多 泰理 (東洋大学)

2. 圧電体における表面波速度の摂動

○田沼 一実 (群馬大学・理工学部), 中村 玄 (北海道大学・理学研究科), Xiang Xu (Zhejiang University)

3. ◎閉曲線上で定式化されたKuramoto-Sivashinsky 方程式の回転波の分岐

矢崎 成俊 (明治大学理工学部), 上形 泰英 (明治大学大学院理工学研究科), ○小林 俊介 (明治大学大学院理工学研究科)

B (K212)

[正会員OS] 多倍長精度浮動小数点演算の高速化手法と応用 (2)

1. ◎PositのOpenCL移植による津波シミュレーションの性能評価

○村上 雄樹 (会津大学), 河野 郁也 (会津大学), 中里 直人 (会津大学)

2. AVX-512IFMAを用いた多倍長整数乗算の高速化

枝松 拓弥 (筑波大学), ○高橋 大介 (筑波大学)

3. 尾崎スキームによる高精度かつ再現性のあるBLAS実装

○椋木 大地 (理化学研究所), 荻田 武史 (東京女子大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学), 今村 俊幸 (理化学研究所)

4. 多倍長精度浮動小数点回路によるパイプライン型アクセラレータの性能評価

○中里 直人 (会津大学), 台坂 博 (一橋大学), 石川 正 (高エネルギー加速器研究機構)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 5 日 10:30–11:50

C (K213)

[研究部会 OS] 計算の品質 (4)

1. 非線形遅延微分方程式の周期解の精度保証

○大石 進一 (早稲田大学)

2. ◎楕円型方程式の弱解に対する正値性証明法

○田中 一成 (早稲田大学)

3. ◎線形熱方程式の解と半離散近似解との誤差評価の改善

○水口 信 (早稲田大学), 中尾 充宏 (早稲田大学), 関根 晃太 (東洋大学), 大石 進一 (早稲田大学)

4. 空間 3 次元 Allen-Cahn 方程式の正値時間大域解に対する精度保証付き数値計算法

○松嶋 佑汰 (早稲田大学大学院), 田中 一成 (早稲田大学), 大石 進一 (早稲田大学)

D (K214)

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (1)

1. シフト付き LR 変換を与える dLVs 反復の収束性について

○植田 旭 (京都大学), 岩崎 雅史 (京都府立大学), 中村 佳正 (京都大学)

2. ◎離散相対論的戸田方程式が与えるシフト付き LR 変換について

○簑下 尚也 (京都府立大学), 岩崎 雅史 (京都府立大学), 山本 有作 (電気通信大学)

3. 一般内積における直交化のための MGS-HP 法の誤差解析

○山本 有作 (電気通信大学), 今倉 暁 (筑波大学)

4. ◎未知の行列とその複素共役転置を同時に含む Sylvester 方程式について

○佐竹 祐樹 (名古屋大学), 曽我部 知広 (名古屋大学), 剱持 智哉 (名古屋大学), 張 紹良 (名古屋大学)

E (K301)

[一般講演] 数理モデリング (3)

1. より詳細な感染症流行データ解析に向けた、感受性の時系列変化によって引き起こされる感染症流行ダイナミクスの解析

○大森 亮介 (北海道大学), 中田 行彦 (島根大学)

2. 偏微分方程式のリミット・トーラス解に対する位相縮約法

○河村 洋史 (海洋研究開発機構)

3. ◎ 2 次元デイジーワールドモデルにおける棲み分けパターン

○陰山 真矢 (関西学院大学), 八木 厚志 (大阪大学)

4. 大域的かつ非対称局所的に相互作用した双安定素子集団の超離散方程式に基づく考察

○大森 祥輔 (早大理工), 山崎 義弘 (早大理工)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

F (K302)

[研究部会 OS] 応用カオス (2)

1. カオス尺度の拡張とその効果について

○井上 啓 (山陽小野田市立山口東京理科大学工学部), 真尾 朋行 (東芝情報システム株式会社・京都大学大学院情報学研究科), 奥富 秀俊 (東芝情報システム株式会社), 梅野 健 (京都大学大学院情報学研究科)

2. カオス力学系によるエントロピーの変換公式とその相互情報量について

○梅野 健 (京都大学大学院情報学研究科)

3. 心拍間隔 (RRI) データからの力学系のアトラクタ再構成の試み

○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)

4. ◎ Sturm-Liouville 型微分方程式からできる直交関数系をカオスの観点から見る

○杉本 哲 (京都大学情報学研究科数理工学専攻), 梅野 健 (京都大学情報学研究科数理工学専攻)

G (K303)

[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (2)

1. ◎置換トリチウムのベータ崩壊によるポリエチレンの構造変化の粗視化分子動力学シミュレーション

○ LI HAOLUN (京工繊大院工芸), 藤原 進 (京工繊大院工芸), 中村 浩章 (核融合研、名大院工), 水口 朋子 (京工繊大院工芸)

2. アモルファス炭素壁への水素入射の分子動力学シミュレーション

○澤田 拓弥 (名古屋大学), 中村 浩章 (名古屋大学, 核融合研究所), 齋藤 誠紀 (山形大学), 澤田 圭司 (信州大学), 土生 柊 (名古屋大学)

3. ◎軸対称高温超伝導膜内遮蔽電流密度解析：等価回路法の適用

○山口 敬済 (総合研究大学院大学), 高山 彰優 (山形大学), 神谷 淳 (山形大学), 大谷 寛明 (総合研究大学院大学)

4. 超伝導リニア加速システムの数値シミュレーション：ペレット入射速度の高速化

○高山 彰優 (山形大学), 山口 敬済 (総合研究大学院大学), 齋藤 歩 (山形大学), 神谷 淳 (山形大学)

A (K211)

[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (3)

1. 多孔質媒質中の乱流に対する k と ε の解軌道及びそれらの初期状態依存性

○鈴木 岳人 (青学大理工)

2. 流体構造連成を考慮した形状最適化

○片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校), 豊場 亮太 (長岡技術科学大学 (学生)), 三宅 悠暉 (金沢大学 (学生))

3. ◎ A micromechanical simulation of crack propagation in inhomogeneous composite solids

○ Alfat Sayahdin (Kanazawa University), Kimura Masato (Kanazawa University)

4. 水素脆化効果を考慮したき裂進展モデルの解析

○高石 武史 (武蔵野大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 13:30–14:50

B (K212)

[正会員 OS] 感染症の数理モデル

1. 年齢構造化 SIRS 感染症モデルの解析

○大桑 健人 (東京大学数理科学研究科), 稲葉 寿 (東京大学数理科学研究科), 國谷 紀良 (神戸大学大学院システム情報学研究科)

2. ◎ Spread of mosquito borne diseases and the effects of sexual transmission on Zika Virus

○ Sasmal Sourav Kumar (Aoyama Gakuin University)

3. 異なる境界条件下での空間拡散を伴う感染齢構造化 SIR モデルの解析

Chekroun Abdennasser (University of Tlemcen), ○國谷 紀良 (神戸大学大学院システム情報学研究科)

4. 免疫減衰をもつ感染症数理モデルにおける周期流行

○中田 行彦 (島根大学), 大森 亮介 (北海道大学), Yang Liu (東北師範大学)

C (K213)

[研究部会 OS] 応用可積分系 (1)

1. 離散二次元戸田方程式によるタイリングの数え上げ

○上岡 修平 (京都大学)

2. Krawtchouk 多項式で表せる optimal design

○飯田 明寛 (京都大学)

3. ◎離散二次元戸田方程式を応用した平面分割の解析

○伊藤 眞麻 (京都大学大学院情報学研究科), 上岡 修平 (京都大学大学院情報学研究科)

4. ◎離散 Gray-Scott モデルの時空パターンと平衡解の Turing 不安定性

○松家 敬介 (武蔵野大学)

D (K214)

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (2)

1. ◎ブロック積型反復解法の近似解精度劣化の原因解析と高精度化

○倉本 亮世 (筑波大学 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)

2. 特異対称系での GMRES 法と RRGMRES 法の数値検証と、RRGMRES(m) 法の収束定理

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

3. 空間座標の 2 次までの多項式を用いた deflated CG 法の性能検討

○高谷 周平 (個人)

4. 融合積和演算を利用した特異値分解のための両側ヤコビ法の実装について

○荒木 翔 (京都大学), 高田 雅美 (奈良女子大学), 木村 欣司 (福井大学), 中村 佳正 (京都大学)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 13:30–14:50

E (K301)

[一般講演] 応用数理 (2)

1. ◎深層ニューラルネットにおける加算と結合のスキップ接続の対応

○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)

2. 双対平坦多様体における自己双対測地線に基づく双対葉層化

○熊谷 敦也 (日本大学商学部)

3. ◎ Filippov の方法の特徴付けについて

○須田 智晴 (京都大学大学院人間・環境学研究科)

4. ルジャンドル陪関数の変形と応用１３

○田川 昭夫 (なし)

F (K302)

[研究部会 OS] 応用カオス (3)

1. 時間遅れフィードバック法を用いた決定論的拡散の制御

○小林 幹 (立正大学), 安東 弘泰 (筑波大学)

2. Stochastic bifurcation in a turbulent swirling flow

○佐藤 譲

3. ◎あるシンプレクティック写像の Anosov 性について

○大久保 健一 (京大情報), 梅野 健 (京大情報)

4. ◎ Homoclinic bifurcation in plane Couette flow

○ LUSTRO JULIUS RHOAN (OSAKA UNIVERSITY)

G (K303)

[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (3)

1. 平板物体の３次元落下運動シミュレーション

○宮尻 拓 (立命館大学), 藤田 且久 (立命館大学), 仲田 晋 (立命館大学)

2. 漸化式動的グループ化による Block GWBiCGSTAB 法の収束性・近似解精度改善

○多田野 寛人 (筑波大学)

3. ◎並列処理を前提とした通信回避 Krylov 部分空間解法の収束特性と性能評価

○松元 朗 (東京工科大学大学院), 藤田 宜久 (立命館大学), 伊東 拓 (日本大学), 阿部 邦美 (岐阜聖徳学園大学), 生野 壮一郎 (東京工科大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 15:00–16:20

A (K211)

[研究部会OS] 離散システム (1)

1. ◎行列式の次数計算による重み付き線形マトロイド交差アルゴリズムについて

○古江 弘樹 (東京大学情報理工学系研究科数理情報学専攻), 平井 広志 (東京大学情報理工学系研究科数理情報学専攻)

2. ◎スパイダーメトリック上での r-gather クラスタリング問題に対する FPT アルゴリズムと NP 困難性

○隈部 壮 (東京大学・理研 AIP), 前原 貴憲 (理研 AIP)

3. ◎無制約 XOS 関数最大化に対する最適近似アルゴリズム

河瀬 康志 (東京工業大学), 小林 佑輔 (京都大学), ○山口 勇太郎 (大阪大学)

4. ◎群ラベル制約付き最短路問題に対する強多項式時間アルゴリズム

○山口 勇太郎 (大阪大学)

B (K212)

[研究部会OS] 機械学習

1. ◎ Barron 評価を達成するニューラルネットの構成法

○園田 翔 (理研 AIP)

2. 識別問題に対する高次元ニューラルネットの勾配降下法の大域収束性と汎化性能解析

○二反田 篤史 (東京大学), 鈴木 大慈 (東京大学)

3. 機械学習を利用した結晶界面構造決定と物性の予測

○溝口 照康 (東大生研), 清原 慎 (東大生研), 大谷 龍剣 (東大生研)

4. パーシステントホモロジーと機械学習の組み合わせによるデータ解析

○大林 一平 (理化学研究所 AIP)

C (K213)

[研究部会OS] 応用可積分系 (2)

1. ABS 方程式系とガルニエ系からの六角格子上の離散冪函数の導出

○梶原 健司 (九州大学), 中園 信孝 (東京農工大学), 増田 哲 (青山学院大学), Joshi Nalini (シドニー大学)

2. ユークリッド幾何に基づく離散対数型美的曲線の実装

井ノ口 順一 (筑波大学), ○梶原 健司 (九州大学), 三浦 憲二郎 (静岡大学)

3. 糸のたわみ問題と離散ソボレフ不等式の最良定数

○山岸 弘幸 (都立高専), 永井 敦 (津田塾大)

4. ロジスティック不等間隔差分方程式による欠損データ対処法

○佐藤 大輔 (NTT ネットワーク基盤技術研究所), 松村 龍太郎 (NTT ネットワーク基盤技術研究所)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 15:00–16:20

D (K214)

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (3)

1. 分子動力学における共有結合ポテンシャル剛性行列の不定値性について

○鷲尾 巧 (UT-Heart 研究所/東京大学), 久田 俊明 (UT-Heart 研究所)

2. ◎粒子法を使用した電子状態計算

○廣野 史明 (法政大), 岩沢 美佐子 (法政大), 狩野 覚 (法政大), 善甫 康成 (法政大)

3. 遅延ピボットと内部反復改良を用いた大規模疎行列の高精度直接法

○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

4. 動的モード分解のノイズ除去の効果に対する統計解析

○相島 健助 (法政大学)

F (K302)

[一般講演] 応用数理 (3)

1. 連結ピン組織構造に伝達長の小さい関係を追加するモデル

○澤田 清 (流通科学大学)

2. 有限離散確率分布族の指数型測地線系の可積分性と平均化 Hebb 型学習方程式への応用

○上野 嘉夫 (京都薬科大学)

3. ◎ネットワーク最適化問題の双対理論から導く min-plus 行列式の別表現

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

4. ◎双向臨界グラフの構成的特徴付け

○喜多 奈々緒 (東京理科大学)

G (K303)

[正会員 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化 (4)

1. 陰関数曲面による発泡金属のソリッドモデル生成

○花岡 佑哉 (日本大学大学院生産工学研究科), 伊東 拓 (日本大学生産工学部), 仲田 晋 (立命館大学情報理工学部), 渡辺 圭子 (立命館大学理工学部)

2. 蛍光顕微鏡による DNA 画像のための画像処理技術の開発

○大谷 寛明 (核融合研、総研大), 松元 朗 (東京工科大), 生野 壮一郎 (東京工科大), 剣持 貴弘 (同志社大), 中村 浩章 (核融合研、名大), 波多野 雄治 (富山大), 藤原 進 (京都工繊大)

3. Visual Analytical System for Analyzing State-Transition in Dynamical Systems

○ WANG TING (京都大学大学院工学研究科), 夏川 浩明 (京都大学学術情報メーディアセンター), 小山田 耕二 (京都大学学術情報メーディアセンター)

4. ヘリカル核融合炉における磁力線の可視化

○胡 昆祁 (京都大学小山田研究室), 小山田 耕二 (京都大学), 大谷 寛明 (NIFS)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 16:30–17:50

A (K211)

[研究部会OS] 離散システム (2)

1. ◎ On pseudo-randomness of digraphs and ranking tournaments

○佐竹 翔平 (神戸大学 大学院システム情報学研究科)

2. 非正な曲率をもつ束と半束のクラスについて

○平井 広志 (東京大学)

3. ホッジランクを用いた選好意識データからのネットワーク構築

○谷口 隆晴 (神戸大学, JST さきがけ), 小松 瑞果 (神戸大学)

B (K212)

[正会員OS] FreeFEM チュートリアル

1. FreeFEM 講習会—変分不等式の数値解法

○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディアセンター), 高石 武史 (武蔵野大学)

C (K213)

[研究部会OS] 応用可積分系 (3)

1. 和型の max-plus 方程式の数理モデル

○高橋 大輔 (早稲田大学)

2. 一般化離散BKP方程式から導かれる混合ソリトン解について

○長井 秀友 (東海大学), 新澤 信彦 (西日本工業大学)

3. ◎交通流を記述する非線型離散モデルの構成とルール184FuzzyCAの超離散解析

○東 康平 (東京大学大学院数理科学研究科), 薩摩 順吉 (武蔵野大学工学部数理工学科)

4. アフィン型ミューテーションの可積分性について

○野邊 厚 (千葉大学), 松木平 淳太 (龍谷大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月5日 16:30–17:50

D (K214)

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (4)

1. ◎行列実数乗の計算に対する数値積分法のための前処理について

○立岡 文理 (名古屋大学), 曽我部 知広 (名古屋大学), 剱持 智哉 (名古屋大学), 張 紹良 (名古屋大学)

2. Fast validation for the Perron pair of an irreducible nonnegative matrix

○ Miyajima Shinya (Iwate University)

3. 有理関数の合成による伝達関数の改良とそれに対応するフィルタの構成について

○村上 弘 (首都大学東京)

F (K302)

[一般講演] 応用数理 (4)

1. 確率微分方程式の弱い近似で使用される近似正規確率変数について

○齊藤 善弘 (岐阜聖徳学園大学経済情報学部), 中島 貴志 (岐阜聖徳学園大学大学院 M2)

2. ◎辞書式順序におけるブーリアングレブナー基底の再帰生成アルゴリズム

○佐川 嘉信 (芝浦工業大学大学院理工学研究科), 井戸川 知之 (芝浦工業大学システム理工学部)

3. 境界フィードバックループに無駄時間要素を含む 1 階双曲型システムの安定性解析

○佐野 英樹 (神戸大学)

4. Convergence analysis of inner-iteration preconditioned GMRES method for least squares problems

○ Liao Zeyu (総合研究大学院大学 複合科学研究科 情報学専攻), 速水 謙 (国立情報学研究所/総合研究大学院大学 複合科学研究科 情報学専攻)

○：登壇者, ◎：若手優秀講演賞対象

Memorandum

とめ 株式会社とめ研究所

～知能情報処理技術をコアコンピタンスとした
ソフトウェア研究開発受託会社～

◆応用数理など博士課程出身者が多く活躍する当社では、現在、ソフトウェアリサーチャー（研究職）を採用中

◆応用数理の研究で培った数値解析、シミュレーション等の経験を先端ソフトウェア研究開発で発揮しませんか

●当社エンジニアの4割が博士号取得者、８割が博士課程出身

【会社情報】

とめ研究所の経営理念は未来の新しい働き方を先取りした「面白い事をやって社会や生活を変える」、経営ビジョンは人類が永遠に追い求め続けている「人と機械の共生でもっと生活を楽しく」です。

その「人と機械の共生でもっと生活を楽しく」を実現するためには、機械を賢くすることが最重要課題と考えています。機械を賢くするために、画像処理、自然言語処理、音声処理、知識処理、数値解析、統計処理、機械学習・ディープラーニング等の先端の知能情報処理技術、つまり人工知能に真正面から取り組んでいます。

あなたも、「ソフトウェアリサーチャー（研究職）」として、目の前に見えて来た人と機械の共生を目指して、機械を賢くする先端ソフトウェア研究開発に携わりませんか。

【活かせる力】

研究等で培った力、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。

(1) 課題追究力
- 研究課題の設定や課題解決の豊富な経験

(2) 論理的思考力
- 論文作成等を通じて培った論理的思考力

(3) 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未経験でも研修等で習得。

【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、博士課程での専攻分野、プログラミング経験はいずれも不問。 ・博士後期課程修了／中退見込、あるいは修了／中退後５年程度以内の方。 ・日本語でのドキュメント作成や打ち合わせなどが可能なネイティブレベルの日本語力をお持ちの方。
募集期間	随時
勤務地	希望考慮（原則住居の移動を伴う転勤なし） ・当社ラボ／京都本社・京阪奈・名古屋・横浜・東京・筑波 ・当社ラボ周辺の客先プロジェクト所在地
応募方法	当社ＨＰの応募フォームよりご応募下さい。
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

ArithmerOCR

AI Optical Character Recognition

Arithmer株式会社では、独自のAI画像認識技術を応用し、活字と手書き、定型と非定型の紙文書や画像文書を高精度にテキスト化するArithmerOCRをご提供いたします。
文字は長い歴史の中で進化してきた究極の絵画であると考えます。高度AI技術に基づき、独自の領域抽出、文字分割、テキスト認識を行う事によって、難しい状況においても他を圧倒する認識率を実現しています。また、独自の自然言語処理技術と連携することで文書解析と補正を行い、より正確なテキスト化を実現しています。
ArithmerOCRの高精度テキスト化技術は、幅広い業界の紙文書や画像文書のテキスト化に適用可能です。ビジネスの目的達成のために、文書レイアウト構築から専門単語の辞書構築、技術コンサルティングまで、お客様が抱えている課題を共に解決していきます。
また ArithmerOCRでは、OCR結果を効率的に確認、修正するためのインターフェースも提供いたします。さらに、結果に応じて追加学習を進めることにより、使用するほど認識率は一層向上していきます。
もちろん、オンプレ、クラウドなど様々な環境に対応しています。オプションとして、Arithmer CC（Curation Center）では、OCR結果をキュレーターが正確に修正することで、ワンストップで電子データをご提供することも可能です。
ArithmerOCRによる紙文書、画像文書の電子化で、さらなるビジネスの飛躍を実感して下さい。

ArithmerSia

AI Still Image Analysis

Arithmer株式会社では、高度AI画像解析技術を応用して、静止画像からの物体識別、位置特定、固有情報の高精度な取得を実現します。
- 見えないものを見る - 従来、人の目で静止画から情報を取得し判断していた検査などの業務は、ArithmerSiaを使用することで飛躍的に効率化、高精度化することが可能です。
たとえば、保険業界では自動車の事故画像から損傷部位や損傷の程度を瞬時に判定する機能を開発、迅速な保険金の支払いに適用することができます。
またArithmerSiaは、インターネット、工場の生産ライン、フードプロテクションなど、様々な環境から得られる大量の画像資産の有効活用を可能にし、コスト削減や生産性の向上に繋げています。
オンプレ・クラウドにとどまらず、iOS・Androidアプリケーションへの導入も可能です。お客様の大切な画像資産を有効活用し、お客様と共に新しいソリューションを作り上げていきます。

ArithmerDia

AI Dynamic Image Analysis

Arithmer株式会社の高度AI動画解析技術に基づいた ArithmerDia では、動画中の物体識別、位置特定、人物検出、動作解析、詳細情報の取得などを容易にし、さらにはピクセル数値のゆらぎを解析することで、動画中の空気の流れすら特定することができます。
たとえば、自動車などの分野では、車載動画を自動監視することで、安全運転を呼びかけるサポートや、先進運転支援(ADAS)を可能にします。
さらに、製造業では製造工程におけるダイナミックな不良検知、インフラ分野ではカメラを通じた現場監視の自動化技術、その他あらゆる現場のオペレーションをサポートします。
ArithmerDiaでは、従来目視で行ってきた動画解析の自動化を実現するだけでなく、あらゆるメディアの動画を解析することで、ユーザに適切な行動をサジェスト、広告や業務管理と最適化など、様々な分野への応用を期待できます。
もちろん、オンプレ・クラウドでの導入にとどまらず、iOS、Androidアプリケーションとしても動作が可能です。

ArithmerRobo　AI Smart Robot

Arithmer株式会社では、高機能なロボットシステムに、弊社独自のAI技術を導入したArithmerRoboをご提供致します。世界トップクラスのロボットメーカーと提携し、弊社独自の画像解析、3Dモデリング、AI　agent、自然言語処理など、最先端のAI技術をロボットに導入する事で、専門家の能力をはるかに凌ぐAIスマートロボットを実現します。
さらにArithmerRoboでは、これら複数のAIスマートロボットどうしが相互に協調し、より良いパフォーマンスを発揮するためのAIネットワークを構成します。私達はこのArithmerRoboによって、AIスマートファクトリーの基盤を構築し、グローバルなビジネスインフラに変革をもたらします。

ArithmerDB

AI Agent for Big Data Management System

Arithmer株式会社では、独自のAI　agent技術を応用した統合データベース環境を実装することで、分散されたビッグデータ間の複雑な関係性を自動的に分析、連携するArithmerDBをご提供致します。
このArithmerDBは、現在お持ちのデータ集合に手を加えることなく、AI　agentが自律的に、分散したビッグデータの中から有機的な解析と発見を行います。
たとえば、銀行などの金融機関では、企業間マッチング、人材配置などに活用されており、ユーザーの求める情報をAI agentが自律的に提案することを可能としています。
さらに、従来のSQLによる問い合わせに加えて、弊社独自のAI技術を応用することで、自然言語による柔軟なデータベースの問い合わせも実現しています。これにより、さらに直感的かつ高速に必要なデータの抽出を可能としています。
ArithmerDBを活用すれば、分散したビッグデータに隠れている貴重な情報を最大限に活用する事ができ、ビジネスの発展に大きく貢献します。

ArithmerR3

AI 3D Modeling

Arithmer株式会社では、高度数学を駆使した実数3次元モデリングのためのArithmerR3をご提供しています。
このArithmerR3では、人体、口腔内、商品などの3Dビックデータから次元削減を行い、比較的少数のパラメータを持つ3Dモデルを構築する事が可能です。
たとえば、人体の画像採寸による洋服のオーダーメイドや、義歯の画像モデリングによる製作、乱雑に置かれたワークのロボットによるピッキングなど、幅広いタスクで応用されています。
導入している業界は、服飾業から製造業、医療品開発業、宇宙開発など多岐にわたっています。
オンプレ・クラウドでの導入にとどまらず、iOS、Androidアプリケーションとしても動作可能なArithmerR3で、異次元のモデリング技術を体験して下さい。

ArithmerNLP

AI NLP and Chatbot

Arithmer株式会社では、AI自然言語処理技術に基づいた弊社独自のNLPシステムを用いて、大規模コーパスから最適な解を瞬時に引き出すArithmerNLPを提供致します。
この ArithmerNLPは、数千ページにわたる複雑な業務マニュアルから社内FAQに対応したAI Chatbot を半自動で生成、顧客からの問い合わせに瞬時にかつ正確に回答します。
さらに質問傾向や回答結果のビックデータを自動的に蓄積、活用する事で、業務効率化にも用いられています。
またArithmerNLPは、テキストベースのインターフェースだけではなく、音声、画像認識を活用した誰でも簡単に使える対話型エンジンとして、コールセンター、AI気象予報士など、幅広い層に対応したサービスのご提供可能です。
オンプレミス、クラウドのどちらの環境でもご提供できる体制を整えており、より高度なユーザーエクスペリエンスを実感できます。

Arithmer 株式会社
〒106-6040 東京都港区六本木一丁目6番1号 泉ガーデンタワー 40F
tel. 03-5579-6683　HP https://arithmer.co.jp

AIシステム開発最前線

最先端の現代数学で AI(人工知能)の可能性を切り拓く

Arithmer 株式会社
代表取締役社長兼 CEO
東京大学大学院 特任教授
大田佳宏

最新のAI技術が社会実装されるようになって約10年。止まらない進化を支えているのが現代数学だ

AI実用化を左右する「精度の壁」

現代では，インターネット上を大量のデータが行き交い，これを用いた深層学習で磨かれたAIシステムが次々と登場している。工場や事務作業の自動化に役立つだけでなく，高齢者世帯の家事の手助けをしたり，建設や農業など人手不足が深刻な現場で働く人をサポートするなど，人々の幅広いニーズに応えられるようになってきた。

こうしたなかAIシステム開発の課題も見えてきた。画像認識技術を用いた顔認証システム，自動通訳システムなどでは，まさに「人を超える能力」を発揮する一方，社会実装の一歩手前で足踏みする研究も少なくないのだ。

では，何がAI研究の社会実装のハードルとなっているのか。東京大学大学院数理科学研究科の特任教授で，2016年に東京大学数理科学分野で初のベンチャーとしてArithmerを設立した大田佳宏氏は「重要な課題の一つはAIの精度だ」と解説する。

例を挙げると，AI研究の重要なテーマでもあったOCR(光学文字認識) は、これまで金融機関の手書き申込書などでは50%以上の精度を完全には実現することができずにいた。半分のミスを人が修正するなら，事務作業の効率化に貢献できないため，大規模な導入が見送られてきた。

現代数学がもたらしたAIの高精度化

AIシステム開発において精度の壁を乗り越える「道具」として注目されているのは現代数学だ。大田氏は「現代の科学技術の基盤にあるのは，100年前に生まれた数学だ。しかし，この間に数学は多様な進歩を遂げた。現代数学は次の100年を創造する原動力となるだろう」と話す。

AIシステム開発もその一つだ。Arithmerは設立以来，超離散系，トポロジーなどの現代数学をAIシステムの精度向上に役立てる研究に取り組んできた。そして，最初に大きな成果を得たのが，これまで課題の多かったOCRシステムだ。AIシステムに現代数学を導入することで，従来のシステムの約2倍近くの精度を実現。精度の壁を突き破ったことで，事務作業の大幅な軽減を可能にし，大手金融機関などに採用されているという。

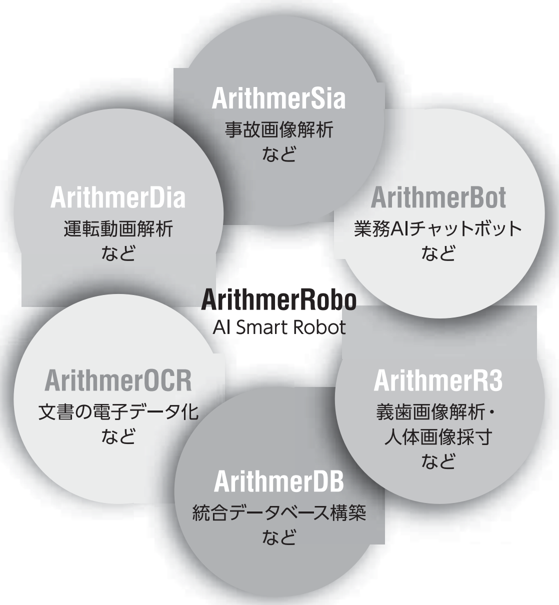
危険な運転をAIが察知

現代数学の応用によって格段に精度を高めたAIは，社会のさまざまな領域の課題解決に役立つと期待される。Arithmerでは，定型／非定型文書の電子データ化（ArithmerOCR)，業務AIチャットボット（ArithmerBot)，統合データベース構築（ArithmerDB）など7つの領域において重点的なシステム開発を進めてきた（左下図）。

なかでも期待が高いのは自動車関連の技術だ。自動運転車の実現は，少し先のことになりそうだが，そのために研究されたAIシステムが車社会の課題解決に貢献しようとしている。

例えば，Arithmerが大手損害保険会社と共同開発した運転動画解析システム（ArithmerDia）は，ダッシュボードに置かれたスマートフォン（スマホ）

Arithmerの研究開発領域



日経サイエンス
2019 03 掲載

で撮影された動画データを利用してドライバーの運転内容を評価する。

システム構築にあたってArithmerは10ヶ月間の走行データを蓄積し解析。信号や各種標識の有無だけでなく，運転速度などを認識できるようにした。そして，ドライバーが赤信号を直進してしまったり，急なハンドル操作をするなど危険な事故につながりかねない運転をAIが判断。自動的にその画像を保存し，レポートを作成する。

ドライバーを雇用する運輸企業やタクシー会社ではドライバー一人ひとりの違反やクセを正確に把握することで，効率的な安全運転教育に役立つほか，自動車保険のコストを低減することにつながるという。

スマホで簡単に洋服の採寸

また，一般の人々の生活を大きく変える技術として注目されているのは，AIを活用したモデリング技術だ。Arithmerでは大手紳士服メーカーと共同で，スマートフォンを用いた自動採寸システム（ArithmerR3）を開発した。

このシステムでは，スマホに専用のアプリをダウンロード。スマホのカメラで体の前後など計4回撮影するだけで，AIが数千人分の体型データをもとに，肩幅，胸周りなどのサイズをミリ単位で計測する。データをメーカーに送信すれば，店舗で採寸することなくオーダーメイドのワイシャツを購入することができるという。

AIを活用した最新のモデリング技術は，歯科医療も大きく変えるだろう。これまで義歯（被せもの）をつくるとき，歯科クリニックでは樹脂で患者の口腔型をとり，それを歯科技工士に送って義歯を作成してもらう。そのため患者に義歯を入れるまでに1週間程度の時間がかかっていた。

それに対してArithmerが歯科技工所を展開する企業と開発した「義歯リアルタイム自動生成システム」ならクリニックを受診したその日に義歯を入れることができるという。

このシステムでは特殊な装置を用いて口腔内をスキャンし，データを歯科技工所に送る。歯科技工所ではコンピューターを用いて最適な設計データを作成しクリニックに送り返す。クリニックでは，そのデータを用い3Dプリンターで義歯を作成する。

大田氏は「大量のデータから深層学習によってモデルを作成した。現在，日本では，歯科技工士が作った義歯でないと使用できないが，海外からの受注が増えている」と話す。制度が整えば日本でも受診したその日に義歯が入れられる日が来るだろう。

北海道に現代数学の研究拠点を設立

大田氏がArithmerを設立してから2年半。現代数学は，AIシステム開発の可能性を大きく広げようとしている。2019年はArithmerにとっても飛躍の年になりそうだ。

Arithmerの技術を導入する企業が増加していると同時に，グローバル化も本格化する。提携企業と共に進出する形で，米国（シカゴ・ボストン・カリフォルニア），カナダ，インド，ベトナム，シンガポールに拠点を設ける予定だ。

そしていま，大田氏が準備を進めているのは，現代数学の拠点を日本に設立することだ。それが北海道虻田郡ニセコ町に設立予定の「国際数学研究所ニセコ」で，2003年にカナダに設立され高い評価を受けている数学研究所に匹敵する規模のものになる予定という。世界の数学者がニセコに集まることで，日本のAIシステム開発はさらに加速すると期待される。

大田氏は「いま，さまざまなAIシステムが開発されている。近い将来，こうした要素技術を統合する形でAI Smart Robotが登場し，社会に大きな変革をもたらすだろう」と話す。そのとき未来のトビラを開く鍵となるのが現代数学といえるだろう。

Arithmer 株式会社
〒106-6040 東京都港区六本木一丁目6番1号
泉ガーデンタワー 40F
https://arithmer.co.jp
Arithmer

ポスター講演

- 地盤材料を対象にした 3 次元 SPH プログラムのエネルギー保存の検討
  ○野中 沙樹 (神戸大学), 大石 哲 (神戸大学)

- 個人毎に最適な脳波二値化条件の抽出
  ○永井 亮祐 (同志社大学大学院)

- 標準化レーベンシュタイン距離法を用いたアミノ酸置換スコア行列である BLOSUM の改良と応用
  ○金城 和輝 (同志社大学院), 小泉 範子 (同志社大学院), 伊藤 利明 (同志社大学院)

- 自動運転車の特徴を考慮したセルオートマトンモデル
  ○松永 玲香 (お茶の水女子大学 人間文化創成科学研究科), 友枝 明保 (武蔵野大学 工学部 数理工学科), 西成 活裕 (東京大学 先端科学技術研究センター)

- ファッションコーディネート選択と集合特徴量
  ○長瀬 准平 (芝浦工業大学大学院理工学研究科/ZOZO Research), 斎藤 侑輝 (ZOZO Research), 中村 拓磨 (ZOZO Research), 石渡 哲哉 (芝浦工業大学システム理工学部)

- 河川における生物ダイナミックスの管理方針に関わる確率過程モデリング：斐伊川の事例
  ○吉岡 秀和 (島根大学), 辻村 元男 (同志社大学), 八重樫 優太 (京都大学), 吉岡 有美 (島根大学), 濱上 邦彦 (岩手大学)

- 指定相対精度での行列対数関数の計算法
  ○中村 真輔 (秋田県立大学)

- コウイカ類の筋収縮によるパターン形成のための数理モデル
  ○深田 英吾 (島根大学大学院自然科学研究科), 水野 佳奈 (島根大学大学院総合理工学研究科), 岩本 真裕子 (島根大学学術研究院理工学系)

- 旬の青果物を美しく包むオリガミマジック！
  ○阿部 綾 (明治大学), 寺田 耕輔 (明星大学), 崎谷 明恵 (明治大学), 萩原 一郎 (明治大学)

- 美しく折畳めスプリングバックしないペットボトルの開発
  ○楊 陽 (明治大学), 陳 暁詩 (明治大学), 奈良 知恵 (明治大学), 萩原 一郎 (明治大学)

- 粘着円充填の斜列構造の分岐
  ○牧田 渉 (龍谷大学), 山岸 義和 (龍谷大学), 須志田 隆道 (サレジオ工業高等専門学校)

- 二種類の移動確率を持つ完全非対称単純排他過程における移動確率の差の影響に関する研究
  ○川口 りほ (東京大学), 柳澤 大地 (東京大学), 西成 活裕 (東京大学)

- 3 値 3 近傍 CA のファジー化と 1 次保存則を満たすルールの数え上げ
  ○小西 沙織 (同志社大学大学院理工学研究科), 坂本 崇真 (同志社大学理工学部), 山﨑 功貴 (同志社大学理工学部), 西田 優樹 (同志社大学大学院理工学研究科), 渡邊 芳英 (同志社大学理工学部)

- 数点における観測値に基づく双極子波源の代数的推定法
  ○大江 貴司 (岡山理科大学理学部), 横山 美沙 (株式会社エス・ユー・エス)

- ピーク近傍の流行動態を用いた年令別定点報の捕捉率の推定
  ○斎藤 正也 (統計数理研究所), 西浦 博 (北海道大学)

- 非自励な dLVs 系から導かれる“加速型”箱玉系
  ○関口 真基 (東京都立荻窪高等学校), 岡 来美 (京都府立大学生命環境学部), 岩崎 雅史 (京都府立大学生命環境学部), 石渡 恵美子 (東京理科大学理学部応用数学科)

- タイムラグを考慮した離散ロトカ・ボルテラ系とその固有値計算への応用
  ○岡 来美 (京都府立大学生命環境学部), 関口 真基 (東京都立荻窪高等学校), 岩崎 雅史 (京都府立大学生命環境学部), 石渡 恵美子 (東京理科大学理学部応用数学科)

- ブロック赤黒順序付け緩和 MILU(0) 前処理法の GPU 向け高速化
  ○塩谷 明美 (電気通信大学), 山本 有作 (電気通信大学)

- 重力崩壊における Einstein 方程式の数値安定性と CAF
  ○浦川 遼介 (早稲田大学), 米田 元 (早稲田大学)

- 賃貸物件の価格設定に関する数理モデル
  ○土屋 拓也 (八戸工業大学), 西尾 洸毅 (八戸工業大学)

- 産業情報の収集および分析に基づく産業支援サイトの構築〜城陽市の発展に向けて〜
  ○村澤 直毅 (東京急行電鉄株式会社), 新庄 雅斗 (同志社大学), 岩崎 雅史 (京都府立大学)

- 自己駆動粒子系の集団運動の制御
  ○市川 直人 (島根大学大学院自然科学研究科), 岩本 真裕子 (島根大学学術研究院理工学系), 上山 大信 (武蔵野大学工学部), 加納 剛史 (東北大学電気通信研究所), 山田 恭史 (広島大学大学院統合生命科学研究所)

- 倍精度数による 4 倍精度・8 倍精度数の演算ライブラリの開発
  ○平山 弘 (神奈川工科大学)

- 四辺形分割を用いた動く立体の構成手法
  ○宮嶌 祐生 (東京大学), 舘 知宏 (東京大学)

- Time series motif discovery in matrix profiles via low-rank approximation
  ○保國 惠一 (筑波大学)

超特異性判定アルゴリズムの効率化とその暗号応用

橋本 侑知 [1,3], 高島克幸 [2]
[1] 東京大学，[2] 三菱電機 情報技術総合研究所, [3] 産業技術総合研究所
e-mail : yuji_hashimoto@mist.i.u-tokyo.ac.jp
e-mail : Takashima.Katsuyuki@aj.MitsubishiElectric.co.jp

1 概要

超特異楕円曲線間の同種写像を用いた暗号は耐量子暗号として期待されており、DH 型鍵共有 (SIDH: Supersingular Isogeny Diffie–Hellman)、認証・署名、ハッシュ関数等が研究されている。それらの暗号系で用いられている楕円曲線が実際に超特異楕円曲線であることを第三者が検証するためには超特異性判定アルゴリズムが必要である。Sutherland の超特異性判定アルゴリズム [1] では、同種写像グラフの特性が巧みに用いられる。我々は、そのアルゴリズムに、吉田–高島により提案された 2-同種写像列計算の効率化手法 [2] を適用して効率化を図る。そして、Sutherland アルゴリズムとの計算量比較を行い、計算機による速度評価も行う。また、立花–高島–高木の 3-同種写像列計算 [3] の超特異性判定アルゴリズムへの適用についても検討する。

2 提案アルゴリズム

標数 p は $p \equiv 1 \pmod{12}$ とする。本章では、吉田–高島の効率的な 2-同種写像列計算と立花–高島–高木の効率的な 3-同種写像列計算を用いて Sutherland の超特異性判定アルゴリズムを効率化する。

2.1 吉田–高島法を用いた超特異性判定アルゴリズム

入力を標数 $p\ (\geq 5)$ の有限体 $\mathbb{F}_q$ $(q = p$ or $p^2)$ 上定義された楕円曲線 $E : y^2 = f(x) = x^3 + Ax + B$ $(A, B \in \mathbb{F}_{p^2})$ として、超特異楕円曲線ならば true、そうでなければ false を出力する吉田–高島の 2-同種写像列計算を基にした超特異性判定アルゴリズムは、以下の手順で実行される。

1) $j(E) \notin \mathbb{F}_{p^2}$ であれば false を出力する。
2) X に関する 3 次式 $f(X)$ が $\mathbb{F}_{p^2}$ に 3 つの根を持っていなければ false を出力する。持っていれば、その 3 根を $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2 (\in \mathbb{F}_{p^2})$ とする。
3) $\mu = 0, 1, 2$ に対して、初期値 $(\alpha_{0,\mu}, \beta_{0,\mu}, \gamma_{0,\mu})$ を

$$
\begin{aligned}
(\alpha_{0,0}, \beta_{0,0}, \gamma_{0,0}) &\leftarrow (\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2),\\
(\alpha_{0,1}, \beta_{0,1}, \gamma_{0,1}) &\leftarrow (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_0),\\
(\alpha_{0,2}, \beta_{0,2}, \gamma_{0,2}) &\leftarrow (\lambda_2, \lambda_0, \lambda_1),
\end{aligned}
$$

とする。
4) $m = \lfloor \log_2 p \rfloor + 1$ として、$i = 1$ から m まで以下を繰り返す。
$\mu = 0, 1, 2$ に対して、判別式

$$\Delta_{i-1,\mu} \leftarrow (\beta_{i-1,\mu} - \alpha_{i-1,\mu})(\gamma_{i-1,\mu} - \alpha_{i-1,\mu})$$

が $\mathbb{F}_{p^2}$ において平方根をもつかどうか判定して、持たないならば false を出力する。持っていれば、その 1 根を $\delta_{i-1,\mu} = \Delta_{i-1,\mu}^{\frac{1}{2}}$ として、i 番目の楕円曲線 E_i の 2 等分点 x 座標 $(\alpha_{i,\mu}, \beta_{i,\mu}, \gamma_{i,\mu})$ を以下により計算する。

$$\alpha_{i,\mu}, \gamma_{i,\mu} \leftarrow \alpha_{i-1,\mu} \pm 2\delta_{i-1,\mu}, \beta_{i,\mu} \leftarrow -2\alpha_{i-1,\mu},$$

5) 以上の手順で false と出力されなかったら true を出力する。

2.2 立花–高島–高木法を用いた超特異性判定アルゴリズム

3-同種写像を用いた超特異性判定アルゴリズムは、前節アルゴリズムより主要計算の繰り返し回数が少ないアルゴリズムとなる。但し、3 等分点 x 座標の $\mathbb{F}_{p^4}$ への所属が判定条件として用いられるので、現状では効率は良くないと思われる。その超特異性判定アルゴリズムは、以下の手順で実行される。入力は、標数 $p\ (\geq 5)$ の有限体 $\mathbb{F}_q$ $(q = p$ or $p^2)$ 上定義された楕円曲線 $E : y^2 = f(x) = x^3 + Ax + B$ $(A, B \in \mathbb{F}_{p^2})$ である。

1) $j(E) \notin \mathbb{F}_{p^2}$ であれば false を出力する。
2) E の 3 等分多項式 $\psi_3(x) = 3x^4 + 6Ax^2 + 12Bx - A^2$ の 4 根を $\alpha^x_{0,1}, \ldots, \alpha^x_{0,4}$ とする。もし、$\alpha^x_{0,\mu} \in \mathbb{F}_{p^4}$ $(\mu = 0, \ldots, 3)$ でなければ false を出力する。また、$A_{0,\mu} = A, B_{0,\mu} = B$ $(\mu = 0, \ldots, 3)$ とする。
3) $m = \lfloor \log_3 p \rfloor + 1$ として、$i = 1$ から m まで以下を繰り返す。
   $\mu = 0, \ldots, 3$ に対して、
   (a) $\xi_{1,\mu} \leftarrow (\alpha^x_{i,\mu})^2, \xi_{2,\mu} \leftarrow \alpha^x_{i,\mu}\xi_{1,\mu}, \xi_{3,\mu} \leftarrow A_{i,\mu}\alpha^x_{i,\mu}$,
   $A_{i+1,\mu} \leftarrow -(9A_{i,\mu} + 30\xi_{1,\mu})$,
   $B_{i+1,\mu} \leftarrow -(70\xi_{2,\mu}+42\xi_{3,\mu}+27B_{i,\mu})$,
   (b) $\tau_\mu \leftarrow -6(3\xi_{1,\mu} + A_{i,\mu})$,
   $\sigma_\mu \leftarrow -6(15\xi_{2,\mu} + 11\xi_{3,\mu} + 9B_{i,\mu})$,
   $\zeta_\mu \leftarrow \sqrt{\sigma_\mu^2 + \tau_\mu^3}$,
   $u_\mu \leftarrow \sqrt[3]{-\sigma_\mu + \zeta_\mu}$, $v_\mu \leftarrow -\tau_\mu/u_\mu$,
   $\alpha^x_{i+1,\mu} \leftarrow \alpha^x_{i,\mu} + u_\mu + v_\mu$
   を計算する。もし、$\alpha^x_{i+1,\mu}$ が $\mathbb{F}_{p^4}$ に入らないならば false を出力する。
4) 以上の手順で false と出力されなかったら true を出力する。

3 計算量比較

j 不変量とモジュラー多項式を用いた既存最速のアルゴリズムである Sutherland の超特異性判定法と、2 等分点のみを用いた提案法との計算量比較を行う。共に、ステップ 4 内で、$m = \lfloor \log_2 p \rfloor + 1$ 回繰り返される開平演算を含む計算過程が、最も計算時間が多く必要となるところである。それを基本過程と呼ぶことにして、その基本過程内で必要とされる $\mathbb{F}_{p^2}$ 演算を、表 1 にまとめる。我々の提案法では、基本過程において必要な $\mathbb{F}_{p^2}$ 乗算回数が 6 回少ない。

$\mathbb{F}_{p^2}$ 演算	乗算	開平	定数倍
Sutherland [1]	9	3	15
2-同種写像に基づく提案法	3	3	–

表 1. 基本過程内で必要とされる $\mathbb{F}_{p^2}$ 演算

4 計算機実験による速度評価

b をビット長とする。表 2 の各ビット長に対して、 $p \in [2^{b-1}, 2^b]$ の中からランダムに 5 つの素数を選んだ。また、各 p に対して $\mathbb{F}_{p^2}$ 上の超特異楕円曲線を 100 個生成し、それらの超特異性判定速度の平均値を Magma を用いて計った。それらの超特異楕円曲線は、起点となる超特異楕円曲線から 2-同種写像列計算を用いてランダムに生成されたものである。起点となる超特異楕円曲線は、Magma の SupersingularEllipticCurve function を用いて生成している。また、Magma の計算機環境は Magma V2.23-10 on 2.10 GHz Intel Xero Skylake Gold 6130 Processor である。

表 2. Performance result (CPU times in milliseconds)

b	既存アルゴリズム	提案アルゴリズム
64	137	104
128	732	631
192	1676	1425
256	2430	2120
320	5150	4100
384	5711	4721
448	8434	7066
512	12865	10472
576	17153	14633
640	25735	21578
704	37302	31370
768	42132	36132
832	47533	39007
896	71306	53930
960	77907	68208
1024	121396	103023

参考文献

[1] A. Sutherland. Identifying supersingular elliptic curves. LMS J. Comp. and Math., 15-317-325, 2012.
[2] R. Yoshida and K. Takashima. Computing a sequence of 2-isogenies on supersingular elliptic curves. IEICE Trans. Fundamentals, 96-A(1):158-165, 2013.
[3] H. Tachibana, K. Takashima, and T. Takagi. Constructing an efficient hash function from 3-isogenies. JSIAM Letters, 9:29-32, 2017.

同種写像問題に対する代数的求解法の解析と計算量評価

高橋 康 [1], 工藤 桃成 [2], 池松 泰彦 [3], 安田 雅哉 [3], 横山和弘 [4]
[1] 富士通研究所，[2] 神戸市立工業高等専門学校，[3] 九州大学，[4] 立教大学
e-mail : m-kudo@kobe-kosen.ac.jp (工藤)

1 Introduction

同種写像暗号とは，楕円曲線間の同種写像計算問題の困難性に安全性の根拠を置く暗号方式であり，耐量子暗号候補として期待されている．実際，2011 年に Jao らが同種写像ベースの暗号方式を提案し，2017 年末には Jao らの方式を基にした鍵交換アルゴリズム SIKE が耐量子暗号候補として NIST に提出された．

以下，q を奇素数 p の冪とし，有限体 $\mathbb{F}_q$ 上の楕円曲線 E の j 不変量，$\mathbb{F}_q$ 有理点のなす群とその位数を，それぞれ $j(E)$，$E(\mathbb{F}_q)$，$\#E(\mathbb{F}_q)$ と表す．次の問題 1 は**一般同種写像問題 (General Isogeny Problem)** [1] と呼ばれ，同種写像計算問題の標準的な形式として知られる：

問題 1 与えられた $j, \tilde{\jmath} \in \mathbb{F}_q$ に対して，$j(E) = j$，$j(\widetilde{E}) = \tilde{\jmath}$，$\#E(\mathbb{F}_q) = \#\widetilde{E}(\mathbb{F}_q)$ を満たす同種な $\mathbb{F}_q$ 上の楕円曲線 E，$\widetilde{E}$ および同種写像 $\phi : E \to \widetilde{E}$ を計算せよ．

ここで $\mathbb{F}_q$ 上の楕円曲線 E，$\widetilde{E}$ が同種であることは，$\#E(\mathbb{F}_q) = \#\widetilde{E}(\mathbb{F}_q)$ に同値である．

問題 1 には種々の variant があり，これまで様々な解読アルゴリズムが提案されてきた．考える楕円曲線が**通常 (ordinary)** である場合には，量子計算機を用いたアルゴリズムで準指数時間計算量のものが提案されている．一方で，**超特異 (supersingular)** 楕円曲線に対しては量子計算機によるアルゴリズムでも指数時間計算量であるため，SIKE などにおいては超特異楕円曲線がパラメータとして利用されている．

本研究では問題 1 の variant として，同種写像ハッシュ関数 [2] や SIDH 鍵共有 [3] の安全性とも関連性が深い **Supersingular Isogeny Graph Path-Finding Problem** と呼ばれる次の問題 2 に着目し，古典計算機による解読手法について考察する：

問題 2 奇素数 ℓ_0 を固定し，ℓ を ℓ_0 の冪とする．与えられた $j, \tilde{\jmath} \in \mathbb{F}_{p^2}$ に対して，$j(E) = j$，$j(\widetilde{E}) = \tilde{\jmath}$，$\#E(\mathbb{F}_q) = \#\widetilde{E}(\mathbb{F}_q)$ を満たす ℓ 同種な超特異楕円曲線 E，$\widetilde{E}$ および次数 ℓ の同種写像 $\phi : E \to \widetilde{E}$ を計算せよ．

ここで同種写像 $\phi : E \to \widetilde{E}$ が次数 ℓ であるとは，群として $\mathrm{Ker}(\phi) \cong \mathbb{Z}/\ell\mathbb{Z}$ となるときをいう．また，次数 ℓ の同種写像 $\phi : E \to \widetilde{E}$ が存在するとき，E と $\widetilde{E}$ は ℓ 同種であるという．

問題 2 に対する一般的解法としては，**衝突探索法** (Meet-in-the-middle approach) [4] と呼ばれるものがあり，古典計算機による計算量は $\widetilde{O}(\sqrt{\ell})$ となることが知られている．これに対し高橋らは SCIS2019 において代数的求解アルゴリズム [5] を提案し，次数が小さい冪の同種写像問題に対しては，衝突探索法より高速であることを実験的に示した．しかしながら，F_4 アルゴリズムによる Gröbner 基底計算などを用いていることから，その計算量評価が困難であった．そこで本研究では，高橋らの求解法において現れるイデアルの構造などを明らかにすることで，漸近計算量を厳密に評価するとともに，今後期待できる高速化について考察する．

2 高橋らの代数的アルゴリズムの概要

高橋らが SCIS2019 において提案した代数的求解手法 [5] には次の二種類があり，両者ともに問題 2 を有限体上の代数方程式系の求解に帰着させることができる：

手法 1 楕円曲線の**モジュラー多項式**を利用．
手法 2 同種写像の**核多項式**を利用．

高橋らの実験結果 [5] において，$\ell = 3^e$ で $e \leq 4$ のときに手法 2 は衝突探索法より高速であることが示されている．しかしながら両手法で，代数方程式系の求解のための Gröbner 基底計算において，計算代数システム Magma の F_4 実装をブラックボックス的に用いており，実験結果のみから漸近計算量を正確に推測することは困難であった．特に手法 1 に関しては，3 節で述べるように実際には F_4 アルゴリズムを用いる必要はなく，さらなる高速化改良が可能である．

本予稿では手法 1 に着目し，以下にまずその計算の概要を述べる．求める ℓ 同種写像 $\phi : E \to \widetilde{E}$ を，e 個の ℓ_0 同種写像の列

$$E_0 \xrightarrow{\phi_1} E_1 \xrightarrow{\phi_2} \cdots \xrightarrow{\phi_e} E_e$$

に分解し，各楕円曲線 E_k $(1 \le k \le e-1)$ の j 不変量 j_k を変数とみて，$\Phi_\ell(j_{k-1}, j_k) = 0$ $(1 \le k \le e)$ で定義される代数方程式系を $\mathbb{F}_q$ 上で求解する．ここで，$E_0 := E$，$E_e := \widetilde{E}$，$j_0 := j = j(E)$ と $j_e := \tilde{\jmath} = j(\widetilde{E})$ であり，$\Phi_{\ell_0}(X, Y) \in \mathbb{Z}[X, Y]$ は**モジュラー多項式**と呼ばれる．特に e が偶数 $e = 2e_0$ のとき，上記の方程式系は変数の少ない二つの方程式系に分割可能であり（**二分法**と呼ぶ），Gröbner 基底を求めることで求解できる．

3　手法 1 の具体的計算方法と計算量評価

手法 1 の Gröbner 基底計算において F_4 アルゴリズムを用いる場合，その計算量を正確に見積もるには，計算中に現れる多項式の次数の最大値，または，イデアルの正則性次数を求める必要がある．しかし，これらの計算量指標を入力多項式のみから厳密に評価する方法は現時点では知られていない．そこで本研究では，手法 1 の方程式系を定めるイデアルの代数的性質を利用することで，F_4 アルゴリズムの使用を避けた代数方程式系求解方法を明示的に与えるとともに，その漸近計算量を厳密に評価する．

以下では簡単のため，e は 2 冪とし，$e_0 = e/2$，$\ell' := \ell_0^{e_0} = \sqrt{\ell}$ とする．手法 1 では，j と $\tilde{\jmath}$ から j_{e_0} を求めることができれば,「j と j_{e_0} から $j_{e_0/2}$ (resp. j_{e_0} と $\tilde{\jmath}$ から $j_{3e_0/2}$) を求める」というパラメータの小さい問題へと分割できる．このため，j と $\tilde{\jmath}$ から j_{e_0} を求める計算量を評価すれば十分であることに注意する．以下 j_k $(1 \le k \le e-1)$ を変数とみなし，$h_k := \Phi_{\ell_0}(j_{k-1}, j_k)$ $(1 \le k \le e)$ とする．このとき，次が成り立つ：

- イデアル I (resp. $\widetilde{I}$) の j_{e_0} に関する最小多項式を g (resp. $\widetilde{g}$) とするとき，E_{e_0} の j 不変量は g と $\widetilde{g}$ の共通根である．

ここで

$$I := \langle h_1, \ldots, h_{e_0} \rangle \subset \mathbb{F}_q[j_1, \ldots, j_{e_0}],$$
$$\widetilde{I} := \langle h_{e_0+1}, \ldots, h_e \rangle \subset \mathbb{F}_q[j_{e_0}, \ldots, j_{e-1}]$$

であり，g (resp. $\widetilde{g}$) は $I \cap \mathbb{F}_q[j_{e_0}] = \langle g \rangle$ (resp. $\widetilde{I} \cap \mathbb{F}_q[j_{e_0}] = \langle \widetilde{g} \rangle$) を満たす．従って，$j$ と $\tilde{\jmath}$ から j_{e_0} を求めるには，次の計算を行えばよい：

(1) 最小多項式 g (resp. $\widetilde{g}$) を求める計算.
(2) g と $\widetilde{g}$ の GCD を求める計算.

さらに，$h_1, \ldots, h_{e_0}$ (resp. $h_{e_0+1}, \ldots, h_e$) は $j_{e_0} \succ \cdots \succ j_2 \succ j_1$ (resp. $j_{e_0} \succ \cdots \succ j_{e-2} \succ j_{e-1}$) なる辞書式順序に関して既に Gröbner 基底となっており，(1) では F_4 アルゴリズムなどによる Gröbner 基底計算を行う必要はない．

(1) の計算方法としては，FGLM 基底変換，j_{e_0} に関する正規形計算の利用，逐次 GCD 計算利用の三つが考えられ，これらの計算量はそれぞれ $\widetilde{O}(e\ell^{\frac{3}{2}})$，$\widetilde{O}(\ell^{\frac{3}{2}})$，$\widetilde{O}(\ell)$ と評価できる．また，(2) の計算量は $\widetilde{O}(\ell^{\frac{2}{e}})$ であり，従って (1) で逐次 GCD 計算を適用する場合における手法 1 全体の計算量は $\widetilde{O}(\ell)$ となる．現状では衝突探索法の $\widetilde{O}(\sqrt{\ell})$ には及ばないが，実験的には $e \le 10$ において手法 2 と衝突探索法の双方より高速に計算することに成功している．また，講演において紹介予定の**三分法**による改良の実験結果では，今後の高速化改良により，さらに大きな e に対して衝突探索法に匹敵する可能性が示唆されている．

講演では，(1)，(2) の計算量評価の詳細や手法 2 の計算量，三分法を含む実験結果，および，更なる改良により今後期待できる高速化の見通しについて説明する予定である．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 19K22847 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] S. D. Galbraith and F. Vercauteren, Computational problems in supersingular elliptic curve isogenies, Quantum Inf. Process., **17** (2018), 265.

[2] D. X. Charles, K. E. Lauter and E. Z. Goren, Cryptographic hash functions from expander graphs, Journal of Cryptology, **22** (2009), 93–113.

[3] L. De Feo, D. Jao and J. Plut, Towards quantum-resistant cryptosystems from supersingular elliptic curve isogenies, Journal of Mathematical Cryptology, **8** (2014), 209–247.

[4] S. D. Galbraith, Constructing isogenies between elliptic curves over finite fields, LMS Journal of Computation and Mathematics, **2** (1999), 118–138.

[5] 高橋康, 安田雅哉, 横山和弘, Velu の公式による同種写像問題の連立代数方程式への帰着と求解, 2019 暗号と情報セキュリティシンポジウム, 4B2-3, 2019.

同種写像暗号 CSIDH の Edwards 曲線による構成について

守谷 共起 [1], 小貫 啓史 [1], 高木 剛 [1]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail : tomoki_moriya@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 背景

同種写像暗号 CSIDH は耐量子暗号の候補の一つであり，2018 年に Castryck らによって提案された [1]．CSIDH は超特異楕円曲線の同型類に対するイデアル類群の自由で推移的な作用により構成される．イデアル類群の作用の計算には，同種写像の核として，$\ker(\pi_p - 1)$ もしくは $\ker(\pi_p + 1)$ に含まれる点が必要となる．ここで，π_p は p-Frobenius 写像である．CSIDH では，Montgomery 曲線において x 座標が素体に含まれる点を考えることによって，暗号演算を素体上の計算のみで実現している．一方，楕円曲線暗号の高速化で利用される Edwards 曲線においては，w 座標という座標を考えることで高速な演算が実行できるが，w 座標が素体に含まれる点には 4 次拡大体上で定義される点まで含まれており，その表示から同種写像の核となる点を素体上の演算のみで得ることは自明ではない．本講演では，Edwards 曲線を用いた CSIDH を素体上の演算だけで実現する方法について述べる．

2 準備

2.1 同種写像

K を体とする．E を K 上定義された滑らかな種数 1 の代数曲線，O を $E(K)$ に含まれる E の点とする．このとき，組 (E, O) を K 上定義された楕円曲線と定義する．簡単のため，以降 O は省略する．楕円曲線 E には O を単位元とする可換群の構造を入れることができる．

E，F を K 上定義された楕円曲線とする．L を K の代数拡大体とする．L 上定義された定数写像でない有理写像 $\phi\colon E \to F$ が群の準同型になっているとき，ϕ を L 上定義された同種写像と呼ぶ．ϕ が分離で，$\#\ker\phi = \ell$ のとき，ϕ を ℓ-同種写像と呼ぶ．

G を E の有限部分群とするとき，$\ker\phi = G$ となる分離な同種写像 $\phi\colon E \to F$ が存在する．このとき，F は同型を除いて一意に定まり，その代表元を E/G と表す．また，G の点を使うことで ϕ を実際に計算することができる．

2.2 Montgomery 曲線

次の数式で定義される楕円曲線 $E_{\mathcal{M},a}$ を Montgomery 曲線と呼ぶ．

$$Y^2Z = X^3 + aX^2Z + XZ^2 \quad (a^2 - 4 \neq 0).$$

点 $P = (X : Y : Z)$ の x 座標を $x(P) = X/Z$，y 座標を $y(P) = Y/Z$，射影 x 座標 $\mathbf{x}$ を $\mathbf{x}(P) = (X : Z)$ により定める．Montgomery 曲線上の群演算，同種写像の計算は，射影 x 座標を使うことで効率的に行える．

2.3 Edwards 曲線

次の数式で定義される楕円曲線 E_d を Edwards 曲線と呼ぶ．

$$X^2 + Y^2 = Z^2 + dT^2, \quad XY = ZT \quad (d \neq 0, 1).$$

E_d の単位元を 0_d と表す．点 $P = (X : Y : Z : T)$ の w 座標を $w(P) = \frac{dT^2}{Z^2}$，射影 w 座標 $\mathbf{w}$ を $\mathbf{w}(P) = (dT^2 : Z^2)$ により定める．Edwards 曲線上の群演算，同種写像の計算は，射影 w 座標を使うことで効率的に行える [2, 3]．

2.4 CSIDH

この小節では CSIDH のプロトコルを説明する．最初に，CSIDH において重要な定理の主張を述べる．

定理 1 $\mathcal{O}$ を虚二次体の整環とし，E を $\mathbb{F}_p$ 上定義された楕円曲線とする．$\mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ を $\mathbb{F}_p$-自己準同型環が $\mathcal{O}$ と同型になる楕円曲線の $\mathbb{F}_p$-同型類の集合とする．$\mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ が超特異楕円曲線の $\mathbb{F}_p$-同型類を含むのならば，イデアル類群 $\mathrm{cl}(\mathcal{O})$ の $\mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ への作用，

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{cl}(\mathcal{O}) \times \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O}) & \longrightarrow & \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O}) \\ ([\mathfrak{a}], E) & \longmapsto & [\mathfrak{a}]E := E/E[\mathfrak{a}] \end{array}$$

は自由かつ推移的．ここで，$\mathfrak{a}$ は $\mathcal{O}$ の整イデアル，$E[\mathfrak{a}] = \bigcap_{\alpha \in \mathfrak{a}} \ker\alpha$ である．

定理 2 p を $p \equiv 3 \pmod 8$ を満たす素数とする．E を $\mathbb{F}_p$ 上定義された超特異楕円曲線とする．このとき，E と Montgomery 曲線 $E_{\mathcal{M},a}$ が $\mathbb{F}_p$-同型となるような a が存在するならば，そして存在するときのみ，$\mathrm{End}_p(E) \cong \mathbb{Z}[\pi_p]$ が成り立つ．さらに，a は E に対して一意．

CSIDH は次のように構成される．

1) Montgomery 曲線 $E \in \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathbb{Z}[\pi_p])$ を公開パラメータとする．$[\mathfrak{a}] \in \mathrm{cl}(\mathbb{Z}[\pi_p])$ を Alice の秘密鍵，$[\mathfrak{b}] \in \mathrm{cl}(\mathbb{Z}[\pi_p])$ を Bob の秘密鍵とする．
2) Alice は $[\mathfrak{a}]E$ を計算し，Bob に送る．Bob は $[\mathfrak{b}]E$ を計算し，Alice に送る．
3) Alice は $[\mathfrak{a}][\mathfrak{b}]E$ を，Bob は $[\mathfrak{b}][\mathfrak{a}]E$ をそれぞれ計算する．計算結果の Montgomery 係数を共有鍵とする．

イデアル類群による作用の計算は，一般的には容易ではない．CSIDH では p を $4 \cdot \ell_1 \cdots \ell_n - 1$ と取る．ここで，$\ell_1, \ldots, \ell_n$ は互いに異なる小さい奇素数である．$[\mathfrak{l}_1]^{e_1} \cdots [\mathfrak{l}_n]^{e_n}$ という形でイデアル類群の元を表す．ここで，$(e_1, \ldots, e_n)$ は絶対値が小さい整数の組で，$\mathfrak{l}_i = (\ell_i, \pi_p - 1)$，$\mathfrak{l}_i^{-1} = (\ell_i, \pi_p + 1)$ である．したがって，イデアル類群の計算は，核が $\ker(\pi_p - 1)$ もしくは $\ker(\pi_p + 1)$ に含まれるような ℓ_i-同種写像を現実的な回数だけ計算することで実現できる．

x を $\mathbb{F}_p$ のランダムな元とすると，x を x 座標に持つような点 P は $\ker(\pi_p - 1)$ もしくは $\ker(\pi_p + 1)$ の元になる．どちらに含まれるのかは，$x^3 + ax^2 + x$（これは P の y 座標を 2 乗した値である）が $\mathbb{F}_p$ で平方か否かを調べることで判定することができる．こうして得られた点 P を $\frac{p+1}{\ell_i}$ 倍することで，$1 - \frac{1}{\ell_i}$ の確率で $E[\mathfrak{l}_i]$ または $E[\mathfrak{l}_i^{-1}]$ の生成元を得る．この生成元を使い，$[\mathfrak{l}_i]$ もしくは $[\mathfrak{l}_i^{-1}]$ の作用が計算できる．

以上の計算は Montgomery 曲線の射影 x 座標を使い，すべて $\mathbb{F}_p$ 上の演算で実現できる．

3 主定理

ここからが本研究の内容である．

Edwards 曲線上で CSIDH を構成する上で重要な定理が 3 つある．それらを次に述べる．

定理 3 p を $p \equiv 3 \pmod 8$ を満たす素数とする．P を位数が 2 のべきではない Edwards 曲線 E_d の点で，$w(P)$ が $\mathbb{F}_p$ に含まれ，平方になるものとする．$w(2P)$ が平方ならば，$P' \in \ker(\pi_p + 1)$，$w(2P) = w(P')$，$\frac{p+1}{4}P' = 0_d$ を満たす点 P' が存在する． $w(2P)$ が平方でないならば，$P' \in \ker(\pi_p - 1)$，$1/w(2P) = w(P')$，$\frac{p+1}{4}P' = 0_d$ を満たす P' が存在する．

定理 4 p と P は定理 3 と同じ条件とする．このとき，$w(2P)$ が平方になる点 P の個数と，$w(2P)$ が平方にならない点 P の個数は等しい．

定理 5 p を $p \equiv 3 \pmod 8$ を満たす素数とし，E を $\mathbb{F}_p$ 上で定義された超特異楕円曲線とする．このとき，E と Edwards 曲線 E_d が $\mathbb{F}_p$-同型となるような d が存在するならば，そして存在するときのみ，$\mathrm{End}_p(E) \cong \mathbb{Z}[\pi_p]$ が成り立つ．さらに，d は E に対して一意．

4 アルゴリズム

前節の主定理に基づき，Edwards 曲線上のイデアル類群の作用のアルゴリズムを構成した．これはすべて $\mathbb{F}_p$ 上の演算で実現できている．

アルゴリズム 1 Edwards 曲線上のイデアル類群の作用

Input: $d \in \mathbb{F}_p$，$(e_1, \ldots, e_n)$
Output: $[\mathfrak{l}_1^{e_1} \cdots \mathfrak{l}_n^{e_n}]E_d$ の Edwards 係数 d'
1: **while** $e_i \neq 0$ となる e_i が存在する **do**
2: $w \leftarrow 0$
3: **while** $w = 0$ または $w = 1$ または $w = -1$ **do**
4: ランダムに $w \in \mathbb{F}_p$ を取る
5: **end while**
6: $w \leftarrow w^2$ (**定理 3, 4**)
7: $\mathbf{w}(P) \leftarrow (w : 1)$
8: $\mathbf{w}(2P)$ を計算 (**定理 3**)
9: $(W : Z) \leftarrow \mathbf{w}(2P)$
10: W が平方なら $s \leftarrow +1$，非平方なら $s \leftarrow -1$ とする
11: $S = \{i \mid \mathrm{sign}(e_i) = s\}$ とする
12: **if** $S = \emptyset$ **then**
13: 第 2 行に戻る
14: **end if**
15: $\mathbf{w}(P) \leftarrow (W : Z)$, $k \leftarrow \prod_{i \in S} \ell_i$
16: $\mathbf{w}(P) = (W : Z) \leftarrow \mathbf{w}(((p+1)/4k)P)$ (**定理 3**)
17: **if** $s = 1$ **then**
18: $\mathbf{w}(P) \leftarrow (Z : W)$ (**定理 3**)
19: **end if**
20: **for all** $i \in S$ **do**
21: $\mathbf{w}(Q) \leftarrow \mathbf{w}((k/\ell_i)P)$
22: **if** $K \neq 0_d$ **then**
23: $\ker \phi = \langle Q \rangle$ となる ℓ_i-同種写像 $\phi \colon E_d \to E_{d'}$ を計算する
24: $d \leftarrow d'$, $\mathbf{w}(P) \leftarrow \mathbf{w}(\phi(P))$, $k \leftarrow k/\ell_i$, $e_i \leftarrow e_i - s$
25: **end if**
26: **end for**
27: **end while**
28: **return** d (**定理 5**)

参考文献

[1] Castryck, W., Lange, T., Martindale, C., Panny, L., and Renes, J. (2018). CSIDH: An Efficient Post-Quantum Commutative Group Action. In *ASIACRYPT 2018*.

[2] Farashahi, R. R., and Hosseini, S. G. (2017). Differential Addition on Twisted Edwards Curves. In *ACISP 2017*.

[3] Kim, S., Yoon, K., Park, Y. H., and Hong, S. (2019). Optimized Method for Computing Odd-Degree Isogenies on Edwards Curves. *IACR Cryptology ePrint Archive, 2019*, 110.

IoT デバイス上の Ring-LWE 暗号実装における考察

武田 岬[1], 田中 覚[2], 布田 裕一[3]
[1]NEC 通信システム，[2] 東京都立産業技術高等専門学校，[3] 東京工科大学
e-mail : stanaka@metro-cit.ac.jp

1 概要

世界の IoT デバイスは日々増加しており, ネットワーク上に行き交う個人情報等の機密情報の保護が必要不可欠である. ネットワーク上の盗聴を防ぐための暗号技術として, Ring-LWE 暗号 [1] は, 安全性・実用性のバランスのとれた有望な方式であり, 量子計算機の実用化後も解読が困難な耐量子暗号方式であるとして近年注目を集めている. Ring-LWE 暗号では多項式同士の乗算が必要であり, この計算が暗号化・復号処理における計算量の大部分を占めている. 一方で, 計算資源が限られている IoT デバイスでに Ring-LWE 暗号を活用するには, 高速かつ省メモリな多項式の乗算アルゴリズムが必要不可欠である. 本研究では多項式における乗算アルゴリズムの検討を実施し, IoT デバイス上に乗算アルゴリズム別で Ring-LWE 暗号を実装した結果について述べる.

2 Toom-Cook 法

整数係数多項式環 $\mathbf{Z}_q[x]$ の 2 つの 2 項式 $A = a_0 + a_1x, B = b_0 + b_1x$ について, 積 AB を求めたとき, 教科書的な算法では $AB = a_0b_0 + (a_0b_1 + a_1b_0)x + a_1b_1x^2$ となり, 係数計算で乗算が 4 回必要である. しかし,

$$\begin{aligned} c_2 &= a_1b_1 \\ c_0 &= a_0b_0 \\ c_1 &= c_2 + c_0 - (a_1 - a_0)(b_1 - b_0) \end{aligned}$$

とすれば, これは $AB = c_0+c_1x+c_2x^2$ となり乗算が3回で済むことが知られている (Karatsuba 法). Karatsuba 法では式を 2 分割して計算回数を削減したが, これを一般化して, 2 つの多項式を d 分割して, d 分割した多項式の係数から事前計算を用いて乗算回数を削減し, 再帰の回数を減らす手法が Toom-Cook 法である. 本研究では, 分割数 $d = 4$ のときの Toom-Cook 法を用いて実装を行った.

$d = 4$ の時の Toom-Cook 法による算法は, 2 つの 3 次式 $A = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0, B = b_3x^3 + b_2x^2 + b_1x + b_0$ が与えられたとき, 積 AB の 7 つの係数は 9 つの事前計算 a_0b_0, a_1b_1, a_2b_2, a_3b_3, $(a_3-a_2)(b_3-b_2)$, $(a_2-a_0)(b_2-b_0)$, $(a_3-a_1)(b_3-b_1)$, $(a_1-a_0)(b_1-b_0)$, $(a_3-a_2-a_1+a_0)(b_3-b_2-b_1+b_0)$ が必要となる.

3 高速フーリエ変換

高速フーリエ変換 (FFT) は, 離散フーリエ変換 (DFT) を活用した多項式の乗算アルゴリズムである. 通常, DFT は浮動小数点演算を行うため誤差を生じるが, 整数剰余環 $\mathbf{Z}_q$ 上で定義された多項式同士の積ならば, 浮動小数点数を用いることなく計算が行えるため, 誤差を生じない. 2 つの $n-1$ 次多項式の乗算は, $\omega^n \equiv 1 \pmod q$ を満たす 1 の原始 n 乗根 ω を用いれば, 下記手順で多項式演算を行うことができる (数論変換, NTT).

① 2 つの多項式を ω を用いて順変換する.
② 多項式の係数毎に係数の積を求める (畳み込み乗算).
③ 演算結果を逆変換し, 計算結果を得る.

特に, 多項式の項数が 2 冪のときはバタフライ演算とビット反転処理を用いた高速数論変換 (FNTT) を用いることができる.

4 Ring-LWE

Ring-LWE 暗号 [1] では, 鍵生成, 暗号化, 復号において多項式乗算が必要である. オリジナルのアルゴリズムを用いて NTT を用いて乗算を処理する場合, 乗算処理の都度計算量の大きな逆変換を行う必要がある. 計算量を削減する改良として, 鍵生成の段階で順変換した鍵パラメータを用いることで, 逆変換が必要な計算を復号時のみに限定することができる. 一方で, 順変換した鍵パラメータを用いる場合, 固定長演算の桁数の確保と同様に, 予め多項式の次数を上げる必要があるため, メモリ使用量が大きくなる.

5 関連研究

西永ら [2] は, FNTT の高速化・省メモリ化を図り, IoT デバイスで用いられる ARM Cortex-

M0 マイクロコントローラ上で FNTT を使った次数 255 の Ring-LWE 暗号の性能を評価した．しかし，NTT や FNTT では逆変換の計算量が大きいため，次数が 255 と小さい場合には一般的に，FNTT ではなく Toom-Cook 法を使った方が高速に乗算を行える．本研究では Ring-LWE 暗号において Toom-Cook 法と NTT, FNTT を使用した際の実行時間とメモリ消費量を測定し，次数に対して最適な乗算アルゴリズムを見出す．Ring-LWE 暗号の多項式の項数が 2 の冪乗とは限らないため，高速な FNTT に限定せず NTT を含めて検討を行う．

6　多項式乗算の実装

本研究では Arduino M0 Pro を用いて Toom-Cook 法，NTT，FNTT の実装を行った．Arduino M0 Pro のメモリ容量は SRAM32KB，フラッシュメモリ 256KB である．再帰呼び出しが必要な Toom-Cook 法の実装では下記の手法を用いて省メモリ化を図った．

① 関数の仮引数に乗算結果を格納するポインタを記述
② 一時変数のグローバル変数化
③ 通常乗算を実施する項数を指定し，再帰回数を軽減する
④ ローカル変数を必要最小限に抑える

再帰処理を必要としない NTT, FNTT ではメモリを無駄なく開放すれば消費を最小限に抑えられる．一方で，高速化を行うため，下記の手法を活用した．

① 冪乗演算でシフト演算を採用する
② 逆元 t^{-1}, ω の冪乗元を事前計算して再利用する

7　評価

多項式の次数が 255, 383, 511, 767, 1023 の場合の Ring-LWE 暗号の実行時間を図 1，最大 RAM 使用量を図 2 に示す．乗算アルゴリズムは Toom-Cook 法と NTT, FNTT を用いた．NTT, FNTT の Ring-LWE 実装は，4 節で述べた①鍵を順変換しない場合と②鍵を順変換した場合をそれぞれ実装した．

図 1 の通り，多項式の項数が 2 冪の場合は事前計算が有効に働くため，FNTT, NTT でも鍵を順変換しないオリジナルの演算が高速に処理できる．一方で，項数が 2 冪でない場合の

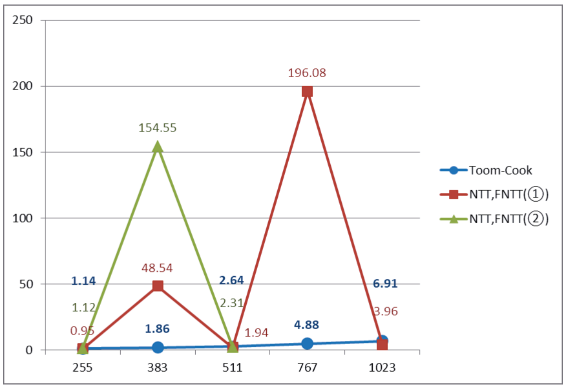


図 1. Ring-LWE 暗号の実行時間 (sec)

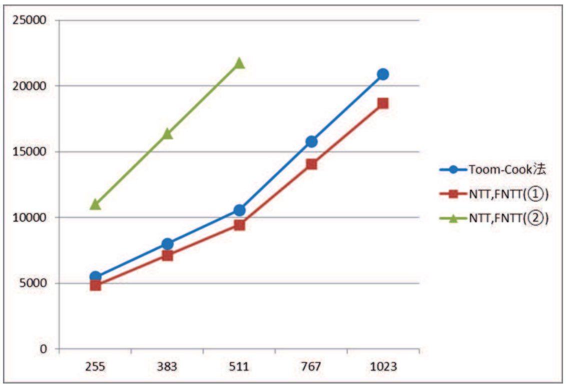


図 2. Ring-LWE 暗号の最大 RAM 使用量 (byte)

FNTT, NTT のオーバーヘッドが顕著に発生する．Toom-Cook 法での実行時間は次数に対してほぼ比例関係を保つため，項数が 2 冪でない場合においても効率的な計算が行われている．

また，図 2 にもある通り，オリジナルの FNTT, NTT が Toom-Cook 法よりも最大 RAM 使用量が小さい．一方で FNTT, NTT は事前計算した ω の冪や t^{-1} は ROM(フラッシュメモリ) に格納している．Toom-Cook 法では ROM を必要としないため，極限まで ROM を削減したデバイス等の実装では，Toom-Cook 法が処理コスト面において有効である．

参考文献

[1] Vadim Lyubashevsky, Chris Peikert, Oded Regev. On ideal lattices and learning with errors over rings. Journal of the ACM (JACM), Vol. 60, Issue. 6, No. 43, 2013.

[2] 西永 俊文, 広瀬 僚太, 満保 雅浩, “Ring-LWE 暗号の ARM Cortex-M0+への実装と評価”, 2018 年暗号とセキュリティシンポジウム (SCIS2018), 4E1-3, 2018.

直交選点有限要素法による非定常２基質制限移流拡散反応方程式(生物膜モデル)の定式化と基質消費およびフラックスの計算

大久保 孝樹
函館工業高等専門学校　社会基盤工学科
e-mail: ohkubo@hakodate-ct.ac.jp

1　概要

直交選点有限要素法(OCFEM)の基本概念は，直交多項式で解を表現できるように，直交選点において強形式の偏微分方程式の残差がゼロとして解を求める方法である．数学的な別な概念の意味付けとして，Weierstrass の関数の多項式近似とその拡張である関数の偏微分の多項式近似を用いていると考えてもよいと思われる．

OCFEM では，大久保が名付けた微分作用素行列の概念を用いると簡単に偏微分方程式を定式化できる．微分作用素行列は，偏微分された直交多項式の係数を求める代わりに直交多項式を Lagrange 補間多項式によって表現した際に導出される係数行列と考えてよい．偏微分を形式的に微分作用素行列に置き換えて、強形式の偏微分方程式の残差をゼロと置くとOCFEMで容易に定式化できる．その際，微分作用素行列を境界条件である外部選点と基礎方程式である内部選点に分けて考える必要がある．

本研究では，生物膜モデルとして非定常２基質制限移流拡散反応方程式をOCFEMで定式化し，基質の濃度分布を計算するとともに，生物膜全体の基質消費速度と生物膜に流出入するフラックスを計算しそれらの整合性を確認した．

2　直交選点有限要素法による定式化

生物膜：

$$\frac{\partial S}{\partial t}+u\frac{\partial S}{\partial x}+v\frac{\partial S}{\partial y}-D_{sf}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}-D_{sf}\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}-f(S,C)=0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}-D_{cf}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-D_{cf}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-\alpha f(S,C)=0$$

拡散層：

$$\frac{\partial S}{\partial t}+u\frac{\partial S}{\partial x}+v\frac{\partial S}{\partial y}-D_{s}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}-D_{s}\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}=0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}-D_{cf}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-D_{cf}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}=0$$

ここで，比基質消費速度は

$$f(S,C)=\frac{\upsilon_{\max}S}{K_s+S}\frac{C}{K_c+C}$$

で表される．αは基質Ｓと酸素Ｃ化学量論比である．

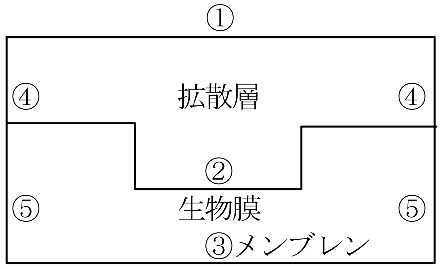


図 2-1 生物膜と拡散層の境界条件

境界条件の概略図を**図 2-1** に示す．Ｃに関しても同様

① $S=S_0$

② 生物膜と拡散層の境界

$$\left(uS-D_{sf}\frac{\partial S}{\partial x}\right)l+\left(vS-D_{sf}\frac{\partial S}{\partial y}\right)m=\left(uS-D_{s}\frac{\partial S}{\partial x}\right)l+\left(vS-D_{s}\frac{\partial S}{\partial y}\right)m$$

③ メンブレン上：

$$D_{sf}\frac{\partial S}{\partial x}l+D_{sf}\frac{\partial S}{\partial y}m=0$$

④ $\left(uS-D_{s}\frac{\partial S}{\partial x}\right)l+\left(uS-D_{s}\frac{\partial S}{\partial y}\right)m=0$

⑤ $\left(uS-D_{sf}\frac{\partial S}{\partial x}\right)l+\left(uS-D_{sf}\frac{\partial S}{\partial y}\right)m=0$

初期条件： $S=\frac{S_0}{2}$　　$C=\frac{C_0}{2}$　$(t=0)$

ここでは，１要素における内部選点の生物膜および拡散層におけるOCFEMによる定式化した式を示す．時空間の偏微分をそれぞれ微分作用素行列で表すと以下のようになる．ｑは内部選点，ｐは全選点(外部選点ｒと内部選点ｑ)であり，ｉ，ｓは時間選点である．

内部選点：生物膜

$$A^{q}_{tis}S_{qs}+u_{qi}A_{xqp}S_{pi}+v_{qi}A_{yqp}S_{pi}-D_{sf}B_{xqp}S_{pi}$$
$$-D_{sf}B_{yqp}S_{pi}-f(S_{qi},C_{qi})=0$$

$$A^{q}_{tis}C_{qs}+u_{qi}A_{xqp}C_{pi}+v_{qi}A_{yqp}C_{pi}-D_{cf}B_{xqp}C_{pi}$$
$$-D_{cf}B_{yqp}C_{pi}-\alpha f(S_{qi},C_{qi})=0$$

内部選点：拡散層

$$A^{q}_{tis}S_{qs}+u_{qi}A_{xqp}S_{pi}+v_{qi}A_{yqp}S_{pi}-D_{s}B_{xqp}S_{pi}$$
$$-D_{s}B_{yqp}S_{pi}=0$$

$$A^{q}_{tis}C_{qs}+u_{qi}A_{xqp}C_{pi}+v_{qi}A_{yqp}C_{pi}-D_{c}B_{xqp}C_{pi}$$
$$-D_{c}B_{yqp}C_{pi}=0$$

要素境界条件(隣接要素の共通選点におけるフラックスが連続)および境界条件(外部選点)における OCFEM の定式化も同様にできる.

3 面積分と線積分による基質消費速度とフラックスの計算

① 基質消費速度の計算：

生物膜の各要素における選点での比基質消費速度を面積分して加えると，生物膜の基質消費速度が計算できる．選点は，Regendre 多項式の根である直交選点を用いているので，面積分は Gauss-Regendre の数値積分公式を用いることができ高精度の積分が可能である．以下に，数積分の式を示す.

$$S\_Consum = \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=5+4\cdot N}^{(N+2)(N+2)} \frac{v_{s\max} S_i^j}{K_S + S_i^j}\frac{C_i^j}{K_C + C_i^j} X_f W_i$$
$$((a_2 + a_4\eta_i)(b_3 + b_4\xi_i) - (a_3 + a_4\xi_i)(b_2 + b_4\eta_i))$$

上式は四辺形要素について記述してある。

② 流出入のフラックスの計算：

生物膜の表面の流入とメンブレン上での流出のフラックスを線積分で求める．Gauss-Regendre の数値積分公式を用いることができ高精度の積分が可能である.

$$Flux = \sum_{i=1}^{N} W_i f(x_i, y_i)\sqrt{a_2^2 + b_2^2}$$

上式は四辺形要素の辺におけるフラックスについての記述である。

生物膜モデルにおいて，定常状態では、基質消費速度と流出入のフラックス収支が一致しなければならない.

4 計算条件および計算結果と考察

図 4-1 に生物膜・拡散層の要素分割と選点配置の例を示す．計算条件として，液本体の濃度 S=10mg/l(基質としてグルコース)，C=4mg/l(酸素)とし，拡散係数，生物膜の動力学定数は今まで使われていた値を用いた[1]．生物膜は，膜分離活性汚泥法のメンブレン上に付着した生物膜を想定し，y 方向の吸引速度(移流)を 7 μm/s とした.

図 4-1 に示した 2 ケースの内 case1 の生物膜の形態について計算を行った結果である定常状態における基質の濃度分布を**図 4-2** に示す．**図 4-2** の case1 は、生物膜の領域は非凸領域となっているが，数値解析の OCFEM における数学的定式化に問題はないので，妥当な結果であると考えられる.

図 4-3 は case1 における非定常状態の基質の消費速度とフラックスの時間変化である．初期条件は，全領域で液本体の濃度の 1/2 とした．**表 4-1** は，拡散層と生物膜の合計厚さ 50μm における基質消費速度の定常計算と非定常計算の場合の定常値の結果の比較示したものであり，各内部選点次数においてかなりの精度で一致している．**表 4-1** の下の表は，フラックスの定常計算と非定常計算の場合の定常値の結果の比較示したものであり，かなりの精度で一致している．**表 4-1** の(基質消費速度)と(フラックス)は有効数字 6～7 桁の範囲で一致しており，基質消費速度とフラックスの流出入の整合性が取れていることがわかる.

参考文献：

[1]大久保孝樹：直交選点有限要素法の改善とその効果－2 基質制限の非線形移流拡散反応方程式において－；第 20 回計算工学講演会 2015.6 D-1-3

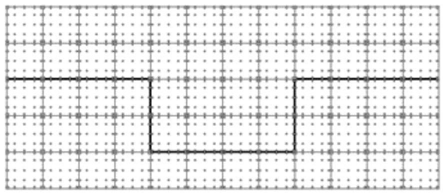


図 4-1 生物膜モデルの要素と選点の配置例(case1)

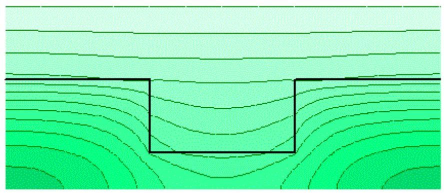


図 4-2 基質濃度分布の例(case1)

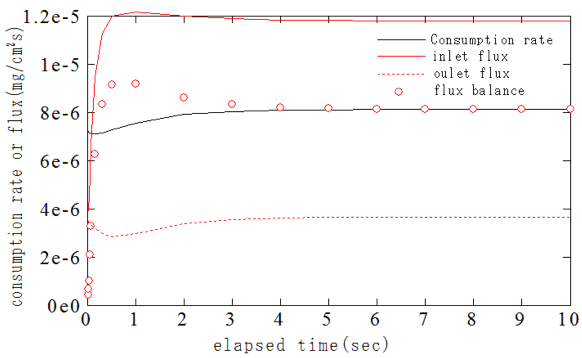


図 4-3 基質の消費速度とフラックス収支の時間変化

表 4-1 基質消費速度とフラックス収支の非定常と定常による計算値

基質	基質消費速度(mg/s・cm^2)	
内部選点	非定常計算	定常計算
2×2	8.121382663E-06	8.121382675E-06
7×7	8.121972148E-06	8.121972160E-06

基質	フラックス収支(mg/s・cm^2)	
内部選点	非定常計算	定常計算
2×2	8.121382702E-06	8.121382675E-06
7×7	8.121972187E-06	8.121972160E-06

N 次元半線形熱方程式の球対称解に対する新しい質量集中型有限要素近似

中西　徹 [1], 齊藤　宣一 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : nakanish@ms.u-tokyo.ac.jp / norikazu@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1　はじめに

非線形偏微分方程式論では，空間の次元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．本研究では，次の偏微分方程式を考える．

$$\begin{cases} U_t = \Delta U + f(U), \quad (t,\vec{x}) \in (0,T)\times\Omega \\ U = 0, \quad (t,\vec{x}) \in (0,T)\times\partial\Omega \\ U(0,\vec{x}) = U_0(\vec{x}), \quad \vec{x}\in\overline{\Omega} \end{cases} \tag{P}$$

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 級の関数とする．

方程式 (P) の球対称解が満たす方程式は，次のようになる．

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + \frac{N-1}{x}u_x + f(u), \quad (t,x)\in(0,T)\times I \\ u_x(t,0) = u(t,1) = 0, \quad t\in(0,T) \\ u(0,x) = \phi(x), \quad x\in\overline{I}. \end{cases} \tag{S}$$

ただし，$I=(0,1)$, $x=|\vec{x}|\in\overline{I}$，$\Omega=B(1)=\{\vec{x}\in\mathbb{R}^N; |\vec{x}|<1\}$，$u(t,x)=U(t,\vec{x})$，$\phi(x)=U_0(\vec{x})$ とする．

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] で（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．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 ([2])．

われわれは [3] で，有限要素スキームを 2 種類提案し，正値性保存則と誤差評価が成り立つことを証明した．しかし，空間次元に $N\leq 3$ という制限が必要になったり，時間刻み幅に準一様性が必要になったりして，肝心の爆発問題への応用に障壁があった．本講演では，それらの難点をすべて克服した新しい質量集中型の有限要素近似を提案し，その正値性保存や収束性を示し，さらに，爆発解の計算への応用を報告する．

2　新しい質量集中型有限要素スキーム

2.1　P1-有限要素空間

節点

$$0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_{j-1} < x_j < \cdots < x_{m-1} < x_m = 1$$

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，P1-有限要素空間

$$S_h(I) = \{v\in H^1(I) \mid v \text{ は } I_j \text{上一次以下の多項式} \quad (j=1,\cdots,m),\ v(1)=0\}$$

を考える．

2.2　有限要素スキーム

集中質量有限要素法のスキームを新たに提案する．

- $S_h(I)$ の基底関数 ϕ_i を $\phi_i(x_j)=\delta_{ij}$ によって定める．
- 内積・ノルムを次のように定める．

$$(u,v) = \int_I x^{N-1}u(x)v(x)dx,\ \|v\| = (v,v)^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle u,v\rangle = \sum_{i=0}^{m} u(x_i)v(x_i)(1,\phi_i),\ |||v||| = \langle v,v\rangle^{\frac{1}{2}}$$

- $\partial_{\tau_n}u_h^{n+1} = \frac{u_h^{n+1}-u_h^n}{\tau_n}$ とし，対称形式 A を $A(u,v)=(u',v')$ によって定める．また，各 τ_j は時間刻み幅で，$t_n=\sum_{j=0}^{n-1}\tau_j$ $(n\geq 1)$ と置いている ($t_0=0$)．

このとき次のスキームを提案する．

定義 1 (集中質量有限要素スキーム (L–1))
Find $u_h^n(\approx u(t_n,\cdot))\in S_h(I)(n\in\mathbb{N}\cup\{0\})$ *s.t.*

$$\begin{cases} \left\langle \partial_{\tau_n}u_h^{n+1},\chi\right\rangle + A(u_h^{n+1},\chi) = (f(u_h^n),\chi), \quad \forall\chi\in S_h(I) \\ u_h^0 = v_h \end{cases}$$

定義 2 (集中質量有限要素スキーム (L–2))
Find $u_h^n(\approx u(t_n,\cdot))\in S_h(I)(n\in\mathbb{N}\cup\{0\})$ *s.t.*

$$\begin{cases}\langle\partial_{\tau_n}u_h^{n+1},\chi\rangle+A(u_h^n,\chi)=\langle f(u_h^n),\chi\rangle,\\ u_h^0=v_h,\quad\forall\chi\in S_h(I)\end{cases}$$

注意 3 通常の集中質量有限要素近似では，$S_h(I)$ の元を集中質量作用素によって *P0*-有限要素空間に変換し，それらの $(\cdot,\cdot)$ 内積を考える．しかし，今回提案するスキームでは，集中質量作用素を用いずに $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 内積を用いている．

3 主結果

定理 4 ((L–1) の正値性)
スキーム *(L–1)* において，$v_h\geq 0$ ならば，$u_h^n\geq 0$ $(n\geq 1)$ が成り立つ． □

定理 5 ((L–1) の収束性)
$f(u)=u|u|^\alpha$ $(\alpha>0)$ とする．このとき， (S) の解が $[0,T]\times\overline{I}$ で十分に滑らかならば，次の誤差評価が成り立つ：

$$\sup_{t_n\in[0,T]}\|u_h^n-u(t_n)\|\leq C(h^2+\tau).$$

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 v_h は $||v_h-P_A\phi||_{L^\infty(I)}\leq Ch^2$ と選んでいる．P_A は A による射影で, $A(v-P_Av,\chi)=0,\chi\in S_h$ を満たす． □

(L–2) の収束性について以下が得られる．

定理 6 ((L–2) の収束性)
$\tau_n\leq\min_{0\leq i\leq m-1}\frac{(1,\phi_i)}{A(\phi_i,\phi_i)}$，$f(u)=u|u|^\alpha$ $(\alpha>0)$ とする．このとき，(S) の解が $[0,T]\times\overline{I}$ で十分に滑らかならば，次の誤差評価が成り立つ：

$$\sup_{t_n\in[0,T]}\|u_h^n-u(t_n)\|_{L^\infty(I)}\leq C(h+h^2\log\frac{1}{h}+\tau).$$

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 v_h は $||v_h-P_A\phi||_{L^\infty(I)}\leq Ch$ と選んでいる．
□

(L–2) については，爆発解の研究にも応用できる．そのために，Nakagawa [4] の時間刻み幅制御を採用する．

- T_∞ を真の爆発時刻とする; $\|u(t)\|\to\infty(t\to T_\infty),\|u(t)\|_{L^\infty(I)}\to\infty(t\to T_\infty)$
- $\hat{T}_\infty(h)$ を近似爆発時刻とする; $\hat{T}_\infty(h)=\sum_{n=0}^\infty\tau_n$,
- エネルギー関数, 離散化エネルギー関数をそれぞれ

$$\begin{aligned}J(u(t))&=\frac{1}{2}\|u_x(t)\|^2-\frac{1}{\alpha+2}\int_I x^{N-1}|u(x,t)|^{\alpha+2}dx,\\ J_h(u_h^n)&=\frac{1}{2}\|(u_h^n)_x\|^2-\frac{1}{\alpha+2}\sum_{i=0}^m|u_h^n(x_i)|^{\alpha+2}(1,\phi_i)\end{aligned}$$

と書くことにする．

仮定 7 (定理 6 における仮定)

- $\tau\leq\min_{0\leq i\leq m-1}\frac{(1,\phi_i)}{A(\phi_i,\phi_i)}$,
- $\tau_n=\tau\min\{1,\frac{1}{|||u_h^n|||^\alpha}\}$,
- すべての $T<T_\infty$ に対し,

$$\lim_{h\downarrow 0}\sup_{0\leq t_n\leq T}|J_h(u_h^n)-J(u(t_n))|=0.$$

定理 8 ((L–2) の爆発時刻の収束) *(L–2)* において $f(u)=u|u|^\alpha$ とする. 仮定 1 の下で，$\lim_{h\downarrow 0}\hat{T}_\infty(h)$ が存在し，

$$\lim_{h\downarrow 0}\hat{T}_\infty(h)=T_\infty$$

が成り立つ． □

爆発時刻の収束については，より仮定を緩めた結果も報告する予定である．

参考文献

[1] 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] 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.

[3] T. Nakanishi and N. Saito, *Finite element method for radially symmetric solution of a multidimensional semilinear heat equation*, arXiv: 1902.07919

[4] T. Nakagawa, *Blowing up of a finite difference method solution to $u_t=u_{xx}+u^2$*, Appl. Math. Optim. **2** (1976) 337–350.

一般化 Robin 境界条件に対する不連続 Galerkin 法

千葉 悠喜 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail：ychiba@ms.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

現実の現象のシミュレーションを行うにあたって，複雑な境界条件を持つ方程式の数値計算手法の提案と解析は重要である．例えば，曲線上の Laplace-Beltrami 作用素 ∇_Γ を含む動的境界条件

$$\mu\frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha u + \beta\Delta_\Gamma u - \frac{\partial u}{\partial \nu} + g$$

や，その定常問題である一般化 Robin 境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} + \alpha u - \beta\Delta_\Gamma u = g$$

といった境界条件の解析は，reduced-FSI モデルや Cahn-Hilliard 方程式への応用の際に重要である．動的境界条件や一般化 Robin 境界条件に関する過去の研究は，有限要素法については [1],[2] などがあり，不連続 Galerkin(DG) 法については [3] がある．しかし，[2] では滑らかな領域上の方程式を扱っているのに対し，[3] では矩形領域のみを扱っているため，現実の問題への応用が難しい一因となっている．

本研究は，滑らかな領域上の一般化 Robin 境界条件を持つ Poisson 方程式に対し，DG 法の適用とその解析を行う．

2 領域の多角形近似 (cf. [4])

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$ とし，その境界 $\Gamma = \partial\Omega$ は十分滑らかだとする．$p(x)$ を Γ の十分小さな近傍における Γ への直交射影とする．

領域 Ω の近似多角形領域 $\Omega_h \subset \mathbb{R}^2$ を，その頂点がすべて Γ 上にあるように選ぶ．$\Gamma_h = \partial\Omega_h$ とする．$\mathcal{T}_h$ を Ω_h の正則かつ準一様なな三角形分割とし，$\mathcal{E}_h$ を対応する Γ_h の分割とする．Γ_h に各 $K \in \mathcal{T}_h$ の辺が高々1 つしか含まれないと仮定する．

$$\mathcal{I}_h = \{E\colon E \text{ は } K \in \mathcal{T}_h \text{の辺}, E \not\subset \Gamma_h\},$$
$$\mathcal{R}_h = \{R\colon R \text{ は } E \in \mathcal{E}_h \text{の端点}\}$$

と定める．$G_h\colon \Omega_h \to \Omega$ を p を用いて [4] の §4 のように定める．$E \in \mathcal{E}_h$ に対し，$E^l = G_h(E) \subset \Gamma$ とする．

3 モデル方程式とスキーム

次の Poisson 方程式を考える．

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{in} \quad \Omega \\ \dfrac{\partial u}{\partial \nu} + \alpha u - \beta\Delta_\Gamma u = g & \text{on} \quad \Gamma \end{cases} \tag{1}$$

ここで，α, β は正定数であり，Δ_Γ は Γ 上の Laplace-Beltrami 作用素である．

Ω_h 上の有限要素空間 V_h を

$$V_h := \{v_h \in L^2(\Omega_h)\colon v_h|_K \text{は} K \in \mathcal{T}_h \text{上 1 次以下の多項式}\}$$

で定める $E \in \mathcal{I}_h$ に対し，$\{\!\{\cdot\}\!\}_E$ および $[\![\cdot]\!]_E$ を以下のように定める．

$$\{\!\{v\}\!\}_E := \frac{1}{2}(v_1 + v_2),$$
$$[\![v]\!]_E := v_1 n_{E,1} + v_2 n_{E,2},$$
$$\{\!\{\nabla v\}\!\}_E := \frac{1}{2}(\nabla v_1 + \nabla v_2),$$
$$[\![\nabla v]\!]_E := \nabla v_1 \cdot n_{E,1} + \nabla v_2 \cdot n_{E,2}$$

ここで，$E = K_1 \cap K_2$ を満たす相異なる $K_1, K_2 \in \mathcal{T}_h$ が存在し，$v_i = v|_{K_i}$ であり，$n_{E,i}$ は E 上の K_i に関する外向き単位法線ベクトルである．同様に，$R \in \mathcal{R}_h$ に対し，

$$\{\!\{v\}\!\}_R := \frac{1}{2}(v_1 + v_2),$$
$$[\![v]\!]_R := v_1 n_{R,1} + v_2 n_{R,2},$$
$$\{\!\{\nabla_{\Gamma_h} v\}\!\}_R := \frac{1}{2}(\nabla_{\Gamma_h} v_1 + \nabla_{\Gamma_h} v_2),$$
$$[\![\nabla_{\Gamma_h} v]\!]_R := \nabla_{\Gamma_h} v_1 \cdot n_{R,1} + \nabla_{\Gamma_h} v_2 \cdot n_{R,2}$$

とする．ここで，$R = E_1 \cap E_2$ を満たす相異なる $E_1, E_2 \in \mathcal{E}_h$ が存在し，$v_i = v|_{E_i}$ であり，$n_{E,i}$ は R 上の E_i^l に関する単位方向ベクトルである．

(1) に対する DG 法のスキームを次のように定める．

$$\begin{aligned} &\text{Find} \quad u_h \in V_h \quad \text{s.t.} \\ &a_{\Omega_h}(u_h, v_h) = l_h(v_h) \quad {}^\forall v_h \in V_h \end{aligned} \tag{2}$$

ここで，

$$
\begin{aligned}
a_{\Omega_h}(u,v) &= a_{\mathcal{T}_h}(u,v) + a_{\mathcal{E}_h}(u,v)\\
a_{\mathcal{T}_h}(u,v) &= \sum_{K\in\mathcal{T}_h} (\nabla u, \nabla v)_K\\
&+ \sum_{E\in\mathcal{I}_h} \Big(-(\{\!\{\nabla u\}\!\}_E, [\![v]\!]_E)_E - ([\![v]\!]_E, \{\!\{\nabla v\}\!\}_E)_E\\
&\qquad + \frac{\sigma}{h}([\![u]\!]_E, [\![v]\!]_E)_E \Big)\\
a_{\mathcal{E}_h}(u,v) &= \sum_{E\in\mathcal{E}_h} \Big(\alpha(u,v)_E + \beta(\nabla_{\Gamma_h} u, \nabla_{\Gamma_h} v)_E \Big)\\
&+ \sum_{R\in\mathcal{R}_h} \Big(-(\{\!\{\nabla_{\Gamma_h} u\}\!\}_R, [\![v]\!]_R)_R - ([\![v]\!]_R, \{\!\{\nabla_{\Gamma_h} v\}\!\}_R)_R\\
&\qquad + \frac{\sigma}{h}([\![u]\!]_R, [\![v]\!]_R)_R \Big)\beta\\
l_h(v) &= (\widetilde{I}_h f, v)_{\Omega_h} + (\widetilde{I}_h g, v)_{\Gamma_h}
\end{aligned}
$$

であり，σ は十分大きい正定数，$\widetilde{I}_h$ は V_h への Lagrange 補間である．

4　スキームの解析と誤差評価

解析のためにノルムを以下のように定める．

$$
\begin{aligned}
\|v\|^2_{\mathcal{T}_h,\mathcal{I}_h} &= \sum_{K\in\mathcal{T}_h} |v|^2_{H^1(K)}\\
&+ \sum_{E\in\mathcal{I}_h} \frac{1}{h} \|[\![v]\!]_E\|^2_{L^2(E)} + \sum_{E\in\mathcal{I}_h} h \|\{\!\{\nabla v\}\!\}_E\|^2_{L^2(E)}\\
\|v\|^2_{\mathcal{E}_h,\mathcal{R}_h} &= \sum_{E\in\mathcal{E}_h} \left(\alpha \|v\|^2_{L^2(E)} + \beta \|\nabla_{\Gamma_h} v\|^2_{L^2(E)} \right)\\
&+ \beta \sum_{R\in\mathcal{R}_h} \frac{1}{h}[\![v]\!]^2_R + \beta \sum_{E\in\mathcal{R}_h} h\{\!\{\nabla_{\Gamma_h} v\}\!\}^2_R\\
\|v\|^2_{\mathrm{DG},\Omega_h} &= \|v\|^2_{\mathcal{T}_h,\mathcal{I}_h} + \|v\|^2_{\mathcal{E}_h,\mathcal{R}_h}
\end{aligned}
$$

これらのノルムに対し，以下が成り立つ．

補題 1 σ が十分大きいならば，h に依存しない正定数 C が存在し，以下が成り立つ．

$$
\begin{aligned}
a_{\Omega_h}(u,v) &\le C \|u\|_{DG,\Omega_h} \|v\|_{DG,\Omega_h} && u,v \in H^2(\Omega_h,\Gamma_h) + V_h\\
a_{\Omega_h}(v_h,v_h) &\ge C \|v_h\|^2_{DG,\Omega_h} && v_h \in V_h
\end{aligned}
$$

以下の誤差評価が成り立つ．

定理 2 $u \in H^2(\Omega,\Gamma)$ が (1) の解であるとし，$u_h \in V_h$ が (2) の解であるとする．このとき，h に依存しない正定数 C が存在し，

$$
\left\| u^{-l} - u_h \right\|_{DG,\Omega_h} \le Ch \qquad (3)
$$

が成り立つ．

講演時に簡単に証明およびいくつかの数値例を示す．

参考文献

[1] T. Kashiwabara, C. M. Colciago, L. Dedè, and A. Quarteroni, Well-Posedness, Regularity, and Convergence Analysis of the Finite Element Approximation of a Generalized Robin Boundary Value Problem, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 53(1), 2015, 105–126

[2] B. Kovács, and C. Lubich, Numerical analysis of parabolic problems with dynamic boundary conditions *IMA Journal of Numerical Analysis*, 37(1), 2017, 1–39

[3] P. F. Antonietti, M. Grasselli, S. Stangalino, and M. Verani, Discontinuous Galerkin Approximation of Linear Parabolic Problems with Dynamic Boundary Conditions, *Journal of Scientific Computing*, 66(6), 2016, 1260–1280

[4] C. M. Elliott, and T. Ranner, Finite element analysis for a coupled bulk-surface partial differential equation, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 33(2), 2013, 377–402

軸対称液滴シミュレーションにおけるメッシュ制御への信号処理的方法

古賀 一基 [1]
[1] 京都大学大学院 情報学研究科
e-mail : koga.kazuki.85v@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

本講演では、表面張力により駆動される非粘性軸対称液滴のある境界積分方程式による定式化を考え、その数値解法において解の有限時間特異点を捉えるメッシュ制御を信号処理的方法で構築する．特に、滑らかな閉曲線に対して弧長変数の Fourier 係数を定義し、それがメッシュ制御に対する信号処理的方法とその収束性の検証との両方において有効であることを示す．さらに、弧長変数の Fourier 係数に対する台形公式は、近年盛んに研究されている非一様高速 Fourier 変換 (NUFFT) によって効率的に近似することが可能である．最後に、得られたメッシュ制御法を Nie[1] が提案した初期条件に適用し、その計算結果について議論する．

2 境界積分方程式

三次元空間 $\mathbb{R}^3$ において二つの非粘性非圧縮性流体が表面張力の働く閉曲面 S によって隔てられているとする．特に、S 内部は単連結とし、S を含む流れ全体の軸対称性を仮定する．このとき、対称軸を含むある平面と S との交線を

$$\boldsymbol{X}(\alpha,t) = (r(\alpha,t), z(\alpha,t)), \quad \alpha \in [0,\pi], \tag{1}$$

によってパラメータ表示し (図 1)、その時間発展を記述する方程式を解くことを考える．ここで、t は時間変数、r は円柱座標系における半径方向座標、z は対称軸方向座標である．

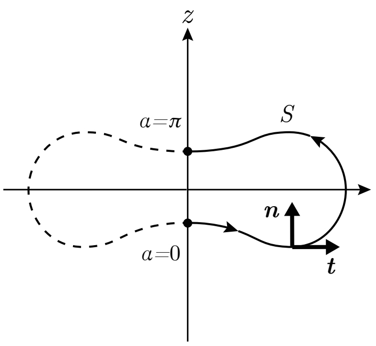


図 1. 対称平面上のパラメータ表示.

一般に、S を除いて流れが回転なしであり、流速が S で法線方向に連続かつ接方向で不連続ならば、S は渦層 (vortex sheet) であるという．このとき、流速の方位角成分をゼロと仮定し、渦層の強さ (vortex sheet strength) を

$$\gamma(\alpha,t) = \boldsymbol{X}_\alpha \cdot [\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_2](\boldsymbol{X}(\alpha,t),t), \tag{2}$$

を定義すれば、S 内外の流速は S 上の Biot-Savart 積分によって復元することができる．ただしここで、変数に関する添字は微分を意味し、$\boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{u}_2)$ は S の内部 (外部) からとる S 上の点での流速の極限値である．特に、平均値

$$\boldsymbol{W} = \frac{\boldsymbol{u_1} + \boldsymbol{u_2}}{2}, \tag{3}$$

に対しては完全楕円積分を含む $\boldsymbol{X}$ 上の主値積分による表現が知られている [1]．そこで $\boldsymbol{X}$ の発展方程式を、内向き単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ と反時計回り方向の単位接ベクトル $\boldsymbol{t}$ を用いて

$$\boldsymbol{X}_t = U\boldsymbol{n} + V\boldsymbol{t}, \tag{4}$$

と書けば、法線方向速度 U は流速の法線方向の連続性により $U = \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{n}$ で与えられる．一方、渦層の強さ γ に対する発展方程式は、Bernoulli の定理と Laplace-Young 条件により

$$\gamma_t = -\sigma\kappa_\alpha + ((V - \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{t})\gamma/s_\alpha)_\alpha, \tag{5}$$

で与えられる [1]．ここで、σ は表面張力係数、κ は平均曲率で S が球のとき正の値を取ると定める． また、s_α は局所長と呼ばれる量で、$s_\alpha = \sqrt{r_\alpha^2 + z_\alpha^2}$ により定義される．

以上から、本研究では方程式系

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{X}_t = U\boldsymbol{n} + V\boldsymbol{t}, \\
&U = \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{W} = \frac{\boldsymbol{u_1} + \boldsymbol{u_2}}{2}, \\
&\gamma_t = -\sigma\kappa_\alpha + ((V - \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{t})\gamma/s_\alpha)_\alpha,
\end{aligned}$$

を適切な接方向速度 V の下で数値的に解く．実際には、S の時間発展は法線方向速度 U のみによって決まり、接方向速度 V は局所長 s_α(及びそれに依存する γ) にのみ影響を与える．

3 信号処理に基づくメッシュ制御

一般に、Frenet-Serret の公式と (4) から

$$s_{\alpha,t} = V_\alpha - s_\alpha \kappa_z U, \tag{6}$$

が導かれる．ただし、κ_z は r–z 平面上での $\boldsymbol{X}$ の曲率である．ここで、$\boldsymbol{X}$ を閉曲線に拡張した場合の全長を L とし、例えば s_α を

$$s_\alpha(\alpha, t) = R(\alpha, t)L, \tag{7}$$

のように定義すれば、(6) は V に関する方程式とみなすことができる．以下では、特に R を

$$\begin{aligned} R(\alpha,t) &= (1-\epsilon)(1-e^{-at^2})R_e \\ &\quad + (1-\epsilon)e^{-at^2}R_0 + \epsilon R_0, \end{aligned} \tag{8}$$

の形で与える．ここで、$R_0 \equiv (2\pi)^{-1}$ であり、R_e は曲率 κ_z によって動的に決定される．すなわち、s_α は $t=0$ で α に関して定数 (一様配置) に一致し、時間発展と共に望ましいパラメータ表示へ滑らかに移行する．

幾何学的な量に対する信号処理により R_e を定めるため、弧長変数 s に関する Fourier 係数

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{L}\int_0^L e^{-2\pi i k \frac{s}{L}} f(s) ds, \tag{9}$$

を考える．本研究では、界面の自己衝突に対応する曲率発散周辺での急激な符号の変化を無視するため、正則化された解析包絡線 [2]

$$E[\kappa_z](s) = \sqrt{1 + \kappa_z(s)^2 + (\mathcal{H}[\kappa_z](s))^2}, \tag{10}$$

に対してガウシアンフィルタを適用する．ただし、$\mathcal{H}$ は Hilbert 変換である．こうして得られる関数を GL で表し、R_e を

$$R_e(\alpha,t) = \frac{1}{2}\frac{GL(s(\alpha),t)^{-1}}{\int_0^\pi GL(s(\alpha'),t)^{-1} d\alpha'}, \tag{11}$$

で与える．ただし、R_e の時間微分を含む方程式 (6) を V について陽に解けるように

$$R_t(\alpha,t) \approx \frac{R(\alpha,t) - R(\alpha,t-\tau)}{\tau}, \tag{12}$$

と近似して単純化を行う [3]．この近似 (12) の正当性については講演の中で詳述する．時間方向の離散化に関する収束性の検証には、二つの解をある標準的なパラメータ表示に戻して比較することが必要となる．

4 数値計算結果

$\boldsymbol{X}$ を $[0,2\pi]$ 上の周期関数に拡張し、N 個の点

$$\alpha_j = j(2\pi/N), \quad j = 0,1,\ldots,N-1, \tag{13}$$

での値を高速 Fourier 変換で離散化する．一方、変数変換 $ds = s_\alpha d\alpha$ 後の (9) に対する台形公式

$$\hat{f}(k) \approx \frac{2\pi}{LN}\sum_{j=0}^{N-1} e^{-2\pi i \frac{s(\alpha_j)}{L}} f(s(\alpha_j)) s_\alpha \tag{14}$$

は汎用的な NUFFT で計算可能である [4].

Nie[1] による $\boldsymbol{X}$ が単位円の場合の初期条件

$$\sigma = 0.04, \quad \gamma(\alpha,0) = -\sin\alpha, \tag{15}$$

における最終ステップの形状を図 2 に示す．界面が自己衝突する領域に加え、その他の高曲率領域にも離散点が集中していることがわかる．

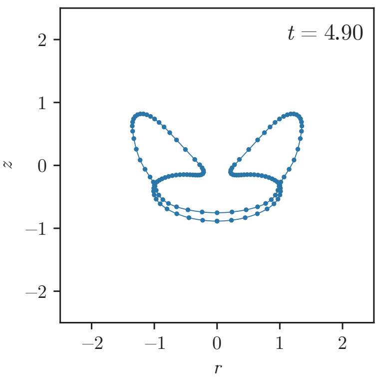


図 2. 初期条件 (15) の最終ステップにおける形状.

謝辞　本研究は、JSPS 平成 30 年度若手研究者海外挑戦プログラムの助成を受けました.

参考文献

[1] Q. Nie, The nonlinear evolution of vortex sheets with surface tension in axisymmetric flows, J. Comput. Phys., 174 (2001), 438–459.

[2] S.O. Rice, Envelopes of narrow-band signals, Proc. IEEE, 70 (1982), 692–699.

[3] M. Nitsche and P.H. Steen, Numerical simulations of inviscid capillary pinchoff, J. Comput. Phys., 200 (2004), 299–324.

[4] Flatiron Institute nonuniform fast Fourier transform libraries (FINUFFT), `https://github.com/flatironinstitute/finufft`.

平坦時空における Einstein 方程式の 2 次摂動の数値計算

土屋 拓也 [1], 米田 元 [2]
[1] 八戸工業大学，[2] 早稲田大学
e-mail：t-tsuchiya@hi-tech.ac.jp

1 導入

Einstein 方程式は一般相対性理論における支配方程式の 1 つであり, 宇宙の様々な現象を表す方程式である. この方程式は連立非線形偏微分方程式であり, その解を求めることは簡単ではない. 今回この方程式の厳密解からの摂動を考え, その摂動方程式を解析することで Einstein 方程式の解の調査を行う. 厳密解として最も簡単な平坦時空 (Minkowski 時空) を用いることにする.

2 Einstein 方程式とエネルギー運動量保存則

Einstein 方程式

$$G^{\mu\nu} = 8\pi T^{\mu\nu} \tag{1}$$

は左辺の Einstein テンソル $G^{\mu\nu}$ が時空の計量 $g^{\mu\nu}$ による時空中のゆがみを表し, 右辺のエネルギー運動量テンソル $T^{\mu\nu}$ が物質の配置を表す. そのため, Einstein 方程式は時空中のゆがみ具合と物質の配置のつり合いを表す式となっている. また, エネルギー運動量テンソルに対して

$$\sum_{\mu=0}^{3} \partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 \tag{2}$$

は平坦な時空におけるエネルギー運動量保存則を表す. 式 (1) の両辺において共変微分における発散を考えると, Bianchi の恒等式より $\nabla_\mu G^{\mu\nu} = 0$ が成り立つため,

$$\sum_{\mu=0}^{3} \nabla_\mu T^{\mu\nu} = \sum_{\mu=0}^{3} \frac{1}{8\pi} \nabla_\mu G^{\mu\nu} = 0 \tag{3}$$

となる. これが一般相対性理論におけるエネルギー運動量保存則を表す. この式の左辺は

$$0 = \sum_{\mu=0}^{3} \partial_\mu T^{\mu\nu} + \sum_{\mu,\lambda=0}^{3} \Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} T^{\lambda\nu} + \sum_{\mu,\lambda=0}^{3} \Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} T^{\mu\lambda} \tag{4}$$

と表せる. $\Gamma^{\lambda}{}_{\mu\nu}$ は接続係数と呼ばれる計量 $g^{\mu\nu}$ の関数であり, 共変微分と偏微分の差を表す. 上記右辺第 1 項目の平坦時空におけるエネルギー運動量保存則に, 右辺第 2 項目と第 3 項目の重力場中の “情報” が組み込まれる形で成り立つ式であることを意味する.

3 Einstein 方程式と摂動

Einstein テンソル $G^{\mu\nu}$ は時空の計量 $g^{\mu\nu}$ の関数である. 今, 厳密解である計量に摂動パラメータ $(0 <)\varepsilon \ll 1$ を用いて

$$g^{\mu\nu} = g_B{}^{\mu\nu} + \varepsilon^{(1)} g^{\mu\nu} + \varepsilon^{2(2)} g^{\mu\nu} + O(\varepsilon^3) \tag{5}$$

と表せるときを考える. 上記 $g_B{}^{\mu\nu}$ が厳密解を表し, 今回これを背景時空とよぶ. また, ${}^{(1)}g^{\mu\nu}$, ${}^{(2)}g^{\mu\nu}$ はそれぞれ ε で厳密解からのずれを考えた際の ε と ε^2 の係数である. このとき, 接続係数 $\Gamma^{\lambda}{}_{\mu\nu}$ は式 (5) により

$$\Gamma^{\lambda}_{\mu\nu} = {}^{(0)}\Gamma^{\lambda}_{\mu\nu} + \varepsilon^{(1)}\Gamma^{\lambda}_{\mu\nu} + \varepsilon^{2(2)}\Gamma^{\lambda}_{\mu\nu} + O(\varepsilon^3) \tag{6}$$

と摂動パラメータ ε で展開される. また, エネルギー運動量テンソルも摂動パラメータ ε に対して

$$T_{\mu\nu} = {}^{(0)}T_{\mu\nu} + \varepsilon^{(1)}T_{\mu\nu} + \varepsilon^{2(2)}T_{\mu\nu} + O(\varepsilon^3) \tag{7}$$

と摂動パラメータの次数に従って展開する場合を考える. このとき, 式 (4) は ε のオーダーごとに分解すれば 0 次, 1 次, 2 次のものはそれぞれ

$$\partial_\mu {}^{(0)}T^{\mu\nu} + {}^{(0)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\lambda\nu} + {}^{(0)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\mu\lambda} = 0, \tag{8}$$

$$\partial_\mu {}^{(1)}T^{\mu\nu} + {}^{(1)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\lambda\nu} + {}^{(0)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(1)}T^{\lambda\nu} + {}^{(1)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\mu\lambda} + {}^{(0)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(1)}T^{\mu\lambda} = 0, \tag{9}$$

$$\partial_\mu {}^{(2)}T^{\mu\nu} + {}^{(1)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(1)}T^{\lambda\nu} + {}^{(2)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\lambda\nu} + {}^{(0)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda} {}^{(2)}T^{\lambda\nu} + {}^{(1)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(1)}T^{\mu\lambda} + {}^{(2)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(0)}T^{\mu\lambda} + {}^{(0)}\Gamma^{\nu}{}_{\mu\lambda} {}^{(2)}T^{\mu\lambda} = 0 \tag{10}$$

となる.

ここで, 真空で平坦な背景時空を考えると ${}^{(0)}T_{\mu\nu}=0$, ${}^{(0)}\Gamma^{\lambda}{}_{\mu\nu}=0$ となるため, 0 次 (式 (8)) の左辺は恒等的に 0 となり成り立つ. 1 次 (式 (9)) は $\partial_\mu{}^{(1)}T^{\mu\nu}=0$ となり, 重力場の影響を受けない. そのため, 例えば遠方でブラックホール同士の合体などの運動により重力波が発生し, ほとんど平坦な時空である地球付近まで到達してきた場合, 地球上ではそのエネルギーを観測することができない. 2 次 (式 (10)) においては, ${}^{(1)}\Gamma^{\mu}{}_{\mu\lambda}$ や ${}^{(1)}T^{\lambda\nu}$ が恒等的に 0 ではないので, 重力場中の影響が ${}^{(2)}T^{\mu\nu}$ に表れることとなる. このため, 真空で平坦背景において遠方からのエネルギーを考慮する場合は, Einstein 方程式は 2 次摂動まで考慮する必要がある.

今回, Eistein 方程式 (1) の Einstein テンソル $G^{\mu\nu}$ を

$$G^{\mu\nu}={}^{(0)}G^{\mu\nu}+\varepsilon^{(0)}G^{\mu\nu}+\varepsilon^{2(0)}G^{\mu\nu}+O(\varepsilon^3)$$

と 2 次摂動まで加味した摂動方程式を導出し, 正準形式を構築した. Einstein 方程式の 2 次摂動の方程式は非線形となるため, 解を調べるために数値計算を行った. 以下の数値計算では摂動パラメータの大きさは $\varepsilon=10^{-4}$ とした.

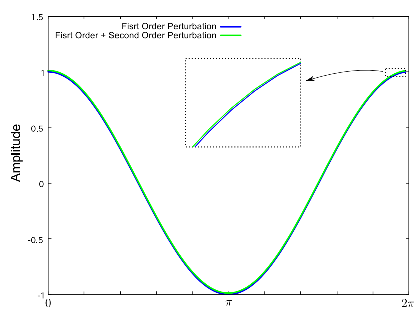


図 1. Crank-Nicolson スキームを用いた際の 1 次摂動のみ (青線) と 2 次摂動まで加えた時 (緑線) の計量の波形. 横軸は x, 縦軸は波形の振幅.

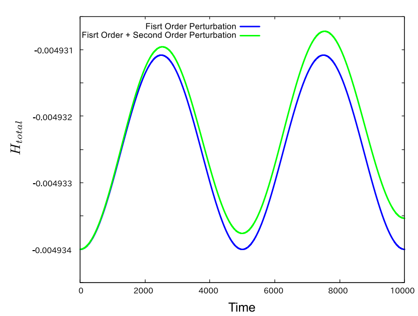


図 2. Crank-Nicolson スキームを用いた際の 1 次摂動のみ (青線) と 2 次摂動まで加えた時 (緑線) の系の全 Hamiltonian. 横軸は時間, 縦軸は全 Hamiltonian の値.

まず, Crank-Nicolson スキームを用いて, 1 次摂動までと 1 次摂動に 2 次摂動まで加えた場合の違いを調べるための数値計算を行った. 図 1 と図 2 はそれぞれ, 時の計量の波形と全 Hamiltonian の値を表す. 2 次摂動まで加えた結果のほうが現象として正しい結果となるが, 全 Hamiltonian の値のずれが時間経過とともに全体的に上昇していくことがみてとれ, 数値計算がうまくいっていないことがわかる.

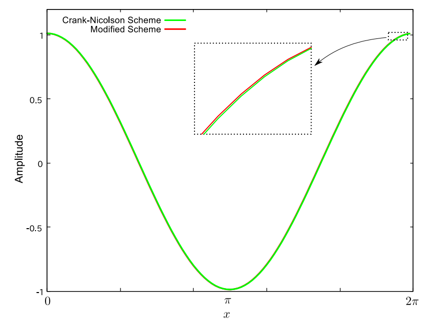


図 3. 2 次摂動まで加えた時の計量の波形. 緑線が Crank-Nicolson スキーム, 赤線が修正スキームを用いた場合を表す. 横軸は x, 縦軸は波形の振幅.

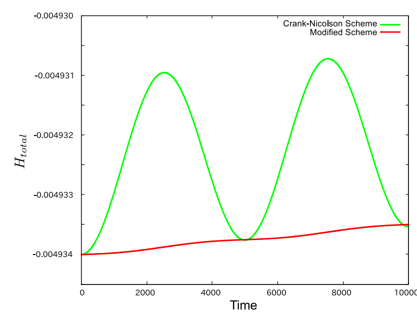


図 4. 2 次摂動まで加えた時の系の全 Hamiltonian. 緑線が Crank-Nicolson スキーム, 赤線が修正スキームを用いた場合を表す. 横軸は時間, 縦軸は全 Hamiltonian の値.

図 1 と図 2 の結果は, Crank-Nicolson スキームによる数値誤差を与えている可能性がある. そこで, 1 次摂動のレベルで全 Hamiltonian が保たれるようにスキームを修正した場合の波形が図 3, 全 Hamiltonian が図 4 である. 図 4 より, 修正スキームによる結果 (赤線) のほうが, Crank-Nicolson による結果 (緑線) よりも時間経過による変化が小さく, 良い数値スキームとなっていることがわかる.

講演では, 上記の内容の詳しい説明とその数値計算の結果を紹介する. また, より高精度に修正した数値結果も紹介する予定である.

相対論的天体力学の１体問題に関するある近似解法

鈴木隆治
浜松市天文台宇宙論勉強会
e-mail：takaharu-s@hw.tnc.ne.jp

1　はじめに

A. Einstein は、1916 年に、『一般相対性理論』を発表 [1] し、同時に、K. Schwarzschild は、重力場方程式１つの解を発表した。[2] 日本の数理天文学者、萩原雄祐博士は、1931 年に、Schwarzschild 時空における小天体の厳密な軌道解析を発表した。[3][4] そこでは、19 世紀の偉大な数学者 Weierstrass の楕円関数（Elliptic Function) $p(z)$ が使われている。[5][6] 初等的に、応用数理の視点に立って、計算する手法 (Algorithm) を考える。これが、私がこの研究を始めた動機であった。基本的に、私の提唱する近似法は Newton の古典的な天体力学を、相対論的に補正するものである。

2　相対論的天体力学における万有る引力の補正 [7]

Schwarzschild 時空における小天体の運動は、文献 [8] に解析してあるが、残念なことに、p.122「式 (6.56) は u についての非線形の方程式であって、解は楕円関数で表される。」と書いてあるだけで、それ以上の深入りはしていない。

式（6.56) は

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2}+u=\frac{GM}{h^2}+3\frac{GM}{c^2}u^3 \quad (6.56) \tag{1}$$

であり、問題は、原点 O に、球対称の質量 M の Black hole 天体を置き, $OP=r(>rg=2GM/c^2)$ に、小天体（質量 m、$m<<M$）を置くときその軌道の極方程式を $r=r(\phi)$ を、としたとき満たすべき微分方程式が、式 (6.56)(1) である。G は Newton の万有引力定数、c は真空中の光速、h は、軌道の面積速度

$$\frac{r^2}{2}\frac{d\varphi}{d\tau}=\frac{h}{2}\ (\text{一定}) \tag{2}$$

（τ は、固有時刻）の２倍である。式 (1) より、Newton の古典的な万有引力は、ポテンシャル

$$\phi(r)=-\frac{GM}{r}\left\{1+(h/cr)^2\right\} \tag{3}$$

より、相対論的に

$$F=-m\frac{d\phi}{dr}=-\,GMm/r^2\left\{1+3(h/cr)^2\right\} \tag{4}$$

と補正される。具体例として、等速円運動をする小天体の半径 r (一定）の公転速度 v は、等価原理により.

$$\frac{v^2}{r}=\frac{GM}{r^2}\left\{(1-3(rg/2r)^2/r^2\right\} \tag{5}$$

から、

$$\begin{aligned}v&=\sqrt{\frac{GM}{r}/(1-3rg/(2r))}\leqq vN\\&=\sqrt{GM/r}\end{aligned} \tag{6}$$

となる。なお、榎戸輝揚氏により、円軌道の半径 r は、$r\geqq 3rg$ である。

3　相対論的天体力学における力学的エネルギーの保存則と擬楕円軌道

この小論では、Schwarzschild 時空における、あくまでも、『小天体』の運動を扱う。これは、一般相対論が証明し、観測的にも確認されたように、物体が重力場で加速運動するときには、必ず『重力波』が発生し、時空を乱すので、「小天体」としておいて、それが発生する重力波は、Schwarzschild 時空を乱さないということを、前提とする。（萩原博士の 1931 年の論文も、その前提がある。）このとき、重力波による放射エネルギー損失を、運動エネルギーと、位置エネルギーの和である、力学的エネルギーでは無視できる程、小さいとして、事実上、力学的エネルギーは保存される。単位質量の小天体のもつ力学的エネルギー

$$\hat{E}=|\vec{v}|^2/2+\phi(r) \tag{7}$$

は、保存される。ここに、$\vec{v}$ は、極座標表示の速度　（$\frac{dr}{d\tau},r\frac{d\phi}{d\tau}$）である。これより、小天体の軌道を、$\hat{E}<0$ の場合に限定し、概楕円軌道 (pseudo-elliptic orbit) の場合のみを考える。近

似理論では、Black hole に、最も 1 天体が接近する地点 A, 最も離れる地点 B (太陽系では。それぞれ『近日点』、『遠日点』と呼んでいるが、本論文では、Black hole を中心に、主軸が回転する楕円軌道で近似するため、『近 BH 点』、『遠 BH 点』と呼ぶ。）小天体の近 BH 点における速さを vA, 遠 BH 点における速さを vB とし、概楕円の長軸半径を a, 離心率を e とすると、

$$r\max = a(1+e), r\min = a(1-e) \tag{8}$$

である。小天体の単位質量あたりの力学的エネルギー保存則は、

$$\begin{aligned}\hat{E} &= \frac{vA^2}{2} - \frac{GM}{(a(1-e))}\left\{1+\left(\frac{h}{ca}(1-e)\right)^2\right\}\\ &= \frac{vB^2}{2} - \frac{GM}{(a(1+e))}\left\{1+\left(\frac{h}{ca}(1+e)\right)^2\right\}\end{aligned} \tag{9}$$

であり、面積速度保存則（$h=$一定）は、

$$h = a\,(1-e)vA = a(1+e)vB \tag{10}$$

であり、これより、補正因子

$$\chi = 1/\sqrt{1-\frac{rg(3+e^2)}{(2a(1-e^2))}} \tag{11}$$

を用いて、式 (9),(10) を、vA, vB について解くと、それぞれ

$$\begin{aligned} vA &= \sqrt{GM(1+e)/(a(1-e))}\chi \\ vB &= \sqrt{GM(1-e)/(a(1+e))}\chi \end{aligned} \tag{12}$$

となる。以下,Newton の古典天体力学の値を $(\ )N$, 相対論的な値を $(\ )E$ と書くと、式（12) は、 $(vA)\,E=(vA)N\chi$、$(vB)\,E=(vB)\,N\chi$ と略記できる。式 (10) に代入して。

$$h = \sqrt{GMa(1-e^2)}\chi \tag{13}$$

あるいは、 $(h)\,E=(h)\,N\chi$ である。式 (9) へ代入して、

$$\hat{E} = -GM\chi/(2a)\left\{1-2rg/(a(1-e^2))\right\}$$

である。公転に伴う近 BH 点の前進角 Ω は、近 BH 点、遠 BH 点の寄与を加算して、求められ

$$\begin{aligned}\Omega &= 2\pi\{(vA)E-(vA)N\}/(vA)N\\ &\quad + 2\pi\{(vB)E-(vB)N\}/(VB)N \\ &= 4\pi(\chi-1)\end{aligned} \tag{14}$$

である。事実、太陽系の水星の近日点の前進角であり、

$$\begin{aligned}\delta &= 24\pi^3a^2/(T^2c^2(1-e^2))\\ &= 6\pi(GM/hc)^2\\ &= 3\pi rg/(a\,(\,1-e^2\,)) = 5\times\ 10^{-6}[\text{rad/公転}]\end{aligned}$$

は、 r $g << a$、$3+e^2=$ 約 3 として、式 (11) より、$\chi=$ 約 $1+3\ rg$／（4 a（$1-e^2$)) から、$\chi-1=$ 約 $\frac{3rg}{4a(1-e^2))}$ となり、式 (15) より $\Omega=$ 約 $3/(a(1-e^2))=\delta$ である。公転周期

$$\begin{aligned}T &= [\pi a^2\sqrt{1-e^2}+a^2(1-e)^2/2\times\ 2\pi(\chi-1\,)\\ &\quad + a^2(1+e)^2/2\times2\pi(\chi-1\,)]/(h/2)\\ &= 2\pi a^{\frac{3}{2}}/\sqrt{GM}\{\chi^{-1}+\frac{2\,(1+e^2)(1-\chi^{-1})}{\sqrt{1-e^2}}\}\end{aligned}$$

である。$(T)E<(T)N$ である。固有時刻 $\tau(0\leq\tau\leq T)$ での小天体の位置も、計算可能である。

4 今後の研究の方向性

（1）近似解 s 厳密解の誤差を評価する。（2）1 小天体が、等速円運動をしているとき、もう 1 つの小天体の軌道を、摂動法を使って、近似法で軌道解析する。

参考文献

[1] A. Einstein,Die Grundlage der allgemeinen Relativitatsthorie, Annalen der Physik,49, 1916.

[2] K. Schwarzschild:Sitz, Preuss, Akad, 1916, 189.

[3] Y. Hagiwara, Theory of the Relativistic Trajectories in a Gravitational Field Schwarzschild2, Japanese Journal of Astronomy and Geophysics, 8(3), (1931), 67–176.

[4] 萩原雄祐、天体力学、第 4 巻（概周期軌道）1978、148–162.

[5] 寺澤寛一、自然科学者のための数学概論（増訂版）、岩波書店、1974、514–672.

[6] 戸田盛和、楕円関数入門、日本評論社、2001、190–192.

[7] T. Suzuki, The Motion of Free Fall of the Mass Point in the Space of Schwarzschild Time-Space,2018/10/28(未出版論文)

漸化式による常微分方程式の Taylor 級数解による数値解法の性能

平山 弘 [1]

[1] 神奈川工科大学

e-mail : hirayama@sd.kanagawa-it.ac.jp

1 概要

Taylor 級数法を使えば、微分方程式 $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$ の解を Taylor 級数に展開できる。いろいろな方法があるが、教科書に載っている常微分方程式の級数解法が非常に有効な方法となる。この常微分方程式の級数解法は、筆算で行うことを前提としているためか、Taylor 級数の加減乗算の範囲で行われている。この方法は計算機を使えば、除算、指数対数関数、三角関数等を含む場合も容易に効率的に計算することができる。Taylor 級数解法は、任意の次数で計算が可能が可能である。当然であるが、その解の次数より低い次数の解を含んでいる。この性質は、Runge-Kutta 法では、埋め込み型と呼ばれている性質である。Taylor 級数解は、パデ展開すれば、A 安定な計算法が得られる。このように Taylor 展開法は非常に良い性質を持っている。

本論文では、Taylor 展開法は、良い性質を持つだけでなく多くの問題で高速に計算できることを示す。

2 常微分方程式の解の Taylor 展開

次の微分方程式の解の Taylor 展開式を計算する。この常微分方程式の解を Taylor 級数 $\mathbf{y}(x) = \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1 x + \mathbf{y}_2 x^2 + \mathbf{y}_3 x^3 + \cdots$ を求める。

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \tag{1}$$

まず初期値を、$\mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x))$ に代入すると、$\mathbf{f}_0$ が得られる。同じ次数の左辺は $\mathbf{y}_1$ であるから、1 次の係数 $\mathbf{y}_1$ が求まる。ここまでの結果 $\mathbf{y}(x) = \mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1 x$ を (1) に代入し、1 次式まで正確に計算する。これは、n 次の Taylor 級数同士の計算では n 次まで正確に計算出来るからである。この計算の中で、必要な次数だけを計算すると効率的な計算となる。この方法を繰り返すと任意次数の Taylor 級数解が得られる。

3 常微分方程式の解の Taylor 展開例

次の簡単な微分方程式 (初期値 $y(0) = 1$) を解く。

$$y' = y^2 + 1 \quad y(0) = 1 \tag{2}$$

$y(x) = y_0 + y_1 x + y_2 x^2 + y_3 x^3 + \cdots$ を上の式に代入し、同じ次数は等しいと置くと

$$\begin{aligned} y_1 &= (y_0^2) + 1 \\ 2y_2 &= (2y_0 y_1) + 1 \\ 3y_3 &= (2y_0 y_2 + y_1^2) + 1 \\ &\cdots \\ n y_n &= \left(\sum_{k=0}^{n-1} y_k y_{n-k-1} \right) + 1 \end{aligned}$$

y_0 は初期値からわかるので、上の漸化式から $y_1, y_2, \cdots, y_n$ と計算出来る。このようにして、$y(x) = 1 + 2x + 2x^2 + \frac{8}{3}x^3 + \frac{10}{3}x^4 + \cdots$ が得られる。

4 数値例 1(長時間計算)

Taylor 展開法を使って長時間の計算を行った。解析解が知られている二体問題 (Kepler equation)[3] を解いた。方程式は次のようになる。

$$x_1' = x_3, x_2' = x_4, x_3' = -\frac{x_1}{r^3}, x_4' = -\frac{x_2}{r^3}, r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$$

初期値は、e が $0 \le e < 1$ を満たす実数とする。初期値が以下の式で表されるとする。

$$x_1(0) = 1 - e, \quad x_2(0) = x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}}$$

e=0.9 の場合を区間 [0,10],[0,100][0,1000] の間を計算し、最後の点に達したときの計算時間、誤差を求めた。RK 法として、6 段 5 次の Runge-Kutta-Fehlberg 法を使った刻み幅自動調節プログラム [4] を使い、許容誤差 1.0e-12 として計算した。Taylor 法でも刻み幅自動調節を行った。Taylor 級数の最後の項が許容誤差以下になるように刻み幅を決めて計算した。すなわち、展開位置が p で最後の項の次数が m の時、$|a_m (x-p)^m| \le \epsilon$ が成り立つ。$h = x - p$ と置くと、この式から刻み幅 $h \le \sqrt[m]{\frac{\epsilon}{|a_m|}}$ が得られる。

この方法を使うと 5 次の Taylor 展開法は 5 次の項が刻み幅の計算に使われ実質 4 次以下の

計算となり非常に時間のかかる計算になることがある。

表1の測定では計算機として、Intel Core i7-8700K 3.7GHz、コンパイラーとして、Visual Studio C++ 2017を使用した。計算は、次数が5次から29次までTaylor展開法を使って行った。その中の5次、20次の計算結果を表1に示した。

表 1. kepler 問題の計算時間と誤差

t	誤差	step 数	時間 msec	最小刻幅
	RKF 法			
10	5.7e-12	25356	1.29	1.7e-05
100	1.8e-09	260574	13.31	4.7e-07
1000	1.2e-07	2663118	136.75	9.8e-08
10000	4.3e-06	26582346	1181.50	2.9e-08
	5th Taylor			
10	1.1e-13	27302	3.45	3.0e-04
100	4.3e-12	281592	34.39	3.0e-04
1000	5.9e-10	2872230	345.04	3.0e-04
10000	2.7e-08	28674280	3463.91	3.0e-04
	20th Taylor			
10	8.8e-13	134	0.070	7.2e-02
100	1.0e-10	1318	0.72	7.2e-02
1000	8.2e-09	13384	7.20	7.2e-02
10000	4.2e-07	133602	70.58	7.2e-02

この結果から、5次の低次の場合は、Taylor展開法は、内部操作等のオーバーヘッドのため、RKF法による計算と比較し、約3倍程度時間がかかった。

計算次数が20次の時が計算時間が最小であった。区間[0,10000]のときの計算速度は、6段5次のRunge-Kutta-Fehlberg法の16.7倍であった。このように、高次のTaylor展開法を使えば、10倍以上の速度で計算することができる可能性がある。

5 数値例2

次のLorentzモデルの計算を行う。

$$\left\{\begin{array}{lcl} \frac{dy_1}{dx} & = & \sigma(-y_1+y_2) \\ \frac{dy_2}{dx} & = & -y_1y_3+ry_1-y_2 \\ \frac{dy_3}{dx} & = & y_1y_2-by_3 \end{array}\right.$$

ここで、パラメタ-は$\sigma=10, r=\frac{470}{19}, b=\frac{8}{3}$である。初期条件は$y_1(0)=0, y_2(0)=1, y_3(0)=0$である。$x$の積分区間$[0,50]$とする。この問題は、桁落ちが激しいので、4倍精度で計算した。以下のその結果を表2に示す。この問題では、計算速度は7倍以上で、精度は15桁以上良い結果が得られた。

表 2. kepler 問題の計算時間と誤差

方法	次数	時間 msec	誤差	step 数
RKF	5	767.8	3.7e-06	4109172
Taylor	6	6122.2	3.3e-14	6918002
Taylor	10	386.2	3.7e-18	303924
Taylor	15	145.7	8.5e-20	74384
Taylor	20	107.7	6.74e-20	38032

6 結論

Taylor展開法は高次計算が容易であるため、高精度かつ高速な計算が可能である。

Kepler問題では、計算速度が10倍以上であることが示された。Taylor展開法は常微分方程式の高速で高精度な数値計算に適している。

Lorentz問題では、Taylor展開法の低次計算では、RKFの方が計算速度は速くなるが、精度は、Taylor展開法の方が優れた結果が得られた。

多くの問題は効率的に計算できるが、次数が増えても効率的に計算できない問題もある。これらの問題は今後検討する必要がある。

参考文献

[1] Gisela Engeln-Müllges, Frank Uhlig, Numerical Algorithms with Fortran, Springer, 1996

[2] 平山, 小宮, 佐藤, Taylor級数法による常微分方程式の解法, 日本応用数理学会論文誌, 12(2002), 1–8.

[3] 三井、小藤、齋藤, 微分方程式による計算科学入門, 共立出版, (2005)

[4] 森正武, FORTRAN77 数値計算プログラミング, 岩波書店, (1987)

[5] Nedialkof N. S. and Pryce J. D., Solving Differential-Algebraic Equation by Taylor Series (III) : the DAETS Code, J. Numerical Analysis, Industrial and Appl. Math. 1(2007) 1–30

ねじり折りの剛体可折性とねじり折りを用いた剛体平織りの数え上げ

諫山 博人 [1], 川崎 英文 [2]
[1] 九州大学大学院数理学府，[2] 九州大学大学院数理学研究院
e-mail：isa0927math@gmail.com

1 概要

凸 n 角形周りのねじり折りで, n 角形の辺全てを谷折りしたものを V^n ねじり折りと呼ぶ. 本発表では最初に V^n ねじり折りが剛体折り不可能であることを示す.

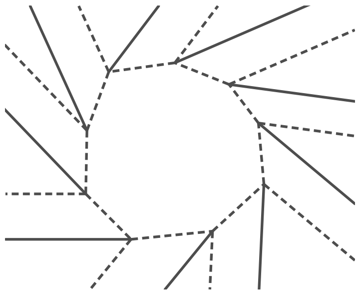


図 1. V^n ねじり折り. 破線が谷折り, 実線が山折り.

次に, 正方形周りのねじり折りで, 正方形の辺のうち k 本を谷折りし, $4-k$ 本を山折りしたものを V^kM^{4-k} ねじり折りと呼ぶ. そのようなねじり折りを複数個並べた平織りのうち, 剛体折り可能なものを数え上げる.

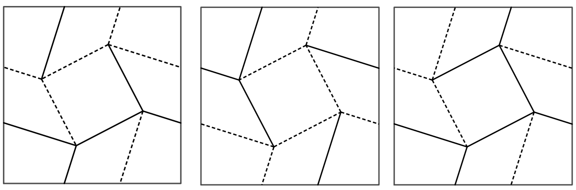


図 2. V^2M^2(左), V^3M(中央), VM^3(右)

2 球面三角法

単位球面をその中心を通る平面で切ったとき, その切り口は単位円になり, これを大円とよぶ. また, 2 つの大円が交わっているとき, その交点における 2 つの大円の接線のなす角を球面角とよぶ. 球面角は, それぞれの大円を切り取る平面同士の平面角に等しい. 球面上の 3 点 A, B, C が同一の大円上にないとき, 劣弧 AB, BC, CA が定まり, これらの劣弧で囲まれた図形 ABC を球面三角形とよぶ.

球面上の三角形についても余弦定理, 正弦定理が存在し, 劣弧 AB, BC, CA の長さをそれぞれ c, a, b としたとき, 定理 1 が成り立つ ([1]).

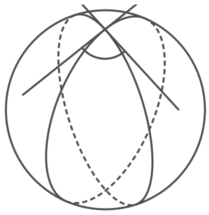


図 3. 球面角

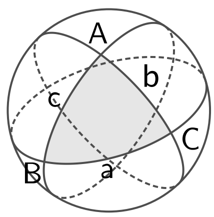


図 4. 球面三角形 ABC

定理 1 球面三角形 ABC について,

$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A$$
$$\cos b = \cos c \cos a + \sin c \sin a \cos B$$
$$\cos c = \cos a \cos b + \sin a \sin b \cos C$$

$$\frac{\sin a}{\sin A} = \frac{\sin b}{\sin B} = \frac{\sin c}{\sin C}$$

3 単頂点剛体折り

単位円の中心 O を頂点とし, 次数 4, 隣り合う折り線のなす角を α_i $(i = 1, 2, 3, 4)$ とする単頂点折りを剛体折りすると, 弧は単位球面の大円弧となり, 球面四角形 $B_1B_2B_3B_4$ が得られる.

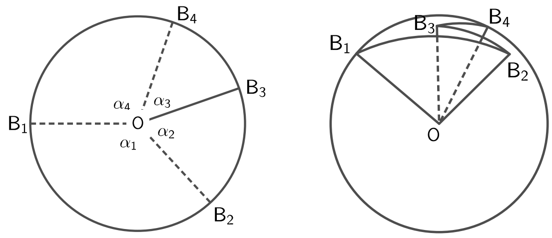


図 5. 次数 4 の単頂点折りの展開図 (左) と, それを剛体折りしたもの (右)

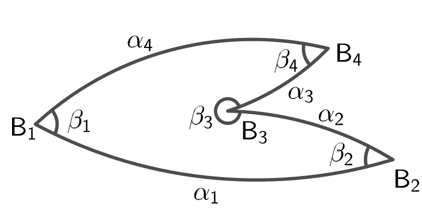


図 6. 球面四角形 $B_1B_2B_3B_4$

この単頂点折りが平坦可折条件を満たす場合, 4 つの頂点 B_1, B_2, B_3, B_4 における球面角 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ の以下の関係が Lang[2] により与えられた.

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京) Copyright (C) 2019 一般社団法人日本応用数理学会

定理 2 平坦可折条件を満たす次数 4 の単頂点折りを剛体折りすると, 球面角 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ について以下の関係が成り立つ.

$$\beta_1 + \beta_3 = 2\pi, \quad \beta_2 = \beta_4$$

定理 3

$$\frac{\tan \frac{1}{2}\beta_2}{\tan \frac{1}{2}\beta_1} = \frac{\sin \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sin \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)}, \quad \beta_1 > \beta_2$$

4　V^n ねじり折りの剛体折り不可能性

V^n ねじり折りについて, 凸 n 角形の各頂点を左回りに v_i $(i = 1, ..., n)$ とする. また, V^n ねじり折りが剛体折り可能であると仮定し, 辺 $v_i v_{i+1}$ を挟む 2 つの面の平面角を $\beta_{v_i v_{i+1}}$ とする.

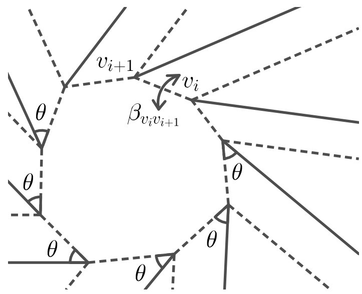


図 7. V^n ねじり折りにおける平面角 $\beta_{v_i v_{i+1}}$

このとき定理 3 により, 各頂点 v_i 周りにおいて $\beta_{v_{i-1} v_i} < \beta_{v_i v_{i+1}}$ が成立する. よって,

$$\beta_{v_1 v_2} < \beta_{v_2 v_3} < ... < \beta_{v_{n-1} v_n} < \beta_{v_n v_1} < \beta_{v_1 v_2}$$

が得られるが, これは矛盾. ゆえに V^n ねじり折りは剛体折り不可能である.

5　$V^k M^{4-k}$ ねじり折りの数え上げ

定理 3 より, $V^k M^{4-k}$ ねじり折り $(k = 0, 1, 2, 3, 4)$ のうち, 剛体折り可能であるものは $V^2 M^2$, $VM^3, V^3 M$ の 3 種類である ([2]). これらを並べた剛体折り可能な平織りを数え上げる.

$V^k M^{4-k}$ ねじり折りでは, 正方形の各頂点周りの角 α_i $(i = 1, 2, 3, 4)$ が定まっているので,

$$\frac{\sin \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2)}{\sin \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)} =: \mu \ (< 1)$$

とすると, 定理 3 より $\frac{\tan \frac{1}{2}\beta_2}{\tan \frac{1}{2}\beta_1}$ は定数 μ になる. 定理 2, 定理 3 及び μ を用いることで, 図 8 のような平織りが剛体折り不可能であることが示される.

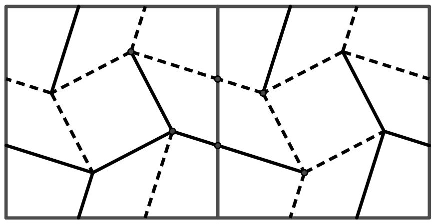


図 8. 剛体折り不可能な平織り

$V^2 M^2, VM^3, V^3 M$ を並べた平織りで, 剛体折り可能なものを数え上げると, 以下の定理が得られる.

定理 4 $V^2 M^2, VM^3, V^3 M$ を 2 枚並べたとき, 剛体折り可能な平織りは 18 種類である. (等長変換で一致するものは除く)

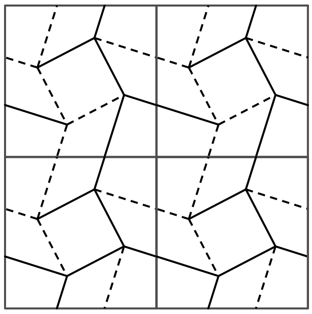


図 9. 剛体折り可能な平織り

定理 5 $V^2 M^2, VM^3, V^3 M$ を 4 枚正方形に並べたとき, 剛体折り可能な平織りは 15 種類である.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 16K05278 の助成を受けている.

参考文献

[1] 中岡 稔, 双曲幾何学入門- 線形代数の応用, サイエンス社, 1970.

[2] Robert J. Lang, Twists, Tilings, and Tessellations, CRC Press, 2018.

[3] 渡邉 尚彦, 膜構造の畳み込みに関する折紙的アプローチに関する研究, 東京大学大学院修士論文, 2006.

[4] 山口 大貴, ねじり折りの平坦可折性とピンホール折り, 九州大学大学院数理学府修士論文, 2018.

表裏対称な折り紙を対象とした単一視点形状モデリング

加藤 優弥[1], 金森 由博[2], 三谷 純[2]
[1]筑波大学 情報システム研究科, [2]筑波大学 情報システム系
e-mail: kato@cgg.cs.tsukuba.ac.jp

1 序論

一枚の紙を折り、折り紙作品を作ることは、世界中で親しまれている。また、特に動物を中心とした折り紙作品は、CG やイラストとしても普及している。しかし、一般のモデリングソフトを用いて折り紙作品をモデリングすることは、困難で多大な時間を要する。困難さの原因は、複数の紙が重なりあった状態であることや、あらゆる頂点周りの角度が 2π を満たさなければならないことが挙げられる。しかし、CG 等でモデルを用いる場合の多くは、それらしい外見を持っていることを重視しており、これらの制約を正確に満たす必要はないと考えられる。

そこで本研究では、折り紙モデルの CG 等での使用を目的とし、内部構造を省略した折り紙モデルを対話的に設計するシステムを提案する。ここでは対象とする折り紙作品を表裏対称であるものに限定する。こうすることで、3D モデリングで複雑とされるカメラ操作を省略し[1]、単一視点での形状モデリングが可能となる。

これまでにも、折り紙形状に特化したモデリングシステムは提案されている[2][3]が、これらの多くは、折り紙を実際に折る操作をコンピュータ上でシミュレーションするものである。提案手法では対象を限定することで、シミュレーションとは異なる新しいモデリング手法を提案する。

2 提案手法

2.1 対象とする折り紙

本研究では、表裏対称な折り紙を対象にしている。さらに、システムで指定できる折り操作を図 1 に示す 8 種類に限定することで、簡易な入力を可能にしている。「豚の足」「鏡像」は、一般的な折り操作の名称ではないが、完成状態が図のような形状になっているものを便宜上そう呼ぶことにする。また、これらのうち「中割り折り」「かぶせ折り」は紙を裏返すと同様の操作であることから、ここでは同一の操作として扱うものとする。

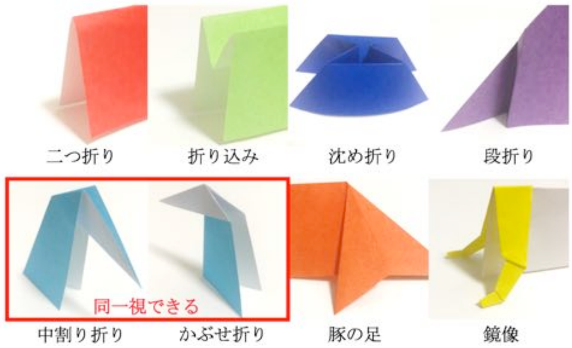


図 1. 対象とする折り操作

2.2 システム

提案システムのユーザインターフェースは 2 つのスクリーンから構成され、一つが 2D でユーザが入力を加えるもの、もう一つが対応する 3D 形状を対話的に表示するものである。システムは、次に示すようなユーザ入力を要求し、モデルの形状の計算を行う（図 2）。まず、参照画像となる折り紙の完成図の画像を用意する(a)。次に、参照画像上で、紙の面を表すポリゴンの集合を描画する(b)。操作は頂点のマウスクリックで行い、描画したポリゴンはスクリーンの平面を挟んで複製される。最後にポリゴンがどのような折り操作で作られたものであるかを、アノテーションを配置することで指定する(c)。操作は面や辺のマウスクリックやマウスドラッグで行われる。こうすることで折り紙作品の 3D モデルが生成される(d)。

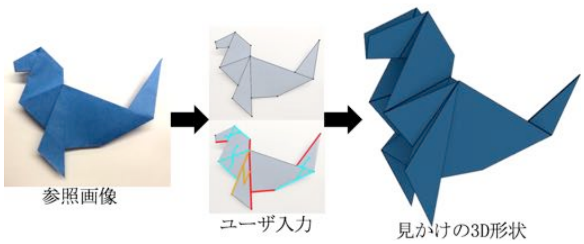


図 2. システムの概要

2.3 アノテーション指定と形状補正

アノテーションの指定方法と対応する形状の一覧を図 3 に示す。左列のような入力を加えると、中央の列のようなアノテーションが配置

され、右列のような形状が生成される。ここでは、形状生成のアルゴリズムの説明は省略するが、これらの形状は正確な内部構造を考慮しておらず、あくまで外見のみを指定した折り操作で折ったように見せる手法である。

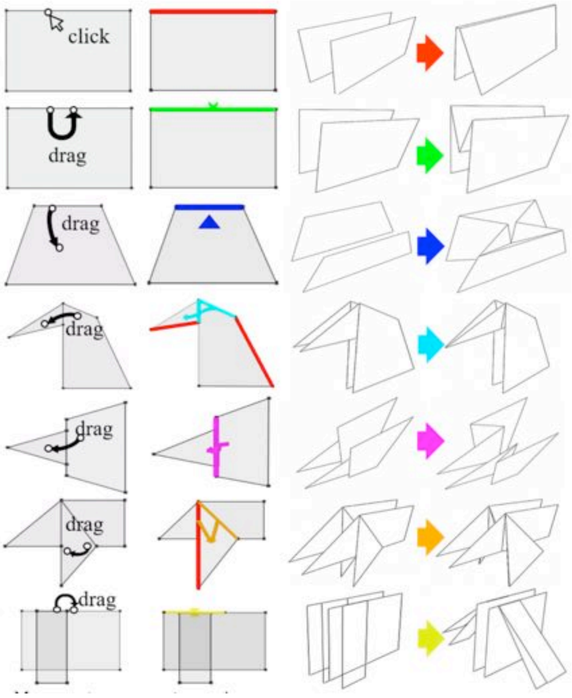


図 3. アノテーション指定と対応する形状

提案手法では、さらにユーザの入力に対して補正を行う。補正は 2 段階に分けて行われ、一つ目はポリゴン入力の際、入力した辺を既存の辺にスナップさせる。二つ目は、アノテーション指定後、本来その折り操作が満たすべき幾何制約を満たすように形状を補正する。幾何制約とは、例えば「中割り折り」の場合、折り返される部分は折る前の形状と比較して鏡映反転しているというようなものである。

3 結果

3.1 比較

一般モデリングシステムとして Maya を例にとり、比較を行った。Maya で生成されるモデルは実際の折り操作に基づいており、内部を含めて正確な構造を持っている。図 4 は Maya、提案システム、実物を比較した例である。

3.2 ユーザテスト

折り紙の知識があるユーザ 4 名と折り紙の知識がないユーザ 3 名の計 7 名に対し、ユーザテストを行った。はじめに 10 分程度のチュートリアルを受け、実際に作品を作成したのち、提案システムを用いて時間無制限でモデルを作成する。対象とする作品は、図 2 や図 4 で示す例と同程度の難易度の 3 作品とし、作成までの時間を計測する。テストの結果、それぞれに対して平均 2 分程度で作業を完了できることがわかった。さらに、折り紙の知識の有無は作業時間とほとんど関係ないことがわかった。

図 4. Maya モデルとの比較

4 まとめと今後の課題

本研究では、内部構造を省略した折り紙モデルを簡易な方法で生成する対話的システムを提案した。さらに、提案システムで生成したモデルは内部構造が省略されているにも関わらず、正確なモデルと遜色ない見た目を持つことや、一般のユーザでもシステムが容易に利用可能であることを示した。

今後の課題として、参照画像の画像解析によるエッジ抽出を用い、ポリゴン入力の完全自動化をすることが挙げられる。また、システムを拡張し、「鶴」などの紙を膨らますような形状に対応することも今後の課題の一つである。

参考文献

[1] Gingold Y, Igarashi T and Zorin D, Structured annotations for 2D-to-3D modeling, ACM Transaction on Graphics. Vol.28, (2009), pp.148:1-148:9.

[2] Miyazaki S, Yasuda T and Yokoi S, An origami playing simulator in the virtual space, Journal of Visualization and Computer Animation 7, Vol.1, (1996), pp.25-42.

[3] 古田陽介, 木本晴夫, 三谷純, 福井幸男. マウスによる仮想折紙の対話的操作のための計算モデルとインターフェース, 情報処理学会論文誌, Vol.48, (2007), pp. 3658-3669.

紙材料モデルを用いた折紙形状の折りたたみシミュレーション

戸倉 直[1]
[1] トクラシミュレーションリサーチ
e-mail: tokura.sunao@tokurasimresearch.com

1 はじめに

折紙工学に関するこれまでの先行研究等[1][2]を通じて円筒，円錐，楕円体等の様々な立体形状の折りたたみ可能条件が提示されており，これらの形状の実製品への応用も進展しつつある．立体折紙形状の実製品への応用に際しては，紙で試作品を作成し，低コストで基本的な動作確認が行われている．あるいは紙そのものを材料とした折紙製品を試作することで収縮・展開挙動の検討が行われている．これらの折紙製品の動的な挙動の数値シミュレーションには，有限要素法（FEM）ソフトウェアが用いられているが，紙自体が複雑な非線形材料であり，物性値の同定が容易でないため，解析のための材料モデルとしては単純な弾性体が用いられることが多い．しかし弾性体では動的な挙動や折りたたみ時の反力が実際と異なる可能性が十分考えられる．そこで本稿では直交異方性材料として提案された紙材料モデルを反転らせん円筒折紙の折りたたみシミュレーションに適用し，弾性体モデルとの比較検討を行った．

2 紙材料モデル

紙は製造工程のロール搬送時に繊維方向が固定されるため，図 1 に示すように，ロール搬送方向とそれに直交する方向，および面外方向に特性の異なる直交異方性弾塑性材料となる．Xia[3]は面内 2 方向および面外方向の引張り・圧縮・せん断試験を実施し，得られた応力-ひずみ曲線にフィッティングする構成式を提案した．降伏曲面は式(1)で表される．

$$f = \sum_{i=1}^{6} \left[\frac{S : N_i}{q_i(\varepsilon_p^f)} \right] - 1 = 0 \qquad (1)$$

ここで S は応力 6 成分，N_i は MD および CD 方向引張り・圧縮降伏曲面法線ベクトル，q_i は降伏曲面，$\varepsilon_p{}^f$ は塑性ひずみである．q_i=1 と置いて式(1)をプロットしたものを図 2 に示す．降伏曲面内は弾性域であり，異方性のヤング率が与えられている．降伏曲面は塑性ひずみの関数として関連流れ則に従い拡張される．Nygårds[4], Tryding[4][5]らは紙構成式を汎用構造解析ソフトウェアに実装し，実験の再現を行った．本稿では折りたたみシミュレーションに動的陽解法 FEM ソフト LS-DYNA R11[6]を用いたが, [3]～[5]で示された物性値を基に作成した入力データを使用した．これを表 1 に示す.

3 解析モデルおよび解析条件

反転らせん円筒折紙をモデル化の対象とした. 解析モデルを図 2 に示す．紙の厚みは 0.5 mm であり，剛体板で円筒を上方から圧縮し折りたたんだ．稜線が折り線となっているが，折り線はすでに折られて塑性変形しているとみなせるため，初期降伏応力 S01, S02, S03, S04, S05 を 5 MPa とし，折りたたまれやすくした．上部の剛体板に強制変位を与え，準静的に軸方向に圧縮した．円筒と剛体板および円筒自体の自己接触にはペナルティ法による接触境界条件を設定した．

4 結果およびまとめ

図 3 に圧縮時の円筒の変形図を示す．折り線に沿って折りたたまれていることがわかる．また図 4 に圧縮時の剛体板の反力履歴を示す．紙モデルの異方性の効果および弾性体との違いが明確に示されている．紙材料モデルを用いることでより高精度な解析が期待できる．

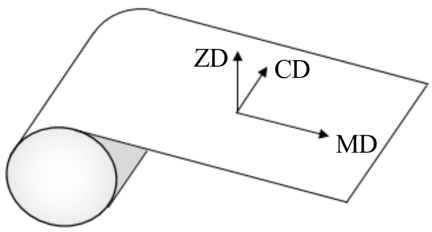


図 1. 紙の異方性材料軸. 慣習的に搬送方向，面内直交方向，面外方向をそれぞれ MD, CD, ZD 方向と記す.

表 1. LS-DYNA の物性モデル*MAT_PAPER 入力データ（文献に記載がないものについては推定値）

RO (ton/mm^3)	7.79×10^{-10}	A03 (MPa)	7.5
E1 (MPa)	3400.0	B03	375.0
E2 (MPa)	960.0	C03 (MPa)	200.0
E3 (MPa)	960.0	S04(MPa)	6.3
PR21	0.10447	A04 (MPa)	6.0
PR32	0.10447	B04	160.0
PR31	0.10447	C04 (MPa)	300.0
G12 (MPa)	800.0	S05 (MPa)	6.3
G23 (MPa)	800.0	A05 (MPa)	7.5
G13 (MPa)	800.0	B05	310.0
E3C (MPa)	900.0	C05 (MPa)	225.0
CC	2.0	PRP1	0.5
TWOK	4.0	PRP2	0.133
S01 (MPa)	10.7	PRP4	0.5
A01 (MPa)	19.0	PRP5	0.133
B01	260.0	ASIG (MPa)	0.4378
C01 (MPa)	800.0	BSIG (MPa)	-1.0
S02 (MPa)	6.5	CSIG	6.5
A02 (MPa)	20.0	TAU0 (MPa)	2.5
B02	160.0	ATAU (MPa)	2.0
C02 (MPa)	250.0	BTAU	2.0
S03 (MPa)	6.0	-	-

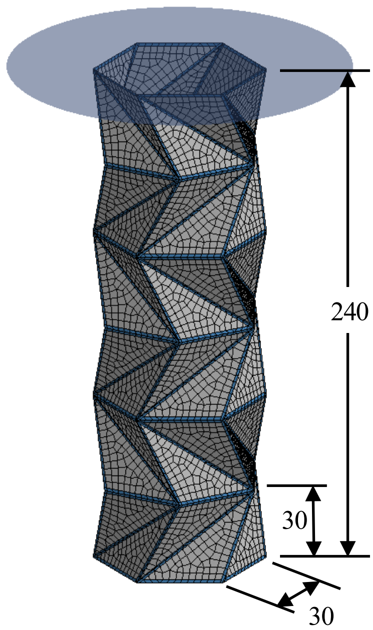


図 2. 反転らせん円筒モデル形状および寸法
単位：mm

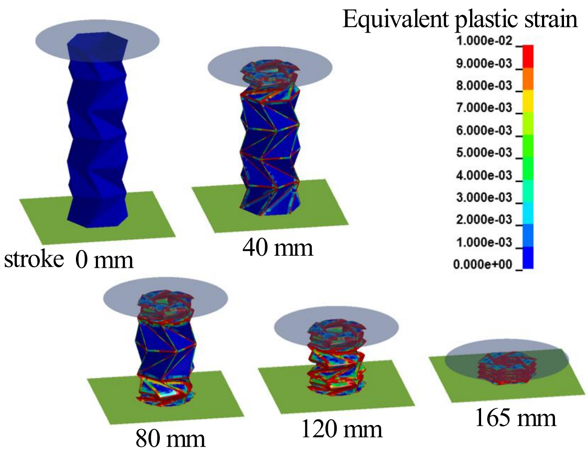


図 3. 圧縮変形＋相当塑性ひずみコンター

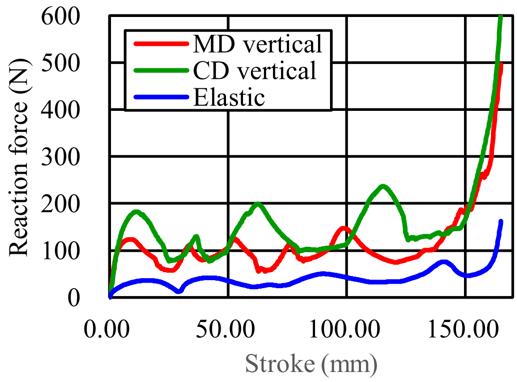


図 4. 反転らせん円筒圧縮反力履歴

参考文献

[1] 杉山文子, 野島武敏, 球状膜を半径方向に収縮させながら軸方向に折り畳む方法の開発, 日本機械学会論文集, Vol.80, No.814, 2014

[2] 石田祥子, 数理的手法に基づいた折り畳み可能な構造の展開図創出に関する研究, 東京工業大学博士論文, 2014

[3] Q. S. Xia, Mechanics of inelastic deformation and delamination in paperboard, PhD thesis at Massachusetts Institute of Technology, 2002

[4] M. Nygårds, M. Just, J. Tryding, Experimental and numerical studies of creasing of paperboard, International Journal of Solids and Structures, 46, 2493-2505, 2009

[5] J. O. Hallquist, LS-DYNA Keyword User's Manual, R11, 10/12/18 (r:10572), Livermore Software Technology, 2018

平織りの技法を用いた伸縮可能な構造の提案

山本 陽平[1]，金森 由博[2]，三谷 純[2]
[1]筑波大学システム情報工学研究科 [2]筑波大学情報システム系
e-mail: yamamoto@cgg.cs.tsukuba.ac.jp

1 序論

折り紙の特徴として，平坦な素材に折り目を与えることで柔軟に収縮・展開する構造を設計できる点が上げられる．現在広く使われている収縮・展開が容易な折り方として，ミウラ折りや風船の基本形を敷き詰めたものが挙げられる．これらは，折りの過程で折り線に囲まれた領域（以降では面と呼ぶ）が変形しない剛体折りと呼ばれる特徴を持つため，硬いパネルとヒンジの組み合わせで制作できるが，幾何学的な制約が厳しいため，設計できる形状が限定される．一方，非剛体折りは，折りの過程で面が変形し，その変形による内部応力が，収縮・展開の抵抗力として作用するものの，幾何学的な制約が易しいため設計が容易である．

本研究は，容易に収縮・展開できる折り方のバリエーションを増やすことを目的とする．研究の対象は，単純な折り構造を平面に連結することで幾何学的な模様を作り出す平織りと呼ばれる技法である．本稿が対象とする平織りの例を図 1 に示す．この平織りは非剛体折りで平坦に折りたためる．折りたたまれた形は，最も上の層になる面の成す模様が，タイリングを 2 色で塗り分けた模様のように見えるため，以降では「二層織り」と呼ぶ．本稿では，二層織りを紹介するとともに，二層織りの収縮・展開のしやすさを，折る過程で幾何学的に算出できる面の角度を指標として評価したため報告する．

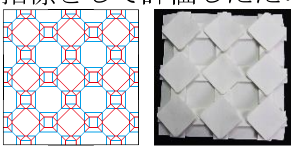


図 1. 二層織りの例(左:展開図(実線：山折り,破線:谷折り)，右:折りたたんだ形)

2 二層織りの基本形

二層織りは，基本となるパターン（以降では基本形と呼ぶ）を平面に並べることで構成される．山本の提案する手法[1]を用いて設計した基本形の一例を図 2 に示す．基本形の各部分の名称を次のように定める．中央に位置する面を**中央面**，紙の縁から垂直に伸びる 2 本の山折りおよび 2 本の谷折りから構成される領域（灰色の領域）を**プリーツ**，プリーツの山折りに挟まれた領域を**プリーツの上面**と呼ぶ．基本形は中央面が一番上の層になるよう平坦に折りたためる．また，折りたたまれた紙の縁は，元の縁が縮小した形となる．図 2(a)のように，ある辺の長さをl，プリーツの上面を除いた幅をw_1+w_2としたとき，折りたたまれた縁の倍率は，

$$\frac{(l-2(w_1+w_2))}{l} \quad \cdots 式(1)$$

となる．

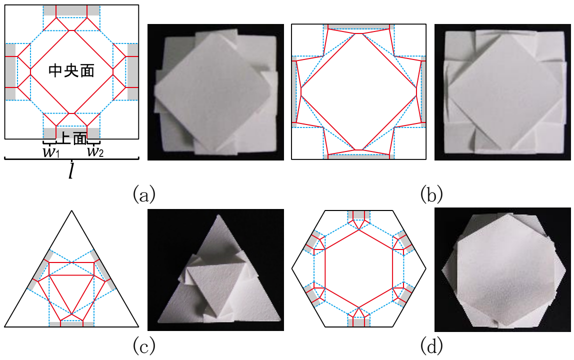


図 2. 基本形の例(左:展開図，右:折りたたんだ形)

3 基本形の連結

2 枚の基本形の長さが等しい辺を合わせた際，一方のプリーツ上の折り線を延伸した先にもう一方のプリーツ上の折り線が重なれば，プリーツの上面と底面を共有するように連結できる．この操作で，平面に並べた基本形を連結することで二層織りを構成できる．例えば図 2(a)(c)(d)の基本形を連結することで，紙の縁が正十二角形の二層織りを構成できる（図 3(a)）．また，紙の縁に凹部を含む二層織りも構成できる（図 3(b)）．なお，縁の倍率は基本形の倍率と同じになる．

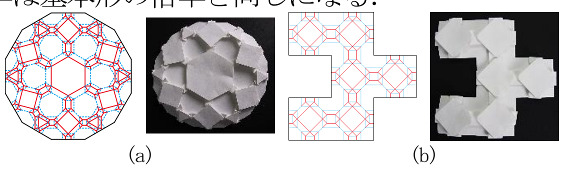


図 3 基本形を連結した二層織りの例
(左:展開図，右:折りたたんだ形)

4 基本形の伸縮のしやすさ

本稿では，折りの過程で面の変形の要因の一つとなる，中央面と上面の角度に着目する．この角度を指標として，収縮・展開のしやすさを評価する．なお基本形は，図 2 のように回転かつ鏡像対称とする．

図 2(a)に示す基本形の一部を図 4(a)に示す．また，折りたたむ過程の 2 つの基本形を，水平面上に並べ，真横から見た模式図を図 4(b)に示す．中央面と上面の角度とは，折り線a, bの折り角ϕ_a, ϕ_b（折り線を折る過程で，折り線を共有する 2 枚面が成す角度）の差である．この差をθとする．2 枚の基本形を連結すると上面は共有される．しかし，θが 0 より大きければ，上面は図 4(b)のように中央が沈んだ形になろうとする．折る過程でθが小さいほど，上面の変形は小さくなるため，収縮・展開しやすいと評価する．

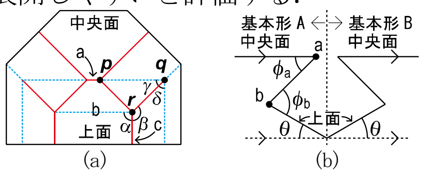


図 4 (a)基本形の展開図(図 2(a))の一部,
(b)水平面上に配置した 2 枚の基本形の模式図

基本形の収縮・展開のしやすさを評価するために，ϕ_aが 0° から 180° に変化する際の角度θを求める．点p, q, rのような 4 本の折り線が交わる頂点では，球面三角法を用いて，4 つの内角と 4 本の折り線の折り角を自由度 5 で決定できる．さらに，平坦に折りたためる内角であれば，舘の提案する関係式[2]を用いることで，4 本の折り線の折り角を，1 つおきの大きさが等しくなるよう，自由度 1 で決定できる．そのため，折り線pqの折り角の大きさはϕ_aと等しくなる．次に，折り線aを含む頂点pから順に頂点q, rと折り角を順に求めると仮定する．すると頂点rでは，舘の関係式が成立しない．そこで，折りの過程で頂点r近傍の内角α, βの値は変化し，折り線qrの折り角とϕ_bの大きさは等しくなると仮定する．以上より，頂点qにおける舘の関係式を用いることで，折り角ϕ_a, ϕ_bの関係式は

$$\tan\frac{\phi_b}{2} = \frac{1-\tan\frac{\gamma}{2}\tan\frac{\delta}{2}}{1+\tan\frac{\gamma}{2}\tan\frac{\delta}{2}}\tan\frac{\phi_a}{2} \quad \cdots 式(2)$$

となる．なお，γ, δは，頂点qの内角である．

ϕ_aが 0° から 180° に変化する際の角度θを，式(2)を用いて計算した結果を図 5 の太線に示す．また，図 2(b)の基本形を対象に，同様に角度θを求めた結果を図 5 の細線に示す．図 2(a)(b)は中央面の形は同じだが，紙の縁の倍率は図 2(a)の方が小さくなる．一方，中央面と上面の角度の最大値は，図 2(b)の方が小さくなるため，図 2(b)の基本形の方が収縮・展開しやすいと評価できる．収縮・展開のしやすい基本形ほど，折りたたんだ縁の倍率が 1 に近づくことを確認した．

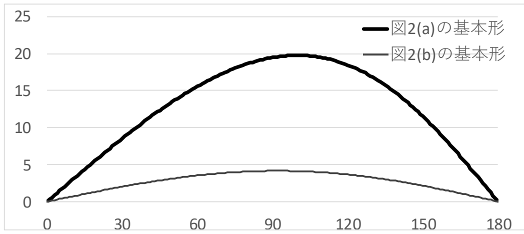


図 5 中央面と上面の傾きのグラフ（横軸：折り線aの折り角ϕ_a，縦軸：中央面と上面の成す角度θ）

なお，実際の折る過程の抵抗となる内部応力は，すべての面の変形を力学的に解析することで求められる．中央面と上面の角度の変化のみで折りのしやすさを評価することの妥当性の検証は今後の課題とする．

5 まとめと今後の課題

本稿では，二層織りと名付けた平織りを紹介し，折りの過程における面の傾きを用いて，収縮・展開のしやすさを評価する手法を提案した．収縮・展開しやすい基本形ほど，折りたたんだ縁の倍率が 1 に近づくことを確認した．これにより，収縮・展開のしやすさと折りたたみの倍率を勘案して二層織りを設計できる．今後の課題は，面の傾きの変化で収縮・展開のしやすさを評価することの妥当性の検証である．

参考文献

[1] Yohei Yamamoto, Jun Mitani, “Two-Layered Origami Tessellation”, Origami7: Proceedings of the 7th International Meeting on Origami in Science Vol3 (2018), pp835-847.

[2] Tomohiro Tachi, “Generalization of Rigid Foldable Quadrilateral Mesh”, Journal of the International Association for Shell and Spatial Structures Vol.50 (2009), pp173-179.

参議院選挙区にみる閾値と偏りの関係

諸星　穂積
政策研究大学院大学
e-mail：morohosi@grips.ac.jp

1　はじめに

参議院選挙は，選挙区と比例代表の 2 つの方式で行われる．ここでは選挙区制のほうで都道府県に割り当てられる議席数について論じる．図 1 にみるように，選挙区の定員は創設以来あまり変化していない．この間の人口の変動があまり反映されていない．2015 年までの議席配分で特徴的な点は，各県に偶数議席を配分し最小限を 2 としている点であった．この最小議席数の制限が配分の公平性にどの程度の影響を与えているか，他の方法であればどのようになったのかを，[1] を参考に過去のデータを使って調べてみた．

また別の分析として，選挙区が ℓ 議席の配分を持つための最小の人口割合（閾値 (threshold) と呼ばれる [2, 3]）が，過去どのくらいの値で推移したのかを計算してみた．

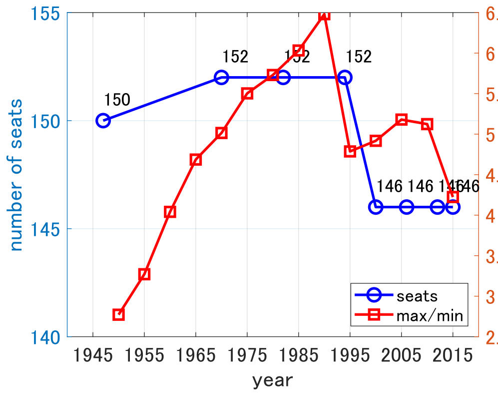


図 1. 選挙区定員の推移（左軸）と 1 議席あたり人口の最大／最小（右軸）．

2　偏りの計算

総議席数 h を s 個の選挙区に割り当てるとして，選挙区 i の人口を p_i，人口割合を $w_i = p_i/\sum_{i=1}^{s} p_i$，割り当てられた議席数を a_i とする（$h = \sum_{i=1}^{s} a_i$ である）．人口に比例して議席を配分するならば，選挙区 i は hw_i だけ議席をもつべきだろう．そこで，実際に配分された議席との差を議席超過量として定義する．

$$b_i = a_i - hw_i. \tag{1}$$

図 2 で，1950–2015 年の 14 回の国勢調査時点での b_i の値を計算し，人口の順にまとめて箱ひげ図にした．人口の少ない県では正の偏り，多い県では負の偏りが明らかである．

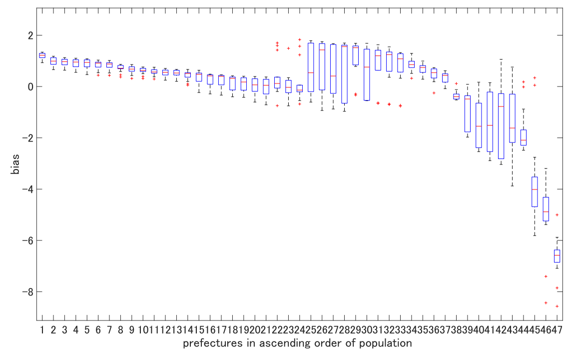


図 2. 選挙区ごとの偏り．

また年毎に b_i の絶対値の平均をとって，全体的な格差の指標としてみる．

$$B = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s} |b_i|. \tag{2}$$

この値を，1950–2015 年の 14 回の国勢調査時点で計算した．また仮想的に条件を同じ（各県最低 2 議席，偶数議席配分）にして，他の代表的な 6 配分法（Adams, Dean, Hill, Webster, Jefferson, Hamilton）を使った場合の B の値を合わせて図 4 に示した．

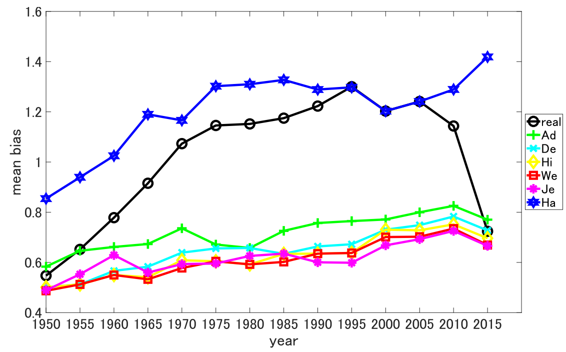


図 3. 選挙区の偏り平均値．

最低 2 議席という制約がどのくらい偏りに影響しているのかを調べるため，以下のような設定を考えて偏りの計算をした．

1) 最適議席数 2，各県は偶数議席を持つ．

2) 最低議席数 2，奇数議席も可．

3) 最低議席数 1．

以上の 3 条件について，6 配分法で 1950–2015 年の 14 回の国勢調査時点での B を計算してその平均を求めた．図 4 が結果である．方法にもよるが，偶数議席の制約よりも，最低議席数の制約のほうが偏りへの影響が大きそうである．

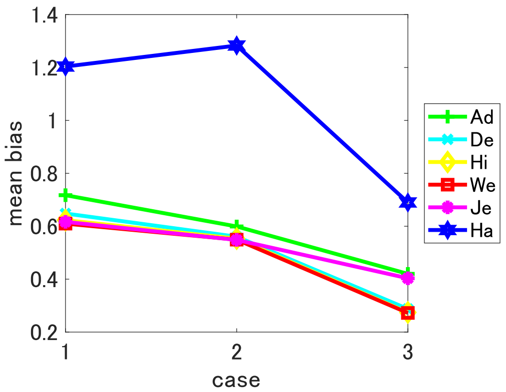


図 4. 6 配分法の 3 条件での偏り平均値．

3 閾値の計算

選挙区が ℓ 議席の配分を持つための人口割合（閾値）は，以下のように定義される．以下では，人口割合が昇順，$w_1 \leq w_2 \leq \cdots \leq w_s$，になっているものと仮定する．配分法 d により決まった議席数を $a_1^d, \ldots, a_s^d$ とする．人口割合のベクトル $\boldsymbol{w} = (w_1 \ldots, w_s)$ が取りうる値の全集合のなかで，E_ℓ^d を選挙区 1（最小の人口をもつ選挙区）の議席数 a_1^d が ℓ になる $\boldsymbol{w}$ の集合とする．

$$E_\ell^d = \left\{ \boldsymbol{w} \mid \sum_{i=1}^{s} a_i^d = h,\ a_1^d = \ell \right\}. \quad (3)$$

議席数が ℓ になる人口の下側閾値 I_ℓ^d は，この値未満の人口では議席数は必ず ℓ 未満になってしまう値である．

$$I_\ell^d = \min\{w_1 | \boldsymbol{w} \in E_\ell^d\}. \quad (4)$$

議席数が ℓ になる人口の上側閾値 S_ℓ^d は，人口がこの値を超えると議席数は必ず ℓ より大きくなる値である．

$$S_\ell^d = \max\{w_1 | \boldsymbol{w} \in E_\ell^d\}. \quad (5)$$

標識関数 $d(k)$ に対応する除数法では，この上下閾値は以下のように表すことができる [2]．

$$I_\ell^d = \min_{\sum_{i=2}^{s} \ell_i = h-\ell} \frac{d(\ell-1)}{d(\ell-1) + \sum_{i=2}^{n} d(\ell_i)}, \quad (6)$$

$$S_\ell^d = \min_{\sum_{i=2}^{s} \ell_i = h-\ell} \frac{d(\ell)}{d(\ell) + \sum_{i=2}^{n} d(\ell_i - 1)}. \quad (7)$$

注目したいのは I_2 : 人口比率がこの値以下では決して 2 議席を得ることができない，の値である．5 つの配分法で計算した過去の I_2 の値と，最小人口県の全人口に占める比率を図 5 に示した．最小県の人口比率は，小規模県に有利

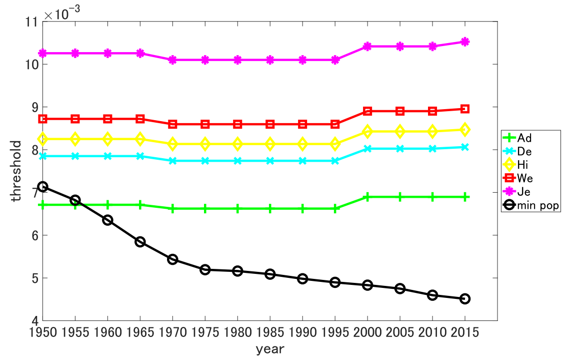


図 5. 閾値 I_2 の変化と最小県の人口比率．

とされる Adams 法の閾値を半世紀以上前に下回っている．

4 おわりに

参議院選挙区を例に，最小議席数の制限と議席数の偏りの関係をみた．最低議席数の変更や，偶数議席への制限をやめることが，偏りの是正にある程度有効であるが，一方で総議席数を今のままにしていては，是正にも限界があるようだ．この点は今後明らかにしたい．

参考文献

[1] K. Schuster, F. Pukelsheim, M. Drton, and N. R. Draper, Seat biases of apportionment methods for proportional representation, *Electoral Studies*, 22(2003), 651–676.

[2] A. Palomares and V. Ramírez, Thresholds of the divisor methods, *Numerical Algorithms*, 34(2003), 405–425.

[3] M. A. Jones and J. M. Wilson, Evaluation of thresholds for power mean-based and other divisor methods of apportionment, *Mathematical Social Sciences*, 59(2010), 343–348.

研究開発投資の「選択と集中」について

石井 良輔 [1], 中川 訓範 [2]
[1] 帝京大学，[2] 静岡大学
e-mail：nakagawa.kuninori@shizuoka.ac.jp

1 はじめに

本研究では、政府による研究投資に関する意思決定について、空間競争モデルを拡張したモデル（Ishii and Nakagawa (2015) [1]）を使って考察する。本モデルを利用する分析の利点は、投資する対象となる研究の多様性が均衡においてどのようになるかを明示的に分析可能となることである。具体的には、提案された研究プロジェクトに対して政府が選択と集中を行なう際に、その選択と集中の度合いについて明示的に考察可能となる。本研究のモデルにおいて、研究プロジェクトが提案されたあとに、政府は彼ら自身に役立つ研究がわからない事前とわかったあとの事後の２回の投資機会を持つ。このモデルにおいて、投資する研究の対象数とその偏りについて考察する。サブゲーム完全均衡において、役立つ研究がわからない事前の段階に政府はなるべく多くの研究分野に投資を行なうことを示した。この結果は、選択と集中をしないことが最適であることを含意している。

2 モデル

プレイヤーは研究者と政府である。研究者の数は 2 人で、それぞれが代表として研究プロジェクト $i, i=1,2$ を提案する。政府は、その研究プロジェクトを観察し、研究資金を投資する。プロジェクト i に対する投資金額を p_i と表記する。プロジェクトの研究内容は一次元の線分上の座標 z で表現され、プロジェクト i の座標を z_i と表記し、$0 \le z_1 \le z_2 \le 1$ とする。

政府は、この z_i が同時に提案されたあとに、それらを採択するかを決定し、採択したプロジェクトに研究資金を交付する。交付のタイミングは２回あり、一度目のタイミングでは、政府はどちらのプロジェクトの研究内容が政府にとって役立つのかわからない。二度目のタイミングでは、政府はいずれの研究内容が政府にとって役立つかをわかっている。政府にとって理想的な研究プロジェクトの内容も z と同じ一次元の線分上にあり、t で表記する。

政府は、政府の支出額 $\sum_i p_i$ と政府にとっての理想 t と各プロジェクト z_i との乖離 $(t-z_i)^2$ の期待値の総和を最小にするように行動する。この資金は競争的資金であり、投下される資金の額 p_i は競争的環境で決定される。言い換えると、採択のタイミングごとに、政府と研究者の間で研究プロジェクトが査定され、査定される研究プロジェクト間でも競合がある。研究者は、全期間を通じて研究プロジェクトの内容は変更できないが、研究プロジェクトに必要な申請金額は事前と事後で変更できる。

このゲームは最初に z が決定され、事前の p^b、事後の p^a が決定される三段階のゲームである。ここで b は事前、a は事後をそれぞれ示す。このゲームを後ろ向きに解き、サブゲーム完全な均衡を求める。

3 事後

政府自身にとって理想的な研究内容 t が判明している状況を「事後」と呼ぶ。いま、提案されている研究プロジェクトは２つなので、t が判明した事後において政府にとっての理想 t と各プロジェクト z_i との乖離 $(t-z_i)^2$ は、その実現値によって測ることが可能である。ここで、一般性を失うことなく、z_1 のプロジェクトが政府にとってアタリであったとしよう。t に対する相対的な近接度は、当該プロジェクトの研究内容に関する政府へのアピールの優位性と解釈できる。具体的には、理想点 t の政府に対する z で測られる優位性は、いま z_1 が t に対して相対的に近いので、$(t-z_2)^2-(t-z_1)^2$ である。この状況で、相対的にアピールの低い研究プロジェクト z_2 が均衡でつけることのできる p_2^{a*} を考える。$p_2^{a*}=0$ である。この証明はベルトラン競争と同様である。ここから、$p_1^{a*}=(t-z_2)^2-(t-z_1)^2$ である。よって、事後の均衡における研究プロジェクトへの投下資金は $(p_1^{a*}, p_2^{a*}) = ((t-z_2)^2-(t-z_1)^2, 0)$ となる。アタリが 2 であった場合も同様に示せる。よって、$p_i^{a*} = (t-z_j)^2-(t-z_i)^2, i \neq j, i=1,2$ である。

4　事前

「事前」とは政府にとっての正解が分かっていない状況である。言い換えると、当たりくじが分かっていない状況で、くじを買う状況である。このとき、政府は事後のサブゲームの均衡を所与にして、事前の段階での意思決定を行なう。投資するプロジェクトの当たりはずれを、ここでは利得の期待値によって評価する。政府の行動には３つの可能性がある。１、両方の研究プロジェクトに資金を投下する。２、いずれか１つの研究プロジェクトを選択し、それに資金を集中する。２は、z_1 ないし z_2 のいずれかを選択するため、２通りある。３つめは、何もしないという行動である。いま、t は $[0,1]$ で一様分布すると仮定する。まず、２つのプロジェクトに投資した場合の期待利得は $\int_0^{\frac{z_1+z_2}{2}}(t-z_1)^2dt + \int_{\frac{z_1+z_2}{2}}^1(t-z_2)^2dt + p_1^b + p_2^b$ である。最後に、事前の段階でいずれかを選択し集中した場合は $\int_0^1(t-z_i)^2 + p_i^bdt$ で計算できる。

ここで、２つのプロジェクトに投資した場合といずれかを選択し集中した場合の期待利得が等しくなる p_1^b, p_2^2 を求める。

$$p_1^b = (z_2 - z_1)(\frac{z_1+z_2}{2})^2, \tag{1}$$

$$p_2^b = (z_2 - z_1)(1 - \frac{z_1+z_2}{2})^2. \tag{2}$$

最後に、政府が事前に何もしなかったケースについて考える。研究者側から見た事後の均衡の期待利得を計算する。プロジェクト１についてのみに示す。$p_1^{a*} = (t-z_2)^2 - (t-z_1)^2$ より、

$$\int_0^{\frac{z_1+z_2}{2}} p_1^{a*}dt = (z_2 - z_1)(\frac{z_1+z_2}{2})^2 \tag{3}$$

２の場合も同様に計算できる。また、ここから (1) が事前の段階ゲームの均衡における投資額であることもわかった。

事前の段階ゲームにおいて、期待値で政府は全てが無差別になるような金額を投資する。均衡において、２つのプロジェクトに投資すること１つに選択と集中すること、さらに何も投資しないことは、政府にとって期待値の意味で無差別である。

5　均衡における z の値

最後に、均衡における z の値を計算する。(1) より、利潤が計算できるので、一階条件より、$z_1^* = 1/4, z_2^* = 3/4$ である。

6　まとめ

本稿では、政府による研究開発投資の選択と集中について、空間競争モデルに事前と事後の段階を組み込んだモデルによって考察した。サブゲーム完全な均衡において、政府は選択と集中を行なわない可能性を示した。この結果は、五里霧中で暗中模索をすることが研究であるならば、広く薄くばらまく投資の方が有効であることを含意している。同時に、事後の均衡から、正解のわかっている状況では、アタリくじのみに効率的に投資可能であることも含意されている。このことから、投資の選択と集中が正解のわかっている場合には有効だという政策的含意も示されたと言えよう。この問題は、政府にとって、事後とは何で、それはいつどこで実現するのかということが本質であると考えられる。なお、本稿では $N=2$ のケースについて考察したが、Ishii and Nakagawa (2017) [2] において、一般的な N の場合についても同様の結果が成り立つことを示した上で、均衡における研究プロジェクトの数についても考察している。

参考文献

[1] Ishii,R. and Nakagawa,K., Scheduling competition in the airline industry and the issue of duplicate bookings, in:Proc of MISTA 2015 (the 7th Multidisciplinary International Conference on Scheduling : Theory and Applications), pp.55–62, 2015.

[2] Ishii,R. and Nakagawa,K., Government Expenditure on Research Plans and their Optimal Diversity, ARSC2017, 31st Applied Regional Science Conference, University of Tokyo, 2017.

オンライン上の情報伝播シミュレーションと再現性向上のための拡張

竹内 謙太郎
静岡大学総合科学技術研究科工学専攻数理システムコース
e-mail: takeuchi.kentaro.14@shizuoka.ac.jp

1 概要

現在、解決すべき社会問題の一つにオンライン上での誤情報の伝播が挙げられる。昔に比べて SNS の登場によりユーザーが情報に接触する回数は著しく増加し、誤情報伝播が一層起こりやすい環境になってしまった為、このような問題が発生した。本研究は誤情報伝播に対して確実な対抗手段を生み出す為、情報拡散を忠実に再現したモデルを提案することを目的としている。今回は有力な打開策を提案するものではなく、情報伝播を再現したモデル構築とネットワークに対するいくつかの拡張の効果を見ることに重点を置いている。更に、誤情報伝播の再現を行うためには前提となる誤情報を含まない情報伝播の再現に注力する必要があると考えたため、今回のモデルでは誤情報伝播を扱っていない。先行研究[1]を元に 3 種類の拡張を施し、情報伝播にどのような影響があるかを調査した。

2 モデル

周期境界を持つ隣接8マスの格子ネットワークにワッツ・ストロガッツのスモールワールド性を付与したモデルを使用する。各ノードをユーザーとし、それぞれが「考え方」というパラメータを持つ。この時、最初に情報を伝播するノード(初期情報共有者)はランダムに選ぶように設定する。情報にも値があり、情報を共有していないユーザーの考え方と情報の値のズレが境界値以下の時に情報を共有するように設定する。ここで、考え方の値は一様乱数で与える。

表1. モデルの詳細

	詳細
ネットワーク	スモールワールド
情報の値	0~1
各個人の考え方の値	0~1
情報共有の境界値	0.015

3 拡張

3.1) 均質パスの形成

ネットワーク内において、隣人が自分と似た考えを持っている時、その隣人とのパスを均質パスと定義する。一つ目の拡張は均質パスを特定まで割合に引き上げて情報伝播を行う。この時、ランダムで辺を選び、半分の確率でどちらかのユーザーがもう一方のユーザーの考え方をコピーした後にノイズを入れるようにする。実際のオンライン上のネットワークでは似た考えの人と繋がりやすいため、コミュニティーの偏りを表現する事が出来る。

3.2) 寛容さの導入

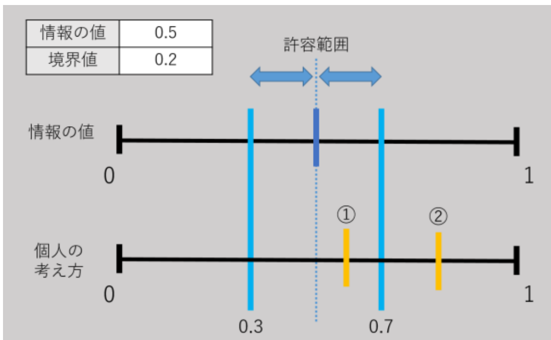


図 1. 情報を共有する時の条件の例
(今回の場合はユーザー①のみ情報共有)

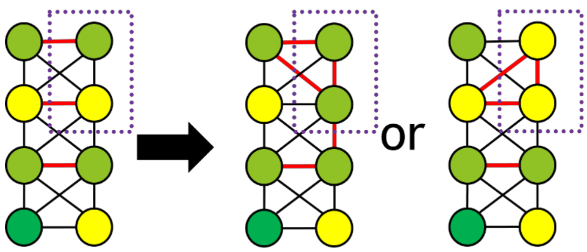


図 2. 均質パスの形成(太線は均質パス)

全員が一定のズレ以内ならば情報を拡散させるという状況は実際には考えにくい。自分が好きな分野の話であればどんな内容であれ拡散させる人がいる一方で、ピンポイントで興味のある情報以外一切拡散しようとしない人も存在する。以上を踏まえたユーザーの多様性を表現するために「寛容さ」という拡張を行った。今までの境界値にこの寛容さの値を足す事により各ユーザーの許容範囲を変更する事が可能になる。

3.3) 話題の好み

ニュースはいくつかのジャンルに分けることが出来、とりわけ政治に関する話題の時は情報伝播が大きいことが分かっている[2]。ユーザーは自分が好きな話題は積極的に情報を広げる傾向がある一方で、ある話題に興味のあるユーザーは関連のない話題には興味を示すことはないと考えることはできないだろうか。この発想を元にした拡張が話題の好みの概念を取り入れたものである。ユーザーは 3 つの話題を積極的に広げ、3 つの話題に対しては消極的な態度をとるものと仮定する。この相関図を六角形で表し、ある一つの頂点に注目したとき、興味のある話題と一致したときには情報拡散を大きく促し、ある程度関連性のあるジャンルであれば少しだけ情報拡散を促し、対角線にある頂点の話題はとりわけ興味のない話題として情報拡散を極力行わないようにし、残り 2 つの話題に関しても微量の負の補正をかけるようにする。これにより、ユーザーの好みを簡潔に表現することが出来る。

4　結論

先行研究での簡単なモデルに拡張を導入することで、多様性を持たせて実際のデータを再現するような結果を得ることが出来た。その一方で、拡張前後で結果が変わらない場合が見られた。これは更なる統計データを得る事で的確な数値を実験的に見つけていくことで更なる有力な拡張が見出せると考えられる。

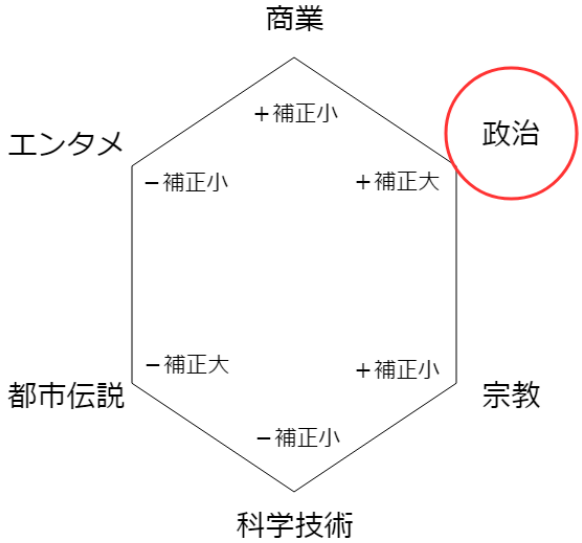


図 3. ユーザーが政治の話題が好きな場合の補正

参考文献

[1] Michel Del Vicario, Allessandro Bessi, et al. The spreading of misinformation. PNAS, 113 (2016), 554-559.

[2] Soroush Vosoughi, et al. The spread of true and false news online. Science 359 (2018), 1146-1151.

偶数位数を持つ有限体上楕円曲線の2次の指標

白勢 政明[1]

[1] 公立はこだて未来大学

e-mail : shirase@fun.ac.jp

1 概要

q を奇素数 $p(\geq 5)$ のべきとし，$\mathbb{F}_q$ を元の個数が q の有限体とする．$E/\mathbb{F}_q$ を楕円曲線とし，$\#E(\mathbb{F}_q)$ ($\#$ は元の個数) は偶数で位数 2 の点が与えられているとする．この時，準同型写像 $\phi : E(\mathbb{F}_q) \to \{1, -1\}$ を Legendre 記号とノルムを使って定義できることを示す．ある意味 ϕ は $E(\mathbb{F}_q)$ の 2 次の指標である．なお，本稿の結果は，有理数体上の楕円曲線に関する [1] の 3.5 節の命題を有限体上で考え直したものである．

2 指標の構成

q を奇素数 p のべきとする．写像 $\lambda_q : \mathbb{F}_q^* \to \{1, -1\}$ を $u \mapsto u^{(q-1)/2}$ と定義する．

補題 1 *(a)* λ_q は準同型である．
(b) $u \in \mathbb{F}_q^*$ に対して，u が平方元 $\Leftrightarrow \lambda_q(u) = 1$.
(c) $N_{\mathbb{F}_q/\mathbb{F}_p}$ を $\mathbb{F}_q$ の $\mathbb{F}_p$ 上ノルムとすると，

$$\lambda_q(u) = \left(\frac{N_{\mathbb{F}_q/\mathbb{F}_p}(u)}{p}\right)$$

が成り立つ．ここで，$(\frac{\cdot}{\cdot})$ は *Legendre* 記号である．

∵) (a) 自明.
(b) α を $\mathbb{F}_q^*$ の生成元とし，$u = \alpha^k$ とする．すると，$\lambda_q(u) = u^{(q-1)/2} = (\alpha^k)^{(q-1)/2} = (\alpha^{(q-1)/2})^k = (-1)^k$ となる．よって，u が平方元 (k が偶数) ならば $\lambda_q(u) = 1$ であり，u が非平方元 (k が奇数) ならば $\lambda_q(u) = -1$ である．
(c) $u \in \mathbb{F}_q^*$ に対して，

u が $\mathbb{F}_q^*$の平方元 $\Leftrightarrow N_{\mathbb{F}_q/\mathbb{F}_p}(u)$ が $\mathbb{F}_p^*$の平方元

であるため，(c) が言える．□

$E/\mathbb{F}_q$ を

$$E/\mathbb{F}_q : \ y^2 = x^3 + ax^2 + bx + c \qquad (1)$$

で与えられる楕円曲線とし，位数 2 の点 $(x_0, 0) \in E(\mathbb{F}_q)$ が与えられているとする．$x_0 = c = 0$ の時，写像 $\phi : \ E(\mathbb{F}_q) \to \{1, -1\}$ を次のように定義する．

$$\begin{array}{ccll} \mathcal{O} & \mapsto & 1 & \\ (0,0) & \mapsto & \lambda_q(b) & \\ (x_1, y_1) & \mapsto & \lambda_q(x_1) & (x_1 \neq 0) \end{array}$$

$x_0 \neq 0$ の場合は $(x_0, 0)$ が $(0, 0)$ になるような座標変換を行ってから，上記の定義を適用する．すると，

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{O} & \mapsto & 1 \\ (x_0, 0) & \mapsto & \lambda_q(a + 3x_0^2) \\ (x_1, y_1) & \mapsto & \lambda_q(x_1 - x_0) \end{array}$$

となる．

命題 2 ϕ は準同型である．*(*$P, Q \in E(\mathbb{F}_q)$ に対して $\phi(P + Q) = \phi(P) \cdot \phi(Q)$ が成り立つ．*)*

∵) $x_0 = 0$ の場合を示せば十分である．$P_1, P_2 \in E(\mathbb{F}_q)$ をとり，$P_3 = -P_1 - P_2$ とする．この時，P_1, P_2, P_3 はある直線 L 上にある．各 $i = 1, 2, 3$ に対して，$P_i \neq \mathcal{O}$ の時，P_i の座標を (x_i, y_i) で表す．初めに

$$\phi(P_1) \cdot \phi(P_2) \cdot \phi(P_3) = 1 \qquad (2)$$

を示す．
(a) 直線 L が $\mathcal{O}$ も $(0, 0)$ も通らない場合: $i = 1, 2, 3$ に対して $P_i = (x_i, y_i)$ と書け，$\phi(P_i) = \lambda_q(x_i)$ となる．L の式を $y = \lambda x + \nu$ $(\nu \neq 0)$ とし，これを E : $y^2 = x^3 + ax^2 + bx$ に代入すると，$x^3 + (a - \lambda^2)x^2 + (b - 2\lambda\nu)x - \nu^2 = 0$ が得られ，この方程式の解は x_1, x_2, x_3 である．よって，$x_1x_2x_3 = \nu^2$ であり，

$$\begin{array}{rcll} 1 & = & \lambda_q(\nu^2) = \lambda_q(x_1x_2x_3) & \\ & = & \lambda_q(x_1) \cdot \lambda_q(x_2) \cdot \lambda_q(x_3) & \text{補題 1(a) より} \\ & = & \phi(P_1) \cdot \phi(P_2) \cdot \phi(P_3) & \end{array}$$

が得られる．
(b) L の式は $\mathcal{O}$ を通らないが $(0, 0)$ を通る場合: P_1，P_2，P_3 のうち 1 つが $(0, 0)$ に等しくそれを P_{i_1} とし，残りを $P_{i_2} = (x_{i_2}, y_{i_2})$，$P_{i_3} = (x_{i_3}, y_{i_3})$ とする．L の式は $y = \lambda x$ と書け，これを E の式に代入すると，$x^3 + (a - \lambda^2)x^2 + bx = 0$ が得られ，この方程式の解は $0, x_{i_2}, x_{i_3}$ である．解と係数の関係より，$x_{i_2}x_{i_3} = b$, つまり $x_{i_3} = b/x_{i_2}$ が成り立つ．従って，

$$\begin{array}{ll} \phi(P_1) \cdot \phi(P_2) \cdot \phi(P_3) = \phi(P_{i_1}) \cdot \phi(P_{i_2}) \cdot \phi(P_{i_3}) & \\ \quad = \lambda_q(b) \cdot \lambda_q(x_{i_2}) \cdot \lambda_q(x_{i_3}) & \\ \quad = \lambda_q(b \cdot x_{i_2} \cdot b/x_{i_2}) & \text{補題 1(a) より} \\ \quad = \lambda_q(b^2) = 1 & \end{array}$$

が得られる．

(c) L は $\mathcal{O}$ を通るが $(0,0)$ を通らない場合: 更に，(i) $P_1 = P_2 = P_3 = \mathcal{O}$ の場合と，(ii) そうでない場合に分ける．

(i) $P_1 = P_2 = P_3 = \mathcal{O}$ の時，$P_1 + P_2 + P_3 = \mathcal{O}$ であり，$\phi(P_1)\cdot\phi(P_2)\cdot\phi(P_3) = 1\cdot 1\cdot 1 = 1$ となる．

(ii) P_1, P_2, P_3 のうち 1 つが $\mathcal{O}$ に等しくそれを P_{i_1} とし，残りを P_{i_2}, P_{i_3} とする．$P_{i_3} = -P_{i_2}$ なので，$P_{i_2} = (x_{i_2}, y_{i_2})$ とすると $P_{i_3} = (x_{i_2}, -y_{i_2})$ である．L は $(0,0)$ を通らないので $x_{i_2} \neq 0$ である．よって，$\phi(P_{i_2}) = \phi(P_{i_3}) = x_{i_2}$ であり，次が得られる．

$$
\begin{aligned}
&\phi(P_1)\cdot\phi(P_2)\cdot\phi(P_3) = \phi(P_{i_1})\cdot\phi(P_{i_2})\cdot\phi(P_{i_3})\\
&= 1\cdot\lambda_q(x_{i_2})\cdot\lambda_q(x_{i_2})\\
&= 1\cdot\lambda_q(x_{i_2}^2) \qquad \text{補題 1(a) より}\\
&= 1
\end{aligned}
$$

(d) L が $\mathcal{O}$ と $(0,0)$ を通る場合: P_1, P_2, P_3 のうち 1 つが $\mathcal{O}$ に等しく，2 つが $(0,0)$ に等しい．よって，次が得られる．

$$
\begin{aligned}
&\phi(P_1)\cdot\phi(P_2)\cdot\phi(P_3) = \phi(\mathcal{O})\cdot\phi((0,0))\cdot\phi((0,0))\\
&= 1\cdot\lambda_q(b)\cdot\lambda_q(b)\\
&= 1\cdot\lambda_q(b^2) \qquad \text{補題 1(a) より}\\
&= 1
\end{aligned}
$$

(a)，(b)，(c)，(d) より (2) が示された．

最後に ϕ が準同型であることを示す．$P_3 = -P_1 - P_2$ より次が得られる．

$$
\begin{aligned}
\phi(P_1 + P_2) &= \phi(-P_3)\\
&= \phi(P_3)^{-1} && \text{補題 1(a) より}\\
&= \phi(P_1)\cdot\phi(P_2) && \text{(2) より} \quad \square
\end{aligned}
$$

3 指標の応用

$\phi : E(\mathbb{F}_q) \to \{1, -1\}$ を前節で定義した準同型写像とする．集合 $\mathcal{E}_{\text{even}}$ と $\mathcal{E}_{\text{odd}}$ を

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}_{\text{even}} &= \{P \in E(\mathbb{F}_q) :\ P \text{ の位数は偶数}\}\\
\mathcal{E}_{\text{odd}} &= \{P \in E(\mathbb{F}_q) :\ P \text{ の位数は奇数}\}
\end{aligned}
$$

と定義する．

補題 3 $\phi^{-1}(-1) \neq \emptyset$ ならば

$$\#\phi^{-1}(1) = \#\phi^{-1}(-1)$$

が成り立つ．

$\because$) $\phi^{-1}(-1) \neq \emptyset$ を仮定する．$\phi^{-1}(1) = \ker\phi$ は $E(\mathbb{F}_q)$ の部分群であり，

$$E(\mathbb{F}_q)/\ker\phi = \{\phi^{-1}(1), \phi^{-1}(-1)\}$$

である．各剰余類の元の個数は等しいので，$\#\phi^{-1}(1) = \phi^{-1}(-1)$ となる．$\square$

命題 4 $E/\mathbb{F}_q$ は *(1)* で与えられる楕円曲線とし，$P \in E(\mathbb{F}_q)$ とする．

(a) P の位数が奇数ならば，$\phi(P) = 1$ である．

(b) $\phi^{-1}(-1) \neq \emptyset$ を仮定し，$\#E(\mathbb{F}_q) = 2\times$奇数とする．この時

$$P \text{ の位数が奇数} \Leftrightarrow \phi(P) = 1$$

である．

$\because$) (a) $P \in E(\mathbb{F}_q)$ の位数を奇数 $2k+1$ とすると，ϕ の準同型性より次が得られる．

$$
\begin{aligned}
1 &= \phi(\mathcal{O}) = \phi((2k+1)P)\\
&= \underbrace{\phi(P)^{2k}}_{=1}\cdot\phi(P) = \phi(P)
\end{aligned}
$$

(b) $E(\mathbb{F}_q)$ の位数を $2l$ (l は奇数) とする．$E(\mathbb{F}_q)$ は有限アーベル群なので，$E(\mathbb{F}_q)$ の 2-シロー部分群 $\mathrm{Syl}_2(E(\mathbb{F}_q)) \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ であり

$$E(\mathbb{F}_q) \simeq \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times G \ (G \text{ の位数は } l),$$

と書け，

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}_{\text{even}} &\simeq \{(0,g) \in \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times G\}\\
\mathcal{E}_{\text{odd}} &\simeq \{(1,g) \in \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times G\}
\end{aligned}
$$

である．よって，

$$\#\mathcal{E}_{\text{even}} = \#\mathcal{E}_{\text{odd}} = \#G = l \tag{3}$$

である．補題 3 より $\phi^{-1}(1) = l$ であり，特に $\#\mathcal{E}_{\text{odd}} = \#\phi^{-1}(1)$ である．(a) より $\mathcal{E}_{\text{odd}} \subset \phi^{-1}(1)$ である．従って，$\mathcal{E}_{\text{odd}} = \phi^{-1}(1)$ であり，$P \in \mathcal{E}_{\text{odd}} \Leftrightarrow P \in \phi^{-1}(1)$ となる．$\square$

命題 4(b) は，$\#E(\mathbb{F}_q) = 2\times$ 奇数の時，$P \in E(\mathbb{F}_q)$ の位数の偶奇性を判定できることを示している．

4 まとめと今後の課題

本稿は準同型写像 $\phi :\ E(\mathbb{F}_q) \to \{1, -1\}$ を定義した．命題 4(b) より，$\#E(\mathbb{F}_q) = 2\times$ 奇数で $\phi^{-1}(-1) \neq \emptyset$ の時，ϕ を使って $P \in E(\mathbb{F}_q)$ の位数の偶奇性を判定できる．

今後の課題として，いつ $\phi^{-1}(-1) \neq \emptyset$ となるかを調べ，$\#E(\mathbb{F}_q) = 4\times$ 奇数の時，$P \in E(\mathbb{F}_q)$ の位数の偶奇性を判定できるかを研究したい．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 19K11966 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] J. H. Silverman, J. Tate, Rational Points on Elliptic Curves, Springer-Verlag, 1992.

互いに 3-同種な楕円曲線から定まるクンマー曲面上の楕円曲線束について

内海 和樹 [1]
[1] 立命館大学理工学部
e-mail : kutsumi@fc.ritsumei.ac.jp

1 概要

本講演では 3-同種な 2 つの楕円曲線から定まる直積型クンマー曲面上のある楕円曲線束に対し，そのモーデル・ヴェイユ格子の生成元を有理点として具体的に書き下す方法について述べる．一般に，楕円曲線間の同種写像のグラフから定まる直積型クンマー曲面上の因子を記述するのは関数体係数代数方程式の解を扱うことになるので難しい．2 つ楕円曲線が 3-同種な場合はそのような代数方程式を解かずに因子をうまく扱えるのでそれを紹介する．

2 直積型クンマー曲面

基礎体 k は代数体とする．E_1, E_2 を k 上の楕円曲線とする．商曲面 $E_1 \times E_2/\{\pm 1\}$ の最小特異点解消を直積型クンマー曲面といい，$\mathrm{Km}(E_1 \times E_2)$ と書く．E_1, E_2 が 3 次多項式 f_1, f_2 により

$$E_1 : y_1^2 = f_1(x_1), \quad E_2 : y_2^2 = f_2(x_2)$$

で定義されるとき，

$$C_t : f_2(x_2) = t^2 f_1(x_1) \quad \left(t = \frac{y_2}{y_1}\right) \tag{1}$$

は $\mathrm{Km}(E_1 \times E_2)$ のアフィン特異モデルを与える．このとき，射

$$\mathrm{Km}(E_1 \times E_2) \to \mathbf{P}^1 : (x_1, x_2, t) \mapsto t$$

は $\mathrm{Km}(E_1 \times E_2)$ 上に猪瀬ペンシルと呼ばれる楕円曲線束を定める．これにより，C_t を $k(t)$ 上の 3 次曲線，すなわち楕円曲線と見なせる．従って，適切な変数変換により $k(t)$ 上の楕円曲線としてのワイエルシュトラス方程式

$$F : y^2 = x^3 - 3\alpha x + t^2 - 2\beta + \frac{1}{t^2}$$

に変形できる．ここで，$j_i = j(E_i)/1728$ とすると，$\alpha = \sqrt[3]{j_1 j_2}, \beta = \sqrt{(1-j_1)(1-j_2)}$ である．この $k(t)$ 上の楕円曲線 F に対し，以下が成り立つ．

定理 1 *([1, Theorem 1.2])* $j(E_1) \neq j_2(E_2)$, $h = \mathrm{rank}\,\mathrm{Hom}_{\bar{k}}(E_1, E_2)$ とする．$k(t)$ 上の楕円曲線 F のモーデル・ヴェイユ格子 $F(k(t))$ は

$$\mathrm{Hom}_{\bar{k}}(E_1, E_2)\langle 4\rangle \oplus A_2^*\langle 2\rangle^{\oplus 2}$$

に同型な指数 2 の部分格子を含む．ここで，A_2^* はルート格子 A_2 の双対格子で，$\langle n\rangle$ は格子のペアリングを n 倍することを表す．

3 次多項式 f_1 の根を $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ とし，f_2 の根を $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ とすると，各 $R_{ij} = (\alpha_i, \beta_j)$ は 3 次曲線 C_t の $k(t)$-有理点である．これら R_{ij} に対応する F の $k(t)$-有理点たちが生成する $F(k(t))$ の部分格子が $A_2^*\langle 2\rangle^{\oplus}$ に同型である．E_1 と E_2 が同種であるとき，$\mathrm{Hom}_{\bar{k}}(E_1, E_2)$ に同型な部分格子を生成する有理点は同種写像 $\varphi = (\varphi_x, \varphi_y) \in \mathrm{Hom}_{\bar{k}}(E_1, E_2)$ から定まる．これは $k(t)$ 上の方程式

$$f_2(\varphi_x(x_1)) = t^2 f_1(x_1)$$

の $\overline{k(t)}$ 上の解から定まる C_t の $\overline{k(t)}$-有理点全てを楕円曲線 F の演算で足し合わせて得られる．しかしながら，これを直接計算するのは一般には困難である．本講演では [2] で得られた，次数 3 の同種写像から定まる有理点を計算する方法を紹介する．

3 楕円曲線間の 3 次同種写像

楕円曲線間の次数 3 の同種写像を具体的に書き下そう．

定理 2 *([3, §3])* E_1 を k 上の楕円曲線とし，$G \subset E_1(\bar{k})$ をガロア群 $\mathrm{Gal}(\bar{k}/k)$ の作用で不変な位数 3 の部分群とする．このとき，楕円曲線 E_1 の方程式と部分群 G の生成元 P は以下のいずれかの形で表せる．

(i) $E_1 : y_1^2 = x_1^3 + d, \quad P = (0, \sqrt{d})$

(ii) $E_1 : y_1^2 = x_1^3 + a(x_1 - b)^2, \quad P = (0, b\sqrt{a})$

さらに，商 $E_2 = E_1/G$ の方程式と次数 3 の同種写像 $\varphi : E_1 \to E_2 : (x_1, y_1) \mapsto (x_2, y_2)$ は，それぞれ次のように書ける．

(i) $E_2 = E_1/G : y_2^2 = x_2^3 - 27d$

$$(x_2, y_2) = \left(\frac{y_1^2 + 3d}{x_1^2}, \frac{\left(x_1^3 - 8d\right) y_1}{x_1^3} \right)$$

(ii) $E_2 = E_1/G : y_2^2 = x_2^3 - 27a\left(x_2 - 4a + 27b\right)^2$

$$x_2 = \frac{9\left(2y_1^2 + 2ab^2 - x_1^3 - \frac{2}{3}ax_1^2\right)}{x_1^2},$$
$$y_2 = \frac{27y_1\left(-4abx_1 + 8ab^2 - x_1^3\right)}{x_1^3}$$

4　3 次同種写像から定まる有理点

E_1, E_2, φ を前節の通りとし,

$$\varphi : x_2 = \varphi_x(x_1), \quad y_2 = \varphi_y(x_1)y_1$$

とする．φ は奇数次なので $\varphi(\alpha_i) = \beta_i$ としてよい．$R_{11} = (\alpha_1, \beta_1)$ を F の零元として選ぶ．曲線 C_t と $x_2 = \varphi_x(x_1)$ の交点を考える．

$$f_2(x_2) = f_2\left(\varphi_x\left(x_1\right)\right) = \varphi_y\left(x_1\right)^2 f_1(x_1)$$

を方程式 (1) に代入して

$$\left(\varphi_y\left(x_1\right) - t\right)\left(\varphi_y\left(x_1\right) + t\right) f_1(x_1) = 0$$

を得る．3 次方程式 $\varphi_y(x_1) = t$ の $\overline{k(t)}$ での解を $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ とし,

$$Q_i = \left(\gamma_i, \varphi_x\left(\gamma_i\right)\right)$$

とする．各 Q_i は C_t の $\overline{k(t)}$-有理点である．$k(t)$ 上の楕円曲線 F 上の演算としての和により C_t 上の点

$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3$$

を定めると，Q は C_t の $k(t)$-有理点である．この Q を直接計算するのが困難なので，別の有理点を探す．$Q_4 = R_{22}, Q_5 = R_{33}$ とし，5 点 $Q_1, \ldots, Q_5$ を通る 2 次曲線を C とする．C は $k(t)$ 上の曲線であり，その方程式は 3 次方程式 $\varphi_y(x_1) = t$ の解 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ を計算することなく求めることができる．C_t は 3 次曲線なので，ベズーの定理から C_t と C は 6 点で交わる．すなわち，C_t 上の第 6 の有理点 Q_6 が得られる．$\mathrm{Km}(E_1 \times E_2)$ 上の因子類群上の和として

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 \sim 0$$

だから，楕円曲線 F の和としても

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 = O$$

である．$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3, Q_4, Q_5$ は C_t の $k(t)$-有理点なので，Q_6 も $k(t)$-有理点である．こうして得られた Q_6 に対応する楕円曲線 F の $k(t)$-有理点は定理 1 におけるモーデル・ヴェイユ格子 $F(k(t))$ の部分格子で $\mathrm{Hom}_{\bar{k}}(E_1, E_2)\langle 4 \rangle$ に同型なものを生成する有理点の一つである．

参考文献

[1] T. Shioda, Correspondence of elliptic curves and Mordell-Weil lattices of certain elliptic $K3$ surfaces, Algebraic Cycles and Motives, Vol. 2, Cambridge Univ. Press (2007), 319-–339.

[2] M. Kuwata and K. Utsumi, Mordell-Weil lattice of Inose's elliptic $K3$ surface arising from the product of 3-isogenous elliptic curves, J. Number Theory, Vol. 190 (2018), 333–351.

[3] J. Top, Descent by 3-isogeny and 3-rank of quadratic fields, Advances in Number Theory, Clarendon Press/Oxford University Press, (1993), 303-317.

円分関数体の相対類数の行列式公式にあらわれる行列式の値の大きさについて

青山 大輝 [1], 木村 巌 [2]
[1] 富山大学大学院理工学教育部修士課程，[2] 富山大学大学院理工学研究部（理学）
e-mail : iwao@sci.u-toyama.ac.jp

1 概要

p を素数とする．p 分体 $K_p := \mathbb{Q}(\zeta_p)$ の相対類数 h_p^- にはいくつかの行列式公式が知られている．特に，Hazama [1]（Theorem. 3.4）は，次数が $(p-1)/2$ の，±1 成分の正方行列（以下単に ±1 行列という）の行列式掛ける簡単な因子が h_p^- に等しいことを主張する．谷口哲也氏（金沢工業大学）は，このような行列式公式にあらわれる ±1 行列の行列式の絶対値が，同じ次数のランダムな ±1 行列のなかで特異に巨大であることを指摘した．

本研究では，円分体 K_p の正標数関数体類似である，円分関数体 $K_m := k(\Lambda_m)$ とその整数環の相対類数 $h_m^-, \tilde{h}_m^-$（定義は後述）について同様の考察を行った．これらの相対類数についても，±1 行列（もしくは $0/1$ 行列）による行列式公式が知られている．数値実験の結果，K_m の標数が小さい場合は，円分体の場合と同様に，行列式公式にあらわれる ±1 行列は，同じ次数の ±1 行列の中で特異に巨大な行列式をもつことが観察された．一方，標数が大きくなると，目立って大きくはないことが観察された．以上の数値的な観察に対して，円分関数体の相対類数の大きさに関する評価を用いて 1 つの説明を与える．

2 定義と基礎となる結果

$\mathbb{F}$ を標数 p の q 元体とする．$A = \mathbb{F}[T]$ を $\mathbb{F}$ 上の，T を変数とする一変数多項式環，$k = \mathbb{F}(T)$ を A の商体，つまり $\mathbb{F}$ 上の一変数有理関数体とする．ρ を Carlitz 加群，すなわち，$\rho\colon A \ni T \mapsto \phi + \mu \in \mathrm{End}\,\mathbb{G}_a$ で定まる環準同形写像とする．但し，右辺は加法群 $\mathbb{G}_a$ の自己準同形環で，$\phi(x) = x^q$, $\mu(x) = Tx$ はそれぞれ，q 乗 Frobenius 自己準同形，T 倍自己準同形である．任意の $m(T) \in A$ に対して，$\rho(m)(x)$ は A 係数の分離的な多項式である．k の分離閉包を 1 つ固定し，その中で Λ_m を $\rho(m)(z) = 0$ を満たす元全体の集合とする．$K_m := k(\Lambda_m)$ は k 上の有限次 Galois 拡大であり，K_m/k の Galois 群は $(A/mA)^\times$ と同型であり，K_m/k は m の外で不分岐であるなど，m 分体 $\mathbb{Q}(\zeta_m)$ と極めて類似した対象であることが知られている．K_m を m-th **円分関数体**という．円分体の最大実部分体に相当するのは，$(A/mA)^\times$ の，非零定数多項式が代表する元のなす部分群に Galois 理論で対応する体で，K_m の最大実部分体といって K_m^+ と表す．

K_m の次数 0 の因子類群の位数を h_m と書く．同様に，K_m^+ の次数 0 の 因子類群の位数を h_m^+ とする．h_m^+ は h_m を割り切ることが知られており，その商を K_m の**相対類数**と呼び h_m^- と表す：$h_m = h_m^+ h_m^-$.

K_m の整数環，つまり，K_m における A の整閉包を O_m と書くことにする．O_m は Dedekind 整域であり，そのイデアル類群（Picard 群）の位数を O_m の類数と呼び $\tilde{h}_m$ と書く．K_m^+ の整数環 O_m^+ も A の K_m^+ での整閉包として同様に定義され，その類数を $\tilde{h}_m^+$ と書く．次数 0 の因子類群の位数と同様の整除性がなりたち，O_m の**相対類数** $\tilde{h}_m^-$ が定義される：$\tilde{h}_m = \tilde{h}_m^+ \tilde{h}_m^-$.

Jung and Ahn [2] により，$m(T) = p(T)^n$, $p(T) \in A$ は既約モニック多項式，の場合の K_m の相対類数（h_m^- と $\tilde{h}_m^-$ 双方）の行列式公式が得られている．$\mathbb{M}_m$ を，A の非零元で次数が $\deg m(T)$ より小さく，$m(T)$ と互いに素な元とする．$\mathbb{M}_m^+ := \{\, a(T) \in \mathbb{M}_m \mid a(T) \text{ is monic} \,\}$, $\mathbb{M}_m^- := \mathbb{M}_m \setminus \mathbb{M}_m^+$ と定義する．

$m \in A$ を非零元とする．$a \in A$ に対して，$\overline{a} \in \mathbb{M}_m$ を $a \equiv \overline{a} \pmod{m}$ なる唯一の元，$\mathrm{sgn}(a)$ を a の最高次係数，$\mathrm{sgn}_m(a) := \mathrm{sgn}(\overline{a})$ とする．

$a, b \in \mathbb{M}_m^-$ に対して，$\langle a, b \rangle$ を次のように定義する：$\mathrm{sgn}_m(ab) = 1$ なら $\langle a, b \rangle = 1$, そうでないなら 0. このとき，Jung-Ahn の命題 2.6 が，O_m の相対類数の**行列式公式**である：

命題 1 (Jung-Ahn, Proposition 2.6)**.** $p(T) \in A$ が既約モニック多項式，$m(T) = p(T)^n$ と仮定する．次が成立する：$\tilde{h}_m^- = |\det(\langle a, b \rangle)_{a,b \in \mathbb{M}_m^-}|$, ここで，右辺の行列式の中の行列のサイズ $r = \#\mathbb{M}_m^-$ は次で与えられる：$r = |p|^{n-1}(|p|-1)(1-$

$1/(q-1))$，ここで $|p| = q^{\deg p}$ である．
Hadamard の不等式から，$\tilde{h}^-_m \le r^{\frac{r}{2}}$.

この主張の行列式は 0, 1 を成分とするものだが，簡単な変形で，次数が 1 大きい ± 1 行列の行列式に書き換えることができる．

命題 2. $p(T) \in A$ を既約モニック多項式，$m(T) = p(T)^n$ とする．r は命題 1 と同じで，次が成立する：$A' = (a'_{A,B})_{A,B \in \mathbb{M}^-_m}$ は $\mathrm{sgn}_m(AB) = 1$ のとき $a'_{A,B} = -1$, そうでないとき 1 と定義する．$(-2)^r \tilde{h}^-_m = \det(A'')$, ただし，$A''$ は，$r+1$ 次 ± 1 対称行列で，1 行と 1 列はすべて 1, それ以外は A' である．

補題 3. $p(T) \in A$ が既約多項式，$m(T) = p(T)^n$ のとき，$h^-_m = (q-1)^s \tilde{h}^-_m$.　(Yin [4], Lemma 3, s も同論文参照)．

3　数値計算と観察

命題 1 の式は容易に計算できる．本研究では Sagemath[1]を用いた．一方，pari[2] を用いた C プログラムにより，ランダムな 0/1 対称行列を，幾つかのサイズで 10,000 サンプル生成し，それらの行列式を計算した．このデータから，桁数のヒストグラムを matplotlib [3]で作成した．

例えば，$p = 11$, $p(T)$ が既約多項式 $p(T) = T^2 + 7T + 2$ のとき，$\tilde{h}^-_p$ は 2 進で 150 桁の数である．一方，命題 1 の行列式は，108 次 0/1 対称行列の行列式になる．108 次の 0/1 対称行列の行列式 10,000 サンプルの 2 進桁数のヒストグラムが図 1 である．命題 1 の行列式はそれほど大きくないことが図から読み取れる．

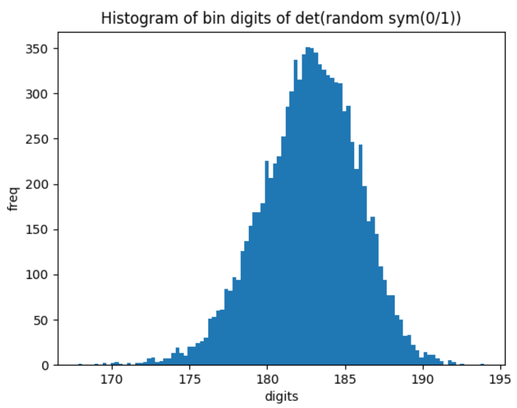


図 1. 108 次のランダム 0/1 対称行列の行列式の桁数のヒストグラム

[1]http://www.sagemath.org/
[2]http://pari.math.u-bordeaux.fr/
[3]https://matplotlib.org/

4　考察と結論

簡単のため，$m(T) = p(T) \in A$ が既約多項式の場合を考える．このとき，関数体 K_p に対する Riemann 予想（Weil の結果）から，相対類数 h^-_p には次の明示式が知られている（Rosen [3], Theorem 3）：$h^-_p = \prod_{i=1}^{2g-2g^+}(1-\pi_i)$, 但し $\pi_i \in \mathbb{C}$, $|\pi_i| = \sqrt{q}$. また g, g^+ はそれぞれ，K_p, K_p^+ の種数である．$g^- = g - g^+$ とする．h^-_p の明示式と補題 3 から次の評価が得られる：

$$\frac{(\sqrt{q}-1)^{2g^-}}{(q-1)^s} \le \tilde{h}^-_p \le \frac{(1+\sqrt{q})^{2g^-}}{(q-1)^s}. \qquad (1)$$

種数は Riemann-Hurwitz の公式で容易に計算でき，$2g^- = (d-1)(q^d-1)(q-2)/(q-1)$. ここから得られる $\tilde{h}^-_p$ の評価と，ランダムな 0/1 対称行列についての Hadamard の不等式の評価の比較から，q が大きくなっていくとき，$\tilde{h}^-_p$ がランダムな 0/1 対称行列の行列式に対してそれほど大きくならないことが読み取れる．

謝辞　円分関数体の相対類数の行列式公式を用いた研究について，幾つか重要なご示唆を頂いた中島匠一氏（学習院大学）に御礼申し上げます．また，谷口哲也氏（金沢工業大学）には，本研究のきっかけとなった，円分体の相対類数の行列式表示を用いた研究について様々なご教示を賜りました．御礼申し上げます．

参考文献

[1] Fumio Hazama, *Demjanenko matrix, class number, and Hodge group*, J. Number Theory **34** (1990), no. 2, 174–177. MR 1042490

[2] Hwanyup Jung and Jaehyun Ahn, *On the relative class number of cyclotomic function fields*, Acta Arith. **107** (2003), no. 1, 91–101. MR 1956987

[3] Michael Rosen, *A note on the relative class number in function fields*, Proc. Amer. Math. Soc. **125** (1997), no. 5, 1299–1303. MR 1371139

[4] Linsheng Yin, *Stickelberger ideals and relative class numbers in function fields*, J. Number Theory **81** (2000), no. 1, 162–169. MR 1743498

正則連分数展開に基づく短い周期の Tausworthe 発生法

原瀬 晋 [1]
[1] 立命館大学理工学部
e-mail : harase@fc.ritsumei.ac.jp

1 はじめに

多変数関数 f と確率分布 π に対して，マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法を用いた期待値計算 $\mathrm{E}_\pi[f(X)]$ を考える．乱数を用いたモンテカルロ法は収束が非常に遅い．そこで，準乱数と呼ばれる高い一様性を有する点列に置き換えて高速化を図る準モンテカルロ法を適用したい．しかるに，通常の準乱数は，MCMC 法にそのまま適用することが出来ない．近年，Owen ら [1] により，CUD 列と呼ばれる点列を用いると，MCMC 法による期待値計算に適用できること (一致性) が理論的に示された．ここで，CUD 列の定義は構成的でない．そのため，短い周期の擬似乱数発生法を用意し，一周期使い切った際に現れる格子構造を利用して，CUD 列の近似点集合として実装する方法が提案されている [2]．本講演では，Tausworthe 発生法に対して，手塚–伏見 [3] に基づき，パラメータとなる二元体上の多項式の組 $(p(x), q(x))$ を正則連分数展開の観点から最適化し，一様性の高い点集合を得る方法を紹介する．また，MCMC 法に適用し，既存の方法 [2] との比較を行う．

2 ディスクレパンシーと CUD 列

まず，s 次元単位立方体 $I^s = [0,1)^s$ 内に置かれた N 個の点 $P = \{\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_{N-1}\} \subset I^s$ の配置が，理想的な一様分布からどの程度ずれているかを示す一つの尺度として，s 次元ディスクレパンシー (discrepancy)D_N^{*s} を定義する．

定義 1 (s 次元ディスクレパンシー) 上記の記法の下，s 次元ディスクレパンシー D_n^{*s} を

$$D_N^s(P) := \sup_J \left| \frac{\nu(J;N)}{N} - \mathrm{vol}(J) \right|$$

と定義する．ここで，上限 sup は $J = [0, t_1) \times \cdots \times [0, t_s) \subset I^s$ という形のすべての直方体にわたってとるものとする．また，$\nu(J;N)$ は J に含まれる P の点の個数を表わし，$\mathrm{vol}(J) = t_1 \cdots t_s$ は J の体積である．

$D_N^s(P)$ が 0 に近いほど，一様に分布していると考えられる．一方，CUD 列とは，次の性質を満たす 1 次元無限点列 $\{u_i\}_{i=0}^\infty \subset [0,1)$ である．

定義 2 (CUD 列) 1 次元無限点列 $u_0, u_1, u_2, \cdots \in [0,1)$ について，すべての次元 $s \geq 1$ に対して，オーバーラップした s 個の組のディスクレパンシーが

$$\lim_{N\to\infty} D_N^{*s}\left((u_0, \ldots, u_{s-1}), (u_1, \ldots, u_s), \ldots, (u_{N-1}, \ldots, u_{N+s-2})\right) = 0$$

を満たすとき，$\{u_i\}_{i=0}^\infty$ を *CUD* 列 *(completely uniformly distributed sequence)* という．

特に，準モンテカルロ法の観点から，なるべく速く 0 に収束することが望ましい．また，定義 2 の必要十分条件として，すべての次元 $s \geq 1$ に対して，オーバーラップしない s 個の組のディスクレパンシーが

$$\lim_{N\to\infty} D_N^{*s}\left((u_0, \ldots, u_{s-1}), (u_s, \ldots, u_{2s-1}), \ldots, (u_{s(N-1)}, \ldots, u_{Ns-1})\right) = 0$$

を満たすことが知られており，MCMC 法に対して，この順番で点列を用いることにする．

3 Tausworthe 発生法

計算機上で，CUD 列をそのまま発生させることは難しい．そこで，短い周期の Tausworthe 発生法 (LFSR 発生法) を用いて，CUD 列を近似する点列を発生させることにする．Tausworthe 発生法は，二元体 $\mathbb{F}_2 := \{0,1\}$ 上の多項式演算の乗算合同法として定式化される:

$$\begin{aligned} X_i(x) &= q(x)X_{i-1}(x) \mod p(x) \\ X_i(x)/p(x) &= a_{i\sigma}x^{-1} + a_{i\sigma+1}x^{-2} + a_{i\sigma+2}x^{-3} \\ &\quad + \cdots \in \mathbb{F}_2((x^{-1})). \end{aligned}$$

多項式 $p(x), q(x) \in \mathbb{F}_2[x]$ は法と乗数を表すパラメータであり，$p(x)$ は m 次の原始多項式，$0 < \sigma < 2^m - 1$ で $\gcd(\sigma, 2^m - 1) = 1$ を満たす自然数 σ について $q(x) = x^\sigma \mod p(x)$ とする．$u_i := \sum_{j=0}^{w} a_{i\sigma+j} \cdot 2^{-j-1} \in [0,1)$ と変換すると，$u_0, u_1, u_2, \ldots \in [0,1)$ は最大周期

2^m-1 を持つ点列となる (w は計算機のワードサイズ)．$m=10,\dots,32$ 程度にとり，この出力列を CUD 列の近似点集合として採用する．

定義 2 にすり合わせるように，$N=2^m$ と固定し，周期 $N-1$ の点列 $u_0,u_1,\dots,u_{N-2}$, $u_{N-1}=u_0,\dots$ について，s 次元の組の一周期分

$$\mathbf{u}_i=(u_i,\dots,u_{i+s-1}),\quad (i=0,1,\dots,N-2)$$

に原点 $\{\mathbf{0}\}$ を加えた点集合 $P=\{\mathbf{0}\}\cup\{\mathbf{u}_i\}_{i=0}^{N-2}$ を考える (要素数 $|P|=N$)．P は格子構造

$$P=\left\{\nu_w\left(\frac{h(x)}{p(x)}(1,q(x),q(x)^2,\dots,q(x)^{s-1})\right)\ \middle|\ \deg(h(x))<m\right\}$$

をもつことに注意する．(関数 $\nu_w:\mathbb{F}_2((x^{-1}))\to[0,1)$, $\sum_{j=j_0}^{\infty}k_jx^{-j-1}\mapsto\sum_{j=\max\{0,j_0\}}^{w-1}k_j\cdot 2^{-j-1}$ は各座標に適用するものとする．) 各次元 $s=1,2,3,\dots$ に対して，$D_N^{*s}(P)$ が小さい，すなわち，高い一様性をもつ多項式の組 $(p(x),q(x))$ を上手く決定することが問題となる．

4 t-値と正則連分数展開

一般に，$D_N^{*s}(P)$ の計算は NP 困難である．一方，Tausworthe 法の点集合 P については，次に定義する t-値と呼ばれる一様性を表す非負整数 t が計算できて，$D_N^{*s}(P)=O(2^t(\log N)^{s-1}/N)$ となる ($N=2^m$)．よって，t-値が小さいほど一様性が高く，t-値が 0 のとき，最適値となる．

定義 3 (t-値) $s\geq 1$, t を $0\leq t\leq m$ を満たす整数とする．$N=2^m$ 個からなる点集合 $P\subset I^s$ が，体積が 2^{t-m} となるすべての 2 進部分区間

$$E=\prod_{j=1}^{s}\left[\frac{l_j}{2^{d_j}},\frac{l_j+1}{2^{d_j}}\right)\in I^s$$

にちょうど 2^t 個ずつ含まれるときに，P は基数 2 の (t,m,s)-*net* であるという．ただし，各 $1\leq j\leq s$ に対して，d_j,l_j は $d_j\geq 0$, $0\leq l_j<2^{d_j}$ となる整数とする．この性質を満たす最小の t を t-値という．

2 次元の場合，Tausworthe 法の点集合 P の t-値は $q(x)/p(x)$ の正則連分数展開と関連している．

定理 4 ([3]) 次数 m の既約多項式 $p(x)\in\mathbb{F}_2[x]$ に対して，$q(x)\in\mathbb{F}_2[x]$ を $\deg q(x)<m$ とする．このとき，2 次元点集合

$$P=\left\{\nu_w\left(\frac{h(x)}{p(x)}(1,q(x))\right)\middle|\deg(h(x))<m\right\}$$

は，$q(x)/p(x)$ の正則連分数展開の部分商がすべて次数 1 のとき，そのときに限り，$(0,m,2)$-*net*，すなわち，t-値が 0 となる．

では，与えられた $p(x)$ に対して，上記の $q(x)$ はいくつ存在するか?次の結果が知られている．

定理 5 (Mesirov–Sweet) m 次の既約多項式 $p(x)\in\mathbb{F}_2[x]$ に対して，$q(x)\in\mathbb{F}_2[x]$ を $\deg(q(x))<m$ とする．各 $p(x)$ に対して，$q(x)/p(x)$ の正則連分数展開の部分商の次数がすべて 1 となる $q(x)$ がちょうど 2 個存在する．

この 2 つ多項式は，$q(x)$ と $q^{-1}(x) \mod p(x)$ の関係にあり，後者は Tausworthe 法を逆向きに走らせたものに対応する．よって，s 次元点集合 P は同じ格子となり，格子のパラメータとしては 1 個である．

本講演では，手塚–伏見 [3] の方法に基づき，正則連分数展開の観点から 2 次元の t-値が 0 となる $(p(x),q(x))$ を数学的に絞っておき，3 次元以上でなるべく小さい t-値をもつ $(p(x),q(x))$ を全数探索する．また，MCMC 法に適用し，先行研究の均等分布性により最適化された Tausworthe 法 [2] との比較を述べる．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP18K18016, JP26730015, JP26310211, JP15K13460 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] S. Chen, J. Dick and A. B. Owen, "Consistency of Markov chain quasi-Monte Carlo on continuous state spaces", Ann. Statist., Volume 39, Number 2 (2011), 673–701.

[2] S. Chen, M. Matsumoto, T. Nishimura and A. B. Owen, "New inputs and methods for Markov chain quasi-Monte Carlo", In: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2010, Springer Proc. Math. Stat., vol. 23, 313–327, Springer 2012.

[3] S. Tezuka and M. Fushimi, "Calculation of Fibonacci polynomials for GFSR sequences with low discrepancies", Math. Comp., 60 (1993), no. 202, 763–770.

有限要素解の局所事後誤差評価と応用について

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 博士前期課程 2 年
[2] 新潟大学大学院 自然科学研究科
e-mail : f18a055k@mail.cc.niigata-u.ac.jp
e-mail : xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 概要

本研究では，Poisson 方程式の境界値問題に対して，Hypercircle 法による有限要素解の局所事後誤差評価手法を検討する．具体的に，以下の Poisson 方程式の境界値問題を考える．

$$-\Delta u = f \text{ in } \Omega,\ \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = g_N \text{ on } \Gamma_N,\ u = g_D \text{ on } \Gamma_D. \tag{1}$$

ここで，Ω は $\mathbb{R}^2$ の多角形領域または，$\mathbb{R}^3$ の多面体領域である．特に Ω は凸領域に限らない．また，Γ_N, Γ_D は $\Gamma_N \cup \Gamma_D = \partial\Omega$ を満たす互いに素な境界 $\partial\Omega$ の部分集合であり，$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}$ は $\partial\Omega$ 上の外向きの単位法線方向微分を表す．上の問題の解 u と有限要素解 u_h に対して，関心のある領域 $S \subset \Omega$ における $\|\nabla u - \nabla u_h\|_S$ の誤差評価について検討する．

有限要素解の大域的な事後誤差評価については既に多くの研究結果があり，近年，Hypercircle 法を用いた有限要素解の誤差の具体的な値または誤差の上界評価 (定量的な誤差評価) を提供する手法が報告される．特に，劉-大石の論文 [2] では菊地の事後誤差評価 [1] の拡張として事前誤差評価を提案したことがあり，この評価は本研究の提案手法に重要な役割を果たす．

有限要素解の局所的な誤差評価については，誤差の収束オーダーなどの定性的な誤差評価が考えられたが，定量的な有限要素解の局所誤差評価は，著者らが知る限りでは無い．本研究ではHypercircle法の拡張として，関心のある領域の上で定義された重み関数を利用して，有限要素解の H^1 ノルムでの定量的な局所事後誤差評価に関する新しい手法を提案した．提案手法の特徴として，L 字型領域などの非凸な領域における方程式の厳密解が H^2 正則性を持ってない場合でも，関心のある領域におけるシャープな誤差評価が可能であることが挙げられる．また，本講演では当該手法の応用例として，Laplace 方程式の有限要素解に対して，最大値ノルムによる定量的な局所誤差評価手法を検討し，数値例を紹介する．

2 主結果

まず，Hypercircle 法による誤差評価を行う上で重要な Prager-Synge の定理を紹介する．

定理 1 (Prager-Synge の定理 [3])**.** 関数 u を式 (1) の厳密解とし，ベクトル値関数 $\mathbf{p} \in H(\mathrm{div}; \Omega)$ は以下を満たすとする．

$$\mathrm{div}\ \mathbf{p} + f = 0,\ \mathbf{p} \cdot n = g_N \text{ on } \Gamma_N.$$

このとき，任意の $v \in V_0$ に対して，Prager-Synge の定理に現れる以下の Hypercircle 式が成り立つ．

$$\|\nabla u - \nabla v\|_\Omega^2 + \|\nabla u - \mathbf{p}\|_\Omega^2 = \|\nabla v - \mathbf{p}\|_\Omega^2. \tag{2}$$

ここで，f の近似 f_h に対して $\mathrm{div}\ \mathbf{p}_h + f_h = 0$ を厳密に満たす $\mathbf{p}_h$ を構成することが，提案手法の特徴の一つである．

局所誤差評価のために関心のある領域 S に対して，S を囲う帯状領域を $B_S := \{x \in \Omega \setminus \overline{S};\ \mathrm{dist}(x, \partial S) < \varepsilon\}$ とし (図 1 参照)，さらに部分領域 $\Omega' = S \cup B_S$ を定義する．

定義 2 (重み付き L^2 ノルム)**.** 非負の重み関数 $\alpha \in W^{1,\infty}(\Omega)$ は $\overline{\Omega'}$ を台 (Support) とする区分的な多項式関数で，以下を満たす．

$$\alpha(x) = \begin{cases} 1,\ x \in S \\ 0,\ x \in (\Omega')^c \end{cases}$$
$$0 \le \alpha(x) \le 1,\ \forall x \in \overline{\Omega}.$$

また，重み付き L^2 ノルム以下で導入する．

$$||f||_\alpha := ||f\sqrt{\alpha}||_\Omega$$

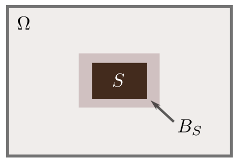


図 1. 部分領域と全領域の関係.

上で定義した重み付き L^2 ノルムに関して，Hypercircle 法を利用することで有限要素解の局所事後誤差評価を得る．

定理 3 (有限要素解の局所事後誤差評価). 与えられた $f \in L^2(\Omega)$ に対して，u と u_h を，それぞれ (1) の解，有限要素解とし，$\mathbf{p}_h \in H(\mathrm{div};\Omega)$ は以下の条件を満たすベクトル値関数とする．

$$\mathrm{div}\ \mathbf{p}_h + f_h = 0,\ \mathbf{p}_h \cdot n = g_N \text{ on } \Gamma_N.$$

このとき，以下の誤差評価が得られる．

$$\|\nabla u - \nabla u_h\|_S \le C_0 h \|f - f_h\|_\Omega + \sqrt{(\epsilon_1)^2 + (\epsilon_2)^2 + (\epsilon_3)^2}. \quad (3)$$

ただし，

$$(\epsilon_1)^2 := 2C_pC_0h\|\nabla\alpha\|_{\infty,\Omega} \cdot \|f - f_h\|_\Omega \cdot \|\nabla u_h - \mathbf{p}_h\|_\Omega,$$
$$(\epsilon_2)^2 := 2C(h)\|\nabla\alpha\|_{\infty,\Omega} \cdot \|\nabla u_h - \mathbf{p}_h\|_\Omega^2,$$
$$(\epsilon_3)^2 := \|\nabla u_h - \mathbf{p}_h\|_\alpha^2.$$

ここで，$C(h), C_0, C_p$ は計算可能な定数である．

実際の計算において，$\mathbf{p}_h$ は混合有限要素法で得られる ∇u の近似である．領域全体での誤差評価も局所誤差評価の上界を与える一方で，本評価ではメッシュサイズを十分小さくしたときに，局所誤差に関わる項である ϵ_3 が誤差評価式 (3) を支配して大域的な誤差評価式よりもシャープな評価を与えることが特徴である．

3 数値実験

以下の斉次 Dirichlet 問題に対して数値実験を行った．

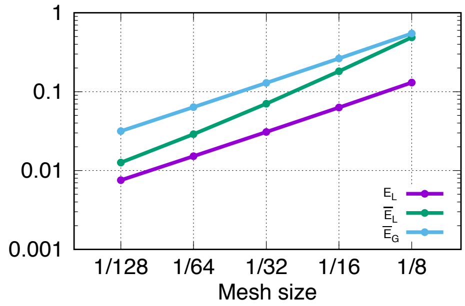
$$-\Delta u = 2\pi \sin(\pi x)\sin(\pi y) \text{ in } \Omega,\ u = 0 \text{ on } \partial\Omega.$$

ただし，領域 Ω は単位正方形 $(0,1)^2$ である．数値実験を行うにあたり，一様メッシュを用いて $u_h, \mathbf{p}_h$ を計算し，部分領域 $S := (0.375, 0.625)^2$，帯状領域 B_S の幅を 0.3 とした．また，以下の記号を導入する．

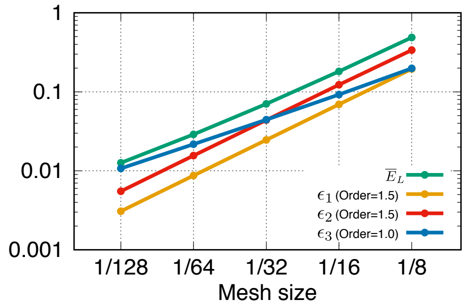
$$E_L := \|\nabla u - \nabla u_h\|_S,$$
$$\overline{E}_L := C_0h\|f - f_h\|_\Omega + \sqrt{(\epsilon_1)^2 + (\epsilon_2)^2 + (\epsilon_3)^2},$$
$$\overline{E}_G := \|\nabla u_h - \mathbf{p}_h\|_\Omega + C_0h\|f - f_h\|_\Omega.$$

ここで，E_L は評価の目標となる局所誤差を表し，$\overline{E}_L$ は本研究で提案する新しい局所誤差評価式を表す．また，$\overline{E}_G$ は文献 [2] で提案された領域全体での事後誤差評価式を表す．この例では，厳密解を利用して $\overline{E}_L$ と E_L の比較を行うことができる．数値実験の結果を図 2 に示す．

図 2-(a) からメッシュサイズ h が小さいとき，$\overline{E}_L$ は E_G と比較して良い E_L の上界を与えて



(a) 誤差評価手法の比較.



(b) 誤差評価式 (3) の各要素の比較.

図 2. 計算結果

いることがわかり，図 2-(b) から $h \le 1/32$ のときに誤差評価式 (3) の ϵ_3 が支配的となって，シャープな評価を与えることも推測できる．

本稿では正方形領域の場合の計算結果について示したが，L 字型領域の場合の結果，3 次元領域で定義された Laplace 方程式の混合境界値問題に対する数値例と，最大値ノルムによる定量的な局所誤差評価手法については発表時に紹介する予定である．

参考文献

[1] Kikuchi, F. and Saito, H., Remarks on *a posteriori* error estimation for finite element solutions, J. Comput. Appl. Mech., **199**(2007), 329–336.

[2] Liu, X. and Oishi, S., Verified eigenvalue evaluation for the Laplacian over polygonal domains of arbitrary shape, SIAM J. Numer. Anal., **51**(2013), 635–752.

[3] Prager, W. and Synge, J. L., Approximations in elasticity based on the concept of function space, Quart. Appl Math, **5**(1947), 1–21.

[4] 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), **45**(1994), 23–32.

Error analysis of Crouzeix-Raviart finite element method without the shape regularity condition

Hiroki Ishizak[1], Takuya Tsuchiya[2]
[1]Ehime Univ. [2]Ehime Univ.
e-mail : h.ishizaka005@gmail.com, tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

1 Introduction

In this talk, we present an error analysis of piecewise linear nonconforming Crouzeix–Raviart finite element method (CR FEM) for the Poisson problem in 3dim without the shape regularity condition.

Let $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ be a convex bounded polyhedral domain. We consider the Poisson problem as follows: Find $p : \Omega \to \mathbb{R}$ such that

$$-\Delta p = f \quad \text{in } \Omega, \quad p = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \ (1)$$

where $f \in L^2(\Omega)$ is a given function. The CR FEM for the Poisson equation is to find $p_h^{CR} \in CR_{h0}^1$ such that

$$(\nabla_h p_h^{CR}, \nabla_h \varphi_h) = (f, \varphi_h) \ \forall \varphi_h \in CR_{h0}^1, \ (2)$$

where $(.,.)$ is the L^2-inner product, CR_{h0}^1 is the first order CR finite element space described later and ∇_h denotes the broken (piecewise) gradient. Here, we only use structural simplicial meshes $\mathbb{T}_h$ of $\overline{\Omega}$, made up closed 3-simplices, which does not have hanging nodes, with $h := \max_{T \in \mathbb{T}_h} h_T$ and h_T denotes the diameter of a mesh element T. First, we show that CR FEM is equivalent to the lowest order Raviart–Thomas finite element method (RT FEM). Next, using the Babuška–Aziz technique [1], we present error estimates of RT interpolation. Since RT FEM is confirming, a Céa type lemma is valid and error estimates of RT FEM are obtained from that of RT interpolation. Using the obtained equivalence of CR and RT FEMs, we finally present the targeted error estimates of CR FEM. For the two dimensional case, [2], which is the previous research, provides error analysis of this problem. Also, in [3]. one can find error analysis of Lagrange interpolation without the shape-regular condition for the mesh in three-dimensional case. We again emphasise that we do not impose the shape-regular condition for the mesh partition.

2 Finite element spaces and the L^2-projection

Let $\mathbb{T}_h$ be a regular mesh of the domain Ω and $T \in \mathbb{T}_h$. Let $\mathcal{P}^k(T)$ be the space of polynomials of degree at most k in $T \in \mathbb{T}_h$. Furthermore, let $\mathcal{F}_h^i$ be the set of interior faces and $\mathcal{F}_h^\partial$ the set of the faces on the boundary $\partial\Omega$. We set $\mathcal{F}_h := \mathcal{F}_h^i \cup \mathcal{F}_h^\partial$.

We define the global Raviart-Thomas finite element space by

$$RT_h^0 := \{v_h \in L^2(\Omega)^3; v_h|_T \in RT^0(T), \\ \forall T \in \mathbb{T}_h, \ [[v_h \cdot n_F]]_F = 0, \ \forall F \in \mathcal{F}_h^i\},$$

where $[[v_h \cdot n_F]]_F$ denotes the jump of the normal component of v_h across the interface F and $RT^0(T) := \{v; \ v(x) = p(x) + xq(x), p \in \mathcal{P}^0(T)^3, \ q \in \mathcal{P}^0(T)\}$. The first order CR finite element space is defined by

$$CR_{h0}^1 := \{\varphi_h \in L^2(\Omega); \varphi_h|_T \in \mathcal{P}^1(T) \ \forall T \in \mathbb{T}_h, \\ \int_F [[\varphi_h]]_F ds = 0 \ \forall F \in \mathcal{F}_h\}.$$

Here, $[[\varphi_h]]_F$ denotes the jump of φ_h across the face F. We also define the standard piecewise constant space by

$$M_h^0 := \left\{q_h \in L^2(\Omega); q_h|_T \in \mathcal{P}^0(T) \ \forall T \in \mathbb{T}_h\right\}.$$

Further, we define the local L^2-projection Π_T^0 from $L^2(T)$ into the space $\mathcal{P}^0(T)$ by $\forall p \in L^2(T)$, $\int_T (\Pi_T^0 p - p) dx = 0$, and the global L^2-projection Π_h^0 to the space M_h^0 by $\forall p \in L^2(\Omega)$, $(\Pi_h^0 p)|_T = \Pi_T^0(p|_T), \quad \forall T \in \mathbb{T}_h$.

3 Main results

The main result of this talk is to give error estimates without the shape regularity assumption on triangulations, $\mathbb{T}_h$ for the piecewise CR element approximation of the Poisson problem, that is,

Theorem. *Assume that $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ is convex. Let $p \in H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ be the solution of (1) and $p_h^{CR} \in CR_{h0}^1$ the solution of the CR problem (2). Then, there exists a constant $c > 0$ independent of p, h, R and the geometric properties of $\mathbb{T}_h$ such that*

$$\left(\sum_{T \in \mathbb{T}_h} \|\nabla p - \nabla p_h^{CR}\|_{0,2,T}^2 \right)^{1/2} \leq c(R+h)\|f\|,$$

where R is the projected circumradius defined in [3].

In order to show this theorem, we first present error estimate for the first order RT finite element approximation of the Poisson problem. In the proof, the Babuška and Aziz technique [1] is used. Then, we consider the RT finite element problem such as: Find $(\bar{u}_h^{RT}, \bar{p}_h^{RT}) \in RT_h^0 \times M_h^0$ such that

$$(\bar{u}_h^{RT}, v_h) + (\operatorname{div} v_h, \bar{p}_h^{RT}) = 0, \ \forall v_h \in RT_h^0, \quad (3a)$$
$$(\operatorname{div} \bar{u}_h^{RT}, q_h) = -(\Pi_h^0 f, q_h), \ \forall q_h \in M_h^0, \quad (3b)$$

and the CR finite element problem: Find $\bar{p}_h^{CR} \in CR_{h0}^1$ such that

$$(\nabla_h p_h^{CR}, \nabla_h \varphi_h) = (\Pi_h^0 f, \varphi_h), \ \forall \varphi_h \in CR_{h0}^1. \quad (4)$$

We secondly show that the CR problem (4) is equivalent to the RT problem (3). In two-dimensional case, [4] is the pioneer in research in this direction. Furthermore, Marini introduced an inexpensive method, [5]. See also [6]. Here, we extend this relationship to three dimensional case. Recently, in [7], it is proved that the enriched piecewise linear CR finite element method is identical to the first order RT finite element method for the Poisson problem in any dimension. Using this, we can have the relationshios, for any $T \in \mathbb{T}_h$,

$$\bar{u}_h^{RT}|_T = \nabla \bar{p}_h^{CR} - \frac{1}{3}\Pi_T^0 f (x - x_T),$$
$$\bar{p}_h^{RT}|_T = \Pi_T^0 \bar{p}_h^{CR} + \frac{1}{72}\Pi_T^0 f \sum_{i=1}^{4} |x_i - x_T|^2,$$

where x_i $(i = 1,2,3,4)$ are vertices of T and x_T is the barycentre of T such that $x_T := \frac{1}{4}\sum_{i=1}^4 x_i$.

Thus, it is possible to obtain the target estimates (Theorem) with help of this and the error estimate for the first order RT element approximation. We again emphasise that we do not impose the shape-regular condition for the mesh partition.

References

[1] I. Babuška, A.K. Aziz, On the angle condition in the finite element method, SIAM J. Numer. Anal. 13, pp. 214-226 (1976).

[2] K. Kobayashi, T. Tsuchiya, Error analysis of Crouzeix-Raviart and Raviart-Thomas finite element methods, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 35, (2018) pp. 1191-1211.

[3] K. Kobayashi, T. Tsuchiya, Error Analysis of Lagrange Interpolation on Tetrahedrons, (2018). https://arxiv.org/abs/1606.03918

[4] D.N. Arnord, F. Brezzi, Mixed and nonconforming finite element methods : implementation, postprocessing and error estimates, RAIRO 19. No. 1 (1985), pp. 7-32.

[5] L. D. Marini, An inexpensive method for the evaluation of the solution of the lowest order Raviart-Thomas mixed method, SIAM J. Numer. Anal. 22, (1985) pp. 493-496.

[6] X. Liu, F. Kikuchi, Estimation of error constants appearing in non-conforming linear triangular finite element, Proceedings of APCOM'07-EPMESC XI (2007).

[7] J. Hu , R. Ma, The Enriched Crouzeix–Raviart Elements are Equivalent to the Raviart–Thomas Elements, J. Sci. Comput., (2015) pp. 410-425.

創成解による板・シェル問題の妥当性確認

山田 貴博
横浜国立大学
e-mail : tyamada@ynu.ac.jp

1 はじめに

厚さの薄い平板や曲面構造に対応するシェルは，さまざまな分野で現れる力学的な構造形式の一つであり，その応力解析は理工学において重要である．これらの板およびシェルの釣り合い問題は，板厚が薄い場合には Kirchhoff-Love の仮定に基づく変形の記述から導かれる方程式によって記述される．この Kirchhoff-Love の仮定については，3 次元連続体力学に基づく支配方程式において板厚をパラメータとした漸近解析における板厚 0 の極限として導かれること証明されており [1]，数学的にも妥当なモデルであることが知られている．また，有限要素法に基づく数値計算手法においても，Kirchhoff-Love の仮定を考慮した近似手法が用いられている [2]．

一方，曲面を考えるシェル構造の問題においては，解析解は支配方程式に何らかの近似を使用して導出されているものが多い [3]．したがって，数値計算手法がその支配方程式を適切に近似したものであることを確認する検証 (verification) をシェルの問題において考えるとき，このような解析解を比較対象とすることには疑問が残る．

また，Kirchhoff-Love の仮定は板厚が薄いこと（数学的には板厚 0 の極限）を仮定しているが，実際の板・シェルの問題においては板厚は有限な大きさであり，その適用範囲については検討することが必要となる．しかしながら，これまではこの適用範囲については数値解から経験的に判断されていることがほとんどであり，明確な指標が望まれている．

そこで本研究では，板・シェルの問題において得られた解析解（文献 [3][4] 等参照）を 3 次元連続体における厳密解と見なし，創成解の方法 (method f manufactured solution) を適用することを考える．これにより，板・シェル問題の解の 3 次元連続体の釣り合い方程式における適合度を体積力の大きさとして評価することが可能となる．本研究は，このようなアプローチにより 3 次元連続体の観点から板・シェルの方程式の特性を可視化し，定量的な評価を試みるものである．

2 創成解の方法

本研究では，3 次元領域 Ω を占める線形弾性体の微小変形釣り合いの問題における創成解の方法を考える．この問題の支配方程式は，変位場 $\boldsymbol{u}$ から計算される応力 $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u})$ に関する釣り合い方程式として

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f} \quad \text{in} \quad \Omega \tag{1}$$

と表される．ここで，∇ は勾配演算子，$\boldsymbol{f}$ は体積力である．

創成解の方法は，解を具体的に既定し，それが上記の支配方程式を満足するものとすることで，与えた解が厳密解となる問題を構成するものである．いま，創成解 $\boldsymbol{u}^m$ をとすると，この解を厳密解とする問題の支配方程式は式 (1) より次式で与えられる．

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f}^m \quad \text{in} \quad \Omega \tag{2}$$

このとき，体積力項 $\boldsymbol{f}^m$ は

$$\boldsymbol{f}^m = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^m) \tag{3}$$

により，創成解 $\boldsymbol{u}^m$ から計算された応力の導関数として与えられる．また，境界条件を Γ_u と Γ_t に対して設定するものとすれば

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^m \qquad \text{on} \quad \Gamma_u \tag{4}$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{t}} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^m) \cdot \boldsymbol{n} \qquad \text{on} \quad \Gamma_t \tag{5}$$

と与えられる．以上の体積力と境界条件を設定した新しい問題が創成解を厳密解とする問題となる．

本研究では，板・シェルの問題の解析解を創成解 $\boldsymbol{u}^m$ として選ぶことで，板・シェルの問題の解析解が厳密解となる 3 次元連続体の問題を考察する．このとき，得られた 3 次元連続体の問題の体積力や表面力は，必ずしも元となった板・シェルの問題におけるものとは一致しない．このような体積力や表面力が，3 次元連続体の観点から板・シェルの問題の解を評価する指標となる．

3　創成解における体積力の表示

上述のように，式 (3) に創成解を具体的に代入し計算することで，創成解の方法における体積力が計算できる．本研究では，この創成解としてシェル問題の理論解を利用するが，これらの理論解は，極座標系や円筒座標系を用いて記述されることが多い．一方，3 次元連続体の問題として考察する場合には，体積力はデカルト座標系上で表される方が便利である．このようなシェルの理論解を用いて応力を定義し，その導関数からデカルト座標系上で表された体積力を実際に求めるためには，数式処理を用いてかなり煩雑な計算を実行することが必要となる．

そこで，本研究では筆者等が提案した弱定式化に基づき，有限要素法で用いる体積力の等価節点力の計算手続き [5] を用い，体積力を評価し，可視化する．

前節で示した 3 次元弾性体の釣り合い方程式に対する弱表現は，仮想変位 $\boldsymbol{v}$ を用いて以下のように表される．

$$\int_\Omega \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{v}) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u})\, dx = \int_\omega \boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{v}\, dx + \int_{\Gamma_t} \boldsymbol{t} \cdot \boldsymbol{v}\, ds \quad (6)$$

ここで，$\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{v})$ は仮想変位 $\boldsymbol{v}$ に対する仮想ひずみテンソルであり，その成分は

$$\epsilon_{ij}(\boldsymbol{v}) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)$$

で表される．

このとき，仮想変位 $\boldsymbol{v}$ に対して有限要素近似 $\boldsymbol{v}^h$ を適用すれば，次式が得られる．

$$\int_\Omega \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{v}^h) : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}^m\ )\, dx = \int_\Omega \boldsymbol{f}^m \cdot \boldsymbol{v}^h\, dx + \int_{\Gamma_t} \boldsymbol{t}^m \cdot \boldsymbol{v}^h\, ds \quad (7)$$

上式の右辺は創成解に対する外力の等価節点力を計算するための外力仕事式に他ならない．したがって，創成解に対する外力の等価節点力は，式 (7) の左辺から計算できることとなる．

本研究では，有限要素近似に 3 重 1 次六面体要素を用い，式 (7) から等価節点力を求めることで，体積力と表面力を離散的なベクトルとしてを可視化することが可能となる．

4　板・シェルの理論解の修正 s

Kirchhoff-Love の仮定に基づく板・シェル理論では，面外せん断変形は無視されており，せん断力は曲げモーメント分布の変化率から与えられる．このような板･シェルの理論解を 3 次元連続体の創成解とすると，面外せん断力によって釣り合う状態が表現できないことから，面方向の各点で面の接線方向の節点力が面の表と裏の両面に対となって生じる．これらの節点力は，せん断力ではなくモーメントを直接作用するためのものであると理解できる．したがって，板・シェルの理論解を創成解とするには，面の各点において面外せん断変形を発生するよう，解を修正することが必要である．

5　終わりに

本研究では，板・シェルの理論解を 3 次元連続体の問題の創成解とすることで，3 次元連続体の観点から板・シェルの解を評価する手法を提案した．

参考文献

[1] P. G. Ciarlet: Mathematical Elasticity, Vol. III: Theory of Shells, Elsevier, 2000.

[2] 山田貴博:　高性能有限要素法，丸善, 2007.

[3] W. Flugge: Stresses in shells, Springer–Verlag, 1973.

[4] S. Timoshenko and S. Woinowsky-Krieger: Theory Of Plates & Shells, 2nd Edition, McGraw–Hill, 1959.

[5] 山田貴博: 超弾性体の大変形有限要素解析への創成解の方法の適用, 土木学会論文集 A2 分冊（応用力学）, Vol. 72, No. 2, pp.I_277–I_284, 2016.

非同次項を持つ２階線形常微分方程式の固有値問題の数値解法

石川 英明
e-mail: UHI91261@nifty.com

1 概要

我々は，これまで量子力学の固有値問題を解くため，可能な限り単純で高精度な数値計算法を研究開発してきた．１個の粒子に対する（或いは一体問題に対する）一次元の微分方程式の固有値問題では、微分方程式を離散化した行列の固有値方程式を解く方法（｢離散化行列固有値方程式法｣とも呼ぶ）と shooting 法で高精度の結果を得た[1-3]．一体問題の中心力場問題では、一次元での shooting 法を更に発展させて高精度の結果を得た[4,5]．我々は更に，原子構造計算に対する新しい数値計算法を研究開発している．原子構造計算では，原子の電子状態（固有値と固有関数）を計算する際，原子が一般に多電子系であるため，平均場近似を用いると、固有値と固有関数に対する２階常微分方程式とポテンシャルを固有関数から構成する方程式とから成る，連立微分方程式系が導かれる[6-9]．これらの方程式系はセルフ・コンシステントに解く問題に帰着され、その解は数値計算で求めることになる［6,10-12]．平均場近似で最も基本的な近似は，系の全波動関数を１電子波動関数の単純な積として表すもので，得られる微分方程式系は所謂 Hartree 方程式となる．数学的な観点からは，Hartree 方程式は非同次項がない，通常の固有値問題と同様の２階常微分方程式である．我々はこれまで，固有関数を用いてポテンシャルを高精度に計算する方法を新たに開発し，更に中心力場問題の固有値問題を解く方法と組み合わせて，Hartree 方程式を高精度に解く数値計算法を開発してきた[13]．平均場近似の精度を更に上げて，全電子波動関数を１電子波動関数から成る１個の行列式（Slater 行列式）で近似して得られる連立微分方程式は所謂 Fock 方程式となる．数学的な観点からは、Fock 方程式は非同次項を含む一般化された固有値方程式（微分方程式）である．本報告の目的は，こうした微分方程式を，系統的に，見通し良く，高精度に解くことにある．

2 方法

我々は先ず，非同次項を落とした微分方程式の通常の固有値問題を解く[4,5]．次に，こうして得られた固有値と固有関数を初期値に用いて，非同次項を持つ微分方程式の固有値問題を系統的に解く．その内容については講演で述べる．

3 計算結果

非同次項を持つ微分方程式の固有値問題として以下の例（[10]，p. 246）を扱う

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{0(0+1)}{r^2}-2\frac{1}{r}-2E\right]y(r)=g(r),$$

$$g(r)=A\begin{bmatrix}-\dfrac{1}{2}r\exp(-r)\\ -(6-10r+\dfrac{7}{2}r^2)r\exp(-2r)\end{bmatrix}.$$

ここで固有関数を規格化するため以下の定数を掛けておく

$$A=\sqrt{82944/40765}.$$

境界条件は

$$r=0 \;\text{で}\; y(r)=0\,;\quad r\to\infty \;\text{で}\; y(r)\to 0.$$

解析解は以下で与えられる（これらを上式に代入すると、方程式が満たされている）

固有値　$2E=-1/2=-0.5,$

固有関数　$y=Ar\exp(-r)[1+r^2\exp(-r)].$

ここで固有関数は規格化されている

$$\int_0^\infty dr[y(r)]^2=1.$$

また以下の恒等式が成り立っている

$$2E=\int_0^\infty dr\left\{\begin{array}{l} y(r)\left[-\dfrac{d^2}{dr^2}+\dfrac{0(0+1)}{r^2}-2\dfrac{1}{r}\right]y(r) \\ -y(r)g(r) \end{array}\right\}$$

$$/\int_0^\infty dr\left[y(r)\right]^2=-\frac{1}{2}.$$

尚、微分方程式で右辺の $g(r)$ をゼロと置いたものは水素原子の 1s 状態に対する式となり，その解は以下のようになる

固有値 $2E=-1,$

固有関数 $y=2r\exp(-r).$

我々の方法で得た数値解は以下のようになった．正確な数値の桁数は 13 であった．ここで下線部は誤差を含む数値である

固有値 $2E=-4.99999999999\underline{76}\times10^{-1}.$

参考文献

[1] H. Ishikawa, An accurate method for numerical calculations in quantum mechanics, J. Phys. A: Math. Gen. **35** (2002), 4453-4476.

[2] H. Ishikawa, Numerical methods for the eigenvalue determination of second-order ordinary differential equations, J. Comput. Appl. Math, **208** (2007), 404-428.

[3] H. Ishikawa, 二階線型常微分方程式の固有値問題の高精度数値解法と量子力学への応用, J. Comput. Chem. Jpn, **6** (2007), 199-216.

[4] H. Ishikawa, Numerical methods for the eigenvalue determination of central-force-field problems in quantum mechanics, J. Comput. Chem. Jpn, **9** (2010), 89-108.

[5] H. Ishikawa, Numerical methods for the eigenvalue determination of second-order ordinary differential equations in quantum mechanics, in Quantum Mechanics, ed. by J. P. Groffe, Nova Science Publishers, New York, 2012, pp. 63-117.

[6] D. R. Hartree, The Calculation of Atomic Structures, Wiley, New York, 1957.

[7] J. C. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, 2 vols., McGraw-Hill, New York, 1960.

[8] E. U. Condon, H. Odabaçi, Atomic Structure, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1980.

[9] R. D. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra, Univ. California Press, Berkeley, 1981.

[10] C. Froese Fischer, The Hartree-Fock Method for Atoms, Wiley, New York, 1977.

[11] C. Froese Fischer, Self-consistent-field (SCF) and multiconfiguration (MC) Hartree-Fock (HF) methods in atomic calculations: Numerical integration approaches, Comput. Phys. Rep. **3** (1986), pp. 273-326.

[12] C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jönsson, Computational Atomic Structure. An MCHF Approach, IOP Press, Bristol, 1997.

[13] H. Ishikawa, unpublished.

スマートコントラクト：金融工学の観点からの課題

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 概要

スマートコントラクトは, デジタルアセットを直接コントロールする, コンピュータプログラムで書かれた, 安全な環境下で自動執行される契約であり, i) 取引の自動化に伴う決済時間の短縮, ii) 不正防止, iii) 取引コスト削減 (仲介者を介さない) など様々なメリットを有すると考えられる. また, 安全実現の基礎の一つであるブロックチェーン（分散台帳）技術は, “中央集権型集中管理システム” と対照的性格を有し, それ故に効果的な応用場面があるのではないかと想像される. 本講演では, 金融派生商品 (financial derivative products: 単にデリバティブとも呼ぶ) をスマートコントラクト化した「スマートデリバティブコントラクト」の開発を念頭に置いて, その意義や課題を論じたい.

2 デリバティブ市場：概況

デリバティブとは, 基礎となる資産・商品 (原始資産・商品) から派生した金融資産あるいは契約である. 具体例として, 原始商品 (株式, 外国通貨, コモディティ etc.) に関する満期が T で権利行使価格 K(¥) のヨーロピアンコールオプションを挙げる. これは, 満期日 T において原始商品を価格 K(¥) で買うことができる権利に関する契約であり, この権利の購入者は満期での原始商品の価格 S_T(¥) が K 以上 (以下) ならこの権利を行使する (破棄する) ので, 結局 $F_T = \max(S_T - K, 0)$ (¥) 分の利益が購入者に生じる. 一方, この権利の発行者 (販売者) は満期 T に F_T(¥) 分の支払い (ペイオフ) を購入者に対して行う. このようなデリバティブは原始商品の将来に渡る価格変動リスクの回避 (リスクヘッジ) のための契約と見做される.

2.1 店頭デリバティブ

デリバティブはその取引の仕方から 2 種類に分類される：一つは取引所を介して契約・売買が行われる市場デリバティブ, もう一つは取引所を介さない当事者間の相対 (あいたい) 取引で行われる店頭 (Over The Counter: OTC と略) デリバティブである. 今日, 世界デリバティブ市場は巨大なものとなっており, 2014 年末時点で 700 兆 $ 以上の規模 (想定元本ベース) となっているが, 店頭デリバティブはそのリスクヘッジ機能に加えて相対取引由来の契約の柔軟さを持ち, 多数 (約 9 割) を占めている.

2.2 店頭デリバティブ規制

リーマン・ショック (2008) 等の世界的金融危機を通して店頭デリバティブ取引が内包する危険性が広く認識されることになった. これらは, カウンターパーティーリスク (金融機関間での店頭デリバティブ取引における相手がデフォルト (債務不履行) に陥るリスク) や, システミックリスク (相対取引であり当局ですらその全体像が把握できない：一つのデフォルトが連鎖的に金融システム全体へ波及・伝搬してゆく効果が測りきれない) と呼ばれている.

その後, 新たな金融危機を防ぐため, 世界規模での店頭デリバティブ規制・整備が議論され実行に移されつつある現況である. 代表的項目は以下の通り：

1) 標準化された取引を取引所または電子取引プラットフォーム[1]を通じて行うこと,
2) 標準化された取引の中央清算機関 (Central Counterparty Clearing House: CCP) への清算集中 (取引者間に CCP を置くことでカウンターパーティのデフォルトの連鎖・波及を防ぐ)[2],
3) 取引情報蓄積機関 (Trade Repository: TR) への報告の義務化,
4) 中央清算されない取引に係る証拠金規制.

3 プライシング, 動的ヘッジング

(店頭) デリバティブのプライシング・ヘッジングで用いられる金融工学の枠組みを, Black-

[1]店頭取引だが取引情報が保持・報告・開示される
[2]従来相対で行われていた店頭デリバティブ取引の資金決済について, 証拠金を担保として CCP が債務を引き受け個々の金融機関の代わりに CCP が資金決済を行う.

Scholes-Merton 理論に基づく従来の (金融危機以前の) 枠組みと金融危機以後の枠組みとに分けて概説する.

3.1 Black-Scholes-Merton の枠組み

安全運用過程 $B := (B_t)_{t=0}^T$, 株価過程 $S := (S_t)_{t=0}^T$ から成る金融市場モデルが完備 (complete) であるとき, 任意のデリバティブ (T, F_T) (T: 満期, F_T: 満期で売り手から買い手に支払われるペイオフ, $F_T = f(S_0, \ldots, S_T)$) が B と S の動的な運用によって複製される. すなわち, 初期投資額 $x \in \mathbb{R}$, 動的ポートフォリオ戦略 $\Pi := (\Pi_t)_{t=1}^T$ $\Pi_t := (\pi_t^S, \pi_t^B)$ に対応した

$$\Delta X_t = \pi_t^S \Delta S_t + \pi_t^B \Delta B_t, \quad X_0 = x,$$

ただし $X_t = \pi_t^S S_t + \pi_t^B B_t$, $t = 1, \ldots, T$, (さらに $\Delta X_t := X_t - X_{t-1}$ などの記法を使った) でポートフォリオ価値過程 $X_t = X_t^{x,\Pi}$, $t = 0, \ldots, T$ を定義するとき

$$F_T = X_T^{x,\Pi}$$

を満たすものが唯一定まることが知られている. 特に, この x がデリバティブの適正な価格であり, デリバティブの発行者は一方でこの複製ポートフォリオ (x, Π) に従った運用を行ってリスクヘッジができる. また

$$X_t^{x,\Pi} = \mathbb{E}_t^{\mathbb{Q}}\left[\frac{B_t F_T}{B_T}\right], \quad x = \mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[\frac{F_T}{B_T}\right]$$

が成立する. ただし $\mathbb{E}_t^{\mathbb{Q}}[\cdots]$ はリスク中立確率 $\mathbb{Q}$ に関する時刻 t での条件付き期待値を表す.

3.2 XVA: 金融危機以後の枠組み

金融機関 (I と記す) とカウンターパーティ(C と記す) 双方のデフォルトの可能性を考慮したデリバティブは, 満期が $\tau_1 \wedge \tau_2 \wedge T$ (τ_1, τ_2 はそれぞれ I や C のデフォルト時刻を表す), ペイオフが

$$F := G_T 1_{\{T<\tau_1\wedge\tau_2\}} + H_{\tau_1}^1 1_{\{\tau_1<\tau_2\wedge T\}} + H_{\tau_2}^2 1_{\{\tau_2<\tau_1\wedge T\}}$$

と表される. $G_T := g(S_0, \ldots, S_T)$ と書かれ, また, $H_{\tau_i}^i$ はデフォルトが生じない時のデリバティブの価値：

$$\hat{V}_t := \mathbb{E}_t^{\mathbb{Q}}\left[\frac{B_t^d G_T}{B_T^d}\right], \quad t = 0, \ldots, T,$$

($(B_t^d)_{t=0}^T$ は無リスク金利の口座過程) と非線形な関数 $h^i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を用いて, $H_{\tau_i}^i := h^i(\hat{V}_{\tau_i})$ の形で表される ($i = 1, 2$). さらに, カウンターパーティリスク軽減のため, 相対取引の双方がデフォルトで損失を被る可能性のある相手方に担保を刻々（時刻 t に $\alpha\hat{V}_t$, $\alpha \in [0, 1]$）差し入れる. 担保を受け取った側は, 担保資産に応じた経過利息を相手に支払うことになっており, $(B_t^{col})_{t=0}^T$ で担保金口座過程を表す. 金融危機以後, 以前は一括りで安全運用金利と見做されて区別されていなかった金利の差異が顕在化した.

「金利」=「無リスク金利」
+「信用スプレッド」+「流動性スプレッド」

と解釈し, 上記の B^d, B^{col}, さらに銀行の資金調達部門の口座過程 $B^f := (B_t^f)_{t=0}^T$ やレポ (現金担保付き貸借) 取引に関する口座過程 $B^r := (B_t^r)_{t=0}^T$ を全て区別して取り扱う. I と C それぞれが発行する社債価格過程をそれぞれ $(P_t^1)_{t=0}^T$, $(P_t^2)_{t=0}^T$ と記し[3], 完備市場性の仮定の下で, 初期投資額 $x \in \mathbb{R}$, 動的ポートフォリオ戦略 $\Pi := (\Pi_t)_{t=1}^T$ $\Pi_t := (\pi_t^S, \pi_t^1, \pi_t^2, \pi_t^f, \pi_t^r, \pi_t^{col})$ に対応した

$$\Delta X_t = \pi_t^S \Delta S_t + \pi_t^1 \Delta P_t^1 + \pi_t^2 \Delta P_t^2 + \pi_t^f \Delta B_t^f + \pi_t^r \Delta B_t^r - \pi_t^{col} \Delta B_t^{col}, \quad X_0 = x,$$

ただし $X_t = \pi_t^S S_t + \pi_t^1 P_t^1 + \pi_t^2 P_t^2 + \pi_t^f B_t^f + \pi_t^r B_t^r - \pi_t^{col} B_t^{col}$, $\pi_t^S S_t + \pi_t^r B_t^r = 0$ (: レポ市場での取引を通して株式を動的に運用), $\pi_t^{col} B_t^{col} = -\alpha\hat{V}_t$(: 担保の運用), ($t = 1, \ldots, T$), でポートフォリオ価値過程 $X_t = X_t^{x,\Pi}$, $t = 0, \ldots, T$ を定義すると,

$$F = X_{\tau_1\wedge\tau_2\wedge T}^{x,\Pi}$$

を満たすものが唯一定まることがわかる. 特に, デリバティブの理論的適正価格は

$$x = \hat{V}_0 + \mathrm{CVA} - \mathrm{DVA} + \mathrm{FVA} + \mathrm{ColVA}.$$

の形で表現される. 上式右辺は, $\hat{V}_0$: Black-Scholes の枠組みから算出される価格, CVA: Credit Valuation Adjustment, DVA: Debt Valuation Adjustment, FVA: Fund Valuation Adjustment, ColVA: Collateral Valuation Adjustment, と呼ばれ, 第 2 項以降の修正項を総称して XVA と呼ぶ.

[3] I, C のデフォルトリスクをヘッジするための商品の簡単な例として挙げた：実際は CDS(Credit Default Swap) などを用いることが多い.

暗号学と金融工学の融合とその社会実装について

桑原　一郎
Crypto Garage

1.はじめに
イノベーションのキーワードとして「知の探索」と「知の深化」という言葉が近年定着しつつある。
2009年に誕生し、近年注目が集まっているビットコインはまさに「知の深化」で育まれた理論・学問（暗号学、経済学、ゲーム理論等）と「知の探索」による各要素技術の組み合わせで生まれたイノベーションとも言えるであろう。
このようなイノベーションを生み出すためには、多くの隣接する学問領域が協業して研究する学際的研究、更にそれを社会実装することが必要不可欠である。
本発表では、学際的研究および社会実装の実例として、世界初のビットコイン上のスマートコントラクト「P2P デリバティブ」について紹介をする。
「P2P デリバティブ」はビットコインディベロッパーやアカデミアを中心に議論されている暗号学、セキュリティと、経済学・会計学・工学・数学など様々な学問領域と接点を持ちながら発展してきた金融工学の知見の融合により生まれた。以下でその内容について触れていく。

2.ビットコインおよびビットコイン上のスマートコントラクトと楕円曲線暗号
ビットコインのセキュリティを担保する要素技術の一つとしては公開鍵暗号方式が用いられており、離散対数問題の困難性を安全性の根拠とする楕円曲線暗号（ECDSA）が検証プロトコルのベースとなっている。
具体的には、ビットコインは公開鍵ごとにアドレスが生成され、公開鍵に紐付く秘密鍵の保持者が当該アドレスの所有権（アドレス内のビットコインを移転する権利）を保持する。
ビットコイン保持者は移転時に移転用のトランザクションを作成、トランザクションの内容をメッセージとして秘密鍵を用いて署名、自身がその秘密鍵を保持していることを証明する。トランザクションがブロードキャストされると、そこに含まれる署名、メッセージ、公開鍵は公知となり、署名が正しいことは誰でも検証可能となる。

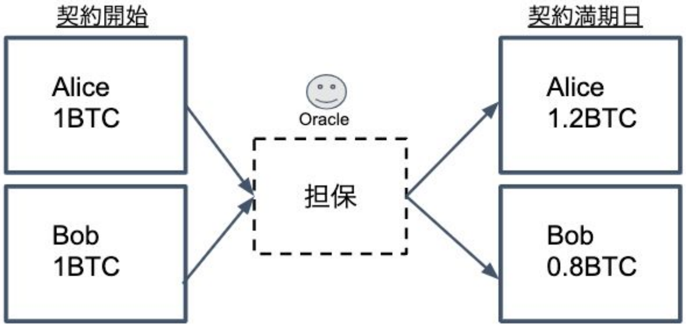
ECDSAよりセキュアかつ効率的な検証が可能な技術としてはSchnorr署名が存在。
Schnorr署名はECDSAとは異なり、線型性を保持しており（メッセージに対して鍵Aとその署名S_A、鍵Bとその署名S_Bが存在する際に鍵A+Bの署名値が$S_A＋S_B$になる）複数の署名の検証をまとめて行うことが可能となる。

なおSchnorr署名は2008年まで特許で保護されており利用が不可能だったため、現在検証プロトコルのベースとはなっていない。現在は利用可能となっており、ビットコインの検証プロトコルへの導入検討が積極的に議論されている。

また、ビットコイン検証プロトコル以外にも、ブロックチェーンの外側（オフチェーン）で鍵や署名の合成（合算）を行い、スマートコントラクトに応用する技術研究も近年衆目を集めており、今回紹介するスマートコントラクトもSchnorr署名を活用している。

3.ビットコイン上のスマートコントラクト技術DLC

「P2P デリバティブ」は、MIT DCIのTadge Dryjaが2017年に発表した「DLC」をベースにしている。DLCは予測市場をベースにビットコイン上で未来の契約が行える技術であり、契約当事者アリス、ボブの２名、予測に対する結果を公表、契約執行の手助けをするオラクルの３者から成りたっている。契約時にアリス、ボブはブロックチェーン上に担保を出し合いロックする。契約満期日になるとオラクルの協力を得て契約内容に基づいたBTC配分がアリス、ボブに返却される。



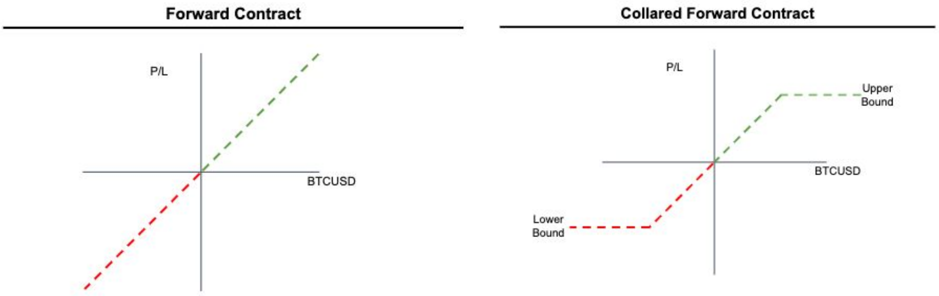
DLCはDiscreet Log Contracts（目立たない契約）の略称で、プライバシーの問題に対処し、オラクルは契約の内容を把握することなく契約執行の手助けが可能である。
上記はSchnorr署名で鍵および署名の合成をオフチェーンで行うことで実現している。
また、ビットコインの「Trustless」の文脈を引き継ぎ、信頼し合っていない2者間でも契約が可能、オラクルに必要な信頼も最小限に抑えることを目指している。

5.P2Pデリバティブ（DLCと金融工学の融合）
上記DLCのBTC分配ロジックに為替予約の差金決済の理論を活用したものが我々の開発した「P2Pデリバティブ」である。
契約執行時の契約者の差金決済金額（増減）は以下の通り計算される。

	定義	単位	note
N	想定元本	BTC	N > 0
S	fixing spot rate	BTC/$	受渡金額の確定日のレート。 S > 0。
F	契約rate	BTC/$	契約時に同意した先渡しレート。 F > 0。

契約者の差金決済額（BTC増減）$= N(\frac{S-F}{F}) = N(\frac{S}{F} - 1)$

代表的な期先決済のデリバティブ取引としてフォワード取引・オプション取引が挙げられるが、フォワード取引は、その定義から取引参加者双方において損失および利益の可能性が無限大に発散し得る為(価格下落側は下限があるが)、P2Pデリバティブのスタイルは成り立たない。
他方、上限・下限付きのフォワード取引（カラードフォワード）で、かつ決済金額に上限を設ける形であれば、その最大値までを支払い担保すれば良いため中間に担保を積む、という考え方が成立する。



アリスとボブ、それぞれの担保額をA,Bと定義すると、最終的な分配額、fixing spot rateの上限、下限は以下の通り計算される。

	定義	単位	note
A	アリスの担保額	BTC	A > 0
B	ボブの 担保額	BTC	B> 0

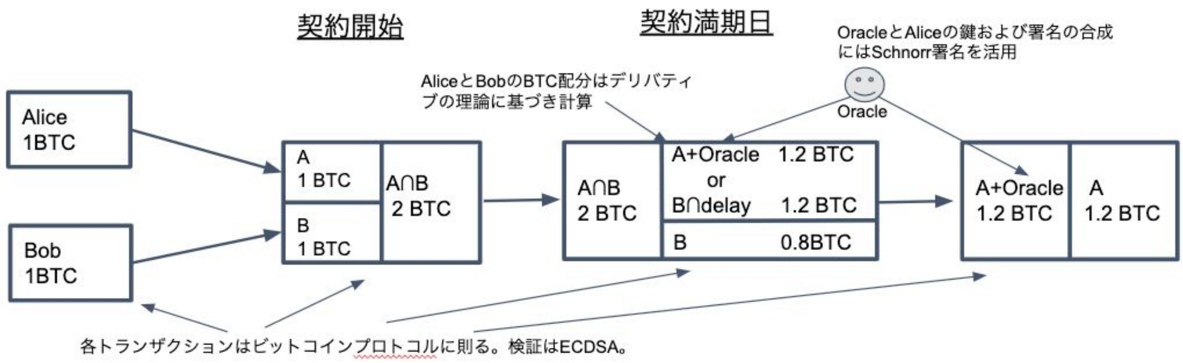
担保からアリスに分けられる額$A_{amount} = A + N(\frac{S}{F} - 1)$
担保からボブに分けられる額$B_{amount} = A + B - A_{amount} = B + N(1 - \frac{S}{F})$

担保から分配される額は担保の総額以下
$A_{amount} = A + N(\frac{S}{F} - 1) \leq A + B$

担保から分配される額は担保の0以上
$A_{amount} = A + N(\frac{S}{F} - 1) \geq 0$

上記より担保額A,Bで補えるfixing spot rateSの上限下限は以下の通り
$S_{upper} = F(1 + \frac{B}{N})$
$S_{lower} = F(1 - \frac{A}{N})$

このようにDLCと金融工学を組み合わせることでP2Pでの上限・下限付きのフォワード取引（カラードフォワード）が実現した。
なお、P2Pデリバティブ取引の中で前述で説明した要素技術（暗号学と金融工学）は以下の通り使用されている。



6.P2Pデリバティブの課題とチャレンジ
今後の課題・チャレンジとしては金融商品としてのさらなる充実（金融工学的なアプローチ）、ビットコインの文脈でのさらなるTrustlessの追求（暗号学、分散技術的なアプローチ）の２軸が存在する。

金融商品の観点では、現状の契約では担保は契約の有効期限までビットコインプロトコルでロックされており、契約有効期限前の実行、契約後の内容変更、キャンセルは不可能。（両当事者が同意する場合、契約条件の変更は可能）
また、各契約当事者への分配は固定された担保からであるため、分配には上限と下限がある。 デリバティブ取引の分類では、これは上限と下限のあるヨーロッパ型のオプション取引となる。 現在はアメリカンタイプのオプションをラインナップに追加し、マージンコールなどにより担保を動的に変更する機能の開発に取り組んでいる。
また、Trustlessの追求という観点では、オラクルへの信頼ポイントをどのように減らすかがポイントとなる。分配額はオラクルのレートの出力に依存するため、オラクルによる不正操作のリスクを減らすために公正な参照レートを作成する方法についても今後取り組んでいく予定である。

7.終わりに
金融工学と暗号学の融合の例としてビットコイン上のスマートコントラクト「P2Pデリバティブ」を紹介させていただいたが、今後これを更に発展させていく上でも学際的研究が必要不可欠であることは言うまでもない。この講義を通じて学際的研究に興味を抱く方々が増え、新たなイノベーションの生まれるきっかけとなればこれ幸いである。

参考文献）
https://bitcoin.org/bitcoin.pdf
https://adiabat.github.io/dlc.pdf
https://cryptogarage.co.jp/p2pd/

トークナイゼーションのモデル化に関する一考察

佐古 和恵[1], 福岡 俊樹[2,3], 桑原 一郎[2]
[1]NEC，[2]Crypto Garage, [3]FINPLANET

概要

金融分野における「株」や「債券」をはじめ、さまざまなアセットがブロックチェーン上でトークン化され、取引されている。それぞれのアセットはそもそもどういう用途があり、どのようなセキュリティ要件を満たすことが期待されているのか。ひとつひとつのケースにおいて「トークン」をモデル化し、目的に応じた性格の比較を行う。

曲線折りを含む展開図からの3次元形状復元を目的としたRuling配置の推定

佐々木 好祐 [1], 金森 由博 [2], 三谷 純 [2]

[1] 筑波大学 システム情報工学研究科, [2] 筑波大学 システム情報系

e-mail : sasaki@cgg.cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本研究は，曲線で折る折り紙の造形についての研究である．紙を曲線で折ることを曲線折りと呼び，曲線・曲面を含む形を表現することができる．折り紙による造形では，展開図を用意しそれを折ることをする．展開図から折った後の形を生成する方法の 1 つに計算機を用いたシミュレーションがあり，シミュレーションソフトウェアの 1 つに Ghassaei ら [1] の Origami Simulator がある．展開図情報を用いて折りのシミュレートをするソフトウェアはこれ以外にも複数存在するが，我々の調べた範囲では曲線折りを含む展開図を入力しシミュレートできるものはない．本研究では，Origami Simulator を用いて曲線折りを含む折り紙のシミュレートを近似的に実現することを目的とする．入力は曲線折りを含む展開図であり，出力はその展開図を折った時に得られる形および，その形へ変化する様子を示すアニメーションである．

Origami Simulator は直線の折り線のみを入力として受け付けるため，曲線折りのシミュレーションをする際は展開図中の曲線を短い線分の集まりによる折れ線で近似する．シミュレーション時には入力された展開図の折り線で囲まれた部分を三角形に分割して曲面の近似を行う．しかし既存の分割方法では曲面を再現できない場合がある．曲線折りでできる曲面は可展面であるため，曲面の Ruling を算出し Ruling の一部を辺に含むような三角形を配置して曲面の近似を行うことで，なめらかな曲面のシミュレーションが可能となる (図 1)．しかし折った後の形状が不明な状態で Ruling を決定できないため，展開図情報のみから Ruling を決定することは難しい．提案手法では，曲線の折り線と Ruling の角度の関係を用いて Ruling 配置を推定することで曲線折りを含む展開図からの折りのシミュレートを実現する．曲線折りを含む展開図の入力に対し，実際に紙を折った様子と Ruling の配置を手動で指定した場合，提案手法を用いて配置した場合のシミュレーション結果を比較し，十分な結果が得られているかを検証する．また曲面の滑らかさの評価指標となる曲げエネルギーを計測し比較をする．

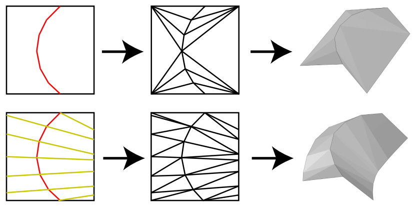


図 1. 三角形分割のシミュレーション結果への影響．(上段) 既存の三角形分割の場合，(下段) Ruling の一部を辺に含む三角形分割の場合．

2 提案手法

提案手法では Origami Simulator での既存のシミュレーションの手順に加えて，展開図の三角形分割の改善による Ruling 配置の推定を行う．

展開図の初期分割には制約付きドロネー三角形分割を用いる．曲線折りによる曲面は柱面に近づく傾向にあり，その時展開図上の Ruling は平行になる傾向にあるため，1 つの頂点を多数の三角形が共有しないようにするためである．

三角形分割の改善は曲線の折り線と Ruling 配置に関する経験則に基づいて行う．舘 [2] によれば，図 2 のような曲線の折り線，Ruling の方向と折り角度の関係は次の式で表される．

$$\kappa_{2D}(s) = \kappa(s)\cos\alpha(s)$$
$$\cot\beta_L(s) = \frac{\alpha'(s) - \tau(s)}{\kappa(s)\sin\alpha(s)}$$
$$\cot\beta_R(s) = \frac{-\alpha'(s) - \tau(s)}{\kappa(s)\sin\alpha(s)}$$

s を曲線の折り線の弧長パラメータ，κ_{2D} を平面に描かれた折り線の曲率，$\kappa(s)$ と $\tau(s)$ を折った後の折り線の曲率と捩率，折り角度 $\alpha(s)$ を $\boldsymbol{T}(s)$ と $\boldsymbol{N}(s)$ による平面と Ruling のなす角，$\beta_L(s)$ と $\beta_R(s)$ を展開図上での Ruling と曲線の成す角とする．

ある展開図を折る際になるべく自然な状態，つまり曲線を大きく捩らず ($\tau(s) = 0$)，折り角を場所によって変化させずに折る ($\alpha'(s) = 0$)

とする．この時 $\cot\beta_L(s) = \cot\beta_R(s) = 0$ であり Ruling は展開図上の曲線の接線と直交する．この傾向を利用し三角形分割を改善する．

初めに三角形分割内の折り線でも輪郭線でもない稜線を 1 つ選ぶ．その稜線に対しては稜線を付け替える操作が可能であり，これを稜線交換と呼ぶ．次に曲線の折り線と稜線とのなす角を稜線交換前後それぞれについて求める (図 2)．さらにそれぞれ角の組の二乗誤差 d を求める．Ruling が展開図上の曲線の接線と直交する傾向より，この稜線が Ruling に沿った稜線に近づくためには二乗誤差ができるだけ小さければ良い．そこで稜線交換前の二乗誤差 $d_a + d_b$ よりも，交換後の二乗誤差 $d_c + d_d$ のほうが小さければ稜線交換を実行する．これを対象となるすべての稜線に対して行い，稜線交換の必要がなくなるまで繰り返す．

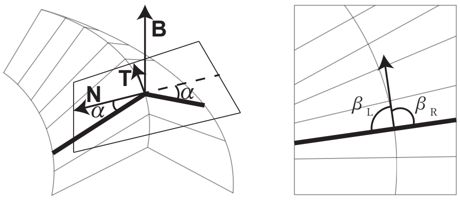


図 2. 曲線の折り線と Ruling

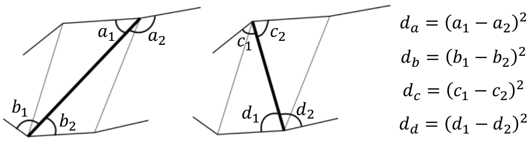


図 3. 稜線交換

3　結果

提案手法を用いて図 4 の展開図の折りのシミュレーションを行った．比較は 1.Origami Simulator(既存手法)，2. 折った形状を見て Ruling を手作業で適当と思われる位置に配置した場合，3. 提案手法の 3 つの方法で行う．またシミュレーション結果に対して曲面の滑らかさの評価指標となる曲げエネルギーを計測し比較した．曲げエネルギーの計算は Bergou ら [3] の手法を参考にした．曲げエネルギーが小さいほどより自然な状態である．シミュレーション結果と曲げエネルギーの計測結果を表 1 に示す．

シミュレーション結果を比較すると，既存手法では再現できなかった曲面が提案手法では再現できている．手作業で Ruling を配置した場合と同等のシミュレーションができている．曲

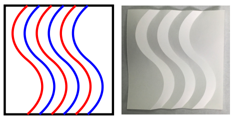
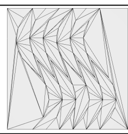
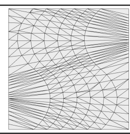
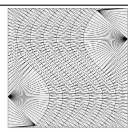
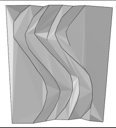
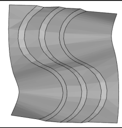
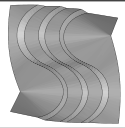


図 4. 折りのシミュレーションをした展開図

表 1. 結果
(a) 三角形分割，(b) シミュレーション，(c) 曲げエネルギー

	1. 既存手法	2. 手作業	3. 提案手法
(a)			
(b)			
(c)	149.77	34.58	36.21

げエネルギーを比較すると既存手法に比べて提案手法は滑らかな曲面を実現できているとわかる．手作業で Ruling を指定した場合と比べてもほぼ同等であり，Ruling をある程度推定できていると言える．

4　まとめと今後の課題

本研究では，折り紙の展開図を折った際の形状を計算機を用いてシミュレーションするソフトウェアの 1 つである Origami Simulator において，曲線折りを含む展開図のシミュレーションを近似的に実現する方法を提案した．

今後の課題としてシミュレーション精度の向上が挙げられる．計測した曲げエネルギーを利用して，曲げエネルギーが小さくなるように三角形分割を改善し再シミュレーションを行い精度を向上する方法が考えられる．

参考文献

[1] Amanda Ghassaei, Erik D. Demaine, and Neil Gershenfeld, “Fast, interactive origami simulation using gpu computation”, In Origami7, pp. 1156–1166, (2018)

[2] Tomohiro Tachi, “One-dof rigid foldable structures from space curves”, In Proceedings of the IABSE-IASS Symposium, pp. 20–23, (2011)

[3] Miklos Bergou, Max Wardetzky, David Harmon, Denis Zorin, and Eitan Grinspun, “A quadratic bending model for inextensible surfaces”, In Symposium on Geometry Processing, pp. 227–230, (2006).

折紙工法で得られる輸送箱の振動遮断に関する検討

○阿部 綾[1]，崎谷 明恵[1]，屋代 春樹[1]，寺田 耕輔[2]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学先端数理科学インスティテュート，[2]明星大学
e-mail: aya_abe@meiji.ac.jp

1　概要

多様な観点から見て「イチゴ」，「卵」それぞれに最適な輸送箱を開発・提供し，最終的には細胞や血液の輸送箱の可能性についても検討する．最初のステップとして，充填強化蓋に最適な設計をすることで，イチゴを輸送する時に極力避けたい固有周波数帯域を避けることを試みる．さらに次のステップとして，卵について検討を行う．

2　研究の全容

紙を折ることで強度剛性は増す．その究極はコアにして空間充填させることである．これまでに,組み立てた立体コアを用いて,空間を満たすように積み上げげて,外箱に収める新しい輸送箱,箱入りアッセンブリトラスコア(Box in Assembly Truss Core) [1]が開発された．

本研究では,輸送対象物を図1に示すような,四面体と八面体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)を更に箱に詰めて,図 2 に示す充填強化蓋で間隙を埋めることで,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．また，折紙工法で得られる輸送箱について，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]を行うことを目指している．

空間充填されると圧力を上から，または横からかけても凹まないので箱を重ねても，立てても中の青果物は傷つくことなく安全にしかも大量に搬送することが可能となる．イチゴなど高価な青果物や卵の輸送には振動や衝撃に細心の注意が払われる．

ここでは,正四面体コア 4 個と正八面体ハーフコア 5 個とで空間充填させ,各コアにイチゴを入れて輸送するイチゴ箱の輸送実験と振動遮断のための固有値計算の検討結果について報告する．

図 1. 組み立てた正四面体と正八面体ハーフのコア

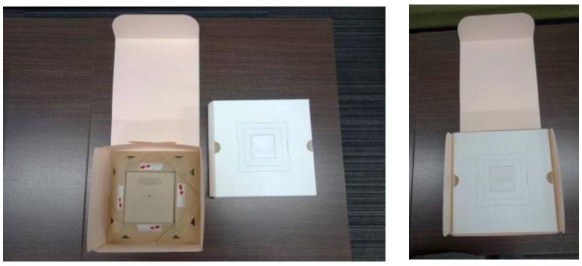


図 2. コアを 9 個いれた箱と充填強化蓋

3　イチゴ箱の輸送実験について

今冬から春にかけて数回にわたり,図 3 に示すような輸送実験を行い， 当初コアにイチゴを吊るした場合で検討したが,下端部に損傷による果汁の染み出しが発生したことから,改善策について議論した.結果として,改善案を3つ提案するに至った.

(1)クッションペーパーによる緩衝材の形状を変えることにより，先端を守り，更にイチゴが動かないようにする(図 4)．
(2)クッションペーパーの片方に輪を付け，先端を守り，コアに固定し，動かないようにする．
(3)円錐形の固定具を新たに作り，その中にクッションペーパーで作成した緩衝材をつけたイチゴを入れて，コアに入れる．
クッションペーパーの使用により損傷をある程度軽減することが出来た.

図 3. 輸送実験例(コアにイチゴを吊るした場合)

図 4. イチゴ箱の改善策の一例

4 輸送箱の固有値計算

輸送箱の振動特性の特徴について明らかにするために,輸送箱を構成する各パーツについて固有値計算を行うこととする.まず,材料特性について検討を行った.ヤング率について,材料となる紙の重量とたわみ量といった計測値から計算により求める方法と文献値による値を用いる方法との2通りの数値について比較検討をした.その結果, 文献値による値について,他文献による同様な解析と固有値計算結果で近い値が得られたことから,その値を用いることとした.質量密度は計測値を用いることとした.具体的な数値は以下となる.

ヤング率:2.25Gpa

質量密度:1.176×10^2 kg/m^3

図 5 に箱の解析モデル全体を示す. 図 6 に正八面体ハーフ単体の固有値計算結果を固有モードとともに示す.7 次から 10 次の固有モードにおいて底面部分が波打っている様子から,正八面体ハーフの底面の振動特性が低次弾性共振の主要因であることが伺える.

また,既往研究結果から,イチゴ果実の場合,20-30Hz の加振による損傷が最も大きくなる[3]ということが得られており, 正八面体ハーフ単体の場合,13 次の固有モード以降において,この範囲に当てはまるということが言えるため,固有値をずらす対策が求められると言える.

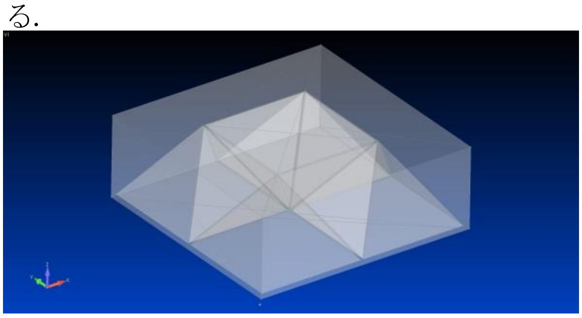


図 5. イチゴ箱の解析モデル

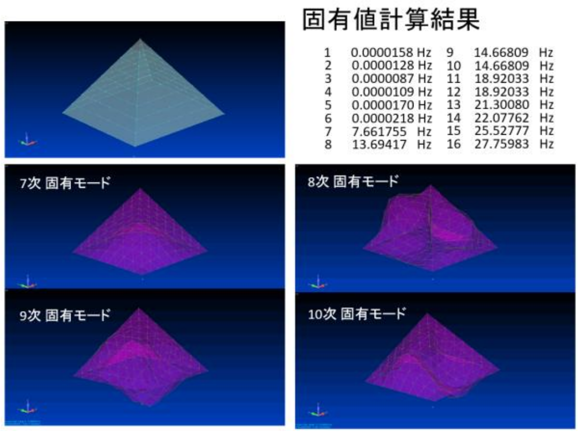


図 6.正八面体ハーフコアの固有値計算

5 結語

正四面体コア 4 個と正八面体ハーフコア 5 個とで空間充填させ,各コアにイチゴを入れて輸送するイチゴ箱の輸送実験とイチゴ箱を構成する八面体ハーフコアの固有値計算の検討結果についてこれまでの経過を報告した.

今後は輸送箱全体についての固有値計算も検討し,充填強化蓋の最適化計算を行うことを予定している.また,内容物として,イチゴをコアの中に入れた場合について,イチゴを質量とばねで置き換える方法について検討中である.

参考文献

[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] 中村宣貴, 梅原仁美, 根井大介, 岡留博司, 石川豊, 中野浩平, 前澤重禮, 椎名武夫,包装条件の違いがイチゴ果実の損傷に及ぼす影響,農業施設 39 巻 1 号 (2008.6) ,pp.1-8.

美しく折畳めスプリングバックしないペットボトルの開発

楊 陽[1]，陳　曉詩[1]，奈良 知惠[1]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学
e-mail：piscesyy0227@gmail.com

1　概要

折紙工学が誕生[1]して以来，早速試みられた課題に美しく折畳めスプリングバックしない折畳ペットボトルがあり，「折畳ペットボトル実用化間近か」と言った主旨の記事が写真入りで大手新聞の科学欄に報じられた[2]．その後も，鎌田氏ら[3], 有尾氏[4]も円筒折りを利用した折畳ペットボトルへの応用を試みている．しかし，いずれも実用化には至っていない．このような実用化には，折紙理論だけでは通用せず，計算科学シミュレーションの援用は不可欠である．本稿では，計算科学シミュレーションを援用美しく容易に折り畳み可能なペットボトルをはじめとする飲料容器の開発の検討を行う．

2　螺旋—螺旋—螺旋三段モデル

図 1 に示すように，第 3～第 5 段を螺旋部とし，第 2 段，第 6 段を円錐殻や円筒殻として検討した．この場合，第 3 段の螺旋部は第 2 段の円錐殻に入り込み，第 5 段の螺旋部は，第 6 段の円筒部に入り込む設計仕様とする．残るは，第 4 段の螺旋部であるが，螺旋段上に誘導線を付けることを検討する．

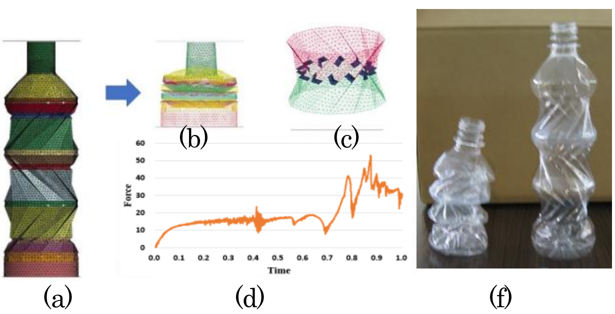


図 1. 螺旋—螺旋—螺旋三段モデル

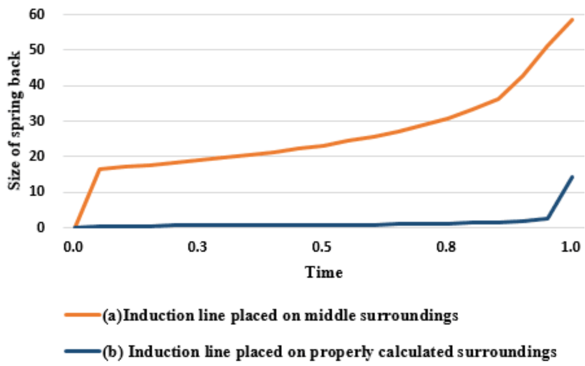


図 2. 誘導線の位置の比較

図 1 の三角形シェル要素メッシュは LS-PrePost で生成している．使用する有限要素法ソフトは LS/DYNA で，同図のモデルでは節点数は 7000 程度である，拘束条件は底面を完全固定，荷重条件は上端の節点に初速度 150mm/s を軸方向に付与．材料は pp 材で，メーカ推奨値である，ヤング率 1.0GPa，降伏応力 20.0MPa，塑性係数 30.0MPa，加工硬化係数 0.1，ポアソン比 0.4 としている．人の手で折畳む際，必ずしも軸方向に完全に平行に潰せるか疑問であるため，斜め方向に初速度を与える問題も取り上げた．斜めからの場合，途中で折れ曲がる傾向が見られた．ただし，全構造の板厚は 0.2 であるが，底部だけを 0.3 とすると途中で折れ曲がらず最後まで潰れた．螺旋の振り角 θ，半径 r と高さ H の間には次式の関係がある．

$$h = 2r\sqrt{\cos\left(\frac{\pi}{n}\right)\cos\left(\frac{\pi}{n}+\theta\right)} \quad 0<\theta<\frac{\pi}{2}\left(1-\frac{2}{n}\right) \qquad (1)$$

ここで，n は反転螺旋の辺数である．本来，この種の問題は静的問題であるが，動的に解析

したことによる影響は見られないことは筆者らの先の研究[5]を参照して確認している．すなわち準静的解析手法に，動的緩和法，システムダンピング法，マススケーリング法の三つがあるが，本課題のように座屈がいくつも生じる課題にはマススケーリング法のみ対応可能であることを示している．そこで今回マススケーリング法の解析を試みたがその影響は無視できることをまず確認した．誘導線を境にそれぞれが潰れ誘導線部が完全に絡まり誘導線部でロックできればスプリングバックを抑える可能性がある．誘導線の幅は，0.5mm~2mm で検討したが結果に差異はなかった．但し，位置による影響は大きく，誘導戦を各段の真ん中に設けた場合と各段で最初に座屈が生じるラインを中心に誘導線を設けた場合のスプリングバックを比較した場合を図 2 に示す．後者のスプリングバック量が前者に比べて格段に小さいことが分かる．図 1(b)は誘導線を適切に置いたものでスプリングバックが非常に小さいことを示している．同図(c) は誘導線を見やすくするため，1 段だけ取り出している．誘導部は飛び飛びに設けているが連続につなげてもその差異は殆どなかった．荷重—時間線図を同図(d)に示す．同図(f)を潰し終える 2 秒までは人間の手で畳める 30N 以下である．

3　螺旋—円筒—螺旋三段モデル

第 4 段はラベルを貼りやすいように，円筒モデルとした．この場合は，第 4 段の円筒部は折畳まれず．第 3 段は第 2 段に入り込み，第 5 段は第 6 段に入り込んだ例として，シミュレーション結果を図 3(a)に，プロトタイプの結果を同図(b)に示す．この場合は，第 3 段，第 5 段とも第 4 段の円筒部に入れ込む選択肢もある．ここで図 1 のモデルでは誘導線は第 4 段のスプリングバックを抑えるのが一番の目的であるが，図 3 のモデルでも誘導線を使用している．第 4 段を螺旋構造から円筒構造に換えることにより構造全体が剛くなっており折畳みにくい．この場合，誘導線は折畳み易くする効果を与えている．

(a)　(b)

図 3. 螺旋—円筒—螺旋三段モデル

4　結語

美しく折畳んで．スプリングバックしないペットボトルの開発を試み，更に精査が必要であるが，どの様にすればこのようなことが達成できるかが大凡分かった．但し，構造が複雑になる分，試作品で樹脂が行き渡りにくくなる問題もある．製造器の特徴に合わせて最適な設計仕様を求めて行く．

参考文献

[1] 野島武敏，数理折紙による構造モデル−折紙工学の提案−京都大学 IIC フェア，京都新聞，(2002).

[2] 世界に飛び出せ折り紙工学—ペットボトルから宇宙船までー，朝日新聞朝刊 (2007).

[3] 鎌田 慶宣，折りたたみ可能な PET ボトルの開発，日本機械学会 Dynamics and Design Conference 2011 CD-ROM 論文集，No. 11-2.

[4] 有尾一郎，円筒状容器およびその製造方法，特許第 4769976 号(2011).

[5] 津田政明，萩原一郎，準静的大変形問題の動的陽解法有限要素法に関する基礎検討，日本機械学会論文集(A 編)，64 巻 622 号 (1998)，pp. 1548-1555.

機械学習を活用した設計探査技術の開発

Development of design exploration technology utilizing machine learning

Ichiro Kataoka [1], Tatsuya Hasebe[1], Norihiko Nonaka[1]
[1]Hitachi, Ltd.
e-mail：ichiro.kataoka.vf@hitachi.com

1　Introduction

社会インフラ向け製品には，顧客が提示する要求仕様に応じて設計を行う受注型製品が多い．このような受注型製品では，一次見積りと呼ばれる企画・構想設計の段階にて，顧客の要求仕様に見合う製品構成案を短時間で顧客に提供することが求められる．しかし，製品構成案を検討する際に，試行錯誤による繰り返し作業が発生してしまうと検討工数・期間が増加する．

そこで，本研究では，企画・構想設計の期間短縮を目的として，製品構成案を導出する際の試行錯誤による繰返し作業を低減可能な設計探査技術を開発する．

2　企画・構想設計における課題

原製品構成案の設計は，要求仕様を満足するように製品を構成する複数の設計パラメータの値を決定することで行われる．現状，設計ツールを用いて設計パラメータの値を試行錯誤しながら決めていることが多いが，設計パラメータ数が多いと検討に時間を要してしまう．

このような課題に対して，部品の組合せパターンを決めておき，顧客の要求仕様に応じてどの組合せパターンがよいかを選択可能な，コンフィグレータルールエンジンを搭載したツールであるコンフィグレータが開発されている(1)．コンフィグレータでは，要求仕様に対する見積もり案を素早く提供することが可能であるが，新製品の設計や仕様の構成変更が入ると，コンフィグレータの内容も変える必要がある．さらに，コンフィグレータで選定した見積り案の精度が低い場合，シミュレーションによる性能評価を行う必要があり，設計パラメータ値の決定に時間を要してしまう．

上記のような課題に対して，設計パラメータが取り得る値をシミュレーションにより網羅的に算出しておき，要求仕様と設計パラメータの組合せを人工知能の一つである機械学習により覚えておくことで，新規の要求仕様に対する設計パラメータを高速に探査する手法が有効であると考える．

3　機械学習による製品構成案予測提示技術

受注型製品の一つである遠心圧縮機の見積り設計を対象に，機械学習とシミュレーションを用いた，製品構成案の予測提示機能について検討した(2)．遠心圧縮機は，吸入口から吸入したガスなどの気体を，インペラを通じて遠心力を利用して圧縮し，吐出口に排出する機械である(3)．顧客から要求仕様が来たときに，圧縮機の運転条件を満たす性能の製品構成案を検討し，短期間で顧客に提示することが求められる．例えば，要求仕様として，吸入圧力，吸入温度，吐出圧力，吐出温度，流量が与えられたときに，これらを満たす圧縮機の構成，例えば，ケーシングの型，回転数などのパラメータを決定する必要がある．性能評価シミュレーションツールにより求めた，仮想的な製品構成案を蓄積し，機械学習の一種である多層ニューラルネットワークを用いて学習を行った(4)(5)．処理の流れを図1に示す．

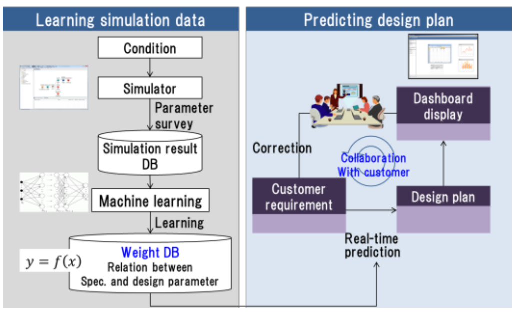


図1. シミュレーションデータを活用した設計探査のプロセス

この学習結果を用いて，要求仕様に対する製品構成案を予測し，精度を検証した．多層ニュ

ーラルネットワークによる予測提示では，仮想的な製品構成案に近い設計パラメータを回帰することで算出することとした．仮想的な製品構成案の作成においては，吸入圧力，吐出圧力，吸入温度，流量を入力とし，回転数の関係を出力とした．

学習繰返し回数を 1～10,000 回まで変化させたときの，運転時の定格回転数における予測値と実際の値との相対誤差率(%)の変化を図 2 にプロットした．学習回数が増加するにつれ，誤差が低減されるのが分かった．学習回数を 1,000 回と 10,000 回とした時の誤差率はそれぞれ 0.92%, 0.73%となった．この時の予測時間については 32 秒となり，機械学習により設計パラメータを高速に予測できる見通しを得た．

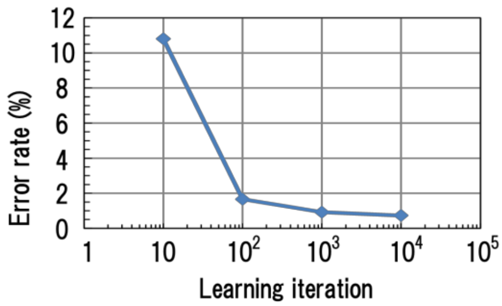


図 2. 学習回数に対する相対誤差の変化

4　結言

顧客からの要求仕様に合致した製品構成案を短期間で検討することを目的として，機械学習の一手法である多層ニューラルネットワークを活用して，要求仕様と製品構成案の関係を表す設計空間を学習する方式を検討した．
従来，複数の設計ツールを繋ぐ性能評価シミュレーションを用いて，最初に計算条件を設定すると計算を実行できるようにした．また，シミュレーションにより求めた製品構成案のデータを用いて，要求仕様と設計パラメータの関係を学習可能なシステムを構築することで，高速に設計案を提示できることを確認した．

参考文献

[1] 城山孝二，原島一郎，パラメータネットワークモデルによるコンフィグレータの開発，機械学会年次大会講演論文集，vol. 4，(2009)，pp. 197-198.

[2] 片岡一朗，張子賢，野中紀彦，製品設計空間の機械学習技術の開発，日本機械学会最適化シンポジウム講演論文集，(2016).

[3] 舩橋茂久，岩瀬拓，平舘澄賢，深谷征史，電力・産業機械から家電製品にわたるシステム製品設計を支える流体解析基盤技術，日立評論，vol. 94，No. 4 (2012)，pp. 324-325.

[4] AWang, M.，Xiao, T.，Li, J.，Zhang, J.，Hong, C. and Zhang, Z.，Minerva: a scalable and highly efficient training platform for deep learning, NIPS 2014 Workshop，(2014).

[5] Miskuf, M. and Zolotova, I.，Comparison between multi-class classifiers and deep learning with focus on industry 4.0, Proc. of the 28th International Conference 2016 Cybernetics & Informatics，(2016).

機械学習による構造解析のためのデータ設計

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

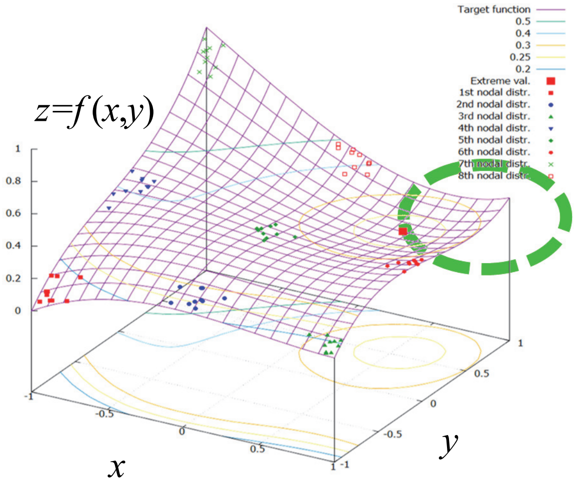
1 緒言

機械学習を援用して評価困難であった現象に対して適用し成果を上げている[1]．一方で，設計目的でCAEの代替モデルとして解析時間を削減する試みが進められている．しかし，物理現象を表すパラメータが分かっているにも関わらず，どのようなデータを準備してどのように学習させればよいか依然不明なままである．材料設計や数値流体力学の分野ではそもそも膨大なデータを扱うため機械学習との親和性が良い事例が多く報告されている[2]．本研究では，代替モデルの構築を作るために必要な学習データの拡張方法について検討する．

2 ニューラルネットワークの補間（補外）能力の比較

学習に適したデータとはどのようなものか明確な回答を示した例はない．データは問題依存で，学習を実際に行ってみたときにはじめてアルゴリズムやデータの量などの問題点が理解できる．つまり，ある程度の試行錯誤が必要であると理解されている．特徴量の学習に極めて有効である Convolutional Neural Network (以下 CNN)を工学問題へ適用するためには特徴が現れるようなデータに改める必要がある．図.1 に示すような 2 変数の多項式は,CNN の学習はできない．この関数では，入力が 2 変数だけとなり特徴量の学習ができない．一方で，現象や必要なパラメータが実際どのような変化をするかわからないこともある．例えば，10 以上の設計パラメータが存在した時に，具体的にどのような関数で近似できるか調べることは困難である．一般的には重回帰分析を実施してその妥当性を検討するが，線形モデルでは全体の傾向を表すだけとなりとても停留点を見つけ出す目的には利用できない．

図.1 は停留点を 1 つだけもつ多項式である．この関数は $x, y, x^2, xy, x^3, y^3, xy^2, x^2y$ の項を持つ．この関数を僅かな点 (図.1 の 8 か所を中心に±0.1 の範囲に 10 点×8 か所=80 点) で $f(x, y)$ の予測が可能かどうかを調べる．比較には全結合された Multi-Layer Perceptron(以下 MLP)と CNN である．本問題は回帰問題に分類される．



$$f(x, y) = \frac{4x^3 + (8y + 2)x^2 - (4y^2 - 8y + 5)x + 10y^3 - 5y + 14}{42}$$

図.1 学習対象の分布と学習に用いたオリジナルデータ点（オリジナルデータは図中の 9 か所に正規分布に従う形で各箇所 10 点，オリジナルデータ 90 点に対して，1000 倍のデータオーギュメント実施）

3 CNN のためのデータ設計（Image-based parameter）

CNN ではフィルタリングをおこない特徴量を学習する．特徴量を抜き出せるだけのベクトルまたはマトリックスを入力データとして準備する．図.2 に CNN のための入力データ拡張の考え方を示す．2 変数の関数のため Neural Network(以下 NN)により補間することを考えると 2 入力，1 出力となる．図.3 に本稿で用いた MLP の構成を示す．しかし，具体的に何次の項が含まれているかどうか分からないが，組み合わせの可能性としては図.2 に示すような可能性が考えられる．このマトリックスを CNN の入力データとみなして特徴量の抽出が期待できる．補間対象とする関数は 8 つの項をもつ多項式であるが，意味のない項は特徴量として学習されないため特に削除しない．また一般的な工学問題を考えたとき，このような項の組み合わ

せが事前には分からない．そのため，図. 2 をそのまま入力として実験を行った．図. 3 に MLP，図. 4 に CNN の構成を示す．なお，この構成を定めるためにハイパーパラメータの調査は実施しており最もよい学習を行う構成をここでは示している．

	1	x	x^2	x^3	x^4
1	1	x	x^2	x^3	x^4
y	y	xy	x^2y	x^3y	x^4y
y^2	y^2	xy^2	x^2y^2	x^3y^2	x^4y^2
y^3	y^3	xy^3	x^2y^3	x^3y^3	x^4y^3
y^4	y^4	xy^4	x^2y^4	x^3y^4	x^4y^4

図 2. Image-based parameter の構成方法

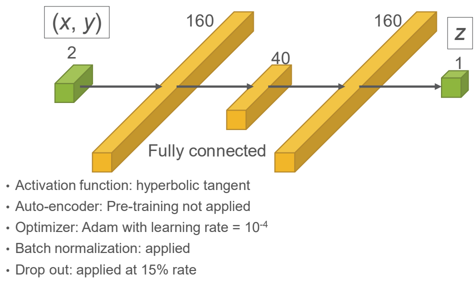


図 3. Multi-Layer Perceptron の構成

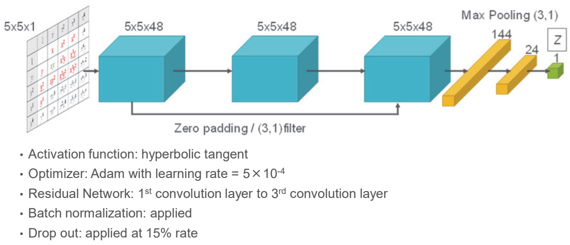


図 4. Image-based parameter を用いた Convolutional Neural Network の構成

4 結果および考察

図 5. に正解の分布（格子）と予測値（丸マーカー）を示す．格子の交点上にマーカーがあれば予測が正しく行われた理解できる．MLP 全体で予測精度が悪い．図 6. から損失は収束しているように見えるが，学習結果は滑らかな曲面を再現できていない．一方で CNN では損失は収束の傾向を示し，検証データによる誤差も MLP より平均で 1/10 程度である．また，補外領域にあたる領域(x=1, y=1)では，徐々に予測の誤差が減少している．近傍領域の学習データの損失は減少していなくても検証予測の精度が高まる．つまり補外領域においては十分な学習を実施

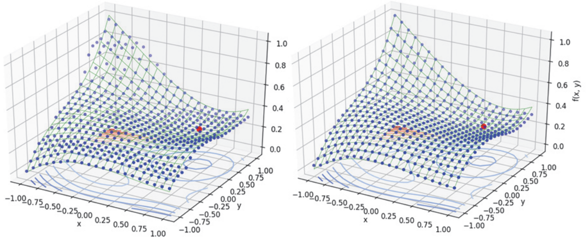


図 5. MLP(左)と CNN(右)の予測結果 (MLP では x=-1,y=1 の近傍で予測できていない，一方で x=1,y=1 の補外領域ではそれらしい値の予測はしているが停留点が求められるか不明，また，CNN では全域に渡って高い予測精度をしめしており，補外領域においては過小予測をしているが極値の予測は可能な程度の補間・補外が可能である)

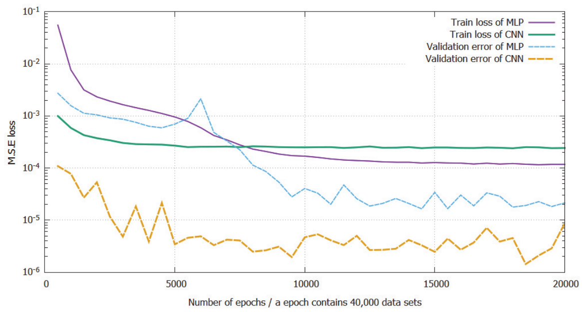


図 6. 損失および検証データの二乗和誤差

することにより補外領域の精度向上につながる．なお，補外領域のデータはないため，一般的に損失からでは予測精度の検討はできない．

5 結言

CAE の結果を念頭に置けば $1/x^3$ などの変数を入力として与えれば例えば曲げ応力の学習が促されロバスト性が高まることが期待される．Image-based parameter により MLP より性能に優れる CNN の工学問題の回帰問題へ適用する方法を示した．

参考文献

[1] 和田義孝, 深層学習によるき裂進展評価～計算力学サロゲートモデルの構築～，保全学, Vol. 18-2, 2019, 11-15.
[2] E. Kaiser, et al, Sparse identification of nonlinear dynamics for model predictive control in the low-data limit, Vol. 474, Issue 2219, Proc. of the Royal Society A, 2018.

図形処理における近似算法による構造厳密性の保証

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

図形処理において，図形の構造情報を求める事に特化して，近似算法でも厳密性が確保する枠組みを提案する．要所以外では必要な近似精度も低い．計量情報は後から必要に応じて求めることで，精度と速度を両立できる．

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]. 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．ここでは，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る図形処理を考える.

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, 生成元を点から，線分や円，Bezier 曲線や NURBS 曲線のようなより一般の曲線にした勢力圏図の構成を中心に，近似アルゴリズムを，生成元を点列で近似した点の勢力圏図構成算法として，厳密解を求める方法を例示する．また，その周辺の図形処理とともに，近似算法による構造厳密性をもつ図形処理が，図形処理の枠組みとして機能し，ある処理が他の処理の部品として使えることを示す.

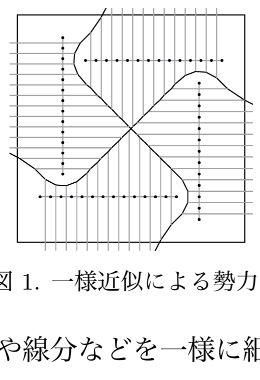


図 1. 一様近似による勢力圏図

まず，円や線分など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．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部分に限られる．そのような部分は少ないため高速性の確保が期待できる.

3 本研究の基本近似算法

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.

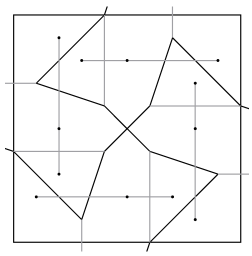


図 2. 構造的に正しい勢力圏図

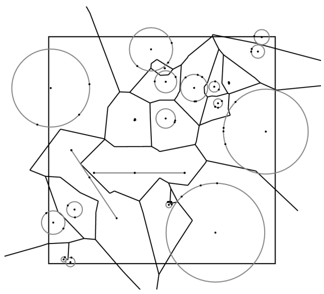


図 3. 円と線分の勢力圏

初期近似においては, 生成元を数点で近似する．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　構造厳密性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，円などの構成中の勢力圏図に共通した局所テストとして，生成元 g_1, g_2 の領域が辺 e で隣接し，e は生成元 g_1, g_3, g_2, g_4 により時計回りに囲まれるときに，g_1, g_2 と共有点をもつ円で，g_3, g_4 が外部にあるようなものがとれることを確認するテストである．このテストは局所的なものであるが，すべての辺 e がこのテストを通過 (図 4) すれば，大域的に勢力圏図の構造は正しいといえる．

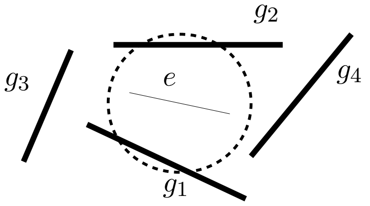


図 4. 局所テストを通過した辺

辺 e がこの局所テストに通過しない場合は，e の周り生成元の近似精度が足りないといえる．そこで，点の数を増やして近似精度を上げる．点の数の増やし方は，任意性があるが，e のテストに関係しない部分については近似精度を上げる必要はない．

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．生成元が円や線分の時には，点の追加方法には容易で効率的なものがあるがより一般化して，Bezier 曲線や NURBS の場合には，現状では効率が落ちるような点の追加方法しか見出していない．点の追加方法の効率化は今後の課題である．生成元としていろいろな曲線が混在した勢力圏図の構成においては，近似された生成元は点列として統一されているものの，点の追加方法は元の生成元の種類で個別処理される．これは近似算法を採用する意義を減じかねない問題である．この解決も今後の課題である．曲線の一般化を進めて，NURBS 曲線を扱えるようにすれば，線分も円も Bezier 曲線も，NURBS 曲線の一種として処理できる．つまり処理の統一化が果たせる．

6　算法の部品としての円と Bezier 曲線や NURBS 曲線との交差判定

勢力圏分割の構成において，生成元を Bezier 曲線や NURBS 曲線に一般化し，それらを点列近似して，構造情報が正しい勢力圏図を構成する際には，辺の局所テストとして，これらの曲線と円の交差判定を厳密に行う必要がある．ここで行う厳密判定は交差の有無の判定であるから，構造情報を厳密に求めることともいえる．Bezier 曲線，NURBS 曲線とも，制御点を使って，曲線を囲む多角形を得たり，曲線上に点を取り，曲線を囲む多角形とともに分割することができる．囲む多角形を曲線の近似として利用し，曲線の交差判定を多角形の交差判定に帰着させることができる．判定の結果は，交差する・しない・近似不足であり，近似不足の場合，曲線上の点で曲線を分割して精度を上げる．算法の部品が同じ枠組みの図形処理として成立する．

7　近似算法で構造厳密性が保証できる図形処理のまとめ

本手法で構造厳密性を保証するためには，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．
少なくとも，生成元を広範囲に一般化した勢力圏図の構成や，Bezier 曲線，NURBS 曲線，円の交差判定はこの条件を満たす．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．

参考文献

[1] 杉原厚吉, 計算幾何学, 朝倉書店, 2013.
[2] 今井敏行, 渡辺秀臣, 点 Voronoi 図による線分 Voronoi 図の位相的に正しい近似構成法, 日本応用数理学会 2005 年度年会講演予稿集 (2005), 206–207.

CGの形状操作技術を利用した有限要素メッシュの変形

松本 隆希[1]，小林 美蘭[1]，藤田 宜久[1]，仲田 晋[1]
[1]立命館大学
e-mail: is0328ff@ed.ritsumei.ac.jp

1 概要

自動車の衝突模擬実験には有限要素法がよく用いられている．有限要素法はシミュレーションの前段階として，解析対象を要素に分割する必要がある．このとき，人体モデルの姿勢や体型の変更に伴って，メッシュの形状も変化する．また，より多くの姿勢や体型を再現するには，高速に人体モデルを変形する必要がある．

本研究の目的は，ある形状の有限要素メッシュを他の形状に沿って高速に変形することである．つまりある形状(変形前)のメッシュの情報と他の形状(変形後)の境界の情報を入力とした時，変形前の内部のメッシュを転写して変形後のメッシュを出力する問題を考える．ここでは以下の要求を設定する．

1) 変形後のメッシュは変形前のメッシュの節点を移動したものであり，節点数や接続は変更しない．
2) 各要素の変形やアスペクト比の劣化を抑えるように変形後メッシュを決定する．

この問題を解決するために我々はコンピュータグラフィックスにおける高速変形の技術を活用する．高速変形の技術は数多く提案されているが，ここでは制御点の移動に応じた変形形状を得ることができる As-Rigid-As-Possible Shape Manipulation(ARAP)法[1]，および制約条件に応じた時系列変形をリアルタイムで計算できる Position Based Dynamics(PBD)法[2]の 2 つを採用し，それぞれ前述のメッシュ変形問題に応用することで，高速メッシュ変形の実現を目指す．なお本論文では 2 次元の問題として記述するが，3 次元への拡張も可能である．

2 提案手法

変形前のメッシュの境界節点を$\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_m$，変形前のメッシュの内部節点を$\boldsymbol{x}_{m+1},\cdots,\boldsymbol{x}_n$，変形後のメッシュの境界節点を$\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_m$とする．この入力に対し，変形後のメッシュの内部節点$\boldsymbol{x}'_{m+1},\cdots,\boldsymbol{x}'_n$を適切に決定することがここでの問題である．なお，ここでは簡単のため 3 角形要素からなる 2 次元のメッシュに限定する．

ARAP 法はメッシュのいくつかの節点を制御点とし，ユーザが操作する制御点に応じて他の節点を適切に追従させることで対話的な形状変形を実現している．節点位置を決める問題は一般には非線形の大変形問題として記述されるが，ARAP 法ではこれを 2 段階の線形最小 2 乗問題として定式化することで高速化が図られている．また，ARAP 法の最小 2 乗問題には各要素の大きなひずみを抑制する効果が含まれているため，本研究での要求の 1 つであるアスペクト比の劣化を抑える効果が期待できる．m個の境界節点を制御点とすることで変形後メッシュの内部節点座標を決定することが可能となる．なお，最小 2 乗問題は疎行列を持つ線形問題として記述できるが，ここでは簡単のため密行列用の QR 分解を用いる．

PBD 法は強制変位や辺の長さといった複数の制約をメッシュに設定し，微小時間ごとに制約を満たす節点位置を求めることで変形物体の運動を決定する手法である．非線形連立方程式として記述される制約条件の設定次第で弾性体や布，その他柔軟物体の表現が可能である．本研究では m 個の境界節点に強制変位の制約を，すべての辺に長さ維持の制約を，すべての要素に体積維持の制約を設定することで内部節点の移動先を計算する．強制変位制約により境界節点を移動させる効果が，辺と要素の制約により要素の大きなひずみを防ぐ効果が期待される．この問題は内部節点座標を未知数とする非線形方程式として記述され，[2] と同様にガウスザイデル法で解を得ることとする．

本来この 2 つの手法は微小時間ごとにメッシュを更新させる手法であるが，本研究での問題に適用するために変形前と変形後の 2 つの状態のみを扱うこととし，結果的に 1 回の更新で最終的な節点位置を得ることとなる．

3 結果

本研究では，2 つの手法を用いてメッシュを変

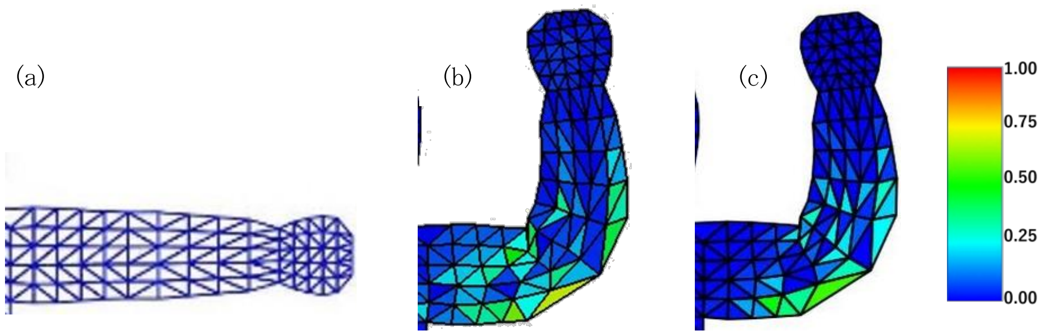


図 1. 人型メッシュの腕を曲げる変形を行った結果. (a)は元のメッシュ, (b)は PBD 法を用いた曲げ変形, (c)は ARAP 法を用いた曲げ変形

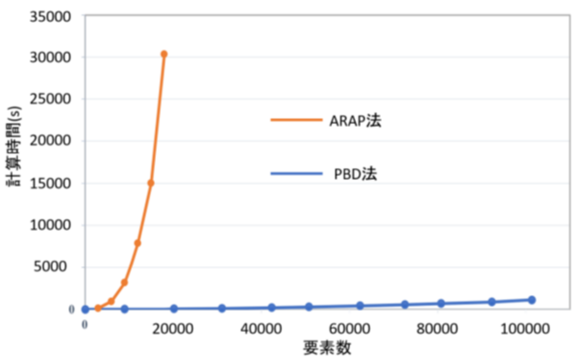


図 2. 要素数と計算時間の関係

形させ，各要素の形状をどれだけ維持できているか，そして変形にかかる速度を評価した．今回の実験では，2 次元の 3 角形要素でできた人型のメッシュの肘の部分を曲げる変形を行った．メッシュを変形させた後，各要素がどのくらい維持できているのかを評価するため，アスペクト比の相対誤差を用いた．

図 1 に変形前のメッシュ，PBD 法による変形後のメッシュ，ARAP 法による変形後のメッシュを示す．各要素の色は変形前後におけるアスペクト比の相対誤差を表す．この例では一部でアスペクト比の大きな変化は生じているものの，全体としては妥当なメッシュが得られていると考える．なお，ARAP 法は比較的多様な変形で妥当なメッシュが得られたが，PBD 法は内部節点がメッシュの外に位置してしまうといった不安定なふるまいが多く観測された．

続いて，メッシュの要素数を増やして変形させ，各要素数の変形にどのくらい時間がかかるのか計測した．図 2 は横軸をメッシュの要素数，縦軸を変形にかかる時間としたときの各方法のグラフである．グラフより，ARAP 法は要素数が増えると計算時間が大幅に増えていくことが分かった．一方，PBD 法は要素数が増えても計算時間が大きく増えることはなかった．今回 ARAP 法の線形最小 2 乗問題は密行列のソルバーを利用しているために要素数に応じて計算時間が大きく増加する結果となっている．一方，PBD 法ではガウスザイデル法による反復で解を求めており，結果的に要素数に対する計算量の増加は少なかった．

4　まとめ

コンピュータグラフィックス分野での変形技術をメッシュ変形の問題に応用する試みとして ARAP 法と PBD 法の適用方法を提案した．ARAP 法は高い安定性を示す一方で計算時間がかかるという結果となった．PBD 法はその逆で，高速に変形できるものの変形によってはメッシュの各要素が崩壊するおそれがあることが観測された．今後は疎行列ソルバーの導入による高速化や制約条件の見直しによる安定化といった改良，あるいは他の変形技術の活用により高速性と安定性を両立したメッシュ変形の実現が考えられる．

参考文献

[1] T. Igarashi, T. Moscovich and J. F. Hughes, As-Rigid-As-Possible Shape Manipulation, ACM Transactions on Graphics, Vol. 24 (2005), 1134-1141.

[2] M. Muller, B. Heidelberger and M. Hennix, Position Based Dynamics, Journal of Visual Communication and Image Representation, Vol. 18 (2007), 109-118.

交通シミュレーションの機械学習

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

近年の交通インフラやセンサ技術の発達により、交通情報の取得が容易になったことで、交通流予測問題の研究が盛んに行われている。交通量や車両の速度、交通規制情報などがリアルタイムに収集され、これらのデータを蓄積しビッグデータとして活用することが可能となった[1, 2]。また、計算機環境の発達もあり、ビッグデータを利用した大規模なノンパラメトリック解析による交通流予測の精度向上が目覚ましい成果を上げている[3, 4]。

交通流予測問題とは、既知の交通流データから、未知の交通流データを予測する問題である。この問題は、交通流の時間的・空間的な依存性のために解決の困難な問題である[4, 5]。時間的な依存性は、短期的なものと長期的なものに分けられる。交通流は時間的に独立した現象ではなく、現在の状態は以前の状態の影響を強く受ける。これが短期的な時間依存性である[6]。一方、時間帯や季節や曜日などの、長期的な時候的要素により様々なスケールの周期的な特徴を有する場合が多い。これが長期的な時間依存性である[7]。さらに、時間的な依存性とは別に、ある箇所で渋滞が発生した場合に、その上流部や下流部の周辺領域にまでその影響が伝播していくといった空間的な依存性も存在する[6]。これらの依存性の存在が交通流予測問題を複雑にしており、依存性を考慮したモデル化が予測精度を向上させるに重要である。交通流予測問題は既に多くの研究がなされており、その予測精度は高まってきている。しかし、既存研究の多くはデータの取得、予測が比較的容易な平常時の交通流を対象にしたものであり、データの取得が難しい特殊な特性を持った交通流の予測はこれまでほとんど行われていない。

そこで本研究では、グラフ畳み込み RNN (Recurrent Neural Network) を利用し、交通事故発生状況下での交通流予測を行う。グラフ畳み込み RNN は、RNN による短期的・長期的な時間依存性のモデル化だけでなく、グラフ畳み込みにより空間的依存性をモデル化し、道路ネットワーク上での交通現象の伝播を学習する。ここで、交通事故は短期的な事象であり、かつ、空間的に強い依存性を持った現象であるため、グラフ畳み込みによる影響の伝播が効果的であると考えられる。一方、交通事故は特殊な事象であるため、現実世界において深層学習モデルを十分に収束させるほど多量のデータを収集することは困難である。これを解決するため、ミクロ交通流シミュレーションを利用し、擬似的に交通事故が発生したシナリオでの交通流の再現を繰り返し、データを多量に作成することとする。

2　手法

本研究では、グラフ畳み込み RNN により交通事故の影響の伝播を考慮したモデルを構築し、そのモデルによる予測の定量的・定性的な評価を行う。特殊な事象である交通事故を評価するため、マルチエージェント交通流シミュレーションを用いた教師データを作成する。具体的な対象を日本の地方都市である岡山市の CBD(Central business district)とし、車両感知器は片側 2 車線以上の道路全てに配置した。ネットワークの諸元は交差点数 330、道路リンク数 339、車両感知器数 206、ネットワークサイズは 3km 四方である。また、交通需要は、岡山県警による交通量調査に基づき推定を行ったものを利用した。交通流データは 5 分毎のものとし、5 分毎に各感知器における車両の平均通過速度とタイムスタンプ、交通事故の有無を取得した。入力シーケンスデータ長、出力シーケンスデータ長をともに 12 とした。5 分毎のデータであることから、入力データと出力データともに 1 時間分のデータとなり、各モデルでは 1 時間分の交通流データから直後の 1 時間分の交通流データを予想する。平均車両速度は、学習に用いる際には z-score 正規化が施される。z-score 正規化とは、データセットを平均 0、標準偏差 1 のデータセットに変換する正規化手法である。

比較のため、HA (Historical Averages)、LSTM (Long Short-Term Memory)、X-LSTM (eXtended LSTM)と、グラフ畳み込みを行うDCRNN (Diffusion Convolutional RNN)、X-DCRNN (eXtended DCRNN) の 5 つの手法によって交通流予測を行う。ここで、X は入力するデータに、交通事故情報の特徴量を加えたモデルである。各モデルにおいてハイパーパラメータの調整を行い、数値実験を行った。

3 結果

図1に交通事故が発生した道路リンクでの観測交通流と予測交通流を示す。LSTM、X-LSTM では事故による交通量の急激な減少を捉えきれていないが、DCRNN、X-DCRNN は十分な予測精度を持っていることがわかる。表1に事故箇所下流での予測誤差をまとめる。

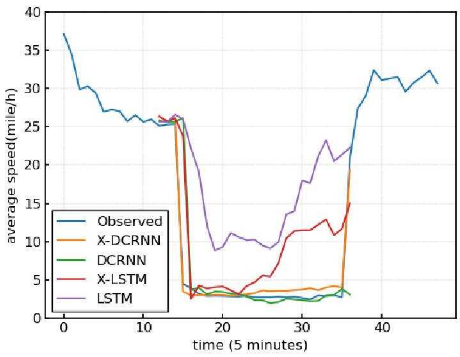


図 1. 交通事故が発生した道路リンクでの観測交通流と予測交通流

表 1. 事故箇所下流での予測誤差

Model	MAE	RMSE
LSTM	9.87	11.9
X-LSTM	15.3	17.5
DCRNN	3.81	6.33
X-DCRNN	3.68	6.39

4 おわりに

本研究では、データの取得が難しい特殊な状況を想定した交通流予測を目的とし、特に、グラフ畳み込みによる影響の伝播の効果が大きいと思われる交通事故を取り扱い交通流予測を行った。深層学習モデルの学習には多量の訓練データが必要となるが、現実世界において交通事故が発生した状況下での交通流データを十分に学習が収束するほどに用意することは難しい。そこで、交通シミュレータにより擬似的に交通事故が発生したシナリオの交通流を再現し、多量のデータを作成した。このデータを使用し、交通予測に用いられるさまざまなモデルの学習を行い、各モデルの予測精度を検証した。結果としてグラフ畳み込みを用いることにより、道路ネットワーク上への交通事故の影響の伝播が適切に学習され、LSTM、X-LSTM に対し交通予測の精度が向上することを確認した。

参考文献

[1] Li Li, Xiaonan Su, Yanwei Wang, Yuetong Lin, Zhiheng Li, and Yuebiao Li., Transportation Research Part C: Emerging Technologies, Vol. 58, pp. 292-307, 2015.
[2] Shi, Qi, and Mohamed Abdel-Aty., Transportation Research Part C: Emerging Technologies, Vol. 58, pp. 380-394, 2015.
[3] Yisheng Lv, Yanjie Duan, Wenwen Kang, Zhengxi Li, and Fei-Yue Wang, IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, Vol 16, No. 2, pp. 865-873, 2015.
[4] Li Zhu, Fei Richard Yu, Yige Wang, Bin Ning, and Tao Tang, IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, Vol 99, pp. 1-16, 2018.
[5] Min, Wanli, and Laura Wynter, Transportation Research Part C: Emerging Technologies, Vol. 19, No. 4, pp. 606-616, 2011.
[6] Treiber, Martin, and Arne Kesting. Traffic Flow Dynamics: Data, Models and Simulation. Springer, 2013.
[7] Billy Williams, Priya Durvasula, and Donald Brown, Transportation Research Record: Journal of the Transportation Research Board, No. 1644, pp. 132-141, 1998.

エボラ出血熱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
e-mail : katou.k.ai@m.titech.ac.jp

1　導入

2014 年、西アフリカ地域でエボラ出血熱が大規模流行を引き起こし 1 万人以上が亡くなった。2018 年、コンゴで感染が拡大し WHO は今なお慎重な対策を行っている。強い感染力、高い致死率を持つ「エボラ出血熱」について、数理モデルを用い予防対策を検討する。
まずエボラ出血熱の数理モデルを新しく提案する。ここでは感染の確率的変動を加味し、確率微分方程式として表す。その後解の存在と一意性、安定性を検討し、モデルの理論的な妥当性を示す。次に流行を沈静化させるためのワクチン戦略を最適制御問題として求める。ここでは金融分野などでしばしば用いられる HJB 方程式を用いて問題を偏微分方程式の形で表し、それを選点法により数値的に解析する。
同病については様々なモデルが提案されているが、本研究ではワクチンを用いた対策モデルである点、さらに確率変動を踏まえたモデルである点に新規性が見込まれる。また、最適なワクチン戦略を数値的に導くことができた点は数理モデル分野への大きな貢献となる。

2　数理モデル

本研究ではエボラ出血熱に合わせた確率的数理モデル (確率 SVIR モデル) を提案する。フィルター付き完備な確率空間 $(\Omega, \mathscr{F}, [\mathscr{F}_t]_{t\geq t_0}, \mathbb{P})$ 上で、一次元ブラウン運動 $W(t)$ が定義されているとする。
確率 SVIR モデルにおいては人口を 4 種類に分割する。感受性者 (S)、ワクチン接種者 (V)、感染者 (I)、免疫保持者 (R) の 4 種類である。ここで β を接触頻度と感染率の積（伝達係数と呼ばれる）、γ を回復率とする。また、μ を自然出生率、死亡率、δ を発症後の死亡率、ν を抗体の消失率とする。$\alpha(t)$ 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し、ρ をワクチンの効果 ($\rho = 1$ の時ワクチンの効果はない) とする。この時、提案モデルのダイナミクスは次のようになる。

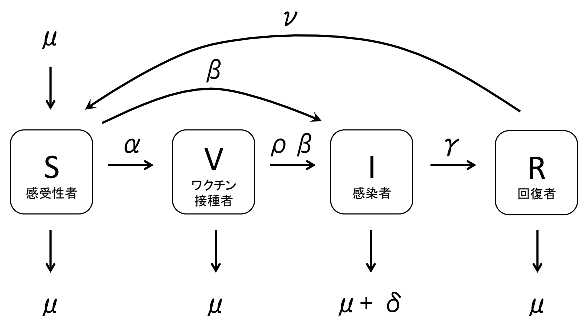


図 1. 確率 SVIR モデルのダイナミクス

$$\begin{cases} dS_t = (\mu N_t + \nu R_t - \beta \frac{I_t}{N_t} S_t - \alpha_t S_t - \mu S_t)dt \\ \qquad -\sigma S_t \frac{I_t}{N_t} dW_t \\ dV_t = (\alpha_t S_t - \rho\beta V_t I_t - \mu V_t)dt \\ \qquad -\rho\sigma V_t \frac{I_t}{N_t} dW_t \\ dI_t = (\beta S_t \frac{I_t}{N_t} + \rho\beta V_t \frac{I_t}{N_t} - \gamma I_t - (\mu+\delta) I_t)dt \\ \qquad +\sigma(S_t + \rho V_t) \frac{I_t}{N_t} dW_t \\ dR_t = (\gamma I_t - \nu R_t - \mu R_t)dt \end{cases}$$

ここで σ をブラウン運動の影響力、全人口を $N(t)$ で表す。

$$N(t) = S(t) + V(t) + I(t) + R(t)$$

$\alpha(t)$ を定数 α とする時、ワクチンを考慮した基本再生産数は次のように書ける。

$$R_0 = \frac{\beta}{\mu+\delta+\gamma} \frac{\mu+\rho\alpha}{\mu+\alpha}$$

3　解の存在・一意性と安定性

上記確率微分方程式における解の存在・一意性、$\alpha(t)$ が定数である場合の安定性を議論する。

定理 1 確率 $SVIR$ モデルにおいて、一意な正の解 $(S(t), V(t), I(t), R(t))$ が存在する。

定理 2 以下の条件の時、確率 $SVIR$ モデルは平衡点 $(S, V, I, R) = (\frac{\mu}{\mu+\alpha}N, \frac{\alpha}{\mu+\alpha}N, 0, 0)$ に大域的漸近安定する。

$$R_0 + \frac{\frac{1}{2}\sigma^2}{\mu+\delta+\gamma}(\frac{\mu+\rho\alpha}{\mu+\alpha})^2 < 1, \alpha > 4(\mu+\nu)$$

ここで N はある正の定数である。

4　確率最適制御

確率 SVIR モデルにおける最適問題を構築し、その解となる最適なワクチン割合を導出する。初期値 x_0 を持つ目的関数は

$$E_{0,x_0}\left[\int_0^T (\alpha^2(s) + cI(s))ds\right]$$

と表せる。ここで c は重み定数、T は終端時刻である。ある定数 $\bar{\alpha}$ を用いると、最適解の存在する範囲は次のように書ける。

$$\mathcal{A} = \{\alpha(\cdot) : 0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha} \;\; a.s.\}$$

問題 3 効用関数、価値関数を定義する。

$$J(t, x; \alpha) = \mathbb{E}_{t,x}\left[\int_t^T (\alpha^2(s) + cI(s))ds\right]$$

$$U(t, x) = \min_{\alpha \in \mathcal{A}} J(t, x; \alpha)$$

この時、以下の最適なワクチン割合を導出する。

$$\alpha^*(t) = arg \min_{\alpha \in \mathcal{A}} J(x; \alpha(t)) \in \mathcal{A}$$

定理 4 問題 *3* において、U が一回微分可能である時、最適なワクチン割合は以下のように表せる。

$$\alpha^*(t) = \min[\max(0, \frac{1}{2}S(t)(U_S(t) - U_V(t))), \bar{\alpha}]$$

5　数値実験

2014 年に発生したエボラ出血熱の大規模流行の公表データ [2] を用いて、最適なワクチン戦略を行った場合の数値シミュレーションを行う。
準備として一般化モーメント法 [3] を用いて適当なパラメータを推定した。$S_0 = 450, I_0 = 12, R_0 = 2$ を仮定すると以下のようにパラメータが求められた。

$$\beta = 0.2, \gamma = 0.022, \mu = 0.00004,$$
$$\nu = 0.2, \delta = 0.013, \sigma = 0.18$$

上記の値を用いた上で数値シミュレーションを行った。ここで、$U(t)$ を再生核補間を用いた選点法 [4] で近似することにより、近似的に $\alpha^*(t)$ を導出した。最適なワクチン戦略を行った場合の感染者の推移は図 2 に表される。青線はワクチン戦略を行わない場合、オレンジ線は最適なワクチン戦略を行った場合である。また、最適なワクチン割合の推移は図 3 のように表せる。ここでは $\rho = 0.1, \bar{\alpha} = 0.05, c = 0.05$ とおき、人数に対し適切にスケール変換を行っている。
ワクチン割合が最適な場合、目的関数の値は

$$U(0) = 0.152$$

であった。また、ワクチンを一定の値で打った場合、目的関数の値は表 1 のようになる。

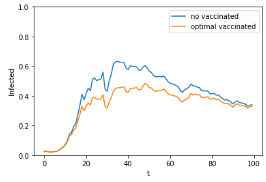


図 2. 感染者の推移

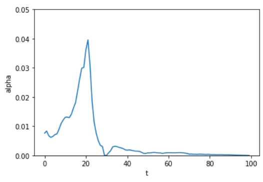


図 3. 最適なワクチン割合

表 1. 目的関数の値

α	0	0.01	0.02	0.03
$J(0)$	0.167	0.156	0.164	0.191

謝辞　本研究の遂行に当たり、指導教官の中野張准教授からは多大な助言を賜りました。厚く感謝を申し上げます。

参考文献

[1] Bernt Oksendal, Stochastic Differential Equations, Springer, 2013.
[2] Amira Rachah and Delfim F.M. Torres, Mathematical Modelling, and Optimal Control of the 2014 Ebola Outbreak in West Africa, Hindawi, Volume 2015.
[3] Lars Peter Hansen, Large Sample Properties of Generalized Method of Moments Estimators, Econometrica,Vol.50, No.4, pp. 1029-1054, 1982.
[4] Yumiharu Nakano, Convergence of meshfree collocation methods for fully nonlinear parabolic equation, Springer, Vol.136, Issue 3, pp 703-723, 2017.

Comparison of the Deterministic and Stochastic Models of Data-Diffusion

Watanabe Itsuki
Waseda University.
e-mail : dynaforce_12.5@akane.waseda.jp

1 Introduction.

We compare the nonlinear deterministic and stochastic models of data-diffusion, which are given by a partial differential equation and a multi-dimensional jump Markov process, respectively.

In 1980, Arnold and Theodosopulu [1] constructed a stochastic model of chemical reaction with diffusion, and compared it with the deterministic version of the model. Blount [2] compared the heat equation and Markov model of random walk on a discrete torus $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, $N \geq 1$ is a positive integer, where particles move only their left and right neighbor, and he clarifies the behavior of the difference between two mathematical models.

In this paper, we focus on the two mathematical models of data-diffusion (see Section 2). First, by the law of large numbers, we show that the difference between the deterministic and stochastic models converges to 0 in probability. Second, we show that the rescaled difference weakly converges to the certain process which has the variance as a variables.

2 The deterministic model.

We consider the following reaction-diffusion equation, which was proposed by Hutson et.al [3],

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}u(t,r) = \displaystyle\int_0^1 u(t,r')dr' - u(t,r) + R\left(u(t,r)\right), \\ u(t,0) = u(t,1), \\ 0 \leq u(0,r) < \rho < \infty. \end{cases} \tag{1}$$

where $R(x) = b(x) - d(x) = b_1 x - d_1 x + b_0$ and $b_1, b_0, d_1 \geq 0$ with $b_1 \leq d_1$. This function $b(x)$ and $d(x)$ represent birth and death rate of data particles. The existence and uniqueness of its solution was proved by Bates and Zhao [4]. This equation models random walk on torus $[0,1]$ that can move everywhere not only right and left. That is, this model can be considered as an uniform data-diffusion model on complete graph.

3 The stochastic model.

Given the network size $N \in \mathbb{N}_{\geq 1}$ and the size of data particles $l > 0$. Let $n_k(t)$ be the number of data in k-th site on $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ at time t and let $n(t) = (n_0, \cdots, n_{N-1}(t))$ be the state of multi-dimensional Markov chain at time t. For $r \in [kN^{-1}, (k+1)N^{-1})$, we define the stochastic analogue by

$$X^N(t,r) = n_k(t)l^{-1},$$

which has the transition rates ;

$$\begin{cases} n \to n_{(i:+1,k:-1)} = (\cdots, n_i+1, \cdots, n_k-1, \cdots) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{at rate } n_k N^{-1}, \\ n \to n_{(k:+1)} = (\cdots, n_k+1, \cdots) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{at rate } lb(n_k l^{-1}), \\ n \to n_{(k:-1)} = (\cdots, n_k-1, \cdots) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{at rate } ld(n_k l^{-1}), \end{cases}$$

for $i \in \{0, 1, \cdots, k-1, k+1, \cdots, N-1\}$. The following result is obtained as in [2] ;

Lemma 1.

$$n_k(t) - n_k(0) - \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}(n_i(s) - n_k(s))ds - \int_0^t lR(n_k(s)l^{-1})ds \tag{2}$$

is mean 0 martingale.

This formula (2) is the amount of data particles change accumulated in $[0,t]$ at k-th site.

By Lemma 1, there exists a martingale $Z^N(t)$ satisfying

$$X^N(t) = X^N(0) + \int_0^t I_N X^N(s)ds + \int_0^t R(X^N(s))ds + Z^N(t),$$

where $I_N f(r) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f(r + iN^{-1}) - f(r)$ for $f \in H^N$ and

$$H^N = \left\{ f : [0,1] \to \mathbb{R} \,\middle|\, f(r) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k \mathbb{1}_{[kN^{-1},(k+1)N^{-1})}(r) \right\}.$$

4 The limit by the law of large numbers.

We compare the solution $u(t)$ of equation (1) and stochastic analogue $X^N(t)$ by the law of large numbers in a particular scaling regime.

Theorem 2. *Assume*
(i) $||X^N(0) - u(0)||_\infty \to 0$ *in probability as* $N \to \infty$,
(ii) $l = l(N)$ *s.t.* $\lim_{N\to\infty} \log(N/l) = 0$.
Then, for any $T > 0$,

$$\sup_{[0,T]} ||X^N(t) - u(t)||_\infty \to 0 \quad \text{in probability} \quad \text{as } N \to \infty.$$

(*Sketch of the proof.*) Consider the space-discretized version of equation (1) and let u^N be the solution of this equation. The methods of subsolution and supersolution (cf. Franco and Groisman [5]), for any $T > 0$, gives

$$\sup_{[0,T]} \|u(t) - u^N(t)\|_\infty \le C(T,R)N^{-2}. \tag{3}$$

On the other hand, Gronwall's inequality for $X^N(t) - u^N(t)$ gives

$$\begin{aligned}&\sup_{[0,T]} \|X^N(t) - u^N(t)\|_\infty \\ \le&\{\|X^N(0) - u^N(0)\|_\infty + \sup_{[0,T]} \|Y^N(t)\|_\infty\} \\ &\times \exp((d_1 - b_1)T), \quad (4)\end{aligned}$$

where $Y^N(t) = \int_0^t e^{I_N(t-s)}dZ^N(s)$. By (3) and (4), after showing that $\sup_{[0,T]} \|Y^N(t)\|_\infty \to 0$ in probability as $N \to \infty$, we obtain the results.

5 The limit in distribution.

Let $U^N(t) = \sqrt{l}(X^N(t) - u(t))$ and let $M^N(t) = \sqrt{l}Z^N(t \wedge \tau)$. Set the operator A and A_N by $A(\cdot) = \int_0^1 (\cdot)dr + (b_1 - d_1)(\cdot)$, $A_N(\cdot) = I_N(\cdot) + (b_1 - d_1)(\cdot)$. By a straightforward estimate, we have;

Lemma 3. *The sequence of stochastic processes* $\{M^N(t)\}$ *is relatively compact on* $D_{L^2}[0,\infty)$, *where* $D_E[0,\infty)$ *is the space of cádlág functions from* $[0,\infty)$ *into a metric space* E.

By Lemma 3, there exists a stochastic process M and a subsequence $\{N_j, j \in \mathbb{N}\}$ such that $M^{N_j} \to M$ in distribution as $j \to \infty$ where

$$Var(M) = \int_0^t \{(b_1 + d_1)u(s) + \langle u(s), 1\rangle\} ds.$$

The following is the main results in this section.

Theorem 4. *Assume*
(a) $\frac{l}{N} \to 0$, *(b)* $Nl \to \infty$,
(c) $U^N(0) \to U_0$ *in distribution on* L^2, *where* U_0 *is independent of* M.
Then
$U^N(t) \to U(t)$ *in distribution on* $D_{L^2}[0,\infty)$ *and* $U(t)$ *formally satisfies*

$$U(t) = e^{At}U_0 + \int_0^t e^{A(t-s)}dM(s).$$

Before starting the proof, we introduce the some convergence results.

Lemma 5. *Assume* $U^N(0) \to U_0$ *in distribution on* $L^2[0,1]$. *Then*
(a) $(U^N(0), M^N) \to (U_0, M)$ *in distribution on* $L^2 \times D_{L^2}[0,\infty)$.
(b) $e^{At}U^N(0) + \int_0^t e^{A_N(t-s)}dM^N(s) \to e^{At}U_0 + \int_0^t e^{A(t-s)}dM(s)$ *in distribution on* $D_{L^2}[0,\infty)$.

(*Sketch of the proof of Theorem 4.*) By the semigroup theory, we have

$$\begin{aligned}U^N(t) =& e^{At}U^N(0) + \int_0^t e^{A_N(t-s)}dM^N(s) + (e^{A_N t} - e^{At})U^N(0) \\ &+ \sqrt{l}(e^{A_N t} - e^{At})u(0) + \int_0^t e^{A_N(t-s)}d(\sqrt{l}Z^N(s) - M^N(s)).\end{aligned}$$

It is easy to show that $\sup_{[0,T]} \|(e^{A_N t} - e^{At})f\|_\infty \le C(f)N^{-1}$ for all $f \in L^2[0,1] \cup H^N$. Furthermore, by definition of stochastic process $M^N(t)$,

$$P\{\sqrt{l}Z^N(t) - M^N(t) \neq 0 \text{ in } [0,T]\} \le P\{\tau \le T\} \to 0$$

as $N \to \infty$. Thus, this complete the proof by combining the above and Lemma 5.

参考文献

[1] Arnold, L., Theodosopulu, M., *deterministic limit of the stochastic model of chemical reactions with diffusion*, Adv.in Appl.Probab. **12**, (1980)367-379

[2] Blount, D., *Comparison of stochastic and deterministic models of a linear chemical reaction with diffusion*, Ann. Probab., **19**, (1991)1440-1462

[3] Hutson, V., Martinez, S., Mischaikow, K., Vickers, G. T., *The evolution of dispersal*, J.Math.Biol, **47**, (2003)487-517

[4] Bates, P.W., Zhao, G., *Existence, uniqueness and stability of the stationary solutions to a nonlocal evolution equation arising in population dispersal*, J.Math.Anal.Appl. **332**, (2007)428-440

[5] Franco, T., Groisman, P., *A particle with explosion: law of large numbers for the density of particles and the blow-up time*, J.Stat.Phys., **149**, (2012)629-642

ゲル基質上の上皮細胞シートが引き起こす浸透圧勾配依存的なドーム形成とその数理モデル

秋山 正和[1], 石原（石田）すみれ[2], 須志田 隆道[3], 古澤 和也[4], 名黒 功[5], 立野 浩輝[5], 石原 誠一郎[2], 芳賀 永[2]

[1] 明治大学・先端数理科学インスティテュート，[2] 北海道大学・大学院先端生命科学研究院・細胞ダイナミクス科学研究室，[3] サレジオ工業高等専門学校・情報工学科，[4] 福井工業大学・環境情報学部・環境・食品科学科，[5] 東京大学・大学院薬学系研究科・細胞情報学教室

e-mail：masakazu.akiyam@gmail.com

1　概要

動物の複雑な体構造は，上皮組織の座屈や折れ曲がり，伸長といった単純な変形が積み重なることにより形成される [1]．上皮組織が折れ曲がる変形のひとつにドーム形成があるが，そのような形態を引き起こす要因はほとんど分かっていない．先行研究により上皮組織上下の浸透圧勾配がドーム形成の要因として提唱されているものの [2]，その直接的証拠は報告されていない．そこで我々は浸透圧勾配によってどのようにドーム形成が誘引されるかについてを調べた．

生体内ではドーム形成における浸透圧勾配の影響を検証することが難しいため，本研究では浸透圧勾配がどのようにドーム形成を引き起こすかを直接的に検証できる細胞培養系で実験を行なった．生体内では上皮細胞は細胞外基質（ECM）上に接着していることから，ECM を主成分としたゲル基質上で上皮細胞シートに浸透圧勾配を与える系を作成した．この実験系で細胞に浸透圧勾配（ゲル基質側が高張圧）を与えると，細胞シートは内部がゲル基質で満たされたドームへと変形した（図 1）．

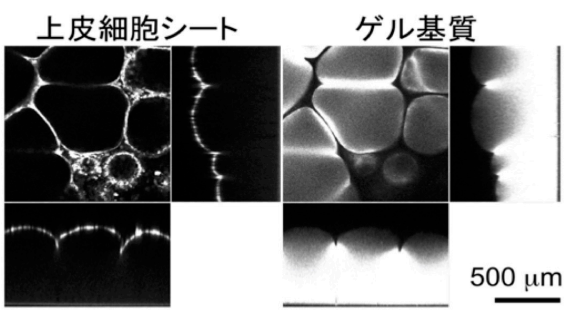


図 1. ドーム変形した上皮細胞シートとゲル基質の蛍光観察像

以上から，浸透圧勾配が細胞シートのドーム形成を誘引する直接的な要因であることが示された．次に，浸透圧勾配がドーム形成を起こす仕組みを調べた．3D ライブイメージングの結果，ドーム形成時にはゲル基質が膨潤していることがわかった．ゲルは内部の溶液の塩濃度によって膨潤度が変わる．また，細胞の水チャネル Aquaporin（AQP）は水を高張側に輸送する．そのため，ドーム形成時は AQP によって水がゲルへと輸送されゲル中の塩濃度が下がり，膨潤が起こっている可能性が考えられる．この仮説を検証するため，実験では AQP の阻害剤を投与した．その結果，ゲル基質の膨潤が抑制されドーム形成は阻害された．理論では，上記の仮説を検証するため，数理モデルを構築しコンピューターシミュレーションを行った．その結果，細胞の面積と水輸送能が互いに Feedback しあうことによって，基質が局所的に膨潤する事が示された．この局所的な膨潤により，細胞シートがドーム状に盛り上がった．これらの結果より，AQP の水輸送による ECM の局所的な膨潤がドーム形成を起こしていることが明らかになった．

2　問題設定

概要からわかるように本現象において肝となるのは，ゲル上に細胞シートが存在する場合は，特徴的なドーム形状が観察されるのに対して，存在しない場合はそのような形状は観察されないことにある．したがって，単にゲルの膨潤による物理的な影響によるパターン形成ではなく，細胞自身が作る何らかの働きとの相互作用によって生じた現象であるといえる．そこで，本現象を理解するために，ゲル層と細胞層をそれぞれモデル化し，それらをカップリングさせた数理モデルを用いて仮説の検証を行った．

3　数理モデル

実際の系と同様に円形領域を考える．ゲルと細胞群の界面を表現するため，数式処理ソフト Mathematica を用いて領域を小さな三角形領域 $T_k = T_k(t), (k = 0, ..., M)$ へと分割した．領域分割後に頂点の集合 $\boldsymbol{r}_i, (i = 0, ..., N)$ と接続情報が得られるが，これがゲルの界面を表す変数となる．$\boldsymbol{r}_i$ の支配方程式は Vetex Dynamics Model などでよく用いられる数式項及び，本モデル独自の項が含まれる．紙面の都合上，詳細な説明は割愛する．

$$\tau_i \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} = \kappa_1 \boldsymbol{F}_i^{\text{bend}} + \kappa_2 \boldsymbol{F}_i^{\text{length}} + \kappa_3 \boldsymbol{F}_i^{\text{area}} + \kappa_4 \boldsymbol{F}_i^{\text{normal}}$$

ここでは，細胞と細胞が吸う水に関するモデルを簡単に紹介する．実験から，本系における時間スケールでは，細胞分裂や細胞死はほとんど生じないことが確認されている．そこで，ここでは簡単のため三角形領域 T_k には平均的な細胞の高さを表す変数 $c_k = c_k(t)$ のみが存在すると考えた．c_k は T_k の上にあり，T_k の面積が変化することによって c_k も変化する．この際，細胞の体積は短い時間ではほぼ一定であるという実験事実を用いて，c_k を $c_k(t) = \dfrac{c_k(0)A_k(0)}{A_k(t)}$ のように計算する．ここで $A_k = A_k(t)$ は T_k の面積を表す．

c_k は細胞の上面から AQP の働きによって水を吸う．そこで，$w_k = w_k(t)$ を c_k の吸ったトータルの水量を表す変数とする．実験から，細胞が吸う水量は細胞の高さが低い時最大となり，細胞の厚みがある一定以上であれば最小となることが知られている．そこで，w_k を $\dfrac{dw_k}{dt} = f(c_k)$ のように与えた．ここで $f(x) := \dfrac{\tanh(\mu_1(x_0 - x)) + 1}{2}$ である．

初期条件としては，$c_k(0)$ は $[0.8, 1.2]$ の一様乱数．$w_k(0)$ は 0．$\boldsymbol{r}_i(0) = (r_x(0), r_y(0), r_z(0))^T$ の各成分は微小な摂動として $[-0.01, 0.01]$ の一様乱数を与えた．境界条件としては，円形領域の境界部分に属する三角形の頂点のみを固定端とした．

4　数値計算結果

κ_1 を変化 (0.01 ～ 0.06) させることにより，ドーム形状の直径を変化させる事ができた（図 2 (a)～(c)）．実際の系でも，ゲルの硬さ依存的にドーム形状の直径は変化するため，本結果は妥当性のある計算結果といえる．

さらに，細胞のある場合と無い場合でも計算を行ったところ，実際の系と同様なドーム形状の再現に成功した．（図 2 (d),(e)）

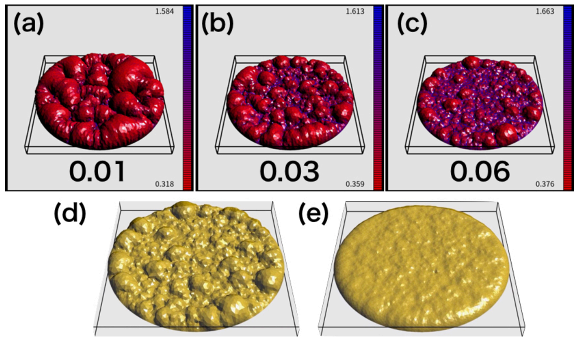


図 2. (a)～(c) 曲げエネルギーの違いによるパターンの変化

さらに，パラメタ探索を行ったところ，現実のパターンに非常に酷似した計算結果も得ることができた (図 3)．特に境界部分と内側部分では，ゲルパターンに質的な変化が見られるが，それらも再現することができた．

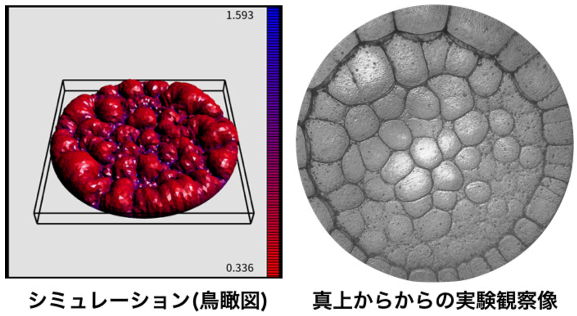


図 3. シミュレーションと実際の観察像との比較.

5　最後に

以上から，上皮組織の変形に重要な機構であるドーム形状の発現機序の一端を実験的・数理的に明らかにした．講演では，実験とモデリングに関する詳細を説明するとともに，本モデルの妥当性および将来性等に関して議論したい．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 15H05857, 15H05858. の助成を受けたものです.

参考文献

[1] Gilmour D., Rembold M., Leptin M. (2017) Nature, 541, 311-320.

[2] Leighton J., Brada Z., Estes L. W., Justh G. (1970) Cancer, 26, 1022-1028.

温度変化に対する体内時計の安定化と波形の歪みについての数理的研究

儀保 伸吾[1,2], 黒澤 元[1,2]
[1]理化学研究所 数理創造プログラム(iTHEMS), [2]JST CREST
e-mail: shingo.gibo@riken.jp

1 はじめに

多くの生物は，地球環境の 1 日の変化に適応するために，約 24 時間周期の体内時計を持っている．体内時計は生体分子の化学反応(分解，合成，リン酸化など)のネットワークによって構成される．一般に，温度が高くなると生化学反応は速く進むが，体内時計の周期は温度によらず約 24 時間でほとんど変わらない．この現象は，「体内時計の温度補償性」と呼ばれており，その仕組みは分かっていない．一方で，体内時計を構成する生体分子の約 24 時間周期の増減は，様々な波形のものがある．生体分子の増減の波形の違いは，温度補償性のメカニズムを理解する上で重要な手がかりとなる可能性がある．本研究では，振動波形の違いに着目し，数理モデルを用いて体内時計の温度補償性の条件を調べた．

2 数理モデル

体内時計の約24時間周期の振動を作るには，多段階の修飾(リン酸化)と分解，タンパク質による遺伝子発現の制御が必要であることが実験と理論によって知られている[1,2]．これらの事実に基づいて，体内時計の振る舞いを記述する簡単なモデルとして下記のモデルを構築した(図 1)：

$$dx_1/dt = f(x_4) - (b + p + k_u)x_1 \quad (1a)$$
$$dx_2/dt = bx_1 - k_o x_2 \quad (1b)$$
$$dx_3/dt = px_1 - (h + k_u)x_3 \quad (1c)$$
$$dx_4/dt = hx_3 - k_t x_4 \quad (1d)$$

ここで，変数 x_1 は修飾されていないタンパク質の濃度，x_2，x_3，x_4 はリン酸化されたタンパク質の濃度である．また，パラメータ p，h，b はリン酸化反応のレート，k_u，k_o，k_t は分解のレートである．関数 $f(x_4)$はタンパク質 x_4 による遺伝子発現の制御を表しており，振動が生じる適当な関数を仮定する．温度が上昇することは，反応レート p，h，b，k_u，k_o，k_t が増加することに対応する．

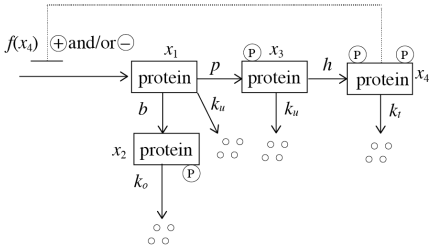


図 1. 体内時計の数理モデル

$x_4(t)$ の周期解をフーリエ級数展開 ($x_4(t)=\sum_{j=-\infty}^{\infty} a_j \exp(i(2\pi/\tau)jt)$) することで，式(1)の周期を次のとおり求めることができる：

$$\tau = \left[\frac{4\pi^2}{(b+p+k_u)(h+k_u)+(b+p+h+2k_u)} \frac{\sum_{j=1}^{\infty} |a_j|^2 j^4}{\sum_{j=1}^{\infty} |a_j|^2 j^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

ここで，τ は周期，a_j は $x_4(t)$のフーリエ係数，j はフーリエ係数の次数である．全ての反応レートは式(2)の分母にあるため，温度が高くなり化学反応が速くなると，周期は短くなりやすいことが分かる．一方，温度の変化に対して周期が安定であるためには，温度が高くなることによる反応レートが上昇を打ち消すように，$[\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2 j^4/\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2 j^2]^{1/2}$ が大きくなる必要がある．この項は，$x_4(t)$の振動波形がサイン波であれば 1 となり，サイン波から歪んだ波形であれば 1 よりも大きな値をとる．すなわち，$[\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2 j^4/\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2 j^2]^{1/2}$ は振動波形のサイン波からの歪みを表す指標であり，Non-sinusoidal power(NS)と呼ぶことにする．

したがって，体内時計の周期が温度補償であるとき，高温で振動波形が歪み，NS が大きくなることが予測できる[3]．

3 数値計算

波形の歪み方には，矩形波，三角波など様々なものがあり，体内時計の周期が温度に対して安定な場合，どのような形に波形が歪むかは，式(2)だけでは分からない．そこで，式(1)の数

値計算から温度補償な場合の波形の歪み方を具体的に予測した．数値計算の次の手順でおこなった：(i) $f(x_4)$ をHill関数 $vx_4^n/(K^n+x_4^n)$ として，全てのパラメータを 0〜10 の一様乱数で振り，振動が生じた30setについて周期を計算(低温)，(ii)振動が生じた30setについて，反応レート $(b, p, h, k_u, k_o, k_t, v)$ を1.1〜1.9倍大きくした場合49setの周期を計算(高温)．また，波形の特徴をとらえるために，$x_4(t)$ が増えるのにかかった時間(synthesis interval)と減るのにかかった時間(decay interval)も計算した．

結果を図2に示す．図2より多くの場合，高温で反応レートが上がると，周期は短くなる．一方で，反応レートの上昇に対して，周期が比較的安定な場合も少数存在し，このとき synthesis interval は短くなるが，decay interval は長くなる傾向があった．すなわち，温度に対して周期が安定な場合，振動波形は前のめりになり非対称になることが予測される．ここで，$x_4(t)$ は遺伝子発現を制御する因子なので，$x_4(t)$ の振動波形が非対称化し，減るのにかかる時間が長くなる場合，遺伝子発現を抑制し，DNAからRNAを作る反応(転写)を遅くすることで，周期を安定化していると解釈できる．

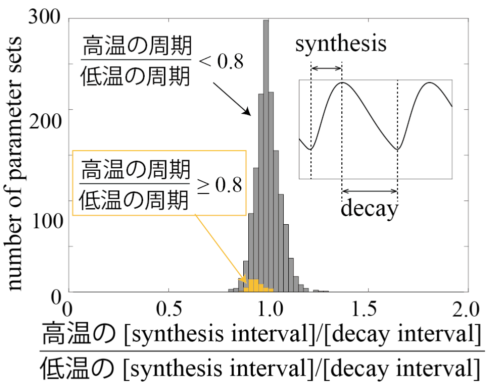


図2：数値計算結果．黒は高温で周期が短くなった場合．オレンジは高温で周期が安定だった場合．

4 電気振動モデル(van der Pol モデル)による波形の歪みの効果の検討

波形の歪みによる周期の制御の一般性について，体内時計とは異なる仕組みで振動する van der Pol モデルを使って検討した．

van der Pol モデル：

$$\ddot{x} + f\left(x\right)\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \qquad (3)$$

体内時計のモデルと同様に，式(3)の周期解をフーリエ級数 $\left(x_4(t)=\sum_{j=-\infty}^{\infty} a_j \exp(i(2\pi/\tau)jt)\right)$ で展開し，周期を求めると次式を得る．

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega_0}\left[\frac{\sum_{j=1}^{\infty}\left|a_j\right|^2 j^2}{\sum_{j=1}^{\infty}\left|a_j\right|^2}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (4)$$

ここで，$2\pi/\omega_0$ は線形振動 $(f(x)=0)$ の周期，$[\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2 j^2/\sum_{j=1}^{\infty}|a_j|^2]^{1/2}$ は波形の歪みを表す．したがって，van der Pol モデルでも波形の歪みが周期を長くすることが分かる．

5 おわりに

本研究では，数理モデルの解析と数値計算によって，体内時計の周期が温度に対して安定であるためには，高温で生体分子の増減の振動波形が歪む必要があることを予測した．今後は，実験データの解析によって予測を検証することを考えている．また，体内時計のモデルだけでなく，van der Pol モデルでも波形の歪みが周期を延ばすことを示し，波形による周期の制御についてモデルによらない普遍性が存在する可能性を示唆した．しかし，波形が周期を制御する仕組みはまだ分かっておらず，非線形力学系の解析手法を使って，その仕組みを数学的に理解したいと考えている．

謝辞　本研究は，CREST(JPMJCR14W3)の支援を受けた．

参考文献

[1] Hardin PE, Hall JC, Rosbash M, *Feedback of the Drosophila period gene product on circadian cycling on its messenger RNA levels*, Nature, 343 (1990), 536-540.

[2] Goodwin BC, *Oscillatory behavior in enzymatic control processes*, Adv. Enzyme Regul., 3 (1965), 425-438.

[3] Gibo, S., and Kurosawa, G. *Non-sinusoidal waveform in temperature-compensated circadian oscillations*, Biophys. J., 116 (2019), 741-751.

カンファレンス行列を使った実験数を圧倒的に低減する研究方法

森輝雄
森技術士事務所
e-mail: tm551017@ybb.ne.jp

1　概要

ここ 30 年間,設計に田口の「L_{18}+SN 比」を適用していたが実験数が多いことと予測精度がよくないことが知られるようになった.これに代わるプラットホームとして「確かな少数実験」を実現する「C 行列+回帰」の可能性を取り上げてきた.カンファレンス行列[1][2][3]は,一次項に「2 因子間交互作用と 2 乗項」が交絡しない性質があるために予測精度が高い.また現状ではL_9, L_{18}. L_{27}. L_{36}のように 9 跳びであるが C 行列は,割り付け因子数の 2 個増毎に対応しており実験数を低減できる.

2　ノーベル受賞者でも頭を悩ませる膨大な実験数

実験数削減は,開発期間の短縮,実験費用の低減など経済的効果が大きい.しかし,目的を達成するまで継続され実験数を削減しにくい.2014 年のノーベル物理学賞（青色 LED）の著者から赤崎と中村の記述を引用する.

赤崎勇：”天野浩君は元旦を除くとほとんど毎日,MOVPE に火をいれ, 1500 回以上の実験をしていたわけですから,いつ故障し“1000→500 度”なっても不思議ではありませんでした. 中村修二：”そしてそれは,過去の約 1 年間,500 回以上も繰り返してきた失敗例の一つになったかもしれない実験でした“

これら文章からも,ノーベル賞受賞者ともいえども実験数そのものは膨大なようである.

3　研究展開とデータ構造

研究展開を 3 期に分割し,対応するデータ構造を図 1 に示す.基礎研究（初期）のデータは実現可能性の研究であるからその応答は,無[0]と有[1]のデジタル型となる.研究課題の出現を検討するため,演繹から可能とする具体的な仮説を立て,帰納とし実験にて確認し再現することを検証する一連の研究となる.例えば,仮説とし材料欠陥をなくせば青色レーザができる,あるいは弱酸で刺激すれば万能細胞ができるなどがある.

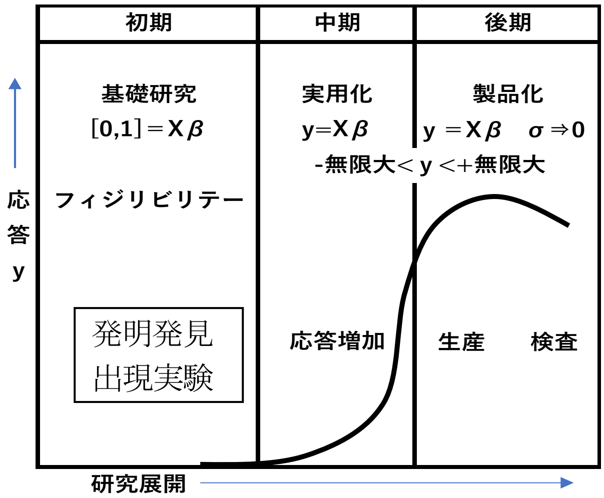


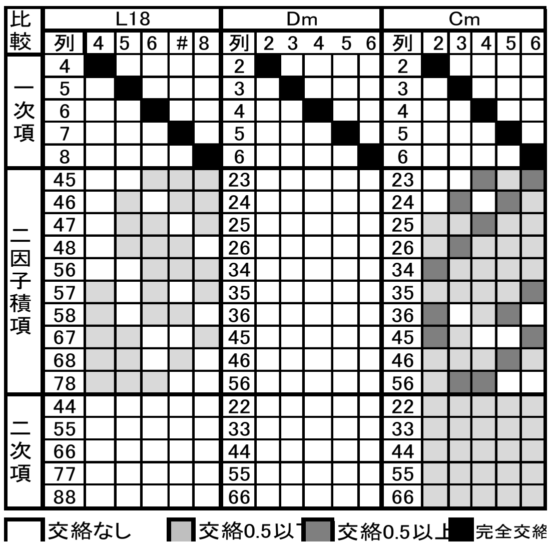
図 1　応答と研究展開

実用化（中期）は,因子水準を組みかえて応答（y）を大きくしたい.製品化（後期）はばらつきを低減しながら目標に調整する.全組み合わせを実施できないこの全域で一部実施法が適用される.

4　一部実施法に対応する数学手段

傾向も確認するので 3 水準を前提とする.5 因子を実験するために適用した $L_{18}(3^5)$, $D_{13}(3^5)$, $C_7(3^5)$の交絡を表 1 に示す.

表 1　交絡状態



5　実験数削減のための戦略的思考

5.1　カンファレンス行列 Cm の特徴の利用

3 水準は自由度「2」であるが Cm 行列は「1」だから実験数は半分になる. 表 2 に Cm6 を示す.

表 2　カンファレンス行列 Cm6

Cm6	1	2	3	4	5	6
1	0	1	1	1	1	1
2	1	0	1	1	−1	1
3	1	1	0	−1	−1	−1
4	1	1	−1	0	1	−1
5	1	−1	−1	1	0	1
6	1	−1	1	−1	1	0

表 1 から Cm6 の主効果には積項と 2 次項が交絡する. このため Dm6(Cm6+Cm6−Co)とすると実験数が倍になるが交絡を回避できる.

5.2　Cm6 で圧倒的な実験数削減の可能性

積項と 2 次項の主効果の交絡がないか低い場合は Cm 単体を設計に使えると想定できる. 交絡を低くするには水準幅を狭くすればよい. この状態では実験空間が狭いので大きい応答を目標とする研究でも逐次（所謂山登り）法なら線形性が成立する. これを図 2 に示す.

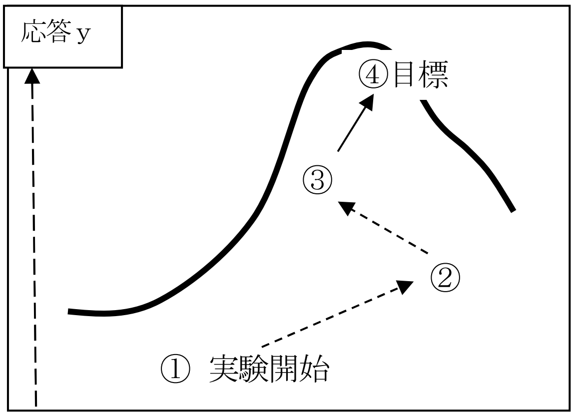


図 2　Cm による逐次(山登り)法

6　数値シムレーションによる検証

制御回路(式 1)を使い 5 因子を割り付けた表 1 の 3 種に, 実験数が多い L_{36} を追加し 4 種の逐次実験をした. (具体的定数は省略する.)

$$y=b/(ac)^{0.5} \quad (1) \quad (y>0)$$

中心設定が 1 の時 1/5 を第 1, 5 倍を第 3 水準とする水準比 5（実験空間大：非線形性大）の多元配置の最大値は 503.63, これに対し交絡がない, または少ないと思われる水準比 2(水準設定:1/2, 1, 2：実験空間小、非線形小)とし逐次法を 2 回試みた. この 4 種の開始応答は 54.44 であり 2 回の逐次実験で応答上昇を検証した. これを表 3, 図 3 に示した.

表 3　逐次上昇と全実験数

水準設定	逐次	応答上昇			全実験数
水準比	計画	基準	1 回	2 回	
5倍	多元	503.63			243
2倍	L36	39.20	207.75	1096.34	72
	L18	53.44	254.19	975.92	36
	D6	53.44	278.05	1307.69	26
	C6	53.44	207.75	1307.69	14

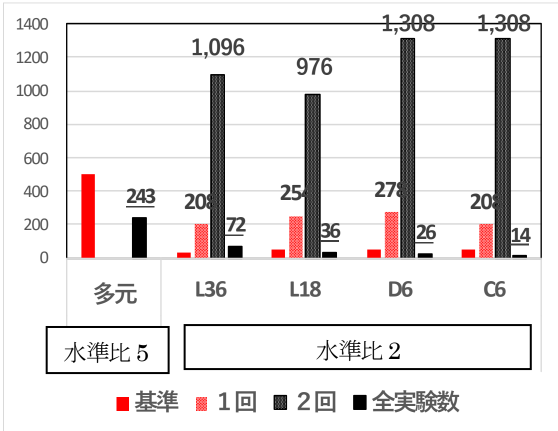


図 3　逐次上昇と全実験数

7　結果と考察

水準比 5（広幅）の最大値 503.63 を水準比 2（狭幅）の逐次 2 回目の山登りで超えたが, 実験数は L_{36} の 72 個に対し C_6 は 14 個と圧倒的に低減でき約 1/5 になった.

1：応答上昇が目的の初期・中期の研究であれば C 行列単体を適用が可能である.

2：逐次実験の係数グラフの最大値水準と実験最大水準が一致程度から交互作用の程度を判定できる.

3：2 で不一致の数が多い時には実験最良 No を次回設計の基準とする.

参考文献

[1] Xiao, L., Lin. D.K.J., Bai, F (2012): ” Constructing Definitive Screening design Using Conference matrices “ JQT, 44, [1], 2

[2] 田中研太郎 (2016)：“カンファレンス行列と実験計画法”, 「品質」, 46, (1) 51-54.

[3] 森輝雄, 貞松伊鶴, 松浦俊, 田中研太郎 (2019) “カンファレンス行列と 2 水準ノイズを用いた直交計画によるパラメータ設計”, 「品質」, 49 (3) pp 66-78

時間発展方程式を用いたトポロジー最適化

村井 大介 [1], 川本 敦史 [1], 近藤 継男 [1]
[1] 株式会社　豊田中央研究所
e-mail : Daisuke-Murai@mosk.tytlabs.co.jp

1　設計変数と問題設定

$T > 0$ を定数、$D \in \mathbb{R}^d,\ d = 2,3$ を十分広い設計領域、$\partial D = \Gamma_{\rm D} \cup \Gamma_{\rm N}$ を D の境界、$\Gamma_{\rm D}$ をディリクレ境界、$\Gamma_{\rm N}$ をノイマン境界、$\mathbf{0}$ を零ベクトル、$\boldsymbol{I}$ を単位行列、$\boldsymbol{n} = (n_1, \cdots, n_d)$ を境界 ∂D 上の外向き単位法線ベクトル、$\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_d)$ を D 上の各点とする。設計変数 $\theta(\boldsymbol{x}, t) \in H^1(D \times [0,T]; \mathbb{R}),\ \boldsymbol{x} \in D,\ t \in [0,T]$ をもちいて、D 内に存在する物体と空隙、その境界を関数 $\phi \in H^1(\mathbb{R}; [0,1])$ を用いて物体 $(\phi = 1)$、空隙 $(\phi = 0)$、境界 $(\phi = 1/2)$ と定義する。

ある時刻 $t \in [0,T]$ から微小時刻 $\delta t > 0$ だけ進んだ時の $\theta(t+\delta t)$ を $\theta(t)$ を用いて

$$\begin{aligned}\theta(t+\delta t) &= \theta(t) + \delta\theta \\ &= \theta(t) + \frac{{\rm d}\theta(t)}{{\rm d}t}\delta t = \theta(t) + v(t)\delta t\end{aligned} \tag{1}$$

のように構成する。ここで $\delta\theta$ は θ の微小な変動を、${\rm d}\theta(t)/{\rm d}t = v(t) \in H^1(D \times [0,T]; \mathbb{R})$ は θ の時刻 t における変動速度を表す。ここで、$\theta_0 = \theta(0)$ を設計変数の初期値とする。式 (1) により $\theta(t)$ は

$$\theta(t) = \theta_0 + \int_0^t v(s){\rm d}s \tag{2}$$

と表される。

θ の関数である目的関数 $f_0(\theta) \in \mathbb{R}$ と制約関数 $f_1(\theta) \in \mathbb{R}$ が与えられたとき、$f_1(\theta) \le 0$ の条件下で $f_0(\theta)$ を最小化するトポロジー最適化問題

$$\min_\theta \{f_0(\theta) | f_1(\theta) \le 0\} \tag{3}$$

を考える。問題 (3) の Lagrange 関数を

$$\begin{aligned}&\mathscr{L}(\theta) = \mathscr{L}_0(\theta) + \lambda_1 \mathscr{L}_1(\theta), \\ &\mathscr{L}_i(\theta) = f_i(\theta), \quad i = 0,1\end{aligned} \tag{4}$$

とおく。ここで λ_1 は f_1 に対する Lagrange 乗数を表す。

$\theta(t+\delta t)$ における Lagrange 関数 (4) は

$$\mathscr{L}(\theta(t+\delta t)) = \mathscr{L}(\theta(t)) + \int_t^{t+\delta t} \frac{{\rm d}\mathscr{L}(\theta(t))}{{\rm d}t}{\rm d}t, \tag{5}$$

$$\begin{aligned}&\frac{{\rm d}\mathscr{L}(\theta(t))}{{\rm d}t} = \frac{{\rm d}\mathscr{L}_0(\theta(t))}{{\rm d}t} + \lambda_1 \frac{{\rm d}\mathscr{L}_1(\theta(t))}{{\rm d}t}, \\ &\frac{{\rm d}\mathscr{L}_i(\theta(t))}{{\rm d}t} = \left\langle \frac{{\rm d}\mathscr{L}_i(\theta)}{{\rm d}\theta}, \frac{{\rm d}\theta(t)}{{\rm d}t} \right\rangle \\ &= \int_D g_i^D(\theta) \frac{{\rm d}\theta(t)}{{\rm d}t}{\rm d}\Omega + \int_{\partial D} g_i^{\partial D}(\theta) \frac{{\rm d}\theta(t)}{{\rm d}t}{\rm d}\Gamma, \\ &\quad i = 0,1\end{aligned} \tag{6}$$

と表される。ここで $\langle\cdot,\cdot\rangle$ は D 上および ∂D 上の内積を合わせたものを、${\rm d}\mathscr{L}_i(\theta)/{\rm d}\theta,\ i = 0,1$ は $\mathscr{L}_i = f_i$ の θ 微分 (感度) を、$g_i^D,\ i = 0,1$ は $\mathscr{L}_i,\ i = 0,1$ の領域 θ 微分 (感度) を、$g_i^{\partial D},\ i = 0,1$ は $\mathscr{L}_i,\ i = 0,1$ の境界 θ 微分 (感度) を表す。

2　問題 (3) の解法

問題 (3) の解を求めるために、式 (2) における $v(t)$ を反応拡散方程式

$$\begin{aligned}&\frac{{\rm d}v(t)}{{\rm d}t} = \boldsymbol{\nabla}\cdot(c\boldsymbol{\nabla}v(t)) - av(t) - g_0^D - \lambda_1 g_1^D \\ &\qquad \text{in} \quad [0,T] \times D, \qquad (7) \\ &v(0) = 0 \quad \text{in} \quad D, \\ &c\boldsymbol{\nabla}v(t)\cdot\boldsymbol{n} = -g_0^{\partial D} - \lambda_1 g_1^{\partial D} \ \text{on}\ [0,T] \times \partial D\end{aligned}$$

に従って求める。ここで $c,\ a$ は与えられた正定数である。また、$\theta(t)$ を時間発展方程式

$$\frac{{\rm d}\theta(t)}{{\rm d}t} = v(t) \ \text{in}\ [0,T] \times D,\ \theta(0) = \theta_0 \ \text{in}\ D \tag{8}$$

の解として与えることにより、問題 (3) の解を求める。

3　目的関数の減少性

定理 1 $\forall t \in [0,T]$ において $f_1(\theta(t)) = 0$ が満たされるとき $\forall t \in [0.T]$ に対して $f_0(\theta(t)) \le f_0(\theta_0)$ が成り立つ。

証明　任意の試験関数 $v'(t) \in H^1(D \times [0,T]; \mathbb{R})$ を反応拡散方程式 (7) にかけて D 上で積分することで、弱形式

$$
\begin{aligned}
0 = &\int_D \frac{\mathrm{d}v(t)}{\mathrm{d}t} v'(t) \mathrm{d}\Omega \\
&+ \int_D \left\{ av(t)v'(t) + c\boldsymbol{\nabla} v(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} v'(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \\
&+ \int_D \left\{ g_0^D + \lambda_1 g_1^D \right\} v'(t) \mathrm{d}\Omega \\
&+ \int_{\partial D} \left\{ g_0^{\partial D} + \lambda_1 g_1^{\partial D} \right\} v'(t) \mathrm{d}\Gamma
\end{aligned}
\tag{9}
$$

を得る。弱形式 (9) の $v'(t)$ を $v(t)$ と取り直し、式 (5) の右辺に代入すると

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{L}(\theta(t+\delta t)) = \mathscr{L}(\theta(t)) \\
&\quad - \int_t^{t+\delta t} \int_D \left\{ av(t)^2 + c\boldsymbol{\nabla} v(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} v(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \\
&\quad - \int_t^{t+\delta t} \int_D \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}v(t)^2}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

を得る。$\mathscr{L}(\theta(t))$ を $[0,t]$ で積分すると、$v(0) = 0$ より

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{L}(\theta(t)) = \mathscr{L}(\theta_0) \\
&\quad - \int_0^t \int_D \left\{ av(t)^2 + c\boldsymbol{\nabla} v(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} v(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \\
&\quad - \int_D \frac{v(t)^2}{2} \mathrm{d}\Omega
\end{aligned}
$$

を得る。さらに $\forall t \in [0,T]$ において $f_1(\theta(t)) = 0$ が満たされているため $\mathscr{L}(\theta(t)) = f_0(\theta(t))$ が成り立つから $a > 0,\ c > 0$ および

$$
\begin{aligned}
&\int_0^t \int_D \left\{ av(t)^2 + c\boldsymbol{\nabla} v(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} v(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \\
&\quad + \int_D \frac{v(t)^2}{2} \mathrm{d}\Omega \geq 0
\end{aligned}
$$

より $f_0(\theta(t)) \leq f_0(\theta_0)$ を得る。 □

4　数値例

目的関数 f_0 を平均コンプライアンス

$$
\begin{aligned}
f_0(\theta) = &\int_D \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{u} \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{p} \mathrm{d}\Gamma \\
&- \int_{\Gamma_{\mathrm{D}}} (\phi(\theta)^\alpha \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} \mathrm{d}\Gamma,
\end{aligned}
\tag{10}
$$

制約関数 f_1 を体積制約

$$
f_1(\theta) = \int_D \phi(\theta) \mathrm{d}\Omega - V_1, \quad V_1 = \int_D \phi(\theta_0) \mathrm{d}\Omega
\tag{11}
$$

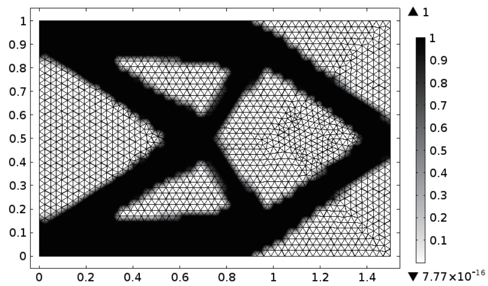


図 1. 最適解 $\phi(\theta(T))$ の分布

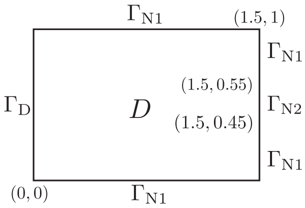


図 2. 設計領域 D と境界 $\partial D = \Gamma_{\mathrm{D}} \cup \Gamma_{\mathrm{N1}} \cup \Gamma_{\mathrm{N2}}$

としたトポロジー最適化問題の数値解を図 1 に示す。ここで、$\boldsymbol{u}$ は図 2 に示す問題設定の下で設定された線形弾性問題

$$
\begin{aligned}
&-\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\phi(\theta)^2 \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \right) = \boldsymbol{b} \quad \text{in} \quad D, \\
&\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) = 2e_\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) + e_\lambda \mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})) \boldsymbol{I}, \\
&\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} \}, \\
&\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} \quad \text{on} \quad \Gamma_{\mathrm{D}}, \\
&\phi(\theta)^2 \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0} \quad \text{on} \quad \Gamma_{\mathrm{N1}}, \\
&\phi(\theta)^2 \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{p} \quad \text{on} \quad \Gamma_{\mathrm{N2}}, \\
&e_\mu = \frac{e_Y}{2(1+e_P)}, \quad e_\lambda = \frac{2e_\mu e_P}{1-2e_P}
\end{aligned}
\tag{12}
$$

の解 [1]、$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{p} = (0,1),\ \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} = \boldsymbol{0},\ e_Y = 1$ はヤング率、$e_P = 0.3$ はポアソン比、$\phi(\theta) = (\tanh(\theta)+1)/2$ である。

参考文献

[1] Azegami, Hideyuki and Kaizu, Satoshi and Takeuchi, Kenzen, Regular solution to topology optimization problems of continua, JSIAM Letters, 3 (2011), 1–4.

自動車のシャシー用部品を対象としたひずみエネルギー最小化問題に対するトポロジー最適化解析

岸田 真幸 [1], 嶋田 雅也 [2], 高橋 陽也 [3], 吉原 健太 [3], 倉橋 貴彦 [3], 加藤 遼 [4], 小林 正成 [4]
[1] 長岡技術科学大学技術科学イノベーション専攻，[2] 長岡技術科学大学機械創造工学課程，
[3] 長岡技術科学大学機械創造工学専攻，[4] オイレス工業株式会社
e-mail : s173029@stn.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

近年，軽量化を目的とした金属部品の樹脂化が進んでいる．一方で，樹脂は金属と比べ弾性率が小さく強度に劣る点があるため，金属部品と比べ肉抜きすることが困難である．

本研究では，トポロジー最適化理論に基づき自動車のシャシー用部品を対象としたひずみエネルギー最小化とする最適設計を行う．

2 ひずみエネルギー最小化問題に対する定式化

評価関数には式 (1) で示されたひずみエネルギーを用いる．

$$J = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{F}\}^{\mathrm{T}}\{\boldsymbol{u}\} = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{K}]\{\boldsymbol{u}\} \tag{1}$$

線形弾性体の変形問題に対する支配方程式を導入する．式 (1) を目的関数，体積制約を制約条件として，文献 [1] および [2] を参考に最適性基準法を用いて密度の更新式を導入する．また，式 (2) に示された SIMP 法を用いて要素に密度を与えた．ここで，ペナルティパラメータ p は 3 と設定する．

$$E(\rho) = (E_0 - E_{\min})\rho^p + E_{\min} \tag{2}$$

フィルタリング処理には，文献 [1] を参考に Sigmmund が提案した感度にフィルターを課す方法を用いてフィルタリング処理を行った．

3 自動車のシャシー用部品を対象としたトポロジー最適化

図 1 に解析モデルであるシャシー用部品のモデルを，図 2 にそのモデルの一要素の寸法を示す．図 3 に境界条件を示す．青色の要素は密度が 0 すなわち，材料が存在しない箇所で，赤色の要素は密度が 1 すなわち，機能的に必要な部分であることから密度を更新しない要素に値する．このことから黄色の要素を更新していき最適な構造を求めていく．また，図 4 に示すように荷重条件は，周方向ごとに異なっており，荷重方向は Z 方向のみとしており、トポロジー最適化に必要な計算条件は，表 4 に示す．

今回は，初期密度すなわち体積比率を 1.00〜0.50 に設定しており，0.05 ずつ変えた条件で解析を行う．ここで，初期密度 1.00 は，軽量化をする前の初期の構造である．解析結果の一例として，図 5 に初期密度を 0.70 とした時のトポロジー最適化の結果を示す．この図は，密度 0 の要素を表示していない．図 5 より，荷重がかかる周辺の要素は密度が 1 になり，式 (1) より離れていくに連れて変位が小さくなるため要素の密度は 0 となる傾向となった．また，図 6 にそれぞれの初期密度に対するひずみエネルギー（評価関数）のグラフを示す．この結果から，初期密度に対するひずみエネルギーの結果は，初期密度が小さくなるにつれて，2 次関数のグラフのように増加する傾向があることが明らかになった．また，図 6 より初期密度 0.85 までは初期の構造に近いひずみエネルギーであり，初期密度が 0.85 を超えた時点でひずみエネルギーが徐々に増加していることも明らかになった．

4 おわりに

本研究では，トポロジー最適化解析により自動車のシャシー用部品の材料の削減に関する最適設計の考察を行った．最適設計の考察を行うために，初期の構造の評価関数であるひずみエネルギーと，初期密度を 0.05 刻みで 0.95 から 0.50 まで変えた場合のトポロジー最適化の結果のひずみエネルギーを比較し，自動車のシャシー用部品の初期密度とひずみエネルギーの関係性について明らかにした．また，本研究の結果より，ひずみエネルギーの許容値を定めることにより，シャシー用部品の肉抜き構造の最適設計ができると考えられる．

謝辞　本研究を行うにあたり，科学研究費補助金 (基盤 (C))18K03897 の援助およびオイレス工業株式会社の助成金を受けた．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．

参考文献

[1] 西脇, 泉井, 菊池, トポロジー最適化, 丸善出版, 2013.

[2] K. Yoshihara, T. Kurahashi and M. Kobayashi, Numenrical and practical experiments for maximally stiff structure based on the topology optimization theory and the FEM, JSIAM, Vol.10(2018),pp.73–76.

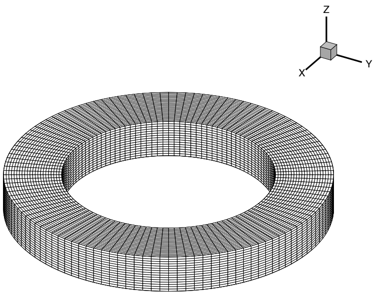


図 1. 解析モデル

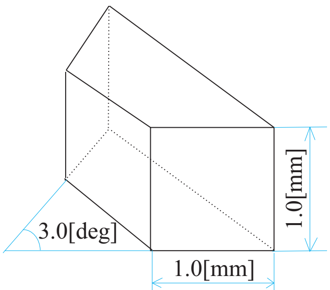


図 2. 解析モデルの一要素

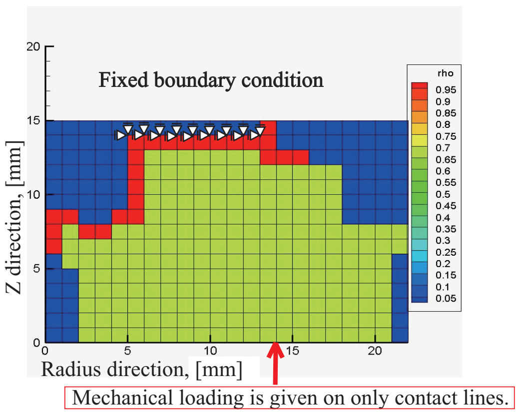


図 3. 境界条件

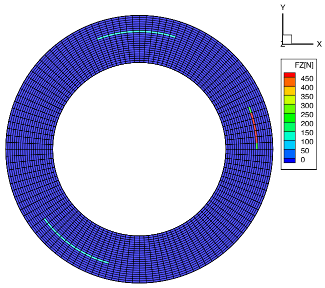


図 4. 荷重条件（上面視）

表 1. 計算条件

Number of elements	39600
Element type	Hexahedron
Volume constrain amount V_f	1.00〜0.50
Initial non-dimensional density ρ_0	1.00〜0.50
Penalty parameter p	3.00
Damping parameter η	0.75
Move limit of non-dimensional density update γ	0.15
Filtering radius R,[mm]	1.50
Young's modulus E_0,[GPa]	20.2
Poisson's ratio ν	0.37

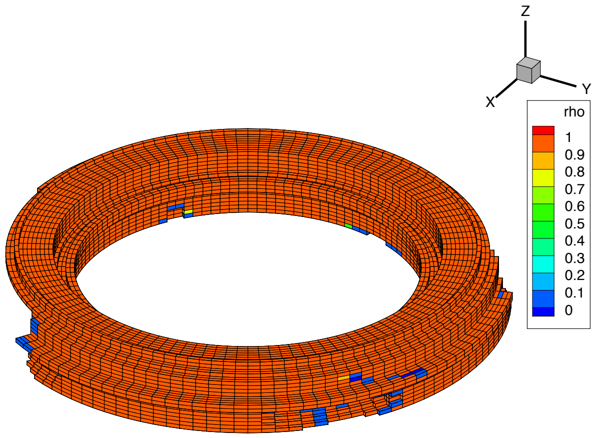


図 5. 初期条件 ρ_0=0.7 の最適化構造の一例

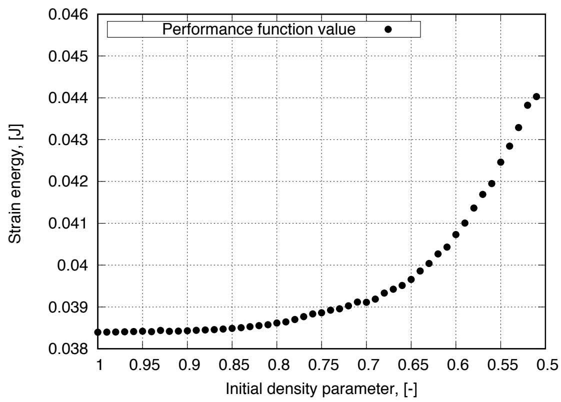


図 6. 初期密度に対するひずみエネルギー

高精度逆問題解析に援用可能な波動方程式の順問題に対する直接的数値解法の開発

代田 健二 [1], 曽我部 知広 [2]
[1] 愛知県立大学情報科学部，[2] 名古屋大学大学院工学研究科
e-mail : shirota@ist.aichi-pu.ac.jp

1 はじめに

本研究では，波動方程式族の逆問題に対する高精度数値解法開発の基礎研究として，スカラー波動方程式の初期値境界値問題に対する数値解法について考察する．

著者は，波動場における逆問題，特に係数同定問題に対する数値解法の研究を実施し，一定の成果を挙げてきた．しかし，その研究において実測データを用いた数値実験を実施した場合，実用上満足のいく結果を得ることが出来なかった．不十分な結果を得た大きな要因は，モデル化誤差であることが，関連先行実験研究から示唆されていたため，その誤差を考慮した数値解法の開発を考察し，手法の効果を検証するため数値実験を試みた．しかし，有限要素法など通常用いられる解法による離散化誤差，計算過程で発生する丸め誤差の同定解に対する影響は，逆問題の非適切性により無視できず，モデル化誤差対処法研究において効果検証の妨げとなっていた．

一方，多倍長計算環境下において高精度数値解法を用いることにより，非適切問題に対しても，丸め誤差の影響を受けない高精度数値解を得られることが，先行研究により示されている [1]．そこで本研究では，モデル化誤差に対処する数値的再構成法を開発するための基礎研究として，次のスカラー波動方程式の順問題に対する高精度数値解法を考察する．

$$\partial_t^2 u - K\nabla\cdot\left(\frac{1}{\rho}\nabla u\right) = f \ \text{in}\ \Omega\times(0,\,T)\,. \quad (1)$$

$u(\boldsymbol{x},\,t)$ は音圧の変化，$K(\boldsymbol{x})$ は体積弾性率，$\rho(\boldsymbol{x})$ は密度，$\Omega\subset\mathbb{R}^n$ $(n=2,\,3)$ は区分的に滑らかな境界を持つ有界領域とする．

2 高精度解法による波動方程式の離散化

(1) の初期値境界値問題に対する空間方向近似には，任意形状に対して適用可能な任意多点差分法 [2] を採用する．$\{\boldsymbol{x}^{(j)}\}_{j=1}^N$ を，$\boldsymbol{x}^{(i)}\neq\boldsymbol{x}^{(j)}$ $(i\neq j)$ を満たす $\overline{\Omega}$ 内に配置された求積点とする．偏微分作用素 $P(\partial_x)$ を

$$P(\partial_x)v(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} K\nabla\cdot\left(\dfrac{1}{\rho}\nabla v\right)(\boldsymbol{x}) & \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \\ v(\boldsymbol{x}) & \boldsymbol{x}\in\Gamma_D\,, \\ K\dfrac{\partial v}{\partial n}(\boldsymbol{x}) & \boldsymbol{x}\in\Gamma_N \end{cases}$$

と定義する．ただし，Γ_D，Γ_N は，それぞれ Dirichlet，Neumann 境界値が与えられている Ω の境界 $\partial\Omega$ の一部であり，$\partial\Omega=\Gamma_D\cup\Gamma_N$，$\Gamma_D\cap\Gamma_N=\emptyset$ を満たすものとする．また $\boldsymbol{n}$ は，境界上の単位外向き法線方向ベクトルである．このとき $P(\partial_x)u(\boldsymbol{x},\,t)$ は，任意多点差分法により次の通りに近似される:

$$P(\partial_x)u(\boldsymbol{x}^{(i)},\,t) \approx \sum_{j=1}^N w_{ji}u(\boldsymbol{x}^{(j)},\,t)$$

$(i=1,\,2,\,\ldots,\,N)$．ただし重み行列 $W=(w_{ij})$ は，連立一次方程式 $LW=Q$ の解である．ここで，

$$L = (e^{\zeta\boldsymbol{x}^{(i)}\cdot\boldsymbol{x}^{(j)}})\in\mathbb{R}^{N\times N}\,,$$
$$Q = (P(\zeta\boldsymbol{x}^{(i)})\,e^{\zeta\boldsymbol{x}^{(i)}\cdot\boldsymbol{x}^{(j)}})\in\mathbb{R}^{N\times N}$$

であり，$\zeta>0$ は与えられた定数である．また

$$P(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} K(\boldsymbol{x})\left(\nabla\dfrac{1}{\rho(\boldsymbol{x})}\cdot\boldsymbol{\xi}\right. & \\ \qquad\qquad \left.+\dfrac{1}{\rho(\boldsymbol{x})}\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}\right) & \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \\ 1 & \boldsymbol{x}\in\Gamma_D\,, \\ K(\boldsymbol{x})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\xi} & \boldsymbol{x}\in\Gamma_N \end{cases}$$

である．$\boldsymbol{u}(t)=(u(\boldsymbol{x}^{(1)},\,t),\,\ldots,\,u(\boldsymbol{x}^{(N)},\,t))^{\mathrm{T}}$ とおくと，任意多点差分近似により，(1) の初期値境界値問題は次の 2 階連立常微分方程式の初期値問題となる：

$$\begin{cases} \ddot{\boldsymbol{u}}(t) - W^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{f}(t)\,, & t\in(0,\,T]\,, \\ \boldsymbol{u}(0)=\boldsymbol{u}_0\,, & \dot{\boldsymbol{u}}(0)=\boldsymbol{v}_0\,. \end{cases} \quad (2)$$

ここで $\ddot{\boldsymbol{u}}=(\partial_t^2u_1,\,\ldots,\,\partial_t^2u_N)^{\mathrm{T}}$ であり，$\boldsymbol{f}(t)$ は外力項と境界値を，$\boldsymbol{u}_0$，$\boldsymbol{v}_0$ は初期値を離散化して得られるベクトルである．

(2) を高精度に近似する方法として，反復を基礎とする数値積分法ではなく，Chebyshev 多項式と Gauss-Lobatto 選点によるスペクトル選点法を採用する [3]．ここで (2) を，1 階連立常微分方程式へ変換する．

$$\begin{cases} \dot{\widetilde{\boldsymbol{u}}}(t) - \widetilde{A}\widetilde{\boldsymbol{u}}(t) = \widetilde{\boldsymbol{f}}(t)\,, \quad t \in (0,\, T]\,, \\ \widetilde{\boldsymbol{u}}(0) = \widetilde{\boldsymbol{u}}_0\,. \end{cases} \tag{3}$$

ただし，$\widetilde{\boldsymbol{u}} = (\boldsymbol{u},\, \dot{\boldsymbol{u}})^{\mathrm{T}}$，$\widetilde{\boldsymbol{f}} = (\boldsymbol{0}_N,\, \boldsymbol{f})^{\mathrm{T}}$，$\widetilde{\boldsymbol{u}}_0 = (\boldsymbol{u}_0,\, \boldsymbol{v}_0)^{\mathrm{T}}$ であり，

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} O_N & I_N \\ W^{\mathrm{T}} & O_N \end{pmatrix}$$

である．$\boldsymbol{0}_N$，O_N，I_N は，それぞれ N 次の零ベクトル，零行列，単位行列である．ここで $\widehat{t}_k$ $(k = 0,\, 1,\, \ldots,\, N_T)$ を Gauss-Lobatto 選点，$t_k = T(\widehat{t}_k + 1)/2$ $(k = 0,\, 1,\, \ldots,\, N_T)$ とする．(3) へスペクトル選点法を適用することにより，$2N \cdot N_T$ 元連立一次方程式を得ることができる．

$$\left(\frac{2}{T} D_t \otimes I_{2N} - I_{N_T} \otimes \widetilde{A}\right) \widehat{\boldsymbol{u}} = \widehat{\boldsymbol{f}}\,. \tag{4}$$

D_t はスペクトル選点法における 1 階微分行列，$\widehat{\boldsymbol{u}} = (\widetilde{\boldsymbol{u}}(t_0),\, \ldots,\, \widetilde{\boldsymbol{u}}(t_{N_T - 1}))^{\mathrm{T}}$，

$$\widehat{\boldsymbol{f}} = \left(\widetilde{\boldsymbol{f}}(t_k) - \frac{2}{T}(D_t)_{k,\, N_T}\widetilde{\boldsymbol{u}}_0\right)_{k=0}^{N_T - 1}$$

であり，$\otimes$ は行列の Kronecker 積である．

3 テンソル積構造を用いた連立一次方程式に対する近似解法

(4) の係数行列は疎行列であるが，高精度性を実現するには求積点数を一定数以上取る必要があり，行列保持に対するメモリ使用量が多倍長環境における高精度計算の大きな問題となる．一方，大橋 [4] らにより，行列のテンソル積構造を維持したまま，その特異値を高速かつ小メモリ量で求める方法が提案された．その方法の基礎は，テンソル積構造の係数行列を持つ方程式を同値の行列方程式に変換することにある．(4) の同値な方程式は，逆 vec 作用素 $U = \mathrm{vec}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{u}}) \in \mathbb{R}^{2N \times N_T}$，$F = \mathrm{vec}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{f}}) \in \mathbb{R}^{2N \times N_T}$ により，

$$U\, \widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}\, U = F$$

となる．ただし，$\widetilde{D_t} = 2/T \cdot D_t$ である．すなわち，係数行列については N_T 次正方行列 D_t と N 次正方行列 W のみ保持していればよく，元の問題と比べ使用メモリ量を大幅に抑制することが可能となる．

(4) に対する解法として，非対称行列に適用可能であり，かつ行列構造を変えない BiCG 系手法を採用する．例えば，(4) へ GPBiCGSafe 法 [5] を適用し，逆 vec 作用素による同値変形を行うことで，アルゴリズムを導出できる．

Algorithm 1 テンソル積 GPBiCGSafe 法

Given $U, P, Q, Z, S = O_{2N \times N_T}$;
$F = \mathrm{vec}^{-1}(\widehat{\boldsymbol{f}}) \in \mathbb{R}^{2N \times N_T}$;
$R = F - \left(U\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}U\right)$; $R' = R$;
$r = R' : R$; $\beta = 0$;
repeat
  $P = R + \beta(P - Q)$; $\alpha = \frac{r}{R' : (P\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}P)}$;
  ζ, η を計算する．
  $Q = \zeta(P\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}P) + \eta(Z\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}Z + \beta Q)$;
  $S = R - \alpha(P\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}P)$; $Z = \zeta R + \eta Z - \alpha Q$;
  $U = U + \alpha P + Z$;
  $R = S - (Z\widetilde{D_t}^{\mathrm{T}} - \widetilde{A}Z)$; $\beta = \frac{\alpha \cdot R' : R}{\zeta r}$;
until $\sqrt{R : R} \le \epsilon\sqrt{F : F}$
return $\widehat{\boldsymbol{u}} = \mathrm{vec}(U) \in \mathbb{R}^{2N \cdot N_T}$

アルゴリズム内の $:$ は，行列の Frobenius 積である．数値実験結果は，発表時に示す．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 18K03420 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] 今井仁司, 無限精度計算が切り開く応用解析・数値解析の未来, 数理解析研究所講究録, Vol. 1566 (2007), 96–118.

[2] K. Iijima and K. Onishi, Lattice-free finite difference method for numerical solution of inverse heat conduction problem, Inv. Probl. Sci. Eng., Vol. 15 (2007), 93–106.

[3] C. Canuto *et al.*, Spectral methods in fluid dynamics, Springer-Verlag, 1987.

[4] A. Ohashi and T. Sogabe, On computing maximum/minimum singular values of a generalized tensor sum, Electron. Trans. Numer. Anal., Vol. 43 (2015), 244–254.

[5] 関本幹, 藤野清次, 降順に展開した漸化式を使わない積型反復法, 九州大学大学院システム情報科学紀要, Vol.16 (2011), 70–74.

F4-style アルゴリズムを基にした MQ 問題の求解

伊藤 琢真 [1,2], 篠原 直行 [1], 内山 成憲 [2]
[1] 情報通信研究機構, [2] 首都大学東京
e-mail : tito@nict.go.jp

1　はじめに

連立多変数代数方程式で全次数が 2 である問題は MQ 問題と呼ばれている．MQ 問題を効率よく解くことは多変数公開鍵暗号 (MPKC) の安全性評価に繋がる．本稿では Gröbner 基底を計算する F4-style アルゴリズムを基に MQ 問題を効率よく解くための手法を提案し，さらにその効果について考察する．

2　準備

本稿では主に [1] に基づいた用語および定義を使用する．$\mathbb{F}_q$ を要素数が q 個の有限体とする． 多項式環 $\mathcal{R}$ を $\mathcal{R} = \mathbb{F}_q[x_1, \ldots, x_n]$ とし，$x_1, \ldots, x_n$ から成る単項式全体の集合を $\mathcal{M}$ とする．単項式の順序 $\prec$ は次数付き逆辞書式順序とする．

定義 1 $f \in \mathcal{R}$ に対し，f に現れる単項式で最も大きなものを $\mathrm{LM}(f)$，その単項式の係数を $\mathrm{LC}(f)$ とし，それにより構成される項を $\mathrm{LT}(f) = \mathrm{LC}(f) \cdot \mathrm{LM}(f)$ で表す．

定義 2 $f \in \mathcal{R}, G \subset \mathcal{R}$ として，f のある単項式 m に対して，$\exists g_i \in G\ s.t.\ \mathrm{LM}(g_i) | m$ のとき，m の係数を c として $f - \frac{cm}{\mathrm{LT}(g_i)} g_i$ という操作をすることで m を消すことができる．この操作を f を G で reduction するという．Reduction ができない状態まで reduction を続けることを full-reduction という．

定義 3 ペア $p = \{f, g\} \subset \mathcal{R}$ に対し，$\mathrm{LCM}(p) = \mathrm{LCM}(f, g) = \mathrm{LCM}(\mathrm{LM}(f), \mathrm{LM}(g))$ とし，$\mathrm{Spoly}(p) = \mathrm{Spoly}(f, g) = \frac{u}{\mathrm{LT}(f)} f - \frac{u}{\mathrm{LT}(g)} g, u = \mathrm{LCM}(f, g))$ を f と g の S 多項式を呼ぶ．

Gröbner 基底の計算では S 多項式の生成とその reduction を繰り返す．

定義 4 $G \subset \mathcal{R}$ が row echelon form であるとは，$\forall g_i \neq g_j \in G$ に対して，$\mathrm{LC}(g_i) = 1$ かつ $\mathrm{LM}(g_i) \neq \mathrm{LM}(g_j)$ が成り立つことをいう．

G の row echelon form は G を行列で表現し，その行列に対してガウス消去を行うことで得られる．

3　F4-style アルゴリズム

Gröbner 基底を効率よく計算するアルゴリズムとして F4-style アルゴリズム (Algorithm 5) が知られており，その特徴は複数の S 多項式を同時に full-reduction することである．最初の F4-style アルゴリズムである F4[2] では S 多項式を reduction するときに Macaulay matrix を作っているが，我々はメモリを節約するため，Macaulay matrix を作らない方法を採用した．

Algorithm 5 (F4-style algorithm)
Input: $F = \{f_1, \ldots, f_l\} \subset \mathcal{R}$.
Output: A Gröbner basis of $\langle F \rangle$.
1: $G \leftarrow$ row echelon form of F
2: **if** $0 \in G$ **then** $G \leftarrow G \backslash \{0\}$
3: $P \leftarrow \{\{g_i, g_j\} \mid g_i \neq g_j \in G\}$
4: **while** $P \neq \emptyset$ **do**
5: 　$P' \leftarrow$ a subset of P, $P \leftarrow P \backslash P'$
6: 　$H \leftarrow \{\mathrm{FullReduce}(\mathrm{Spoly}(g_1, g_2), G) \mid \{g_1, g_2\} \in P'\}$
7: 　$\tilde{H} \leftarrow$ row echelon form of $G \cup H$
8: 　$H^+ \leftarrow \{\tilde{h} \in \tilde{H} \mid \mathrm{LM}(\tilde{h}) \notin \mathrm{LM}(G)\}$
9: 　$G \leftarrow \tilde{H} \backslash H^+$
10: 　Add each polynomial $h \in H^+ \backslash \{0\}$ to G and update P
11: **end while**
12: **return** G

G が常に row echelon form となっているため，実際に P に格納するペアは単項式 (G に現れる多項式の LM) のペアで十分である．また無駄なペアを省くためにブッフバーガーの規準というものが 3 行目や 10 行目でよく使われる．5 行目のペアを選ぶ方法については normal strategy と呼ばれる方法がよく使われ，ペアの LCM が $\prec$ に関して最小のものを選ぶ方法である．

4　提案方式

本提案方式は Algorithm 5 を基に MQ 問題を解くことを目的としており，Gröbner 基底が求まることは保証していない．

4.1 ペアの削除

ブッフバーガーの規準を使っていたとしても reduction をすると 0 になるような無駄なペアは存在する．本稿ではランダムに生成された MQ 問題を解いたときの実験的な結果から無駄なペアを削除する方法を提案する．Algorithm 5 の 5 行目で P' は P から normal strategy を基にして選ばれているものとし, 簡単のため $|P'| = 1$ としておき, $p' \in P'$ に対して $d = \deg(\mathrm{LCM}(p'))$ とする．6 行目で $0 \in H$ となったとき, $P_d = \{p \mid p \in P, \deg(\mathrm{LCM}(p)) = d\}$ のペアからなる S 多項式全てを full-reduction すると, 全て零多項式となることが観察できた．この現象を利用することで効率よく無駄なペアを削除できる．しかし理論的に計算に必要なペアを削除してしまう可能性が無いとは言えないため, 出力が Gröbner 基底である保証は無くなる．

4.2 ペアの選択方法

第 4.1 節の方法を適用する場合, normal strategy よりも良い選び方があるということが実験により観察できた．ペアの集合 P の要素 $\{m_1, m_2\}$ は $m_1 \succ m_2 (m_1, m_2 \in \mathcal{M})$ としておく．P の中で LCM の次数が最小となるものを P_d としておき, その中からペアを選ぶ方法を提案する．$\{m_1, m_2\}, \{m_3, m_4\} \in P_d$ に対して $u_1m_1 = u_2m_2 = \mathrm{LCM}(m_1, m_2), u_3m_3 = u_4m_4 = \mathrm{LCM}(m_3, m_4)(u_1, \ldots, u_4 \in \mathcal{M})$ とする．$u_1 \prec u_3$ or $(u_1 = u_3$ and $u_2 \preceq u_4)$ のときに $\{m_1, m_2\}$ を選ぶようにした．

5 結果

実験に使った問題は MQ challenge [3] の TypeII, III に関連するもので, 2 次 n 変数の $2n$ 個の多項式で, ほどんどの場合は解が 1 しか存在しない問題である．扱った係数の体は $\mathbb{F}_{31}$ と $\mathbb{F}_{256}$ で, M4GB[1] と比較した結果は以下の通りである．

表 1. 実計算時間 (sec)

	$\mathbb{F}_{31}$		$\mathbb{F}_{256}$	
n	M4GB	提案法	M4GB	提案法
25	813.6	114.6	751.3	177.0
26	2217.6	226.4	2102.1	348.8
27	6640.5	535.1	6040.5	852.4
28	18683.4	1354.7	17315.8	2136.8
29	53196.9	4551.4	49031.9	7812.3

表 2. メモリ使用量 (MB)

	$\mathbb{F}_{31}$		$\mathbb{F}_{256}$	
n	M4GB	提案法	M4GB	提案法
25	1398	414	1409	414
26	3428	638	3331	638
27	6785	1091	6750	1091
28	14619	1829	14515	1830
29	28950	3448	28462	3447

実験に使用した計算機のスペックは Intel CPU Core i7-7820X, 64GB RAM である．M4GB の実装は並列化が施されていたため, 我々のアルゴリズムも並列で動くようにした．実計算時間, メモリ使用量ともに改善されているといえる．メモリの使用量は良いときには M4GB の 1/8 に節約できている．

汎用サーバ (4 x Intel Xeon CPU E5-4669 v4, 1TB RAM) を使うことで MQ challenge の Type II $n = 37$ を約 75.6 日で, Type III $n = 37$ を約 56.1 日で解くことに成功した．

6 まとめ

本稿では F4-style アルゴリズムを基に MQ 問題を効率よく解く手法を提案した． 結果として M4GB より高速でメモリも節約され, MQ challenge Type II, III の $n = 37$ の問題を解くことに成功した．今後の課題としては, MQ 問題以外でも適用できるのか, 必要なペアだけを確実に選択する方法はあるか, ということが挙げられる．

参考文献

[1] R. H. Makarim and M. Stevens, "M4GB: An Efficient Gröbner-Basis Algorithm," Proc. of ISSAC 2017, pp. 293–300, 2017.

[2] J. C. Faugère, "A New Efficient Algorithm for Computing Gröbner Bases (F_4)," Journal of Pure and Applied Algebra, Vol. 139 (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.

双対性による関数近似公式および数値積分公式の収束解析

早川 知志 [1], 田中 健一郎 [1]
[1] 東京大学
e-mail : satoshi_hayakawa@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

重み付き Hardy 空間上での関数近似問題について, 田中・杉原 [1] が提案し実験的優位性を確認していた手法の理論解析を行い, 準最適性の証明および誤差の収束オーダーを評価することに成功した. 後者の過程には, Borel 測度に対する (無限次元) 最適化問題の双対をとることにより評価を行うという新しい手法が含まれる [2]. 発表では, この結果の別の応用として, 積分近似問題に対する類似の手法の収束レートの評価にも触れる.

2 問題設定

重み付き Hardy 空間 $\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w)$ とは, 帯領域 $\mathcal{D}_d := \{z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| < d\}$ 上で定義された正則関数 f であって, w により定まるノルム

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

が有限のものの集合である. このように無限遠での減衰が特定の関数によって規定されているような関数は, 区間上の関数 F を $(-\infty, \infty)$ 上で変数変換することなどにより得られる. 実際, 例えば積分を考えると

$$\int_{-1}^{1} F(t)\,\mathrm{d}t = \int_{-\infty}^{\infty} F(\psi(x))\psi'(x)\,\mathrm{d}x$$

となり, 減衰 ψ' を持つ関数を考えることになる. このような ψ として二重指数関数や双曲線関数を用いることで, 実際に精度のよい関数近似や数値積分が行われている.

今回は, 重み関数 w に次の条件を課す.

(1) $\mathcal{D}_d$ 上で正則かつ非 0, また実軸上で $(0, 1]$ に値をとる;
(2) $\lim_{x\to\pm\infty} \int_{-d}^{d} |w(x + iy)|\,\mathrm{d}y = 0$ かつ $\lim_{y\to\pm d} \int_{-\infty}^{\infty} |w(x + iy)|\,\mathrm{d}x < \infty$;
(3) $-\log w$ が $\mathbb{R}$ 上で偶関数かつ狭義凸.

また $\mathbb{H}^\infty$ の関数に対する実軸上での (線形な) 近似公式として, f の情報を n 個まで使えるようなもの

$$A[f](x) = \sum_{j=1}^{l}\sum_{k=0}^{n_j-1} f^{(k)}(a_j)\phi_{jk}(x)$$

(ただし $a_j \in \mathcal{D}_d$, $n_1 + \cdots + n_k = n$, ϕ_{jk} は $\mathcal{D}_d$ 上正則) たち全体を考え, minimum worst-case error を

$$E_n^{\min} := \inf_{A[\cdot]} \sup_{\|f\|\le 1} \sup_{x\in\mathbb{R}} |f(x) - A[f](x)|$$

で定める. この $E_n^{\min}$ (d, w に依存) が最適性の指標となる.

この設定のもと, 田中･杉原 [1] はポテンシャル論に基づいた関数近似公式を提案し, 実験的に既存手法 (sinc 法) に対する優位性を確認した.

この手法において最適な $a_1, \ldots, a_n$ の配置は $\inf_{x\in\mathbb{R}} \left(\sum_{j=1}^{n} K(x - a_j) + Q(x)\right)$ を最大化する a_j たちであることが知られている ([3], ただし $K := -\log|\tanh(\frac{\pi}{4d}\cdot)|$, $Q := -\log w$). [1] ではこれをポテンシャル論に結び付け, 離散エネルギー最小化問題 (凸最適化になっている！)

$$\begin{array}{ll} \min & \sum_{i\ne j} K(a_i - a_j) + \frac{2(n-1)}{n}\sum_{i=1}^{n} Q(a_i) \\ \text{s.t.} & a_1 < \cdots < a_n \end{array}$$

を解くことで最適とは限らないが実験的に「良い」配置を得ている. 本研究 [2] では, この手法をさらに理論的に解析し, 理論的にも「良い」といえることを示した.

3 主結果と双対性

[1] で得られる近似を $\mathrm{TS}[f]$ と書くことにする. このとき次が成り立つ [2].

定理 1

$$\sup_{\|f\|\le 1} \sup_{x\in\mathbb{R}} |f(x) - \mathrm{TS}[f](x)| \le \sqrt{2e^3}(E_n^{\min})^{\frac{n-1}{2n}}.$$

これは準最適性を示している. また, 次の評価も成り立つ.

定理 2

$$\sup_{\|f\|\le 1} \sup_{x\in\mathbb{R}} |f(x) - \mathrm{TS}[f](x)| \le \sqrt{2e^3}w(\alpha_n)^{\frac{n-1}{4n}},$$

ただし α_n は

$$\frac{2\alpha_n}{\pi\tanh(d)}\frac{Q(\alpha_n)^2+Q'(\alpha_n)^2}{Q(\alpha_n)}\leq n$$

をみたす最大の実数.

TS は 1 つの近似手法なので, 定理 2 の評価は $E_n^{\min}$ に対しても成立することに注意. またこれは [4] で行われている heuristics の結果にも一致している.

定理 2 の証明の鍵となるのは, 離散エネルギー最小化問題の連続対応物

(P)

$$\begin{array}{ll} \min & \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} K(x-y)\,\mathrm{d}\mu(x)\,\mathrm{d}\mu(y) \\ & \qquad +2\int_{\mathbb{R}} Q(x)\,\mathrm{d}\mu(x) \\ \text{s.t.} & \mu \text{ は正の Borel 測度}, \ \mu(\mathbb{R})=n \end{array}$$

の最適値を下から評価することにある.

ここでは定理 2 の証明自体は省略するが, その部分問題である (P) の下からの評価について述べる. このままでは最小化問題のため, いくら μ を近似的に見積もっても最適値の上界が得られるだけで, 下界を得ることはできない. そこでこの最適化問題を μ についての凸二次計画問題とみて, 双対問題らしきもの

(D)

$$\begin{array}{ll} \max & -\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} K(x-y)\,\mathrm{d}\nu(x)\,\mathrm{d}\nu(y)+2ns \\ \text{s.t.} & \nu \text{ は符号付き Borel 測度} \\ & s-\int_{\mathbb{R}} K(\cdot-y)\,\mathrm{d}\nu(y)\leq Q \end{array}$$

を考える (ただし ν は可積分性をみたし, かつ σ 有限とする). すると, 次が成立する.

定理 3 *(P) と (D) の最適値は一致する.*

弱双対性

$$\text{(P) の最適値} \geq \text{(D) の最適値}$$

の成立について簡単に解説する. これは K が「半正定値」であることから従うのだが, 一般には (連続な) 積分核の半正定値性は, 任意の m と $x_1,\ldots,x_m$ に対して行列 $\{K(x_i-x_j)\}_{i,j=1}^m$ が半正定値であるという特徴付けにより定義される. しかし, 今回は K は原点において発散してしまうため, この特徴付けは意味をなさない.

(P) と (D) の目的関数の差をとると

$$\iint K(x-y)\,\mathrm{d}(\mu-\nu)(x)\,\mathrm{d}(\mu-\nu)(y) \qquad (*)$$

が成り立つという意味での「半正定値性」がほしいということになる. これは実は K の Fourier 変換が非負になる (それ自体も非自明だが) ことから従う. 実際, 積分順序の交換を許し, $\alpha=\mu-\nu$ に適当な可積分性を仮定すると,

$$\begin{aligned} (*) &= \iint K(x-y)\,\mathrm{d}\alpha(x)\,\mathrm{d}\alpha(y) \\ &= \iint \frac{1}{2\pi}\int e^{i\omega(x-y)}\mathcal{F}[K](\omega)\,\mathrm{d}\omega\,\mathrm{d}\alpha(x)\,\mathrm{d}\alpha(y) \\ &= \frac{1}{2\pi}\int \mathcal{F}[K](\omega)\left|\int e^{i\omega x}\,\mathrm{d}\alpha(x)\right|^2\mathrm{d}\omega \geq 0 \end{aligned}$$

となる. 実際には可積分性や Fubini の定理の適用のためにかなり複雑な議論を要することを注意しておく [2].

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17K14241 の助成を受けた.

参考文献

[1] Tanaka, K., & Sugihara, M. (2018). Design of accurate formulas for approximating functions in weighted Hardy spaces by discrete energy minimization. IMA Journal of Numerical Analysis, published online (doi: 10.1093/imanum/dry056).

[2] Hayakawa, S., & Tanaka, K. (2019). Convergence analysis of approximation formulas for analytic functions via duality for potential energy minimization. arXiv preprint arXiv:1906.03133.

[3] Sugihara, M. (2003). Near optimality of the sinc approximation. Mathematics of Computation, 72(242), 767-786.

[4] Tanaka, K., Okayama, T., & Sugihara, M. (2017). Potential theoretic approach to design of accurate formulas for function approximation in symmetric weighted Hardy spaces. IMA Journal of Numerical Analysis, 37(2), 861-904.

p 乗根の合成有理関数による二重指数関数近似

Gawlik Evan[1], 中務佑治[2]
[1] ハワイ大学マノア校，[2] オックスフォード大学、国立情報学研究所
e-mail：nakatsukasa@maths.ox.ac.uk

1　概要

有理関数近似論で重要な結果の一つに、特異点が近似領域内もしくは近くに存在する場合には、多項式よりも有理関数の方が遥かに高い関数近似性能を持つという事実がある [1]．例えば $[-1,1]$ における絶対値関数や $[0,1]$ における平方根 $x^{1/2}$ などが好例で、多項式では $1/n$ 近似にとどまるのに対して (n,n) 型有理関数ならば指数関数の平方 $\exp(-c\sqrt{n})$ で近似できることが知られている．もう少し一般的に、p を自然数として p 乗根 $x^{1/p}$ を $[0,1]$ 上で同様に $\exp(-c\sqrt{n})$ 近似できることが Stahl [2] により示されている．

本研究で注目するのは、合成有理関数というクラスの関数で p 乗根を近似することである．具体的には、$r_k(\cdots r_2(r_1))$ と書ける関数をここでは ’純粋’ 合成有理関数と呼び、これを少し拡張した

$$r(x) = r_k(x, r_{k-1}(x, r_{k-2}(\cdots(x, r_1(x,1)))))$$

の形をした関数を合成有理関数と呼び、このクラスの関数で p 乗根を近似したい．行列 p 乗根計算のための Newton 法で得られる有理関数はこのクラスに入ることは容易に確認できる．合成有理関数は同型の有理関数よりも遥かに狭い関数クラスだが、少ないパラメータで高い型の有理関数を表現できる．例えば、(m,m) 型有理関数を k 回合成することで (m^k,m^k) 型の有理関数が得られる．さらに、Zolotarev 関数等 [3, 4]、最良近似有理関数を含む場合もある．本研究では p 乗根を合成有理関数で構成的に近似し、型に関しては約 p 乗根指数関数的、またパラメータ数に関して二重指数関数的に収束することを示す．

合成有理関数は古典的関数近似論ではあまり扱われないが、実は科学技術計算で既に大きな役割を担っている．好例として以下がある．

- 上述の行列関数計算では蜜行列アルゴリズム [5] の殆どは陰的に合成有理関数が使われているとみなせる．
- Deep learning で背景にある近似関数は ReLU などの activation function を多数合成して得られるものである．

ここでは、Gawlik[6] で現れる p 乗根の合成有理関数に着目する．$f_0(x)=1, \alpha_0=\alpha$ として、

$$f_{k+1}(x) = f_k(x)\hat{r}_{m,\ell}\left(\frac{x}{f_k(x)^p}, \alpha_k, \sqrt[p]{\cdot}\right),$$
$$\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_k}{\hat{r}_{m,\ell}\left(\alpha_k^p, \alpha_k, \sqrt[p]{\cdot}\right)},$$

で再帰的に構成される有理関数である．ここで $\hat{r}_{m,\ell}(x,\alpha,\sqrt[p]{\cdot})$ は $(m,\ell)\in\mathbb{N}_0\times\mathbb{N}_0\setminus\{(0,0)\}$ 型の $[\alpha^p,1]$ における（相対誤差の）最良近似有理関数である、つまり

$$\hat{r}_{m,\ell}(x,\alpha,\sqrt[p]{\cdot}) = \left(\frac{1+\alpha}{2\alpha}\right) r_{m,\ell}(x,\alpha,\sqrt[p]{\cdot}),$$

$$r_{m,\ell}(\,\cdot\,,\alpha,\sqrt[p]{\cdot}) = \operatorname*{arg\,min}_{r\in\mathcal{R}_{m,\ell}} \max_{x\in[\alpha^p,1]} \left|\frac{r(x)-x^{1/p}}{x^{1/p}}\right|.$$

この関数は元々行列 p 乗根へのアルゴリズムとして導入され、原点を含まない領域 $[\alpha^p,1]$ での近似を目指すものである．本研究では、うまく α を選ぶことで、原点を含む [0,1] 上での高品質な近似有理関数が得られることを示す．主定理は

定理 1　自然数 $p\ge 2$ に対して N が存在して、任意の $n\ge N$ に対して合成有理関数 r が存在して、型は $(n,n-1)$ であり

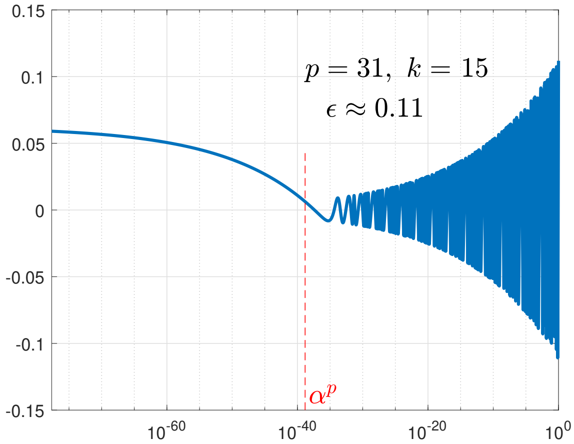
$$\max_{x\in[0,1]} |r(x)-x^{1/p}| \le \exp(-bn^c),$$

を満たす．r は $(p,p-1)$ 型有理関数を $\lfloor \log_p n\rfloor + 1$ 回合成して得られる関数である．ここで $b>0$ は p に依存する定数で、

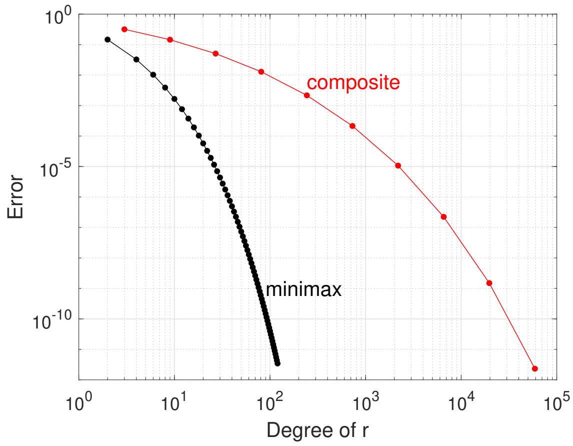
$$c = \frac{\log\left(\frac{p}{p-1}\right)\log 2}{\log\left(\frac{2p}{p-1}\right)\log p}.$$

である．

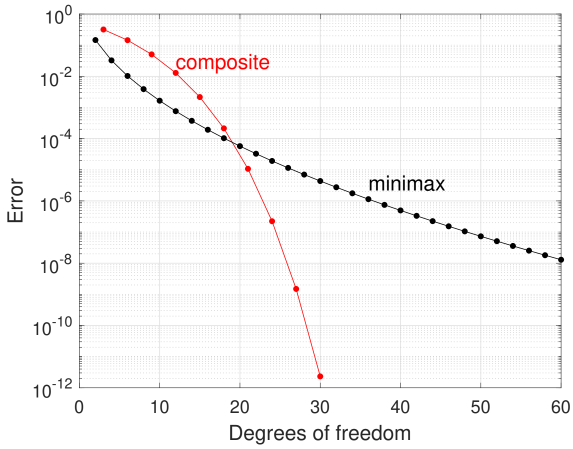
具体的には、誤差関数は下図のような形を取る．



誤差自身は、次数（型）に関しては $\exp(-c\sqrt{n})$ 収束する最良近似有理関数に比べ劣る：

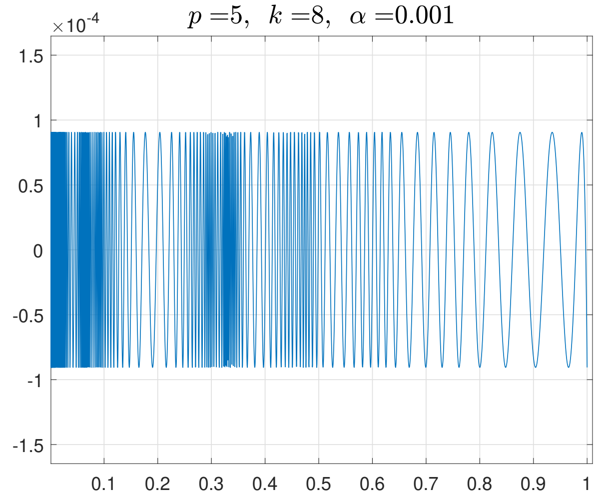


しかしながら、パラメータ数に関しては二重指数関数近似されるため、合成有理関数で圧倒的に高い近似ができる．



証明は、$[0, \alpha^p]$ と $[\alpha^p, 1]$ で誤差関数の挙動が異なるので別に対応し、また Jacobi elliptic functions と深い関係を持つ Zolotarev 関数のような美しい関係性が知られていないため、間接的なものを採用し、「ϵ 誤差を達成するために必要な合成回数」を導くことから近似関数の収束性を示す．詳しくは [7] を参照されたい．

副産物として、sector 関数 $\mathrm{sect}_p(z) = z/(z^p)^{1/p}$ の’純粋’合成有理関数近似が得られ、こちらも（原点を除く領域で）パラメータ数に関して二重指数関数的に誤差が収束する．誤差関数は下図のように有名な equioscillation 挙動を見せる．



参考文献

[1] L. N. Trefethen. *Approximation Theory and Approximation Practice.* SIAM, 2013.

[2] H. R. Stahl. Best uniform rational approximation of x^α on $[0, 1]$. *Acta Math.*, 190(2):241–306, 2003.

[3] Y. Nakatsukasa and R. W. Freund. Computing fundamental matrix decompositions accurately via the matrix sign function in two iterations: The power of Zolotarev's functions. *SIAM Rev.*, 58(3):461–493, 2016.

[4] I. Ninomiya. Best rational starting approximations and improved Newton iteration for the square root. *Math. Comp.*, 24(110):391–404, 1970.

[5] N. J. Higham. *Functions of Matrices: Theory and Computation.* SIAM, Philadelphia, PA, USA, 2008.

[6] E. S. Gawlik. Rational minimax iterations for computing the matrix pth root. *arXiv preprint arXiv:1903.06268.*

[7] E. S. Gawlik and Y. Nakatsukasa Approximating the pth root by composite rational functions, *arXiv preprint arXiv:1906.11326*, 2019.

振動積分に対する佐藤超函数論に基づく数値計算法

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

1　概要

Fourier 変換などによく現れる減衰の遅い振動関数の半無限区間積分は，DE 公式など従来の数値積分公式では計算が難しい．これに対して，DE 公式と Richardson 補外を組み合わせた方法 [1]，振動積分に特化した独自の DE 変換を用いた DE 公式 [2] などが考案されている．本研究では，Fourier-Laplace 変換で表されるある解析関数の解析接続による振動積分の計算法を提案し，その佐藤超函数論との関連について言及する．

2　振動積分の数値計算法

次の積分を考える．

$$I = \int_0^{\infty} f(x)\mathrm{d}x,$$

ここで，$f(x)$ は半無限区間 $(0, +\infty)$ 上で定義される振動関数で，$x \to +\infty$ で例えばべき乗のオーダーで遅く減衰するものとする．これに対し，次の複素変数 ζ を持つ関数を考える．

$$\mathscr{F}[f](\zeta) = \int_0^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta x}\mathrm{d}x.$$

$f(x)$ に対し適切な条件を課すと，右辺の積分は $\mathrm{Im}\,\zeta > 0$ のとき収束し，$\mathscr{F}[f](\zeta)$ は上半平面 $\mathrm{Im}\,\zeta > 0$ における解析関数を表す．そして，振動積分 I は極限

$$I = \lim_{\epsilon \to 0+} \mathscr{F}[f](\mathrm{i}\epsilon) \tag{1}$$

により求められる．したがって，解析関数 $\mathscr{F}[f](\zeta)$ を上半平面 $\mathrm{Im}\,\zeta > 0$ で求め，これを実軸上に解析接続することにより，振動積分 I を求めることができる．本研究では，これを数値的に行うことにより，振動積分 I を数値的に求めることを考える．

$\mathscr{F}[f](\zeta)$ の上半平面 $\mathrm{Im}\,\zeta > 0$ に適切に与えられた点 ζ_0 の周りの Taylor 級数展開を考える．

$$\mathscr{F}[f](\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\zeta - \zeta_0)^n, \tag{2}$$

ここで，c_n は次で与えられる Taylor 係数である．

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{n!}\,\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\zeta^n}\mathscr{F}[f](\zeta)\bigg|_{\zeta=\zeta_0} \\ &= \frac{1}{n!}\int_0^{\infty} (\mathrm{i}x)^n f(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta_0 x}\mathrm{d}x \end{aligned}$$

この c_n が求められれば，Taylor 級数 (2) を用いて点 ζ_0 近傍で $\mathscr{F}[f](\zeta)$ を計算できる．c_n を与える積分は，被積分関数が指数関数的に減衰するので，DE 公式など従来の数値積分公式で簡単に計算することができる．

さて，Taylor 級数 (2) は一般に，R を収束半径として，収束円 $|\zeta - \zeta_0| < R$ の内部でのみ収束する．求める振動積分 I は極限 (1) で与えられ，収束半径 R が小さすぎるとこの極限が計算できない．そこで，Taylor 級数 (2) で与えられる解析関数 $\mathscr{F}[f](\zeta)$ をより広い領域に解析接続し，極限 (1) が計算できるようにする．ここでは，Taylor 級数を次のように連分数に展開することにより，$\mathscr{F}[f](\zeta)$ の解析接続を行う．

$$\mathscr{F}[f](\zeta) = \cfrac{a_0}{1 + \cfrac{a_1(\zeta - \zeta_0)}{1 + \cfrac{a_2(\zeta - \zeta_0)}{1 + \ddots}}}.$$

一般に連分数は Taylor 級数に比べて収束域が広いので，連分数に変換することにより $\mathscr{F}[f](\zeta)$ の解析接続ができると期待される．連分数の係数 a_n は Taylor 係数 c_n から商差法により求めることができる [3]．ところが，一般に商差法は丸め誤差に弱いので，多倍長演算により精度を保つことにする．

3　佐藤超函数論との関連

本研究の方法は佐藤超函数論と関連がある．佐藤超函数論は佐藤幹夫により考案された，複素関数論に基づく一般化関数の理論である [4]．応用向けに書かれた佐藤超函数論の易しい解説としては，例えば [5] を参照されたい．これによれば，超函数と呼ばれる一般化関数 $f(x)$ は，

複素平面から実軸を除いた領域 $\mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$ に含まれる領域における解析関数の境界値の差として表される．

$$f(x) = F_+(x+\mathrm{i}0) - F_-(x-\mathrm{i}0),$$

ここで，$F_+(z)$ は上半平面 $\mathrm{Im}\,z > 0$ に含まれる領域における解析関数，$F_-(z)$ は下半平面 $\mathrm{Im}\,z < 0$ に含まれる領域における解析関数である．例えば，Dirac のデルタ関数は佐藤超函数論では次のように表される．

$$\delta(x) = -\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left(\frac{1}{x+\mathrm{i}0} - \frac{1}{x-\mathrm{i}0}\right).$$

本研究の方法を佐藤超函数論の言葉で述べれば，上で $F_+(\zeta) = \mathscr{F}[f](\zeta)$, $F_-(\zeta) = 0$ とおいて得られる佐藤超函数 $\mathscr{F}[f](x+\mathrm{i}0)$ を考え，その $x=0$ における値として振動積分 I を求めていることになる．

なお，佐藤超函数論の数値解析への応用に関する研究として，数値積分の理論誤差解析と佐藤超函数論との関連を調べた森による研究 [6], 佐藤超函数論における積分の定義を用いた数値積分法に関する著者らの研究 [7] などがある．

4 数値例

次の振動積分に対し，本研究の方法で積分値を計算した．

$$(1)\quad \int_0^\infty \frac{\cos(x/2)-\cos x}{x}\mathrm{d}x = \log 2 = 0.693147\ldots,$$

$$(2)\quad \int_0^\infty \frac{xJ_0(x)}{x^2+1}\mathrm{d}x = K_0(1) = 0.421024\ldots,$$

$$(3)\quad \int_0^\infty \log x J_0(x)\mathrm{d}x = -\gamma - \log 2 = -1.27036\ldots,$$

$$(4)\quad \int_0^\infty \frac{Y_0(x)}{x^2+1}\mathrm{d}x = -K_0(1) = -0.421024\ldots.$$

計算は C++プログラムに 10 進 100 桁の多倍長演算をライブラリ exflib[8] を用いて行い，Taylor 係数 c_n は DE 公式を用いて c_0 から c_{100} まで計算した．Taylor 級数の中心 ζ_0 は $\zeta_0 = \mathrm{i}$ ととった．表 1 に相対誤差および被積分関数の計算回数を示す．この表より，各積分は本研究の方法により高い精度で計算されていることがわかる．

表 1. 振動積分の計算結果

積分	相対誤差	被積分関数の計算回数
(1)	5.4×10^{-26}	917
(2)	1.4×10^{-36}	947
(3)	3.8×10^{-36}	958
(4)	2.1×10^{-37}	947

参考文献

[1] M. Sugihara, Methods of numerical integration of oscillatory functions by the DE-formula with the Richardson extrapolation, J. Comput. Appl. Math., 17(1987), 47–68.

[2] T. Ooura and M. Mori, A robust double exponential formula for Fourier-type integrals, J. Comput. Appl. Math., 112(1999), 229–241.

[3] P. Henrici, Applied and Computational Complex Analysis, Vol. 2, John Wiley & Sons, 1977.

[4] 佐藤幹夫，超函数の理論，数学，10 巻 (1958), 1–27.

[5] U. Graf, Introduction to Hyperfunctions and Their Integral Transformation — An Applied and Computational Approach, Birkhäuser, 2010.

[6] 森正武，数値解析と超函数論，京都大学数理解析研究所講究録，145(1972), 1–11.

[7] H. Ogata and H. Hirayama, Numerical integration based on hyperfunction theory, J. Comput. Appl. Math., 327(2018), 243–259.

[8] H. Fujiwara, Exflib information, `http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/`.

シンプレクティック数値積分法とリュービルの定理

佐々 成正
日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター
e-mail : sasa.narimasa@jaea.go.jp

1　はじめに

これまで我々は, ハミルトン系の時間発展問題に対し, シンプレクティック数値積分法を適用した際に成り立つ保存則について議論してきた. その 1 つの結果として, 偏微分方程式系にシンプレクティック数値解法を適用した際, 系の運動量保存則が成り立つ事を示した.

本講演ではシンプレクティック数値解法による時間発展において, 相空間の体積を具体的に計算し, リュービルの定理が成り立っていることを示す手法について考察する.

2　ハミルトン系

本稿では簡単のため 1 自由度ハミルトン系,

$$h_1 = h_1(q_1, p_1), \tag{1}$$

と 2 自由度系,

$$h_2 = h_2(q_1, q_2, p_1, p_2), \tag{2}$$

に対する時間発展問題,

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial h_m}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial h_m}{\partial q_j}, \tag{3}$$

を例に取って考察する ($1 \leq j, m \leq 2$). ここで, 発展方程式 (3) にシンプレクティック数値解法を適用した場合の離散的時間発展を

$$(q_j(t+\Delta t), p_j(t+\Delta t)) = \hat{S}(\Delta t)(q_j(t), p_j(t)) \tag{4}$$

で表すことにする. Δt は時間メッシュである. また, 離散的時間発展 (4) はある仮想的なハミルトニアン,

$$h_{mS}(q_j, p_j) = h_m + h_{m1}\Delta t + h_{m2}\Delta t^2 + \cdots, \tag{5}$$

による時間発展と等価であると仮定する.

3　1 自由度系

1 自由度ハミルトン系 (1) に対するリュービルの定理とは, 相空間内のある閉領域の面積

$$I_1 = \iint dq_1 dp_1, \tag{6}$$

が (3) による時間発展によって変化しないことを意味している. シンプレクティック数値積分法は正準変換であることから, その時間発展においても式 (6) の保存が言える.

相空間の面積を具体的に計算するのため, 仮想的に系 h_1 が等間隔で L 個並んだ周期的格子系,

$$H_1 = \sum_{j=1}^{L} h_1(q_1^{(j)}, p_1^{(j)}), \tag{7}$$

を用意する. さらに, 系 H_1 に式 (4) と同じシンプレクティック数値解法を適用して得られる離散時間発展は, 系 (5) を並べた周期的格子系,

$$H_{1S} = \sum_{j=1}^{L} h_{1S}(q_1^{(j)}, p_1^{(j)}), \tag{8}$$

と等価な時間発展を与える. 周期的格子系 (8) に対して離散フーリエ変換を用いた補間を,

$$u_j(s) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sum_{\ell=-L/2}^{L/2-1} a_\ell \mathrm{e}^{ik_\ell(j-1+s)}, \tag{9}$$

$$u_j = q_1^{(j)} + \mathrm{i}p_1^{(j)}, \quad k_\ell = 2\pi\ell/L, \tag{10}$$

$$u(x_1) = u_j(s), \quad x_1 = (j-1+s)\Delta x \tag{11}$$

で定義すれば, この補間式を用いて相空間の面積 (6) が,

$$I_1 = \int u^*(x_1)\partial_{x_1} u(x_1) dx_1, \tag{12}$$

で与えられる.

4　2 自由度系

2 自由度ハミルトン系 (2) に対するリュービルの定理は, 相空間内のある閉領域の体積

$$I_2 = \iiiint dq_1 dq_2 dp_1 dp_2, \tag{13}$$

が (3) による時間発展によって変化しないことを指している.

講演では, この相空間の体積の具体的な計算方法について考察したい.

On Directional Frames Having Lipschitz Continuous Fourier Transforms

藤ノ木 健介 [1]，橋本 紘史 [2]，木下 保 [3]
[1] 東海大学，[2,3] 筑波大学
e-mail : h.hashimoto@math.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本講演では，Wavelet，Curvelet，Shearlet の定義から紹介しよう．

2 Wavelet

R 上の関数 ψ が直交ウェーブレットであるとは，$\{\psi_{j,k}(x); j,k \in \mathbf{Z}\}$ が $L^2(\mathbf{R})$ の正規直交基底となることで，次と同値である．

$$(i)\ \sum_{j\in\mathbf{Z}} \left|\hat{\psi}(2^j\xi)\right|^2 = 1$$

$$(ii)\ \sum_{j=0}^{\infty}\hat{\psi}\Big(2^j(\xi+2(2m+1)\pi)\Big)\overline{\hat{\psi}(2^j\xi)}=0\ (m\in\mathbf{Z})$$

これは 1 次元版のウェーブレットの定義である（[1]，[2] を見よ）．2 次元以上のウェーブレットに関しても様々な研究がなされてきた（[3]，[4]，[5] 等を見よ）．Curvelet や Shearlet のときは (i) のような 1 の分解に相当する式だけを満たし，パーセバルフレームによる展開を目指している．

3 Curvelet

周波数空間で直交座標系でなく極座標表示を用いるが，$r = |\xi|, \omega = \tan^{-1}\frac{\xi_2}{\xi_1}$ とおいて次を考える．

$$\sqrt{\alpha^3}e^{-ib\cdot(r\cos\omega, r\sin\omega)}W(\alpha^2 r)V(\pi^{-1}\alpha^{-1}\omega).$$

ただし，W と V は以下の 1 の分解の条件を満たすとする．

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty}|W(\alpha^2 r)|^2 = 1\quad r\in\Big(\frac{3}{4},\frac{3}{2}\Big),$$

$$\sum_{\ell=-\infty}^{\infty}|V(\omega-\ell)|^2 = 1\quad \omega\in\Big(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\Big).$$

ここで，W の方の式では $\alpha = 2^{-j/2}$ とおいて和を実行している．動径に関する関数 W は r の負の方も同時に被覆することを考えているので，角度を半円分の領域だけに制限すればよい．

このとき，Curvelet の定義は次のようになる．

$$\Psi_{j,\ell}^{(k)}(x) = 2^{-3j/4}\mathcal{F}^{-1}\Big[W(2^{-j}r)V\Big(\pi^{-1}2^{\lceil j/2\rceil+1}\omega\Big)\Big]\Big(R_{\Omega_{j,\ell}}x - \Big(\frac{k_1}{2^j},\frac{k_2}{2^{j/2}}\Big)\Big).$$

ただし，$\Omega_{j,\ell} = 2^{-\lceil j/2\rceil-1}\ell\pi$ $(-2^{\lceil j/2\rceil+1} \le \ell < 2^{\lceil j/2\rceil+1})$ であり，$R_{\Omega_{j,\ell}}$ は角度 $-\Omega_{j,\ell}$ であるような逆回転の行列とする（[6] を見よ）．この Curvelet を用いたフレームによる展開式は冗長性を含んでいるが，パーセバルフレームとなっているので展開係数が内積の形になっているため扱いやすいと言える．Curvelet によるタイリングは，j が進むたびに 2 分割することであることにも注意する．

4 Shearlet

Curvelet は周波数空間の極座標表示をもとに構成されていたが，これはコンピューターへの実装の際にデカルト座標へと改良しなければならなかった．その改良の 1 つに Digital curvelet というものが知られている ([7] を見よ)．また，Curvelet は parabolic scaling を導入しているため，原点付近に Wavelet like な関数を導入せねばならなかった．Guo，Kutyniok，Labete[8] によって考案された Shearlet は，極座標の代わりに原点からの角度に依存する shear パラメーターを導入することでこれらの問題を解決したとされている．また Shearlet は parabolic scaling と shear に対応する行列

$$A_a = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{1/2}\end{pmatrix},\quad S_s = \begin{pmatrix} 1 & s \\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

を用いて

$$\psi_{j,s,k}(x) = 2^{\frac{3}{4}j}\psi(S_sA_{2^j}x - k)\ (j,s\in\mathbf{Z}, k\in\mathbf{Z}^2)$$

で定義される．Continuous shearlet のパラメーターは群を成しており，それを上手くサンプリ

ングしたものとして上の Discrete shearlet を定義している．ψ が Continuous shearlet の文脈で Classical shearlet と呼ばれるものであれば Curvelet と同様な周波数空間の 1 の分解を得る:

$$\sum_{j\in\mathbf{Z}}\sum_{s\in\mathbf{Z}}|\hat{\psi}({}^tS_{-s}A_{2^{-j}}\omega)|^2=1.$$

従って，Shearlet も $L^2(\mathbf{R}^2)$ のパーセバルフレームとなっている（[9] を見よ）．

5 Frame

Multidirectional な Frame を用いた展開に対して，まずは周波数空間で不連続な関数による 1 の分解にもとづいた以下の結果を紹介する．

定理 1 $N\geq 2$，$J\in\mathbf{Z}$，$k'=\left(k_1\cot\frac{\pi}{2^N},k_2\right)$，$p_N=(2\cos\frac{\pi}{2^N})^{-1}$ とし，実数値関数 $\Psi_{j,\ell}^{(N)}$ を次で定義する．

$$\Psi_{j,\ell}^{(N)}(x)$$
$$=\sum_{\pm}\left\{\pm\frac{\cos(2^j\pi p_N X_\ell^\pm)-\cos(2^{j+1}\pi p_N X_\ell^\pm)}{2^{j+2}\pi^2 p_N(4p_N^2-1)^{\frac{1}{4}}X_\ell^\pm R_\ell x\cdot(1,0)}\right\},$$

ここで，

$$X_\ell^\pm=x_1\sin\frac{(2\ell\pm 1)\pi}{2^N}+x_2\cos\frac{(2\ell\pm 1)\pi}{2^N}.$$

このとき，$f\in L^2(\mathbf{R}_x^2)$ は

$$f=\sum_{j\geq J+1}\sum_{1\leq\ell\leq 2^{N-1}}\sum_{k\in\mathbf{Z}^2}\alpha_{j,\ell,k}\Psi_{j,\ell}^{(N)}\left(x-2^{-j}R_{-\ell}k'\right),$$

と展開できる．ただし，

$$\alpha_{j,\ell,k}=\int_{\mathbf{R}_x^2}f(x)\Psi_{j,\ell}^{(N)}\left(x-2^{-j}R_{-\ell}k'\right)dx,$$

であり，R_ℓ は反時計回りに角度 $2^{1-N}\ell\pi$ の回転作用素とする．

この結果は前回の応用数理学会で報告したが，今回は周波数空間でリプシッツ連続な関数による 1 の分解にもとづいた結果を報告する．

参考文献

[1] I. Daubechies, Ten lectures on wavelets, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 61, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.

[2] E. Hernandez and G. L. Weis, A First Course on Wavelets, CRC Press, New York, 1996.

[3] R. Ashino, S. J. Desjardins, C. Heil, M. Nagase, and R. Vaillancourt, Smooth tight frame wavelets and image microanalysis in the Fourier domain, Comput. Math. Appl., 45, 1551–1579, 2003.

[4] K. Fujinoki and O. V. Vasilyev, Triangular wavelets: an isotropic image representations with hexagonal symmetry, EURASIP J. Image and Video Process., Article ID 248581 1–16, 2009.

[5] Z. Zhang and N. Saito, Ring-like structures of frequency domains of wavelets, Appl. Comput. Harmon. Anal., 29, 18–29, 2010.

[6] E. Candés and D. Donoho, Continuous curvelet transform. II. Discretization and frames, Appl. Comput. Harmon. Anal., Vol. 19, pp. 198–222, 2005.

[7] E. Candès, L. Demanet, D. Donoho, and L. Ying, Fast Discrete Curvelet Transforms, Multiscale Model. Simul., 5, 861–899, 2006.

[8] K. Guo, G. Kutyniok, and D. Labate, Sparse multidimensional representations using anisotropic dilation and shear operators, Wavelets and splines: Athens 2005, 189–201, Mod. Methods Math., Nashboro Press, Brentwood, TN, 2006.

[9] G. Kutyniok and D. Labate, Introduction to shearlets. Shearlets, 1-38, *Appl. Numer. Harmon. Anal.*, Birkhäuser/Springer, New York, 2012.

四元数線形正準変換

芦野 隆一 (Ryuichi Ashino)

大阪教育大学　数理情報 (Mathematics and Infomatics, Osaka Kyoiku University
e-mail: ashino@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

Abstract

線形正準変換は光学や信号解析において重要な役割を果たしている．フーリエ変換，ラプラス変換，分数次フーリエ変換，フレネル変換などの変換は，線形正準変換の特別な場合として扱うことができる．したがって，四元数値関数の線形正準変換を考えることは意味がある．本講演では，四元数線形正準変換を考える上で適切な合成積の定義を述べる．

1　導入

本研究は，Department of Mathematics, Universitas Hasanuddin, Tamalanrea Makassar, Indonesia の Mawardi Bahri との共同研究である．

ウィリアム・ローワン・ハミルトンは平面上の運動（回転と平行移動）を表現できる複素数を拡張し，３次元空間の運動を表現できる四元数（超複素数）を考えた．四元数は非可換のため，四元数フーリエ変換の定義はいくつかある．以下に典型的な定義を述べる．

定義 1.1. $f \in L^2(\mathfrak{R}^2;\mathbb{H})$ の四元数フーリエ変換 $\mathcal{F}_q\{f\} \in L^2(\mathfrak{R}^2,\mathbb{H})$ を以下で定義する．

$$\mathcal{F}_q\{f\}(\boldsymbol{v}) = \int_{\mathfrak{R}^2} f(\boldsymbol{z})\, e^{-\mu \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{z}}\, d\boldsymbol{z}.$$

ここで μ は $\mu^2 = -1$ を満たす四元数である．逆四元数フーリエ変換は

$$f(\boldsymbol{z}) = \mathcal{F}_q^{-1}[\mathcal{F}_q\{f\}](\boldsymbol{z}) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathfrak{R}^2} \mathcal{F}_q\{f\}(\boldsymbol{v})\, e^{\mu \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{z}}\, d\boldsymbol{v}.$$

四元数フーリエ変換は [1] により提案され，[2, 3] でカラー画像に応用された．四元数フーリエ変換の基本的な性質は， [4, 5] を見よ．

2　四元数フーリエ変換に付随する合成積

定義 2.1. 関数 $f \in L^2(\mathfrak{R}^2;\mathbb{H})$ と $g \in L^2(\mathfrak{R}^2;\mathbb{H})$ の合成積 $f \star g$ を以下で定義する．

$$(f \star g)(\boldsymbol{z}) = \int_{\mathfrak{R}^2} f(\boldsymbol{y})g(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{y}.$$

定理 2.1 ([6])**.** 関数 $f,\, g \in L^2(\mathfrak{R}^2;\mathbb{H})$ を以下のように表現する：

$$f(\boldsymbol{z}) = f_0(\boldsymbol{z}) + \mathbf{i}f_1(\boldsymbol{z}) + \mathbf{j}f_2(\boldsymbol{z}) + \mathbf{k}f_3(\boldsymbol{z}), \quad g(\boldsymbol{z}) = g_0(\boldsymbol{z}) + \mathbf{i}g_1(\boldsymbol{z}) + \mathbf{j}g_2(\boldsymbol{z}) + \mathbf{k}g_3(\boldsymbol{z}).$$

このとき，以下が成り立つ．

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_q\{f \star g\}(\boldsymbol{v}) = {} & \mathcal{F}_q\{g\}(\boldsymbol{v})\mathcal{F}_q\{f_0\}(\boldsymbol{v}) + \mathbf{i}\mathcal{F}_q\{g\}(\boldsymbol{v})\mathcal{F}_q\{f_1\}(\boldsymbol{v}) \\ & + \mathbf{j}\mathcal{F}_q\{g\}(\boldsymbol{v})\mathcal{F}_q\{f_2\}(\boldsymbol{v}) + \mathbf{k}\mathcal{F}_q\{g\}(\boldsymbol{v})\mathcal{F}_q\{f_3\}(\boldsymbol{v}). \end{aligned} \tag{1}$$

3　四元数線形正準変換

特殊線型群 $SL(2,\mathfrak{R})$ の元 $A_s = \begin{pmatrix} a_s & b_s \\ c_s & d_s \end{pmatrix} \in SL(2,\mathfrak{R}), s=1,2$ に対し，$b_1b_2 \neq 0$ のとき，線形正準変換の核 K_{A_s}，$s=1,2$ を

$$K_{A_s}(z_s, v_s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu b_s}}\, e^{\frac{1}{2}\mu\left(\frac{a_s}{b_s}z_s^2 - \frac{2}{b_s}z_s v_s + \frac{d_s}{b_s}v_s^2\right)}, \qquad s=1,2 \tag{2}$$

で定義し，$f \in L^1(\mathfrak{R}^2;\mathbb{H})$ の線形正準変換を

$$L^{\mathbb{H}}_{A_1,A_2}\{f\}(\boldsymbol{v}) = \begin{cases} \displaystyle\int_{\mathfrak{R}^2} f(\boldsymbol{z}) K_{A_1}(z_1,v_1) K_{A_2}(z_2,v_2)\, d\boldsymbol{z}, & b_1b_2 \neq 0, \\ \sqrt{d_1d_2}\, f(d_1v_1, d_2v_2)\, e^{\mu\left(\frac{c_1d_1}{2}\right)v_1^2}\, e^{\mu\left(\frac{c_2d_2}{2}\right)v_2^2}, & b_1b_2 = 0 \end{cases} \tag{3}$$

で定義する．

謝辞

この結果は，本研究は JSPS 科研費 JP16K05216, JP17K05298, JP17K05363 と京都大学数理解析研究所の共同利用と数学アドバンストイノベーションプラットフォームによる成果である．

References

[1] T. A. Ell, *Quaternion-Fourier transforms for analysis of two-dimensional linear time-invariant partial differential systems*, Proceedings of the 32nd IEEE Conference on Decision and Control, vol.**2** (1993), 1830–1841.

[2] T. A. Ell and S. J. Sangwine, *Hypercomplex Fourier transforms of color images*, IEEE Transactions on Image Processing **16**(1) (2007), 22–35.

[3] S. J. Sangwine, Fourier transforms of colour images using quaternion, or hypercomplex, numbers, Electronics Letters, 32(21) (1996), 1979–1980.

[4] R. Bujack, H. De Bie, N. De Schepper and G. Scheuermann, *Convolution products for hypercomplex Fourier transforms*, Journal of Mathematical Imaging and Vision **48** (2014), 606–624.

[5] L. P. Chen, K. I. Kou, and M.S. Liu, *Pitt's inequality and the uncertainty principle associated with the quaternion Fourier transform*, Journal of Mathematical Analysis and Application **423**(1) (2015), 681–700.

[6] M. Bahri, A. Lawi, N. Aris, M. Saleh, and M. Nur, *Relationships between convolution and correlation for Fourier transform and quaternion Fourier transform*, International Journal of Mathematical Analysis **7**(43) (2013), 2101–09.

p 進数体上の複素数値関数に対する Stockwell 変換

鈴木 俊夫 [1]
[1] 流通経済大学
e-mail : tosuzuki@rku.ac.jp

1 p 進数体 $\mathbf{Q}_p$

p を素数とする．$x \in \mathbf{Q}$ は p と互いに素な $m, n \in \mathbf{Z}$ を用いて， $x = p^{-\gamma}\frac{m}{n}$ とかける．このとき，$x \in \mathbf{Q}$ に対して，その p 進ノルムを

$$|x|_p = \begin{cases} 0 & (x = 0), \\ p^{\gamma} & (x \neq 0) \end{cases}$$

で定める．有理数体 $\mathbf{Q}$ に対して，通常の絶対値から得られる距離に関して完備化することにより実数体 $\mathbf{R}$ が得られるが，p 進ノルムから得られる距離に対して $\mathbf{Q}$ を完備化することにより，p 進数体 $\mathbf{Q}_p$ が得られる（[1] 参照）．p 進数は，数学では数論を中心に重要な役割を果たすが，現在は量子力学等でもその応用が注目されている．

p 進数体の元 x は p 進展開が可能である．すなわち，$|x|_p = p^{\gamma}$（$\gamma \in \mathbf{Z}$）のとき，

$$x = p^{-\gamma}(x_0 + x_1 p + x_2 p^2 + \cdots)$$

$(0 \leq x_i \leq p-1, x_0 \neq 0)$ と表現される．p 進数体の元は p で割り切れるほどそのノルムが小さくなるため，上の p 進展開は p 進ノルムの意味で収束する．そのため，p 進数は無限桁に意味をもたせた数，と捉えることも可能であろう．

2 p 進数体上の時間周波数解析

$\{x\}_p$ を x の p 進展開における小数部分とする．すなわち，$\gamma \geq 0$ または $x = 0$ のとき $\{x\}_p = 0$ とし，$\gamma < 0$ のときは，

$$\{x\}_p = p^{-\gamma}\left(x_0 + x_1 p + \ldots + x_{\gamma-1}p^{\gamma-1}\right)$$

とする．これを用いて，$\chi_p(\xi x) = \exp(2\pi i\{\xi x\}_p)$ とおく．このとき $f \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ に対して

$$\mathcal{F}f(\xi) = \hat{f}(\xi) = \int_{\mathbf{Q}_p} f(x)\chi_p(\xi x)dx$$

を f の Fourier 変換という．実数上の関数に対してと同様に，窓関数をかけて局所化を行うことで，窓（短時間）Fourier 変換が定義される．窓関数 $g \in L^1(\mathbf{Q}_p) \cap L^2(\mathbf{Q}_p)$ に対して，$f \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ の p 進窓 Fourier 変換を

$$\mathcal{F}_g f(b, \xi) = \int_{\mathbf{Q}_p} f(x)\overline{g(x-b)}\chi_p(\xi x)dx$$

で定義する（[2] 参照）．

許容条件 $c_\psi = \int_{\mathbf{Q}_p} |\hat{\psi}(\xi)|^2/|\xi|d\xi < \infty$ を満たす関数 $\psi \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ をウェーブレットという．$f \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ に対して，

$$\Omega_\psi f(b, a) = \frac{1}{\sqrt{c_\psi}|a|_p^{\alpha}}\int_{\mathbf{Q}_p} f(x)\overline{\psi\left(\frac{x-b}{a}\right)}dx$$

を f の p 進（連続）ウェーブレット変換という（[3] 参照）．

f をそのノルム $|x|_p$ にのみ依存する $L^2(\mathbf{Q}_p)$ 関数とする．このとき，$\psi \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ に対して，

$$\int_{\mathbf{Q}_p} f(|x|_p)\psi(\xi x)dx = \sum_{\gamma\in\mathbf{Z}} f(p^{\gamma})\int_{S_\gamma}\psi(|\xi|_p^{-1}x)dx$$

が成り立つ．ここで，

$$\int_{S_\gamma}\chi_p(x\xi)dx = \begin{cases} p^{\gamma}\left(1-\frac{1}{p}\right) & (|\xi|_p \leq p^{-\gamma}), \\ -p^{\gamma-1} & (|\xi|_p = p^{-\gamma+1}), \\ 0 & (|\xi|_p \geq p^{-\gamma+2}) \end{cases}$$

であるから，変数のノルムにのみ依存する関数の p 進 Fourier 変換，ウェーブレット変換は，ノルムにのみ依存する関数になることがわかる．

また，関数 f に対して，その伸縮，平行移動，変調の作用素をそれぞれ，

- $D_{1/a}^{\alpha}f(x) = |a|_p^{-\alpha}f\left(\frac{x}{a}\right)$
- $T_{-b}f(x) = f(x-b)$
- $M_\xi f(x) = \chi_p(-\xi x)f(x)$

とする．$L^2(\mathbf{Q}_p)$ における内積 $(f, g)_{L^2(\mathbf{Q}_p)} = \int_{\mathbf{Q}_p} f(x)\overline{g(x)}dx$ を用いると，p 進窓 Fourier 変換は $\mathcal{F}_g f = (f, M_\xi T_{-b}g)$，$p$ 進ウェーブレット変換は $\Omega_\psi f(a, b) = \frac{1}{\sqrt{c_\psi}}(f, T_{-b}D_{1/a}^{\alpha}g)$ と表すことができる．

$L^2(\mathbf{R})$ 上の関数に対して，Fourier 変換とウェーブレット変換のハイブリッド型変換と言われる Stockwell 変換が，近年注目されている．本講演では，この Stockwell 変換を $L^2(\mathbf{Q}_p)$ 上の関数に対して定義をし，その性質を見ていく．

3　p 進 Stockwell 変換の定義とその性質

$g \in L^1(\mathbf{Q}_p) \cap L^2(\mathbf{Q}_p)$ とする．$f \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ に対して，

$$S_g[f](b,\xi) = |\xi|_p \int_{\mathbf{Q}_p} f(x)\overline{g\left(\xi(x-b)\right)}\chi_p(\xi x)dx$$

を f の p 進 Stockwell 変換と定義する．上で定義した作用素を用いると，

$$S_g[f](b,\xi) = (f, M_\xi T_{-b} D^1_\xi)_{L^2(\mathbf{Q}_p)}$$

と表すことができ，Stockwell 変換がハイブリッドと呼ばれる所以を見ることができる．このとき，p 進ウェーブレット変換と p 進 Stockwell 変換について，実数上の関数の Stockwell 変換と同様に，次の関係が成立する：$\varphi \in L^1(\mathbf{Q}_p) \cap L^2(\mathbf{Q}_p)$，$\psi(x) = \varphi(x)\chi_p(-x)$ に対して，

$$(S_\varphi f)(b,\xi) = \sqrt{c_\psi}|\xi|_p^{-\alpha+1}\chi_p(\xi b)(\Omega_\psi f)(b, 1/\xi).$$

また，窓関数 g が

$$c_\varphi = \int_{\mathbf{Q}_p} \frac{|\widehat{\varphi}(\xi-1)|^2}{|\xi|_p} d\xi < \infty$$

を満たすとき，次の Parseval-Steklovy 型の等式が成り立つことがわかった．

$$(f,h)_{L^2(\mathbf{Q}_p)} = \frac{1}{c_g}\int_{\mathbf{Q}_p}\int_{\mathbf{Q}_p} S_g f(b,\xi)\overline{S_g h(b,\xi)}\frac{dbd\xi}{|\xi|_p}.$$

これにより，弱い意味での再生公式，

$$f(x) = \frac{1}{c_\varphi}\int_{\mathbf{Q}_p}\int_{\mathbf{Q}_p} S_g f(b,\xi) g(\xi(x-b))\chi_p(-bx)\frac{d\xi db}{|\xi|_p}$$

が成り立つことがわかる．実際，この式は $L^2(\mathbf{Q}_p)$ の意味で成立することがわかる．また，p 進 Stockwell 変換 S_g は $L^2(\mathbf{Q}_p)$ から $L^2(\mathbf{Q}_p^2, d\xi db/|\xi|_p)$ への等長写像だということもわかる．

さらに，g が変数のノルムにしか依存しない $L^2(\mathbf{Q}_p)$ 関数で，$f \in L^2(\mathbf{Q}_p)$ が変数のノルムにしか依存しない，もしくは階段関数であるとき，f の Stockwell 変換を無限和を用いた表現で書き下すことに成功した．詳しい式や証明方法については，講演の中で解説したい．

参考文献

[1] V.S. Vladimirov, I.V. Volovich, E.I. Zelenov, p-Adic Analysis and Mathematical Physics, World Scientific, 1994.

[2] S. Y. Park, P. U. Chung, An Application of p-adic Analysis to Windowed Fourier Transform, Kangweon-Kyungki Math. Jour. 12 (2004), No. 2, pp. 193-200

[3] C. Minggen, G. Gao, and P. U. Chung, On the wavelet transform in the field $\mathbf{Q}_p$ of p-adic number, Appl. Comput. Harmon. Anal. 13,2002, 162-168.

Rigorous numerics in combustion problem: premixed stationary flames in weak thermal expansion setting

Kaname Matsue[1], Moshe Matalon[2]
[1]International Institute for Carbon-Neutral Energy Researcg (WPI-I^{2}CNER)/ Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University, [2]Department of Mechanical Science and Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign
e-mail : kmatsue@imi.kyushu-u.ac.jp

1 Introduction

The dynamics of hydrodynamically unstable premixed flames is our main concern in the present study. Based on the multi-scale analysis among hydrodynamic length scale and thermal diffusivity describing internal flame structure, we obtain the hydrodynamic model for describing dynamics of hydrodynamically unstable flames [1]. Although this model describes flame evolution with finite thermal expansion ratio $\sigma > 1$, we obtain Sivashinsky's type system assuming that $\sigma - 1 \ll 1$. In the absence of *gravity*, the system is well-known as the *Michelson-Sivashinsky equation*, which provides exact solutions called *pole solutions* [5]. In particular, pole solutions with stationary shape called *coalescent pole solutions* are well considered as references of flame dynamics in more realistic setting (e.g. [1]) for characterizing real flame evolutions. On the other hand, in the presence of gravity (e.g. [4]), there are very limited studies for characterization of solution structures. In the present study, we apply *rigorous numerics* to the Sivashinsky-type system describing flame dynamics with the effect of gravity on underlying fluid field, and discuss the meaning of results in combustion research (cf. [3]).

2 The Rakib-Sivashinsky equation

The *Rakib-Sivashinsky (RS) equation* [4] describing the dynamics of hydrodynamically unstable planar premixed flames in a gravitational field with weak thermal expansion setting is the following:

$$\phi_t + \frac{1}{2}\phi_x^2 - \alpha\phi_{xx} - \frac{1}{2}\mathbb{I}(\phi) = \frac{-G}{2}\{\phi - \langle\phi\rangle\} \tag{1}$$

on $(t,x) \in (0,\infty)\times(0,1)$, where

$$\mathbb{I}(\phi) := \sum_{k\in\mathbb{Z}} \int_0^1 2\pi|k|\phi(\xi,t)e^{2\pi ik(x-\xi)}d\xi,$$
$$\langle\phi\rangle := \int_0^1 \phi(x)dx$$

and the parameter G is supposed to be nonnegative. The inverse of G is referred to as the *Froude number*. The spatial periodic boundary condition is imposed. In the present study, we pay attention to solutions with a specific form based on the dynamical feature of premixed flame fronts:

$$\phi(x,t) = -Ut + \Phi(x), \tag{2}$$

where U is the propagation speed of (perturbed) flame fronts. Namely, we focus on traveling wave solutions with stationary shape described by the graph of a function Φ. Due to the periodic boundary condition and the fact that $\mathbb{I}$ is a periodic function with respect to x, we have the following explicit expression of the speed under (2):

$$U = \frac{1}{2}\langle\Phi_x^2\rangle. \tag{3}$$

In particular, (1) is transformed into a closed system for Φ in the case of stationary flame shape:

$$\frac{1}{2}\Phi_x^2 - \alpha\Phi_{xx} - \frac{1}{2}\mathbb{I}(\Phi) + \frac{G}{2}\{\Phi(x) - \langle\Phi\rangle\} - \frac{1}{2}\langle\Phi_x^2\rangle = 0. \tag{4}$$

Using the transition $\psi = \phi + Ut$, the system (1) is transformed into

$$\psi_t + \frac{1}{2}(\psi_x^2 - \langle\psi_x^2\rangle) - \alpha\psi_{xx} - \frac{1}{2}\mathbb{I}(\psi) = \frac{-G}{2}\{\psi - \langle\psi\rangle\}. \tag{5}$$

Therefore the traveling wave solution with stationary shape (2) corresponds to a stationary solution of (5). To formulate our problem for (1), we apply the Fourier expansion of targeting solution Φ as follows:

$$\Phi(x) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k e^{2\pi ikx}, \quad c_k \in \mathbb{C}.$$

Since Φ is a real value function, then the coefficient c_k has the constraint $c_{-k} = \mathrm{conj}(c_k)$. Moreover, we further make the following assymption:

Assumption 1. *$b_k = 0$ for all $k \in \mathbb{Z}$, where $b_k = \mathrm{Im}(c_k)$. In particular, Φ is an even function for x.*

Now our problem (5) is reduced to a system of countable ordinary differential equations (ODEs) (cf. [7]). Our aim here is reduced to compute equilibrium solutions of (5) as well as its stability through the system of ODEs.

3 Self-consistent a priori bounds

Let X be a separable Hilbert space and $X_k := \mathrm{Span}\{\mathbf{e}_1, \cdots, \mathbf{e}_k\}$. For $x \in X$, x_i denotes the i-th component of x and, for any function $F : D(F) \to X$, we define $F_i(x)$ in the same way. Let $P_k : X \to X_k$ be the orthogonal projection. Our interest here is the solution of the evolutionary system

$$\frac{dx}{dt} = F(x) \tag{6}$$

on X, where $F : D(F) \to X$ is sufficiently smooth.

Definition 2 (cf. [7])**.** Let $m, M \in \mathbb{N}$ with $m \leq M$. A compact set $W \subset X_m$ and a sequence of pairs $\{x_k^\pm \in \mathbb{R} \mid x_k^- < x_k^+\}$ for the *topologically self-consistent bounds* for (6) if

C1: For $k > M$, $x_k^- < 0 < x_k^+$.

C2: Let $\hat{x}_k := \max |x_k^\pm|$, then $\sum_k \hat{x}_k^2 < \infty$.

C3: The function $x \mapsto F(x)$ is continuous on

$$B \equiv W \oplus \prod_{k=m+1}^{\infty} [x_k^-, x_k^+] \subset X.$$

Moreover, if $\hat{f}_k := \max_{x \in B} |F_k(x)|$, then $\sum_k \hat{f}_k^2 < \infty$.

C4: For every $u_1, u_2 \in B$ such that, for some $k > m$,

$$(u_1)_k = x_k^+ \quad \text{and} \quad (u_2)_k = x_k^-,$$

then we have

$$F_k(u_1) < 0, \quad F_k(u_2) > 0.$$

C5: For any $x^m \in \partial W$ and any $u^{\mathrm{tail}} \in \prod_{k=m+1}^{\infty} [x_k^-, x_k^+]$, we have

$$P_m F(x^m + u^{\mathrm{tail}}) \neq 0.$$

The condition **(C3)** implies that $B \subset D(F) \subset X$. We know that (6) is equivalent to a system of countable ODEs on a domain determined by self-consistent bounds. The condition **(C5)** provides a topological condition for the existence of exact solutions.. This condition means that the vector field is not 0 at points on $\partial W \oplus \prod_{k=m+1}^{\infty} [x_k^-, x_k^+]$, which is essential to apply *the Conley index theory* or *mapping degree*. We directly apply the above machinery to a system of ODEs associated with (5) for proving the existence of exact solutions with given pair of parameters (α, G), as well as their stability using Lyapunov function validations based on e.g. [2].

4 Meaning of results in combustion research

For any solutions of (1) of the form (2) *with* $G = 0$, there is a known result that the corresponding flame propagation speed U given by (3) has the explicit upper bound $U_\infty = 0.125$. (e.g. [6]). On the other hand, our validation results indicate that there is a stable flame front *with positive G whose propagation speed is faster than that of any fronts with $G = 0$*, which looks paradoxical compared with realistic features (e.g. [3]). Nevertheless, the present result can provide a true morphology of flames *outside the earth, such as International Space Station.*

References

[1] M. Matalon and B.J. Matkowsky. *Journal of Fluid Mechanics*, 124:239–259, 1982.

[2] K. Matsue, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 4 (2013), pp. 62–79.

[3] K. Matsue, S. Mohan, and M. Matalon, in preparation.

[4] Z. Rakib and G. Sivashinsky, Combustion science and technology, 54 (1987), pp. 69–84.

[5] O. Thual, U. Frisch, and M. Henon, J. Phys., 46(1985), pp. 1485–1494.

[6] D. Vaynblat and M. Matalon, SIAM Journal on Applied Mathematics, 60 (2000), pp. 679–702 and pp. 703–728.

[7] P. Zgliczyński and K. Mischaikow, Found. Comput. Math., 1 (2001), pp. 255–288,

シンプレクティック数値積分法に対する影のハミルトニアンの存在・非存在について

谷口 隆晴 [1,2]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻，[2] JST さきがけ
e-mail : yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

シンプレクティック数値積分法は，主にハミルトン方程式を対象とした時間方向の離散化手法のうち，時間発展写像がシンプレクティック写像となっているような手法の総称である．代表的なものに，シンプレクティック Runge–Kutta 法や変分的積分器（variational integrator）などが知られている．シンプレクティック数値積分法は，経験的にエネルギーやその他の保存量の保存性が良いことが知られている．実際，変分的積分器については，離散化後のラグランジアンがある種の対称性をもつのであれば，それに付随する保存則が成り立つという，離散版の Noether の定理が成立する [1]．また，エネルギーの保存則についても，影のハミルトニアンと呼ばれる量が形式的に定まり，シンプレクティック数値積分法は，これをハミルトニアンとするハミルトン系として理解されることがある [2, 3]．

しかし，一方，影のハミルトニアンは，Baker–Campbell–Hausdorff 展開などにより，形式的な無限級数などとして定まることが多く，また，この級数は必ずしも収束することが保証されているわけではない．実際，過去に我々が行った，ブラックホール周りの質点の運動に関する数値計算では，影のハミルトニアンが存在しないと思われる場合があった [4]．実際，ω をシンプレクティック形式とするシンプレクティック多様体 $(\mathcal{M}, \omega)$ 上で定義された，あるベクトル場 X から生成されるフローがあり，それがシンプレクティック形式を保存する，すなわち，ω の X にそった Lie 微分について

$$\mathcal{L}_X \omega = 0$$

が成り立っていたとすると，カルタンの公式より

$$\mathrm{d}(X \lrcorner \omega) + X \lrcorner \mathrm{d}\omega = 0$$

であるが，シンプレクティック形式 ω が閉形式であることから

$$\mathrm{d}(X \lrcorner \omega) = 0$$

となる．従って，もしも，$\mathcal{M}$ の 1 次コホモロジー $H^1(\mathcal{M}; \mathbb{R})$ が消えていれば，ある関数 $H : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ が存在して

$$X \lrcorner \omega = \mathrm{d}H$$

となる．これはハミルトン方程式である．この計算はシンプレクティックフローに対するものであり，シンプレクティック写像であるシンプレクティック数値積分法に，直接，適用されるものではない．しかし，多様体 $\mathcal{M}$ のホモロジー群によっては，影のハミルトニアンが存在しない可能性を示唆するものではある．実際，以前，我々が行った計算にも，ブラックホールという特異点が存在しており，実質的に時空に穴が空いていると考えられる．

以上を踏まえ，本研究では，シンプレクティック数値積分法に対する影のハミルトニアンの存在・非存在について，幾何学的な観点から考察する．

2 用語と記号の準備

$\mathcal{M}$ を連結で境界をもたず，閉な C^∞ 多様体とし，シンプレクティック多様体 $(\mathcal{M}, \omega)$ 上で定義されたハミルトン方程式に対するシンプレクティック数値積分法を考える．

$\mathcal{M}$ 上の微分同相群を $\mathrm{Diff}(\mathcal{M})$，シンプレクティック同相群を $\mathrm{Symp}(\mathcal{M}, \omega)$ と書く．滑らかな写像 $\psi : [0, 1] \times \mathcal{M} \to \mathcal{M}$，$(t, q) \mapsto \psi_t(q)$ で，全ての t に対して，t を固定した写像 ψ_t がシンプレクティック写像になるような ψ を symplectic isotopy と呼ぶ．このような写像は，あるシンプレクティックベクトル場から生成されるが，特に，そのベクトル場がハミルトンベクトル場であるものを Hamiltonian isotopy と呼ぶ．シンプレクティック同相群のうち，恒等写像からの Hamiltonian isotopy が存在するものの集合を $\mathrm{Ham}(\mathcal{M}, \omega)$ と表し，同様に恒等写像

と symplectic isotopic なものを $\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ と表す．

3 シンプレクティック幾何学の観点からの影のハミルトニアンの存在・非存在

シンプレクティック数値積分法は，刻み幅 Δt を固定するごとに，シンプレクティック写像を与える．また，この写像は $\Delta t \to 0$ とすれば恒等写像に近づくため，恒等写像と symplectic isotopic である．つまり，各シンプレクティック数値積分法は $\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ の元と見なすことができる．本講演では，シンプレクティック数値積分法に対する影のハミルトニアンの存在・非存在を考えるが，上述のように，シンプレクティック数値積分法は $\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ の元とみなすことができるため，影のハミルトニアンの存在・非存在を考えるためには，$\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ の元が，ハミルトン方程式の解写像になっているかどうかを考えればよい．しかし，ここで，恒等写像からの Hamilton isotopy が存在する，すなわち，ハミルトンベクトル場を積分することによって得られるようなシンプレクティック写像の集合を $\mathrm{Ham}(\mathcal{M},\omega)$ と表していたことを思い出すと，シンプレクティック数値積分法が影のハミルトニアンをもつかどうかという問題は，結局，$\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ の元が $\mathrm{Ham}(\mathcal{M},\omega)$ に含まれるか，という問題に置き換わる．これは，シンプレクティック幾何学のよく知られた問題であり，Banyaga の定理として理解されている（[5] など．）

定理 1 $(\mathcal{M},\omega)$ は閉かつ連結なシンプレクティック多様体とし，$\psi \in \mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ とする．$\psi \in \mathrm{Ham}(\mathcal{M},\omega)$ であるのは，ある symplectic isotopy ψ_t が存在して

$$\psi_0 = \mathrm{id},\ \psi_1 = \psi,\ \mathrm{Flux}(\{\psi_t\}) = 0$$

であるときであり，また，そのときに限る．

ここで，$\mathrm{Flux} : \widetilde{\mathrm{Symp}}_0(\mathcal{M},\omega) \to H^1(\mathcal{M};\mathbb{R})$ は flux homomorphism と呼ばれる写像である．$\widetilde{\mathrm{Symp}}_0(\mathcal{M},\omega)$ は $\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ の普遍被覆である．

上記の定理は，シンプレクティック数値積分法が定めるシンプレクティック写像が $\mathrm{Ham}(\mathcal{M},\omega)$ に含まれるかどうかを判定することができるものであり，従って，影のハミルトニアンの存在を判定するものと言える．特に，1 次コホモロジー $H^1(\mathcal{M};\mathbb{R})$ が消えていれば $\mathrm{Flux}(\{\psi_t\}) = 0$ という条件は自然に満たされ，$\mathrm{Symp}_0(\mathcal{M},\omega)$ と $\mathrm{Ham}(\mathcal{M},\omega)$ は一致する．したがって，この場合，基本的に，どのようなシンプレクティック数値積分法に対しても影のハミルトニアンの存在が保証される．そのため，1 次コホモロジー $H^1(\mathcal{M};\mathbb{R})$ は，シンプレクティック数値積分法の有効性を確認するための簡単な判定に用いることが出来る．

謝辞 本研究は JST さきがけ (JPMJPR16EC) の補助を受けている．

参考文献

[1] J.E. Marsden, M. West, Discrete mechanics and variational integrators, Acta Numer., Vol. 10 (2001), 357–514.

[2] S. Reich, Backward error analysis for numerical integrators, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 36 (1999), 1549–1570.

[3] H. Yoshida, Recent progress in the theory and application of symplectic integrators, Celestial Mech. Dyn. Astr., Vol. 56 (1993) 27–43.

[4] 入江凜, 谷口隆晴, 測地線方程式に対する離散勾配法の適用とアインシュタイン方程式の数値解を用いるための基礎検討, 日本応用数理学会研究部会連合発表会, 2015.

[5] D. McDuff, D. Salamon, Introduction to Symplectic Topology, 3rd ed., Oxford University Press, 2017.

ポテンシャル系の孤立不変集合のコホモロジーの評価

柴山 允瑠
京都大学大学院情報学研究科
e-mail : shibayama@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 主結果

$U(\boldsymbol{q})(\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^d)$ を滑らかな関数とし，$M(\boldsymbol{q})$ を $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^d$ に滑らかに依存する d 次の正値対称行列とし，ラグランジアン

$$L(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = \frac{1}{2}\langle \dot{\boldsymbol{q}}, M(\boldsymbol{q})\dot{\boldsymbol{q}}\rangle - U(\boldsymbol{q})$$

を考える．このラグランジアンに関するラグランジュ系は

$$\frac{d}{dt}(M(\boldsymbol{q})\dot{\boldsymbol{q}}) = -\nabla U(\boldsymbol{q}) \tag{1}$$

と表される．

各解に沿って，エネルギー

$$h = E(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) := \frac{1}{2}\langle \dot{\boldsymbol{q}}, M(\boldsymbol{q})\dot{\boldsymbol{q}}\rangle + U(\boldsymbol{q})$$

は一定である．h の値を固定し，そのエネルギー曲面

$$\mathcal{M}(h) := \{(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) \mid E(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = h\}$$

に制限して考える．このとき，配位空間において $\boldsymbol{q}$ が取りうる範囲は，

$$\mathcal{H}(h) = \{\boldsymbol{q} \mid U(\boldsymbol{q}) \leq h\}$$

に制限される．

用語の説明は後回しにし，主結果を述べる．$\boldsymbol{q} = (x, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^{d-1}$ と表すことにする．$a < b$ を固定し，

$$N_h(a,b) := \{(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) \in \mathcal{M}(h) \mid a \leq x \leq b\}$$
$$T_h(a,b) := \{\boldsymbol{q} \in \mathcal{H}(h) \mid a \leq x \leq b\}.$$

とおく．$T_h(a,b)$ の境界は $B_a := \{\boldsymbol{q} \in \mathcal{H}(h) \mid x = a\}, B_b := \{\boldsymbol{q} \in \mathcal{H}(h) \mid x = b\}$ からなり，それらの上で

$$\frac{\partial U}{\partial x} < 0 \quad \text{on } B_a, \qquad \frac{\partial U}{\partial x} > 0 \quad \text{on } B_b \tag{2}$$

が成り立ち，

$$\sup_{\boldsymbol{y}} U(x, \boldsymbol{y}) > h \quad (\forall x \in [a,b]) \tag{3}$$

が成り立つとする．

定理 1. $M(\boldsymbol{q})$ を単位行列とし，$h \in \mathbb{R}, U(\boldsymbol{q})$ が (2), (3) を満たし，$A > 0, B > 0$ があって各 $(x, \boldsymbol{y}) \in T_h(a,b)$ に対して

$$-Ax^2 \leq U(x, 0), \quad U(x, \boldsymbol{y}) \leq B|\boldsymbol{y}|^2,$$

$$3\pi^2 h^2 \geq 4B(b-a)^2(3h + A(b-a)^2).$$

を満たすとする．このとき，孤立不変集合 $I \subset N_h(a,b)$ が存在し，$\check{H}^{2d-3}(I) \neq \{0\}$ を満たす．

2 孤立不変集合

自励的な常微分方程式

$$\dot{x} = f(x) \qquad x \in M$$

を考える．M は多様体である．この flow を $\varphi^t(x)$ とする．

$S \subset M$ が不変集合 (invariant set) とは

$$\cup_{t\in\mathbb{R}}\varphi^t(S) = S$$

を満たすことをいう．$N \subset M$ に対して，

$$\mathrm{Inv}(N, \varphi) = \{x \in N \mid \varphi^t(x) \in N(\forall t \in \mathbb{R})\}$$

とおく．S が孤立不変集合 (isolated invariant set) であるとは, S のある近傍 N により $S = \mathrm{Inv}(N, \varphi) \subset \mathrm{int}(N)$($\mathrm{int}(N)$ は N の内部) と表せることをいう．

$N \subset M$ を境界を持つ部分多様体で $\dim N = \dim M$ とする．$\partial N = n$ とする．

$$n^+ = \{p \in n \mid \exists\varepsilon > 0, \forall t \in (-\varepsilon, 0), \varphi^t(p) \notin N\}$$
$$n^- = \{p \in n \mid \exists\varepsilon > 0, \forall t \in (0, \varepsilon), \varphi^t(p) \notin N\}$$
$$\tau = \{p \in n \mid f(x) \in T_p n\}$$

とおく．N が孤立化ブロックであるとは，$n^+ \cap n^- = \tau$ で τ が n の余次元 1 の部分多様体であることをいう．孤立化ブロック N に対して，

$$a^+ = \{p \in n^+ \mid \varphi^t(p) \in N(\forall t > 0)\}$$
$$a^- = \{p \in n^- \mid \varphi^t(p) \in N(\forall t < 0)\}$$

とおく．また，

$$I := \{p \in N \mid \varphi^t(p) \in N(\forall t \in \mathbb{R})\}$$

は孤立不変集合になる．

$x \in n\backslash a^+$ に対して, $\sigma^+(x)$ を

$$\sigma^+(x) = \sup\{t_1 \geq 0 \mid \varphi^t(x) \in N(\forall t \in [0, t_1])\}$$

により定める．$\pi^+ : n\backslash a^+ \to n^-$ を $\pi^+(x) = \varphi^{\sigma^+(x)}(x)$ により定める．

定理 2 (Easton [1])**.** $n\backslash a^+$ の k 次のホモロジーの元 $z = [c] \in H_k(n\backslash a^+)$ が存在して，

$$\begin{aligned} z - z' &\neq 0 \quad \text{in} \quad H_k(n\backslash a^+) \\ \overline{zz'} &= 0 \quad \text{in} \quad H_{k+1}(N, n) \end{aligned}$$

を満たすとする．ここで，

$$\begin{aligned} z' &= \pi^+_*(z), \\ \overline{zz'} &= [\{\varphi^t(x) \mid x \in c, t \in [0, \sigma^+(x)]\}] \end{aligned}$$

である．このとき，$\check{H}^{n-k-2}(I) \neq \{0\}$ が成り立つ．

本研究では，ラグランジュ系において，この定理の $k = 0, n = 2N - 1$ の場合の仮定を変分法を用いて確認することで，孤立不変集合の $2n-3$ 次のコホモロジーが 0 でないことを示す.

3 ラグランジュ系

1 節で述べたラグランジュ系を考える．(2) が成り立てば，$N_h(a, b)$ は孤立化ブロックである．

$$\begin{aligned} S_{ab} = \{(\boldsymbol{q}(0), \boldsymbol{p}(0)) \in N_h(a, b) \mid \exists t_0 < 0 < t_1, \\ \boldsymbol{q}(t_0) \in B_a, \boldsymbol{q}(t_1) \in B_b, \\ \boldsymbol{q}(t) \in T_h(a, b)(t_0 < t < t_1)\}. \end{aligned}$$

とおく．Easton の定理より，S_{ab} が空でなければ，$\check{H}^{2n-3}(I) \neq \{0\}$ となる孤立不変集合 I が存在する．

汎関数

$$\mathcal{I} = \int_0^1 2(h - U(\boldsymbol{r}))ds \int_0^1 \langle \dot{\boldsymbol{r}}, M(\boldsymbol{r})\dot{\boldsymbol{r}} \rangle ds$$

に関する変分問題を考える．$\boldsymbol{r}(s)$ が $I'(\boldsymbol{r}) = 0$ を満たせば，$\boldsymbol{q}(t) := \boldsymbol{r}(t/T)$ は $E(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = h$ を満たす (1) の解になる．ここで，

$$T = \sqrt{\frac{\frac{1}{2}\int_0^1 |\frac{d\boldsymbol{r}}{ds}|^2 ds}{\int_0^1 h - U(\boldsymbol{r}) ds}}$$

である．

$\alpha \in B_a, \beta \in B_b$ に対して，

$$\begin{aligned} \Omega(\alpha, \beta) = \{\boldsymbol{r} : [0, 1] \mapsto \mathbb{R}^n \mid r_1(0) = \alpha, \\ r_1(1) = \beta, a \leq r_1(s) \leq b, U(\boldsymbol{r}(s)) < h\} \end{aligned}$$

とおく．

命題 1. ある $\alpha \in B_a, \beta \in B_b$ に対して，

$$\inf_{\Omega(\alpha,\beta)} \mathcal{I} < \inf_{\partial\Omega(\alpha,\beta)} \mathcal{I} \tag{4}$$

が成り立つとする．このとき，$N_h(a, b)$ に含まれる孤立不変集合 I が存在し，$\check{H}^{2n-3}(I) \neq \{0\}$ が成り立つ．特に，$\dim I \geq 2n - 3$ である．

定理 1 で仮定した不等式により (4) が示せ，定理 1 が証明される．

4 n 中心問題への応用

n 中心問題

$$\frac{d^2\boldsymbol{q}}{dt^2} = -\sum_{j=1}^{n} m_j \frac{\boldsymbol{q} - \boldsymbol{a}_j}{|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{a}_i|^3} \qquad (\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^d)$$

を考える．

$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ が同一直線上にある場合を考える．

定理を応用することで，隣り合う 2 質点の間に孤立不変集合が存在し，その $(2d - 3)$ 次のコホモロジーは 0 ではない.

5 2 重振り子への応用

$M(\boldsymbol{q})$ が単位行列でない場合にも，定理 1 は拡張できる．その応用例として 2 重振り子のラグランジアン

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m_1 l_1^2 \dot{\theta}_1^2 \\ &+ \frac{1}{2} m_2 (l_1^2 \dot{\theta}_1^2 + l_2^2 \dot{\theta}_2^2 + 2 l_1 l_2 \dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2)) \\ &+ (m_1 + m_2) g l_1 \cos\theta_1 + m_2 g l_2 \cos\theta_2 \end{aligned}$$

を考える．

$(\theta_1, \theta_2, \dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2) = (0, \pi, 0, 0)$ を含む孤立化ブロックがとれ，それに含まれる孤立不変集合 $I \subset N$ が存在し，$\check{H}^1(I) \neq \{0\}$ を満たす.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K03366 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] Robert W. Easton, On the existence of invariant sets inside a submanifold convex to a flow, *J. Differential Equations*, **7**(1970), 54–68.

Topological computation analysis of meteorological time-series data

森田 英俊 [1], 稲津 將 [2], 國府 寛司 [1]
[1] 京都大学，[2] 北海道大学
e-mail : hmorita@math.kyoto-u.ac.jp

1 序

Morse グラフは，力学系の回帰的不変集合の勾配的関係を表現する，計算機を用いた方法である [1]．すなわち，相空間をグリッド分割し，力学系に誘導されたグリッド要素間の多価写像を得る．この多価写像は，グリッド要素を頂点，写像による対応を辺とした有向グラフで表される．この有向グラフは，いくつかの強連結した部分と，それらを勾配的に繋ぐ部分とに分けられるため，新たに前者を頂点，後者を辺とした有向グラフが得られる．これを Morse グラフといい，またその頂点に当たる部分に対応する不変集合を Morse 集合という．Morse 集合は元の力学系の回帰的不変集合をグリッドで外から近似したものになっている．

元来は力学系モデルに対し厳密な結論を得るために開発されたこの方法は，時系列解析へとその適用範囲を広げつつある．本研究はノイズを含む時系列データ解析への応用である．特に，現実のデータを扱う際にパラメータの選定は不可避であり，それに大きく依存しない，相空間内の本質的なダイナミクスを表す方法を考察する．以下に述べるこの方法を Morse graph method for stochastic time-series data (MGSTD) と呼ぶことにする [2]．

2 方法

相空間のグリッド分割　二次元の相空間を考える（原理的には一般の次元に拡張できる）．相空間をグリッドサイズ h で分割する．ただしグリッドの原点を $(\delta_2, \delta_2) \in [0, h)^2$ とする．するとグリッド要素は $Q^i = [n_1^i h + \delta_1,\ (n_1^i + 1)h + \delta_1] \times [n_2^i h + \delta_2,\ (n_2^i + 1)h + \delta_2]$, $n_1^i, n_2^i \in \mathbb{Z}$，という形になる．このグリッド分割（グリッド要素の集合）を $\mathcal{R}$ とする．

多価写像　ν_i をグリッド要素 $Q^i \in \mathcal{R}$ 内のデータ数，$\mu_{i\to j}$ を Q^i から Q^j へ遷移するデータ数とすると，Q^i から Q^j への遷移確率は $T_{i\to j} = \mu_{i\to j}/\nu_i$ である．$T_{i\to j}$ が $T_{j\to i}$ よりも有意に大きい（resp. 小さい）ならば $i \to j$（resp. $i \leftarrow j$）と表し，その違いが有意でないならば $i \leftrightarrow j$ と表すようにする．そこで，有意さを表す実数 $\rho\ (\geq 1)$ を導入し，次のように遷移を定める：

$$\begin{array}{lll} i \to j & \text{if} & \rho < T_{i\to j}/T_{j\to i} \\ i \leftrightarrow j & \text{if} & \rho^{-1} \leq T_{i\to j}/T_{j\to i} \leq \rho \\ i \leftarrow j & \text{if} & T_{i\to j}/T_{j\to i} < \rho^{-1} \end{array}$$

さらに，稀なイベントを除くため，閾値 $\mu_* \in \mathbb{N}$ を導入し，$\mu_{i\to j} \geq \mu_*$ の遷移のみを考慮する．こうして $i \to j$ または $i \leftrightarrow j$ でありかつ $\mu_{i\to j} \geq \mu_*$ であるときに i から j への対応があるように多価写像が定められる．この多価写像から Morse グラフおよび Morse 集合が求まる．

パラメータは全部で 6 個ある；$h, \delta_1, \delta_2, \rho, \mu_*$.

適切な μ_* の決定　μ_* が小さすぎると，ほとんど全てのグリッド要素が連結するため，一つの Morse 集合が相空間のほぼ全域を覆ってしまい，遷移の情報は得られない．μ_* が大きくなるにつれ，グリッド要素の連結が減るため，ある値で大きい Morse 集合がいくつかの小さい Morse 集合に分裂する．μ_* が大きすぎると，分裂がさらに進み，勾配的関係を持たない互いに独立な Morse 集合だけになり，再び遷移の情報は得られない．

そのため，相空間上の動きを表すのに適切な μ_* の値は，相空間のほぼ全域を覆うほど大きい Morse 集合がいくつかの同程度の大きさの Morse 集合に分裂した瞬間のものである．すなわち，最も大きい Morse 集合と二番目に大きい Morse 集合の大きさ（グリッド要素の数）の比が急激に小さくなるときの μ_* の値をとる．

MGSTD ベクトル場　(δ_1, δ_2) は相空間のグリッド分割の原点に過ぎず，相空間内のダイナミクスには関係ないはずである．しかしながら，現実のデータのようにデータ数が十分でない場合，この原点が変わることで多価写像が大きく変化し，Morse グラフが大きく異なり得る．そ

こで (δ_1, δ_2) に依存しない動きを，以下のように定義される平均的なベクトル場で表現する．

各 $(\delta_1, \delta_2) \in [0, h)^2$ に対し，まずグリッド分割 $\mathcal{R}_{(\delta_1,\delta_2)}$ を定め，Morse グラフと Morse 集合の族 $\{\mathrm{MS}_i\}$ を求める．$\#(\mathrm{MS}_i)$ を MS_i の大きさ（グリッド要素の数），$|\mathrm{MS}_i|$ を MS_i の幾何学的実現，p_i を $|\mathrm{MS}_i|$ の重心とする．次に，このMorse グラフにおける各 MS_i から MS_j への勾配関係に対し，向きが $p_i - p_j$ に平行で長さが $(\#(\mathrm{MS}_i) + \#(\mathrm{MS}_j))/2$ のベクトルを，p_i と p_j との $\#(\mathrm{MS}_i) : \#(\mathrm{MS}_j)$ 内分点に置き，v_{ij} とする．次に，各グリッド要素 $R \in \mathcal{R}_{(\delta_1,\delta_2)}$ に対し，$\{v_{ij}\}$ のうち R 内に置かれたものの平均ベクトルを，R の中心に置き，$v(R)$ とする．

この $\{v(R) \mid R \in \mathcal{R}_{(\delta_1,\delta_2)}, (\delta_1, \delta_2) \in [0, h)^2\}$ を (δ_1, δ_2) について次のように平均する．まず基準となる（例えば $(\delta_1, \delta_2) = (0, 0)$ のときの）グリッド分割 $\mathcal{Q}$ を定める．各グリッド要素 $Q \in \mathcal{Q}$ に対し，$\{v(R)\}$ のうち Q 内に置かれたものの平均ベクトルを，Q の中心に置き，$w(Q)$ とする．こうして得られる $\{w(Q) \mid Q \in \mathcal{Q}\}$ を MGSTD ベクトル場と呼ぶことにする．

3 結果

例として，次の二次元確率微分方程式が生成する時系列を解析する：

$$\begin{cases} dx_t = y_t dt + \sigma dB_t^x, \\ dy_t = [-4y_t + x_t(1 - x_t^2)]dt + \sigma dB_t^y, \end{cases} \tag{1}$$

ここで B_t^x と B_t^y はそれぞれ独立な標準ブラウン運動．ノイズがなければ（$\sigma = 0$），二つの沈点 $(\pm 1, 0)$ と一つの鞍点 $(0, 0)$ がある．この時系列データから求まる MGSTD ベクトル場が図 1 である．ノイズがないときのフローを質的に再現している．

さらに，実際の気象データから得られた時系列を解析する．対流圏や成層圏の気圧配置の時間変化を主成分解析した，第一・第二主成分スコア (PC1, PC2) の時系列データである．対流圏について求まる MGSTD ベクトル場が図 2 である．ここで見られる特徴的な動きは，気圧配置の遷移に関する気象学的な知見と合致する．

謝辞　本研究は JST CREST および JSPS 科研費 JP25287029, JP26310208, JP18H03671, JP25610028, JP26310201, JP18K03734 の支援を受けた．

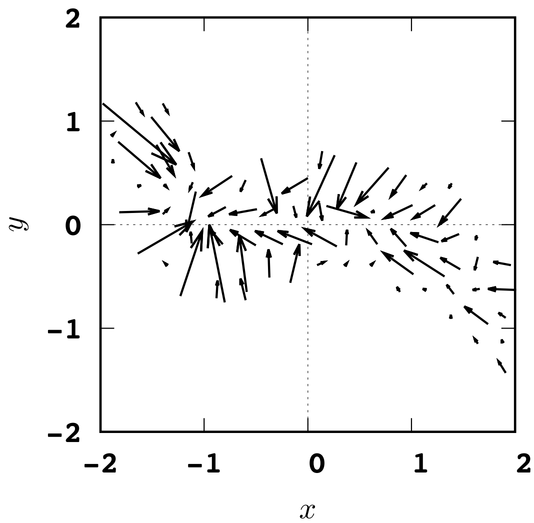


図 1. 二次元確率微分方程式 (2) が生成する時系列データから求まる MGSTD ベクトル場．論文 [2] Figure 2.6-(c) より転載．

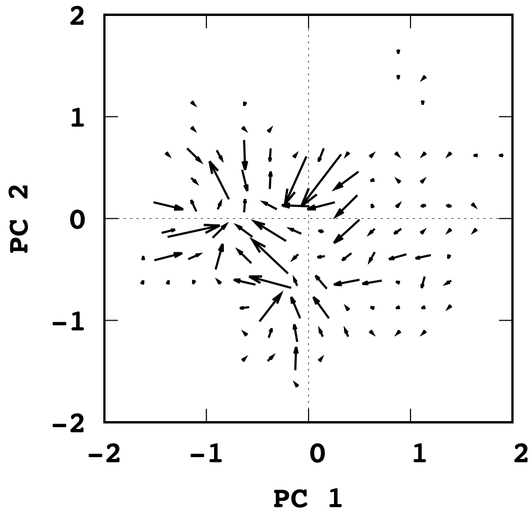


図 2. 対流圏の気象データから求まる MGSTD ベクトル場．論文 [2] Figure 3.1-(a) より転載．

参考文献

[1] Z. Arai, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, H. Oka and P. Pilarczyk, *A Database Schema for the Analysis of Global Dynamics of Multiparameter Systems*, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 8 (2009), 757–789.

[2] H. Morita, M. Inatsu and H. Kokubu, *Topological computation analysis of meteorological time-series data*, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 18 (2019), 1200–1222; arXiv:1805.03059.

サービス EC における人々の予約行動パターンに基づく需要予測モデル

新谷 健[1,2], 梅野 健[1]
[1] 京都大学大学院 情報学研究科，[2] フォルシア株式会社
e-mail : shintani.masaru.28a@st.kyoto-u.ac.jp, umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1 概要

サービス EC とは、web を用いた事前予約が可能なサービス群の総称であり、例えば旅行やホテル、航空券、美容院やマッサージ、一部の飲食店などがそれに含まれる。我々は、そういった web 予約サービス EC における人々の行動パターンを明らかにして、需要予測を可能にするモデルの開発を行っている。本研究においては、予約行動をある自然現象のように捉え、いくつかの仮定、仮説をおいた上で予約データを用いた需要予測のアルゴリズムを提案する。

2 モデリング

2.1 定義

あるサービスに対する予約数 $X(t)$ とキャンセル数 $Y(t)$ が、以下の関数に従ってふるまうとする。

$$X(t) = A\phi_X(t) \tag{1}$$
$$Y(t) = B\phi_Y(t) \tag{2}$$

ただし、$A > B > 0$ とし、t はサービス享受日（例えばホテルで言うと宿泊日）より何日前かを示す期間（単位：日）であり、$\phi_X(t), \phi_Y(t)$ は、

$$\phi_X(0) = 1,\ \lim_{t\to\infty} \phi_X(t) = 0$$
$$\phi_Y(0) = 1,\ \lim_{t\to\infty} \phi_Y(t) = 0$$

を満たすものとする。つまりこの時、$X(0) = A, X(\infty) = 0, Y(0) = B, Y(\infty) = 0$ となる。

2.2 仮説

定義のもと、以下の仮説を置く。
$\phi(t)$ を、$\phi_X(t), \phi_Y(t)$ に共通する性質を持つ関数、すなわち $\phi(t)$ が満たす性質は、$\phi_X(t), \phi_Y(t)$ も満足するような関数とする。このとき、任意の $0 \leq t_1 < t_2$ に対し、次の式が成立すると仮定する。

$$\phi(t_2) = \phi(t_1)\phi(t_2 - t_1) \tag{3}$$

この式を言い換えると、ある区間 e と日付 α が与えられた時、

$$\phi(\alpha) = \phi(0)\phi(\alpha - 0) = \phi(\alpha)$$
$$\phi(\alpha + e) = \phi(\alpha)\phi(e)$$

のように、e 日後（あるいは前）の値は、α 日時点での値によらず、そこから一定の割合だけ減る（増える）、というような性質を表す。

この性質は、自然界において原子の半減期の性質にも見られるような、自己比例すなわち観測数の変化が、その時点での観測数に比例することを意味している。すなわち、人の予約行動そのものを自然現象のように見なし、予約数は、期日から遠ざかるにつれその数に比例して日々減少していくということを仮定したことになる。

2.3 帰結

予約数、キャンセル数に対して上記の定義と仮説を置いた場合、$\phi_X(t), \phi_Y(t)$ は陽に表すことが出来る。

$$\phi_X(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau_X}\right)$$
$$\phi_Y(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau_Y}\right)$$

ただし、τ_X, τ_Y は正の時定数である。

3 実データによる検証

実際の宿泊予約データに対するデータ分析の結果、宿泊予約数 $X(t)$, キャンセル数 $Y(t)$ は、ある定数 A, B, τ_X, τ_Y を用いて

$$X(t) = A\exp\left(-\frac{t}{\tau_X}\right) \tag{4}$$
$$Y(t) = B\exp\left(-\frac{t}{\tau_Y}\right) \tag{5}$$

に相応しくフィッティングされることがわかった。

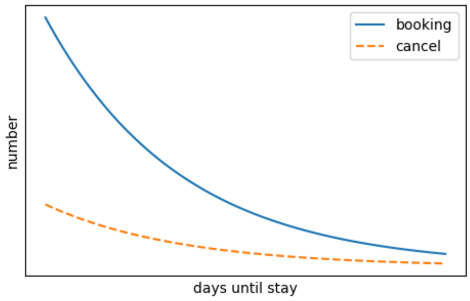


図 1. 予約数、キャンセル数の指数関数フィッティングイメージ

4　需要予測アルゴリズム

予約データが指数関数に有意にフィッティングされるという理論のもと、式 (4),(5) を用いて需要予測をおこなうことができる。

期日から t 日前時点での合計予約数 $S_X(t), S_Y(t)$ は、下記で表される。

$$S_X(t) = \int_0^{\infty} X(t)\mathrm{d}t = A\tau_X \exp\left(-\frac{t}{\tau_X}\right)$$
$$S_Y(t) = \int_0^{\infty} Y(t)\mathrm{d}t = B\tau_Y \exp\left(-\frac{t}{\tau_Y}\right)$$

この式わかるように、$t = 0$ の時点、つまり最終的な予約数、キャンセル数の総数はそれぞれ $A\tau_X, B\tau_Y$ となる。言い換えれば、t 日前時点で、最終的にどれほどの利用者数（$= A\tau_X - B\tau_Y$）となるかを見込める需要予測が可能となる。

更にこの結果とを用いると、例えば宿泊施設向けなどには、t 日前時点で、現在の価格が高すぎたり低すぎたりするような判断を促し、ダイナミックプライシングに役立つ仕組みを構築することが出来るだろう。

……………………………………………
……………………………………………

参考文献

安定分布による暗号通貨の価格変動分布解析とその評価手法

柿中 晋治 [1], 梅野 健 [1]

[1] 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻

e-mail : kakinaka.shinji.35e@st.kyoto-u.ac.jp, umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1 概要

古典的な金融工学ではランダムウォーク理論に基づいて金融資産価値の変動分布が正規分布に従うと考えられていたが、実際の市場は金融危機のように暴落や高騰が起きており、価格変動分布を評価できるモデルの重要性が再確認されている. 安定分布はファットテール性を有するパラメトリックな分布のクラスであり, 金融市場で観測される極端な変動を捉えるとして研究されてきた [1, 2]. ここでは, 従来の中央管理的なシステムを持たない暗号通貨市場における価格変動を安定分布を用いて分析し, 特徴付けを行う. また, 一般的に安定分布による分析は目視確認に留まる場合が多く, 得られる推定結果に対して踏み込んだ議論をすることができない. そこで, 一般化中心極限定理の理論的背景に基づいた分析および新たに定義した距離関数を用いた定量的分析を通して, データの推定分布に対する適切な評価手法を提案する. 安定分布がデータをどの程度上手く表せているかを把握できるだけでなく, 市場の動きに潜在するべき乗則性に関する現象を解明する一助となる.

2 安定分布のパラメータ推定

安定分布はべき分布の一種であり, 確率変数の適当な一次変換もまた同一分布に従うことが定義である. また, いくつかの場合 ($\alpha = 2, \beta = 0$ の正規分布, $\alpha = 1, \beta = 0$ のコーシー分布, $\alpha = 0.5, \beta = 1$ のレヴィ分布) を除けば確率密度関数 $f(x)$ は解析的に求めることができず, 逆フーリエ変換した特性関数 $\phi(k)$ を用いて以下のように表される.

$$\phi(k) = \exp\{i\delta k - |\gamma k|^{\alpha}(1 - i\beta\,\mathrm{sgn}(k)\omega(k,\alpha))\}$$
$$\omega(k,\alpha) = \begin{cases} \tan\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) & \alpha \neq 1 \\ -\frac{2}{\pi}\log|\gamma k| & \alpha = 1 \end{cases} \tag{1}$$

ただし, α は裾の厚さ, β は歪度, γ は尺度, δ は位置を表す. 実証分析ではこれらのパラメータを正しく推定することが求められており, Hill 推定など一般的なべき分布 $x^{-\alpha}$ を想定している手法は適切に安定分布のパラメータを推定できない可能性がある. ここでは, 特性関数に基づいた手法を用いる [3]. データ列 X_n にエルゴード性を仮定すると, e^{ikX_n} の平均を計算することで特性関数 $\hat{\phi}(k)$ を直接求めることができる. 更に (1) を式変形してある条件下で線形回帰を行うことによって規格化されたパラメータ α, β の推定値を得ることができる.

今回解析対象となる 5 種類の暗号通貨の対数収益率 ($\Delta t = 1\mathrm{h}$) の推定結果を表 1 に載せる.

表 1. 1 時間足の対数収益率に対する α の推定結果 (2017/01/01-2019/01/01) (https://poloniex.com)

暗号通貨 (/USDT)	$\hat{\alpha}$	$\hat{\beta}$
Bitcoin (BTC)	1.327	−0.028
Ethereum (ETH)	1.403	0.005
Ripple (XRP)	1.340	−0.002
Litecoin (LTC)	1.411	0.018
Monero (XMR)	1.518	0.007

どの暗号通貨もべき指数 α がおおよそ 1.4 − 1.5 となり, $\alpha = 2$ である正規分布よりも裾が厚いファットテールな分布に従うことが明らかとなった (図 1). 株式市場においても類似した推定値が報告されているため [1, 2], 暗号通貨で採用されている自律分散システムは分布の形に影響を与えないということを示唆している.

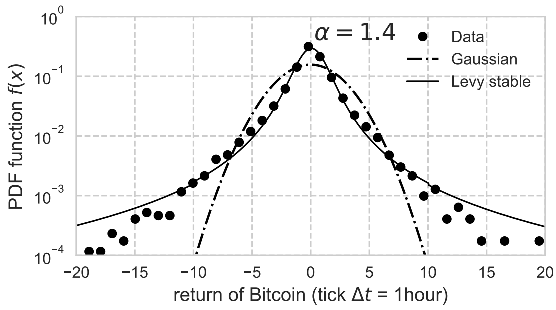


図 1. BTC の価格変動分布と安定分布による推定分布

3 理論的背景に基づいた推定分布の評価

安定分布は分散が無限大に発散するが, 観測データの有限性ゆえに, 実証分析では常に一般化中心極限定理 (GCLT) が成り立つとは限らな

い．実際，時間足 Δt を大きくしていくとある時点から安定分布の性質である GCLT が崩れて中心極限定理 (CLT) が作用し，価格変動分布が正規分布へゆっくりと収束することが知られている [4]．以下の図 2 が示すように $\Delta t \leq 4h$ においては安定分布の性質（α 一定）である一方で，それより大きな Δt においては α が 2 に近づくのが解る．すなわち，このような現象が起きてしまう低頻度データにおいては安定分布による分析は不適当であると言える．

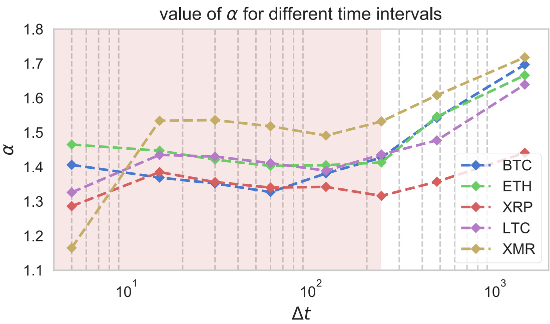


図 2. 各時間足 Δt に対する $\hat{\alpha}$ の変動

4　推定分布に対する定量的評価手法

安定分布の確率密度関数は陽に表せないため，一般的に推定分布 $\hat{p}(x)$ と経験分布 $p(x;N)$ との乖離度を直接的に測ることが容易にできない．そのため，パーセバルの等式を用いて分布間の二乗距離 $\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{p}(x) - p(x;N)|^2 dx$ を特性関数の形式に変換し，乖離度を測る．十分なデータ数のもと，サンプリング定理が成り立つとして標本化すると，以下のように近似計算できる．

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} |\hat{\phi}(k) - \phi(k;N)|^2 dk$$

しかし，データに内在するノイズやパラメータ推定精度に伴うズレを考慮すれば，上の二乗距離は誤差を表す確率変数 ε_k，理想的なデータ列から得る特性関数 $\phi_{\mathrm{ID}}(k;N)$ を用いて次のように書ける．

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left|\hat{\phi}(k) - \phi_{\mathrm{ID}}(k;N) + \varepsilon_k\right|^2 dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left|\hat{\phi}(k) - \phi_{\mathrm{ID}}(k;N)\right|^2 dk \\ &+ \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \left\{2\mathrm{Re}\left((\hat{\phi}(k) - \phi_{\mathrm{ID}}(k;N))\overline{\varepsilon_k}\right)\right\} dk \\ &+ \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} |\varepsilon_k|^2\, dk\end{aligned}$$

実データへの適用は分割数 Δ_k のリーマン和を考えればよい．第 1 項目はデータの有限性に伴う誤差であり，データ数 N に対して $\mathcal{O}(\frac{1}{N})$ のオーダーで落ちる．一方で第 2 項目はバイアスを表しており，ε_k が大きい場合には無視できなくなる．すると $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ のオーダーが有効となるため，これが距離関数のリーディングオーダーとなる．なお，$N \to \infty$ で距離関数はノイズ項 $\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} |\varepsilon_k|^2 dk$ へ収束する．図 3 は各通貨に関する距離関数であり，黒線は XRP に関する分布間の距離 $(\alpha = 1.518, \beta = 0.007)$ を ε_k の標準偏差 0.025 としたときのシミュレーション結果である．データが高頻度 $(\Delta t < 30\mathrm{min})$ のときは著しく安定分布と相性が悪くなっていく様子が分かる．これは，取引所の流動性が高頻度では少ないことやデータの分散不均一性が原因として考えられる．このように安定分布をモデル分布として採用した場合に，観測データに内在するノイズを含むあらゆる誤差の見積もりができるだけでなく，実証分析に適した時間足 Δt を評価できる [5]．標準誤差が解析的に求められるパラメータ推定手法を開発すれば，観測データに内在するノイズのみを議論することが可能となり，価格変動分析の性質をより一層厳密に評価できるようになると期待される．

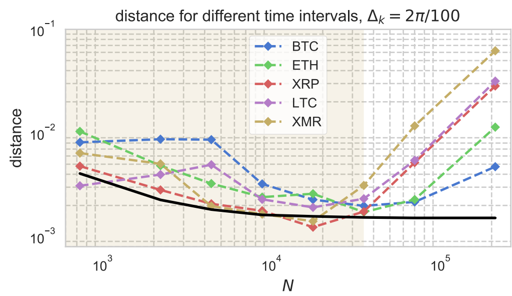


図 3. データ数 N(各時間足 Δt) に対する距離関数およびノイズ項の設定によるシミュレーション結果の一例

参考文献

[1] R. N. Mantegna and H. E. Stanley, Nature 376, 46 (1995).
[2] W. Xu et al., Math. Comput. Mod. 54, 610 (2011).
[3] T. Fukunaga and K. Umeno, arXiv: 1709.06279, (2017).
[4] P. Gopikrishnan et al., Phys. Rev. E 60, 5305 (1999).
[5] S. Kakinaka and K. Umeno, arXiv: 1807.05360, (2019).

周波数多重を用いたワイヤレスグループ電力送電方式 （Almost periodic frequency arrangement (APFA) 方式による）

中澤 勇夫 [1,2], 梅野 健 [1]
[1] 京都大学大学院 [2] 情報通信機構
e-mail : nakazawa.isao.53e@st.kyoto-u.ac.jp, umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1 概要

家電以外にも IoT 機器、車両 (自動車他)、飛行体等にワイヤレス給電の要望が高まっている [1]。このワイヤレス給電の対象が広がり、増大する WPT (Wireless Power Transfer) システムでは給電のエリアごとに給電端末が散在する事になり、同時給電の必要性が高まると想定される。本発表では、周波数多重を用いて WPT を可能とする方式を提案するもので、通信の分野で通常使われている周波数分割多重方式から概周期周波数配置（APFA）方式を用いて [3,4]、ワイヤレスグループ電力送電方式 (WGPT) の実現性と特性を検討する。また、電力受電では各サブキャリアの合成波のタイミング検出に影響する要素として、APFA の合成波の位相ジャンプ性について述べる。

2 ワイヤレスグループ電力送電システム

2.1 電力送電の適用域

屋外での WGPT としては、バス或いは大型自動車関連への給電、無人航空機（UAV: Unmanned aerial vehicle,)、およびドローン等がサービスの対象として考えられるいる 。また、衛星を使った宇宙太陽光発電システム（SSPS）も技術的に共通点が在るので WGPT に含まれる [1,2]。ＩＴＵ (International Telecommunication Union) では WPT に使える無線周波数帯として、920 MHz band, 2.45 GHz band, および 5.7 GHz band が候補として挙がっている。この発表では、ドローンに向けの WPT を対象として、2.45 GHz band、或いは 5.7 GHz band を使った送信部とアンテナからなる電力給電スポットと、地上高 10 m から 20 m にあるドローンを対象とする。

2.2 電力給電スポット

電力給電スポットと複数のドローンへの給電波のイメ-ジは図 1 に示す。ドローンへのワイヤレスによる給電はドローンの位置と傾きが変動するので、円偏波あるいは楕円偏波を用いるのが望ましい。円偏波は円偏波アンテナを用いる方法と垂直偏波と水平偏波を合成する方法がある。複数の電力送電波を検出する方法として円偏波では左旋円偏波と右旋円偏波による方法が、楕円偏波では長軸の直交性を用いて分離して検出が可能である。また、APFA の周波数は各々のサブキャリアを合成して増幅する方法と、各々のサブキャリアを増幅してアレーアンテナで空間合成する方法等が適用できる [5]。

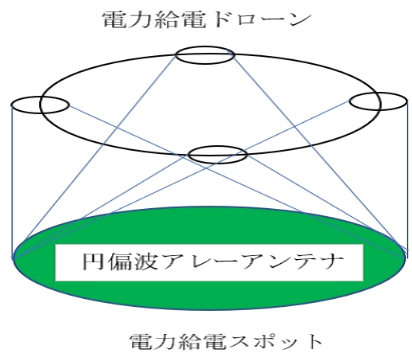


図 1. 複数のドローンへの給電システムイメージ

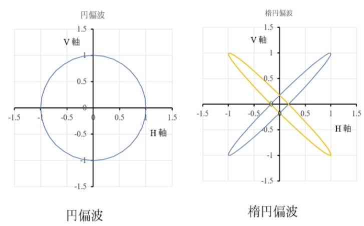


図 2. 送信波の電磁界水平 (H) 垂直平面

2.3 受電システム

マイクロ波の受電はレクテナを用いて電流に変換されている。ただ、APFA の周波数配置を用いる時には受信波の複素相関を取る必要があるが、Radio wave band の SW (Swich 回路) を用いて離散化複素相関を取ることを想定している。APFA はカオス性を示すので [3,4]、受

信信号の位相差に不連続性が見られる。図 2 は Subcarrie $= 32$, $\sigma = 0.01$ の時の受信波の位相差（度）を表していて、受信波の位相差のジャンプはほとんど見られない。図 3 は Subcarrie $= 32$, $\sigma = 0.129$ の時の受信波の位相差（度）を表していて、多くの位相差のジャンプが見られる。

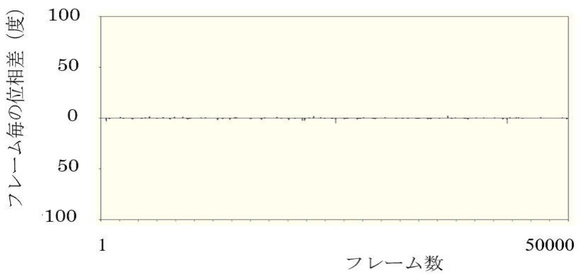


図 3. NOF の正規化標準偏差に対する受信波の位相差（度）(Subcarrie $= 32$, $(\sigma) = 0.01$)

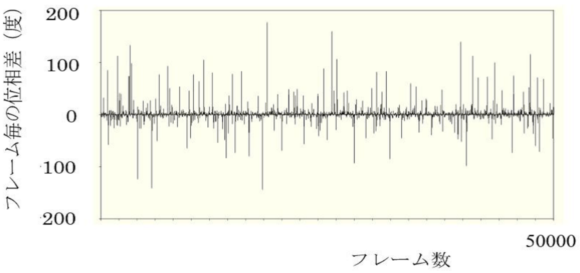


図 4. NOF の正規化標準偏差に対する受信波の位相差（度）(Subcarrie $= 32$, $(\sigma) = 0.129$)

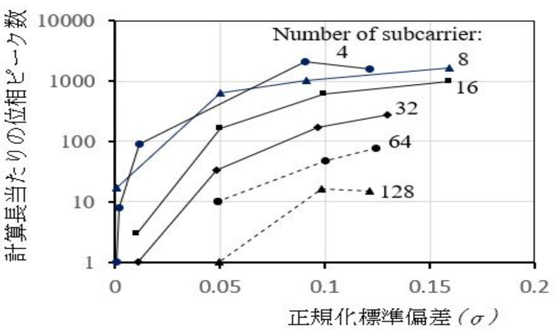


図 5. NOF の正規化標準偏差に対する受信波の位相差のピーク数

図 4 はサブキャリ数を 4 チャネルから 128 チャネルに対して、APFA 周波数の NOF (Normalized offset frequency) の正規化標準偏差 (σ) を変えた時の位相差の不連続性を図示している。

σ が 0.05 〜0.1 になると、受信波の位相差のピーク数が増大して受信信号の位相に不安定性が見られる。また、図 5 は図 4 と同一条件でのシュミュレーシン結果で、正規化標準偏差 (σ) を変えて受信波の位相差のピーク値を求めている。 σ が 0.05 〜0.1 になると、受信波の位相差のピーク値が増大して、180 度程度のジャンプする場合があると判る。

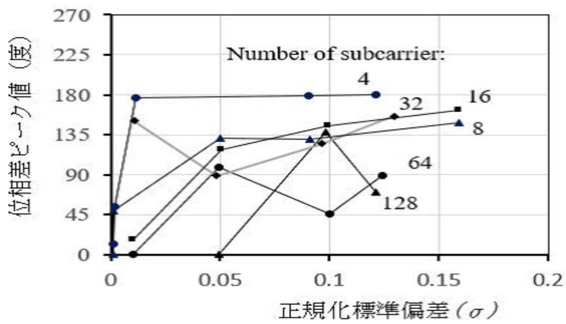


図 6. NOF の正規化標準偏差に対する受信波の位相差の最大ピーク値

3　まとめ

小規模な APFA システムをワイヤレスグループ電力送電システムに適用する場合の条件と基本的な構成の検討を行った。ドローンの複数給電には円偏波、楕円偏波を用いたアンテナのゾーン分けの構成を提案している。受信波からの同期信号の検出に関しては、位相差のジャンプが発生する事を示した。位相安定性には NOF の標準偏差が影響することが判った。

参考文献

[1] 篠原 真毅,　マイクロ波空間伝送でワイヤレス電力伝送は新たなフェーズ,　周波数資源開発シンポジウム 2019 予稿集, 7 月 5 日, 2019pp.91-115,.

[2] JAXA Web Page, url[http://www.kenkai.jaxa.jp/research/ssps/ssps-mssps.html].

[3] Isao Nakazawa, Ken Umeno, Chaotic properties in APFA communication, JSAIM2018 General Meeting, September 2018, pp.77-78.

[4] Isao Nakazawa, Ken Umeno, Application and Chaotic Feature of APFA (New Concept) to Optical Communication, The 530th Topical Meeting of The Laser Society of Japan, No.RTM-19-01-05, 28, Feb.. 2019.

[5] 原田　他, 周波数選択型マイクロ波空間伝送 WPT システム, 信学技報, WPT2017-40, 2017-10.

進化計算によるレザバーネットワークの機能分化

山口 裕 [1], 津田 一郎 [2]
[1] 福岡工業大学情報工学部，[2] 中部大学創発学術院
e-mail：y-yamaguchi@fit.ac.jp

1 はじめに

脳の構造は様々な階層において分化がみられる．特定の機能の発現には複数の分化したモジュールが状況に応じて活動し，機能を実現していることが知られている [1]．またこの機能分化の構造は刺激入力などの経験に依存することが知られている．我々は，このような複雑系である神経ネットワーク内に機能の構成要素となるモジュールが発現する現象を拘束条件つきの自己組織化と捉え，その数理的理解を目標とし数理モデルを提案してきた [2, 3]．本研究ではこれらの研究より具体的なタスクを想定し，回路において機能分化が起こる動的ネットワークの数理モデルを構成し，ネットワークの進化適応を追うことでタスクの特性に応じた柔軟な機能分化が発現する条件を探る．

数理モデルにはレザバー計算モデル [4, 5] を利用する．レザバー計算は大自由度力学系を利用した機械学習手法として注目されており，脳神経系のモデルとしても利用されている．本研究ではネットワークに視覚的入力，聴覚的入力を模した複数の情報源からの入力を与え，それらを分離するタスクの正確性を拘束条件とし，タスク遂行能力の高いネットワーク構造を進化的アルゴリズムにより探索する．そして発達した適応したネットワークの内部構造を機能分化の観点から検証する．

2 モデル

2.1 レザバーモデル

レザバー計算モデルはリカレントニューラルネットワークのひとつであり，入力層，レザバーとよばれる再帰結合を持つ中間層，出力層からなる．各素子のダイナミクスは leaky integrator 型と呼ばれるモデルを採用する：

$$x_i(t+1) = (1-\alpha_i)x_i(t) + \alpha_i \tanh\left(\sum_j w_{ij}x_j(t) + I_i(t)\right) + \xi_i(t), \quad (1)$$

ここで $x_i(t)$ は時刻 t における i 番目のニューロンの状態，α_i は過去の入力の減衰率，w_{ij} は再帰結合の重み，I_i は外部からの入力，ξ_i はノイズである．出力は中間層の状態の重み付き和により与えられる：

$$y_k(t) = \sum_j w_{kj}^{(\mathrm{out})} x_j(t), \quad (2)$$

ここで $w_{kj}^{(\mathrm{out})}$ は出力の重みである．

本研究では，中間層を入力ニューロンと出力ニューロンに分ける (図 1)．入力ニューロンは外部入力を受け付けるが出力へは結合しない．一方出力ニューロンは出力への結合を持つが，入力は直接受け取らない．

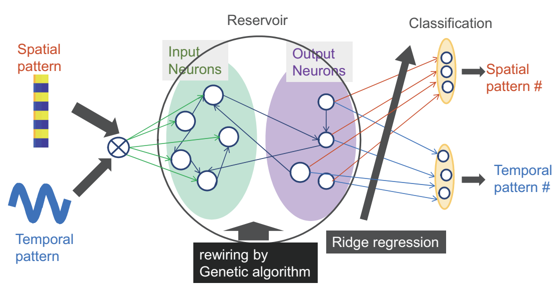


図 1. 本研究で用いるレザバーネットワーク

2.2 タスク

空間的パターンと時間的パターンの積からなる入力を考える．空間パターン $a_i^{(l)}, i = 1, ...N/2$ は $-1, 1$ からなる単純な直交パターンを 3 種用意し，時間パターン $b^{(m)}(t)$ は正弦波を 3 種用意する．入力を $I_i^{(l,m)}(t) = a_i^{(l)} b^{(m)}(t)$ とし，各入力ニューロンに入力する．選ばれる入力パターンの組 (l, m) は一定の間隔でランダムに交代する．

レザバーの出力は時間パターン，空間パターンをそれぞれ識別することを考える．入力は２つの入力が混合されており，各々の識別には何らかの非線形処理が必要となる．出力重みの学習は，学習期間の内部状態と教師信号を使いリッジ回帰により行う．

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

2.3　進化アルゴリズム

ランダム結合をもつレザバーを用いて上記のタスクを行った場合，出力重みをリッジ回帰により学習した後も性能は十分に上がらなかった．進化計算アルゴリズムを利用してネットワークをタスクに適応させることを考える．まずネットワークの集団を用意し，各個体に (1) から (3) を行う: (1) 初期遷移と学習期間の間，時系列パターンを入力し，内部状態を更新する (2) リッジ回帰により出力重みを学習する (3) 学習した重みを用いてテスト区間において空間，時間パターンそれぞれの教師信号と出力との間の平方二乗誤差平均を計算する．そして (4) 誤差の低い個体を残し，突然変異により次世代を作る．これを繰り返し，適応度の高い個体を適応的に生成する．

2.4　相互情報量による機能分化の解析

中間層の各ニューロンが時間，空間それぞれの情報をどの程度表現しているかを，ニューロンの状態とパターンの正解との間の相互情報量 $I_{(sp),i}, I_{(temp),i}$ を計測することにより調べる．内部状態 x_i を最大値から最小値の間で離散化し，同時頻度分布をもとに出力との間の相互情報量を計算する．

3　数値実験結果

ニューロン数 $N = 64$ として初期ネットワークを作り，進化アルゴリズムを実行した．進化後には時間パターン，空間パターンの正解率 $p_{(sp)}, p_{(temp)}$ はともに 9 割を超えた．各ニューロンがどの程度時間，空間，それぞれのパターンに対する情報をもっているかを調べるため相互情報量解析を行った．図 2 に進化後の $I_{(sp),i}$ と $I_{(temp)i}$ の同時分布を示す．$I_{(sp),i}$ と $I_{(temp),i}$ の間には負の相関を持つことがわかった (相関係数 $r = -0.41$)．つまり時空間どちらかの情報を表現しているニューロンほどもう一方の情報は表現していない傾向があった．この意味で，ニューロンの間に機能の分化が現れていることが確認された．

4　考察とまとめ

本研究ではレザバー型のネットワークを進化させることで，複数入力の同時デコーディングを行うネットワークを実現した．ネットワー

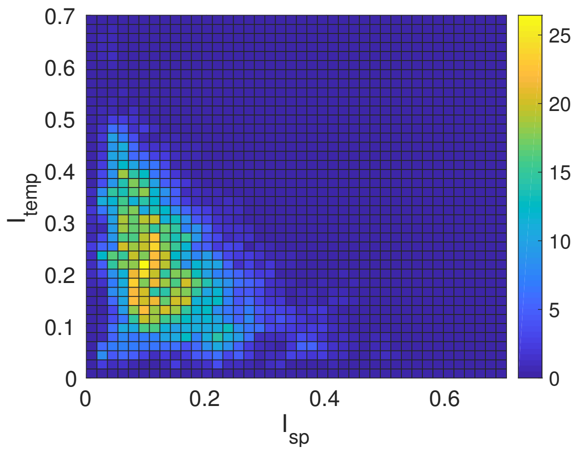


図 2. 各ニューロンが持つ空間パターンの情報量と時間パターンの情報量の分布

クの機能分化を情報量の観点から解析した結果，２種の情報の同時デコーディング能力を獲得したネットワーク内に，特定の情報に特化したニューロン群が現れることを見出した．今後ネットワーク構造の分析を行うとともに，拘束条件やタスクに対する分化の依存性を示す予定である．

謝辞　本研究は JST, CREST, JPMJCR17A4 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] M. F. Glasser et al., A multi-modal parcellation of human cerebral cortex, Nature, 536, (2016), 171–179.

[2] Y. Yamaguti and I. Tsuda, Mathematical modeling for evolution of heterogeneous modules in the brain, Neural Networks, vol. 62, 2015, 3–10.

[3] I. Tsuda, Y. Yamaguti, and H. Watanabe, Self-organization with constraints—a mathematical model for functional differentiation, Entropy, 18, (2016), 74.

[4] W. Maass, T. Natschläger, and H. Markram, Real-time computing without stable states: A new framework for neural computation based on perturbations, Neural computation, 14, 11, (2002), 2531–2560.

[5] H. Jaeger and H. Haas, Harnessing nonlinearity: Predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication, Science, 304, (2004), 78–80.

グラフの変形を用いた量子ウォークのユニタリ同値性

著者 1 瀬川悦生 [1]

[1] 横浜国立大学

e-mail : etsuo-segawa-tb@ynu.ac.jp

1 Introduction

2000 年代初頭に量子 (ランダム) ウォークという名前がつけられてから, 関連する多くのモデルがそれぞれの研究分野の視点に応じた姿に形を変えて提案されている. 例えば, 物性物理 [1], 実験 [2], また数学の分野では確率論 [3], グラフゼータ [4], スペクトル・散乱理論 [5] の観点から考察するときにには coined walk; 量子ウォークで駆動する量子アルゴリズムなどを考える量子情報などの分野では bipartite walk [6]; さらに一部の実験の実装の提案 [7] や組合せグラフ理論・アルゴリズム [8] の分野では staggered walk などが提案されている. この講演では, これらの様々な量子ウォークモデルを含むような, partition-based walk という自然な拡張モデルを通じて, 各量子ウォークモデルを眺める. 同時に, 実はこれらすべての量子ウォークモデルがこの partition-based walk とユニタリ同値となることをグラフの変形を用いて説明する.

2 2-partition walk による各モデルの説明

各モデルをできるだけ統一的に眺めるために, 量子ウォークをある離散集合 Ω の各元でラベル付けされた標準基底で生成された線形空間を $\ell^2(\Omega)$ とおく. つまり,

$$\ell^2(\Omega) = \{\psi \mid \psi : \Omega \to \mathbb{C},\ \sum_{\omega\in\Omega} |\psi(\omega)|^2 < \infty\}.$$

内積は標準内積で, $\langle\psi, \varphi\rangle = \sum_{\omega,\omega'} \overline{\psi(\omega)}\phi(\omega)$. 時間発展は $\ell^2(\Omega)$ 上のあるユニタリ作用素 U を繰り返し作用させることで与えられる. 時刻 n での状態を $\psi_n \in \ell^2(\Omega)$ とすれば, $\psi_{n+1} = U\psi_n$ となる. ユニタリ性よりノルムが保存され, $||\psi_0|| = 1$ とすれば, 各時刻における確率分布が定義できる. つまり, $\mu_n : \Omega \to [0, 1]$ とすると, $\mu_n(\omega) = |\psi_n(\omega)|^2$ である.

このままだとあまりにも様々な可能性がありすぎるので, これまでの各モデルを眺めることができるようなユニタリ作用素を構成するために, 次のようなことを考える. 与えられた離散集合 Ω に対して, 異なる 2 つの同値関係 π_1, π_2 を導入する. この同値類を $\Omega/\pi_1 := \{C_1, C_2, \dots\}$, $\Omega/\pi_2 := \{D_1, D_2, \dots\}$ とおいたときに, Ω において, それぞれ $|C_j|, |D_j| < \infty$ $(j = 1, 2, \dots)$ であると仮定する. 部分空間 $\mathcal{C}_j \subset \ell^2(\Omega)$ を C_j の元で生成された部分空間とする. さらに, $\hat{C}_j$ を $\mathbb{C}_j$ 上のある (有限な) ユニタリ作用素とする. 同様にして, $\mathcal{D}_j$ を D_j の元で生成された部分空間とする. さらに, $\hat{D}_j$ を $\mathbb{D}_j$ 上のある (有限) ユニタリ作用素とする. すると, $\hat{C} := \oplus_j \hat{C}_j$, $\hat{D} := \oplus_j \hat{D}_j$ はそれぞれ $\ell^2(\Omega)$ 上のユニタリ作用素になる. $\hat{C}$, $\hat{D}$ 単独で作用させると, 量子ウォーカーはそれぞれ π_1, π_2 による有限なパーテションの外に出ることができないがこれを交互に作用素させることによって, パーテションの外にも移動できるようになる. そこで 1 ステップの時間発展を与えるユニタリ作用素として, $U = \hat{D}\cdot\hat{C}$ とする. これを 2-partition based モデルと呼ぶ.

これを用いて, 各モデルを与えることができることを説明するために, グラフの用語を少し準備する. グラフ $G = (V, E)$ において, A を E から誘導される対称な有向辺全体の集合とする. 任意の有向辺 $a \in A$ に対して $\bar{a} \in A$ を a の逆辺, $o(a)$, $t(a)$ を a の始点と終点, $|a| \in E$ を a を誘導した無向辺で, $|a| = |\bar{a}|$.

1) **coined walk**: 連結グラフ $G = (V, E)$ が与えられたときに, ベースになる離散集合は $\Omega = A$. 同値関係 π_1, π_2 はそれぞれ,

   $$a \overset{\pi_1}{\sim} b \Leftrightarrow t(a) = t(b),\ \ a \overset{\pi_2}{\sim} b \Leftrightarrow |a| = |b|.$$

   特に, 全ての $e \in E$ で

   $$\hat{D}_e \cong \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

   とすることが多く, フリップフロップ型のシフト作用素と呼ばれる. またこの拡張として非対角成分を入れたものを, 最近ではスプリットステップ量子ウォークと呼ばれたりもする.

2) **bipartite walk**: 二部グラフ $(X \sqcup Y, E)$ が与えられたときに, 任意の辺 $e \in E$ に対して, $X(e)$ を X に属する方の頂点, $Y(e)$ を Y に属する方の頂点とする. ベースになる離散集合は $\Omega = E$ で,

$$e \overset{\pi_1}{\sim} f \Leftrightarrow X(e) = X(f),$$
$$e \overset{\pi_2}{\sim} f \Leftrightarrow Y(e) = Y(f).$$

3) **staggered walk**: 次のような 2 種類の G の分割が存在するときに, G を 2-tesseallble と呼ぶ. $G/\Gamma_1 := \{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}$, $G/\Gamma_2 := \{\beta_1, \beta_2, \dots\}$ とすると, α_j, β_j はそれぞれ G のクリークで, $\sqcup_j V(\alpha_j) = \sqcup_j V(\beta_j) = V(G)$, かつ, $(\sqcup_j E(\alpha_j)) \cup (\sqcup_j E(\beta_j)) = E(V)$. すると, $\Omega = V$ で,

$$u \overset{\pi_1}{\sim} v \Leftrightarrow u, v \in {}^{\exists}V(\alpha_j),$$
$$u \overset{\pi_2}{\sim} v \Leftrightarrow u, v \in {}^{\exists}V(\beta_j).$$

3 同値関係

4 種類の量子ウォークモデル, partition-based walk, coined walk, bipartite walk, staggered walk の族をそれぞれ $\mathcal{P}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{S}$ と記述する. また $\mathcal{C}_2$ を Coined walk の二乗を時間発展とする量子ウォークモデルの属とする. 実は $\mathcal{C}_2$ は $\mathcal{P}$ による定式化で次のように書き表される: $\Omega = A$, 任意の $a, b \in A$ に対して, $a \overset{\pi_1}{\sim} b \overset{def}{\Leftrightarrow} t(a) = t(b)$, $a \overset{\pi_2}{\sim} b \overset{def}{\Leftrightarrow} o(a) = o(b)$. さらに $\langle \delta_b, \hat{E}_u \delta_a \rangle = \langle \delta_{\bar{b}}, \hat{F}_u \delta_{\bar{a}} \rangle$ $(\forall u \in V)$. これらの量子ウォークモデルの属の間に順序を以下のように定義する.

定義 1. $\mathcal{A}, \mathcal{A}' \in \{\mathcal{C}, \mathcal{P}, \mathcal{B}, \mathcal{C}_2, \mathcal{S}\}$ とする. モデル $\mathcal{A}$ に属する任意の量子ウォークの時間発展 $\hat{\Theta} : \ell^2(K) \to \ell^2(K)$ に対して, $\mathcal{A}'$ に属するある量子ウォークの時間発展 $\hat{\Theta}' : \ell^2(K') \to \ell^2(K')$ と, 単射 $\eta : K \longrightarrow K'$ が存在して,

$$\hat{\Theta} = \mathcal{U}_\eta^{-1} \, \hat{\Theta}' \, \mathcal{U}_\eta,$$

が成立するとき, $\mathcal{A} \prec \mathcal{A}'$ と書く. ここで $\mathcal{U}_\eta : \ell^2(\Gamma) \to \ell^2(\eta(\Gamma))$ はユニタリ写像で, $(\mathcal{U}_\eta \psi)(a) = \psi(\eta^{-1}(a))$. 特にその逆も成立して $\mathcal{A} \succ \mathcal{A}'$ のとき, $\mathcal{A} \cong \mathcal{A}'$ と記述する.

明らかに $\mathcal{P} \succ \mathcal{B}, \mathcal{C}_2, \mathcal{S}$ が成立する. ところがこの逆も成立し, 次の定理が言える.

定理 2. $\mathcal{C}, \mathcal{P}, \mathcal{B}, \mathcal{C}_2, \mathcal{S}$ を上で定義した量子ウォークモデルの属とする. すると,

$$\mathcal{C} \prec \mathcal{P} \cong \mathcal{B} \cong \mathcal{C}_2 \cong \mathcal{S}.$$

4 拡張モデル

k 種類の同値関係を用意して, k-partite based walk への拡張を考えることができる. このときに, 各クリークを頂点する誘導される有向 k-partite グラフが容易に構成できる. 実は 2 次元格子上で有向 $k = 4$ partite グラフに相当するようなモデルが既にあり, トポロジカル絶縁体との対応について議論がされており [9], 応用上重要になる. 特に, 入次数と出次数がそれぞれ 2 であるような有向グラフの構成は, レーザーを用いた実験室での実装 [10] においても, 実現が理論的に可能になるので, 重要である.

参考文献

[1] T, Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, E. Demler, Phys. Rev. A **82** (2010) 033429.

[2] K. Manouchehri, J. Wang, Springer (2014).

[3] 今野紀雄, (2014) 森北出版.

[4] N. Konno and I. Sato, Quantum Inf. Process. 11 (2012) pp.341-349.

[5] H. Morioka, Reviews in Mathematical Physics, (2019) https://doi.org/10.1142/S0129055X19500193.

[6] M. Szegedy, Proc. 45th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (2004) 32-41.

[7] J. K. Moqadam, M. C. Oliveira, R. Portugal, Phys. Rev. B 95 (2017) 144506

[8] R. Portugal, Phys. Rev. A **93** (2016) 062335.

[9] T. Endo, N. Konno, H. Obuse and E. Segawa, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 50 (2017) 455302.

[10] K. Matsue, L. Matsuoka, O. Ogurisu and E. Segawa, Quantum Studies: Mathematics and Foundations 6 (2018) pp. 35?44.

ウォークによるレコメンデーションモデル

高橋佐良人 [1]
[1] 横浜国立大学　理工学府　博士課程後期
e-mail : takahashi-sarato-vb@ynu.jp

1　はじめに

EC サイト（Amazon [1]，楽天市場 [2] など）で表示されるおすすめの商品，ポータルサイトや SNS（Yahoo! JAPAN [3]， Facebook [4] など）でのおすすめのニュースや広告など，Web 上には様々な「レコメンド」が利用されるサービスがあり，そのモデルやシステムの精度が，商品の売上やサイトのアクセス数に大きな影響を与えている．今回，ランダムウォークなどの「ウォーク」を利用して新しいタイプのレコメンデーションモデルの構築を試みる．

ランダムウォークを利用したレコメンデーションモデルは，今までにもいくつか提案されている [5, 6]．また，Laknath [7] は，レコメンダーシステムで使われているランダムウォークを以下の 3 つのカテゴリに分類して紹介している．

1) Global ranking methods
2) Random work with restarts (RWR)
3) Absorbing random walks

これらの方法は，ユーザーやアイテムの関係をグラフで表現し，そのグラフ上をランダムウォークさせることにより得られる分布などから，レコメンドするアイテムを選ぶなど，そのグラフ構造を利用するのが一般的である．例えば RWR は，アイテム，ユーザー，SNS などのグラフ上のランダムウォークを利用して，ノード間の類似度を計算することにより，友人の可能性が高いユーザーを紹介することなどに使われている．

今回提案する方法は，アイテムやユーザーのグラフを考慮しない方法であり，ユーザーの選択過程（意思決定）をウォークに見立て，嗜好度合として評価することを試みる．

2　モデルの特徴

今回検討するモデルは，レコメンドを想定し，以下の特徴を持つモデルとする．

1) 選択を 1 ステップと考える 1 次元離散時間のモデルである
2) 選択対象となるアイテム/カテゴリを 1 次元の座標で表し，各ステップでは隣接座標に限らず，現在の座標を含む任意の座標へ移動する可能性がある
3) 「過去」の選択過程をウォークで表現するモデルであり，「未来」へは時間発展しない
4) ステップごとに選択対象となるアイテム/カテゴリ（全ての座標）への嗜好度合を算出できることとする
5) あるステップで選択されたアイテム/カテゴリ（座標）への嗜好度合は，直前のステップでの，そのアイテム/カテゴリへの評価よりも高くなることとする
6) そのステップでの座標における存在確率を，アイテム/カテゴリ（座標）の嗜好度合と考える

はじめに，上記の特徴を持つユーザーの選択過程を評価するモデルとして，ランダムウォークを想定し発展させたモデルを考える．その後，ランダムウォークを想定したモデルを，相関付ランダムウォーク，量子ウォークへと発展させ，その特徴，違いに関して，検証を行う．以下に各ウォークを利用したモデルに関して，簡単に紹介する．

3　ランダムウォークの利用

ここで利用するウォークは，1 次元のモデルであり，左へ 1 単位移動する確率が p，右に 1 単位移動する確率が $q(=1-p)$ のランダムウォークを，上記特徴を満たすように発展させたモデルである．時間発展をするモデルではなく，過去の選択過程をウォークとして評価する，移動は左右へ 1 単位ではなく，任意の座標へ移動できる，の 2 点がランダムウォークとの大きな違いである．

前出のモデルの特徴を満たすため，以下のルールに基づき，各ステップでのユーザーの嗜好度合を評価する．

1) 初期状態は，ある 1 つのアイテム（座標）のみ 100%の嗜好度合を与えた状態とする
2) あるアイテム（座標 x とする）における嗜好度合は，次のステップでは以下の定義で移動する
・次のステップで，他のアイテム（座標 k とする）が選択された場合 : 確率 p で他のアイテム（座標 k）へ，確率 q で同じアイテム（座標 x）へ嗜好度合が移動する
・次のステップで，同じアイテム（座標 x）が選択された場合 : アイテム（座標 x）の嗜好度合は，確率 1 で同じアイテム（座標 x）へ移動する

上記ウォークのダイナミクスを以下に示す．

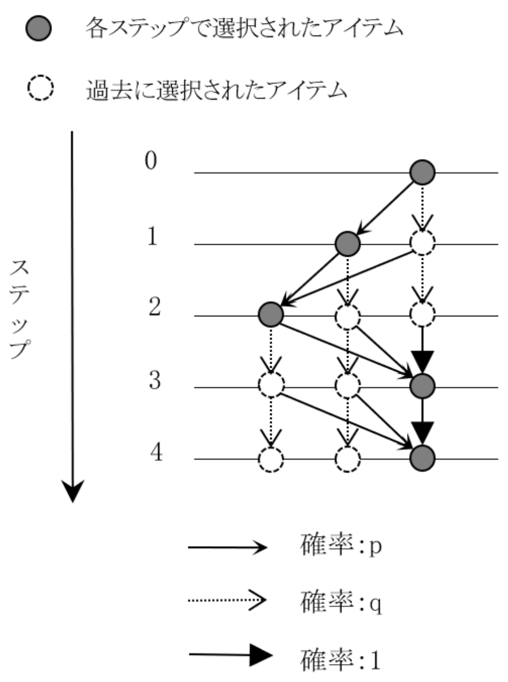


図 1. ウォークのダイナミクス

4 相関付ランダムウォークの利用

次に，上記ランダムウォークを想定したモデルを，相関付ランダムウォークを想定し，発展させる．相関付ランダムウォーク (correlated random walk， persistent random walk) は，直前のウォークに依存して（時間相関を持つ）次のステップへの移動確率が変わるランダムウォークとして知られている（例えば， [8] の補遺を参照）．また特殊な場合として，通常の対称なランダムウォークを含んでいる．この性質を取り込むことにより，相関付ランダムウォークを想定し発展させたモデルは，過去の選択をより考慮したモデルになることが期待される．

5 量子ウォークの利用

最後に，相関付ランダムウォークを想定したモデルを，量子ウォークを想定したモデルへと発展させ，その挙動を確認する．量子ウォークは，ランダムウォークの量子版として，2000 年頃から，盛んに研究されている分野である [8, 9, 10, 11]．また量子，という言葉からも連想されるように，その挙動に関しては，直感では解釈し難いことも予想されるが，反対に量子の性質でしか表現できない挙動をとる可能性もあるため，前出の 2 つのモデルとの違いには，興味が持たれる．

6 今後の展開

本研究では，個人の嗜好性，嗜好度合を選択の時系列を考慮する形で，ウォークを利用して評価することを試みた．今後は，この嗜好度合の妥当性の評価を実際のデータを通して行い，最終的なレコメンドというアクションに繋げることを目標として，検討を進めたいと考える．

謝辞 本研究を進めるにあたり，貴重な助言，協力を頂いた横浜国立大学大学院 工学研究院 今野紀雄教授，学部 4 年生の内藤拓人君，黄海仲星君に感謝する．

参考文献

[1] Amazon， `https://www.amazon.co.jp/`.
[2] 楽天市場， `https://www.rakuten.co.jp/`.
[3] Yahoo! JAPAN， `https://www.yahoo.co.jp/`.
[4] Facebook， `https://www.facebook.com/`.
[5] M. Gori, A. Pucci, V. Roma, and I. Siena, Itemrank: A random-walk based scoring algorithm for recommender engines, IJCAI, vol.7 (2007), pp.2766–2771.
[6] L. Backstrom and J. Leskovec, Supervised random walks: predicting and recommending links in social networks, Proceedings of the fourth ACM international conference on Web search and data mining. ACM, (2011), pp.635–644.
[7] Laknath Semage, Recommender systems with random walks: A survey, arXiv:1711.04101.
[8] 今野紀雄，量子ウォークの数理，産業図書，2008.
[9] 今野紀雄，量子ウォーク，森北出版，2014.
[10] 町田拓也，図で解る量子ウォーク入門，森北出版，2015.
[11] 今野紀雄，井手勇介 (共編著)，量子ウォークの新展開 -数理構造の深化と応用-，培風館，2019.

確率セルオートマトンによって表現される粒子系の漸近分布の評価

延東和茂
早稲田大学基幹理工学部
e-mail：k-endo@aoni.waseda.jp

1 概要

状態変数の値が 0 と 1 の 2 値であるセルオートマトンのうち，状態変数の総和が時間に対して不変であるようなものを粒子セルオートマトンと呼ぶ．この粒子セルオートマトンに対して確率変数を導入したものは，数学のみならず物理，社会，生命現象における幅広い応用的研究がなされている．特に，確率バーガーズセルオートマトンと呼ばれる確率粒子セルオートマトンは，統計力学における TASEP (totally asymmetric simple exclusion process) と等価なモデルとして知られ，行列積の方法やベーテ仮設を用いた手法などによって解析がなされている [1][2].

本稿ではまず，確率バーガーズセルオートマトンに対して，その漸近挙動を理解することを目的に行った，上記の手法とは異なるアプローチを提示する．具体的には，確率バーガーズセルオートマトンを，とり得る全空間の状態の集合を状態空間に持つ 1 次元の確率過程として捉え，エルゴード過程であることを仮定したうえで遷移確率行列を用いながら系の極限分布を予想する．予想した極限分布から，漸近挙動における物理量が期待値として導出できることを示す．また，導出した物理量が GKZ 超幾何級数という特殊関数となっていることを利用して，空間周期無限大の極限計算を行い，既存の研究において導出された無限系における物理量と合致することを示す．さらに，これらの手法を用いて同様の解析を行える確率セルオートマトンを新たに提案し，それらの極限分布と物理量を予想する．なお，解析を行う系はすべて parallel update であり，周期境界条件を想定している．

2 確率バーガーズセルオートマトン

$$
\begin{aligned}
&u_j^{n+1} = u_j^n + q_{j-1}^n - q_j^n, \\
&q_j^n = \min(a_j^n, u_j^n, 1-u_{j+1}^n), \quad (u_j^n \in \{0,1\}) \\
&a_j^n = \begin{cases} 1 & (\text{確率 } \alpha) \\ 0 & (1-\alpha) \end{cases}
\end{aligned}
$$

で定義される確率バーガーズセルオートマトンを考える．各粒子の動きは，以下のようになると考えることができる．

$$\overset{\text{確率 } \alpha}{\overset{\curvearrowright}{10}}$$

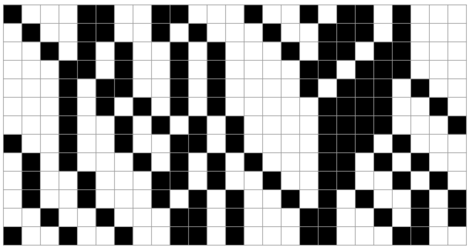


図 1. 確率バーガーズセルオートマトンの時間発展の例

例えば，空間サイズ $L = 4$，粒子数 $m = 2$ の場合，とり得る状態は

$$\Omega = \{0011,\ 0110,\ 1100,\ 1001,\ 0101,\ 1010\}$$

となり，上記の粒子の動く確率的条件を基に各状態から各状態への遷移確率行列を導出することができ，その固有値 1 の固有ベクトルは，

$$(1-\alpha,\ 1-\alpha,\ 1-\alpha,\ 1-\alpha,\ 1,\ 1)$$

となる．

また，異なるパラメータ $L = 6$，$m = 3$ の時，状態空間 Ω は

000111, 001110, 011100, 111000, 110001,
100011, 001011, 010110, 101100, 011001,
110010, 100101, 010011, 100110, 001101,
011010, 110100, 101001, 010101, 101010

となり，固有値 1 の固有ベクトルは，

$$\Big(\overbrace{(1-\alpha)^2, \ldots (1-\alpha)^2}^{\text{6 components}}, \overbrace{1-\alpha, \ldots 1-\alpha}^{\text{12 components}}, 1, 1\Big).$$

となる．このようないくつもの異なる空間サイズ，粒子数での実験から，系の漸近分布に関する予想を以下のように立てることができる．

3　確率バーガーズセルオートマトンの漸近分布と基本図

予想 任意の状態 $x \in \Omega$ に対して，その時間無限大における生起確率は，

$$p(x) = \frac{C}{(1-\alpha)^{\#10(x)}}$$

ここで，$\#10(x)$ は，各状態におけるローカルなパターン 10 の数，C は $\sum_{x\in\Omega} p(x) = 1$ を満たすための規格化定数である．

この予想から，系の各状態の時間無限大における生起確率は，以下のようになる．

$$p(x) = \frac{(\frac{1}{1-\alpha})^{\#10(x)}}{\sum_{k=1}^{m} N_{L,m}(k)(\frac{1}{1-\alpha})^k} \qquad (0 < \alpha < 1)$$

ここで，$N_{L,m}(k)$ は，$\#10 = k$ となるような状態の数で，一般の L, m に対して，

$$N_{L,m}(k) = \frac{L(m-1)!(L-m-1)!}{(m-k)!(k-1)!k!(L-m-k)!}$$

となる．

上で導出した各状態の生起確率を基に，期待値としての基本図（時間無限大における粒子の平均運動量と粒子密度の関係式）を導出することができ，

$$Q_{L,\alpha}(m) = \frac{\alpha}{L}\frac{\sum_{k=1}^{m} k\, N_{L,m}(k)(\frac{1}{1-\alpha})^k}{\sum_{k=1}^{m} N_{L,m}(k)(\frac{1}{1-\alpha})^k}$$

となる．

この基本図は GKZ 超幾何級数を用いて表現さ

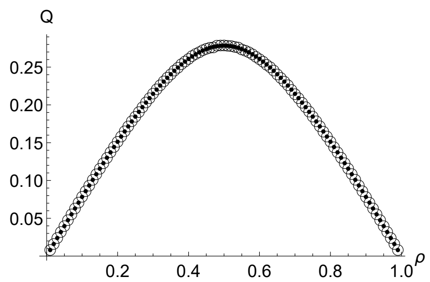


図 2. 確率バーガーズセルオートマトンの基本図. $\alpha = 0.8$. 黒点が上式から導出，白丸が数値計算によって導出された基本図.

れており，その性質を利用して熱力学的極限を計算することができ，その結果は，

$$Q = \lim_{\substack{L\to\infty \\ m=\rho L}} Q_{L,\alpha}(m) = \frac{1-\sqrt{1-4\alpha\rho(1-\rho)}}{2}$$

となり，既存の結果と合致する [3].

4　拡張と今後の展望

その他にも，同様の手法で解析が行えるような拡張された確率粒子系を提案し，漸近分布に関する予想と基本図の導出について，講演で紹介する．漸近分布を予想する際，任意の空間サイズ，粒子数において，導出した遷移確率行列の固有ベクトルの各要素が通分，因数分解されていることが必要となっており，いくつかの系に共通する興味深い性質であるといえる．また，max-plus 代数を用いて表現された拡張系の超離散化，逆超離散化を用いた可積分系としての解析も，今後の展望である．

参考文献

[1] R. A. Blythe, M. R. Evans, Nonequilibrium steady states of matrix-product form: a solver's guide, J. Phys. A: Math. Theor., 40 (2007), R333.

[2] O. Golinelli, K. Mallick, The asymmetric simple exclusion process: and integrable model for non-equilibrium statistical mechanics, J. Phys. Math. Gen., 39 (2006), 12679.

[3] M. Schreckenberg, A. Schadschneider, K. Nagel, N. Ito, Discrete stochastic models for traffic flow, Phys. Rev. E, 51 (1995), 2939.

超離散量子ウォークの保存量と定常状態

渡邉 扇之介 [1]，福田 亜希子 [2]，瀬川 悦生 [3]，佐藤 巌 [1]
[1] 小山工業高等専門学校，[2] 芝浦工業大学，[3] 横浜国立大学
e-mail : sewatana@oyama-ct.ac.jp

1　はじめに

超離散系とは，連続系における独立変数と従属変数をどちらも離散化することで得られる系として知られ，以下の超離散極限が鍵となる．

$$\lim_{\epsilon\to+0}\epsilon\log(e^{\alpha/\epsilon}+e^{\beta/\epsilon})=\max\{\alpha,\beta\},$$
$$\lim_{\epsilon\to+0}\epsilon\log(e^{\alpha/\epsilon}\cdot e^{\beta/\epsilon})=\alpha+\beta.$$

この超離散極限によって得られる超離散系は演算が max と $+$ のみで構成される．一般に，実数に無限大を加えた集合 $\mathbb{R}_{\max}$ に 2 つの二項演算和 $\oplus$ と積 $\otimes$ を，それぞれ $\oplus=\max$ と $\otimes=+$ で定義した代数 $(\mathbb{R}_{\max},\oplus,\otimes)$ を max-plus 代数といい，代数幾何においてはトロピカル幾何という名でも様々な研究がされている [1]．本研究は確率統計や物理，情報などで広く知られる量子ウォークの超離散版を構築することを目指したもので，その第一歩として max-plus 代数における量子ウォークを模した一次元整数格子上のモデル，max-plus ウォークを構成した．通常の一次元整数格子上の量子ウォークでは，各格子点上の状態ベクトルのユークリッドノルムの総和が保存量となることが知られている [2]．これに対して，本研究で考える max-plus ウォークは各格子点上の状態ベクトルを決定する行列の固有値の総和が保存量となることを示す．さらに，その固有値に関する固有ベクトルが max-plus ウォークの定常状態となることを示す．

2　Max-plus ウォーク

1 次元整数格子上の各格子点に，max-plus 代数におけるベクトルを与える．このとき，これらのベクトルがある決められた max-plus 行列によって時間発展するモデルを max-plus ウォークと呼ぶ．格子点上のベクトルのことを状態と呼び，時刻 $n\in\mathbb{N}$ で場所 $k\in\mathbb{Z}$ にある状態を ψ_k^n と書く．本研究では，状態を 2 次元ベクトルとし，1 つの初期状態 $\psi_0^0\in\mathbb{R}_{\max}^2$ が 2 つの 2×2 の max-plus 行列 $P,Q\in\mathbb{R}_{\max}^{2\times 2}$ で時間発展する次の図 1 のような max-plus ウォークを考える．注意として，$\mathbb{R}_{\max}^n$ は n 次の max-plus ベクトル全体，$\mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ は $n\times n$ の max-plus 行列全体を表す．

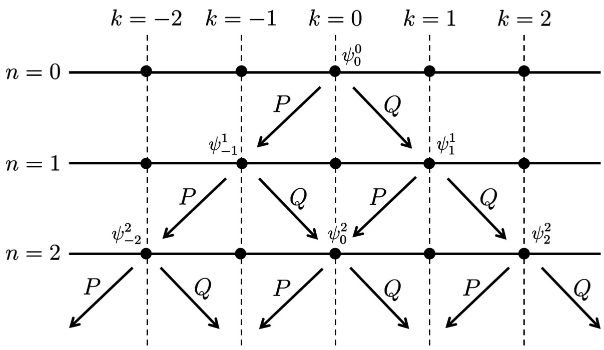


図 1. Max-plus ウォーク

このとき，max-plus ウォークにおける状態 ψ_k^n は次のような時間発展系で決まる．

$$\psi_k^n=(P\otimes\psi_{k+1}^{n-1})\oplus(Q\otimes\psi_{k-1}^{n-1})=A_k^n\otimes\psi_0^0.$$

行列 $A_k^n\in\mathbb{R}_{\max}^{2\times 2}$ を max-plus ウォークの状態決定行列と呼ぶ．例えば $n=3$，$k=0$ での状態決定行列 A_{-1}^3 は

$$A_{-1}^3=Q\otimes P^{\otimes 2}\oplus P\otimes Q\otimes P\oplus P^{\otimes 2}\otimes Q$$

となる．発展行列 P,Q をそれぞれ

$$P=\begin{pmatrix}a & b\\ \varepsilon & \varepsilon\end{pmatrix},\quad Q=\begin{pmatrix}\varepsilon & \varepsilon\\ c & d\end{pmatrix}$$

とし，新たに 2 つの行列 $R,S\in\mathbb{R}_{\max}^{2\times 2}$ を

$$R=\begin{pmatrix}c & d\\ \varepsilon & \varepsilon\end{pmatrix},\quad S=\begin{pmatrix}\varepsilon & \varepsilon\\ a & b\end{pmatrix}$$

とすると，状態決定行列 A_k^n は次の定理で示すように，行列 P,Q,R,S の 1 次結合で書くことができる．

定理 1 Max-plus ウォークにおける状態 ψ_k^n は初期状態 ψ_0^0 から，左に進むことを意味する発展行列 P を ℓ 回，右に進むことを意味する発展行列 Q を m 回用い，左から右 (または右から左) に r 回折り返すことで得られるとする．こ

のとき，状態決定行列 A_k^n は
(i) $k=-n+2,-n+4,\ldots,n-2$ のとき

$$
\begin{aligned}
&A_k^n = \\
&\bigoplus_{r=1}^{(\ell-1)\wedge m}\left\{(\ell-r-1)a+rb+rc+(m-r)d\right\}\otimes P \\
&\oplus \bigoplus_{r=1}^{\ell\wedge(m-1)}\left\{(\ell-r)a+rb+rc+(m-r-1)d\right\}\otimes Q \\
&\oplus \bigoplus_{r=1}^{\ell\wedge m}\left\{(\ell-r)a+rb+(r-1)c+(m-r)d\right\}\otimes R \\
&\oplus \bigoplus_{r=1}^{\ell\wedge m}\left\{(\ell-r)a+(r-1)b+rc+(m-r)d\right\}\otimes S,
\end{aligned}
$$

(ii) $k=-n$ のとき $A_{-n}^n=(n-1)a\otimes P$,
(iii) $k=n$ のとき $A_n^n=(n-1)d\otimes Q$
となる．ここで，$a\wedge b=\min\{a,b\}$ である．

3 Max-plus ウォークの保存量

Max-plus ウォークの発展行列 P,Q の成分であった $a,b,c,d\in\mathbb{R}_{\max}$ に対して以下の条件を課す．

$$
\begin{cases} a\otimes d=e, \\ b\otimes c=e. \end{cases} \tag{C}
$$

この条件 (C) のもとで，定理 1 で得られた max-plus ウォークの状態決定行列 A_k^n は

$$
A_k^n=\begin{cases}
\begin{pmatrix} na & (n-1)a+b \\ \varepsilon & \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{if } \; k=-n, \\
\begin{pmatrix} -ka & (-k-1)a+b \\ (-k+1)a-b & -ka \end{pmatrix} \\
\quad \text{if } k=-n+2,-n+4,\ldots,n-2, \\
\begin{pmatrix} \varepsilon & \varepsilon \\ (-n+1)-b & -na \end{pmatrix} \quad \text{if } \; k=n
\end{cases}
$$

となる．この行列 A_k^n の max-plus 固有値 λ_k^n は，場所 k で場合分けすることなく，

$$
\lambda_k^n=-ka
$$

となる．任意の時刻 t における固有値 λ_k^t の総和 Φ^t を考えると

$$
\Phi^t=\sum_k \lambda_k^t=\sum_k -ka=0
$$

となり，これは $\Phi^t=0$ が max-plus ウォークの時間に関する保存量となることを意味する．さらに，仮定とした条件 (C) は Φ^t が保存量となるための必要十分条件であることも示すことができ，まとめると以下の定理を得る．

定理 2 Max-plus ウォークにおいて，状態決定行列 A_k^n の固有値 λ_k^n の k に関する総和 Φ^n が保存量となるための必要十分条件は発展行列 P,Q が条件 (C) を満たすことである．またこのとき，Φ^n の値は 0 である．

4 Max-plus ウォークの定常状態

この節では，無限個の初期状態を与えたときの max-plus ウォークを考える．無限次の行列 $\mathcal{A}$ とベクトル Ψ^n を

$$
\mathcal{A}=\begin{pmatrix}
\ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
\cdots & \mathcal{E} & P & \mathcal{E} & \cdots \\
\cdots & Q & \mathcal{E} & P & \cdots \\
\cdots & \mathcal{E} & Q & \mathcal{E} & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix},\quad
\Psi^n=\begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{-1}^n \\ \psi_0^n \\ \psi_1^n \\ \vdots \end{pmatrix}
$$

としたとき，次の発展方程式は，この max-plus ウォークの時刻 n における系全体の時間発展を記述している．

$$
\Psi^{n+1}=\mathcal{A}\otimes\Psi^n=\mathcal{A}^{\otimes n}\otimes\Psi^0.
$$

行列 P,Q が条件 (C) を満たすときの行列 $\mathcal{A}$ の max-plus 固有値と固有ベクトルに関して，以下の定理を示した．

定理 3 行列 $\mathcal{A}$ のスペクトラル $\sigma(\mathcal{A})$ は $\sigma(\mathcal{A})=\{0\}$ であり，このときの固有ベクトル $v(\mathcal{A})$ は

$$
v(\mathcal{A})=\kappa\otimes\begin{pmatrix} \vdots \\ X_{-1} \\ X_0 \\ X_1 \\ \vdots \end{pmatrix},\quad
X_k=\begin{pmatrix} -ak \\ (-k+1)a-b \end{pmatrix}
$$

となる．ここで，$\kappa\in\mathbb{R}_{max}$ は定数である．

この定理 3 で得られた固有ベクトル $v(\mathcal{A})=\boldsymbol{v}$ は固有値 0 に関する固有ベクトルであるため

$$
\mathcal{A}\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}
$$

を満たす．つまりこの $\boldsymbol{v}$ の成分である X_k を場所 k の初期状態とした max-plus ウォークは時間発展によって状態が変化しない．よって，我々はこの $\boldsymbol{v}$ を max-plus ウォークの定常状態と呼ぶ．

参考文献

[1] F. Baccelli, G. Cohen, G.L. Olsder and J.P Quadrat, Syncronization and Linearity, Wiley, New York, 1992.

[2] 今野紀雄，量子ウォーク，森北出版，2014.

電磁場の固有値移動に関する形状最適化問題と導波管への応用

村木 健太 [1], 佐竹 正義 [2], 畔上 秀幸 [1]
[1] 名古屋大学 情報学研究科，[2] 株式会社 SOKEN
e-mail : azegami@i.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

車両や携帯電話などでマイクロ波の伝送に使われる導波管は，低い周波数の信号を遮断し，高い周波数の信号を通過させるハイパスフィルタとしての特性を持っている．これまで，導波管のフィルタ性能を向上させるために，導波管内の電場に対する周波数応答問題を状態決定問題とおき，出力ポートの電力とフィルタ特性関数の積和を目的関数とした形状最適化問題を定式化して，その数値例を示した [1]．その数値例では，サンプリング周波数を 2 つしか取れなかったこともあり，フィルタ性能の向上が確認されたが，改善の余地が見られた．本研究では，導波管内の電場に対する固有値問題を状態決定問題とみなし，固有値を目的関数とおいて移動することを目的にした形状最適化問題を定式化し，その問題の解の中からフィルタ性能の優れた形状をみつけることを目指した．

2 初期領域と設計変数の許容集合

本研究では，図 1 のような既報 [1] の導波管を考える．入力境界 $\Gamma_{\mathrm{I}0}$ に電流密度 $\boldsymbol{i}_{\mathrm{R}} : \Gamma_{\mathrm{I}0} \to \mathbb{R}^3$ が与えられ，出口境界 $\Gamma_{\mathrm{O}0}$ から信号が出力される．中央の境界 $\Gamma_{\mathrm{C}0}$ はカットオフ周波数によって決定される．そこで，領域変動の変位 $\boldsymbol{\phi}$ の関数空間を $X = \left\{\boldsymbol{\phi} \in H^1\left(\mathbb{R}^3;\mathbb{R}^3\right) \;\middle|\; \boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{I}0} \cup \Gamma_{\mathrm{O}0} \cup \Gamma_{\mathrm{C}0}\right\}$ とおき，その許容集合を $\mathcal{D} = X \cap C^{1,0}\left(\mathbb{R}^3;\mathbb{R}^3\right)$ とおく．

3 状態決定問題

ϵ, μ, γ_{R} および c をそれぞれ空気の誘電率，空気の透磁率，境界条件によって決定される係数および光の速度とする．

問題 3.1 (固有値問題) $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}$ が与えられたとき，$r \in \mathbb{N}$ に対して，

$$\boldsymbol{\nabla} \times \left(\frac{1}{\mu}\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r\right) - \omega_r^2 \epsilon \boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \quad \text{in } \Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right),$$
$$\boldsymbol{\nu} \times \boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{C}0} \cup \Gamma_{\mathrm{D}}\left(\boldsymbol{\phi}\right),$$
$$\frac{1}{\mu}\boldsymbol{\nu} \times \left(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r\right) + \gamma_{\mathrm{R}} \boldsymbol{\nu} \times \left(\boldsymbol{\nu} \times \boldsymbol{e}_r\right) = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3}$$
$$\text{on } \Gamma_{\mathrm{I}0} \cup \Gamma_{\mathrm{O}0}$$

を満たす電場の固有周波数 $\omega_r \in \mathbb{R}$ と固有振幅モード $\boldsymbol{e}_r : \Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right) \to \mathbb{R}^3$ を求めよ．

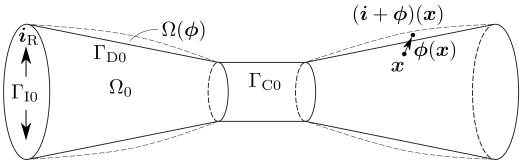


図 1. 導波管の初期領域と境界条件

問題 3.1 の弱解 $\boldsymbol{e}_r$ の関数空間を

$$\begin{aligned} U_{\mathrm{E}} = \big\{ &\boldsymbol{e} \in L^2\left(\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right);\mathbb{R}^3\right) \mid \\ &\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e} \in L^2\left(\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right);\mathbb{R}^3\right), \\ &\boldsymbol{e} \times \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^3} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{C}0} \cup \Gamma_{\mathrm{D}}\left(\boldsymbol{\phi}\right) \big\} \end{aligned} \tag{1}$$

と仮定して，さらに，許容集合を次のように仮定する．

$$\mathcal{S}_{\mathrm{E}} = U_{\mathrm{E}} \cap C^{0,1}\left(\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right);\mathbb{R}^3\right) \tag{2}$$

4 形状最適化問題

カットオフ周波数近傍にある固有周波数を指定した方向に移動するための形状最適化問題を次のように定義する．$R = \{r_1, \cdots, r_{|R|}\} \subset \mathbb{N}^{|R|}$ を指定したモード次数の集合として，w_r ($r \in R$) は ω_r^2 の移動方向 (増減) を与える実定数として，目的関数を次のようにおく．

$$f\left(\boldsymbol{\phi}, \omega_r \,|\, r \in R\right) = \sum_{r \in R} w_r \omega_r^2 \tag{3}$$

問題 4.1 (固有周波数移動) 次を満たす $\Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right)$ を求めよ．

$$\min_{(\boldsymbol{\phi}, \omega_r, \boldsymbol{e}_r \,|\, r \in R)} \left\{ f_1\left(\boldsymbol{\phi}, \omega_r \,|\, r \in R\right) \mid \text{問題 3.1} \right\}.$$

5 評価関数の形状微分

f は ω_r の関数なので，問題 3.1 を制約条件にした Lagrange 乗数法によって，f の形状微分が求められる．この問題では，自己随伴関係

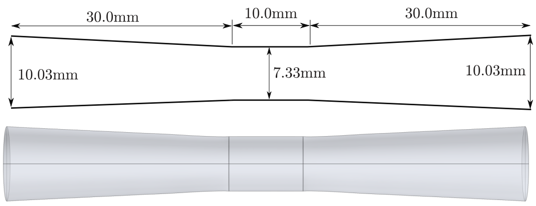


図 2. 導波管の初期形状 (上) と最終形状 (下)

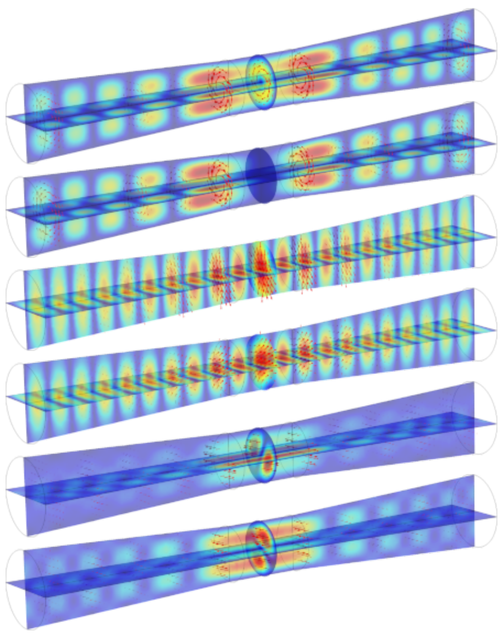


図 3. 電場の固有振幅モード $\boldsymbol{e}_r$ (上から $r = 1, 2, \ldots, 6$)

が得られ，その結果，$\tilde{f}(\phi) = f(\phi, \omega(\phi))$ とかくとき，任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{D}$ に対して

$$\tilde{f}_1'(\phi)[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{\varphi} \rangle$$

$$= \sum_{r \in R} \int_{\Omega(\phi)} \left(\boldsymbol{G}_{1\Omega r} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}} + g_{1\Omega r} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi} \right) \mathrm{d}x,$$

$$\boldsymbol{G}_{1\Omega} = \frac{2 w_{\mathrm{R}}}{\mu} (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r)(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r^{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}},$$

$$g_{1\Omega i} = -\frac{w_{\mathrm{R}}}{\mu} (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r) \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{e}_r^{\mathrm{c}}) - w_{\mathrm{R}} \omega_r^2 \epsilon \boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_r^{\mathrm{c}}$$

が得られる．ただし，$(\cdot)^{\mathrm{c}}$ は複素共役を表す．

6　数値例

数値解法は H^1 勾配法に基づく反復法を採用した．プログラムは COMSOL Multiphysics 5.2a を用いて作成された．固有周波数の入れ替わりは，MAC (modal assurance criterion) 法によって判別された．

導波管の初期形状を図 2 の上に示す．カットオフ周波数を 50 [GHz] として，その近傍 (49.2, 50.2) [GHz] に存在した 6 つのモードを昇順で $r = 1, 2, \ldots, 6$ とおいた．図 3 に電

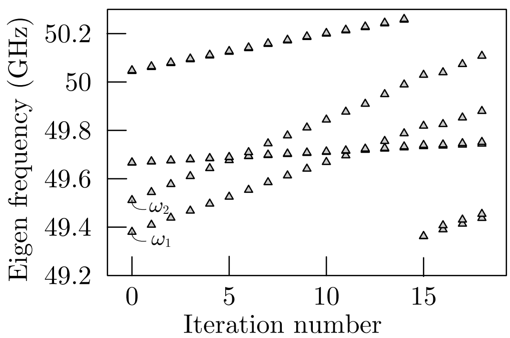


図 4. 固有周波数の推移 ($w_1 = -1$, $w_2 = -1$)

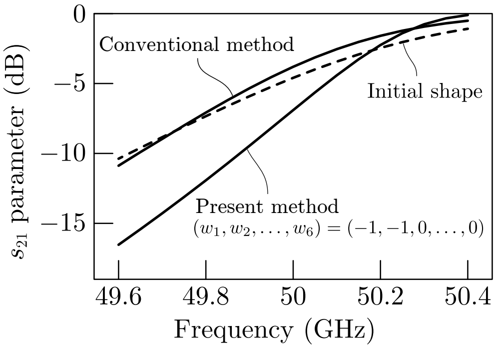


図 5. s_{21} パラメータ

場の固有振幅モード $\boldsymbol{e}_r$ を示す．本研究では，$w_1, w_2, \ldots, w_6$ に $\{-1, 0, 1\}$ のうちのどれかを与えた様々な組み合わせに対して，問題 4.1 の数値解を求めた．その結果，フィルタ性能が最も向上したのは，$(w_1, w_2, \ldots, w_6) = (-1, -1, 0, \ldots, 0)$ のときであった．

図 2 の下に，そのときの最終形状を示す．形状変更はわずかであるが，Γ_{C0} の境界 (テーパー部の付け根) が滑らかになっている．図 4 に，そのときの形状更新の回数に対する固有周波数の推移を示す．w_1 と w_2 はともに増加し，それ以外の固有周波数も増加した．図 5 に，導波管のフィルタ性能を評価するときに使われるカットオフ周波数近傍の s_{21} パラメータ (入力ポートに注入された電力に対する出力ポートを通過する電力の比) を示す．この図には，従来法 [1] の結果も示されている．この図より，今回得られた導波管の形状は，従来法で得られた形状よりも優れたフィルタ性能をもつことが確認された．カットオフ周波数の移動に関しては，Γ_{C0} の直径を修正することで規格内に収めることが可能である．

参考文献

[1] M. Satake and H. Azegami. Shape optimization of waveguide filter. *JSIAM Letters*, Vol. 8, pp. 33–36, 6 2016.

H^1 勾配法に基づく複数材料を考慮したロバストトポロジー最適化

新谷 浩平 [1], 畔上 秀幸 [1]

[1] 名古屋大学大学院

e-mail : mailad4me@gmail.com

1 緒言

トポロジー最適化は許容された設計空間の中で，コスト関数が最小となるように最適な材料の配置を決める手法である [1]．近年，Additive manufacturing の発展により複数材料を用いた複雑な造形技術が可能となったことを受け，トポロジー最適化を用いた設計手法が注目されている [2]．本研究では，物性値のばらつきを考慮した下で，複数材料の最適配置を求めるロバストトポロジー最適化問題を定義し，H^1 勾配法を用いた解法を示す．

2 複数材料の数理モデル

1 種類の材料を仮定した場合は，次のような定式化が使われてきた．$d \in \{2,3\}$ 次元の有界領域 D 上で，のちに密度と関連付けられる設計変数を $\theta \in X = H^1(D;\mathbb{R})$ とおく．密度は θ のシグモイド関数

$$\phi(\theta) = \frac{1}{2}\tanh\theta + \frac{1}{2} \tag{1}$$

によって与えられるものとする．物性値 e は SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) 法に従い，

$$e(\theta) = \rho^{\alpha}(\theta)\, e_1 \tag{2}$$

のようにおく．ただし，e_1 は材料 1 の物性値を表す．また，$\alpha > 1$ は中間的な物性値にペナルティを与えるために設けられた指数定数である．

これを m 種類の複合材料に拡張する．本稿では [2] に従い，

$$e(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{m}\left((e_i - e_{i-1})\prod_{j=1}^{i}\rho^{\alpha}(\theta_i)\right) + e_0$$

おく．ただし, e_0 は穴に対応した十分小さな物性値，e_i は材料 $i \in \{1,\dots,m\}$ の物性値を表し，$\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1,\theta_2,\dots,\theta_m\} \in X^m$ は設計変数を表す．

e_i に対して確率変数 ω_i を導入する．$\boldsymbol{\omega} = \{\omega_1,\omega_2,\dots,\omega_m\}$ の定義域を $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ とかき，$q(\boldsymbol{\omega}) : \Omega \ni \boldsymbol{\omega} \mapsto [0,1]$ を確率密度関数とする．確率変数 ω_i は互いに独立であると仮定する．このとき，物性値 e と e_i を $e(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})$ と $e_i(\omega_i)$ のように表すことにする．

3 ロバストトポロジー最適化問題

物性値 $e(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})$ が定義された設計領域 D の境界 $\Gamma_{\mathrm{D}} \subset \partial D$ で変位が拘束され，$\Gamma_{\mathrm{N}} \subset \partial D \setminus \bar{\Gamma}_{\mathrm{D}}$ ($^{-}$ は閉包) に外力 $\boldsymbol{p} \in L^{2q}\left(\Gamma_{\mathrm{N}};\mathbb{R}^d\right)$ $(q > d)$ がが与えられた線形弾性問題を考える．変位解 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) \in H^1\left(D;\mathbb{R}^d\right)$ を用いて，目的関数を

$$f_0(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) = \mu\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right) + \beta\sigma\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right) \tag{3}$$

のように定義する．ただし，平均コンプライアンスの平均値と標準偏差を

$$\begin{aligned}
c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) &= \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\,\mathrm{d}x,\\
\mu\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right) &= \int_{\Omega} c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) q(\boldsymbol{\omega})\,\mathrm{d}\omega\\
\sigma^2\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right) &= \int_{\Omega}\big\{c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\\
&\qquad - \mu\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right)\big\}^2 q(\boldsymbol{\omega})\,\mathrm{d}\omega
\end{aligned}$$

とおく．β は平均値と標準偏差のバランスを決める定数とする．

また，材料 $i \in \{1,\dots,m\}$ を規定する制約条件を以下のように定義する．

$$f_i(\boldsymbol{\theta}) = \int_D \prod_{j=1}^{i}\rho^{\alpha}(\theta_j) dx - c_i \le 0 \tag{4}$$

ここで，c_i は材料 i の質量に対する制約値を表す．

これらの定義を用いて，ロバストトポロジー最適化問題を次のように定義する．

$$\min_{\boldsymbol{\theta}\in X^m}\big\{ f_0(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) \mid f_i(\boldsymbol{\theta}) \le 0, i \in \{1,\dots,m\} \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}) \text{ は線形弾性問題の解 } \big\} \tag{5}$$

4 不確実性パラメータの評価法

ω_i が互いに独立であることを用いれば，平均値と標準偏差は次式で評価される (Univariate Dimension Reduction [3])．

$$\mu\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right) = -(m-1)\, c\left(\boldsymbol{\theta},\mu(\boldsymbol{\omega})\right)$$

$$+\sum_{i=1}^{m}\mu\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_i\left(\omega_i\right)\right)\right),$$

$$\sigma^2\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)=\sum_{i=1}^{m}\sigma^2\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_i\left(\omega_i\right)\right)\right)$$

ただし，$\mu_i\left(\omega_i\right)=\{\mu\left(\omega_1\right),\dots,\omega_i,\dots,\mu\left(\omega_m\right)\}$, $\mu\left(\boldsymbol{\omega}\right)=\{\mu\left(\omega_1\right),\dots,\mu\left(\omega_m\right)\}$ のように定義する．さらに，μ と σ^2 における Ω 上の積分を Gauss 積分で求めるときは次のようになる．

$$\mu\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)=-\left(m-1\right)c\left(\boldsymbol{\theta},\mu\left(\boldsymbol{\omega}\right)\right)+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}w_{ij}\,c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_i\left(l_{ij}\right)\right),$$

$$\sigma^2\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}w_{ij}\Big\{c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_i\left(l_{ij}\right)\right)-\sum_{k=1}^{n}w_{ik}\,c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_i\left(l_{ik}\right)\right)\Big\}^2$$

ただし，n は Gauss 積分点の数を表し，$l_{(\cdot)j}$ と $w_{(\cdot)j}$ は Gauss 積分点と重み定数を表す．上式の評価に必要な線形弾性問題の求解数は $mn+1$ 回である．Ω 上に設けた Gauss 積分点の数を小さくとることで，線形弾性問題の求解数を抑えることができる．

5　評価関数の勾配

本稿では勾配法による解法を示す．f_0 の θ_i $(i\in\{1,\dots,m\})$ の変動に対する勾配は

$$g_{0i}\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)=\frac{\partial f\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}=\frac{\partial\mu\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}+\frac{\beta}{2\sigma\left(c(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega})\right)}\frac{\partial\sigma\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}$$

のように求められる．ここで，

$$\frac{\partial\mu\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}=-\left(m-1\right)\frac{\partial c\left(\boldsymbol{\theta},\mu\left(\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}+\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}w_{jk}\,\frac{\partial\,c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_j\left(l_{jk}\right)\right)}{\partial\theta_i},$$

$$\frac{\partial\sigma\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)\right)}{\partial\theta_i}=2\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}w_{jk}\Big\{c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_j\left(l_{jk}\right)\right)-\mu\left(c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_j\left(l_{jk}\right)\right)\right)\Big\}\Big(\frac{\partial c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_j\left(l_{jk}\right)\right)}{\partial\theta_i}-\sum_{l=1}^{n}w_{jl}\frac{\partial c\left(\boldsymbol{\theta},\mu_j\left(l_{jl}\right)\right)}{\partial\theta_i}\Big),$$

$$\frac{\partial c\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)}{\partial\theta_i}=\frac{\partial e\left(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\omega}\right)}{\partial\theta_i}S\left(\boldsymbol{u}\right)\cdot E\left(\boldsymbol{u}\right)$$

である．また，$S\left(\boldsymbol{u}\right)$ と $E\left(\boldsymbol{u}\right)$ は応力とひずみである．一方，$f_i\left(\boldsymbol{\theta}\right)$ の θ_j $(j\in\{1,\dots,m\})$ の変動に対する勾配は次のようになる．

$$g_{ij}\left(\boldsymbol{\theta}\right)=\frac{\partial f_i\left(\boldsymbol{\theta}\right)}{\partial\theta_j}=\frac{\partial\rho\left(\theta_j\right)}{\partial\theta_j}\prod_{k=1}^{i}\frac{\rho\left(\theta_k\right)}{\rho\left(\theta_j\right)}$$

6　ロバストトポロジー最適化問題の解法

本研究では，θ 型 H^1 勾配法 [4, 第 8 章] により問題 (5) を解く．すなわち，f_i $(i\in\{0,\dots,m\})$ が降下する θ_j $(j\in\{1,\dots,m\})$ の更新方向 $\vartheta_{ijg}\in X$ を次式で求める．

$$a\left(\vartheta_{ijg},\psi\right)=-\left\langle g_{ij},\psi\right\rangle\quad\forall\psi\in X$$

ただし，

$$a\left(\vartheta,\psi\right)=c_a\int_D\left(\boldsymbol{\nabla}\vartheta\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi+c_D\vartheta\psi\right)\mathrm{d}x,$$

$$\left\langle\vartheta,\psi\right\rangle=\int_D\vartheta\psi\mathrm{d}x$$

とおく．ここで，c_a と c_D をステップサイズと正則性を調整する正定数である．これらの ϑ_{ijg} を用いて，θ_i を更新した後に (4) に対する KKT 条件が満たされるように Lagrange 乗数 λ_{ij} を求め，繰返し数 $k\in\{0,1,\dots\}$ に対して，次式で θ_i を更新していく．

$$\theta_{ik}=\theta_{i\,k-1}+\vartheta_{0ig}+\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ji}\vartheta_{jig}$$

参考文献

[1] Bendsøe, M. P. and Sigmund, O. “Topology Optimization: Theory, Methods and Applications,” Springer, Berlin; Tokyo, 2003.

[2] Chan, Y-C, Shintani, K. and Chen, W. “Robust topology optimization of multi-material lattice structures under material and load uncertainties.” Frontiers of Mechanical Engineering, 2019, 14(2): 141-152.

[3] Rahman S, Xu H. “A univariate dimension-reduction method for multi-dimensional integration in stochastic mechanics,” Probabilistic Engineering Mechanics, 2004, 393408.

[4] 畔上 秀幸, “形状最適化問題”, 森北出版, 2016.

制約質量下の最適質量分布と時間発展 変分不等式問題

海津 聰 [1]

e-mail：kaizusatoshi@gmail.com

1 概要

有界領域 $D(\subset \mathbf{R}^d, d=1,2,3)$ 上の密度分布 $x(\xi), \xi \in D, 0<\kappa \le \Lambda(=1), \kappa << \Lambda$, 全質量 $t_m(x)=\int_D x(\xi)d\xi \le c_0$ なる分布族を K^{c_0} とし, 体積力 $f(\xi)$ と境界応力 $g(\xi)$ 下, 分布 $x(\xi)$ がなす仕事 量 $j_0(x)$, K^{c_0} で, $j_0(x)$ の最小量を与える分布 $x(\xi)$ を $x^*=x^{c_0,*}$, $j_0(x^*)=\min\limits_{x\in K_{c_0}} j_0(x)$. 尚, この分野への導入に文献 [1, 2, 3] に多大な感謝を捧げます.

要点: I. $x^*(\xi)$ が存在する, II. x^* を求めるスキーム $_{1,2}$, III スキーム $_1$ の離散解がみたす不等式を一個, スキーム $_2$ の数値例を 2 個の提示.

2 制約質量下の最適質量分布

外力を $f\in L^2(D)=H$, $g\in H^{1/2}(\Gamma_N)$, 分布 x と (1) BVP で定まる変位 u^x を $u^x=u(x)\in V=\{v\in H^1(D)\mid v=0 \quad \Gamma_D\}$, $\partial D=\Gamma_D\cup\Gamma_N$.

$$\begin{cases} a(x,u^x,v)=\langle f,g,;v\rangle \quad \forall v\in V, \\ a(x,u,v)=\int_D x\nabla u\cdot\nabla v d\xi, \\ \langle f,g;v\rangle=\int_D fvd\xi+\int_{\Gamma_N} gvd\sigma. \end{cases} \tag{1}$$

$\{f,g\}\ne\{0,0\}$ のとき x のコスト $j_0(x)$ と最小コストを与える最適分布 x^* は,

$$\begin{cases} j_0(x)=\langle f,g;v\rangle=a(x,u^x,u^x) \\ (\ge \kappa\|u^x\|^2>0), \\ x^*\in K^{c_0}: \quad j_0(x^*)=\inf\limits_{x\in K_{c_0}} j_0(x). \end{cases} \tag{2}$$

定理 1 最適分布密度 $x^*(\xi)\in K^{c_0}$ が存在する.

定理 1 は次の根拠で成り立つ.

(i) a) $K^{c_0} \overset{\subset}{\ne} M\equiv L^\infty(D)=L^* \overset{\subset}{\ne} H\equiv L^2(D) \overset{\subset}{\ne} L\equiv L^1(D) \overset{\subset}{\ne} L^{**}\equiv M^*$.

b) $K^{c_0}: w^*(M,L)$ 閉集合, ノルム 有界.

c) $K^{c_0}: w^*(M,L)$ コンパクト.

(ii) a) $U^{c_0}=\{u^x\}_{x\in K^{c_0}}$: 有界, $\|u^x\|_V\le C^{c_0}$.

b) $a(x-y,u^x,v)=a(y,u^y-u^x,v) \quad x,y\in K^{c_0}$.

c) $x^n \overset{w^*}{\to} x^\infty$, $M \Rightarrow x^n\nabla u^{x_n} \overset{w^*}{\to} x^\infty\nabla u(x^\infty)$, V^*.

d) $j_0|_{K^{c_0}}$ の最小化列は w^* 収束部分列をもつ.

3 陽的 時間発展変分不等式 離散スキーム $_1$

最適変位 $x^*\in K^{c_0}$ の変分不等式は方向微分, $j_0'(x)=\mathcal{A}x\in M^*$ を用い, $0\le\langle\mathcal{A}x^*, y-x^*\rangle\ \forall y\in K^{c_0}$. 又, $j_0(x)$ は $\underline{w^*(M,L)}$ $\underline{連続}$ 凸関数, (**Kondrashov's Th.**). 更に, $a(x,u'(x;y-x),v)=-a(y-x,u^x,v)$, $j_0'(x;y-x)=-\langle\mathcal{A}x,y-x\rangle_{\{L^*,L\}}$, $\mathcal{A}x=-|\nabla u(x^k)|^2$, 最適解 (2) は, $\mathcal{A}x^*\ni 0$.

多角形 D に, 有限要素法を適用, 三角形分割族を $\{\mathcal{T}_h\}_{h\downarrow 0}$, $\mathcal{T}_h=\{S_h^i\}_{i=1}^{N_h}$, $h=\max_{\mathcal{T}_h}$ diameter(S_h^i). V_h は $v_h\in C(\overline{D})$, S_h^i 上一次, Γ_D 上 $v_h=0$ なる族で $V_h\subset V$, $M_h=\{x_h\in M\mid x_h|_{S_h^i}\in\mathbf{R}\}=\{\mathbf{R}^{N_h},\|\cdot\|_M\}\subset M$, $K_h^{c_0}=K^{c_0}\cap M_h$, $L_h=\{\mathbf{R}^{N_h},\|\cdot\|_L\}\subset L$, $\mathcal{A}_h=\mathcal{A}|_{M_h}: M_h\mapsto L_h$. 時間間隔を $[0,T]$, 時間分割数 $N_T, \tau_h=\frac{T}{N_T}$, (2) 対応, 陽的時間発展変分式は (3), c. f., (9.4), [4].

$$\begin{aligned} &\forall x_h^0\in\partial K_h^{c_0},\ \exists x_h^{k+1}\in\partial K_h^{c_0}, \\ &\left\langle \frac{x_h^{k+1}-x_h^k}{\tau_h}+\mathcal{A}_h x_h^k, y_h-x_h^{k+1}\right\rangle_{\{L_h,M_h\}} \\ &\ge 0 \quad \forall y_h\in K_h^{c_0} \quad k\in\{0\}\cup\{1,2,\cdots,N_T-1\}. \end{aligned} \tag{3}$$

4 スキーム $_2$

スキーム $_2$ 1) $0<\bar\delta<<1$ 固定. $0<\exists\tau_h\le\frac{C^{c_0}\tau_h}{\max_j|S_h^j|}\Leftrightarrow$, $\tau_h=\frac{T}{N_T}$, $\tau_h\le\frac{\bar\delta\max_i|S_h^i|}{C^{c_0}}$. $\forall x_h^0\in\partial K_h^{c_0}$. 以下, $k\in\{0\}\cup\mathbf{N}$.
2) $\forall x_h^k\in\partial K_h^{c_0}$, $\exists u_h(x_h^k)\in V_h$, $\mathcal{A}_h x_h^k=\{|\nabla u_h^k|^2_{S_h^{k},i}\}_i$,
3) $y_h^{k+1}=x_h^k-\tau_h\mathcal{A}_h x_h^k\in K_h^{|D|+\bar\delta}\setminus\partial K_h^{c_0}$,
4) $\exists\eta_h^{k+1}\in\mathbf{R}, x_h^{k+1}=\kappa_+\eta_h^{k+1}(y_h^{k+1}-\kappa)\in\partial K_h^{c_0}$,
5) $k+1<N_T$ のとき $k+1$ を k としステップ 2) へ, $k+1=N_T$ のとき停止.

注意 1. スキーム $_2$, ステップ 1) で, $|\nabla u_h(x_h^k)|^2_{S_h^i}|S_h^i|\le C^{c_0}$ (**2** 節 (ii) a) 参照). **注意 2.** スキーム $_1$ で, $\partial K^{c_0}\ni x_h^k\mapsto y_h^{k+1}=x_h^k-\tau_h\mathcal{A}_h x_h^k\in M\setminus K^{c_0}$. 写像, $y_h^{k+1}\mapsto x_h^{k+1}\in\partial K^{c_0}$: $K_h^{c_0}$ 上への, y_h^{k+1} の射影である (Theorem 2.3, [5]) V

注意 3. 下記の諸データはスキーム $_2$ の計算例である

c0= 0.6, rt= 300 000, period= 7500, printout=40, 40.0688 min

j0= {1.47008, 1.45356, 1.44008, 1.42882, 1.41925, 1.411, 1.40382, 1.3975, 1.3919, 1.38692, 1.38245, 1.37843, 1.37481, 1.37153, 1.36855, 1.36585, 1.36338, 1.36113, 1.35908, 1.35719, 1.35547, 1.35389, 1.35244, 1.35111, 1.34988, 1.34876, 1.34772, 1.34677, 1.34589, 1.34508, 1.34434, 1.34365, 1.34302, 1.34243, 1.34189, 1.34139, 1.34093, 1.34051, 1.34012, 1.33975}.

c0=0.3, rt=32 000, period=800, printout=40, 43.8631 min

j0= 82.94574, 2.91672, 2.89276, 2.8726, 2.85537, 2.84048, 2.82748, 2.81604, 2.8059, 2.79687, 2.78878, 2.78151, 2.77495, 2.76902, 2.76364, 2.75875, 2.75429, 2.75023, 2.74651, 2.74311, 2.73999, 2.73713, 2.73451, 2.73209, 2.72987, 2.72783, 2.72595, 2.72421, 2.72261, 2.72113, 2.71977, 2.71851, 2.71734, 2.71626, 2.71527, 2.71435, 2.71349, 2.7127, 2.71197, 2.71129

5　スキーム $_1$ の安定性

定理 2　スキーム $_1$ の安定条件

$$\exists \bar{\delta} > 0 : \bar{\delta} \geq \frac{\tau_h}{\min_j |S_h^j|} \tag{4}$$

が成立のとき, スキーム $_1$ の離散解 $\{x_h^k\}_k$ は次不等式をみたす.

$$\sum_{k=1}^{N_T} \|x_h^{k+1} - x_h^k\|_H^2 \leq T\sqrt{\bar{\delta}}|C_0|^4. \tag{5}$$

6　今後の問題点

1) スキーム $_2$:$y_h^{k+1} \mapsto x_h^{k+1}$ はスキーム $_1$:$x_h^k - \mathcal{A}_h x_h^k \mapsto x_h^{k+1}$ の射影の近似で, スキーム $_1$ からスキーム $_2$ が得られる. この近似度をさせればスキーム $_2$ の精度があがる.
2) スキーム $_2$:$y_h^{k+1} \mapsto x_h^{k+1}$ はスキーム $_1$:$x_h^k - \mathcal{A}_h x_h^k \mapsto x_h^{k+1}$ の射影の近似で, スキーム $_1$ からスキーム $_2$ が得られる. この近似度を上げればスキーム $_2$ の精度があがる.
3) スキーム $_1$ の離散解 $\{x_h^k\}_{k=1}^{N_h}$ から $w_h \in C([0,T],H)$ を, $w_h|_{[t_k,t_{k+1}]}$ が一次式, で定め, 更に階段関数, $z_h(t) = x_h^k, t_k \leq t \leq t_{k+1}$ と定めると, 上記 定理 4 から $w_h - z_h \to 0$, $L^2((0,T);H)$, $h \to 0$ が得られる. ここで $\{w_h \in C([0,T],H)\}_{h\downarrow 0}$ $(\subset C([0,T],H))$ のコンパクト性の十分条件の確認が必要 (c. f. [6]).
4) 最後に列 $\{\mathcal{A}_h x_h^k\}_k (\subset L^{**})$ の $w^*(L^{**}, M)$ コンパクト性の確認を行う.
5) 上記事項が済んだ後 w_h の極限解 が満たす変分不等式の形を確認する ([4]).
6) スキーム $_2$ の精度をあげる.

謝辞　名古屋大学の畔上秀幸先生から最適設計分野の豊かさと奥深さを教えて頂き, 大変に感謝致しております.

参考文献

[1] Bendsoe, M. P., O. Sigmund, Topology Optimization, Springer, 2003.
[2] Allaire, G, F. Jouve2, A.-M, Toader, Structural optimization using sensivity analysis and a level-set method, J. of Computational Physics, 194(2004), 363–393.
[3] 畔上秀幸, 形状最適化問題, 森北出版, 2016.
[4] Lions, J. L Quelque méthods de résolution des problèmes aux limites non linéaires, Dunos Gauthier-Vilars, 1969.
[5] Kinderlehrer, D., G. Stampacchia, An introduction to variational inequalities and their applications, Society for Industrial and Applied Mathmatics, 2000.
[6] Temam, R., Navier-Stokes Equations, AMS Chelsea Publishing, 2001.

※ 本文の出現順に並べてください.

回転物体を有する流路における形状最適化

尾関 優汰 [1], 倉橋 貴彦 [1], 片峯 英次 [2]
[1] 長岡技術科学大学 機械創造工学専攻，[2] 岐阜工業高等専門学校 機械工学科
e-mail : s185011@stn.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

回転物体を有する流体機械として，エアコンやエンジンなどが挙げられる．これら機械の高効率化を目的とした研究として，ファンの翼形状や種類について検討した研究 [1] などが行われているが，最適な流路形状についての検討は例を見ない．そこで，本研究では，回転物体を有する流れ場に対し，随伴変数法に基づく逆解析手法を導入することで，回転物体を有する流路における形状最適化についての検討を行う．なお，本研究では，回転物体を有する流れ場に対し，Shear-slip mesh update 法 [2] を用いて解析を行った．また，数値解析の実行には，FreeFem++[3] に基づいて開発したプログラムを使用した．

2 流速規定問題の定式化

流れ場 Ω の部分領域における流速を目的の流速に近づけることを目的とし，式 (1) に示す目的関数 J を定義する．

$$J = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f}\int_{\Omega} Q_i(u_i - u_{i(target)})^2 d\Omega dt \quad (1)$$

ここで，Q_i は任意の重みの定数，u_i は流速，$u_{i(target)}$ は目的流速を示す．また，t_0 は初期時間，t_f は終端時間を示す．流れ場の支配方程式として，非定常非圧縮粘性流れ場のナビエストークス方程式と連続の式を用いる．また，形状更新前と形状更新後の領域体積が同じとなるように体積制約式を導入する．随伴変数法に基づき，目的関数と支配方程式からラグランジュ関数 J^* を定義し，ラグランジュ関数の第一変分を誘導する．目的関数はラグランジュ関数の第一変分の各項が 0 と等しい場合に停留する．設計境界上の座標に対するラグランジュ関数の勾配を求める．得られた勾配 G_i に対して，力法 [4] を用いて，平滑化処理を行う．修正された勾配 G_i^* を用いて，形状の更新を行う．

3 数値解析による検証

図 1 に示す計算モデルに対し，表 1 に示す計算条件のもとに，外形形状最適化解析を行った．流速を規定する領域 region A, region B, region C を設定し，図 2 に示す目的形状を解析して得られる目的領域における流速を目的値とした．また，回転物体の角速度 $\omega = 2\pi$ とした．目的領域付近の壁面境界を設計境界とした．目的領域では任意の重み定数 Q_i を 1.0 とし，その他の領域においては 0 とした．

数値解析結果を図 3 から図 7 に示す．図 3 は初期値を 100 とした目的関数と領域の面積の収束履歴を示す．図 4 には，初期形状と目的形状，同定形状を比較した図を示す．図 5 から図 7 には，それぞれ region A, region B, region C の中心点における流速の時間履歴を示している．

解析結果より，得られた同定形状は，目的形状とは異なる形状ではあるが，目的領域における流速が目的値に近づいている形状であることが確認できる．

4 おわりに

本研究では，有限要素法と随伴変数法に基づく逆解析手法を用いて，回転物体を有する流路の外形形状最適化問題の解析を行い，流路の最適外形形状について検討した．数値解析より，目的形状とは異なった形状ではあるものの，目的関数が 0 付近に収束する同定形状が得られた．

参考文献

[1] 三菱電機 (株)，新しい風を作れ！ルームエアコン革命，日本機械学会誌，Vol. 122(2019), 38-39.
[2] Behr, M. and Tezduyar, T., The Shear-Slip Mesh Update Method, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.174, (1999), 261-274.
[3] 大塚厚二，高石武史，有限要素法で学ぶ現象と数理-FreeFem++数理思考プログラミング-，共立出版，2014.
[4] 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), 1479-1486.

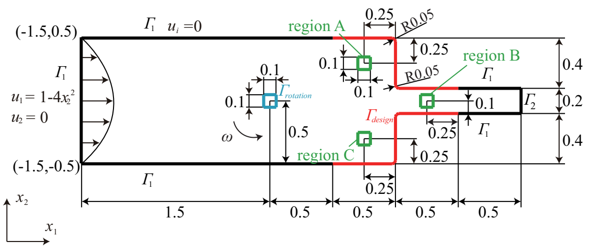


図 1. 数値解析モデルおよび境界条件

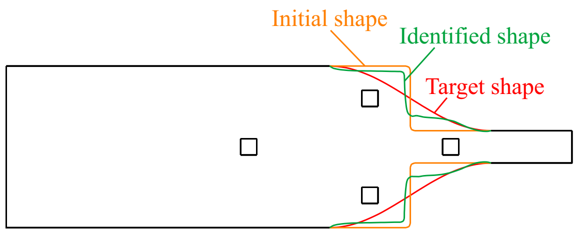


図 4. 初期形状と目的形状および同定形状の比較図

表 1. 計算条件

Non-dimensional time increment Δt	0.01
Time steps	800
Number of nodes	11552
Number of elements	22578
Reynolds number Re	200
Convergence criterion ϵ	0.001
Step length η	0.01

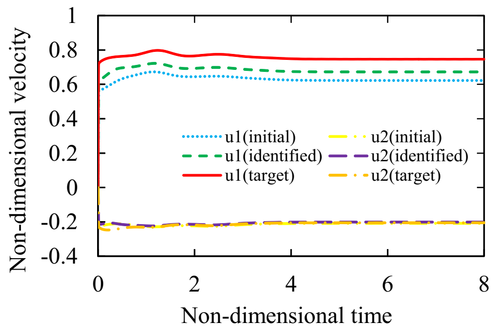


図 5. region A の中心点における流速の時間履歴

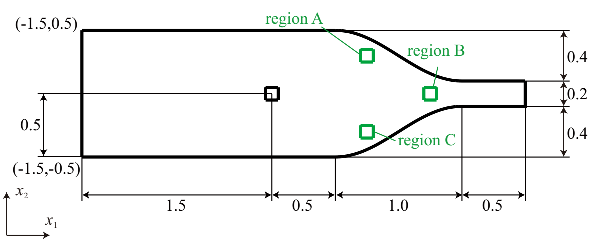


図 2. 目的形状の数値解析モデル

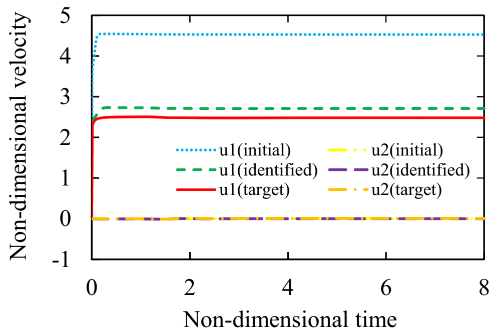


図 6. region B の中心点における流速の時間履歴

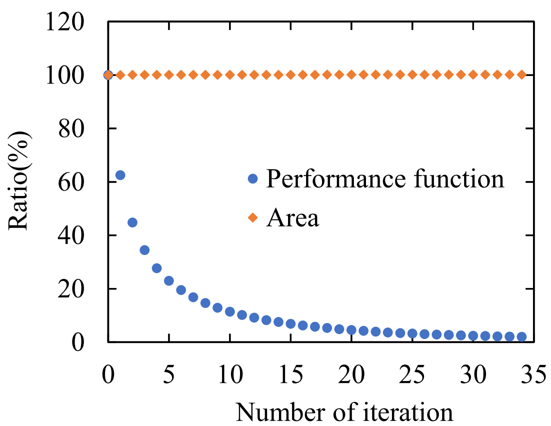


図 3. 評価関数と領域面積の収束履歴

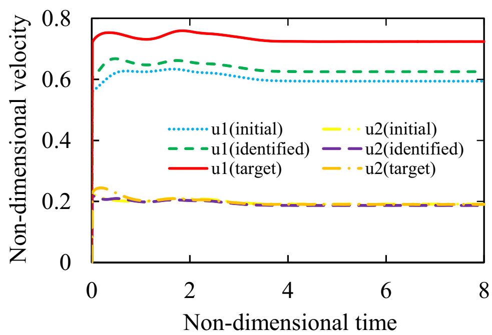


図 7. region C の中心点における流速の時間履歴

GPU による階層型行列計算法の高速化に向けた多数の小密行列ベクトル積計算の最適化

大島 聡史 [1], 山崎 市太郎 [2], 伊田 明弘 [3], 横田 理央 [4]
[1] 名古屋大学, [2] サンディア国立研究所, [3] 東京大学, [4] 東京工業大学
e-mail : ohshima@cc.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

今日の高性能計算ハードウェアは並列計算により高性能を達成しており、高い並列度のある計算を行わなければ十分な性能を発揮できない。例えば、数千の計算コアを持つ GPU で 4x4 行列の行列積を行おうとしても、計算コアを使い切ることができず高い計算性能が得られない。しかし、並列度の低い計算、小さな規模の計算でも、それを多数同時に実行する場合には全体として高い並列度が確保できるため、性能を十分に発揮させることができる可能性がある。

ベクトルや行列に関する計算を高速に行うためのツールとして、BLAS の API に対応したライブラリが広く用いられている。BLAS の API では一回の関数呼び出しにつき一回の対象計算を行うため、多数の小行列計算を行う場合には低性能な BLAS 関数を何度も実行することになる。さらに GPU を用いる場合には GPU カーネル呼び出しのオーバーヘッドも実行回数分だけ増加するため、高い性能は期待できない。そこで、COMPACT BLAS や BATCHED BLAS といった、小さな行列計算を多数行うための BLAS の研究開発が進められている。

一方、今日の高性能計算ハードウェアは、演算性能の性能向上に対してメモリ容量の向上が追いついていない。そのため大規模な密行列計算を必要とするアプリケーションの計算規模を大きくすることは容易ではない。そこで、密行列を近似して扱うことでメモリ量を削減する近似計算手法の研究が進められている。我々も階層型行列計算法 (Hierarchical matrix method, $\mathcal{H}$-matices) を中心に、近似行列のデータ構造から高速計算まで様々な研究を行っている。

2 $\mathcal{H}$-matices と小密行列ベクトル積

$\mathcal{H}$-matices は、行列を近似することにより、行列データの保持に必要なメモリ容量を削減する手法の一つである。その詳細な説明は [1] に譲るが、対象である大きな行列を、「少なくとも一辺が短い行列同士の積 (低ランク行列)」と「小さな密行列」を多数用いて近似する (図 1)。以下、近似によって生成された階層型行列を $\mathcal{H}$ 行列と呼ぶことにする。密行列を用いた計算アルゴリズムにおいて密行列を $\mathcal{H}$ 行列に置き換えれば、全体的な計算アルゴリズムを変えることなくメモリ使用量を削減することができる。我々は $\mathcal{H}$ 行列を係数行列に持つ連立一次方程式を BiCGSTAB 法で解くことを考えているため、$\mathcal{H}$ 行列とベクトルの積、すなわち $\mathcal{H}$ 行列ベクトル積 (以下 HMVM と呼ぶ) の高速化が重要である。HMVM は、多数の近似行列ベクトル積と小密行列ベクトル積によって構成されており、近似行列ベクトル積は 2 回の小密行列ベクトル積によって構成される。そのため、多数の小密行列ベクトル積を高速に行う方法が重要な意味を持つ (図 1)。

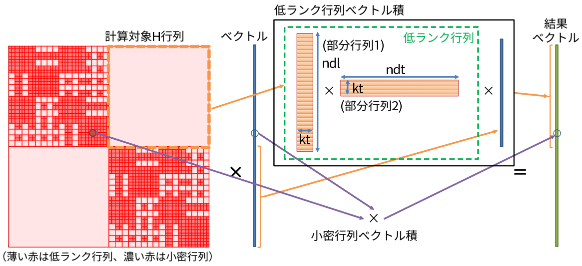


図 1. $\mathcal{H}$ 行列と $\mathcal{H}$ 行列ベクトル積

3 GPU を用いた多数の小密行列ベクトル積計算の最適化

高性能を得るために重要となるのは多数の小密行列積を GPU 上の大量の計算コアにどのように割り当てるかであるが、実際に計算する小密行列の形状は元となる $\mathcal{H}$ 行列の構造によって様々なバリエーションが考えられる。我々は、一度の GPU カーネル実行の中で GPU の一部の計算資源で各行列ベクトル積を計算するという実装法によって HMVM の高速化を達成した報告を [2] にて行い、さらにその中における行列ベクトル積のパラメタ最適化について [3] で報告予定である。

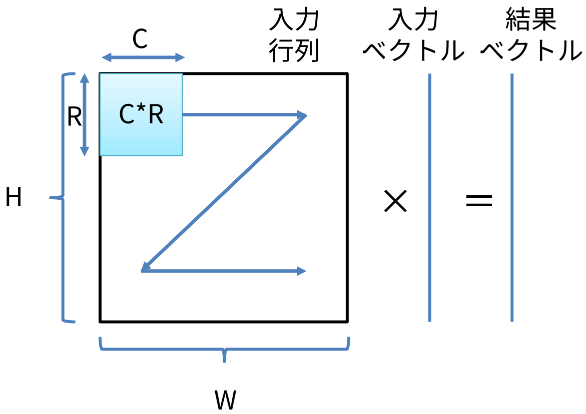


図 2. 性能パラメタ

[3] におけるパラメタ最適化の概要は以下の通りである。計算対象である小密行列の数は十分に多くあり、他より非常に大きな小密行列は存在せず、1 小密行列ベクトル積を複数 Block で計算することは考えないものとする。このとき、小密行列の幅を W、小密行列の高さを H、1Block あたりの Thread 数を 32*T、1 つの小密行列ベクトル積を C 列 R 行単位で計算するとする。この条件の下、様々な大きさの小密行列 (W と H の組み合わせ) に対して、どのような T, C, R の組み合わせが最も高い性能を得られるのかを調査した。候補とした最適化パラメタの組は合計 181 であり、現実の問題では小密行列が多数同時に計算されることを考慮して同一の小密行列を多数同時に計算して時間を比較した。(ただし、実際の問題では同一でない形状の小密行列を多数同時に計算することになる。)

Tesla P100 にて実験を行った結果、どのような行列サイズ (W,H) においても常に最大性能を得られるような T,C,R の組み合わせは見つけられなかった。多くの行列サイズにおいて高い性能を得られた例としては例えば T=2, C=8, R=4 という組み合わせがあるが W が 10 以下の場合を中心にあまり高い性能を得られないケースもあった。そこで、数個の有望なパラメタを組み合わせて用いる計算カーネルを作ることでさらに性能が向上する可能性を示した。

4 これからの展望

我々は階層型行列ベクトル積計算にあらわれる主要な演算である多数の小密行列ベクトル積の GPU 向け最適化を行ってきた。Tesla P100 にて実験を行った結果、行列の形状によって最も高い性能が得られる最適化パラメタに違いがあることや、幾つかの最適化パラメタを組み合わせた計算カーネルを作ることで性能向上が確認できた。

より高い性能を得る方法としては、例えば多数の最適化パラメタを組み合わせた計算カーネルを作ることが考えられるが、WARP divergence による性能低下が進むことや計算カーネルが大きくなることによる同時実行数の低下などが起こる可能性があり、さらなる検討が必要である。さらに HMVM 全体を高速化するには、近似行列ベクトル積において小密行列ベクトル積が二回実行されることを考慮した最適化を考える余地がある。また、様々な階層型行列フォーマットの特徴を考慮した最適な計算法の実装についても取り組みたい。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17H01749, JP18H03248, JP18K19782、大規模学際情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN, 課題番号 jh190043) の支援を受けています。本研究では九州大学情報基盤研究開発センターの研究用計算機システムの (スーパーコンピュータシステム ITO) を利用しています。

参考文献

[1] A. Ida, T. Iwashita, T. Mifune, Y. Takahashi: Parallel Hierarchical Matrices with Adaptive Cross Approximation on Symmetric Multiprocessing Clusters, Journal of Information Processing, Vol.22, No.4, `http://hdl.handle.net/2433/191244`, 2014.

[2] S. Ohshima, I. Yamazaki, A. Ida, R. Yokota: Optimization of Hierarchical matrix computation on GPU, In proceedings of Supercomputing Frontiers. SCFA 2018, Springer LNCS 10776, pp.274–292, DOI=https://doi.org/10.1007/978-3-319-69953-0_16, 2018.

[3] S. Ohshima, I. Yamazaki, A. Ida, R. Yokota: Optimization of Numerous Small Dense-Matrix–Vector Multiplications in $\mathcal{H}$-matrix Arithmetic on GPU, Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG) 2019 (MCSoC19 Special Session), 2019. (採録決定)

Tensor コアを用いた TSQR

大友 広幸 [1], 横田 理央 [2]
[1] 東京工業大学 情報理工学院 情報工学系，[2] 東京工業大学 学術国際情報センター
e-mail： ootomo.h@rio.gsic.titech.ac.jp

1 概要

$m >> n$ な $m \times n$ の行列に対する QR 分解アルゴリズムとして Tall-Skinny QR（TSQR）がある [1]．TSQR では分割した入力行列に対して QR 分解を行うことで，高速かつ数値的安定性を保ったままに QR 分解を行うことができる．本研究では NVIDIA Volta アーキテクチャ世代より搭載された混合精度行列積演算回路である Tensor コア[1]を用いて TSQR を実装し，計算精度，計算速度およびメモリ使用量の評価を行った．

2 背景

2.1 TSQR

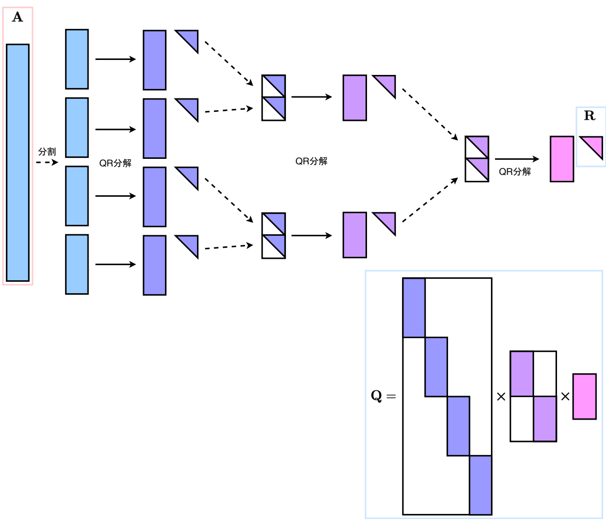


図 1. TSQR 概要図

TSQR では Tall-skinny な行列に対し行方向での分割と，それぞれに対する QR 分解と結合を繰り返し行うことで効率的に QR 分解を行うことができる．TSQR は複数の行列に対して並列に QR 分解を行う Batched QR 分解を用いることで計算資源の利用率の高い実装が可能である．

[1] `https://www.nvidia.com/en-us/data-center/tensorcore/`

2.2 Tensor コア

NVIDIA Volta アーキテクチャより混合精度行列積演算回路である Tensor コアが搭載された．Tensor コアでは行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathrm{FP16}^{4\times4}, \mathbf{C}, \mathbf{D} \in \mathrm{FP16/FP32}^{4\times4}$ に対し行列積和

$$\mathbf{D} \leftarrow \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{C}$$

を 1 Warp（32 Threads）が協調して計算する．Tensor コアではこの足しこみ処理を精度を損なうことなく行うことができ，これにより単純に FP16 で計算した場合に比べ計算精度の劣化が少ないという特長がある．

3 実装

本研究では TSQR 内でにおける QR 分解には Householder 変換を用いた QR 分解を用いた．Householder 変換を用いた QR 分解では内部で行列積計算を行う必要があり，ここで Tensor コアを用いた．本研究で実装した TSQR の実装を表 1 に示す．それぞれの実装では $m \times n$（$n \leq 16$）の行列に対する QR 分解を行う．

名称	入出力型	Tensor コア
TSQR-FP32-TC	float	使用
TSQR-FP16-TC	half	使用
TSQR-FP32	float	非使用
TSQR-FP16	half	非使用

表 1. 実装一覧

4 評価

4.1 評価の仕方について

本研究で実装した TSQR に対し $m \times 16$ の乱数行列 $\mathbf{A}$ を入力し結果 $\mathbf{Q}, \mathbf{R}$ を得た．NVIDIA cuSOLVER の QR 分解関数との比較を行った．

4.2 相対残差/直交性の評価

相対残差 $\frac{||\mathbf{QR}-\mathbf{A}||_F}{||\mathbf{A}||_F}$ を計算し図 2 に示す．相対残差においては Tensor コアを用いることによる FP16 に対する優位性は確認されなかった．

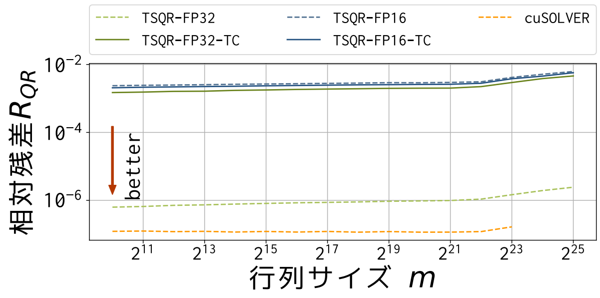


図 2. 相対残差

直交性 $\frac{\|\mathbf{I}-\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\|_F}{\sqrt{16}}$ を計算し図3に示す．直交性においては Tensor コアを用いることによる FP16 に対する優位性は確認されなかった．

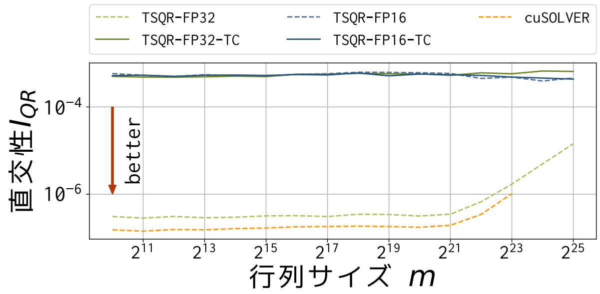


図 3. 直交性

4.3　計算時間の評価

メモリ確保を除いた計算にかかった時間を図4に示す．Tensor コアを用いた実装では，$m \geq 2^{17}$ において cuSOLVER に比べ高速に QR 分解を行えることが確認された．

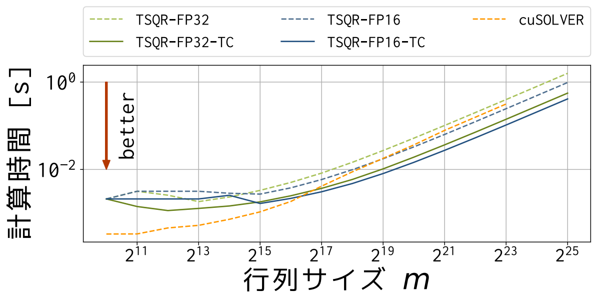


図 4. 計算時間

4.4　計算性能の評価

それぞれの実装で行われた行列積計算を計算量として計算性能を図5に示す．Tensor コアを用いた実装では最大 7.4TFlop/s の計算性能が確認された．

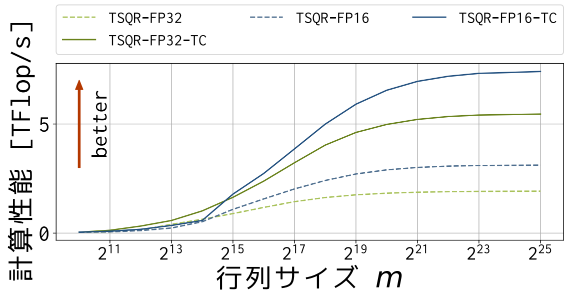


図 5. 計算能力

4.5　作業用メモリの使用量の評価

それぞれの実装で必要となる作業用メモリ量を図6に示す．TSQR-FP32-TC では cuSOLVER に比べ約 1/5 の作業用メモリで QR 分解を行うことが可能である．

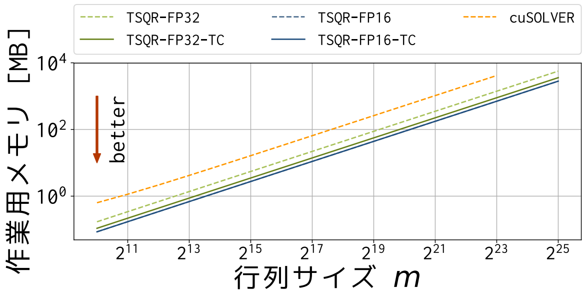


図 6. 作業用メモリ量

5　おわりに

Tensor コアを用いた TSQR では，単純な FP16 での実装に対し精度の劣化を抑えられないものの，高速かつ省メモリで計算可能なことが確認された．

謝辞　本研究は JST CREST JPMJCR19F5 の支援を受けたものである．本研究は JSPS 科研費 JP18H03248 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] James Demmel, Laura Grigori,Mark Hoemmen, and Julien Langou: *Communication-optimal parallel and sequentialQR and LU factorizations: theory and practice*, arXiv:0806.2159v3 [cs.NA] 29 Aug 2008.

修正グラムシュミット法によるBLR行列の近似QR分解

伊田 明弘[1]
[1]東京大学　情報基盤センター
e-mail: ida@cc.u-tokyo.ac.jp

1　はじめに

H-行列法に代表される低ランク構造行手法は、科学技術計算に現れる密行列に対する高速計算手法として近年注目を集めている[1]．BLR（ブロック低ランク）行列は、演算の行い易さと効率的な通信パターン構築の容易さを特徴に持つ低ランク構造行手法の一つである[2]．行列サイズをNとして，密行列の扱いには少なくとも$O(N^2)$の計算機メモリが必要であり，行列演算（行列-行列積，LU 分解，QR 分解など）には$O(N^3)$の計算コストが要求される．この密行列を BLR 行列で近似することが出来れば、必要な計算機メモリは，$O(N^{1.5})$に低減される．本稿では、BLR 行列形式に基づく近似 QR 分解手法について計算コストを考える．

2　修正グラムシュミット法による密行列の QR 分解

行列$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$は，直交行列$Q \in \mathbb{R}^{m\times n}$および上三角行列$R \in \mathbb{R}^{n\times n}$を用いて，

$$A := QR, \tag{1}$$

と分解でき，QR 分解と呼ばれる（以下，簡単のため正方行列を考える；$m = n = N$）．

QR 分解の実行のために，様々なアルゴリズムが提案されており，並列計算やキャッシュメモリの有効利用に向けては，ブロック分割テクニックを採用したものがある．今，このテクニックを用いるために，式(1)の行列A, Q, Rを次式のように$N_b \times N_b$のブロック（部分行列）に分割する．

$$X := \{X_{ij} | 1 \le i, j \le N_b\}, X \in \{A, Q, R\}. \tag{2}$$

ブロック分割QR分解アルゴリズムにも種類があるが，本稿では修正ブロックグラムシュミット(MBGS)法[3]に注目する．図 1 に MBGS 法の手順を示す．密行列を MBGS アルゴリズムで QR 分解した場合の計算コストは $O(N^3)$である．

Input：A with $N_b \times N_b$ blocks
Output：Q, R with $N_b \times N_b$ blocks such that QR=A
1: **For** $j = 1,2,\cdots,N_b$ **do**
2: 　$[Q_{*,j}, R_{j,j}] := \mathrm{TSQR}(A_{*,j})$
3: 　**For** $k = j+1, j+2, \cdots, N_b$ **do**
4: 　　$R_{j,k} := Q_{*,j}^T A_{*,k}$
5: 　　$A_{*,k} := A_{*,k} - Q_{*,j} R_{j,k}$
6: 　**End do**
7: **End do**

図 1 : MBGS アルゴリズム．N_bは行列A, Q, Rの行（または列）に含まれるブロック数を表す．行列の添え字は，行方向または列方向のブロック・インデックスである．添え字の記号*は，その方向の全ブロックを示す．2 行目の関数 TSQR($A_{*,j}$)は，tall-skinny 行列$A_{*,j}$の QR 分解を行う関数である．この分解は，$Q_{*,j}^T Q_{*,j} = I$ および $Q_{*,j}, R_{j,j} = A_{*,j}$を満たす．

3　BLR 行列に基づく QR 分解

式(2)のようにブロック分割された行列Aを考える．そのような行列において，全ての非対角ブロックを低ランク行列形式で表現し，対角ブロックを密行列で表せば，形式的に BLR 行列$\tilde{A}$を得る．即ち，

$$\tilde{A} := \{\tilde{A}_{ij} |\ 1 \le i, j \le N_b\},$$
$$\tilde{A}_{ij} = \begin{cases} \tilde{A}_{ij}^U \tilde{A}_{ij}^V (i \ne j) \\ A_{ij} \quad (i = j), \end{cases} \tag{3}$$

ここで，$\tilde{A}_{ij}^U \in \mathbb{R}^{m_i \times k_{ij}}$，$\tilde{A}_{ij}^V \in \mathbb{R}^{k_{ij} \times n_j}$であり，$k_{ij} \in \mathbb{N}$は部分行列$\tilde{A}_{ij}$のランクである．多くの部分行列について，$k_{ij} \ll \min(m_i, n_j)$であれば，BLR 行列の使用メモリ量は密行列に比べて十分に小さい．さらに，$\varepsilon \in \mathbb{R}_{>0}$に対して，全ての部分行列で$\|A_{ij} - \tilde{A}_{ij}\|_F / \|\tilde{A}_{ij}\|_F \leqq \varepsilon$と仮定すると，全体行列について$\|A - \tilde{A}\|_F / \|\tilde{A}\|_F \leqq \varepsilon$となることを証明可能である[4]．式(3)の BLR 行列表現は，任意の行列について可能であるが，ランクk_{ij}が十分小さくなるには多くの仮定が必要である．境界要素法に現れる行列や，微分

方程式を離散化して得られる疎行列の逆行列について，適当な行の入れ替えと分割を行えば，全部分行列でランクk_{ij}が十分に小さくなるような BLR 行列表現が可能であることが知られている．

図 1 に示した MBGS アルゴリズムを，式(3)の BLR 行列$\tilde{A}$に適用し，$\tilde{A} \coloneqq \tilde{Q}\tilde{R}$と QR 分解することを考える．密行列の場合と同様に，演算はブロック毎に行われる．違いは，非対角ブロックが低ランク行列で表現されていることである．ここで，分解結果行列$\tilde{Q}$と$\tilde{R}$に対して，次の２つの条件 C1 および C2 を課す：

C1: $\tilde{Q}$, $\tilde{R}$は$\tilde{A}$と同じブロック構造を有する．

C2: $\tilde{Q}_{ij}$, $\tilde{R}_{ij}$の非対角ブロックは， $\tilde{A}_{ij}$のブロックと同じランクk_{ij}である．

これらの条件下でMBGSアルゴリズムの演算を実行するためには，密部分行列どうしの積和演算に加えて，低ランク部分行列が関わる演算が必要である．条件C1, C2の下では，行列積$\tilde{Q}\tilde{R}$は$\tilde{A}$にならず，その近似になる：$\tilde{A} \approx \tilde{Q}\tilde{R}$．この原因は，低ランク行列どうしの和にある．低ランク行列の和を正確に行うと，ランクが増大する．条件“C2”を満たすためには，和の結果行列を近似して，増大したランクを減らす必要が生じる．そのように近似的に低ランク行列の和を行う方法として，文献[1]で提案されている手法“rounded addition”を採用する．この手法では，特異値分解(SVD)と tall-skinny 行列 QR 分解(TSQR)を効果的に用いたアルゴリズムを利用してランクを低減させている．

図1のMBGSアルゴリズムにおいて，2,5,7行目の行列演算を，低ランク行列演算に置き換えたものを，BLR行列に基づくQR分解アルゴリズムとして提案する．そのアルゴリズムの計算コストを表1に示す．この時，低ランク行列のサイズlは，ランクk_{ij}に比べて十分大きいと仮定し，計算コストの見積もりにランクk_{ij}は含めていない．計算コストはブロックサイズlに依存し，ブロックサイズ$l \propto \sqrt{N}$と取れば，計算コストは$O(N^2)$となる．

表 1：BLR 行列に対して MBGS アルゴリズムを用いて QR 分解した際の計算コスト．全てのブロックは正方で，一定サイズlであることを仮定した．

Function	# of calls	1time complexity	Total complexity
$\mathrm{TSQR}(A_{*,j})$	$O(N/l)$	$\tilde{O}(l^3)$	$\tilde{O}(Nl^2)$
$Q^T_{*,j}A_{*,k}$	$O((N/l)^2)$	$\tilde{O}(N+l^2)$	$\tilde{O}(N^3/l^2+N^2)$
$A_{*,k}-Q_{*,j}R_{j,k}$	$O((N/l)^2)$	$\tilde{O}(N+l^2)$	$\tilde{O}(N^3/l^2+N^2)$

4　まとめ

本稿では，低ランク構造行列手法の中で最も簡便なBLR行列表現を用いて，修正ブロックグラムシュミット(MBGS)法により近似QR分解を行う手法を検討した．密行列のQR分解を行う場合に必要なメモリ量$O(N^2)$と計算量$O(N^3)$を，検討した手法では，それぞれ$O(N^{1.5})$と$O(N^2)$へ低減させることが理論上可能である．講演では，計算時間およびQR分解の精度について，数値実験を用いて調べた結果を発表する．

謝辞　本研究の一部は，JSPS 科研 17H01749, 17K19962, 18H03248 および、大規模学際情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN, 課題番号 jh190043)の援助を受けて実施した．

参考文献

[1] Mario Bebendorf. : Hierarchical matrices. Springer.

[2] Amestoy P., et.al.: Improving multifrontal methods by means of block low-rank representations. *SIAM Journal on Scientific Computing,* 37(3) (2015), 1451-1474.

[3] Jalby W. and Philippe B.: Stability analysis and improvement of the block Gram-Schmidt algorithm. *SIAM journal on* scientific *and statistical computing* 12, 5 (1991), 1058-1073.

[4] Ida A., *et al.*: Improvement of hierarchical matrices with adaptive cross approximation for largescale simulation. *Journal of Information Processing* 23, 3 (2015), 366-372.

超並列電子状態計算に対するベイズ推定型計算性能解析

星健夫 [1], 角田皓亮 [1], 田中和幸 [1], 桑田亨成 [1], 深谷猛 [2], 山本有作 [3]
[1] 鳥取大学，[2] 北海道大学, [3] 電気通信大学
e-mail：hoshi@tottori-u.ac.jp

1 概要

自動最適化 (auto-tuning) の基盤として，ベイズ推定を用いた強スケーリング性能予測手法を構築しており，Oakforest-PACS(OFP) 全ノード計算で実践した．実行時間 T をノード数 P の関数としてモデル化 ($T = T(P)$) し，マルコフ連鎖モンテカルロ法により実行時間予測 (外挿) を行なう．自作の超並列電子状態計算ソフト ELSES を用いて，世界最大となる 3 億原子系電子状態計算に対してテストした．ベイズ推定値とよく一致する並列効率が得られ，手法の有用性が確認された．手法は汎用であるので，他ソフトにも活用できる．

2 序論

スパコン全体を使うような極限的超並列計算は，機会が非常に限られる．自動最適化実現には，小さいノード数での経験から，実行時間が予測 (外挿) する必要がある．一部著者 (星ら) は物質科学系の実応用に従事しており，本研究のニーズを与えた．実行時間モデルとしては，アムダールの関係式 ($T = c_1P^{-1} + c_2$; c_1, c_2 は定数) が有名であるが，単純であり，実応用への適用には不十分である．

我々は下記モデルを提案した [1]；

$$T(P) = \frac{c_1}{P} + c_2 + c_3 \log P + \frac{c_4}{P^2} + c_5 \frac{\log P}{\sqrt{P}}. \quad (1)$$

ただし $\{c_i\}_{i=1,5}$ は，決めるべきパラメータである．右辺 5 項は，それぞれ，理想並列項，非並列項，全体通信項,「スーパーリニア」項 (P^{-1} より速い減少項)，列（行）単位での行列通信項，からなる．論文 [1] では，京での一般化固有値問題計算に適用し，有用性を得た．

本研究では，超並列シフト型クリロフ部分空間に基づく自作電子状態計算ソフト ELSES(`http://www.elses.jp/`)[2,3] に適用する．理由は 2 点ある;(I) OFP 全体を使ったベンチマークテストを行う予定があり，事前に並列性能を予測したかった．(II) MPI 通信時間などが (タイマーコマンドで) 陽に測定できるため，性能モデル式 (1) 各項との比較が可能である．

3 OFP 全ノードでのテスト計算

テスト計算として，(i) 理想ダイヤモンド系約 3 億原子系 (302,776,320 原子)，(ii) 有機界面系 (パリレン・ペンタセン)3 億原子系 (306,744,900 原子) を対象とした．(i) は理論的ロードバランスが期待される参照系，(ii) はフレキシブル (紙のように柔らかい) 電子デバイス向け実問題系である．従来は京全体を使った最大系でも 1 億原子 [3] であり，上記系は世界最大系である．アルゴリズムは多数の小規模行列計算に帰着される上，キャッシュメモリを最大限活用する（行列をワークアレイに確保する）など，メニーコア CPU 向けチューニングを行なっている．そのため，OFP での高い並列効率が期待できる．

OFP 全ノード (8192 ノード) までを使った強スケーリング型テストを行なった．具体的には，ノード数 P=128, 256, 512, 1024, 2048, 4096, 8192 ノード計算を，それぞれ 3 回実施した．1 ノードを 1MPI プロセスに割り当て，ノード内は OpenMP 並列を行なっている．また，$P_{\rm min} = 128$ ノードでの実測値 (3 回実施の平均値) を基準として，強スケーリング型並列効率を，$\alpha(P) \equiv (T(P_{\rm min})P_{\rm min})/(T(P)P)$ で定義した．ベイズ推定においては（通常ジョブで実施できる）P=128, 256, 512, 1024, 2048 での実行時間を教師データに用い,（申請が必要なジョブである）P=4096, 8192 ノードでの実行時間を予測した．並列効率は事後分布として与えられ，その中央値を $\tilde{\alpha}_{\rm med}$，95%信頼区間の下限上限値を $\tilde{\alpha}_{\rm low}$,$\tilde{\alpha}_{\rm up}$ と書くことにする．

4 結果・考察・まとめ

最大ノード数 $P = P_{\rm max} = 8192$ での並列効率 $\alpha \equiv \alpha(P_{\rm max})$ のみを議論する．ベイズ推定値は，(i) $(\tilde{\alpha}_{\rm low}, \tilde{\alpha}_{\rm med}, \tilde{\alpha}_{\rm up}) = (0.879, 0.948, 1.004)$, (ii) $(\tilde{\alpha}_{\rm low}, \tilde{\alpha}_{\rm med}, \tilde{\alpha}_{\rm up}) = (0.775, 0.865, 0.978)$, である．一方，実測値 (3 回実施の平均値) に対しては，(i) $\alpha = 0.926$，(ii) $\alpha = 0.843$ であった．(i)(ii) 共に，高い信頼性で性能予測ができたことになる．以下では，(ii) に着目する；図 1(a) に強スケーリングベンチマーク結果を図示

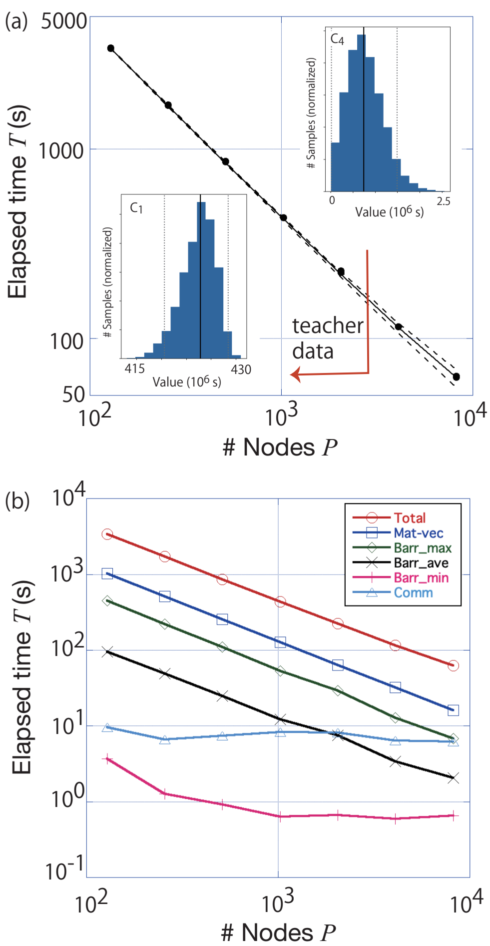


図 1. 有機半導体界面 (3 億原子) 系電子状態計算に対する，OFP 全ノード (8,192 ノード) までに渡る強スケーリングベンチマーク．(a) 実行時間の実測値 (黒丸)，および，ベイズ推定値 (実線が中央値，破線が 95%信頼区間上下端値)．内図は，パラメータ C_1, C_4 のヒストグラム．(b) 実行時間の詳細な実測値；全体 (Total)・行列ベクトル積 (Mat-vec)・バリア時間の最大値 (Barr_max)・平均値 (Barr_ave)・最小値 (Barr_min)・MPI 通信時間 (Comm)．

した．また，サンプルヒストグラム（$\propto$ 事後確率分布）の例として，パラメータ C_1(理想並列項)，C_4(super linear 項) を内図に記した．ほぼ理想的な並列性能があるため，パラメータ C_1 の事後分布は尖った (不確かさが少ない) ピークであり，C_4 の事後分布は鈍った (不確かさが大きい) ピークとなる．モデル式 (式 (1)) との比較を行うため，図 1(b) に実行時間の詳細な実測値として，全体 (Total)・疎行列ベクトル積 (Mat-vec)・バリア時間・(バリアコマンドを除く)MPI 通信時間 (Comm)，を記した．バリア時間は他ノードを待つ時間が含まれ，ノードごとに大きく異なる．そのため，最大値 (Barr_max)・平均値 (Barr_ave)・最小値 (Barr_min) を記した．バリア時間の最大値と最小値の差が，ロードインバランスからくる待ち時間 (処理が早く終わったノードが他ノードを待つ時間) となる．バリア時間の最小値は，バリアコマンド自体の実行時間となる．図 1(b) の各項に対して式 (1) が妥当なモデルとなっており，結果としてベイズ推定による性能外挿ができていることが示唆される (詳細は講演で述べる)．

強スケーリング性とは別な観点として，OFP はメニーコア CPU マシンであるため，ノード内 MPI 並列度数 $n_{\rm intra}$ も重要なパラメータとなりうる．低ノード数でのテスト計算で，ノード内 MPI 並列度数の依存性がほとんどなかった．しかし，他ソフト ([1] の EigenKernel) では，大きな依存性がある場合が得られた (詳細は講演で述べる)．

まとめとして，OFP フルノードを用いた大規模 (世界最大) 電子状態計算において，ベイズ推定に基づく性能予測（外挿）が有用であることを得た．数理手法は汎用であり，今度は，他ソフトへの適用を目指していく．そこでは，ノード内 MPI 並列自由度・問題サイズ依存性なども考慮したモデル化を行い，さらに実用的な性能予測（外挿）手法を確立し，自動最適化技術へと昇華させていきたい．

謝辞　本研究は，ポスト京プロジェクト重点課題7，および，科研費 (17H02828) の支援を受けた．OFP 計算は，学際共同利用 (筑波大) および大規模 HPC チャレンジ (JCAHPC) による．

参考文献

[1] K. Tanaka, *et al.*, EigenKernel - A middleware for parallel generalized eigenvalue solvers to attain high scalability and usability, Japan J. Indust. Appl. Math., 36, 685-698 (2019).

[2] T. Hoshi, *et al.*,, An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502 (2012).

[3] T. Hoshi, *et al.*,, Extremely scalable algorithm for 10^8-atom quantum material simulation on the full system of the K computer, Proc. ScalA'16 in SC16, pp. 33-40 (2016)

情報セキュリティへの符号理論の応用

萩原 学
千葉大学大学院理学研究院
e-mail : hagiwara@math.s.chiba-u.ac.jp

概要

情報セキュリティの諸機能を実現するツールとして符号理論（誤り訂正の理 論）が応用されることがある。本講演では、どのように符号理論が応用されるか、具体的例を挙げながら解説していく。また、講演者が注目している最近の符号理論を紹介し、今後の情報セキュリティへの応用可能性について問題提起する。

Haar-Like 直交変換による非線形画像近似

藤ノ木 健介
東海大学
e-mail : ujinoki@tokai-u.jp

概要

パラメーターを有する Rosca の球面 Haar ウェーブレット変換を 2 次元のウェーブレット変換に応用する。各パラメーターが非線形画像近似に与える影響を調査し、最適な組み合わせを計算機実験によって示す。その最適パラメーターを利用した新たな Haar-Like 直交変換も紹介する。

平行移動回転ありの画像分離問題における重みの推定方法について

守本 晃 [1], 芦野 隆一 [1], 萬代 武史 [2]
[1] 大阪教育大学，[2] 大阪電気通信大学
e-mail : morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

1 概要

複数の元画像を回転・平行移動した重み付き和を複数回観測する．観測した複数枚の観測画像から元画像を分離したい．前回までの講演で，2 枚の観測画像のペアから，元画像の枚数・相対回転角度・相対平行移動量を推定する方法を提案した．本講演では，相対重みを推定する問題に対して，ウェーブレット解析を用いた解法のアイデアを説明する．

2 問題設定

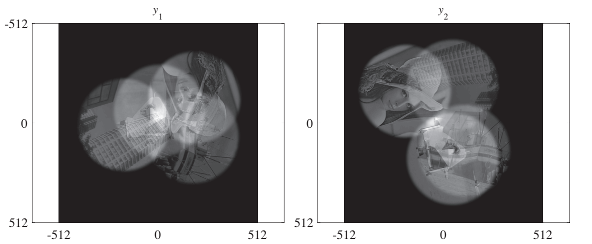


図 1. 観測画像 y_1 と y_2.

観測画像は，図 1 にあるように回転・平行移動した元画像の重み付き和である．我々 [1, 2, 3] では，観測画像 y_2 の各元画像の y_1 の対応する元画像に対する相対回転角度と相対平行移動量を推定した．そこで，y_2 を元画像 1 に対し

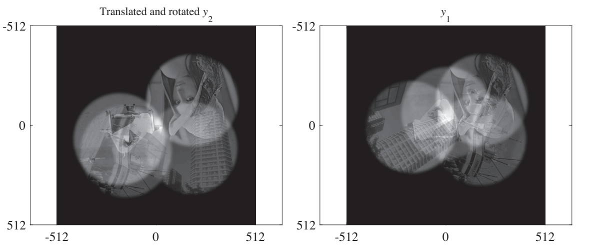


図 2. 左:回転・平行移動した観測画像 y_2. Lena 画像の位置が y_1 (右) とほぼ同じ.

て推定した相対回転角度分回転させてから，相対平行移動量だけ平行移動させると図 2 をえる．この図 2 左では，Lena 画像が右図の観測画像 y_1 とほぼ同じ角度・同じ位置に来ている．

文献 [1, 2, 3] で提案した方法では，相対角度は 0.25 [Degree] 単位，相対平行移動量はピクセル単位なので，図 2 の Lena 画像と y_1 では，平行移動量が 1 以下のずれがある．我々 [4] で提案したマルチウェーブレット変換 （MWT）は，フーリエ・マルチプライヤーによる複素数値線形エッジ抽出であり，画像の少し平行移動に対して，エッジの値が大きく変動するので，相対重みを求めるのが困難であった．そこで次節のアイデアを用いる．

3 微少平行移動と複素数値 MWT

「フーリエ変換して，フーリエ像にマスク $m(\xi)$ をかけ算して，逆フーリエ変換する」作用素をフーリエ・マルチプライヤーとよぶ．たとえば，変調 $m(\xi) = e^{-ic\cdot\xi}$ を取れば，c だけ平行移動できる．図 3 では，左のターゲットパターンを下に 0.21 ピクセル，右に 0.17 ピクセル移動させると右図になる．平行移動した画像から元の画像を引くと，図 4 のように平行移動した方向に垂直なエッジが抽出できる．

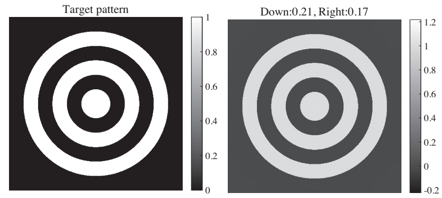


図 3. ターゲットパターンとその平行移動.

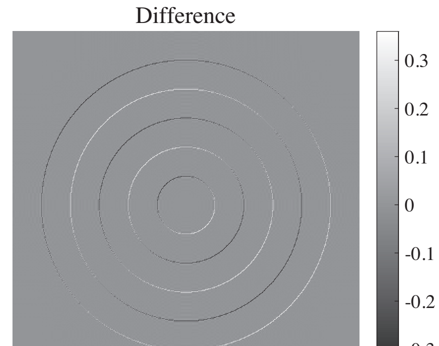


図 4. 平行移動 − ターゲットパターン.

ここでは，トーラスを動径方向に 52 等分したマスクを用いたマルチウェーブレット変換 [4] を考える．マスクの例は，図 5 にある．マスク 6/52 を用いたフーリエ・マルチプライヤーで，

ターゲットパターンを変換すると，図 6 の複素数値のエッジが抽出できる．

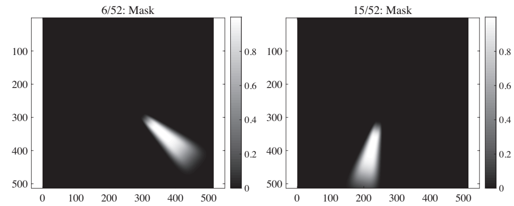


図 5. マルチウェーブレット変換のマスクの例 6/52 と 15/52. トーラス 52 分割の 6 と 15 番目.

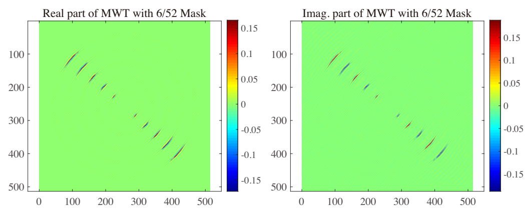


図 6. マルチウェーブレット変換 6/52. 左:実部，右:虚部.

平行移動を考えない [4] では，一つの元画像に由来するエッジの場合には，観測画像の複素数値マルチウェーブレット変換の比が実数値になることを用いて，比が実数値になる点でのみ比を記憶し，比のヒストグラムのピークから比（相対重み）を求めていた．

微少平行移動のある場合は複素数値マルチウェーブレット変換（MWT）の偏角の差が図 7，図 8 左図にあるように，エッジ上では，ほぼ一定値になる．このとき，MWT の絶対値の比は，図 7，図 8 右図から 1 である．観測画像は平行移動しただけだから，重みは同じである．

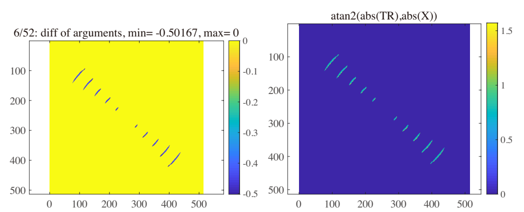


図 7. 左:ターゲットパターンの MWT の偏角 − その平行移動の MWT の偏角. 右:MWT の絶対値の比. 6/52.

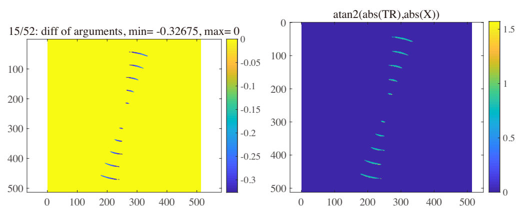


図 8. 左:ターゲットパターンの MWT の偏角 − その平行移動の MWT の偏角. 右:MWT の絶対値の比. 15/52.

このアイデアを使った，相対的重みを求めるアルゴリズムを文献 [5] で提案した．

謝辞　この研究は JSPS 科研費 JP16K05216, JP17K05298, JP17K05363 および京都大学数理解析研究所と国際共同利用・共同研究拠点の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Ashino, R., Mandai, T, Morimoto, A.: An estimation method of shift parameters in image separation problem. In: Mityushev, V.V., Ruzhansky, M.V. (eds.) Current Trends in Analysis and Its Applications: Proceedings of the 9th ISAAC Congress, Krakow 2013, pp. 467–473, Birkhäuser Mathematics (2015). doi:10.1007/978-3-319-12577-0_52

[2] Ashino, R., Mandai, T, Morimoto, A.: Detection of rotation angles on image separation problem. In: Lindahl, K., Lindstrom, T., Rodino, L.G., Toft, J., Wahlberg, P. (Eds.) Analysis, Probability, Applications, and Computation, pp. 551–558, Springer Nature Switzerland AG (2019). doi:10.1007/978-3-030-04459-6_53

[3] Ashino, R., Mandai, T, Morimoto, A.: An estimation of rotation and translation in image separation problem. In: 2018 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, pp. 113–118, IEEE (2018). doi:10.1109/ICWAPR.2018.8521267

[4] Ashino, R., Kataoka, S., Mandai, T, Morimoto, A.: Blind image source separations by wavelet analysis. Appl. Anal. 91, 617–644 (2012). doi:10.1080/00036811.2011.616497

[5] Ashino, R., Mandai, T, Morimoto, A.: An estimation of mixing coefficients in image separation problem using multiwavelet transforms. In: 2019 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, pp. 128–133, IEEE (2019).

周波数領域で自由な形状に設計されたコンパクトサポートを持つウェーブレットによるタイトウェーブレットフレームの構築

戸田　浩[1], 章　忠[1]
[1] 豊橋技術科学大学
e-mail：pxt00134@nifty.com

1　はじめに

周波数領域で，自由な形状に設計された，コンパクトサポートを持つウェーブレットを基礎にして，タイトウェーブレットフレームを構築する手法を提案する．この手法は 2 段階に分かれる．まず最初に，自由な形状に設計されたウェーブレット，これをオリジナルマザーウェーブレットと呼ぶことにするが，これを用いた，近似タイトウェーブレットフレームを構築する．そして次に，オリジナルマザーウェーブレットの形状に最小限の変更を加えた，リメーキングマザーウェーブレットにより，タイトウェーブレットフレームを構築する．

2　準備

$\mathbb{R}$ は実数全体の集合を表し，$\mathbb{Z}$ は整数全体の集合を表す．$L^1(\mathbb{R})$ は積分可能な関数の集合を表し，$L^2(\mathbb{R})$ は二乗積分可能な関数の集合を表す．関数 $f(t) \in L^2(\mathbb{R})$，$g(t) \in L^2(\mathbb{R})$ の内積を次のように定義する．

$$\langle f\,,\,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,\overline{g(t)}\,dt. \tag{1}$$

$\overline{g(t)}$ は $g(t)$ の複素共役を表す．関数 $f(t) \in L^2(\mathbb{R})$ のノルム $\|f\|$ を次のように定義する．

$$\|f\| = \sqrt{\langle f\,,\,f\rangle}. \tag{2}$$

関数 $f(t) \in L^1(\mathbb{R})$ のフーリエ変換（Fourier transform）$\hat{f}(\omega)$ を次のように定義する．

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,e^{-i\,\omega\,t}\,dt. \tag{3}$$

関数 $\hat{f}(\omega) \in L^1(\mathbb{R})$ の逆フーリエ変換（inverse Fourier transform）$f(t)$ を次のように定義する．

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{f})(t) = f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)\,e^{i\,\omega\,t}\,d\omega. \tag{4}$$

3　タイトウェーブレットフレームの構築

3.1　オリジナルマザーウェーブレット

オリジナルマザーウェーブレット $\psi^{Orig}(t) \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ は，以下の条件を満たす任意のウェーブレットとする．

$$0 < \sup_{\omega\in\mathbb{R}} \left|\hat{\psi}^{Orig}(\omega)\right| < \infty, \tag{5}$$

$$\|\psi^{Orig}\| = 1, \tag{6}$$

$$\left|\hat{\psi}^{Orig}(\omega)\right| \begin{cases} > 0\,, & \omega_0 < \omega < \omega_1, \\ = 0\,, & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{7}$$

ここに，

$$0 < \omega_0 < \omega_1 < \infty, \tag{8}$$

$$\Omega = \omega_1 - \omega_0 > 0. \tag{9}$$

オリジナルマザーウェーブレット $\hat{\psi}^{Orig}(\omega)$ のノルムは 1 に規格化され，正の周波数領域に長さ $\Omega > 0$ のコンパクトサポートを持つ．

3.2　レベル 0 におけるウェーブレットの間隔 $p > 0$ とダイレーション $a > 1$ の設定

タイトウェーブレットフレームを構築するための，2 つの重要な定数を設定する．まず，レベル 0 におけるウェーブレットの間隔 $p > 0$ を，以下の条件を満たす範囲に設定する．

$$0 < p \le \frac{2\pi}{\Omega}. \tag{10}$$

また，ダイレーション $a > 1$ は，以下の条件を満たす範囲に設定する．

$$1 < a < \frac{\omega_1}{\omega_0}. \tag{11}$$

3.3 近似タイトウェーブレットフレームの構築

ここで次のような $\omega \in \mathbb{R}$ の関数を定義する．

$$Orig(\omega) = \frac{1}{p} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \left| \hat{\psi}^{Orig}(a^{-j}\omega) \right|^2 . \quad (12)$$

すると $Orig(\omega)$ に関して次式が成立する．

$$0 < \sup_{\omega \in \mathbb{R}} |Orig(\omega)| < \infty, \quad (13)$$

$$Orig(\omega) \begin{cases} > 0 \,, & \omega > 0, \\ = 0 \,, & \omega \le 0, \end{cases} \quad (14)$$

$$Orig(a^n \omega) = Orig(\omega), \quad \omega > 0,\ n \in \mathbb{Z}. \quad (15)$$

ここで，もし $Orig(\omega)$ が領域 $\omega > 0$ において，近似的にほぼ定数と見なすことができれば，以下のようにして，近似タイトウェーブレットフレームが構築できる．まず領域 $\omega > 0$ における $Orig(\omega)$ の関数値の平均値 A^{Orig} を以下のように求める．

$$A^{Orig} = \frac{1}{a\omega_0 - \omega_0} \int_{\omega_0}^{a\omega_0} Orig(\omega)\, d\omega. \quad (16)$$

次にウェーブレットの集合 $\left\{ \psi_{j,n}^{Orig}(t) : j, n \in \mathbb{Z} \right\}$ を以下のように定義する．

$$\psi_{j,n}^{Orig}(t) = \sqrt{a^j} \psi^{Orig}\left(a^j t - pn \right) . \quad (17)$$

するとウェーブレットの集合 $\{ \psi_{j,n}^{Orig}(t), \overline{\psi_{j,n}^{Orig}(t)} : j, n \in \mathbb{Z} \}$ は近似タイトウェーブレットフレームを構築し，任意の関数 $f(t) \in L^2(\mathbb{R})$ に対し，次式が成立する（詳細は省略するが，文献 [1, 2] で紹介した定理を基に，次式の証明が可能）．

$$f(t) \approx \frac{1}{A^{Orig}} \Big\{ \sum_{j \in \mathbb{Z}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left\langle f,\ \psi_{j,n}^{Orig} \right\rangle \psi_{j,n}^{Orig}(t) + \sum_{j \in \mathbb{Z}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left\langle f,\ \overline{\psi_{j,n}^{Orig}} \right\rangle \overline{\psi_{j,n}^{Orig}(t)} \ \Big\}. \quad (18)$$

3.4 タイトウェーブレットフレームの構築

この節では，以下のように定義されるリメーキングマザーウェーブレット $\psi^{Rem}(t)$ を基礎に，タイトウェーブレットフレームを構築する．

$$\psi^{Rem}(t) = \frac{\psi^{Rem'}(t)}{\|\psi^{Rem'}\|}, \quad (19)$$

$$\hat{\psi}^{Rem'}(\omega) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{A^{Orig}}{Orig(\omega)}} \hat{\psi}^{Orig}(\omega), & \\ & \omega_0 < \omega < \omega_1, \\ 0 \,, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (20)$$

ウェーブレットの集合 $\left\{ \psi_{j,n}^{Rem}(t) : j, n \in \mathbb{Z} \right\}$ を，次のように定義する．

$$\psi_{j,n}^{Rem}(t) = \sqrt{a^j} \psi^{Rem}\left(a^j t - pn \right) . \quad (21)$$

するとウェーブレットの集合 $\{ \psi_{j,n}^{Rem}(t), \overline{\psi_{j,n}^{Rem}(t)} : j, n \in \mathbb{Z} \}$ はタイトウェーブレットフレームを構築し，任意の関数 $f(t) \in L^2(\mathbb{R})$ に対し，次式が成立する（詳細は省略するが，文献 [1, 2] で紹介した定理を基に，次式の証明が可能）．

$$f(t) = \frac{1}{A^{Rem}} \Big\{ \sum_{j \in \mathbb{Z}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left\langle f,\ \psi_{j,n}^{Rem} \right\rangle \psi_{j,n}^{Rem}(t) + \sum_{j \in \mathbb{Z}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left\langle f,\ \overline{\psi_{j,n}^{Rem}} \right\rangle \overline{\psi_{j,n}^{Rem}(t)} \ \Big\}, \quad (22)$$

ここに，

$$A^{Rem} = \frac{A^{Orig}}{\|\psi^{Rem'}\|^2}. \quad (23)$$

4 まとめ

本文では，周波数領域で，自由な形状に設計された，コンパクトサポートを持つウェーブレットを基礎にして，タイトウェーブレットフレームを構築する手法を提案した．

参考文献

[1] H. Toda, Z. Zhang, "Orthonormal basis of wavelets with customizable frequency bands," Int. J. Wavelets Multiresolut. Inf. Process, Vol.14, No.6, 1650050 (31 pages), 2016, DOI :10.1142/S0219691316500508.

[2] H. Toda, Z. Zhang, "Orthonormal wavelet basis with arbitrary real dilation factor," Int. J. Wavelets Multiresolut. Inf. Process, Vol.14, No.3, 1650010 (33 pages), 2016, DOI: 10.1142/S0219691316500107.

変分原理の周期解の分岐への応用

藤原俊朗[1], 福田宏[1], 尾崎浩司[2]
[1] 北里大学，[2] 東海大学
e-mail : fujiwara@kitasato-u.ac.jp，fukuda@kitasato-u.ac.jp, ozaki@tokai-u.jp

1 概要

変分原理によれば，作用（Lagrangianの時間積分）の停留点が運動方程式の解である．この原理を周期解の分岐に応用する．分岐において周期解の作用の2階微分 (Hessian) の固有値が重要な役割を担う．固有値の一つがゼロになることが，分岐の必要十分条件であることを示す．

2 変分原理の分岐への応用

Lagrangian $L(q_i, \dot{q}_i)$ と作用積分 $S = \int dt\, L$ が与えられたシステムを考える．変分原理は，関数空間の中で作用の停留点（$\delta S = 0$ の点）が運動方程式の解であることを保証する．

さて，停留点（運動方程式の解）が一つ与えられ，そこでの高次の変分 $\delta^2 S$，$\delta^3 S$ などを計算できるとすれば，近傍での作用の変化の様子がある程度わかるはずである．それを眺めれば，近くにある他の停留点（運動方程式の他の解）を見つけることができるだろうか．

できる，もし2つの解が「十分近く」にあれば．それは解の分岐において実現する．系がパラメーター ξ を持ち，分岐点 ξ_0 の十分近くでは元の解 q_o と分岐解 q_b が存在し，$\xi \to \xi_0$ で2つの解が一致すると想定しよう．すると，2つの解の間の距離 R は

$$R = \int dt (q_b(t) - q_o(t))^2 \to 0 \text{ for } \xi \to \xi_0$$

と，いくらでもゼロに近づけることができる．したがって ξ が ξ_0 に十分に近いところで作用の高階微分 $\delta^2 S(q_\mathrm{o})$，$\delta^3 S(q_\mathrm{o})$ などをいくつか計算すれば，分岐解 q_b を見つけ性質を予言することができるだろう．

3 仮に作用が1変数関数であったなら

分岐点付近で作用はどのような振る舞いをするか．その要点を説明するために，作用が1変数関数 $s(x)$ だったら何が起きるを述べる．真の作用と区別するために小文字の s を使う．

関数 $s(x)$ が近接した2つの停留点 x_o と $x_\mathrm{b} = x_\mathrm{o} + R$ を持つとする，$s'(x_\mathrm{o}) = s'(x_\mathrm{o} + R) = 0$．すると $R \to 0$ の極限で s の2階微分はゼロ，

$$\because\ 0 = (s'(q_\mathrm{o} + R) - s'(q_\mathrm{o}))/R \to s''(q_\mathrm{o}).$$

逆に $s'(q_\mathrm{o}) = 0$ のもとで $s(q_\mathrm{o} + x)$ の Tayler 展開を考えると，

$$s(q_\mathrm{o} + x) = s(q_\mathrm{o}) + \kappa x^2/2 + s'''(q_\mathrm{o}) x^3/3! + \dots.$$

ここで $\kappa = s''(q_\mathrm{o})$ である．停留点はこれの x 微分がゼロの点なので，停留点を求める方程式は

$$x\left(\kappa + \frac{s'''(q_\mathrm{o})}{2}x + \frac{s''''(q_\mathrm{o})}{3!}x^2 + \dots\right) = 0.$$

$x = 0$ は元の解 q_o を表し，そうでない解

$$\kappa + \frac{s'''(q_\mathrm{o})}{2}x + \frac{s''''(q_\mathrm{o})}{3!}x^2 + \dots = 0$$

のうち $\kappa \to 0$ で $x \to 0$ を満たすものが分岐解を表す．もし $s'''(q_\mathrm{o}) \neq 0$ なら，分岐解は

$$x = -\frac{2}{s'''(q_\mathrm{o})}\kappa + O(\kappa^2).$$

この場合は κ の符号にかかわらず分岐解が存在する．もし $s'''(q_\mathrm{o}) = 0$，$s''''(q_\mathrm{o}) \neq 0$ なら

$$x = \pm\sqrt{\frac{-3!\kappa}{s''''(q_\mathrm{o})}}$$

であり，この場合は $s''''(q_\mathrm{o})$ と逆符号の κ だけに分岐解が現れる．

以上みてきたように，1変数関数 $s(x)$ の2つの停留点が無限に近づけば2階微分がゼロになり，逆に2階微分がゼロになればもう一つの停留点が発生する．

4 扱う系と主定理

実際の作用は関数空間（無限次元空間）の関数だが，同様のことが言える．

扱う系は自由度 N の Lagrangian

$$L = \sum_{i=1,2,\dots N} \frac{m_i}{2}\left(\frac{dq_i}{dt}\right)^2 + V(q_1, q_2, \dots, q_N)$$

とその周期解 $q_o(t)$ である．周期を T とし，分岐も同周期のものだけを考える．作用は $S = \int_0^T dt\, L$，作用の 2 階微分 $\delta^2 S$ は $\int_0^T dt\, \delta q \mathcal{H} \delta q$ で与えられる．ここで $\mathcal{H}$ は線形作用素で

$$\mathcal{H}_{ij} = -m_i \delta_{ij} \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}$$

と定義される（δ_{ij} は Kronecker のデルタ）．

以下の 2 つの定理と補題が成立する．

定理 1 分岐点において $\mathcal{H}$ はゼロ固有値を持つ．

定理 2 逆に，$\mathcal{H}$ がゼロ固有値を持てば，その点は分岐点である．

注：保存量に対応するゼロ固有値は除く．

補題 3 $\mathcal{H}$ のゼロ固有値が g 重に縮退している時，作用 S の停留点は *Lyapunov-Schmidt reduction* された g 変数の作用 $S_{LS}(x_1, x_2, \ldots, x_g)$ の停留点として与えられる．

5 三体 8 の字解の分岐への応用

前セクションで示した理論を三体 8 の字解の分岐に応用する．

三体 8 の字解は等質量平面三体問題の解で，8 の字の形をした一つの軌道の上を 3 つの粒子が同じ時間間隔をおいて移動する解である．この解はポテンシャルを $1/(ar^a)$ for $a \neq 0$，$\log r$ for $a = 0$ として $a > -2$ で存在する．また Lennard-Jones ポテンシャル $1/r^6 - 1/r^{12}$ では周期 $T \geq T_{\min} = 14.479...$ の領域に存在する．

数値計算によって，この解には 6 種類の分岐が生じることがわかっている [1]．一方，この解の対称性から $\mathcal{H}$ の固有関数が 6 種類に分類されることが理論的にわかっている [2]．

今回報告する理論は，この 2 つの知見を結びつけるもので，数値計算で得られていた 6 種類の分岐が，$\mathcal{H}$ の固有関数の 6 種類の対称性の違いによるものであることを明らかにする．このようにして，三体 8 の字解の分岐はこの理論によって（定性的には）完全に理解される．

図 1 は Newton ポテンシャル $(a = 1)$ での三体 8 の字解付近の S_{LS} を表したものである．この解の $\mathcal{H}$ は $a = 0.9966$ 付近でゼロ固有値を持ち，この点で分岐する．このゼロ固有値は 2 重に縮退しているので，上の補題により S_{LS} は 2 変数の関数になる．図に示したように三体 8 の字解の近くに 3 つの停留点が存在する．これは Simó の H 解と呼ばれている解に対応する．

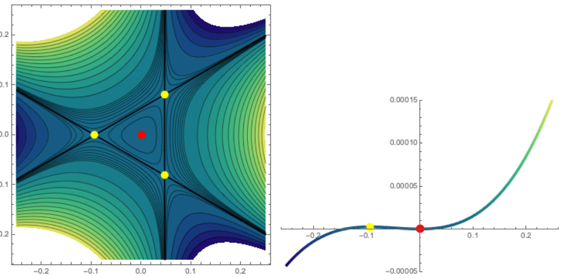


図 1. Newton ポテンシャルでの三体 8 の字解の周りの S_{LS}．左図は等高線図．中心の赤点は三体 8 の字解．3 つの黄点は Simó の H 解．右図は X 軸上の S_{LS} を表す．3 つの黄点は実質的には同じ解を表す（粒子を入れ替え，時間の原点をずらせば互いに移り変わる）．

この分岐点でのゼロ固有値に属する固有関数の対称性から，S_{LS} は極座標を用いて

$$S_{\mathrm{LS}}(r,\theta) = S_{\mathrm{LS}}(0) + \frac{\kappa}{2} r^2 - \frac{A_3}{3!} r^3 \cos(3\theta) - \frac{A_4}{4!} r^4 + O(r^5)$$

と表される．係数 A_3, A_4 は原理的には三体 8 の字解だけから計算できる．しかし A_4 を与える級数は収束が遅く実用的ではない．図 1 は H 解の情報も使って決めた係数を用いて描いた．

この分岐は $A_3 \neq 0$ なので，分岐解は分岐点の両側に（i.e. κ の正負に関わらず）存在する．

6 今後の発展

1) この理論を他の解や他の Lagrange 系へ応用する．現時点では三体 8 の字解への応用のみ．
2) 解の分岐と線形安定性の関係は不明．三体 8 の字解では線形安定性が変化しない分岐が多い．変化するしないの違いはどこからくるか．

謝辞 本研究は以下の助成を受けている．JSPS 科研費 17K05146 (福田)，17K05588 (尾崎)．

参考文献

[1] Fukuda H, Fujiwara T, and Ozaki H. Morse index and bifurcation for figure-eight choreographies of the equal mass three-body problem. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 52(18):185201, Apr 2019.

[2] Fujiwara T, Fukuda H and Ozaki H. Decomposition of the Hessian matrix for action at choreographic three-body solutions with figure-eight symmetry. arXiv:1811.09023, 2018.

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　パート2　適用例

本永 翔也 [1], 矢ヶ崎 一幸 [2]
[1,2] 京都大学 情報学研究科
e-mail : [1]mnaga@amp.i.kyoto-u.ac.jp, [2]yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1　はじめに

周期軌道やホモクリニック軌道を求めたり，それらの存在を判定したりすることは力学系における基本的な問題の一つである．また，第一積分や可換なベクトル場の存在は，力学系の可積分性と密接な関係があり，重要である．

周期軌道やホモクリニック軌道，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かどうかは一般に自明ではない．前報 [1] では，このことが成り立つための必要条件を与えた．本報告では，前報の結果を適用し，周期的な摂動を受ける剛体の運動方程式の周期軌道の存在や，座屈ばりの 3 自由度モード方程式に対する可換なベクトル場の保存について論じる．

2　前報 [1] の結果

$\mathscr{M}$ を向きづけられたパラコンパクトかつ滑らかな n 次元多様体とする．X_ε を ε についても滑らかな $\mathscr{M}$ 上のベクトル場で，$X_\varepsilon = X^0 + \varepsilon X^1 + O(\varepsilon^2)$ とし，X^0 に対し以下を仮定する．

(A1) $T > 0$ を定数として T-周期軌道 $\gamma(t)$ が存在する．

(A2) 第一積分 F が存在する．

次式で与えられる積分 $\mathscr{I}_{F,\gamma}$ を定義する．

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

このとき，次の定理が成り立つ．

定理 1 X_ε が $\gamma(t)$ の近傍で第一積分 $F_\varepsilon = F + O(\varepsilon)$ をもつならば，$\mathscr{I}_{F,\gamma} = 0$ となる．

定理 2 X_ε が $T_\varepsilon = T + O(\varepsilon)$-周期軌道 $\gamma_\varepsilon = \gamma + O(\varepsilon)$ をもつならば，$\mathscr{I}_{F,\gamma} = 0$ となる．

さらに，次を仮定する．

(A3) X^0 は可換なベクトル場 Z をもつ，すなわち，$[X^0, Z] = 0$ が成り立つ．

ここで，$[\cdot,\cdot]$ はリー括弧を表す．次式で与えられる積分 $\mathscr{J}_{F,Z,\gamma}$ を定義する．

$$\mathscr{J}_{F,Z,\gamma} := \int_0^T dF([X^1, Z])(\gamma(t))dt \tag{2}$$

次の定理が成り立つ．

定理 3 X_ε が $\gamma(t)$ の近傍で可換なベクトル場 $Z_\varepsilon = Z + O(\varepsilon)$ をもつならば，$\mathscr{J}_{F,Z,\gamma} = 0$ となる．

(A1) の代わりに，ホモクリニック軌道が存在する場合に対しても上と同様の結果が得られる [1].

3　周期的な摂動を受ける剛体

ドローンの数理モデルである，周期的な摂動を受ける剛体を考える．回転運動の運動方程式は次式で与えられる [2].

$$\begin{aligned}
\dot{\omega}_1 =& \frac{I_2 - I_3}{I_1}\omega_2\omega_3 \\
&+ \varepsilon\left(-\frac{\alpha}{I_1}v_0(t)\omega_2 + \frac{\beta_1}{I_1}v_1(t)\right), \\
\dot{\omega}_2 =& \frac{I_3 - I_1}{I_2}\omega_3\omega_1 \\
&+ \varepsilon\left(\frac{\alpha}{I_2}v_0(t)\omega_1 + \frac{\beta_2}{I_2}v_2(t)\right), \\
\dot{\omega}_3 =& \frac{I_1 - I_2}{I_3}\omega_1\omega_2 + \varepsilon\frac{\beta_3}{I_3}v_3(t),
\end{aligned} \tag{3}$$

ここで，$j = 1, 2, 3$ として，$\omega_j \in \mathbb{R}$ は慣性主軸まわりの角速度，I_j は主軸まわりの慣性モーメント，$\alpha, \beta_j \geq 0$ は定数，$v_\ell(t)$ $(\ell = 0, 1, 2, 3)$ は周期 T (> 0) の周期関数である．また，$I_1 < I_2 < I_3$ を仮定し，$\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ と表す．$\varepsilon = 0$ のとき，式 (3) は第一積分

$$F(\omega) = \frac{1}{2}(I_1\omega_1^2 + I_2\omega_2^2 + I_3\omega_3^2)$$

を有する．また，$c \in \mathbb{R}$ を任意定数，

$$p_1^\pm(c) = (\pm c, 0, 0), \quad p_2^\pm(c) = (0, \pm c, 0),$$
$$p_3^\pm(c) = (0, 0, \pm c)$$

として，点 $\omega = p_j^{\pm}(c)$ $(j = 1, 2, 3)$ は平衡点となる．状態変数 $\theta = t \mod T$ を導入し，式 (3) を自律化する．$\varepsilon = 0$ のとき，周期軌道族 $\gamma_{j,c}(t) = (p_j^{\mathrm{p}}, (c), t)$ が存在する．文献 [2] では，

$$v_\ell(t) = \begin{cases} \sin \nu t & (\ell = 0, 2, 3) \\ 0 & (\ell = 1) \end{cases}$$

のとき，十分小さな $\varepsilon > 0$ に対して周期軌道族 $\gamma_{2,c}(t)$ が保存するための必要十分条件が $\alpha = 0$ または $\beta_3 = 0$ であることが示されている．定理 1 と 2 より次の結果を得る．

命題 4 各 $j = 1, 2, 3$ に対して次が成立する．もし

$$\int_0^T v_j(t) dt \neq 0$$

かつ $\beta_j \neq 0$ ならば，任意の $c > 0$ に対して周期軌道 $\gamma_{j,c}(t)$ は保存せず，また，第一積分 $F(\omega)$ は周期軌道 $\gamma_{j,c}(t)$ の近傍において保存しない．

4 座屈ばりの 3 自由度モード方程式

減衰力の作用しない座屈ばりに対する 3 つのモードに関する方程式を考える [3].

$$\begin{aligned} &\dot{x}_1 = x_2, \quad \dot{y}_1 = y_3, \quad \dot{y}_2 = y_4, \\ &\dot{x}_2 = x_1 - (x_1^2 + \beta_1 y_1^2 + \beta_2 y_2^2) x_1, \\ &\dot{y}_3 = -\omega_1^2 y_1 - \beta_1 (x_1^2 + \beta_1 y_1^2 + \beta_2 y_2^2) y_1, \\ &\dot{y}_4 = -\omega_2^2 y_2 - \beta_2 (x_1^2 + \beta_1 y_1^2 + \beta_2 y_2^2) y_2 \end{aligned} \tag{4}$$

ここで，ω_ℓ, β_ℓ $(\ell = 1, 2)$ は正の定数で，$\omega_1 < \omega_2$ を満たす．式 (4) において原点 $(x, y) = (0, 0)$ はサドル・センター型平衡点である．$\varepsilon > 0$ を十分小さな定数として，$(x, y) = (\varepsilon\xi, \varepsilon\eta)$ とすると，

$$\begin{aligned} &\dot{\xi}_1 = \xi_2, \quad \dot{\eta}_1 = \eta_3, \quad \dot{\eta}_2 = \eta_4, \\ &\dot{\xi}_2 = \xi_1 - \varepsilon^2 (\xi_1^2 + \beta_1 \eta_1^2 + \beta_2 \eta_2^2) \xi_1, \\ &\dot{\eta}_3 = -\omega_1^2 \eta_1 - \varepsilon^2 \beta_1 (\xi_1^2 + \beta_1 \eta_1^2 + \beta_2 \eta_2^2) \eta_1, \\ &\dot{\eta}_4 = -\omega_2^2 \eta_2 - \varepsilon^2 \beta_2 (\xi_1^2 + \beta_1 \eta_1^2 + \beta_2 \eta_2^2) \eta_2 \end{aligned} \tag{5}$$

を得る．式 (5) は線形方程式が摂動を受ける形である．$\varepsilon = 0$ のとき，式 (5) は第一積分

$$\begin{aligned} &F_1(\xi, \eta) = -\xi_1^2 + \xi_2^2, \\ &F_{j+1}(\xi, \eta) = \omega_j^2 \eta_j^2 + \eta_{j+2}^2 \quad (j = 1, 2), \end{aligned}$$

周期軌道

$$\begin{aligned} &\gamma_{1,c}(t) = (0, 0, c \sin \omega_1 t, 0, c\omega_1 \cos \omega_1 t, 0), \\ &\gamma_{2,c}(t) = (0, 0, 0, c \sin \omega_2 t, 0, c\omega_2 \cos \omega_2 t) \end{aligned}$$

および可換なベクトル場

$$\begin{aligned} &Z_1 = (\xi_2, \xi_1, 0, 0, 0, 0), \ Z_2 = (\xi_1, \xi_2, 0, 0, 0, 0), \\ &Z_3 = (0, 0, \eta_1, 0, \eta_3, 0), \ Z_4 = (0, 0, 0, \eta_2, 0, \eta_4), \\ &Z_5 = (0, 0, \eta_3, 0, -\omega_1^2 \eta_1, 0), \\ &Z_6 = (0, 0, 0, \eta_4, 0, -\omega_2^2 \eta_2) \end{aligned}$$

をもつ．ここで，$c > 0$ は任意定数である．積分 (1) と (2) を計算すると，

$$\begin{aligned} &\mathscr{I}_{F_j, \gamma_\ell} = 0 \quad (j = 1, 2, 3, \ \ell = 1, 2), \\ &\mathscr{J}_{F_j, Z_k, \gamma_\ell} = \begin{cases} \frac{3}{4} \omega_1 \beta_1^2 \pi & \text{if } j = 2, k = 3, \ell = 1; \\ \frac{3}{4} \omega_2 \beta_2^2 \pi & \text{if } j = 3, k = 4, \ell = 2; \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned}$$

となる．定理 3 より次の結果を得る．

命題 5 式 (5) に対して，原点近傍で，ベクトル場 Z_3 および Z_4 は，それぞれ，(η_1, η_3) 平面および (η_2, η_4) 平面の近傍で保存しない．さらに，式 (4) に対して，原点近傍において線形項が

$$\tilde{Z}_3 = (0, 0, y_1, 0, y_3, 0), \ \tilde{Z}_4 = (0, 0, 0, y_2, 0, y_4)$$

に一致する可換なベクトル場は存在しない．

謝辞 本研究は科研費 (課題番号：17H02859, 19J22791) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] 本永翔也，矢ヶ崎 一幸，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, 日本応用数理学会 2018 年年会講演予稿集，pp. 41–42，2018.

[2] K. Yagasaki, Heteroclinic transition motions in periodic perturbations of conservative systems with an application to forced rigid body dynamics, Regul. Chaotic Dyn. 23 (2018), 438–457.

[3] K. Yagasaki, Homoclinic and heteroclinic behavior in an infinite-degree-of-freedom Hamiltonian system: Chaotic free vibrations of an undamped, buckled beam, Phys. Lett. A. 285 (2001), 55–62.

摂動を受けるレイリー・ベナール対流に現れるカオス的混合と分岐構造

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 : m-watanabe_26494@asagi.waseda.jp

1 はじめに

汚染物質の拡散予測等の観点から，流体輸送のメカニズムを解明することは非常に重要な課題である．オイラー的な視点からは安定に見える流れであっても，ラグランジュ的な視点からは，流体粒子がカオス的に輸送されることが知られており，そのようなラグランジュ的な流体輸送の解析が注目されている．さて，高温の下側境界と低温の上側境界をもつ流体層には，レイリー数 Ra が適切なとき，セル状に定常なレイリー・ベナール対流が発生する．しかし，Ra を徐々に増加させると，流速ベクトル場が水平方向に振動し始め，しだいに摂動の振幅が増加する．そこで本研究では，摂動を受ける 2 次元のレイリー・ベナール対流の近可積分モデルにおける，カオス的な流体混合を解明することを目的として，KAM トーラスの中心に現れる周期軌道の，摂動の振幅 ε をパラメータとする分岐について解析を行う．

2 摂動を受けるレイリー・ベナール対流

本研究では，摂動を受ける 2 次元のレイリー・ベナール対流の近可積分モデルを，流れ関数

$$\psi(x,z,t) = \frac{A}{k}\sin(\pi z)\sin\left[k\left\{x+\varepsilon\cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)\right\}\right] \approx \psi_0(x,z)+\varepsilon\psi_1(x,z,t)$$

をハミルトニアンとする時間依存のハミルトン系 $dx/dt = -\partial\psi/\partial z, dz/dt = \partial\psi/\partial x$ としてモデル化する [1]．このモデルでは，図 1 に示すように，摂動によりセル間で流体混合が生じる．

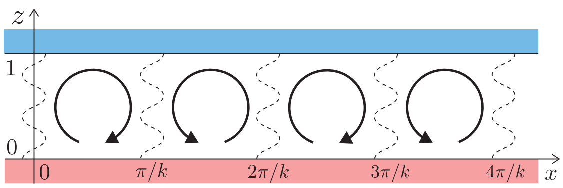


図 1. 摂動を受けるレイリー・ベナール対流

3 KAM トーラスと周期軌道

カオス的な混合を解明するために，従来ポアンカレ写像を用いた解析がなされてきた [2]．図 2 に，ポアンカレ写像を黒い小さなプロットとして示す．ここに $A = \pi, k = \pi, T = \pi^{-1}, \varepsilon = 0.1$ とする．図からも明らかなように，ポアンカレ断面の KAM トーラスで流体粒子は準周期的に輸送され，無秩序に並ぶ領域の流体粒子はカオス的に輸送されることがわかる．KAM トーラスの中心上の流体粒子は周期的に輸送され，その周りの準周期領域も，KAM トーラスの中心を回る渦となりながら，周期的に輸送されることを数値的に明らかにした．図 2 の大きなプロットは，KAM トーラスの中心に存在する流体粒子を表す．さらに，軌道の周期 T_{p} は摂動の周期 T の整数倍となることから，KAM トーラスは，図 3 に示すように，相空間ではねじれた構造をもつことがわかった．

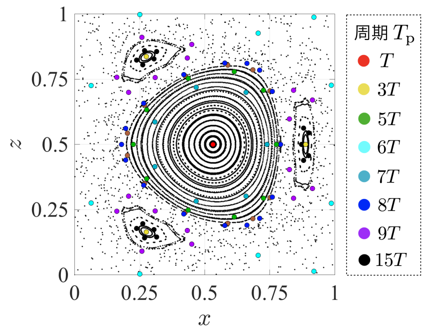


図 2. ポアンカレ写像と周期点 (1 セル)

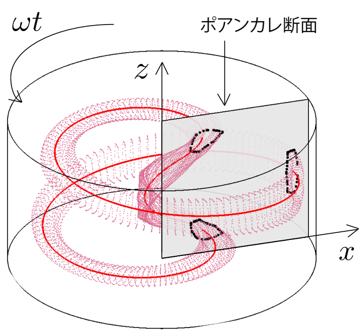


図 3. 3 周期軌道とその周りの KAM トーラス

4　周期軌道の ε パラメータ分岐

次に，摂動の振幅 ε を変化させた際の，KAM トーラスの中心に存在する周期軌道の変化に着目する．横軸に x, z，縦軸に ε をとり，図 4 に周期点の位置の変化を示す．プロットの色は軌道の周期 T_{p} を表す．図 4 より，KAM トーラスの中心に存在する周期軌道は，摂動の振幅 ε をパラメータとして，繰り返し分岐することが確認できる．また本研究では，ポアンカレ写像を用いた解析から，周期軌道が分岐するとともに，準周期領域が徐々に崩壊していくことも確認している．

分岐について，さらに詳しく解析した結果，以下の 3 種類の特徴的な分岐が生じることがわかった．1 つ目 (分岐 A) は，1 つの T_{p} 周期軌道が 2 つの T_{p} 周期軌道に変化する分岐である．2 つ目 (分岐 B) は，2 つの T_{p} 周期軌道がそれぞれ 1 つの nT_{p} 周期軌道に変化する分岐である．3 つ目 (分岐 C) は，1 つの T_{p} 周期軌道から，新たに 1 つあるいは 2 つの nT_{p} 周期軌道が加わる分岐である．ただし n は整数とする．横軸に x，縦軸に ε をとり，図 5 に，1, 3, 6, 9, 12 周期軌道の分岐の様子とその種類を示す．点線は分岐が生じる ε の値を示し，右端に記載されたアルファベットは分岐の種類を示す．また，その後ろの数字は，軌道の周期と摂動の周期の比 T_{p}/T を示す．なお，分岐により比 T_{p}/T が変化する場合は，矢印の前に分岐前の比，後に分岐後の比を示す．

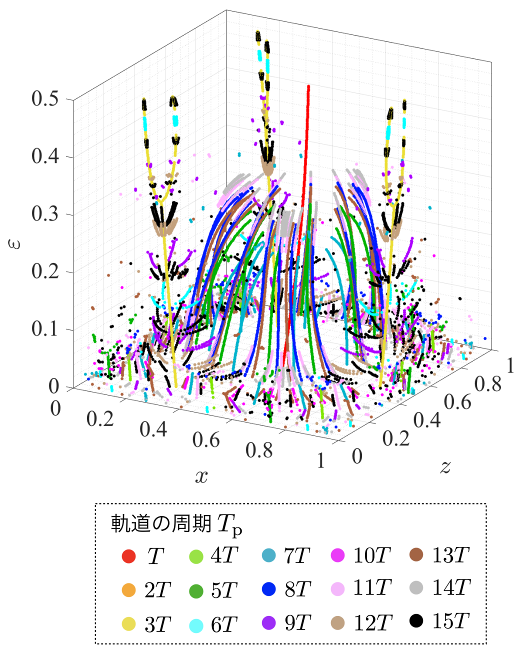


図 4. 周期軌道の ε パラメータ分岐

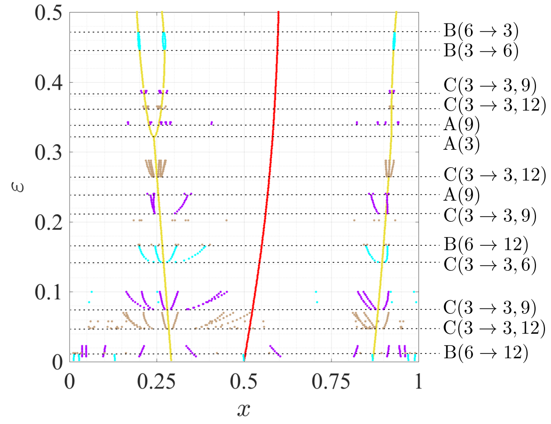


図 5. 1, 3, 6, 9, 12 周期軌道の分岐とその種類

5　まとめ

本研究の結言を以下に述べる．

- KAM トーラスの中心上の流体粒子は，周期的に輸送され，周りの準周期領域も，それらの流体粒子の周りを回る渦となりながら，周期的に輸送されることを数値的に示した．
- 周期軌道の周期 T_{p} は摂動の周期 T の整数倍となることから，KAM トーラスは，相空間ではねじれた構造をもつことがわかった．
- KAM トーラスの中心に存在する周期軌道は，摂動の振幅 ε をパラメータとして繰り返し分岐し，3 種類の特徴的な分岐が現れることを明らかにした．

謝辞　本研究は, 科研費基盤研究 (A)(17H01097), 早稲田大学特定課題研究 (SR 2019C-176, SR 2019Q-020)，早稲田大学重点領域研究機構・熱エネルギー変換工学・数学融合研究所，早稲田大学アーリー・バードプログラム，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．

参考文献

[1] T. H. Solomon and J. P. Gollub, Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection, Phys. Rev. A, Vol. 38 (1988), 6280–6286.

[2] 井上義朗, 平田雄志, 平面セル状対流におけるカオス的混合の数値解析 II –混合度と最終混合パターン–, 化学工学論文集, 26(1) (2000), 31-39.

成分濃縮ネットワークでの平衡解と素子形状最適化

渡邊 辰矢 [1], 松本 壮平 [2], 小野 直樹 [3]
[1] 茨城大理学部，[2] 産総研集積マイクロシステム研究センター，[2] 芝浦工大工学部
e-mail：shinya.watanabe.zzz@vc.ibaraki.ac.jp

1　概要

混合流体の成分を弱く分離する素子を多数結合して濃縮を高める 2 次元ネットワークで，平衡解とその安定性を調べた．また，温度差を用いて分離する素子の場合について，分離性能を高めるための形状最適化を試みた．

2　成分濃縮ネットワーク

混合ガスを入口から入れると，ガスに含まれる標的成分の濃度が，2 つの出口の一方では濃く，他方では薄くなる成分分離素子（図 1）を考える．

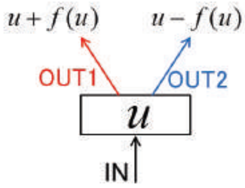


図 1．標的成分の入口濃度が u の混合ガスを入れると 2 つの出口濃度が $g_{\pm}(u) = u \pm f(u)$ となる成分分離素子．この図では入口流量 q が等分配される場合を示すが，一般に高濃度側流量が θq $(0 \le \theta \le 1)$ の場合には $g_+ = u + (1-\theta)f(u)$, $g_- = u - \theta f(u)$ とモデル化する．

単一素子では弱い分離しか生じない場合でも，多数の素子を図 2 のような 2 次元長方格子あるいはスタガード格子に組めば，継続した分離により成分が濃縮することが期待される．実際，分離関数 $f(u)$ が u の 2 次式の場合に，格子の列数と行数（段数）を十分大きくとれば，濃度変化が粘性 Burgers 方程式により記述され，これを用いて完全な分離に任意に近づけられることが示されている [1]．

微弱な濃度分離を増幅するネットワークとして，同位体分離の分野では従前よりカスケードと呼ばれる 1 次元ネットワークが用いられている [2]．この回路では隣接素子（節点）間に 2 本ずつの流路（辺）があり，流量のほとんどを循環させつつ，両端の素子から高濃度の製品流と低濃度の廃棄流が染み出るため，各素子にポンプが不可欠になる．これに対して図 2 のネットワークの流れは一方向性のため，全体の圧力勾配のみで流せ，受動素子のみでも構成できる．

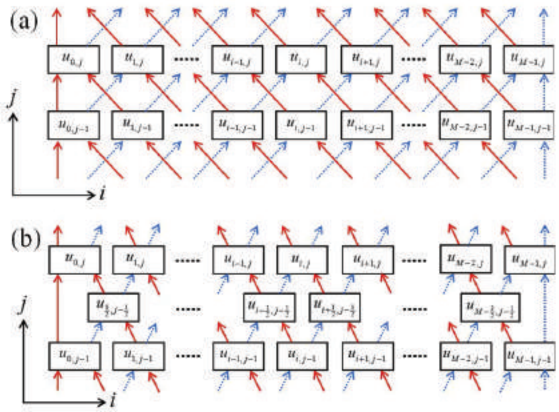


図 2．図 1 の素子を多数つなげた (a) Type I および (b) Type II のネットワーク．

3　平衡解

図 2 の 2 つのネットワークの平衡解（濃度分布 $\{u_i^*\}$ が行番号 j によらない）は Type I の場合は $g_-(u_i^*) = g_+(u_{i+1}^*)$ を，Type II では $g_+^{-1} \circ g_-(u_i^*) = g_-^{-1} \circ g_+(u_{i+1}^*)$ を満たす [3]．例えば Type I での平衡解を，3 通りの $f(u)$ の場合に求めれば図 3 のようになる．

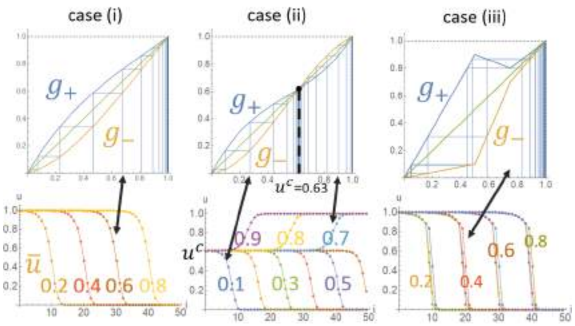


図 3．Type I での平衡解は 1 次元写像 $g_-(u_i^*) = g_+(u_{i+1}^*)$ で得られる．(i) $g_{\pm}$ が 2 次式ではないが単調な場合，(ii) f が $0 < u^c < 1$ なる u^c で符号を変える場合，(iii) g_+ が非単調の場合．

ケース (i) では f（および $g_{\pm}$）が 2 次式の場合と同じく，平衡濃度分布は $u \approx 1$ と $u \approx 0$ の 2 領域を薄い界面（濃度衝撃波）で結ぶものとなっている．ケース (ii) では $u = u^c$ を境に標的成分の濃度の高い出口が切り替わる．そのため，平衡濃度分布は u^c と $u = 0$ あるいは 1 をつなぐものとなり，ほぼ完全な分離は原理的に不可能となる．アルコールと水の分離などの

場合にこのような分離関数となる．

ケース (iii) の分離特性の場合には複数の平衡解を得るが，界面付近の形状が多少異なるだけであり，ほぼ完全な分離は実現できる．図 2 のネットワークでは各行で標的成分の総量，あるいは平均濃度 $\overline{u}$ が保存する．図 4 のようにすべての平衡解を図示すると，$\overline{u}$ に対して平衡解は一意に決まることがわかる．平衡解が線形安定な $\overline{u}$ の区間と不安定な区間が交互に現れ，不安定な区間では 2 周期解が観察された．これは Type I のネットワークの市松模様の構造によると思われる．実際 Type II で同様にすると，$\overline{u}$ によらず安定な平衡解が得られた．

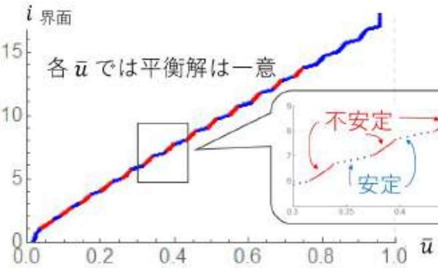


図 4. 列数 $M = 17$ の Type I ネットワークで分離関数 $g_{\pm}$ が図 3 のケース (iii) の場合の平衡解．横軸に平均濃度 $\overline{u}$，縦軸に界面の位置（線形補間して $u = 0.5$ となる列座標）をとり，線形安定な場合を青，不安定な場合を赤で示した．

4 温度差による分離素子での形状最適化

前節までのモデルの具体的な応用として図 5 のように，六角セルから成る基盤を上下に接合し，上下面に温度差を印加し，内部に混合ガスを流すことを考える．これは Type II のネットワークとなる．上半分の壁面は赤の矢印に沿ってガスが流れ易いように配置され，下半分では青い矢印に沿う流れを促す．両矢印が平行に流れる区間で上下面の温度差により，混合ガスの標的成分の濃度が上下方向に偏る（温度拡散効果）．この上下半分ずつを左右に振り分け，下流のセル 2 つへ流す．これを繰り返して，混合ガスの非接触での分離を目指す．

セルの中の実際の流れは無論，図 5 のように単純ではない．Comsol Multiphysics 4.2 を用い，流路の高さ H，幅 W，セル長 L, セル出入口の壁の迎角 θ，および流量 Q を変え，流れ，温度，濃度の連成方程式を解いた．図 6 のように，流路のアスペクト比が 1 を下回ると，上下の流れが混合し，分離性能が悪化する．

数値計算で得られた出口濃度差の，理論値に対する比を，パラメタを変えながら等高線で図

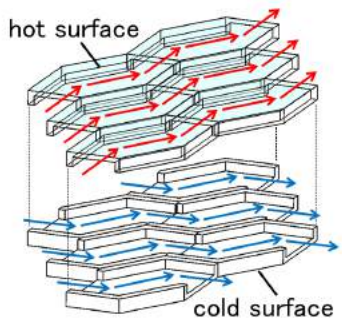


図 5. Type II ネットワークを実現する基盤構成

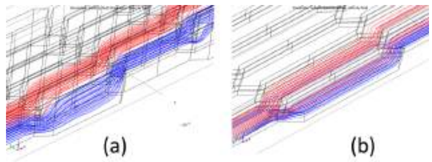


図 6. (a) $H > W$, (b) $H < W$ での流線

7 に示した．$H < W$ の領域の他，低流量（拡散支配）の領域，そして Q または H が大きい（セル長が平衡濃度を作るに不十分な）領域で比が小さくなり，これら 3 領域に挟まれて最適パラメタが観察される．

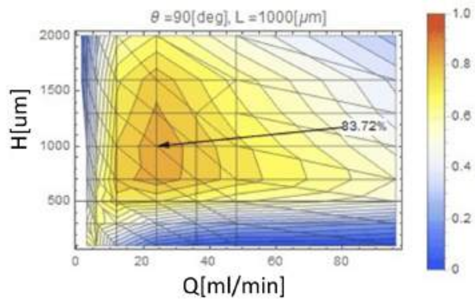


図 7. 数値計算での出口濃度差（対理論比）

謝辞　本研究成果は，科学技術振興機構事業研究成果最適展開プログラム A-STEP 機能検証フェーズの支援を受けた．

参考文献

[1] S. Watanabe, *et al*, “Burgers equation with no-flux boundary conditions and its application for complete fluid separation,” *Physica D* **331**(2016), 1–12.

[2] M. Benedict, T.H. Pigford, H.W. Levi, 同位体分離の化学工学, 日刊工業新聞社, 1984 年.

[3] S. Watanabe, *et al*, 準備中 (2019).

乱数の特殊性に見る生成器の統計検定に関する考察

奥富 秀俊 [1]
[1] 東芝情報システム株式会社
e-mail：okutomi@tjsys.co.jp

1　概要

著者は，NIST SP.800-22 における２段階評価に関して，系列に対するランダム性の評価（１段目）は一般的な統計検定として与えられているが，生成器に対する評価（２段目）は統計検定として与えられていない点を疑問に思っている [1]．またこのことが，最終的な評価に関する解釈を難しくさせていると考えている．本稿では生成器に対する統計検定について考察する．

2　統計的評価

統計的評価とは，母集団から「無作為抽出」された標本の特徴量を用いて，母集団の特徴量を推定すること（統計的推定），あるいは，母集団の特徴量に関する仮説を検証すること（統計的検定），である．以下に統計検定の典型例を示す．

例 1 (統計検定の例) 河川 A に生息するアユの体長は初夏において平均 26.2cm，標準偏差が 0.95 と報告されている（過去 20 年の統計）．本年６月に採取した 20 体の平均体長は 25.9cm であった．河川 A のアユは例年どおり成長していると考えて良いか．有意水準 5% で検定せよ．

例１における母集団は，本年河川 A に生息するアユ全体である．検定が扱う問題のその多くの場合は，母集団そのものを厳密に知ることはできない．また，標本は母集団から偏りなく無作為に抽出されたものであることが前提となる．

3　乱数生成器に対する統計検定について

例１にならって生成器の出力集合を母集団とする仮説検定について考察する．

3.1　理想的な生成器の場合

便宜のため以下に示す生成モデルを起用する．

定義 2 (理想的な n ビット乱数生成器) 理想的な n ビット乱数生成器 G_0 は，容器，ボール，攪拌器，生成ボタン，選択器，で構成される（図１を参照）．容器には計 2^n 個のボールが格納されている．ボールにはそれぞれ 0 から 2^n-1 までの整数値が順番に付番されている．生成ボタンを押すと攪拌器がボールを攪拌する．攪拌が終了すると選択器がボールを１つ選択する．選択されたボールの二進数展開値を n ビット乱数とする．ボールは容器に戻される．

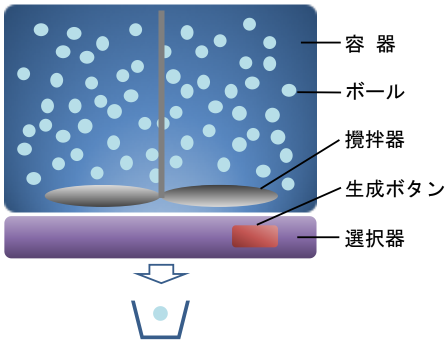


図 1. 理想的な n ビット乱数生成器モデル

攪拌器による攪拌が十分であれば，選択器は容器内のボールを偏りなく選択／抽出できる．生成器 G_0 による生成を m 回繰り返して得られた m 個のデータを標本とする[1]．これより，当標本を用いた G_0 の母集団に関する仮説検定が設定できる．仮説の立て方とその検定法には様々なものが考えられるが，本稿では任意として進める．

ここで乱数生成器の評価の特殊性が顕れる．母集団仮説とは G_0 の出力集合に関する仮説であるが，G_0 の出力集合は既知であり，母集団の特徴量の取り方に注意すれば，その分布も数学的に厳密に与えることができる．よって，仮説はもはや仮説ではなく真の情報／真の陳述である．そこで，あえて標本を用いて母集団仮説を検定することは無意味といえる．何故ならば，検定で得られた p-value がどのような値を取ったとしても，仮説の内容（この場合は真の情報）は不動だからである．

[1] これは暗に，SP.800-22 では $m=1,000$ 系列について評価することに対応させている．

それでは，この場合の母集団仮説に対する検定で得られる p-value とはどのような意味を持つだろうか…?　この場合の p-value は，標本が母集団から偏りなく抽出されたものであるか否かの「無作為抽出性」を意味すると解釈できる．

さらに続けると，標本の無作為抽出性とは，生成器 G_0 の無作為抽出性である．したがって，G_0 に関する母集団の検定は，生成器の無作為抽出性の検定（主として攪拌器と抽出器の機能を評価するもの）と同義である．かくして，生成器の無作為抽出性を評価するという意味での検定の与え方が明らかになった．

例 1 を典型例とする多くの場合において，統計検定は，母集団の厳密な数学的構造を知ることなく，かつ，標本の良し悪し（無作為抽出性）も判らないという，客観的に考えると極めて危険な状態で行われていることに改めて気がつく．一方で，生成器 G_0 の場合は，母集団の数学的構造が厳密に与えられるという特殊性から，検定は本来の目的を成さないが（仮説が仮説ではなく真の情報であるため，標本を用いて仮説（真の情報）を検証することに意味はない），標本の無作為抽出性を評価できる．

3.2　擬似乱数生成器の場合

はじめに n ビット擬似乱数生成モデルを考える．シードと系列の対応関係を無視するならば，基本構造は理想的な生成器と同じである．

定義 3 (n ビット擬似乱数生成器) n ビット擬似乱数生成器 G_1 は，その構成要素として G_0 と同等のものを有する（図 2 を参照）．ただし，容器に含まれるボールの総数は，シード長 l $(\ll n)$ に対して 2^l $(\ll 2^n)$ であり，G_0 よりも $2^n - 2^l$ 個少ない．また，ボールには 0 から $2^n - 1$ までのいずれかの整数値が重複なく付番されている．

G_1 の母集団は明らかに G_0 のものとは異なるが，G_0 のものと同等にふるまうことが要求される．したがって，G_1 の母集団から得られた標本の特徴量から，G_1 の母集団の特徴量は G_0 の母集団の特徴量とみなせるという仮説検定が設定できる（G_0 の場合は無意味であった）．

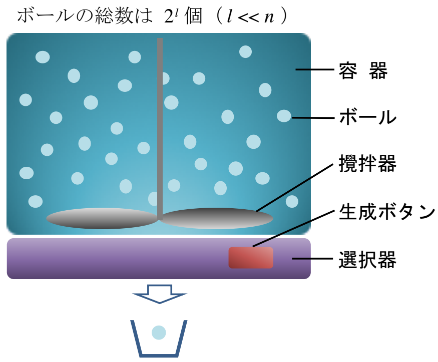


図 2. n ビット擬似乱数生成器モデル

一方で，同検定が 3.1 節で示した生成器の無作為抽出性の検定と関係するか否かが焦点となる．

命題 4 G_0 の出力集合を S_0 とする．G_1 の出力集合を S_1 とする．$\#S_0 = 2^n$，$\#S_1 = 2^l$ $(l \ll n)$，$S_1 \subset S_0$ である．G_1 の選択器が S_1 の要素を偏りなく抽出することと，G_0 の選択器が S_0 の要素のうち $S_0 \setminus S_1$（差集合）の要素を除いた残りの S_1 の要素を偏りなく抽出することは等価である．

命題 4 は，G_0 について，その選択器を「G_1 の出力集合の要素しか出力しない選択器」に置き換えたとすれば（これを G_0' とする），3.1 節で示した内容に帰着でき，G_0' に対する母集団検定は，G_0' の無作為抽出性の検定として扱えることを意味する．

4　まとめ

乱数生成器の評価において，生成器の出力集合を母集団とする場合は，母集団の数学的構造は厳密に与えられるという特殊性により，母集団から抽出された標本を用いて母集団仮説を検定することは，標本の無作為抽出性を検定することと等しいことを示した．この解釈に基づき，具体的な生成器の検定法を与えることが今後の課題である．

参考文献

[1] 奥富秀俊, “乱数生成器を評価するという観点での統計的評価法に関する考察,” SCIS2019, 2D1-2, January 2019.

[2] P.G.Hoel, “Introduction to Mathematical Statistics,” John Wiley & Sons Inc., 1971.

乱数性の劣る2値系列を用いた乱数検定の特徴付けと類似性の評価について

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

乱数検定集合 NIST SP800-22は，15種類188項目の乱数検定から構成される[1]．全ての検定項目について同じ2値系列の集合を対象とする場合，検定項目間の独立性が問題となる．これに対して，個々の検定項目において，独立な異なる2値系列を対象とする場合には，個々の検定項目の検定結果も独立となる．このため，検定項目間の類似性の評価のためには，検定項目間の独立性とは異なる類似性の概念が必要になると考えらえる．これまでに，著者等は複数の異なる対立仮説を設定し，対立仮説に従う2値系列の検定結果を特徴ベクトルとして，検定項目間の類似性を評価する方法を提案している[2]．本研究では，マルコフ過程に厳密に対応するカオス力学系の真軌道から生成した2値系列[3]を対立仮説として用い場合において，NIST SP800-22 に含まれる乱数検定項目の類似性と検出力を評価した結果を報告する．

2 乱数検定の類似性の評価と検出力

対象とする乱数検定項目をT_i $(i=1,\cdots,N)$，類似性の評価に用いる対立仮説をH_j $(j=1,\cdots,M)$とし，H_jに従うm個の2値系列に T_i を適用して得られる P 値を，$p_{T_i}(k;H_j)$ $(k=1,\cdots,m)$，その平均値を$\bar{p}_{T_i}(H_j)$とする．検定 T_i の特徴ベクトルを

$$v_{T_i}=\left(\bar{p}_{T_i}(H_1),\bar{p}_{T_i}(H_2),\cdots,\bar{p}_{T_i}(H_M)\right) \quad (1)$$

と定義する．また，比較のため個々のP値を用いた特徴ベクトルを，

$$v'_{T_i}=\left(p_{T_i}(H_1),p_{T_i}(H_2),\cdots,p_{T_i}(H_M)\right) \quad (2)$$

と定義する．ここで，

$$p_{T_i}(H_j)=\left(p_{T_i}(1;H_j),p_{T_i}(2;H_j),\cdots,p_{T_i}(m;H_j)\right) \quad (3)$$

である．特徴ベクトルを用いて，異なる二つの特徴ベクトルv_1とv_2の距離を

$$dist(v_1,v_2)=|v_1-v_2| \quad (4)$$

と定義する．この特徴ベクトル間の距離が短いほど二つの検定は類似していると考える．

次に乱数検定 T_i について，対立仮説H_jの有意水準αでの検出力を

$$Pw\left(T_i;H_j,\alpha\right)=\#\left(\left\{k\middle|p_{T_i}\left(k;H_j\right)<\alpha\right\}\right)/m \quad (5)$$

対立仮説の集合$H\subseteq\{H_1,H_2,\cdots,H_M\}$の検出力を

$$Pw(T_i;H,\alpha)=\frac{1}{\#(H)}\sum_{H_j\in H}Pw(T_i;H_j,\alpha) \quad (6)$$

と定義する．ここで$\#(\cdot)$は，集合の要素数を表す．乱数検定の集合$\Gamma\subseteq\{T_1,T_2,\cdots,T_N\}$による検出力を

$$Pw(\Gamma;H,\alpha)=1-\prod_{T_i\in\Gamma}\left(1-Pw\left(T_i;H,\frac{\alpha}{\#(\Gamma)}\right)\right) \quad (7)$$

と定義する．ここで乱数検定集合全体での有意水準をαとするために，個々の検定での有意水準にBonferroni 補正を適用している．

3 対立仮説の構成

本研究では，対立仮説として長さlの部分列を等確率 2^{-l} で生成し，特定のlビットの部分列 $s=s_1s_2\cdots s_l$ $(s_1=0,s_i\in\{0,1\},(i=2,\cdots,l))$ につづくビットの条件付き確率が，

$$\begin{aligned}P(0|s)=P(1|s')=1/2+e,\\ P(1|s)=P(0|s')=1/2-e,\end{aligned} \quad (8)$$

で与えられる系列を用いる．ここで，s' は，s の第一ビットs_1を反転させた部分列である．この2値系列は，マルコフ過程に厳密に対応するカオス力学系を用いて生成することができ[3]，この力学系 $x_{i+1}=g(x_i)$ $(x_i\in[0,1))$ は，ベルヌーイ写像を部分的に変形した区分線形写像，

$$g(x)=\begin{cases}\xi_+\cdot(x+2he\Delta) & (x\in I_1)\\ \xi_-\cdot(x-2(h+1)e\Delta) & (x\in I_2)\\ 2x & (x\in I_0\cup I_3)\\ \xi_-\cdot(x-2^{-1}-2he\Delta) & (x\in I_5)\\ \xi_+\cdot(x-2^{-1}+2(h+1)e\Delta) & (x\in I_6)\\ 2x-1 & (x\in I_4\cup I_7)\end{cases} \quad (9)$$

で与えられる．ここで，$\xi_\pm=2/(1\pm2e)$，$\Delta=2^{-l}$，$I_i=[a_i,a_{i+1})$，$a_0=0$，$a_1=h\Delta$，$a_2=$

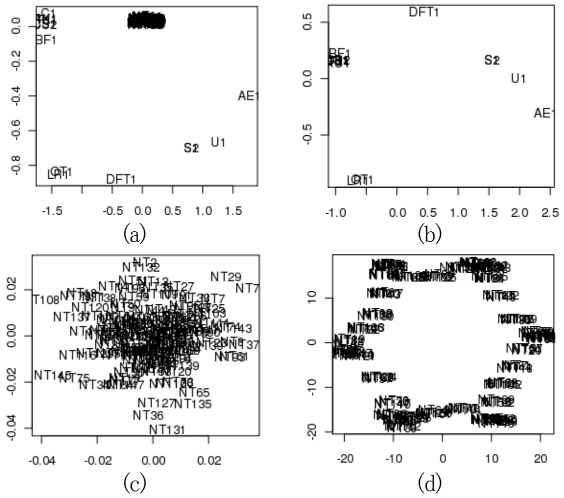


図 1. 多次元尺度構成法による検定間距離の表示例

$(h+\xi_{+}^{-1})\Delta$，$a_3=(h+1)\Delta$，$a_4=2^{-1}$，$a_5=2^{-1}+h\Delta$，$a_6=2^{-1}+(h+\xi_{-}^{-1})\Delta$，$a_7=2^{-1}+(h+1)\Delta$，$a_8=1$である．また，$h=0,1,\cdots,2^{l-1}-1$は，部分列 sを 2 進数と見なした場合の値である．本研究では 2 次の代数的数を用いた真軌道計算で厳密な軌道を計算し，対立仮説に対応する 2 値系列を生成する[3].

4　数値実験

本研究では，長さ$l=4$の8パターンの部分列s,s'について，$e=\pm4^{-1}$, $\pm8^{-1}$, $\pm16^{-1}$として，48 個の対立仮説に対応する 2 値系列を生成し，NIST SP800-22 に含まれる検定項目の類似性の評価を行った．ここで，各対立仮説に従う$m=1{,}000$個の 2 値系列に対して P 値を算出して特徴ベクトルを構成している．また，Random Excursion 系の検定は対象外としている．図 1 に多次元尺度構成法を適用して各検定間の距離関係を表示した例を示す. 図 1(a), (b), (c)は，式(1)の平均 P 値を特徴ベクトルとした場合について，(a)13 種類 162 項目，(b) Non-overlapping Template Matching (NT) 検定 を除く 12 種類 14 項目，(c) NT 検定のみ 148 項目を表示している. 図 1(a), (b)より，検定項目は，7 つのクラスターに分類できることがわかる． 図 1(d)は, NT 検定について, 式(2)を特徴ベクトルとして距離を表示したものであり，複数のクラスターから構成されている．これは，個々の検定の P 値を特徴ベクトルとする場合，検定項目間の相関構造がクラスターとして表れていると考えられる．平均P 値を用いる場合は， 1 つのクラスターとして分類されている (図 1(c)).

表 1. NIST SP800-22 に含まれる乱数検定の検出力

No.	検定名称 (略称)	部分列長 l		
		4	7	10
1	Frequency(F)	1.7%	1.1%	1.0%
2	BlockFrequency(BF)	8.0%	1.5%	1.0%
3	CumulativeSums(CS)	2.2%	1.0%	0.8%
4	Runs(RU)	1.3%	1.2%	0.9%
5	LongestRun(LR)	13.2%	13.4%	13.4%
6	Rank(RK)	0.9%	0.9%	0.9%
7	DFT (DFT)	56.8%	1.2%	1.1%
8	NonOverlappingTemplate(NT)	100%	99.0%	1.0%
9	OverlappingTemplate(OT)	13.4%	13.7%	13.4%
10	Universal(U)	100%	10.6%	1.5%
11	ApproximateEntropy(AE)	100%	100%	100%
14	Serial(S)	100%	85.7%	35.5%
15	LinearComplexity(LC)	1.0%	1.1%	1.1%

表 1 に$l=4$, 7, 10，$e=4^{-1}$, $\alpha=0.01$の場合の検出力を示す．複数の検定項目からなる検定については，式(7)を用いて検定全体としての検出力を算出している．$l=7,10$ についても，8パターンの部分列を指定して対立仮説に対応する 2 値系列を生成している．結果として {AE, NT, S, U}の 4 検定については高い検出力が得られた. {F, BF, RU, RK, LC}については，対立仮説を殆ど検出できなかった．これは，対象とした対立仮説では, 長さlまでの部分列の生成確率は2^{-l}であり，この範囲では理想的な乱数との差異を検出するのが難しいためと考えられる．

5　まとめ

本研究では，対立仮説の検定結果を用いて乱数検定の類似性および検出力を評価する方法を提案し，NIST SP800-22 に適用した結果を報告した．乱数検定の特徴づけに適した対立仮説の集合の構成が課題である．

謝辞　本研究は，JSPS 科研費 17K00355 および 16KK0005 の助成を受けて実施された. 本研究は, 九州大学情報基盤センター研究用計算機システムを利用した.

参考文献

[1] NIST SP800-22 Revision 1a, 2010.
[2] 山口明宏, 斉藤朝輝, “カオス真軌道から生成した相関系列を用いた乱数検定の特徴付け,” NOLTA ソサイエティ大会, 2018.
[3] 山口明宏, 斉藤朝輝, “乱数検定の独立性解析に向けた区分線形写像のカオス真軌道によるマルコフ過程の構成,” 日本応用数理学会 2017 年度年会, 2017.

NIST の二重検定におけるサンプルサイズ

原本博史
愛媛大学教育学部
e-mail：haramoto@ehime-u.ac.jp

1 はじめに

この講演では、アメリカ国立標準技術研究所が作成した検定パッケージ SP800-22 に含まれている 6 種類の統計的検定について、個々の検定における p 値の分布を正確または近似的に計算し、帰無仮説に対応する理論分布との齟齬をカイ二乗ディスクレパンシーと呼ばれる量で測ることで、第 2 段階における検定のサンプルサイズとして適切・不適切な大きさを具体的に求める計算方法とその実験結果を報告する。

2 二重検定

本講演では 0 または 1 のビット列を出力する擬似乱数生成法を考える．

アメリカ国立標準技術研究所 (National Institute of Standards and Technology, NIST) が作成した検定パッケージ SP800-22 [1] は、X_i を擬似乱数の i 番目の出力とするとき，帰無仮説

$$\mathcal{H}_0 : X_1, \dots, X_n \sim_{i.i.d.} B(1, 1/2)$$

を検定する 15 種類の統計的検定よりなる．

NIST の検定では二重検定と呼ばれる検定も行われる。N 個の n ビット列それぞれに一つの検定 (第 1 段階の検定) を適用し，得られた p 値を $\nu+1$ 個のカテゴリー I_0, …, I_ν に分類したときの観測度数を Y_0, …, Y_ν とする．帰無仮説 $\mathcal{H}_0$ のもとでの各カテゴリーの理論確率を p_0, …, p_ν とすると，p 値が I_i に属する期待度数は Np_i となる．このとき χ^2 統計量

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{\nu} \frac{(Y_i - Np_i)^2}{Np_i}$$

は N が大きいとき自由度 ν の χ^2 分布に近似的に従うことが知られている．そこで χ^2 の実現値 χ_b^2 に対する確率 $\mathbb{P}(\chi_b^2 < \chi^2)$ があらかじめ定められた有意水準 α(例えば $\alpha = 10^{-8}$) より小さいとき，帰無仮説

$$\mathcal{H}_0' : p \text{ 値の分布は } \{p_i\} \text{ に従う}$$

を棄却する (第 2 段階の検定).

二重検定では全体のサンプルサイズが nN となるため，第 1 段階の検定のサンプルサイズ n が大きくしにくいときでも，よりたくさんの数列を検定できる利点がある．一方，第 2 段階のサンプルサイズ N を大きくしすぎると，高品質の擬似乱数生成法であっても棄却されることが経験的に知られており，NIST は $N \in O(1/\alpha)$ という基準を推奨している．この現象は，次に述べるカイ二乗ディスクレパンシーを用いて説明できる．

第 2 段階の検定は，p 値の分布が $\{p_i\}$ に従うという帰無仮説に関する検定である．p 値の真の分布 $\{q_i\}$ が $\{p_i\}$ とは異なるとき，統計量 χ^2 は自由度 ν の χ^2 分布に従わず，自由度 ν，非心度 $N\delta$ の非心 χ^2 分布に従うことがしられている．ここで

定義 1 確率分布 $\{p_i\}$, $\{q_i\}$ に関するカイ二乗ディスクレパンシーを次で定める．

$$\delta := \sum_{i=0}^{\nu} \frac{(q_i - p_i)^2}{p_i}$$

定理 2 (松本–西村, [2]) 上記の記号のもとで，次の不等式が成り立つ．

$$\left|\mathbb{E}(\chi^2) - (\nu + N\delta)\right| \le \nu \max_{i=0,\dots,\nu} \left|1 - \frac{q_i}{p_i}\right|$$

特に，有意水準 $\alpha \in (0, 1)$ の χ^2 適合度検定において，サンプルサイズが

$$N \approx \frac{\chi_\nu^2(\alpha) - \nu}{\delta} \qquad (\chi_\nu^2(\alpha) \text{ は上側 } 100\alpha\% \text{ 点})$$

ならば，得られる p 値は α 程度と期待される。

3 モンテカルロ法を用いた近似計算

p 値の分布は総当たりで計算できるが，一般に n が大きくなると困難になる．そこで，実現値全体の集合から理論分布に従う M 個のランダムサンプル $x_1, \dots, x_M$ を抽出し，

$$\#\{x_1, \dots, x_M \mid \mathbb{P}(T(x_i) < T(X)) \in I_i\}/M$$

で確率 q_i を近似するモンテカルロ法を考える．ここで T は検定統計量である。

表 1. SHA-1 に対する二重検定の p 値

検定名	サンプルサイズ	1 回目	2 回目	3 回目	4 回目	5 回目
BlockFreq	105,000	6.12e-01	7.62e-01	4.81e-01	3.46e-01	2.36e-01
	1,180,000	2.57e-04	1.83e-05	1.53e-03	4.51e-03	1.32e-07
LongestRun	21,000	0.31e-01	2.85e-01	3.94e-01	2.22e-01	2.62e-01
	235,000	1.50e-03	8.10e-06	4.28e-07	1.65e-02	3.39e-02
DFT	3,700	8.75e-01	4.02e-01	5.07e-01	1.80e-01	3.77e-01
	46,100	5.46e-03	1.24e-03	2.07e-03	4.29e-06	9.41e-07
Overlap	2,600,000	2.00e-01	8.68e-02	4.36e-01	2.68e-02	6.02e-01
	27,033,000	1.26e-05	1.63e-05	1.14e-04	1.19e-03	1.08e-03
RandomExc	87,000	5.67e-02	7.76e-01	6.82e-02	2.09e-01	2.93e-01
	934,000	9.77e-12	1.50e-09	5.04e-09	1.18e-04	3.65e-15
LinearComp	507,000	2.43e-03	7.24e-01	2.57e-01	8.61e-02	5.61e-02
	5,351,000	2.33e-06	5.24e-09	6.87e-10	8.22e-08	1.18e-04

図 1 に $(n, m) = (10^6, 1{,}032)$ の場合の Overlapping Template Matching test に関するカイ二乗ディスクレパンシー δ の近似計算の様子を示す．横軸をモンテカルロ法のサンプルサイズ M，縦軸を δ の値とし，総当たり法で求めた正確な δ の値を赤線で，$\delta \pm 0.01\delta$ の値を青線で示す．実現値は全部で $\#V = \binom{968+5}{5} \approx 7.2 \times 10^{12}$ 個あるが，$M = 2.6 \times 10^{10}$ 程度のサンプルサイズによるモンテカルロ法の結果でも，十分な近似を与えていることがわかる．

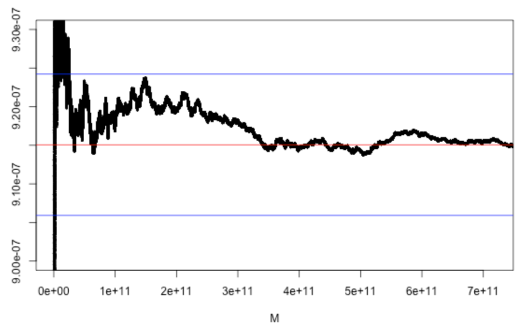


図 1. モンテカルロ法の結果

本研究では，上記のように総当たりまたはモンテカルロ法を用いて，15 種類の検定のうち 6 つの検定について，サンプルサイズ $n = 10^6$ における δ, N_r, N_s を計算している．これらの値が実験的にも意味があるかを確かめるため，第 2 段階のサンプルサイズをおよそ N_r, N_s とした二重検定を，SHA-1 アルゴリズムを用いた擬似乱数生成法に対して適用した．5 つの異なる初期値を取って作った 5 系列に対する結果の p 値を表 2 に示す．

実験結果でもサンプルサイズ N_r の検定結果では棄却されやすく，N_s では一度も棄却されない傾向がある．このほか，高品質生成法の一つであるメルセンヌ・ツイスター法や WELL に関しても同様の結果を得ており、カイ二乗ディスクレパンシーを用いたサンプルサイズの計算が有効であることがわかる。

謝辞　本研究は，日本学術振興会科学研究費補助金（若手研究 (B)，課題番号 17K14234）および、統計数理研究所共同プログラム (2019-ISMCRP-0005) の助成を受けて実施しました．

参考文献

[1] L. Bassham,III et al., A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, National Institute of Standards & Technology, 2010.

[2] M. Matsumoto and T. Nishimura, A Nonempirical Test on the Weight of Pseudorandom Number Generators, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 2000, 381–395.

[3] H. Haramoto and M. Matsumoto, A Method to Compute an Appropriate Sample Size of a Two-Level Test for the NIST Test Suite, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 2016, 283–294.

複数項目のカイ二乗検定の独立化

岩崎淳 [1]
[1] 京都大学
e-mail : iwasaki.atsushi.4x@kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

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．対立仮説は無限に考えられるので，乱数検定は無数につくられうる．そのため、実用上は複数の乱数検定からなるテストセット [1, 2, 3] を用いて検定を行う．（もちろん，テストセット自体も無数につくられうるが.）

テストセットを用いるにあたって，含まれる乱数検定すべてを通じて帰無仮説を採択するか棄却するかの基準（合格基準）を定めることが必要となってくる．仮説検定であるので,（近似的にでも）有意水準が求められる，または，定められた有意水準になるように合格基準が定められなければならない．しかし，提案されているほとんどのテストセットにおいて，それは困難である．主な理由としては，含まれている検定どうしが独立ではないことがあげられる．ここで「検定が独立」とは，同じ乱数に対して複数の検定で計算されたそれぞれの検定統計量が従う分布が，帰無仮説の下で独立ではないことをいう．

本稿では，乱数検定で広く用いられる χ^2 検定に着目する．同一の対象に対する複数の χ^2 検定を考え，参照分布の結合分布が既知の下で、検定統計量が独立になるような変形を提案する。

2 χ^2 検定

サンプルを K 個のクラスに分類することを考えよう．帰無仮説として，それぞれのクラスに分類される確率が与えられる.（クラス k に分類される確率を p_k とする.）独立なサンプルを N 個とってきたときに，そのうちクラス k に分類されたサンプル数を f_i とおく．このとき，χ^2 検定の検定統計量は

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^{K} \frac{(f_k - Np_k)^2}{Np_k} \tag{1}$$

で与えられ，経験分布と理論分布の “ズレ” が完全になければ 0，“ズレ” が大きいほど大きな値をとる．この検定統計量は，$N \to \infty$ としたとき帰無仮説の下で自由度 $K-1$ の χ^2 分布に従う．

同じ条件の下で，(1) の右辺各項の分布を考えると，平方根をとった $(f_k - Np_k)/\sqrt{Np_k}$ は平均 0･分散 $\sqrt{1-p_k}$ の正規分布に従う．これらは k について独立ではなく，一次的な拘束条件

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{f_k - Np_k}{\sqrt{Np_k}} \times \sqrt{Np_k} = 0 \tag{2}$$

がある．

3 問題設定

例として 2 項目の χ^2 検定 X と Y を考える．検定 X ではクラス x_1 から x_{K_X}，検定 Y ではクラス y_1 から y_{K_Y} を考えるとする．帰無仮説の下で，検定 X でクラス x_i に，検定 Y でクラス y_j に分類される結合分布 $p_{XY}(x_i, y_j)$ は既知とする.（当然の帰結として，周辺分布 $p_X(x_i)$ と $p_Y(y_j)$ も既知である.）独立に N 回サンプルをとったときの，検定 X で x_i が観測される回数を n_i 回，検定 Y で y_j が観測される回数を m_j とおく．

このとき，それぞれの検定統計量は

$$\chi_X^2 := \sum_{i=1}^{K_x} \frac{(n_i - Np_X(x_i))^2}{Np_X(x_i)}, \tag{3}$$

$$\chi_Y^2 := \sum_{j=1}^{K_y} \frac{(m_j - Np_Y(y_j))^2}{Np_Y(y_j)} \tag{4}$$

で与えられ，$N \to \infty$ で，自由度 $K_X - 1$ の χ^2 分布，自由度 $K_Y - 1$ の χ^2 分布に従う．しかし，検定統計量の結合分布は，一般に独立ではない．

そこで，検定 Y の検定統計量を

$$\hat{\chi_Y^2} := \sum_{j=1}^{K_Y} d_j \, (m_j - c_j)^2 \tag{5}$$

とおいて，c_j と d_j の値を選びなおすことを考えよう．その際の条件として

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

- $\hat{\chi}^2_Y$ は自由度 $K_Y - 1$ の χ^2 分布に従う
- χ^2_X と $\hat{\chi}^2_Y$ は独立

を課す．

4　c_j と d_j の導出

自然な考えとして，c_j は以下のように与えるのがよいであろう：

$$c_j = \mathbb{E}\left[m_j \mid n_1, n_2, \cdots, n_{K_X}\right] \tag{6}$$

$$= N \sum_{i=1}^{K_X} \frac{p_{XY}(x_i, y_j)}{p_X(x_i)} \cdot \frac{n_i}{N} \tag{7}$$

$$= \sum_{i=1}^{K_X} \frac{p_{XY}(x_i, y_j)}{p_X(x_i)} \cdot n_i. \tag{8}$$

一方，詳細は割愛するが，d_j の方は，$\hat{\chi}^2_Y$ が χ^2_X と独立に自由度 $K_Y - 1$ の χ^2 分布に独立に従うためには，

$$\exists q_1, q_2, \cdots, q_{K_Y} \quad \text{s.t.} \tag{9}$$

$$\sum_{j=1}^{K_Y} q_j = 1, \tag{10}$$

$$\forall j, \quad q_j \geq 0, \tag{11}$$

$$\mathrm{Var}\left[\sqrt{d_j}\,(m_j - c_j) \mid n_1, n_2, \cdots, n_{K_X}\right] = 1 - q_j, \tag{12}$$

$$\sum_{j=1}^{K_Y} \sqrt{N q_j d_j}\,(m_j - c_j) = 0 \tag{13}$$

を満たすようにとれば十分である．ただし，上記の条件を満たす d_j の存在と一意性については議論の余地がある．

5　実験

パラメータを $K_X = K_Y = 6$,

$$p_{XY}(x_i, y_j) = \begin{cases} \frac{1}{K_X K_Y} + 0.12 \; (i = j) \\ \frac{1}{K_X K_Y} - \frac{0.12}{K_Y - 1} \; (i \neq j) \end{cases} \tag{14}$$

として実験を行った（図 1，2）．変形が適切に機能していることが確認できる．

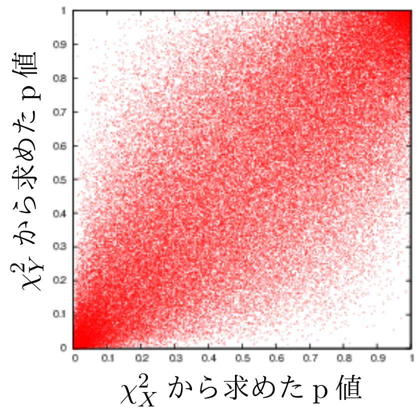


図 1. 変形前

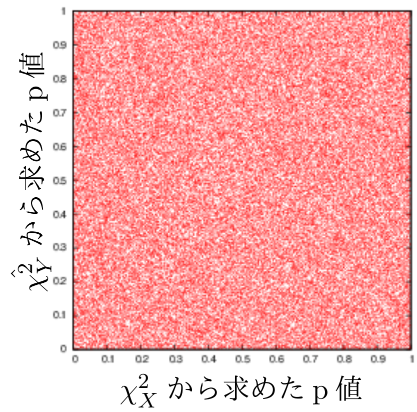


図 2. 変形後

参考文献

[1] G. Marsaglia, "DIEHARD: a battery of tests of randomness," http://stat. fsu. edu/geo (1996).

[2] P. L'Ecuyer and R. Simard, "TestU01: AC library for empirical testing of random number generators," ACM Trans. on Mathematical Software 33.4 (2007): 22.

[3] A. Rukhin, at el., " A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications," National Institute of Standards and Technology Special Publication 800-22 revision 1a (2010).

辺符号グラフ上の量子ウォーク

吉江 佑介 [1], 久保田 匠 [1], 瀬川 悦生 [2], 谷口哲至 [3]
[1] 東北大学情報科学研究科，[2] 横浜国立大学環境情報研究院, [3] 広島工業大学電子情報工学科
e-mail : yaman8102@gmail.com

1 概要

量子ウォークは古典ランダムウォークの量子可, 非可換可として解釈されるモデルであり, 昨今でも様々な応用がなされている [1], [2], [3]. また古典ランダムウォークよろしくグラフ上の Hitting time や mixing time の解析など多岐に渡った研究がなされているが, その応用として探索問題がたびたび考案されている. 量子ウォークを駆動させた量子探索アルゴリズムにより, 古典探索に比べた著しい効率化がもたらされる事となり, 量子ウォークの有用性を大いに強調する結果となった [4], [5]. 本講演は辺符号グラフ上での量子ウォークを考案し, その上での探索問題に取り組むものである.

2 準備

$G = (V(G), E(G))$ を頂点集合 $V(G)$, 辺集合 $E(G)$ の有限連結単純グラフとする. また $\mathcal{A}(G) = \{(u,v),(v,u) \mid uv \in E(G)\}$ を G の有向辺の集合とする. $a \in \mathcal{A}(G)$ に対し, $o(a), t(a)$ を a の始点, 終点とし a^{-1} で a の逆辺を表す.

2.1 辺符号グラフ

$\tau : \mathcal{A}(G) \to \{-1, 1\}$ と有向辺上の符号の符号とする. つまり各有向辺に ± 1 の符号を割り振る. 但し τ は, $\tau((u,v)) = -1$ ならば $\tau((v,u)) = 1$ となるものを指定する. また

$$\mathcal{M} = \{(u,v) \mid \sigma(uv) = -1\}$$

とする. 本講演では $\mathcal{M}$ に属す有向辺を探索する探索問題を提案する.

2.2 量子ウォーク

上記の τ に対し, $d_\tau : \ell^2(\mathcal{A}(G)) \to \ell^2(V(G))$ を

$$(d_\tau \varphi)(v) = \sum_{v=t(a)} w(a)\varphi(a), \quad \varphi \in \ell^2(\mathcal{A}(G)),$$

但し,

$$w(a) = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{\deg(t(a))}}, & a \in \mathcal{M}, \\ \frac{1}{\sqrt{\deg(t(a))}}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

とする. また $S : \ell^2(\mathcal{A}(G)) \to \ell^2(\mathcal{A}(G))$ を

$$(S\varphi)(a) = \varphi(a^{-1}), \quad \varphi \in \ell^2(\mathcal{A}(G)),$$

という flip-flop shift operator と呼ばれる作用素とする.

これらを用いた

$$U_\tau := S(2d_\tau^* d_\tau - I_{\mathcal{A}(G)})$$

から定まる量子ウォークを駆動させ, 量子探索を行う. この時 $T_\tau = d_\tau S d_\tau^*$ とすると

$$(T_\tau f)(v) = \sum_{t(a)=v} w(a)w(a^{-1})f(o(a)), \quad f \in \ell^2(V(G)$$

が分かる. この T_τ を行列で表すと

$$(T_\tau)_{u,v} = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{\deg(u)\deg(v)}}, & (u,v) \in \mathcal{M}, \text{ or } (v,u) \in \mathcal{M}, \\ \frac{1}{\sqrt{\deg(u)\deg(v)}}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

となる. この行列について以下の事が知られている.

定理 1 (Spectral mapping theorem [6], [7])

$$\{e^{\pm i\theta_\lambda} \mid \lambda \in \mathrm{Spec}(T_\tau)\} \subset \mathrm{Spec}(U_\tau)$$

但し $\theta_\lambda = \cos^{-1}\lambda$ である.

3 主結果

以降は G として完全グラフ K_{n+1} を選ぶ. また G の有向辺上の符号として 1 辺 a_m のみに -1 を割り振るものを考える. 更にこの τ に対し G の無向辺上の符号 σ を以下のように定める.

$$\sigma(uv) = \begin{cases} -1 & \tau((u,v)) \cdot \tau((v,u)) = -1, \\ 1 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$\Gamma = (G, \sigma)$ とすると今

$$T_\tau = \frac{1}{n} A(\Gamma)$$

となるので隣接行列の固有値解析が有用になる [8]. これらを用いて, [5] に基づき, 量子探索を駆動させると以下の事が分かる.

定理 2 $G = K_{n+1}$ 上の一辺のみに -1 を割り振った辺符号グラフにおいて上記の量子ウォークを駆動させると n のオーダーでの探索が可能である.

更にこの定理を拡張して, 以下が分かる.

定理 3 $G = K_{n+1}$ 上に -1 を割り振った有向辺の集合が t 個のマッチングになるようにし, 上記の量子ウォークを駆動させると n のオーダーでの探索が可能である.

4 証明の概略

証明は n が十分大きいとして, 上記の U_τ を駆動させ, -1 が割り振られた有向辺での発見確率が高くなるまでの Running time のオーダーを以下の手順で測る事で行う.

(i) T_τ の最大固有値を $\lambda_M = \cos\theta$ とし, U の固有値 $e^{\pm i\theta}$ の固有ベクトルをそれぞれ $\varphi_{+\theta}, \varphi_{-\theta}$ とする. またそれらより

$$\beta_\pm := \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{+\theta} \pm \varphi_{-\theta})$$

を定義する.

(ii) u を初期状態とし $|\langle u, \beta_- \rangle| \approx 1$ を確かめる.

(iii) β_- から β_+ へはおよそ $\lfloor \frac{\pi}{2\theta} \rfloor$ ステップで行けるので θ のオーダーを確かめる.

(iv) β_+ の -1 を割り振った辺における発見確率を計算する. そしてトータルの Running time のオーダーを測り n になる事を確かめる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18J10656, 19K03616, 16K05263, Research Origin Dressed Photon の助成を受けたものである. ....
....

参考文献

[1] D. M. Emms, E. R. Hancock, S. Severini, R. C. Wilson, A matrix representation of graphs and its spectrum as a graph invariant, Electronic Journal Combinatorics, **13**. (2006), R34.

[2] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, A note on the discrete-time evolutions of quantum walk on a graph, Journal of Math-for-Industry, **5**. (2013), pp. 103–109.

[3] N. Konno, I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, Quantum Information Processing, **11**. (2011), pp. 341–349.

[4] S. Aaronson, A. Ambainis, Quantum search of spatial regions, Theory of computing, **1**. (2005), pp. 47–79.

[5] R. Porugal, Quantum Walks and Search Algorithms, Springer, Berlin, 2013.

[6] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices, Journal of Functional Analysis, **267**. (2014), pp. 4197–1235.

[7] Yu. Higuchi, E. Segawa, A. Suzuki, Spectral mapping theorem of an abstract quantum walk, arXiv 150606457, (2016).

[8] S. Akbari, H. R. Maimani, L. Parsaei Majd, On the spectrum of some signed complete and complete bipartite graphs, Filomat **32**. (2018), pp. 5817–5826.

量子乱数と量子ウォークの関係

鹿野 豊 [1,2]
[1] 慶應義塾大学量子コンピューティングセンター，[2] チャップマン大学量子科学研究所
e-mail : yutaka.shikano@keio.jp

1 はじめに

現在の Internet of Things (IoT) 社会の根源を支えているセキュア通信技術として、素因数分解の難しさに起因した RSA 暗号方式が用いられている。一方で、ショアのアルゴリズムと呼ばれる量子アルゴリズムにより、量子 IoT 社会においては RSA 暗号方式が効率的に解読できる可能性が出てきた。最近、RSA 暗号方式 (RSA 2048 bits) を 8 時間で解読するためには 2 千万量子ビット規模の量子計算機が必要であるという試算が提出され、技術的な目標が定まったと言える [1]。また、RSA 暗号方式で解読されてはならないのは、「乱数」生成のパートである。RSA 暗号方式において、2 つのランダムな素数の組を生成しなければならないが、この素数の組の生成に乱数のアルゴリズムが適用されている。更には、RSA 暗号方式が解読されても問題のないセキュアな暗号方式として、耐量子暗号の研究も盛んに進められているが、この安全性証明にも「真の乱数」が存在していると仮定している。直接鍵を配布するセキュリティーシステムの一つである量子暗号においても、乱数ペアをシェアすることを目的としている。そのため、乱数生成のパートが解読されてしまっては、どれだけ通信路が安全であっても、セキュアな通信インフラを確立することが出来ない。そのため、セキュアな乱数生成技術は来たるべき量子 IoT 社会の実現において、必要不可欠な技術要件と言える。そこで、本稿ではセキュアな乱数生成技術にどのように量子科学技術が適応可能かどうかを量子ウォークと呼ばれる数学的な道具を例にして議論する。

2 量子乱数

セキュアな乱数生成のための議論は、「乱数とは何か？」という定義をどのように行えば良いかに依存している。

定義 1 (乱数) 数列 $\{a_n\}$ $(n \in \mathbb{N})$ が 2 値乱数列であるとは、次の条件を満たすものである。

1) a_k は $0, 1$ のどちらかの値をとる。

2) 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して、

$$a_{k+1} = f(a_k, a_{k-1}, \cdots, a_1) \qquad (1)$$

となる関数 f が存在しない。

上記の定義は、乱数の「予測不可能性」という特徴に立脚する議論であり、おそらく多くの人たちが同意出来るものであると考えている。また、実用上、よく用いられている疑似乱数生成機は上記の定義を満たす数列と限りなく統計上区別することの出来ない数列である。疑似乱数生成には、「シード」と呼ばれるパートが存在しており、セキュアな乱数生成にするためには物理乱数生成機によって生成されたものを使うことが一般的である [2]。

ここで、「量子乱数」とは、量子力学の数学的な公理が自然界を支配している法則であるとするのであれば、

> ２準位系の量子力学系を用意し、その量子状態として重ね合わせ状態を準備することが出来れば、その測定過程において生成される測定結果列は、乱数列となる。

ただし、現在、原理的には量子乱数列を生成出来る量子回路に対して、クラウド型量子計算機を用いて調べた結果においては、統計的にも乱数列となる数列が生成されていないことが分かる [3]。しかし、生成された数列がどのような相関をもっているかは今後の課題であり、より良い量子計算機の実現に対する基準を与えることになると考えている。

3 量子ウォークと量子シュミレーションの関係

量子ウォークは古典的なランダムウォークを量子力学の数学的公理の中で定義しようとした際に誕生した概念である。詳しい定義や性質に関しては、レビュー論文 [4] を参照されたい。最もシンプルな 1 次元離散時間量子ウォークにおいては、2 準位系の量子コイン状態に応じたシフト演算子を定義し、各ステップ毎に仮想的に

各位置ごとで量子状態が測定されたと仮定した際に計算される確率分布をもって、量子ウォークのダイナミクスを定義する。このダイナミクスは通常知られているランダムウォークとは違い、物理的にはディラック方程式により予言されるダイナミクスに近い確率分布が得られることが知られている。また、初期に用意する量子コイン状態やコイントスに対応する量子コイン演算子を変化させることにより、より多くのダイナミクスを表現出来る可能性を秘めている。また、離散時間量子ウォークは量子計算技術の発展と共に、物理的にも実現可能になってきているため、筆者は「離散時間量子ウォークは、様々な量子ダイナミクス（より広義には微分方程式で記述されるダイナミクス）を表現する能力を持ち、シミュレーション可能である」とした [4]。また、物理的にはどのように実装すれば良いかの指針も与えられている [5]。

量子ウォークを用いた量子シミュレータに関する議論として、量子ウォークのダイナミクスの途中に測定過程を入れ込むことにより確率分布がランダムウォークで予言される確率分布と同じになることを見いだしている [6, 7]。しかし、この議論に従えば、測定の間隔を調整することにより極限分布における確率分布が予想可能となるため、測定の間隔も乱数によって変化させなければならない。また、量子コイン演算子を非線形にすることで、確率分布のダイナミクスを変化させることを行った [8, 9]。これまで調べられている非線形量子ウォークにおいては、微分方程式で記述可能なダイナミクスに陥ってしまうため、乱数の「予測不可能性」の定義とは反するダイナミクスが生じてしまう可能性がでてきた。もし完璧な量子乱数生成が出来る量子ウォークが定義出来ることは、量子ウォークが量子ダイナミクスに対する量子シミュレータとして取り扱うことが出来ない例が存在することと等価と考えることが出来るであろう。量子ダイナミクスの「予測可能性」を引き出すための道具として、今後、量子ウォークの数学的な性質がより明らかにされることが重要であるということが分かる。

4 結論

量子乱数生成は量子セキュア社会の実現に向けたキーテクノロジーとして注目されている。しかし、その生成アルゴリズムについて、どのような条件を満たせば良いか？ということが明確ではなかった。本稿では、これまで量子確率過程として見なすことが出来る量子ウォークと量子乱数生成の関係について論じた。これまでの議論だけでは不十分ではあるが、今後、量子ウォークの数学的な性質を調べていくことで、量子乱数との議論をより明確出来る可能性を見いだした。

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 17K05082, 19H05156 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] C. Gidney and M. Ekera, arXiv:1905.09749.

[2] K. Tamura and Y. Shikano, Quantum Random Number Generation with the Superconducting Quantum Computer IBM 20Q Tokyo, in Proceedings of Workshop on Quantum Computing and Quantum Information, edited by M. Hirvensalo and A. Yakaryilmaz, TUCS Lecture Notes **30**, 13 – 25 (2019).

[3] K. Tamura and Y. Shikano, arXiv:1906.04410.

[4] Y. Shikano, J. Comput. Theor. Nanosci. **10**, 1558 – 1570 (2013).

[5] Y. Shikano, Interdisciplinary Information Sciences **23**, 33 – 37 (2017).

[6] Y. Shikano, K. Chisaki, E. Segawa, and N. Konno, Phys. Rev. A **81**, 062129 (2010).

[7] K. Chisaki, N. Konno, E. Segawa, and Y. Shikano, Quant. Inf. Comp. **11**, 0741-0760 (2011).

[8] Y. Shikano, T. Wada, and J. Horikawa, Sci. Rep. **4**, 4427 (2014).

[9] G. Di Molfetta, L. Honter, B. B. Luo, T. Wada, and Y. Shikano, Quantum Stud.: Math. Found. **2**, 243 – 252 (2015).

二刀流? 量子ウォークと無限粒子系

今野 紀雄 [1]
[1] 横浜国立大学大学院 工学研究院
e-mail : konno-norio-bt@ynu.ac.jp

1 はじめに

「量子ウォーク (quantum walk)」は，ランダムウォークの量子版として 2000 年頃より，量子コンピュータ周辺から本格的な研究が始まった「量子系のモデル」である．一方「無限粒子系（interacting particle system)」は，有限個あるいは無限個の粒子が確率的に相互作用しながら時間発展する，1970 年頃より研究されてきた「古典系のモデル」である．本講演では，この「量子ウォーク」と「無限粒子系」との非自明な類似性にも触れつつ，それらを概説したい．

2 ファースト・コンタクト

まず，“無限粒子系から量子ウォークへの個人的な研究の転換期”での量子ウォークとの出会いについて記す．当時の無限粒子系研究の一端は [1] により，また最近の動向は [2] を参照のこと．ファースト・コンタクトは，2002 年正月に，検索サイトに偶然打ち込んだ「quantum random walk」(当時はそうよばれていた) により，ネット上に数編しかなかった論文がヒットしたことによる．それまでは，その偶然の機会を予期していたかの如く，無限粒子系の量子力学的アプローチの研究周辺を彷徨っていた．具体的には，Sudbury and Lloyd による論文 [3] 等を読み込み理解を深めていた．最初の私の量子ウォークに関する論文 [4] を，2002 年 5 月に arXiv に投稿し，弱収束極限定理論文 [5] を経て，8 月に前述の Sudbury 氏も加わった [6] を投稿した．一方ほぼ同時期，無限粒子系の量子力学的手法が頭の中で重低音のように鳴り響く状況の中，無限粒子系の双対性に関して論文 [7, 8] にまとめた．その解説が [9] である．また，量子ウォークと無限粒子系とのテンソル表現の類似性を示唆する論文として [10] がある．さらに，量子ウォークのエンタングルメントを彷彿とさせる符号付測度を用いて無限粒子系の極限定理を求めた論文 [11] も存在する．無限粒子系のグラフ表現の論文 [12] もあり，量子ウォークの確率測度の表現との類似性も興味深い．

このように 2002 年は，私自身の研究史で無限粒子系の量子力学的アプローチと量子ウォークとが交差した歴史的瞬間であった．その後 2008 年に『無限粒子系の科学』[13] と『量子ウォークの数理』[14] を出版した．

3 出会いの前後

量子ウォークは，量子モデルとしては簡単に定義できるモデルなので，Feynman をはじめとし，おそらく多くの人達によって同様のモデルが提案されてきたと思われる．しかし，2001 年の Ambainis et al. の論文 [15] によって，量子ウォークの研究が開花したといっても過言ではない．筆者が量子ウォークと出会ったとき興味をもった理由は，そのランダムウォークと異なる性質による．1 番目は，ランダムウォークの確率測度が 2 項分布で表され，出発点の確率が高い単峰型であるのに対し，量子ウォークの確率測度は，粗くいうとその逆の，出発点の確率が最も低く，2 つの端点に近い場所の確率が高い逆釣鐘型であること．そして，2 番目は，ランダムウォークの分散が時刻に比例するのに対して，量子ウォークの場合は時刻の 2 乗に比例することである．2002 年当時，まだ本格的な研究がはじまった時期だけに，確率測度の明示的な表現やランダムウォークの中心極限定理に対応する弱収束極限は知られていなかった．いまや 1 次元系の基本的な結果となったが，組合せ論的な手法で弱収束極限を得ることに成功し，2002 年の 6 月には第一報を投稿することができ [5]，その後まとまった論文として完成した [16]．現在では，理論的な側面だけでなく，量子ウォークの実現方法のさまざまな提案や応用，例えば，強相関電子系，トポロジカル絶縁体，放射性廃棄物低減，光学，量子テレポーテーション，量子鍵配送なども研究されている．量子ウォークに関するレヴュー・本は，例えば，[14, 17, 18, 19, 20, 21, 22] がある．

4 最後に

量子ウォークの解析は，組合せ論的手法，フーリエ解析，停留位相法，母関数法，CGMV 法，転送行列法，グラフゼータ法，スペクトル写像

定理，スペクトル散乱理論を用いた手法など様々なものがあり，それら相互の関係を明らかにすることにより，多状態や一般のグラフの上の挙動に関する詳しい研究がさらに可能である．そのことは，無限粒子系も含めた古典系のマルコフ過程理論に対応する量子系の理論を構築する足がかりになる．本講演で扱えなかった最近の種々のテーマについては，約 20 名の量子ウォーク研究者による『量子ウォークの新展開』[23] で解説されているので，是非読んで頂きたい．このように，量子ウォークは，数学の問題だけでなく，量子コンピュータなどによる応用も含め，今後もさまざまな分野で魅力あるテーマであり続けるであろう．

参考文献

[1] 乾徳夫, 方向性のあるパーコレーション問題における組合せ問題. 応用数理, 12 巻 (2002), 191–200.

[2] 玉井敬一, 佐野雅己, 有向パーコレーションと乱流遷移. 応用数理, 29 巻 (2019), 10–17.

[3] A. W. Sudbury and P. Lloyd, Quantum operators in classical quantum theory. IV. Quasi-duality and thinnings of interacting particle systems, Ann. Probab., Vol.25 (1997), 96–114.

[4] N. Konno, T. Namiki and T. Soshi, Symmetry of distribution for the one-dimensional Hadamard walk, Interdisciplinary Information Sciences, Vol.10 (2004), 11–22, quant-ph/0205065.

[5] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, Quantum Inf. Process., Vol.1 (2002), 345–354.

[6] N. Konno, T. Namiki, T. Soshi and A. Sudbury, Absorption problems for quantum walks in one dimension, J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 36 (2003), 241–253, quant-ph/0208122.

[7] N. Konno, Dualities for a class of finite range probabilistic cellular automata in one dimension, J. Statist. Phys., Vol.106 (2002), 915–922.

[8] N. Konno, Self-duality for multi-state probabilistic cellular automata with finite range interactions, J. Statist. Phys., Vol.106 (2002), 923–930.

[9] 今野紀雄, 格子確率モデルの双対性. 電子情報通信学会誌, 85 巻 (2002), 510–514.

[10] M. Katori, N. Konno, A. Sudbury and H. Tanemura, Dulalities for the Domany-Kinzel model, J. Theoret. Probab., Vol.17 (2004), 131–144.

[11] M. Katori, N. Konno and H. Tanemura, Limit theorems for the non-attractive Domany-Kinzel model, Ann. Probab., Vol.30 (2002), 933–947.

[12] M. Katori and N. Konno, Extension of the Arrowsmith-Essam formula to the Domany-Kinzel model, J. Statist. Phys., Vol.101 (2000), 747–774.

[13] 今野紀雄, 無限粒子系の科学, 講談社, 2008.

[14] 今野紀雄, 量子ウォークの数理, 産業図書, 2008.

[15] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath and J. Watrous, One-dimensional quantum walks, in: Proc. of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, pp.37–49, 2001.

[16] N. Konno, A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, J. Math. Soc. Japan, Vol.57 (2005), 1179–1195.

[17] N. Konno, Quantum Walks. In: Quantum Potential Theory, Franz, U., and Schürmann, M., Eds., Lecture Notes in Mathematics: Vol.1954, pp. 309–452, Springer-Verlag, Heidelberg, 2008.

[18] K. Manouchehri and J. Wang, Physical Implementation of Quantum Walks, Springer, 2013.

[19] R. Portugal, Quantum Walks and Search Algorithms, Springer, 2013.

[20] 今野紀雄, 量子ウォーク, 森北出版, 2014.

[21] 町田拓也, 図で解る量子ウォーク入門, 森北出版, 2015.

[22] 町田拓也, 量子ウォーク - 基礎と数理 -, 裳華房, 2018.

[23] 今野紀雄, 井手勇介 (共編著), 量子ウォークの新展開 -数理構造の深化と応用-, 培風館, 2019.

チュートリアル　AND-OR 木の探索コスト

鈴木 登志雄
首都大学東京 理学研究科 数理科学専攻
e-mail：toshio-suzuki@tmu.ac.jp

1　概要

NAND 木の葉をブール変数，根の値をブール関数とみなす．真理値割り当ての確率分布が与えられたとき，ブール関数値を求めるために，アルゴリズムが計算の途中でブール変数にクエリ（問い合わせ）する回数の期待値を探索コストと考える．このコストの極値問題に関する基本的なキーワードと問題意識についてチュートリアル講演を行う．

2　ゲーム木の一種としての AND-OR 木

ゼロサム２人ゲームのミニマックス木はゲーム理論にとって基本的な対象であるが，評価関数が２値の場合はブール関数複雑性の観点からも興味深い．このとき MIN（最小値）ゲートと MAX（最大値）ゲートはそれぞれ，AND ゲートと OR ゲートになる．

根が AND，そして AND 層と OR 層が交互に現れ，否定ゲートがない木を AND-OR 木という．根が OR の場合，OR-AND 木ということもある．NAND 木は本質的には OR-AND 木である．NAND(x, y) は $\neg(x \wedge y)$ であるから，ド モルガンの法則によって $(\neg x) \vee (\neg y)$ と同値である．したがって，たとえば

NAND(NAND(x_0, x_1), NAND(x_2, x_3))

は，$(x_0 \wedge x_1) \vee (x_2 \wedge x_3)$ に同値変形できる．元の NAND 木の深さによっては葉の一つ上に否定ゲートが残ることもある．しかし，それらを無視すれば OR-AND 木を得る．

完全２分木で AND-OR 木になっているものが最も基本的であるが，もう少し一般的な木も考える．たとえばどの葉も根までの距離が等しく，かつ，各々の層ごとに子の個数が一定の木である（Tarsi[3] の意味での balanced tree）．

葉への真理値割り当てが与えられ，その値が隠されているとしよう．探索アルゴリズムの目標は根のブール値を求めることにある．そのため，アルゴリズムは一つずつ葉へのクエリを行う．クエリの回数によってコストを測る．

AND-OR 木自体がゲーム木であるが，ここで我々は暗に，ゲームのようなものをもう一つ考えていることになる．真理値割り当てを設定する側はコストを増やしたい．対照的にアルゴリズムは，少ないコストで根の値を求めたい．この暗に考えているゲームの単純戦略と混合戦略がそれぞれ何か，次に説明する．

3　真理値割り当てを設定する側の戦略

木は固定されているとする．真理値割り当てを設定する側の単純戦略は，真理値割り当てそのものである．木を固定し，葉への真理値割り当て全体の集合を $\mathcal{W}$ としよう．$\mathcal{W}$ 上の確率分布が混合戦略であり，いくつかのタイプがある．

独立同分布（IID，あるいは i.i.d.）と呼ばれるタイプの混合戦略は次のようなものである．表が出る確率が p のコインを，葉の枚数だけ用意する．それぞれの葉ごとにコインを独立に投げ，表が出たら真理値 0，裏が出たら真理値 1 をその葉に設定する．p が 0 か 1 の場合は，上記の単純戦略になる．多くの場合，$0 < p < 1$ という仮定の下で考える．

独立分布（ID，あるいは i.d.）と呼ばれるタイプの混合戦略は，上記において，各コインごとに表が出る確率が異なっていてもかまわないとするものである．

一般に真理値割り当ての確率分布という場合，独立分布でなくてもかまわない．

4　根の値を求める側の戦略

ここでも木は固定されているとする．根の値を求める側の単純戦略は，決定性（deterministic）アルゴリズムである．ここで決定性というのは乱数に頼らないという意味である．どんな真理値割り当てに対しても根の値を正しく求めるアルゴリズムのみを考える．また決定性アルゴリズムは，根の値を求めるために不要なクエリは行わないものとする．たとえば

$f = (x_0 \wedge x_1) \vee (x_2 \wedge \neg x_3)$

を求めるためにまず x_1 にクエリして，その値が 0 とわかったとする．このとき x_0 の値に関わらず $x_0 \wedge x_1$ の値は 0 であり，f の値は $x_2 \wedge \neg x_3$ の値に等しい．よってこのとき，x_0 を探索しない（探索をカットする）．一般に，OR ゲート

v の子（葉でなくてもよい）一つが値 1 であるとわかったら，v が値 1 と知り，v の子孫をそれ以上探索しない．また，AND ゲート v の子一つが値 0 であるとわかったら，v が値 0 と知り，v の子孫をそれ以上探索しない．

決定性アルゴリズムにもいくつかのタイプがある．**深さ優先**（depth-first）アルゴリズムとは，ひとたびある内部ノード v の子孫である葉 x を探索したなら，v の値を知るまで，v の子孫でない葉へのクエリを行わないものをいう．Knuth-Moore のアルファベータ探索は，本来は，やや込み入った定義をしている．しかし我々の文脈においては，Knuth-Moore のアルファベータ探索は，上記のようなカットを行う深さ優先アルゴリズムと同値である．

ディレクショナル（directional）アルゴリズムとは，葉全体の集合 L の順列 σ が一つ決まっていて，探索のカットはするが，σ と矛盾する順序での探索は決してしないものをいう．上記の f に対し，アルゴリズムの例を三つみよう．

例 1：x_0, x_1, x_2, x_3 の優先順位で探索するアルゴリズムは深さ優先ディレクショナルアルゴリズムである．

例 2：まず x_0 の値を調べる．それが 1 のときは x_1, x_2, x_3 の順に探索する．x_0 が 0 のときは x_3, x_2 の順に探索する．これは深さ優先であるが，ディレクショナルでない（non-directional あるいは undirectional）アルゴリズムである．

例 3：まず x_0 の値を調べる．それが 1 のときは x_2, x_3, x_1 の順に探索する．x_0 が 0 のときは x_2, x_3 の順に探索する．これは深さ優先ではない（non-depth-first）アルゴリズムである．

決定性アルゴリズム全体の集合を $\mathcal{A}_D$ としよう．根の値を求める側の戦略は，$\mathcal{A}_D$ 上の確率分布である．この分野においては，このような確率分布を乱択アルゴリズム（randomized algorithm）という．

5 主要な問題群と鑑賞のポイント

木の族 $\mathcal{T}$ が与えられ，各 $T \in \mathcal{T}$ に対して真理値割り当て上の確率分布の族 $\mathcal{D}_T$，および決定性アルゴリズムの族 $\mathcal{A}_T$ が与えられたとする．ここで「$d_0 \in \mathcal{D}_T$ が任意の $d \in \mathcal{D}_T$ に対して

$$\min_{A\in\mathcal{A}_T} \mathrm{cost}(A, d_0) \geq \min_{A\in\mathcal{A}_T} \mathrm{cost}(A, d)$$

となるならば，d_0 はある種の対称性（例，IID）をもつことを示せ」というのが，[5] 以降の研究における典型的な問題群の一つである．

確率分布 d はユークリッド空間の点とみなせる．示したいことは maximizer の対称性であり，等周問題に似ている．ところが各点 d に，コスト期待値を最小化するアルゴリズム全体 $\mathcal{A}_d$ が付随する．アルゴリズム族の場が目的関数の値を決めているので，目的関数を具体的に記述することが困難である上に，対象のなめらかさを仮定できない．スローガン風にまとめると**「対象のなめらかさを壊すアルゴリズム族の場の下で，等周問題と似た問題を考える．勾配流の代替物をうまくみつけるのが手法上の要である」**

6 歴史的背景と文献

1980 年代に Pearl[2]，Tarsi[3] らは独立同分布の場合を研究した．とくに Tarsi は最適な深さ優先ディレクショナルアルゴリズムの存在を示した．続いて Saks-Wigderson[4] は独立でない分布についてゲーム論的均衡点を研究した．Liu-Tanaka[5] が [4] の拡張に取り組んで以来，均衡点としての固有分布の研究が進んだ．論文 [6] は 2007 年から 2016 年頃までの展開のサーベイである．計算量理論の教科書 [7] の第 12 章も参考になる．

参考文献

[1] D.E.Knuth, R.W.Moore, An analysis of alpha-beta pruning, *Artif. Intell.*, 6 (1975) 293–326.

[2] J.Pearl, Asymptotic properties of minimax trees and game-searching procedures, *Artif. Intell.*, 14 (1980) 113–138.

[3] M.Tarsi, Optimal search on some game trees, *J. ACM*, 30 (1983) 389–396.

[4] M.Saks, A.Wigderson, Probabilistic Boolean decision trees and the complexity of evaluating game trees, in: *Proc. 27th IEEE FOCS*, 1986, 29–38.

[5] C.-G.Liu, K.Tanaka, Eigen-distribution on random assignments for game trees, *Inform. Process. Lett.*, 104 (2007) 73–77.

[6] T.Suzuki, Kazuyuki Tanaka's work on AND-OR trees and subsequent developments, *Ann. Japan Assoc. Philos. Sci.*, 25 (2017) 79–88.

[7] S.Arora, B. Barak, *Computational complexity: A modern approach*, Cambridge University Press, 2009.

応用論理学招待講演　重み付き AND-OR 木の固有分布について

田中 一之
東北大学 理学研究科 数学専攻
e-mail : tanaka.math@tohoku.ac.jp

1　概要

様々な木のクラス，アルゴリズムのクラス，入力分布のクラスに対する固有分布の特徴が調べられているが，本講演ではとくに重み付き木に対する最近の研究成果を報告する．

2　背景

AND-OR 木とは，根に AND，葉以外の各頂点には AND もしくは OR が根から距離によって交互にラベル付けされた木構造である．葉に対する真理値 0,1 の割り当て ω が与えられたとき，アルゴリズム A を実行し，根の値の決定までに要する葉へのクエリ回数をそのアルゴリズムの計算コストといい，$C(A,\omega)$ で表す．真理値割り当てのクラスの上の確率分布 d が与えられたとき，アルゴリズム毎の計算コストの期待値 $C(A,d)$ が定義できる．

劉と田中 [1, 2] は，$\min_A C(A,d)$ を最も大きくするような確率分布を固有分布と呼び，様々な木のクラス (完全二分木，一様木，均整木)，アルゴリズムのクラス (深さ優先，ディレクショナル)，入力分布のクラス (CD, ID, IID) に対する固有分布の特徴を調べる研究を始めた．とくに，一様 AND-OR 木について，ID クラスにおける固有分布は IID であると予想した．鈴木と新田 [3] は一様二分木に対し，続けて彭ら [4] は多分岐均整木に対してこの予想を解いた．均整木とは，同じ高さの頂点はすべて同数の子をもち，かつすべての葉が同じ高さをもつものをいう．鈴木 [5] はこれらの結果が，深さ優先でないアルゴリズムでも言えることを示した．

CD に関して，劉と田中 [1, 2] は，根の値を $i=0,1$ にするような割り当てのうち，葉における値 i の個数が最小になるようなものの全体を i 集合と呼んだ．そして，i 集合上の分布で，すべての決定性アルゴリズムに対するコストの期待値が同一になるようなものを E^i 分布と呼び，一様二分木においては，E^i 分布は i 集合上の一様分布であり，それが唯一の固有分布であることを示した．鈴木と中村 [6] は，ディレクショナル・アルゴリズムだけを考えると唯一性が成り立たないことを示した．彭ら [7] はこれらの結果を多分岐均整木に拡張し，固有分布と E^i 分布の同値性を示した．固有分布の唯一性を示すために，沖坂ら [8] は特殊な重み付き木を導入した．そこでは，値 $1,0$ の葉への 1 回のクエリにそれぞれ実数 $a,b>0$ のコストがかかる．また，このような重み付きの多分岐均整木に対しても，ID クラスにおける固有分布は IID であることが示されている (未発表)．最後に，葉毎に異なる重みをもつような木についての進行中研究の一部を紹介する．

3　特殊な重み付き木

木に対する (真理値) 割り当ては，葉の集合から真理値 $\{0,1\}$ への関数 ω である．割り当ての全体を Ω と記す．そして，Ω 上の確率分布 $d:\Omega\to[0,1]$ を考える (すなわち，$\sum_{\omega\in\Omega} d(\omega)=1$)．$\Omega$ 上の分布 d に対して，アルゴリズム A のコストの期待値は $C(A,d)=\sum_{\omega\in\Omega} d(\omega)\cdot C(A,\omega)$ で定義される．

次のような特殊な重み付き木を考える．

定義 1 (**[8]**) 割り当て ω に対し，アルゴリズム A の実行により問い合わされる値 1 と 0 の葉の個数をそれぞれ $\sharp_1(A,\omega)$ と $\sharp_0(A,\omega)$) とする．このとき，任意の実数 $a,b>0$ に対して，

$$C(A,\omega;a,b) := a\cdot\sharp_1(A,\omega)+b\cdot\sharp_0(A,\omega),$$

を重み (a,b) の**拡張コスト**という．Ω 上の分布 d に対しては，拡張コストの期待値 $C(A,d;a,b) := \sum_{\omega\in\Omega} d(\omega)\cdot C(A,\omega;a,b)$ が定まる．

[7] の唯一性の結果は次のように一般化して証明された．

定理 2 (**[8]**) (重み付き) 多分岐均整木において，アルゴリズム全体での固有分布は一意的であり，ディレクショナルに限れば一意的でない．

このような拡張コストに対して，ID に関する多くの結果も一般化できる．とくに重み付き多分岐均整木 $\mathcal{T}$ において，固有分布 $\delta\in\mathrm{ID}$ は IID である (未発表)．

4　一般の重み付き木

Saks と Wigderson [9] は，木の重み w を，葉全体の集合から正の実数への関数 w_0, w_1 の対で定義した．アルゴリズム A と割り当て ω に対して，A の実行により問い合わされる値 0 と 1 の葉の集合をそれぞれ $L_0(A,\omega)$ と $L_1(A,\omega)$ で表す．このとき，重み w の木に対するアルゴリズム A の **SW** コストは次で定義される．

$$C(A,\omega;w) := \Sigma_{l\in L_0} w_0(l) + \Sigma_{l\in L_1} w_1(l).$$

前節の特殊な重みは，w_0, w_1 が定数 b, a の場合であった．ID d とディレクショナル・アルゴリズム A に対する SW コスト $C(A,d;w)$ は，以下のように帰納的に与えることができる．

定義 3 (ID に対する SW コスト) 重み w もつ $\mathcal{T}$ に対して，ID d とディレクショナル・アルゴリズム A が与えられている．各頂点 σ において，値が 0 となる確率 p_σ およびそのときの SW コスト C^0_σ，さらに値が 1 となる SW コスト C^1_σ とする．このとき，

(1) σ が葉 l であるとき，$p_\sigma = d(l)$ かつ $C^i_\sigma = w_i(l)(i=0,1)$.

(2) A が σ の子 $\sigma_1,\ldots,\sigma_n$ をこの順序で調べるとする．σ が $\wedge$ のとき，$p_\sigma = 1 - \prod_{k=1}^n(1-p_{\sigma_k})$，$C^1_\sigma = \sum_{k=1}^n C^1_{\sigma_k}$，$C^0_\sigma \cdot p_\sigma = p_{\sigma_0}\cdot C^0_{\sigma_0} + \sum_{l=1}^n(\prod_{k=1}^{l-1}(1-p_{\sigma_k})\cdot p_{\sigma_l}(\sum_{k=1}^{l-1} C^1_{\sigma_k} + C^0_{\sigma_l}))$. $\vee$ のときも同様.

また，$C_\sigma = p_\sigma C^0_\sigma + (1-p_\sigma)C^1_\sigma$ とおく．

上の定義で，σ が $\wedge$ のときの C^0_σ の定義式が複雑になるため，Saks と Wigderson [9] は 2 分木の場合にそれをアルゴリズムに依存しない式で抑える工夫をしている．

ID d に対するアルゴリズム DIR_d を帰納的に定める．頂点 σ の以下の部分を $\mathsf{DIR}_d\!\upharpoonright\!\sigma$ とする．

定義 4 σ が $\wedge$ のときは $\frac{C_{\sigma_1}}{p_{\sigma_1}} \leq \cdots \leq \frac{C_{\sigma_n}}{p_{\sigma_n}}$ を満たすように，σ が $\vee$ のときは $\frac{C_{\sigma_1}}{1-p_{\sigma_1}} \leq \cdots \leq \frac{C_{\sigma_n}}{1-p_{\sigma_n}}$ を満たすように，σ の子 $\sigma_1,\ldots,\sigma_n$ を並べ，$\mathsf{DIR}_d\!\upharpoonright\!\sigma$ は，$\mathsf{DIR}_d\!\upharpoonright\!\sigma_1,\cdots,\mathsf{DIR}_d\!\upharpoonright\!\sigma_n$ をこの順に実行する．

驚くべきことに，DIR_d は，任意の重み付き非均整木において，深さ優先アルゴリズムの中で最良である．そこで，定義 4 における各不等号が等号になるような ID d を考えれば，その SW コストはアルゴリズムによらないものになる．これを独立比例分布 (PID) と呼ぶ．根の値が 0 となる確率 r を定めれば，PID は一意に定まる． しかし残念ながら，ID=IID の PID 版は一般に成り立たず，それを成り立たせる追加条件を探査中である．

謝辞　企画者の鈴木登志雄氏に感謝します．

参考文献

[1] C.G. Liu and K. Tanaka, Eigen-distribution on random assignments for game trees, *Inform. Process. Lett.*, 104(2)(2007) 73-77.

[2] C.G. Liu and K. Tanaka, The computational complexity of game trees by eigen-distribution, in: *LNCS 4616*, 2007, 323-334.

[3] T. Suzuki and Y. Niida, Equilibrium points of an AND-OR tree: under constraints on probability, *Ann. Pure Appl. Logic*, 166(11)(2015) 1150-1164.

[4] W. Peng, N. Peng, K. Ng, K. Tanaka and Y. Yang, Optimal depth-first algorithms and equilibria of independent distributions on multi-branching trees, *Inform. Proc. Lett.*, 125 (2017) 41-45.

[5] T. Suzuki, Non-depth-first search against independent distributions on an AND-OR tree, *Artif. Intell.*, 139 (2018) 13-17.

[6] T. Suzuki and R. Nakamura, The eigen distribution of an AND-OR tree under directional algorithms, *IAENG Int. J. Appl. Math.*, 42(2)(2012) 122-128.

[7] W. Peng, S. Okisaka, W. Li and K. Tanaka, The uniqueness of eigen-distribution under non-directional algorithms, *IAENG Int. J. of CS*, 43(3)(2016) 318-325.

[8] S. Okisaka, W. Peng, W. Li and K. Tanaka, The eigen-distribution of weighted game trees, in: *LNCS 10627*, 2017, 286-297.

[9] M. Saks and A. Wigderson, Probabilistic Boolean decision trees and the complexity of evaluating game trees, in: *Proc. of 27th Ann. IEEE Sympo. FOCS*, 1986, 29-38.

ソロベイ還元と連続性

鈴木 登志雄
首都大学東京 理学研究科 数理科学専攻
e-mail : toshio-suzuki@tmu.ac.jp

1 概要

計算可能性理論における還元は，実数どうしの複雑さを比較する擬順序である．とくにソロベイ還元は，実数の距離に基づいて定義される．還元と連続性の関係をよりよく理解することを目指した，隈部正博，宮部賢志，水澤勇気との共同研究について紹介する．この研究は，リプシッツ連続かつ，しかるべき性質をもつ実関数の存在によってソロベイ還元を特徴付けることから始まった．ではヘルダー連続関数に対応する還元はあるだろうか．答えは肯定的である．我々は擬ソロベイ還元（quasi Solovay reduction）を導入した．この還元はソロベイ還元，チューリング還元のいずれとも異なる．ヘルダー連続かつ，しかるべき性質をもつ実関数の存在によって擬ソロベイ還元を特徴付ける．また，擬ソロベイ完全性とエフェクティブ・ハウスドルフ次元との間の密接な関係を示す．

2 実関数の計算可能性

他分野の方の便宜のため，本稿では基本概念を重点的に説明する．プレプリント [1] をご覧になる一助となれば幸いである．

関数 $f : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ が**計算可能関数**であるとは，あるプログラム（チューリング計算機）M があって，どんな自然数 n に対しても以下が成り立つことをいう．$(*)$「n を入力として M の計算を開始すると，有限ステップで M が停止し，$f(n)$ を出力する」大事なことは，たとえ人間が $f(n)$ の値を知っていても，人間は M に答えを耳打ちしないという点である．M は自力で出力を生み，それが $f(n)$ と一致する．

f の定義域が $\mathbb{N}$ の部分集合であるとき，上記の条件 $(*)$ を次のように変えた条件を考える．「n を入力として M の計算を開始すると，n が f の定義域に属するときは有限ステップで M が停止して $f(n)$ を出力し，n が f の定義域に属さないときは M が永久に停止しない」このような M があるとき，f は**計算可能な部分関数**であるという．ここまでの議論において，$\mathbb{N}$ を $\mathbb{Q}$ に変えたものを考えてもよい．

$\mathbb{N}$ の部分集合 A が与えられたとする．計算可能な関数 $f : \mathbb{N} \to \{0,1\}$ があって「$n \in A \Leftrightarrow f(n) = 1$」となるとき，$A$ を**計算可能な集合**という．計算可能集合よりもう少し弱い概念として *c.e.*（**枚挙可能）集合**という性質が知られている．計算可能な部分関数 $f : \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ があって，その定義域が A に等しいとき，A を c.e. 集合という．

閉区間 $[0,1]$ に属する実数 x が与えられたとする．計算可能な関数 $f : \mathbb{N} \to \{0,1\}$ があって $0.f(0)\ f(1)\ f(2)\ \cdots$ が x の２進展開になっているとき，x を**計算可能な実数**という．計算可能実数よりもう少し弱い概念として *left-c.e.* **実数**という性質が知られている．デデキント切断の下組 $\{q \in \mathbb{Q} | q < x\}$ が c.e. 集合になるとき，x は left-c.e. 実数であるという．代数的 $\Rightarrow$ 計算可能 $\Rightarrow$ left-c.e. が成り立つ．たとえば円周率 π は計算可能な実数である．

計算可能解析という分野 [2] では，$\mathbb{R}$ から $\mathbb{R}$ への関数の計算可能性をどのように定義したら実り多い議論ができるかを追求してきた．実数は必ずしも計算可能ではない．しかし，たとえば実数を２倍にする操作を考察すると，その変換自体はある意味で「プログラムで書ける」．

実関数 f とある種のチューリング計算機 M が与えられたとする．f の定義域に属する x に対して，以下の変換を考える．

$a < x < b$ となる有理数の順序対 (a,b)
全体を書き並べたリスト
$\mapsto c < f(x) < d$ となる有理数の順序対 (c,d)
全体を書き並べたリスト

どの x に対しても，この変換が（x と無関係な共通の）M で行われるとき，実関数 f は（計算可能解析の意味で）**計算可能**であるという．正確な定義は [2] を参照されたい．

3 ソロベイ還元

ソロベイ還元は実数の距離に基づく還元である．

定義 1 *[3]* α が β にソロベイ還元可能 ($\alpha \leq_S \beta$) であるとは，計算可能な部分関数 $f:\mathbb{Q}\to\mathbb{Q}$ と正の整数 d が存在して，任意の $q\in\mathbb{Q}$ (*s.t.* $q<\beta$) に対して，$f(q)<\alpha$ かつ $|\alpha-f(q)|<d|\beta-q|$ となることをいう．

4 リプシッツ連続関数

いま座標平面上の点 (x_0,y_0) $(0<x_0<1, 0<y_0<1)$ が与えられたとする．区間 $(-\infty,x_0)$ を定義域とする一次関数で，非減少かつ，$x\to x_0-0$ のときの y 座標が y_0 に限りなく近づくものがあるかといえば，当然存在する．しかし，計算可能解析の意味で計算可能な一次関数に限定すると，必ずしもその限りではない．

定義 2 $f:I\to\mathbb{R}$ （I は $\mathbb{R}$ の区間）とする．

1) f がリプシッツ連続であるとは，定数 $L>0$ があって以下が成り立つことをいう．$\forall x_1,x_2\in I\ |f(x_1)-f(x_2)|\leq L|x_1-x_2|$.

2) f が（次数 *1* 以下で）ヘルダー連続であるとは，定数 $H>0$ と $\xi\leq 1$ があって以下が成り立つことをいう．$\forall x_1,x_2\in I\quad |f(x_1)-f(x_2)|\leq H|x_1-x_2|^{\xi}$.

以下ではとくに断らない限り，α,β は区間 $(0,1)$ に属する left-c.e. 実数であるとする．また，実関数に対して計算可能というとき，それはいつも計算可能解析の意味で計算可能ということにする．まず，区間 $(-\infty,\beta)$ から区間 $(-\infty,\alpha)$ への，計算可能で連続な関数はいつでも存在する．

定理 3 *[1]* 以下は同値．

1) $\alpha\leq_S\beta$

2) $\exists f:(-\infty,\beta)\to(-\infty,\alpha)$ *s.t.*

 (a) f は計算可能．

 (b) f は区間 $(-\infty,\beta)$ でリプシッツ連続．

 (c) $\{f(x):x<\beta\}$ は区間 $(-\infty,\alpha)$ で共終．

 (d) f は非減少．

5 ヘルダー連続関数に対応する還元

定義 4 *[1]* α が β に擬ソロベイ還元可能（$\alpha\leq_{qS}\beta$）であるとは，計算可能な部分関数 $f:\mathbb{Q}\to\mathbb{Q}$ と正の整数 d,ℓ が存在して，任意の $q\in\mathbb{Q}$ (*s.t.* $q<\beta$) に対して，$f(q)<\alpha$ かつ $|\alpha-f(q)|<d|\beta-q|^{1/\ell}$ となることをいう．

擬ソロベイ還元はソロベイ還元ともチューリング還元とも異なる [1].

定理 5 *[1]* 以下は同値．

1) $\alpha\leq_{qS}\beta$

2) $\exists f:(-\infty,\beta)\to(-\infty,\alpha)$ *s.t.*

 (a) f は計算可能．

 (b) f は区間 $(-\infty,\beta)$ でヘルダー連続（オーダー $\xi\leq 1$）．

 (c) $\{f(x):x<\beta\}$ は区間 $(-\infty,\alpha)$ で共終．

 (d) f は非減少．

6 エフェクティブ・ハウスドルフ次元

エフェクティブ・ハウスドルフ次元は（集合ではなく）点に対して定義される．Majordomo は，コルモゴロフ複雑性と文字列長の比の $\liminf$ を用いてエフェクティブ・ハウスドルフ次元を特徴付けた [4]．我々は以下を示した．

定理 6 （隈部，宮部，水澤，鈴木）β は *left-c.e.* 実数とする．以下は同値．

1) すべての *left-c.e.* 実数 α に対し $\alpha\leq_{qS}\beta$.

2) β のエフェクティブ・ハウスドルフ次元が正．

計算可能性理論におけるある種の還元の概念を，ある種の連続な実関数の存在として理解できることがわかった．スローガン風にまとめると**「実解析は計算可能性理論の役に立つ」**

参考文献

[1] Masahiro Kumabe, Kenshi Miyabe, Yuki Mizusawa and Toshio Suzuki. Solovay reduction and continuity, preprint, arXiv:1903.08625[math.LO] (2019).

[2] K. Weihrauch. *Computable analysis: an introduction.* Springer, New York, 2000.

[3] R.G.Downey and D.R. Hirschfeldt. *Algorithmic Randomness and Complexity.* Springer, New York, 2010.

[4] E. Mayordomo. A Kolmogorov complexity characterization of constructive Hausdorff dimension. *Inform. Process. Lett.* 84 (2002), 1 - 3.

相対的高メモリバンド幅環境における密行列固有値ソルバの実装方式について

片桐 孝洋[1]
[1]名古屋大学 情報基盤センター
e-mail: katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp

1 概要

ムーアの法則が近い将来成り立たなくなり，計算機の演算性能が一切向上しなくなると言われている．いわゆる，ポストムーア時代の到来である．現在のCPUの高性能化技術では，電力当たりの演算性能を高め，かつ，並列化することで高性能化を実現しているが，配線微細化に関する物理的限界が近づいており，演算速度向上がますます難しくなっている．

この一方で，我々は3次元積層技術などメモリ内のデータ転送能力の向上は，演算性能向上に対して相対的に向上できると予想している．この計算機環境のことを，**相対的高メモリバンド幅環境**と呼ぶ．ポストムーア時代には，相対的高メモリバンド幅環境になると仮定する場合，従来の演算性能（FLOPS）の向上に基づく計算方式から，データ移動性能（BYTES）に基づく計算方式に再構築する必要がある．すなわち，従来ソフトウェアスタックの再利用や再構築を行っていくべきである[1]．

そこで本発表では，FLOPSからBYTESへの転換を前提とし，数値計算アルゴリズムや数値計算の演算カーネルの再構築の可能性について議論する．現在普及した3次元積層技術による高バンド幅なメモリをもつ計算機に移行するとき，従来の実装方式がどのように変化するかを検証する．この際，従来技術である**自動チューニング**（Auto-tuning，以降AT）[2]は，従来実装技法からのコストの低い切り替え技術として必須となり，将来に渡り高性能計算のための必要技術の1つになると予想している．

2 ポストムーア時代の数値計算の実装方式の変革

相対的高メモリバンド幅環境において，従来の数値計算の実装方式から変革が必要となると予想する事例を以下に示す．

- **アルゴリズムを変更して BLAS3 利用している実装方式**

アルゴリズムによる数式をそのまま反映した実装よりも，BLAS3を用いた実装方式のほうが実装困難であることが多い．場合により，演算量の増加がある．（例：固有値計算アルゴリズムの一部）．これらの数値計算アルゴリズムでは，以下の変更が有効となる可能性がある．

1. **非ブロック計算の復帰**：
   BLASで定義できない複雑演算を,直接実装したほうが高速となる．
2. **Byte per Flops（B/F）> 4 以上のハードウェアでBLASインタフェース再考**：
   この環境では，DGEMM演算がそもそも不要となる．BLASで定義できない演算，例えば，三重対角化の演算カーネル：A(k) - (x_k - t_k v_k) v_k^T - v_k y_k^T を分離せず演算すると，高速となる場合がある．

ハードウェア的な変更がなされる場合もある．例えば，メモリに直接演算器を付け，DAXPY演算を行うハードウェアが実現すると，BLAS1演算が高性能化し，かつ，低レイテンシー化される．そのため，従来のBLAS3ベースの実装方式に対して高速化されるため，BLAS1インタフェースに変更する必要が生じる．

- **従来用いられていない高精度だが高 B/F なアルゴリズム**

例えば，直交化処理は数値計算アルゴリズムにおいて，もっともよく使われている処理の1つである．この直交化処理のアルゴリズムは，以下の2つがある：

1. **修正Gram-Schmidt(G-S)法**:
   数値的に安定であるが，キャッシュブロック化と並列化が困難であり，演算性能が低い．
2. **古典G-S法**：
   数値的に不安定であるが，キャッシュブロック化と並列化が容易であるため，演算効率が高い．

以上のように，直交化処理のアルゴリズムでは，修正G-S法が，より使われるようになる可

能性がある．

一方で，連立一次方程式の反復解法の前処理では，収束が安定する汎用アルゴリズムは B/F 値が高いことが多い．そのため，問題特性を利用し収束性を保ちつつ，低 B/F な実装方式が多数開発されている．この反復解法の前処理でも，現在のトレンドの実装方式から変わる可能性がある．

3　性能評価～固有値ソルバを例にして～

ここでは，密行列固有値計算アルゴリズムの例として，実対称標準固有値問題の求解ライブラリ ABCLib_DRSSED[3]を利用して，B/F 値を変化させ，性能を調査した例を示す．

計算機環境として，名古屋大学情報基盤センターが所有する Fujitsu PRIMEHPC FX100（以降，FX100）を利用する．FX100 は，利用するコア数に応じてメモリ帯域を変化させることができる．1 ソケット当たり，16 コア：B/F = 0.47，14 コア：0.543，12 コア：0.633，10 コア：0.760，および 1～8 コア：0.950，と変化させることができる．

ABCLib_DRSSED は非ブロック化 Householder 三重対角化アルゴリズムを採用しており，対称性も利用していないため，演算量が通常の方法よりも 2 倍多い．しかし，キャッシュに入るような小規模行列では，従来法よりも 2～4 倍も高速となる事例が確認されている．

図 1 に，8000 次元における ABCLib_DRSSED の全体時間に対する，16 スレッド実行（B/F=0.475）に対する速度向上をのせる．

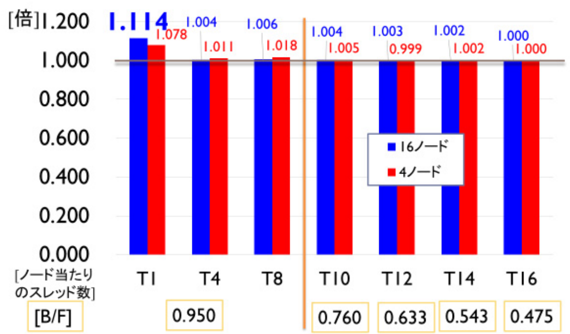


図 1.　ABCLib_DRSSED の全体時間に対する，16 スレッド実行に対する速度向上（4 ノード実行時，16 ノード実行時）

図 1 から，B/F が 0.950 に上がると，B/F が 0.475 より 1.114 倍高速化される．ブロック化アルゴリズムでは，B/F に影響せずキャッシュ性能で全体性能が決まる．そのため，B/F が変化しても性能は不変であると仮定すると，非ブロック化アルゴリズムは，B/F が高い環境で，ブロック化アルゴリズムに対して，相対的に高速化されると考えられる．そのため，高 B/F 環境では，高速な実装方式が切り替わる可能性がある．

4　おわりに

本発表では，3 次元積層技術などメモリ内のデータ転送能力の向上が，演算性能向上に対して，相対的に向上できると仮定し，ポストムーア時代には，相対的高メモリバンド幅環境になるという立場をとる．このとき，現在主要な数値計算の実装方式を変える必要があることを示した．

今後の課題として，より詳細な性能分析をして，本主張を精査していく必要がある．

謝辞　本研究の一部は，科学研究費補助金，挑戦的研究（萌芽），「ディープラーニングを利用した革新的自動チューニング基盤の創製」（課題番号：18K19782）による．

参考文献

[1] S. Matsuoka, H. Amano, K. Nakajima, K. Inoue, T. Kudoh, N. Maruyama, K. Taura, T. Iwashita, T. Katagiri, T. Hanawa, T. Endo, From FLOPS to BYTES: Disruptive Change in High-performance Computing Towards the Post-moore Era, Proceedings of the ACM International Conference on Computing Frontiers (CF16), (2016), 274-281.

[2] T. Katagiri and D. Takahashi, Japanese Auto-tuning Research: Auto-tuning Languages and FFT, Proceedings of the IEEE, Vol. 106, Issue 11, (2018), 2056-2067.

[3] T. Katagiri, K. Kise, H. Honda, T. Yuba, ABCLib_DRSSED: A parallel eigensolver with an auto-tuning facility, Parallel Computing, Vol. 32, Issue 3, (2006), 231-250.

Intel Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実現と評価

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

1 はじめに

高速 Fourier 変換（fast Fourier transform, 以下 FFT）は，科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである．これまでに提案されてきた並列三次元 FFT における典型的なデータ分散方法としては，三つの次元（x，y および z 軸）のうちの一つの次元のみ（例えば z 軸）のみが分割される．この場合，z 軸におけるデータ数は MPI プロセス数以上となる必要がある．

最近のスーパーコンピュータでは，MPI プロセス数が 1 万個を超える場合もあるが，z 軸で一次元分割を行った場合，z 軸におけるデータ点数も 1 万点を超えることになり，三次元 FFT の問題サイズに制約が生じることになる．この問題に対処する方法として，二次元分割を用いた並列三次元 FFT が提案されている [1, 2, 3]．しかし，Intel Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実装はまだ報告されていない．そこで Intel Xeon Phi クラスタにおいて二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT を実装して評価を行った．

2 二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実装

FFT は，離散 Fourier 変換（discrete Fourier transform，以下 DFT）を高速に計算するアルゴリズムとして知られている．DFT の入力データが実数の場合，DFT の共役対称性を用いることによって，2 つの n 点実数 DFT は 1 つの n 点複素 DFT を使って効率的に計算することができる．二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の提案する実装は，DFT の共役対称性および row-column FFT アルゴリズムに基づいている．

データ数 N を $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ とし，MPI プロセスが $P \times Q$ の二次元にマッピングされるとする．$P \times Q$ 個の MPI プロセスを持つ分散メモリ型並列計算機では，三次元配列 $x(N_1, N_2, N_3)$ は二番目の N_2 次元と三番目の N_3 次元に沿って分散される．N_2 が P で割り切れ，N_3 も Q で割り切れる場合，$N_1 \times (N_2/P) \times (N_3/Q)$ 個のデータが各 MPI プロセスに分散される．

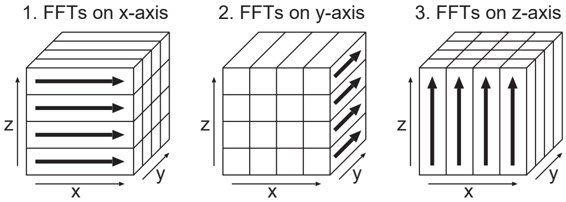


図 1. 二次元分割を用いた場合の並列三次元実数 FFT

図 1 は，y 軸と z 軸の初期データを二次元分割した並列三次元実数 FFT を示している．N_1 点実数 FFT の各出力データは，conjugate-even 対称性に従うので，$(N_1/2 + 1)$ 点の複素出力データのみを格納すれば十分である．$N_1/2$ が P (> 1) で割りきれる場合，$N_1/2 + 1$ は P で割り切れない．そのため，all-to-all 通信ではなく，all-to-allv 通信を使用して行列の転置を行う必要がある．

また，FFT カーネルは Intel Advanced Vector Extensions 512（Intel AVX-512）命令を用いてベクトル化を行った．

3 性能評価

性能評価にあたっては，提案する並列三次元実数 FFT である FFTE （version 7.0，二次元分割）の性能を FFTE（version 7.0，一次元分割），FFTW（version 3.3.8，一次元分割）[4] および P3DFFT （version 2.7.7，二次元分割）[2] と比較した．測定に際しては，weak scaling と strong scaling における実数 FFT を連続 10 回実行し，その平均の経過時間を測定した．なお，FFT の計算は倍精度実数で行い，三角関数のテーブルはあらかじめ作り置きとしている．入力と出力では同じデータ分散を使用した．FFTW では，”measure” planner を使用した．Xeon Phi クラスタとして，最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）に設置されている Oakforest-PACS（8208 ノード）の 1∼2048

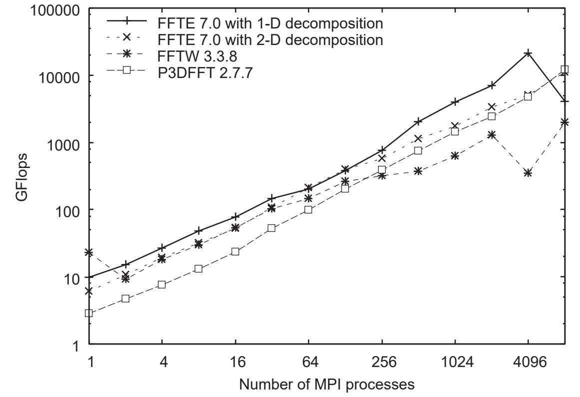


図 2. 並列三次元実数 FFT の weak scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512\times$ MPI プロセス数）

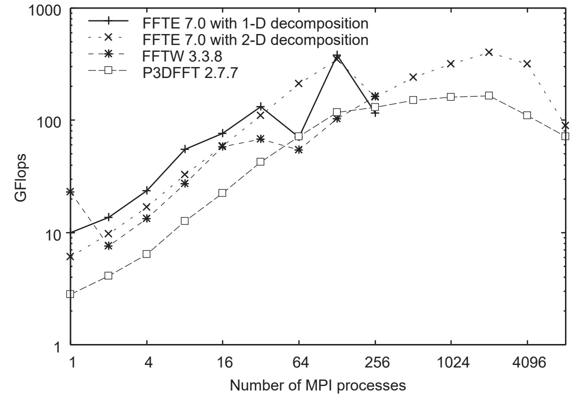


図 3. 並列三次元実数 FFT の strong scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512$）

ノードを用いた．コンパイラは FFTE および P3DFFT に対しては Intel Fortran Compiler version 18.0.1.163 を，FFTW および P3DFFT に対しては Intel C Compiler version 18.0.1.163 を用いた．コンパイルオプションは`-O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp`を指定した．MPI ライブラリは Intel MPI 2018.1.163 を用いた．各ノードあたりの MPI プロセス数は 4，各 MPI プロセスあたりのスレッド数は 64 に設定し，環境変数`KMP_AFFINITY=balanced`を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した．$N = 2^m$ 点実数 FFT の GFlops 値は $2.5N \log_2 N$ より算出している．

並列三次元実数 FFT の weak scaling 性能（$N = 256\times512\times512\times$ MPI プロセス数）を図 2 に示す．図 2 から分かるように，64，128 および 8192 MPI プロセスを除いて FFTE（一次元分割）は FFTE（二次元分割）よりも高速であることが分かる．これは，一次元分割における全体の通信量は二次元分割の約半分であるのが原因であると考えられる．また，FFTE（二次元分割）は 1 および 16 MPI プロセスを除いて FFTW よりも高速であり，8192 MPI プロセスを除いて P3DFFT よりも高速である．

並列三次元実数 FFT の strong scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512$）を図 3 に示す．図 3 から分かるように，FFTE（二次元分割）は 64 および 256MPI プロセスにおいて FFTE（一次元分割）よりも高速である．これは二次元分割の方が一次元分割よりも通信レイテンシの影響が少ないことが原因であると考えられる．また，FFTE（二次元分割）は 1 および 256 MPI プロセスにおいて FFTW よりも高速であり，P3DFFT よりも高速である．

4 まとめ

本論文では，Intel Xeon Phi クラスタにおける二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の実現と評価について述べた．二次元分割を用いた並列三次元実数 FFT の提案した実装は，DFT の共役対称性および row-column FFT アルゴリズムに基づいている．FFT カーネルは Intel AVX-512 命令を用いてベクトル化を行った．性能評価の結果，二次元分割が多数の MPI プロセスに対して通信時間を短縮することによって性能を効果的に改善することを示した．

謝辞　本研究の一部は，JSPS 科研費 19K11989 の支援によって行われた．

参考文献

[1] D. Takahashi, “An implementation of parallel 3-D FFT with 2-D decomposition on a massively parallel cluster of multi-core processors,” in *PPAM 2009, Part I*, ser. LNCS, vol. 6067. Springer, 2010, pp. 606–614.

[2] D. Pekurovsky, “P3DFFT: A framework for parallel computations of Fourier transforms in three dimensions,” *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 34, pp. C192–C209, 2012.

[3] 2DECOMP&FFT - Library for 2D Pencil Decomposition and Distributed FFTs. [Online]. Available: http://www.2decomp.org/

[4] M. Frigo and S. G. Johnson, “The design and implementation of FFTW3,” *Proc. IEEE*, vol. 93, pp. 216–231, 2005.

メニィコアクラスタ向け並列多重格子法

中島 研吾[1,2]
[1]東京大学情報基盤センター，[2]理化学研究所計算科学研究センター
e-mail：nakajima@cc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

並列多重格子法は，エクサスケールシステムにおける大規模問題向け数値解法として注目されている．著者等の提案した Hierarchical Coarse Grid Aggregation（hCGA）法は，MPI プロセス数が 10^4 以上の場合，並列多重格子法ソルバの性能を劇的に向上させるが，階層化のレベル数が 2 であるため，10^5-10^6 プロセス以上の場合には，Coarse Grid Solver による計算オーバーヘッドが顕著となる可能性がある〔1〕．本研究では，3 レベル以上の多階層を考慮できる AM-hCGA 法(Adaptive Multilevel hCGA)を提案し，Oakforest-PACS（JCAHPC）〔2〕を使用した計算例を紹介する．

2 対象アプリケーション：pGW3D-FVM

pGW3D-FVM〔1〕は有限体積法（FVM）に基づき，不均質多孔質媒体中の三次元地下水流れを解くプログラムである．問題は，透水係数が空間的に変動するポアソン方程式を所定の境界条件下で解くことに帰着される．

不均質な透水係数分布は地質統計学的手法〔3〕によって計算されている．各メッシュは各辺長さ 1 の単位立方体であり，差分格子と同様の規則的な形状である．ポアソン方程式から導かれる対称正定で疎な係数行列を有する大規模連立一次方程式は，多重格子法（Multigrid）を前処理手法とする共役勾配法（Conjugate Gradient Method preconditioned by Multigrid, MGCG）によって解かれている．8 つのメッシュから 1 つのメッシュを生成する Octree 法を採用し，V-Cycle に基づく幾何学的多重格子法（Geometric Multigrid）を適用している．ブロック Jacobi 型局所 IC（0）法を加法シュワルツ法と組み合わせた緩和演算子（smoothing operator）を各レベルにおいて適用している〔1〕．

3 hCGA 法と AM-hCGA 法

著者による先行研究〔1〕では，hCGA 法（Hierarchical Coarse Grid Aggregation）（図 1）により，MPI プロセス数が増加した場合の通信オーバーヘッド削減に成功している．図 2 は多重格子法前処理付き CG 法による不均質場ポアソン方程式の弱スケーリング計算例である．図 2 は Oakleaf-FX システム（Fujitsu PRIMEHPC FX10, SPARC IXfx）〔4〕最大 4,096 ノード（65,536 コア）を使用して，約 172 億元の連立一次方程式を解いた場合及び，Oakforest-PACS システム（Intel Xeon Phi（Knigths Landing））〔2〕，最大 8,192 ノード（524,288 コア）により最大約 354 億元の問題を解いた例である．hCGA 法の導入により従来手法と比較して高い速度向上が得られている〔1〕．並列多重格子法では，各 MPI プロセスにおけるメッシュサイズが小さくなったところで，1 プロセスに集めて更に多重格子法を継続している（Coarse Grid Solver）が，MPI プロセス数が増加すると Coarse Grid Solver が扱う問題規模が大きくなり，計算時間が増加するために図 2 の●◆のように，弱スケーリングにおいてスケーラビリティが失われる．Coarse Grid Solver を階層的に適用する hCGA（図 2 の○◆）によってある程度それは改善されているが，ノード数が増加することによって，●◆と同様の問題が生じる可能性がある．これを回避するため，階層（layer）の数を 2 より大きくすることが可能な手法（AM-hCGA (Adaptive Multilevel hCGA)）を提案する（図 3）．

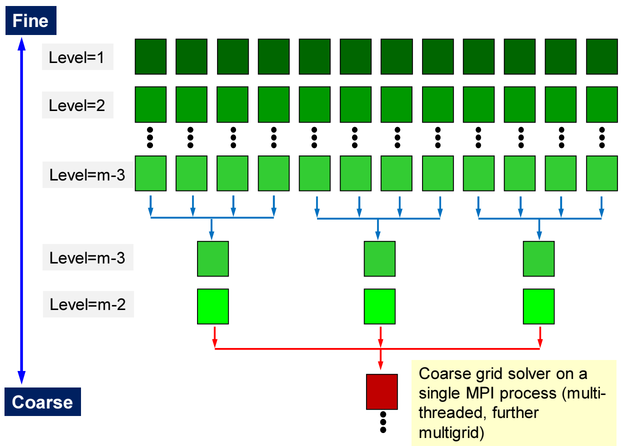


図1 hCGA法（Hierarchical Coarse Grid Aggregation）

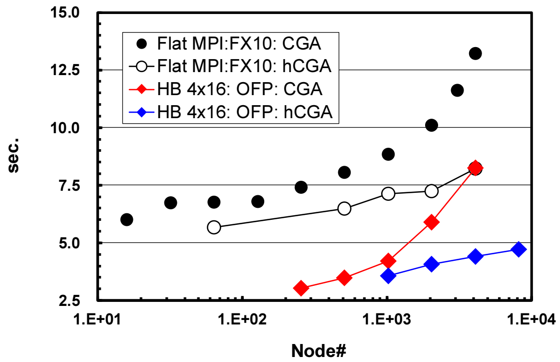


図2　並列多重格子法前処理付きCG法の弱スケーリング計算例, FX10 : Fujitsu PRIMEHPC FX10最大4,096ノード，65,536コア，最大未知数：17,179,869,184，OFP : Oakforest-PACS最大8,192ノード, 524,288コア，最大未知数：344,738,234,368

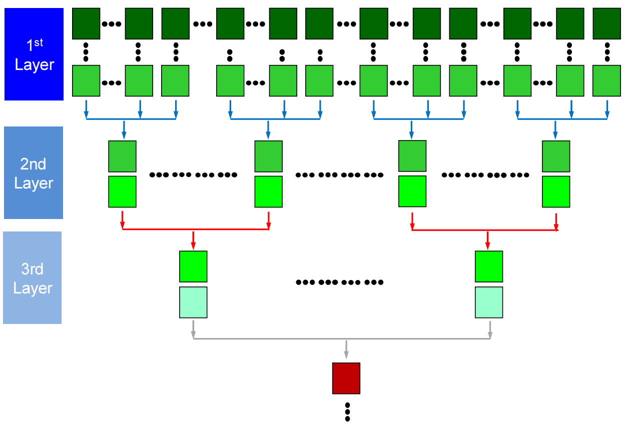


図3　AM-hCGA 法の概要(Adaptive Multilevel hCGA)

4　計算結果

OFP の 2,048 ノード（131,072 コア）までを使用して，弱スケーリングの計算を実施した．計算の概要は下記の通りである．図 4 は各ノード数（コア数）における CGA 法，hCGA 法，AM-hCGA 法の各ベストケースの MGCG 法ソルバの計算時間である．CGA 法 128 ノードの場合の計算時間で無次元化してある. hCGA 法，AM-hCGA 法は，それぞれほぼスケーリングしているが，CGA 法はノード数が 1,024 以上に増加すると，Coarse Grid Solver の負荷が増加し，2,048 ノードでは計算時間が 10 倍以上増加している．2,048 ノードでは AM-hCGA 法が hCGA 法をわずかではあるが (6.01%) 上回っている．

5　まとめ

並列多重格子法は，エクサスケールシステムにおける大規模問題向け数値解法として注目されている．本研究ではノード数が増加した場合に Coarse Grid Solver の計算負荷を軽減し，スケーラビリティを保つために，Adaptive Multilevel hCGA（AM-hCGA）を提案し，pGW3D-FVM のポアソン方程式求解部の多重格子法前処理付き共役勾配法ソルバ（MGCG）に実装し，OFP 2,048 ノード（131,072 コア）を使用して良好なスケーラビリティを得た．AM-hCGA 法は特にノード数が大きい時に効果を発揮することが示された．

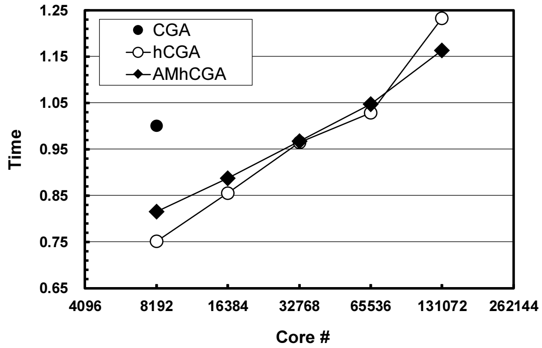


図 4　MGCG 法ソルバの計算時間（弱スケーリング）（Sliced-ELL，OFP 向け最適化済み，CGA 法 128 ノードの計算時間（MGCG 法ソルバ）で無次元化），最小 128 ノード（8,192 コア）・最大 2,048 ノード（131,072 コア），最大 1,072,741,824 自由度

謝辞　本研究の一部は、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）の支援によるものです．また Oakforest-PACS の計算資源は最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）「大規模 HPC チャレンジ」の支援を受けています．

参考文献

[1] K. Nakajima, Optimization of Serial and Parallel Communications for Parallel Geometric Multigrid Method, Proceedings of the 20th IEEE International Conference for Parallel and Distributed Systems (ICPADS 2014) 25-32, 2014

[2] Joint Center for Advanced High Performance Computing (JCAHPC): http://jcahpc.jp/

[3] Deutsch, C.V., Journel, A.G, GSLIB Geostatistical Software Library and User's Guide, Second Edition. Oxford University Press, 1998

[4] 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/

倍精度と単精度を用いた混合精度 GMRES(m) 法の収束性に関する実験的評価

深谷 猛[1], グドール 聖哉[1], 張 臨傑[2], 岩下 武史[1]
[1] 北海道大学，[2] 中国海洋大学
e-mail : fukaya@iic.hokudai.ac.jp

1 はじめに

近年，計算速度や消費電力の優位性から，低精度演算の積極的な活用が注目されており，連立一次方程式に対して，反復改良法に基づいた研究が活発に行われている [1, 2]．本発表では，代表的なクリロフ部分空間反復法であるリスタート付き GMRES 法（GMRES(m) 法）に対して，混合精度演算を適用した場合の収束性を実験的に評価した結果を報告する．

2 混合精度を用いた GMRES(m) 法

GMRES(m) 法は，一般（非対称）の疎行列を係数とする連立一次方程式に対するクリロフ部分空間法の一つである GMRES 法に「リスタート」と呼ばれる手法を適用した解法である．今倉らの論文 [3] において，GMRES(m) 法は Algorithm 1 のように解釈でき，更に，2 行目の部分は $\boldsymbol{e}$ に関する連立一次方程式

$$A\boldsymbol{e} = \boldsymbol{r}_0, \quad \boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0, \tag{1}$$

を初期近似解 $\boldsymbol{e}_0 = \boldsymbol{0}$ とした m 反復の GMRES 法で解く場合と等価であることが示されている．式 (1) は，反復改良法における誤差方程式そのものであり，これより，GMRES(m) 法と反復改良法が本質的に同じ構造を有していることが分かる．

上述の事実より，混合精度版 GMRES(m) 法のアルゴリズムを Algorithm 2 のように導出できる．ここで，(L) が右肩に付いた変数は低精度で保持されるデータであり，Lower($\cdot$), Higher($\cdot$) はそれぞれ低精度，高精度へデータを変換する（C 言語におけるキャストに相当する）処理である．Algorithm 2 では，各内部反復の初期残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0$ は高精度で計算し，その後の計算（Arnoldi 過程や最小化の計算）は低精度で行う．

Algorithm 1 GMRES(m)

Input: An initial guess $\boldsymbol{x}_0$

1: **repeat**
2: Solve (approximately) $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ by m iterations of GMRES with the initial guess $\boldsymbol{x}_0$, and find the solution $\boldsymbol{x}_m$.
3: $\boldsymbol{x}_0 := \boldsymbol{x}_m$.
4: **until** attain the required accuracy (or the maximum iteration number)

Output: $\boldsymbol{x}_0$

Algorithm 2 Mixed precision GMRES(m)

Input: An initial guess $\boldsymbol{x}_0$

1: $A^{(\mathrm{L})} := \mathrm{Lower}(A)$
2: **repeat**
3: $\boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$
4: $\beta := \|\boldsymbol{r}_0\|_2$
5: $\boldsymbol{v}_0^{(\mathrm{L})} := \mathrm{Lower}(\boldsymbol{r}_0/\beta)$
6: $\beta^{(\mathrm{L})} := \mathrm{Lower}(\beta)$
7: Compute m-step Arnoldi process in lower precision with $A^{(\mathrm{L})}$ and $\boldsymbol{v}_0^{(\mathrm{L})}$, and get $V_m^{(\mathrm{L})}$ and $\bar{H}_m^{(\mathrm{L})}$.
8: Compute $\boldsymbol{y}_m^{(\mathrm{L})}$ in lower precision from $\beta^{(\mathrm{L})}$ and $\bar{H}_m^{(\mathrm{L})}$.
9: $\boldsymbol{e}_m^{(\mathrm{L})} := V_m^{(\mathrm{L})}\boldsymbol{y}_m^{(\mathrm{L})}$
10: $\boldsymbol{x}_0 := \boldsymbol{x}_0 + \mathrm{Higher}(\boldsymbol{e}_m^{(\mathrm{L})})$
11: **until** attain the required accuracy (or the maximum iteration number)

Output: $\boldsymbol{x}_0$

3 収束性に関する数値実験

Algorithm 2 に示したアルゴリズムと本質的に同じアルゴリズムが文献 [4, 5] 等において既に示されており，初期の GPU 環境における有用性も報告されているが，一方で，混合精度にした場合の収束性については十分な報告がされていない．そこで，フロリダ大学の疎行列データベース（SuiteSparse Matrix Collection）で提供されている疎行列の中から，条件数が既知である行列を対象に，倍精度のみを用いる GMRES(m) 法と混合精度（倍精度と単精度）を用いる GMRES(m) 法の収束性を比較する実験を行った．

表 1. GMRES(m) 法の収束性に関する実験結果：収束までに要した内部反復回数の合計を記載．($m = 100$，$\boldsymbol{b} = (1, 1, \ldots, 1)^\top$，開始時：$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，収束判定：近似解の相対残差ノルムが 10^{-12} 以下，もしくは内部反復回数が合計で 5 万回．収束しなかった場合は括弧付きで最大反復回数到達時の近似解の相対残差ノルムを記載．)

条件数	行列名	n	非ゼロ要素数	倍精度のみ	混合精度
$O(10^2)$	FEM_3D_thermal1	17,880	430,740	344	344
	Zhao1	33,861	166,453	53	210
	ns3Da	20,414	1,679,599	2,438	2,444
$O(10^3)$	poisson3Da	13,514	352,762	310	326
	epb1	14,734	95,053	2,164	2,185
	light_in_tissue	29,282	406,084	1,095	1,096
$O(10^4)$	coupled	11,341	97,198	15,700	11,900
	Zhao2	33,861	166,453	4,589	4,500
	waveguide3D	21,036	303,468	(1.9×10^{-5})	(2.2×10^{-5})
$O(10^5)$	memplus	17,758	99,147	3,787	3,776
	wang4	26,068	177,196	(9.8×10^{-1})	(9.8×10^{-1})
	viscoplastic2	32,769	381,326	2,473	2,448
$O(10^6)$	inlet	11,730	328,323	(9.7×10^{-1})	(9.7×10^{-1})
	airfoil_2d	14,214	259,688	(3.0×10^{-9})	(3.0×10^{-3})
	chipcool1	20,082	281,150	(1.2×10^{-3})	(3.2×10^{-6})
$O(10^7)$	garon2	13,535	373,235	(7.5×10^{-2})	(7.5×10^{-2})
	sme3Da	12,504	874,887	(2.0×10^{-1})	(1.9×10^{-1})
	TSOPF_RS_b39_c7	14,098	252,446	(7.1×10^{-1})	(7.1×10^{-1})

2 種類の手法の収束性（収束までに要した内部反復回数の総数）の実験結果を表 1 に示す．表 1 の結果より，今回対象とした係数行列に関しては，2 種類の手法の収束性は似た傾向を示している．つまり，倍精度のみの場合で収束する問題であれば，混合精度にしても収束することが期待できる，という可能性が示唆された．より詳しい実験結果等は，当日の発表で報告する予定である．

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費（課題番号：19H04122，19H05662），学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点，および，革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（課題番号：jh190042-NAH）の支援を受けている．

参考文献

[1] E. Carson and N. Higham, Accelerating the Solution of Linear Systems by Iterative Refinement in Three Precisions, SIAM J. Sci. Comp., Vol. 40 (2018), A817–A847.

[2] A. Haidar, S. Tomov, J. Dongarra, and N. Higham, Harnessing GPU Tensor Cores for Fast FP16 Arithmetic to Speed Up Mixed-Precision Iterative Refinement Solvers, in: Proc. of SC'18, pp. 47:1–47:11, 2018.

[3] 今倉暁，曽我部知広，張紹良，GMRES(m) 法のリスタートについて，日本応用数理学会論文誌，Vol. 19 (2009), 551–561.

[4] D. Göddeke, R. Strzodka, and S. Turek, : Performance and Accuracy of Hardware-Oriented Native-,Emulated- and Mixed-Precision Solvers in FEM Simulations, Int. J. Parallel Emergent Distrib. Syst., Vol. 22 (2007), 221–256.

[5] H. Anzt, V. Heuveline, and B. Rocker, An Error Correction Solver for Linear Systems: Evaluation of Mixed Precision Implementations, Lect. Notes Comput. Sci., Vol. 6449 (2011), 58–70.

Lean を用いた単一削除符号の形式化に向けて

近藤 裕樹 [1], 萩原 学 [2]
[1] 千葉大学大学院融合理工学府，[2] 千葉大学大学院理学研究院
e-mail : ayaa5493@chiba-u.jp

1 はじめに

符号理論は，誤りを訂正できる系列の集合，いわゆる良い符号の構成を目的とする理論である．良い符号の構成には，符号化や誤り訂正などに計算量の低いアルゴリズムを要求する場合もあり，計算機科学的側面も存在する．符号理論の数学理論や計算機科学的側面に対し，形式化を行う既存研究が存在する [1, 2].

著者らは，最近の符号理論で注目されている“削除符号” の形式化に取り組んでいる．本稿で述べるのは，削除符号の特別な場合である “単一削除符号” である．

単一削除符号とは，“単一削除誤り” (系列 $x_1 \dots x_n$ のシンボルが 1 つなくなり，長さが 1 短くなる誤り) に対し，復号可能な符号である．つまり，i 番目 ($1 \leq i \leq n$) のシンボルがなくなり，$x_1 \dots x_{i-1}x_{i+1} \dots x_n$ へと変わったとき，復号して元の系列に戻せる符号である．

単一削除符号には様々なものがある．本稿では最も著名な Levenshtein 符号の形式化及び，復号アルゴリズム [3] の形式化について論じる．

なお，本研究の形式化には定理証明支援系 Lean を用いた [4].

2 Levenshtein 符号

以下，$\mathbb{N}$ を 0 以上の整数からなる集合，B_2 を整数の 0,1 からなる集合とする．

本研究の形式化対象である Levenshtein 符号を次で定義する．

定義 1 正整数 n，整数 a, m (ただし $n+1 \leq m$) に対し，集合 $L_{a,m}(n)$ を次のように定義する．

$$L_{a,m}(n) = \{X \in {B_2}^n \mid \rho X \equiv a \pmod m\}$$

ただし，ρ はモーメントとよばれる関数であり，$\rho X = \sum_{i=1}^{n} ix_i$ を表す．集合 $L_{a,m}(n)$ を *Levenshtein* 符号という．

上記定義に対し次のように形式化を行った．

```
def moment : list B2 → ℕ
| [ ] := 0
| (x::X) := moment X + num_Is (x::X)
```

```
notation ‘ρ‘ X := moment X
```

```
def LevCode (n a m : ℕ) :=
{X : list B2 | length X = n ∧
    (ρ X) % m = a % m ∧ n + 1 ≤ m}
```

Lean では，定義の形式化を行う際，コマンド “def” を用いる．コマンドの後に，名前及び，言明を記載することで定義の形式化が行える．(定理に関してもコマンド “theorem” を用いて，同様に行える．) また，記法の導入にはコマンド “notation” を用いる．コマンドの後に，記法と言明を記載することで記法を用いることが可能となる．以上をもとにソースコードを確認すると，モーメント及び，Levenshtein 符号の定義 (def moment, def LevCode)．また，記法 ρ X の導入 (notation ρ X) を行っていることが確認できる．

モーメントは，系列 (list) に対し次のように定義した．Lean では，系列が [ ]（空列），x::X（系列 X の先頭に x を付け加えたもの）の 2 つから帰納的に構成されている．それぞれに対し，0，ρ X + num_Is (x::X) を対応させる関数としてモーメントを定義した．なお，num_Is (x::X) は系列 x::X 中の 1 の個数を表す．この定義では，num_Is (x::X) を繰り返し加える (x_i には i 回 num_Is が適用される）ことで，ix_i を表現している．このように定義することで，モーメントを紐解いたときに帰納法を適用しやすいという利点がある．

Levenshtein 符号の定義は，定義 1 を Lean で扱える形にしたものである．先ほど述べたように，Lean では，系列が [ ]，x::X により帰納的に定義されているため，定義 1 の $X \in {B_2}^n$ をそのまま表すことはできない．そのため，系列の長さを返す写像 length を用い，length X = n とした．また，合同式に関しては，剰余が同じであることを用いて，剰余を返す写像%を用い，(ρ X) % m = a % m とした．

3 復号アルゴリズムの形式化

次が [3] で考案されたアルゴリズムである．

Algorithm 1
Levenshtein の復号アルゴリズム [3]

Input: $n, a, m \in \mathbb{N}, 1 \leq n, Y \in {B_2}^{n-1}$

$$wt(Y) := \begin{cases} 0 & n-1=0 \\ \sum_{i=1}^{n-1} y_i & \text{上記以外} \end{cases}$$

$r := a - \rho Y$ を m で割った剰余
if $r \leq wt(Y)$ **then**
  $\tilde{i} := \max\{1 \leq j \leq n \mid R_1(j, I_{j,0}(Y)) = r\}$
  return $I_{\tilde{i},0}(Y)$
else
  $\tilde{i} := \min\{1 \leq j \leq n \mid L_0(j, I_{j,1}(Y)) = r - wt(Y) - 1\}$
  return $I_{\tilde{i},1}(Y)$
end if

ただし, アルゴリズム中の $I_{j,0}(Y), I_{j,1}(Y)$ はそれぞれ系列 Y の j 番目に 0,1 を挿入する操作, $R_1(j, I_{j,0}(Y)), L_0(j, I_{j,1}(Y))$ はそれぞれ $I_{j,0}(Y)$ の j 番目より右側の 1 の個数，$I_{j,0}(y)$ の j 番目より左側の 0 の個数を表す．

復号アルゴリズムの形式化を以下のファイルで構成した．インポートする順に紹介すると，1) NatLemmas.lean, 2) Subsequence.lean, 3) InsDel.lean, 4) B2.lean, 5) NumOsNumIs.lean, 6) Moment.lean, 7) SubMod.lean, 8) LevenshteinCode.lean であり，ファイルは全て [5] より手に入れることができる．

Subsequence.lean と InsDel.lean は [2] にて作成されたファイルを拡張したものである．一方, 他ファイルは本研究のために構築した．

以下，形式化の結果を紹介する．

```
def decoding_alg (n a m : ℕ) (Y : list B2) :=
if n = length Y then Y
else if sub_mod a Y m ≤ num_Is Y
    then sIns Y (max_num_RIs Y (sub_mod
        a Y m)) O
    else sIns Y (min_num_LOs Y ((sub_mod
        a Y m) − num_Is Y − 1)) I
```

定義中の条件 n = length Y は削除が起きなかった場合を表し，その場合元の系列を返すこととした．また，sub_mod，sIns Y (max_num_RIs Y (sub_mod a Y m)) O，sIns Y (min_num_LOs Y ((sub_mod a Y m) - num_Is Y - 1)) I は, それぞれアルゴリズム中の r，$I_{\tilde{i},0}(Y)$，$I_{\tilde{i},1}(Y)$ に対応する．

また，このアルゴリズムが正しく機能することを次の定理で示した．

```
theorem sDelErr_correctable
{n a m i : ℕ} {X Y : list B2}
(H1 : X ∈ LevCode n a m)
(H2 : Y = sDel X i) :
    decoding_alg a m n Y = X :=
```

ただし，sDel X i は系列 X の i 番目のシンボルの削除を表す．

この定理より，符号語 X ∈ LevCode n a m に単一削除が生じ，系列 Y = sDel X i へと変わったとき，復号アルゴリズム decoding_alg n a m Y を行い，符号語 X に戻すことができる．つまり，アルゴリズムが正しく機能すること及び，Levenshtein 符号が単一削除符号であることを形式化した．

4 まとめ

本稿では，Levenshtein 符号の形式化及び，復号アルゴリズム [3] の形式化を行った．この形式化により，復号アルゴリズムが正しく機能することを検証した．

今後の課題として，Levenshtein 符号に関する形式化を発展させたり，他の符号の形式化に取り組む．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18H01435 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M. Hagiwara, K. Nakano, J. Kong, Formalization of Coding Theory using Lean, *Proc. of ISITA2016*, pp.522–526.

[2] J. Kong, D. J. Webb, M. Hagiwara, Formalization of Insertion/Deletion Codes and the Levenshtein Metric in Lean, *Proc. of ISITA2018*, pp.11–15.

[3] N. J. A. Sloane, On Single-Deletion-Correcting Codes, *Codes and Designs*, vol.10(2002), pp.273–291.

[4] LEAN THEOREM PROVER Microsoft Research, `https://leanprover.github.io`.

[5] `http://manau.jp/Lean/cotoleta/`

Mizar による離散確率分布の統計的識別不能性の形式化

岡崎 裕之 [1], 布田 裕一 [2], 師玉 康成 [1]
[1] 信州大学，[2] 東京工科大学
e-mail : okazaki@cs.shinshu-u.ac.jp

1 概要

発表者らは暗号の安全性証明の形式検証についての研究を進めている．本発表では確率分布の統計的な同一性の判定方法であるコルモゴロフ-スミルノフ検定 (KS 検定)[1] の形式化を定理証明システム Mizar[2] を用いて行うことで，統計的識別不能性 [3] を形式化する方針について報告する．

2 離散確率分布の形式化

発表者らは定理証明システム Mizar を用いて離散確率分布に関する形式化について過去に発表を行ってきた [4]．離散確率分布を，同じ確率体積関数 (離散確率密度関数) に基づく確率変数の集合として，確率変数を有限列として形式化を行った．以下は集合 S の有限列 s を離散確率変数としたときの確率体積関数 `FDprobability` の形式定義である．ただし，`S*` は集合 `S` の有限列全体の集合，`s"X` は `X` に対する `s` の逆像, すなわち `s.i` $\in$ `X` であるような `i` の集合，`len(s)` は `s` の長さである．

定義 1（`DIST_1:def 2`）

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

しかし，ただ一つの確率体積関数に基づく確率変数のみを，同一の離散確率分布の要素として定義していたため，暗号理論をはじめ実際の確率事象を扱う上では実用的ではなかった．そこで統計的に識別不能な確率変数の集合を確率分布として扱う事にした．確率変数間になんらかの距離を導入し，その距離が無視出来るほど小さい場合にそれら 2 つの確率変数は統計的識別不能であると形式定義することにした．

3 無視可能関数の形式化

本節では Mizar による無視可能関数 (negligible function)[3] の形式化を紹介する [5, 6]．

定義 2（`ASYMPT_3:def 4`）

```
definition
 let f be Function of NAT,REAL;
  attr f is negligible means
  for c be non empty positive-yielding
      XFinSequence of REAL holds
  ex N be Nat st
  for x be Nat st N <=x holds
  |. f.x .| < 1/((seq_p(c)).x);
end;
```

4 統計的識別不能性の形式化

2 節および 3 節で発表者等が識別不能性の形式化の為に行ってきた確率分布，無視可能関数の形式化の概要を紹介した．暗号理論でよく知られた識別不能性の定義は [3] 等にあるように，“2 つの確率変数を識別出来る確率が無視できるほど小さいときに識別不能” というように，具体的にどのように識別するのかのフォーマルな定義が与えられていない．なお，無条件で識別不能である場合を統計的識別不能，任意の確率的多項式時間判定器によって識別不能である場合を計算量的識別不能と言う．

そこで発表者等は確率変数間に距離を導入し，その距離が無視できるほど小さい時に統計的識別不能であると形式定義することにした．どのような距離を採用したところで，無視可能関数で上から抑えるので，距離の差は定数倍のオーダーに収まると予想されるが，出来るだけ妥当な距離を用いることが望ましい．そこで，統計学における仮説検定の手法に基づいて形式化を行うことにした．有名な χ^2 検定などでは検定対象の母集団に関する仮定を置いてるために，母集団に関する仮定を必要としないノンパラメトリック検定を用いることにした．ノンパラメトリック検定の一つである KS 検定は 2 標本が同じ母集団から観測されたか否かを判定する検定方式である．すなわちこれは本研究の目的と

する確率変数の識別を行う検定方法に他ならない．そこで本研究では統計的識別不能性の形式定義を行うために，確率変数間に導入する距離としてKS検定の統計量であるd値を用いることにした．

4.1 Mizarによる2標本KS検定形式化

本節ではMizarによる2標本KS検定の形式化方針を紹介する．KS検定の形式化は本研究の目的である暗号理論のみならず他の目的にも利用されると予想する．そこでまずは統計分野で一般的に用いられる，実数値標本（確率変数）に対するKS検定の標本値についての形式定義を以下のように行った．

定義 3 `definition`

```
let X,Y be non empty FinSequence of REAL;
   func KS_p(X,Y)-> Real   means
    ex D be non empty bounded_above
    Subset of REAL st D
   = the set of all |.(Cumulative(X)).x
                  - (Cumulative(Y)).x.|
       where x is Element of REAL
    & it = upper_bound  D;
end;
```

ただし，Cumulative(X)は標本Xの累積確率体積関数であり，標本値$\mathtt{KS_p}(\mathtt{X},\mathtt{Y})$は2標本X, Yの累積確率体積関数間の差の絶対値の上限を意味する．

しかし[4]では，任意の有限集合の要素についての確率変数を取り扱うように形式化している．そこで定義.3をもとに任意の有限集合の確率変数に対する2標本KS検定の形式化を以下のように行った．

定義 4 `definition`

```
let S be non empty finite set;
let s,t be non empty FinSequence of S;
    func KS_p(s,t)-> Real means
ex X,Y be non empty FinSequence of REAL
    st X = (canFS S)"*s &
        Y = (canFS S)"*t &
        it = KS_p(X,Y);
end;
```

ここで，canFS Sは有限集合Sの各要素を順序付けする固有の有限列であり，(canFS S)″はその逆写像，(canFS S)″ ∗ sはSの有限列sと(canFS S)″の合成写像となる．したがって，(canFS S)″ ∗ sはcanFS Sの添え字集合，すなわち自然数の有限列，実数値列となるので定義.3を利用して2標本KS検定の標本値を定義することが出来る．なお，紙幅の都合で本稿では省略したが1標本KS検定の形式化も行った．

5 まとめ

Mizarによる統計的識別不能性の形式化方針を紹介した．確率変数間に距離を導入しその距離が無視可能である場合を統計的識別不能と形式定義することとした．確率変数間の距離はKS検定の標本値d値を用いて定義するものとした．さらにMizarによるd値の形式定義を紹介した．しかしd値はあくまでKS検定の統計量であり，KS検定の有意確率はd値を用いたコンピュータによる計算アルゴリズムや近似式として与えられることが多い．そのため，確率変数間の具体的な距離の定義をどうするかについて現在検討を行っている．

謝辞 本研究の一部はJSPS科研費JP17K00182, JP18K02917の助成を受けたものです．

参考文献

[1] J.Durbin, Distribution theory for tests based on the sample distribution function. Society for Industrial and Applied Mathematics,1973.

[2] Mizar System: http://mizar.org/.

[3] O. Goldreich, “Foundations of Cryptography: Volume 1 Basic Tools”, Cambridge University Press, 2001.

[4] H. Okazaki, Y. Futa, Y. Shidama, “Formal definition of probability on finite and discrete sample space for proving security of cryptographic systems using Mizar”, Artificial Intelligence Research, 2(4), pp.37-48, 2013.

[5] 岡崎　裕之,　布田　裕一, “Negligibleの形式定義に関する考察”, 2014年 暗号と情報セキュリティシンポジウム , 3C5-5, 2014.

[6] H. Okazaki, “Algebra of Polynomially Bounded Sequences and Negligible Functions”, Formalized Mathematics, 23(4), pp.371-378, 2015.

状態の更新を含むプロトコルの形式化の検討

野口 凌雅 [1], 花谷 嘉一 [2], 米山 一樹 [1]
[1] 茨城大学，[2] 株式会社東芝
e-mail : 19nm725f@vc.ibaraki.ac.jp

1 概要

SCIS2019 において，IEEE 802.21 におけるグループ鍵管理手法について，形式手法を用いた自動検証ツール ProVerif [1] を用いて安全性検証を行った。しかし，ProVerif はプロセスをまたいだ状態保持の形式化をサポートしていないため，状態の更新を含むリプレイ攻撃対策の検証は行えなかった。本発表では，状態の更新を含むプロトコルに対するリプレイ攻撃の形式化の検討を行う。

2 形式化の検討

状態の更新を含むプロトコルの injective な対応関係（リプレイ攻撃の有無）を検証する形式化を，ProVerif 及び StatVerif [2] を用いて，以下の 3 つの方法により検討する。StatVerif は ProVerif を拡張し，プロセスをまたいだグローバル状態の形式化をサポートした形式検証ツールである。

2.1 ProVerif の table 機能を用いた方法

ProVerif の table は、プロセスごとに情報を蓄積することが可能である。以下のような簡単な例を考える。

1) A と B は秘密情報 s を事前に共有している。
2) B は A に s を送信する。
3) A は受信した s が自身の table に登録されていなければ登録する。

A が s を table に登録するのは一度きりのため，リプレイ攻撃は存在しないはずである (injective な対応関係は true）。この例について ProVerif を用いて記述したコードを以下に示す。

```
free c:channel.
free s:bitstring[private].
table t(bitstring).
event eA(bitstring).
event eB(bitstring).
query x:bitstring; inj-event(eA(x
   )) ==> inj-event(eB(x)).

let A(s:bitstring) =
     in(c, x:bitstring);
     if x = s then (
         get t(=s) in 0
         else (
              insert t(x);
              event eA(x))).

let B(s:bitstring) =
  event eB(s);
  out(c, s).

process
  (!A(s) | !B(s))
```

検証結果は，‘*false* ’となった。理由としては，table の状態による分岐判定がうまくいっておらず，同じ分岐を誤って二回検知してしまっているためと考えられる。よって，ProVerif の table 機能では、状態の更新による分岐を検証することはできない。

2.2 StatVerif の state を用いた方法

StatVerif は、グローバルな状態を state として保持することが可能である。以下のような簡単な例を考える。

1) A と B は秘密情報 s を事前に共有している。
2) B は A に s を送信する。
3) A は s を受信し，自身の state が false なら true に書き換える。

A が state の書き換えを行うのは一度きりのため，リプレイ攻撃は存在しないはずである (injective な対応関係は true）。この例について StatVerif を用いて記述したコードを以下に示す。

```
free c:channel.
```

```
free s:bitstring[private].
cell state := false.
event eA(bitstring).
event eB(bitstring).
query x:bitstring; inj-event(eA(x
    )) ==> inj-event(eB(x)).

let A(s:bitstring) =
    lock(state);
    in(c, x:bitstring);
    read state as st;
    if x = s then (
        if st then unlock(state)
        else (
            state := true;
            event eA(x);
            unlock(state))).

let B(s:bitstring) =
  event eB(s);
  out(c, s).

process
  (!A(s) | !B(s))
```

検証結果は，'*cannot be proved* 'となった。ProVerifのように，誤った攻撃手順を発見することはなかったが，injectiveな対応関係を証明することもできていない。

2.3 到達可能性によりリプレイ攻撃の有無を検証する方法

正規のプロセスを明示的に複数回（主に2回）記述し，その到達可能性を調べることで，リプレイ攻撃の有無を検証することができる。2.2の例について，2回プロセスを記述し，2回目のeventの到達可能性について検証したコードを以下に示す。

```
free c:channel.
free s:bitstring[private].
event eA2(bitstring).
cell state := false.
query event(eA2(s)).

let A(s:bitstring) =
    in(c, x1:bitstring);
    if x1 = s then (
        state := true;
        event eA1(x1);

        in(c, x2:bitstring);
        lock(state);
        read state as st;
        if x2 = s then (
            if st then 0
            else (
                event eA2(x2);
                unlock(state))
        ) else unlock(state)
    ) else unlock(state).

let B(s:bitstring) =
  out(c, s).

process
  (!A(s) | B(s))
```

検証結果は，'*true* 'となった。つまり、2回目のeventは起きない，すなわちリプレイ攻撃が存在しないことを示すことができた。ProVerifでもtableを用いずに、プロセスを明示的に複数回記述することで，リプレイ攻撃の有無を検証することができる。

3 まとめ

ProVerif及びStatVerifを用いて，状態の更新を含むプロトコルを形式化し，injectiveな対応関係の認証性を検証する検討を行った。ProVerifやStatVerifのinjectiveな対応関係を用いて検証することはできなかったため，現状では明示的にリプレイ攻撃の条件を記述して検証するしかない。今後，状態の更新を含むプロトコルのinjectiveな対応関係の認証性を検証できる形式検証ツールの調査を行っていきたい。

参考文献

[1] B.Blanchet,B.Smyth,V.Cheval,M.Sylvestre, "ProVerif 2.00.", http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif

[2] Mark Ryan,Myrto Arapinis,Eike Ritter, "StatVerif: Verification of stateful processes," https://markryan.eu/research/statverif/

Stochastic Modelling with Randomised Markov Bridges

関根 順 †, Andrea Macrina‡
† 大阪大学大学院基礎工学研究科, ‡University College London
e-mail : †sekine@sigmath.es.osaka-u.ac.jp, ‡a.macrina@ucl.ac.uk

1 序

$E \subset \mathbb{R}^n$ を状態空間, $T \in (0,\infty)$ を終端時刻とし

$$Y_0^{(y,T,z)} = y, \quad Y_T^{(y,T,z)} = z$$

を満たす E-値 (y,T,z)-マルコフ橋 (Markov Bridge: MB) $Y^{(y,T,z)} := (Y_t^{(y,T,z)})_{t\in[0,T]}$ を考える．また $Y^{(y,T,z)}$ と独立な E-値確率変数 X を与え

$$Z := Y^{(y,T,X)},$$

と定義し, これをランダムマルコフ橋 (Randomised Markov bridge: RMB) と呼ぶことにする．我々は, Z を隠れた確率変数 X のノイズ付き観測と見なし (最終時刻 T においては, 橋過程 $Y^{(y,T,z)}$ のノイズが消滅し $X(= Z_T)$ が観測される), フィルタリングの計算に興味を持つ：すなわち, フィルトレーション (情報系)

$$\mathcal{F}_t^Z := \sigma(Z_s; s \in [0,t]), \quad t \in [0,T]$$

に関して, 条件付確率

$$\pi_t(dx) := \mathbb{P}\left(X \in dx | \mathcal{F}_t^Z\right),$$

$(t \in [0,T))$ や条件付期待値

$$\pi_t(f) := \mathbb{E}\left[f(X)|\mathcal{F}_t^Z\right] = \int_E f(x)\pi_t(dx),$$

$(t \in [0,T))$ の計算を行うことを考える．この問題は, 数理ファイナンス分野のモデリングとして [1], [2], [3] などで調べられてきた研究の一般化と捉えられる：これらの研究の中では, ブラウン橋やレヴィ橋が MB として用いられ, RMB は情報過程と呼ばれており, $f(X)$ が金融商品の満期 T で支払われるキャッシュフローを表しており,

$$S_t := \mathrm{e}^{-r(T-t)}\pi_t(f) = \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{-r(T-t)}f(X) \,\middle|\, \mathcal{F}_t^Z\right]$$

$(t \in [0,T))$ でこの金融商品の価格過程が与えられる．ただし $r \geq 0$ は無リスク金利を表し $\mathbb{P}$ はリスク中立確率である．

2 RMB の構成

E-値強マルコフ過程 $Y := (Y_t)_{t\in[0,T]}$ を道空間上の正準確率空間 $(\Omega_T^1, \mathcal{F}_T, \tilde{\mathbb{P}}^1)$ 上で考える．$\tilde{\mathbb{P}}_y^1(\cdot) := \tilde{\mathbb{P}}^1(\cdot|Y_0 = y)$ とし, Y から生成されるフィルトレーションを $(\mathcal{F}_t^1)_{t\in[0,T]}$ と記す．また

$$\begin{aligned}\tilde{P}_t(x,dy) :=& \tilde{\mathbb{P}}_x^1(X_t \in dy)\\ =& \tilde{p}_t(x,y)m(dy)\end{aligned}$$

を満たす推移確率密度が存在するとする (m は E 上 σ-有限測度). $\tilde{p}_t(x,y) > 0$ $^\forall(t,x,y) \in (0,T] \times E \times E$ や Y に関するある種の条件を仮定すると, Y を基にした (y,T,z)-MB が $(\Omega_T^1, \mathcal{F}_{T-}, \mathbb{P}_y^1)$ 上に構成されることが知られている．ただし

$$d\mathbb{P}_y^1|_{\mathcal{F}_t^1} = \frac{\tilde{p}_{T-t}(Y_t,z)}{\tilde{p}_T(y,z)} d\tilde{\mathbb{P}}_y^1|_{\mathcal{F}_t^1}.$$

次に, 確率空間 $(\Omega_2, \mathcal{F}_2, \mathbb{P}_2)$ 上に確率変数 X を与え, X の分布を $\nu := \mathbb{P}_2 \circ X^{-1}$ と記す．このとき, $\Omega := \Omega_T^1 \times \Omega_2$, $\mathcal{F}_t := \mathcal{F}_t^1 \otimes \mathcal{F}_2$, $\mathcal{F}_{T-} = \mathcal{F}_{T-}^1 \otimes \mathcal{F}_2$ とし, $\mathbb{P}_y := \mathbb{P}_y^1 \otimes \mathbb{P}_2$ を

$$\begin{aligned}&d\mathbb{P}_y(\omega_1,\omega_2)\,\big|_{\mathcal{F}_t}\\ :=& \frac{\tilde{p}_{T-t}\left(Y_t(\omega_1), X(\omega_2)\right)}{\tilde{p}_T(y, X(\omega_2))} d\tilde{\mathbb{P}}_y^1(\omega_1) \otimes d\mathbb{P}_2(\omega_2)\,\big|_{\mathcal{F}_t}\end{aligned}$$

と定めて $(\Omega, \mathcal{F}_{T-}, \mathbb{P}_y, (\mathcal{F}_t)_{t\in[0,T)})$ 上に RMB を

$$\begin{aligned}Z_t(\omega_1,\omega_2) :=& Y_t(\omega_1) \quad \text{for } t \in [0,T),\\ Z_T(\omega_1,\omega_2) :=& X(\omega_2)\end{aligned}$$

と構成できる．

3 結果

命題 1. $t \in [0,T)$ に対して以下が成立.

$$\pi_t(dz) = \frac{\dfrac{\tilde{p}_{T-t}(Z_t,z)}{\tilde{p}_T(Z_0,z)}\nu(dz)}{\displaystyle\int_E \frac{\tilde{p}_{T-t}(Z_t,z')}{\tilde{p}_T(Z_0,z')}\nu(dz')}.$$

命題 2. $0 \leq s < t < T$ に対して

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(Z_t \in dy|\mathcal{F}_s^Z\right) =& \mathbb{P}\left(Z_t \in dy|Z_s, Z_0\right)\\ =:& P_{s,t}(Z_s, dy|Z_0)\end{aligned}$$

が成立し, 更に以下の表現を持つ.

$$
\begin{aligned}
&P_{s,t}(x,dy|z_0)=q(s,x;t,y|z_0)m(dy),\\
&q(s,x;t,y|z_0)\\
&:=\frac{\tilde{p}_{t-s}(x,y)\left\{\int_E\frac{\tilde{p}_{T-t}(y,z)}{\tilde{p}_T(z_0,z)}\nu(dz)\right\}}{\int_E\frac{\tilde{p}_{T-s}(x,z')}{\tilde{p}_T(z_0,z')}\nu(dz')}.
\end{aligned}
$$

次に, Y が $(\Omega_1,\mathcal{F}_T,\tilde{\mathbb{P}}^1,(\mathcal{F}^1_t)_{t\in[0,T]})$ 上の SDE

$$dY_t=b(Y_t)dt+\sigma(Y_t)dW_t$$

($b:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, $\sigma:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^{n\times d}$, W は d 次元ブラウン運動) の解で与えられており, $m(dx)=dx$(: ルベーグ測度) の場合を考える.

命題 3. $f:E\to\mathbb{R}$ は $\int_E|f(x)|\nu(dx)<\infty$ を満たすボレル可測関数. $(\sigma\sigma^\top)>0$ と確率的 *Fubini* の定理を使うための可積分性に関する仮定を置く.

$$\ell_s(x):=\ln\tilde{p}_{T-s}(Z_s,x).$$

と記す. このとき以下が成立.
(1) $(\Omega,\mathcal{F}_{T-},\mathbb{P}_y,(\mathcal{F}^Z_t)_{t\in[0,T)})$ 上で Z は

$$
\begin{aligned}
dZ_t=&\left\{b(Z_t)+(\sigma\sigma^\top)(Z_t)\pi_t(\nabla\ell_t)\right\}dt\\
&+(\sigma\sigma^\top)^{1/2}(Z_t)dU_t,\quad Z_0=y,
\end{aligned}
$$

および $Z_{T-}:=\lim_{t\uparrow T}Z_t=X$ を満たす. ここで $(U_t)_{t\in[0,T)}$ は n 次元 $(\mathbb{P}_y,\mathcal{F}^Z_t)$-ブラウン運動 *(*所謂新生過程*)*.
(2) $t\in[0,T)$ に対して以下が成立.

$$
\begin{aligned}
\pi_t(f)=&\pi_0(f)\\
&+\int_0^t\{\pi_s(f\nabla\ell_s)-\pi_s(f)\pi_s(\nabla\ell_s)\}^\top\\
&\qquad(\sigma\sigma^\top)^{1/2}(Z_s)dU_s.
\end{aligned}
$$

4 例 : 歪正規過程, ファイナンスへの応用

応用上の使い易さを考え, 命題 1-3 に現れる積分も込めて具体的な計算が行える例を挙げる : 基となる Markov 過程 Y を Gauss-Markov 過程

$$dY_t=(k+KY_t)dt+\Sigma dW_t,\quad Y_0\in\mathbb{R}^n,$$

で与える ($k\in\mathbb{R}^n$, K and $\Sigma\in\mathbb{R}^{n\times n}$, $\Sigma\Sigma^\top>0$, W: n-次元ブラウン運動). そして

$$\nu(dx):=\mathbb{P}(X\in dx):=f_{\mathrm{GMSN}}(x;a,b,A,B,C)dx$$

と与える. ここで右辺は一般化多次元歪正規分布. すなわち $a\in\mathbb{R}^m$, $b\in\mathbb{R}^n$, $A\in\mathbb{S}^m_{++}$, $B\in\mathbb{S}^n_{++}$, $C\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $m\in\mathbb{N}$, $n\in\mathbb{N}$,

$$\Phi_m(x;A):=\int_{\prod_{i=1}^m(-\infty,x_i]}\phi_m(y;A)dy,$$

$\phi_m(y;A):=\exp\left(-\frac{1}{2}y^\top A^{-1}y\right)/((2\pi)^{\frac{m}{2}}\sqrt{A})$ として

$$
\begin{aligned}
&f_{\mathrm{GMSN}}(x;a,b,A,B,C)\\
&\qquad:=\frac{\phi_n(x-b,B)\Phi_m(Cx-a,A)}{\Phi_m\left(Cb-a,A+CBC^\top\right)}
\end{aligned}
$$

と定義されたものである ([4], [5] など参照). この場合, 命題 1-3 の結果が全て具体的・明示的に計算される. 特に, 推移確率 $q(s,x;t,y|z_0)$ も一般化歪正規分布になることが示される.

さらに, ファイナンスへの問題の応用として, i) コモディティプライシングモデル, ii) 温室効果ガスの排出権に関連した気候リスクの証券化モデル, を考察している.

参考文献

[1] Brody, D. C., L. P. Hughston and A. Macrina: Information-based asset pricing. *International Journal of Theoretical and Applied Finance*, **11**(1), 107–142, (2008).

[2] Hoyle, E., L. P. Hughston and A. Macrina: Lévy random bridges and the modelling of financial information. *Stochastic Processes and their Applications*, **121**, 856–884, (2011).

[3] Filipović, D., L. P. Hughston and A. Macrina: Conditional density models for asset pricing. *International Journal of Theoretical and Applied Finance*, **15**(1), 1250002, 24 pp. (2012).

[4] Gupta, A. K., G. González-Farías, and J. A. Domínguez-Molina: A multivariate skew normal distribution. *Journal of Multivariate Analysis*, 89, 181-190, (2004).

[5] Azzalini, A. and A. Capitanio: “The Skew-Normal and Related Families. Institute of Mathematical Statistics Monographs.” *Cambridge University Press*, (2013).

Itô Calculus in Risk Theory

宮城 惠
立命館大学大学院 理工学研究科 数理科学科
e-mail : ra0058rf@ed.ritsumei.ac.jp

1 概要

通常の損害保険数理のモデルに拡散過程を追加したモデルに対して倒産確率，あるいはより一般に Gerber–Shiu 関数をある特殊なフィルトレーションに関するマルチンゲールによって特徴付けるという結果について報告する．このような特徴付けについては，既に Constaninescu, Thoman 両氏が作用素論的手法で示している（cf. [1]）．本研究では伊藤の公式を用いた確率解析的手法で，上記の先行研究の一般化を目指す．

2 モデル

この章では本稿で取り扱う資産過程の定式化に必要となる記号などを定める．$n \in \mathbb{N}$，$\alpha_j \in \mathbb{R}$ $(j = 1, \cdots, n)$，微分作用素 $\mathcal{A}$ に対して，$\mathcal{L}_n$ を次のように定義する：

$$\mathcal{L}_n(\mathcal{A}) := \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \mathcal{A}^j.$$

次に，係数 $\mu, \sigma \in C_b^\infty(\mathbb{R})$ に対して，資産過程 U を次の確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}, (\mathcal{F}_t)_{t\geq 0})$ 上の 1 次元確率微分方程式の解とする：

$$U_t = u + \int_0^t \mu(U_s)\mathrm{d}s + \int_0^t \sigma(U_s)\mathrm{d}W_s - \int_0^t \mathrm{d}R_s,\ t \geq 0,\ U_0 = u \in \mathbb{R},$$

ただし W は原点から出発する 1 次元 $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$-ブラウン運動であり，$R$ は次で与えられるジャンプ過程である：

$$R_t = \sum_{i=1}^{\infty} X_i \mathbf{1}_{\{t \geq \sum_{j=1}^{i} T_j\}}, \quad t \geq 0.$$

ここで，$(T_j)_{j=1}^\infty$ は独立同分布な確率変数列であり，その共通の分布関数 F_T は次の定数係数微分方程式の解である：

$$\mathcal{L}_n\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right) F_T = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \frac{\mathrm{d}^j F_T}{\mathrm{d}t^j} = 0.$$

また，ジャンプの大きさ $(X_j)_{j=1}^\infty$ は確率 1 で正の値をとる独立同分布な確率変数列であり，分布関数 F_X を持つとし，$W, (T_j)_{j=1}^\infty, (X_j)_{j=1}^\infty$ は互いに独立とする．

さらに，Z を次の 1 次元確率微分方程式の $\mathbb{R}_+$ 上に値をとる解とする（幾何ブラウン運動など）：

$$Z_t = z + \int_0^t \mu(Z_s)\mathrm{d}s + \int_0^t \sigma(Z_s)\mathrm{d}W_s,\quad t \geq 0,\ Z_0 = z \in \mathbb{R}_+.$$

このとき，Z は 2 つのジャンプ間の時間では資産過程 U と同分布となる．拡散過程 Z に関する生成作用素 $\mathcal{A}$ は次で与えられる：ある適当な関数 $h : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\mathcal{A}h(u) = \mu(u)\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}u}(u) + \frac{\sigma^2(u)}{2}\frac{\mathrm{d}^2 h}{\mathrm{d}u^2}(u).$$

最後に，jump 過程 R を点過程に関する確率積分として表現する．$\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$ 上のランダム測度 N_R を次で与える：

$$N_R([0,t) \times A) := \sum_{i=1}^{J_t} \delta_{X_i}(A),\quad t \geq 0,\ A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}),$$

ただし $N_R(\emptyset) := 0$ とする．ここで確率過程 J を

$$J_t = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{t \geq \sum_{j=1}^{i} T_j\}} \quad t \geq 0$$

と定めると，これは U の時刻 t における jump の回数を表す．また，δ_x は $x \in \mathbb{R}$ に重みを持つ Dirac 測度である．このとき，jump 過程 R は次のように表現される：

$$R_t = \int_0^t \int_{\mathbb{R}} x N_R(\mathrm{d}s\mathrm{d}x).$$

3 主結果

定理 1. $h \in C^\infty(\mathbb{R})$ とする． 適当な正則性の条件の下で，確率変数列 $(h(U_j))_{j=0}^\infty$ が離散 $(\mathcal{F}_{T_j})_{j=0}^\infty$-マルチンゲールになるための必要十

分条件は h が次の積分微分方程式の解となることである：

$$\mathcal{L}_n(-\mathcal{A})h(u) = (-1)^{n-1}\alpha_0 \int_{-\infty}^{\infty} h(u-x)F_X(\mathrm{d}x).$$

定理 2. $\delta \in \mathbb{R}$，$w \in C^\infty(\mathbb{R})$ とする．$(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$-停止時刻 T^* を次のように定義する：

$$T^* := \inf\{t > 0; U_t < 0\}.$$

このとき，

$$\begin{aligned} h(u) &:= h(u;\delta) \\ &:= \mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{T^*<\infty\}}e^{-\delta T^*}w(U_{T^*})\middle| U_0 = u\right] \end{aligned}$$

は境界条件

$$\begin{cases} \lim_{u\to\infty} h(u) = 0, \\ h(u) = w(u),\ u > 0 \end{cases}$$

の下での積分微分方程式

$$\begin{aligned} &\mathcal{L}_n(-\mathcal{A}+\delta)h(u) \\ &= (-1)^{n-1}\alpha_0 \int_0^\infty h(u-x)F_X(\mathrm{d}x) \end{aligned}$$

の有界な唯一の解として与えられる．

この h はリスク理論の文脈では **Gerber–Shiu 関数**と呼ばれるものに相当する（cf. [3]）．

4 Gerber–Shiu 関数

Gerber–Shiu 関数 h は**定理 2** における δ や w を変えることにより，リスク理論に現れる様々な関数と一致することが知られている．以下，いくつか例を挙げる．

例 3. $w \equiv 1$ のとき，

$$h(u;\delta) = \mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{T^*<\infty\}}e^{-\delta T^*}\middle| U_0 = u\right]$$

は破産確率のラプラス変換に他ならない．

例 4. $\delta = 0$ のとき，

$$h(u;0) = \mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{T^*<\infty\}}\middle| U_0 = u\right]$$

は破産確率そのものを表す．

5 定理 1 の証明の概略

任意の $0 \leq s < t$ をみたす s, t と $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して，$h(U)$ に伊藤の公式（cf. [2]）を適用すると，

$$\begin{aligned} &h(U_t) - h(U_s) \\ &= \int_s^t \mathcal{A}h(U_v)dv + \int_s^t h'(U_v)\sigma(U_v)\mathrm{d}W_v \\ &\quad + \int_s^t \int_A (h(U_{v-}-x) - h(U_{v-}))N_R(\mathrm{d}v\mathrm{d}x) \\ &= \int_s^t \mathcal{A}h(U_v)\mathrm{d}v \\ &\quad + \int_s^t \int_A (h(U_{v-}-x) - h(U_{v-}))\widehat{N}_R(\mathrm{d}v\mathrm{d}x) \\ &\quad + (\text{martingale}), \end{aligned}$$

ただし，$\widehat{N}_R$ は N_R の compensator である．よって，Doob の任意抽出定理より，$h(U)$ がマルチンゲールになるための必要十分条件は，次の式をみたすことである：

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}\left[\int_0^{T_1} \mathcal{A}h(U_s)\mathrm{d}s \right.\\ &\quad \left. + \int_0^{T_1}\int_{\mathbb{R}} (h(U_{s-}-x) - h(U_{s-}))\widehat{N}_R(\mathrm{d}s\mathrm{d}x)\right] \\ &\quad = 0. \end{aligned}$$

最後に，得られた条件を作用素の交換関係を用いて書き換えることで，求める積分微分方程式の必要十分条件を得ることができる．

参考文献

[1] C. D. Constantinescu and E. Thomann. Martingales in renewal jump-diffusion processes. preprint

[2] D. Applebaum. Lévy Processes and Stochastic Calculus, Second Edition. Cambridge University Press. (2009).

[3] H. U. Gerber and E. S. W. Shi. On the time value of ruin. North American Actuarial Journal, **2**(1), 48–78, (1998).

Stochastic Hamiltonian Systems for Economic Growth Models

鈴木 康太 [1], 赤堀 次郎 [2]
立命館大学大学院理工学研究科 [1,2]
e-mail : `ra0054pe@ed.ritsumei.ac.jp`

1 はじめに

本研究ではノードハウス氏が提唱した DICE (Dynamic Integrated model of Climate and the Economy) モデル [1] を連続時間に拡張した CT(Continuous Time)-DICE モデル [2] と確率的に拡張した CT-DICE モデル [3] を対象にしている．最適制御問題を解く際，ポントリャーギンの最大原理やベルマンの動的計画法などが有名な手法である．今回 CT-DICE モデルに対してハミルトン系を援用することで, いくつかの仮定の下で解を求め，第一積分を具体的に記述した．積分可能な系に関するリウヴィルの定理 [4] より，ハミルトン系の自由度と同じ数の第一積分を見つければ，その系は可積分であることが知られている．そこで, CT-DICE モデルを確率過程を使い拡張したモデルを考える．そのモデルから導出される確率ハミルトン系に対し,「可積分性」に対応する概念があるのか興味があり,「確率」第一積分という概念について考察することを目標とする．

2 CT-DICE モデルとハミルトン系

定義 1 CT-DICE モデル [2] の最適化問題を以下の値を求める問題とする．

$$\sup_{C,\mu\in\mathcal{C}([t,T])}\left\{\int_t^T \frac{1}{1-\gamma}C(s)^{1-\gamma}\mathrm{d}s+\varphi K^{1-\gamma}(T)\right.$$
$$\left.+\psi M^{\tau-1}(T)\right\}$$

subject to

$$\begin{cases} \dot{K}(s)=A(s)e^{-a\mu(s)}K(s)^{\alpha}M(s)^{\tau-1} \\ \qquad -\delta_K K(s)-C(s), s\in(t,T), \\ K(t)=k_0,\ k_0>0, \\ \dot{M}(s)=B(s)e^{-b\mu(s)}(A(s)e^{-a\mu(s)}K(s)^{\alpha})^{\upsilon} \\ \qquad \times M(s)^{\tau-1}-\delta_M M(s), s\in(t,T), \\ M(t)=m_0,\ m_0>0. \end{cases}$$

ただし，t,T：時刻，$K(s)>0$：資本ストック，$C(s)$：消費，$M(s)>0$：温室効果ガスの蓄積量，$\mu(s)$：環境政策，$A(s),B(s)\in\mathcal{C}([t,T];(0,\infty))$：外生変数の関数，$a,b,\alpha,\upsilon,\delta_K,\delta_M$：正の定数，$\tau$：負の定数．

定理 2 $\alpha=\frac{-a(\upsilon-1)+b}{b}\frac{a\upsilon+b}{a},\gamma=\frac{a(\upsilon-1)+b}{a},\tau=\frac{a(\upsilon-1)+b}{a\upsilon+b}$ と仮定し，$\beta:=\frac{a(\upsilon-1)+b}{b}$ とすると，CT-DICE モデルの最適化問題におけるハミルトニアン H は $H(s,K,M,p_K,p_M)=\gamma(1-\tau)^{\frac{1}{\tau}}A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}K^{\gamma-1}M^{\tau-1}p_K^{1-\frac{1}{\gamma}}(-p_M)^{1-\frac{1}{\tau}}$ $+\frac{\gamma}{1-\gamma}p_K^{1-\frac{1}{\gamma}}-\delta_K K p_K-\delta_M M p_M$ となり，ハミルトン系は以下の形で得られる．

$$\begin{cases} \dot{K}(s)=\partial_{p_K}H(s,K,M,p_K,p_M), \\ \dot{M}(s)=\partial_{p_M}H(s,K,M,p_K,p_M), \\ \dot{p_K}(s)=-\partial_K H(s,K,M,p_K,p_M), \\ \dot{p_M}(s)=-\partial_M H(s,K,M,p_K,p_M), \\ K(t)=k_0, \\ M(t)=m_0, \\ p_K(T)=(1-\gamma)\varphi K(T)^{-\gamma}, \\ p_M(T)=(1-\tau)\psi M(T)^{-\tau}. \end{cases}$$

(1) 上記のハミルトン系を満たす $K(s),M(s)$ は以下の様になる．

$$K(s)=\left\{\mathrm{e}^{\frac{\delta_K}{\gamma}(s-t)}k_0^{1-\gamma}+(1-\gamma)^{1+\frac{1}{\gamma}}f_K^{(0)}(t)^{1-\gamma}\right.$$
$$\left.\times\int_t^s h_K^{(0)}(\theta)\mathrm{e}^{\frac{\delta_K}{\tau}(s-\theta)}\mathrm{d}\theta\right\}^{1-\tau}\frac{f_K^{(0)}(s)}{f_K^{(0)}(t)},$$
$$M(s)=\left\{\mathrm{e}^{\frac{\tau\delta_M}{\gamma}(s-t)}m_0^{1-\tau}+(1-\tau)^{\frac{1}{\gamma}+1}\right.$$
$$\left.\times\int_t^s h_M^{(0)}(\theta)\mathrm{e}^{\frac{\tau\delta_M}{\gamma}(s-\theta)}\mathrm{d}\theta\right\}^{1-\gamma}.$$

ただし，

$$f_K^{(0)}(s):=\left[\{\varphi(1-\gamma)\}^{\frac{1}{\gamma}}+\frac{\tau}{\delta_K}\right]\mathrm{e}^{\frac{\delta_K}{\tau}(T-s)}-\frac{\tau}{\delta_K},$$
$$f_M^{(0)}(s):=\{-\psi(1-\tau)\}^{\frac{1}{\tau}}\mathrm{e}^{\frac{\delta_M}{\gamma}(T-s)},$$
$$h_K^{(0)}(s):=A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}f_K^{(0)}(s)^{\gamma-2}f_M^{(0)}(s)^{\tau-1},$$
$$h_M^{(0)}(s):=A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}f_K^{(0)}(s)^{\gamma-1}f_M^{(0)}(s)^{-1}.$$

(2)$G(K,M,p_K.p_M):=\{Kp_k^{\frac{1}{\gamma}}+\frac{\tau}{\delta_K}\}^{\frac{1}{\delta_K}\tau}$ $\times\{M(-p_M)^{\frac{1}{\tau}}\}^{\frac{-\gamma}{\delta_M}}$ とすると，関数 G は上記の系に関する第一積分である．

3 確率過程を用いたCT-DICEモデルと確率ハミルトン系

定義 3 $(\Omega, \mathscr{F}, \{\mathscr{F}_s\}_{s\in[0,T]}, \mathbb{P})$ をフィルター付き確率空間とし，$\{W_K(s)\}_{s\in[0,T]}, \{W_M(s)\}_{s\in[0,T]}$ を $\{\mathscr{F}_s\}$-適合で互いに独立なブラウン運動とする．確率過程を用いた CT-DICE モデル [3] の最適化問題を以下の値を求める問題とする．

$$\sup_{C,\mu\in\mathcal{C}([t,T])} \mathbb{E}\Big[\int_t^T \frac{1}{1-\gamma}C(s)^{1-\gamma}\mathrm{d}s + \varphi K^{1-\gamma}(T) + \psi M^{\tau-1}(T)\Big|\mathscr{F}_t\Big]$$

subject to

$$\begin{cases} \mathrm{d}K(s) = \{A(s)e^{-a\mu(s)}K(s)^\alpha M(s)^{\tau-1} \\ \qquad -\delta_K K(s) - C(s)\}\mathrm{d}s \\ \qquad +\sigma_K K(s)\mathrm{d}W_K(s), s\in(t,T), \\ K(t) = k_0,\ k_0>0, \\ \mathrm{d}M(s) = \{B(s)e^{-b\mu(s)}(A(s)e^{-a\mu(s)}K(s)^\alpha)^v \\ \qquad \times M(s)^{\tau-1} - \delta_M M(s)\}\mathrm{d}s \\ \qquad +\sigma_M M(s)\mathrm{d}W_M(s), s\in(t,T), \\ M(t) = m_0,\ m_0>0. \end{cases}$$

ただし，σ_K, σ_M は正の定数としその他の変数は定義 1 と同様である．

定理 4 定理 2 と同様の設定の下，確率過程を用いた CT-DICE モデルの最適化問題における確率ハミルトニアン H は $H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M) = -\gamma(1-\tau)^{\frac{1}{\tau}}A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}K^{\gamma-1}M^{\tau-1}p_K^{1-\frac{1}{\gamma}}(-p_M)^{1-\frac{1}{\tau}} + \frac{\gamma}{1-\gamma}p_K^{1-\frac{1}{\gamma}} - \delta_K K p_K - \delta_M M p_M + \sigma_K K q_K + \sigma_M M q_M$ となり，確率ハミルトン系は以下の形で得られる．

$$\begin{cases} \mathrm{d}K(s) = \partial_{p_K}H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}s \\ \quad +\partial_{q_K}H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}W_K(s), \\ \mathrm{d}M(s) = \partial_{p_M}H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}s \\ \quad +\partial_{q_M}H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}W_K(s), \\ \mathrm{d}p_K(s) = -\partial_K H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}s \\ \qquad +q_K(s)\mathrm{d}W_K(s), \\ \mathrm{d}p_M(s) = -\partial_M H(s,K,M,p_K,p_M,q_K,q_M)\mathrm{d}s \\ \qquad +q_M(s)\mathrm{d}W_M(s), \\ K(t) = k_0, \\ M(t) = m_0, \\ p_K(T) = (1-\gamma)\varphi K(T)^{-\gamma}, \\ p_M(T) = (1-\tau)\psi M(T)^{-\tau}. \end{cases}$$

上記の確率ハミルトン系を満たす $K(s), M(s)$ は以下の様になる．

$$\begin{aligned} K(s) =& \Big\{ \mathrm{e}^{\pi_K(s,t)}k_0^{1-\gamma} + (1-\gamma)^{1+\frac{1}{\gamma}}f_K(t)^{1-\gamma} \\ & \times \int_t^s h_K(\theta)\mathrm{e}^{\pi_K(s,\theta)}\mathrm{d}\theta \Big\}^{1-\tau}\frac{f_K(s)}{f_K(t)}, \\ M(s) =& \Big\{ \mathrm{e}^{\pi_M(s,t)}m_0^{1-\tau} + (1-\tau)^{1+\frac{1}{\tau}} \\ & \times \int_t^s h_M(\theta)\mathrm{e}^{\pi_M(s,\theta)}\mathrm{d}\theta \Big\}^{1-\gamma}. \end{aligned}$$

ただし，

$$\begin{aligned} &\lambda_K := \delta_K\tau^{-1} + (1+\gamma)\sigma_K^2 2^{-1}, \\ &\lambda_M := \delta_m\gamma^{-1} + (1+\tau)\sigma_m^2 2^{-1}, \\ &\rho_K := \delta_K\tau^{-1} + (1-\gamma)\sigma_K^2 2^{-1}, \\ &\rho_M := \tau\left\{\delta_M\gamma^{-1} - (1-\tau)\sigma_M^2 2^{-1}\right\}, \\ &f_K(s) := \left[\{\varphi(1-\gamma)\}^{\frac{1}{\gamma}} + \frac{1}{\lambda_K}\right]\mathrm{e}^{\lambda_K(T-s)} - \frac{1}{\lambda_K}, \\ &f_M(s) := \{\psi(1-\tau)\}^{\frac{1}{\tau}}\mathrm{e}^{\lambda_M(T-s)}, \\ &h_K(s) := A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}f_K(s)^{\gamma-2}f_M(s)^{\tau-1}, \\ &h_M(s) := A(s)^{\frac{1}{\beta}}B(s)^{\frac{1}{\gamma}}f_K(s)^{\gamma-1}f_M(s)^{-1}, \\ &\pi_K(s_1,s_2) := (1-\gamma)\sigma_K\{W_K(s_1) - W_K(s_2)\} \\ &\qquad + \left[\rho_K - 2^{-1}\{(1-\gamma)\sigma_K\}^2\right](s_1-s_2), \\ &\pi_M(s_1,s_2) := (1-\tau)\delta_M\{W_M(s_1) - W_M(s_2)\} \\ &\qquad + \left[\rho_M - 2^{-1}\{(1-\tau)\delta_M\}^2\right](s_1-s_2). \end{aligned}$$

参考文献

[1] William D. Nordhaus, Managing the Global Commons: the Economics of Climate Change, MIT press, Cambridge, MA, 1994.

[2] Ken-ichi Oi, *Optimal Economic Growth under Climate Changes: Some Models with Explicit Solutions*, Master Thesis , Graduate School of Mathematics, Ritsumeikan University (2009).

[3] Kensuke Nagata, *Optimal economic growth models as stochastic Hamiltonian systems*, Master Thesis , Graduate School of Mathematics, Ritsumeikan University (2011).

[4] V. I. Arnold, 古典力学の数学的方法 (訳. 安藤・露江・丹羽), 岩波書店, 1980.

時間遅れ滑らか依存性：時間遅れがもたらす平滑化効果と反応の時間的順序

西口 純矢 [1]
東北大学 材料科学高等研究所 (AIMR) 数学連携グループ
e-mail：junya.nishiguchi.b1@tohoku.ac.jp

1　イントロダクション

定数の離散的な遅れを持つ微分方程式は，さまざまなダイナミックな現象の数理モデルとして用いられている ([1])．しかし，多くの場合に遅れの正確な値は未知である．したがって，上のような **遅延微分方程式** を用いた数理モデルの妥当性を考えるためには,「解が時間遅れパラメータの関数としてどのように振る舞うか」を調べることが重要である．これは時間遅れパラメータ同定の問題として知られており，遅延微分方程式の解を時間遅れパラメータに関して微分することが必要となる ([2], [3])．

また，時間遅れパラメータの値がダイナミクスに影響を与えることが示唆されている．骨髄における成熟した血球細胞の濃度変化の数理モデルとして考えられている Mackey–Glass 方程式 ([4]) において，時間遅れパラメータの値を増加させたときに複雑な解の振る舞いが見られることが数値的に知られている．このような現象は時間遅れパラメータに関する分岐として理解されるべきであるが，そのためには解の C^1 滑らか依存性，より正確には時間遅れをパラメータとして持つ半流れの滑らかさが必要である．

上に述べた微分可能性の問題は，微分方程式論の観点から基本的である．しかしながら，対応する **遅れ型関数微分方程式** の滑らかさは初期履歴の滑らかさと密接に関わっている．それゆえに，解の時間遅れに関する C^1 滑らか依存性を得るために，どのような初期履歴の空間（ここでは **履歴空間** とよぶ）を取ればよいかは必ずしも明らかではない．

この講演の目的は，(i) 初期履歴と時間遅れに関する解の C^1 滑らか依存性と (ii) 初期履歴の正則性 (regularity) との関係性を，ある遅延微分方程式のクラスを考察することで明らかにすることである．定式化については第 2 節を参照されたい．

初期履歴と時間遅れに関する C^1 滑らか依存性の問題で現れるのが，**Sobolev 型の履歴空間** である ([5])．このクラスは正則性の意味で連続関数と連続的微分可能関数の中間に位置する．定義や履歴空間の観点での基本的な性質は第 3 節を参照されたい．Sobolev 型の履歴空間はもともとは中立型遅延微分方程式に対して用いられたものである ([6], [7])．ここで中立型とは，未知関数の瞬間変化率が未知関数の導関数の過去の値にも依存するようなクラスである．

Sobolev 型の履歴空間を採用した上で，初期履歴と時間遅れに関する C^1 滑らか依存性を得るための本質的なツールとなるのが **L^p における平行移動の微分可能性** である．遅れ型関数微分方程式としての滑らかさがなくてもこの C^1 滑らか依存性を得ることができ，**時間遅れがもたらす平滑化効果** として理解できる．

最後に，時間依存の時間遅れへの拡張を考えることで，この初期履歴と時間遅れに関する C^1 滑らか依存性の問題には **反応の時間的順序** という構造が隠されていることを提示する．

2　定式化

第 1 節で述べた目的のために，遅延微分方程式

$$\dot{x}(t) = f(x(t), x(t-r)) \tag{1}$$

とその初期値問題

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(t), x(t-r)), & t \geq 0, \\ x(t) = \phi(t), & t \in [-R, 0] \end{cases} \tag{2}$$

を各 $(\phi, r) \in C([-R,0], \mathbb{R}^N) \times [0, R]$ に対して考える．ここで,

- 定数 $R > 0$ は極大の時間遅れ,
- $r \in [0, R]$ はパラメータ,
- $N \geq 1$ は整数,
- $f\colon \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ は関数

である．$C([-R,0], \mathbb{R}^N)$ で $[-R,0]$ から $\mathbb{R}^N$ への連続関数のなす空間で，上限ノルム

$$\|\phi\|_{C[-R,0]} := \sup_{\theta \in [-R,0]} |\phi(\theta)|$$

に関する Banach 空間とする ($|\cdot|$ は $\mathbb{R}^N$ のノルム)．f の Lipschitz 連続性の下で，初期値問

題 (2) は一意的な極大解

$$x(\cdot;\phi,r)\colon [-R,T_{\phi,r})\to\mathbb{R}^N$$

を持つ ($0<T_{\phi,r}\le\infty$)．すると，初期履歴と時間遅れに関する C^1 滑らか依存性とは，関数

$$(\phi,r)\mapsto x(\cdot;\phi,r)$$

の適切な意味での連続微分可能性である．

3 Sobolev 型の履歴空間

定義 1. $a<b$ を $a+R<b$ を満たす実数とし，$x\colon [a,b]\to\mathbb{R}^N$ を関数とする．各 $t\in[a+R,b]$ に対して，関数 $R_t x\colon [-R,0]\to\mathbb{R}^N$ を

$$R_t x(\theta)=x(t+\theta)\quad(\theta\in[-R,0])$$

で定め，時刻 t における x の **履歴** と呼ぶ．

定義 2. $\phi\colon [-R,0]\to\mathbb{R}^N$ に対して，$\bar{\phi}$ を

$$\bar{\phi}(t)=\begin{cases}\phi(t) & (t\in[-R,0]),\\ \phi(0) & (t\in[0,+\infty))\end{cases}$$

で定め，ϕ の **static prolongation** と呼ぶ．

定義 3. $1\le p<\infty$ とし，$a<b$ を実数とする．絶対連続関数 $x\colon [a,b]\to\mathbb{R}^N$，すなわち $x\in\mathrm{AC}([a,b],\mathbb{R}^N)$ に対して，

$$\|x\|_{\mathcal{W}^{1,p}[a,b]}:=\left(|x(a)|^p+\|x'\|_{L^p[a,b]}^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

と置く．ここで，x' はほとんど至る所で定義された x の導関数である．$\mathcal{W}^{1,p}([a,b],\mathbb{R}^N)$ を，ノルム $\|\cdot\|_{\mathcal{W}^{1,p}[a,b]}$ を備えたノルム空間

$$\left\{x\in\mathrm{AC}([a,b],\mathbb{R}^N):x'\in L^p([a,b],\mathbb{R}^N)\right\}$$

とする．とくに $\mathcal{W}^{1,p}([-R,0],\mathbb{R}^N)$ を **Sobolev 型の履歴空間** と呼ぶ．

補題 4. $1\le p<\infty,\ T>0$ とする．このとき，

$$\begin{aligned}&[0,T]\times\mathcal{W}^{1,p}([-R,T],\mathbb{R}^N)\\&\quad\ni(t,x)\mapsto R_t x\in\mathcal{W}^{1,p}([-R,0],\mathbb{R}^N)\end{aligned}$$

は連続である．

補題 5. $1\le p<\infty,\ T>0$ とする．このとき，

$$\begin{aligned}&\mathcal{W}^{1,p}([-R,0],\mathbb{R}^N)\ni\phi\mapsto\\&\bar{\phi}|_{[-R,T]}\in\mathcal{W}^{1,p}([-R,T],\mathbb{R}^N)\end{aligned}$$

は連続である．

4 主結果

定理 6. $1\le p<\infty$ とする．f が C^1 級であるならば，

$$\Phi(t,\phi,r)=(R_t x(\cdot;\phi,r),r)$$

で定義される $\mathcal{W}^{1,p}([-R,0],\mathbb{R}^N)\times[0,R]$ における極大半流れは C^1 滑らかである．

注 7. 上の Φ は拡張されたシステム

$$\begin{cases}\dot{x}(t)=f(x(t),x(t-r(t))),\\ \dot{r}(t)=0\end{cases}$$

が生成する極大半流れである．このようなシステムは，分岐の問題において現れる ([8])．

5 ディスカッション

上の結果を時間依存の時間遅れ $r=r(t)$ に拡張するためには，L^p における平行移動の微分可能性において「平行移動が変数の場合」を許す必要がある．このとき，関数 $t\mapsto t-r(t)$ の狭義単調性が必要となる（反応の時間的順序）．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17H06460 および JP19K14565 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] T. Erneux, “Applied Delay Differential Equations,” Springer, New York, 2009.

[2] F. Hartung, Proceedings of the Third World Congress of Nonlinear Analysts, Part 7 (Catania, 2000). Nonlinear Anal. **47** (2001), 4557–4566.

[3] H. T. Banks, D. Robbins and K. L. Sutton, Math. Biosci. Eng. **10** (2013), 1301–1333.

[4] M. C. Mackey and L. Glass, Science **197** (1977), 287–289.

[5] J. Nishiguchi, submitted (arXiv:1907.06294)

[6] R. D. Driver, Arch. Rational Mech. Anal. **19** (1965), 149–166.

[7] W. R. Melvin, J. Differential Equations **12** (1972), 524–534.

[8] Y. A. Kuznetsov, “Elements of Applied Bifurcation Theory,” Third edition. Springer-Verlag, New York, 2004.

半古典位相縮約理論による量子同期現象の解析

加藤　譲 [1], 中尾　裕也 [1]
[1] 東京工業大学
e-mail：kato.y.bg@m.titech.ac.jp

1 Introduction

Spontaneous rhythmic oscillations and synchronization arise in various science and technology fields. Various nonlinear dissipative systems exhibiting rhythmic dynamics can be modeled as limit-cycle oscillators. A standard theoretical framework for analyzing limit-cycle oscillators in classical dissipative systems is the *phase reduction theory* [1]. By using this framework, we can systematically reduce multi dimensional nonlinear dynamical equations describing weakly perturbed limit-cycle oscillators to a one dimensional phase equation that approximately describes the oscillator dynamics.

Recently, theoretical studies have been performed on the synchronization of nonlinear oscillators which explicitly show quantum signatures [2]. In this study, we formulate a general framework of the phase reduction theory for quantum synchronization under the semiclassical approximation. We derive an approximate one-dimensional classical SDE for the phase variable of the system from a general master equation that describes weakly perturbed quantum dissipative systems exhibiting stable nonlinear oscillations. The quantum-mechanical density matrix and power spectrum of the original system can be approximately reconstructed from the reduced phase equation.

2 Derivation of the phase equation

We consider quantum dissipative systems interacting with linear and nonlinear reservoirs, which has a stable limit-cycle solution in the classical limit and is driven by weak perturbations. The evolution of the system under a Markovian approximation can be described by a quantum master equation

$$\dot{\rho} = -i[H + \epsilon \tilde{H}(t), \rho] + \sum_{m=1}^{n} \mathcal{D}[L_m]\rho, \qquad (1)$$

where ρ is a density matrix representing the system state, H is a system Hamiltonian, $\epsilon \tilde{H}(t)$ is a time-dependent Hamiltonian representing weak external perturbations applied to the system ($0 < \epsilon \ll 1$), n is the number of reservoirs, L_m is the coupling operator between the system and the mth reservoir ($m = 1, \ldots, n$), and $\mathcal{D}[L]\rho = L\rho L^\dagger - (\rho L^\dagger L - L^\dagger L \rho)/2$ denotes the Lindblad form. Using the P representation [3] given by $\rho = \int P(\boldsymbol{\alpha})|\alpha\rangle\langle\alpha| d\boldsymbol{\alpha}$ with $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{C}^{2\times 1}$, the Fokker-Planck equation (FPE) equivalent to Eq. (1) can be written as

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{\alpha}, t)}{\partial t} = \Big[-\sum_{j=1}^{2} \partial_j \{A_j(\boldsymbol{\alpha}) + \epsilon \tilde{A}_j(\boldsymbol{\alpha}, t)\} + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2} \partial_j \partial_k \{\epsilon D_{jk}(\boldsymbol{\alpha})\} \Big] P(\boldsymbol{\alpha}, t), \qquad (2)$$

where $A_j(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{C}^{2\times 1}$ and $\tilde{A}_j(\boldsymbol{\alpha}, t) \in \mathbb{C}^{2\times 1}$ are the jth components of complex vectors representing the system dynamics and perturbations, respectively, and $\epsilon D_{jk}(\boldsymbol{\alpha})$ is the (j,k)-th component of the symmetric diffusion matrix $\epsilon \boldsymbol{D}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{C}^{2\times 2}$ representing quantum fluctuations. By introducing an appropriate complex matrix $\sqrt{\epsilon}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{C}^{2\times 2}$ the diffusion matrix $\epsilon \boldsymbol{D}(\boldsymbol{\alpha})$ can be represented as $\epsilon \boldsymbol{D}(\boldsymbol{\alpha}) = \sqrt{\epsilon}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\alpha})(\sqrt{\epsilon}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\alpha}))^T$ and the Ito SDE corresponding to Eq. (2) for the phase-space variable $\boldsymbol{\alpha}(t)$ is given by

$$d\boldsymbol{\alpha} = \{\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha}) + \epsilon \tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\alpha}, t)\} dt + \sqrt{\epsilon}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{W}, \qquad (3)$$

where $\boldsymbol{W}(t) = (W_1(t), W_2(t))^T \in \mathbb{R}^{2\times 1}$ represents a vector of independent Wiener processes $W_i(t)$ ($i = 1, \ldots, 2$) satisfying $\langle dW_i dW_j \rangle = \delta_{ij} dt$.

To derive an approximate one-dimensional SDE for the phase variable of the system, we define $\boldsymbol{X} = (x,p)^T = (\mathrm{Re}\ \alpha, \mathrm{Im}\ \alpha)^T \in \mathbb{R}^{2\times 1}$ from the complex vector $\boldsymbol{\alpha}$. The real-valued expression of Eq. (3) for $\boldsymbol{X}(t)$ is then given by an Ito SDE,

$$d\boldsymbol{X} = \{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) + \epsilon \boldsymbol{q}(\boldsymbol{X},t)\}dt + \sqrt{\epsilon}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{W}, \tag{4}$$

where $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^{2\times 1}$, $\boldsymbol{q}(\boldsymbol{X},t) \in \mathbb{R}^{2\times 1}$, and $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ are real-valued equivalent representations of $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{C}^{2\times 1}$, $\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\alpha},t) \in \mathbb{C}^{2\times 1}$, and $\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\alpha}) \in \mathbb{C}^{2\times 2}$ in Eq. (3), respectively.

We assume that the system in the classical limit without perturbation and quantum noise, $\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$, has an exponentially stable limit-cycle solution $\boldsymbol{X}_0(t) = (x_0(t), p_0(t))^T = \boldsymbol{X}_0(t+T)$ with a natural period T and frequency $\omega = 2\pi/T$. In the same way as the phase reduction for classical limit cycles [1], we can introduce an asymptotic phase function $\Phi(\boldsymbol{X}) : B \subset \mathbb{R}^2 \to [0, 2\pi)$ such that $\nabla\Phi(\boldsymbol{X}) \cdot \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) = \omega$ is satisfied for all system states $\boldsymbol{X}$ in the basin B of the limit cycle in the classical limit, where $\nabla\Phi(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^{2\times 1}$ is the gradient of $\Phi(\boldsymbol{X})$. When the noise and perturbations are sufficiently weak, a SDE for the phase in the lowest order approximation is obtained by using the Ito formula as

$$\begin{aligned} d\phi = (\omega &+ \epsilon \boldsymbol{Z}(\phi) \cdot \boldsymbol{q}(\phi,t) \\ &+ \epsilon g(\phi))dt + \sqrt{\epsilon}(\boldsymbol{G}(\phi)^T \boldsymbol{Z}(\phi)) \cdot d\boldsymbol{W}, \end{aligned} \tag{5}$$

where, $\boldsymbol{Z}(\phi) = \nabla\Phi|_{\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}_0(\phi)}$ and $g(\phi) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{G}(\phi)^T \nabla^T \nabla\Phi|_{\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}_0(\phi)} \boldsymbol{G}(\phi)\right\}$. All these functions can be calculated numerically. From the reduced phase equation, using the phase distribution $P(\phi)$, we can approximately reconstruct the quantum state as follows.

$$\rho \approx \int_0^{2\pi} d\phi P(\phi) \left|\alpha_0(\phi)\right\rangle \left\langle \alpha_0(\phi)\right|. \tag{6}$$

Though, it is not shown in this proceeding paper, the power spectrum of the original quantum system in the steady state can be also reconstructed from the obtained phase equation.

3 Results

Figure 1(a)-(d) show the steady-state Wigner distributions of an quantum van der Pol system [2] under the weak harmonic driving or the squeezing, where only the harmonic driving is given as the perturbation in Fig. 1(a) and (b), while only the squeezing is given as the perturbation in Fig. 1(c) and (d). It can be seen that the true density matrix Fig. 1(b,d) is accurately approximated by the density matrix Fig. 1(a,c) reconstructed from the phase equation in both cases.

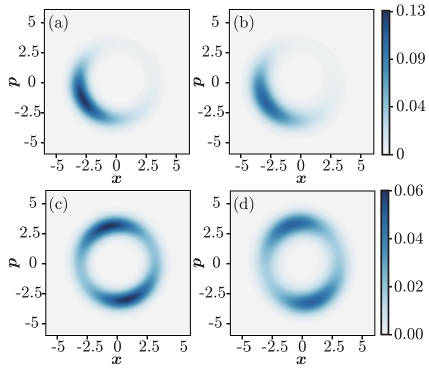


図 1. Results for the quantum van der Pol oscillator under harmonic driving (a, b) and under weak squeezing (c,d). (a,c): Wigner distributions reconstructed from the reduced phase equation, and (b,d): Wigner distributions obtained by direct numerical simulation of the original master equation.

4 Conclusion

We have developed a general framework of the phase reduction theory for quantum limit-cycle oscillators under the semiclassical approximation and confirmed its validity by analyzing synchronization dynamics of the quantum vdP system.

参考文献

[1] Y. Kuramoto, *Chemical oscillations, waves, and turbulence*, Springer Science & Business Media (1984).

[2] T. E. Lee, and H. R. Sadeghpour, Quantum synchronization of quantum van der Pol oscillators with trapped ions, Phys. Rev. Lett. **111**, 234101 (2013).

[3] C. W. Gardiner, and H. Haken, *Quantum noise*, Springer (1991).

Pitchfork bifurcations and linear stability of solitary waves in coupled nonlinear Schrdinger equations

Kazuyuki Yagasaki[1], Shotaro Yamazoe[2]
Graduate School of Informatics, Kyoto University[1,2]
e-mail : yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp[1], yamazoe@amp.i.kyoto-u.ac.jp[2]

1 Introduction

We consider coupled nonilnear Schrödinger equations (CNLS) of the form

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\partial_t u + \partial_x^2 u + \partial_1 F(|u|^2, |v|^2; \mu)u = 0, \\ &\mathrm{i}\partial_t v + \partial_x^2 v + \partial_2 F(|u|^2, |v|^2; \mu)v = 0, \end{aligned} \tag{1}$$

where $(u, v) = (u(t, x), v(t, x))$ are $\mathbb{C}$-valued unknown functions of $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, μ is a real parameter, $F : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ is a C^3 function satisfying

$$F(0, 0; \mu) = \partial_1 F(0, 0; \mu) = \partial_2 F(0, 0; \mu) = 0$$

for any $\mu \in \mathbb{R}$, and $\partial_j F$ represents the derivative of F with respect to the j-th argument for $j = 1, 2$.

We are interested in solitary waves

$$(u(t, x), v(t, x)) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} U(x), \mathrm{e}^{\mathrm{i}st} V(x))$$

in (1) with real constants $\omega, s > 0$ such that the $\mathbb{R}$-valued functions $U(x)$ and $V(x)$ satisfy

$$\lim_{x\to\pm\infty} U(x), \lim_{x\to\pm\infty} V(x) = 0. \tag{2}$$

So $(U(x), V(x))$ is a homoclinic solution to

$$\begin{aligned} &- U'' + \omega U - \partial_1 F(U^2, V^2; \mu)U = 0, \\ &- V'' + sV - \partial_2 F(U^2, V^2; \mu)V = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

satisfying (2). We make the following assumptions.

(A1) $\partial_\mu F(\zeta, 0; \mu) = 0$ for any $\zeta, \mu \in \mathbb{R}$.

(A2) When $V = 0$, the first equation of (3),

$$-U'' + \omega U - \partial_1 F(U^2, 0; \mu)U = 0,$$

has a homoclinic solution $U_0(x)$ with $\lim_{x\to\pm\infty} U_0(x) = 0$.

(A3) At $\mu = 0$, the normal variational equation of (3) around $(U_0(x), 0)$,

$$-V_1'' + sV_1 - \partial_2 F(U_0^2, 0; 0)V_1 = 0,$$

has a bounded solution $V_1(x)$ satisfying $\lim_{x\to\pm\infty} V_1(x) = 0$.

By **(A1)** and **(A2)**, (1) has a solitary wave of the form

$$(u(t, x), v(t, x)) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} U_0(x), 0), \tag{4}$$

which does not depend on μ. Using a result of [1], we show under **(A1)**–**(A3)** and some nondegenerate conditions that pitchfork bifurcations of (4) occur. Two solitary waves born at the pitchfork bifurcation are expressed as

$$\begin{aligned} &u(t, x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}(U_0(x) + O(\varepsilon^2)), \\ &v(t, x) = \pm\mathrm{e}^{\mathrm{i}st}(\varepsilon V_1(x) + O(\varepsilon^3)). \end{aligned} \tag{5}$$

We only treat the solution with + sign in (5) without loss of generality by replacing v with $-v$ if necessary.

In this talk, we give linear and orbital stability results for solitary waves (4) and (5) under some nondegenerate conditions which are easier to verify, compared with [2].

2 Main Result

Let $\mathcal{J}\mathcal{L}_\varepsilon$ be the linearized operator of (1) around the solution (5), where $\mathcal{J}$ is a bounded skew-adjoint operator in $L^2(\mathbb{R})$ and $\mathcal{L}_\varepsilon$ is a self-adjoint operator from $H^2(\mathbb{R})$ to $L^2(\mathbb{R})$. An eigenvalue $\lambda \in \mathrm{i}\mathbb{R} \setminus \{0\}$ of $\mathcal{J}\mathcal{L}_\varepsilon$ is said to have a *positive* (resp. *negative*) *Krein signature* if $\mathcal{L}_\varepsilon$ is positive (resp. negative) definite on the generalized eigenspace $\mathrm{gKer}(\mathcal{J}\mathcal{L}_\varepsilon - \lambda)$.

Let $(p_j(x, \lambda), q_j(x, \lambda))$, $j = 1, 2$, be a solution to the linearized problem for the single NLS with the nonlinear term $\partial_1 F(|u|^2, 0; \mu)u$ around the solitary wave $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} U_0(x)$,

$$\begin{aligned} &- p'' + \omega p - \partial_1^2 F(U_0(x)^2, 0; \mu)U_0(x)^2(p + q) \\ &\qquad - \partial_1 F(U_0(x)^2, 0; \mu)p = \mathrm{i}\lambda p, \\ &- q'' + \omega q - \partial_1^2 F(U_0(x)^2, 0; \mu)U_0(x)^2(p + q) \\ &\qquad - \partial_1 F(U_0(x)^2, 0; \mu)q = -\mathrm{i}\lambda q, \end{aligned}$$

such that

$$\lim_{x\to-\infty} e^{-\sqrt{\omega-i\lambda}x}\begin{pmatrix}p_1(x,\lambda)\\ q_1(x,\lambda)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

$$\lim_{x\to-\infty} e^{-\sqrt{\omega+i\lambda}x}\begin{pmatrix}p_2(x,\lambda)\\ q_2(x,\lambda)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

and

$$(p_1p_2'+q_1q_2'+p_1'p_2+q_1'q_2)(0,\lambda)=0. \quad (6)$$

Let $p_3(x,\lambda)$ be a solution to

$$-p''+sp-\partial_2F(U_0(x)^2,0;0)p=-i\lambda p \quad (7)$$

such that

$$\lim_{x\to-\infty} e^{-\sqrt{s+i\lambda}x}p_3(x,\lambda)\to 1.$$

$p_j(x,\lambda)$, $j=1,2,3$, are called the *Jost solutions* and are uniquely determined. Note that all eigenvalues of the eigenvalue problem for (7) are purely imaginary and they are also eigenvalues of $\mathcal{J}\mathcal{L}_0$. Moreover, the number of eigenvalues of (7) having negative Krein signature coincides with the number of zeros of $V_1(x)$. We now state our main theorem.

Theorem 1. *Suppose that* **(A1)**-**(A3)** *hold. Then the following hold.*

(i) *If $\partial_\omega\|U_0\|^2_{L^2}<0$, then solitary waves* (4) *and* (5) *are both linearly and orbitally unstable.*

(ii) *If $\partial_\omega\|U_0\|^2_{L^2}>0$, then* (4) *is linearly stable. In addition, if all eigenvalues of $-\partial_x^2+s-\partial_2F(U_0(x),0;\mu)$ are positive, then* (4) *is orbitally stable.*

(iii) *If $\partial_\omega\|U_0\|^2_{L^2}>0$ and $V_1(x)$ is positive, then* (5) *is both linearly and orbitally stable.*

(iv) *Let $\lambda\in\sigma_{\mathrm{ess}}(\mathcal{J}\mathcal{L}_0)$ be an eigenvalue of* (7) *and assume that it is a simple eigenvalue of $\mathcal{J}\mathcal{L}_0$. Then the following hold for $0<\varepsilon\ll 1$.*

(a) *If λ has a positive Krein signature and*

$$p_1(0,\lambda)p_1'(0,\lambda)+q_1(0,\lambda)q_1'(0,\lambda)\neq 0,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}\partial_1\partial_2F(U_0(x)^2,0;0)U_0(x)V_1(x)\big(p_2(x,\lambda)+q_2(x,\lambda)\big)p_3(x,\lambda)\,dx\neq 0,$$

then $\mathcal{J}\mathcal{L}_\varepsilon$ has no eigenvalues near λ.

(b) *If $\operatorname{Im}\lambda<-\omega$ (or especially λ has a negative Krein signature) and*

$$p_2(0,\lambda)p_2'(0,\lambda)+q_2(0,\lambda)q_2'(0,\lambda)\neq 0,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}\partial_1\partial_2F(U_0(x)^2,0;0)U_0(x)V_1(x)\big(p_1(x,\lambda)+q_1(x,\lambda)\big)p_3(x,\lambda)\,dx\neq 0,$$

then $\mathcal{J}\mathcal{L}_\varepsilon$ has a pair of eigenvalues of positive and negative real part near λ.

In particular, if the assumption of (b) *hold for some $\lambda\in\sigma_{\mathrm{ess}}(\mathcal{J}\mathcal{L}_0)$ along with one of* (iv), *then the solitary wave* (5) *is linearly unstable.*

Parts (i)–(iii) of Theorem 1 follow from a general theory of Grillakis et al. [3]. To prove (iv), we use the Evans function technique [4]. A key step in the proof is a particular choice (6) of the Jost solutions. Theorem 1 can be extended to the case in which $\mathcal{J}\mathcal{L}_0$ has resonance poles. In the talk, we also illustrate the above theory for the cubic nonlinearity case

$$F(\zeta_1,\zeta_2;\mu)=\zeta_1^2+\mu\zeta_1\zeta_2+\frac{\beta_2}{2}\zeta_2^2$$

and give some numerical computations.

Acknowledgements This work was partially supported by the JSPS KAKENHI Grant Number JP17H02859.

References

[1] D. Blázquez-Sanz and K. Yagasaki, Analytic and algebraic conditions for bifurcations of homoclinic orbits I: Saddle equilibria, *J. Differential Equations*, **253** (2012), 2916–2950.

[2] D. Pelinovsky and J. Yang, Instabilities of multihump vector solitons in coupled nonlinear Schrödinger equations, *Stud. Appl. Math.*, **115** (2005) 109–137.

[3] M. Grillakis, J. Shatah and W. Strauss, Stability theory of solitary waves in the presence of symmetry, II, *J. Funct. Anal.*, **94** (1990) 308–348.

[4] T. Kapitula and K. Promislow, Spectral and Dynamical Stability of Nonlinear Waves, Springer, 2013.

Bifurcations and stability for one-parameter families of symmetric periodic orbits in reversible systems

YAGASAKI Kazuyuki
Graduate School of Informatics, Kyoto University
e-mail : yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 Introduction

We study bifurcations and stability for one-parameter families of symmetric periodic orbits in reversible systems. In a previous work [1], bifurcations from one-parameter families of symmetric periodic orbits were theoretically investigated. Moreover, the theory was applied to a generalization of the Hénon-Heiles system [2] and it was shown that there exist infinitely many families of symmetric periodic orbits bifurcating from a family of symmetric periodic orbits. In this talk, our main interest lies in the stability of these symmetric periodic orbits and some criteria for determining their stability are obtained, but further results on bifurcations required for the purpose are also given. Especially, it is shown that except in special cases the original periodic orbits do not change their stability when these bifurcations occur. We apply our theory to the generalized Hénon-Heiles system. See [3] for more details.

2 Setup

We consider four-dimensional systems of the form

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^4, \tag{1}$$

where $f : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^4$ is C^r $(r \geq 3)$. We make the following assumptions.

(A1) The system (1) is *reversible*, i.e., there exists a (linear) involution $R : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^4$ such that

$$f(Rx) + Rf(x) = 0 \tag{2}$$

for all $x \in \mathbb{R}^4$. Moreover, $\dim \mathrm{Fix}(R) = 2$, where

$$\mathrm{Fix}(R) = \{x \in \mathbb{R}^4 \,|\, Rx = x\}.$$

(A2) There exists a one-parameter family of symmetric periodic orbits, $x^\alpha(t)$, $\alpha \in \mathscr{A}$, with period $T_\alpha > 0$, in (1), where $\mathscr{A}(\neq \emptyset)$ is an open interval of $\mathbb{R}$ and T_α is bounded. Moreover, the following conditions hold:

(i) $x^\alpha(t)$ is C^r with respect to α as well as t;

(ii) the two vectors

$$\frac{\partial x^\alpha}{\partial t}(t) \left(= f(x^\alpha(t))\right), \ \frac{\partial x^\alpha}{\partial \alpha}(t)$$

are linearly independent for $t \in [0, T_\alpha]$ and $\alpha \in \mathscr{A}$.

Let $x = (\xi, \eta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ and write

$$f(\xi, \eta) = (f_\xi(\xi, \eta), f_\eta(\xi, \eta))$$

with $f_\xi, f_\eta : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$. We also assume the following.

(A3) The two-dimensional ξ-plane is invariant under the flow generated by (1), i.e.,

$$f_\eta(\xi, 0) = 0 \text{ for all } \xi \in \mathbb{R}^2, \tag{3}$$

and the family of periodic orbits is given by $x^\alpha(t) = (\xi^\alpha(t), 0)$, $\alpha \in \mathscr{A}$, i.e., it lies on the ξ-plane.

We can discuss more general cases in a similar manner. See [3].

3 Main Results

We easily see that there exist $\zeta, \hat{\zeta} \in \mathbb{R}^2$ such that $(\xi, \eta) = (0, \zeta) \in \mathrm{Fix}(-R)$ and $(0, \hat{\zeta}) \in \mathrm{Fix}(R)$. Let $\Phi_\eta^\alpha(t)$ be the fundamental matrix of the *normal variational equation* (NVE) along $x = (\xi^\alpha(t), 0)$,

$$\dot{v} = \mathrm{D}_\eta f_\eta(\xi^\alpha(t), 0)v, \tag{4}$$

with $\Phi_\eta^\alpha(0) = \mathrm{id}_2$. Define the *n-th order Melnikov function* as

$$M^n(\alpha) = \zeta \cdot \mu_\alpha^n \hat{\zeta}. \tag{5}$$

for $n \in \mathbb{N}$, where $\mu_\alpha = \Phi_\eta^\alpha(T_\alpha)$ is the monodromy matrix of (4). Let

$$\tilde{\Xi}_2(T,\alpha) = \tfrac{1}{2}\zeta \cdot \Phi_\eta^\alpha(T) \int_0^T \Phi_\eta^\alpha(t)^{-1} \mathrm{D}_\eta^2 f_\eta(\xi^\alpha(t),0)\left(\Phi_\eta^\alpha(t)\hat{\zeta}, \Phi_\eta^\alpha(t)\hat{\zeta}\right)\mathrm{d}t.$$

Theorem 1. *Suppose that $M^n(\alpha)$ has a simple zero at $\alpha = \alpha_0$, where n is the smallest of such positive integers. Then $\mu_\alpha^n\hat{\zeta} = \hat{\zeta}$ or $\mu_\alpha^{2n}\hat{\zeta} = \hat{\zeta}$ only at $\alpha = \alpha_0$ in its neighborhood. Moreover, if $\mu_\alpha^n\hat{\zeta} = \hat{\zeta}$ (resp. $\mu_\alpha^{2n}\hat{\zeta} = \hat{\zeta}$), then two branches (resp. one branch) of symmetric periodic orbits appear (resp. appears) at $\alpha = \alpha_0$ and the period of the periodic orbits tend to nT_{α_0} (respectively to $2nT_{\alpha_0}$) as they approach to $(\xi,\eta) = (\xi^{\alpha_0}(t),0)$. In addition, we have*

$$\alpha = \alpha_0 + \Delta\alpha(\alpha_0)\varepsilon + \mathscr{O}(\varepsilon^2),$$
$$T = nT_{\alpha_0} + \Delta T(\alpha_0)\varepsilon + \mathscr{O}(\varepsilon^2)$$

with

$$\Delta\alpha(\alpha_0) = \frac{\tilde{\Xi}_2(nT_{\alpha_0},\alpha_0)}{\mathrm{d}M^n(\alpha_0)/\mathrm{d}\alpha},$$
$$\Delta T(\alpha_0) = n\frac{\mathrm{d}T_{\alpha_0}}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\tilde{\Xi}_2(nT_{\alpha_0},\alpha_0)}{\mathrm{d}M^n(\alpha_0)/\mathrm{d}\alpha}$$

on the new branches of symmetric periodic orbits, which are written as $x_\varepsilon(t) = x^\alpha(t) + \mathscr{O}(\varepsilon)$, where T represents their period (resp. the half of their period). If $M^n(\alpha)$ has no zero at $\alpha = \alpha_0$ for any $n \in \mathbb{N}$, then such a family of symmetric periodic orbits does not exist.

Theorem 2. *Suppose that the hypotheses of Theorem 1 hold for $n > 1$. Then the symmetric periodic orbit $x^\alpha(t)$ is linearly stable near $\alpha = \alpha_0$.*

We show that a symmetric periodic orbit $x_\varepsilon(t)$ on the new branches with $x_\varepsilon(0) \in \mathrm{Fix}(R)$ near $x^\alpha(t)$ is written as

$$x_\varepsilon(t) = x^\alpha(t) + \varepsilon\Phi^\alpha(t)\hat{z}(\alpha) + \mathscr{O}(\varepsilon^2)$$

with $x_\varepsilon(0) = (\xi^\alpha(0), \varepsilon\hat{\zeta})$, where $0 < \varepsilon \ll 1$. The VE of (1) around $x_\varepsilon(t)$ is given by

$$\dot{w} = \mathrm{D}f(x_\varepsilon(t))w, \tag{6}$$

the right hand side of which is $T(\varepsilon)$- or $2T(\varepsilon)$-periodic in t, depending on whether $\Phi^\alpha(t)\hat{z}(\alpha)$ is nT_α- or $2nT_\alpha$-periodic. Let

$$A(\alpha)w = \int_0^{pnT_\alpha} \Phi^\alpha(t)^{-1} \mathrm{D}^2 f(x^\alpha(t))(\Phi^\alpha(t)\hat{z}(\alpha), \Phi^\alpha(t)w)\mathrm{d}t$$

for $w \in \mathbb{R}^4$. The monodromy matrix $\Psi_\varepsilon(pT(\varepsilon))$ of (6) is approximated up to $\mathscr{O}(\varepsilon)$ by

$$\begin{aligned}&\bar{\Psi}_\varepsilon(pT(\varepsilon))\\ &= \Phi^{\alpha_0}(pnT_{\alpha_0}) + \varepsilon\biggl(\Delta\alpha(\alpha_0)\frac{\partial\Phi^{\alpha_0}}{\partial\alpha}(pnT_{\alpha_0})\\ &\quad + p\Delta T(\alpha_0)\frac{\mathrm{d}T_{\alpha_0}}{\mathrm{d}\alpha}\dot{\Phi}^{\alpha_0}(pnT_{\alpha_0})\\ &\quad + \Phi^{\alpha_0}(pnT_{\alpha_0})A(\alpha_0)\biggr).\end{aligned} \tag{7}$$

Theorem 3. *Suppose that the hypotheses of Theorem 1 hold and the approximate monodromy matrix $\bar{\Psi}_\varepsilon(pT(\varepsilon))$ given by (7) has an eigenvalue 1 of multiplicity two up to $\mathscr{O}(\varepsilon)$. Then for $|\varepsilon|$ sufficiently small it has the same stability type as the full monodromy matrix $\Psi_\varepsilon(pT(\varepsilon))$.*

In the talk, we also illustrate the above theory for the generalized Hénon-Heiles system

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= \xi_2,\ \dot{\xi}_2 = -\xi_1 - c_0\xi_1^2 - c_1\eta_1^2 - c_2\eta_1^3,\\ \dot{\eta}_1 &= \eta_2,\ \dot{\eta}_2 = -\omega^2\eta_1 - d_1\,\xi_1\eta_1 - d_2\,\xi_1\eta_1^2,\end{aligned} \tag{8}$$

where c_0, c_1, c_2, d_1 and d_2 are constants.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS Kakenhi Grant Number JP17H02859.

References

[1] K. Yagasaki, Bifurcations from one-parameter families of symmetric periodic orbits in reversible systems, *Nonlinearity*, **26** (2013), 1345–1360.

[2] M. Hénon and C. Heiles, The applicability of the third integral of motion: Some numerical experiments, *Astron. J.*, **69** (1964), 73–79.

[3] K. Yagasaki, Subharmonic bifurcations and stability for one-parameter families of symmetric periodic orbits in reversible systems, in preparation.

乱数生成と検定によるクラウド型量子コンピュータの分析

田村 賢太郎 [1], 鹿野 豊 [1,2]
[1] 慶應義塾大学大学院理工学研究科, [2] チャップマン大学量子科学研究所
e-mail : cicero@keio.jp, yutaka.shikano@keio.jp

1 概要

量子ビットにおいて 0 と 1 が特定の確率で測定される状態を重ね合わせ状態といい, 中でも 0 と 1 が等確率で測定される重ね合わせ状態を作ることは量子コンピュータの基本動作である. 内蔵された全ての量子ビットをこの等確率な重ね合わせ状態にして測定を行う場合, 量子コンピュータは物理乱数生成器に等しい [1, 2].

物理乱数生成器では出力を検定にかけることで, ハードウェアが正常に働いていることを確認できる. 同様にして, 量子コンピュータ内の量子ビットにおける重ね合わせ状態を出力から分析できるはずである. 特にクラウド型量子コンピュータをはじめとした遠隔型の量子コンピュータにおいて, ユーザがハードウェアに直接アクセスすることは難しい. したがって, 出力から重ね合わせ状態を分析する手法はユーザにとって有益である.

本研究では, IBM のクラウド型量子コンピュータに内蔵された量子ビットを全て 0 と 1 の等確率な重ね合わせ状態にし, 測定を行うというプロセスを繰り返した. 出力に NIST の乱数検定 [3] を適用した結果, 多くの量子ビットにおいて重ね合わせが等確率に用意できていないことや, 重ね合わせが安定しない量子ビットが存在することが明らかとなった.

2 物理乱数生成

IBM の２０量子ビットのクラウド型量子コンピュータ（IBM 20Q Poughkeepsie）のすべての量子ビットを等確率な重ね合わせ状態に用意し, 測定を行うプログラムを使用した. 一回のプログラム実行で, 各量子ビットにつき 8192 ビットのビット列が得られる. これを繰り返し行い, それぞれの量子ビットに対して 579 サンプルを得た.

3 出力の分析

出力の分析において注目したのは次の 3 点である.

- 各量子ビットの等確率性.
- 等確率性の時系列変化.
- 各量子ビットの無規則性.

まず, 各量子ビットの出力を時系列順につなぎ合わせ, 1 の割合を調べた.

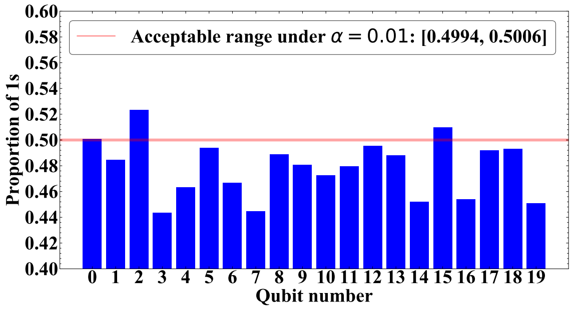


図 1. 各量子ビットの出力に含まれる 1 の割合.

図 1 の赤線は有意水準 $\alpha = 0.01$ のもとでの採択域 [0.4994, 0.5006] を示している. この領域に 1 の割合が含まれていた量子ビットは 1 つもない. ここで生じる疑問は, 量子ビットの出力が一貫して偏っていたのか, それとも特定の期間のサンプルが偏っていたために全体が偏ってしまったのかという点である.

サンプルごとの等確率性の変化を調べるために, 続いて最小エントロピーの変化を可視化した. 図 2 から, 量子ビットによって 1 の割合が安定しているものとそうでないものがあることがわかる. 例えば, 量子ビット 0 の最小エントロピーは比較的安定しているのに対し, 量子ビット 17 には最小エントロピーが急激に低下した期間があることがわかる.

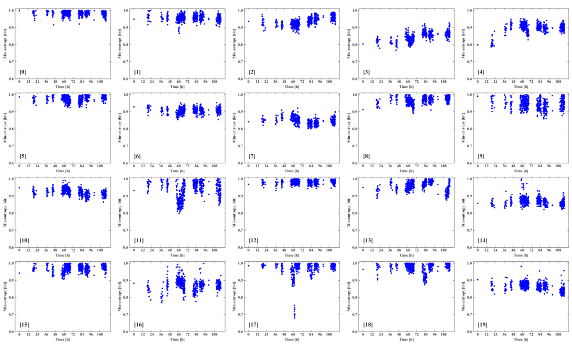


図 2. 各量子ビットの出力における最小エントロピーの変化.

無規則性を調べる目的で, 各量子ビットの 579 サンプルに対して NIST の乱数検定の一部を適用した. 検定に通過したサンプルの割合の一部を表 1 に示す. 8 つの試験と試験番号は以下の対応関係にある.

1) Frequency.
2) Frequency block ($M = 128$).
3) Runs.
4) Longest run of ones ($M = 128, N = 49$).
5) DFT.
6) Approximate entropy ($m = 3$).
7) Cumulative sums (forward).
8) Cumulative sums (backward).

表 1. 量子ビット 0, 12, 17 における各試験を通過したサンプルの割合. サンプル数 579 における NIST の通過条件は ≥ 0.977595.

Test #	Qubits		
	0	12	17
1	0.9344	0.9534	0.7945
2	0.9862	0.9914	0.9016
3	0.9240	0.9465	0.7841
4	0.9914	0.9965	0.9551
5	0.9827	0.9931	0.9758
6	0.9793	0.9810	0.8428
7	0.9430	0.9637	0.7962
8	0.9413	0.9482	0.7910

表 1 では量子ビット 0, 12, 17 の結果を示した. IBM 20Q Poughkeepsie のいずれの量子ビットも, 8 つの検定全てに通過することはなかった. しかし, 中でも量子ビットの 0 と 12 は通過するサンプルの割合がいずれも 90 %を超えており, 重ね合わせ状態が所望の等価な状態に比較的近いといえる. 一方, 量子ビット 17 は最小エントロピーの推移で不安定な挙動を見せたことが検定の結果にも顕れている.

4　まとめ

出力サンプルをつなげて考慮すると, NIST の基準を満たすような等確率性を持った量子ビットはなかった. しかし, 最小エントロピーの時系列変化から, 一貫して偏った量子ビットと, 偏りの度合いが変動する量子ビットとが存在するとわかった. クラウド型量子コンピュータを長期間に渡って使用するコンテクストでは, 量子ビットが安定して重ね合わせ状態を実現できることが求められる. このとき, 重ね合わせの偏りの変動は重要な情報である. 出力に NIST の検定を適用することで, 定量的に量子ビットの重ね合わせ状態を評価し, 量子ビット 0 と 12 が比較的安定して精度の高い重ね合わせ状態を実現できていることが明らかとなった.

クラウド型量子コンピュータをはじめとした遠隔型量子コンピュータでは, ユーザがハードウェアの情報を直接得ることが難しい. そのような状況下で量子ビットの重ね合わせ状態の精度および安定性を判断する 1 つの方法として, 乱数検定の枠組みは有効な選択肢の 1 つである.

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 17K05082, 19H05156 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] K. Tamura, Y. Shikano, Quantum Random Number Generation with the Superconducting Quantum Computer IBM 20Q Tokyo, in: Proc. of Workshop on Quantum Computing and Quantum Information, Vol. **30**, pp. 13–25, 2019.

[2] K. Tamura, Y. Shikano, Quantum Random Numbers generated by the Cloud Superconducting Quantum Computer, arXiv:1906.04410v1 [quant-ph], 2019.

[3] A. Rukhin, J. Soto, J. Nechvatal, M. Smid, E. Barker, S. Leigh, M. Levenson, M. Vangel, D. Banks, A Heckert, J Dray, S Vo, SP 800-22 Rev. 1a. A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, National Institute of Standards & Technology, 2010.

地震波動伝播シミュレーションのための拡散効果を伴う修正波動方程式の混合型有限要素法

今井 隆太 [1], 賀須井 直規 [1], 山田 雅行 [2], 羽田 浩二 [2], 藤原 広行 [3]
[1] みずほ情報総研株式会社,[2] 株式会社ニュージェック,[3] 国立研究開発法人防災科学技術研究所
e-mail : ryuta.imai@mizuho-ir.co.jp

1 はじめに

長周期地震動評価のための地震波動伝播シミュレーションでは，深部浅部統合地盤モデルに対して安定した長時間積分が求められる．地盤モデルは，不整形な層構造や物性値の不均質性のような複雑な地盤特性を反映しており，しばしば数値不安定を引き起している．このような不安定を緩和するために地盤の速度構造を微調整するなどのアドホックな前処理に多大な労力が費されてきた．このため，数値不安定を取り除くような地震波動伝播シミュレーションの平滑化スキームの開発が求められている．

Imai et al.[1] では，地震波動伝播シミュレーションのための平滑化スキームを開発するために，拡散効果を伴う修正波動方程式が導出された．そこでは，修正波動方程式の初期値問題の解が通常の波動方程式の解と熱核との畳み込みで構成できることが示され，差分法によってこのスキームが地震波動伝播シミュレーションに対して平滑化の効果を与えることも示された．地震波動伝播シミュレーションの分野ではこの十数年来，差分法が用いられてきたが，複雑な地盤の層構造や不整形な地表面形状のモデリングでは有限要素法の方が適していると考えられることもあり，最近になって有限要素法が導入されるようになってきている．

本研究では，拡散効果を伴う修正波動方程式の混合型有限要素法を構築して，地震波動伝播シミュレーションに応用するする方法を提案する．

2 修正波動方程式の混合型有限要素法

2.1 数学的準備

拡散効果を伴う修正波動方程式とは以下のような偏微分方程式である [1].

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - b\Delta\right)^2 u(t,x) = a^2\Delta u(t,x). \quad (1)$$

式 (1) は空間変数についての四階微分の項 $b^2\Delta^2 u$ を含んでおり，通常の弱定式化では解について高次の（例えば H^2 程度の）滑かさが要求される．有限要素法においても，計算領域全体で滑かな（例えば C^1 級の）形状関数が必要となるため，形状関数や節点未知変数の設定などの実装が複雑になるという問題点が考えられる．そこで，本質的な未知変数 $u(t,x)$ だけでなく，中間変数 $v(t,x) = \frac{\partial u}{\partial t}(t,x) - b\Delta u(t,x)$ も未知変数として導入することによって，修正波動方程式を以下のような非斉次の拡散方程式の連立方程式に帰着させる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} - b\Delta u &= v. \\ \frac{\partial v}{\partial t} - b\Delta v &= a^2\Delta u.\end{aligned} \quad (2)$$

式 (2) は，二成分の反応拡散方程式系に類似している [2]．混合型有限要素法の構築に先立って，拡散効果を伴う修正波動方程式についての数学的な性質について言及しておく．先ず始めに初期値境界値問題について述べる．領域 Ω が有界な場合，ラプラシアン Δ の固有関数 $\{e_n(x)\} \subset H_0^1(\Omega)$ からなる $L^2(\Omega)$ の正規直交基底を用いることによって，拡散効果を伴う修正波動方程式の初期値境界値問題の解を構成することができる．つまり，固有関数展開の展開係数は以下の常微分方程式系を満たすことがわかる．

$$\frac{d^2u_n}{dt^2} + 2b\lambda_n\frac{du_n}{dt} + (b^2\lambda_n^2 + a^2\lambda_n)u_n = 0. \quad (3)$$

式 (3) の解は $u_n(t) = \exp(-b\lambda_n t)\sin(a\sqrt{\lambda_n}t + \theta_n)$ の形に表されることから，修正波動方程式の解は熱方程式の解の性質と波動方程式の解の性質の両方を持っていることが示唆される．次に，修正波動方程式と Q 値との関係について述べる．式 (3) と通常の（減衰項付きの）単振動の常微分方程式を比較すれば，修正波動方程式は各モードの周波数に反比例した Q 値を導入したことに相当していることがわかる．更に，修正波動方程式の解の伝播速度はモードに寄らずに一定であることもわかる．

2.2　有限要素スキーム

式 (2) の両辺に試験関数 φ, ψ をそれぞれ乗じて弱定式化を導出すると以下の通りとなる．

$$M\left(\frac{\partial u}{\partial t}, \varphi\right) + B(u, \varphi) - M(v, \varphi) = f_1. \quad (4)$$
$$M\left(\frac{\partial v}{\partial t}, \psi\right) + A(u, \psi) + B(v, \psi) = f_2.$$

ここで，$A(f,g) = a^2 \int_\Omega (\nabla f)\cdot(\nabla g) dV$，$B(f,g) = b\int_\Omega (\nabla f)\cdot(\nabla g) dV$，$M(f,g) = \int_\Omega fg dV$ とし，f_1, f_2 は境界上の積分の項とした．式 (4) をガラーキン法で空間方向に離散化することで以下のような離散式を得る．

$$\mathbf{M}\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \mathbf{B}\mathbf{u} = \mathbf{M}\mathbf{v} + \mathbf{f}_1. \quad (5)$$
$$\mathbf{M}\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \mathbf{B}\mathbf{v} = -\mathbf{A}\mathbf{u} + \mathbf{f}_2.$$

ここで，形状関数を $N^p(x) \in H_0^1(\Omega)$ とするとき，それぞれの行列を $\mathbf{M} = (\int_\Omega N^p N^q dV)$，$\mathbf{D} = (\int_\Omega (\nabla N^p)\cdot(\nabla N^q) dV)$，$\mathbf{A} = a^2\mathbf{D}$，$\mathbf{B} = b\mathbf{D}$ と置いた．時間発展については以下のような半陰的時間積分を提案する．

$$\mathbf{M}\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{B}\mathbf{u}^n = \mathbf{M}\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{f}_1. \quad (6)$$
$$\mathbf{M}\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \mathbf{B}\mathbf{v}^n = -\mathbf{A}\mathbf{u}^n + \mathbf{f}_2.$$

行列 $\mathbf{M}$ と $\mathbf{D}$ の固有値をそれぞれ m_k と d_k とするとき，式 (6) に基づく時間積分スキームの安定条件は $\Delta t b\frac{d_k}{m_k} + \Delta t a\sqrt{\frac{d_k}{m_k}} < 2$ となる．質量行列 $\mathbf{M}$ と拡散行列 $\mathbf{D}$ の次元チェックから $\sqrt{\frac{d_k}{m_k}} \approx \frac{1}{\Delta x}$ となるので，この条件は CFL 条件の一般化になっている．とくに，提案している半陰的時間積分スキームは固有値 $\mu_k = \frac{d_k}{m_k}$ が大きいモードほど速くその振幅が減衰することがわかる．

3　弾性波動伝播シミュレーション

数値実験として，2.2 節で構築した混合型有限要素スキームを弾性体方程式に適用した．つまり，拡散効果を伴う修正弾性体方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - b\Delta\right)^2 u_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (7)$$

の混合型有限要素スキームを構築して弾性波動伝播シミュレーションを実施した．初期条件として，変位 u に対して小さい台を持つ初期分布を与えた．図 1 と図 2 にそれぞれ変位 u のスナップショットと直線 $x = y$ 上の変位 u の分布を示す．通常スキームの計算結果に比べて提案スキームによる変位は短波長成分が相対的に多く除去されて平滑化されていることが確認できる．

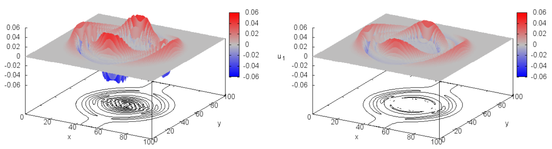


図 1. time=30 における変位 u の分布のスナップショット（左：通常スキーム，右：提案スキーム）

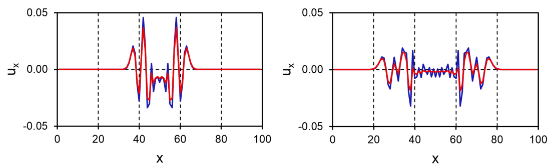


図 2. $x = y$ 上の変位 u の分布（左：time=15，右：time=30）

4　おわりに

拡散効果を伴う修正波動方程式の混合型有限要素法を定式化して，地震波動伝播シミュレーションの平滑化スキームを構築した．混合型有限要素法の数理的側面として，拡散効果を伴う修正波動方程式の初期値境界値問題の解の性質や Q 値との関係を示した．また，修正波動方程式の混合型有限要素法を定式化して，半陰的時間積分スキームを提案した．提案スキームは相対的に高周波数モードを多く減衰させる性質を持つことが示された．更に，弾性波動伝播シミュレーションを実施して，提案スキームが短波長成分のフィルタリングに有効であることを示した．

参考文献

[1] R. Imai, K. Takamuku, and H. Fujiwara, A modified wave equation with diffusion effects and its application as a smoothing scheme for seismic wave propagation simulations, Int. J. Comput. Math., Vol.96, No.5(2019), 935-949.

[2] 山本宏子, 波動方程式の反応拡散近似, 応用数学合同研究集会予稿集, 2016

拡散テンソルトラクトグラフィへの応用のためのフィザルムソルバの拡張

増谷 佳孝
広島市立大学大学院情報科学研究科
e-mail: masutani@hiroshima-cu.ac.jp

1 はじめに

拡散テンソルトラクトグラフィ(Diffusion Tensor Tractography: DTT)は，拡散テンソルの最大固有値方向などによる線維方向の推定に基づき，脳白質線維束などの構造を可視化する[1]．診断や治療における応用[2]の初期から指摘されてきた線維交叉などにおける問題を解決するため，本稿ではフィザルムソルバの拡張による新しいDTT手法の提案と，その応用結果について報告する．

2 方法

フィザルムソルバはTeroら[3]により提案された，粘菌の成長を模した数理モデル[4]に基づく適応的なネットワークデザインのツールである．まず，ネットワーク状のグラフのノードのうち２つを流れの始点および終点とし，エッジを管と考える．このとき，管の内部をポアズイユ流が始点から終点へと流れるが，最短経路上の流量が増大するよう，各エッジ固有の伝導率が適応的に変化する．このモデルにおけるi番目のノードとj番目のノードをつなぐエッジの長さをL_{ij}，伝導率をD_{ij}，またノードでの圧力をp_iとすると，i番目のノードに接続するエッジの流量Q_{ij}の和は保存則により以下が成り立つ．

$$\sum_j Q_{ij} = \sum_j \frac{D_{ij}}{L_{ij}}\left(p_i - p_j\right) = \begin{cases} I_0 & (i=1) \\ -I_0 & (i=2) \\ 0 & (i \neq 1,2) \end{cases} \tag{1}$$

ただし$i=1$は始点，$i=2$は終点のノードのインデクスで，始点と終点に流量I_0の流入および流出を仮定している．伝導率D_{ij}は以下のように管の径a_{ij}および粘性係数κより決定される．

$$D_{ij} = \frac{\pi {a_{ij}}^4}{8\kappa} \tag{2}$$

粘菌の成長に伴い伝導率は以下の式で更新され，これにより最短経路上の流量が増大する．

$$\frac{d}{dt}D_{ij} = f\left(\left|Q_{ij}\right|\right) - D_{ij} \tag{3}$$

これは管の径a_{ij}が適応に伴い変化していくことを模擬している．

DTT への応用では MR 画像の各画素の位置にノードを置き，隣接する画素をエッジで接続したグラフを考える．一般に，DTT では与えられた追跡開始領域内の複数の開始点から目標領域へ線維追跡を行う．そこでフィザルムソルバの拡張として，まず始点ノード，終点ノードを複数設定することを考える．単純には (1)式が成立するよう流量I_0を複数の始点および終点に均等に分配すればよい．しかし，開始領域の決定にはあいまい性が存在し，すべての開始点が抽出対象の線維に対応するとは限らない．よって，始点群のさらに上流および終点群の下流にそれぞれ１つずつ仮想ノードを配置することで，実際の始点群および終点群に対する流量の選択性を持たせ，上記の問題を解決する．

次に，拡散異方性に基づきエッジの長さL_{ij}を調整する．画素間の最短距離を１とするとエッジの長さは1，$\sqrt{2}$，$\sqrt{3}$の３種であるが，各画素の位置での拡散異方性によりエッジの長さを調整し，拡散の最大方向の流量を増やす．すなわち拡散異方性により調整されたエッジの長さ${L_{ij}}'$を以下のように定義する．

$${L_{ij}}' = L_{ij} \cdot \phi\left(\mathbf{T}_i, \mathbf{T}_j\right) \tag{4}$$

ここで$\mathbf{T}_i$はノード位置での拡散テンソルを表し，調整関数$\phi(\cdot)$は以下のように定義する．

$$\phi\left(\mathbf{T}_i, \mathbf{T}_j\right) = \max\left\{ \begin{matrix} \left(1 - \left|\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{m}_{ij}\right|\right)^{FA_i}, \\ \left(1 - \left|\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{m}_{ij}\right|\right)^{FA_j} \end{matrix} \right\} \tag{5}$$

ただし，$\mathbf{v}_i$は$\mathbf{T}_i$の最大固有値方向，$\mathbf{m}_{ij}$はエッジの方向を表す単位ベクトル，FA_iは$\mathbf{T}_i$より得られる異方性指標で 0~1 の値をとる．すなわち，接続するノードの拡散異方性が高く，かつ拡散の最大方向に近い方向のエッジは元の長さに比べ短く調整され，その結果として流量が増大し，最短経路として選ばれやすくなる．

最後に，グラフのエッジ上の流れをベクトル場に変換する．エッジ上の経路をそのまま線維とすると元画像の解像度に依存して滑らかでない追跡軌跡となるため，以下の式で各ノードからの流出をベクトル場に変換した後，ストリームライン[5]により線維形状を得る．

$$\mathbf{F}_i = \sum_j \left\{ R(Q_{ij}) \Big/ \sum_j R(Q_{ij}) \right\}^{\beta} \mathbf{m}_{ij}, \qquad (6)$$

$\mathbf{F}_i$は各ノード位置の流れベクトルであり，$R(\cdot)$は流出のみを扱うためのランプ関数，βは各方向のエッジにおける流量の重みを制御する係数で高い値ほど流量の重みを強調する．

3 結果

合成線維を水とともに封入したファントム模型を MRI 装置で撮影した FiberCup Data[6]より中央のスライス画像を抽出し，提案手法の適用を２次元で試みた（図 1）．追跡開始領域および目標領域内の画素位置のノードに始点および終点を設定した後，エッジ長さの調整，フィザルムソルバの適用，ベクトル場への変換を行い，開始領域からのストリームラインを抽出した．伝導率の更新関数は$f(x) = x$，ベクトル場変換の重み係数には$\beta = 1.0$を使用した．比較のために使用した最大固有値方向の追跡による DTT では線維交叉部において抽出対象外の線維へと誤追跡が生じ，目標領域に到達しないことが確認された（図 1c）．一方，提案手法では対象の線維が良好に描出された（図 1d）．

4 おわりに

基本的な DTT 手法との比較において提案手法の優位性および有効性が確認できた．しかし，結果はフィザルムソルバにおける更新回数やエッジ長さの調整関数，ベクトル場への変換時のパラメタなどに影響されるため，実験による至適な条件の探索が今後の最も重要な検討課題である．また，実際の３次元の医用画像ではノードおよびエッジの増加に伴い計算コストが大幅に上昇するため，計算の高速化も検討したい．

謝辞　本研究の一部は JST CREST (JPMJCR15D1)「臨床医療における数理モデリングの新たな展開」の助成による．また，フィザルムソルバの実装に関し貴重な助言を頂いた九州大学 IMI の手老篤史博士に感謝します．

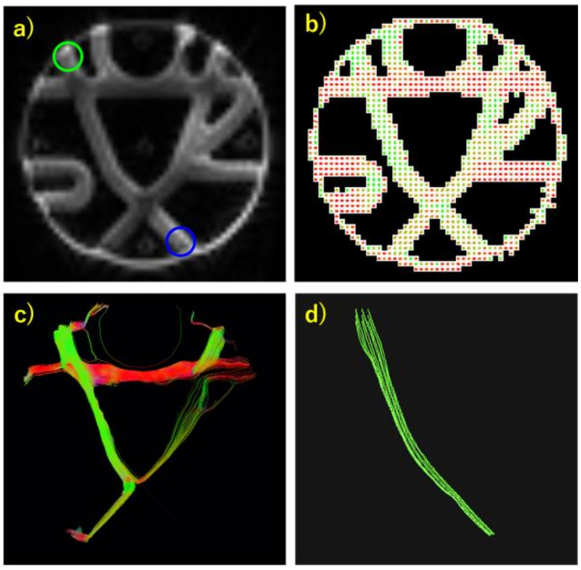


図 1. FiberCup Data における結果

a) b=0 画像（緑：開始領域，青：目標領域），b) 拡散テンソル場(赤～緑は線維方向)，c) 基本的な DTT 手法による結果，d) 提案手法による結果

参考文献

[1] Jeurissen B, Descoteaux M, Mori S, Leemans A, Diffusion MRI fiber tractography of the brain, NMR in Biomedicine, Vol.32, No.4, (2019), e3785.

[2] 青木，阿部，増谷，高原（編），これでわかる拡散 MRI　第３版，秀潤社，2013.

[3] Tero A., Kobayashi R., Nakagaki T, Physarum Solver: a Biologically Inspired Method of Road-Network Navigation, Physica: A Statistical Mechanics and its Applications, Vol.363, No.1, (2006), 115-119.

[4] Nakagaki T, Yamada H, Toth A, Maze-Solving by an Amoeboid Organism. Nature, Vol.407, (2000), 470.

[5] Faber TE, Fluid Dynamics for Physicists. Cambridge University Press, Cambridge (1995).

[6] Poupon C, Rieul B, Kezele I, Perrin M, Poupon F, Mangin JF, New Diffusion phantoms dedicated to the study and validation of HARDI models. Magnetic Resonance in Medicine, Vol.60, (2008), 1276-1283

神経スパイクモデルの連立微分方程式の数値解法について

伊藤 利明
同志社大学
toito@mail.doshisha.ac.jp

1　概要

ニューロン(神経細胞)の１つ１つの発火現象は、非常に強いスパイクを待つ関数で再現される．この関数は、非線形常微分方程式モデルで解がある値になった時のジャンプ（スイッチング）で再現される．ニューロンが複数で協調的な振る舞い（シンクロ）をする場合に、この振舞いを数値解法でうまく扱うには、計算精度の確保にスパイク付近での特殊な扱いが必要となる。この扱いが多数(およそ 10^{11} 個)のニューロンのネットワークからのシンクロによるマクロ現象としての脳波信号の周期の再現シミュレーションに影響する．以上は，海馬から外部入力刺激が脳の他領域に起こす脳波のパターンや，ある記憶に対応した脳波発現などのマクロレベルで現れるシンクロ現象の再現シミュレーションでは重要となる[1-5]．本報告では、シミュレーションによる脳波信号の周期の再現について，数値処理からの配慮を報告する.

2　スパイクモデル

ニューロンの発火（発生波）の種類は非常に多い．以下の波のモデル式(1)は 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[3]．ここでVは発生電位で信号は不連続であり，I は外部からの入力(基底 DC 電圧，干渉項)，UはVの復元変数である．

$$\begin{aligned}&\dot{V} = 0.04V^2 + 5V + 140 - U + I\\&\dot{U} = a(bV - U)\\&\text{if } V \geq +30\,[mV]\ ,\ \text{then}\\&V \leftarrow c,\ U \leftarrow U + d\end{aligned} \tag{1}$$

図 1 に(1)式を用いた典型的な 2 つのニューロン(RS と CH)の発火パターンを示す． RS, CH のスパイクは以下のパラメータ設定となる，

RS: $a = 0.02, b = 0.2, c = -65, d = 8$

CH: $a = 0.02, b = 0.2, c = -50, d=2$.

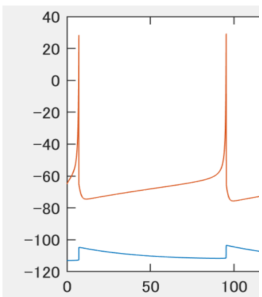
数値積分法から見ればスティフ系の振る舞いと似たジャンプによる不連続・振動を含む．(1)の解のスイッチングによる不連続性から，数値積分法の前進(陽)解法が適している．不連続でない解の部分の変化は穏やかだが，解が不連続に変化する直前の解は連続に急増加する．従い数値積分法での Δt(1 ステップ)での変動が大きく，解のスイッチング判断が難しい．また V の値からニューロンの発火を判断する際にも，この特徴が問題となる.

以上から本研究では，複数のニューロンの干渉モデルを，(1)式の I を下式(2)の単純なものとし数値解法の振る舞いを調べた.

関数 I_i : $V_j \geqq 30r$, r=0.5, … , 0.9 を発火状態のニューロン(j)の V 値とする．あるニューロン(i)にシナプス接続した他の発火したニューロン(j)が(N_i)個ある場合に以下で求める，

$$I_{temp} = \frac{I_{max}}{N_i}\sum_j^{N_i} V_j\ ,\ I_{max} = 20\ , \tag{2}$$

$$I_i = max\{I_{max}\ ,\ I_{temp}\}$$



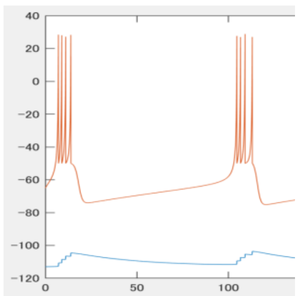


図 1. RS(左)と CH(右)ニューロン黄線=V, 青線=U.
横軸は時間[ms]，縦軸は V, U の値.

図 2 は CH の相図で，図内の実線は $\dot{V} = 0$, $\dot{U} = 0, V = 30, V = c$ である．(1)から I_iが大きいと V_i は早く増加する．この結果として V_i の周期は短くなる．従い他のニューロンの発火にシンクロする機能となる．以上の設定で複数の RS と CH ニューロンそれぞれのシンクロ現象について，数値計算時のパラメータを変えて，その解の再現性を評価する.

3　数値積分法

先の理由から数値積分法には前進解法の Euler 法と古典的 R-K(44)法を用いた.

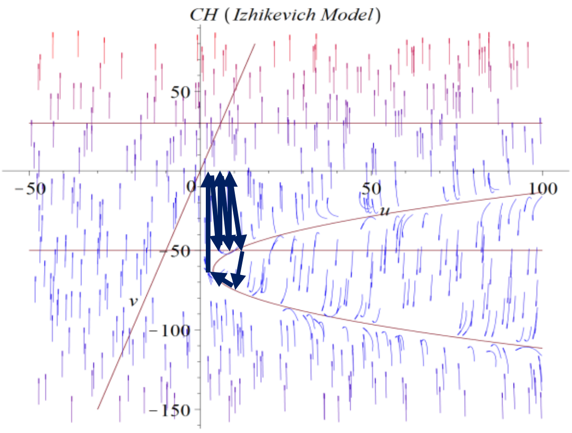


図 2.　相図 CH，青矢印は周期軌道

図 3 は RS(右)，CH(左)において，単体のニューロンと比べ RS では周期が短いシンクロ現象が数値解法で得られた．I の値を大きくすると波形が非常に大きく変化するモデルとなり，発火の判断が非常に難しくなる．ニューロンの数はどれも 500 個(全て互いに接続)，Δt=0.01，r=0.5．また図 4 に CH ニューロンの，I_i : $V_j \geqq$ 30r の r の値に非常に敏感に依存する結果を示す（r = 0.9）．実際には r=1.0 に近い値での計算がよい.

4　結果とまとめ

ニューロンのシンクロ現象を正しく再現するには，他のニューロン状態との I(干渉項)をうまく扱わないと，正確なシミュレーションにならない．非常に多くの方程式を同時に解く問題では，1 つ 1 つの方程式の誤差が，方程式の数により精度の程度と同程度かそれ以上になる場合がある．力学系視点では系の特異性は擾乱に対し安定であるが，大規模方程式系の本モデルの様な場合はシンクロ現象の性質に解の個々の数値的な制度の扱いが直接反映するため慎重な扱いが必要である.

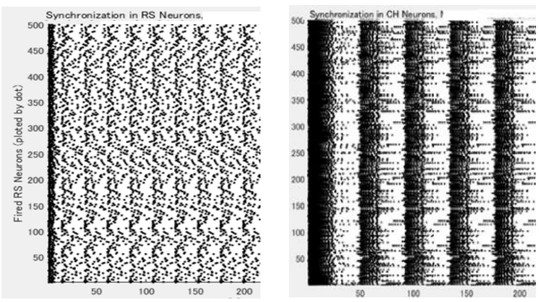


図 3.　r=0.5，Euler 法による RS(右)，CH(左)

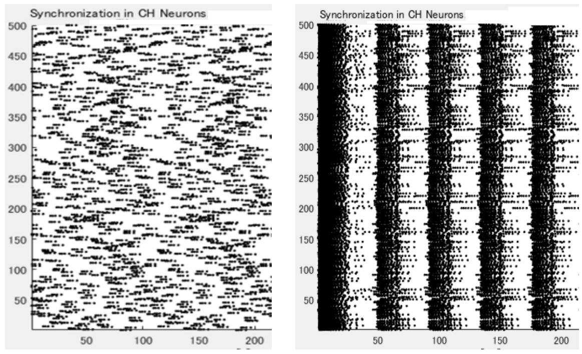


図 4.　CH 計算結果，図 3 と r=0.9 以外は条件が同じ. Euler(左)，RK44(右).
数値積分法によりシンクロ現象の再現結果が大きく異なる.

実際のシミュレーションでは計算効率も問題であり，計算で用いるニューロンの個数が多いほど，計算時間がかかる．また誤差は精度の高い数値積分法と条件分岐制御を行えば減るが，時間がかかる.

以上から，非常に多数のニューロンによるシンクロ現象からマクロな脳波レベルの再現を目指すシミュレーションの実施には何らかのトレードオフ導入か，不連続部分での解の振る舞いの統計手法を導入した誤差解析による対処の工夫等が必要になると思われる.

参考文献

[1] http://www.digicortex.net/
[2] 伊藤利明，ODE とコネクトーム，日本応用数理学会 2018 年度年会, 予稿集，2018.
[3] E. M. Izhikevich, Dynamical Systems in Neuroscience, MIT Press, 2007.
[4] R. E. Mirollo, S. H. Strogatz, Synchronization of Pulse-Coupled Biological Oscillators, SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol.50, No.6, (1990), 1645-1662.
[5] E. M. Izhikevich, Polychronization: Computation With Spikes, Neural Computation, (2005).

非分離型解法での抵抗境界条件と冠動脈分岐流量の分配

宇田 智紀 [1]

[1] 東北大学 材料科学高等研究所 数学連携グループ

e-mail : t_uda@tohoku.ac.jp

1 序論

計算機の発達に伴って様々な科学分野における大規模数値計算への需要が高まっており，医療分野も例外ではない．心臓の左心室を出た動脈血はその総量の 95%がバルサルバ洞から大動脈へ送られ，残りは左右冠動脈へ分岐する．冠動脈を流れる血液は心筋に栄養（特に酸素）を供給するため，心機能および関連する病理を考える上で極めて重要な解析対象といえる．本研究の目的は，数値シミュレーションによって冠動脈血流を正確に再現することで冠動脈血栓症などの病理における数理的メカニズムの理解を進めることである．

冠動脈血流シミュレーションにおける一つの大きな課題が適正な流量の実現とそのための境界条件の設定である．バルサルバ洞から大動脈および冠動脈への分岐のモデルにおいて，末梢血管まですべて計算することはできないため適当なところで打ち切った血管形状で計算を行うことになるものの，これら境界で自由流出境界条件を使うことは現実に即していない．というのも，バルサルバ洞の直径約 30mm に対して分岐点での冠動脈の直径は約 2–4mm しか無く，単純に自由流出にした計算では総量の 98%以上が大動脈側へ流れ冠動脈側の流量が極端に少なくなってしまうからである．

そこで本研究ではノイマン境界条件の一種である抵抗境界条件およびインピーダンス境界条件を扱う．抵抗境界条件は，概念的には流出量の増大に応じて圧力が上がることを要請するもので，流出量が多いほど圧力勾配が緩やかになり流出量を抑える効果を持つ．電気回路の抵抗における電圧・電流の比例関係とのアナロジーで，この境界条件における圧力・流量間の比例係数も抵抗（値）と呼ぶ．インピーダンス境界条件も，電気回路とのアナロジーであって同様の効果を持ち，時間方向への平滑化効果を持つ．これらの境界条件を設定することで分岐間の流量分配をある程度制御できる．その際，抵抗やインピーダンスの適正なパラメータ事前設定が重要だが，Olufsen らによる血管フラクタルツリーモデルで打ち切った末梢血管を置き換えることで抵抗・インピーダンスを推定することが可能である．

本講演では，まず Navier-Stokes 方程式の非分離型解法での抵抗境界条件およびインピーダンス境界条件の定式化について述べる．その後，血管フラクタルツリーモデルによる抵抗の推定方法を示し，最後に流量分配を実現するための発見的方法論と数値計算結果を紹介する．

Existence and non-existence of the asymmetrical rotating solution of the reaction-diffusion particle model

岡本 守 [1], 長山 雅晴 [2], 後藤田 剛 [3]

[1] 北海道大学 理学院数学専攻，[2] 北海道大学 電子科学研究所，[3] 名古屋大学 多元数理科学研究科

1 概要

集団運動は多くの生物に見られる現象で，典型的には鳥や魚，昆虫の群れなどで見ることが出来る．これらの運動は各生物種が内包する複雑な機構を通じて実現されている可能性があるが，一方で，Vicsek は比較的単純な規則でもって，これらの集団運動のような挙動を再現できることを示した [1]．一方で，集団運動を実験的に理解しようという試みにおいては界面活性剤を用いた系で渋滞様の集団運動が観察され [2, 3]，その発生が数値計算を援用して分岐的に理解されるといった成果がある [4]．

今回，円環水路上で樟脳を用いて行われた実験に注目した．円環水路上に２枚の円形樟脳濾紙を浮かべると，この２枚が共に等速で進行することがある．この時，円環の中心を対象点として２枚の樟脳濾紙が点対称であるか，非対称となるかで２通りの運動が考えられる．実際に，実験では対称，非対称両方の運動が確認され，２枚の樟脳運動が非常に近接しながら等速で運動することが観察されており，モデル方程式が対応する解を持つことも数値的に確認されている [4]．しかしながら，一般的には水面が汚染されている場合には界面活性剤による運動は抑制される傾向にあることが古くから指摘されており [5]，２枚の樟脳円盤が近接しながら等速で運動する現象は興味深い対象である．

以上から，本研究では先行研究で用いられたモデル方程式を数学的に解析することで，非対称な等速運動に対応する解の存在について調べた．結果として，その様な解が存在するための十分条件と，存在しないための十分条件を得た．

2 モデル方程式と解析の概要

本研究では，先行研究 [4] で用いられた，以下の周期境界条件下の正規化されたモデル方程式：

$$
\begin{aligned}
&\mu\frac{dx_c^i}{dt} = \gamma(u(t,\pi_L(x_c^i+r))) - \gamma(u(t,\pi_L(x_c^i-r))),\\
&\qquad i = 1,2,\\
&\pi_L(x) = \begin{cases} x, & 0 \le x < L,\\ \pi_L(x-L), & L \le x,\\ \pi_L(x+L), & x < 0,\end{cases}\\
&\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + F(x-x_c^1) + F(x-x_c^2),\\
&\qquad t>0,\quad x\in[0,L),\\
&u(t,0) = u(t,L),\quad \frac{\partial u}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial u}{\partial x}(t,L),\\
&F(y) = \begin{cases} 1, & |y|_L \le r,\\ 0, & |y|_L > r,\end{cases}\\
&|y|_L = \min_{n\in\mathbb{Z}} |y+nL|,
\end{aligned}
\tag{1}
$$

に注目した．等速運動に対応する解として，通常の反応拡散系における等速進行波解の定義に倣い，以下の方程式：

$$
\begin{aligned}
&0 = \gamma(U(z_c^i+r)) - \gamma(U(z_c^i-r)) - \mu c,\\
&\qquad i=1,2,
\end{aligned}
\tag{2}
$$

$$
\begin{aligned}
&0 = \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\frac{\partial U}{\partial z} - U + F(z-z_c^1) + F(z-z_c^2),\\
&\qquad z\in[0,L),
\end{aligned}
\tag{3}
$$

の解を等速運動に対応する解として速度 c の等速回転解と呼ぶ．更に等速回転解 $(U(z), c, z_c^1, z_c^2)$ が $|z_c^1 - z_c^2| = L/2$ を満たす時，その解は対称であると呼び，さもなくば非対称であると呼ぶ．

部分問題として (3) を考えれば，その解 $U(z)$ は (c, z_c^1, z_c^2) を用いて容易に表示できるので，その結果を (2) に代入することで，等速回転解の

存在，ないし非存在が，以下の非線形方程式：

$$\gamma(U(z_c^1+r))-\gamma(U(z_c^1-r)) \\ =\gamma(U(z_c^2+r))-\gamma(U(z_c^2-r)), \quad (4)$$

の可解性に関連付けられる．最後に，(4) の可解性を調べることで，以下の結論を得た：

定理 1 (等速回転解の存在と非存在) $0<4r<L$ なる r,L と，単調減少な $\gamma\in C^2$ について，方程式 (2)，(3) の可解性は以下のようになる：

1) 任意の $c>0$ に対して，適切な $\mu>0$ を取ることで，速度 c の対称な等速回転解が存在するように出来る．特に $c>0$ に対して，適切な μ は一意に定まる．

2) いかなる $\mu>0$ に対しても，速度 0 の非対称な等速回転解は存在しない．言い換えれば，停止する際には必ず対称な位置で停止する．

3) $\gamma''\geq 0$ とする．いかなる $\mu>0$ に対しても，非対称な等速回転解は存在しない．

4) $\rho=4r/L$ とする．以下の 2 本の不等式が同時に満たされるとする：

$$\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{4r^2(1-\rho)}\right)\gamma'(\rho)<(1-\rho)\gamma''(\rho), \\ (1-\rho)\gamma''(\rho)<\gamma'(\rho).$$

この時，十分大きな $c>0$ に対して，ある適切な $\mu>0$ が存在して，速度 c の非対称な等速回転解が存在する．

3 議論

本研究で得られた結果から，モデル方程式 (1) が非対称な等速回転解を持つための条件には γ の凸性，即ち，界面活性剤濃度に対する表面張力の応答が重要であるという結論が得られる．先行研究で非対称な等速運動が再現された理由は，上に凸な領域を持つような γ を計算に用いたためである．一方で，実験的には，樟脳を始めとした界面活性剤の多くは，単独では濃度に対する表面張力の応答として下に凸の曲線を描く [6]．このことは，モデル方程式 (1) は何らかの修正を必要とすることを示している．

参考文献

[1] T. Vicsek, A. Czirok, E. Ben-Jacob, I. Cohen, O. Shochet, *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles*, Phys. Rev. Lett.75, 1226–1229 (1995).

[2] N. J. Suematsu, S. Nakata, A. Awazu and H. Nishimori, *Collective behavior of inanimate boats*, Phys. Rev. E, 81, 056210 (2010).

[3] 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, 012911 (2013).

[4] K. Nishi, 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, 022910 (2015).

[5] L. Rayleigh, *Measurements of the Amount of Oil Necessary in Order to Check the Motions of Camphor upon Water*, Proc. R. Soc. Lond 47, 364–367 (1889).

[6] C. C. DEWITT and R. F. MAKENS, *THE SURFACE RELATIONS OF THE COMPONENTS OF PINE OIL AND OF POTASSIUM ETHYL XANTHATE. II*, J. Am. Chem. Soc 54, 455–464 (1932).

細胞の大きさと形状を残す空間離散モデルの連続化の提案と応用

石井 宙志 [1], 栄 伸一郎 [1], 佐藤 純 [2]，○田中吉太郎 [3,*]，八杉徹雄 [2]
[1] 北海道大学，[2] 金沢大学，[3] はこだて未来大学
e-mail : y-tanaka@fun.ac.jp

1 概要

多細胞生物の発生過程では，細胞の形や分布の様子といった離散的な空間構造が観察される．拡散や細胞膜結合型のタンパク質などの細胞膜を介する相互作用は，そのパターン形成や発生において中心的な役割を担うことが多い．例えば，それらは細胞の分化や細胞極性，それからの器官の発生位置を制御する．こうした現象を理論的に解析するとき，我々は，しばしば領域を四角形や六角形に分割し，その格子上で，空間の独立変数が離散量である数理モデルを構築する．本予稿では，このようなモデルを離散モデル，空間の独立変数が連続であるものを連続モデルと呼ぶことにする．離散モデルは実験との相性が良いことがある．例えば，ショウジョウバエの視覚中枢における分化の伝搬の数理モデルがある．[1, 2] では，このモデルを用いて，視覚中枢における神経細胞の分化の伝搬の実験の再現や，予測を与えることに成功している．しかし，一般的に離散モデルは解析が困難であることが多い．経験則的に，細胞や格子の大きさの 0 極限をとって，連続モデルにするが，分化の波の伝搬モデルでは，うまく機能しなかった．そこで，本研究は，一般的に，細胞や格子の大きさを残したまま，離散モデルを連続モデルに書き換える方法を提案する．Shift 作用素を用いることで離散モデルが各点的に連続モデルに同値に変形できることと，積分作用素を用いることで，その方程式の解を近似しうる方程式を導出できることを示す．

2 連続化の方法の主要なアイデア

一般的な離散モデルを用いて，連続化の方法を説明する．1 次元空間上に長さ l の N 個の細胞が敷き詰められているとして，以下の発展方程式を考える:

$$u_{i,t} = f(u_{i-1},\ u_i,\ u_{i+1}) + g(u_i), \quad t>0, \quad i=1,\dots,N, \tag{1}$$

ここで，$u_i = u_i(t)$ は i 度番目の細胞 C_i 上の化学物質の濃度や密度であり，f はなめらかな関数で，細胞間相互作用に対応し，g も滑らかな関数で，化学反応項とする．区間を $\mathbb{T} := [0, Nl]$ とし，周期境界条件:$u_0(t) = u_N(t), u_1(t) = u_{N+1}(t)$ を課しておく．f の典型的な例は，拡散や側方抑制である：

$$f_{\mathrm{dif}}(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}) = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{l^2},$$
$$f_{\mathrm{del}}(u_{i-1}, u_{i+1}) = \frac{-u_{i-1} - u_{i+1}}{l}.$$

$i = 1, \dots, N$ の方程式 (1) に対して，特性関数

$$\chi_{C_i}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in C_i, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

を用いて，

$$u(x,t) := \sum_{i=1}^{N} u_i(t)\chi_{C_i}(x) \tag{2}$$

と定義する．i 番目の方程式 (1) 内の未知変数に特性関数 $\chi_i(x)$ をかけて，重ね合わせるという変数変換を行うと，

$$u_t = f(\sum_{i=1}^{N} u_{i-1}(t)\chi_{C_i}(x),\ u,\ \sum_{i=1}^{N} u_{i+1}(t)\chi_{C_i}(x)) + g(u),$$

を得る．隣の細胞からの影響力は平行移動に注意すると以下のように変形できる：

$$u_t = f(u(x-l,t),\ u,\ u(x+l,t)) + g(u). \tag{3}$$

これで連続モデルにすることができた．この方程式は各点的に (1) と等しくなる．

また実験系などに適用しやすくするため，積分作用素を用いた変形について説明する．shift 作用素を平行移動された Dirac Delta 関数 $\delta_l := \delta(x+l)$ との合成積と表せば，式 (3) は

$$u_t = f(u * \delta_{-l},\ u,\ u * \delta_l) + g(u),$$

と記述できる．ここで，Dirac Delta 関数は Nl 周期を持つとする．Dirac Delta 関数を Nl 周期の軟化子 $\rho_\varepsilon(x) \in C_0^\infty(\mathbb{T})$ で近似すると

$$u_t^\varepsilon = f(u^\varepsilon * \rho_{\varepsilon,-l},\ u^\varepsilon,\ u^\varepsilon * \rho_{\varepsilon,l}) + g(u^\varepsilon), \tag{4}$$

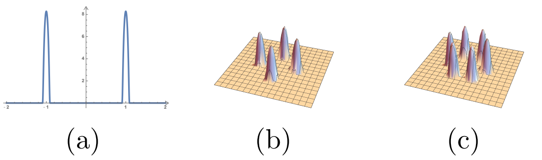


図 1. f_{dif} の積分核 K の形状．(a)1 次元上，(b) 四角格子上，(c) 六角格子上

ここで，$0 < \varepsilon \ll 1$ で，$\rho_{\varepsilon,l} := \rho_\varepsilon(x+l)$ とした．この方程式はパラメーター ε に依存するので，解を $u^\varepsilon(x,t)$ と記述した．さらに細胞間相互作用が拡散のように線型であると仮定すれば，

$$u_t^\varepsilon = K * u^\varepsilon + a_0 u^\varepsilon + g(u^\varepsilon),$$

の形にできる．ここで，積分核 $K = a_{-1}\rho_{\varepsilon,-l} + a_1\rho_{\varepsilon,l}$ とおいた．f_{dif} の場合の形状が，図 1(a) である．この手法の利点は，格子の情報を，f や K の中に入れられることである．上記の変形は，簡単にシステムや，高次元系に応用することができる．例えば，2 変数反応拡散系は，

$$\begin{cases} u_t^\varepsilon = d_u K * u^\varepsilon - \dfrac{2d_u u^\varepsilon}{l^2} + g_1(u^\varepsilon, v^\varepsilon), \\ v_t^\varepsilon = d_v K * v^\varepsilon - \dfrac{2d_v v^\varepsilon}{l^2} + g_2(u^\varepsilon, v^\varepsilon), \end{cases}$$

と導出することができる．ここで，g_1, g_2 はなめらかな関数である．2 次元四角格子上と六角格子上の f_{dif} に対しては，図 1(b), (c) のような形状の積分核 K を導出することができる．

3 格子上の分化の波の数理モデルへの応用

[1] の分化の波の離散モデルに，本手法を適用させた．元々のモデルの第 4 式にある積分項は，なるべく単純な記述にするために局所的な項に修正した．領域を Ω とし，$x \in \Omega$, $t > 0$ に対して以下の連続モデルを提案する：

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

ここで，積分核 $K = K(x,y)$ は考える領域の格子の形によって形状が決まる関数である．六角格子に対応する図 1 (c) の積分核 K を用いて

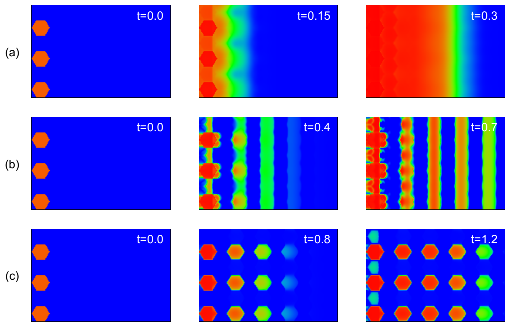


図 2. A の数値計算結果．赤色が高濃度，青色が低濃度を表す．パラメーターは $d_e = 2.0$, $k_e = 1.0$, $k_n = 3.0$, $d_t = 2.0$, $d_c = 0.5$, $k_d = 1.5$, $a_d = 1.0$, $e_a = 10.0$, $A_0 = 1.0$, $\varepsilon = 0.2$ となっている．(a) $a_e = 5.0$, PW モード．(b) $a_e = 2.1$, ストライプモード．(c) $a_e = 1.0$, ごま塩モード．

数値計算をした結果が図 2 である．離散的な初期値を与えると，メッシュに依存せずに，解が離散的な伝搬を再現することがわかる．

4 まとめ

本予稿では，細胞や格子の大きさと形状を残す連続化の手法について説明した．我々の手法では，数理モデルに直接的に空間的な離散な構造を導入することができ，またその影響を連続的な方程式に適用できる理論を用いて解析することができる．軟化子を使った方程式は，元の方程式と解が異なるが，ε を小さくすることで離散モデルの解を近似できると考えている．実際の生命現象では，細胞の形が様々な場合であることがある．講演では，このような場合に対する平均化した球対称な積分核の導入についても，実際の実験データとともに，説明する予定である．今後は，(3) と (4) の特異極限解析と様々なモデルへの応用を行う予定である．

謝辞 本研究は，JST, JPMJCR14D3 と JSPS, JP17K14228 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] M. Sato, T. Yasugi, Y. Minami, T. Miura, and M. Nagayama, *Proc Natl Acad Sci USA*, 113, pp. E5153-E5162 (2016)

[2] Y. Tanaka, T. Yasugi, M. Nagayama, M. Sato, and Shin-Ichiro Ei, *Scientific reports*, 8, 12484 (2018) .

LIF モデルに対する Fokker-Planck 方程式における時間周期的な運動を示す空間非一様解

池田 幸太 [1], Delphine Salort[2], Pierre Roux[3]
[1] 明大総合数理, [2]Sorbonne Université, laboratory LCQB, Université
[3]Paris-Sud and Sorbonne Université
e-mail : ikeda@meiji.ac.jp

1 LIF モデルに対する Fokker-Planck 方程式

脳を構成する主要な細胞の 1 つであるニューロンは, 活動電位, あるいは神経スパイクと呼ばれる電気信号を生成する．この電気信号は, ニューロン間で互いにやり取りされることにより, 様々な脳機能を実現していると考えられている [1]. ニューロンにおける膜電位の挙動に対する数理モデルは数多く知られており, Hodgkin-Huxely モデルはその代表例の 1 つである．このモデルはニューロンの電気生理的な振る舞いを詳細に再現し得る一方で, 数多くのパラメータを含んでいる. ニューロンは空間的に複雑な樹状構造を持つ上, 多くの種類のイオン電流が関わるため, これら全ての効果を取り入れた上で Hodgkin-Huxely モデルを修正しても, 非常に大きな自由度を必要とするため解析するのは実質的に不可能である．このような観点から, ニューロンの挙動を単純化した積分発火モデルが提案されている [2]. このモデルで考える膜電流は, 受動的なリーク電流のみと仮定されるため, 通称 LIF (leaky integrate-and-fire) モデルと呼ばれる.

ニューロンは多数存在し, 相互に影響しながら全体の系が構成されている. LIF モデルを用いて膜電位の時間変化を調べるためには, 多自由度の微分方程式が解析対象となってしまうものの, そのような系を直接解析することは難しい. そこで, ニューロン間の相互作用は平均的, ないしは確率的に起こると仮定すると, Fokker-Planck 方程式を導出することが可能となり,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial v}[(-v+bN(t-D))\rho]-a\frac{\partial^2\rho}{\partial v^2} = N(t)\delta(v-V_R), \quad -\infty<v<V_F,\ t>0 \tag{1}$$

を得る [3]. ここで δ はデルタ関数を表し, $N(t)$ は与えられた関数 $N_0(t)\geq 0$ に対して

$$N(t)=\begin{cases}-a\dfrac{\partial\rho}{\partial v}(V_F,t), & t>0,\\ N_0(t), & -D\leq t\leq 0\end{cases}$$

で定義される. 境界条件, 及び初期条件として

$$\rho(V_F,t)=\rho(-\infty,t)=0, \quad \rho(v,0)=\rho_0(v)\geq 0$$

を課す．パラメータは $a>0, b<0, D\geq 0, V_R<V_F$ を満たすものとする．(1) の両辺を $(-\infty,V_F)$ で積分することで, $\rho(v,t)$ の積分量が保存される, すなわち,

$$\int_{-\infty}^{V_F}\rho(v,t)dv=\int_{-\infty}^{V_F}\rho_0(v)dv$$

が成り立つことが分かる.

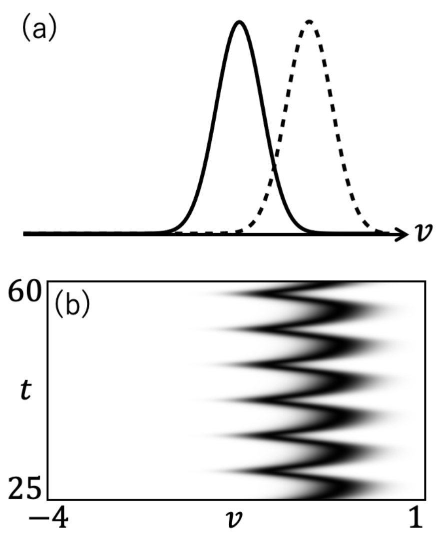


図 1. (1) に現れる周期解. (a) における実線は $t=29.7$, 破線は $t=32.5$ における解のグラフを表す．(b) は $t=25$ から $t=60$ までの解を表しており, 解の値が大きい領域を黒く表示している. 数値計算を実施する際, 半開区間 $(-\infty,V_F)$ を有限の開区間 (V_L,V_F) に置き換えており, 新たな境界条件 $\rho(V_L,t)=0$ を課した. (a), (b) ともに, パラメータは $a=0.1, b=-300, D=2, V_L=-4, V_R=0, V_F=1$, 空間刻み幅は $dx=0.02$, 時間刻み幅は $dt=0.0005$ とした.

2 主結果

適当な条件下では, (1) の解はパルス波の形状を保ちつつ, ある時間周期で一定の範囲を動く様子が観測される (図 1). ここで $b \sim -\infty$ を考え, $\rho(v,t) \sim \phi(v - c(t))$ を満たす $\phi(x)$ と $c(t)$ の存在と $N(t) \sim 0$ を仮定すると, ある定数 $C > 0$ に対して $\phi(x) = C\exp(-x^2/2a)$ が形式的には成り立つことが分かる. ϕ はパルス型の空間形状を持つことに注意する. また, $c(t)$ は

$$c' + c = bN_*(c(t - D)) \tag{2}$$

の解であり,

$$N_*(c) \equiv (V_F - c)\exp\left(-\frac{(V_F - c)^2}{2a}\right)$$

である. 本講演における目標は, (2) における周期解の存在を示し, 上記の数値シミュレーション結果を保証することである. 以下では $V_F \geq 0$ と仮定する.

まず (2) における定常解が存在条件を求める.

定理 1 $V_F = 0$ かつ $-1 \leq b < 0$ のとき, *(2)* は $c < 0$ に定常解を持たない. 一方, $V_F > 0$ もしくは $b < -1$ が成り立つとき, *(2)* は $c < V_F$ において一意に定常解 $c_* < 0$ を持つ.

定理 1 により, 定常解 c_* の存在条件が得られた. この条件が成り立つとき, c_* の安定性を調べたい. そこで (2) の線形化固有値問題

$$\lambda + 1 = bN'_*(c_*)e^{-D\lambda} \tag{3}$$

を導出し, この方程式の解 $\lambda \in \mathbb{C}$ の性質を調べると, 以下の結果を得る.

定理 2 $V_F > 0$ もしくは $b < -1$ が成り立つとする. さらに, $bN'_*(c_*) < -1$ が成り立ち, かつ D が十分大きいとき, *(3)* には $Re\lambda > 0$ と $\pi/(2D) < Im\lambda < \pi/D$ を満たす解 λ が存在する.

定理 2 により, 実部正で虚部が 0 でない固有値 λ の存在を保証できた. この事実により, 定常解 c_* の不安定性と周期解の存在が期待できる. この予想はある条件下では正しく, 以下の結果が得られる.

定理 3 $V_F^2 \geq a$ が成り立つとする. もし b が十分小さく, D が十分大きければ, 周期解 $c(t)$ が *(2)* に存在する. また, D と t に依存しないある定数 $c_0 < 0$ が存在して, $c_0 \leq c(t) < 0$ が成り立つ.

定理 3 により, (2) における周期解 $c(t)$ の存在を保証することができた. この結果は数値シミュレーションによっても確認でき, 図 1 に対応していると考えられる (図 2). これらの結果から, (1) におけるパルス型の解が示す時間周期的な運動は (2) によって記述できると言えるだろう.

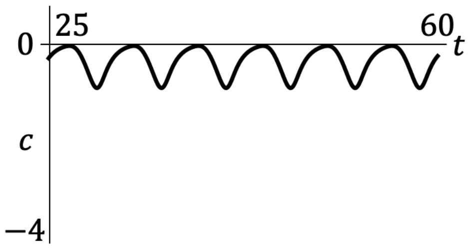


図 2. (2) に現れる周期解. $t = 25$ から $t = 60$ までの解を表示している. パラメータは図 1 の説明で述べたものと同一のものを使用し, Mathematica で計算結果を得た.

参考文献

[1] 北野 勝則, 脳のシミュレーションを始めるために (特集 脳神経系シミュレーション), 人工知能, 30, 5 (2015), pp.607–615.

[2] R. Brette and W. Gerstner, *Adaptive exponential integrate-and-fire model as an effective description of neuronal activity*, Journal of neurophysiology, 94, 5 (2005), pp.3637–3642.

[3] N. Brunel, *Dynamics of sparsely connected networks of excitatory and inhibitory spiking neurons*, Journal of computational neuroscience, 8, 3 (2000), pp.183–208.

Existence and stability of symmetric solutions of a variational problem for plane curves

上坂 正晃 [1], 上田 肇一 [2], 中村 健一 [3], 長山 雅晴 [4]
[1] 東京大学, [2] 富山大学, [3] 金沢大学, [4] 北海道大学
e-mail : k-nakamura@se.kanazawa-u.ac.jp

1 問題設定

区間 $I = (0,1)$ において周期的な H^2 関数の空間を $H^2_{\mathrm{p}}(I)$ とし, $u \in H^2_{\mathrm{p}}(I)$ に対する以下のエネルギー汎関数を考える.

$$\begin{aligned} W[u] &:= \int_0^1 \kappa(x)^2 \sqrt{1+u'(x)^2}dx \\ &\quad + \int_0^1 2A(x)\kappa(x)\sqrt{1+u'(x)^2}dx. \end{aligned} \tag{1}$$

ただし, $A(x)$ は I 上の正値可測関数であり, $\kappa(x)$ は関数 u のグラフの曲率

$$\kappa(x) := \frac{u''(x)}{(1+u'(x)^2)^{3/2}}$$

である. 本講演では, W の臨界点の存在および安定性について考察する (厳密には, u に定数を加えてもエネルギーは変わらないので, 必要に応じて適宜制約条件を課す).

この変分問題は, 皮膚機能の数理的研究において, 皮膚を構成する表皮と真皮の境目である基底膜の変形メカニズムを理解するための数理モデルとして提案されたものである. 基底膜は真皮乳頭層と呼ばれる多数の突起状構造を持ち, そこで真皮が表皮に食い込む形となっており, このような真皮の変形が皮膚の病気や老化と深い関係があることが明らかになっている ([1]). 基底膜には表皮幹細胞や, その幹細胞から分化し盛んに細胞分裂を行う TA 細胞などが結合しているが, 幹細胞の多くが突起の先端部に位置していることが観察されており, 小林・長山らは粒子モデルを用いて,

- 細胞の基底膜への接着力が突起生成の一因である
- 幹細胞と TA 細胞の接着力の違いにより, 幹細胞が突起の先端部に位置する

ことを説明した ([2]). 上記のエネルギー汎関数 W は, 粒子モデルを連続化し, 表皮基底膜を 1 次元とみなし, 1 つの突起の生成に着目するために周期境界条件を課すことにより得られたもので, 第 1 項は基底膜の弾性エネルギー, 第 2 項は細胞の接着エネルギーに由来する.

2 臨界点の存在

本講演では, $A(x)$ は以下のような区分的定数関数であると仮定する.

$$A(x) := \begin{cases} A_1 & \text{if } x \in [a_1, a_2], \\ A_0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{2}$$

ただし, $a_1 = (1-a)/2$, $a_2 = (1+a)/2$ $(a \in (0,1))$, $0 < A_0 < A_1$ とする. これは, 長さ a の区間 $[a_1, a_2]$ を占める細胞の接着力がそれ以外の細胞よりも強い状況を表している. A が定数の場合は, Deckelnick と Grunau により, Euler-Lagrange 方程式に対する Navier 境界値問題 (境界における曲線の位置と曲率に関する条件が課されている) について詳細な研究が行われている ([3, 4]). A が (2) のような区分的定数関数の場合は, [3] において得られた解を $x = a_1, a_2$ でうまく貼り合わせることによって, $x = 1/2$ に関して対称な解を構成することができる. 以下, W の臨界点の存在に関する結果を述べる.

補題 1 $u \in H^2_{\mathrm{p}}(I)$ が W の臨界点であるための条件は, u が $x \in (0,1) \setminus \{a_1, a_2\}$ において,

$$\frac{2}{\sqrt{1+(u')^2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\kappa'}{\sqrt{1+(u')^2}}\right) + \kappa^3 = 0 \tag{3}$$

をみたし, さらに $x = a_1, a_2$ における以下の接合条件をみたすことである.

$$\begin{aligned} \kappa(a_1 - 0) &= \kappa(a_1 + 0) + A_1 - A_0 \\ \kappa(a_2 + 0) &= \kappa(a_2 - 0) + A_1 - A_0 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} &2\kappa'(a_1-0) + \kappa(a_1-0)^2 u'(a_1)\sqrt{1+u'(a_1)^2} \\ &= 2\kappa'(a_1+0) + \kappa(a_1+0)^2 u'(a_1)\sqrt{1+u'(a_1)^2} \\ &2\kappa'(a_2-0) + \kappa(a_2-0)^2 u'(a_2)\sqrt{1+u'(a_2)^2} \\ &= 2\kappa'(a_2+0) + \kappa(a_2+0)^2 u'(a_2)\sqrt{1+u'(a_2)^2} \end{aligned} \tag{5}$$

$\eta \in \mathbb{R}$ に対し $\langle \eta \rangle := \sqrt{1+\eta^2}$ と定め, $(0,\infty)$ 上の関数 $G(\eta)$, $H(\eta)$ を次で定義する.

$$G(\eta) = \int_0^\eta \langle s \rangle^{-\frac{5}{2}}\, ds, \;\; H(\eta) = 2G(\eta)\langle \eta \rangle^{-\frac{1}{2}}.$$

このとき, G, H は正値有界関数となる. H の $\eta > 0$ における最大値を $\alpha_{\max}(= 1.343799\ldots)$ とし, 最大値をとる η を $\eta_{\max}$ とする (図 1).

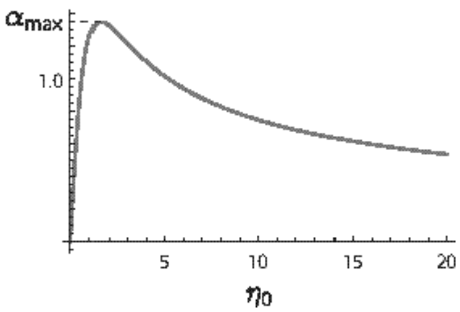


図 1. $H(\eta)$ のグラフ

定理 2 $a \in (0,1)$ とする. $x = 1/2$ に関して対称な W の臨界点の個数は,

$$H(\eta) = a(1-a)(A_1 - A_0) \qquad (6)$$

の解の個数に等しい. すなわち,

(i) $a(1-a)(A_1 - A_0) > \alpha_{\max}$ のとき, 0 個,
(ii) $a(1-a)(A_1 - A_0) = \alpha_{\max}$ のとき, 1 個,
(iii) $a(1-a)(A_1 - A_0) < \alpha_{\max}$ のとき, 2 個.

注. 定理 2 により得られた対称な臨界点の形状は, (6) の解で特徴づけることができ, その概形は図 2 のようになる. 具体的には, (6) の解 $\eta_0 > 0$ に対し, 対応する臨界点を u とすると,

$$|u'(x)| \leq \eta_0, \ u'(a_1) = \eta_0 = -u'(a_2) \qquad (7)$$

が成り立つ.

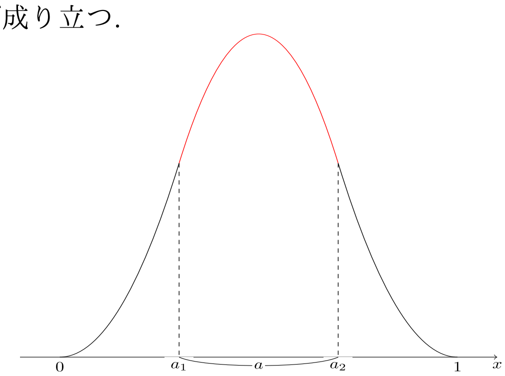


図 2. 臨界点の形状

3 臨界点の安定性

定理 2 により, $a(1-a)(A_1 - A_0) < \alpha_{\max}$ のとき (6) の解 $\eta^{(s)}, \eta^{(l)}$ $(0 < \eta^{(s)} < \eta_{\max} < \eta^{(l)})$ が存在し, それぞれに対応する W の対称な臨界点 $u^{(s)}, u^{(l)}$ が存在する. $u^{(s)}$ を small solution, $u^{(l)}$ を large solution と呼ぶ. これらの臨界点の安定性に関しては, 次の結果を得た.

定理 3 $a \in (0,1)$ とする.

(i) large solution $u^{(l)}$ は不安定である.
(ii) small solution $u^{(s)}$ は $\eta^{(s)}$ が十分小さいとき安定である.

定理 3 の証明において, 臨界点の安定性は W の 2 次変分の符号で判定される.

補題 4 $a(1-a)(A_1 - A_0) \leq \alpha_{\max}$ と仮定し, $u = u(\cdot; \eta_0)$ を (6) の解 η_0 に対応する W の対称な臨界点とする. このとき, 任意の $\varphi \in H^2_{\mathrm{p}}(I)$ に対し, 次が成り立つ.

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} W[u + t\varphi]\bigg|_{t=0} &= 2\int_0^1 v^{-5}(\varphi'')^2\,dx \\ &+ 5\int_0^1 \kappa^2 v^{-3}(2 - v^2)(\varphi')^2\,dx \\ &- \frac{12G(\eta_0)}{a(1-a)}\eta_0 \langle \eta_0 \rangle^{-\frac{9}{2}} \left(\varphi'(a_1)^2 + \varphi'(a_2)^2\right). \end{aligned}$$

ただし, $v(x) = \langle u'(x) \rangle \left(= \sqrt{1 + u'(x)^2}\right)$.

謝辞 本研究は, 科学技術振興機構 戦略的創造研究 CREST JPMJCR15D2 「数理モデリングを基盤とした数理皮膚科学の創設」(研究代表者：長山雅晴) の援助を得て行われました.

参考文献

[1] 長山雅晴, 傳田光洋, 北畑裕之, 小林康明, 角層バリア機能の数理モデルとその応用, 応用数理, Vol. 27, No. 2 (2017), 18–26.

[2] Kobayashi, Y., Yasugahira, Y., Kitahata, H., Watanabe, M., Natsuga, K. and Nagayama, M., Interplay between epidermal stem cell dynamics and dermal deformation, npj Computational Materials, Vol. 4 (2018), 45.

[3] Deckelnick, K. and Grunau, H.-C., Boundary value problems for the one-dimensional Willmore equation, Calc. Var. Partial Differ. Equ., Vol. 30 (2007), 293–314.

[4] Deckelnick, K. and Grunau, H.-C., Stability and Symmetry in the Navier Problem for the One-Dimensional Willmore Equation, SIAM J. Math. Anal., Vol. 40 (2009), 2055–2076.

シミュレーションデータを用いた基礎方程式の推定

小野 謙二 [1], 櫻井 大督 [2], 古賀 壱成 [3]
[1] 九州大学情報基盤研究開発センター，[2] 九州大学情報基盤研究開発センター附属汎オミクス計測・計算科学センター，[3] プログレス・テクノロジーズ
e-mail : keno@cc.kyushu-u.ac.jp

1 概要

データから，そのデータを表現する方程式を探索する研究は Equation Discovery として知られている [1]．観測や実験データを用いた式の探索や，シミュレーション結果を用いたモデリングのための式探索など，様々用途が考えられる．Equation Discovery の具体的な方法としては，スパース回帰を用いるもの，遺伝的アルゴリズムの一つである Genetic Programming (GP) を用いる方法などがある．従来は，常微分方程式や線形方程式などの式探索が行われてきた．また，偏微分方程式に対しては，予め項の形を網羅的に仮定して変数選択を行うスパース回帰を用いる方法が提案されてきた [2]．しかし，この方法では想定外の項の形は現れないため．探索空間が限定される問題点がある．本稿では GP を用いる発見的な探索手法を偏微分方程式に対して適用する方法を提案する．

2 問題設定と方程式の推定方法

2.1 問題設定

本稿では一次元の流体シミュレーションを行い，得られたデータから逆に元の支配方程式を推定する．データ生成に用いた式，すなわち，推定する式は下記の 4 つである．

1) 線形移流方程式

$$u_t = -c\, u_x$$

2) 拡散方程式

$$u_t = 1/R_e\, u_{xx}$$

3) 非線形移流方程式（Burgers 方程式）

$$u_t = -u\, u_x + 1/R_e\, u_{xx}, \quad R_e = 200 \quad (1)$$

4) 化学種の自己触媒モデルである連成方程式 (Brusselator)

$$\begin{cases} \dot{x} = -(B+1)x + x^2 y + A \\ \dot{y} = Bx - x^2 y \end{cases} \quad (2)$$

2.2 偏微分方程式の推定方法

本研究における GP プロセスの遺伝子は，方程式の項の形に相当する．GP で用いられる遺伝子の交叉や突然変異などの進化の操作は，項の形の違いとして現れる．また，優れた遺伝子を残す方法として EFS[3] を導入した．EFS は方程式の作成，特徴合成，特徴選択の 3 ステップで構成される GP である．GP のプロセスによって生成された m 個の遺伝子から構成される式 $F(\boldsymbol{X})$ を次式のように表す．

$$F(\boldsymbol{X}) = \sum_{i=1}^{m} \beta_i\, h_i(X_i)$$

$h_i\,(X_i)$ は $F(\boldsymbol{X})$ に含まれる可能性がある項で，これを「特徴」と定義する．$\boldsymbol{X}$ は観測データベクトルを表しており $X_1, X_2, ..., X_m$ は m 個の各変量を表している．

特徴合成は，交叉や突然変異を用いて評価が良くなるような遺伝子（項）を作成し，新しい項を作成することである．特徴選択は，項の評価（たとえば，エリート戦略）によって方程式作成に必要なものと不必要なものに分類することである．項における良い評価とは，$\beta_i \neq 0$ となることであり，作成された方程式 $F(\boldsymbol{X})$ と目的変数 Y の重相関係数が高い場合，係数 $\beta_i \neq 0$ である関数 $h_i\,(X_i)$ の評価が良くなる．そのため，項の評価方法に次式の LASSO を使用し，その方程式の重相関係数も評価に用いる．

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\lambda} = \underset{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^m}{\arg\min} \|Y - \sum_{i=1}^{m} \beta_i X_i \|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^{m} |\beta_i|$$

1 つの推定実験について，1 つの試行につき 300 世代のステップを繰り返し，50 回の試行を行った．実験結果は，各項数の最大適合度の点を結ぶパレートフロントから最適解を得る．図 1 は式 (1) の解を示している．項数 2 のとき，項の形と係数がよく一致していることがわかる．推定方法の詳細は [4] を参照されたい．

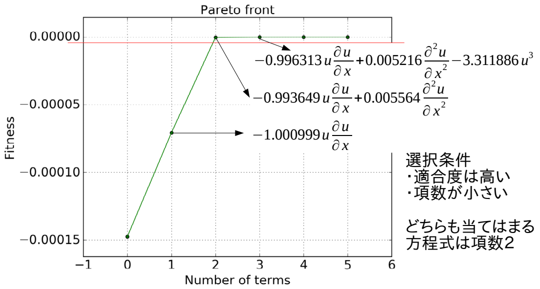


図 1. 一次元 Burgers 方程式の推定におけるパレート分析

3　数値計算と推定結果

本稿では紙面の都合上，Brusselator の結果を示す．式 (2) は $\dot{x} = -\dot{y} - x + A$ と書け，その挙動は図 2 のように周期解となる．

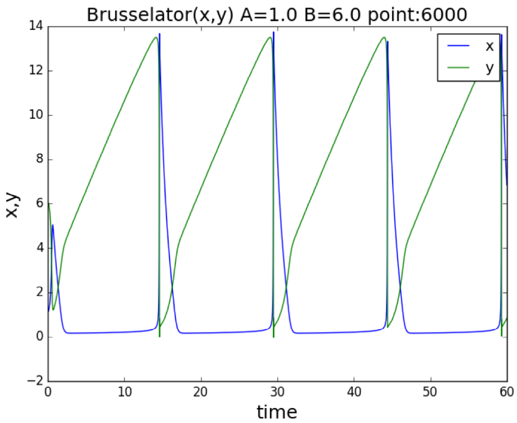


図 2. 化学種 x, y の連成方程式 (A=1.0, B=6.0)

連成方程式の場合には，2 段階の推定が必要となる．まず，$\dot{x}$ と $\dot{y}$ を独立に求めると，図 3 から $\dot{x} \approxeq -\dot{y}$ の関係式を得る．次に，目的変数を $\dot{x}+\dot{y}$ として式の推定を行う．その結果，図 4 のように，項数 2 のときに $\dot{x}+\dot{y} = 1 - x$ を得ることができる．

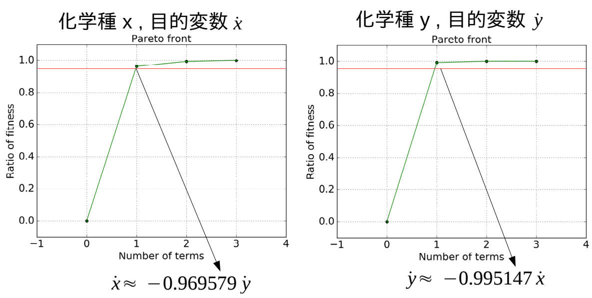


図 3. Brusselator の式推定の第一段階

4　まとめ

CFD や化学反応連鎖のシミュレーションを行い，それらのデータを使い，元の支配方程式を推定した．推定には Genetic Programming を用いて得られた結果をパレート解析により分析し，式を推定する分析方法を提案した．その結果，項数が少なく適合度が高い方程式が支配方程式であることが判明し，提案方法は固有の知識を必要とせずに支配方程式を自動的に推定できることを確認できた．また，連成方程式の場合には，数段階を経て解き方を考える必要があるが，最終的には精度よく推定することが可能となった．

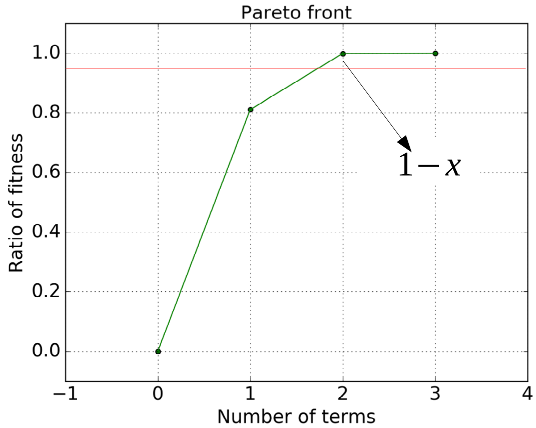


図 4. Brusselator の式推定の第二段階

謝辞　本研究は，九州大学情報基盤研究開発センターの研究用計算機 ITO を利用した．

参考文献

[1] J. Crutchfield, B. McNamara: Equations of motion from a data series. Complex Syst. 1, pp. 41–452 (1987).

[2] Samuel H. Rudy, Steven L. Brunton, Joshua L. Proctor, and J. Nathan Kutz: Data-driven discovery of partial differential equations. Science Advances, 2017.

[3] Arnaldo, I., O'Reilly, U.M., Veeramachaneni, K.: Building predictive models via feature synthesis. Proc. of the 2015 Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, pp. 983–990 , 2015.

[4] 古賀壱成，小野謙二，データを記述する方程式の推定，計算講演会論文集 Vol.24 (2019).

構造解析向け超並列固有値ソルバの大規模実応用モデルにおける性能評価

二村 保徳 [1], 櫻井 鉄也 [1], 畠澤 作二郎 [2]
[1] 筑波大学，[2] エムエスシーソフトウェア株式会社
e-mail：futamura@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本研究では有限要素法による構造解析で現れる大規模な疎行列一般化固有値問題

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}$$

を高並列な分散並列計算環境で高速に解くことを考える．$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は対称行列，$B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は正定値対称行列であり，特定の周波数領域内の固有値 λ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求める．

2 櫻井・杉浦法

櫻井・杉浦法 [1] は，指定した周回積分路内部の固有値と対応する固有ベクトルを求める並列性の高い固有値解法であり，構造解析をはじめ，電子状態計算，殻模型計算，素粒子計算などの科学技術計算に応用されている．

櫻井・杉浦法では周回積分

$$\boldsymbol{s}_k := \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\Gamma z^k (zB - A)^{-1} B\boldsymbol{v} \mathrm{d}z \qquad (1)$$

を考える．ここで Γ は複素平面上の Jordan 曲線，$\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n$ であり，通常 $\boldsymbol{v}$ は乱数で生成する．留数定理により $\boldsymbol{s}_k$ は Γ 内部の固有値に対応する固有ベクトルの線形結合となる．式 (1) を N 個の積分点を用いた数値積分で以下のように近似する．

$$\widehat{\boldsymbol{s}}_k := \sum_{j=1}^{N} \zeta_j^k w_j (z_j B - A)^{-1} B\boldsymbol{v}.$$

ここで z_j，w_j はそれぞれ積分点および重みであり，ζ_j は数値安定性のために z_j をシフト・スケールした値である．$S := [\widehat{\boldsymbol{s}}_0, \widehat{\boldsymbol{s}}_1, \ldots, \widehat{\boldsymbol{s}}_{M-1}]$ の列空間から近似固有対を得るため，文献 [1] における Hankel 行列を用いた方法や Rayleigh–Ritz の手法による方法 [2] を用いる．複数の $\boldsymbol{v}$ を用いたブロック版の手法が提案されている [3, 4].

櫻井・杉浦法では積分点ごとに $z_jB - A$ を係数行列とする線形方程式の求解が計算の主要部になるが，これらは独立に解くことができる．また，固有値を求める領域を複数設定する場合は，それらに対する計算も独立に行うことができる．さらに線形方程式求解に対しても並列アルゴリズムの適用が考えられるため，櫻井・杉浦法は 3 階層の階層的な並列性をもつ．この階層的並列性を利用することにより，超並列計算環境で高い性能を発揮することが期待される．櫻井・杉浦法を実装した分散並列ソフトウェアとして z-Pares [5] が公開されている．

3 数値実験

実応用モデルから現れる大規模問題において最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）が運用している Oakforest-PACS を利用した数値実験・並列性能評価を行った．Oakforest-PACS 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を通じて利用した．結果については講演において述べる．

参考文献

[1] T.Sakurai and H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., Vol. 159 (2003), 119–128.

[2] T. Sakurai and H. Tadano, CIRR: a Rayleigh–Ritz type method with contour integral for generalized eigenvalue problems, Hokkaido Math. J., Vol. 36 (2007), 745–757.

[3] T. Ikegami, T. Sakurai and U. Nagashima, A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai–Sugiura projection method, J. Comput, Appl. Math., Vol. 33 (2010), 1927–1936.

[4] T. Ikegami, T. Sakurai and U. Nagashima, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach, Taiwanese J. Math., Vol. 14 (2010), 825–837.

[5] z-Pares, `http://zpares.cs.tsukuba.ac.jp/`.

NMF 型 DNN 計算法とその応用

今倉 暁 [1], 二村 保徳 [1], 櫻井 鉄也 [1]
[1] 筑波大学
e-mail：imakura@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

近年，画像認識や信号処理など様々な分野においてディープニューラルネットワーク（DNN）が注目され活発に研究が進められている [3]. DNN 計算は，非線形活性化関数，バイアス項および正則化関数による非線形最適化問題として定式化され，その最適化には，確率的勾配降下法に基づくバックプロパゲーション（BP）法が標準的なアルゴリズムとして利用されている．

一方，近年我々は全結合ニューラルネットワークに対して，非線形非負値行列分解（非線形 NMF）に基づく新しい最適化アルゴリズムを開発した [1, 2, 4]. NMF 型 DNN 計算法は BP 法に対して大きなミニバッチサイズを取ることができるため並列性高い並列性を示すことが確認されている [2].

本講演では，BP 法および NMF 型 DNN 計算法の収束特性の違いについて検証し，新しい解法の可能性について検討する．

2 DNN 計算

学習データセットの特徴量数を m_{in}，データサンプル数を n，正解データの次元数を m_{out} とする．また，教師データを $X \in \mathbb{R}^{m_{\mathrm{in}} \times n}$，正解データを $Y \in \mathbb{R}^{m_{\mathrm{out}} \times n}$ とする．この時，重み行列 $W_i \in \mathbb{R}^{m_i \times m_{i-1}}$ およびバイアス項 $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^{m_i}$ を用い，全結合 DNN は，

$$Z_i = \begin{cases} f(W_i Z_{i-1} + \boldsymbol{b}_i \mathbf{1}^{\mathrm{T}}) \\ \quad (i = 1, 2, \ldots, d-1) \\ W_i Z_{i-1} + \boldsymbol{b}_i \mathbf{1}^{\mathrm{T}} \\ \quad (i = d) \end{cases}$$

と書くことができる．ここで，$Z_0 = X$，$\mathbf{1} = [1, 1, \ldots, 1]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ である．また，関数 f は活性化関数と呼ばる要素ごとの関数で，一般的にシグモイド関数や ReLU: $f(X) = \max(O, X)$ などが用いられる．

DNN 計算では，DNN で計算される出力値 Z_d と正解データ Y の距離 $D(Y, Z_d)$ を最小化するように，重み W_i およびバイアス項 $\boldsymbol{b}_i$ を最適化する．

3 NMF 型 DNN 計算

本節では，NMF 型 DNN 計算法の概略について示す．なお簡単のため，バイアス項 $\boldsymbol{b}_i$ および最適化の際の正則化項については無視することにする．バイアス項 $\boldsymbol{b}_i$ および最適化の際の正則化項を考慮した場合の最適化アルゴリズムの詳細については，論文 [1] を参照されたい．また，活性化関数は ReLU を用いるとする．

NMF 型 DNN 計算では，出力値 Z_d と正解データ Y の距離 $D(Y, Z_d)$ を 2 乗誤差により

$$\begin{aligned} &D(Y, Z_d) \\ &\quad = \|Y - Z_d\|_{\mathrm{F}}^2 \\ &\quad = \|Y - W_d f(W_{d-1} \cdots f(W_1 X) \cdots)\|_{\mathrm{F}}^2 \end{aligned} \tag{1}$$

と定義する．この最小化法として，NMF 型 DNN 計算法の基本アイディアは各重み行列 W_i を $i = d, d-1, \ldots, 1$ の順に逐次的に最適化することである．

行列 $W_i^{(0)}$ $(i = 1, 2, \ldots, d)$ を各重み行列の初期値とする．なお，初期値の設定については NMF 型オートエンコーダーが提案されている [4]．第 k 反復において，行列 $Z_i^{(k)}$ を

$$Z_0^{(k)} = X \tag{2}$$

$$\begin{aligned} &Z_i^{(k)} = f(W_i^{(k)} f(W_{i-1}^{(k)} \cdots f(W_1^{(k)} X) \cdots)) \\ &\quad (i = 1, 2, \ldots, d-1) \end{aligned} \tag{3}$$

と置き，各行列 W_i の更新について考える．

行列 W_d に着目すると，誤差 (1) は

$$\|Y - W_d Z_{d-1}\|_{\mathrm{F}}^2$$

と書くことができる．ここで，$Z_{d-1} = f(W_{d-1} Z_{d-2}) \geq 0$ に注意すると，行列 $W_d^{(k+1)}$ は半非負値行列分解（semi-NMF）

$$\begin{aligned} &[W_d^{(k+1)}, \widehat{Z}_{d-1}^{(k+1)}] \\ &\quad = \arg \min_{W_d, (Z_{d-1} \geq 0)} \|Y - W_d Z_{d-1}\|_{\mathrm{F}}^2 \end{aligned} \tag{4}$$

により近似的に計算される．この時，semi-NMF の初期値として $W_d^{(k)}, Z_{d-1}^{(k)}$ を用いる．

Algorithm 1 The nonlinear semi-NMF based method

Require: Input and correct data X, Y and size of mini-batch s
Ensure: Weight matrices $W_i, i = 1, 2, \ldots, d$

```
Set initial guess W_1^{(0,0)}, W_2^{(0,0)}, ..., W_d^{(0,0)}
Compute a low-rank approximation X ≈ U_1 Σ_1 V_1^T
for k = 0, 1, ... do:
  for ℓ = 0, 1, ..., m/s − 1 do:
    Set the index of mini-batches J_ℓ^{(k)} and X_ℓ = U_1 Σ_1 V_1(J_ℓ^{(k)}, :)^T, Y_ℓ = Y(:, J_ℓ^{(k)})
    Set Z_i^{(k,ℓ)} = f(W_i^{(k,ℓ)} Z_{i−1}^{(k,ℓ)}) for i = 1, 2, ..., d − 1, where Z_0^{(k,ℓ)} = X_ℓ
    Solve (approximately) semi-NMF (4) with initial guesses W_d^{(k,ℓ)}, Z_{d−1}^{(k,ℓ)}
    for i = d − 1, d − 2, ..., 2 do:
      Solve (approximately) nonlinear semi-NMF (5) with initial guesses W_i^{(k,ℓ)}, Z_{i−1}^{(k,ℓ)}
    end for
    Solve (approximately) nonlinear LSQ (6) with an initial guess W_1^{(k,ℓ)}
  end for
  Update W_i^{(k+1,0)} = W_i^{(k,m/s)} for i = 1, 2, ..., d
end for
```

同様に，W_i $(i = d-1, d-2, \ldots, 2)$ に着目すると，$Z_i = f(W_i Z_{i-1})$ より，

$$\widehat{Z}_i \approx f(W_i Z_{i-1})$$

であることが望まれる．したがって，行列 $W_i^{(k+1)}$ は非線形 semi-NMF

$$[W_i^{(k+1)}, \widehat{Z}_{i-1}^{(k+1)}] = \arg \min_{W_i, (Z_{i-1} \geq 0)} \|\widehat{Z}_i^{(k+1)} - f(W_i Z_{i-1})\|_\mathrm{F}^2 \quad (5)$$

により計算される．

行列 W_1 に着目すると，$Z_0 = X$ であるため，最小化問題は（非線形）NMF ではなく，非線形最小 2 乗問題

$$W_1^{(k+1)} = \arg \min_{W_1} \|\widehat{Z}_1^{(k+1)} - f(W_1 X)\|_\mathrm{F}^2 \quad (6)$$

となる．

最後に，得られた重み行列 $W_i^{(k+1)}$ を用いて，(2), (3) と同様に行列 $Z_i^{(k+1)}$ を更新する．実用上の観点から，アルゴリズムは学習データの部分サンプルを逐次的に用いるミニバッチ学習が行われる．また，計算コストの削減および数値安定性の改善のため，教師データの低ランク近似を用いる．NMF 型 DNN 計算法のアルゴリズムは Algorithm 1 のように示される．

当日は，BP 法および NMF 型 DNN 計算法の収束特性の違いおよび新しい解法の可能性について発表する．

参考文献

[1] R. Arai, A. Imakura, T. Sakurai, An improvement of the nonlinear semi-NMF based method by considering bias vectors and regularization for deep neural networks, International Journal of Machine Learning and Computing (IJMLC), **8** (2018), 191–197.

[2] A. Imakura, Y. Inoue, T. Sakurai, Y. Futamura, Parallel implementation of the nonlinear semi-NMF based alternating optimization method for deep neural networks, Neural Processing Letters, **47** (2018), 815–827.

[3] D. E. Rumbelhart, G. E. Hinton, R. J. Williams, Learning Representations by Back-Propagating Errors Nature, **323** (1986), 533–536.

[4] T. Sakurai, A. Imakura, Y. Inoue, Y. Futamura, Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks, In: A. Hirose, S. Ozawa, K. Doya, K. Ikeda, M. Lee, D. Liu. eds, Neural Information Processing, ICONIP 2016, Lecture Notes in Computer Science, **9950** (2016), 354–362.

1 周期未満波形からの時間周波数解析

石山　文彦
日本電信電話株式会社　NTT ネットワーク基盤技術研究所
e-mail：fumihiko.ishiyama.ys@hco.ntt.co.jp

1　はじめに

時間周波数解析の理論式は、互いに直交する基底関数

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_m^*(t) w_n(t) dt = \delta_{m,n} \quad (1)$$

と解析対象波形 $S(t)$ との無限積分

$$A_m = \int_{-\infty}^{\infty} w_m(t) S(t) dt \quad (2)$$

で書かれることが多い。実際の解析対象波形は有限長であるため、この理論式は概念的に用いられるのみで、数値計算上は、与えられた有限区間で直交する基底関数が用いられる。

この時間幅を T とすると、例えばフーリエ解析では、とりうる周波数が

$$f_m = \frac{m}{T} \quad (3)$$

なる値に限定される。つまり、区間内で整数周期の繰り返し波形をなす基底関数となる。

このことから、直交基底を用意して相関積分をとるという方法論では、1 周期未満波形からの時間周波数解析はできないことになる。

そこで我々は、この方法論によらない時間周波数解析手法の検討を進めている [1, 2, 3]。

我々の手法は、久保の線形応答理論 [4] をベースとし、波を粒子表現することで解析対象を理解しようとするものとなっている。我々の手法のモデル式はフーリエ級数展開のスーパーセットとなっており、具体的な計算手続きは線形予測法とほぼ同一である。数値計算上の違いは、自己相関行列の構成方法にあらわれる。

以下、我々の手法を紹介するとともに、これを用いての解析事例を示す。

2　解析手法

我々のモデル式は、van der Pol による周波数変調振動の式 [5]

$$S(t) = c\left(e^{+\int_0^t 2\pi i f(\tau)\mathrm{d}\tau} + e^{-\int_0^t 2\pi i f(\tau)\mathrm{d}\tau}\right) \quad (4)$$

の拡張とみなすのがわかりやすい。ここで $f_m(t)$ は時変な周波数である。これに振幅変調振動に相当する項 $\lambda_m(t)$ を追加し、項数も一般の場合を考える。

$$S(t) = \sum_{m=1}^{M} c_m e^{\int_0^t [2\pi i f_m(\tau) + \lambda_m(\tau)]\mathrm{d}\tau} \quad (5)$$

ここで、

$$H_m(t) = \ln c_m + \int_0^t [2\pi i f_m(\tau) + \lambda_m(\tau)]\mathrm{d}\tau \quad (6)$$

とおくと、我々のモデル式は、一般の複素関数 $H_m(t)$ による級数展開

$$S(t) = \sum_{m=1}^{M} e^{H_m(t)} \quad (7)$$

であらわされる。このモデル式の複素関数を、周波数空間を等分割する一次関数にとることで、フーリエ級数展開が得られる。

このモデル式自体は非線形であるため、そのまま解くことはできない。そこで、ある時刻 t_0 を中心とする微小区間に着目する。各複素関数を t_0 のまわりで展開した式

$$S(t)|_{t\sim t_0} \simeq \sum_{m=1}^{M} e^{H_m(t_0) + H'_m(t_0)(t-t_0) + O((t-t_0)^2)} \quad (8)$$

において、十分に短い時間幅であれば、高次項の寄与を無視することができ、単純な線形問題に帰着させることができる。つまり、局所的に線形な座標系の直交基底を求めればよい。この直交基底より、周期性の概念を要さずに局所における周波数が算出される。

あとは着目する微小区間に対して線形予測法を区分的に適用し、各時刻 t_n 近傍での各振動モード $H'_m(t_n)$ を算出すればよいことになるが、ここに数値計算上の問題が隠されている。

標準的には Yule-Walker 方程式を解くことで予測係数の算出が行われるが、ここには Walker による周期波形への置き換え近似 [6] が隠されており、さらに、標準的な数値計算上の式には

板倉による補正 [7] も隠されている。そのため、通常の数値計算アルゴリズムを用いた場合、正しい $H'_m(t_0)$ の算出ができない。どの教科書にも記載されていない、厳密式を用いる必要がある [1, 2, 3]。

3　解析事例

蛍光灯が発する電磁ノイズ解析への適用事例を図 1 に示す。蛍光灯は高周波ノイズを電源線に発しており、これが周辺機器の誤動作を招く場合がある。

解析条件は、サンプリング間隔 5μs、解析次数 4、一度の解析に用いるサンプル数 20 とした。

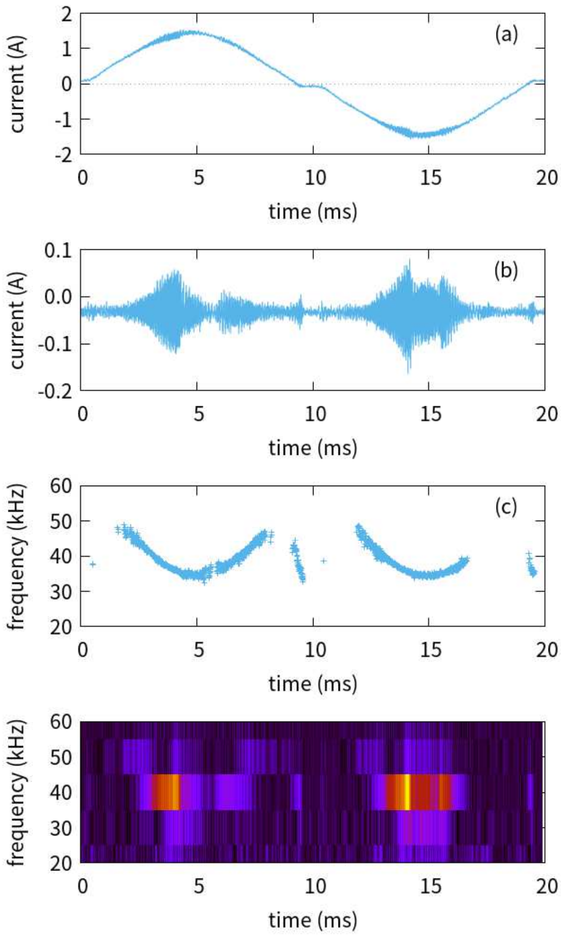


図 1. (a) 蛍光灯の電流波形、(b) 電流波形の高周波成分 (電磁ノイズ)、(c) 提案手法による解析結果、(d) 同一条件での STFT 適用結果。

この事例での STFT の周波数分解能は 10kHz となり、十分な結果が得られていない。一つの解析区間内には 3 ∼ 5 周期の半端波形が含まれるが、我々の手法では、周波数の時間変化を詳細に追うことができている。

4　まとめ

我々の提案手法を紹介し、その適用事例を示した。

我々の手法は、局所的な直交座標系の固有値から周波数情報を算出しようとするものであることから、よくある手法のように周期性の概念を要しない。このため、1 周期未満の部分波形からも詳細な周波数情報を得ることができる。

また、我々の手法の産業応用への可能性を示す目的で、実測電磁ノイズ波形に適用し、STFT に対する優位性を示した。

参考文献

[1] F. Ishiyama, Y. Okugawa, and K. Takaya, "Linear predictive coding without Yule-Walker approximation for transient signal analysis - Application to switching noise," *13th IEEE Colloq. Signal Process. Appl.*, pp.44-48, Penang, Malaysia, Mar., 2017.

[2] F. Ishiyama, "Local linear predictive coding for high resolution time-frequency analysis," *17th IEEE Int. Symp. Signal Process. Info. Tech.*, pp.1-6, Bilbao, Spain, Dec., 2017.

[3] F. Ishiyama, "Piecewise linear predictive coding for nonlinear signal analysis and automatic trend extraction," *IEICE Trans. Fundamentals (Japanese Edition)*, vol.J101-A, pp.36-45, 2018.

[4] R. Kubo, "Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems," *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 12, pp. 570-586, 1957.

[5] B. van der Pol, "The fundamental principles of frequency modulation," *J. Inst. Elect. Eng. III*, vol.93, pp.153-158, 1946.

[6] G. Walker, "On periodicity in series of related terms," *the Royal Society of London*, Ser. A, vol.131, pp.518-532, 1931.

[7] F. Itakura, "Minimum prediction residual principle applied to speech recognition," *IEEE Trans. Acoust. Speech Signal Process.*, vol.23, pp.67-72, 1975.

非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算の数値的比較

南畑 淳史 [1], 荻田 武史 [2], 大石 進一 [3]
[1] 中央大学，[2] 東京女子大学，[3] 早稲田大学
e-mail：aminamihata@gmail.jp

1　概要

偏微分方程式で記述されるモデルの離散化等から得られる連立一次方程式の係数は疎行列であることが多い．疎行列を保つ連立一次方程式の精度保証付き数値計算にはシフトしたコレスキー分解を用いた精度保証付き数値計算 [1] が用いられる．しかし非対称行列に適用する場合は $A^TAx = A^Tb$ と変形しなければならないため，条件数が $\kappa(A)^2$ となり，$\kappa(A) < 10^8$ 程度の問題しか解けないことが問題となる．また，係数行列が特別な性質を持たない場合に用いられる連立一次方程式の精度保証付き数値計算では係数行列の近似逆行列を必要とするため，多くの場合は近似逆行列が密行列となってしまい疎行列でなくなってしまう．本発表では，疎行列向けの LU 分解を用いた連立一次方程式の精度保証付き数値計算に着目する．特に，左前処理として L の近似逆行列を用い，右前処理として U の近似逆行列を用いる精度保証付き数値計算に着目する．この方法は一般的にはあまり使われない．その理由の一つが誤差評価の箇所で左前処理よりも劣ることが考えられる．例えば，A の近似逆行列 R を用いた左前処理行列を用いた誤差評価式は以下の通りである．

$$|A^{-1}b - \tilde{x}| \le |(RA)^{-1}|\,|R(b - A\tilde{x})| \qquad (1)$$

また，LU 分解は $LU \approx PAQ$ を満たすとし，L の近似逆行列 X_L と U の近似逆行列 X_U とする．また，$B = PAQ, c = Pb, y = Q^Tx, \tilde{y} = Q^Tx$ として，LU 分解の近似逆行列を用いた左前処理の誤差評価式は以下の通りである．

$$|B^{-1}c - \tilde{y}| \le |\left(X_U\left(X_LB\right)\right)^{-1}|\,|X_UX_L(c - B\tilde{y})| \qquad (2)$$

左前処理に X_L，右前処理に X_U を用いた誤差評価式は以下の通りである．

$$|B^{-1}c - \tilde{y}| \le |X_U|\left|\left((X_LB)X_U\right)^{-1}\right|\,|X_L(c - B\tilde{y})| \qquad (3)$$

左前処理を用いた誤差評価式は残差 $(b - A\tilde{x})$ に前処理行列がかかっている．しかしながら，右前処理の誤差評価式は残差には前処理行列がかかっていない．そのため，誤差評価式としては左前処理が精度が良い．本発表では疎行列を保つという観点からは左前処理と右前処理を組み合わせたほうが効果的であり，問題によっては非常に大規模な問題も精度保証付き数値計算が出来ることを示す．

2　スパースな LU 分解の L と U の逆行列

疎行列向けの LU 分解では列の近似最小次数置換を用いた LU 分解を用いられることが多い．列の近似最小次数置換付き LU 分解の行および列のピボットを用いて行列 A を置換すると図.1 のような対角ブロックと密の帯を持つ行列に変換、もしくは図.1 の構造を一部に持つ行列になることが多い．例えば，置換後の Sparse matrix collections [2] の raefsky3 は図.2 となる． また，図.1 の LU 分解は図.3 の構造とな

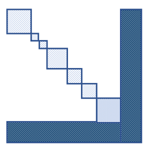


図 1. 良く表れるパターン

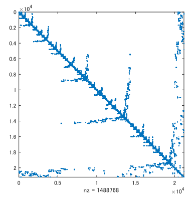


図 2. 置換後の raefsky3 のパターン

る．さらに，その逆行列も図.3 の構造となる．そのため，図.1 の構造を持つ行列の逆行列は密行列となるが，図.1 の LU 分解の L と U の近似逆行列はスパースな構造を持つことが期待できる．例えば，raefsky3 の L と U の近似逆行列はそれぞれ図 5. と図 6. となる．

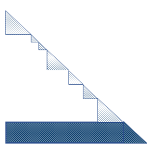


図 3. 図.1 の LU 分解の下三角行列

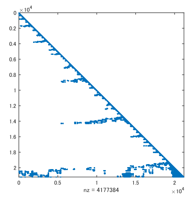


図 4. raefsky3 の L のパターン

3　数値実験

Sparse matrix collections [2] より行列サイズが 10,000 以下の 526 個の非対称な疎行列を用いて，(1),(2),(3) に現れる行列が疎行列となるかの実験を行った．また，L, U, R, X_L, X_U は MATLAB の LU function および inv function

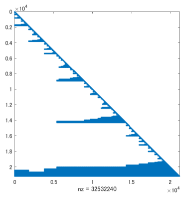


図 5. raefsky3 の L の逆行列のパターン

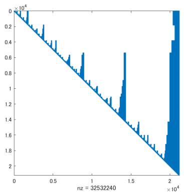


図 6. raefsky3 の U の逆行列のパターン

を用いて LU 分解および近似逆行列を作成した．

$$[L, U, p, q] = \mathtt{lu}(A, '\mathtt{vector}');$$

$$R = \mathtt{inv}(A);\ X_L = \mathtt{inv}(L);\ X_U = \mathtt{inv}(U);$$

density は非ゼロ要素数を全要素で割った値を使用した．図 7-14 に L, U, X_L, X_U, R, RA, $X_U(X_L(PAQ)), (X_L(PAQ))X_U$ の density のヒストグラムを示す．

図 7-8. より L, U は 90%以上の問題で density が 0.1 以下であることが分かる．図 9. より，X_L の density が 0.1 以下である問題が約 64%あることが分かる．図 10. より，X_U の density が 0.1 以下である問題が約 61%あることが分かる．図 11. より，R の density が 0.1 以下である問題が約 2%あり，density が 0.9 以上が約 47%であることが分かる．従って，LU 分解の段階ではほとんどの問題が疎行列性を保っているが，近似逆行列を作成すると疎行列性が失われることが分かる．ただし，L と U の近似逆行列であれば 60%以上の問題で行列は疎のままであることが分かる．図 12. より RA の density が約 0.1 以下である問題は 2%であることが分かる．従って，近似逆行列 R を用いた誤差評価式は多くの場合で，疎行列性を保つことが出来きないことが分かる．図 13. より $X_U X_L PAQ$ の density が 0.1 以下である問題は 2%であることが分かる．従って，X_L および X_U の行列が疎であっても $X_U X_L PAQ$ は密であることが多いことが分かる．従って，左前処理だけを用いた誤差評価式は疎行列性を保つことが出来ないことが分かる．図 14. より $X_L PAQ X_U$ の density が 0.1 以下である問題は 40%であることが分かる．従って，X_L および X_U の行列が疎であれば，$X_L PAQ X_U$ は疎である可能性があることが分かる．また，図 13. および 14. より LU 分解を用いる場合は左前処理だけではなく，左前処理と右前処理を組み合わせたほうが良いことが分かる．

次に scircuit in [2] と呼ばれる問題を (3) を用いて解いた結果を示す．この行列の性質を表 1. に示す．表 1. より (3) で使用する行列は疎な構造を保っており，精度保証付き数値計算もできていることが分かる．

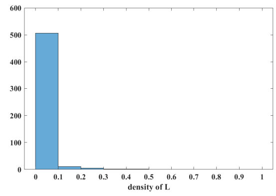


図 7. L の density

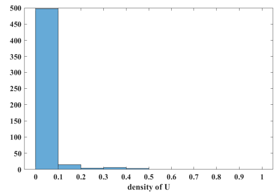


図 8. U の density

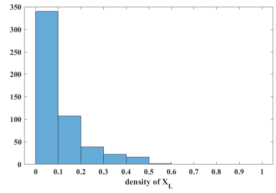


図 9. X_L の density

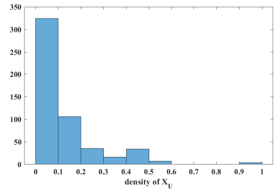


図 10. X_U の density

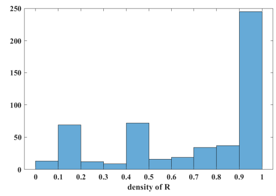


図 11. R の density

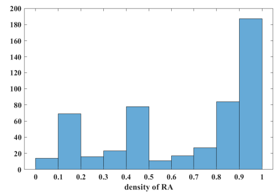


図 12. RA の density

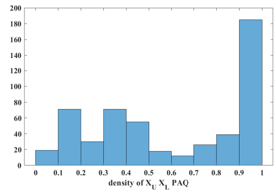


図 13. $X_U X_L PAQ$ の density

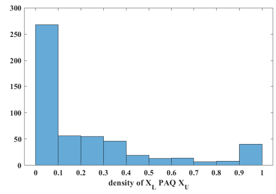


図 14. $X_L PAQ X_U$ の density

表 1. scircuit の行列の性質

次元	170,998
DM 分解の最大ブロックサイズ	170,493
$\kappa(A)$	5.58×10^9
A の density	3.28×10^{-5}
X_L の density	2.25×10^{-5}
X_U の density	2.25×10^{-5}
$(X_L(PAQ))X_U$ の density	4.45×10^{-3}
$\|\|(X_L(PAQ))X_U - I\|\|_\infty$ の上界	7.35×10^{-8}

参考文献

[1] S. M. Rump and T. Ogita. Super-fast validated solution of linear systems. Journal of Computational and Applied Mathematics. 2007, vol. 199(2), pp. 199-206.

[2] T. A. Davis and Y. Hu. The University of Florida sparse matrix collection. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). 2011, vol. 38(1), pp. 1:1-1:25.

Gauss の超幾何微分方程式のモノドロミー行列に対する精度保証付き数値計算

井上 直也[1], 石毛 利昌[2], 高安 亮紀[3]
[1] 筑波大学大学院システム情報工学研究科, [2] 千葉大学大学院理学研究科, [3] 筑波大学システム情報系
e-mail : takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本発表では Gauss の超幾何微分方程式

$$x(1-x)\frac{d^2y}{dx^2}+[\gamma-(\alpha+\beta+1)x]\frac{dy}{dx}-\alpha\beta y=0 \tag{1}$$

$(x,\,\alpha,\,\beta,\,\gamma\in\mathbb{C})$ を考える．Gauss の超幾何微分方程式の解は級数

$$F(\alpha,\beta,\gamma;x):={}_2F_1\left[\begin{matrix}\alpha,\beta\\ \gamma\end{matrix};x\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n\,n!}x^n$$

で与えられ, これを Gauss の超幾何関数, または単に超幾何関数という．ここで,

$$(x)_n:=\begin{cases}1 & (n=0)\\ \prod_{k=0}^{n-1}(x+k) & (n\ge 1)\end{cases},\quad x\in\mathbb{C}$$

は Pochhammer 記号である．以下, $\gamma,\gamma-\alpha-\beta,\alpha-\beta\notin\mathbb{Z}$ を仮定する．

ある特異点周りの閉経路に沿った解析接続を常微分方程式の精度保証付き数値計算を用いて行うことで, 特異点周りのモノドロミー行列を厳密に包含することができる．Gauss の超幾何微分方程式の場合はモノドロミー行列を得る陽的な公式がある．しかし, より一般的な超幾何微分方程式, 特に多変数超幾何微分方程式のモノドロミー行列を得ることは難しいため, 解の多価性を表現するモノドロミー行列の値を精度保証付き数値計算で得る方法を紹介する．

2 接続行列・モノドロミー行列

Gauss の超幾何微分方程式は $x=0,1,\infty$ を確定特異点にもち, 確定特異点の周りでそれぞれ基本解を持つ．特異点 $x=0$ 周りでは $x\in D_0:=\{x:|x|<1\}$ において

$$y_0^{(1)}(x)=F(\alpha,\beta,\gamma;x),$$
$$y_0^{(2)}(x)=x^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,\beta-\gamma+1,2-\gamma;x).$$

特異点 $x=1$ 周りでは $x\in D_1:=\{x:|x-1|<1\}$ において

$$y_1^{(1)}(x)=F(\alpha,\beta,\alpha+\beta-\gamma+1;1-x),$$
$$y_1^{(2)}(x)=(1-x)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\alpha,\gamma-\beta,\gamma-\alpha-\beta;1-x).$$

特異点 $x=\infty$ 周りでは $x\in D_\infty:=\{x:|x|>1\}$ において

$$y_\infty^{(1)}(x)=x^{-\alpha}F(\alpha,\alpha-\gamma+1,\alpha-\beta+1;x^{-1}),$$
$$y_\infty^{(2)}(x)=x^{-\beta}F(\beta-\gamma+1,\beta,\beta-\alpha+1;x^{-1})$$

とそれぞれ表される．超幾何微分方程式・超幾何関数の性質については例えば [1] が詳しい．

いま $i=0,1,\infty$ とし, 複素数 $x_i\in D_i$ から $x_j\in D_j$ $(j=0,1,\infty)$ への経路を $\ell_{i,j}$ と表す．経路 $\ell_{i,j}$ 上の解析接続を $(\ell_{i,j})_*$ と表すとすると, $x\in D_j$ に対して

$$(\ell_{i,j})_*\left(y_i^{(1)}(x),y_i^{(2)}(x)\right)=\left(y_j^{(1)}(x),y_j^{(2)}(x)\right)M_{i,j}$$

をみたす $M_{i,j}\in\mathrm{GL}(2,\mathbb{C})$ を接続行列という．

Gauss の超幾何微分方程式の場合, 接続行列は

$$M_{0,1}=\begin{bmatrix}\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} & \frac{\Gamma(2-\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(1-\beta)}\\ \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} & \frac{\Gamma(2-\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha-\gamma+1)\Gamma(\beta-\gamma+1)}\end{bmatrix},$$

$$M_{0,\infty}=\begin{bmatrix}\frac{e^{-\alpha\pi\mathrm{i}}\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\beta)} & \frac{e^{-(\alpha-\gamma+1)\pi\mathrm{i}}\Gamma(2-\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta-\gamma+1)\Gamma(1-\alpha)}\\ \frac{e^{-\beta\pi\mathrm{i}}\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\beta)\Gamma(\alpha)} & \frac{e^{-(\beta-\gamma+1)\pi\mathrm{i}}\Gamma(2-\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha-\gamma+1)\Gamma(1-\beta)}\end{bmatrix},$$

$$M_{1,\infty}=M_{0,\infty}M_{0,1}^{-1}$$

と陽的に与えられる $(\mathrm{i}=\sqrt{-1})$．しかし, 一般的にはこのような公式を導くことが困難である．

本研究では, 次で定義される行列値関数 $\Phi_i(x)\in\mathrm{GL}(2,\mathbb{C})$ を基本解行列という．

$$\Phi_i(x):=\begin{bmatrix}y_i^{(1)}(x) & y_i^{(2)}(x)\\ \frac{dy_i^{(1)}}{dx}(x) & \frac{dy_i^{(2)}}{dx}(x)\end{bmatrix}.$$

初期値問題の解の一意性から接続行列はまた

$$(\ell_{i,j})_*\Phi_i(x) = \Phi_j(x)M_{i,j},\ x \in D_j$$

をみたし, $M_{i,j} = \Phi_j(x)^{-1}(\ell_{i,j})_*\Phi_i(x)$ と基本解行列を用いて表すことができる.

次に基本解系 $\left(y_0^{(1)}(x), y_0^{(2)}(x)\right)$ に関する基本群のモノドロミー表現を与える. いま $\pi_1(x, \mathbb{C}\setminus\{0,1,\infty\})$ を x を基点とする領域 $\mathbb{C}\setminus\{0,1,\infty\}$ の超幾何微分方程式の基本群とする. そして, $(\ell_i)_*$ $(i = 0, 1, \infty)$ は $x \in D_0$ を基点とし, 確定特異点 $x = i$ の周りの閉経路上の解析接続を表す. このとき, 基本解系に対して

$$(\ell_i)_*\left(y_0^{(1)}(x), y_0^{(2)}(x)\right) = \left(y_0^{(1)}(x), y_0^{(2)}(x)\right)M_i$$

をみたす $M_i \in \mathrm{GL}(2,\mathbb{C})$ をモノドロミー行列という. この行列は写像

$$\begin{aligned}\pi_1(x, \mathbb{C}\setminus\{0,1,\infty\}) &\to \mathrm{GL}(2,\mathbb{C})\\ \ell_i &\mapsto M_i\end{aligned}$$

を決定する. この写像を基本群のモノドロミー表現といい, $M_0M_1M_\infty = I$ をみたす行列の3つの組 (M_0, M_1, M_∞) によって決まる.

Gauss の超幾何微分方程式の場合, モノドロミー行列は上記の接続行列を用いて

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi(1-\gamma)\mathrm{i}} \end{bmatrix},$$

$$M_1 = M_{0,1}^{-1}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi(\gamma-\alpha-\beta)\mathrm{i}} \end{bmatrix}M_{0,1},$$

$$M_\infty = (M_1M_0)^{-1}$$

と与えられる陽的な公式がある.

接続行列と同様にモノドロミー行列も基本解行列に対して次をみたす.

$$(\ell_i)_*\Phi_0(x) = \Phi_0(x)M_i. \tag{2}$$

3 精度保証付き数値計算によるモノドロミー行列の計算

精度保証付き数値計算を用いて, モノドロミー行列を厳密に包含する方法を紹介する. まず, (2) から

$$M_i = \Phi_0(x)^{-1}(\ell_i)_*\Phi_0(x)$$

が成り立つ. いま $\Phi_0(x)$ は基点 $x \in D_0$ における関数値であり, $(\ell_i)_*\Phi_0(x)$ は確定特異点 $x = i$ の周りの閉経路上の解析接続結果である. 方程式 (1) を

$$d\Phi(x) = A(x)\Phi(x),$$
$$A(x) := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{\alpha\beta}{x(1-x)} & \frac{(\alpha+\beta+1)x-\gamma}{x(1-x)} \end{bmatrix}dx$$

と変形し (Pfaffian 方程式と呼ばれる), 閉経路を一つ固定することで, 複素数値常微分方程式系を得る.

例えば, 確定特異点 $x = 1$ 周りの閉経路として $\Gamma_1 : x(t) = e^{\mathrm{i}\pi t}/2 + 1$, $t \in [-1, 1]$ をとれば,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\mathrm{i}\pi}{2}e^{\mathrm{i}\pi t},\quad \frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dt}\cdot\frac{dt}{dx} = \frac{dy}{dt}\frac{2}{\mathrm{i}\pi e^{\mathrm{i}\pi t}}$$

より, $z = dy/dx$ とすると

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = \frac{\mathrm{i}\pi}{2}e^{\mathrm{i}\pi t}z, \\ \frac{dz}{dt} = \mathrm{i}\pi\left[\frac{\gamma-(\alpha+\beta+1)(e^{\mathrm{i}\pi t}/2+1)}{e^{\mathrm{i}\pi t}/2+1}\right]z \\ \qquad + \mathrm{i}\pi\left(\frac{\alpha\beta}{e^{\mathrm{i}\pi t}/2+1}\right)y, \end{cases} \tag{3}$$

$t \in (-1, 1)$ という正規系の常微分方程式系を得る. 基点は $x(-1) = 1/2 \in D_0$ であり, 常微分方程式の初期条件は $\Phi_0(1/2)$ である. これは Gauss の超幾何関数 $F(\alpha, \beta, \gamma; x)$ を用いてその関数値を精度保証付き数値計算する. そして $t \in (-1, 1)$ の区間において常微分方程式系 (3) を精度保証付きで厳密に解析接続 (例えば [2] のような常微分方程式の精度保証付きソルバーにより求積) する事により, $(\ell_1)_*\Phi_0(1/2)$ の厳密な包含を得る. すると区間行列

$$\boldsymbol{M}_1 = \Phi_0\left(\frac{1}{2}\right)^{-1}(\ell_1)_*\Phi_0\left(\frac{1}{2}\right)$$

は上記のモノドロミー行列 M_1 の厳密な包含となる.

発表時には上記モノドロミー行列の包含方法によってモノドロミー行列が得られることを例証し, さらに本手法の多変数超幾何微分方程式への応用について言及する.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 18K13453 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] 原岡喜重, 超幾何関数, 朝倉書店, 2002 年.

[2] M. Kashiwagi. kv - C++ Numerical Verification Libraries. `http://verifiedby.me/kv/`.

大規模並列環境における実対称標準固有値問題の精度保証法

寺尾 剛史 [1], 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 : nb17105@shibaura-it.ac.jp

1 概要

本研究では，実対称行列に対する標準固有値問題の近似固有値の精度保証法の提案と大規模並列環境における計算性能の評価を行う．標準固有値問題に対する精度保証法として [1] 等が知られている．また，実対称系の大規模一般化固有値問題に対する精度保証法が提案された [2]．これらの手法は，固有値ソルバと独立しており，固有対の計算に対して任意の計算手法を適用可能である．つまり，LAPACK や ScaLAPACK 等の最適化された固有値計算ライブラリを使用可能である．本研究では，この精度保証法における誤差評価方法を改良し，大規模な問題に対して誤差上限の過大評価を抑える手法を提案する．

また，大規模並列環境における数値計算法は計算性能のスケーラビリティが非常に重要である．数値実験では，名古屋大学の FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX100 (以後 FX100) 上でのスケーラビリティの評価を紹介し，大規模計算機上で提案手法が有効であることを示す．

2 準備

本稿では，実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対する標準固有値問題 $Ax^{(i)} = \lambda_i x^{(i)}$ について述べる．ここで，$\lambda_i \in \mathbb{R}, x^{(i)} \in \mathbb{R}^n$ とする．このとき，

$$AX = X\Lambda, \quad X^TX = I$$

を満たす n 次対角行列 Λ $(\Lambda_{ii} = \lambda_i)$ と $X = \{x^{(1)}, \ldots, x^{(n)}\} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を考える．また，I は単位行列である．このとき，ある数値計算法で対角行列 $\hat{D} \approx \Lambda$ と $\hat{X} \approx X$ が得られたと仮定する．ここで，全ての i に対する λ_i を包含する定理を紹介する．

まず，正則な行列 $\hat{X}$ に対して

$$\lambda_i(A) = \lambda_i(\hat{X}^{-1}A\hat{X})$$

が成り立ち，$\hat{X}^{-1}A\hat{X} \approx \hat{D}$ が期待できる．よって，ゲルシュゴリンの定理より $|\hat{D} - \hat{X}^{-1}A\hat{X}|$ の上限を計算することで $\hat{D}_{ii}$ を中心としたゲルシュゴリン円盤の半径の上限を計算することができる．ここで，行列に対する絶対値記号は全要素に対して絶対値をとるものとする．また，行列の不等式は各要素に対して成り立つものとする．

定理 1 は，[2] で提案された手法を標準固有値問題へ適用したものである．

定理 1 $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対して全近似固有対からなる $\hat{D}, \hat{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が得られたとき，

$$G = \hat{X}^T\hat{X} - I, \quad R = \hat{X}^T(\hat{X}\hat{D} - A\hat{X}) \quad (1)$$

とする．ここで，$\|G\|_\infty < 1$ であるとき，

$$r = |R|e + \frac{n\|R\|_\infty}{1 - \|G\|_\infty}|G|e \quad (2)$$

とする．ただし，$e = (1, \ldots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$ である．このとき，

$$\lambda_i \subseteq \bigcup_{k=1}^{n} [\hat{D}_{kk} - r_k, \hat{D}_{kk} + r_k] \quad (3)$$

が成り立つ *[2]*.

定理 1 は D に対する行列方程式 $\hat{X}D = A\hat{X}$ の近似解を $\hat{D}$, $\hat{X}$ の近似逆行列を $\hat{X}^T$ として $\hat{D}$ の精度保証を行ったものである．よって，行列方程式における誤差は

$$|\hat{D} - \hat{X}^{-1}A\hat{X}| = |\hat{X}^{-1}(\hat{X}\hat{D} - A\hat{X})| \approx |R|$$

である．

3 提案手法

定理 1 の (2) は，$|R|$ が行列方程式の誤差であり，本来 $n\|R\|_\infty|G|e/(1 - \|G\|_\infty)$ は小さいことが望ましい．しかし，大規模な行列に対して n の値が無視できない状況が考えられる．ここで，定理 1 の (2) の第 2 項を改善する誤差評価式を提案する。

補題 2 $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対して全近似固有対からなる $\hat{D}, \hat{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が得られたとする．また，R と G は (1) と同様とする．ここで，$\|G\|_\infty < 1$ であるとき，

$$|\hat{D} - \hat{X}^{-1}A\hat{X}| \leq (I - |G|)^{-1}|R| \quad (4)$$

が成り立つ．

証明　$\|G\|_\infty < 1$ より，行列 $I-G$ は正則であり，$|(I-G)^{-1}| \le (I-|G|)^{-1}$ を満たす．よって

$$\begin{aligned}\hat{D} - \hat{X}^{-1}A\hat{X} &= \hat{X}^{-1}(\hat{X}\hat{D} - A\hat{X}) \\ &= \hat{X}^{-1}\hat{X}^{-T}\hat{X}^{T}(\hat{X}\hat{D} - A\hat{X})\end{aligned}$$

であり，(1) より

$$\begin{aligned}|\hat{D} - \hat{X}^{-1}A\hat{X}| &\le |(I-G)^{-1}||R| \\ &\le (I-|G|)^{-1}|R|\end{aligned}$$

が成り立つ．

補題 2 より，$\tilde{r} := (I-|G|)^{-1}|R|e$ とすると定理 1 の (3) と同様に固有値を包含できる．また，[3, p134] から，$v = (I+|G|)|G||R|e, w = (I-|G|)v$ とし，$w > 0$ ならば

$$\tilde{r} \le |R|e + \max_i \frac{(|G||R|e)_i}{w_i} v \tag{5}$$

が成り立つ．これは，(2) の n が作用する項を改善できる．発表では (5) の評価と計算方法を紹介する．

4　数値実験

本稿では，名古屋大学の FX100 上での計算性能のスケーラビリティを紹介する．FX100 は，CPU : SPARC64 XIfx，1 ノードのコア数 : 32 コア，メモリ : 32GB，ノード数 : 2,880 である．図 1，2 は FX100 上の擬似乱数（[0, 1] 区間の一様分布）からなる行列に対する ScaLAPACK の固有値ソルバ（PDSYEVD）と精度保証法の弱スケーラビリティと強スケーラビリティのそれぞれの比較結果である．ここで，提案手法の G, R の計算には，[4] に基づく区間行列積を用いた．

FX100 上で，提案手法は ScaLAPACK の固有値ソルバより高速であり，かつ高い強スケーラビリティを示した．図 2 より，5 万元の問題に対して PDSYEVD の 45%程度の計算時間で精度保証に成功した．提案手法の主要の計算は，行列-行列積であり，この計算は高いスケーラビリティを持つ．よって，並列性の非常に高い計算機上で提案手法は高速に計算可能である．また，エクサスケールの計算機等でも高い計算性能が期待できる．発表では，精度に関する数値実験結果を紹介する．

謝辞　本研究は、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の支援による (課題番号: jh190015).

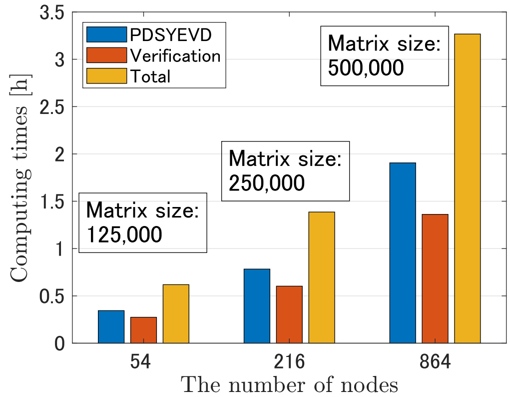


図 1. FX100 上の固有値ソルバ (PDSYEVD) と精度保証法の弱スケーラビリティの比較.

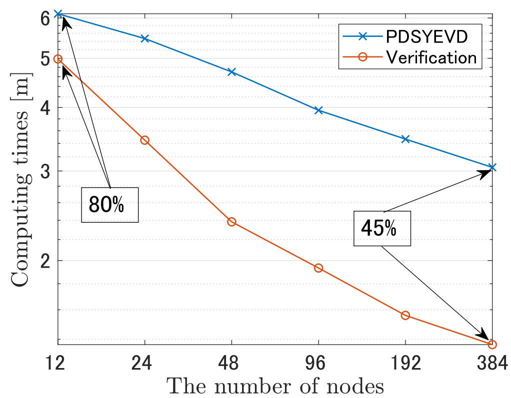


図 2. FX100 上の 5 万元の行列に対する固有値ソルバ (PDSYEVD) と精度保証法の強スケーラビリティの比較.

参考文献

[1] 宮島 信也, 荻田 武史, 大石 進一, 実対称行列の各固有値に対する精度保証付き数値計算法, 日本応用数理学会論文誌, 15 (2005), 253–268.

[2] T. Hoshi, T. Ogita, K. Ozaki and T. Terao, An a posteriori verification method for generalized eigenvalue problems in large-scale electronic state calculations, Submitted for publication.

[3] A. Neumaier: A simple derivation of the Hansen-Bliek-Rohn-Ning-Kearfott enclosure for linear interval equations, Reliable Computing, 5 (1999), 131–136.

[4] S. M. Rump, Fast and parallel interval arithmetic, BIT, 39 (1999), 539–560.

3 つの行列の積に対する無誤差変換と固有値問題への応用

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

本稿では，成分がすべて浮動小数点数で表現された 3 つの行列 A,B,C の積 ABC を扱う．行列 A, B, C の情報から B の近似である B' を生成し，浮動小数点演算を用いて $AB'C$ を評価しても丸め誤差が発生しないようにする．この技術を利用して，真の固有値と固有ベクトルが事前にわかるテスト行列の生成法を提案する．また，固有ベクトルを並べた行列の条件数も指定できるようにする．

2 表記

IEEE 754 規格 [1] によって定められる，ある固定精度における 2 進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．$\mathtt{ufp}(a), a \in \mathbb{R}$ は $|a|$ 以下の最大の 2 の整数乗数を返す関数とする．すなわち，$a \neq 0$ のとき $\mathtt{ufp}(a) = 2^{\lfloor \log_2 |a| \rfloor}$ である．ただし，例外的に $\mathtt{ufp}(0) = 0$ とする．u を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 3 つの行列の積に対する無誤差変換

行列 $A \in \mathbb{F}^{m\times n}, B \in \mathbb{F}^{n\times p}, C \in \mathbb{F}^{p\times q}$ が与えられるとする．目標は

$$AB'C = \mathrm{fl}(A(B'C)) \tag{1}$$

を満たす B の近似行列 $B' \in \mathbb{F}^{n\times p}$ 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．$c_{ij} \neq 0$ に対して ϕ_{ij} を，$a_{ij} \neq 0$ に対して ψ_{ij} を

$$\begin{aligned} c_{ij} \in \phi_{ij}\mathbb{Z}, \qquad c_{ij} \notin 2\phi_{ij}\mathbb{Z}, \\ a_{ij} \in \psi_{ij}\mathbb{Z}, \qquad a_{ij} \notin 2\psi_{ij}\mathbb{Z} \end{aligned} \tag{2}$$

となる 2 の整数乗数とする．例外的に $c_{ij} = 0$ のとき $\phi_{ij} = 0$，$a_{ij} = 0$ のとき $\psi_{ij} = 0$ とする．定数 $\beta, \gamma, \theta, \omega$ を

$$\begin{aligned} \beta &= \max_{i,j,k,\phi_{ij}\neq 0} \frac{\phi_{kj}}{\phi_{ij}}, \\ \gamma &= \max_{i,j,\phi_{ij}\neq 0} \frac{\mathtt{ufp}(c_{ij})}{\phi_{ij}}, \\ \theta &= \max_{i,j,k,\psi_{ij}\neq 0} \frac{\psi_{ik}}{\psi_{ij}}, \\ \omega &= \max_{i,j,\psi_{ij}\neq 0} \frac{\mathtt{ufp}(a_{ij})}{\psi_{ij}} \end{aligned} \tag{3}$$

と定義する．これらのすべては 1 以上の 2 の整数乗数となる．n'_i は行列 B の i 行にある非零要素の数とし，$n' = \max_i n'_i$ とする．

$$\begin{aligned} \sigma &= 12\mathtt{ufp}(\alpha)\beta\gamma\theta\omega \in \mathbb{F}, \\ \mathbb{F} &\ni \alpha \geq n \cdot n' \max_{i,j} |b_{ij}| \end{aligned}$$

とし，$B' \in \mathbb{F}^{n\times p}$ を

$$b'_{ij} = \mathrm{fl}((\sigma + b_{ij}) - \sigma)$$

と求めたとき，

$$4n \cdot n' \cdot u\beta\gamma\theta\omega < 1 \tag{4}$$

ならば (1) が成立する．もし，$\mathrm{fl}((AB')C) = AB'C$ を成立させたい場合は，n'_i を B の i 列にある非零要素の数とすればよい．なお，A と C には，各要素の浮動小数点数の仮数部と指数部に関して強い制約があり，また最悪の場合は B' は零行列になる．

4 固有値が事前にわかるテスト行列

正則な行列 $X \in \mathbb{F}^{n\times n}$ を用いて，前章までの議論を $A := X^{-1} \in \mathbb{F}^{n\times n}, C := X \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とした

$$ABC = X^{-1}BX \tag{5}$$

を扱う．本稿の内容は学会発表 [2] を一般化したものである．B が対角行列であれば対角化（$n' = 1$），上三角ならばシューアの標準形（$n' = n$），上 2 重対角行列であればジョルダン標準形（$n' = 2$）の議論ができる．多くの問

題では，$X^{-1}BX$ の計算に丸め誤差が発生するため，先に述べた 3 つの行列の積に関する無誤差変換は有用である．

テスト行列を生成する関数を 2 つ提案する．1 つめは対角化を利用して

入力： $d \in \mathbb{F}^n$, c_1

出力： $A,\ X \in \mathbb{F}^{n\times n}$，$s,\ r \in \mathbb{F}^n$，$c_2 \in \mathbb{F}$

とする．d_i は期待する固有値であり，A の正確な固有値は $s_i + r_i \approx d_i$ となる．行列 X は A の正確な固有ベクトルを並べた行列であり．c_1 は期待される X の条件数，c_2 は X の条件数（c_1 の良い近似）である．

まず，$X^{-1}, X \in \mathbb{F}^{n\times n}$ を準備することが重要である．$X \in \mathbb{F}^{n\times n}$ であっても，$X^{-1} \notin \mathbb{F}^{n\times n}$ であることが多く，また (4) を満たす必要があるために小さな $\beta, \gamma, \theta, \omega$ が望まれる．

$$n = \prod_{i=1}^{k} k_i, \quad k_i \in \mathbb{N}$$

に対して，$\beta, \gamma, \theta, \omega \le 2$ となる X_i^{-1} と X_i のペアを k 組を用意し，

$$\begin{aligned} X^{-1} &= X_1^{-1} \otimes X_2^{-1} \otimes \cdots \otimes X_k^{-1} \\ X &= X_1 \otimes X_2 \otimes \cdots \otimes X_k \end{aligned}$$

とする．$\otimes$ はクロネッカー積を意味する．それぞれの行列における式 (3) の γ, ω の積が u^{-1} を超えなければ，クロネッカー積の計算で丸め誤差は発生しない．行列の条件数 $\mathtt{cond}(\cdot)$ に関して，クロネッカー積の性質から

$$\mathtt{cond}(X) = \prod_{i=1}^{k} \mathtt{cond}(X_i)$$

となる．よって，X の条件数は $X_1, \ldots, X_k$ を適切に選ぶことにより，c_1 に近い条件数を設定することができる．表 1 は，現在用意しているサンプル行列 X_i の個数と最大の条件数をまとめたものである．条件数が約 1 の間隔になるようにサンプル行列を用意している．対称・非対称を指定することも可能である．この手法の欠点は，n が素数のときに全く対応できないこと，また n が小さいとき，現状では X を悪条件にはできないことである．

もう 1 つの関数は以下のように定義する．

Input: $D \in \mathbb{F}^{n\times n}$

Output: $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$, $s, r \in \mathbb{F}^n$

表 1. $\beta, \gamma, \theta, \omega \le 2$ を満たすサンプル行列（抜粋）

n	行列の数	最大条件数
2	6	6.85
3	20	19.1
4	41	33.7
5	44	48.0

A, s, r の役割は前出のものと同じであり，D は上三角行列，上 2 重対角行列，ブロック対角行列を想定する．

式 (5) の B を 2 次のブロック行列を並べたブロック対角行列とすれば，複素固有値を持った実行列を生成することも可能である．$a \pm bi$ を固有値に持つ実行列は，例えば

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix}$$

がある．よって，例として $a \pm bi$ と $c \pm di$ を固有値の候補としたい場合は

$$D = \begin{pmatrix} a & b & 0 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & d \\ 0 & 0 & -d & c \end{pmatrix}.$$

から D' を生成し，$X^{-1}D'X$ を計算する．ただし，

$$\mathrm{fl}((\sigma + b_{ij}) - \sigma) \ne -\mathrm{fl}((\sigma + b_{ji}) - \sigma)$$

ということがあるため，

$$b'_{ij} = \mathrm{fl}((\sigma + b_{ij}) - \sigma), \quad i < j$$

を計算し，b'_{ji} は b'_{ij} の符号を変えたものを代入するとよい．

5　今後の課題

表 1 にあるテスト行列をより充実させることが今後必要である．また，シルベスタ方程式や最小 2 乗問題などのテスト問題も生成できるように議論を拡張する．

参考文献

[1] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.

[2] 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).

Conic finance に基づくポートフォリオ構築

中川 秀敏 [1]
[1] 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

Conic Finance は、市場では常に bid と ask の 2 つの価格が存在するという「一物二価」を前提にした理論である。本講演では、Madan and Schoutens [1] の例に倣い、「ポートフォリオ全体での bid」と「個別資産の bid の投資比率加重和」の差で定義される「ダイバーシティ尺度」を最大化するポートフォリオ構築法を日本株式で応用した結果および検討課題を報告する。

2 Conic portfolio 理論

Madan and Schoutens [1] の 7 章によると、Conic portfolio 理論とは、保守的な市場評価値に相当するビッド値を用いて、「ポートフォリオとしてみたときのビッド値」と「個別資産のビッド値の投資比率加重和」の差として定義される「ダイバーシティ尺度 (diversity measure)」を最大化するアロケーションに基づくポートフォリオ構築法とまとめることができる。

投資期間 $T(>0)$ 経過後のリスク資産価値を表す確率変数 X に対する市場のベストなビッド（買い）値 $\mathrm{bid}(X)$ とベストなアスク（売り）値 $\mathrm{ask}(X)$ は以下で与えられることが知られている：

$$\mathrm{bid}(X) = e^{-rT} \inf_{Q\in\mathcal{M}} \mathbf{E}_Q[X],$$
$$\mathrm{ask}(X) = e^{-rT} \sup_{Q\in\mathcal{M}} \mathbf{E}_Q[X].$$

ただし、r は無リスク利子率、$\mathcal{M}$ を確率測度を要素とする適当な凸集合とする。

（一般に $\mathrm{bid}(X) = -\mathrm{ask}(-X)$ が成り立つ。）

また、リスク尺度の研究で知られているように、$\mathrm{bid}(X)$ は適当な凹 (concave) な $[0,1]$ 上の分布関数（つまり歪み関数）Ψ を用いて

$$\mathrm{bid}(X) = e^{-rT} \int_{-\infty}^{\infty} x d\Psi(F_X(x))$$

と表すことができる（F_X を（リスク中立確率の下での）X の分布関数）。

後の数値例では、歪み関数として特に MINMAXVAR 関数

$$\Psi_\lambda^{\mathrm{MINMAXVAR}}(u) := 1 - \left(1 - u^{\frac{1}{1+\lambda}}\right)^{1+\lambda}, \quad \lambda \geq 0$$

を用いる。

3 ダイバーシティ尺度最大化

投資対象となるリスク資産が n 個あるとする。 ある投資期間における 「平均がゼロとなるように補正した資産 $i \in \{1, \ldots, n\}$ の中心化 (centered) リターン」を確率変数 R_i で表し、ポートフォリオでの資産 i への投資比率を a_i で表す（$\sum_{i=1}^n a_i = 1$ とする）。

投資比率のポートフォリオ $(a_i)_{i=1,\ldots,n}$ のダイバーシティ尺度を以下で定義する。要約すると、「ポートフォリオとしてみたときのビッド値」と「個別資産のビッド値の投資比率加重和」の差である（中心化しているので、ビッド値の値はいずれも 0 以下となることに注意）。

$$\mathrm{bid}\left(\sum_{i=1}^n a_i R_i\right) - \sum_{i=1}^n a_i \mathrm{bid}(R_i) \; (\geq 0)$$

Conic portfolio 理論の観点では、最適投資比率は上記ダイバーシティ尺度を最大化する $(a_i^*)_{i=1,\ldots,n}$ となる。

実際のリスク資産に対してダイバーシティ尺度を計算するためには、中心化リターンの確率分布が必要となる。ここでは、Madan and Schoutens [1] に従い、過去の日次リターンのデータをブートストラップ（重複サンプリング）で 20 個掛け合わせる（1ヶ月を 20 営業日と見立てる）ことで、疑似月次リターンを求めていく方法を用いる。

4 数値例：日本株式 5 銘柄による分析

日本市場での時価総額上位の 5 社の株式（武田薬品工業、ソニー、トヨタ、三菱 HG、NTT ドコモ）を用いて、先に示した方法でポートフォリオを構築[1]し、2015 年 1 月〜2019 年 1 月を運用期間としてパフォーマンスを調べる。

[1] テキストでは、GE, Intel, IBM, Johnson & Johnson, Apple の 5 銘柄で同様の分析をした結果を紹介している。

具体的には、上記 5 銘柄へのロング・ポジションという制約（$a_i \geq 0$）で、月初にリバランスする運用という想定で、リバランス日から過去 250 営業日分のデータから計算される「ダイバーシティ尺度」を最大化する投資比率を算出し、その比率に従って 1ヶ月間運用する。なお、月次リターン分布を求める際に行うブートストラップのサンプリング回数は 10000 回とし、歪み関数は MINMAXVAR（$\lambda = 0.5$) を用いる。

また、比較のため「疑似 Sharpe レシオ（期待リターン/標準偏差）最大化」ポートフォリオ（リバランス時点から過去 250 営業日分のリターンデータを用いて平均ベクトルと分散共分散行列を推定）および等ウェイト・ポートフォリオの月初リバランスによるパフォーマンスも算出する。

今回の結果だけを見ると、「ダイバーシティ尺度」最大化ポートフォリオが、相対的に良いパフォーマンスを最も長い期間示していた (図 1)。

また、投資比率の月次推移を見ても、「ダイバーシティ尺度」最大化ポートフォリオのリバランスは、「疑似 Sharpe レシオ最大化」ポートフォリオのそれと比べると、穏やかに推移しているように見える（図 2, 3)）。

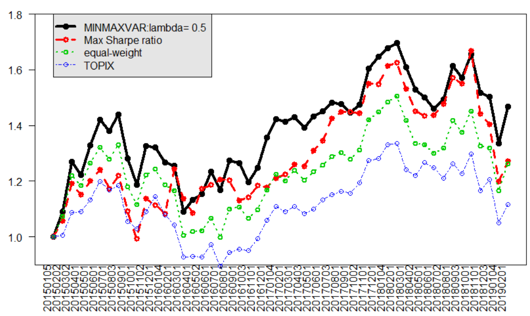


図 1. 歪み関数 MINMAXVAR（$\lambda = 0.5$) を用いたときの「ダイバーシティ尺度」最大化ポートフォリオ、疑似 Sharpe レシオ最大化ポートフォリオ、等ウェイト・ポートフォリオのそれぞれの月初の累積リターン推移、および TOPIX （2015 年 1 月 5 日の価値を 1 とする。ポートフォリオは月初にリバランスと想定）

なお、歪み関数 MINMAXVAR のパラメータ λ を 0.1 から 1 まで変化させた際の、「（最適投資比率に対する）ダイバーシティ尺度」などの 2015 年 1 月～2019 年 1 月平均も調べている（表 1）。λ に対する各指標の単調増加の様子が見て取れる。ただし “reward” および “risk” はそれぞれ $-\sum_{i=1}^{n} a_i \mathrm{bid}(R_i)$ および $-\mathrm{bid}\left(\sum_{i=1}^{n} a_i R_i\right)$ のこと。

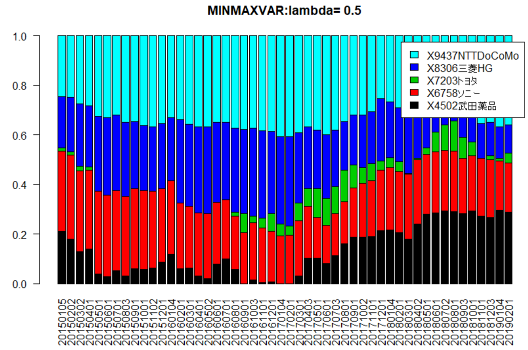


図 2. 歪み関数 MINMAXVAR（$\lambda = 0.5$) を用いたときの「ダイバーシティ尺度」最大化ポートフォリオの各月の投資比率の推移

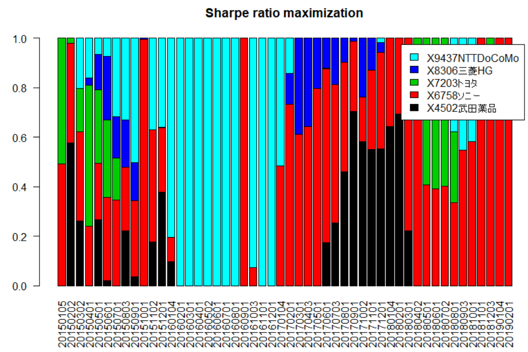


図 3. 疑似 Sharpe レシオ最大化ポートフォリオの各月の投資比率の推移

表 1. いくつかの MINMAXVAR のパラメータ λ に対する「ダイバーシティ尺度」などの 2015 年 1 月～2019 年 1 月平均

λ	ダイバーシティ尺度	“reward”	“risk”
0.010	0.000	0.001	0.001
0.100	0.003	0.014	0.010
0.500	0.014	0.060	0.046
0.800	0.021	0.089	0.068
1.000	0.025	0.106	0.081
2.000	0.040	0.175	0.135
5.000	0.068	0.266	0.199
10.000	0.075	0.281	0.206

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K01248 の助成を受けておこなわれた。

参考文献

[1] Madan, D., and W. Schoutens, *Applied Conic Finance*, Cambridge University Press (2016)

位置情報分析による人口統計を活用した、J-REIT投資戦略の有効性について（投資分野へのビッグデータの活用事例）

金子 拓也[1, 2], 木村 塁[1,3], 美嶋 勇太朗[1,3]
[1]株式会社KDDI総合研究所, [2]国際基督教大学 教養学部, [3] KDDI株式会社
e-mail: ta-kaneko@kddi-research.jp

1 概要

異次元緩和による低金利環境下、株式や債券などの伝統的な金融商品に加え、オルタナティブと呼ばれる金融商品群が投資対象として注目されている。その中でも特にJ-REITは、高利回りで比較的安定的に価格が推移していることなどから人気があり、東証Ｊリート市場の時価総額は、東証一部に次ぐ規模にまで成長している[1]。J-REITは当然元本や利回りが保証された金融商品ではなく、リスクファクターとしては、不動産市場リスク、金利変動リスク、自然災害リスク、上場廃止リスク、運営に関するリスクなど様々なリスクが考えられる[2]が、株価（以降リートの株価相当は「投資口価格」と書く）に直接かつ常態的に影響するのは、企業の商品やサービスの売れ行きに相当する、保有不動産物件の稼働率である。物件の稼働率は、目論見書や有価証券報告書に記載報告されるものの、スキームの複雑さ故、投資法人が収益を受け取るのは売り上げから数か月後であり、目論見書の公開も基準日からタイムラグがあることから、公開情報だけでは不動産の現状を適時に把握することは難しい。そこで本稿では、ユーザの位置情報に基づく人口統計を用いることで、保有不動産の状況を適時に把握できるのかどうかを、IR情報を正解として同期性を確認し、そのうえで公開情報を大幅に先行して得られる人口統計量を活用した投資戦略への応用を考える。

2 位置情報統計量と投資口価格の関係

J-REITの最大の特徴の一つは、不動産収入から支払利息を含むコストを差し引いた利益の殆どが配当金（以降J-REITの配当金相当は「分配金」と書く）として投資家に支払われる点である。このことは、事業会社のように利益から法人税を支払い、残りを内部留保と配当金とでシェアするケースとは異なり、利益と分配金の連動性が高いことはもちろんのこと、不動産収入と分配金との高い連動性も期待できる。つまり、収入を高い精度で予測できるのなら、より精緻な分配金の推定が可能となり、これを期待利回りで割ることで投資口価格の理論値が推定できる。J-REITの種類としては、オフィスビル、住居、商業施設、物流施設、ホテルなどそれぞれのカテゴリー単一種への投資に限定した特化型や、これらを組み合わせた複合型、あるいは総合型がある。この中で、位置情報統計量を用いてファンドの収入が予測しやすいと思われるのは、あるエリアへの人流が売り上げと連動していると想像できるホテル特化型であるので、これを事例としてとりあげる。以降ではモデルの概要を説明した後で、疑似的な投資実験を行い、位置情報統計量の有効性を見る。

観察対象のユーザの位置情報の総数をN、観察可能な位置情報（ユーザから許諾を得た位置情報）の総数をnとするとき、位置の捕捉率α%（$= n/N$）は、小規模エリアの位置情報の推移を観察するには不十分であり、何らかの拡大推計手法を用いる必要があると想定する。番号i$(\in \mathbf{N})$が附番されたユーザの日付k時刻tの位置情報を$u(i,k,t)$とし、日付kのある時間間隔T^kにおいて、エリアAに滞在するユーザ数を$\#A(T^k)$と書くとき、これは以下により得られる。

$$\#A(T^k) := \sum_{i=1}^{n} \mathbf{1}_{\left\{\int_{s\in T^k} \mathbf{1}_{\{A\cap u(i,k,s)\neq\emptyset\}} \mathbf{d}s>0\right\}} \quad (1)$$

ただし$\mathbf{1}_{\{x\}}$は x が真のとき1、偽のとき0を出力する指示関数である。さらに単位計測日内（例えば 1 日など）のm個の排反な期間T_j^k, j（$T_i^k \cap T_j^k = \emptyset, \mathrm{i} \neq \mathrm{j}$）において共通して滞在ユーザ数を計測する場合は次により算出する。

$$\#A(T_j^k) := \sum_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{m} \mathbf{1}_{\left\{\int_{s\in T_j^k} \mathbf{1}_{\{A\cap u(i,k,s)\neq\emptyset\}} \mathbf{d}s>0\right\}} \quad (2)$$

ただし$\mathrm{J} = \{1,\cdots,\mathrm{m}\}$とする。このように計測されたエリア$A$に滞在するユーザ数$\#A(T^k)$に加え、これにタイムラグ、捕捉率のトレンド排除、拡大推計等の加工を施した指数の変動が、保有

不動産の稼働率と高い相関を有するとき、投資口の理論価格の算出への応用が期待できる。

3　物件稼働率と投資口価格の推移

全 63 社の上場リートの中で、ホテル特化型のリートは 4 社あり、保有不動産の規模や棟数の確認のし易さの観点から､証券コード 3478 の森トラスト・ホテルリート投資法人[3]について詳しく見ることにする。本リートは 4 棟のホテル物件を有しており、東京駅と新大阪駅に隣接する 2 棟について IR レポートで稼働状況等を詳しく説明している。([3]参照）この 2 棟の客室数でそれぞれの稼働率を加重平均したものと月別平均投資口価格は下図のとおりとなる。

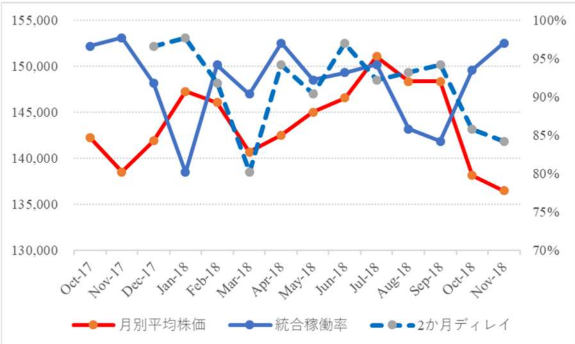


図 1. ①加重平均した月別稼働率（青, 右軸)、②2 か月ディレイの稼働率（点線）③月次の平均投資口価格（赤, 左軸）①と②の相関係数が -54.4%に対し、②と③の相関係数は 63.3%となっている。

位置情報から得られる人口統計データに、現在特許出願中の技術などを使って加工処理を施したものと、個別物件の月次稼働率を比較すると下図のとおり。

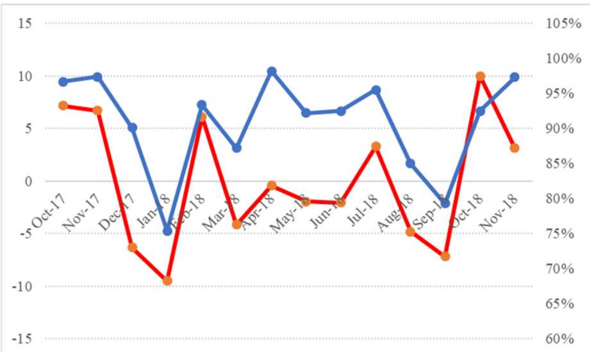


図 2. ①IR レポートの新大阪物件の月別稼働率（青, 右軸)、②人口統計データに基づく稼働率（赤, 左軸）①と②の相関係数は 75.5%となった。9 月の稼働率の落ち込みは、タンカーが関空の連絡橋に衝突するなど関空周辺に被害をもたらした台風 21 号の影響によるもの。本人口統計データを用いれば、稼働状況を適時把握でき、適切な投資判断に活用できる可能性がある。

以上より、関連性が確かめられたものと想定して人口統計の IR 情報比の先行性、市場価格の遅効性を考慮の上、簡単な投資戦略を考える。

4　疑似投資実験

実取引を再現したものではなく､mock に過ぎないが、上で得られる人口統計を用いた証券コード 3478 の疑似投資事例を紹介する。簡単にアルゴリズムは、上下 2 つの閾値を用意し、日々の人口統計データを適当に基準化した指数が、上側の閾値を超えるとロングポジションを、下側の閾値を下回るとショートポジションを、以外の場合はキャッシュポジションをとるもの。いずれも始値で取引を開始、終値で取引を手仕舞うことを繰り返す。下図の事例では、2017 年 12 月から 2019 年 4 月までのデータを用いている。設定の詳細等は発表時に説明する。

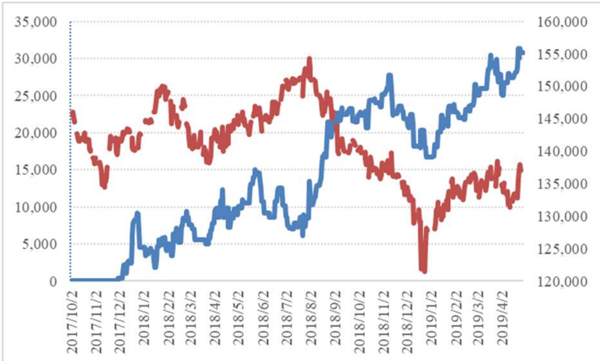


図 3. 日々の累積損益（青, 左軸）と投資口価格の推移（赤, 右軸)、累積損益は始値と終値の差額分だけ日々変化。判定精度は 56.7%程度となった。

参考文献

[1] JPX Web Page, https://www.jpx.co.jp/markets/indices/related/value/.
[2] 投資信託協会 Web Page, https://www.toushin.or.jp/reit/meritrisk/risk/.
[3] 森トラスト・ホテルリート投資法人 Web Page, http://mt-hotelreit.jp/

ハル・ホワイトモデルに対するフォワード・スターティング・オプション価格計算

畑 宏明[1], 安田 和弘[2], 劉 念麟[3]
[1] 静岡大学，[2] 法政大学，[3] 東京理科大学
e-mail：k_yasuda@hosei.ac.jp

1 概要

S_t を時刻 t での株価，σ_t を時刻 t でのボラティリティとする．これらが次のようなハル・ホワイトモデルに従っているとする：

$$dS_t = rS_t dt + \sigma_t S_t e^\top dw(t), \qquad S_0 > 0, \quad (1)$$
$$d\sigma_t = a\sigma_t dt + b\sigma_t dw_2(t), \qquad \sigma_0 > 0. \quad (2)$$

ただし，$w := (w_1, w_2)^\top$ は2次元ブラウン運動，$r > 0$ は金利，$e := (\sqrt{1-\rho^2}, \rho)^\top \in \mathbb{R}^2$，$\rho \in (-1, 1)$, $a \in \mathbb{R}$, $b > 0$ とする．

$T > 0$ をオプションの満期，$t^* \in [0, T)$ をオプションの行使価格を決定する時刻，$k > 0$ を行使価格を決定する比率とする．時刻0におけるフォワード・スターティング・コールオプション価格は次の式で与えられる：

$$\mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[e^{-rT}(S_T - kS_{t^*})^+\right]. \quad (3)$$

通常のヨーロッパ型コールオプションとの違いは，行使価格が時刻0で決定せず，将来の時刻 t^* で決定するところにある．

本講演では，このオプション価格に対してモンテカルロ法を用いた計算方法を考える．標準的な方法であれば，与えられたモデル (1), (2) をオイラー・丸山近似（n ステップ）し，その数値解に対してモンテカルロ法（m 回）をすることで，オプション価格 (3) の近似値が得られる（**Stand**）．この方法を用いた場合，必要な計算コスト（乱数の個数）は $2n \times m$ となる．本講演では，オプション価格 (3) に対して，semi-analytical な表現（2通り）と，semi-analytical な表現にさらに展開をほどこした近似による表現を与え，計算コストを削減することを考える．また，それらの数値計算精度等を比較するための数値実験結果を与える．

2 表現の導出のアイデア

ここでは，紙面の都合上それぞれの価格表現の導出のアイデアのみを主に述べておく．詳細は，[2] に書かれている．

2.1 Semi-analytical な表現

Semi-analytical な表現のアイデアは，[1] で与えられたアイデアで，次のような方法を用いる：

$$(3) = \mathrm{e}^{-rT}\mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[\mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[(S_T - kS_{t^*})^+ \middle| \mathcal{F}^1_{t^*} \vee \mathcal{F}^2_T\right]\right].$$

ただし，$\mathcal{F}^1_t := \sigma(w_1(u); 0 \le u \le t)$, $\mathcal{F}^2_t := \sigma(w_2(u); 0 \le u \le t)$, $\mathcal{F}_t := \mathcal{F}^1_t \vee \mathcal{F}^2_t$ とする．期待値の中の条件付き期待値部分が与えられた情報の下で解析的に計算できるため，計算して次のような表現を得る．

定理 1. $0 \le t \le t^* < T$ に対して，t におけるオプション価格 $C_{FWS}(t, \sigma_t, S_t)$ は

$$\mathrm{e}^{-r(T-t)}\mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[S_{t^*} F^{(1)}_{t^*,T} \middle| \mathcal{F}_t\right] \quad (4)$$

となる．ただし，$0 \le s < t$ に対して，

$$\begin{aligned}
F^{(1)}_{s,t} &:= \mathrm{e}^{\theta^{(1)}_{s,t}} N\left(d^{(1),1}_{s,t}\right) - kN\left(d^{(1),2}_{s,t}\right), \\
\theta^{(1)}_{s,t} &:= \frac{2m^{(1)}_{s,t} + V^{(1)}_{s,t}}{2}, \\
d^{(1),2}_{s,t} &:= \frac{m^{(1)}_{s,t} - \log k}{\sqrt{V^{(1)}_{s,t}}}, \\
d^{(1),1}_{s,t} &:= d^{(1),2}_{s,t} + \sqrt{V^{(1)}_{s,t}}, \\
m^{(1)}_{s,t} &:= r(t-s) - \frac{1}{2}\int_s^t \sigma_u^2 du \\
&\quad +\rho \int_s^t \sigma_u dw_2(u), \\
V^{(1)}_{s,t} &:= \left(1-\rho^2\right)\int_s^t \sigma_u^2 du,
\end{aligned}$$

$N(x)$ は標準正規分布関数とする．

上記の表現では，t^* から T における $\{w_1(t)\}$ が現れないことが分かる．これにより，オイラー・丸山近似とモンテカルロ法を用いてシミュレーションする際に，t^* から T における $\{w_1(t)\}$ のための乱数を発生させる必要が無く

なり，計算コストが削減されることが期待される．(4) の表現を **Expre 1** とする．$\rho < 0$ のときに限定されるが，さらに，丸山・ギルサノフの定理を用いて計算を進めた表現が [2] では与えられている．ここでは，その表現を **Expre 2** としている．**Expre 2** では，$\{w_1(t)\}$ に関して全く乱数を発生させなくて良くなる．例えば $t^* = T/2$ とし，時刻 0 に価格付けをする場合を考える．標準的なオイラー・丸山近似（n ステップ）とモンテカルロ法（m 回）を用いた場合の計算コスト（乱数の個数）は $2n \times m$ であるのに対して，**Expre 1** は $\frac{3}{2}n \times m$，**Expre 2** は $n \times m$ の計算コストになる．実際，これを支持する数値計算結果を得ている（表 1）．

2.2 展開を用いた表現

展開を用いた表現のアイデアは，[3] で与えられたアイデアで，次のような方法を用いる．$\varepsilon \geq 0$ に対して，$t < s$ で，

$$dS_s^{(\varepsilon)} = rS_s^{(\varepsilon)}ds + \sigma_s^{(\varepsilon)}S_s^{(\varepsilon)}e^\top dw(s),$$
$$d\sigma_s^{(\varepsilon)} = a\sigma_s^{(\varepsilon)}ds + \varepsilon b\sigma_s^{(\varepsilon)}dw_2(s)$$

とする．ただし，$S_t^{(\varepsilon)} = S_t$，$\sigma_t^{(\varepsilon)} = \sigma_t$ とする．$t \leq t^* < T$ に対して，

$$g_t(\varepsilon) := \mathbb{E}^{\mathbb{Q}}\left[\left.\frac{(S_T^{(\varepsilon)} - kS_{t^*}^{(\varepsilon)})^+}{\mathrm{e}^{r(T-t)}}\right|\mathcal{F}_t\right]$$

とする．$g_0(1)$ が本来のオプション価格 (3) であることを注意しておく．$g_0(\varepsilon)$ に対して，$\varepsilon = 0$ のまわりでテイラー展開し，1 次の項までを採用し，$\varepsilon = 1$ と近似する：

$$(3) \approx g_0(0) + g_0'(0).$$

この表現を **Expan** とする．$g_0(0)$ と $g_0'(0)$ は Malliavin 解析の duality formula を用いて計算され，詳しい表現は [2] で与えられている．$g_0(0)$ はとある正規分布に従う確率変数にのみ依存した期待値で表せ，$g_0'(0)$ は解析的に得られる．したがって，この表現では，オイラー・丸山近似を用いる必要はなくなり，計算コストはモンテカルロ法の m になる．

3 数値実験結果

次のようなパラメータ値を用いる：$r = 0.05$, $\rho = -0.3$, $S_0 = 100$, $\sigma_0 = 0.3$, $a = 0.01125$, $b = 0.15$, $k = 1$, $T = 1$, $t^* = 0.5$．モンテカルロ法の回数は $m = 10^5$，オイラー・丸山近似のステップ数は $n = 10^2$ とする．ここでの真値は，標準的な計算方法を用い，そこではモンテカルロ法の回数は $m = 10^8$，オイラー・丸山近似のステップ数は $n = 10^3$ とし，得られた真値は 9.5187 である．次のような計算結果を得た：

表 1. 数値実験結果（誤差率，標準誤差，計算時間）

	Stand	**Expre 1**
PRICE	9.5268	9.5169
ERROR (%)	0.0853	-0.0187
SE	0.04677	0.01234
RATIO (SE)	1	0.2638
TIME (Sec.)	3.6032	2.7866
RATIO (TIME)	1	0.7734

	Expre 2	**Expan**
PRICE	9.5198	9.5143
ERROR (%)	0.0118	-0.0463
SE	0.01084	0.01195
RATIO (SE)	0.2318	0.2555
TIME (Sec.)	1.8308	0.0615
RATIO (TIME)	0.5081	0.01707

ここでの数値計算結果では，**Expan** が 2 つ semi-analytical な表現 (**Expre 1**, **Expre 2**) と計算精度は劣らない中，計算時間が圧倒的に早いことが分かる．講演では，その他の数値実験結果についても紹介する．

謝辞 本研究では，Arturo Kohatsu-Higa 教授（立命館大学）に有益なコメントを頂いた．ここに感謝の意を表します．

参考文献

[1] G.A. Willard, Calculating prices and sensitivities for path-independent derivatives securities in multifactor models, *Journal of Derivatives*, **5** (1997), 45–61.

[2] H. Hata, N.-L. Liu and K. Yasuda, Expressions of Forward Starting Option Price in Hull-White Stochastic Volatility Model, *submitted* (2019).

[3] E. Benhamou, E. Gobet and M. Miri, Time Dependent Heston Model, *SIAM J. Financial Math.* **1** (2010), 289–325.

二重待ち行列モデルについての一コメント

岸本一男 [1]
[1] 東京理科大学経営学部
e-mail : kishimot@rs.tus.ac.jp

1 はじめに

金融商品の価格変動のモデルは，売買が価格変動に影響を与えないものとして定式化されている．この定式化の下で，大量の投資家が同じモデルを用いてリスクのヘッジを行うと，システムのクラッシュが引き起こされる可能性が懸念される．また通常の取引においても，マーケットインパクトの影響をモデルの中に組み込むことができないことが大きな問題である．

著者が共同研究者とともに提案した２重待ち行列モデル [1] は，売買によって価格変動が駆動されるものであり，ある程度までは実データとの整合性も検証され [2]，応用例も提案されている [3]．しかし，売買それ自身があたえる価格変動への影響は陽に述べていなかった．結果自体はほとんど自明であるが，本発表はこの影響について指摘する．

2 ２重待ち行列モデル

二重待ち行列モデルは，東証あるいは大証のザラバ取引をモデル化したものである．注文サイズは１に限定され，取引は等間隔の離散的な価格のいずれかで行われるとする．売買は十分に厚く，最良気配での買い気配と売り気配のとの価格差は常に１ティックであると仮定する．

買い注文は現在の最良気配での上板と下板とのみに，それぞれパラメータ $b_{\mathrm{U}}, b_{\mathrm{L}}$ の指数分布に従ってポアソン到着し，売り注文も同様に現在の最良気配での上板と下板とのみに，それぞれパラメータ $s_{\mathrm{U}}, s_{\mathrm{L}}$ の指数分布に従ってポアソン到着する．上板での買い注文と，下板での売り注文とが約定を引き起こし，結果として板の厚み１だけ減少させる．一方，下板での買い注文と，上板での売り注文は，単に板の厚みを１増加させる．

板が消滅したときには，上板が消滅した場合にはその後に売り注文の板が，下板が消滅した場合には買い注文の板が，上板なら r_{U}, 下板なら r_{L} 入るとする．

$r_{\mathrm{U}}, r_{\mathrm{L}}$ は過去の履歴に依存する確率変数とするのがより現実に忠実で，幅広く観察される板の移動での強い負の系列相関を説明しうる [3] が，本発表では簡単のため， $r_{\mathrm{U}}, r_{\mathrm{L}}$ とも定数だとする．

3 ２重待ち行列モデルの性質（[1] の要約）

$r_{\mathrm{U}}, r_{\mathrm{L}}$ が履歴によらず定数だとの仮定の下では，板の上下変動がトレンドを持ったランダムウォークになる．

上下板の初期の厚さをそれぞれ $r_{\mathrm{s}}, r_{\mathrm{b}}$ とすると，上板での買い注文（成り行き買い注文）と売り注文（指し値売り注文）とを，それぞれ，$b_{\mathrm{m}}, s_{\mathrm{L}}$，下板での売り注文（成り行き売り注文）と買い注文（指し値売り注文）とを，それぞれ，$s_{\mathrm{m}}, b_{\mathrm{L}}$，と記すと，上板，下板について，板の厚さが初めて 0 になる時刻の密度は，待ち行列での標準的結果として次式で与えられる：

$$
\begin{aligned}
f_{\mathrm{U}}(t) &= \sqrt{\left(\frac{b_{\mathrm{m}}}{s_{\mathrm{l}}}\right)^{r_{\mathrm{U}}}}\frac{r_{\mathrm{U}}}{t}e^{-(b_{\mathrm{m}}+s_{\mathrm{l}})t}I_{r_{\mathrm{U}}}(2\sqrt{b_{\mathrm{m}}s_{\mathrm{l}}}t),\\
f_{\mathrm{L}}(t) &= \sqrt{\left(\frac{s_{\mathrm{m}}}{b_{\mathrm{l}}}\right)^{r_{\mathrm{L}}}}\frac{r_{\mathrm{L}}}{t}e^{-(s_{\mathrm{m}}+b_{\mathrm{l}})t}I_{r_{\mathrm{L}}}(2\sqrt{s_{\mathrm{m}}b_{\mathrm{l}}}t).
\end{aligned}
$$

但し，$I(\cdot)$ は変形ベッセル関数である．

このとき，初めていずれかの板が消滅する時間の確率密度は，上板下板について，それぞれ，次のようになる：

$$
g_{\mathrm{U}}(t) = f_{\mathrm{U}}(t)\int_t^\infty f_{\mathrm{L}}(\tau)d\tau,
$$
$$
g_{\mathrm{L}}(t) = f_{\mathrm{L}}(t)\int_t^\infty f_{\mathrm{U}}(\tau)d\tau.
$$

本発表を通じて次の関係を仮定する：

$$
b_{\mathrm{m}} > s_{\mathrm{l}}, s_{\mathrm{m}} > b_{\mathrm{l}}.
$$

この条件のもとでは，有限時間での板の消滅が確率１でおこり，上下への移動確率は積分順序変更すれば次式となる：

$$
p_{\mathrm{U}} = \int_0^\infty f_{\mathrm{L}}(t)dt\int_0^t f_{\mathrm{U}}(\tau)d\tau,
$$
$$
p_{\mathrm{L}} = \int_0^\infty f_{\mathrm{U}}(t)dt\int_0^t f_{\mathrm{L}}(\tau)d\tau.
$$

上板，下板の消滅までの時間を，それぞれ，T_{U}，T_{L} と記すと，次式を得る：

$$\begin{aligned} E[T_{\mathrm{U}}] &= \int_0^{\infty} t f_{\mathrm{U}}(t) dt \int_0^t f_{\mathrm{L}}(\tau) d\tau, \\ E[T_{\mathrm{L}}] &= \int_0^{\infty} t f_{\mathrm{L}}(t) dt \int_0^t f_{\mathrm{U}}(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

4　２重待ち行列モデルの性質へのコメント

本発表での目的の１つは，上方への平均移動速度を明示的に記載することである：

$$v_{\mathrm{U}} = \frac{p_{\mathrm{U}} - p_{\mathrm{L}}}{p_{\mathrm{U}} E[T_{\mathrm{U}}] + p_{\mathrm{L}} E[T_{\mathrm{L}}]}. \tag{1}$$

特に，下板あるいは上板が十分に厚くて，消滅する確率が０と見なせる場合はが次式が成立する（これは [1] にある）：

$$E[T_{\mathrm{U}}] = \int_0^{+\infty} t f_{\mathrm{U}}(t) dt = \frac{r_{\mathrm{U}}}{b_{\mathrm{m}} - s_{\mathrm{l}}}, \tag{2}$$

$$E[T_{\mathrm{L}}] = \int_0^{+\infty} t f_{\mathrm{L}}(t) dt = \frac{r_{\mathrm{L}}}{s_{\mathrm{m}} - b_{\mathrm{l}}}. \tag{3}$$

すなわち，

$$v_{\mathrm{U}} = \frac{r_{\mathrm{U}}}{b_{\mathrm{m}} - s_{\mathrm{l}}}, \quad (p_{\mathrm{L}} < 0) \tag{4}$$

$$v_{\mathrm{L}} = -\frac{r_{\mathrm{L}}}{s_{\mathrm{m}} - b_{\mathrm{l}}}, \quad (p_{\mathrm{U}} < 0). \tag{5}$$

本発表では（[1] でも）初期板の厚みが履歴に依存しないと仮定したので，板の移動は再帰過程である．

まず簡明な式（4），(5）の場合を扱おう．この結果は，新たな買い手が大量の購入をポアソン注文によって行う場合，時間あたり購入量を下げて長く時間をかけて購入するほど，株価の上昇が小さく，有利な購入ができることを示している．特に，大量の購入を行う投資家が１名である場合は，有利な購入が可能である．

購入量売却量をお互いに知っている投資家複数名がどのように振る舞うのが最適であるかは，協力あるいは非協力のゲーム理論の問題となり，同一には扱えない．特に非協力ゲームとして眺めれば，相手よりも先に購入することが有利なので，両者がゆっくり待っているという解は起こりにくい．より現実的には，購入量売却量も不明な状態での「ゲーム」となる．本結果の自由度をどのように制御するかの解は，素直には定まらないことに注意する必要がある．

以上のような留保条件の上で，もし自分の売買行動が他の投資家に影響を与えず，自分が「餌食」にならないように「こっそり」振る舞えるなら，マーケット・インパクトを最小化する解の問題を考えることができる．

より一般的な式（1）の場合には，投資家は，下板での買い注文，上板での売り注文，更には，初期板への注文の３つの変数が許される．すなわち，「買い板（あるいは売り板）が十分厚い」と言えない場合，買い方の投資家の自由度は更に大きくなる．

既存の数値を前提として，それに上乗せして自分の投資活動を行う場合の最適解の問題が定式化される．特に，買い手が１投資家のみの場合，初期買い板の厚みを１にし，下板での買い注文量を０に近い状態で留めておいて，かつ上板での買い注文を控えれば，株価は下落していく．その後に大量の買い注文を始める場合，最初から買い注文を始めるより総額で安い金額で購入することができる．一方で，ライバルの投資家との競合関係から，自分が「餌食」になることを考慮することも必要となる．

5　結論

２重待ち行列モデルでの，自明ではあるが明示的に述べられていない式（1）に言及し，マーケットインパクトを考慮した売買活動の問題が定式化されることを指摘し，一部の場合は簡明な結論となることを指摘した．

参考文献

[1] 遠藤 操, 左 士イ, 岸本 一男，２重待ち行列による日中株価変動のモデル化とその検証，日本応用数理学会論文誌，16 巻 (2006), 305–316.

[2] Li, M., Hui, X., Endo, M., and Kishimoto, K., A Quantitative Model for Intraday Stock Price Changes Based on Order Flows, Journal of Systems Science and Complexity, Vol.27(2014).

[3] Endo, M., Li, M., Zuo, S. and Kishimoto, K., A queuing model for a continuous double-auction trading system, the 22nd Australasian Finance and Banking Conference, Sydney, 2009.

分布型の遅れをもつ微分方程式の解の爆発について

石渡 恵美子 [1], 石渡 哲哉 [2], 中田 行彦 [3]
[1] 東京理科大学，[2] 芝浦工業大学，[3] 島根大学
e-mail : ishiwata@rs.tus.ac.jp, tisiwata@shibaura-it.ac.jp, ynakata@riko.shimane-u.ac.jp

遅延微分方程式 (DDE) は，ある時点での解の変化率等を与えるためにその時点の解の情報だけでなく，過去の解の情報も参照するタイプの微分方程式である．数理モデリングという観点から見れば，瞬時に情報が届かない状況や，生物などであれば何らかの情報のインプットから，それに対する対応までタイムラグが発生することは，比較的自然に起きうるであろうから，過去の情報の取り扱いをどのようにするのか，というのは非常に重要な観点だと考えられる．一方，数学研究という立場に立てば，遅延微分方程式は一見表記の上では常微分方程式と同じように見えるが，本質的に無限次元の問題となっており，取り扱いは難しくなっている．生物現象を由来に持つモデルについては，平衡解の安定性解析などが進んでいるが，その他のケース，例えば解の爆発現象については [1] などの研究はあるものの，系統的な理解はまだ進んでいない．

近年、我々は [2] において 2 次元系の DDE について考察し，タイムラグが有限時間爆発を引き起こすことを示した．(以下,「爆発」はすべて有限時間爆発とする．) この問題の面白いところは，タイムラグをゼロとした場合にはすべての解は有界であり，不安定な不動点である原点以外からスタートした解はすべてある周期解に収束するという非常に安定な系であるにも関わらず，任意の正のタイムラグが入った途端，爆発解が出現するところにある．それでは，この狭間はどこにあるだろうか？ということが自然な興味として出てくる．そこで我々は，より解析しやすそうな 1 次元問題を考察することにした．

まず導入として次の 2 つの問題を考える: (A) $x'(t) = x^2(t) = x(t) \cdot x(t), \quad x(0) = a > 0$, (B) $x'(t) = x(t-1) \cdot x(t), \quad x(t) = \phi(t) > 0 (t \in [-1, 0])$．ここで，初期関数 $\phi(t)$ は連続関数のクラスで考えることとする．(A) は任意の正の初期値に対して解は爆発し，(B) のすべての解は時間大域的に存在する．ただし，非有界となる．ここではタイムラグを 1 としたが，任意の正の定数としても同様である．それではこの両者の間を見るため，次の問題を考える：

$$
\text{(P1)} \begin{cases} \frac{dx}{dt} = x(t) \int_0^1 w(s) x(t-s) ds \quad (t > 0), \\ x(t) = \phi(t) > 0 \quad (t \in [-1, 0]) \end{cases}
$$

以下，初期関数は連続関数のクラスで考えることとする．また，w は履歴に対する重みを表し, δ をディラックのデルタ関数とすると，上の方程式は $w(s) = 2\delta(s)$ とすれば問題 (A) に、$w(s) = 2\delta(s-1)$ とすれば問題 (B) になる，という意味で上の 2 つの問題を繋いだものとなっている．なお，今回扱うタイプとは異なるが分布型の時間遅れをもつ所謂 Volttera 型の遅延微分方程式については，[3] などで解の爆発が議論されている．

ここでは，まず一様分布 $w(s) \equiv 1$ の場合を考える．これに対して以下の結果を得た：

定理 1 $w(s) \equiv 1$ とする．問題 (P1) の全ての解は有限時間で爆発する．

一様分布の場合は，方程式を α, β を正定数として

$$
\text{(P2)} \begin{cases} \frac{dx}{dt} = x(t)^\alpha \int_0^1 x(t-s)^\beta ds \quad (t > 0), \\ x(t) = \phi(t) > 0 \quad (t \in [-1, 0]) \end{cases}
$$

と一般化した問題に対しても同様の結果が得られる．

定理 2 $\alpha + \beta > 1$ とする．このとき問題 (P2) の全ての解は有限時間で爆発する．また，$\alpha + \beta \leq 1$ の場合はすべての解は時間大域的に存在する．

次により一般的な重みとして $w(s)$ を非負値連続関数とする．$w(0) > 0$ であれば上記と同様の考察により問題 () の解は爆発することが示される．よって問題は $w(0) = 0$ の場合である．関数 w が $s = 0$ の近傍を含む区間で 0 であれば解の爆発は起きないことを示すことができるので, $w(0) = 0$ かつ $s > 0$（の $s = 0$ の近

傍) で正である重みで爆発が起きるのかどうかが問題となる．ここでは最も単純な場合として考察の対象を $w(s)=s$ とする:

$$(\mathrm{P3})\begin{cases}\frac{dx}{dt}=x(t)\int_0^1 sx(t-s)ds \quad (t>0),\\ x(t)=\phi(t)>0 \quad (t\in[-1,0]).\end{cases}$$

この問題に対して次の結果を得た：

定理 3 問題 (P3) の全ての解は有限時間で爆発する．

参考文献

[1] K. Ezzinbi and M. Jazar, Blow-up Results for Some Nonlinear Delay Differential Equations, Positivity 10 (2006), 329–341.

[2] E. Ishiwata, T. Ishiwata and Y. Nakata, Delay-induced blow-up in a limit-cycle oscillation model, preprint.

[3] J. A. D. Appleby, D. D. Patterson, Blow-up and superexponential growth in superlinear Volterra equations, Discrete & Continuous Dynamical Systems 38(2018), 3993–4017.

曲線短縮問題に現れる準線形放物型偏微分方程式に対する爆発解の漸近挙動に関する一考察

穴田 浩一[1], 石渡 哲哉[2], 牛島 健夫[3]
[1] 早稲田大学高等学院, [2] 芝浦工業大学, [3] 東京理科大学

1 Introduction

次の準線形放物型偏微分方程式

$$\begin{cases} v_t(\theta,t) = v(\theta,t)^{\delta}\Big(v_{\theta\theta}(\theta,t) + v(\theta,t)\Big) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{for } \theta\in\mathbb{R},\ t>0, \\ v(\theta,0) = v_0(\theta) \end{cases}$$

は, 図 1 のような自己交差する閉曲線に対する曲線短縮問題の短縮速度に関する方程式として知られている ([1, 2]).

ここで, 図 1 の上にある閉曲線について, θ を接線と水平方向との角, 曲率を κ_0, $v_0 := \kappa_0^{\alpha}$, $\delta = 1 + \dfrac{1}{\alpha}$, としたとき, v_0 は次をみたしている smooth な関数となるものを考える.

- $v_0(\theta+4\pi) = v_0(\theta)$ for $\theta\in\mathbb{R}$.
- $v_0(-\theta) = v_0(\theta)$ for $\theta\in\mathbb{R}$,
- $v_0'(\theta) < 0$ if $0<\theta<2\pi$,
- $v_0(\theta)^2 + v_0'(\theta)^2 \le A < \infty$,
- $v_0''(\theta) + v(\theta) \ge 0$ for $\theta\in\mathbb{R}$,
- $v_0(\theta) \ge \varepsilon_0 > 0$ for $\theta\in\mathbb{R}$.

$\delta \ge 2$ のとき, v は

$$\limsup_{t\nearrow T}(T-t)^{\frac{1}{\delta}} \sup_{\theta\in(-2\pi,2\pi)} v(\theta,t) = \infty,$$

をみたす $T>0$ が存在する, すなわち, $t\nearrow T$ のとき Type II 爆発をすることが知られており, 1 次元空間だけでなく, 多次元においてもさまざまな研究がなされている ([3, 4, 5, 6]). さらに, rescaling algorithm を利用した数値計算による, 爆発解の振舞に関する考察も行われている ([7, 8, 9]).

ここでは, 図 1 の曲線短縮問題について,

$$W_{\delta}(t) := (T-t)v\left(\frac{\pi}{2},t\right)v(0,t)^{\delta-1}$$

の $t\nearrow T$ の際の振る舞いについて考える. ここで, このとき $\displaystyle\sup_{\theta\in(-2\pi,2\pi)} v(\theta,t) = v(0,t)$ となることに注意する. この W_{δ} の振る舞いを調べることは非常に重要で, [2] や [3] では, $\delta = 2$ の場合について, W_{δ} の振る舞いから, $v(0,t)$ の $t\nearrow T$ の際の爆発レートを得ている.

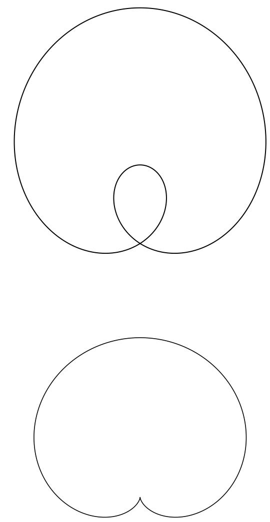


図 1. 自己交差する閉曲線に対する曲線短縮問題: $v = \kappa^{\alpha}$, $\delta = 1 + \dfrac{1}{\alpha}$ (上: $t=0$ のとき, 下: $t=T$ のとき).

この W_{δ} の振る舞いついて, まず $2 \le \delta < 3$ の場合, W_{δ} が有界であることを示す（定理 3）. また, $\delta = 3$ の場合に関する評価を与える（定理 4）. 加えて, rescaling algorithm による数値計算例を示す（図 2）.

2 Some Lemmas

ここでは, 図 1 の曲線短縮問題における v は次をみたす.

補題 1 図 1 の曲線短縮問題について, $\delta \ge 2$, $0 < \theta < \dfrac{\pi}{2}$ のとき, 次が成り立つ.

- $v(\theta,t) > v(0,t)\cos\theta$.
- $v(\theta,t) < v(0,t)\cos\theta + v\left(\dfrac{\pi}{2},t\right)\sin\theta$.

また, v_{θ} は次をみたしていることがわかる.

補題 2 図 1 の曲線短縮問題について, $\delta \ge 2$, $0 < \theta < \dfrac{\pi}{2}$ のとき, 次が成り立つ.

- $v_{\theta}(\theta,t) > -v(0,t)\sin\theta$.
- $v_{\theta}(\theta,t) < -\dfrac{v(\theta,t)\sin\theta}{\cos\theta} + \dfrac{v\left(\dfrac{\pi}{2},t\right)}{\cos\theta}$.

3 Main Results

まず, $2 \leq \delta < 3$ のとき, 図 1 の曲線短縮問題における v について, W_δ は次をみたすことがわかる.

定理 3 図 1 の曲線短縮問題において, $2 \leq \delta < 3$ ならば,

$$W_\delta(t) \leq C_\delta \quad \text{for any } 0 < t < T$$

をみたす, $C_\delta > 0$ が存在する.

注意 この定理は, [3, 2] における $\delta = 2$ の場合の結果を $2 < \delta < 3$ へ拡張したものになっている.

さらに, $\delta = 3$ の場合について, 次の定理を得ることができる.

定理 4 図 1 の曲線短縮問題において, $\delta = 3$ ならば,

$$\limsup_{t \nearrow T} \frac{W_3(t)}{\log(T-t)v(0,t)^3} \leq C_3$$

をみたす, $C_3 > 0$ が存在する.

また, 図 2 に rescaling algorithm による W_δ の数値計算例を示す. 図 2 では, $\delta = 3$ のとき W_3 が発散していることを示唆しているが, 定理 4 の結果は, 図 1 の曲線短縮問題のおいて, W_δ の $t \nearrow T$ の際の発散の上限を与えたことになる.

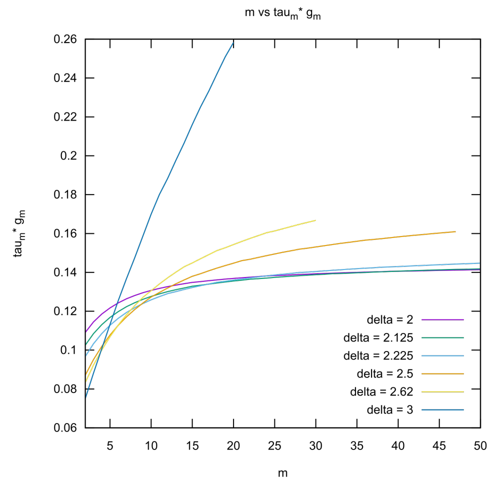


図 2. W_δ の数値計算例 ($\delta = 2, 2.125, 2.25, 2.5, 2.62, 3$)

参考文献

[1] Angenent, A. B.: On the formation of singularities in the curve shortening flow, *J. Diff. Geo.* **33** (1991) 601–633.

[2] Angenent, S. B. and Velázquez, J. J. L.: Asymptotic shape of cusp singularities in curve shortening, *Duke Math. J.* **77** (1995) 71–110.

[3] Anada, K. and Ishiwata, T.: Blow-up Rates of Solutions of Initial-Boundary Value Problems for a Quasi-Linear Parabolic Equations, Journal of Differential Equations **262** (2017), 181–271.

[4] Anada, K. and Ishiwata, T.: Some Features for Blow-up Solutions of a Nonlinear Parabolic Equation, *IAENG Int'l. J. App. Math.* **45** (2015) 175–182.

[5] Anada, K. and Ishiwata, T.: Asymptotic behavior of blow-up solutions to a degenerate parabolic equation, *J. Math-for-Industry* **3** (2011) 1–8.

[6] Anada, K., Fukuda, I. and Tsutsumi, M.: Regional blow-up and decay of solutions to the Initial-Boundary value problem for $u_t = uu_{xx} - \gamma(u_x)^2 + ku^2$, *Funkcialaj Ekvacioj* **39** (1996) 363–387.

[7] Anada, K. Ishiwata, T. and Ushijima, T.: On a numerical method for estimating blow-up rate using scaling invariance, preprint.

[8] Anada, K. Ishiwata, T. and Ushijima, T.: A numerical method of estimating blow-up rates for nonlinear evolution equations by using rescaling algorithm, Japan J. Indust. Appl. Math **35** (2018), 33–47.

[9] Anada, K. Ishiwata, T. and Ushijima, T.: Numerical study on the blow-up rates to a nonlinear evolution equations, Proc. EQUADIFF 2017 (2018), 325–330.

爆発解の漸近オーダーの推定法 — Benford の法則の応用 —

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

本発表では，爆発解を持つ非線型微分方程式の解の漸近的形状を，ある規則のもとにサンプルした数値解より推定する方法を提案する。これは統計学の分野で最近注目されている Benford の法則の一つの応用である。

2 Benford の法則と一様分布列について

Benford の法則とは，広範な分野から数値を集め 10 進浮動小数点表示で表したとき，先頭桁の値が小さい数ほど多く現れるという統計的現象である [1, 2]。この法則を正数列 (x_n) によって厳密に定義すると以下のようになる：

x_n の 10 進浮動小数点表示を

$$x_n = 10^m \times (d_0(x_n) + d_1(x_n)10^{-1} + \cdots),$$
$$m \in \mathbb{Z},\ \ d_0(x_n) \in \{1, \ldots, 9\},$$
$$d_i(x_n) \in \{0, \ldots, 9\}, \quad i \geq 1$$

としたとき，先頭桁 d_0 が d となる割合が

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\#(1 \leq n \leq N;\, d_0(x_n) = d)}{N} = \log_{10}\left((d+1)/d\right),\ \ d \in \{1, 2, \ldots, 9\} \tag{1}$$

となる法則である。よく知られた数列では，2^n，$n!$，fibonacci 数列 F_n などがこの法則を満たす [3, 4]。その他，自然現象，社会現象にも多く現れる [5]。ここでは，性質 (1) を持つ数列を **Benford 数列** と呼ぶことにする。

ある数列が，その (常用) 対数の値が **1 を法とする一様分布列** (以下 u.d. mod 1 列と略す) になるとき，その数列は Benford 数列になる [3, 4]。u.d. mod 1 列とは，その小数部分が区間 [0, 1) で一様に分布している数列を言う。具体的には，数列 (u_n) が任意の実数 a, b $(0 \leq a < b < 1)$ に対して，条件

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\#(1 \leq n \leq N; \{u_n\} \in [a, b])}{N} = b - a \tag{2}$$

を満たすとき u.d. mod 1 列と呼ばれる [6]。これまでに幾つかの u.d. mod 1 列が知られてきた。例えば，定数項以外の少なくとも 1 つの係数が無理数となる n の多項式で表される数列が該当する [6]。

3 爆発問題への応用

ここでは区間 $t \in [t_0, T)$ $(0 < t_0 < T < +\infty)$ で定義された C^1 クラスの関数 $y(t)$ を考える。$y(t)$ は次の条件を満たすものとする：

- $\lim_{t\uparrow T} y(t) = +\infty.$
- $\lim_{s\to+\infty} \varphi(s) = +\infty$ を満たす単調増加関数 $\varphi(s)$ に対して

$$y(t) \sim \varphi(1/(T-t)), \quad t \uparrow T.$$

ここで $\varphi(s)$ として次の 3 つのクラスを考える：

BL0：$\varphi(s) = \exp\left(p(s)\right)$
BL1：$\varphi(s) = p(s)$
BL2：$\varphi(s) = \log\left(p(s)\right)$

ただし $p(s)$ は最高次の係数が正である次数が 1 以上の多項式である。本発表では，爆発時刻 T が既知という条件のもと，Benford の法則を用いて $y(t)$ が上の 3 つのどのクラスに属するかを判定する方法を提案する。

例えば $y(t)$ がクラス BL0 に属する場合，

$$p(s) = a_m s^m + \cdots + a_1 s + a_0,\ \ a_m > 0 \tag{3}$$

と置けば

$$\log y(t) \sim p(s) \sim a_m s^m,\ \ s \to +\infty\ \ (t \to T)$$

となるので，s として

$$s_n = n\,\alpha,\ \ n = 1, 2, \ldots,\ \ \alpha > 0 \tag{4}$$

という数列を選べば，$t_n = T - 1/s_n$ に対して

$$\log y(t_n) \sim a_m\, \alpha^m n^m,\ \ n \to \infty \tag{5}$$

となる。ここで α^m が無理数であれば，上で述べたことよりこの数列は u.d. mod 1 列になり，その結果 $y_n = y(t_n)$ は Benford 数列になる。そのためには α として $0 < t_1 = T - 1/\alpha < T$ を満たす超越的な無理数を選べばよい。クラ

ス BL1, BL2 の場合は，それぞれ $\exp(y(t))$ と $\exp(\exp(y(t)))$ が BL0 と同じ漸近的形状になるので，これらの値を同じ $t = t_n$ でサンプルすれば Benford 数列になる。

そこで以下に示す判定法を提案する：

1) $t_0 < t_1 = 1 - 1/\alpha < T$ となる超越的無理数 α を選ぶ。
2) 微分方程式 $y'(t) = f(y)$, $y(t_0) = y_0$ の解を $t_n = T - 1/(n\alpha)$, $n = 1, 2, \dots, N$ においてサンプルする。
3) y_n より $E^{[j]}[y_n]$ $(j = 0, 1, 2)$ を

$$E^{[0]}[y_n] = y_n, \quad E^{[1]}[y_n] = \exp(y_n),$$
$$E^{[2]}[y_n] = \exp(\exp(y_n))$$

によって求める。
4) 各 $E^{[j]}[y_n]$ $(j = 0, 1, 2)$ について先頭桁の値 d_0 を求め，$d_0 = d$ となる度数

$$F_d^{[j]} := \#(1 \le n \le N; d_0 = d), \quad d = 1, \dots, 9$$

を求める。
5) これと Benford の法則が成り立っているときの期待度数 $B_d := N \log_{10}((d+1)/d)$ との偏差

$$\Delta^{[j]} := \max_{1 \le d \le 9} \left| (F_d^{[j]} - B_d)/B_d \right| \qquad (6)$$

を計算し，$\min_j \Delta^{[j]}$ を与える $j = k$ によって解はクラス BLk であると判定する。

4　数値例

以下の常微分方程式の初期値問題を考える:

$$y'(t) = \pi \cosh(y(t)), \quad t \in (0.5, 1), \quad y(0.5) = 0. \qquad (7)$$

この方程式の解は

$$y(t) = \log\left(\tan(\pi t/2)\right) \qquad (8)$$

で与えられ，爆発時刻 T は 1 となる。ここでは $\alpha = \pi/(\pi - 3)$ とし $t_1 = 1 - 1/\alpha$ ($\fallingdotseq 0.95492965$) から次式で与えられる点 t_n $(n = 2, 3, \dots)$

$$t_n = t_{n-1} + \delta t_n, \quad \delta t_n = \frac{1}{n(n-1)\alpha} \qquad (9)$$

において数値解 y_n をサンプルし，$E^{[1]}[y_n]$, $E^{[2]}[y_n]$ を求め，それぞれについて先頭桁の頻度を調べ，Benford の法則からの偏差 (6) を計算する。なお，数値解法は 4 次の陽的ルンゲ・クッタ法で多倍長演算で計算する。

Table 1. 先頭桁の頻度 ($N = 2000$ の結果)

d	$F_d^{[0]}$	$F_d^{[1]}$	$F_d^{[2]}$	B_d
1	413	804	584	602
2	1	641	344	352
3	2	79	255	250
4	7	79	209	194
5	18	79	201	158
6	49	79	128	134
7	134	80	102	116
8	366	79	104	102
9	1010	80	73	92

サンプル数 $N = 2000$ での結果は，Table 1 および以下の通りである。

$$\Delta^{[0]} = 1.01 \times 10, \ \Delta^{[1]} = 8.20 \times 10^{-1},$$
$$\Delta^{[2]} = 2.69 \times 10^{-1}$$

この結果より，数列 $(E^{[2]}[y_n])$ が Benford 数列に最も近いので，クラス BL2 と判定できる。

5　おわりに

他の数値例および考察は当日発表する。

参考文献

[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. Berger, T.P. Hill, An Introduction to Benford's Law, Princeton Univ. Press, 2015.

[4] S.J. Miller ed., Benford's Law: Theory and applications, Princeton Univ. Press, 2015.

[5] A.E. Kossovsky, Benford's Law, Theory, the General Law of Relative Quantities, and Forensic Fraud Detection Applications, World Scientific, 2014.

[6] L. Kuipers, H. Niederreiter, Uniform Distribution of Sequences, John Wiley & Sons, 1974.

ドラッグ・デリバリー・システムを表現するモデル方程式の時間大域解の漸近的挙動

岩崎 悟 [1]
[1] 大阪大学大学院　情報科学研究科
e-mail : satoru.iwasaki@ist.osaka-u.ac.jp

1　はじめに

近年注目を集めるナノ医療の一つにドラッグ・デリバリー・システム（以下，DDS と表記する）がある．DDS とは，人体に投与した微小なデバイス（以下，ナノマシンと表記する）が，自己創発的に悪性腫瘍などのターゲットとなる領域に集まり，薬剤を投与するシステムである．DDS などのナノ医療システムの開発実験は，環境整備などにコストや時間が必要で，簡単には試行できない．そこで，システムの本質的な挙動を定性的・定量的に調べ，開発実験に有意義なフィードバックを行うために数理モデルを用いたシミュレーションが重要となる．

Okaie らは 2014 年に，DDS のメカニズムを，システムを構成する物質の濃度の時間発展に関する反応拡散方程式の形の数理モデル (以下，ターゲット検出モデルと表記する) で定式化して，ナノマシンが一つのターゲットを検出する能力があることを数値的に検証した [1]．Okaie らの提案した DDS のシナリオを図 1 に示す．モデル方程式の導出はバクテリアの走化現象に基づいており，以下の形で与えられる：

$$\begin{cases} u_t = a_1 u_{xx} - [u[V_1 v - V_2 w]_x]_x & \text{in } I \times T, \\ v_t = a_2 v_{xx} + g_1 \tau(x,t) u - h_1 v & \text{in } I \times T, \\ w_t = a_3 w_{xx} + g_2 u - h_2 w & \text{in } I \times T. \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$u = u(x,t)$, $v = v(x,t)$, $w = w(x,t)$ は未知関数であり，それぞれ位置 $x \in I = (0,1)$ と時刻 $t \in T = (0,\infty)$ でのナノマシン，アトラクタント，リペレントの濃度である．各未知関数の境界条件はノイマン条件とする．$\tau(x,t)$ は既知関数で位置 $x \in I$ と時刻 $t \in T$ でのターゲットの濃度である．各係数 $a_1, a_2, a_3, g_1, g_2, V_1, V_2, h_1, h_2 > 0$ は正の値とする．

医療の観点からすると，ナノマシンは悪性腫瘍などに対応するターゲット領域 $\tau(x,t)$ をすべて検出できなくてはならない．つまり十分に時間が経過した後，$\tau(x,t)$ の濃度が高い場所と，$u(x,t)$ の濃度が高い場所が一致することが望ましい．ところで，ナノマシンをターゲットに集めたいだけならば，ナノマシンの集中を妨げるリペレントの存在は必要ないように思われる．リペレントが導入された動機は，一つのターゲットに集まりすぎることを防ぐことにより，複数のターゲットにナノマシンが分配されることを狙ったものである．

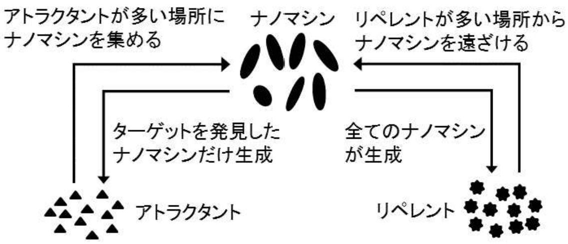


図 1. Okaie らの DDS のシナリオ [1]

そこで本研究は，ターゲット検出モデルの解の時間大域的挙動に焦点を絞り，数学解析の立場から「ナノマシンが複数のターゲットをすべて検出するための条件」を求めることを目的としている．本講演では [2] で得られた，方程式 (1) を簡略化したモデル方程式 (2) の解析結果を紹介する．

2　簡略化ターゲット検出モデルの解析

適当な仮定のもと，ターゲット検出モデル (1) は，未知関数がナノマシンの濃度 $u(x,t)$ だけの以下の準線形反応拡散方程式に帰着される：

$$u_t = [au + \alpha u^2]_{xx} - \mu[u[\tau(x)u]_x]_x \text{ in } I \times T. \tag{2}$$

ただし，$a = a_1 > 0$, $\mu = g_1 V_1/h_1 > 0$, $\alpha = g_2 V_2/2h_2 > 0$ であり，特に μ と α はそれぞれアトラクタントとリペレントの効果の強さを表している．また，ターゲットの濃度 $\tau(x)$ は時間に依存しないと仮定し，時間変数はなくなっている．以下においてパラメータは

$$2\alpha > \mu \cdot \max_{x \in \bar{I}} \tau(x) \tag{3}$$

という条件を満たしていると仮定する．この条件はリペレントの効果 $\alpha > 0$ が十分に大きいことを意味している．

ナノマシン $u(x,t)$ はノイマン条件を満たすので，方程式 (2) を空間 I で積分すればわかるようにナノマシンの総量は任意の時刻で保存される．つまり，ナノマシンの初期総量 $\int_I u_0(x)dx = l > 0$ も一つのパラメータとなる．よって，各 $l > 0$ に対して初期値空間 $\mathcal{K}_l$ を $\mathcal{K}_l = \{u_0 \in H^1(I);\ u_0 > 0 \text{ and } \int_I u_0 dx = l\}$ と定める．

まず，局所解を構成するために方程式 (2) を，空間の三つ組 $H^1(I) \subset L_2(I) \subset H^1(I)'$ における $H^1(I)'$ を基礎空間とした発展方程式として定式化する．非線形項の適当な意味でのリプシッツ条件が確認できるので，方程式 (2) の局所解を構成することができる．続いて，局所解のア・プリオリ評価も確かめられ，この局所解は大域解まで延長することができる．さらに，初期値が正値であることから，時間大域解も正値となることが確かめられる．結論として，以下の大域解の存在に関する定理が得られる．

定理 1 条件 (3) が成り立つとする．このとき，任意の初期値 $u_0 \in \mathcal{K}_l$ に対して，方程式 (2) は以下の関数空間に正値の大域解 u を持つ．

$$\begin{cases} u \in \mathcal{C}((0,\infty); H^2_N(I)) \cap \mathcal{C}^1((0,\infty); L_2(I)), \\ \int_I u(x,t)dx \equiv l \quad \textit{for all} \quad t \in [0,\infty). \end{cases}$$

続いて方程式 (2) の定常問題を考える．つまり以下を満たす正値関数 $\overline{u}$ を探す問題を考える．

$$\begin{cases} [a\overline{u} + \alpha\overline{u}^2]'' - \mu[\overline{u}[\tau(x)\overline{u}]']' = 0 \text{ in } I, \\ \overline{u}'(0) = \overline{u}'(1) = 0, \\ \int_I \overline{u}dx = l. \end{cases} \tag{4}$$

定常問題 (4) に対して，以下の定理が成り立つ．

定理 2 条件 (3) が成り立つとする．各 $l > 0$ に対して，定常問題 (4) は唯一の正値解 $\overline{u}_l$ を持つ．さらに，$\overline{u}_l$ は以下の非線形関数方程式を満たす解として特徴づけられる：

$$\overline{u}_l(x) = \exp((C_l - G(x)\overline{u}_l(x))/a).$$

ただし，$G(x) = 2\alpha - \mu\tau(x)$ であり，$C_l \in \mathbf{R}$ は l から一意に定まる定数である．

ここで，定常解 $\overline{u}_l(x)$ を微分することにより，ターゲットの分布 $\tau(x)$ の極大値（極小値）の座標と，定常解 $\overline{u}_l(x)$ の極大値（極小値）の座標が一致することが確かめられる．これは現象と対応させると，ナノマシンが定常解 $\overline{u}_l(x)$ になっている場合，ターゲットが濃い場所に，ナノマシンも濃く分布していることを意味しており，ナノマシンがすべてのターゲットを検出できている状況に対応している（図 2 参照）．

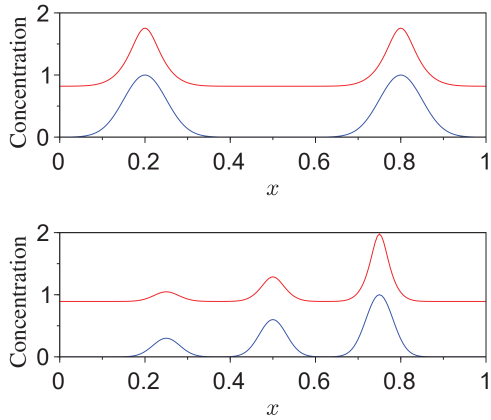


図 2. ターゲットの分布 (青線) と定常解 (赤線) の例

最後に，大域解の収束に関する以下の定理を紹介する．

定理 3 条件 (3) が成り立つとし，$l > 0$ とする．初期値 $u_0 \in \mathcal{K}_l$ から出発する大域解を $u(t)$ とし，$\overline{u}_l$ を定常問題 (4) の解とする．このとき，$t \to \infty$ で $\|u(t) - \overline{u}_l\|_{H^1(I)} \to 0$ が成り立つ．

3 おわりに

定理 3 から，パラメータ条件 (3) が成り立つ（リペレントの効果が強い）場合は，ナノマシンの分布 $u(x,t)$ はターゲットをすべて検出するような定常解 $\overline{u}_l(x)$ に収束することが分かる．一方で，パラメータ条件 (3) が成り立たない（リペレントの効果が弱い）場合は，ターゲットが複数のピークを持つ場合に，一つのピークにナノマシンが集中する状況が発生することが数値的に確かめられる．以上のことから，リペレントを導入することが複数のターゲットをすべて検出するために必要であることを数学的な立場から示唆することができた．

参考文献

[1] Y. Okaie, et al., Modeling and Performance Evaluation of Mobile Bionanosensor Networks for Target Tracking, in: Proc. of 2014 IEEE ICC, pp.3969–3974, 2014.

[2] S. Iwasaki, Convergence of Solutions to Simplified Self-Organizing Target-Detection Model, Sci. Math. Jpn., Vol.81 (2018), pp.115-129.

枢軸選択付き QR 分解を用いた行列の低ランク近似アルゴリズムの打ち切り誤差の解析

河村 遼
東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
e-mail : itleigns@is.s.u-tokyo.ac.jp

1 概要

枢軸選択付き QR 分解を用いて $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ を $\mathbb{R}^{m\times r}$ の行列と $\mathbb{R}^{r\times n}$ の行列の積で近似することを考える $(m \geq n > r)$. 枢軸選択付き QR 分解は特異値分解に比べ低ランク近似としての精度が悪いことが知られているが, 計算量が少ないので使われることも多い. 本稿では行列のノルムにフロベニウスノルムをベクトルのノルムに 2-ノルムを使う. 今回考察するアルゴリズムの疑似コードは以下のようになる [1].

1) $Q \in \mathbb{R}^{m\times n}, R \in \mathbb{R}^{r\times n}, \Pi \in \mathbb{N}^n$ の領域を確保
2) $Q = A$
3) $\Pi_i = i\ (i = 1, \cdots, n)$
4) For $i = 1$ to r do
    (a) $l = \arg\max_j \{\|Q_j\| \mid j = i, \cdots, n\}$
    (b) Q_i と Q_l, Π_i と Π_l をそれぞれ交換
    (c) $R_{i,\Pi_i} = \|Q_i\|$
    (d) $Q_i = \frac{Q_i}{\|Q_i\|}$
    (e) $R_{i,\Pi_j} = 0\ (j = 1, \cdots, i-1)$
    (f) $R_{i,\Pi_j} = Q_i \cdot Q_j\ (j = i+1, \cdots, n)$
    (g) $Q_j = Q_j - (Q_i \cdot Q_j)Q_i\ (j = i+1, \cdots, n)$

このアルゴリズムでは A を $Q[1 :: r]R$ と近似している. また計算量は $O(nmr)$ で理論上も高速である. 以下で定義する打ち切り誤差

$$D_r(A) = \|A - Q[1 :: r]R\|$$

を $r = n-1$ の時について解析できたので本講演ではそれを発表する.

2 誤差の解析

$m \geq n > 1, rank(A) = n$ とする.

定理 1. 任意の A に対し

$$D_{n-1}(A) \leq \sqrt{\frac{4^{n-1}+2}{3}}\sigma_n(A)$$

が成り立つ. また $s \in \mathbb{R}$ が $s < \sqrt{\frac{4^{n-1}+2}{3}}$ を満たすとする. 以下の不等式を満たす A が存在する.

$$D_{n-1}(A) \geq s\sigma_n(A) \qquad \square$$

定理の証明のために準備をする.

$$A = (\boldsymbol{a}_1, \cdots, \boldsymbol{a}_n)$$

と書く.

$$\boldsymbol{d}_i = \boldsymbol{a}_i - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} c_{ij}\boldsymbol{a}_j \quad (i = 1, \cdots, n)$$

として $\|\boldsymbol{d}_i\|$ が最小になるよう $c_{ij} \in \mathbb{R}\quad (i = 1, \cdots, n, j = 1, \cdots, n, i \neq j)$ を定義する. 定理 1 を示すのに以下の補題が重要になる.

補題 2. $\|\boldsymbol{a}_1\| \geq \|\boldsymbol{a}_i\| \quad (i = 2, \cdots, n)$ と仮定する. このとき以下が成り立つ.

$$\frac{1}{\|\boldsymbol{d}_1\|} \leq \sum_{i=2}^{n} \frac{1}{\|\boldsymbol{d}_i\|} \qquad \square$$

証明 j を $2, \cdots, n$ の中の 1 つとする. $|c_{1j}| > \frac{\|\boldsymbol{d}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_j\|}$ と仮定して矛盾を導く. $\|\boldsymbol{d}_j\|$ の最小性から

$$\|\boldsymbol{d}_j\| \leq \left\| \boldsymbol{a}_j - \frac{1}{c_{1j}}\boldsymbol{a}_1 - \sum_{k=2, k\neq j}^{n} \frac{-c_{1k}}{c_{1j}}\boldsymbol{a}_k \right\| = \frac{\|\boldsymbol{d}_1\|}{|c_{1j}|} < \|\boldsymbol{d}_j\|$$

で矛盾する. よって $|c_{1j}| \leq \frac{\|\boldsymbol{d}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_j\|}\ (j = 2, \cdots, n)$. ここで

$$\frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_1\|} > \sum_{i=2}^{n} \frac{\|\boldsymbol{a}_i\|}{\|\boldsymbol{d}_i\|}$$

と仮定して矛盾を導く.

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{a}_1 - \sum_{j=2}^{n-1} c_{1j}\boldsymbol{a}_j$$

と定義する (つまり $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{d}_1 + c_{1n}\boldsymbol{a}_n$). すると

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}\| &\geq \|\boldsymbol{a}_1\| - \sum_{i=2}^{n-1} c_{1j}\|\boldsymbol{a}_j\| \\ &\geq \|\boldsymbol{a}_1\| - \sum_{i=2}^{n-1} \frac{\|\boldsymbol{d}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_j\|}\|\boldsymbol{a}_j\| > \frac{\|\boldsymbol{d}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_n\|}\|\boldsymbol{a}_n\|\end{aligned}$$

が成り立つ. また $\boldsymbol{d}_1 = \boldsymbol{x} - c_{1n}\boldsymbol{a}_n$ で $\|\boldsymbol{d}_1\|$ が最小なので

$$c_{1n} = \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{a}_n\|^2}$$

でなければならない. さらに

$$\begin{aligned}&\left\|\boldsymbol{a}_n - \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{x}\|^2}\boldsymbol{x}\right\|^2 \\ &= \|\boldsymbol{a}_n\|^2 \left(1 - \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2\|\boldsymbol{a}_n\|^2}\right) \\ &< \frac{\|\boldsymbol{d}_n\|^2}{\|\boldsymbol{d}_1\|^2}\|\boldsymbol{x}\|^2 \left(1 - \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2\|\boldsymbol{a}_n\|^2}\right) \\ &= \frac{\|\boldsymbol{d}_n\|^2}{\|\boldsymbol{d}_1\|^2}\left\|\boldsymbol{x} - \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{a}_n\|^2}\boldsymbol{a}_n\right\|^2 = \|\boldsymbol{d}_n\|^2\end{aligned}$$

が成り立つ. つまり以下が成り立つ.

$$\|\boldsymbol{d}_n\| > \left\|\boldsymbol{a}_n - \frac{(\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{x}\|^2}\boldsymbol{x}\right\|$$

$\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{a}_i$ $(i = 1, \cdots, n-1)$ の線形和なので $\|\boldsymbol{d}_n\|$ の最小性に矛盾する. よって

$$\frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_1\|} \leq \sum_{i=2}^{n} \frac{\|\boldsymbol{a}_i\|}{\|\boldsymbol{d}_i\|} \leq \sum_{i=2}^{n} \frac{\|\boldsymbol{a}_1\|}{\|\boldsymbol{d}_i\|}$$

が成り立つ. 両辺を $\|\boldsymbol{a}_1\|$ で割り与式が示された. □

定理 3 ([2, Theorem 1.5])**.** A の QR 分解を Q, R 特異値分解を $U\Sigma V^T$ とする. また R, V の右下 $(n-r) \times (n-r)$ 部分行列をそれぞれ R', V' と書く. このとき

$$\|R'\|_2 \; \sigma_{min}(V') \leq \sigma_{r+1}(A)$$

が成り立つ. □

まず定理 1 の前半を示す.$D_{n-1}(A) = \|\boldsymbol{d}_{\Pi_n}\|$ である. またアルゴリズムの (a) ではノルムが最大の列が選ばれていることに注目し定理 2 を使うと

$$\frac{1}{\|\boldsymbol{d}_{\Pi_i}\|} \leq \sum_{j=i+1}^{n} \frac{1}{\|\boldsymbol{d}_{\Pi_j}\|} \quad (i = 1, \cdots, n-1)$$

が言える. これから以下が言える.

$$D_{n-1}(A) \leq 2^{n-1-i}\|\boldsymbol{d}_{\Pi_i}\| \; (i = 1, \cdots, n-1)$$

また定理 3 より以下の不等式が成り立つ.

$$\|\boldsymbol{d}_{\Pi_i}\| \; |V_{n\Pi_i}| \leq \sigma_n(A)$$

よって

$$\begin{aligned}1 = \sum_{i=1}^{n} V_{n\Pi_i}^2 &\leq (\sigma_n(A))^2 \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\|\boldsymbol{d}_{\Pi_i}\|^2} \\ &\leq \frac{4^{n-1}+2}{3}\frac{(\sigma_n(A))^2}{(D_{n-1}(A))^2}\end{aligned}$$

よって定理 1 の前半が示された. 次に $\frac{D_{n-1}(A)}{\sigma_n(A)}$ が $\sqrt{\frac{4^{n-1}+2}{3}}$ に収束する A を構築する. $\epsilon_i \in \mathbb{R}$ が $i = 1, \cdots, n$ で $0 < \epsilon_i < 1$ を満たすとする. $\mathbb{R}^n$ の基底 $(\boldsymbol{v}_i)$ を以下のように定義する.

$$v_{ij} = \begin{cases} 0 & (j < i) \\ -1 - \epsilon_i & (j = i) \\ 1 - \epsilon_i & (j > i) \end{cases}$$

これにグラムシュミットの正規直交化を施したものを $(\boldsymbol{w}_i)$ とする.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} diag(\sigma_1, \cdots, \sigma_n) \\ O \end{pmatrix}, W = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}_1 & \cdots & \boldsymbol{w}_n \end{pmatrix}$$

としたとき $A = \Sigma W^T$ とすると $\sigma_1 \gg \sigma_2 \gg \cdots \gg \sigma_{n-1} \gg \sigma_n$ を維持したまま $\sigma_i \to \infty$ $(i = 1, \cdots, n-1)$ とすると $\Pi_i = i$ $(i = 1, \cdots, n)$ になる. さらに $\epsilon_i \to 0$ $(i = 1, \cdots, n)$ とすると $\frac{D_{n-1}(A)}{\sigma_n(A)}$ は $\sqrt{\frac{4^{n-1}+2}{3}}$ に収束する. この計算は省略する.

謝辞　指導教員の須田先生に感謝する.

参考文献

[1] P. Businger, G. Golub, Linear Least Squares Solutions by Householder Transformations, Numer. Math.,Vol.7 (1965), 535–547.

[2] Y. P. Hong, C.-T. Pan, Rank-Revealing QR Factorizations and the Singular Value Decomposition, Math. Comp.,Vol.58 (1992), 213–232.

On the Limit cycle behavior in Homothermal Maintenance of Skunk cabbage

エルデネバートル
トゥルトグトフ
Turtogtokh Erdenebaatar
Graduate School of
Science and Engineering
Iwate University
g0318026@iwate-u.ac.jp

川崎 秀二
Shuji Kawasaki
Graduate School of
Science and Engineering
Iwate University
shuji@iwate-u.ac.jp

伊藤 菊一
Kikukatsu Ito
Graduate School of
Agriculture
Iwate University
kikuito@iwate-u.ac.jp

Abstract

The plant called Skunk Cabbage is known to have a remarkable feature that it has a heating organ and retains its body temperature almost constant around 22~24 [°C] in the end of winter. As the mechanism of the homothermal maintenance, we have found that the control has a linear equilibrium phase and nonlinear nonequilibrium phase and the former is well elucidated so far. In this study, we consider the latter mechanism. Several circumstances might indicate that a limit cycle oscillation called Van der Pol /VdP/ system is the candidate of the model. We discuss the validity of the VdP model for our temperature time series data.

Keywords. nonlinear nonequilibrium state, limit cycle phenomena, Van der Pol equation, least-squares fitting.

Introduction

Some unusual plant has a unique process of heat production. That occurs in only a few families of angiosperms but has been well-studied in the Araceae family. Skunk cabbage of the Araceae family is a perennial wildflower that sprouts in marshy, wet areas of forest lands and has a heating organ called a *spadix*. The organ generates heats continuously for several days early in the spring and retains its temperature at about 22~24 [°C], in order to raise its seeds effectively.

According to this research is aimed at expanding the previous paper [5]. In the paper, as a partial study to elucidate the temperature control mechanism of Skunk cabbage, they had considered the phase transition model with a linear system of modeling of the homothermal maintenance, through a data analytic study. Therefore, the main objective of this paper is to investigate the standard in-sample model selection criteria for selecting the applicable mathematical model on the Chaotic Dynamics in Homothermal Maintenance of Skunk cabbage.

For studying and analyzing these, have insights into the data, it is basic to transform the original univariate time-series data to the one that is embedded into a higher dimension. According to the Takens theorem [1-4], univariate time series could get better phase space reconstruction and prediction, if the embedding dimension is selected respectable. The phase space reconstruction for our data yields the embedding dimension m=2 and delay time τ=10.

Then, a complicated set of contains the nonlinear nonequilibrium phase which fitting a time series model to the data of Skunk cabbage is compared with respect to VdP equation performance. For the models with the preferred forecast ability both the in-sample is specification test, as well as the ability to deliver the optimal forecasts, are examined.

Limit cycle

Limit cycle is an isolated closed trajectory in phase space having the property that can occur in nonlinear systems in the dynamical systems with two-dimensional phase space. The oscillatory behavior, unexplainable in terms of linear theory, is characterized by a constant amplitude and frequency determined by the nonlinear properties of the system.

As for the nonlinear model, we put the following premise:

- It should be close to linear in the neighborhood of CT;

- also, it should add an odd function with a higher order than linear.

Because of the equation, we thought of fitting the data to the equation

$$y = -a * (x - x_0) - b * (x - x_0)^p,$$

where a, b>0, p>1

and fitted our data $\varphi(x) = \mathrm{E}[\, y(t)|X(t) = x]$ to this model for parameters a, b, x_0 and p.

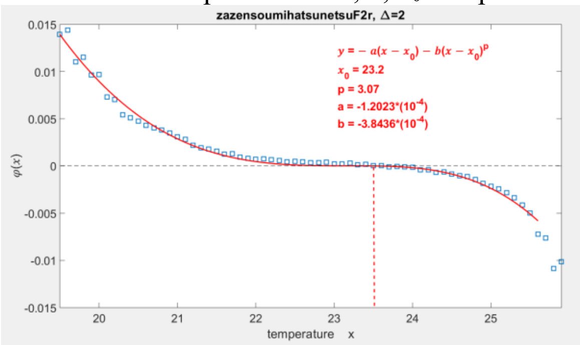


figure 1. The curve fitting for 1st order difference

Since the jump process $y(t) = X(t+1) - X(t)$ might correspond to derivative so that we may consider the continuous-time model. But here in this time, we consider only the discrete-time model for the sake of simplicity. Then, from the curve fitting result, this equation may follow. Finally, we have only fixed point u=0 and it turns out to be the only attractor.

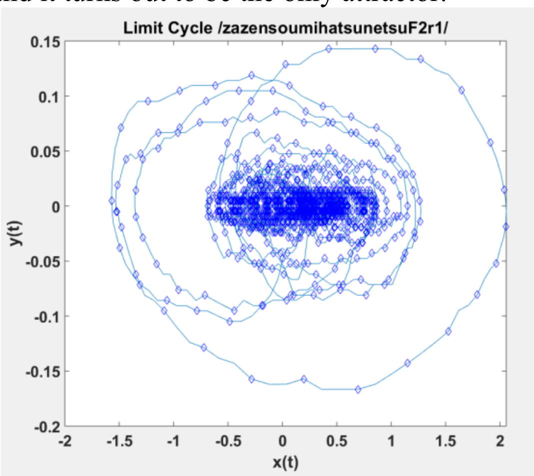


figure 2. Limit cycle

Van der Pol oscillator

The Van der Pol oscillator is described by the equation,

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \mu(x^2 - 1)\frac{dx}{dt} + x = 0,$$

x is the "position" coordinate, x=x(t) and μ is a scalar parameter indicating the strength of dumping for the oscillator. The VdP oscillator can be written in its two dimensional form:

Based on the transformation $z = \frac{dx}{dt}$ leads to:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = z \\ \dfrac{d^2z}{dt^2} = \mu(1 - x^2)z - x \end{cases}$$

As a result of the study to data of Skunk cabbage temperature, we obtained the following equation for the second-order term.

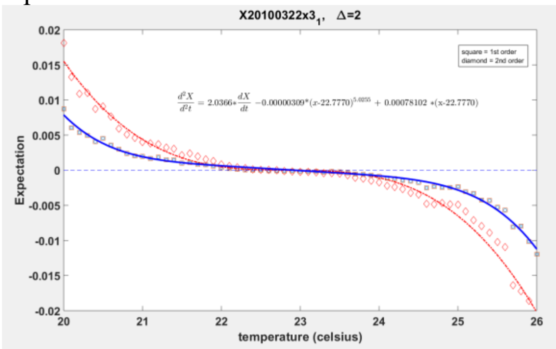


figure 3. The curve fitting for 2nd order difference

In view of these, we set our model equation to be like this:

$$\frac{d^2X}{dt^2} = r * \frac{dX}{dt} - b * (X - x_0)^p + a * (X - x_0)$$

where a, b>0, p>1

It seems to be Van der pol equation, but we have not prove it not yet.

Conclusion and Future work

In this paper, we propose a method of showing the VdP equation where an occurs limit cycle phenomenon in the nonlinear equation based on first-order and second-order derivatives, using curve fitting. In the near future, we plan to accurate our second order nonlinear differential equation is the VdP equation.

References

[1] P. Grassberger and I. Procaccia, Physica D 35, 189 (1983).

[2] P. Grassberger and I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. 50, 346 (1983).

[3] C. Diks, Nonlinear Time Series Analysis: Methods and Applications (World Scientific, Singapore, 1999).

[4] J. P. Eckmann and D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. 57, 617 (1985).

[5] S.Kawasaki and K.Ito, Data Analytic Study of the Homothermal Maintenance Mechanism of Skunk Cabbage: Capturing Pre-equilibrium Characteristics Using Mixed Poisson Model (Biophys and Physicobiol, 2018 Volume).

局所Lyapunov関数を用いたホモクリニック軌道の精度保証法

新田 光輝 [1], 山本 野人 [1], 松江 要 [2]
[1] 電気通信大学，[2] 九州大学
e-mail : knitta@uec.ac.jp

1 はじめに

近年、力学系と精度保証を組み合わせた研究が盛んに行われており、様々な結果が得られている。特にホモクリニック軌道の精度保証としては、

1) covering relation と呼ばれる位相的な手法 [1]
2) parameterization と radii polynomials を利用した解析的な手法 [2]

の二種類が良く知られている。

本研究では、これらの既存手法とは異なる手法として、精度保証により構成したLyapunov関数 [3] と Brouwer の一致点定理を応用したホモクリニック軌道の存在検証のための精度保証法を導出する。本手法は既存手法と比較すると、2) の解析的な手法と似ている部分もあるが、安定多様体、不安定多様体そのものの精度保証が必要な既存手法に対し、提案手法では不安定多様体の通過範囲の一部の精度保証を行えば十分である点が特に異なっている。また、高次元の系に対しても適用できるという特徴を持っている。

2 問題設定

次の自励系常微分方程式により記述される連続力学系を考える：

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{p}),\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,\ \boldsymbol{p} \in D_p \subset \mathbb{R}^{n-\nu},$$
$$t \in \mathbb{R},\ \boldsymbol{f} \in C^r(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n),\ r > 1. \quad (1)$$

ここで、$\boldsymbol{p}$ はパラメータであり、パラメータ領域を $D_p \subset \mathbb{R}^{n-\nu}$ とする。この際、パラメータ領域 D_p は $n-\nu$ 次元球と同相になるようにとる。また、式 (1) に対して、以下の仮定をおく。

- 双曲型平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ を持ち、平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ がサドルであること
- 平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ における不安定多様体の次元が $n-\nu$、安定多様体の次元が ν であること

本研究では以上の問題設定の下、パラメータ領域 D_p から相空間上のある $n-\nu$ 次元超平面 Γ までの連続写像 $F : D_p \to \Gamma$ を構成し、F に対し Brouwer の一致点定理を適用することでホモクリニック軌道が存在するパラメータの存在範囲および相空間上のホモクリニック軌道の存在範囲を特定する精度保証法を提案する。

以下では検証において必要になるいくつかの定義や定理を述べたのち、連続写像 F の構成法の概略や、Brouwer の一致点定理の適用法などを説明する。

3 検証に利用する定理など

3.1 Lyapunov 関数

以下では本手法において重要な役割を果たす数学的道具であるLyapunov関数とBrouwerの一致点定理について説明する。

定義 1. Lyapunov 関数 [3]

領域 $D_L \subset \mathbb{R}^n$ を定義域とする連続微分可能な関数 $L : D_L \to \mathbb{R}$ が次の条件

$$L(\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})) = 0,$$
$$\frac{dL(\boldsymbol{x})}{dt} < 0,\ \forall \boldsymbol{x} \in D_L \backslash \{\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})\}$$

を満たすとき、関数 L を Lyapunov 関数と呼ぶ。ただし、任意のパラメータ $\boldsymbol{p}$ に対して、平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ は $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p}) \in D_L$ であるとする。

本研究では次の二次形式を考え、これがLyapunov 関数となることを精度保証により確認する。

$$L(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p}))^T Y (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p}))$$

ここで、行列 $Y \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は実対称行列である。

3.2 Brouwer の一致点定理

定理 1. Brouwer の一致点定理 [4]

B^n を n 次元球、その境界を S^{n-1} とする。連続写像 $F : B^n \to B^n$ に対し、

- $F(S^{n-1}) \subset S^{n-1}$
- $\deg F|_{S^{n-1}} \neq 0$

が満たされるならば、F と任意の連続写像 $G: B^n \to B^n$ は一致点を持つ。すなわち、ある $\boldsymbol{x} \in B^n$ が存在し、$F(\boldsymbol{x}) = G(\boldsymbol{x})$ が成立する。ここで、$\mathrm{deg}F|_{S^{n-1}}$ は F を境界へ制限した写像の写像度 [4] を表す。

本研究では、Brouwer の一致点定理を用いることで、ホモクリニック軌道を与えるパラメータの存在検証を行う。

4 検証手順

以下の手順により連続写像を構成し、Brouwer の一致点定理を適用することにより、ホモクリニック軌道の存在検証を行う。

1) 近似的なホモクリニック軌道 $\tilde{\varphi}(t)$ およびそれを与えるパラメータ $\tilde{\boldsymbol{p}} \in D_p$ を算定する。
2) 平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ の近傍で二次形式により記述される Lyapunov 関数 $L(\boldsymbol{x})$ を構成し、定義域 D_L の検証を行う。Lyapunov 関数は一意性のあるものではないため、パラメータ領域 D_p が小さければ、D_p 全体に対して同一の実対称行列 Y による Lyapunov 関数と定義域を設定できることが期待される。$L^+ = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n | L(\boldsymbol{x}) > 0\}$, $L^- = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n | L(\boldsymbol{x}) < 0\}$ とおくと、安定多様体は L^+ 上に、不安定多様体は L^- 上に存在することになる。
3) 近似ホモクリニック軌道 $\tilde{\varphi}(t)$ との交点を持つように $L^- \cap D_{L1}$ 上に ν 次元の閉領域 γ を設定する。γ と $\tilde{\varphi}(t)$ の交点を $\tilde{\boldsymbol{x}}$ とする。この領域はパラメータに依らないものとして設定する。
4) 任意のパラメータ $\boldsymbol{p} \in D_p$ に対して、γ 上の不安定多様体の通過点 $\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{p})$ を含む区間 $[X_0]$ を精度保証を用いて確定する。この時、不安定多様体と γ は必ず一点で交差し、かつパラメータについて連続となる。このパラメータ領域 D_p から γ への対応を $F_1 : D_p \to \gamma$ とおく。
5) 軌道計算による γ から Lyapunov 関数の 0 レベルセット L^0 への対応関係として連続写像 $F_2 : \gamma \to L^0$ を定義する。
6) $n-\nu$ 次元超平面 Γ を設定し、$\mathbb{R}^n$ から Γ への射影を P_Γ とおく。
7) $B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$ を Γ 上の中心 $\tilde{\boldsymbol{y}}^*$、半径 ϵ の $n-\nu$ 次元球とする。ただし、平衡点 $\boldsymbol{x}^*(\tilde{\boldsymbol{p}})$ の Γ への射影を $\tilde{\boldsymbol{y}}^* := P_\Gamma \boldsymbol{x}^*(\tilde{\boldsymbol{p}}) \in \Gamma$ とし、任意のパラメータに対する平衡点の射影 $P_\Gamma \boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p})$ について $P_\Gamma \boldsymbol{x}^*(\boldsymbol{p}) \in B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$ となるように半径 ϵ を定める。Γ から $B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$ への retraction $Q : \Gamma \to B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$ を考え、P_Γ と Q の合成として連続写像 $F_3 = Q \circ P_\Gamma : L^0 \to B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$ を構成する。P_Γ, Q の具体的な構成法は講演時に述べる。
8) 連続写像 F を $F = F_3 \circ F_2 \circ F_1 : D_p \to \Gamma$ として定義する。また、F の定義域を ∂D_p に制限したものを F_S とする。このとき、次の二点
   - $F(\partial D_p) \subset \partial B(\tilde{\boldsymbol{y}}^*, \epsilon)$,
   - $\mathrm{deg}F|_{\partial D_p} \neq 0$,

   を精度保証により確認する。これらが確認できれば Brouwer の一致点定理により、ホモクリニック軌道の存在が証明される。

講演では以上の手順についてより詳細な説明を行う。

参考文献

[1] D.Wilczak, “The Existence of Shilnikov Homoclinic Orbits in the Michelson System: A Computer Assisted Proof”, Foundations of ComputationalMathemathics, 6(4):495-535, 2006.

[2] JB van den Berg, JD Mireles-James, JP Lessard, K Mischaikow, “Rigorous numerics for symmetric connecting orbits: Even homoclinics of the GrayScott equation”,SIAM Journal on Mathematical Analysis 43 (4), 1557-1594, 2011.

[3] K.Matsue, T.Hiwaki, N.Yamamoto, “On the construction of Lyapunov functions with computer assistance”, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol319, pp385-412, 2017.

[4] 中岡稔, “不動点定理とその周辺”, 岩波書店, 1977.

接触角度を持つ自由表面問題の有限要素解法と近似界面の Euler 標数の計算

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 概要

液相と気相の界面が計算領域の境界と 90 度未満の接触角度を持つ自由表面問題を考える. 二重井戸ポテンシャルエネルギーを接触角度の条件と体積保存の制約を課して最小化する状態を達成する極値は非線形楕円型方程式の解として求められる. その界面は相を表す指標関数の零等高面となる. 液相が計算領域を充填するかどうかが工学的応用での関心である. 液相領域が単連結かを判定するために, 零等高面を有限要素の四面体毎に探索し, 近似界面の Euler 標数を計算するアルゴリズムを示す.

2 二重井戸ポテンシャルエネルギーと非線形楕円型問題

立方体領域 $\Omega = (-1,1)\times(-1,1)\times(-1/2,1/2)$ の上下の境界を $\Gamma_W = \{(x,y,z)\,;\,(x,y)\in(-1,1)\times(-1,1), z\in\{-1/2,1/2\}\}$, 側面の境界を Γ_N とする. $\varphi:\Omega\to[-1,1]$ を液体 $\varphi=1$ か気体 $\varphi=-1$ かを表すレベルセット関数とする. 液体部分の体積の保存は領域 Ω での積分で表される

$$\int_\Omega \frac{\varphi(x)+1}{2} = V_0\,.$$

表記の単純化のために, $c = 2V_0 - |\Omega|$ と書くことにする. 以下 n を境界 $\Gamma_W\cup\Gamma_N$ の外向き単位法線とする. 液体と気体の界面が領域の境界 Γ_W に角度 θ で接し

$$\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}\cdot n = \cos\theta\,,$$

領域の側面 Γ_N では直交するものとする

$$\nabla\varphi\cdot n = 0\,.$$

液体と気体の分離共存を表現する自由エネルギーは κ を正定数として

$$J(\varphi) := \frac{1}{2}\int_\Omega \kappa|\nabla\varphi|^2 + (\varphi+1)^2(\varphi-1)^2$$

である. このエネルギーを次の部分集合

$$\begin{aligned}W(c,\cos\theta) := \{\varphi\in H^{3/2}(\Omega)\,;\\ \nabla\varphi\cdot n = |\nabla\varphi|\cos\theta \ \text{ on } \Gamma_W,\\ \nabla\varphi\cdot n = 0 \ \text{ on } \Gamma_N\,,\ \int_\Omega\varphi = c\,,\\ \int_\Omega x\varphi = 0, \int_\Omega y\varphi = 0,\ \int_\Omega z\varphi = 0\Big\}\end{aligned}$$

内で最小化する問題を考える. ここで後半の 3 つの積分は流体の重心が原点にあることを表す. 液体と気体の分離共存は自由エネルギー $J(\varphi)$ を最小化することで達成される. $\forall\psi\in W(c,\cos\theta)$ に対して,

$$J(\varphi)\le J(\psi) \tag{1}$$

を満す $\varphi\in W(c,\cos\theta)$ を求めよ. 自由エネルギー $J(\varphi)$ の $\delta\varphi\in W(0,0)$ に対する変分は

$$\begin{aligned}J(\varphi+\delta\varphi)-J(\varphi) = \int_\Omega \kappa\nabla\varphi\cdot\nabla\delta\varphi\\ +2\varphi(\varphi^2-1)\delta\varphi + O(|\delta\varphi|^2)\end{aligned}$$

であり, 最小化問題 (1) は極値問題 $J'(\varphi)=0$ として特徴付けられる. $\varphi\in W(c,\cos\theta)$ より境界条件と体積制約と重心に関する制約が定まり, $\delta\varphi\in W(0,0)\cap H^1_0(\Omega)$ を選ぶと, Ω 内で非線形項を持つ楕円型方程式が得られる

$$\begin{aligned}-\nabla\cdot\kappa\nabla\varphi + 2\varphi(\varphi^2-1) &= 0 && \text{in } \Omega,\\ \nabla\varphi\cdot n &= |\nabla\varphi|\cos\theta && \text{on } \Gamma_W\,,\\ \nabla\varphi\cdot n &= 0 && \text{on } \Gamma_N\,,\\ \int_\Omega\varphi = c\,, \int_\Omega x\varphi = 0\,, \int_\Omega y\varphi &= 0\,,\ \int_\Omega z\varphi = 0\,.\end{aligned}$$

体積制約と重心の位置の制約に関する次のアフィン空間を準備すると

$$\begin{aligned}V(c) := \{\varphi\in H^1(\Omega)\,;\ \int_\Omega\varphi = c,\\ \int_\Omega x\varphi = 0, \int_\Omega y\varphi = 0,\ \int_\Omega z\varphi = 0\Big\}\end{aligned}$$

弱形式は, $\forall\psi \in V(0)$ に対して

$$(F(\varphi),\psi) := \int_\Omega \kappa\nabla\varphi\cdot\nabla\psi + \int_\Omega 2\varphi(\varphi^2-1)\psi - \int_{\Gamma_W} \kappa|\nabla\varphi|\cos\theta\psi = 0$$

を満す $\varphi \in V(c)$ を求めよとなる.

3　Newton 法と制約付き線形方程式

弱形式での非線形方程式の解は Newton 法により求める. $\varphi^0 \in V(c)$ を初期近似として, 変化量 $\delta\varphi \in V(0)$ を求め反復計算を行なう.

Algorithm：Newton 反復

loop $k = 0, 1, \cdots$

　$\forall\psi \in V(0)$ に対して

　　$(F'(\varphi^k)\delta\varphi,\psi) = (F(\varphi^k),\psi)$

　を満す $\delta\varphi \in V(0)$ を求める

　$\varphi^{k+1} := \varphi^k - \delta\varphi$.

ここで k-ステップでの φ^k に関するヤコビアンは $\delta\varphi,\psi \in V(0)$ に対して次のようになる

$$(F'(\varphi^k)\delta\varphi,\psi) = \int_\Omega \kappa\nabla\delta\varphi\cdot\nabla\psi - 2\int_\Omega \delta\varphi\psi + 6\int_\Omega (\varphi^k)^2\delta\varphi\psi - \int_{\Gamma_W} \kappa\frac{\nabla\varphi^k\cdot\nabla\delta\varphi}{|\nabla\varphi^k|}\cos\theta\psi\,. \tag{2}$$

また, 初期近似 $\varphi^0 \in V(c)$ は勾配流による擬似時間発展問題を解くことで求める.

$F'(\varphi^k)$ の有限要素近似による行列表現を A とする. アフィン空間 $V(c)$ は 4 個の積分による制約条件を含んでいるが, $\vec{\varphi}$ を有限要素未知ベクトルとして

$$\vec{m}_0^T\vec{\varphi} = c,\ \vec{m}_1^T\vec{\varphi} = 0,\ \vec{m}_2^T\vec{\varphi} = 0,\ \vec{m}_3^T\vec{\varphi} = 0$$

と表わすと, (2) の行列表現は KKT 型になる

$$\begin{bmatrix} A & \vec{m}_0 & \vec{m}_1 & \vec{m}_2 & \vec{m}_3 \\ \vec{m}_0^T & & & & \\ \vec{m}_1^T & & 0 & & \\ \vec{m}_2^T & & & & \\ \vec{m}_3^T & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{\varphi} \\ \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{f} \\ c \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

A に関するブロック消去を実行して Schur 補行列を経由することで KKT 型の行列が持つ不定値性を回避して, 強圧的な行列のみを用いて求解することができる.

`FreeFem++` ver.3.61 [1] と要素細分に `mmg3d` ver.4.0 [2] を用いて得られた P2 要素による有限要素解を図 1 に示す.

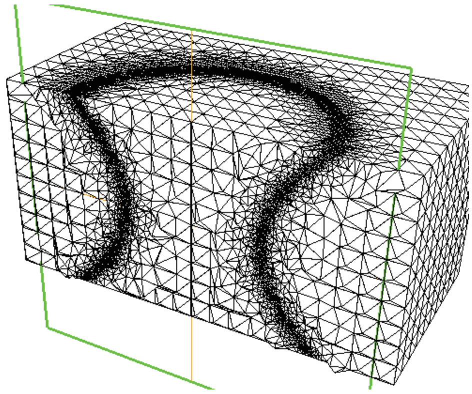


図 1 接触角度 $\theta = \pi/4$ の解と要素細分

4　近似界面の Euler 標数の計算

図 1 は上下の面に接触角度を境界条件として与え, 領域内部の中心部分に液体が充填されている. 液相と気相との境界面は指標関数の零等高面 $\varphi = 0$ である. 鼓型の側面は立方体の側面と同相であるので Euler 標数は V を頂点, E を辺, F を面の数として

$$V - E + F = 8 - 12 + 4 = 0$$

である. 液相が未充填で上下に分離している場合は二つの界面を持ち, Euler 標数は 2 である.

四面体毎の P2 節点で与えられた指標関数 φ の零等高面を求めるアルゴリズムを構築したいが, 界面の近傍で要素細分を十分細かく設定できていること仮定して, 四面体での $\varphi = 0$ の零等高面を 1 次近似することを考える. 実装の単純化のため, 頂点あるいは辺の中点で $\varphi(x) = 0$ を実現する場合にはそれらの点で $\varphi(x)$ に若干の擾乱 $\varepsilon > 0$ を加える. これにより四面体毎にその内部を横切る $\varphi(x) = 0$ を検出して, 零等高面を構成する頂点と辺を数え上げることができる. それらの頂点と辺は他の四面体と共有されていることに注意するが, これらは P2 要素による質量行列の節点の結合関係を利用して表現することができる. 近似多面体の面の数は零等高面を共有する四面体の数である.

謝辞　本研究は株式会社デンソーとの共同研究の支援を受けた.

参考文献

[1] F. Hecht et al.: *FreeFem++ manual*, `http://www.freefem.org/ff++` v

[2] C. Dobrzynski, P. Frey: mmg3d ver. 4.0, `https://www.ljll.math.upmc.fr/frey/software.html`

A study of the toughness of epoxy resins: phase field modeling of fracture.

Xie Shuangquan[1], Takaishi Takeshi[2],Nishura Yasumasa [1], Agaki Kazuto [1], Avalos Edgar [1]
[1]Tohoku University, AIMR，[2]Musashino University
e-mail : xieshuangquan2013@gmail.com

1 概要

We explore the relation between fracture toughness and micro-structures of epoxy material under four different types of processing. The concept of effective toughness is used as an indicator to represent the macroscopic toughness. The microstructure is obtained from the X-ray CT scanning and stand for the heterogeneity of the material. We numerically study the effects of heterogeneous elasticity on toughness based on the phase field model. Numerical simulations show that one type of material has higher effective toughness than others statistically, this result is consistent with the experiments.

. . . .
. . . .

参考文献

[1] Hossain, M. Z., et al. ”Effective toughness of heterogeneous media.” Journal of the Mechanics and Physics of Solids 71 (2014): 15-32.

[2] Chen, Chun- Teh, and Grace X. Gu. ”Effect of Constituent Materials on Composite Performance: Exploring Design Strategies via Machine Learning.” Advanced Theory and Simulations (2019).

Stokes 方程式の滑り境界値問題に対する Crouzeix-Raviart 非適合有限要素法について

及川 一誠 [1], 柏原 崇人 [2], 周 冠宇 [3]
[1] 一橋大学大学院経営管理研究科，[2] 東京大学大学院数理科学研究科, [3] 東京理科大学
e-mail : a191925h@r.hit-u.ac.jp

1 概要

$\Omega \subset \mathbb{R}^N (N = 2, 3)$ を有界かつ滑らかな境界 $\Gamma := \partial\Omega$ をもつ領域とする．ここでは以下の Stokes 方程式の滑り境界値問題を考える：

$$u - \nu\Delta u + \nabla p = f \quad \text{in } \Omega, \tag{1a}$$
$$\nabla \cdot u = 0 \quad \text{in } \Omega, \tag{1b}$$
$$u \cdot n = g \quad \text{on } \Gamma, \tag{1c}$$
$$(I - n \otimes n)\sigma(u, p)n = \tau \quad \text{on } \Gamma. \tag{1d}$$

ただし，$\nu > 0$ は粘性係数，f, g, τ は与えられた関数，n は外向き単位法線ベクトル，$\sigma(u, p) = -pI + \nu(\nabla u + (\nabla u)^T)$ とする．compatibility condition として $\int_\Gamma g ds = 0$ を仮定する．

問題 (1) のような滑り境界値問題に対する有限要素近似は，領域 Ω が多角形や多面体領域などの境界が曲がっていない場合は Dirichlet 境界条件の場合と同様に，精度の良い近似となる．しかし，円や球などのように境界が曲がっている場合は，有限要素解は厳密解に収束しなくなることが知られている．これを克服するために既に様々な手法が提案されている．その中のひとつとして，滑り境界条件をペナルティ法により課す方法がある [1]．ペナルティ法は，FreeFEM++[2] 等のソフトウエアによる実装が容易で，尚かつ数学的正当性が示されている [3, 4, 5] という点で他手法に比べて優れている．

初期の研究では P2/P1 あるいは P1b/P1 要素（以下，まとめて適合要素と呼ぶ）を用いていたが，最近の研究により，非適合の Crouzeix-Raviart (CR) 要素を用いたほうが，より良い結果が得られることが判明した [6, 7]．さらに，CR 要素と Uzawa 法を組み合わせることが数値計算する上で有効であることもわかっている．本講演では Uzawa 法の数値計算結果を中心に報告する．

2 ペナルティ法の Crouzeix–Raviart 非適合有限要素近似

Ω_h を Ω の多角形あるいは多面体の近似領域とし，その境界を Γ_h とする．Ω_h のメッシュを $\mathcal{T}_h$ と表し，各要素の辺（あるいは面）を全て集めた集合を $\mathcal{E}_h$ と表す．領域 Ω_h 内部の辺の集合を $\mathcal{E}_h^\circ$ と表し，境界 Γ_h 上の辺の集合を $\mathcal{E}_h^\partial$ と表すことにする．$P_k(T)$ を要素 T 上における k 次多項式空間とし，$P_k(\mathcal{T}_h)$ をメッシュ$\mathcal{T}_h$ における区分 k 次多項式とする．CR 非適合有限要素は以下のように定義される：

$$V_h = \left\{ v_h \in P_1(\mathcal{T}_h)^N : \frac{1}{|e|}\int_e [v_h] ds = 0 \quad \forall e \in \mathcal{E}_h^\circ \right\},$$
$$Q_h = P_0(\mathcal{T}_h).$$

ここで $|e|$ は e の長さあるいは面積，$[v_h]$ は v_h の内部の要素境界におけるジャンプである．ペナルティ法の CR 非適合有限要素近似は次のようになる：Find $(u_h, p_h) \in V_h \times Q_h$ such that

$$a_h(u_h, v_h) + b_h(p_h, v_h) \tag{2a}$$
$$+ \epsilon^{-1} c_h(u_h \cdot n_h - \tilde{g}, v_h \cdot n_h) + j_h(u_h, v_h) \tag{2b}$$
$$= (\tilde{f}, v_h)_{\Omega_h} + (\tilde{\tau}, v_h)_{\Gamma_h} \quad \forall v_h \in V_h, \tag{2c}$$
$$b_h(q_h, u_h) = 0 \qquad \forall q_h \in Q_h. \tag{2d}$$

ただし，$\epsilon > 0$ はペナルティパラメータ，n_h は Γ_h 上の外向き単位法線ベクトル，$\tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{\tau}$ は，$\mathbb{R}^N$ 上へ適切に拡張した関数を意味し，各双線型形式は以下のように定義される：

$$a_h(u, v) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left((u, v)_T + \frac{\nu}{2}(\mathbb{E}(u), \mathbb{E}(v))_T \right),$$
$$b_h(p, v) = -\sum_{T \in \mathcal{T}_h} (p, \mathrm{div} v)_T,$$
$$c_h(\lambda, \mu) = (\Pi_h^\partial \lambda, \Pi_h^\partial \mu)_{\Gamma_h},$$
$$j_h(u, v) = \sum_{e \in \mathcal{E}_h^\circ} \gamma h_e^{-1}([u], [v])_e.$$

ここで $(u,v)_T := \int_T uvdx, \mathbb{E}(u) := \nabla u + (\nabla u)^T$, Π_h^∂ は境界上の区分定数関数への L^2 射影，$\gamma > 0$ は安定化パラメータである．

c_h は滑り境界条件のペナルティ法による実装である．この項を付け加えずに，直接的に各 $e \in \mathcal{E}_h^\partial$ に対して $\int_e u_h ds = 0$ を課すことも可能であるが，FreeFEM++等のソフトウェアによる実装は難しくなる．

3 Uzawa 法による反復解法

スキーム (2) を以下のように行列形に書き直す：

$$A_h u_h + B_h^T p_h = F_h, \tag{3a}$$

$$B_h u_h = 0. \tag{3b}$$

これに対して Uzawa 法を適用する．初期値を $p^{(0)} \equiv 0$ と設定し，以下の反復を繰り返す．

1) $A_h u^{(n+1)} = F_h - B_h^T p^{(n)}$
2) $p^{(n+1)} := p^{(0)} + \omega(-B_h u^{(n+1)})$.

ここで ω は定数で，本研究では 1 に固定した．この反復計算を繰り返し，$\|u^{(n+1)} - u^{(n)}\|, \|p^{(n+1)} - p^{(n)}\|$ が十分に小さくなったとき，収束したとみなす．

Uzawa 法を CR 非適合要素近似 (2) に適用した場合，A_h の条件数が ϵ によらずほぼ一定であり，かつ悪条件にならない（適合要素では A_h は ϵ が非常に小さい場合は悪条件になる）．実際の数値計算でも，(3) を連立させて解く場合に比べ，収束性は格段に良くなった．数値計算結果の詳細に関しては講演中に紹介する予定である．

参考文献

[1] I. Dione and J.M. Urquiza, Penalty, finite element approximation of Stokes equations with slip boundary conditions, Numer. Math., 129 (2015) 587–610.

[2] F. Hecht, New development in FreeFem++, J. Numer. Math., 20 (2012) 251-265.

[3] T. Kashiwabara, I. Oikawa and G. Zhou, Penalty method with P1/P1 finite element approximation for the Stokes equations under the slip boundary condition, Numer. Math., 134 (2016) 705-740.

[4] G. Zhou, T. Kashiwabara and I. Oikawa, Penalty method for the stationary Navier–Stokes problems under the slip boundary condition. J. Sci. Comput., 68 (2016) 339-374.

[5] G. Zhou, T. Kashiwabara and I. Oikawa, A penalty method for the time-dependent Stokes problem with the slip boundary condition and its finite element approximation, Appl. Math., 62 (2017) 377-403.

[6] T. Kashiwabara, I. Oikawa and G. Zhou, Penalty method with Crouzeix–Raviart approximation for the Stokes equations under slip boundary condition, ESAIM:M2AN, 53 (2019) 869-891.

[7] G. Zhou, T. Kashiwabara and I. Oikawa, The Crouzeix–Raviart element for the Stokes equations with the slip boundary condition on a curved boundary, submitted.

FreeFEM を用いた数値シミュレーション教育の現状と課題

中澤 嵩[1]
[1]大阪大学　数理・データ科学教育研究センター　数理科学ユニット
e-mail: nakazawa@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1　概要

FreeFEM を用いた数値シミュレーション教育の現状と課題について述べたい．特に，登壇者がこれまで行ってきた，学部１年から博士前期課程の学生を対象とした講義内容を紹介するとともに，今後どのように利用者を増やしていくかについて検討した．

2　FreeFEM について

パリ第６大学 Lions 研究所で開発され，無償で公開されている有限要素法ソフトウェアである FreeFEM を用いる．このフリーソフトでソースコードを作成するためには偏微分方程式の弱形式を導出する必要がある．その際，ユーザーが１，２年次の理系の部であれば修得している，基礎数学（線形代数・ベクトル解析・微分積分等）を用いた部分積分さえ可能であれば十分である．

3　講義概要

講義内容は，基礎数学の復讐，Poisson 方程式，拡散方程式，移流方程式，移流拡散方程式，Stokes 方程式，Navier-Stokes 方程式の数値シミュレーションを次の順で進める．

まず，講師から基本的な内容を 15 分程度で説明した後,20 分程度で回答を出せる演習問題を出す．その際，グループワーク（1 グループ 5～10 人程度）を行う．それによって，グループ内で議論や助け合いがなされ，学生は効率的に演習問題をこなすことが可能となる．

4　これまでの実施例

これまで理学部（数学科）や工学部（機械工学科，航空宇宙工学，土木工学）の教員や大学院生・学部生に対して講習会を行ってきた．そのため，以下のような工夫を取り入れた．

1）無理のないスケジュール

この講習会のスケジュールでは，2 日間で，初日の午前中に基礎数学の復讐と Poisson 方程式を 2 コマ，二日目の午後に拡散方程式，移流方程式，移流拡散方程式，Stokes 方程式，Navier-Stokes 方程式の数値シミュレーションを 2 コマ行う．初日と二日目の間に出来るだけ時間を確保して，復習・予習を行う．

2）グループワーク

グループワークを実施することで，学生同士が互いに議論し・助け合うことを促した結果，4 コマ程度でほぼ全ての受講生が Navier-Stokes 方程式の計算が可能となった．

上記のような特徴を生かして，以下に記述する演習やレポートを参加者がスムーズに行えるようにした．

5　演習レポート内容

講義内容を把握していれば，十分に取り組める内容を含め，学部生用ではあるが数学の参考書を必要とするようなじっくりと時間をかけて取り組む問題から，航空工学で盛んに研究されている２次元翼周りの数値流体解析まで，幅広く織り交ぜるように心がけた．レポートを出す際には，複数の問題を総合的に考慮し，更には(Lap top を用いると)数時間の数値計算を複数回必要な問題を出している．この様な講義を通して，数学・物理・工学に興味のある学生に対して幅広く対応し，更には十分に取り組める程度の問題・レポートを出すことにした．

5　一般教養科目としての開講（前期）

大学における一般教養科目として開講する場合にも，これまで行ってきた講習会の講義を拡張する形態で進める．一般教養科目の特徴としては，「文系・理系を問わず低学年の学生を対象」・「100 人弱程度の受講生」・「15 回の講義」等について対策を取る必要がある．具体的に，一つづつ見ていきたい．

まず初めに，「文系・理系を問わず低学年の学生を対象」については，FreeFEM で必要とされる必要最低限の基礎数学（ベクトル解析，微分積分，線形代数，発散定理）の復讐を重点的に行う．

次に，「100 人弱程度の受講生」については，入学する学部によって，大学受験で必要とされる数学知識に大きく差があるため，1 グループに 10 人のグループを作り，文系学部と理系学部に所属する学生を均等に振り分ける．そして，出来るだけグループ内で互いに助け合い問題を解決するように促す．今回のようなハンズ―オン形式の講義において，学生一人一人に個別対応することは非常に困難であるため，このようなグループワークを行うことは，講義を円滑に進める上でも重要な役割を果たすことになる．

最後に，「15 回の講義」については，1 か月程度かけて基礎数学の復習，2 か月程度をかけてポアソン方程式の数値計算を行う．残りの 1 ヶ月は，自習時間としつつ，積極的な学生に対してはNavier-Stokes 方程式の数値シミュレーションまで講義する．

6　一般教養科目としての開講（後期）

後期は，一般教養の単位を既に取得しており，それでもなお知識を吸収したいという積極的な理系学生の受講登録が特に目立つ．しかしながら，履修登録者数は 10 名程度という少人数であることから，従来の講習会で行ってきたアプローチが直接使えることになる．講義内容については，およそ 1 か月程度で Navier-Stokes 方程式の数値シミュレーションを終えてしまう．その後，3 次元メッシュ生成・3 次元熱方程式の数値計算・Paraview による可視化・並列計算等の課題を出している．

7　一般教養科目としての開講（集中講義）

一般に，大学院生は就職活動で長期間研究活動から離れることから，そのような学生を指導する工学系教員は，短期間で実践的な技術を学ばせたいという事情があるようである．そこで，このような悩みを抱えた教員の研究室に所属する大学院生に対して，夏休み期間中の集中講義において，FreeFEM を使った数値計算手法の講義を行っている．できるだけ，受講生を増やすために，履修登録期間前に学内教員に予め確認し，どのような技術を学生に学ばせたいかをアウトリサーチしているのだが，トポロジー最適化問題を数値計算するためのアルゴリズムを指導してほしいという要望が学内で非常に多い．そこで，7 コマ（1 単位）程度で，これらのアルゴリズム及び数値計算を講義している．

8　今後の課題

登壇者は，これまで数値計算を専門としない学生・教員に対して FreeFEM の講義や講習会を行ってきた．しかしながら，研究の中で利用してもらうためには，今後，更なるアフターケア等の取り組みが必要となると考えられる．それに対しては，FreeFEM を中心とした研究会や勉強会等のイベントを効果的に開催していく必要があるかと思われる．

参考文献

[1] F. Hecht, New development in FreeFem++. J. Numer. Math. Vol. 20, No. 3-4, pp. 251-265, 2012.

表皮構造の数理モデル

大野航太 [1], 小林康明 [1], 長山雅晴 [1]
[1] 北海道大学 電子科学研究所
e-mail：kota.ohno@es.hokudai.ac.jp

1　概要

皮膚の構造は大きく分けて表皮，真皮，皮下組織の三つで構成されている．その中でも，表皮は95%が角化細胞で構成されている．角化細胞は表皮の最下層である基底層で分裂し，有棘細胞, 顆粒細胞へと分化しながら上方へ移行し，最終的には角質細胞となって表皮から剥がれ落ちる．この分化した細胞は最下層からそれぞれ基底層, 有棘層, 顆粒層, 角層という層構造を形成している (図 1)．また，この分裂から剥がれ落ちるというターンオーバーが表皮では繰り返されており, 人間の場合, そのターンオーバー時間は約 45 日間と言われている [1]．更に，表皮は生体内の水分保持や細菌感染を防ぐ為にバリア機能を有している．角質細胞と脂質によって形成される角層バリアや, 顆粒層に発現するイオン透過制御などの役割を担うタイトジャンクションバリアなどがあるが, 表皮はターンオーバーを繰り返しても層構造とバリア機能を恒常的に保っている．

この表皮構造の恒常性について，我々は数理モデルを用いて再現し，そのメカニズムを理解することを目指す．また我々は皮膚に見られる様々な病気を数理モデルを用いて再現することで，その疾患の原因を数理モデルから示唆することも目的としている．本研究では，我々の数理モデルの数値実験結果と，モデルを用いて病気の再現を試みた結果を紹介する．

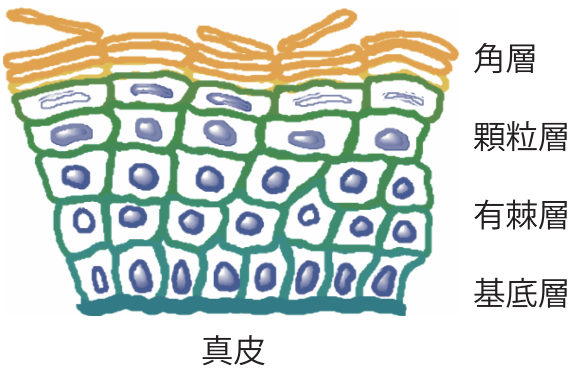


図 1. 表皮構造の模式図

2　恒常性をもつ表皮構造の数理モデル

我々の数理モデルは Ca^{2+} 伝搬の数理モデル [2]，平坦な真皮を仮定した細胞ダイナミクスを記述するモデル [3]，真皮変形に伴う細胞ダイナミクスの数理モデル [4, 5] などの先行研究を通じて構築されている．更に皮膚科学の知見を元に細胞の分化についての数理モデルやタイトジャンクションバリアの形成，角層の剥離について考察を加え，層構造を形成する数値実験結果を得た (図 2)．

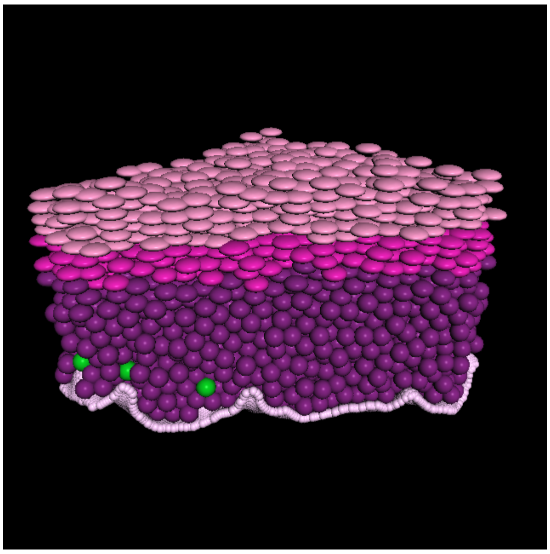


図 2. 数理モデルの計算例．薄いピンク: 角質細胞．濃いピンク: 顆粒細胞．紫: 有棘細胞．緑: 幹細胞．

3　皮疹の再現への取り組み

表皮構造の数理モデルを用いて汗孔角化症という皮疹の再現を試みた．汗孔角化症は四肢や体幹，顔面に縁取り状に隆起した円形かつ褐色に現れる皮疹で，慢性かつ難治性の病気である [1]．汗孔角化症の中でもよく見られる症状に分類される病型では，一つの幹細胞が突然変異した際に，その幹細胞が異常な細胞を分裂で増やす事で現れる [6]．また円形皮疹の大きさはある程度まで拡大した後は変動が見られず，境界部分では突然変異した幹細胞から分裂した異常細胞と，通常細胞から分裂した正常な細胞とが混じり合う様子が観察される．

この様な皮疹の再現を試みる上で，突然変異した幹細胞として次の様な仮定を持つ異常細胞を考える．(1) 異常細胞が分裂した細胞も異常細胞として扱う．(2) 異常な幹細胞は動きにくい．(3) 異常細胞は基底膜から剥がれにくい．(4) 異常細胞同士は接着が強くなる．(5) 異常な細胞は通常の細胞と比べて分裂速度が異なる．この様な異常な幹細胞を一つ用意して数値実験を行なった結果，表皮上部において円形に見える異常細胞の領域が観察された (図 3)．更にこの円形領域は異常細胞の分裂速度が速くなることで，その大きさを維持することが確認された (図 4)．以上の数値実験が汗孔角化症と関係性があるか，皮膚科学の専門家との議論が必要である．しかし，接着強度や分裂速度が通常細胞と異なる異常な幹細胞が発生することで現れる皮疹の存在が，この結果より示唆される．

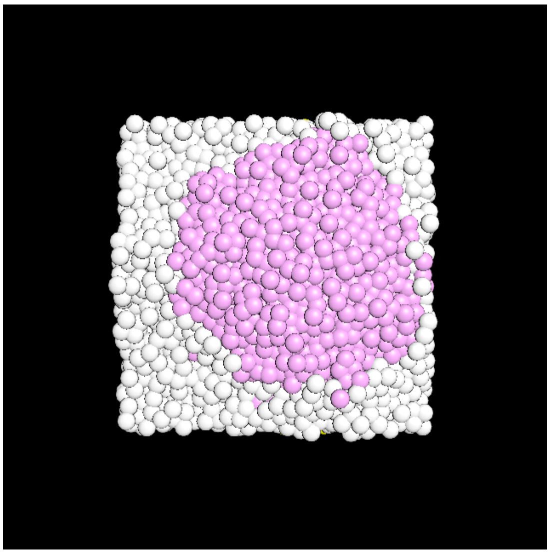


図 3. 汗孔角化症の計算例．白い細胞は通常な角質細胞．ピンク色が異常な角質細胞．

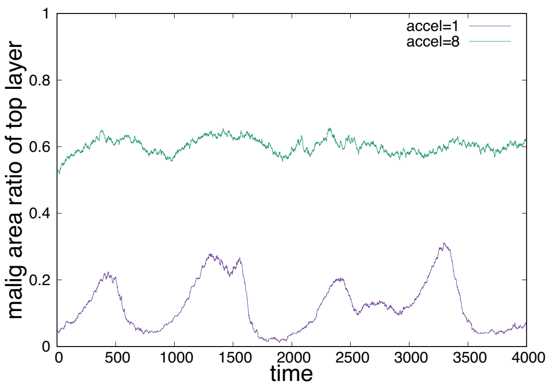


図 4. 表皮上部に現れる異常細胞が占める面積比率の時間推移．紫: 異常細胞の分裂速度が通常細胞と同じ場合．緑: 異常細胞の分裂速度が通常細胞と比べて速い場合．

参考文献

[1] 清水宏, 新しい皮膚科学, 中山書店, 2018.

[2] Y. Kobayashi, Y. Sanno, A. Sakai, Y. Sawabu, M. Tsutsumi, M. Goto, H. Kitahata, S. Nakata, J. Kumamoto, M. Denda and M. Nagayama, Mathematical modeling for calcium waves induced by mechanical stimulation in keratinocytes, PLoS ONE, 9(3) e92650 (2014).

[3] Y. Kobayashi, Y. Sawabu, H. Kitahata, M. Denda and M. Nagayama, Mathematical model for calcium- assisted epidermal homeostasis, Journal of Theoretical Biology, 397 (2016), 52-60.

[4] 長山雅晴, 小林康明, 澤武祐輔, 久保実沙貴, 傳田光 洋, 北畑裕之, 表皮構造の数理モデリング. 数理解析研究所講究録, 第 1957 巻 (2015), 155-168.

[5] 長山雅晴, 傳田光洋, 北畑裕之, 小林康明: 角層バリア 機能の数理モデルとその応用. 応用数理 vol.27, No.2 (2017), 18-26.

[6] Kubo A., Sasaki T., Suzuki H., Shiohama A., Aoki S., Sato S., Fujita H., Ono N., Umegaki-Arao N., Kawai T., Nakabayashi K., Hata K., Yamada D., Matsubara Y., Kosaki K. and Amagai M. Clonal expansion of second-hit cells with somatic recombinations or C¿T transitions form porokeratosis in MVD or MVK mutant heterozygotes. J Invest. Dermatol., pii: S0022-202X(19)31762-2 (2019).

表皮内タイトジャンクション形成の数理モデル

小林 康明 [1], 後藤田 剛 [2], 長山 雅晴 [1]
[1] 北海道大学電子科学研究所，[2] 名古屋大学大学院多元数理科学研究科
e-mail：ykobayashi@es.hokudai.ac.jp

1 概要

哺乳類の表皮にはタイトジャンクション（TJ）とよばれる強い接着結合を持つ細胞の単層があって，この層をイオンや水分が通過するのを防ぐバリアとしてはたらく．皮膚を維持するためには古い細胞は絶えず新しい細胞に置き換わる必要があるが，入れ替わりの際にこの TJ 形成層の結合が破れると皮膚のバリア機能が損なわれるため，TJ 形成層は細胞間の結合を保ったまま細胞の入れ替わりを実現しなければならない．本講演ではこのような細胞の入れ替わりを伴う TJ 形成モデルについて考察する．

2 TJ 形成層の構造変化

表皮は表皮細胞（ケラチノサイト）が積み重なった層構造をなしており，その性質に応じて内側から基底層，有棘層，顆粒層，角層の 4 層に分類される．顆粒層は扁平化した細胞 3 層分の層構造であり，上（外側）から SG1，SG2，SG3 層といい，中央の SG2 層が TJ 形成層である．

細胞の入れ替わりの際の TJ 形成層（SG2 層）の構造変化については実験により多くのことが明らかになっている．[1]．まず SG2 層を構成するある細胞 X にたいして，SG2 層内で X と TJ 結合する細胞の集合を Ω_X とする．X の直下にある SG3 層の細胞 Y に TJ が発現するとき，X，Y，そして Ω_X の要素 Z のあいだに 3 細胞間の結合（tricellular tight junction, tTJ）が形成される．その後 X が TJ を失い，X は SG1 層の構成要素となる．Y と Ω_X に含まれる細胞との間には 2 細胞間の TJ 結合が残り，X が SG2 層から離脱してもその周囲の TJ は破れない．こうして各細胞が TJ の発現と消失の状態変化を起こす中で SG2 層は全体として維持されている．

3 TJ 形成層の数理モデル

どのようなシグナル伝達経路によって上記の細胞の状態変化が起こるのかは明らかになっていない．ここでは次のようなモデルを考える．

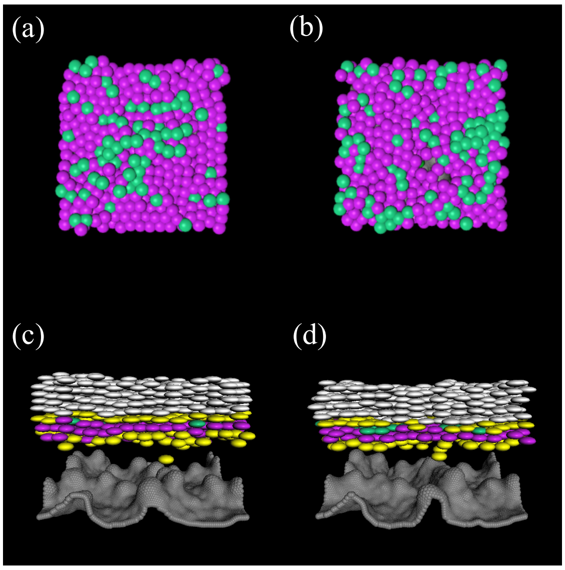


図 1. 表皮構造とタイトジャンクション形成の数値計算．(a, b): SG2 層の可視化．(a) 隙間のない場合，(b) 隙間のある場合．(c, d): 真皮，顆粒層，角層の形状．(c) と (d) はそれぞれ (a) と (b) に対応．紫：SG2A，緑：SG2B，黄：SG3 または SG1，白：角層．それ以外の細胞は非表示．

3.1 顆粒層のモデル

TJ を発現する前の細胞を SG3，TJ を発現中の細胞を SG2，発現後に TJ を失った細胞を SG1 とし，SG2 の時期の前半と後半をさらに SG2A と SG2B の 2 状態に分ける．SG3 → SG2A → SG2B → SG1 の状態変化は不可逆過程であるとし，次の 2 つのルールで状態変化する．

1) 内部状態変数による変化：細胞 i が持つ内部状態変数 S_i が一定の速度

$$\frac{dS_i}{dt} = \alpha$$

($\alpha > 0$ はある定数) にしたがって亢進し，しきい値 S_3，S_{2A}，S_{2B}，S_1 を超えるとそれぞれ SG3，SG2A，SG2B，SG1 となる．

2) SG2 層による分化誘導：細胞が SG2B に変化するとき，その直下の SG3 細胞を SG2A に分化誘導する．

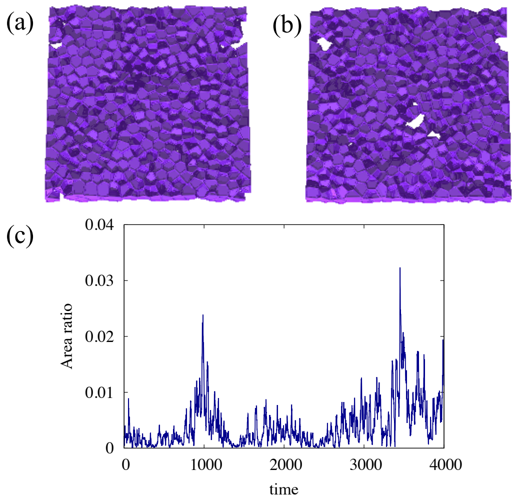


図 2. (a)，(b): 図 1(a)，(b) に対するボロノイ分割による TJ 層の隙間面積の評価．(c)TJ 層の隙間面積の比率の時間変化．

3.2 表皮の数理モデル

我々がこれまでに構築した表皮構造の数理モデル [3] と真皮形状変形の数理モデル [2] によって細胞 3 層からなる顆粒層を構成することが可能である．これに上記のルールを組み合わせたモデルを構築し，表皮形成のシミュレーションを行う．

3.3 TJ バリアの評価

SG2A と SG2B の細胞間にのみ TJ が発現しているものとし，SG2A，SG2B の細胞の中心座標を用いて Voronoi 分割したものを xy 座標に射影し，隙間面積から TJ の破れを評価する．

4 数値計算

4.1 TJ 層の構造の安定性

数値計算の結果，図 1 に示すように SG2A1 層分に SG2B の細胞が一部接着するという，実験とよく一致する 1 層 $+\alpha$ の構造が得られた．このとき顆粒層全体は 3 層の層構造を保っている．

4.2 TJ 層の隙間面積とバリア評価

TJ 層の隙間面積は計算時間の大部分にわたって低い値であるが，図 2(c) に示すようなバーストが生じる．このとき図 2(b) のような大きな TJ 層の破れが生じている．

5 課題

現在の数理モデルで顆粒層自体の層構造に加えて TJ 形成層も実現されることが明らかになったが，これが間欠的なバーストを起こすことなく完全に保たれるためには，破れを防ぐ何らかの追加のメカニズムが必要と考えられる．

参考文献

[1] M. Yokouchi et al, Epidermal cell turnover across tight junctions based on Kelvin's tetrakaidecahedron cell shape, eLife 5 (2016), e19593.
[2] Y. Kobayashi, Y. Sawabu, H. Kitahata, M. Denda, and M. Nagayama, Mathematical model for calcium-assisted epidermal homeostasis, Journal of Theoretical Biology 397 (2016), 52-60.
[3] Y. Kobayashi, Y. Yasugahira, H. Kitahata, M. Watanabe, K. Natsuga, and M. Nagayama, Interplay between epidermal stem cell dynamics and dermal deformation, npj Computational Materials 4 (2018), 45.

数理モデルを利用したヒト培養表皮モデルの高機能化

熊本 淳一[1]，長山 雅晴[1]，傳田 光洋[2]
[1] 北海道大学電子科学研究所，[2] 資生堂グローバルイノベーションセンター
e-mail：junichi.kumamoto@shiseido.com

【背景】

ヒトの表皮細胞を用いて作られる表皮モデルは、基礎研究に応用されるだけではなく、新薬の開発や安全性試験にも用いられる重要なリサーチツールである。しかし、現在までの表皮モデルはヒト表皮を十分に模倣できていない。特に皮膚の重要な機能である角層バリア機能はヒト皮膚（表皮）と比較するとまだまだ不完全である。本研究では上記の現状を数理モデルとそのコンピュータシミュレーションによって改善しようと試みた。既に確立されている表皮恒常性を維持した数理モデル（図 1）を用いて、コンピュータシミュレーションを行った。その結果、表皮の構造や厚さは、表皮幹細胞の空間的分布と、その表皮幹細胞が播種される基底膜の構造によって大きく影響されることが判明した。基底膜の構造が直線的な場合に比べ、波上のような構造をしている時に表皮が肥厚することが数理モデルから導き出された。昨今までの表皮モデルの底部は、ほとんどが直線的なものであるため、そのコンピュータシミュレーションを元に、表皮モデル底部に簡易的に凹凸をつけるだけで、角層バリア機能が向上した表皮モデルを構築できるのではないかと考え、その表皮モデルを構築し機能評価を行った。

【研究手法】

コンピュータシミュレーションの結果を元に、表皮モデル培養容器底部に様々なパターンのポリエステルメッシュを密着させて、簡易的に凹凸を付けた培養容器を作製し、表皮モデルを構築した。構築された表皮モデルは機能評価を行うために、HE 染色を用いて表皮の厚さを評価した。また、表皮モデルの角層バリア機能を評価した。主に電子顕微鏡を用いて角層、細胞間脂質を観察し、角層バリア機能を評価する一般的な評価法である TEWL（Trans Epidermal Water Loss）法を用いて角層バリア機能を評価した。

【研究成果】

HE 染色の結果、無加工の表皮モデルに比べ、ポリエステルメッシュを密着させた培養容器を用いて構築した表皮モデルの方が分厚い表皮が構築された（図２）。また、角層バリア機能評価ではヒト表皮のような細胞間脂質を含む厚い角層が形成されていることが電子顕微鏡観察結果から得られ、TEWL の評価ではコントロールと比べ、有意に水分蒸散量が減少した（図３）。これらの結果から、数理モデルとそのコンピュータシミュレーション結果を模倣した培養容器を用いて表皮モデルを作製するとヒト皮膚表皮並みに厚く、高角層バリア機能を有する 3 次元表皮が構築できることが判明した。

【今後への期待】

この培養表皮モデルは様々な皮膚疾患のメカニズム解明に役立つ他、皮膚外用剤、化粧品等の効果を評価するためのツール、あるいは再生医療にも展開できるという可能性を持っている。さらに本研究成果は、数理モデルとそのコンピュータシミュレーションが生命科学、医学の領域で極めて有効な方法論であることも示唆している。

図1. 数理モデルに対するコンピュータシミュレーションによって表された表皮モデル画像

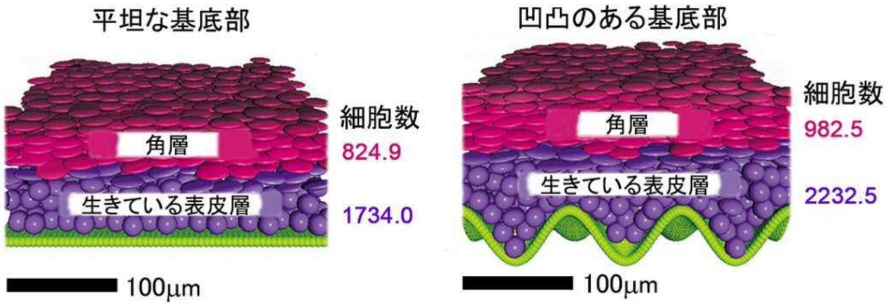


図2. HE 染色法を用いた表皮モデル染色画像

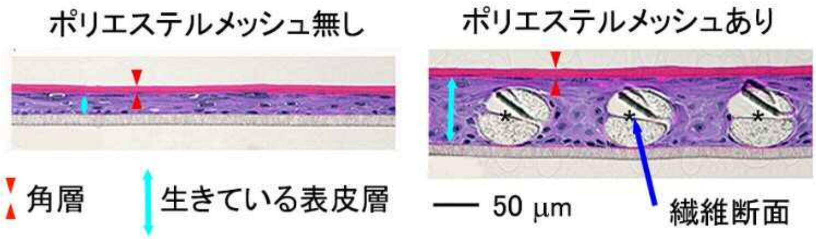
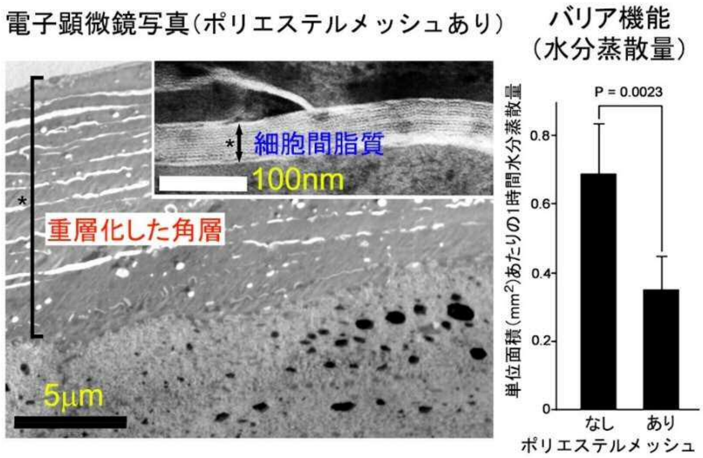


図3. 電子顕微鏡と TEWL 法を用いた角層バリア機能評価



【参考文献】

[1] Kumamoto J, Nakanishi S, Makita M, et al. Mathematical-model-guided development of full-thickness epidermal equivalent. Sci Rep. 2018 Dec 20;8(1):17999.

Both spatial and temporal patterns of sensory afferents activity may explain the geometric perception in the fishbone tactile illusion

仲谷 正史[1,2]，上坂 正晃[3]，最上 紗也子[1] 趙 子夏[3]，須志田 隆道[3]，北畑 裕之[4]，長山 雅晴[3,5]
[1]慶應義塾大学，[2]JST さきがけ，[3]北海道大学，[4]千葉大学，[5]JST CREST

e-mail：mn2598@sfc.keio.ac.jp，nagayama@es.hokudai.ac.jp

1 概要

本研究は，ヒト触知覚特性を説明する数理モデル構築を目指して研究に取り組んだ．錯触覚現象を取り上げ，数理モデルに適用可能な条件で心理実験を行った．その心理実験の結果を数理モデルで説明した結果を述べる．

2 はじめに

本研究は，既存の触覚の錯覚（以下，錯触覚と呼ぶ）が生じるヒトの知覚原理を数理モデルを利用して理解することで，ヒトの触知覚の基本原理を明らかにすることを目的とする．この目的を達成するために，本稿では Fishbone Tactile Illusion (FTI) を題材として選び，この錯触覚のヒト触知覚特性を心理実験で調べた結果を予測する数理モデルについて述べる．

3 Fishbone Tactile Illusion

図 1 に FTI を生じさせる典型的な表面パタンを示す．表面パタンは魚の背骨とあばら骨の 2 つの部分から構成されており，図の青い部分を約 0.1 mm 盛り上がるように印刷している．この表面パタンを手の指先で図 1 に示したようになぞると，背骨の部分があばら骨の部分に対してくぼんで（凹んで）感じられる錯覚である．この 0.1mm のという表面形状は，人間の触知覚において物理的に盛り上がっていることを認知できるには不十分な高さであることが知られている[1].

筆者らの先行研究では，素手でこの表面パタンをなぞったときのヒト触知覚特性について報告していた[1]．素手で触れる場合には，垂直変位による皮膚変形だけでなく，せん断方向の変位入力が含まれる．このことは皮膚変位入力から皮膚変形に至るまでの数理モデルを複雑にしてしまう．

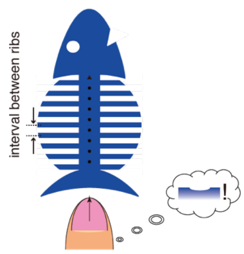


図 1. Fishbone Tactile Illusion が生じる形状例

そこで本研究では，筆者らが過去に提案した高密度ピンマトリクスと呼ばれる，皮膚変位入力を垂直方向に限る装置を利用し[2]，数理モデルの構築を容易にすることを考案した．次節では，具体的に行った心理実験について述べる．

4 心理実験

図 2a に，実験に使用した表面パタンを示す．背骨の幅は 4mm，あばら骨の幅（黒い部分）を 1mm に固定して，あばら骨の間隔を 9 種類（0.2，0.4，0.8，1.0，1.4，1.8，2.2，3.0，4.0mm）に変化させた表面パタンを用意した．

図 2b に実験に利用したピンマトリクスの概要を示す．直径 0.8mm の寸胴なピンを 1.0mm(PM1) もしくは 2.0mm 間隔 (PM2) で並べたものを用意した．ピン下端は半径 0.4mm の阪急形状をしており，原理的には 0.4mm までの形状変化に対して滑らかに上下動をすることができる．

実験参加者は，実験室に入った後に，アイマスクとノイズキャンセルヘッドフォンを装着し，視聴覚からの手がかりを遮断した．ノイズキャンセルヘッドフォンからホワイトノイズに混じってメトロノームのビート音（75bpm）が

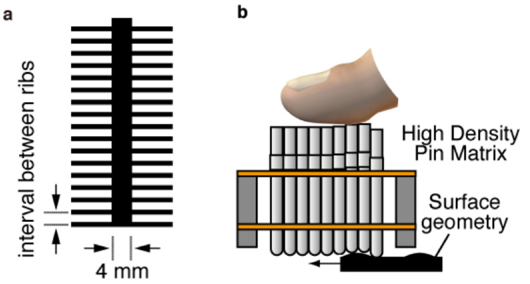


図 2. 心理実験で利用した実験刺激 **a** 実験で使用した表面パタンと **b** 高密度ピンマトリクス

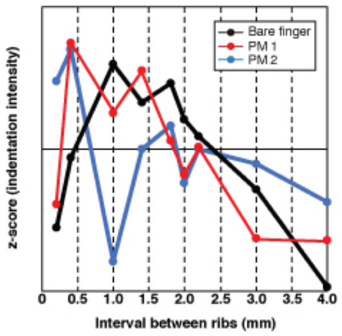


図 3. 心理実験の結果

聞こえており，実験者は実験参加者に２つのビート音の間に表面パタンをなぞり終わるような速度で手を動かすように指示した．

実験において，実験者は一対の実験刺激を提示し，実験参加者はそのどちらにおいて，より背骨がくぼんでいるかを回答した．実験者は 72 組み合わせを素手，PM1，PM2 のいずれかの条件で実験を実施した．

実験結果の一例を図 3 に示す．縦軸が大きいほど，その条件においてくぼんだと回答する頻度が高いことを示す．素手で触れる場合，あばら骨の間隔が広くなるにつれて，くぼむ頻度は高くなるが，あばら骨間隔 1.4mm を境に，くぼむ頻度が減ってゆくことがわかる．この傾向は PM1（赤線）でも同様である．一方で，PM2 では，あばら骨間隔が 1.0mm の場合には急激にくぼみを感じる頻度が低下した． このことは，あばら骨間隔が 1.0mm で PM2 越しに表面パタンに触れると，FTI が生じなくなったことを示す．

5 数理モデルの構築

前節で示した現象を説明する数理モデルの構築について述べる．感覚神経の応答についてはいくつかの数理モデルは提案されている．一方で，本研究の対象となる現象は，多点の機械刺

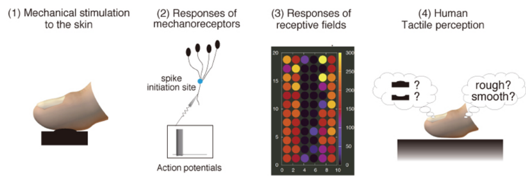
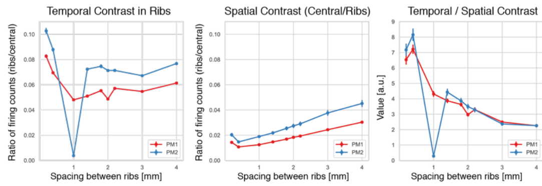


図 4. 数理モデルの概略



激入力を統合して，１つの形状知覚を生じるというものであり，先行研究で示されていた１感覚神経の応答モデルより現象は複雑である．

構築した数理モデルの概要を図 4 に示す．表面パタンから生じる皮膚変形を機械受容チャネルの挙動モデル[3]と機械受容器の応答モデルを組み合わせて記述した．その上で，４つの機械受容器から Hodgkin-Huxley モデル[4]を援用した機械受容野モデルを構築した．この機械受容野 72 個の時空間挙動を解析することで，図 3 に示す心理実験の結果の説明を試みた．

解析結果を図 5 に示す．前述の通り，表面パタンを素手で触れた場合には垂直・せん断応力の両方が皮膚変形を生じさせるため，表面パタンからの垂直変位のみを記述する PM1,2 の場合のみを検討した．図 5a には，神経発火の時間同期性をパラメータとしてプロットした．縦軸の値が小さいほど，受容野が時間同期して応答していることを示す．同図より，あばら骨間隔が 1.0mm 間隔の際に，PM1 と比較して PM2 を通してふれた場合の方が，受容野の時間同期が生じやすいことがわかる．一方で，図 5b には，あばら骨部・背骨のそれぞれの場所に位置する機械受容野の応答の比を示す．この図より，PM1,2 ともに，あばら骨間隔が大きくなるに比例して，あばら骨部の神経発火頻度が低下することが推察される．図 5c は，図 5a と図 5b の結果を元に，機械受容野の神経発火の時間同期度と空間分布を掛け合せた結果を示す．図 5c の結果より，PM2 では PM1 と比較して，あばら骨間隔が 1.0mm の場合で急激な計算値の低下が観測される．この結果は，図 3 の心理実験の結果をよく説明している．このことから，ヒト触知覚特

性は，指先に分布している機械受容野の空間応答分布だけでなく，機械受容野応答の時間位相も情報として利用していることが示唆される．

6 おわりに

本稿では，ヒト触覚の錯覚現象を説明する数理モデルを構築し，数値シミュレーション結果がヒト触知覚特性を確かに説明しうることを示した．今後は，新規の錯触覚現象も説明できるかを確認することで，構築した数理モデルの妥当性を検討してゆく．

謝辞　本研究は、JST さきがけ JPMJPR16D7 および JST CREST JPMJCR15D2 の助成を受けた．

参考文献

[1] Nakatani M. et al., Surface texture can bias tactile form perception, Exp Brain Res. 208(2011), 151-6.
[2] Nakatani M. et al., Tactile sensation with high-density pin-matrix, in: Proc. of APGV, p. 169, 2005.
[3] Prešern J. et al., A single mechanism driving both inactivation and adaptation in rapidly adapting currents of DRG neurons?, Biol Cybern. 110 (2016), 393-401.
[4] James Keener, James Sneyd, Mathematical Physiology, Springer-Verlag New York, 2009.

報告書『数理資本主義の時代』のご紹介

守谷学
経産省

概要

経産省と文科省が発行した報告書「数理資本主義の時代」について紹介する。

企業と数学

八丁地 園子
津田塾大学

概要

企業において、数学がどのように活用されるか、紹介いただく。

パネル討論 “数理資本主義の時代”

佐古 和恵[1], 守谷 学[2], 八丁地 園子[3], 若山 正人[4]
[1]NEC, [2]経産省, [3]津田塾大学, [4]九州大学

概要

パネルディスカッションを行います。パネリストだけでなく、会場の皆さんの討議への参加も歓迎いたします。

二重指数関数型数値積分公式の理論誤差評価の改善

岡山 友昭[1], 黒木 治世[2]
[1] 広島市立大学，[2] エネルギア・コミュニケーションズ
e-mail : okayama@hiroshima-cu.ac.jp

1 概要

二重指数関数型数値積分公式（DE 公式）は，定積分 $\int_a^b f(t)\,\mathrm{d}t$ を効率的に近似計算する方法として Takahasi–Mori [1] によって提案された．そのアイディアは，まず与えられた積分に二重指数関数型変換（DE 変換）と呼ばれる変数変換を適用し，被積分関数が二重指数関数的に減衰するような無限積分に変形した上で，打ち切った複合台形則を適用するというものである．用いる DE 変換をここでは $t = \phi(x)$ とすれば，

$$\int_a^b f(t)\,\mathrm{d}t = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi(x))\phi'(x)\,\mathrm{d}x \approx h \sum_{k=-M}^{N} f(\phi(kh))\phi'(kh)$$

と表される．ただし h，M，N はユーザーが与える n に対して適切に定める．様々なケースについてそれぞれ適切な DE 変換が提案されており，いずれも $\mathrm{O}(\exp(-cn/\log n))$ の収束速度が達成可能であることが示されている [2]．また，精度保証付き数値計算に有用な，近似誤差の上界も計算可能な形で評価されている [3, 4]．この評価のアイディアは，「離散化誤差」と「打ち切り誤差」と呼ばれる誤差に分けて評価することであるが，打ち切り誤差の評価に改善の余地があった．そこで本研究では打ち切り誤差の評価を改善し，結果としてより厳しい近似誤差の上界を与える．

2 既存定理と本研究の定理

まず，DE 変換後の被積分関数を想定した，次の関数空間を導入する．ただし $d > 0$ に対し，$\mathscr{D}_d$ は $\mathscr{D}_d = \{\zeta \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im}\zeta| < d\}$ で定める．

定義 1 L，α，β を正の定数とし，d は $0 < d < \pi/2$ を満たす定数とする．このとき，領域 $\mathscr{D}_d$ で解析的であって，任意の $\zeta \in \mathscr{D}_d$ に対し

$$|F(\zeta)| \leq L \frac{|\cosh\zeta|}{|1 + \mathrm{e}^{-\pi\sinh\zeta}|^{\alpha}|1 + \mathrm{e}^{\pi\sinh\zeta}|^{\beta}}$$

が成り立つような関数 F 全体を $\mathbf{L}_{L,\alpha,\beta}(\mathscr{D}_d)$ と定義する．

この定義のもとで，複合台形則の誤差は次のように評価されている．ただし $\gamma > 0$ に対し，x_γ は次式で定める：

$$x_\gamma = \begin{cases} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{1+\sqrt{1-(2\pi\gamma)^2}}{2\pi\gamma}\right) & (0 < \gamma < \frac{1}{2\pi}), \\ \operatorname{arcsinh}(1) & (\gamma \geq \frac{1}{2\pi}). \end{cases}$$

定理 2 (Okayama et al. [4, Theorem 5.3]) L，α，β を正の定数，d は $0 < d < \pi/2$ を満たす定数とし，$F \in \mathbf{L}_{L,\alpha,\beta}(\mathscr{D}_d)$ とする．このとき，$\mu = \min\{\alpha,\beta\}$，$\nu = \max\{\alpha,\beta\}$ とし，M と N を n に対し

$$\begin{cases} M = n,\, N = n - \lfloor\log(\beta/\alpha)\rfloor & (\text{if } \mu = \alpha), \\ N = n,\, M = n - \lfloor\log(\alpha/\beta)\rfloor & (\text{if } \mu = \beta), \end{cases}$$

で定め，h を

$$h = \frac{\log(4dn/\mu)}{n}$$

で定めると，$Mh \geq x_\alpha$ かつ $Nh \geq x_\beta$ を満たす任意の n に対し，次の評価が成り立つ：

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} F(x)\,\mathrm{d}x - h\sum_{k=-M}^{N} F(kh)\right| \leq \frac{2LC}{\pi\mu}\,\mathrm{e}^{-2\pi dn/\log(4dn/\mu)}.$$

ただし C は次式で定義される定数である：

$$C = \frac{2}{(1-\mathrm{e}^{-\pi\mu\,\mathrm{e}/2})\cos^{\alpha+\beta}(\frac{\pi}{2}\sin d)\cos d} + \mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\nu}.$$

それに対し，本研究では次の誤差評価を与えた．

定理 3 L，α，β を正の定数，d は $0 < d < \pi/2$ を満たす定数とし，$F \in \mathbf{L}_{L,\alpha,\beta}(\mathscr{D}_d)$ とする．このとき，$\mu = \min\{\alpha,\beta\}$ とし，M と N を n に対し

$$\begin{cases} M = n,\, N = \lceil\operatorname{arcsinh}(\frac{\alpha}{\beta}\sinh(nh))/h\rceil \\ \qquad\qquad (\text{if } \mu = \alpha), \\ N = n,\, M = \lceil\operatorname{arcsinh}(\frac{\beta}{\alpha}\sinh(nh))/h\rceil \\ \qquad\qquad (\text{if } \mu = \beta), \end{cases}$$

で定め，h を

$$h=\frac{\operatorname{arcsinh}(2dn/\mu)}{n}$$

で定めると，$Mh \geq x_\alpha$ かつ $Nh \geq x_\beta$ を満たす任意の n に対し，次の評価が成り立つ：

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} F(x)\,\mathrm{d}x - h\sum_{k=-M}^{N} F(kh)\right| \leq \frac{2L\tilde{C}}{\pi\mu}\,\mathrm{e}^{-2\pi dn/\operatorname{arcsinh}(2dn/\mu)}.$$

ただし $\tilde{C}$ は，$c=2\pi d/\operatorname{arcsinh}(2d/\mu)$ を用いて次式で定義される定数である：

$$\tilde{C}=\frac{2}{(1-\mathrm{e}^{-c})\cos^{\alpha+\beta}(\frac{\pi}{2}\sin d)\cos d}+\mathrm{e}^{c-2\pi d}.$$

3　既存定理と本研究の定理の比較

既存定理（定理 2）と本研究の定理（定理 3）で得られた誤差評価を比較すると，まず収束速度はそれぞれ n に対し $\mathrm{O}(\mathrm{e}^{-2\pi dn/\log(4dn/\mu)})$ と $\mathrm{O}(\mathrm{e}^{-2\pi dn/\operatorname{arcsinh}(2dn/\mu)})$ であり，これらは漸近的に等しい．

次に定数部分を $\alpha=\beta=1$，$d=1.5$（典型的なケース）で比較すると，C と $\tilde{C}$ の第 2 項が打ち切り誤差の評価に関する部分であるが，

$$\begin{array}{ll}(\text{既存定理}) & \mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\nu}\approx 4.810\\ (\text{本研究の定理}) & \mathrm{e}^{c-2\pi d}\approx 0.01438\end{array}$$

であり，意図した通り本研究の評価の方が小さいことがわかる．実用上は $\mu \leq 1$ のみで十分であることを踏まえると，$0.6 \leq d < \pi/2$ では $\mathrm{e}^{c-2\pi d} < 1 < \mathrm{e}^{\frac{\pi}{2}\nu}$ が成り立つので，d があまり小さくない場合は本研究の方が良い評価である．また C と $\tilde{C}$ の第 1 項が離散化誤差の評価に関する部分であるが，

$$\begin{array}{ll}(\text{既存定理}) & \dfrac{1}{1-\mathrm{e}^{-\pi\mu\,\mathrm{e}/2}}\approx 1.014\\ (\text{本研究の定理}) & \dfrac{1}{1-\mathrm{e}^{-c}}\approx 1.006\end{array}$$

であり，意図はしていなかったものの若干本研究の評価の方が小さいことがわかる．ただしこの部分の違いは（異なる d について調べても）わずかである．

一方，n の関数の部分を比較すると，

$$\mathrm{e}^{-2\pi dn/\log(4dn/\mu)} < \mathrm{e}^{-2\pi dn/\operatorname{arcsinh}(2dn/\mu)}$$

が成り立つので，既存定理の評価の方が小さい．ただしその差はわずかなものであり（$n=1$ で 0.0004169 程度），n が増大するにつれその差は小さくなる．よって，全体として本研究の評価の方が良いと考えられる．

4　数値実験

表 1 に，次の積分

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{t}(1-t)^{2/3}}\,\mathrm{d}t = B(1/2,1/3) \qquad (1)$$

に対して DE 公式（適切な DE 変換は $t=\{1+\tanh((\pi/2)\sinh x)\}/2$）を適用した結果を示す．この場合は定理 2 および定理 3 の条件を $\alpha=1/2$，$\beta=1/3$，$d=3/2$，$L=\pi$ で満たすので，これらの値を用いて計算を行った．定理 2 より定理 3 の誤差評価の方が小さいことがわかる．

表 1. 積分 (1) に対する DE 公式の誤差評価の比較．

n	8	12	16
定理 2	5.32e-03	1.50e-05	5.63e-08
定理 3	4.59e-03	1.30e-05	4.86e-08

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K14147 の助成を受けた．

参考文献

[1] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, *Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences*, Kyoto University, **9** (1974), 721–741.

[2] K. Tanaka, M. Sugihara, K. Murota and M. Mori, Function classes for double exponential integration formulas, *Numerische Mathematik*, **111** (2009), 631–655.

[3] T. Okayama, T. Matsuo and M. Sugihara, Error estimates with explicit constants for Sinc approximation, Sinc quadrature and Sinc indefinite integration, *Numerische Mathematik*, **124** (2013), 361–394.

[4] T. Okayama, Error estimates with explicit constants for Sinc quadrature and Sinc indefinite integration over infinite intervals, *Reliable Computing*, **19** (2013), 45–65.

Hénon 方程式の非対称解に対する精度保証付き数値計算

浅井 大晴 [1], 田中 一成 [2], 大石 進一 [2]
[1] 早稲田大学大学院 基幹理工学研究科, [2] 早稲田大学 理工学術院
e-mail : captino@fuji.waseda.jp

1 はじめに

Hénon 方程式は, 回転する天体の安定性に関して Hénon[1] が導出した有界領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N (N = 1, 2, 3)$ 上での Dirichlet 境界値問題

$$\begin{cases} -\Delta u = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x_0}|^l u^p & \text{in} \quad \Omega \\ u = 0 & \text{on} \quad \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

である. ここで, u は天体の密度を表し, $\boldsymbol{x}$ はその天体上の地点を表す. 特に, $\boldsymbol{x_0}$ は天体の中心を表す. また, パラメータ $2 \le p < p^*$(ただし, $N = 1, 2$ の時 $p^* = \infty$, $N = 3$ の時 $p^* = 5$) は polytropic 指数と呼ばれ, 天体の中心密度に関係し, その種類ごとに固有の値が決定される. パラメータ $l \ge -1$ は, 運動する天体の観測者の視線方向に沿った速度成分視線速度 (radial velocity) と視線方向に垂直な速度成分の接線速度 (transverse verocity) の比を表す.

特に $l = 0$, つまり視線方向に垂直な速度成分が 0 になり等速直線運動をする場合 Hénon 方程式は Emden 方程式 ($-\Delta u = u^p \quad \text{in} \quad \Omega$) と一致する. Emden 方程式は対称な凸領域の中心について 1 つの方向に非対称な解を持たないことが知られている. 一方で, l が大きい時, つまり接線速度の割合が大きい時 (これは, 天体が公転運動をすることを意味する), Hénon 方程式は対称性破壊分岐を生じ非対称解を持つ.

Emden 方程式は, 数学的にも重要な方程式と位置づけられ, その解に関する膨大な数の研究論文が存在する. 近年, Emden 方程式を一般化した Hénon 方程式についての数学的研究も盛んに行われている. 例えば [2] のようにパラメータ p を動かした時の分岐についての Emden 方程式で発見された方法を Hénon 方程式に応用させる研究などがある. パラメータ l を動かした時の分岐についての研究 [3],[4] もあるが, いずれも近似解の計算のみで, 真の解の存在を示したものではない.

本研究の目的は, $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ の領域で Hénon 方程式の非対称解の存在を示すことである. 特にパラメータ p は $p = 3$ で固定し, パラメータ l を動かした時の分岐構造の考察を行う.

2 精度保証付き数値計算の方法ついて

$H^1(\Omega)$ を Ω 上での 1 階の L^2-Sobolev 空間とし, $V := H^1_0(\Omega)$ を $H^1(\Omega)$ における $C^\infty_0(\Omega)$ の閉包とする. また, $V^* := H^{-1}(\Omega)$ を V の共役空間とする. 以下, $f(u) = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x_0}|^l u^p$ とおく.

まず, (1) を弱形式化して関数空間上の作用素方程式として解釈する. 即ち, 非線形作用素 $F : V \to V^*$ を

$$\langle F(u), v\rangle := (\nabla u, \nabla v)_{L^2} - \langle f(u), v\rangle, \forall v \in V$$

と定義し, 問題

$$\text{Find} \quad u \in V \text{ s.t. } F(u) = 0 \tag{2}$$

を考える. これに対して, Newton-Kantorovich の定理 [5] を適用する.

3 検証結果

近似解 $\hat{u}$ を Legendre 多項式による基底 [6] を用いて構成する. 基底の数を 30 とし, l が偶数の時の結果が以下である.

表 1. $l = 0$ の時の近似解と誤差上限

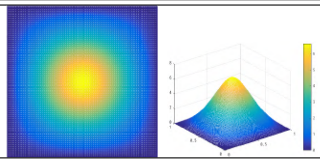
近似解のパターン	誤差上限
	0.17225e-4

表 2. $l = 2$ の時の近似解と誤差上限

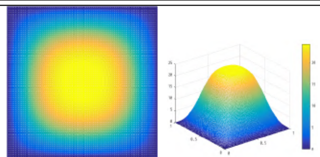
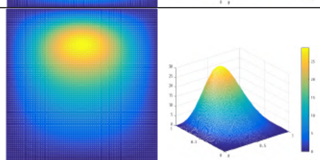
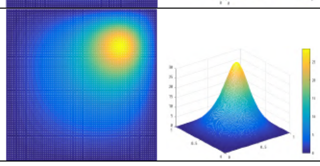
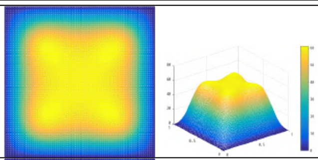
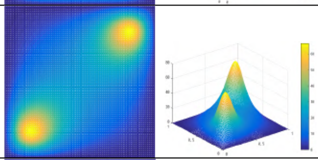
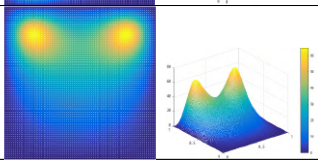
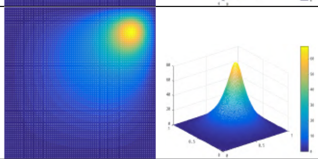
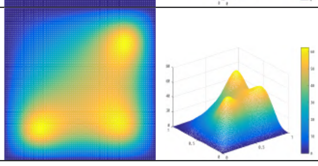
近似解のパターン	誤差上限
	0.59783e-4
	0.00310
	0.04086

表 3. $l = 4$ の時の近似解と誤差上限

近似解のパターン	誤差上限
	0.00308
	0.61634
	0.17156
	1.23234
	0.09283

このように特定の l について解の存在性が示されている. パラメータ l が大きくなるほど, より領域の端に u のピークが寄り, また解のトップが高くなる. そのため精度保証が困難となる.

4　分岐構造の考察

l を 0 から 8 まで動かし近似計算を行うことで図 1 のような近似解曲線が描ける. 特に, 分岐点は $l = 0.75, 2.5$ 付近にあると予想でき, 以下のような分岐構造であると予想できる.

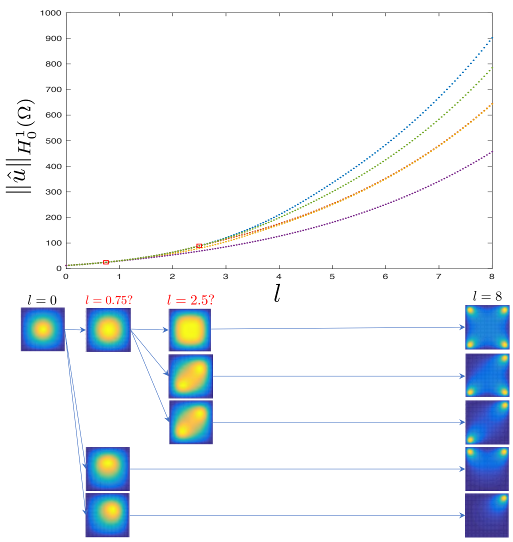


図 1. 解曲線と分岐点の予想

現時点では l が偶数以外の時, 領域の中心の特異性から精度保証付き数値積分の精度が極めて悪くなってしまう. 今後の課題は, その数値積分の改善をし, 正確な分岐構造を解明することである.

謝辞　本研究は CREST, JST, JPMJCR14D4, JSPS 科研費 19K14601, および公益財団法人みずほ学術振興財団の助成を受けたものである.

参考文献

[1] M.Hénon, Numerical Experiments on the Stability of Spherical stellar Systems. *Astronom Astrophys Lib*, 24: (1973), 229-238.

[2] Anna Lisa Amadori, Bifurcation and symmetry breaking for the Henon equation, *Advances in Differential Equations*, Vol19. (2014), 755-782.

[3] YANG ZhongHua, LI ZhaoXiang,ZHU HaiLong, Bifurcation method for solving multiple positive solutions to Henon equation, *Science in China press*, (2008), 2330-2342.

[4] Zhao-xiang Li, Zhong-hua Yang, Hailong Zhu,Bifurcation method for computing the multiple positive solutions to p-Henon equation , *Applied Mathematics and Computation*, (2013), 593-601.

[5] Deuflhard, P. and Heindl, G. Affine invariant convergence theorems for newton's method and extensions to related methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16(1)(1979), 1–10.

[6] Kimura, S. and Yamamoto, N. On explicit bounds in the error for the H_0^1-projection into piecewise polynomial spaces. *Bulletin of informatics and cybernetics*, 31(2)(1999), 109-115.

チェビシェフ級数を用いたタイムステッピングによる常微分方程式系の精度保証付き数値解法

船越 康太[1], 高安 亮紀[1]
[1] 筑波大学
e-mail : fkesys@gmail.com

1 背景

常微分方程式系の初期値問題の精度保証付き数値解法として，テイラー展開をベースにした Lohner 法 [1] (AWA)，Lohner 法の改良版 [2] (CAPD [3])，柏木による方法 [4, 5, 6] (kv ライブラリ [7])，Berz-Makino による方法 [8] (COSY) がある．一方で，スペクトル法をベースにし，ニュートン-カントロヴィッチの定理などを用いたもの [9, 10, 11] などがあり，とくに占部 [10]，大石 [11] の方法は最近のスペクトル法と相性が良い．そこで，本講演ではチェビシェフ級数を用いたタイムステッピングによる非線形常微分方程式系の初期値問題の精度保証付き数値解法を提案するとともに，既存手法と比較し，本手法の優位性と今後の課題を紹介する．

2 はじめに

本講演では以下の初期値問題を考える．

$$\frac{dx}{dt} = f(t,x), \quad x(0) = x_0, \quad t \in (0,h). \tag{1}$$

ここで

$$x(t), x_0 \in \mathbb{R}^n, \quad h > 0,$$

$$f(t,x) = \begin{bmatrix} f_1(t,x) \\ \vdots \\ f_n(t,x) \end{bmatrix},$$

$$f_i(t,x) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \quad i = 1, \ldots, n$$

である．

本研究の目的は，(1) 式の形で表された常微分方程式系に対する解の精度保証付き数値解法を与えることである．以下に手法の概要を示す．

時間区間を $J \stackrel{\text{def}}{=} (0,h)$，関数空間を $\mathcal{X} \stackrel{\text{def}}{=} C(J;\mathbb{R}^n)$ とする．

作用素 $\mathcal{F} : C^1(J;\mathbb{R}^n) \to \mathcal{X}$ を

$$(\mathcal{F}(x))(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dx}{dt} - f(t,x)$$

で定義すると，(1) 式の解は $\mathcal{F}(x) = 0$ を満たす．

いま $\tilde{x}$ をチェビシェフ級数を用いたスペクトル法で得られた数値解とすると

$$\tilde{x}_i(t) = \sum_{l=0}^{M-1} \tilde{x}_{l,i} T_l(t), \quad i = 1, \ldots, n \tag{2}$$

と与えられる．ここで

M : チェビシェフ多項式の項数,

$T_l(t)$: l 次 (第 1 種) チェビシェフ多項式

である．

作用素 $\mathcal{F}$ の簡易ニュートン写像 $\mathcal{T}$ を

$$(\mathcal{T}(x))(t) \stackrel{\text{def}}{=} x(t) - \mathcal{A}(\mathcal{F}(x))(t) \tag{3}$$

で定義する．

ここで，線形作用素 $\mathcal{A}$ は $\mathcal{F}$ の $\tilde{x}$ におけるフレシェ微分 $D\mathcal{F}(\tilde{x})$ を使った非斉次方程式の解写像で定義する．すなわち，$\mathcal{A}^\dagger \stackrel{\text{def}}{=} D\mathcal{F}(\tilde{x}) = \frac{d}{dt} - Df(\tilde{x})$ として，ある変数 $c \in C^1(J;\mathbb{R}^n)$ とベクトル値関数 $g \in \mathcal{X}$ に対する非斉次方程式

$$\mathcal{A}^\dagger c = g, \quad c(0) = c_0$$

の解を $c = \mathcal{A}g$ と与えるように $\mathcal{A}$ を設定する．このとき $\mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger = I$ である．

注意 1 簡易ニュートン写像 (3) 式の定義域は $D(\mathcal{F})$ のように思えるが，実際は $\mathcal{X}$ で定義される．なぜなら

$$\mathcal{T}(x) = x - \mathcal{A}\mathcal{F}(x) = \mathcal{A}(\mathcal{A}^\dagger x - \mathcal{F}(x))$$

となり，$\mathcal{A}^\dagger$ と $\mathcal{F}(x)$ にそれぞれ含まれる $\frac{d}{dt}$ 同士が打ち消しあうためである．また，$\mathcal{A}$ の定義より，$x^* \in \mathcal{X}$ が $\mathcal{T}$ の不動点となると，自動的に $D(\mathcal{F})$ の要素となり，$\mathcal{F}(x^*) = 0$ を満たす．すなわち，x^* は

$$\begin{aligned} x^* &= \mathcal{T}(x^*) = \mathcal{A}(\mathcal{A}^\dagger x^* - \mathcal{F}(x^*)) \\ \iff& \mathcal{A}^\dagger x^* = \mathcal{A}^\dagger x^* - \mathcal{F}(x^*), \quad x^*(0) = x_0 \\ \iff& \mathcal{F}(x^*) = 0, \quad x^*(0) = x_0 \end{aligned}$$

の解であり，$\mathcal{A}$ の定義から，$x^* \in D(\mathcal{F})$.

近似解 $\tilde{x}$ の近傍 $\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ を

$$\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x}) \overset{\text{def}}{=} \{\, x \in \mathcal{X} \mid \|x_i - \tilde{x}_i\| \le \gamma_i, \quad \gamma_i > 0 \,\}$$

で定義する．ただし，$\|x\| \overset{\text{def}}{=} \sup_{t \in J} |x(t)|$.

注意 2 $\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ は時間方向に延びた区間で表現される連続関数全体の部分集合であり，凸集合である．

簡易ニュートン写像 $\mathcal{T}$ が $\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ において縮小写像となることを示せば，バナッハの不動点定理より，$\mathcal{F}(x^*) = 0$ を満たす解，すなわち (1) 式の解が $\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ 内にただ 1 つ存在することになる．

3　主定理

簡易ニュートン写像 $\mathcal{T}$ が $\mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ に唯一の不動点を持つことを示す際に以下の定理を用いる．

定理 1 有界線形作用素 $\mathcal{A}$ を (1) 式の斉次線形化問題の解作用素とする．$\mathcal{F}$ が x に対して C^1-フレシェ微分可能とし，$\mathcal{AF} : \mathcal{X} \to \mathcal{X}$ とする．いま $\tilde{x} \in \mathcal{X}$ に対して

$$|(x(0) - \tilde{x}(0))_i| \le \varepsilon_i,$$
$$\|(\mathcal{AF}(\tilde{x}))_i\|_{\mathcal{X}} \le \mathcal{Y}_i$$

が成り立つとする．さらに，任意の $b, \zeta \in \mathcal{W}_\gamma(\tilde{x})$ に対して

$$\|[\mathcal{A}(D\mathcal{F}(b) - D\mathcal{F}(\tilde{x}))]_i \zeta\|_{\mathcal{L}(\mathcal{X})} \le \mathcal{Z}_i^\varepsilon(\gamma)$$

が成り立つとする．このとき

$$\mathcal{P}_i(\gamma) \overset{\text{def}}{=} \mathcal{Z}_i^\varepsilon(\gamma) - \gamma_i + \mathcal{Y}_i$$

に対し，$\mathcal{P}_i(\bar{\gamma}) \le 0$ となる $\bar{\gamma}_i > 0$ が存在すれば，$\mathcal{F}(x^*) = 0$ を満たす解 x^* が $\mathcal{W}_{\bar{\gamma}}(\tilde{x})$ 内に局所一意存在する．

謝辞　本研究はJSPS科研費18K13453，16H03950の助成を受けたものです．

参考文献

[1] R. J. Lohner, Enclosing the solutions of ordinary Initial and boundary value problems, In E. Kaucher, U. Kulisch and Ch. Ullrich (eds.), Computer Arithmetic, Scientific Computation and Programming Languages, B.G.Teubner, 255–286, 1987.

[2] P. Zgliczynski, C^1 Lohner algorithm, Found. Comput. Math. 2, 429–465, 2002.

[3] CAPD. *Computer Assisted Proof of Dynamics software.* http://capd.ii.uj.edu.pl.

[4] 柏木 啓一郎, 柏木雅英, 平均値形式とアフィン演算を用いた常微分方程式の精度保証法, 日本応用数理学会論文誌, 21(1), 37-58, 2011.

[5] M. Kashiwagi, S. Oishi, Numerical validation for ordinary differential equations - iterative method by power series arithmetic, Proc. 1994 Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA'94 Symposium, 1994.10.7), 243–246.

[6] M. Kashiwagi, Power series arithmetic and its application to numerical validation, Proc. 1995 International Symposium on Nonlinear Theory andits Applications (NOLTA'95 Symposium, 1995.12.10-14), 251–254.

[7] 柏木 雅英, kv – C++による精度保証付き数値計算ライブラリ. http://verifiedby.me/kv/, 2019.2.

[8] M. Berz, K. Makino, Verified integration of ODEs and flows using differential algebraic methods on high-order Taylor models, Reliab. Comput. 4, 361–369, 1998.

[9] J. -P. Lessard, Rigorous numerics for nonlinear differential equations using Chebyshev series, SIAM Journal on Numerical Analysis, 52(1), 1–22, 2014.

[10] M. Urabe, Galerkin's procedure for nonlinear periodic systems, Arch. Rat. Mech. Anal. 20, 120–152, 1965.

[11] S. Oishi, Numerical Verification of Existence and Inclusion of Solutions for Nonlinear Operator Equations, J. Computational and Applied Math., 60, Issues 1-2, 171–185 (1995).

BBM 方程式の高精度解法の比較

安田英典 [1]
[1] 城西大学理学部
e-mail : yasuda@math.josai.ac.jp

1　はじめに

BBM 方程式は孤立波のモデルの一つとして研究されてきたが [1]、元来、undular bore の発達のモデルとして導入されたものである [2]. BBM 方程式は以下の形をしている.

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}+\beta u\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{1}{\gamma^2}\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}$$

BBM 方程式が KdV 方程式と同じようにソリトンを持つかどうかは議論の対象となり、最終的には、高精度の数値シミュレーションを用いた研究によって、ソリトンではないという結果が得られた [3].
孤立波の衝突の計算のようなときは、現象に対して適切なメッシュサイズやタイムステップ幅を選択することができる．しかし、津波に関係する現象を計算するときには、長時間、広域にわたる計算を行うために、なるべく大きなタイムステップ、メッシュサイズが必要となる.
本発表では、BBM 方程式の高精度スキームについて、タイムステップ、メッシュサイズが大きな場合の挙動を検討する.

2　数値スキーム

時間方向の離散化として、$t^n, t^{n+1/2}, t^{n+1}$ のデータを用いる以下の４次精度の解法を用いる.

1) Runge-Kutta method (RK)
2) Lobatto method (L)
3) Crank-Nicolson method と Richardson extrapolation (CNR)

Runge-Kutta 法は 1/3 公式を用いた．陰的 Runge-Kutta 法である Lobatto 法については、Butcher によって提案された Lobatto III を用いた [4]. 次に、２つのタイムステップ幅 $\Delta t/2$, Δt の２次精度の Crank-Nicolson 法の計算結果をもとに Richardson 補外によって４次精度の解を求めた [5]。この手法は Gragg 法ともよばれる．３つの方法では順に陰的な性質が強くなっていく.

空間方向は以下の方法で対称に離散化される.

1) ４次精度の中心差分 (FDM)
2) GEM (Gregory-Euler-McLaurin) scheme (GEM)

GEM scheme は BBM 方程式のために開発された数値解法であり、孤立波がソリトンとなるか否かの研究に用いられた [3][6]．BBM 方程式は保存量は、KdV 方程式と異なり、３つである [7]．そのうちの１つは対称な離散化では保存される.

本発表では、RK-FDM, L-FDM, CNR-FDM の組み合わせと GEM scheme の検討を行った．なお、GEM scheme の時間積分には、Runge-Kutta 法と多段法が使われている [6] が、ここでは Runge-Kutta 法を用いる.

3　数値スキームの検討と改良

数値スキームの検討を、孤立波と undular bore 発達の計算によって行った．孤立波の計算では、RK-FDM と CNR-FDM の結果は一致したが、L-FDM はピークが高くなり波の形が歪んだ．また、空間メッシュサイズが大きいとき、GEM scheme において大きな位相誤差が生じた．このため、GEM scheme に対しては、Fromm の差分法と同様の手法で [8]、Gergory-Euler-McLaurin 展開の打ち切りの異なるスキームを用いて位相誤差の緩和を行った．改良されたスキームを a.GEM scheme とよぶ.
次に、undular bore の計算を行った．波のピークの位置は各スキームともほぼ一致した．ただし、L-FDM のピークはオーバーシュートした．なお、低次の Peregrine スキームは、４次精度のスキームと比べると第１波のピークの進行が遅れ、ピーク間の間隔も広くなった．タイムステップ幅を大きくすると、RK-FDM, CNR-FDM, a.GEM の第１波のピークはほぼ一致したが、第２波から差異が生じた．また、L-FDM は発散した.

4　数値実験

津波に関係する現象には、dispersion の寄与が大きいものがある [9]．ここでは、４次精度の

スキームを用いてdispersive shock wave（DSW）の数値実験を行った．初期条件はステップ関数、$u(x,0) = 0.2$, $(0 < x < 400)$, $u(x,0) = 0$, $(400 < x < 1600)$, メッシュ幅は $\Delta x = 1$. である．Fig.1 に $t = 50$ と $t = 150$ の計算結果を示す．タイムステップは RK-FDM, CNR-FDM, a.GEM は $\Delta t = 0.05$. L-FDM は $\Delta t = 0.01$ とした．L-FDM は $\Delta t = 0.05$ では過剰なオーバーシュートが生じた．

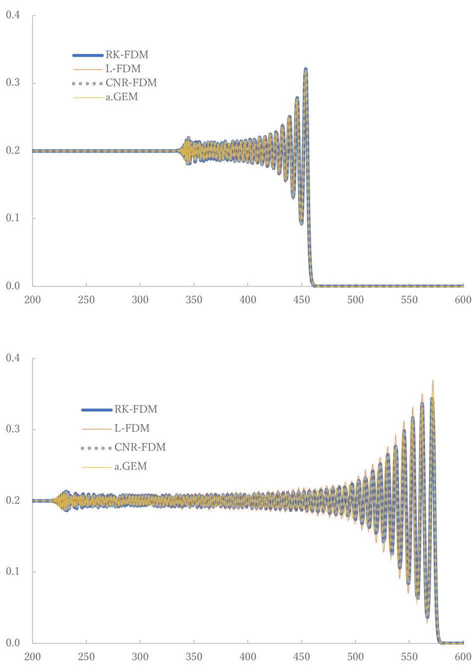


Fig.1 Dispersive Shock Wave

参考文献

[1] T.B. Benjamin, J.L. Bona and J.J. Mahony, Model equations for long waves in nonlinear dispersive systems. Phils. Trans. R. Soc. Lond. A., 286(1972), 47-78.

[2] D.H. Peregrine, Calculations of the development of an undular bore. J. Fluid Mech., 25 (1966), 321-330.

[3] J.L. Bona, W.G. Pritchard and L.R. Scott, Solitary-wave interaction. Phys. Fluids, 23 (1980) 438-441.

[4] J.C. Butcher, Implicit Ringe-Kutta processes. Math. Comput. 18(1964), 50-64.

[5] G.I. Marchuk and V.V. Shaidurov, Difference methods and their extrapolations. Springer-Verlag, 1983.

[6] J. L. Bona, W. G. Pritchard and L. R. Scott, An evaluation of a model equation for water waves. Phil. Trans. R. Soc. Lond., A 302(1981), 457-510.

[7] P.J. Olver, Euler operators and conservation laws of the BBM equation. Math. Proc. Camb. Phil. Soc., 85(1979), 143-160.

[8] J E. Fromm, A method for reducing dispersion in convective difference schemes. J. Comput. Phys., 3(1968) 176-189.

[9] P.A. Madsen, D.R. Furman and H.A. Schäffer, On the solitary wave paradigm for tsunamis. J. Geophys. Res., 113(2008), C12012.

二項モデルにおけるDPを用いた期待効用とPFPPを用いた期待効用の比較(II)

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 et al.(2019) [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．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，市場に各期の上昇率，下落率が各期の直前に分布に従って決まる二項モデルを想定し，多期間期待効用最大化問題を考える．PFPP と市場パラメータに分布を想定した場合での DP の満期での期待効用の比較を数値実験を通して行う．ここで DP で想定する分布は真の分布と異なる可能性がある．

2 可予測フォワードパフォーマンス過程

$(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}; \{\mathcal{F}_t\}_{t\geq 0})$ をフィルター付き確率空間とする．

定義 1 *([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，$n \geq 1$ に対して $U_n \in \mathcal{U}(\mathcal{F}_{n-1})$ を満たす．ただし，$\mathcal{U}(\mathcal{F}_{n-1})$ は $\mathcal{F}_{n-1}$ 可測な効用関数の集合である．

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，

$$U_{n-1}(X_{n-1}) \geq E_{\mathbb{P}}[U_n(X_n)|\mathcal{F}_{n-1}]$$

を満たす．ただし，$\mathcal{X}(0,x)$ は時刻 0 で x の富を持つときの許容可能な富過程の集合である．

3) 任意の初期資産 $x > 0$ に対して，

$$U_{n-1}\left(X^*_{n-1}\right) = E_{\mathbb{P}}[U_n(X^*_n)|\mathcal{F}_{n-1}]$$

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 2 *2)*，*3)* を合わせると，*PFPP* を得るには期間 $[t_{n-1}, t_n)$ において次の *1* 期間逆投資問題を解くことが求められる．

$$\operatorname*{ess\,sup}_{X_n \in \mathcal{A}_{n-1,n(x)}} E_{\mathbb{P}}[U_n(x + \pi_n \mu_n)|\mathcal{F}_{n-1}], \forall x > 0. \quad (1)$$

ただし，$\mathcal{A}_{n-1,n(x)}$ は許容可能な戦略の集合であるとする．

また，各期の上昇率，下落率が直前で決まる二項モデルに対して (1) を解いた結果が [1] で与えられている．

定理 3 *([1] の Theorem 4)*
$U_0, U_1 \in \mathcal{U}$ が *1* 期間最適化問題 (1) を満たす時，逆マージナル関数 I_0, I_1 は次の線形方程式で表される．

$$I_1(ay) + bI_1(y) = (1+b)I_0(cy); \quad y > 0. \quad (1)$$

ただし，$q = \frac{d}{u+d}$，$a = \frac{1-p}{p}\frac{q}{1-q}$，$b = \frac{1-q}{q}$，$c = \frac{1-p}{1-q}$．また p は u となる確率．

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．

3　べき効用の場合

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．

$$U_0(x)=\left(1-\frac{1}{\theta}\right)^{-1}x^{1-\frac{1}{\theta}};\quad x>0.$$

ただし，$1\neq\theta>0$，$\theta\neq-\log_a b$，$a,b,c>0$．また，安全資産の金利は 0 とし，i 期の上昇率を u_i，下落率を d_i とし，$\mathcal{F}_{i-1}$ 可測な i.i.d. 確率変数とする．

3.1　PFPP

PFPP においてこの場合，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．各時刻での効用関数 U_n は次で与えられる．

$$U_n(x)=U_0(x)\prod_{i=1}^{n}\delta(\theta,u_i,d_i,p)^{\frac{1}{\theta}},\ x>0.$$

ただし，$\delta(\theta,u,d,p):=\dfrac{1+b}{c^{\theta}(a^{-\theta}+b)}$.

またこのときの最適投資比率は，

$$\pi^*_{i,F}=\frac{\delta_i(\theta,u_i,d_i,p)\left(\frac{pd_i}{u_i+d_i}\right)^{\theta}-1}{u_i}$$

となる．

3.2　DP

DP において次の期待効用最大化問題を考える．

$$V_0(x,u,d,p)=\sup_{\pi}E\left[u_0\left(X_n^{(\pi)}\right)\right].$$

このとき，DP を用いると次のような表現を得る．

$$\begin{aligned}&V_0(x,u_1,d_1)\\&=\left(1-\tfrac{1}{\theta}\right)^{-1}x^{1-\frac{1}{\theta}}\\&\quad\cdot\left(p(1+\pi_1u_1)^{1-\frac{1}{\theta}}+(1-p)(1-\pi_1d_1)^{1-\frac{1}{\theta}}\right)\\&\quad\cdot\prod_{i=2}^{N}E_{\mathbb{P}}\left[p(1+\pi_iu_i)^{1-\frac{1}{\theta}}+(1-p)(1-\pi_id_i)^{1-\frac{1}{\theta}}\right].\end{aligned}\tag{2}$$

このときの最適投資比率は，

$$\pi^*_{i,B}=\frac{K_i-1}{u_i+K_id_i}\tag{3}$$

となる．ただし，$K_i:=\left(\dfrac{pu_i}{(1-p_i)d_i}\right)^{\theta}$.

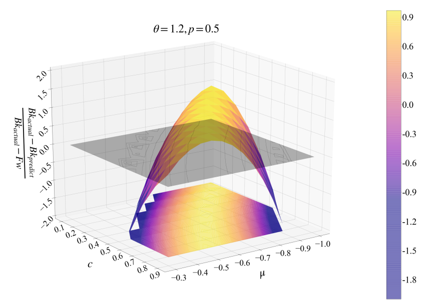
ここで戦略 (3) における u_i，d_i は直前で観測されるためパラメータの不確実性は入ってこない．一方，期待効用 (2) において将来の上昇率，下落率は確率変数であり分布絵お想定しないと期待値を求めることができない．しかし，ここで想定する分布を誤るリスクがある．

4　数値実験

今回の設定において，投資家は初期時刻において各時刻で i.i.d. な分布を想定するとし，u_i は対数正規分布，d_i は区間 $[0,1]$ の三角分布に従う確率変数であるとする．

$$\mu_i=\begin{cases}u_i\sim\log N(\mu,\sigma^2) & p\in(0,1)\\ d_i\sim\mathrm{Triangular}(0,c,1) & 1-p\end{cases}$$

このとき真の分布を $\mu_i=-0.95$，$\sigma^2=\frac{1}{4}^2$，$c=0.5$ とし，投資家の想定する分布を変化させることで，PFPP と DP の 10 期間における確実性等価の差について数値シミュレーションを通した比較を行う．



上図は，真の分布を用いたときの DP の確実性等価と DP で分布を見誤ったときの確実性等価の差を真の分布を用いたときの DP の確実性等価と PFPP の確実性等価の差の比である．この比を用いて，PFPP に対する DP のモデルリスクの大きさを考えていく．

参考文献

[1] B. Angoshtari, T. Zariphopoulou and X.Y. Zhou, Predictable Forward Performance Processes: The Binominal Case, arXiv:1611.04494v4, March, 20, 2019. 2.

Option Price under Exchangeable Binomial Model

赤堀 次郎 [1], 千葉 優 [2], 琉 佳勲 [1], 仙葉 雄基 [3]
[1] 立命館大学理工学部数理科学科, [2] 立命館大学大学院理工学研究科, [3] 滋賀県立甲南高等学校
e-mail : 5u9iiiiiii@gmail.com

1 はじめに

この研究の目的はパラメータがランダム化された二項分布での期待値でオプション価格が与えられるような二項モデルを特徴づけることである．ポリヤの壺がランダム化された二項分布を与えることはよく知られている．また，この事実は，パラメータを確率変数とみなすベイズ統計の一つの基礎となっている．離散モデルにおいて，パラメータのランダム化を与えるスキームは，一般にポリヤ型の強化スキームと呼ばれている．しかし，オプション価格の二項モデル (**Cox-Ross-Rubinstein** モデルと呼ばれる）においては，上向きの変化 u と下向きの変化 d だけでリスク中立確率が決まってしまうため，ポリヤの壺のように確率をコントロールすることはできない．

そこで次に述べるように上向き変化 $u_{r,w}$ と下向き変化 $d_{r,w}$ を設定し，これらを「うまく」選ぶことで強化スキームを実現することを目指す．

2 設定と主定理

以下では上向き変化 $\{u_{r,w}\}_{r,w=1}^{\infty}$ と下向き変化 $\{d_{r,w}\}_{r,w=1}^{\infty}$ の下での 2 項モデルを考察する．

$$
\begin{array}{cccccc}
 & & & \times u_{r+1,w} & S_{r+2,w} \\
 & & & \nearrow & \\
 & \times u_{r,w} & S_{r+1,w} & & \\
 & \nearrow & & \searrow & \\
 & & & \times d_{r+1,w} & S_{r+1,w+1} \\
S_{r,w} & & & & \parallel (*) \\
 & & & \times u_{r,w+1} & S_{r+1,w+1} \\
 & \searrow & & \nearrow & \\
 & \times d_{r,w} & S_{r,w+1} & & \\
 & & & \searrow & \\
 & & & d_{r,w+1} & S_{r,w+2}
\end{array}
$$

ただし, $(*)$ において再結合性を仮定する．さらに, 以下で定められるリスク中立確率

$$q_{r,w} := \frac{1-d_{r,w}}{u_{r,w}-d_{r,w}} \tag{1}$$

は次の式

$$q_{r,w}(1-q_{r+1,w}) = (1-q_{r,w})q_{r,w+1}, \quad q_{r,w} \in (0,1) \tag{2}$$

を満たすと仮定する．この仮定は本モデルにおけるリスク中立確率がポリヤの壺の確率の一般化となっていることを意味する．

ここで上で述べた再結合性について一つ注意をしておく．

補題 1 再結合性 $(*)$ は，$\alpha_{r,w} := u_{r,w} \cdot q_{r,w}$ が (2) と同じ関係式

$$\alpha_{r,w}(1-\alpha_{r+1,w}) = (1-\alpha_{r,w})\alpha_{r,w+1}, \quad \alpha_{r,w} \in (0,1) \tag{3}$$

をみたすことと同値である．

今までに仮定した交換可能性の条件 (2), もしくは (3) は次のような条件と同値であることを得た．以下の主張は [1] の中で既に指摘されていたものの, 完全な証明はなされていなかった．本研究ではその証明を完成させたので, 主定理として報告する．

定理 2 条件 (2)，または (3) が成り立つための必要十分条件はある確率測度 μ_q, $\mu_\alpha \in (0,1)$ が存在して，

$$q_{r,w} = \frac{\displaystyle\int_0^1 x^{r+1}(1-x)^w \mu_q(dx)}{\displaystyle\int_0^1 x^r(1-x)^w \mu_q(dx)} \tag{4}$$

かつ

$$\alpha_{r,w} = \frac{\displaystyle\int_0^1 x^{r+1}(1-x)^w \mu_\alpha(dx)}{\displaystyle\int_0^1 x^r(1-x)^w \mu_\alpha(dx)} \tag{5}$$

が成り立つ．つまり，(2), (3) のすべての解はそれぞれ (4), (5) で与えられる．

このとき, リスク資産の価格過程 $(S_t)_{t\geq 0}$ は次で与えられることが分かる．

定理 3 リスク資産の価格過程 $(S_t)_{t\geq 0}$ は，

$$S_{r,w} = S \cdot \frac{\displaystyle\int_0^1 x^{r+1}(1-x)^w \mu_\alpha(dx)}{\displaystyle\int_0^1 x^r(1-x)^w \mu_q(dx)} \qquad (6)$$

としたとき，$S_t = S_{R_t,W_t}$, $(t \geq 0)$ によって与えられる．ここで, $t \geq 0$ に対し R_t は時刻 t までに上向きの変化が起きた回数で W_t は下向きの変化が起きた回数である．

なお, この確率過程はリスク中立遷移確率 $q_{r,w}$ の下で, Cox-Ross-Rubinstein モデルの一般化となっていることに注意する．

3 主定理の証明の概略

以下, (2) と (4) の同値性の証明について概略を述べる．十分性については直接計算により容易に確認できるので, 以下必要性の証明の概略を述べる．まず 2 重数列 q が (2) の解であるとする．いま数列 $\{Q_r\}_{r=0}^{\infty}$ を $Q_0 = 1$ かつ, $r \geq 1$ に対して，

$$Q_r := q_{r-1,0} \dots q_{0,0} \in (0,1) \qquad (7)$$

と定義する．このとき，$\{Q_r\}_{r=0}^{\infty}$ が完全単調性をもつこと，つまり，任意の n, k について，

$$(-1)^k(\Delta^k Q)_n \geq 0 \qquad (8)$$

となることを示す．ただし，Δ は差分作用素である．このことは，数学的帰納法により証明することができる．

すると, Hausdorff のモーメント問題を援用すれば, 閉区間 $[0,1]$ 上の確率測度 μ が存在して,

$$Q_r = \int_0^1 x^r \mu(dx), \quad r \geq 0$$

を満たすようにできる．そうすれば簡単な計算によって

$$q_{r,w} = \frac{\displaystyle\int_0^1 x^{r+1}(1-x)^w \mu(dx)}{\displaystyle\int_0^1 x^r(1-x)^w \mu(dx)}$$

となることを示すことができる．以上の手続きによって, 主定理を証明することができる．

4 オプション価格のランダム化

一般に（我々のモデルを含む）2 項モデルでは，オプション価格はリスク中立確率の下での期待値で与えられる．オプションのペイオフが $f(R_t)$ と表される場合, Cox-Ross-Rubinstein モデルではオプション価格は

$$\begin{aligned}\pi_0(H) &= \sum_{k=0}^{n} f(k)P(X_n = k) \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(k)_n C_k q^k (1-q)^{n-k}\end{aligned}$$

とかける．ただし, q は

$$q = \frac{1-d}{u-d}, \quad 0 < d < 1 < u$$

で与えられるリスク中立確率である．

この話を我々のモデルに拡張しよう．すなわちオプション価格のランダム化は次のようにして与えられる: 上記と同様にオプションのペイオフが $f(R_t)$ と表される場合, オプションの価格 $\pi(H)$ は

$$\begin{aligned}\pi(H) &= \sum_{k=0}^{n} f(k)P(R_n = k) \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(k)\int_0^1 {}_nC_k x^k(1-x)^{n-k}\mu_q(dx)\end{aligned}$$

で与えられる．

参考文献

[1] 琉佳勲: 「ポリアの壺から生成される二項モデルについて」, 応用数理学会研究部会, 2019 年 3 月 4 日, 筑波大学.

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 II

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 (PDE) 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方法がよく知られている。昨年度 [1] は、本手法にて PDE を解く場合の弱点である微分係数の近似精度について二階微分を RBF で近似する方法を提案した。本講演では、これを数理ファイナンスへの応用を見据えてベンチマーク追尾型の確率制御問題に適用し、価値関数および最適戦略が安定的に得られた点について報告する。

2 確率制御問題

フィルター付き確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \{\mathcal{F}_t\}_{t\geq 0}, \mathbb{P})$ にて $\{W_t\}_{t\geq 0}$ を n 次元ブラウン運動として、以下の制御付き確率過程を考える。

$$\begin{cases} \dfrac{dX_t}{X_t} = \displaystyle\sum_{i=1}^n \pi_t^i \frac{dS_t^i}{S_t^i} + \left(1 - \sum_{i=1}^n \pi_t^i\right) \frac{dS_t^0}{S_t^0}, \\ \hfill \{\pi_t\}_{0\leq t\leq T} \in \mathcal{A}^{\bar{\pi}}, \\ X_0 = x_0 = s_0^0 + s_0^\top \mathbf{1}, \end{cases}$$

ここで、S は以下のダイナミクスで記述される確率過程である。

$$\begin{cases} \dfrac{dS_t^0}{S_t^0} = r(t)dt, \\ S_0^0 = s_0^0 > 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \dfrac{dS_t^i}{S_t^i} = b^i(t)dt \\ \qquad + \sum_{j=1}^n \sigma^{ij}(t) dW_t^j, \\ S_0^i = s_0^i > 0, \\ \qquad i = 1, 2, \cdots, n, \end{cases}$$

ただし、$\mathbf{1} = (1, \cdots, 1)^\top \in \mathbb{R}^n$、$r, : [0,T] \to \mathbb{R}$, $b : [0,T] \to \mathbb{R}^n$, $\sigma : [0,T] \to \mathbb{R}^{n\times n}$ は確定的関数、$T < \infty$ にて $b^i(t) - r(t) > 0$, $i \in \{1, 2, \cdots, n\}$, $t \in [0,T]$ を仮定する。

制御過程は $\pi = (\pi^1, \cdots, \pi^n)^\top$ であり、$\mathcal{A}$ を以下を満たす確率過程 $\{u_t\}_{0\leq t\leq T}$ の作るクラスとする。

1) $0 \leq u_t^i \leq 1$, $i = 1, 2, \cdots, n$.
2) $u_t^\top \mathbf{1} = 1$

パフォーマンス評価基準 J は確定的ベンチマーク関数 f と制御対象との下方二乗平均誤差により定義する：

$$\begin{aligned} & J_t^\pi(x) \\ & = \mathbb{E}\left[\alpha(f(T) - X_T)_+^2 \right. \\ & \quad \left. + (1-\alpha)\frac{1}{T}\int_t^T (f(s) - X_s)_+^2 ds \,\middle|\, X_t = x\right]. \end{aligned}$$

ただし、$\alpha > 0$ は最終時点でのトラッキングエラーと制御中の累積エラーに対するウェイト・パラメーター、$(x)_+ = x1_{\{x>0\}}$, $x \in \mathbb{R}$ である。

価値関数を

$$V_t(x) = \inf_{\pi\in\mathcal{A}} J_t^\pi(x),$$

により定義すれば、これは以下の Hamilton-Jacobi-Bellman(HJB) 方程式を満たす [2]。

$$\begin{aligned} & \partial_t V_t(x) + \min_{\pi\in\mathcal{A}} \{\mathscr{L}_t^\pi V_t(x)\} = 0, \qquad (1) \\ & V_T(x) = \alpha(f(T) - x)_+^2 \end{aligned}$$

ただし、$\mathscr{L}_t^\pi$ は確率過程 X の無限小生成作用素で $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対して

$$\begin{aligned} & \mathscr{L}_t^\pi \phi(x) \\ & \quad = \left(r(t) + (b(t) - r(t)\mathbf{1})^\top \pi\right) x\partial_x\phi(x) \\ & \qquad + \frac{1}{2}x^2\pi^\top\sigma(t)\sigma(t)^\top\pi\partial_{xx}\phi(x) \\ & \qquad + \frac{1-\alpha}{T}(f(t) - x)_+^2, \end{aligned}$$

である。この HJB 方程式を解くことで価値関数およびそれを実現する最適戦略が得られる。

3 カーネル関数による PDE 解法

上記の HJB 方程式 (1) は π に対する二次計画問題とみなすことができるがクラス $\mathcal{A}$ に課せられた条件により π を解析的に書き下すことは（V を含む形であっても）困難である。そこで、カーネル関数を用いた PDE 解法によりこれを求める。紙面の関係上、非常に大雑把な説明にはなるが $t_k = kh$, $k = 0, \cdots, n$, $h := T/n$, $\xi_j^k \in \mathbb{R}$, $\bar{x}_j \in \mathbb{R}$ として、偏微分方程式の解 V を

$$V_{t_k}(x) \simeq \sum_{j=1}^N \xi_j^k \Phi(x, \bar{x}_j)$$

により近似する方法である。計算方法の詳細は [3] 参照。ここで、$\Phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ がカーネル関数と呼ばれるものであるがここでは昨年度の結果より

$$\Phi(x, \bar{x}_j) = \frac{\left(-2\varepsilon^2 + (x - \bar{x}_j)^2\right)\sqrt{1 + \frac{(x-\bar{x}_j)^2}{\varepsilon}}}{6} + \frac{\varepsilon(x - \bar{x}_j)\sinh^{-1}\left(\frac{x-\bar{x}_j}{\varepsilon}\right)}{2}$$

とする。これは下記のように 2 階微分を multi-quadratic (MQ) RBF により近似していることに相当する：

$$\frac{\partial^2 V_{t_k}}{\partial x^2}(x) \simeq \sum_{j=1}^{N} \xi_j^k \sqrt{1 + \frac{(x - \bar{x}_j)^2}{\varepsilon^2}},$$

4 数値計算結果

トラッキング対象を線形関数

$$f(t) = 0.01t$$

とし、$\alpha = 0.5$ と設定した場合についての数値計算結果を示す。主要パラメーターは以下の通りである。

n	2	T	10.0
r	0.01	n	1200
b^1	0.01	N	26
b^2	0.05	$x_{\min}$	11.0
σ^{11}	0.01	$x_{\max}$	61.0
σ^{22}	0.03	ε	8
$\sigma^{12} = \sigma^{21}$	0.0095		

まず、価値関数の二階微分の計算結果を示す。通常のカーネル関数を用いた場合、計算結果が振動する傾向が見受けられるが二回積分形カーネル関数を用いた場合には安定的に解が得られていることが見て取れる。

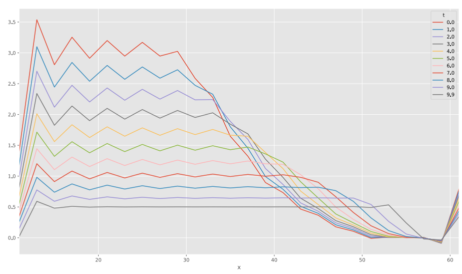


図 1. 二階微分計算結果（カーネル関数）

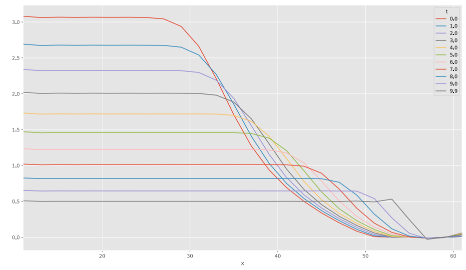


図 2. 二階微分計算結果（二回積分型カーネル関数）

次に、得られた最適戦略は以下の通りである．計算領域の殆どで青色で示された S^2 の選択が支配的に見えるが実際には x の小さい領域に達さないため S^1 も使用される点に注意しておく。（詳細は発表時に別グラフを示す。）

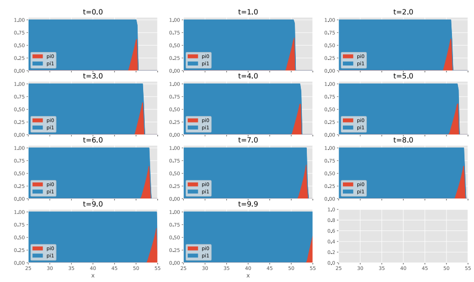


図 3. 最適戦略計算結果

5 免責事項

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。

参考文献

[1] 家田雅志. 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. In 日本応用数理学会 *2018* 年 年会, 2018.

[2] Huyên Pham. *Continuous-time stochastic control and optimization with financial applications*, volume 61. Springer Science & Business Media, 2009.

[3] Yumiharu Nakano. Convergence of meshfree collocation methods for fully nonlinear parabolic equations. *Numerische Mathematik*, 136(3):703–723, jul 2017.

バリア・オプションの Greeks の準解析的計算方法

石谷 謙介
首都大学東京 大学院理学研究科 数理科学専攻
e-mail : k-ishitani@tmu.ac.jp

1 はじめに

停止時刻を含むような滑らかではない Wiener 汎関数に対する微分連鎖律 [1],[2] を応用することで，ヨーロッパ型やルックバック型に加えて，アジア型等も含む一般的なペイオフ関数に複雑なトリガー条件 (トリガーが時間に応じて変化する等) が付随するバリア･オプションの Greeks を計算することが可能となる．

2 設定

区間 $[r_1, r_2]$ 上で定義された実数値連続関数の全体を $\mathcal{C}^{r_1,r_2} \equiv C([r_1, r_2])$ で表す．また 2 つの連続関数 $u, v \in \mathcal{C}^{r_1,r_2}$ が条件 $u(t) < v(t)$ $(t \in [r_1, r_2])$ を満たすとき，u, v の間に制限された経路 $x = \{x(t)\}_{t\in[r_1,r_2]} \in \mathcal{C}^{r_1,r_2}$ の全体を $\mathcal{C}^{r_1,r_2}\langle u, v\rangle$ で表す．

ここでは，ブラック･ショールズモデルを仮定し，満期 $T > 0$ までの原資産価格 $S = \{S_t\}_{0\le t\le T}$ は次の確率微分方程式に従うものとする．

$$\frac{dS_t}{S_t} = \mu dt + \sigma dw(t).$$

但し $S_0, \sigma > 0, \mu \in \mathbb{R}$ は定数，$w = \{w(t)\}_{t\in[0,T]}$ は確率空間 $(\mathcal{C}^{0,T}, \mathcal{B}(\mathcal{C}^{0,T}), P)$ で定義された 1 次元標準 Brown 運動とする．

次に，ノックアウトバリア・オプションのトリガー条件は，満期 T までの原資産価格に対する上下のトリガー曲線 $e^{G^\pm} = \{e^{G^\pm(t)}\}_{t\in[0,T]}$ で与えられ，ペイオフ関数は汎関数 $f : \mathcal{C}^{0,T} \to \mathbb{R}$ で与えられるとする．このとき，ノックアウトバリア・オプションの価格は次の期待値

$$\Phi := E^P[f(S)1_{\mathcal{C}^{0,T}\langle e^{G^-}, e^{G^+}\rangle}(S)]. \qquad (1)$$

として定式化できる．ここで，ノックアウト条項は $1_{\mathcal{C}^{0,T}\langle e^{G^-}, e^{G^+}\rangle}(S)$ を用いて表現した．

以上でノックアウトバリア・オプションの価格を定式化したが，以下では (1) 式を Brown 運動の視点で定式化し直す．まず，以下の関係式

$$1_{\mathcal{C}^{0,T}\langle e^{G^-}, e^{G^+}\rangle}(S) = 1_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g^-, g^+\rangle}(w) \qquad (2)$$

を満たす曲線 $g^\pm = \{g^\pm(t)\}_{t\in[0,T]}$ を求めると，

$$g^\pm(t) = \frac{G^\pm(t) - \log S_0 - \left(\mu - \frac{\sigma^2}{2}\right)t}{\sigma}, \qquad (3)$$

となるが，(2) 式より，$g^\pm$ は Brown 運動 w にとっての上下のトリガー曲線と見做せる．更に，上記のペイオフ関数も Brown 運動の汎関数

$$F(w) = f(\{e^{(\mu-\sigma^2/2)t+\sigma w(t)}\}_{0\le t\le T}), \qquad (4)$$

として表せるため，ノックアウトバリア・オプションの価格 (1) 式は，以下のように Wiener 汎関数積分として定式化し直すことができる．

$$\Phi = \int_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g^-, g^+\rangle} F(w)P(dw). \qquad (5)$$

以上の (5) 式を踏まえ，定理 1 では，ノックアウトバリア・オプションの Greeks を統一的に計算する上で必要となる Wiener 汎関数に対する微分連鎖律について紹介する．その際に，(5) 式は，その被積分関数 F に加えて，Brown 運動 w の上下の曲線 $g^\pm$ も σ，S_0 等のパラメータに依存することを考慮する．

3 結果

各 $r_1, r_2 \in [0, T]$ に対し $P_a^{r_1,r_2}(dw)$ は $w(r_1) = a$ を満たす $\mathcal{C}^{r_1,r_2}$ 上の 1 次元 Wiener 測度とする．

Λ は $\mathbb{R}$ の開集合とし，2 曲線 $g^\pm_{[\lambda]} : [0, T] \to \mathbb{R}$ と汎関数 $F_{[\lambda]} : \mathcal{C}^{0,T} \to \mathbb{R}$ は $\lambda \in \Lambda$ に依存し，それぞれ次の仮定を満たすものとする．

[g1] 各 $\lambda \in \Lambda$ に対し，以下が成立：

$$g^\pm_{[\lambda]} \in W^{1,2+}([0, T]) := \bigcup_{p>2} W^{1,p}([0, T]),$$

$$g^-_{[\lambda]}(t) < g^+_{[\lambda]}(t), \quad (t \in [0, T]).$$

[g2] 各 $t \in [0, T]$ に対し，$g^\pm_{[\cdot]}(t) := \{g^\pm_{[\lambda]}(t)\}_{\lambda\in\Lambda}$ は $\mathcal{C}^1(\Lambda)$ の元で，各 $\lambda \in \Lambda$ に対し $\frac{\partial}{\partial\lambda} g^\pm_{[\lambda]} := \{\frac{\partial}{\partial\lambda} g^\pm_{[\lambda]}(t)\}_{t\in[0,T]}$ は $W^{1,2+}([0, T])$ の元．

[F1] 各 $w \in \mathcal{C}^{0,T}$ に対し，$F_{[\cdot]}(w) := \{F_{[\lambda]}(w)\}_{\lambda\in\Lambda}$ は $\mathcal{C}^1(\Lambda)$ の元．

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

[F2] 各 $\lambda\in\Lambda$ に対し，$F_{[\lambda]}(\cdot)$ 及び $\frac{\partial}{\partial\lambda}F_{[\lambda]}(\cdot)$ は $\mathcal{C}^{0,T}$ で定義された有界連続関数．

以上の前提条件の下で，上下 2 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の間の経路に制限された Wiener 汎関数積分に対し，次の微分連鎖律が成立する [1], [2].

定理 1 $a\in\bigcap_{\lambda\in\Lambda}(g^-_{[\lambda]}(0),g^+_{[\lambda]}(0))$ とする．

$$\Phi_a(\lambda):=\int_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}\rangle}F_{[\lambda]}(w)P^{0,T}_a(dw)$$

は $\lambda\in\Lambda$ に関して微分可能であり，

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\Phi_a(\lambda)=I_a(\lambda)+B^+_a(\lambda)-B^-_a(\lambda), \tag{6}$$

が各 $\lambda\in\Lambda$ で成立する．但し，

$$I_a(\lambda)=\int_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}\rangle}\frac{\partial}{\partial\lambda}F_{[\lambda]}(w)P^{0,T}_a(dw),$$

$$B^{\pm}_a(\lambda)=\int_0^T\frac{\partial}{\partial\lambda}g^{\pm}_{[\lambda]}(r)\nu^{\pm}_a(r)\times E^{r,\pm}_a[F_{[\lambda]}(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})]dr,$$

であり，$B^{\pm}_a(\lambda)$ の右辺の $E^{r,\pm}_a$ は標本路

$$w=(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})\in\mathcal{C}^{0,r}\times\mathcal{C}^{r,T}$$

に対する直積確率測度

$$P^{0,r}_{a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)\otimes P^{r,T}_{g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot) \tag{7}$$

の下での $F_{[\lambda]}(w)=F_{[\lambda]}(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})$ の期待値を表すものとする．また，各 $r\in(0,T)$ に対し $\nu^{\pm}_a(r)$ は以下で定義する．

$$\begin{aligned}\nu^{\pm}_a(r):=&\frac{1}{2}p(r,a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r))\\&\times\bar{c}^{0,r}_{|a-g^{\pm}_{[\lambda]}(0)|,0;\pm}(g^{\pm}_{[\lambda]})\ \bar{d}^{r,T}_{\pm}(g^{\pm}_{[\lambda]})\\&\times P^{0,r}_{a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{\pm}_{[\lambda]},\pm}(\mathcal{C}^{0,r}_{\mp}\langle g^{\mp}_{[\lambda]}\rangle)\\&\times P^{r,T}_{g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{\pm}_{[\lambda]},\pm}(\mathcal{C}^{r,T}_{\mp}\langle g^{\mp}_{[\lambda]}\rangle).\end{aligned} \tag{8}$$

なお，(7) 式第 *1* 項目 $P^{0,r}_{a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)$ は，

$$\text{両端固定条件：}w(0)=a,\ \ w(r)=g^{\pm}_{[\lambda]}(r)$$

を満たし，$[0,r]$ 上で *2* 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の間を動くよう条件付けられた *3* 次元 *Bessel bridge* $w=\{w(t)\}_{t\in[0,r]}$ が定める $\mathcal{C}^{0,r}$ 上の確率測度である *[3]*. 一方，(7) 式の第 *2* 項目 $P^{r,T}_{g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)$ は，

$$\text{片側固定条件：}w(r)=g^{\pm}_{[\lambda]}(r)$$

を満たし，$[r,T]$ 上で *2* 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の間を動くよう条件付けた *Brownian meander* $w=\{w(t)\}_{t\in[r,T]}$ が定める $\mathcal{C}^{r,T}$ 上の確率測度である *[3]*.

$$P^{0,r}_{a,g^-_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)\otimes P^{r,T}_{g^-_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)$$

の下での標本路 $w=(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})$ と *2* 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の概念図は図 *1* の通りである．この図から，標本路 w は区間 $[0,T]$ 上で *2* 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の間を動き，時刻 r で一度だけ下方曲線 $g^-_{[\lambda]}$ に到達する様子が分かる．また (8) 式の $\nu^{\pm}_a(r)$ は，λ の瞬間的変化に伴い (7) 式に従う標本路 $w=(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})$ が実現する「*1* 次オーダーの無限小確率」と解釈できる．

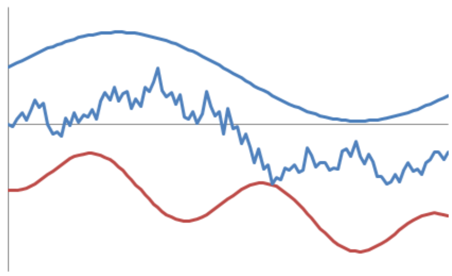


図 1. $P^{0,r}_{a,g^-_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)\otimes P^{r,T}_{g^-_{[\lambda]}(r);g^-_{[\lambda]},g^+_{[\lambda]}}(\cdot)$ の下での標本路 $w=(w|_{[0,r]},w|_{[r,T]})$ と 2 曲線 $g^{\pm}_{[\lambda]}$ の概念図

謝辞 本研究は，公益財団法人 全国銀行学術研究振興財団の助成を受けた．

参考文献

[1] 石谷謙介, Wiener 汎関数積分に対する微分連鎖律を用いたバリア・オプションの Greeks 計算方法, 学会誌「応用数理」, 27(2) (2017), 10–17.

[2] Ishitani, K., Computation of first-order Greeks for barrier options using chain rules for Wiener path integrals, Vol.9 (2017), 13–16.

[3] Funaki, T. and Ishitani, K., Integration by parts formulae for Wiener measures on a path space between two curves, Probability Theory and Related Fields, Vol.137 (2007), 289–321.

東京大学　大学院数理科学研究科　社会連携講座
「データサイエンスにおける数学イノベーション」が目指すもの

中川　淳一
東京大学大学院数理科学研究科
e-mail: junnaka@ms.u-tokyo.ac.jp

数学は社会の至るところに存在します。数学と製鉄業という一見意外な組み合わせのなかにも、数学を必要とする場面が多数あります。

数学は社会の至るところに存在します。数学と製鉄業という一見意外な組み合わせのなかにも、数学を必要とする場面が多数あります。

例えば、図１に示す高炉を事例に考えます。図 1-1 の高炉は、高さが約３５ｍ、内径が約１５ｍの巨大な反応容器で、焼結鉱とコークスを化学反応させて、溶銑と呼ばれる約１５００℃の溶けた鉄をとりだす工程です。高炉では、内部の状態を知りたいが直接計測が困難なため、炉底の煉瓦に埋設された熱電対の温度挙動が、非定常熱伝導方程式の解に可能な限り合致するように、煉瓦内面の伝熱状態を推定しています。ここでは、計測された結果から、その原因を特定する「逆問題」という数学手法を使います。熱電対で計測された図 1-2 の煉瓦温度の時系列データから、溶銑から煉瓦内壁面に流入する熱流束を計算すると、図 1-3 に示すように温度計測値を見ているだけでは識別困難な熱流束の変動量の差異が現れます。図 1-2 の温度計測値は、通常、煉瓦を保護している凝固相が溶解し煉瓦温度が上昇したため、高炉への空気供給を止め溶銑の製造を約１日間休止する「休風」という操作を何度も繰り返すことで、凝固相が安定的に再生成するようになった過程を示す貴重なデータです。グラフの破線が休風を実施したタイミングを示します。休風という系に与える外的刺激と熱流束の変動量の大きさの組み合わせが、系の安定性を示す重要な指標になることが判っています[1]。

高炉の伝熱逆問題で当初、変分法を主体とする工学的手法[2]を使用していました。工学的手法では、変分法を採用しており、初期条件は既知であることが前提になっています。しかし、高炉煉瓦内部の全体の温度分布は計測されていないため、適当に初期温度分布を設定し、設定した温度分布の不確かさに起因する計算誤差が熱拡散の効果で無視できる時間を経験的に判定し、それ以降の計算結果を採用していました。一方、数学的手法では、放物型偏微分方程式の初期条件と片側のノイマン型境界条件が未知で、もう一方の境界条件としてノイマン型およびディリクレ型境界条件の双方が、計測で与えられることを前提に、数学解析を行います。これにより、２種類の計測情報と２種類の未知変数の因果関係の数理的構造が明確になっているのが判ります [3]。

上述したことは、高炉の伝熱逆問題という具体的な課題に対し、数学を使い、抽象的枠組みのなかで問題をとらえることで、問題の根源を明らかにできることを示しています。これにより、高炉の伝熱逆問題という個別化された課題が、「温度と熱流束の時間変化を同時計測することで材料内部の温度情報を推定する技術」として、工学的手法の技術概念を再構築することができました。この技術概念は、赤外線サーモグラフィーを使った装置材料の非破壊診断技術に適用できます。赤外線サーモグラフィーとは、赤外線素子を用いて物体の表面温度分布を計測し画像化する装置で、産業界、医療現場等、さまざまな分野で使われており、近年、注目を集めている技術です。

図２は、数学者と企業研究者との課題解決型の連携で実績をあげてきたひとつのスタイルを示しています[4]。個々の数学者の才能を最大限発揮できるように、ひとつの課題に対し、複数のタスクフォースチームを並行して走らせ、各々の課題の性格に応じて、数学者のメンバーを柔軟に編成します。この連携の場は、課題解決だけでなく人材育成の役割を担っており、すべての中心にフィードバックが機能するコミュニケーションの場があります。現象の解釈方法、数学的なものの考え方、数学モデルの妥当性検証および精度検証等、さまざまな視点からのフィードバックを経て、数学モデルが完成します。数学モデルは、数学と製造現場のインターフェースの役割を担います。ここで、企業の課題解決のための数学モデルとは、製造現場で

起こっている現象の本質を、数学的に解釈する一連の「ものの考え方」の手続きであるといえます。既存の数学手法を単に持ってくるのではなく、数学者と企業研究者による議論を通じた共同の成果物であり、企業の課題解決に繋がるだけでなく、数学的にも新しい発見が生まれます。数学モデルの開発を通じ、数学者と企業研究者の相互理解が深まり、信頼関係ができあがるなか、数学者、企業人の双方の新たな才能が開花し、数学と社会のハブとなる人材が育っていくことを目指しています。

また、数学モデルは、現象理解の道標になり、関係者間での課題認識と情報共有を促し、課題解解決の多様なアイデアを引き出す役割を果たします。実際の現象を扱っている製造現場の人たちとモデルを共有し、共同で進化させていくことが、限られた時間のなかで最善の解を見出す方法だと考えています。そのためには、現象の本質を捉えているだけでなく、判り易さがモデルに求められ、数学活用の手腕が問われるところです。具体的な課題を普遍的なものに置き換え考えるという数学的思考の利点を現実世界で最大限発揮できるよう、 (1)数学により抽象化した枠組みのなかで現実世界の問題をとらえ問題の根源を明らかにすること、(2)数学により構築した枠組みをもとに既存の技術概念の再構築を図ること、(3)技術の出口をつくり技術の製造現場や社会への浸透を図りイノベーションに繋げること、これらが数学をコアにした課題解決型の連携の目指すものであるといえます。

2018年4月に、日本製鉄株式会社の出資により、東京大学大学院数科学研究科に社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」を開設しました。データサイエンスに焦点をあて、数学との関わりを明確にしながら、データ解析に関する数学理論の体系構築行うことを目標としています。同社会連携講座では、①既存の数学理論を背景に、産業ニーズに適合する新規手法を開発し、迅速な問題解決に導く共同研究と、②3年先以降の問題解決を想定し、世の中に無い理論を創出するための数学の問題設定を行い、一見応用とは無縁に思える純粋数学専攻の学生と若手教員が、実世界の問題に興味をもち、数学の専攻分野を超えた議論を行うとともに、諸科学・産業との連携を担える若手数学者の人材育成を目的とした 教育研究に取り組んでいます。

数学は普遍的であるがゆえに、個別の現象やデータに依存せずとも理論が成立し、中立を保つことができます。この中立性こそ、数学がイノベーションの源泉として、諸科学、工学、産業界に対し、Give & Given の課題解決型の新たな連携スタイルを構築できる大きな強みになるはずです。

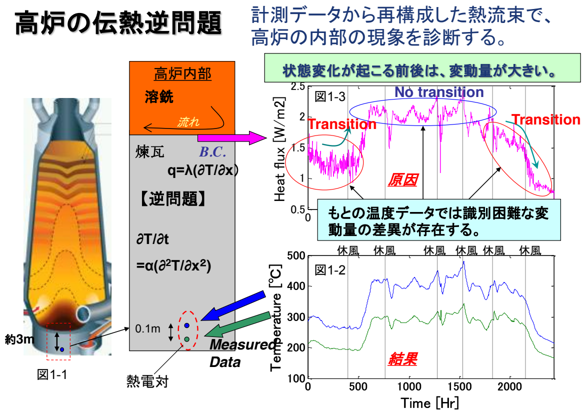


図1. 高炉への伝熱逆問題手法の適用事例

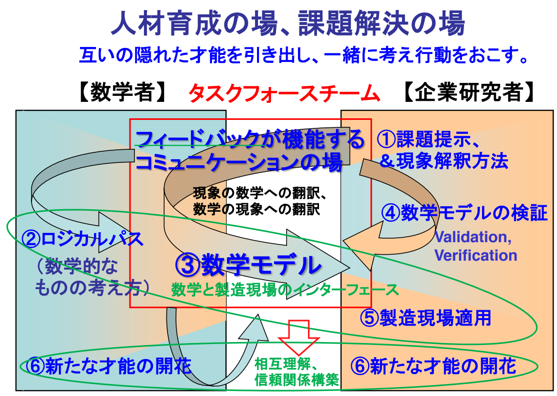


図2 数学者と企業研究者の連携スタイル

参考文献
[1] 中川淳一, 合原一幸, 信学論(A), Vol.J187-A, No.10, pp366-381 (2004)
[2]J. V. Beck, Int. J. Heat Mass Transfer, vol13, pp703-716 (1970)
[3]Y. Wang, J. Cheng, M. Yamamoto, J. Nakagawa, Inverse Problems in Science and Engineering, 18, pp.655-671 (2010)
[4] J. Nakagawa, M. Yamamoto, Educational Interfaces between Mathematics and Industry, Springer International Publishing Switzerland, pp.427-434 (2013)

離散非有限生成な全自己同型群をもつ滑らかな射影代数多様体の一構成

小木曽啓示 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : oguiso@ms.u-tokyo.ac.jp

1 概要-問題の定式化と主結果

V を滑らかな複素射影代数多様体とする。V は自然にコンパクト複素多様体であるが、逆に複素射影空間 $\mathbf{P}^N$ に閉部分多様体として埋め込むことのできる複素多様体は、滑らかな複素射影代数多様体である（Chow の定理）。やはり、Chow の定理により、V の双有理自己写像全体 $\mathrm{Bir}\,(V)$ 及び双正則自己写像全体 $\mathrm{Aut}\,(V)$ は V をコンパクト複素多様体と見たときの双有理型写像全体及び双正則写像と一致し、写像の合成に関して群をなす。

双正則写像 f にそのグラフ Γ_f を対応させることで、$\mathrm{Aut}\,(V)$ は $V \times V$ の閉部分多様体全体のなすスキーム $\mathrm{Hilb}\,(V \times V)$ の部分集合とみなせ、V の自己同型群 $\mathrm{Aut}\,(V)$ 全体には自然な局所ネーターな代数群構造が入る。その次元は、V の大域的正則ベクトル場全体 $H^0(V, T_V)$ の次元と一致する。$H^0(V, T_V) = \{0\}$ であるとき、$\mathrm{Aut}\,(V)$ は離散的であるという。$\mathrm{Aut}\,(V)$ が離散的でなければ、$\mathrm{Aut}\,(V)$ は有限生成群にはなりえない。

問題 1 $\mathrm{Aut}\,(V)$ は離散的ならば、有限生成か？
より一般に、商群 $\mathrm{Aut}\,(V)/\mathrm{Aut}^0\,(V)$ は有限生成か？

自然かつ基本的な問題であるが、意外にも否定的結果がえられたのはここ数年のことである ([1])。本講演の主定理は次であり、Dinh 氏との共同研究 [2] に基づく：

定理 2 任意の整数 $n \geq 2$ に対し、$\mathrm{Aut}\,(V)$ が離散的かつ非有限生成である滑らかな n 次元複素射影多様体 V がある。

Lesieutre 氏の結果 [1] は、$n = 6$ の場合の結果であり、問題 1 への最初の反例である。Lesieutre 氏の構成は我々の構成とは全く異なる。

2 既存の結果

V を n 次元の滑らかな射影代数多様体とする。Ω_V^1 を V の正則余接束（V の正則接束 T_V の双対束）とする。$K_V = \wedge^n \Omega_V^1$ と定め V の標準束という。また、$mK_V = K_V^{\otimes m}$（m は正整数）と書き、m 重標準束という。m 重標準束は代数幾何学においてもっとも大切な直線束である。V の自己同型は引き戻しにより、大域切断のなす複素ベクトル空間 $H^0(V, \Omega_V^1)$, $H^0(V, mK_V)$ に自然に（反変）作用する。より強く、V の自己双有理型写像も、$H^0(V, \Omega_V^1)$, $H^0(V, mK_V)$ に反変作用する。次（Deligne の定理）は非常に強力かつ有用な定理である（[2]）：

定理 3 滑らかな複素射影多様体 V に対し、

$$|\mathrm{Im}(\rho_m : \mathrm{Bir}\,(V) \to \mathrm{GL}(H^0(V, mK_V)))| < \infty$$

特に、線形系 $|mK_V|$(m はある正整数）が V の像への双有理写像になるならば、$\mathrm{Bir}\,(V)$ は有限群である。

滑らかな一次元射影代数多様体はコンパクトリーマン面に他ならない。

系 4 コンパクトリーマン面 V に対し、問題 *1* は肯定的である。特に、定理 *2* は次元に関して *optimal* である。

証明 種数 $g = 0$ のときは $V = \mathbf{P}^1$ であり $\mathrm{Aut}\,(V) = \mathrm{Aut}^0(V) = \mathrm{PGL}(2, \mathbf{C})$ である。$g = 1$ のときは、$V = \mathbf{C}/\Lambda$ (Λ は階数 2 の離散格子）であり、$\mathbf{C}$ はその不変被覆である。従って、安定化群 $\mathrm{Aut}\,(\mathbf{C}, \Lambda)$ の Λ による商群と一致する。具体的には、商群 $\mathbf{C}/\Lambda = V$ による有限巡回群による拡大になり、$\mathrm{Aut}^0(V) = V$ だから、やはり正しい。$g \geq 2$ の場合は、定理 3 により、$\mathrm{Aut}\,(V)$ は有限群であり、自明に正しい。（証明終）

V を複素射影曲面（滑らかな 2 次元複素射影多様体）とする。V は、標準束が自明で（複素多様体として）単連結であるとき、K3 曲面という。また、K3 曲面の位数 2 の自由商をエンリケス曲面という。$\mathbf{P}^2$ と双有理であるとき、V を有理曲面という。次がなりたつ。

定理 5 V を複素射影曲面とする。次の場合を除いて、問題 *1* は肯定的である。V は有理曲面、あるいは、*K3* 曲面と双有理な極小でない曲面、あるいはエンリケス曲面と双有理な極小でない曲面。ここで、極小でないとは、自己交点数が

-1 である $\mathbf{P}^1$（第一種例外曲線）を有することをいう。

（証明のあらすじ）曲面の分類定理、ホッジ指数定理と定理 3 を用いて、系 4 と同様の考え方で証明する。K3 曲面、エンリケス曲面、アーベル曲面の場合にはさらにトレリ型定理を用いて、$\mathbf{Q}$ 上定義された代数群の算術部分群の有限生成性 (Borel-Harish-Chandra の定理) に帰着させる。

系 6 $\mathrm{Aut}\,(V)$ が離散的かつ非有限生成である射影代数曲面 V があれば、任意の $n \geq 2$ に対し、$\mathrm{Aut}\,(W)$ が離散的かつ非有限生成である滑らかな n 次元複素射影多様体 W がある。

証明　$n \geq 3$ とする。X を K_X が射影埋め込みを与える滑らかな $n-2$ 次元射影代数多様体とする。例えば、滑らかな超曲面 $\subset \mathbf{P}^{n-1}$ で次数の高いものをとる。このとき $W = X \times V$ は全要請をみたす。何故なら、定理 5 の V の記述から、射影 $W \to X$ は $\mathrm{Aut}\,(W)$-不変とわかる。従って、射 $X \to \mathrm{Aut}\,(V)$ ができるが、後者は離散的だから、これは自明な射である。故に、$\mathrm{Aut}\,(W) = \mathrm{Aut}\,(X) \times \mathrm{Aut}\,(V)$ であるが、定理 3 より、$\mathrm{Aut}\,(X)$ は有限群だからである。（証明終）

従って、主定理は曲面の場合に帰着された。

3　曲面の場合の構成のアイデア

代数幾何学的に自然に表れる群の中で、最も単純な (可算）非有限生成群であると思われる次に帰着させる。その証明は自明であろう。

補題 7 $p \in \mathbf{P}^1$ とする。このとき、
$\{g \in \mathrm{Aut}\,(\mathbf{P}^1)\,|\,g(P) = P, g_*|_{T_{\mathbf{P}^1,P}} = id\} = (\mathbf{C}, +)$
であり、その加法部分群 $\langle 2^n\,|\,n \in \mathbf{Z}\rangle \subset (\mathbf{C}, +)$ は非有限生成群である。

S を K3 曲面で、$P \subset C = \mathbf{P}^1 \subset S$ であるものとする。以下 $\mathrm{Aut}\,(S, W_1)$ は $W_1 \subset S$ の安定化部分群、$\mathrm{Aut}\,(S, W_1, W_2) = \mathrm{Aut}\,(S, W_1) \cap \mathrm{Aut}\,(S, W_2)$ などとする。次を仮定する:

仮定 8 $\mathrm{Aut}\,(S, P) = \mathrm{Aut}, (S, C, P)$.

このとき、S を P で爆発させた曲面を S_1, 例外曲線 $E_P(\subset S_1)$ 上の 3 点 Q_1, Q_2, Q_3 で S_1 を爆発させた曲面を S_2 とする。構成から, $\mathrm{Aut}\,(S_2) = \{g \in \mathrm{Aut}\,(S, P)\,|\,g_*|_{T_{S,P}} = \alpha(g)id\}$ $(\alpha(g) \in \mathbf{C}^\times)$ とわかる。定理 3 より、$G := \{g \in \mathrm{Aut}\,(S, P)\,|\,g_*|_{T_{X,P}} = id\}$ は、$\mathrm{Aut}\,(S_2)$ の指数有限部分群であり、$f \mapsto f|_C$ は、群準同型写像 $\varphi : G \to (\mathbf{C}, +)$ を定める。

仮定 9 $\langle 2^n | n \in \mathbf{Z}\rangle \subset \varphi(G)$.

このとき G は非有限生成であることを示す。G が有限生成であれば $\varphi(G) \subset (\mathbf{C}, +)$ も有限生成である。$\varphi(G) \subset (\mathbf{C}, +)$ だから、$\varphi(G)$ はアーベル群でもある。故に、その部分群はすべて有限生成である。これは、仮定 9 より、$\varphi(G)$ が非有限性部分群 $\langle 2^n | n \in \mathbf{Z}\rangle$ を含むことに反する。G は非有限生成だから、G を有限指数部分群にもつ $\mathrm{Aut}\,(S_2)$ も非有限生成となる。

$A = \mathbf{C}^2/\Lambda$ を 2 次元トーラスで射影的であるとする。このとき、商曲面 $A/\langle -1_A\rangle$ は 16 点特異点を持つが、その極小特異点解消 $\mathrm{Km}\,(A)$ はクンマー曲面と呼ばれる $K3$ 曲面になる。次 ([2]) により、主定理の証明が完成する。

定理 10 E を $y^2 = x(x-1)(x-2)$ で定義される楕円曲線、F を E と同種でない楕円曲線とする。このとき、$S = \mathrm{Km}\,(E \times F)$ は仮定 *8, 9* をともにみたす $P \in C = \mathbf{P}^1 \subset S$ をもつ。

定理 10 の証明は [2]、更なる進展は、[4], [5] を参照してください。

参考文献

[1] Lesieutre, J., : *A projective variety with discrete non-finitely generated automorphism group*, Invent. Math. **212** (2018) 189–211.

[2] Dinh, T.-C., Oguiso, K., : *A surface with discrete and nonfinitely generated automorphism group*, Duke Math. J. **168** (2019) 941–966.

[3] Ueno, K., : *Classification theory of algebraic varieties and compact complex spaces.* Lecture Notes in Mathematics, **439**, Springer-Verlag, 1975.

[4] Oguiso, K., : *A surface in odd characteristic with discrete and non-finitely generated automorphism group*, arXiv:1901.01351.

[5] Keum J., Oguiso K., : *A surface birational to an Enriques surface with non-finitely generated automorphism group*, arXiv:1904.04451

space-time 境界要素法による 1 次元波動方程式の数値計算

森 理人 [1], 新納 和樹 [1], 西村 直志 [1]
[1] 京都大学
e-mail : mori@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 序論

熱方程式や波動方程式などの時間域における問題を扱う数値解法として，近年 space-time 法と呼ばれる方法が盛んに研究されている [1]. space-time 法では時間方向を空間座標に対する追加の軸のようにみなすことで空間方向と時間方向を同様に扱い時空間領域として問題の離散化を行うため，より柔軟な領域分割が可能となることから adaptive refinement が有効であると考えられている．本論文では，時間発展に伴い変形する領域において波動方程式を支配方程式とする内部 Dirichlet 問題を対象とし，対応する境界積分方程式を space-time 法を用いて数値的に解く方法について述べる．

2 波動方程式

本節では，本論文で扱う問題について述べ，その積分表現による定式化を行う．

時刻 t に依存する 1 次元空間上の単連結領域を $\Omega(t) \subset \mathbb{R}$ ，その境界を $\Gamma(t)$ とし，$Q = \Omega(t) \times (0,T), \Sigma = \Gamma(t) \times (0,T)$ とする．本論文では簡単のため，$\Omega(t) = (0, L+\alpha t)$, $L > 0$, $0 < \alpha < 1$ とし，$\{x = 0\} \times (0,T), \{x = L+\alpha t\} \times (0,T)$ をそれぞれ Σ_L, Σ_R と表すこととする．Q における波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) = 0, \tag{1}$$

Dirichlet 境界条件および初期条件

$$u(x,t) = \bar{u}(x,t),\ (x,t) \in \Gamma(t) \times (0,T) \tag{2}$$

$$u(x,0) = \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = 0,\ x \in \Omega(0) \tag{3}$$

を満たす関数 $u(x,t)$ を求める問題を考える．ここに $\bar{u}$ は与えられた関数とする．この問題に対応する境界積分方程式は

$$\begin{aligned}
&\int_\Sigma G(x-y,t-\tau)q(y,\tau)dS_{y,\tau} \\
&= \frac{1}{2}u(x,t) + \int_\Sigma \left(\frac{\partial G}{\partial y}(x-y,t-\tau)n_y(y,\tau)\right. \\
&\quad \left. -\frac{\partial G}{\partial \tau}(x-y,t-\tau)n_\tau(y,\tau)\right) u(y,\tau)dS_{y,\tau}
\end{aligned} \tag{4}$$

で与えられる．ただし，G は 1 次元波動方程式の時間域の基本解，$q(y,\tau) = n_y(y,\tau)\frac{\partial u}{\partial y}(y,\tau) - n_\tau(y,\tau)\frac{\partial u}{\partial \tau}(y,\tau)$ であり，$n_y(y,\tau), n_\tau(y,\tau)$ はそれぞれ積分点 $(y,\tau) \in \Sigma$ での Q に対する外向き単位法線ベクトルの x 成分と t 成分である．

一般に波動方程式に対する時間域積分方程式 (4) は安定性が保証されないことが知られている [2]．そこで式 (4) を変形し，安定な積分方程式を導出する．式 (4) の各層ポテンシャルを t で微分すると，

$$\dot{\mathcal{S}}f = \int_\Sigma \frac{\partial G}{\partial t}(x-y,t-\tau)f(y,\tau)dS_{y,\tau} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}f = \frac{1}{2}f(x,t) + \left(\int_{\Sigma_L} + \frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{1-\alpha}\int_{\Sigma_R}\right) \\
\times f(y,\tau)\left(\frac{\partial G}{\partial y}(x-y,t-\tau)n_y(y,\tau)\right. \\
\left. -\frac{\partial G}{\partial \tau}(x-y,t-\tau)n_\tau(y,\tau)\right)dS_{y,\tau}
\end{aligned} \tag{6}$$

で定義される積分作用素 $\dot{\mathcal{S}}, \mathcal{D}$ を用いて

$$\dot{\mathcal{S}}q = \mathcal{D}\frac{\partial u}{\partial m} \tag{7}$$

と表すことができ，式 (7) は安定であることが知られている [2]．ただし $\frac{\partial f}{\partial m}$ は関数 f の Σ 上での接線微分である．

3 space-time 法による離散化

本節では，space-time 法を用いた式 (7) の離散化の方法を示す．1次元の空間座標に時間軸を追加した 2 次元空間内の領域 Q の境界 Σ を適当なメッシュにより近似する．次にこのメッシュ上で定義される区分一定基底 ϕ_i で関数 $q, \frac{\partial u}{\partial m}$ を展開し, Galerkin 法を用いることで，

$$\sum_{j=1}^N q^j \int_\Sigma \phi_i \dot{\mathcal{S}}\phi_j dS_{xt} = \sum_{j=1}^N v^j \int_\Sigma \phi_i \mathcal{D}\phi_j dS_{xt} \tag{8}$$

を得る．ここで式 (8) に現れる積分を解析的に計算することで，式 (8) の代数方程式は $n \times n$ 行列 $\dot{S}_{ij}, D_{ij}$ を用いて

$$\sum_{j=1}^N \dot{S}_{ij}q^j = \sum_{j=1}^N D_{ij}v^j \tag{9}$$

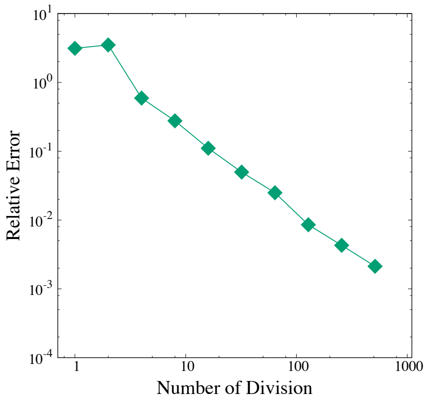


図 1. 分割数 N に対する相対誤差 $\varepsilon(q)$

と線形方程式の形で書くことができ，これを解くことで未知関数 q を数値的に求めることができる．

4　数値計算

この節では前節の結果を元に数値計算を行い，その結果を示す．
$L=1, \alpha=0.2$ とし， Dirichlet 境界条件

$$\bar{u}(0,t)=\begin{cases}1-\cos(t-1) & (t>1)\\ 0 & (t\leq 1)\end{cases} \tag{10}$$
$$\bar{u}(1+0.2t,t)=1-\cos(1.2t)\ (t>0)$$

を与える．このときの解析解は

$$u^*(x,t)=\begin{cases}1-\cos(t+x-1) & \\ & (t+x-1\geq 0)\\ 0 & (t+x-1<0)\end{cases} \tag{11}$$

である．これを $t\in(0,10)$ の範囲で式 (9) を用いて解き，数値的に得られた q^i に対して相対誤差の指標として

$$\varepsilon(q)=\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(q^i-q^*(x_i,t_i))^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}q^*(x_i,t_i)^2}} \tag{12}$$

を用いて評価した．ただし $q^*(x,t)=n_x\frac{\partial u^*}{\partial x}-n_t\frac{\partial u^*}{\partial t}$ である．また，Σ_L と Σ_R の分割数をそれぞれ N_L, N_R と表す．

はじめにすべての境界を一様な時間刻みで分割した場合の結果を示す．$N_L=N_R=N'$ とし， $N'=2^k, k=0,\cdots,9$ の 10 通りの分割数に対して相対誤差を計算した結果を図 1 に示す．領域の変形を伴う問題に対しても，分割数の増加に伴って相対誤差が減少していることが確認できる．

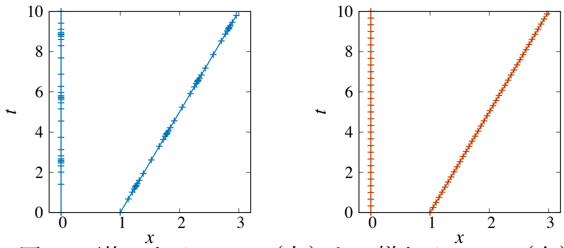


図 2. 不均一なメッシュ（左）と一様なメッシュ（右）

表 1. 不均一なメッシュと一様なメッシュを用いた場合の相対誤差

mesh type	$\varepsilon(q)$
non-uniform	1.3895×10^{-3}
uniform	6.5374×10^{-3}

次に，境界を分割する時間刻みが一定でない場合の結果を示す．$|\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}|$ の大きい部分が細かい分割になるような不均一なメッシュと，分割数が同じで各境界では刻み幅が一様なメッシュに対して数値計算を行った．2 つのメッシュを図 2 に示す．このときの分割数は $N_L=60, N_R=79$ である．この 2 つのメッシュによる相対誤差を有効数字 5 桁で表 1 に示す．不均一なメッシュを用いても安定に計算を行うことができ，一様なメッシュを使用した場合よりも精度が良くなっていることが確認できる．

5　結論

本論文では 1 次元領域における波動方程式の内部 Dirichlet 問題に対して space-time 境界要素法による数値計算を行った．その結果，領域の変形を伴う問題に対しても安定に解を得ることができることを示した．

今後の課題として，安定性の解析や並列化による計算時間の短縮，従来的な方法との計算時間の比較が挙げられる．また，多次元の波動方程式を支配方程式とする問題への space-time 境界要素法の適用も今後の課題である．

参考文献

[1] O. Steinbach, Space-Time Finite Element Methods for Parabolic Problems, CMAM, Vol. 15, Issue 4 (2015), 551-566.

[2] A. Bamberger and T. H. Duong, Formulation variationnelle espace-temps pour le calcul par potentiel retardé de la diffraction d'une onde acoustique (I), MMAS, Wiley, 8 (1) (1986), 405-435.

2 次元波動方程式の種々の時間域積分方程式による解法とその解の性質について

福原 美桜 [1], 三澤 亮太 [2], 新納 和樹 [1], 西村 直志 [1]
[1] 京大情報，[2] 京大工
e-mail : nchml@i.kyoto-u.ac.jp

1 序

境界積分法による波動方程式の時間域解法には安定性に関する懸念があり，変分法の系統や，Lubich の CQM を用いた解法には安定性の保証のあるものもあるが，工学的に最も一般的な時空の選点法を用いた解法の安定性は未だにあまりよく分かっていない (文献 [1] の文献 list 参照)．著者らは最近時間域の境界積分法の安定性を周波数域の積分作用素と Sakurai-Sukiura 法を用いて判定する方法を提案した [1]．本報では同じ方法を用いて，積分方程式の数値解の挙動に関する情報が得られること，及び精度の良い積分方程式を選択するための指針が得られることを示す．

2 問題設定

$D_2 \subset \mathbb{R}^2$ を有界領域とし，その境界 $\Gamma = \partial D_2$ は滑らかとする．また $D_1 = \mathbb{R}^2 \setminus \bar{D}_2$ とし，n を D_1 方向を向いた Γ の単位法線ベクトルとする．次の Dirichlet 問題を考える:

$$\Delta u - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad \text{in } D_1 \times (t > 0)$$
$$u = -u^{\mathrm{inc}} \quad \text{on } \Gamma \times (t > 0)$$
$$u|_{t=0} = \frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = 0 \quad \text{in } D_1$$

及び放射条件を満たす u を求める．ここに u^{inc} は与えられた関数であり，物理的には入射波を表す．

この問題を解くための典型的な境界積分方程式として次の 2 つが考えられる．

$$\dot{u}^{\mathrm{inc}}(x,t) - \dot{S}q(x,t) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u^{\mathrm{inc}}}{\partial n}(x,t) + \dot{u}^{\mathrm{inc}}(x,t) - (D^T)^{-}q(x,t) - \dot{S}q(x,t) = 0 \tag{2}$$

ここに，S は基本解 $G(x,t) = 1/(2\pi\sqrt{t^2 - |x|^2}_+)$ を核関数とする 1 重層ポテンシャルであり，$\dot{}$ は時間微分，$(D^T)^{-}$ は 1 重層の法線微分の内側極限，q(1 重層密度) は未知関数である．式 (2) は Burton-Miller の積分方程式と呼ばれる．

これらの積分方程式を選点法を用いて時間域の境界積分法で解く場合，

$$f(t) = \int_0^t K(t-s)v(s)\, ds \tag{3}$$

の形の方程式に帰着される．ここに，K は (1), (2) などの層ポテンシャルを空間方向に N 点の選点法で離散化したときに現れる $N \times N$ 行列値関数，f は u^{inc} によって定まる N-ベクトル値関数である．また，v は未知関数 q を空間方向に離散化して得られるベクトル値関数である．式 (3) を数値的に解くために，未知関数 $v(s)$ を時間方向の補間函数 $\phi_{\Delta t}(s)$ を用いて $v(s) \approx \sum_m \phi_{\Delta t}(s - m\Delta t)v_m$ $(v_m \in \mathbb{R}^N)$ と離散化し，式 (3) を時刻 $t = l\Delta t$ $(l = 1, 2, \cdots)$ に対して書き下せば，v_l に関する代数方程式が得られる．ここに，$\phi_{\Delta t}(t)$ は $\phi_{\Delta t}(k\Delta t) = \delta_{k0}$ を満たす基底函数，δ_{ij} は Kronecker のデルタである．これを，v_l について逐次解けば式 (3) の数値解が得られる．対応する斉次方程式が $v_m = e^{-i\Omega m\Delta t}v$ の形の非自明解を持つ条件から，この算法の安定性は次の固有値問題と関連づけられることがわかる: 次式を満たす非ゼロの解 $v \in \mathbb{C}^N$ が存在するような $\Omega \in \mathbb{C}$ を求めよ:

$$0 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Delta t}\hat{K}(\Omega_m)\hat{\phi}_{\Delta t}(\Omega_m)\, v \tag{4}$$

ここに，$\Omega_m = \Omega - \frac{2m\pi}{\Delta t}$ であり，$\hat{}$ は時間に関する Fourier 変換を表す．考える算法は (4) のすべての固有値 Ω(特性根と呼ぶ) が $\mathrm{Im}\,\Omega \le 0$ を満たすとき安定であり，ある特性根が $\mathrm{Im}\,\Omega > 0$ を満たすとき不安定である．式 (4) は周波数域の非線形固有値問題であり，これを数値的に解くためには一般には Sakurai-Sugiura Method (SSM) に代表される周回積分に基づいた方法が有効である．特に境界 Γ が (単位) 円の場合には，角度方向の変数に対して Fourier 級数を

用いることによって，(4) の非線形固有値問題は簡単になる．例えば (1) の場合，Ω は次式のゼロ点となる．

$$\sum_m i\Omega_m H_n^{(1)}(\Omega_m) J_n(\Omega_m) \hat{\phi}_{\Delta t}(\Omega_m) \qquad (5)$$

ここに，n ($|n| = 0, 1, 2, \cdots$) は Fourier 級数の次数，J，H は Bessel 関数，Hankel 関数である．

上記が (4) の通常の使い方であるが，本報では (4) が精度の良い積分方程式を選ぶために有用であることを示す．

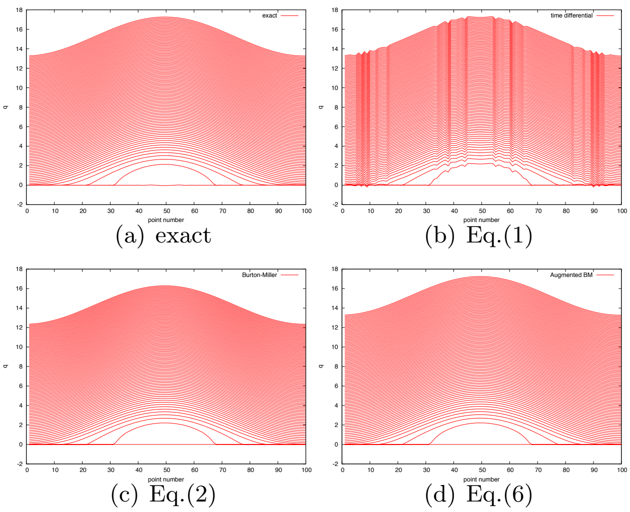
3 数値実験

領域 D_1 が単位円の外部であるとき，(1)，(2) を入射波

$$u^{\mathrm{inc}} = \begin{cases} 0 & (t - x_1 - t_0 \le 0) \\ \frac{(t-x_1-t_0)^2}{t-x_1-t_0+4\Delta t} & (t - x_1 - t_0 > 0), \end{cases}$$

の下で解く．ここに，$t_0 = 1+2\Delta t$ である．時間域の計算では空間方向に区分一定，時間方向に区分線形の基底関数を用い，(1)，(2) の積分方程式を時空共に選点法で離散化して解く．境界の分割は 100 要素とし，時間増分は $\Delta t = \frac{2\pi}{100}$，時間ステップ数は 1000 とした．

図 1 は考える問題の q の正解と，時間域の積分方程式を解いて求めた結果を 10 時間ステップごとに境界の接点番号 (角度変数と次式で対応; $\theta = -2\pi/100 \times$ (接点番号+1/2)) の関数としてプロットしたものである．



(a) exact (b) Eq.(1)
(c) Eq.(2) (d) Eq.(6)

図 1. Exact and numerical solutions of q vs point number.

図 1(b)，1(c) は，それぞれ (1)，(2) の解であり，図 1(a) に示した正解に比べると，それぞれジグザグ状のノイズが乗っている，時間依存の定数だけずれている等の問題があることがわかる．

以上の問題が生ずる原因を理解するため，まず，(5) より，(1) では全ての n に対して $\Omega = 0$ が特性根であることに注目する．このことは，メッシュ境界と波頭位置の不一致によって初期に避けがたく発生する高波数の誤差がいつまでも残ることを意味する．同様に，(2) では $n = 0$ に対して $\Omega = 0$ が特性根であることがわかり，誤差の一様成分が消滅しない傾向にあることが理解される．

上記の問題を解消するために，修正された Burton-Miller 方程式

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u^{\mathrm{inc}}}{\partial n}(x,t) + \dot{u}^{\mathrm{inc}}(x,t) + \alpha u^{\mathrm{inc}}(x,t) \\ &= (D^T)^{-} q(x,t) + \dot{S}q(x,t) + \alpha S q(x,t) \quad (6) \end{aligned}$$

を考える．ここに α は実定数である．これは複素数の結合定数を持つ周波数域の Burton-Miller 型積分方程式の時間域版と考えられる．式 (6) では $\Omega = 0$ は特性根ではないことが容易に示される．また，紙面の都合上省略するが，(6) の特性根を数値計算すると，確かに正の虚部を持つものはないことが確認される．式 (6) を解いた数値結果を図 1(d) に示す．この結果は図 1(a) と比較すると非常に良好であることがわかる．

なお，いくつかの標準的な積分方程式の数値解の精度が悪化する現象は transmission 問題においても現れ，やはり (4) に基づいた考察によって説明ができる．詳細は当日発表する．

謝辞 本研究は科学研究費 18H03251 の助成を受けている．

参考文献

[1] M. Fukuhara, R. Misawa, K. Niino, N. Nishimura. Boundary integral equation methods for the two dimensional wave equation in time domain revisited, arXiv:1902.06480, 2019, https://arxiv.org/abs/1902.06480.

ブロック反復法を用いた Characteristic Basis Function Method に関する一考察

田中 泰 [1,2], 新納 和樹 [1], 西村 直志 [1], 瀧川 道生 [2], 米田 尚史 [2], 宮下 裕章 [2]
[1] 京都大学大学院情報学研究科，[2] 三菱電機株式会社
e-mail : Tanaka.Tai@dh.MitsubishiElectric.co.jp

1 概要

レーダ断面積の角度特性や異なる励振方法に対するアレーアンテナの放射特性などの多方向入射界に対する散乱/放射界の計算を行うことがある．数値電磁界解析において最もよく用いられる解析方法であるモーメント法 (境界要素法)[1] を用いた場合，上記の問題の解析には以下の 2 通りが考えられる．1 つはブロック反復法を用いる方法である [2]．各方向の入射界毎に解析を行う通常の反復法に対して収束性が改善する可能性があるが，1 反復辺りの計算コストが方向数倍だけ増大する問題がある．もう 1 つは CBFM (Characteristic Basis Function Method) と呼ばれる方法である [3]．CBFM は領域分割型のモーメント法の一種で，分割された微小領域の電流から基底関数 CBF を生成する．CBF により離散化することで，モーメント法で一般的に用いられる RWG (Rao-Wilton-Glisson) 関数 [4] に比べて少ない未知数で，多方向の解を同時に得ることができる．しかし，散乱体が大きくなると必要となる CBF の数が増大し，未知数の低減効果がなくなる問題がある．本稿では，上記の問題を解決する方法として，CBFM とブロック反復法を併用する方法について述べる．

2 ブロック反復法を用いた CBFM

モーメント法において，積分方程式はガラーキン法を用いて以下のように表される [1].

$$ZI = V \tag{1}$$

ここで，$Z(\in \mathbb{C}^{N\times N})$ は N 個の RWG 関数を試行/展開関数とした積分方程式の係数行列，$V(\in \mathbb{C}^{N\times S})$ は入射界，そして I は求解される電流を表す．式 (1) の解析にはブロック反復法が用いられる．

次に同じ問題を CBFM によって解く場合を考える．散乱体の境界面を同サイズの領域で M 個に分割した際，領域 i の基底関数となる CBF$\tilde{J}_i^{(n)}$ は以下の式から計算される [5].

$$\tilde{J}_i^{(n)} = Z_{ii}^{-1}\left[V_i - \sum_{j\neq i}^{M} Z_{ij}\tilde{J}_j^{(n-1)}\right] \tag{2}$$

ここで，$Z_{ij}(\in \mathbb{C}^{N_i\times N_j})$ は領域 i(要素数 N_i) と j(要素数 N_j) の結合を表す係数行列，n は反復回数を表す．また，$V_i(\in \mathbb{C}^{N_i\times N_{\mathrm{P}}})$ は CBF 生成のための入射界である．この入射界は N_{P} 個の方向の平面波の集合であり，通常は $N_{\mathrm{P}} \leq S$ となる．本稿では，特異値分解を用いて CBF$\tilde{J}_i^{(n)}$ を直交化する [3]．以降，直交化後の CBF を J_i と定義する．

CBF から係数行列 $Z^{\mathrm{CBF}}(= \{< J_i, Z_{i,j}J_j >\}_{0\leq i,j\leq m-1})$ を計算する [3]．ここで，$< A, B >$ は A の複素共役 A^H と B の内積を表す．さらに領域 i の入射界 $V^{\mathrm{CBF}}(= \{< J_i, V_i >\}_{0\leq i\leq m-1})$ を用いて計算される行列方程式

$$Z^{\mathrm{CBF}}I^{\mathrm{CBF}} = V^{\mathrm{CBF}} \tag{3}$$

から I^{CBF} を求解することで，散乱体上の電流 $I(= \{I_i^{\mathrm{CBF}}J_i\}_{0\leq i\leq m-1})$ が求められる．先述の通り，CBF の数は RWG 関数に対して十分少ないため，式 (3) の求解に直接法を用いることができる．したがって，V が複数の入射界で与えられても，一度の求解で多方向に対応した電流を求めることが可能となる．

従来法において，大規模な解析ほど，CBF 生成に要する平面波の入射数 N_{P} が増加するため，Z^{CBF} の計算時間と計算機のメモリ使用量が問題となる．これは $\{Z_{ij}^{\mathrm{CBF}}\}_{i\neq j}$ は Z_{ij} を低ランクで近似できる，すなわちコンパクトな成分を良く表現できる一方，フルランクとなる特異的な成分 Z_{ii} を近似的に表すことが困難であることに起因する．そこで本稿では，N_{P} をある一定数に限定し，式 (3) の行列方程式を縮小し，さらにブロック反復法を用いる方法を提案する．式 (3) の求解ではコンパクトな成分に対する電流の特性を求めるために利用する．本解析により得られた電流を初期値として，さらに RWG

の次元においてブロック反復法で式 (1) を求解する．CBFM による解はコンパクトな成分を良く表現した値であるため，さらにブロック反復法で特異的な成分を取り込むことで，妥当な解が得られる．本方法を用いると，Z^{CBF} のサイズを低減されるため，メモリ使用量が抑圧できる．さらに，ブロック反復のみを用いた場合に比べて反復回数が低減されるため，計算時間，メモリ使用量の問題を同時に解決することが可能となる．

3　数値計算による検証

提案方法の妥当性を検証するため，図 3 に示す一辺の大きさが 5λ，厚さ 1λ の完全導体平板を解析する (λ は波長)．RWG 関数を定義する未知数，すなわち辺の数は 10977 である．さらに CBF を定義する領域サイズを一辺 1λ，積分方程式は完全導体の解析に一般的に用いられる CFIE (Combined Field Integral Equation)[1] とした．また，式 (1) の反復には，式 (2) と同様のブロック反復法を用いる．

$\phi = 0^\circ$ 座標面における範囲 $-90^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ における 1° 間隔，$\hat{\theta}$ 偏波のレーダ断面積を計算することでその精度を検証する．CBF 生成時の入射波は計算座標面と範囲は上記の同じ値であるが，間隔は 22.5°, 30°, 45° の 3 種，すなわち $N_{\mathrm{P}} = 16, 12, 8$ とした．

3 種の間隔を設定した場合の CBF の数はそれぞれ 576，864，1152 となり，角度間隔に応じて式 (3) で計算される行列方程式の数が圧縮される．係数行列 Z^{CBF} のサイズは CBF 数の二乗に比例するため，間隔 22.5° に対して 45° の係数行列は 1/4 倍の大きさとなる．

次に，ブロック反復法の収束性を評価する．図 3 は各間隔の CBF を用いた場合の残差ノルムの収束性を表している．比較対象として，CBF を用いない，すなわちブロック反復法のみを用いた解析結果 (Conventional) を示している．CBF の角度間隔が狭いほど初期値の精度が向上するため，反復回数が少なくなる傾向が見られる．間隔 45° の場合でも従来法に比べて反復回数を低減できているが，間隔を 30° にすればその回数が半分以下まで低減された．これらの解析結果より，提案手法はメモリ使用量削減の効果，および係数行列圧縮と反復回数削減による高速化の効果を両立可能であることがわかった．

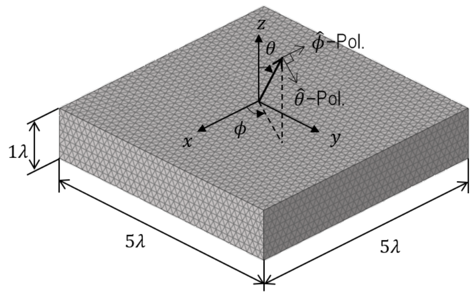


図 1. 導体平板

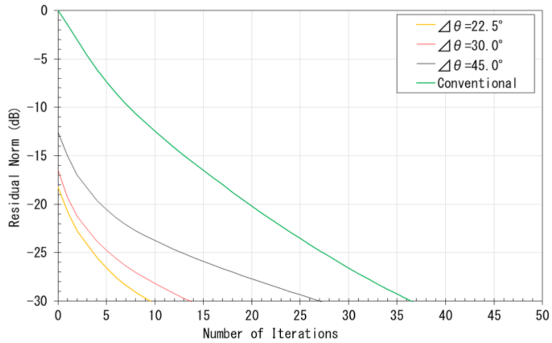


図 2. 収束性

4　結論

解析規模が大きい場合の CBFM として，CBF 数低減とブロック反復法を併用する方法について提案し，その有効性を確認した．

参考文献

[1] R. F. Harrington, Field Computation by Moment Methods, IEEE Press, 1993.

[2] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, SIAM: Philadelphia, 2003.

[3] R. Mittra and K. Du, Characteristic basis function method for iteration-free solution of large method of moments problems, PIER B, Vol.6 (2008), 307 – 336.

[4] S. Rao, D.Wilton, and A. Glisson, Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape, IEEE Trans. Antennas Propag., Vol. 30 (1982), 409 – 418.

[5] T. Tanaka, Y. Inasawa, Y. Nishioka, H. Miyashita, Improved Primary-Characteristic Basis Function Method Considering Higher-Order Multiple Scattering, IEICE Trans. Electron. vol.E100-C (2017), 45 - 51.

非圧縮性 Navier–Stokes 方程式に対する粒子法における安定化項の考察

井元 佑介 [1], 浅井 光輝 [2]
[1] 京都大学高等研究院，[2] 九州大学大学院工学研究院
e-mail： imoto.yusuke.4e@kyoto-u.ac.jp

1 概要

SPH 法や MPS 法に代表される偏微分方程式に対するメッシュフリー数値解法の一つである粒子法を考える．非圧縮性 Navier–Stokes 方程式に対する粒子法では，粒子密度に関する安定化項を圧力 Poisson 方程式の生成項に付加することで計算安定性や精度が改善される安定化粒子法が提案されている [1, 2]．しかしながら，その安定化粒子法のパラメータである安定化係数の最適値や有効な範囲については数値計算による考察しか行われていない．

そこで，本講演では空間離散化が安定化粒子法に対応する非圧縮性 Navier–Stokes 方程式の時間離散化スキームにおいて，非圧縮性条件と局所密度一定の条件に対する誤差評価を行う．さらに，その誤差の上限を最小化するという意味で最適な安定化係数を導く．

2 安定化粒子法

Ω をなめらかな境界 Γ を持つ $\mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ 上の有界領域とする．Ω および $T > 0$ に対して，$Q := \Omega \times (0, T)$ とする．支配方程式として以下の非圧縮性 Navier-Stokes 方程式を考える：

$$
\begin{cases}
\dfrac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t} = -\dfrac{1}{\rho}\nabla p + \nu\Delta u + f, & (x,t) \in Q, \\
\nabla \cdot u = 0, & (x,t) \in Q, \\
u = u_0, & x \in \Omega,\ t = 0, \\
u = u, & x \in \Gamma,\ t \in (0,T).
\end{cases}
\tag{1}
$$

ここに，$u : Q \to \mathbb{R}^d$, $p : Q \to \mathbb{R}$, $\rho > 0$, $\nu > 0$, $f : Q \to \mathbb{R}^d$, $u_0 : \Omega \to \mathbb{R}^d$, $u_\Gamma : \Gamma \times (0, T) \to \mathbb{R}^d$ はそれぞれ，流速，圧力，密度，動粘性係数，単位体積あたりの外力，初期流速，境界流速である．

離散化に必要な記号を導入する．τ は時間刻みとし，t^k を k ステップ目の時刻 $t^k := k\tau$ $(k = 0, 1, \ldots, K := \lfloor T/\tau \rfloor)$ とする．ここに，$\lfloor a \rfloor$ は a を超えない最大の整数である．T_τ を $T_\tau := \{t^k \mid k = 0, 1, \ldots, K\}$ とする．初期時刻の領域 Ω に N 個の点（粒子）が分布しているとする．x_i^k を時刻 t^k の i 番目の粒子とする．∇_h^k, $\nabla_h^k\cdot$, Δ_h^k をそれぞれ，時刻 t^k の粒子 x_i^k に基づく粒子法の近似勾配作用素，近似発散作用素，近似 Laplace 作用素とする．

安定化粒子法を導入する．粒子密度 ϱ_i^k を

$$
\varrho_i^k := \sum_{j=1}^{N} m_j w_h(|x_i^k - x_j^k|) \tag{2}
$$

と定める．ここに，m_j は各粒子における質量で，一般的には $m_j = \rho|\Omega|/N$ $(j = 1, 2, \ldots, N)$ と与える．w_h はサポート半径が h である非負の関数（重み関数）である．安定化粒子法では粒子 x_i^{k+1} における近似解 $(\mathrm{u}_i^{k+1}, \mathrm{p}_i^{k+1})$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ を次の手順で求める：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\widetilde{\mathrm{u}}_i^{*,k+1} - \mathrm{u}_i^k}{\tau} = \nu\Delta_h^k \mathrm{u}_i^k + f(x_i^k, t^k), \\
&\Delta_h^k \mathrm{p}_i^{k+1} = \frac{\rho}{\tau}\nabla_h^k \cdot \widetilde{\mathrm{u}}_i^{*,k+1} + \alpha\frac{\rho - \varrho_i^k}{\tau^2}, \\
&\frac{\mathrm{u}_i^{k+1} - \widetilde{\mathrm{u}}_i^{*,k+1}}{\tau} = -\frac{1}{\rho}\nabla_h^k \mathrm{p}_i^{k+1}.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

ここで，初期条件と境界条件は省略している．Poisson 方程式 (3) の右辺第二項は安定化粒子法で導入される安定化項で，α は $0 \leq \alpha \leq 1$ を満たす安定化係数である．

3 時間離散化スキームの誤差評価と安定化係数の最適化の検討

本節では，空間離散化が安定化粒子法に対応する，次の非圧縮性 Navier–Stokes 方程式 (1) の半陰的な射影法による時間離散化スキームを考える．

$$
\begin{aligned}
&\frac{u_\tau^{*,k+1} - u_\tau^k}{\tau} = \nu\Delta u_\tau^k + f^k, \\
&\Delta p_\tau^{k+1} = \frac{\rho}{\tau}\nabla \cdot u_\tau^{*,k+1} + \alpha\frac{\rho - \varrho_\tau^k(x)}{\tau^2}, \\
&\frac{u_\tau^{k+1} - u_\tau^{*,k+1}}{\tau} = -\frac{1}{\rho}\nabla p_\tau^{k+1}.
\end{aligned}
$$

ここに，$f^k(x) = f(x, t^k)$ である．また，ϱ_τ^k は空間離散化が粒子密度 (2) に対応する時刻 t^k に

おける局所密度関数であり，

$$\varrho_\tau^{k+1}(x) = \rho \int_\Omega w_h(|X_\tau^{k+1}(x) - X_\tau^{k+1}(y)|)dy,$$

$$X_\tau^{k+1}(x) = x + \tau u_\tau^{k+1}(x)$$

で定義される．

ここで，非圧縮性の条件および局所密度一定の条件に対する誤差を

$$E_{\mathrm{div}}^{k+1}(x) := \nabla \cdot u_\tau^{k+1}(x),$$
$$E_{\mathrm{dens}}^{k+1}(x) := \frac{\varrho_\tau^{k+1}(x) - \rho}{\rho}$$

と定める．さらに，ノルムを

$$\|\phi\|_{L^2(\Omega)} := \left\{ \int_\Omega \phi(x)^2 \mathrm{d}x \right\}^{1/2}$$
$$\|\phi\|_{L^2(\Omega;\ell^2(T_\tau))} := \left\{ \sum_{k=0}^{K} \tau \|\phi^k\|_{L^2(\Omega)} \right\}^{1/2},$$
$$\|\phi\|_{L^2(\Omega;\ell^\infty(T_\tau))} := \max_{k=0,1,\ldots,K} \|\phi^k\|_{L^2(\Omega)}$$

と定める．このとき，次の定理を得る．

定理 1 u_τ^k は Ω の境界外側に拡張可能で，その拡張関数が十分なめらかであるとする．このとき，u_τ^k にのみ依存する正定数 c が存在して，以下が成立する．

$$\|E_{\mathrm{div}}\|^2_{L^2(\Omega;\ell^2(T_\tau))} + \|E_{\mathrm{dens}}\|^2_{L^2(\Omega;\ell^\infty(T_\tau))} \le cM(\alpha;\tau)(h^2+\tau) \quad (4)$$

ここに，

$$M(\alpha;\tau) := \frac{\alpha^2-\alpha+1}{1-\alpha} + \frac{\alpha^2-\alpha+1}{\alpha}\tau$$

である．

定理 1 より，α_{opt} を

$$\alpha_{\mathrm{opt}} := \arg\min_{\alpha\in(0,1)} M(\alpha;\tau)$$

とすれば，α_{opt} は (4) の評価を α について最小化する．したがって，α_{opt} は (4) の評価を最小化するという意味で最適な安定化係数となる．α_{opt} は $0<\tau<1$ で一意であり，以下のように具体的に表示できる．

$$\alpha_{\mathrm{opt}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1+\gamma} - \frac{1}{2}\sqrt{2-\gamma-\frac{2(\tau+1)}{(\tau-1)\sqrt{1+\gamma}}}.$$
$$\gamma = \frac{2^{2/3}\tau^{1/3}}{(\tau-1)^{2/3}}$$

図-1 は $\tau \in [0,1]$ における α_{opt} のグラフである．α_{opt} は 1 より十分小さい正の値に分布していることがわかる．さらに，時間刻み τ と α_{opt} は正比例の関係であることがわかる．これらは，安定化粒子法における数値実験による経験則と一致している [1, 2]．

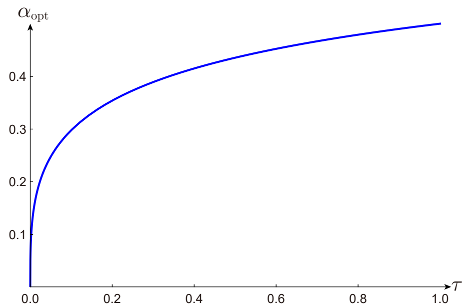


図 1. 時間刻み τ に対する α_{opt} のグラフ．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 17H02061, 17K17585, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（課題番号：jh180060-NAH）の助成支援を受けた．ここに記して謝意を表する．

参考文献

[1] M. Asai, A. M. Aly, Y. Sonoda, and Y. Sakai. A stabilized incompressible SPH method by relaxing the density invariance condition. *J. Appl. Math.*, 2012.

[2] Tanaka, M. and Masunaga, T.: Stabilization and smoothing of pressure in MPS method by quasi-compressibility, *J. Comput. Phys.*, Vol.229, No.11, pp.4279–4290, 2010.

素粒子物理学における Feynman 積分の数値計算

湯浅 富久子 [1], 石川 正 [1], 台坂 博 [2], 中里 直人 [3], Elise de Doncker[4]
[1] 高エネルギー加速器研究機構（KEK），[2] 一橋大学, [3] 会津大学, [4]Western Michigan University
e-mail：fukuko.yuasa@kek.jp

1 はじめに

2006 年に Feynman 図の数値計算において四倍精度でも良い精度で結果が得られない計算にであい，当時の共同研究者が開発する多倍長精度ライブラリを使用することで問題を解決できたことが始まりだった [1]．国内外に複数の多倍長ライブラリが存在することを知り [2]，ライブラリを開発する研究者とそれを必要とする応用分野の研究者が集まり知見を交換する場があればよいという動機から多倍長精度計算フォーラム [3] を開始し，2009 年 2 月 24 日に第一回研究会を開催した．その後フォーラムは，2013 年に開催された SC13 での BoF を含み計 5 回の研究会を開催し，2015 年より応用数理学会会員主催セッションへと発展的に解消となった．

講演では，契機となった Feynman 積分の数値計算法をあらためて紹介するとともに，多倍長精度計算の研究分野から受けた恩恵について述べる．

2 Feynman 積分の計算法

素粒子の電磁相互作用･弱い相互作用･強い相互作用を統一的に記述する「標準理論」が提唱されてから 50 年以上が経過した．この間,「標準理論」は世界中の高エネルギー加速器でさまざまな角度で検証されてきた．2012 年に LHC 加速器で Higgs 粒子が発見されてからは，一層詳細な検証が続けられている．

素粒子を記述する理論は，場の理論である．場の理論で一般的に使用されている方法に摂動法がある．摂動法はもともと天体力学で考案された手法であるが，場の理論においても，結合係数が小さい量子電磁力学および電弱理論では摂動法は良い近似法であり，高次輻射補正の計算に有効である．

場の理論における摂動法による計算は処方が確立しているが，高次の摂動項を含む場合にはループを有する Feynman 図が現れ Feynman 積分の取り扱いが必要となる．1 重ループの Feynman 積分は解析的に取り扱えるがループの数が増してくると困難性が高くなる．例えば，図 1 の 4 重ループの Feynman 図の計算では積分の次元が 10 となり，数値計算でないと取り扱いは極めて困難になる．そこで我々は，Feynman 積分を全てを数値的に取り扱う方法「直接計算法」を開発し，高次補正効果を精度よく求められるよう模索している．

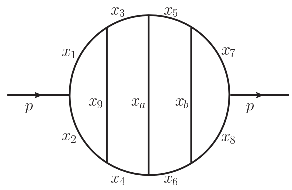


図 1. 4 重ループの Feynman 図

3 直接計算法

Feynman 積分は，Feynman パラメータ $\{x_r\}$ 表示では次のように与えられる．

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= (-1)^N \frac{\Gamma(N-nL/2)}{(4\pi)^{nL/2}} \times \\ &\quad \int_0^1 \prod_{r=1}^{N} dx_r \frac{\delta(1-\sum x_r)}{U^{n/2}(V-i\rho)^{N-nL/2}}, \\ V &= M^2 - \frac{W}{U},\ \ M^2 = \sum m_r^2 x_r\end{aligned}$$

N はループの内線の数，L はループの数である．n は時空の次元で，紫外・赤外発散のないときは $n=4$ としてよい．Feynman パラメータの多項式で与えられる U と W は Feynman 図のトポロジー，外線の運動量や内線の粒子の質量により決められる．内線の質量は M^2 に，外線の運動量は W に係数として含まれる．

紫外・赤外発散がない場合を例に直接計算法について簡単に述べる．Feynman 積分では，積分領域内で被積分関数の分母の V が 0 となる場合があり発散が現れる．この発散は，分母の V に挿入された無限小パラメータ $i\rho$ で回避することができるが，そのままでは積分を実行することは困難である．そこで，ρ を有限化し幾何級数的に変化させ，各 ρ 毎に数値積分を行ない，積分結果の数列 $\{\mathcal{I}(\rho)\}$ を得た後，$\lim_{\rho\to 0}\mathcal{I}$ の極限を外挿により求め，$\mathcal{I}$ を得る．すなわち，

我々の目指している直接計算法は，多次元数値積分と外挿法の組み合わせである．

現在直接計算法では，積分の次元数や被積分関数の振る舞いにより，i) dqag[s] routine in Quadpack[4]，ii) ParInt[5]， iii) 二重指数関数型数値積分公式（DE 公式）[6]，および iv) QMC using rank-1 lattice rule[7] の 4 つの数値積分法を使い分けている．

外挿法には，Wynn の ε 算法 [8] と線形加速法 [9] の 2 つを使用している．いずれにおいても，数値積分によって得られる数列の各要素が良い精度でないと最終的な結果は得られない．

4 課題への対応

N が大きい多重ループの Feynman 積分では，数値積分にかかる計算時間が長大化し直接計算法は実用性を失い「次元の呪い」にかかってしまう [10]．これを回避するために，並列化により高速化を実現している．また，多倍長精度積分計算を高速に計算する専用システム，GRAPE9-MPX の開発を進めている．このシステムは，再構成可能デバイス (FPGA) による専用アクセラレータとディレクティブ型のコンパイラ Goose からなり，四倍，六倍，八倍の精度での積分計算の高速計算を実現する [11]．近年には，OpenCL カーネルも生成するように Goose を拡張し，OpenCL 対応のデバイス（GPU など）も Feynman 積分に利用できるようになった．これをさらに拡張して，PEZY-SC2 チップを採用した並列コンピュータシステム睡蓮 2 でも Feynman 積分の計算が可能になっている [12]．

計算結果の検証も重要な課題である．我々は，多倍長精度計算での結果のチェック，複数の積分法による結果の比較，ゲージ不変性による数値のチェックなどを行っている．また，ヨーロッパの研究グループが開発する pySecDec[13] などと結果の比較を行なっている．

5 おわりに

2008 年 9 月に東大柏キャンパスで開催された応用数理学会で講演してから 10 年以上が経過した．この間に，利用可能な計算機の能力は飛躍的に進展した．過去には計算が困難であった多重ループの Feynman 図も完全に数値的な方法で取り扱えるようになってきた．しかしながら，電子（質量は 0.511×10^{-3}GeV）と Higgs 粒子（質量は 125.1Gev）のように質量差の大きい素粒子が同時に現れる Feynman 図について，十分余裕をもった精度で結果を得るためには，さらなる工夫と手法の模索が必要であることには変わりはない．今後も開発を継続し，性能を向上させていきたい．

謝辞 本研究の一部は，科研費（17K05428）および次世代領域研究開発（高性能汎用計算機高度利用事業費補助金）課題名「ヘテロジニアス・メニーコア計算機による大規模計算科学」の補助を受けている．

参考文献

[1] F. Yuasa, et al., PoS (ACAT) 087, 2007, https://pos.sissa.it/050/

[2] 例えば，exflib - extend precision floating-point arithmetic library, http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/

[3] 多倍長精度計算フォーラム，http://suchix.kek.jp/mpcomp/index_j.html

[4] R. Piessens, et al., QUADPACK, A Subroutine Package for Automatic Integration, Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag, 1983.

[5] http://www.cs.wmich.edu/parint

[6] 森正武，応用数理 8 巻 4 号 p.323-326, 1998 年 https://doi.org/10.11540/bjsiam.8.4_323

[7] I.H. Sloan, and S. Joe, Lattice Methods for Multiple Integration, Oxford University Press, 1994.

[8] P.Wynn, Math. Tables Automat. Computing 10 (1956) 91-96.

[9] 例えば dgefs.f, https://www.netlib.org/slatec/src/

[10] 手塚集，応用数理 8 巻 4 号 p.267-276, 1998 年 https://doi.org/10.11540/bjsiam.8.4_267

[11] H. Daisaka et al., Journal of Physics: Conference Series 1085(052004), doi:10.1088/1742-6596/1085/5/052004

[12] 中里直人 他，情報処理学会研究報告（IPSJ SIG Technical report），Vol. 2018-HPC-167 No.8 2018/12/17.

[13] https://github.com/mppmu/secdec

行列対数関数に対する二重指数関数型公式における積分区間の設定方法について

立岡 文理 [1], 曽我部 知広 [1], 宮武 勇登 [2], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻，[2] 大阪大学 サイバーメディアセンター
e-mail : f-tatsuoka@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

行列 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対して，方程式

$$\exp(X) = I + X + \frac{1}{2!}X^2 + \cdots = A \quad (1)$$

の解 X を行列 A の対数と呼ぶ．方程式 (1) は複数の解を持つが，その中でも，全ての固有値が集合 $\{z \in \mathbb{C} \colon |\operatorname{Im} z| < \pi\}$ に属する解を A の主対数と呼び，$\log(A)$ と表す．なお，A の全ての固有値が $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ に属するとき，$\log(A)$ は一意に存在することが知られており，本発表では A はこの条件を満たすとする．

行列対数関数は量子情報科学・量子力学・機械学習などの分野に現れる計算課題であり，その計算手法も研究されてきた．計算手法には Inverse scaling and squaring 法 [1] などがあるが，本研究では，$\log(A)$ の積分表示

$$\log(A) = \int_{-1}^{1} F(t)\,\mathrm{d}t\,, \quad (2)$$
$$F(t) \coloneqq (A - I)[(1+t)A + (1-t)I]^{-1}$$

に基づき，数値積分によって $\log(A)$ を計算する手法を考える．この手法の長所は，各積分点での被積分関数の計算が独立に行えるため並列化に向いている点と，$\log(A)$ を直接計算することなく行列関数–ベクトル積 $\log(A)\boldsymbol{b}$ ($\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^n$) を計算できる点である．一方で，積分 (2) の被積分関数は逆行列（あるいは線形方程式）の計算を含むため，所要演算量は積分点数に依存する．数値積分法は並列計算向きのアルゴリズムではあるが，計算資源の節約のために，積分公式を適切に選び少ない積分点数で計算することは重要であろう．

積分公式の選択肢の 1 つに Gauss–Legendre (GL) 求積が挙げられる．A が単位行列 I に近いときは，被積分関数が定数関数に近いため，高速な収束が期待される．その一方で，A が悪条件であるときは，積分区間の端点で被積分関数が急激に変化するため，GL 求積の収束性の悪化が懸念される．

そこで本研究では，端点特異性を有する積分に有効な二重指数関数型 (DE) 公式 [2] に着目する．DE 公式は与えられた積分に対して変数変換を行い，効率よく数値積分を行う手法である．ここでは，変換後の積分区間が $(-\infty, \infty)$ となり，変換後の被積分関数が二重指数的に減衰するような変換を用いることになっており，例えば $t(x) = \tanh(\sinh(x))$ が挙げられる．変換後の積分区間は無限区間となるが，被積分関数の減衰が非常に速いため，適切な有限区間の中で数値積分を行えば十分な精度が得られる．

実際の計算で DE 公式を用いるときの課題に，有限区間の設定方法が挙げられる．積分区間が狭すぎると計算結果が低精度となり，広すぎると数値積分の収束が遅くなるためである．これまでに，被積分関数がスカラー関数であるときの積分区間の設定方法が提案されたが [2]，行列の積分にこの手法を適用しようとすると複雑であり実用的でなく，積分 (2) に対応できる積分区間の設定方法が必要である．

そこで，本研究では打切誤差についての解析を行い，解析の結果を基に積分区間を決める方法を提案する．また，数値実験で提案手法の妥当性を確かめる．

2 誤差解析と積分区間の決め方

積分 (2) に対する DE 変換の適用により，

$$\log(A) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x\,,$$
$$F_{\mathrm{DE}}(x) \coloneqq t'(x)F(t(x)),$$
$$t(x) \coloneqq \tanh(\sinh(x))$$

が得られる．本節では，打切誤差の許容量 $\varepsilon > 0$ に対して

$$\left\| \log(A) - \int_{l}^{r} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \le \varepsilon \quad (3)$$

を満たすように積分区間 $[l, r]$ を決める手法を提案する．

積分区間の決め方の方針は以下のとおりである．まず，ノルムの三角不等式から

$$
\begin{aligned}
&\left\| \log(A) - \int_{l}^{r} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \\
&\le \left\| \int_{-\infty}^{l} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \\
&\quad + \left\| \int_{r}^{\infty} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \qquad (4)
\end{aligned}
$$

が得られる．そこで，式 (3) 左辺の代わりに，不等式 (4) 右辺のそれぞれの項の上界を見積もる．次に，与えられた ε に対してそれぞれの項の上界が $\varepsilon/2$ を超えないように l, r を決定する．

まず，不等式 (4) の上界を以下の命題に示す．

命題 1. 積分区間 $[l, r]$ に対して，

$$
a = \frac{\tanh(\sinh(l))}{2},\ b = \frac{\tanh(\sinh(r))}{2}
$$

とする．ここで，

$$
a \le \frac{1}{2\|A - I\|},\ b \ge \frac{1}{\|A^{-1}\|\|A - I\|}
$$

が満たされれば

$$
\begin{aligned}
&\left\| \log(A) - \int_{l}^{r} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \\
&\le \|A - I\|_2(1 + a) \\
&\quad + \|A^{-1}\|_2\|A - I\|_2(1 - b)
\end{aligned}
$$

が成り立つ．

次に，命題 1 に基づく積分区間の決定方法を以下の命題に示す．

命題 2. 誤差の許容量 ε は

$$
0 < \varepsilon < \min\left\{ \frac{4\|A^{-1}\|_2\|A - I\|_2}{|1 - \|A^{-1}\|_2|}, 2 \right\}
$$

を満たすとする．ここで，$l(\varepsilon), r(\varepsilon)$ を

$$
\begin{aligned}
l(\epsilon) &= \sinh^{-1}\left(\tanh^{-1}(a(\varepsilon))\right), \\
r(\epsilon) &= \sinh^{-1}\left(\tanh^{-1}(b(\varepsilon))\right)
\end{aligned}
$$

とする．ただし，

$$
\begin{aligned}
a(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon}{2\|A - I\|_2} - 1, \\
b(\varepsilon) &= 1 - \frac{\varepsilon}{2\|A^{-1}\|_2\|A - I\|_2}
\end{aligned}
$$

である．このとき，

$$
\left\| \log(A) - \int_{l(\epsilon)}^{r(\epsilon)} F_{\mathrm{DE}}(x)\,\mathrm{d}x \right\|_2 \le \varepsilon
$$

が成り立つ．

3 数値実験

本節では，誤差の許容量 ε を変えながら DE 公式を用いて $\log(A)$ を計算した結果を示し，命題 2 の妥当性を確かめる．ここでは，テスト行列としてサイズ 10 の Frank 行列（非対称行列）を用いた．また，被積分関数の計算で生じる丸め誤差の影響を避けるために多倍長演算を用いて数値実験を行なった．多倍長演算には Julia の BigFloat 型を用いた．実験結果を図 1 に示す．

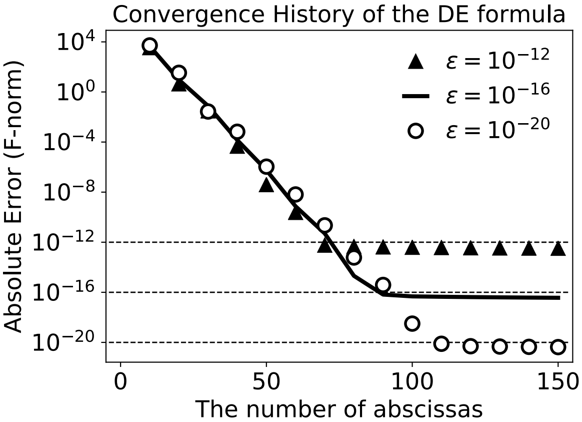


図 1. $\log(A)$ に対する DE 公式の誤差履歴.

図 1 より，ε に応じて区間の設定ができていることが確かめられた．

4 まとめ・今後の課題

本研究では，$\log(A)$ の計算のために DE 公式に着目し，打ち切り誤差の解析に基づく積分区間の設定方法を提案した．数値実験では，積分区間の設定が妥当であったことを確認した．今後の課題は DE 公式の収束性解析と実問題を用いた性能評価である．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18J22501，及び 18H05392 の助成を受けた．

参考文献

[1] A. H. Al-Mohy and N. J. Higham, Improved inverse scaling and squaring algorithms for the matrix logarithm, SIAM J. Sci. Comput. 34 (2012), C153–C169.

[2] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, Publ. Res. Inst. Math. Sci., 9 (1974), 721–741.

ユーザー側から見た多倍長精度数値計算環境の現在

幸谷 智紀 [1]
[1] 静岡理工科大学
e-mail : kouya.tomonori@sist.ac.jp

1 初めに

一般に，CPU や GPU 等，ハードウェアが直接サポートする浮動小数点数は IEEE754 半精度 (仮数部 2 進 11 ビット，binary16)，単精度 (仮数部 2 進 24 ビット, binary32) そして倍精度 (仮数部 2 進 53 ビット，binary64) が一般的である。これらより長い仮数部を持つ浮動小数点を用いる計算を多倍長 (精度) 数値計算と呼ぶ。桁落ちの激しい悪条件問題や高精度な近似解が必要となるケースでは古来様々な職人芸と共に育まれてきたが，現在では GNU MP(GMP)[1] の自然数演算カーネルを土台とした多数桁方式と，binary32 や binary64 を組み合わせて実装される無誤差変換技法を土台とする，QD[2] に代表されるマルチコンポーネント方式の多倍長精度浮動小数点演算ライブラリに集約されている。前者は任意長仮数部の浮動小数点数演算に向いており，後者はそれほど長くない固定桁仮数部で充分なケースに向いている。

現在でも多倍長計算はソフトウェアライブラリを用いて実行されることが多く，演算量もデータ量も多くなることから高速性が常に要求される。本講演では GMP の高速性，GMP に立脚した MPFR[3] とその派生ライブラリ，QD の機能について，ユーザ側の立場から見える特徴を簡単に紹介した後，高速性を追求するために有効であると思われる混合精度反復改良法，Strassen と Winograd の行列乗算アルゴリズム，そして初期誤差をフォローできる無誤差変換技法の応用について紹介する。

2 多数桁方式 vs. マルチコンポーネント方式

多倍長精度を実現するためには，既存のデータ型を複数組み合わせて仮数部長を長くする必要がある。そのための手法として，自然数演算を使用して多倍長精度浮動小数点演算を実装する方式を多数桁方式と呼び，既存の binary32 や binary64 を，符号部，指数部，仮数部全て 1 つのコンポーネントとして丸ごと利用して多倍長精度を実現する方式をマルチコンポーネント方式と呼ぶ。前者は整数演算で実装することが多いが，既存の浮動小数点型の仮数部だけを使用しても実装可能なので，ベースとなる既存のデータ型だけではどちらの方式なのかを判断することはできない。また，マルチコンポーネント方式では固定桁による実装しかできないわけでもなく，CAMPARY[4] のように CPU, GPU どちらの環境でも可変精度を実現できるようなライブラリも登場している。

ここでは，多数桁方式の代表的な実装例として GMP とその派生ライブラリの，マルチコンポーネント方式の代表例として QD の構成および機能をそれぞれ簡単に紹介する。

GNU MP 速さの秘密　GNU MP(GMP)[1] はスウェーデン在住の Trobjörn Granlund が仕切ってきた GNU Project ソフトウェアの一つである。C とアセンブラから成るソフトウェアライブラリで，標準テンプレートと組み合わせて使用できる C++クラスライブラリも同梱されている。1991 年以来，桁数に応じた高速アルゴリズムと様々な CPU アーキテクチャに対応した高速な多倍長自然数演算ライブラリ，即ち，MPN(Multiple Precision Natural number) カーネルを土台とし，任意長整数 (MPZ), 任意長有理数 (MPQ)，そして任意精度浮動小数点数 (MPF) 演算の機能を提供してきた。2019 年現在，Version 6.1.2 が最新である。Granlund を中心に世界中の開発者寄ってたかって各種 CPU アーキテクチャの SIMD 命令をいち早く取り入れた MPN カーネルは他の追随を許さないほど最適化されている。但し，浮動小数点演算の機能は数が少なく，平方根以外の C99 関数は実装されておらず，GMP のマニュアルでも浮動小数点演算用としては MPFR の利用が推奨されている。

MPFR, MPC そして ARB　MPFR[3] は GMP の MPN カーネルを土台として開発された多倍長浮動小数点演算ライブラリで，フランスの INRIA に在籍している Vincent Lefèvre，Paul Zimmermann らが中心となって開発している。C 言語で記述され，任意精度浮動小数点型は MPF

に似た構造体を持つ。IEEE754-1985 浮動小数点演算規格に定められた 4 つの丸め方式をサポートしており，演算ごとに丸め方式を指定して実行する。非数･無限大や，初等関数･特殊関数も実装されており，C99 で記述された標準的な binary64 の C プログラムであれば，問題なく MPFR で任意精度で実行できる。2019 年現在，Version 4.0.2 が最新バージョンである。C++ から利用するクラスライブラリとしては MPFR C++[6] 等がある。

MPFR を土台として構築されているものとして，任意精度区間演算ライブラリ MPFI[7]，任意精度複素数演算ライブラリ MPC[8]，半径演算をサポートする任意精度数値計算ライブラリ ARB[5] がある。

QD の高速性　QD[2] は Yozo Hida，Xiaoye S. Li，David H. Bailey らが開発した C++ライブラリで，binary64 を二つ組み合わせて使用する DD(Double-Double) と 4 つ組み合わせて使用する QD(Quad-Double) をサポートする。基本演算は全て inline 化されており，C++ネイティブライブラリとしては高速な部類であろう。平方根，三角関数，逆三角関数，指数関数，対数関数といった初等関数は実装されている。同じ仮数部長に設定した MPFR と比較すると，四則演算では DD 精度は相当に高速で，QD 精度では除法が若干低速である以外は高速であることが分かる。MPLAPACK[9] の Rgemm 関数を用いて行列乗算で比較すると，DD 演算は MPFR 106bits の約 18 倍，QD 演算は MPFR 212bits の約 2 倍の性能があることが分かる。

3　多倍長精度数値計算の課題

MPFR/GMP も QD も，四則演算レベルの高速化は頭打ち状態であり，これ以上の劇的な性能向上は見込めない。実用性を考えると，多倍長精度数値計算の高速化は常に求められていることから，四則演算より大きな単位のアルゴリズムで高速化を目指す必要がある。ここではその事例を示す。

混合精度反復改良法　混合精度反復改良法は Newton 法を連立一次方程式に適用したもので，複数精度で実行することで高速化を図るというもので，計算量の多い部分を低精度で高速に求め，残差や近似解の導出だけを高精度で実行するというものである。低精度でも充分解ける程度の条件数の問題である必要があり，悪条件問題に適用すべき多倍長精度計算に適用するには矛盾をはらむものであるが，例えば悪条件な常微分方程式の初期値問題に対して陰的 Runge-Kutta 法を適用する際には，その内部反復法としての活用が考えられる。

Strassen の行列乗算アルゴリズム　クイックソートや FFT に代表される分割統治法は演算量を減らす手法の総称で，行列乗算でも Strassen のアルゴリズムという有名なものがある。これを使用することで，サイズの大きい行列乗算では MBLAS の Rgemm 関数より高速に実行できることが判明している。計算精度に難点があるとされている Strassen のアルゴリズムであるが，任意精度計算を使用することで精度低下をフォローすることができ，高速性も併せて担保できる。

初期誤差をフォローする無誤差変換技法の活用　QD で利用されている無誤差変換技法を BLAS 単位で適用することで，精度低下の犠牲はあるものの，高速性を担保する技法が提案されている。ここでは Bold らが提案する FMAerror 及び FMAerrorApprox 演算を利用した，BLAS1 の SCAL 演算と AXPY 演算を拡張する手法の有効性と高速性を示す。

謝辞　本講演にご招待下さった，オーガナイザーの中里直人先生（会津大），湯浅富久子先生（高エネ研）に感謝します。

参考文献

[1] GNU MP, https://gmplib.org/
[2] QD, https://www.davidhbailey.com/dhbsoftware/qd-2.3.22.tar.gz
[3] MPFR, https://www.mpfr.org/
[4] CAMPARY, http://homepages.laas.fr/mmjoldes/campary/
[5] ARB, http://arblib.org/
[6] MPFR C++, http://www.holoborodko.com/pavel/mpfr/
[7] MPFI, https://gforge.inria.fr/projects/mpfi/
[8] MPC, http://www.multiprecision.org/mpc/
[9] MPLAPACK, https://github.com/nakatamaho/mplapack

On the approximation of eigenvalue problems associated with partial differential equations: examples and counterexamples

Daniele Boffi
Dipartimanto di Matematica “F. Casorati”, University of Pavia, Italy
Department of Mathematics and System Analysis, Aalto University, Finland
Istituto di Matematica Applicata e Tecnologie Informatiche “E. Magenes”, CNR, Italy
e-mail : daniele.boffi@unipv.it

1 Abstract

We review some aspects of the a priori and a posteriori error analysis of compact eigenvalue problems originating from partial differential equations. We focus on critical aspects where the numerical experiments shed more light on the theoretical results. Examples of such situations include the presence of spurious modes in mixed formulations and in parameter dependent eigenvalue problems, as well as the correct approximation of multiple eigenvalues and/or clusters of eigenvalues. We are interested in guaranteed error estimates and we are going to present an error estimator with efficiency index tending asymptotically to one.

2 Introduction

The approximation of eigenvalue problems arising from partial differential equations is a fascinating field of research; for many years it has been a common belief that any scheme providing a good approximation to the solution of a (source) partial differential equation could be used successfully for the approximation of the corresponding eigenvalue problem. Although this behavior is essentially true for the standard Galerkin approximation of elliptic problems, this is not always the case and, in particular, it is definitely wrong when mixed finite elements are used. This observation has been pointed out in [4] (see also [2] for a survey on eigenproblem approximation).

In this note we review some a priori and a posteriori error estimates for the finite element approximation of eigenvalue problems arising from partial differential equations and describe several situations where the numerical results may not be immediate to interpret.

3 A priori error estimates

For simplicity, we are going to deal with symmetric eigenvalue problems. The theory for variationally posed elliptic eigenvalue problems in the case of the standard Galerkin approximation is well understood. It deals with problems of the form: given a Hilbert space V, find eigenvalues $\lambda \in \mathbb{R}$ and non-vanishing eigenfunctions $u \in V$ such that

$$a(u, v) = \lambda b(u, b) \quad \forall v \in V,$$

where $a(\cdot, \cdot)$ is a symmetric, continuous and elliptic bilinear form, and $b(\cdot, \cdot)$ is a symmetric and continuous bilinear form defined on a larger Hilbert space H with the assumption that V is compactly embedded in H.

It is well known that, for the situations just described, standard a priori estimates valid for the source problem automatically carry over to the eigenvalue problem. The situation is different when mixed approximations are considered. In particular, let us recall the abstract setting that corresponds, for instance, to the mixed approximation of the Poisson eigenvalue problem: given two Hilbert spaces Σ and U, and continuous bilinear forms $a : \Sigma \times \Sigma \to \mathbb{R}$ and $b : \Sigma \times U \to \mathbb{R}$, find eigenvalues $\lambda \in \mathbb{R}$ and eigenfunctions $u \in U$ such that for some $\boldsymbol{\sigma}$ it holds

$$\begin{cases} a(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) + b(\boldsymbol{\tau}, u) = 0 & \forall \boldsymbol{\tau} \in \Sigma \\ b(\boldsymbol{\sigma}, v) = -(f, v) & \forall v \in U, \end{cases}$$

where $(\cdot, \cdot)$ is the inner product of a pivot space, typically $L^2(\Omega)$.

In this case the classical inf-sup conditions that guarantee the stability of the approximation of the source problem are neither sufficient nor necessary for the good behavior of the approximating eigenmodes obtained after conforming discretization. A counterexample is presented in [4] and a complete theoretical setting is presented in [3].

4 A posteriori error estimates

The solution of partial differential equations can be affected by various singularities due, for instance, to non-smooth domains or to the presence of rough coefficients. In such cases it may be useful to implement a posteriori error estimators that can lead to adaptive schemes.

In this framework it is well known that eigenvalue problems present different features with respect to source problems. One of the main differences is given by the fact that in the case of source problems there is only one solution and the role of the error estimator is to detect how such solution is approximated on the given mesh. On the other hand, in the case of eigenvalue problems, there are in general infinitely many eigensoutions which are approximated by a (growing) finite number of eigenpairs; hence the user has to decide which eigenmodes to track and to design the error estimator accordingly. Subtle issues arise when multiple eigenvalues (or clusters of eigenvalues) are present. Some examples of bad approximation when a wrong strategy is adopted are given in [9, 10, 6].

Adaptive finite element schemes for eigenvalue approximation have a more recent history than for the corresponding source problem. Adaptive schemes for mixed eigenvalue problems are even more recent. The first convergence proof for a standard adaptive scheme based on a residual error estimator has been introduced in [7] for the mixed Laplacian and extended to the Maxwell eigenvalue problem in [5]. A convergence proof for the Stokes problem has been obtained in [8].

Non-residual error estimators for eigenvalue problems have been studied more recently. In particular, in [1] we introduced an error estimator which is asymptotically exact. This means that the constants involved in the equivalence between the error estimator and the actual error quantity are going to one as the mesh is refined.

Acknowledgment The author is member of the INdAM Research group GNCS and his work has been partially supported by IMATI/CNR and by PRIN/MIUR.

References

[1] F. Bertrand, D. Boffi, and R. Stenberg. Asymptotically exact a posteriori error analysis for the mixed Laplace eigenvalue problem. To appear in Comput. Methods Appl. Math.

[2] D. Boffi, Finite element approximation of eigenvalue problems, Acta Numerica, Vol. 19 (2010), pp. 1–120.

[3] D. Boffi, F. Brezzi, and L. Gastaldi, On the convergence of eigenvalues for mixed formulations, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (4), Vol. 25, No. 1-2 (1997), pp. 131–154.

[4] D. Boffi, F. Brezzi, and L. Gastaldi, On the problem of spurious eigenvalues in the approximation of linear elliptic problems in mixed form, Math. Comp., Vol. 69, No. 229 (2000), pp. 121–140.

[5] D. Boffi and L. Gastaldi. Adaptive finite element method for the Maxwell eigenvalue problem. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 57, No. 1 (2019), pp. 478–494.

[6] D. Boffi, R.G. Durán, F. Gardini, and L. Gastaldi. A posteriori error analysis for nonconforming approximation of multiple eigenvalues. Mathematical Methods in the Applied Sciences, Vol. 40 (2017), pp. 350–369.

[7] D. Boffi, D. Gallistl, F. Gardini, and L. Gastaldi. Optimal convergence of adaptive FEM for eigenvalue clusters in mixed form. Math. Comp., Vol. 86, No. 307 (2017), pp. 2213–2237.

[8] M. Feischl. Optimality of a standard adaptive finite element method for the Stokes problem. SIAM J. Numer. Anal. Vol. 57, No. 3 (2019), pp. 1124–1157.

[9] D. Gallistl, An optimal adaptive FEM for eigenvalue clusters, Numer. Math., Vol. 130, No. 3 (2015), pp. 167–496.

[10] P. Solin and S. Giani, An iterative adaptive finite element method for elliptic eigenvalue problems, J. Comput. Appl. Math., Vol. 236, No. 18 (2012), pp. 4582–4599.

ポアソン方程式の解の関数値に関する事後誤差評価
Pointwise error estimation for the approximate solution to boundary value problem of Poisson's equation

Liu Xuefeng[1]
[1]Niigata University
e-mail : xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

The hypercircle method [1], originally developed by Prager–Synge around 1947 for elastic analysis, has been successfully applied to the rigorous (explicit) error estimation with the L^2 norm and the energy norm for finite element solutions to boundary value problems; see, e.g., the *a posteriori* error estimation in [2] and the *a priori* error estimate in [3]. However, there is very limited discussion on the explicit estimation of pointwise value of solutions.

In 1950s, T. Kato considered a kind of boundary value problem associated with a self-adjoint operator H of Hilbert spaces defined in the form $H = T^*T$, where T^* denotes the self-adjoint operator of T [4]. Later, H. Fujita applied the theory of Kato to develop a hypercircle-like method for error estimation and further applied this method to provide pointwise error estimation for the boundary value problems [5]. As pointed out in [5], such a method is not essentially different from those provided by authors of the hypercircle method and others. However, the version of [1] is difficult to produce pointwise error estimation for approximate solutions.

The papers of Kato and Fujita are published in the dawning era of the finite element method (FEM). It seems that the idea therein has never been applied to the error estimation for the finite element method.

In this research, we studied the two important papers [4,5], and investigated the possibility to apply Kato-Fujita's method to develop pointwise error estimation for FEM solutions to boundary value problems. In the presentation, as an example, Poisson's boundary value equation will be considered along with explicit lower and upper bounds for the solution value at any specified point inside the domain.

参考文献

[1] W. Prager and J. L. Synge. Approximations in elasticity based on the concept of function space. Quart. Appl. Math, 5(3):1–21, 1947.

[2] Xuefeng Liu and Fumio Kikuchi. Explicit estimation of error constants appearing in non-conforming linear triangular finite element method. Applications of Mathematics, 63(4):381–397, 2018.

[3] Xuefeng Liu and Shin'ichi Oishi. Verified eigenvalue evaluation for the Laplacian over polygonal domains of arbitrary shape, SIAM J. Numer. Anal. 51 (3):1634–1654, 2013.

[4] Tosio Kato. On some approximate methods concerning the operators T^*T, Mathematische Annalen, 126(1):253–262, 1953.

[5] Hiroshi Fujita. Contribution to the theory of upper and lower bounds in boundary value problems. Journal of the Physical Society of Japan, 10(1):1–8, 1955.

H_0^1 射影誤差に対する 2 次の誤差評価の最良定数の包含方法について

木下 武彦[1]，渡部 善隆[1]，山本 野人[2]，中尾 充宏[3]
[1] 九州大，[2] 電通大，[3] 早稲田大
e-mail：kinoshita.takehiko.759@m.kyushu-u.ac.jp

1 概要

本講演では多項式空間への H_0^1 射影の 2 次の誤差評価に対する最良定数の包含方法を述べる．この定数は Lagrange 型の有限要素法に対する誤差評価にも適用できる場合がある．本結果を利用する事で，2 階楕円型境界値問題に対する解の精度保証付き数値計算が従来よりも高精度に検証できると期待される．

2 導入

$\Lambda := (a,b)$, $(a < b \in \mathbb{R})$ を有界開区間とする．$H_0^1(\Lambda) := \left\{u \in H^1(\Lambda)\ ;\ u(a) = u(b) = 0\right\}$ は内積 $(u,v)_{H_0^1(\Lambda)} := (u',v')_{L^2(\Lambda)}$ を備える複素 Hilbert 空間とし，そのノルムは $\|u\|_{H_0^1} := \sqrt{(u,u)_{H_0^1(\Lambda)}}$ で定義される．ここで，$(\cdot\,,\cdot)_{L^2(\Lambda)}$ は複素 L^2 内積，u' は u の 1 階導関数を表す．任意の自然数 $N \geq 2$ に対し，$\mathbb{P}^N$ を高々 N 次の多項式の集合とする．H_0^1 射影 $P_N^1 : H_0^1(\Lambda) \to H_0^1(\Lambda) \cap \mathbb{P}^N$ は以下の変分方程式：

$$\left(u - P_N^1 u, v_N\right)_{H_0^1(\Lambda)} = 0, \quad \forall v_N \in H_0^1(\Lambda) \cap \mathbb{P}^N$$

をみたすものと定義する．正数 $C_{1:3}(N)$ を

$$C_{1:3}(N) := \frac{1}{|\Lambda|^2} \sup_{0 \neq u \in H_0^1(\Lambda) \cap H^3(\Lambda)} \frac{\left\|u - P_N^1 u\right\|_{H_0^1(\Lambda)}}{|u|_{H^3(\Lambda)}} \tag{1}$$

と定義する．ここで，$|\Lambda| := b - a$, H^3 セミノルムは $|u|_{H^3(\Lambda)} := \|u'''\|_{L^2(\Lambda)}$ と定義する．$C_{1:3}(N)$ はその定義より，以下の誤差評価：

$$\left\|u - P_N^1 u\right\|_{H_0^1(\Lambda)} \leq C_{1:3}(N)\, |\Lambda|^2\, |u|_{H^3(\Lambda)}\,, \qquad \forall u \in H_0^1(\Lambda) \cap H^3(\Lambda)$$

の最良定数となっている．

本講演では具体的に N が与えられたときに，精度保証付き数値計算を用いて $C_{1:3}(N)$ を包含する小さな区間を計算する手法を提案する．定数 $C_{1:3}(N)$ は Lagrange 型の 1 次元有限要素法や，2 次元四角形メッシュの有限要素法等の誤差評価に適用できる．

3 主定理

定理 1 任意の整数 $N \geq 2$, $M \geq \max\{N+5, 10\}$, $L \geq M+5$ に対し，ある 9 重対角非負値実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{(M-N+4)\times(M-N+4)}$, $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{(L-M+4)\times(L-M+4)}$ が存在し，以下の不等式：

$$\frac{1}{4}\sqrt{\|A\|_2} \leq C_{1:3}(N) \leq \frac{1}{4}\sqrt{\|A\|_2 + \left\|\tilde{A}\right\|_\infty} \tag{2}$$

をみたす．ここで，$\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_\infty$ はそれぞれ行列の *2* ノルム，無限大ノルムを表す．

行列 A, $\tilde{A}$ は具体的に書き下す事が出来るが，頁数の制限により割愛する．

証明の概略 $H_0^1(\Lambda)$ の完全直交多項式 $\{\phi_n\}_{n=2}^\infty$ の存在や，ϕ_n のみたす三項間漸化式は既に [1, 2] で報告している．よって，任意の $u \in H_0^1(\Lambda)$ に対し，

$$u = \sum_{n=2}^\infty \mathfrak{a}_n \frac{\phi_n}{\|\phi_n\|_{H_0^1(\Lambda)}}, \tag{3}$$
$$\mathfrak{a}_n := \left(u, \frac{\phi_n}{\|\phi_n\|_{H_0^1(\Lambda)}}\right)_{H_0^1(\Lambda)}, \quad \forall n \geq 2$$

をみたす複素数列 $\mathfrak{a} \in \ell^2$ が存在する．さらに，$P_N^1 u = \sum_{n=2}^N \mathfrak{a}_n \frac{\phi_n}{\|\phi_n\|_{H_0^1(\Lambda)}}$ となり，P_N^1 は打ち切り作用素と一致する．一方，Legendre 多項式 $\{P_n\}_{n=0}^\infty$ は $L^2(\Lambda)$ の完全直交多項式となっており，

$$u''' = \sum_{n=0}^\infty \mathfrak{b}_n \frac{P_n}{\|P_n\|_{L^2(\Lambda)}},$$
$$\mathfrak{b}_n := \left(u''', \frac{P_n}{\|P_n\|_{L^2(\Lambda)}}\right)_{L^2(\Lambda)}, \quad \forall n \geq 0$$

をみたす複素数列 $\mathfrak{b} \in \ell^2$ が存在する．$\mathfrak{a}_n$ と $\mathfrak{b}_n$ の関係を調べると，

$$\mathfrak{a}_n = \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^2 \left(-\alpha_{n-3}\mathfrak{b}_{n-3} + \beta_{n-1}\mathfrak{b}_{n-1} - \gamma_{n+1}\mathfrak{b}_{n+1}\right) \tag{4}$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

をみたす正数列 $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ が存在する事がわかった．これらは具体的に書き下す事ができるが，ここでは割愛する．よって，

$$
\begin{aligned}
&\sum_{n=N+1}^{M} |\mathfrak{a}_n|^2 \\
&= \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \sum_{n=N+1}^{M} \left|-\alpha_{n-3}\mathfrak{b}_{n-3} + \beta_{n-1}\mathfrak{b}_{n-1} - \gamma_{n+1}\mathfrak{b}_{n+1}\right|^2 \\
&= \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \vec{\mathfrak{b}}^H A \vec{\mathfrak{b}},
\end{aligned}
$$

をみたす非負値実対称行列 A が存在する．ここで，$\vec{\mathfrak{b}} := (\mathfrak{b}_{N-2}, \ldots, \mathfrak{b}_{M+1})^T \in \mathbb{C}^{M-N+4}$ とおいた．Parseval の等式から

$$
\begin{aligned}
&\left\|u - P_N^1 u\right\|_{H_0^1(\Lambda)}^2 = \sum_{n=N+1}^{\infty} |\mathfrak{a}_n|^2 \\
&= \sum_{n=N+1}^{M} |\mathfrak{a}_n|^2 + \sum_{n=M+1}^{L} |\mathfrak{a}_n|^2 + \sum_{n=L+1}^{\infty} |\mathfrak{a}_n|^2
\end{aligned}
$$

と，3 つの部分に分解しておき，それぞれ

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=N+1}^{M} |\mathfrak{a}_n|^2 &= \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \vec{\mathfrak{b}}^H A \vec{\mathfrak{b}} \\
&\le \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \|A\|_2 \left|\vec{\mathfrak{b}}\right|^2 \\
\sum_{n=M+1}^{L} |\mathfrak{a}_n|^2 &= \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \vec{\tilde{\mathfrak{b}}}^H \tilde{A} \vec{\tilde{\mathfrak{b}}} \\
&\le \left(\frac{|\Lambda|}{2}\right)^4 \left\|\tilde{A}\right\|_\infty \left|\vec{\tilde{\mathfrak{b}}}\right|^2 \\
\sum_{n=L+1}^{\infty} |\mathfrak{a}_n|^2 &\le O\left(L^{-4}\right) |\Lambda|^4 \sum_{n=L-2}^{\infty} |\mathfrak{b}_n|^2
\end{aligned}
$$

として上側の評価をえる．ここで，$\left\|\tilde{A}\right\|_2 \le \left\|\tilde{A}\right\|_\infty$ は Gershgorin の定理に基づく．一方，A の最大固有値に対応する固有ベクトルを係数とする多項式を具体的に作ることで下側の評価をえる．
□

(2) の両端は精度保証付き数値計算によって具体的に計算できる．特に，実対称行列の最大固有値に対する精度保証付き数値計算が必要となり，その計算方法は例えば [3] を参照するとよい．

本手法は [4] で考察しているような H_0^1 誤差を H^2 セミノルムで評価する場合においても，同様の手順で最良定数を包含できる．

4 楕円型境界値問題への応用

主定理の定数は楕円型境界値問題：

$$
\begin{cases}
-\triangle u = f(u) & \text{in } \Omega \qquad (5a) \\
u = 0 & \text{on } \partial\Omega \qquad (5b)
\end{cases}
$$

の解 u の存在および局所一意性を検証する際に利用する事ができる．検証方法の詳細は [5, §5.2] や [6, §6.10] に譲るが，いずれの文献にも現れる $\|v_0\|_{H_0^1(\Omega)}$ の評価で定理 1 を使う事ができる．ここで $v_0 := (I - P_N^1)(-\triangle)^{-1} f(u_N)$ と定義される，(5) の近似解 u_N を軟化した誤差に対応する．また，$\|v_0\|_{H_0^1(\Omega)}$ が小さいほど，u_N と (5) の厳密解 u との誤差も小さくなる．

講演では従来手法である $\|v_0\|_{H_0^1(\Omega)}$ の 1 次評価，Nobitonian による事後評価と定理 1 による 2 次評価の結果を紹介する．

謝辞　本研究は科研費 (課題番号:JP15H03637, JP16H03950, JP18K03434) のおよび JST CREST の助成を受けたものである．

参考文献

[1] M. T. Nakao and T. Kinoshita: "On very accurate verification of solutions for boundary value problems by using spectral methods," *JSIAM Letters*, **1**, (2009), 21–24.

[2] T. Kinoshita, Y. Watanabe, and M. T. Nakao: "Recurrence relations of orthogonal polynomials in H_0^1 and H_0^2," *Nonlinear Theory and Its Applications*, **6**, (2015), no. 3, 404–409.

[3] 大石進一："精度保証付き数値計算," コロナ社，(2000)．

[4] M. T. Nakao, N. Yamamoto, and S. Kimura: "On best constant in the optimal error stimates for the H_0^1-projection into piecewise polynomial spaces," *Journal of Approximation Theory*, **93**, (1998), 491–500.

[5] 中尾充宏，山本野人："精度保証付き数値計算," 日本評論社，(1998)．

[6] 中尾充宏，渡部善隆："実例で学ぶ 精度保証付き数値計算 理論と実装," サイエンス社，(2011)．

ニワトリ胚中胚葉細胞集団の動的な移動秩序形成

田﨑 創平[1]，仲矢 由紀子[1]，柴田 達夫[1]
[1]理化学研究所・生命機能科学研究センター
e-mail: tasaki.sohei@gmail.com

1　概要

ニワトリ胚の中胚葉組織は、原腸陥入により胚の内側に落ち込んだ間充織細胞の集団が、エピブラストと内胚葉の間にある空間に展開して形成される。しかし、足場の限られた 3 次元空間内の細胞移動様式を含め、中胚葉形成機構には不明な点が多い。我々は、透明化や高解像度 3 次元ライブイメージング、マルチスケールなデータ解析、数理モデルシミュレーションの協働により、中胚葉細胞の集団移動の特徴的な秩序として動的な網目様構造を見出したので報告する。

2　中胚葉細胞集団の動的網目様形態

ある発生段階の固定胚において、DAPI による核染色や接着分子の標識画像の解析から、中胚葉細胞集団が N-cadherin 等の接着分子により 3 次元的につながり、網目様の形態をとって移動していることを見出した。トランスジェニックニワトリを用いたライブイメージングによってもこの網目様構造は確認され、しかも各々の網目（リング）の構成細胞の動的な入れ換えが起きていることが明らかになった。この構造を定量化するため、位相的データ解析手法のひとつであるパーシステントホモロジーを適用した。その結果、10〜20 程度の細胞が各々の網目を形成し、協調的な集団移動を実現していることが分かってきた。

3　中胚葉細胞の集団移動の性質

個々の細胞の動きと、集団としての移動の性質を調べるために、エレクトロポレーションにより細胞の核を標識し、細胞核座標の時系列データを得た。その解析から、細胞密度の増加に伴い、細胞集団の平均速度や平均細胞極性が減少することが分かった。一方で個々の細胞の運動性（たとえば速度の絶対値の集団平均）は変化していなかった。すなわち、運動性ではなく運動の向きの秩序が、細胞密度増加にしたがって減少しているようである。細胞密度は、（発生）時間・空間の両方向に相関しており、集団移動のグローバルな制御と関連していると示唆される。先の網目構造は比較的低細胞密度の状況で形成されるため、効率的な集団移動の実現と関わっていると考えられる。そこで、細胞集団の位相的構造と集団運動性の関係の調査を進めている。

4　中胚葉細胞集団の秩序形成機構における接着分子 N-cadherin の役割

中胚葉細胞の集団移動と網目用構造の形成において、接着分子 N-cadherin 等の役割を調べている。機能阻害型変異体の発現系を構築し、核座標のデータ解析および細胞膜を標識した高解像度ライブイメージングにより、正常細胞系と比較解析した。その結果、N-cadherin を介した細胞間相互作用によって、細胞間の接触時間向上、細胞集団内の細胞位置関係の保持、集団平均速度の向上などが実現されていることが分かってきた。一方で、個々の細胞の運動性については特に変化を与えるものではなかった。そのため、接着因子 N-cadherin の役割は集団移動・形態の秩序の形成に特に寄与していると考えられる。

5　数理モデルとの融合による秩序形成機構の解明に向けて

中胚葉細胞の集団移動を記述するエージェント（細胞）ベースの数理モデルを構築している。足場の限られた 3 次元空間を移動する細胞集団のモデルで、細胞極性や細胞間の接着の役割などを調べることができる。データ解析を *in vivo* と *in silico* の両者で行ない、比較・融合することにより、動的網目構造を形成しながら適切な方向へ効率的に移動していく細胞集団の秩序形成機構の解明にアプローチしている。将来的には、細胞集団移動に最適化した独自の生命系向けの統計フィルターを開発してデータ同化する方法論を構築したい。間充織性の細胞が生体内で実現している集団秩序の形成がどのような意義をもつのか明らかにすべく研究を進めている。

直鎖状ユビキチン鎖を足場とした免疫シグナル制御に関する数理モデル解析

及川 大輔[1]，畑中尚也[2]，鈴木 貴[2]，徳永 文稔[1]
[1]大阪市立大学大学院医学研究科 分子病態学
[2]大阪大学大学院基礎工学研究科 システム創成選考
e-mail: oikawa.daisuke@med.osaka-cu.ac.jp

1 はじめに

ユビキチンは 76 残基(8.6kDa)からなる低分子量球状タンパク質で真核生物に普遍的に存在し，ユビキチン活性化酵素(E1)，ユビキチン結合酵素(E2)，ユビキチンリガーゼ(E3)という 3 種の酵素活性を介して標的タンパク質に結合される翻訳後修飾因子である．当初，タンパク質のユビキチン修飾はプロテアソーム分解に導く標識として見出されたため，「ユビキチン化=分解」と考えられがちだが，ユビキチン修飾はエンドサイトーシス，DNA 修復，細胞内シグナル伝達など非タンパク質分解の機能も数多く担うことが分かってきた．

この様にユビキチン修飾系が多彩な細胞機能制御を司ることができる分子基盤は，ユビキチン連結の多様性に起因する．すなわち，タンパク質 1 分子のユビキチンが合するモノユビキチン化や数分子のモノユビキチンが結合するマルチ−モノユビキチン化に加えて，ユビキチンが分子間で数珠状に連結したポリユビキチン鎖も生成できる．ポリユビキチン鎖には分子内 7 箇所の Lys(K)残基(K6, K11, K27, K29, K33, K48, K63)と，N 末端 Met1(M1)を介する「直鎖状ユビキチン鎖」の 8 通りの均一連結様式のポリユビキチン鎖がある．この様なユビキチン連結様式の多様性がそれぞれ特異的な一群の結合タンパク質を集積させる足場として働き，その下流で多彩な細胞機能発現を可能にしている．

今回は，LUBAC により生成される直鎖状ユビキチン鎖を足場とした免疫シグナル制御について，独自に開発した LUBAC 特異的阻害剤を用いたウエットな実験結果と，当該経路の数理モデル解析により得られた結果との比較検討について紹介したい．

2 直鎖状ユビキチン鎖による NF-κB シグナルの制御とその破綻に伴う疾患

細胞内において直鎖状ユビキチン鎖は，HOIL-1L, HOIP, SHARPIN からなる LUBAC(linear ubiquitin chain assembly complex)と呼ばれるユビキチンリガーゼ複合体により生成される（図 1 A）．その生理機能として、TNF-αなどの受容体直下の因子に直鎖状ユビキチン鎖を付加することで，下流因子の集合の足場となり，NF-κB シグナル経路の中心的酵素である IκB キナーゼ（IKK）を活性化に導くことが知られている（図 1 B）[1]．また，これらに拮抗的に作用する脱ユビキチン化酵素として CYLD や OTULIN が知られ，過度なユビキチン鎖を分解することで適切なバランスを保っている．

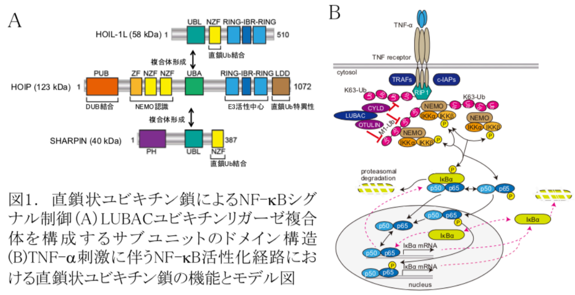


図1. 直鎖状ユビキチン鎖によるNF-κBシグナル制御(A)LUBACユビキチンリガーゼ複合体を構成するサブユニットのドメイン構造(B)TNF-α刺激に伴うNF-κB活性化経路における直鎖状ユビキチン鎖の機能とモデル図

近年，LUBAC の活性制御の不全が皮膚炎や B 細胞リンパ腫を含む様々な炎症性疾患を引き起こすことが報告され，さらに，筋萎縮性側索硬化症（ALS）を含む各種神経変性疾患との関連性も報告されている[1]．よって LUBAC による直鎖状ユビキチン鎖生成と免疫シグナル制御は，新たな創薬ターゲットとしても注目を集めている．

3 新規阻害剤による LUBAC 活性の抑制

このような背景から我々は，LUBAC による直鎖状ユビキチン産生を阻害する新規化合物を探索し，HOIPIN-1（HOIP inhibitor-1）を取得した[2]．さらに，HOIPIN-1 をベースにした合成展開により，高い阻害効率を備えた HOIPIN-8 を見出した（図 2A）[3]．

これらの化合物は，LUBAC の活性中心サブユニットである HOIP-RING2 ドメイン内の Cys930 に結合することでその活性を阻害し，細胞内に

おいては，LUBAC が関与する炎症性サイトカイン（TNF-α、IL-1βなど）で惹起される NF-κB 活性化を抑制した．特に LUBAC のターゲットとして知られる NEMO の直鎖状ユビキチン化が濃度依存的に抑制され，IKK 複合体の活性化も同様に抑制された（図 2B）．

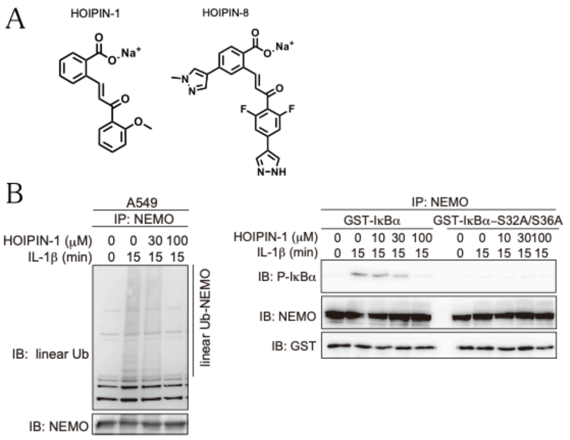


図2. HOIPINsによるLUBAC活性の阻害
(A)HOIPIN-1及び8の構造式 (B)HOIPIN-1による細胞内NEMOの直鎖状ユビキチン化の阻害(左)と、IKK複合体の活性化の阻害(右)

3　LUBAC 活性抑制に伴う NF-κB シグナル動態の数理モデル解析

このような LUBAC 活性の抑制に伴う NF-κB シグナルの動態変化について，図 1 A に示す経路の数理モデル解析を進めた．

先ずは，論文情報を基に既知のシグナル因子の結合・解離などを考慮し，IKK のリン酸化や NEMO の直鎖状ユビキチン化など細胞実験のデータとすり合わせ，TNF-α受容体から IKK 複合体の活性化までの経路をモデル化した．次に，阻害剤添加を模すために LUBAC 活性を段階的に引き下げ，各因子の動態を評価したところ，図 3 に示す通り NEMO の直鎖状ユビキチン化や IKK 複合体の活性化が濃度依存的に抑制された．

これらはウエットの実験データと非常に良く一致していたが，その一方で，IKK 複合体の持続的な活性化は細胞では検出できなかった．数理モデルにおいては，TNF-α刺激後150min を超えても IKK 複合体が一定の活性を保持したまま持続しているが，今回の解析では，K63 型ユビキチン化を含む，直鎖状ユビキチン化以外の経路がこの持続に重要である可能性が示唆された．

現在，この IKK 複合体上流の数理モデルと，下流の細胞質-核間の振動現象を表す既知モデルを組み合わせることで，TNF-α受容体から振動現象までのモデル化を進めている．今回はこれらの進捗についても報告したい．

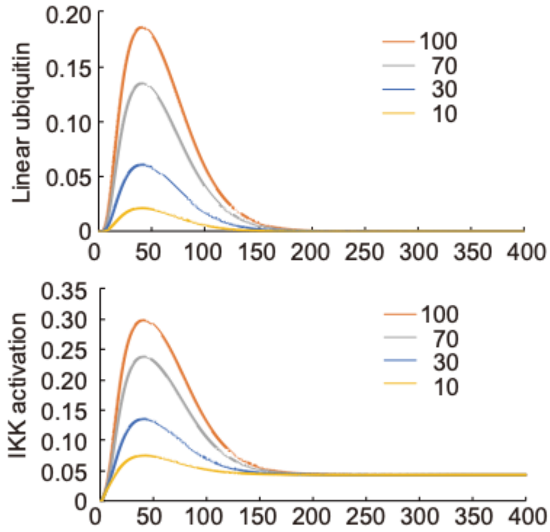


図3. LUBAC活性阻害時の数理モデル解析
(A)NEMOの直鎖状ユビキチン化、及び(B)活性化IKK複合体の挙動

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP16H06575, JP19H05296 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] 徳永文稔, 阪市医誌, 直鎖状ユビキチン鎖生成を介した炎症・免疫シグナル制御と疾患, 65 (2016), 7-12.

[2] Katsuya K, Hori Y, Oikawa D, Yamamoto T, Umetani K, Urashima T, Kinoshita T, Ayukawa K, Tokunaga F, Tamaru M, High-Throughput Screening for Linear Ubiquitin Chain Assembly Complex (LUBAC) Selective Inhibitors Using Homogenous Time-Resolved Fluorescence (HTRF)-Based Assay System. SLAS Discov, 23 (2018), 1018-1029.

[3] Katsuya K, Oikawa D, Iio K, Obika S, Hori Y, Urashima T, Ayukawa K, Tokunaga F, Small-molecule inhibitors of linear ubiquitin chain assembly complex (LUBAC), HOIPINs, suppress NF-κB signaling, Biochem. Biophys. Res. Commun, 509 (2019), 700-706.

T 細胞における LUBAC を介した NF-κ B 活性化機構の数理的解析

畑中 尚也 [1], 及川大輔 [2], 徳永文稔 [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] 大阪市立大学大学院医学研究科分子病態学,[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

生体内で数百にも及ぶ機能を制御するタンパク質である NF-κ B は刺激依存的に活性化される．特に TCR（T 細胞受容体）を介した NF-κ B 活性化においては，LUBAC(linear ubiquitin chain assembly complex) という酵素による CBM 複合体の直鎖状ユビキチン化が重要であることが指摘されている (図 1)．ユビキチン化された CBM 複合体に付与されたユビキチン鎖を足場とし，IKK 複合体がリン酸化されることで NF-κ B の活性化につながる．このとき CBM 複合体を形成する CARMA1，BCL10，MALT1 のユビキチン化にはタイミングのずれが生じることが実験で確認されているが，その生物学的意味は明らかになっていない．

本研究では以下の 2 点を明らかにすることを目的とする．

1) CBM 複合体を介した IKK 活性化の意義
2) CARMA1, BCL10，MALT1 のユビキチン化に時間差が生じる理由

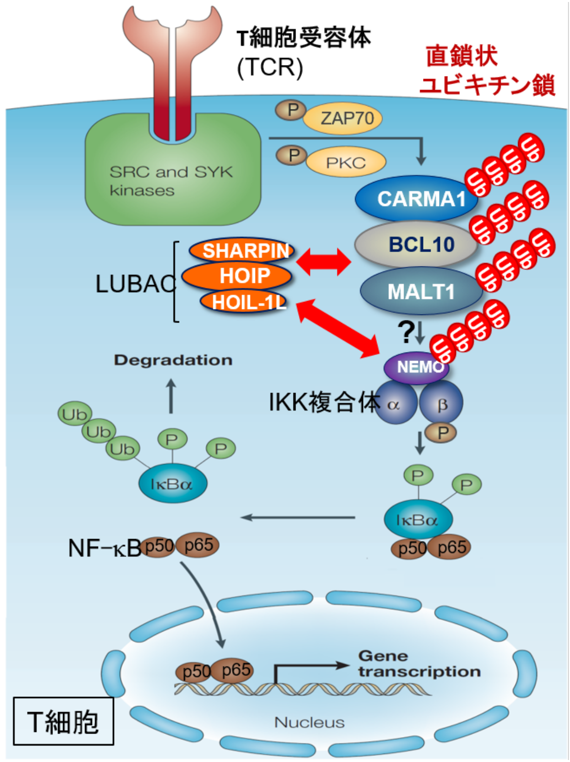


図 1. TCR 刺激入力から NF-κ B 活性化までの概略図．Thome らの論文 [1] の図を基に LUBAC やユビキチン化の反応を書き加えている．

2 結果

はじめに我々は CBM 複合体のユビキチン鎖を介した IKK の活性化と，LUBAC によって直接ユビキチン化された IKK 同士による活性化との違いを明らかにするために数理モデルを構築し，シミュレーションを行った．ただし，ここでは CARMA1, BCL10，MALT1 のユビキチン化のタイミングのずれは考慮していない．また，各現象は化学反応速度論に基づくと仮定する．

CBM の効果を解析するために，次の 2 つの状況を考える．(a) LUBAC 直接 IKK をユビキチン化し，ユビキチン化された IKK 同士が作用することによって IKK が活性化する，(b) LUBAC が CBM 複合体のみをユビキチン化し，そのユビキチン鎖を足場に IKK が活性化する．これらを数値シミュレーションで比較した結果，IKK の活性化の早さと持続性に違いがあることが分かった．CBM を介さない場合には，IKK の活性化には IKK 同士が接触する必要があるため，迅速な活性化は起こりにくく，グラフの形状は平坦になる．一方 CBM を介した IKK の活性化では，ユビキチン鎖が足場となりそこにたどり着けば IKK 同士で活性化できるため，活性化が迅速に起こる．そのため，ピークの形状は鋭くなり短い期間で活性状態と不活性状態を切り替えることができる．

次に，CARMA1, BCL10，MALT1 のユビキチン化のタイミングのずれが生じる原因を解析するため，上で構築したモデルにユビキチン化の反応を加え，詳細なモデルへ拡張する．ただし，ユビキチン化の反応について詳細な機構が不明な点もあるため，簡単にユビキチン化は一次の反応であると仮定した．

CARMA1, BCL10，MALT1 にはそれぞれユ

ビキチン化されている状態とされていない状態があるため，考えるべき状態は 8 通りある (図 2)．はじめに我々はユビキチン化の状態に関わらず CARMA1, BCL10，MALT1 のそれぞれのユビキチン化速度は一定であると考えた．

しかし，その条件ではユビキチン化のタイミングのずれを再現することはできなかった．そのため，ユビキチン化の状態によって次のユビキチン化，あるいは脱ユビキチン化が起こる反応係数が異なると予想される．実際，反応速度を変更することでユビキチン化のタイミングのずれを再現することができた (図 3)．その時のパラメータを観察すると，反応係数の大小には規則性があることが分かった．すなわち，ユビキチン化や脱ユビキチン化の反応が，CARMA1, BCL10，MALT1 の状態によって判別されている可能性が示唆された．これらの詳細なパラメータについては講演の中で報告する．

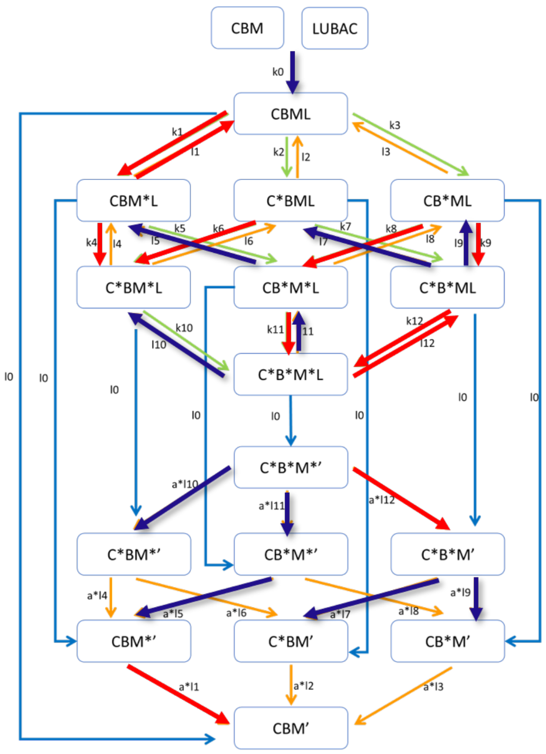


図 2. CBM 複合体ユビキチン化のモデル図．赤線は平均より値の大きかった反応経路を表しており，青線平均より値の小さかった反応経路を表している．

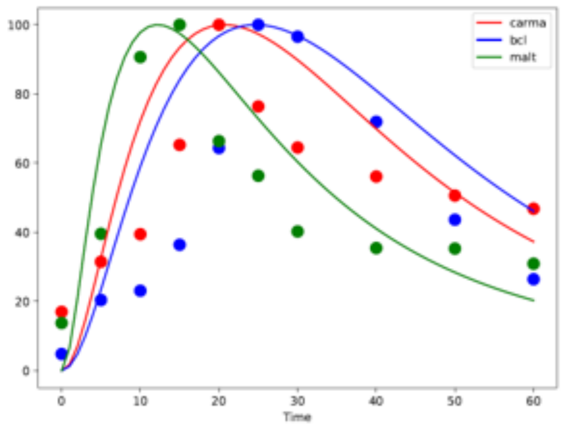


図 3. 遺伝的アルゴリズムを用いたフィッティングの結果．フィッティングに用いたパラメータは乱数的に与え，3000 世代まで計算し，その中でスコアの良かったパラメータを選択している．

参考文献

[1] M Thome, CARMA1, BCL-10 and MALT1 in lymphocyte development and activation, Nat Rev Immunol. 2004 May;4(5):348-59.

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．

ガン免疫の環境依存型モデル EDM における局所消滅性に関する評価

道工　勇（埼玉大学教育学部数学教室）

ガン免疫応答を記述する環境依存型確率モデル EDM において，ガン細胞が免疫細胞から成るエフェクター群により局所的に駆逐される様子に対応する局所消滅性を呈することが分かっている。今回は定性的性質の解析ではなく，その様子の定量的な記述を可能にする，ほとんど確実に局所的に消滅する現象のパラメータ依存表記を紹介する．これにより，EDM のシミュレーションの祭に，具体的な指針を与えやすくなると期待される．数理的には，スケーリング極限で得られる超過程に対するヒストリカル過程の良行経歴パスや連続率に関する評価の導出がキーポイントとなる．

ランダム二分木の分岐構造と中心極限定理・大偏差原理

山本 健
琉球大学理学部
e-mail : yamamot@sci.u-ryukyu.ac.jp

1 二分木と次数

枝分かれとそれによって形成される木構造は様々な場面でみられるパターンである [1]。水理学の分野では，源流を葉，河口を根とする根付き木で河川網をモデル化して形状の分析がおこなわれてきた。次に示すルールで，次数とよばれる自然数を二分木の葉から根に向かって帰納的に割り当てる（図 1 参照）:

1) 葉はつねに次数 1.
2) 次数 r の頂点どうしの合流先は次数 $r+1$.
3) 次数 r_1 および $r_2 (r_1 \neq r_2)$ の頂点の合流先は次数 $\max\{r_1, r_2\}$.

次数 r の頂点からなるパスを次数 r の枝とよぶ。

二分木の確率空間として最も単純なのが，葉の数が n の二分木に一様な確率測度を与えた確率空間（ランダム二分木モデル）である。葉の数が n の二分木 τ に対して，次数 r の枝の本数を $S_{r,n}(\tau)$ と表すことにする。$S_{r,n}$ はランダム二分木モデルにおける確率変数である。本研究では，確率変数 $S_{r+1,n}$ $(r = 1, 2, \ldots)$ の極限 $n \to \infty$ におけるふるまいを明らかにする。

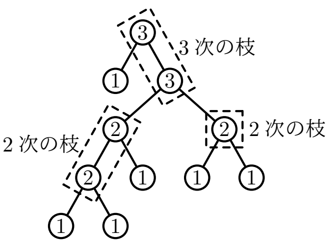


図 1. 二分木の次数づけの例。破線の四角で囲んだ部分が次数 2, 3 の枝である。次数 1, 2, 3 の枝の数はそれぞれ 6, 2, 1 本となる。

2 ランダム二分木の極限定理

$S_{1,n} = n$ であるので，自明でない最低次の確率変数は $S_{2,n}$ である。極限 $n \to \infty$ における $S_{2,n}$ の確率論的な性質として，次の大偏差原理が示されている:

定理 1 ($S_{2,n}$ **に対する大偏差原理 [2]**) $y \in (1/4, 1/2)$ に対して,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P\left(\frac{S_{2,n}}{n} > y\right) = -I(y).$$

$y \in (0, 1/4)$ に対して,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P\left(\frac{S_{2,n}}{n} < y\right) = -I(y).$$

ただし，関数 $I(y)$ は

$$I(y) = (4y-1)\tanh^{-1}(4y-1) - \log(\cosh(\tanh^{-1}(4y-1))).$$

この大偏差原理の系として，中心極限定理

$$\sqrt{n}\left(\frac{S_{2,n}}{n} - \frac{1}{4}\right) \xrightarrow{\mathrm{D}} N\left(0, \frac{1}{16}\right)$$

が得られる。ただし，$\xrightarrow{\mathrm{D}}$ は分布収束を表し，$N(\mu, \sigma^2)$ は平均 μ, 分散 σ^2 の正規分布である。

定理 1 の証明では，ランダム二分木の組合せ論的な性質を駆使して

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log E\left[\exp(\xi S_{2,n})\right] = \frac{\xi}{4} + \log\left(\cosh\frac{\xi}{4}\right) =: \varphi(\xi) \qquad (1)$$

が導出されている。ただし，$E[\cdot]$ はランダム二分木モデル上の平均を表す。$E[\exp(\xi S_{2,n})]$ は $S_{2,n}$ のモーメント母関数であり，その対数 $\log E[\exp(\xi S_{2,n})]$ はキュムラント母関数とよばれる。$n \to \infty$ におけるキュムラント母関数の性質 (1) から，大偏差原理に関する一般性のある定理 [3] を経由して大偏差原理（定理 1）が導かれる。なお，定理 1 の $I(y)$ は $\varphi(\xi)$ の Legendre 変換である。

3 主結果

以上の結果を一般の次数の枝 $S_{r+1,n}$（$r = 1, 2, \ldots$）に拡張する。

補助定理 2 $S_{r+1,n}$（$r = 1, 2, \ldots$）のキュムラント母関数について,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log E\left[\exp(\xi S_{r+1,n})\right] = \varphi^r(\xi).$$

ただし，$\varphi^r(\xi)$ は式 (1) で与えられた φ を r 回合成した関数である（$\varphi^r(\xi) = \underbrace{\varphi \circ \cdots \circ \varphi}_{r}(x)$）。

すなわち，次数 $r+1$ が写像 φ の合成の回数 r に対応する。

式 (1) から定理 1 が導かれたのと同じ過程をたどり，次の大偏差原理が得られる。

定理 3 ($S_{r+1,n}$ に対する大偏差原理) 各次数 $r = 1, 2, \ldots$ に対して，次が成り立つ。
$y \in (1/4^r, 1/2^r)$ に対して

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P\left(\frac{S_{r+1,n}}{n} > y\right) = -I_r(y),$$

$y \in (0, 1/4^r)$ に対して

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log P\left(\frac{S_{r+1,n}}{n} < y\right) = -I_r(y).$$

ただし，$I_r(y)$ は $\varphi^r(\xi)$ の *Legendre* 変換である。

定理 3 の系として，中心極限定理

$$\sqrt{n}\left(\frac{S_{r+1,n}}{n} - \frac{1}{4^r}\right) \xrightarrow{\mathrm{D}} N\left(0, \frac{4^r-1}{3\cdot 16^r}\right).$$

が成り立つ。この中心極限定理は，大偏差原理を経由せずに技巧的に証明されているが [4]，より一般的な大偏差原理との関係性が与えられたことで理論的な見通しが良くなっている。

4 補助定理 2 の証明の概略

大偏差原理（定理 3）の鍵となる補助定理 2 の証明の方針を簡潔に述べる。出発点となるのが，

$$E\left[\exp(\xi S_{r+1,n})\right] = \frac{n!(n-1)!(n-2)!}{(2n-2)!} \sum_{m=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{2^{n-2m} E\left[\exp(\xi S_{r,m})\right]}{(n-2m)!m!(m-1)!} \tag{2}$$

である。左辺の $S_{r+1,n}$（次数 $r+1$）と右辺の $S_{r,m}$（次数 r）に関する量を関係づけている。

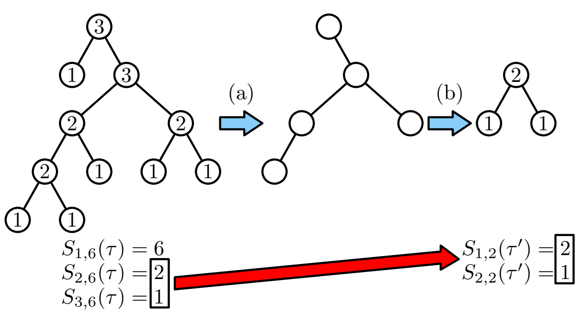


図 2. 二分木の枝刈り。(a) すべての葉を除去し（刈り取り），(b) 辺を縮約して全二分木に整形する。枝刈りによって枝の本数の繰り下がりが起こる。

この式は，二分木の “枝刈り”（図 2）という操作により証明できる [5]。

$r = 1$ の場合に，和の変数を $m = \beta n$ $(0 < \beta < 1/2)$ とおき，和を積分で置き換え，Stirling の近似を用いると，

$$E\left[\exp(\xi S_{2,n})\right] \sim \frac{2}{\sqrt{\pi n}} \int_0^{1/2} \frac{\exp(ng(\beta;\xi))}{\sqrt{1-2\beta}} d\beta,$$

ただし

$$\begin{aligned} g(\beta;\xi) = \xi\beta - (1-2\beta)\log(1-2\beta) - 2\beta\log\beta \\ - \beta\log 4 - \log 2. \end{aligned}$$

積分を鞍点法で評価することで，式 (1) が導かれる。（この手法は Wang and Waymire [2] とは異なる。）補助定理 2 は，式 (2) を用いて次数 r に関する帰納法により証明される。

謝辞 本研究は，科研費 基盤研究 (C) (19K03656, 18K06406) の助成を受けたものである.

参考文献

[1] フィリップ・ボール（桃井緑美子 訳），枝分かれ, 早川書房, 2016.

[2] S. X. Wang and E. C. Waymire, A Large Deviation Rate and Central Limit Theorem for Horton Ratios, SIAM J. Discrete Math., Vol. 4 (1991), 575–589.

[3] J. T. Cox and D. Griffeath, Large Deviations for Poisson Systems of Independent Random Walks, Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, Vol. 66 (1984), 543–558.

[4] K. Yamamoto, Central Limit Theorem for the Horton-Strahler Bifurcation Ratio of General Branch Order, J. Appl. Prob., Vol. 54 (2017), 1111–1124.

[5] K. Yamamoto and Y. Yamazaki, Topological Self-Similarity on the Random Binary-Tree Model, J. Stat. Phys., Vol. 139 (2010), 62–71.

漢字の形に関するベキ乗則について

太田 守洋 [1], ◦ 山本 健 [2]
[1] 琉球大学大学院理工学研究科，[2] 琉球大学理学部
e-mail : yamamot@sci.u-ryukyu.ac.jp

1 はじめに

自然言語は基本的な文法と無数の例外からなる複雑なシステムであるが，統計的な法則や規則性が現れることがある [1]。たとえば，文章中の各単語の出現頻度が順位に反比例するという Zipf の法則や，コーパス中の異なる単語数がコーパスのサイズに対してベキ乗則で増加するという Heaps の法則はよく知られている。そのほかにも，エントロピーのスケーリングやゆらぎ等において，文章の種類や言語によらない普遍性が確認されている。

本研究では，漢字の形の分析をおこなう。漢字は日本人にとって馴染み深い対象である。近年では，漢字の多様な形は非漢字圏の人々からも（一種のアートとして）注目されている。漢字の複雑さを示す基本的な指標として，画数がある。一方，漢字の形の複雑さは漢字を構成する線の長さの和（以下，単に “線長” とよぶ）によって表せる。本研究では，画数と線長を実測し，ベキ乗則が成り立つことを示す。さらに，このベキ乗則とフラクタルの関係を考察する。なお，本研究の詳細は論文 [2] で述べられている。

2 データ解析

実際の漢字の分析として，常用漢字 2136 字と JIS 第 1 および第 2 水準漢字（以下，“JIS 漢字” とよぶ）6355 字の画数の取得および線長の測定をおこなった。各漢字の画数はオンラインのデータベース『Joyo_Kanji』[3] および『漢字辞典オンライン』[4] を参照した。一方，線長は MS ゴシックフォントを用いて測定した。具体的には，各漢字を出力したボックスを 100×100 のメッシュに分割し，縦横に連続した黒ピクセルの長さを列挙する（20×20 メッシュの場合の例が図 1）。これらの黒ピクセルの長さの最頻値をその漢字の線幅として推定する。黒ピクセルの総数（漢字の “面積”）をこの線幅で割った値を線長とする。なお，以下ではボックスの 1 辺の長さが 1 となるように規格化された線長を用いる。

図 2 は常用漢字 (a) および JIS 漢字 (b) の画数

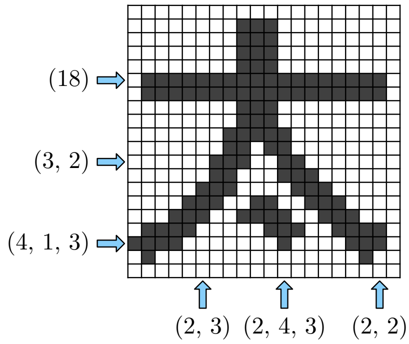


図 1. 20×20 のメッシュで出力した “太” と連続した黒ピクセルのデータの例。たとえば “(4, 1, 3)” は行内に長さ 4, 1, 3 の連続した黒ピクセルが存在することを意味する。

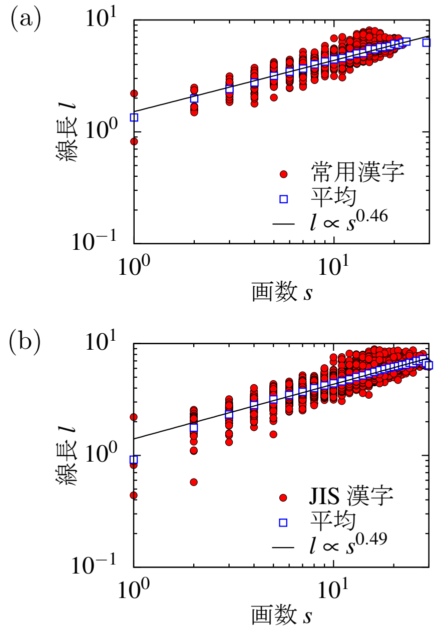


図 2. (a) 常用漢字 2136 字および (b)JIS 漢字 6355 字の画数 s と線長 l の散布図。白抜きの四角は画数ごとの平均線長。

と線長の散布図（両対数表示）である。各画数における線長の平均値を白抜きの四角で示す。個々の漢字は線長にばらつきがあるが，画数ごとの平均線長は両対数目盛においてほぼ直線的に増加する。すなわち，画数 s と平均線長 l にはおおむねベキ乗則

$$l \propto s^{\beta} \tag{1}$$

が成り立つ。ベキ指数 β の値は常用漢字で $\beta=0.46$, JIS 漢字で $\beta=0.49$ である（図中の実線）。

3　フラクタルとの関係

画数と線長のベキ乗則について，フラクタルの視点から考察する。

図 3 に示すように，段階的にフラクタル図形を描いていく。まず，1 辺の長さ L の正三角形を第 0 段階とする。線長は $l_0 = 3L$ であり，各線分を 1 画で書くことにすると画数は $s_0 = 3$ となる。第 1 段階では，正三角形の各辺の中点を結んでできる下向きの正三角形（1 辺 $L/2$）を追加する。線長は $l_1 = 3L + (3/2)L = (9/2)L$，画数は $s_1 = 6$ となる。同様に，各段階で上向き三角形の辺の中点を結んでできる下向き三角形を追加していくと，第 n 段階において

$$l_n = l_{n-1} + \left(\frac{3}{2}\right)^n L, \quad s_n = s_{n-1} + 3^n$$

という漸化式が成り立つ。初期条件 $l_0 = 3L$, $s_0 = 3$ を満たす解として，

$$l_n = 3\left(\frac{3}{2}\right)^n L, \quad s_n = \frac{3}{2}(3^n + 1)$$

が得られる。n を消去すると，

$$l_n = 3L\left(\frac{2}{3}s_n - 1\right)^{1-\ln 2/\ln 3}$$

となり，充分に大きな n において，

$$l \propto s^{1-\ln 2/\ln 3} \tag{2}$$

という指数 $1-\ln 2/\ln 3$ のベキ乗則が導かれる。

図 3 では，n を大きくする極限で Sierpinski ガスケットが描かれる。その Hausdorff 次元は $D = \ln 3/\ln 2$ である。式 (1) と (2) を比較すると，指数 β と次元 D の関係式

$$\beta = 1 - \frac{1}{D}, \quad D = \frac{1}{1-\beta}$$

が得られる。ここでは線分を 1 画で書くと約束したが，画数の定義を変更（各段階で追加される三角形を 1 画で書くなど）しても β と D の関係は変わらない。また，同様の関係は Sierpinski ガスケット以外のフラクタルを描く過程でも成り立つ。

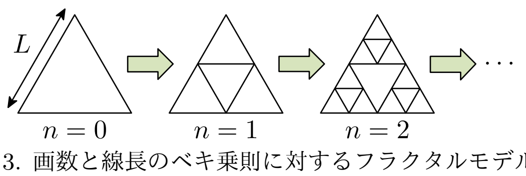


図 3. 画数と線長のベキ乗則に対するフラクタルモデル。下向き三角形を階層的に追加することでフラクタル図形（Sierpinski ガスケット）が描かれる。

常用漢字の $\beta = 0.46$ および JIS 漢字の $\beta = 0.49$ より，次元はそれぞれ $D = 1.85$, $D = 1.96$ となる。次元 D が 2 に近いことから，漢字の形の複雑さは画数が大きくなるにつれてほぼ平面充填的に増加するといえる。

謝辞　本研究は，科研費 基盤研究 (C) (19K03656, 18K06406) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] E. G. Altmann and M. Gerlach, Statistical Laws in Linguistics, in: M. Degli Esposti, E. Altmann, and F. Pachet (eds.) Creativity and Universality in Language, Lecture Notes in Morphogenesis (2016), 7–26.

[2] M. Ohta and K. Yamamoto, Power-law Relation and Complexity in the Shape of Chinese Character (Kanji), J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 88 (2019), 064803 [5 pages].

[3] Joyo_Kanji (by KeitarouNakayama), http://linkdata.org/work/rdf1s3597i.

[4] 漢字辞典オンライン, https://kanji.jitenon.jp

1次元3状態自由量子ウォークの3つの基本性質について

劉 家欣 [1], 黒田 久泰 [1]

[1] 愛媛大学大学院 理工学研究科
e-mail : liu@ns.cs.ehime-u.ac.jp

1 はじめに

量子ウォークは本来，時間発展につれそれぞれの方向へ確率的ランダムに 1 単位移動するモデルである [1][2]．本研究では，それぞれの方向に移動する能力が変化できるように仕様を変えることで,「移動速度」という概念を定義した．

また，量子ウォークを 2 状態で議論するケースが圧倒的に多かったが，本研究では 3 状態の量子ウォークをターゲットにして議論する．

2 自由量子ウォーク

自由量子ウォークのダイナミックスは，一般的な量子ウォークとほぼ同じで, 時刻 $n+1$ の場所 x での状態は，時刻 n の場所 $x-M_L$ と $x-M_R$ $(M_L, M_R \in \mathbb{Z}\backslash\{0\})$ での状態の重ね合わせによって決まる．ここで，M_L と M_R はそれぞれ左向きと右向きに移動する状態に対応する「移動速度」である．図 1 は自由量子ウォークでの状態の重ね合わせを表わしている．ただし，P と Q はそれぞれ，M_L と M_R に働きかける動作作用素であり，$U = P + Q$ はユニタリ行列である．

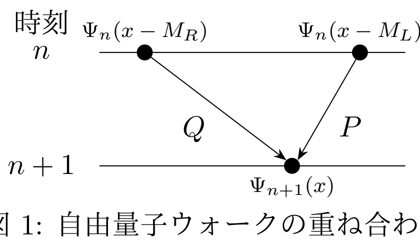


図 1: 自由量子ウォークの重ね合わせ

自由量子ウォークのダイナミックスは以下の漸化式で表せる．

$$\Psi_{n+1}(x) = Q\Psi_n(x-M_R) + P\Psi_n(x-M_L) \quad (1)$$

3 3 状態自由量子ウォーク

状態ベクトルの要素数を増やすことで，多状態の量子ウォークの量子ビットの状態を表せる．この場合，状態数に応じて移動作用素となるユニタリ行列の次元数も増える．この節では，3 状態自由量子ウォークについて述べる．

ここで，ダイナミックスを定義するため，3 次元ユニタリ行列 $U \in \mathrm{U}(3)$ を以下のように分解する．

$$U_1 = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, U_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$U_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{bmatrix}$$

ただし，u_{ij} は複素数である．そして，時間が発展するごと，x 軸方向に M_1，M_2，M_3 単位移動する（$M_1, M_2, M_3 \in \mathbb{Z}$）重みが U_1, U_2, U_3 になるようなすべての量子ウォークを 3 状態自由量子ウォークと呼ぶ．ただし，任意の $j, k \in \{1, 2, 3\}$ に対して，$M_j \neq M_k$ が満たされる．特に，ある $M_j = 0$ が存在し，それ以外の 2 つの「移動速度」に関して，$M_k = -M_l$ が満たされる場合，この 3 状態量子ウォークを 3 状態対称量子ウォークと呼び，それ以外の 3 状態量子ウォークのことを 3 状態非対称量子ウォークと呼ぶ．ここで，$j, k, l \in \{1, 2, 3\}$ は $j \neq k, k \neq l, j \neq l$ を満たす．そうすると，3 状態自由量子ウォークのダイナミックスは図 2 のようになる．

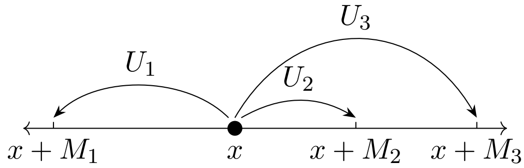


図 2: 3 状態自由量子ウォークのダイナミックス

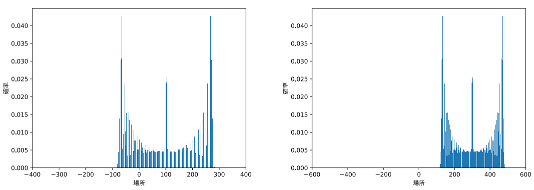
4 3 状態自由量子ウォークの基本性質

ここからは 3 状態自由量子ウォークの 3 つの基本性質を紹介する．ただし，以下の 3 つの小節の中に挙げる実験では，初期量子ビットを $\varphi = {}^T[1/\sqrt{3}, -1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}]$ に固定する．

4.1 平行移動の性質

$U_i (i = 1, 2, 3)$ の状態に対応した速度 M_i を同時に $k \in \mathbb{Z}$ を足しても，確率分布は変わらず，速度を変化した前後の確率分布図はお互い x 軸上での平行移動で得られる．

$n = 100$ の時のグローバーウォークの確率分布が図 3a のようになる．これを基準にし，M_1, M_2, M_3 に同時に 2 を足すと (平行移動)，移動後の確率分布は図 3b のようになる．図で表された結果は予想通り，確率分布の形が変わらず，図 3b は図 3a を x 軸上で平行移動することで得られる．



(a) $M_i = -2, 1, 4$　(b) $M_i = -3, 0, 3$

図 3: 平行移動の性質

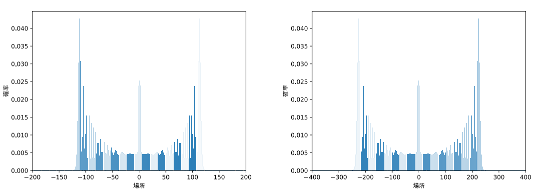
この時，元の自由量子ウォークの各場所の存在確率 $\Psi_n(x)$ と k 個分平行移動した後の自由量子ウォークの各場所の存在確率 $\Psi'_n(x)$ の関係は以下の式で表せる．

$$\Psi'_n(x) = \Psi_n(x + nk) \tag{2}$$

4.2 拡大・縮小

図 4 は拡大・縮小の性質を示している．

図 4b の実験では，図 4a の実験の M_1, M_2, M_3 を同時に 2 倍にしている．図で分かるように，2 つのグラフは全く同じ形をしている．そこでグラフの横軸の目盛に注目すると，図 4b の目盛の幅は 4a の目盛の幅の 2 倍だということがわかる．すなわち，M_i を同時に k 倍にしても，確率分布の形が変わらず，x 軸上で k に比例して元の確率分布がスケール変換される．



(a) $M_i = -2, 0, 2$　(b) $M_i = -4, 0, 4$

図 4: 拡大・縮小の性質

この時，元の自由量子ウォークの各場所の存在確率 $\Psi_n(x)$ と k 倍にした後の自由量子ウォークの各場所の存在確率 $\Psi''_n(x)$ の関係は以下の式で表せる．

$$\Psi''_n(x) = \Psi_n(kx) \tag{3}$$

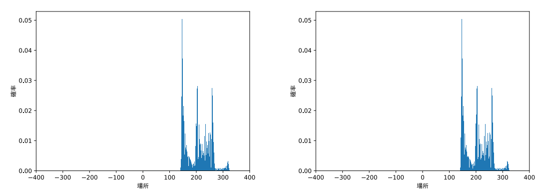
4.3 グローバーウォークの対称性

3 状態量子ウォークの初期量子ビット $\varphi \in \Phi^3$ は以下の集合によって決まる．

$$\Phi^3 = \left\{ \varphi = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^m : \|\varphi\|^2 = 1 \right\}$$

3 状態自由量子ウォークに対して，$\varphi_1 = \varphi_3$ が満たされる場合，M_1 と M_3 を入れ替えると，入れ替えの前と後の量子ウォークは同じ確率分布を示す．この場合，入れ替えの前後で，量子ウォーカーがそれぞれの点での測度（存在確率）が同じであるが，状態ベクトルが異なることが分かっている．ただし，この性質はグローバーウォークの場合のみ成立し，すなわち，移動作用素であるユニタリ行列はグローバー行列である必要がある．また，この性質はユニタリ行列の分け方によっては成立しない場合もある．

3 状態自由グローバーウォークの数値実験の例を図 5 に示す，図からわかるように，M_1 と M_3 を入れ替えても，確率分布か同じであることがわかる．



(a) $M_i = 2, 1, 4$　(b) $M_i = 4, 1, 2$

図 5: グローバーウォークの対称性

参考文献

[1] 今野紀雄, 量子ウォークの数理, 日本数学会, 数学 69 巻 1 号 (2017), 70–90.

[2] 今野紀雄, 量子ウォーク, 森北出版株式会社, 2014.

Lagrange 力学におけるエネルギー保存数値解法の一般的記述について

石川 歩惟 [1], 谷口 隆晴 [1,2]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科，[2]JST さきがけ
e-mail : a-ishikawa@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

エネルギー保存数値解法は, 運動方程式のもつエネルギー保存則を離散化後にも保つような数値計算スキームである．解析力学に限ると, その導出法の多くは Hamilton 力学上の方法となっている．例えば離散勾配法 [1] は, Hamilton 方程式中の勾配を離散勾配と呼ばれるもので置き換えることでスキームを構成する．

それに対し谷口は, スキーム設計指針は異なるものの, 離散勾配法の考え方を Euler–Lagrange 偏微分方程式に応用したスキームを提案した [2]．しかし, 偏微分方程式を空間方向に半離散化したものも含め, 常微分方程式に対するスキームの一般形は未だ示されていない．特に, ラグランジアンは変数の時間微分を引数に取るため, 何らかの方法での離散化が必要となる．[2] では, これを数値解の前進差分と後退差分で置き換えたものを用い, 各差分を 1 つの変数と見なすことで, 離散勾配法を Lagrange 力学上でも扱えるようにした．従って, 空間上の複数の点を用いて近似された, 一般の離散ラグランジアンに対するスキームは考慮されていない．そこで, 本発表では, Euler–Lagrange 常微分方程式に対するエネルギー保存数値解法の一般的記述を与える．

2 Noether の定理とエネルギー保存則

簡単のため, 配位空間を $\mathbb{R}^n$ とし, 一般化座標を $[0,T]$ 上の C^2 級関数として $q=q(t)$ で表す．ラグランジアン $\mathcal{L}$ は $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ 上の C^2 級関数とする．

谷口の方法では, Noether の定理に着目してエネルギー保存スキームを設計する．Noether の定理によると, $\mathcal{L}$ が時間方向の対称性をもつならば, エネルギー保存則の存在が以下のように示される．q は, Euler–Lagrange 方程式

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}=0 \tag{1}$$

に従うものとする．作用積分

$$\int_0^T\mathcal{L}(q(t),\dot{q}(t))\mathrm{d}t \tag{2}$$

に対する $t'=t+\delta t$, $q'(t')=q(t)$ なる変換より

$$\begin{aligned}0=&\frac{1}{\delta t}\left[\int_0^T\mathcal{L}(q(t),\dot{q}(t))\mathrm{d}t\right.\\&\left.-\int_{\delta t}^{T+\delta t}\mathcal{L}(q(t'-\delta t),\dot{q}(t'-\delta t))\mathrm{d}t'\right]\\=&\frac{1}{\delta t}\left[\int_0^T\left(\mathcal{L}(q,\dot{q})|_{t=s}-\mathcal{L}(q,\dot{q})|_{t=s-\delta t}\right)\mathrm{d}s\right.\\&-\int_T^{T+\delta t}\mathcal{L}(q,\dot{q})|_{t=s-\delta t}\,\mathrm{d}s\\&\left.+\int_0^{\delta t}\mathcal{L}(q,\dot{q})|_{t=s-\delta t}\,\mathrm{d}s\right]\end{aligned}$$

を得るが, $\delta t\to 0$ とし, $\mathcal{L}$ に対する連鎖律, 部分積分を順に用いることで, さらに

$$\begin{aligned}&\to\int_0^T\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q}\dot{q}+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}\ddot{q}\right)\mathrm{d}s-\left[\mathcal{L}(q(t),\dot{q}(t))\right]_0^T\\&=\int_0^T\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}\right)\dot{q}\,\mathrm{d}s\\&\quad+\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}\dot{q}-\mathcal{L}(q,\dot{q})\right]_0^T\end{aligned}$$

と変形できる．ここで, 積分項は (1) により消えるため, エネルギー保存則を得る:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}\dot{q}-\mathcal{L}(q,\dot{q})=\mathrm{const.} \tag{3}$$

3 スキームの一般的記述

前節の証明では, 最後に Euler–Lagrange 方程式を用いることで, エネルギー保存則を証明した．谷口の方法では, 離散版の作用積分を時間方向に差分化することで, 離散版のエネルギー保存則と離散版の Euler–Lagrange 方程式を同時に導く．

証明の離散化のためには, 作用積分, 特に被積分関数である $\mathcal{L}$ の離散近似が必要である．本稿では, 時間刻み幅を Δt とし, $\hat{q}^k$ を $q(k\Delta t)$ の近似値とする．また, $\hat{q}^k$ の前進差分を $\delta^+\hat{q}^k$ と表す．[2] では, $t=k\Delta t$ におけるラグランジアンを, q を $\hat{q}^k$, $\dot{q}$ を $\hat{q}^k$ の前進差分と後退差分で

置き換えて近似している．本発表では, スキームの一般的な記述に向けて, 2 つの時刻における近似値を用いて

$$\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1}) \approx \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} \mathcal{L}(q, \dot{q})\mathrm{d}t \qquad (4)$$

となるような関数 $\mathcal{L}_{\mathrm{d}}$ を $\mathcal{L}$ の離散近似として用いていると仮定する．また, 前節の証明では連鎖律と部分積分も用いたが, これらも適切に離散版で再現する必要がある．連鎖律は, 離散勾配法で用いられる離散勾配を用いて再現される．離散勾配は微分 $\dot{q}$ を含む関数に対しては厳密には定義されていないため, [2] では差分近似したものを 1 つの変数と見なして離散勾配を導入していた．一方で $\mathcal{L}_{\mathrm{d}}$ は引数に差分を陽に取らず, 1 つの変数の異なる 2 時刻での近似値を用いるが, これもやはり離散勾配の定義では想定されていない．本稿では, 2 つの引数を独立した変数と見なすことで, $\mathcal{L}_{\mathrm{d}}$ に対する離散勾配を導入する．

定義 1 (4) により定めた $\mathcal{L}_{\mathrm{d}}$ に対し, $\overline{D}_i (i = 1, 2)$ を以下を満たすものとして定義する:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(q_0', q_1') - \mathcal{L}_{\mathrm{d}}(q_0, q_1)\\
&= \begin{pmatrix} \overline{D}_1\mathcal{L}_{\mathrm{d}}((q_0, q_1), (q_0', q_1')) \\ \overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}((q_0, q_1), (q_0', q_1')) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} q_0' - q_0 \\ q_1' - q_1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

部分積分は, 部分和分

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=0}^{N-1} a^{k+1} \cdot \delta^+ b^k \Delta t\\
&= [a^k\, b^k]_0^N - \sum_{k=0}^{N-1} \delta^+ a^k \cdot b^k \Delta t
\end{aligned}$$

で置き換える．また, 以下では簡単のため,

$$\overline{D}_i\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^k := \overline{D}_i\mathcal{L}_{\mathrm{d}}((\hat{q}^{k-1}, \hat{q}^k), (\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1}))$$

と表す．前節の証明と対応するよう計算すると,

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{\Delta t}\left[\sum_{k=-1}^{N-2} \mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^{k+1}, \hat{q}^{k+2}) \right.\\
&\qquad \left. - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1})\right]\\
&= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^{k+1}, \hat{q}^{k+2}) - \mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1})}{\Delta t}\\
&\qquad - \left[\frac{1}{\Delta t}\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1})\right]_0^N\\
&= \sum_{k=0}^{N-1} \overline{D}_1\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^{k+1} \cdot \delta^+\hat{q}^k + \overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^{k+1} \cdot \delta^+ q^{k+1}\\
&\qquad - \left[\frac{1}{\Delta t}\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1})\right]_0^N\\
&= \sum_{k=0}^{N-1} \left(\overline{D}_1\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^{k+1} + \overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^k\right) \cdot \delta^+ q^k\\
&\qquad + \left[\overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^k \cdot \delta^+ q^k - \frac{1}{\Delta t}\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1})\right]_0^N
\end{aligned}$$

となる．前節の計算と比較することにより, [2] を一般化した次の定理を得る．

定理 2 スキーム

$$\overline{D}_1\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^{k+1} + \overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^k = 0 \qquad (5)$$

は, 以下の保存則をもつ:

$$\overline{D}_2\mathcal{L}_{\mathrm{d}}^k \cdot \delta^+ q^k - \frac{1}{\Delta t}\mathcal{L}_{\mathrm{d}}(\hat{q}^k, \hat{q}^{k+1}) = \mathrm{const.} \quad (6)$$

謝辞　本研究は JST さきがけ（JPMJPR16EC）の助成を受けたものである．

参考文献

[1] O. Gonzalez, Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems, J. Nonlinear Sci., Vol. 6 (1996), 449–467.

[2] T. Yaguchi, Lagrangian Approach to Deriving Energy-Preserving Numerical Schemes for the Euler–Lagrange Partial Differential Equations, M2AN, Vol. 47 (2013), 1493–1513.

Hamilton 系に対する SAV 法

剱持 智哉 [1]
[1] 名古屋大学大学院工学研究科
e-mail: kemmochi@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1. SAV 法とは

Scalar auxiliary variable 法 (SAV 法) は, [1] において提案された, 勾配流方程式に対する数値解法である．この節では, 半線形放物型方程式

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta u - f(u), & \text{in } \Omega \times (0,T), \\ \partial_n u = 0, & \text{on } \partial\Omega \times (0,T), \\ u|_{t=0} = u_0, & \text{in } \Omega \end{cases} \tag{1}$$

を例に, SAV 法の導出方法を簡単に紹介する．ただし, $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ は領域, ∂_n は境界における法線微分, $u_0 \in C^0(\overline{\Omega})$ は与えられた関数であり, 非線形項 $f(u)$ はある関数 F を用いて $f(u) = F'(u)$ の形で書けるものとする．このとき, (1) は汎関数

$$E[v] = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}|\nabla v|^2 + F(v) \right) dx \tag{2}$$

に対する勾配流となっている．

エネルギーのポテンシャル部分を

$$E_1[v] = \int_\Omega F(v) dx$$

とおき, E_1 は下に有界であると仮定する．このとき, 実数 $a > -\inf_v E_1[v]$ を 1 つ固定し, 補助変数 (scalar auxiliary variable)

$$r(t) = \sqrt{E_1[u(t)] + a}$$

を導入すると, (1) は以下のように書き換えられる:

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta u - \dfrac{r(t)}{\sqrt{E_1[u(t)] + a}} F'(u), \\ r'(t) = \dfrac{1}{2\sqrt{E_1[u(t)] + a}} (F'(u), \partial_t u). \end{cases} \tag{3}$$

ただし, $(\cdot, \cdot)$ は Ω における L^2 内積である．

SAV 法は, 式 (3) に基づいて方程式 (1) の時間変数を離散化する手法である．SAV 法にはさまざまなバリエーションがあるが, 最も簡単な 1 次のスキームは以下のように書かれる:

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} \\ \quad = \Delta u^{n+1} - \dfrac{r^{n+1}}{\sqrt{E_1[u^n] + a}} F'(u^n), \\ \dfrac{r^{n+1} - r^n}{\Delta t} \\ \quad = \dfrac{1}{2\sqrt{E_1[u^n] + a}} \left(F'(u^n), \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} \right). \end{cases} \tag{4}$$

ただし, $\Delta t > 0$ は時間刻み幅, $u^n \approx u(\cdot, n\Delta t)$, $r^n \approx r(n\Delta t)$ である．一見複雑になったように見えるが, u^{n+1} と r^{n+1} に着目すると, すべての項が線形となっている．さらに, 次の意味での安定性も成り立つ．

補題 1. スキーム (4) の解 u^n, r^n に対し,

$$E^n := \int_\Omega \frac{1}{2}|\nabla u^n|^2 dx + (r^n)^2$$

とおく．このとき, $E^{n+1} \le E^n$ である． □

証明は, (4) の第 1 式に u^{n+1} をかけて積分したものと, 第 2 式に $2r^{n+1}$ をかけたものを足し合わせればよい．式 (3) において $r^2 = E_1[u] + a$ であったことを思い出すと, E^n はエネルギー汎関数 (2) に対応する量となっている．したがって, 補題 1 は, エネルギー散逸性に対応している．

スキーム (4) に対しては誤差評価などの解析が行われており, 誤差が $O(\Delta t)$ となることが知られている [2]．さらに, BDF 公式を用いることで容易に高精度化が可能 [1] であり, 誤差は $O(\Delta t^2)$ となることが知られている [2]．

SAV 法は「ポテンシャル項が下に有界である」という仮定を本質的に用いている．そのため, Fujita 型方程式のような爆発しうる問題や, Hamilton 系などの問題には, そのままでは適用できない．そこで本研究では, SAV 法の適用範囲を拡張することを試みる．

2. Hamilton 系への拡張

本稿では, Hamilton 系

$$\begin{cases} \dot{z} = J\nabla H(z) & t > 0, \\ z(0) = z_0 \end{cases} \tag{5}$$

に対して SAV 法を適用することを考える．ここで, z は $\mathbb{R}^{2n}$ 値の未知関数, $H \in C^1(\mathbb{R}^{2n};\mathbb{R})$ は Hamiltonian, $J \in \mathbb{R}^{2n\times 2n}$ は歪対称行列である．Hamiltonian H は以下のように分解できると仮定する:

$$H(\zeta) = \frac{1}{2}|\zeta|^2 - H_{\mathrm{U}}(\zeta) + H_{\mathrm{L}}(\zeta).$$

ただし, H_{U}, H_{L} はともに**下に有界**な C^1 級関数である．

注意 1. カットオフ関数を考えることにより, $\mathbb{R}$ 上の任意の C^1 級関数は, 上に有界な関数と下に有界な関数との和に分解することができる．したがって, 上記の「仮定」は, 単に記号を定めているに過ぎない．ただし, 分解は一意ではない．

また, 分解の 1 項目は, 偏微分方程式における Dirichlet エネルギーを想定している． □

このとき, 補助変数を 2 つ用意する:

$$r_{\mathrm{U}}(t) = \sqrt{H_{\mathrm{U}}(z(t)) + a_{\mathrm{U}}},$$
$$r_{\mathrm{L}}(t) = \sqrt{H_{\mathrm{L}}(z(t)) + a_{\mathrm{L}}}.$$

ただし, $a_{\mathrm{U}} > -\inf_v H_{\mathrm{U}}(v)$, $a_{\mathrm{L}} > -\inf_v H_{\mathrm{L}}(v)$ である．これらを用いると, 方程式 (5) は次のように書き換えられる:

$$\begin{cases} \dot{z} = J\left(z - \dfrac{r_{\mathrm{U}}}{\sqrt{H_{\mathrm{U}}(z) + a_{\mathrm{U}}}}\nabla H_{\mathrm{U}}(z) \right. \\ \qquad\qquad \left. + \dfrac{r_{\mathrm{L}}}{\sqrt{H_{\mathrm{L}}(z) + a_{\mathrm{L}}}}\nabla H_{\mathrm{L}}(z)\right), \\ \dot{r}_{\mathrm{U}} = \dfrac{1}{2\sqrt{H_{\mathrm{U}}(z) + a_{\mathrm{U}}}}\nabla H_{\mathrm{U}}(z)\cdot\dot{z}, \\ \dot{r}_{\mathrm{L}} = \dfrac{1}{2\sqrt{H_{\mathrm{L}}(z) + a_{\mathrm{L}}}}\nabla H_{\mathrm{L}}(z)\cdot\dot{z}. \end{cases}$$

この方程式を元に, 以下のようなスキームを考える:

$$\begin{cases} \dfrac{z^{n+1} - z^n}{\Delta t} = J\left(z^{n+1/2} - \dfrac{r_{\mathrm{U}}^{n+1/2}}{\sqrt{H_{\mathrm{U}}(z^n) + a_{\mathrm{U}}}}\nabla H_{\mathrm{U}}(z^n) + \dfrac{r_{\mathrm{L}}^{n+1/2}}{\sqrt{H_{\mathrm{L}}(z^n) + a_{\mathrm{L}}}}\nabla H_{\mathrm{L}}(z^n)\right), \\ \dfrac{r_{\mathrm{U}}^{n+1} - r_{\mathrm{U}}^n}{\Delta t} = \dfrac{1}{2\sqrt{H_{\mathrm{U}}(z^n) + a_{\mathrm{U}}}}\nabla H_{\mathrm{U}}(z^n)\cdot\dfrac{z^{n+1} - z^n}{\Delta t}, \\ \dfrac{r_{\mathrm{L}}^{n+1} - r_{\mathrm{L}}^n}{\Delta t} = \dfrac{1}{2\sqrt{H_{\mathrm{L}}(z^n) + a_{\mathrm{L}}}}\nabla H_{\mathrm{L}}(z^n)\cdot\dfrac{z^{n+1} - z^n}{\Delta t}. \end{cases} \tag{6}$$

ただし, $z^{n+1/2} = (z^{n+1} + z^n)/2$ である．$r_{\mathrm{U}}^{n+1/2}$ なども同様である．このスキームは, ある意味でのエネルギー保存性を持つ．

補題 2. スキーム (6) の解 z^n, r_{U}^n, r_{L}^n に対し, $H^n = |z^n|^2/2 - (r_{\mathrm{U}}^n)^2 + (r_{\mathrm{L}}^n)^2$ とおく．このとき, $H^{n+1} = H^n$ である． □

証明は容易である．実際, (6) の第 1 式に $z^{n+1/2}$ を, 第 2 式に $-2r_{\mathrm{U}}^{n+1/2}$ を, 第 3 式に $2r_{\mathrm{L}}^{n+1/2}$ をかけて足し合わせれば良い．勾配流の場合と同様に, H^n は Hamiltonian に対応する量となっていることにも注意しておく．

講演では, スキームの導出の後に, 数値例をいくつか報告する．数値例によると, スキーム (6) の誤差は $O(\Delta t)$ であると予想されるが, 誤差評価や可解性などの理論的な解析は未解決である．

参考文献

[1] J. Shen, J. Xu, and J. Yang. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows. *J. Comput. Phys.*, vol. 353, pp. 407–416, 2018.

[2] J. Shen and J. Xu. Convergence and error analysis for the scalar auxiliary variable (SAV) schemes to gradient flows. *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 56, no. 5, pp. 2895–2912, 2018.

動的境界条件を伴う Cahn–Hilliard 系に対する構造保存スキームの解析について

奥村 真善美 [1], 深尾 武史 [2], 降籏 大介 [1], 吉川 周二 [3]
[1] 大阪大学, [2] 京都教育大学, [3] 大分大学
e-mail : okumura@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 導入

本研究では, 空間領域 Ω を一次元, つまり, $\Omega := (0, L)$ とする. 以下の動的境界条件下での Cahn–Hilliard 方程式系 [1] を考える.

$$\partial_t u = \partial_x^2 p \quad \text{in } \Omega \times (0, T], \tag{1}$$

$$p = -\gamma \partial_x^2 u + F'(u) \quad \text{in } \Omega \times (0, T], \tag{2}$$

$$\partial_t u(0, t) = \partial_x u(x, t)|_{x=0}, \quad \text{in } (0, T], \tag{3}$$

$$\partial_t u(L, t) = -\partial_x u(x, t)|_{x=L} \quad \text{in } (0, T], \tag{4}$$

$$\partial_x p(x, t)|_{x=0} = \partial_x p(x, t)|_{x=L} = 0 \quad \text{in } (0, T]. \tag{5}$$

ただし, $\gamma > 0$ であり, F' はポテンシャル F の導関数で, F は下に有界かつ十分滑らかと仮定する. F の例としては, $F(s) := (q/4)s^4 - (r/2)s^2$ がある. ここで, q, r は正定数. この方程式を特徴づける量として, 体積 M, 局所エネルギー G, 全エネルギー J を以下のように定める.

$$M(u) := \int_0^L u dx,$$

$$G(u, \partial_x u) := \frac{\gamma}{2} |\partial_x u|^2 + F(u),$$

$$J(u) := \int_0^L G(u, \partial_x u) dx.$$

このとき, (1)–(5) の解 u に対して, 以下の性質 (保存性, 散逸性) が成り立つ.

$$\frac{d}{dt} M(u(t)) = 0, \tag{6}$$

$$\frac{d}{dt} J(u(t)) = -\gamma |\partial_t u(0, t)|^2 - \gamma |\partial_t u(L, t)|^2 - \int_0^L |\partial_x p(t)|^2 dx \leq 0. \tag{7}$$

上記の性質を離散的に再現するスキームを離散変分導関数法 (DVDM)[2] により構成する.

2 DVDM によるスキームの構成

空間分割幅を $\Delta x := L/K$, 時間分割幅を Δt とする. $k = 0, \ldots, K$, $n = 0, 1, \ldots$ に対し, 問題の厳密解 $u(k\Delta x, n\Delta t)$ に対応する数値解を $U_k^{(n)}$ とする. また, $\boldsymbol{U}^{(n)} := (U_{-1}^{(n)}, U_0^{(n)}, \ldots, U_K^{(n)}, U_{K+1}^{(n)})^\top$ とする. ここで, $U_{-1}^{(n)}$, $U_{K+1}^{(n)}$ は境界の外向き法線方向微分を中心差分で近似するのに必要な仮想的な量で, 境界条件を通じて求まる. そして, δ_k^+, δ_k^-, $\delta_k^{\langle 1 \rangle}$, $\delta_k^{\langle 2 \rangle}$ をそれぞれ, 空間方向の前進, 後退, 一階中心, 二階中心差分作用素とする [2]. 本研究では, J の離散版に相当する J_{d} を以下のように定める. $n = 0, 1, \ldots$ に対して,

$$J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n)}) := \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} G_{\mathrm{d},k}^+(\boldsymbol{U}^{(n)}) \Delta x + \sum_{k=1}^{K} G_{\mathrm{d},k}^-(\boldsymbol{U}^{(n)}) \Delta x \right\}. \tag{8}$$

ただし, G_{d} は G を離散化したもので, 今回は以下のように採用する.

$$G_{\mathrm{d},k}^+(\boldsymbol{U}^{(n)}) := \frac{\gamma}{2} \left| \delta_k^+ U_k^{(n)} \right|^2 + F\left(U_k^{(n)} \right),$$

$$G_{\mathrm{d},k}^-(\boldsymbol{U}^{(n)}) := \frac{\gamma}{2} \left| \delta_k^- U_k^{(n)} \right|^2 + F\left(U_k^{(n)} \right).$$

(8) のように J_{d} を採用し, 適切な部分和分公式を用いることで, 境界の外向き法線方向微分の近似として中心差分を用いた以下の構造保存スキームを構成し, スキームの改良を行った.

2.1 構造保存スキーム

$n = 0, 1, \ldots$ に対して,

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} P_k^{(n)}, \quad (k = 0, \ldots, K), \tag{9}$$

$$P_k^{(n)} = -\gamma \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) + \frac{dF}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \quad (k = 0, \ldots, K), \tag{10}$$

$$\frac{U_0^{(n+1)} - U_0^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 1 \rangle} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \Bigg|_{k=0}, \tag{11}$$

$$\frac{U_K^{(n+1)} - U_K^{(n)}}{\Delta t} = -\delta_k^{\langle 1 \rangle} \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \Bigg|_{k=K}, \tag{12}$$

$$\delta_k^{\langle 1 \rangle} P_k^{(n)} = 0 \quad (k = 0, K). \tag{13}$$

ただし, $dF/d(\cdot, \cdot)$ は F の差分商で, 以下のように定義される.

$$\frac{dF}{d(\xi, \eta)} = \begin{cases} \dfrac{F(\xi) - F(\eta)}{\xi - \eta}, & (\xi \neq \eta), \\ F'(\xi), & (\xi = \eta). \end{cases}$$

2.2 離散版の保存性と散逸性

提案スキームの解に対し, (6) と (7) の離散版に相当する以下の性質が成り立つ.

定理 1 スキーム (9)–(13) の解 $\boldsymbol{U}^{(n)}$ は以下の性質を満たす. $n = 0, 1, \ldots$ に対し,

$$\delta_n^+ M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n)}) = 0,$$

$$\delta_n^+ J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n)}) = -\gamma \left|\delta_n^+ U_0^{(n)}\right|^2 - \gamma \left|\delta_n^+ U_K^{(n)}\right|^2 - \sum_{k=0}^{K}{}'' \frac{\left|\delta_k^+ P_k^{(n)}\right|^2 + \left|\delta_k^- P_k^{(n)}\right|^2}{2} \Delta x \leq 0.$$

ただし, δ_n^+ は時間方向の前進差分作用素. また, $M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}) := \sum_{k=0}^{K}{}'' U_k \Delta x$ であり, $\sum_{k=0}^{K}{}''$ は台形則に基づく和分作用素で, 以下で定義される. 任意の $\{f_k\}_{k=0}^{K} \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対し,

$$\sum_{k=0}^{K}{}'' f_k := \frac{1}{2} f_0 + \sum_{k=1}^{K-1} f_k + \frac{1}{2} f_K.$$

3 主結果

本研究では, 提案スキームの可解性と誤差評価を保証する定理として, [1, 3] で用いられているエネルギー法に基づいて以下が成り立つことを証明した.

定理 2 (可解性) $\boldsymbol{U}^{(0)} = \{U_k^{(0)}\}_{k=-1}^{K+1} \in \mathbb{R}^{K+3}$ とする. ここで,

$$B_0 := \left\{\frac{2}{\gamma}\left(J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(0)}) + L \left|\min\left\{\inf_{\xi \in \mathbb{R}} F(\xi), 0\right\}\right|\right)\right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$\tilde{B}_0 := \frac{1}{L}\left|M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(0)})\right| + L^{\frac{1}{2}} B_0$$

とおく. もし Δt が

$$\max\left\{\frac{3}{2}\max_{|\xi| \leq 2\tilde{B}_0}\left|F''(\xi)\right|, \ \frac{1}{2}\max_{|\xi| \leq 2\tilde{B}_0}\left|F''(\xi)\right| + \frac{5L^{\frac{1}{2}} B_0}{6}\max_{|\xi| \leq 2\tilde{B}_0}\left|F'''(\xi)\right|\right\}\sqrt{\frac{\Delta t}{2\gamma}} < 1$$

を満たすならば, スキーム (9)–(13) に一意解 $\{U_k^{(n)}\}_{k=-1}^{K+1} \in \mathbb{R}^{K+3}$ $(n = 1, 2, \ldots)$ が存在する.

定理 3 (誤差評価) u, p を初期値 $u(x,0) = u_0(x)$ を伴う問題 (1)–(5) の解とし, $u \in C^5([0, L] \times [0, T])$, $p \in C^5([0, L] \times [0, T])$ とする. そして,

$$\max_{0 \leq n \leq N}\left\{\left\|D\boldsymbol{U}^{(n)}\right\|, \left\|D\boldsymbol{u}^{(n)}\right\|\right\} \leq C_1,$$

$$\max_{0 \leq n \leq N}\left\{\left\|\boldsymbol{U}^{(n)}\right\|_{L_{\mathrm{d}}^\infty}, \left\|\boldsymbol{u}^{(n)}\right\|_{L_{\mathrm{d}}^\infty}\right\} \leq C_2$$

とする. ただし, 任意の $\boldsymbol{f} = \{f_k\}_{k=0}^{K} \in \mathbb{R}^{K+1}$ に対し,

$$\|D\boldsymbol{f}\| := \sqrt{\sum_{k=0}^{K-1}\left|\delta_k^+ f_k\right|^2 \Delta x},$$

$$\|\boldsymbol{f}\|_{L_{\mathrm{d}}^\infty} := \max_{0 \leq k \leq K}|f_k|$$

であり, C_1, C_2 は n に無関係な定数. ここで,

$$C_3 := \frac{C_1 L^{\frac{1}{2}} \max_{|\xi| \leq C_2}\left|F'''(\xi)\right| + \max_{|\xi| \leq C_2}\left|F''(\xi)\right|}{2}$$

とおき, $B \in (0, \gamma/C_3^2)$ を任意に固定する. もし, 時間分割幅 Δt が $\Delta t < B$ を満たす, つまり,

$$\Delta t < B < \frac{\gamma}{C_3^2}$$

ならば, k, n に無関係な定数 C が存在し, 以下の不等式が成り立つ. 任意の $t \in [0, T]$ に対し,

$$\|(\mathit{\Pi}_{\Delta x, \Delta t} U)(\cdot, t) - u(\cdot, t)\|_{L^\infty(0,L)} \leq C\left((\Delta x)^2 + (\Delta t)^2\right).$$

ただし, $\mathit{\Pi}_{\Delta x, \Delta t} U$ は提案スキームの解 $U_k^{(n)}$ を空間変数, 時間変数についてそれぞれ線形補間した関数である. つまり, この定理は, 提案スキームの数値解が Δx と Δt に対して二次の精度をもつことを意味している.

なお, 主結果の定理の証明と数値実験結果については講演にて述べる.

参考文献

[1] T. Fukao, S. Yoshikawa and S. Wada, Structure-preserving finite difference schemes for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions in the one-dimensional case, Commun. Pure Appl. Anal., **16** (2017), 1915–1938.

[2] D. Furihata and T. Matsuo, *Discrete variational derivative method: A structure-preserving numerical method for partial differential equations*, CRC Press, 2010.

[3] S. Yoshikawa, Energy method for structure-preserving finite difference schemes and some properties of difference quotient, J. Comput. Appl. Math., **311** (2017), 394–413.

正則化付き再生核近似を用いた前進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：tanka.s.bm@m.titech.ac.jp

1 設定

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 $(\Omega, \mathcal{F}, \{\mathcal{F}_t\}_{0\le t\le T}, \mathbb{P})$ を考える。ここで、次の式を前進後退確率微分方程式 (FBSDEs) と呼ぶ。

$$\begin{cases} X_t = x_0 + \int_0^t b(s, X_s, Y_s)ds \\ \qquad\qquad + \int_0^t \sigma(s, X_s, Y_s)dB_s \\ Y_t = g(X_T) + \int_t^T f(s, X_s, Y_s, Z_s)ds \\ \qquad\qquad - \int_t^T Z_s dB_s \end{cases} \tag{1}$$

この FBSDEs は $(X_t, Y_t, Z_t) \in (\mathbb{R}^d, \mathbb{R}, \mathbb{R}^{d\times d})$ の 3 つの解を持ち、この解を求める際に条件付き期待値の関数を近似する必要がある。本研究では、その関数近似手法をガウスカーネルと呼ばれる放射基底関数による正則化付き再生核近似を用いて条件付き期待値を近似して近似解を求めるアルゴリズムを設計する。

まず、この FBSDEs において以下を仮定する。

仮定 1
- b, σ, g, f は有界。
- b, σ, g, f は全ての変数に対して大域的リプシッツ連続かつ線形増大。
- $\sigma\sigma^{\mathbf{T}}$ は一様楕円性を満たす。 つまり、以下を満たす正の定数 a, b が存在する。
  $aI \le \sigma(t,x)\sigma(t,x)^{\mathbf{T}} \le bI$
  (I は $d \times d$ の単位行列)
- g は $C^{2+\alpha}(\mathbb{R}^d)$ 上で有界。

この仮定を満たすことで [1] より Y_t, Z_t は X_t から定まる連続関数として考えることができる。

$$Y_t = u(t, X_t), \quad Z_t = v(t, X_t) \tag{2}$$

次に、関数近似手法である正則化付き再生核近似は以下の様に定義する。ガウスカーネル $K_\alpha(x,y) = \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{\alpha^2}\right)$ と選択点 $\Gamma = \{x_1 \in \Omega, \cdots, x_N \in \Omega\}$ 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。

$$\underset{s\in\mathcal{N}_{K_\alpha}(\Omega)}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_{j=1}^N [f(x_j) - s(x_j)]^2 + \lambda ||s||_{\mathcal{N}_{K_\alpha}(\Omega)} \right\}$$

ここで、λ は正則化項、$\mathcal{N}_{K_\alpha}(\Omega)$ 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、

$$s^* = I^\lambda(f) = \sum_{j=1}^N \left\{(A+\lambda I)^{-1}(f|_\Gamma)\right\}_j K_\alpha(\cdot, x_j)$$

となる。また、次の仮定も定める。

仮定 2 有界な関数 f に対して $I^\lambda(f)(x)$ は関数近似のパラメータに依らないリプシッツ定数でリプシッツ連続。

2 アルゴリズムの設計

FBSDEs(1) の時間離散化は (2) を用いて次の様に表すことができる。

$$\begin{cases} X_0 = x_0, \quad u_n(x) = g(x) \\ X_{i+1}^{n,i,x} = x + b\left(t_i, x, u_i(x)\right)h \\ \qquad\qquad + \sigma\left(t_i, x, u_i(x)\right)B_{i,i+1} \\ v_i(x) = \frac{1}{h}\mathbb{E}\left[u_{i+1}(X_{i+1}^{n,i,x})B_{i,i+1}\right] \\ u_i(x) = \mathbb{E}\Big[u_{i+1}(X_{i+1}^{n,i,x}) \\ \qquad\qquad + f(t_i, x, u_{i+1}(X_{i+1}^{n,i,x}), v_i(x))h\Big] \end{cases}$$

ここで、$h = T/n, B_{i,i+1} = B_{t_{i+1}} - B_{t_i}$ と定義し、$u(t_i, x) = u_i(x), v(t_i, x) = v_i(x)$ とする。また、$X_{i+1}^{n,i,x}$ は時刻 t_i において値 x の時の時刻 t_{I+1} の値である。

次に点を取る範囲を決めるために、$r > 1$ で制限をつけたブラウン運動 $\tilde{B}_{i,i+1}$ を用いて次を定義する。

- $\tilde{X}_{i+1}^{n,i,x} = x + b(t_i, x, u_i(x))h$
  $\qquad + \sigma(t_i, x, u_i(x))\tilde{B}_{i,i+1}$
- $\tilde{X}_{i+1}^{n,i,x}$ の範囲：R_i

$$\begin{cases} R_{i+1} = c_0(1 + r^m)(1 + R_i) \quad (c_0 > 0) \\ R_0 > 0 \end{cases}$$

そして、上の条件付き期待値を正則化付き再生核近似で近似して、本研究での FBSDEs の

解を求めるアルゴリズムは次の様になる。

$$\begin{cases} X_0 = x_0, \quad \tilde{u}_n(x) = g(x) \\ \tilde{X}^{n,i,x}_{i+1} = x + b\left(t_i, x, \tilde{u}_i(x)\right) h \\ \qquad\qquad +\sigma\left(t_i, x, \tilde{u}_i(x)\right) B_{i,i+1} \\ \bar{v}_i(x) = \frac{1}{h}\mathbb{E}\left[\tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}^{n,i,x}_{i+1})B_{i,i+1}\right] \\ \tilde{v}_i(x) = I^{\lambda}(\bar{v}_i)(x) \\ \bar{u}_i(x) = \mathbb{E}\Big[\tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}^{n,i,x}_{i+1}) \\ \qquad\qquad +f(t_i, x, \tilde{u}_{i+1}(\tilde{X}^{n,i,x}_{i+1}), \tilde{v}_i(x))h\Big] \\ \tilde{u}_i(x) = I^{\lambda}(\bar{u}_i)(x) \end{cases}$$

このアルゴリズムを終端ステップ n から始めて、$\tilde{u}_0(x_0), \tilde{v}_0(x_0)$ を求める。

3　誤差評価

本研究では、次の誤差を評価する。

$$\Delta u_i = \sup_{x\in\Omega_i} |\tilde{u}_i - u_i|, \Delta v_i = \sup_{x\in\Omega_i} |\tilde{v}_i - v_i|$$

まず、[2] を用いて正則化付き再生核近似の誤差評価は次の様になる。

補題 1 関数 f がリプシッツ連続かつ有界のときに対して以下の不等式を満たす定数 C が存在する。、$\Omega_i = [-R_i, R_i]^d$ と選択点 $\Gamma = \{x_1 \in \Omega_i, \cdots, x_N \in \Omega_i\}$ に対して、

$$\sup_{x\in\Omega_i} |f(x) - I^{\lambda}(f)(x)| \leq C\left\{2 + \exp\left(\frac{(\alpha^*)^2}{8}\right)\right\}\alpha^*$$

ここで、

$$\alpha^* = h_{\Gamma,\Omega_i}^{\frac{2k-d}{2k+d+2}} R_i^{\frac{d+2}{2k+d+2}}, h_{\Gamma,\Omega_i} := \sup_{x\in\Omega_i} \max_{x_j\in\Gamma} |x - x_j|$$

とする。

これまでの仮定と補題を用いて以下の主定理を示す。

定理 2 誤差 $\Delta u_i, \Delta v_i$ と十分小さい h に対して、以下の不等式を満たす定数 C が存在する。

$$\Delta u_i + \sqrt{h}\Delta v_i \leq C\Big(R_0 r^n e^{-\beta r} + \left\{2 + \exp\left(\frac{(\alpha^*)^2}{8}\right)\right\}\alpha^*\Big)$$

ここで、α^* は補題 1 の値を用いる。

4　数値実験

次の FBSDEs を考える。

$$\begin{cases} X_t = x_0 + \int_0^t \sigma Y_s dB_s \\ Y_t = g(X_T) + \int_t^T -rY_s + \frac{1}{2}e^{-3r(T-s)}\sigma^2\sin^3(X_s)ds \\ \qquad\qquad -\int_t^T Z_s dB_s \end{cases}$$

この FBSDEs は解析解 Y_0 を持つのでその値と近似解 $\tilde{u}_{(}x_0)$ を評価する。

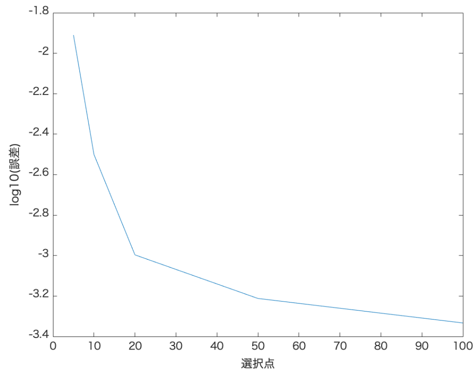
FBSDEs の変数を次の様に設定する。

σ	r	T	x_0
1	0.5	1	$\frac{\pi}{2}$

時間離散化と関数近似のパラメータを次の様に設定する。

n	Ω	λ
50	$[-2, 2]$	10^{-8}

結果は横軸を選択点 $N = 10, 20, 50, 100$、縦軸を $|Y_0, \tilde{u}_0(x_0)|$ の $\log_{10}$ の誤差で表す。



5　まとめと今後の課題

数値結果から正則化付き再生核近似を用いて前進後退確率微分方程式の近似解を求めることができ、誤差評価も示すことができた。課題としては、解の存在や関数近似での仮定がまだ強いのでさらに緩和する必要がある。また、多次元になると選択点が増えてしまい計算コストの問題が発生するので、選択点を上手く選ぶか関数近似の行列計算の高速化を考える必要がある。

参考文献

[1] DELARUE. F, and MENOZZI. S, A forward-backward stochastic algorithm for quasi-linear PDEs, The Annals of Applied Probability, 16.(2006), 140-184.

[2] Wendland. H, and Rieger. C, Approximate Interpolation with Applications to Selecting Smoothing Parameters, Numerische Mathematik, 101(2005), 741-742.

メッシュレス法における境界条件の取り扱いが解析精度に及ぼす影響

藤田 宣久 [1], 伊東 拓 [2], 生野 壮一郎 [3], 中村 浩章 [4], 仲田 晋 [1]
[1] 立命館大学，[2] 日本大学, [3] 東京工科大学, [4] 核融合科学研究所
e-mail : yfujita@fc.ritsumei.ac.jp

1 背景

核融合分野などで用いられる大電力高周波装置は励起される電磁場の基本モードをもとに設計されており，高次モードは不安定性やエネルギー損失の大きな原因となる．高次モードを推定するためのモード解析において，有限要素法は数多くの実績を上げている．しかしながら，高周波環境下では表面近傍の影響を無視できず，装置の中心と壁近傍の物理スケールの違いからメッシュ作成が困難になる．そこで，要素情報を必要としないメッシュレス法を用いることにより，事前準備の大幅な簡素化を図ることができる．

代表的なメッシュレス法である Element-Free Galarkin (EFG) 法 [1] は Moving Least Squares (MLS) 近似を用いて離散化を行っている．MLS 近似の形状関数にはデルタ関数特性がないため，基本境界条件は Lagrange 未定乗数法を用いて近似的に扱われる．Lagrange 未定乗数法の使用に伴い，得られる行列式の次数が増加するだけでなく，一部対角成分がゼロになるために条件数が悪化する．上記問題の解決策として変数低減法 [2] が提案されている．変数低減法は，拘束条件行列のベクトル空間を考え，その直交補空間へ射影することにより消去する方法である．

本研究では任意形状へ適用させる前段階として，メッシュレス法を用いた円筒導波管のモード解析を行う．このとき，得られる行列式に対して変数低減法を適用し，条件数の改善を図る．加えて，境界条件の扱い方が解析精度に及ぼす影響を調査する．

2 計算手法

本論文では簡単のために 2 次元の Helmholtz 方程式：

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} + k^2 \boldsymbol{E} = 0 \tag{1}$$

を扱う．ただし，$k = k_0\sqrt{\mu_{\mathrm{r}}\varepsilon_{\mathrm{r}}}$ である．物理定数は空間に依らず一様であり，定常状態 $\boldsymbol{J} = 0$ を考えると，円筒導波管における TM モードの E_z 成分は

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathrm{t}}^2 \boldsymbol{E}_z = (\chi/a)^2\, \boldsymbol{E}_z & \text{in} \quad \Omega, \\ \boldsymbol{E}_z = 0 & \text{on} \quad \Gamma_{\mathrm{D}}, \end{cases} \tag{2}$$

となる．ただし，$\nabla_{\mathrm{t}}^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$，$\chi$ は伝播モードに対応する固有値，a は導波管の半径である．ここで，MLS 近似による仮定:$E_z(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i(\boldsymbol{x}) E_z(\boldsymbol{x}_i)$，$l(\boldsymbol{s}) = \sum_{p=1}^{M} L_p(\boldsymbol{s}) l_p$ のもと離散化を行うと，最終的に連立一次方程式：

$$\begin{cases} A\boldsymbol{x} + C\boldsymbol{l} = \lambda B\boldsymbol{x}, \\ C^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \mathit{0}. \end{cases} \tag{3}$$

に帰着される．ただし，$\phi(\boldsymbol{x})$ は形状関数であり，$L(\boldsymbol{x})$ は線形独立な関数である．また，l は Lagrange 未定乗数であり，$\lambda = (\chi/a)^2$ である．本研究ではコロケーション法を用いて境界条件を導入する．故に，$L_p(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p)$ とすると行列成分はそれぞれ

$$A := \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \int_{\Omega} \nabla\boldsymbol{\phi}_i \nabla\boldsymbol{\phi}_j^{\mathrm{T}}\, \mathrm{d}\Omega\, \boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}, \tag{4}$$

$$B := \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \int_{\Omega} \boldsymbol{\phi}_i \boldsymbol{\phi}_j^{\mathrm{T}}\, \mathrm{d}\Omega\, \boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}, \tag{5}$$

$$C := \{\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \cdots, \boldsymbol{\phi}_M\}, \tag{6}$$

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り，$\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_N\}$ は N 次元ベクトル空間の正規直交基底である．(3) を書き下すと

$$\left[\begin{array}{c|c} A & C \\ \hline C^{\mathrm{T}} & O \end{array}\right]\left[\begin{array}{c} \boldsymbol{x} \\ \hline \boldsymbol{l} \end{array}\right] = \lambda \left[\begin{array}{c|c} B & O \\ \hline O & O \end{array}\right]\left[\begin{array}{c} \boldsymbol{x} \\ \hline \boldsymbol{l} \end{array}\right], \tag{7}$$

となることから，右辺にある係数行列はランク落ちしている．故に，陽に逆行列を求めることが出来ないため，本研究では QZ 法を用いて計算を行う．

本研究では，部分行列 C に対して直交補空間を考えて消去する．変数低減法では，はじめに部分空間 C の QR 分解を考える．厳密に QR 分

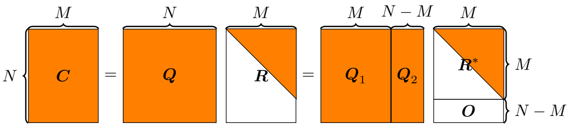


図 1. QR decomposition of a non-square matrix.

解を行うと $\mathcal{O}(N^3)$ の計算量を有するため，図 1 に示すように

$$C = QR = Q_1R^* \tag{8}$$

とする．従って，$Q_1^{\mathrm{T}}Q_1 = I$，$Q_1Q_1^{\mathrm{T}} \neq I$ となる．すると，直交補空間への射影行列は

$$C^{\perp} := I - QQ^{\mathrm{T}} = U \tag{9}$$

となるため，(3) は最終的に

$$A^*\boldsymbol{x} = \lambda B^*\boldsymbol{x}. \tag{10}$$

となる．ただし，それぞれの行列成分は

$$A^* := UAU + QQ^{\mathrm{T}}, \tag{11}$$

$$B^* := UBU, \tag{12}$$

である．QR 分解により係数行列の粗性は失われるが，次数の低減と条件数の改善を図ることができる．

3　数値解析結果及び考察

メッシュレス法における一般化固有値問題の条件数を改善するために，変数低減法を用いて Lagrange 未定乗数の消去を行った．境界条件の取り扱いが解析精度に及ぼす影響を調査するために，TM_{01} モードの固有値 χ を計算した．なお，TM_{01} モードの固有値の解析解は第 1 種 Bessel 関数の 1 つ目のゼロ点である．

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数は 9 つであり，各セルおける積分点数を 100 点とした．また，形状関数の作成に使用した基底関数は 1 次関数であり，重み関数は

$$w(r) := \begin{cases} \frac{1}{2}\exp(-8r^2) & 0 < r \le R \\ 0 & r > R \end{cases} \tag{13}$$

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，境界条件は完全導体のみとし，基本境界条件 Γ_{D} のみを課している．

Lagrange 未定乗数法を用いる必要性は，MLS 近似の形状関数にデルタ関数特性がないことに起因している．そこで，形状関数にデルタ関数特性を持っている Improved Interpolating MLS (IIMLS) [3] 近似を用いた計算も行う．

境界条件の扱い方と相対誤差 e_r の関係を表 1 に示す．ただし，$e_r = |\bar{\chi} - \chi|/|\chi|$ であり，$\bar{\chi}$ は数値解，χ は解析解である．同表より，MLS 近似の形状関数にデルタ関数特性があるものと見なして係数行列に入れ込む方法は解析精度が悪化している．また，Lagrange 未定乗数法と変数低減法の双方を用いた結果は同じ解析精度である．Lagrange 未定乗数法では悪条件問題を解くことを考えると，変数低減法を応用した提案手法は有効的である．一方，IIMLS 近似を用いた場合には境界条件の扱い方による違いが見られなかった．故に，形状関数にデルタ関数特性を持っている場合には，係数行列に入れ込む方法が次数が最小になるため，最適であると言える．

表 1. 境界条件の扱い方による相対誤差 e_r の比較.

	係数行列への入れ込み	Lagrange 未定乗数法	変数低減法
MLS	2.39×10^{-2}	6.45×10^{-3}	6.45×10^{-3}
IIMLS	1.89×10^{-2}	1.89×10^{-2}	1.89×10^{-2}

参考文献

[1] T. Belytschko, Y. Y. Lu and L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Methods Eng., Vol. 37 (1994), 229–256.

[2] A. Kamitani, T. Takayama and A. Saitoh, Acceleration methods for shielding current analysis in cracked superconducting film, Proc. IEEE Int. Conf. Comput. Electromagn. (ICCEM), (2017), 21–22.

[3] 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.

2次元定常電磁波散乱問題への Collocation EFGM-BEM の適用

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手法には，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．

他の電磁波シミュレーション手法として，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，領域型と境界型を組み合わせた離散化法によって電磁波伝搬問題を解く方法も知られている [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]．それ故，定常状態の電磁波伝搬問題の解法として，メッシュレス法を組み込んだ領域型と境界型併用離散化法が開発されれば，上記欠点を解決できる可能性がある．

本研究の目的は定常状態の電磁波伝搬問題の解法として，Collocation EFGM-BEM 併用法を提案し，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：

$$-\left(\Delta + k^2\right) E_z = i\omega\mu\sigma E_z \qquad \text{in } \Omega_{\mathrm{I}}, \qquad (1)$$
$$-\left(\Delta + k_0^2\right) E_z = 0 \qquad \text{in } \Omega_{\mathrm{E}}, \qquad (2)$$

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：

$$[\![E_z]\!] = 0, \qquad \left[\!\!\left[\frac{1}{\mu}\frac{\partial E_z}{\partial n}\right]\!\!\right] = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \qquad (3)$$

を仮定する．但し，$\boldsymbol{n}$ は境界 $\partial\Omega$ に沿った法線ベクトルを示し，$[\![\quad]\!]$ 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 Ω_{I} 及び Ω_{E} 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：

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

と等価になる．但し，$J[w, u]$ は

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

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

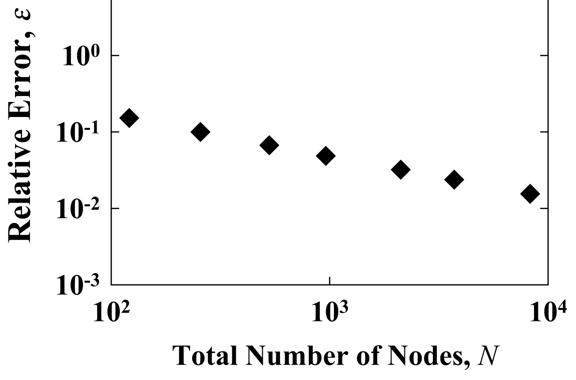


図 1. E_z の相対誤差 ε の全節点数 N 依存性.

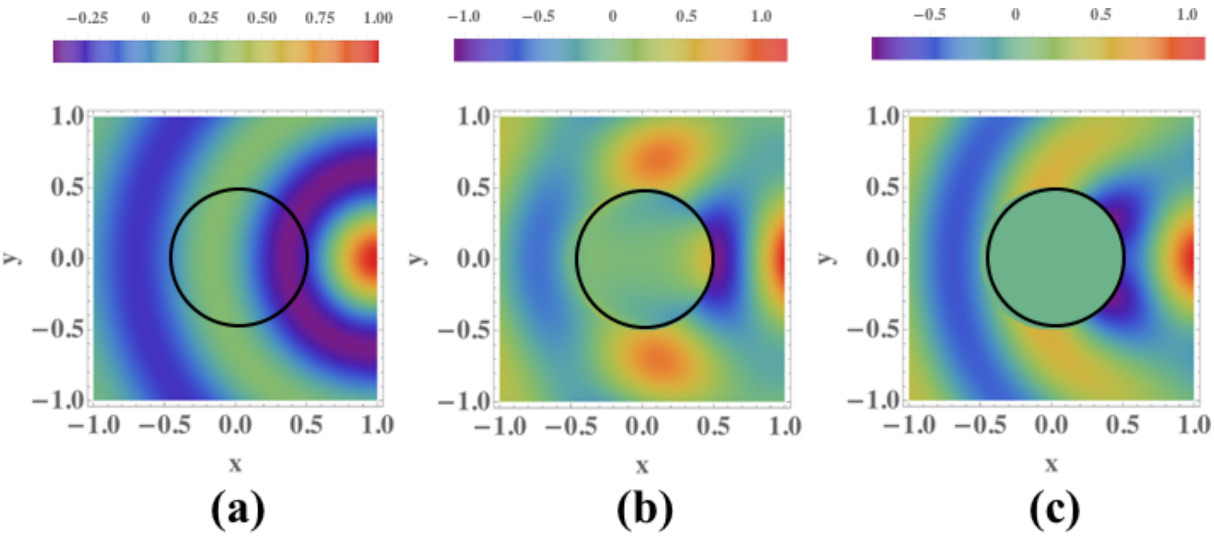


図 2. (a) : $\beta = 0$, (b) : $\beta = 10^2$ と (c) : $\beta = 10^4$ の場合における電界 E_z の空間分布（$N = 5041$）．なお，実線は境界 $\partial\Omega$ を表す．

関数 $w(\boldsymbol{x})$ 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，

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

で表される．但し，$c(\boldsymbol{y})$ は

$$c(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} 1 & : \boldsymbol{y} \in \Omega_{\mathrm{E}} \\ \dfrac{\varDelta\theta(\boldsymbol{y})}{2\pi} & : \boldsymbol{y} \in \partial\Omega \end{cases}$$

を満たす形状関数であり，$\varDelta\theta(\boldsymbol{y})$ は点 $\boldsymbol{y}$ で境界がなす内角である．また，関数 $w^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ は $-(\Delta + k^2)$ の基本解を表し，$E_z^{\mathrm{I}}(\boldsymbol{y})$ は点 $\boldsymbol{y}$ 上の入射波の電界である．

弱形式 (4)，境界積分方程式 (5) 及び境界条件 (3) を離散化することによって，非対称複素行列を係数行列にもつ連立一次方程式を得ることができる．上記方程式を解くことによって，$\Omega_{\mathrm{I}} \cup \partial\Omega$ 上の電界 E_z を得ることができる．

以上より，2 次元定常電磁波散乱問題は連立一次方程式を解く問題に帰着された．

3　数値実験

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 Ω_{I} は原点を中心とする半径 1 の円であり，入射波 $E_z^{\mathrm{I}}(x,y)$ として，

$$E_z^I(x,y) = H_0^{(2)}\left(k\sqrt{(x-1)^2 + y^2}\right),$$

を与える．但し，E_0 は入射波の強度を表し，$H_0^{(2)}(x)$ は 0 次の第 2 種 Hankel 関数とする．さらに，本研究では，連立一次方程式のソルバーとして，複素行列に対応した GMRES 法を採用し，パラメタを以下のように固定する：$k/k_0 = 6, E_0 = 1$．

まず，解の精度を調べよう．図 1 には，相対誤差 ε の全節点数 N 依存性を示す．但し，β として，$\beta = 0$ に固定する．同図より明らかなように，相対誤差は $N^{-0.54}$ に比例している．それ故，節点数の増加に伴って，解の精度が向上する．

次に，β が電界の空間分布に及ぼす影響を調べよう．$\beta = 0$, $\beta = 10^2$ 及び $\beta = 10^4$ に対する E_z の空間分布をそれぞれ図 2(a)，図 2(b) 及び図 2(c) に示す．これらの図からわかるように，内部領域 Ω_{I} だけでなく外部領域 Ω_{E} でも，十分に滑らかな電界 E_z の分布が得られている．

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．

参考文献

[1] 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.

Data driven derivation of partial differential equations in visual analysis system

Yu Long* Kyoto University
Koji Koyamada Kyoto University
Naohisa Sakamoto Kobe University
Shota Mizuno Kyoto University

Abstract

It is important to consider how to derive unknown partial differential equations from observed data, which deductive reasoning is mainly used to derive. In the past 10 years, cost reductions of sensor, data storage and computational resource have made data driven derivation methods possible. Therefore, the development of several innovative methods of characterizing the high-dimensional data generated from the experiment has been easily. In this paper, a new method of data driven derivation of partial differential equations from observed data is proposed and verified by some case study analysis using one-dimensional data which is artificially made by numerical solution. In this method, partial differential equations is derived by using LassoRegression and multiple linear regression analysis to extract partial differential term from several prospective terms. Additionally, two types of dataset are used in each partial differential equation to verify the difference in noise resistance when they are acquired by different means. As a result of the experiment, derivation of partial differential equation was successful on all case studies, and noise resistance has been particularly higher when Reaction-diffusion equation was used. Moreover, we apply a visualization system for 3D datasets in this method which can interactively present the datasets and calculate the regression result in real time. According to the example of advection-diffusion equation, it has been verified that the proposed visualization method is efficiently applicable to three-dimensional time-series data.

Keywords: partial differential equations, regression, visual analysis system.

1. Introduction

In the last ten years, with the cost reduction of sensors, data storage, and computational resources, it facilitates the development of a variety of innovative methods to characterize high-dimensional data generated from experiments. At this time, it is important to find out how to discover the underlying physical laws and governing equations from time series data showing the spatiotemporal activity of an interesting phenomenon. The traditional theoretical methods for this are deductive, rooted in conservation methods, physical principles, or phenomenological behavior.

Therefore, in this research, we propose an inductive method to derive partial differential equations based on only time series data collected at spatial positions. Besides, we also studied on a visual analysis system that contributes to the derivation of partial differential equations from big data. Although many research results and systems exist for numerical solution of partial differential equations, there is almost no methodology or system to derive the partial differential equation that governs the phenomenon using data generated from unknown phenomena or in visual analysis system. In the conventional derivation method, the time partial derivative term has been derived using the conservation law that the sum of the flow rates on each surface of the rectangular parallelepiped in the continuous equation is equal to the temporal change of the scalar quantity considered. In this paper, we conduct experiments on analysis using statistical methods that contribute to the derivation of partial differential equations from big data. A verification experiment is designed to clarify how much analysis using a statistical method supports the selection of partial differential terms. Specifically, we conduct the experiment to verify whether partial differential terms can be calculated using the data obtained by superimposing noise on an analytical solution or numerical solution of a partial differential equation (hereinafter referred to as pseudo measurement data), and can reproduce the original partial differential equation. In our work, we investigate the effectiveness by reproducing the original partial differential equation by regression analysis using three one-dimensional partial differential equations as example and pseudo measurement data of one three-dimensional partial differential equation to verify the effectiveness of the visual analysis system. Also, in this research, partial differential equations can be represented by nonlinear partial differential equations of the form below.

$$h_t = N_x^{\lambda} h \\ x, \lambda \in \Omega, t = [0,T] \tag{1}$$

Here, subscripts represent either partial derivatives in time or space; also, $h(x,t)$ represents the solution; N_x^{λ} is a nonlinear operator parameterized by λ; Ω is a subset of the D-dimensional space R^D. Here is an example of one-dimensional Burgers equation,

$$h_t = N_x^{\lambda} h = \lambda_1 h h_x - \lambda_2 h_x \\ \lambda = (\lambda_1, \lambda_2) \tag{2}$$

In this research, we first consider linear partial differential equations with parameter λ as a constant and partial differential terms to be added next. The hypotheses are set as follows.

H1 By applying regression analysis, important partial differential terms can be narrowed down, and partial differential equations can be derived effectively.

H1.1 By reducing the variables by multiple linear regression, the partial differential terms can be narrowed effectively and the derivation of partial differential equations is effectively enabled.

H1.2 By setting the coefficients of partial differential candidates to 0 by L_1 regularization, partial differential terms can be narrowed effectively, and derivation of partial differential equations is effectively enabled.

H2 By using the visual analysis system, the correlation of between partial differential candidates in region of interest(ROI) both in time and 3D-space can be easily identified.

For regression analysis, two methods are used: reduction of variables by multiple linear regression and extraction of variable terms by regularization regression. In multiple linear regression, an equation expressing the relationship between the objective variable and the explanatory variable of the model is estimated by a statistical method, where the objective variable is the variable that you want to explain and the explanatory variable is the one to explain this. In this research, the objective variable is set as a time partial derivative term, and the explanatory variable is set as a plurality of terms including partial derivative terms that are expected to be variables that can explain the time partial derivative term. By conducting multiple regression analysis and reducing the explanatory variables one by one while looking at the t value, the policy is to represent the explanatory variables as appropriate dependent variables. Also, regularization regression is a machine learning method used to learn model parameters, in particular to prevent over-learning and to improve generalization ability. The most common methods in machine learning are L1 regularization and L2 regularization. In this research, L1 regularization is applied to pseudo measurement data. L1 regularization is often used when it is desired to cut unnecessary parameters, and it is a method that can set some parameters to 0.

For visual analysis system, a ROI is customized with length and its position in the 3D-space and sampling points is selected from this region to apply abovementioned regression method. At the same time, calculation result of t value and regression coefficient can be directly showed along with the raw datasets rendering image and derivation of partial differential equations is effectively enabled.

2. Related work

Maziar Raissi et al. used machine learning techniques to derive partial differential equations from observed data [2]. In their method, they have realized a data efficient learning algorithm that can solve the problem of data shortage scenario that appears on a daily basis when measuring data from complex physical phenomena. They applied the problem to the identification of general parametric nonlinear partial differential equations from noisy data. The effectiveness of this method was demonstrated using benchmark problems of various attributes such as KdV equation, Kuramoto-Sivansky equation, nonlinear Schrödinger equation, Navier-Stokes equation and Fractional equation. The proposed framework is applied to one-dimensional model of these equations to verify its effectiveness. However, in this method, the partial differential terms that constitute the partial differential equation are determined in advance, so it is considered to be insufficient as a method of deriving partial differential equations from unknown physical phenomena. The PDE of Burgers equation is as following,

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = -\lambda_1 C \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} + \lambda_2 \frac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}t^2} \tag{3}$$

In Maziar Raissi's method, assuming that it is known in advance that the partial differential terms that explain $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ are $C\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ and $\mathrm{d}^2C/\mathrm{d}t^2$, then find λ_1 and λ_2, which are the coefficients of these partial differential terms. However, in practice, when encountering a data set governed by an unknown equation, it is possible to have an idea of what the partial differential terms that make up the equation are, but the partial differential terms are actually not clear. So in this research, a hypothesis was set that it was essential to select an appropriate partial derivative term from many partial differential term candidates that could be components of partial differential equations.

3. Regression analysis

Regression analysis is a mathematical statistical method used to express data relationships in the form of following equation,

$$y = X\beta + \varepsilon \tag{4}$$

Here, y is an objective variable, X is a vector composed of explanatory variables, β is a vector composed of the coefficients of each explanatory variable, and ε is a constant term. In this research, the objective variable is $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ time series data, the explanatory variable is partial differential term candidate time series data. Firstly, the derivation of partial differential term candidates by variable reduction using multiple linear regression is explained.

3.1. Multiple Linear Regression

In multiple linear regression, β in equation (4) is derived by the method of least squares, that is, a method of determining β so as to minimize e in equation (5). It has been used in a wide range of fields[3].

$$e = \mathrm{argmin}(\left\| y - (X\beta + \varepsilon) \right\|^2) \tag{5}$$

The following procedure was used to reduce variables by multiple linear regression.

1. Input the time series data of the partial differential term candidate that can be a component of $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ to the objective variable and $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ to the explanatory variable, and apply linear multiple regression.
2. Observe the t value in the result of regression analysis and eliminate one of the explanatory variables that has the smallest number.
3. Input the time series data of other partial derivative terms except for the term as an explanatory variable and apply the regression analysis again.
4. Repeat steps 2 and 3 until the number of partial derivative term candidates becomes appropriate.

Here, the p value is the probability that the objective variable can be explained with other explanatory variables without problems when the coefficient of the explanatory variable is set to 0, and in the case of performing variable reduction by multiple linear regression, it is necessary to look at this value. However, although it is general to reduce, in this research the value overflows and it is often not possible to know the correct value, so in this research the t value is used, which decreases as the p value increases.

3.2. Regularized Regression

Next, the derivation of partial differential terms by L_1 regularization will be described. L_1 regularization is often used when it is desired to remove unnecessary parameters, and is the most general method in machine learning. This method determines β so as to minimize e in equation (6).

$$e = \mathrm{argmin}(\left\| y - (X\beta + \varepsilon) \right\|^2 + \lambda \left\| \beta \right\|_1) \tag{6}$$

Here, λ is the penalty term, and $\left\| \beta \right\|_1$ is the sum of the absolute values of the coefficients of each explanatory variable. The following procedure was used to reduce variables by L_1 regularization.

1. L_1 regularization was applied for each value of the penalty term while changing the penalty term from 0.1 to 0.9, and the coefficients of each partial differential term were derived.
2. When the coefficient value is 0.05 or more regardless of the penalty term, the partial differential term is assumed to be an actual partial differential term.

Here, for the realization of L_1 regularization, the goal was achieved by setting the right side of equation (6) to 0 and the variables to the coefficients of each partial differential candidate.

4. Verification experiment

4.1. Method of verification

By applying regression analysis to pseudo measurement data, it is possible to derive a partial differential term that constitutes a partial differential equation that governs the data. In order to verify this hypothesis, partial differential terms that constitute partial differential equations are assumed to some extent, and time partial differential terms are expressed as linear partial differential equations composed of as many partial differential terms as possible. It was considered that the correct partial derivative term can be derived from the partial derivative term candidate by multiple linear regression. The objective variable is $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$, and the explanatory variable is partial derivative terms expected to be able to explain the objective variable $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$. The objective variable is represented by an appropriate explanatory variable by repeating multiple linear regression multiple times and reducing the explanatory variables one by one. Also, we considered that it is possible to derive the correct partial derivative term by setting the coefficients of some partial derivative candidates to 0 using L1 regularization. In this research, the coefficient for each partial differential term is calculated using L1 regularization. We then calculated whether the partial derivative term for the nonzero coefficient contained the original partial derivative term. We both used data measured in a range of 500 time steps at one point and data measured in the range of 100 time steps at 5 points each in the verification experiment for multiple linear regression and regularized regression.

Furthermore, a visual analysis system is used for package the function of regression including Linear, Lasso, Ridge and ElasticNet. Through regression abovementioned, t value can be used to identify whether a partial differential should be left for the equation in which complexity for Lasso, Ridge, ElasticNet and L1 ratio for ElasticNet can be set artificially. Also, the region of interest can be customized by its position and length which will also interactively showed in the rendering image with the time-series data. Here, we set the ROI at the center in (3.5,3.5,3.5) with length of 5. Besides, Points slider is controlling the number of sampling points in the ROI. More points can be adapted to calculated with higher precision by sacrificing calculation time. In the user interface, different data file is read along Time slider to show space data rendered in different time. At the same time, the objective variable $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ is also calculated at the backend. We take the average value of t-value through 60 time steps in this paper. From these setting above t value can be shown intuitively to derive the correct partial derivative term.

4.2. Applied Partial Differential Equation

The partial differential equations used in the experiment are the one-dimensional reaction-diffusion equation, the Burgers equation, the KdV equation, and the three-dimensional advection diffusion equation. In order to discover the partial differential equation from time series measurements in the space domain, four types of data are generated for each partial differential equation, and these are used as pseudo measurement data.

In addition, time series data of partial differential terms are basically derived by differential method using pseudo measurement data as follows: Here, regarding third order partial differential terms and fourth order partial differential terms, the partial derivative term was derived using cubic spline interpolation because the error in the derivation by the difference method is considered to be too large.

$$\frac{\mathrm{d}C(x,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{C(x,t+1) - C(x,t)}{h}$$

$$\frac{\mathrm{d}C(x,t)}{\mathrm{d}x} = \frac{C(x+1,t) - C(x-1,t)}{2h}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2C(x,t)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{C(x+1,t) - 2C(x,t) + C(x-1,t)}{h^2} \tag{7}$$

$$\frac{\mathrm{d}^3C(x,t)}{\mathrm{d}x^3} = \frac{C(x+2h,t) - 2C(x+h,t) + 2C(x-h,t) - C(x-2h,t)}{2h^3}$$

$$\frac{\mathrm{d}^4C(x,t)}{\mathrm{d}x^4} = \frac{C(x+2h,t) - 4C(x+h,t) + C(x,t) - 4C(x-h,t) - C(x-2h,t)}{h^4}$$

4.2.1. Reaction-diffusion equation

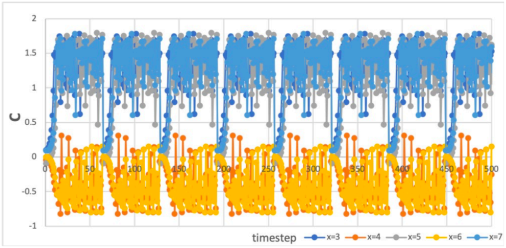
The reaction-diffusion equation has two processes: local chemical reaction in which the concentration of one or more substances distributed in the space changes with each other, and diffusion in which the substance spreads throughout the space. This partial differential equation is applied in a wide range of fields, such as control of traffic signal networks in simple models [4], image quantization [5] and so on. In one-dimensional space, it is written as following,

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = D\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x^2} + R(c) \tag{8}$$

In this research, we set the value as,

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = -0.2\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x^2} + C(1-C)(C-0.4) \tag{9}$$

In this case, equation (9) is called the Nanun equation, which is a simplified Hodgkin-Huxley model differential equation that models activation and inactivation in action potential firing (spike) of neurons. It is a model that expresses the action potentials of electrically excitable cells such as neurons. In this research, the initial state is set to a random number in the range of -0.01 to 0.01, and the pseudo measurement data is generated by deriving the numerical solution of this partial differential equation. Here, the boundary condition is a periodic boundary condition.



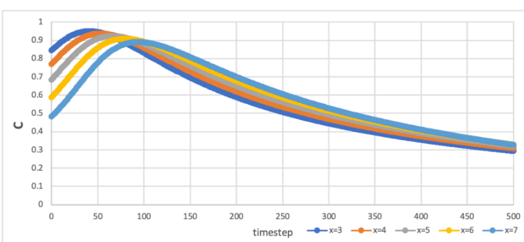
1. Reaction-diffusion equation measured 500 time steps at 5 points

4.2.2. Burgers equation

The Burgers equation is a partial differential equation found in various fields of applied mathematics, such as fluid dynamics, nonlinear acoustics, gas dynamics, traffic flow, etc. This is a basic partial differential equation, and the external force term and pressure gradient It can be derived from the Navier-Stokes equation of the velocity field by dropping the term, and is used in the analysis of the sonic boom [6] etc., forming the vascular network, and ultrasonic magnetohydrodynamic turbulence in space. It is also known as one of the equations governing [7] [8]. In one-dimensional space, the Burgers equation is described as following,

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} = -\lambda_1 C \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} + \lambda_2 \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x^2} \tag{10}$$

In this research, pseudo measurement data is generated by setting the constant to 0.01 and the initial state to a sin curve for one cycle, and deriving the numerical solution. The time series data as shown in Fig. 2 is obtained.



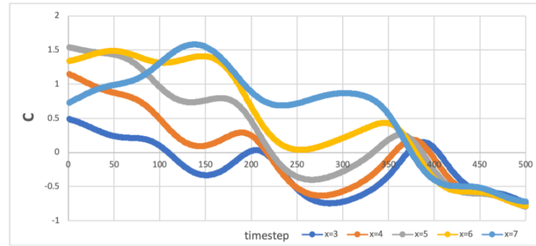
2. Burgers equation measured 500 time steps at 5 points

4.2.3. KdV equation

The KdV equation or the Kortwegue-Dofries equation is one of the non-linear partial differential equations that describes the wave motion in a shallow constant water channel, and is often applied to the analysis of traffic flow. It is known that this partial differential equation can be expressed as a soliton [9] [10], which has solitary waves that are undamped waves as a solution, and is described by equation (11) in one-dimensional space.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial C}{\partial x} - \delta^2 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \tag{11}$$

In this research, in order to obtain the characteristic aspect of the above KdV equation, based on the proposal of Zabusky and Kruskal [11], the parameter is set to $\delta = 0.022$ and the initial state is set to a cos curve of one period, we obtained time series data as shown in Fig.3.



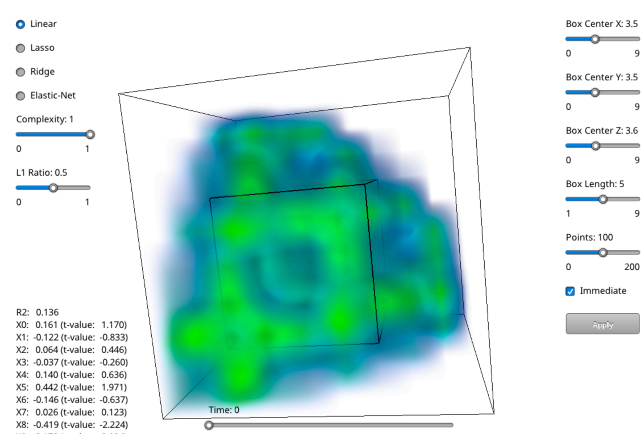
3. KdV equation measured 500 time steps at 5 points

4.2.4. Advection diffusion equation

The advection-diffusion equation is a second-order linear partial differential equation representing a more general flow that combines the advection equation and the diffusion equation, and it is efficient for simulation of water pollution and for surgery. It is used in a wide range of fields, such as modeling of the method of supplying oxygen to blood [12] [13] In three-dimensional space, the equation of advection diffusion is described as following,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V_x \frac{\partial C}{\partial x} - V_y \frac{\partial C}{\partial y} - V_z \frac{\partial C}{\partial z} + D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) \tag{12}$$

In this research, the initial conditions and scheme are used from Appadu's paper[16] to calculate the analytical solution of 3D advection-diffusion equation. Here, we set the constant $V_x = 1$, $V_y = 0$, $V_y = 0$ and $D = 0.1$ then acquired the time-series data in the space domain. Since it's hard to directly display time-series data in space domain, we developed a visualize analysis system based on Kyoto Visualization System(KVS)[17] in order to present the calculation result and display simulation data by using volume rendering.



4. The numerical solution of the advection-diffusion equation visualized in KVS(When Time = 0, it shows the initial condition of advection-diffusion in this research)

5. Result

In the reaction-diffusion equation, the partial differential terms that make up equation (9) are $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x^2$, C, C^2, and C^3, so the partial derivative term candidates are set as $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x^2$, $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, C, C^2, C^3, C^4, C^5, C^6, the result is as following in Table 1,

Table 1 Results of applying regression analysis to one-dimensional reaction-diffusion equation

Method	Space-time observation points \ noise ratio	0%	1%	3%	5%	7%	10%
Regularized regression	500*1	✗	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✓	✓	✓	✓	✗	✗
Multiple linear regression	500*1	✓	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✓	✓	✓	✓	✓	✗

In the Burgers equation, the partial differential terms that make up equation (10) are $C\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}^2C/\mathrm{d}x^2$, so the partial derivative term candidates are set as $\mathrm{d}^2C/\mathrm{d}x^2$, $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $C\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $C^2\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, C, C^2, C^3, the result is as following in Table 2,

Table 2 Results of applying regression analysis to one-dimensional Burgers equation

Method	Space-time observation points \ noise ratio	0%	1%	3%	5%	7%	10%
Regularized regression	500*1	✗	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✗	✗	✗	✗	✗	✗
Multiple linear regression	500*1	✗	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✓	✗	✗	✗	✗	✗

In the KdV equation, the partial differential terms that make up equation (11) are $C\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x^3$, so the partial derivative term candidates are set as $\mathrm{d}^4C/\mathrm{d}x^4$, $\mathrm{d}^3C/\mathrm{d}x^3$, $\mathrm{d}^2C/\mathrm{d}x^2$, $\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $C\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, $C^2\mathrm{d}C/\mathrm{d}x$, C, C^2, C^3, the result is as following in Table 3,

Table 3 Results of applying regression analysis to one-dimensional KdV equation

Method	Space-time observation points \ noise ratio	0%	1%	3%	5%	7%	10%
Regularized regression	500*1	✗	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✗	✗	✗	✗	✗	✗
Multiple linear regression	500*1	✗	✗	✗	✗	✗	✗
	100*5	✓	✗	✗	✗	✗	✗

According to the experimental results, the application method of regression analysis that resulted in the highest noise resistance was to apply multiple linear regression to data measured in the range of 100 time steps each at five points in the data set. In addition, the one with the best accuracy of the derivation by regression analysis is the data using the reaction-diffusion equation, and then the data using the KdV equation, and then the data using the Burgers equation.

It was suggested that multiple linear regression analysis is more accurate than regularization regression by regularization to derive the value of the coefficient directly. It is considered that the nature of the regression is not effective in deriving partial derivative terms with coefficients close to 0. For example, when applying regression analysis to the data set of the KdV equation in this study, The parameter was set to $\delta = 0.022$. This is a very small value, and even if the regularization regression works ideally and derives the coefficient of $\partial^3C/\partial x^3$, it does not include other partial differential terms that are not actually included. It was difficult to identify because the value of the power of the partial differential term that is not actually included in the regularization regression is output as 0. This is because the value of the power of the partial differential term which is not actually included in the regularization regression is output as 0. On the other hand, when using multiple linear regression instead, the partial differential term candidate is reduced one by one using the t value, which is an index of the probability that the partial differential term candidate is included, so that even partial differential terms with coefficient values close to 0 could be derived without problem.

In the advection-diffusion equation, the partial differential terms that make up equation (12) are $V_x\partial C/\partial x$, $V_y\partial C/\partial y$, $V_z\partial C/\partial z$, $\partial^2C/\partial x^2$, $\partial^2C/\partial y^2$ and $\partial^2C/\partial z^2$, so the partial derivative term candidates are set as $\partial C/\partial x$, $\partial C/\partial y$,$\partial C/\partial z$, $\partial^2C/\partial x^2$, $\partial^2C/\partial y^2$,$\partial^2C/\partial z^2$, $\partial^2C/\partial x\partial y$, $\partial^2C/\partial x\partial y$, $\partial^2C/\partial y\partial z$, the result is as following in Table 4,

Table 4 Results of applying regression analysis to 3-dimensional advection-diffusion equation in visualize analysis system

Method	Space-time observation points / noise ratio	0%
Linear Regression	5*5*5	✗
Lasso Regression	5*5*5	✗
Ridge Regression	5*5*5	✗
Elastic-Net Regression	5*5*5	✗

6. Conclusion

The subject of this research is that how to derivate partial differential equations from big data and how can a visual analysis system help in this process. In this paper, we first propose regression analysis can be used to derivate explanatory variable which is partial derivative terms expected to be able to explain the objective variable $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t$ from many terms as possible. By conducting verification experiment with three one-dimensional PDE, it is considered that multiple linear regression is more suitable than regularized regression. In this research, in order to reduce partial differential candidates, since this research deals with known partial differential equations, the actual partial differential terms We reduced them one by one until we reached a number, but when deriving an unknown partial differential equation, we did not know the number of partial differential terms that actually made it.

Then we expanded the regression process to our visual analysis system to simplify this process with a practical user interface to customize ROI in the whole space domain with the variable time. This process is greatly simplified and easily understood by showing the time-series data and t value directly in the rendering space. Though it can not successful derivate advection-diffusion equation from numerical solution, it is considered an effective method using visual analysis system to derive PDE.

The future perspective of this research is to derive partial differential equations by other visual approach and integrate these method in the visualize analysis system. Specifically, the following hypotheses are willing to be verified.

- If Convergent Cross Mapping (CCM) is applied, partial differential terms that affect time partial differentiation can be selected, and it is possible to effectively derive partial differential equations[18].
- In the causal graph visualization, applying the latent factor search technique can support the discovery of partial differential terms so that it should be effectively added[19].

REFERENCES

1. Sugihara, George; et al., "Detecting Causality in Complex Ecosystems," Science 338 (6106) pp. 496–500, 2012
2. Raissi, Maziar, and George Em Karniadakis. "Hidden physics models: Machine learning of nonlinear partial differential equations." *Journal of Computational Physics* 357 (2018): 125-141.
3. Hong, Tao, et al. "Modeling and forecasting hourly electric load by multiple linear regression with interactions." *IEEE PES General Meeting*. IEEE, 2010.
4. Sugi, Masao, Hideo Yuasa, and Tamio Arai. "Autonomous Distributed Control of Traffic Signal Network by Reaction-Diffusion Equation on a Graph." *Transactions of the Society of Instrument and Control Engineers* 39.1 (2003): 51-58.
5. Esclarín, Julio, and Luis Alvarez. "Image quantization using reaction-diffusion equations." *SIAM Journal on Applied Mathematics* 57.1 (1997): 153-175.
6. Noriki Iwanaga, et al. "Jet Noise Prediction using Burgers Equations." special publication: Proceedings of 43rd Fluid Dynamics Conference/Aerospace Numerical Simulation Symposium 2011. 2012.
7. Yang, Z. J. "Travelling wave solutions to nonlinear evolution and wave equations." *Journal of Physics A: Mathematical and General* 27.8 (1994): 2837.
8. Boldyrev, Stanislav. "Kolmogorov-Burgers model for star-forming turbulence." *The Astrophysical Journal* 569.2 (2002): 841.
9. Nagatani, Takashi. "Modified KdV equation for jamming transition in the continuum models of traffic." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 261.3-4 (1998): 599-607.
10. Ge, H. X., R. J. Cheng, and Z. P. Li. "Two velocity difference model for a car following theory." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 387.21 (2008): 5239-5245.
11. Zabusky, Norman J., and Martin D. Kruskal. "Interaction of" solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states." *Physical review letters* 15.6 (1965): 240.
12. McKee, Sean, Ewan A. Dougall, and Nigel J. Mottram. "Analytic solutions of a simple advection-diffusion model of an oxygen transfer device." *Journal of Mathematics in Industry*6.1 (2016): 3.
13. Christoph, Gernot, and Jürgen Dermietzel. "The impact of a contaminated lignite seam on groundwater quality in the aquifer system of the Bitterfeld region–modeling of groundwater contamination." *Water, air, and soil pollution*122.3-4 (2000): 421-431.
14. Sugihara, George, et al. "Detecting causality in complex ecosystems." *science* 338.6106 (2012): 496-500.
15. Kyburg Jr, Henry E. "Judea Pearl, Causality, Cambridge University Press (2000)." (2005): 174-179.
16. Appadu, A. Rao, Jules Kamdem Djoko, and H. H. Gidey. "Comparative study of some numerical methods to solve a 3D advection-diffusion equation." *AIP Conference Proceedings*. Vol. 1863. No. 1. AIP Publishing, 2017.
17. Sakamoto, Naohisa, and Koji Koyamada. "KVS: A simple and effective framework for scientific visualization." *Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering* 2.1 (2015): 76-95.
18. H. Natsukawa and K. Koyamada "Visual Analytics of Brain Effective Connectivity Using Convergent Cross Mapping," Proceedings of SIGGRAPH ASIA Symposium on Visualization in press 2017.
19. Y. Onoue, N. Kukimoto, N. Sakamoto, K. Koyamada, "Minimizing the number of edges via edge concentration in dense layered graphs," IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol. 22, No. 6, pp. 1652-1661, 2016.

Mathematical analysis of reservoir computing

本多 泰理 [1]
[1] 東洋大学　情報連携学部
e-mail : honda012@toyo.jp

1 Introduction

In this article, we discuss a model for reservoir computing, especially one derived from an echo state network [1]. The following formulation of an echo state network is often considered [2]:

$$\boldsymbol{r}(t_k) = \phi\Big(\boldsymbol{J}\boldsymbol{r}(t_{k-1}) + \boldsymbol{v}s(t_k)\Big), \qquad (1)$$

Here, $\boldsymbol{r}(t) \in \mathbf{R}^N$ is an N-dimensional vector at time t, $\boldsymbol{J}$ is an $N \times N$ matrix, $\boldsymbol{v} \in \mathbf{R}^N$ is a constant vector, and $s(t) \in \mathbf{R}$ is a given function depending only on time. $\phi(x)$ can be an arbitrary function, but practically, $\phi(x) = \tanh(x)$ is often used. For a vector $\boldsymbol{u} = \big(u_1, u_2, \ldots, u_N\big)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^N$ and a function $f(\boldsymbol{x})$ defined on $\mathbf{R}^N$, we use the notation:

$$f(\boldsymbol{u}) = \big(f(u_1), f(u_2), \ldots, f(u_N)\big)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^N.$$

However, formulation (1) is inadequate as a discrete approximation of a continuous model. In this article, we revisit the model for an echo state network starting from an ideal continuous one that certainly has the *echo state property*, i.e., for the same $s(t)$, we observe that $\boldsymbol{r}(k) - \check{\boldsymbol{r}}(k) \to 0$ as $k \to \infty$. Then, we derive a discrete approximation to the model that replaces (1).

2 Terms and notation

2.1 Terms from graph limit theory

We first introduce the concept of a *graphon* [3]. It is defined as a function $W(x, y) : [0, 1]^2 \to \mathbf{R}$ that satisfies $W(x, y) = W(y, x)$. Roughly speaking, it can be regarded as a generalization of an adjacency matrix of a weighted non-directed graph. It can also be regarded as the continuum limit of a dense graph sequence.

For a graphon $W(x, y)$, we define the *cut norm* by

$$\|W\|_1 \equiv \sup_{S,T\subset[0,1]} \Big| \int_{S\times T} W(x, y)\, \mathrm{d}x\mathrm{d}y \Big|.$$

Given two graphons W and W', we define $d_1(W, W') \equiv \|W - W'\|_1$.

Recently, some researchers have extended graphons to include sparse and directed graphs. To obtain a sparse graph sequence that converges to an object depicted by a graphon in some sense, we follow the steps below [4]. For graphon W, define $\mathbf{H}(n, W)$ to be a random weighted graph on n vertices. Let $\{x_i\}_{i=1}^n$ be i.i.d. chosen uniformly in $[0, 1]$, and then assign the weight of edge ij to be $W(x_i, x_j)$ for all distinct vertices i and j.

Now, let $\mathbf{G}(\mathbf{H}(n, W), \varrho)$ be a random graph with edge weights ± 1, where $\varrho \in (0, 1)$ is a constant, and ij is made an edge with a probability of $\min\{\varrho|\beta_{ij}|, 1\}$. The edge weight is set at $+1$ if $\beta_{ij} > 0$ and at -1 if $\beta_{ij} < 0$. Now, take a positive sequence $\{\varrho_n\}_n$ such that $\varrho_n \to 0$ and $n\varrho_n \to \infty$. Then, we have $\lim_{n\to\infty} d_1\big(\varrho_n^{-1}\mathbf{G}(n, W, \varrho_n), W\big) = 0$ with probability 1 [4]. For directed graphs, we introduce a *digraphon* [5], which is defined as a set of functions $\{W_{00}, W_{01}, W_{10}, W_{11}\}$ that satisfy:

(i) $W_{00}(x, y) = W_{00}(y, x)$.
(ii) $W_{11}(x, y) = W_{11}(y, x)$.
(iii) $W_{01}(x, y) = W_{10}(y, x)$.
(iv) $\sum_{i=0}^{1} W_{0i}(x, y) + W_{1i}(x, y) = 1$.

Our idea here is to reconsider models of an echo state network as a discrete approximation of the following problem:

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{r}(x, t) = \phi\Big(\sum_{i=0}^{1} \int W_{1i}(x, y)\boldsymbol{r}(y, t) + \boldsymbol{v}(x)s(t)\Big), \qquad (2)$$

Then, we propose a bit modified version of the discretized version of an echo state network. Let the time unit $\tau_n \to 0$ as $n \to \infty$, and $\{t_k^{(n)}\} = k\tau_n$. We also denote the value of $\boldsymbol{r}(t)$

at $t = k\tau_n$ as $\boldsymbol{r}_k^{(n)}$. Then, we consider:

$$\boldsymbol{r}_k^{(n)} = \boldsymbol{r}_{k-1}^{(n)} + \tau_n \phi\Big(\boldsymbol{J}^{(n)} r_{k-1}^{(n)} + \boldsymbol{v}^{(n)} s(t_k^{(n)})\Big). \tag{3}$$

Here, $\boldsymbol{r}_k^{(n)} \in \mathbf{R}^n$, and $\boldsymbol{v}^{(n)} = (\xi_1, \ldots, \xi_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^n$ with $\xi_i = v(i/n)$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$. Moreover, $\boldsymbol{J}^{(n)} = [w_{ij}^{(n)}]$ is a matrix whose components are $w_{ij}^{(n)} = \varrho_n^{-1}\mathbf{G}(n, W_{10} + W_{11}, \varrho_n)$. A solution to (3) is called a DS-solution.

2.2 Terms from the semigroup literature

Let X be a Banach space with norm $\|\cdot\|$. The operator A on X is regarded as a subset of $X \times X$. The domain $D(A)$ and the range $R(A)$ of an operator A are defined as

$$D(A) \equiv \{x \in X \big| [x, y] \in A\},$$
$$R(A) \equiv \{y \in X \big| [x, y] \in A\}.$$

An operator A is said to be *dissipative* if it satisfies $\|(x - \lambda y) - (u - \lambda v)\| \geq \|x - y\|$ for $\lambda > 0$ and $[x, y]$, $[u, v] \in A$. For an operator A and $\omega \in \mathbf{R}$, if $A - \omega I$ is ω-dissipative, we say A is *ω-dissipative*. Let $BUC(\mathcal{G})$ be a space of functions that are uniformly bounded and continuous on a set $\mathcal{G}$.

3 Main results

Theorem 1 *Let a set $\{W_{ij}\}_{i,j=0,1}$ be a digraphon, and assume $\boldsymbol{s} \in BUC(\mathbf{R}_+)$ and $v \in BUC([0, 1])$. Then, if the operator*

$$\phi\Big(\sum_{i=0}^{1} \int W_{1i}(x, y)\boldsymbol{r}(y, t) + \boldsymbol{v}s(t)\Big)$$

is $\omega(t)$-dissipative for $t > 0$, problem (2) has an integral solution of type $\omega < 0$. Especially, for different initial data $\boldsymbol{r}_0$ and $\check{\boldsymbol{r}}_0$, the corresponding solutions $\boldsymbol{r}(t)$ and $\check{\boldsymbol{r}}(t)$ satisfy

$$\|\boldsymbol{r}(t) - \check{\boldsymbol{r}}(t)\| \leq \|\boldsymbol{r}_0 - \check{\boldsymbol{r}}_0\| \exp\Big(\int_0^t \omega(\tau)\, \mathrm{d}\tau\Big). \tag{4}$$

Remark 1 *Inequality (4) corresponds to the echo state property or common-signal-induced synchronization [2].*

Theorem 2 *The DS-solution to (3) converges to that of (2) as $n \to \infty$.*

4 Strategy for the proof

The proof of Theorem 1 essentially follows from a theorem proved for nonlinear semigroups [6] (see also [7], Theorem 6.20). The proof of the convergence of the DS-solution follows the arguments by Oharu and Takahashi [6], who discussed the convergence theorem based on the nonlinear analog of Trotter–Kato's theorem. We also considered the discussion by Crandall and Pazy [8].

参考文献

[1] W. Maass and H. Markram, Real-time computing without stable states: A new framework for neural computation based on perturbations, Neural Comput., Vol. 14 (2002), 2531–2560.

[2] M. Inubushi and K. Yoshimura, Reservoir computing beyond memory-nonlinearity trade-off, Scientific Reports, Vol. 7 (2017), 1–10.

[3] L. Lovasz, Large Networks and Graph Limits, American Mathematical Society, 2012.

[4] C. Borgs et al., An L_p theory of sparse graph convergence I : Limits, sparse random graph models, and power law distributions, arXiv preprint, arXiv:1401.2906.

[5] D. Cai, N. Ackerman and C. Freer, Priors on exchangeable directed graphs, Electron J. Statist., Vol. 10 (2016), 3490–3515.

[6] S. Oharu and T. Takahashi, A convergence theorem of nonlinear semigroups and its application to first order quasilinear equations, J. Math. Soc. Japan, Vol. 26 (1974), 124–160.

[7] I. Miyadera, Nonlinear semigroups (in Japanese), Kinokuniya, 1977.

[8] M. G. Crandall and A. Pazy, Nonlinear evolution equation in Banach spaces, Israel J. Math., Vol. 11 (1972), 57–94.

圧電体における表面波速度の摂動

田沼一実 [1], 中村玄 [2], Xiang Xu[3]
[1] 群馬大学理工学府，[2] 北海道大学理学研究科，[3]Zhejiang University
e-mail：tanuma@gunma-u.ac.jp

1 はじめに

圧電体方程式は，弾性・圧電・誘電テンソルを係数にもつ４つの方程式の連立系となり，弾性場と電場との相互作用をもたらす圧電効果ゆえ，圧電材料の開発等に応用は広い．圧電体が横等方性を有するとき，Bleustein-Gulyaev 波 (BG 波) とよばれる表面波が存在するが ([1, 2])，その伝播速度は圧電テンソルの１成分のみに依存する．したがって表面波の挙動の観測から圧電体の物質定数を決定する逆問題の立場からは，BG 波が有する圧電パラメターの関する情報は少ないといえる．そこで圧電・弾性・誘電テンソルが横等方から任意の非等方な状態に摂動した場合に，表面波速度が BG 波速度からどのように変化するかを一次摂動公式にて表現する．摂動公式の導出には圧電体方程式に拡張した Stroh formalism を用いる．

2 圧電体の基礎方程式

直交座標系 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ において，力学的ひずみ $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{ij})_{i,j=1,2,3}$ と電気変位 $\boldsymbol{D} = (D_1, D_2, D_3)$ は，構成方程式

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^{3} c_{ijkl}\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \sum_{l=1}^{3} e_{ijl}\frac{\partial \phi}{\partial x_l} \quad (i,j=1,2,3),$$

$$D_j = \sum_{k,l=1}^{3} e_{klj}\frac{\partial u_k}{\partial x_l} - \sum_{l=1}^{3} \varepsilon_{jl}\frac{\partial \phi}{\partial x_l} \quad (j=1,2,3).$$

により力学的変位 $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, u_3)$ と電気ポテンシャル ϕ に関係づけられる．ここで $\mathbf{C} = (c_{ijkl})_{i,j,k,l=1,2,3}$ は弾性テンソル ($c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{klij}$), $\boldsymbol{e} = (e_{ijl})_{i,j,l=1,2,3}$ は圧電テンソル ($e_{ijl} = e_{jil}$), $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_{jl})_{i,l=1,2,3}$ は誘電テンソル ($\varepsilon_{jl} = \varepsilon_{lj}$)．したがって，弾性場と電場の橋渡し役が圧電テンソルである ([3, 4])．$\mathbf{C}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}$ にはエネルギー正定値性を仮定する．

力学的運動方程式と電気的平衡方程式は，ρ を圧電体の一様密度としたとき，それぞれ

$$\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho\,\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (i=1,2,3), \quad \sum_{j=1}^{3}\frac{\partial D_j}{\partial x_j} = 0. \tag{1}$$

圧電体は横等方な対称性をもつとする．回転対称軸を x_3 軸にとれば，$\mathbf{C}, \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\varepsilon}$ の各成分は以下の係数行列 $\mathrm{P_{hex}}$ によって表現される．

$$\mathrm{P_{hex}} = (\mathrm{P_{hex}})^T =$$

$$\left[\begin{array}{cccccc|ccc}
c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{23}\\
c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{23}\\
c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{33}\\
0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & e_{41} & e_{42} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & e_{42} & -e_{41} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} & 0 & 0 & 0\\
\hline
0 & 0 & 0 & e_{41} & e_{42} & 0 & \varepsilon_{22} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & e_{42} & -e_{41} & 0 & 0 & \varepsilon_{22} & 0\\
e_{23} & e_{23} & e_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{33}
\end{array}\right]$$

$\mathrm{P_{hex}}$ の左上ブロックは４階テンソル $\mathbf{C}$ を Voigt 記号により 6×6 行列で表し，右上ブロックは３階テンソル $\boldsymbol{e}$ を最初の２添字 ij に Voigt 記号を適用して 6×3 行列で表し，右下ブロックは２階テンソル $\boldsymbol{\varepsilon}$ をそのまま 3×3 行列で表す．ただし $c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2$.

3 Bleustein-Gulyaev 波（BG 波）

本稿では，半空間圧電体 $x_2 \le 0$ の境界面 $x_2 = 0$ を x_1 方向に伝播し，深さ方向 $x_2 \to -\infty$ に指数減衰する表面波を考える．これらの表面波は (1) の一般解

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{u} \\ \phi \end{pmatrix} = \sum_{\alpha=1}^{4} c_\alpha\,\mathbf{a}_\alpha\, e^{-\sqrt{-1}\,k(x_1 + p_\alpha x_2 - v\,t)} \tag{2}$$

によって記述される．ここで，k は波数, v は亜音速域における位相速度, ベクトル $\mathbf{a}_\alpha \in \mathbb{C}^4$ $(1 \le \alpha \le 4)$ と特性根 $p_\alpha \in \mathbb{C}$ $(\mathrm{Im}\, p_\alpha > 0, 1 \le \alpha \le 4)$ は (2) を (1) に代入することで得られ，係数 $c_\alpha \in \mathbb{C}$ $(1 \le \alpha \le 4)$ と v は $x_2 = 0$ での境界条件から決定される．

圧電体が前節の横等方対称性をもつとき，Bleustein と Gulyaev は，$x_2 = 0$ での境界条件 (B) $(\sigma_{i2})_{i\downarrow 1,2,3} = \mathbf{0}$, $\phi = 0$ (mechanically-free, electrically-closed condition) の下で表面波解 (2) を構成した．半空間圧電体の境界面が横等方の回転対称軸を含み，境界での表面波の伝播方向は回転対称軸に垂直という状況設定である．

補題 1 ([1, 2]) 上記の横等方な圧電体において $e_{42} \neq 0$ とし，半空間圧電体 $x_2 \leq 0$ の境界 $x_2 = 0$ で条件 (B) を仮定する．このとき，x_1 方向に伝播し，深さ方向 $x_2 \to -\infty$ に指数減衰する表面波解 (2) が存在し，その位相速度 $v_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}}$ は次式で与えられる．

$$V_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}} = \rho \left(v_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}}\right)^2 = \frac{c_{44}\left(c_{44} + 2\,\dfrac{{e_{42}}^2}{\varepsilon_{22}}\right)}{c_{44} + \dfrac{{e_{42}}^2}{\varepsilon_{22}}} \qquad (3)$$

$v_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}}$ は $\mathrm{P}_{\mathrm{hex}}$ の成分の中，数個の情報しか有しない．とくに圧電テンソルは 1 成分のみの依存である．そこで次章では $\mathbf{C}, \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\varepsilon}$ の各テンソルが横等方から任意の非等方な状態に摂動した場合に，表面波速度がBG 波速度からどのように変化するかを考察する．

4 Bleustein-Gulyaev 波からの摂動

$\mathbf{C}, \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\varepsilon}$ の各テンソルの摂動部分を

$$\mathrm{P}_{\mathrm{ptb}} = \left(\mathrm{P}_{\mathrm{ptb}}\right)^T =$$

$$\left[\begin{array}{cccccc|ccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} & f_{11} & f_{12} & f_{13} \\
 & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} & f_{21} & f_{22} & f_{23} \\
 & & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} & f_{31} & f_{32} & f_{33} \\
 & & & a_{44} & a_{45} & a_{46} & f_{41} & f_{42} & f_{43} \\
 & & & & a_{55} & a_{56} & f_{51} & f_{52} & f_{53} \\
 & & & & & a_{66} & f_{61} & f_{62} & f_{63} \\
\hline
 & & & & & & \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\
 & & & & & & & \delta_{22} & \delta_{23} \\
 & & & & & & & & \delta_{33}
\end{array}\right]$$

とおく．

定理 2 ([5]) $v_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}} \neq v_{\mathrm{R}}$ を仮定する．ここで v_{R} は $\mathrm{P}_{\mathrm{hex}}$ の左上 6×6 ブロック（$\mathbf{C}$ の部分）から決まる *Rayleigh* 波速度．係数行列が $\mathrm{P}_{\mathrm{hex}} + \mathrm{P}_{\mathrm{ptb}}$ で与えられる半空間圧電体 $x_2 \leq 0$ において，境界 $x_2 = 0$ で条件 (B) を仮定する．このとき，x_1 方向に伝播し，深さ方向 $x_2 \to -\infty$ に指数減衰する表面波解 (2) の位相速度 v_{B} は，以下の $v_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}}$ からの一次摂動を有する．

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{B}} = \rho\,(v_{\mathrm{B}})^2 = V_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}} + P_1\, f_{42} + P_2\, f_{51} \\ + D_1\, \delta_{11} + D_2\, \delta_{22} + E_1\, a_{44} + E_2\, a_{55} \end{aligned}$$

ここで $V_{\mathrm{B}}^{\mathrm{hex}}$ は (3) で与えられ，摂動公式の係数 P_i, D_i, E_i $(i = 1, 2)$ は

$$P_1 = \frac{-2\, c_{44}\, {e_{42}}^5}{(c_{44}\, \varepsilon_{22} + {e_{42}}^2)^2\, (c_{44}\, \varepsilon_{22} + 2\, {e_{42}}^2)},$$

$$P_2 = \frac{2\, c_{44}\, e_{42}}{c_{44}\, \varepsilon_{22} + 2\, {e_{42}}^2},$$

$$D_1 = \frac{-{c_{44}}^2\, {e_{42}}^2}{(c_{44}\, \varepsilon_{22} + {e_{42}}^2)\, (c_{44}\, \varepsilon_{22} + 2\, {e_{42}}^2)},$$

$$D_2 = \frac{-{c_{44}}^2\, {e_{42}}^4}{(c_{44}\, \varepsilon_{22} + {e_{42}}^2)^2\, (c_{44}\, \varepsilon_{22} + 2\, {e_{42}}^2)},$$

$$E_1 = \frac{{e_{42}}^4}{(c_{44}\, \varepsilon_{22} + {e_{42}}^2)^2}, \qquad E_2 = 1.$$

横等方圧電体を摂動させても，BG 波に物質定数，とくに圧電テンソルの情報を十分にもたせることは，なかなか難しいことが示唆される．

Barnett と Lothe は，非等方弾性体方程式に対する Stroh formalism を圧電体方程式に拡張した ([6, 7])．その中で，$\mathbf{C}, \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\varepsilon}$ の各成分と v を用いて定義される 4×4 実対称行列 $\mathbf{B_F}$ は，$v = v_{\mathrm{B}}$ において rank が 2 に落ちる．亜音速域での $\mathbf{B_F}$ の 4 つの固有値の単調性を示し，$\mathrm{P}_{\mathrm{ptb}}$ の $\mathbf{B_F}$ への寄与をみることで，定理 2 を導いた．

謝辞 本研究の一部はJSPS 科研費 JP26400157, JP19K03559 の助成を受けた．

参考文献

[1] J.L. Bleustein, A new surface wave in piezoelectric materials, Appl. Phys. Lett., Vol.13 (1968), 412–413.

[2] Yu.V. Gulyaev, Electroacoustic surface waves in solids, Sov. Phys. JETP Lett., Vol.9 (1969), 37–38.

[3] H.F. Tiersten, Linear Piezoelectric Plate Vibrations, Plenum Press, 1969.

[4] V.M. Ristic, Principles of Acoustic Devices, John Wiley & Sons., 1983.

[5] G. Nakamura, K. Tanuma and X. Xu, On the perturbation of Bleustein-Gulyaev waves in piezoelectric media, (submitted)

[6] J. Lothe and D.M. Barnett, Integral formalism for surface waves in piezoelectric crystals. Existence considerations, J. Appl. Phys., Vol.47 (1976), 1799–1807.

[7] J. Lothe and D.M. Barnett, Further development of the theory for surface waves in piezoelectric crystals, Phys. Norv., Vol.8 (1976), 239–254.

閉曲線上で定式化されたKuramoto-Sivashinsky方程式の回転波の分岐

上形 泰英 [1], 小林 俊介 [1], 矢崎 成俊 [2]
[1] 明治大学大学院理工学研究科，[2] 明治大学理工学部
e-mail : s.kobayashi.meiji@gmail.com

1 導入

$\mathbb{R}^2$ 平面内における滑らかな Jordan 閉曲線 $\{\Gamma(t)\}_{0\le t<T}$ の族に対する時間発展方程式

$$\dot{\boldsymbol{X}} = V\boldsymbol{N}+W\boldsymbol{T},\ V = V_0+(\alpha-1)\kappa+\delta\kappa_{ss} \quad (1)$$

を扱う．ここで，“ $\dot{}$ ” は t による微分を表し，$\Gamma(t)$ は $\boldsymbol{X}(u,t) : [0,1]\times[0,T)\to\mathbb{R}^2$ で表現され，$\Gamma(t)=\{\boldsymbol{X}(u,t);\, u\in[0,1]\}$，$\boldsymbol{N}$ は単位法ベクトル，W は接線速度，$\boldsymbol{T}$ は単位接ベクトル，V_0 は定数，$\alpha>1$ はスケーリングされた Lewis 数，κ は曲率，$\delta>0$ はパラメータ，s は弧長パラメータである．方程式 (1) は，ある時空スケールの下で Kuramoto-Sivashinsky 方程式（[1, 2]）: $f_t+f_x^2/2+(\alpha-1)f_{xx}+4f_{xxxx}=0$ と同値となることが知られている（[3, 4]）．元来，Kuramoto-Sivashinsky 方程式は，ガスの燃焼波面の追跡を背景に導出されたものであるが，先行研究 [4, 5] において，(1) は床面付近に設置された紙のすす燃焼前線の追跡にも有効であることが実験解析・数値実験の両面から検証された（図 1 参照）．本講演では，(1) に対して局所分岐理論の立場から考察し，[6, 7] で得られる進行波のアナロジーとして，回転波という特徴的な解の分岐について報告する．

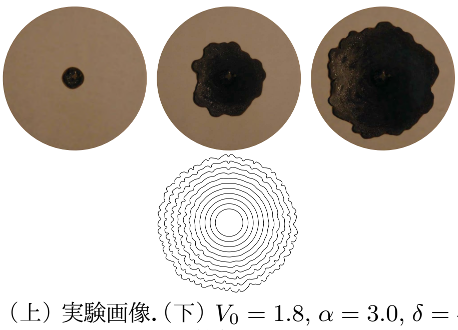


図 1．（上）実験画像.（下）$V_0=1.8,\ \alpha=3.0,\ \delta=4.0$ としたときの (1) の数値計算結果．時間刻みは $\Delta t=2^{-13}$ とし，グリッド点数は $N=512\to1024$ 点，描画時間は $t=0,4,8,\ldots,40$，初期値は半径 20.0 に対して 10% のノイズを与えたものを採用している（詳細は [4] を参照）．

2 摂動の時間発展方程式

方程式 (1) は円周解 $\boldsymbol{C}(u,t)=R(t)\boldsymbol{y}(u)$ ($\boldsymbol{y}=(\cos(2\pi u),\sin(2\pi u))$) をもつ．ただし，$R(t)$ は常微分方程式 $\dot{R}=V_0+(\alpha-1)/R$ を満たす解として与えられる．この円周解からの摂動を，$\boldsymbol{X}(u,t)=\boldsymbol{C}(u,t)+\varepsilon(u,t)\boldsymbol{y}(u)$ の形で考える．ここで，$\varepsilon(u,t)\in\mathbb{R}$ は $u\in[0,1]$ に関する周期関数としている．これを (1) に代入し，ε とその導関数に関する 2 次までの非線型性を計算すると，以下のような摂動 $\varepsilon(u,t)$ に関する時間発展方程式が導かれる：

$$\dot{\varepsilon}=\mathcal{L}\varepsilon+\mathcal{F}(\varepsilon,\varepsilon_u,\varepsilon_{uu},\varepsilon_{uuu},\varepsilon_{uuuu})+\mathcal{O}_3.$$

ただし，$W=3\delta(\kappa^2)_s/2$ としており，

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= -\frac{\delta}{16\pi^4R^4}\frac{\partial^4}{\partial u^4}-\frac{\delta+R^2(\alpha-1)}{4\pi^2R^4}\frac{\partial^2}{\partial u^2}-\frac{\alpha-1}{R^2},\\
\mathcal{F} &= \frac{\alpha-1}{R^3}\varepsilon^2-\frac{V_0}{8\pi^2R^2}\varepsilon_u^2+\frac{\varepsilon\varepsilon_{uu}}{\pi^2R^3}\left(\frac{\alpha-1}{2}+\frac{\delta}{R^2}\right)\\
&\quad+\frac{3\delta}{16\pi^4R^5}\varepsilon_{uu}^2+\frac{\delta}{4\pi^4R^5}\varepsilon\varepsilon_{uuuu}+\frac{3\delta}{16\pi^4R^5}\varepsilon_u\varepsilon_{uuu},\\
\mathcal{O}_3 &= \mathcal{O}(|(\varepsilon,\varepsilon_u,\varepsilon_{uu},\varepsilon_{uuu},\varepsilon_{uuuu})|^3).
\end{aligned}\quad (2)$$

$R(t)$ は既知関数であるため，(2) は非自励系となる．標準的な分岐理論を適用するために，以後 $R(t)$ を分岐パラメータ $R>0$ と見なす．

3 線型化不安定性

(2) の 2 次の非線型性までの力学系を考察することとし，これを定める相空間を $H^4_{\mathrm{per}}=\left\{\varepsilon\in H^4_{\mathrm{loc}};\,\varepsilon(u)=\varepsilon(u+1)\right\}$ と設定する．よって，Fourier 展開による解の表示：

$$\varepsilon(u,t)=\sum_{m\in\mathbb{Z}}\varepsilon_m(t)\mathrm{e}^{2\sqrt{-1}m\pi u}$$

により，以下の無限次元力学系を得る：

$$\dot{\varepsilon}_m=\lambda_m\varepsilon_m+\sum_{\substack{m_1+m_2=m\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}C_{m_1,m_2}\varepsilon_{m_1}\varepsilon_{m_2}. \quad (3)$$

ここで，$\varepsilon_m(t)\in\mathbb{C}$ であり，

$$\begin{aligned}
\lambda_m &= \frac{m^2-1}{R^4}\left(R^2(\alpha-1)-\delta m^2\right),\\
C_{m_1,m_2} &= \frac{V_0m_1m_2}{2R^2}-\frac{4m_2^2}{R^3}\left(\frac{\alpha-1}{2}+\frac{\delta}{R^2}\right)\\
&\quad+\frac{\alpha-1}{R^3}+\frac{\delta m^2(3m_1^2+3m_1m_2+4m_2^2)}{R^5}.
\end{aligned}$$

(3) を定める相空間は $\mathscr{F} = \left\{ \{\varepsilon_m\}_{m\in\mathbb{Z}};\, \varepsilon_{-m} = \bar{\varepsilon}_m,\, \|\{\varepsilon_m\}_{m\in\mathbb{Z}}\|^2_{\mathscr{F}} < \infty \right\}$ であり，$\|\{\varepsilon_m\}_{m\in\mathbb{Z}}\|^2_{\mathscr{F}} = \sum_{m\in\mathbb{Z}}(1+m^2)^4|\varepsilon_m|^2$ をノルムとしている．$\varepsilon_{-m} = \bar{\varepsilon}_m$ が $\varepsilon \in \mathbb{R}$ により従うこと, そして自明解における線型化作用素が解析半群の生成素となることに注意されたい．

さて，自明解 $\varepsilon(u,t) \equiv 0$ における線型化不安定性を調べる．自明解の線型化固有値は λ_m により与えられ，任意の $R > 0$ に対して $\lambda_{\pm 1} = 0$ が成り立つ．さらに $R = R^* := 2\sqrt{\delta/(\alpha-1)}$ において $\lambda_{\pm 1} = \lambda_{\pm 2} = 0$ が成り立ち，$\lambda_m < 0$ $(m \neq \pm 1, \pm 2)$ が分かる．分岐点 $R = R^*$ 近傍において中心多様体縮約を行うことで，以下の縮約方程式系を得る：

Theorem 1. 与えられた $\alpha > 1$ と $\delta > 0$ に対して分岐点 $R = R^*$ が存在し，その近傍において (3) の局所中心多様体 $\mathcal{M}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{loc}}$ が存在する．さらに，$\mathcal{M}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{loc}}$ 上の (3) の流れは，以下の常微分方程式系が定める流れと局所位相同値：

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_1 = a_1\bar{\varepsilon}_1\varepsilon_2 + a_2\varepsilon_1|\varepsilon_2|^2 + \mathcal{O}_4, \\ \dot{\varepsilon}_2 = \lambda_2\varepsilon_2 + b_1\varepsilon_1^2 + (b_2|\varepsilon_1|^2 + b_3|\varepsilon_2|^2)\varepsilon_2 + \mathcal{O}_4. \end{cases} \tag{4}$$

ここで，$c_{i,j} = C_{i,j} + C_{j,i}$，$a_1 = c_{2,-1}$，$a_2 = -c_{1,2}c_{3,-2}/\lambda_3$，$b_1 = C_{1,1}$，$b_2 = -c_{2,0}c_{1,-1}/\lambda_0 - c_{1,2}c_{3,-1}/\lambda_3$，$b_3 = -c_{2,0}c_{2,-2}/\lambda_0 - C_{2,2}c_{4,-2}/\lambda_4$，$\mathcal{O}_4 = \mathcal{O}(|\varepsilon_1, \bar{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \bar{\varepsilon}_2|^4)$.

4　回転波の分岐

極座標表示 $\varepsilon_j = r_j(t)\mathrm{e}^{\sqrt{-1}\theta_j(t)}$ $(j = 1, 2)$ を導入し，位相差を $\phi = 2\theta_1 - \theta_2$ とおく．以下，(4) の 3 次の非線型力学系：

$$\begin{cases} \dot{r}_1 = r_1 r_2(a_1\cos\phi + a_2 r_2), \\ \dot{r}_2 = \lambda_2 r_2 + b_1 r_1^2\cos\phi + r_2(b_2 r_1^2 + b_3 r_2^2), \\ \dot{\phi} = -\left(2a_1 r_2 + \dfrac{b_1 r_1^2}{r_2}\right)\sin\phi. \end{cases}$$

を考察することとする．本稿では，$\sin\phi \neq 0$ の下での非自明定常解を回転波と呼ぶ．実際に回転波は，(r_1, r_2, ϕ) 空間において

$$r_1 = \sqrt{-\frac{2a_1}{b_1}}r_2, \quad r_2 = \sqrt{\frac{\lambda_2 b_1}{2a_1 b_2 - b_1(2a_2 + b_3)}},$$

$$\cos\phi = -\frac{a_2}{a_1}r_2$$

で与えられる．よって，回転波が $\lambda_2 = 0$ で自明解から分岐するための必要条件は $a_1 b_1 < 0$ であることが分かる．また，各波数の位相に関する微分方程式は，それぞれ

$$\dot{\theta}_1 = -a_1 r_2\sin\phi, \quad \dot{\theta}_2 = \frac{b_1 r_1^2}{r_2}\sin\phi$$

で与えられる．(4) による回転波は，位相差 ϕ が定数のままである一方で，$\theta_1(t)$ と $\theta_2(t)$ が共に時間について線型増大または減少する解として特徴付けられる．回転波の主要項は

$$\begin{aligned} \varepsilon(u,t) &\sim r_1\mathrm{e}^{\sqrt{-1}(\theta_1(t)+2\pi u)} + r_2\mathrm{e}^{\sqrt{-1}(\theta_2(t)+4\pi u)} + \mathrm{c.c.} \\ &= 2\left(r_1\cos\left(\theta_1(t) + 2\pi u\right) + r_2\cos\left(\theta_2(t) + 4\pi u\right)\right) \end{aligned}$$

と書かれる．ここで，“c.c.” は複素共役を表す．

参考文献

[1] Y. Kuramoto & T. Tsuzuki, Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium, *Progress of Theoretical Physics* **55** (1976), 356–369.

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

[3] M. L. Frankel & G. I. Sivashinsky, On the nonlinear thermal diffusive theory of curved flames, *J. Phys.* **48** (1987) 25–28.

[4] M. Goto, K. Kuwana and S. Yazaki, A simple and fast numerical method for solving flame/smoldering evolution equations, *JSIAM Lett.* **10** (2018) 49–52.

[5] M. Goto, K. Kuwana, G. Kushida and S. Yazaki, Experimental and theoretical study on near-floor flame spread along a thin solid, *Proceedings of the Combustion Institute* (accepted).

[6] D. Armbruster, J. Guckenheimer and P. Holmes, Heteroclinic cycles and modulated travelling waves in systems with O(2) symmetry, *Physica D* **29** (1988), 257–282.

[7] D. Armbruster, J. Guckenheimer and P. Holmes, Kuramoto-Sivashinsky dynamics on the center-unstable manifold, *SIAM J. Appl. Math.* **49** (1988), 676–691.

Posit の OpenCL 移植による津波シミュレーションの性能評価

村上 雄樹 [1], 河野 郁也 [1], 中里 直人 [1]
[1] 会津大学
e-mail : d8181105@u-aizu.ac.jp

1 はじめに

科学技術計算の分野では，物理現象をモデル化した微分方程式を解くことにより，現実世界をシミュレーションし，個々の現象の理解を深める．しかし，多くのモデルは非線形であり解析的に解くことが現実的には困難である．そのため，コンピュータを用いて数値的に解くことがほとんどであるが，実数全体に対しコンピュータ上で正確に表現される実数の個数は極めて少ない．これは長時間シミュレーションを行うと計算結果に誤差が蓄積されるという，コンピュータを使用する上で避けられない根本的な問題である．そこで，できうる限り誤差の影響を少なくするために多倍長精度の浮動小数点数を用いたり，誤差を含みつつも計算結果を保証するために区間演算を用いたりしながら，より有効な数値解が求められている．

コンピュータ上での実数の近似である浮動小数点数は，IEEE 754 形式が最も広く使われており，指数部と仮数部が固定であるという特徴を持つ．これにより問題によっては，指数部の桁数を有効に使うことができず結果として仮数部が犠牲になってしまう．そのため，指数部と仮数部を可変にする形式の浮動小数点数が提案されてきた [1]．今回，私たちが用いる Posit もその一つである．Posit は，2017 年に Gustafson らによって発表された浮動小数点形式の一種であり，彼らが提案した universal number (unum) の改良版となっている [2]．特徴として，従来の指数部にあたる部分が 2 つに分かれており，直観的には大きく刻む指数部と小さく刻む指数部が存在する．

2 手法

始めに CPU における IEEE 754 形式の浮動小数点計算と Posit による加算･乗算の性能比較を行った．次に，Posit を OpenCL へと移植し，加算･乗算の 1 演算あたりの時間を CPU と比較した．さらに，浅水方程式を解く MOST 法 [3] の計算を CPU にて行い，形式の違いによる計算結果の誤差を比較した．Posit のソフトウェアシミュレータとして SoftPosit[4] を使用した．また計算には，CPU として Intel(R) Xeon(R) Gold 5122 CPU @ 3.60GHz を，GPU として Tesla V100-PCIE-32GB を使用した．

3 結果

表 1 に，CPU での IEEE 754 単精度浮動小数点と 32 bit Posit の加算・乗算の 1 演算あたりの計算時間を示す．使用した CPU のクロック周波数は 3.6 GHz であるため，1 クロックあたり約 0.28 ns である．RDTSC 命令を用いて 1 演算あたりのクロックを測定し，そこから計算時間を算出した．Posit は，そのフォーマットから指数部の桁数によって計算時間が変わることが予想されるため，引数を特定の範囲からの乱数とした．$[a, b) = \{ x \,|\, a \leq x < b \}$ として，$I_0 = [1.0, 2.0), I_1 = [\mathrm{FLT\_MIN}, 10^{-30}), I_2 = [10^{30}, \mathrm{FLT\_MAX}), I_3 = [10^{-15}, 10^{-14}), I_4 = [10^{14}, 10^{15})$ の中から引数を選んだ．

表 1: float と Posit32 の性能比較

(a) 加算

$x+y$	x	y	計算時間/ns
float			1.06
Posit	I_0		8.97
	I_1		26.1
	I_2		27.7

(b) 乗算

$x*y$	x	y	計算時間/ns
float			1.06
Posit	I_0		7.92
	I_3		16.1
	I_4		17.1
	I_1	I_2	29.2
	I_3	I_4	16.9

表 2 に，GPU での 32 bit Posit の加算・乗算の 1 演算あたりの計算時間を示す．CPU の場合と同様，演算の引数を特定の範囲からの乱数とした．また，GPU の特性上複数のスレッドを同時に処理するため，カーネルの実行時間をローカルワークサイズである 2^7 で割ったもの

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

を 1 演算あたりの計算時間とする．全体の演算量（グローバルワークサイズ）は，2^{22} とした．CPU と比べ GPU での 1 演算あたりの計算時間は，加算で 50–70 倍，乗算で 40–80 倍遅くなっている．Posit は，指数部の桁数が固定されておらず，計算上，指数部と仮数部を分離するために条件分岐を必要とする．そのため，GPU を用いて計算する場合，スレッドダイバージェンスにより全体として計算時間がかかってしまったと考えられる．

表 2: CPU と GPU での Posit32 の性能比較

(a) 加算

$x+y$	x	y	計算時間/ns
CPU	I_0		8.97
GPU			647.75
CPU	I_1		26.1
GPU			1376.0
CPU	I_2		27.7
GPU			1336.0

(b) 乗算

$x*y$	x	y	計算時間/ns
CPU	I_0		7.92
GPU			647.75
CPU	I_3		16.1
GPU			920.0
CPU	I_4		17.1
GPU			879.75
CPU	I_1	I_2	29.2
GPU			1280.0
CPU	I_3	I_4	16.9
GPU			887.75

図 1 には，MOST 法の計算における各メッシュの波の高さの相対誤差の平均について，ステップごとの推移を示す．基準となる各メッシュ i に対する波の高さ b_i は倍々精度で計算を行い保存しておき，比較対象である float，16 bit Posit，32 bit Posit の 3 種類の計算結果 t_i について相対誤差 $c_i = |t_i - b_i|/b_i$ を求め，その平均 $\bar{c} = 1/n * \sum_i^n c_i$ を各ステップごとにプロットした．計算領域は $n = 500$ であり，おおよそ中心に一つ波を設定した．また，境界条件は特に設定を行っていない．傾向として，32 bit Posit が float よりも 1 桁精度がよいことが分かる．

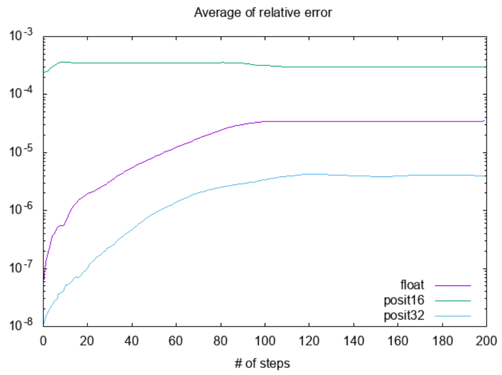


図 1: ステップごとの各メッシュの相対誤差の平均

4 まとめ

float と Posit32 の演算精度は，10 進数 1 桁の差があるが，CPU で実行する場合は少なく見積もっても 8–9 倍の計算時間の差があるためあまり有効ではない．また，GPU で Posit を計算した場合，そのフォーマットによる性質上 CPU と比較して 40–80 倍程度の速度低下が見られた．しかしながら，今回はあくまでも OpenCL 移植に伴う加算・乗算といった基本的な演算のみの性能比較である．そのため，実際に MOST 法を用いて津波シミュレーションを実行し，より実用的な性能評価を行うことが今後の課題である．

参考文献

[1] Peter Lindstrom, Scott Lloyd, and Jeffrey Hittinger. Universal coding of the reals: alternatives to ieee floating point. In *Proceedings of the Conference for Next Generation Arithmetic*, p. 5. ACM, 2018.

[2] John L Gustafson and Isaac T Yonemoto. Beating floating point at its own game: Posit arithmetic. *Supercomputing Frontiers and Innovations*, Vol. 4, No. 2, pp. 71–86, 2017.

[3] Vasily V Titov and Frank I Gonzalez. Technical report, NOAA Tech. Memorandum ERL PMEL-112, 1997.

[4] Softposit. `https://gitlab.com/cerlane/SoftPosit`.

AVX-512IFMA を用いた多倍長整数乗算の高速化

枝松 拓弥 [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 : edamatsu@hpcs.cs.tsukuba.ac.jp, daisuke@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

乗算は最も基本的な四則演算の一つである．また 64bit を超えた精度の数を多倍長数といい，多倍長整数乗算はソフトウェアで解決する問題である．この演算は公開鍵暗号システムや数式処理システムに応用される．乗算においてキャリーの発生は課題の一つであり，これに対応するためオペランドの 1 ワードの bit 数を減らす表現（reduced-radix 表現）手法 [1] を用いた．また近年では Intel から Cannon Lake プロセッサが出荷されたことにより AVX-512 Integer Fused Multiply-Add（IFMA）命令が利用可能になった．さらに高速な乗算アルゴリズムの一つに Karatsuba 法がある [2]．本研究では reduced-radix 表現，AVX-512IFMA 命令，Karatsuba 法を用いた多倍長整数乗算の実装，性能評価を行う．

2 関連研究

reduced-radix 表現と AVX-512 命令を用いた多倍長整数乗算の高速化を行った先行研究を挙げる．文献 [3] では AVX-512 Foundation（F）を使用し Intel Software Development Emulator（SDE）で命令数を評価した結果，GNU Multiple Precision Arithmetic Library（GMP）[4] に対し 4096bit どうしの乗算で約 1.45 倍性能向上した．文献 [5] では AVX-512 IFMA を用いて実装し命令数のみの性能評価を行った結果，4096bit どうしの乗算で AVX-512IFMA により，GMP に対し約 8 倍の性能向上が得られている．また文献 [6] では AVX-512F を使用して Xeon Phi プロセッサにおける実行時間の評価を行った結果，4096bit どうしの乗算で GMP に対し約 2.3 倍の性能向上が得られている．

3 reduced-radix 表現

本研究では，多倍長整数を符号なし 64bit 整数型配列で表現する．64bit どうしの加算は最大で 65bit になり，キャリーが発生する可能性があるため余分な処理が追加される．そこで，乗算前に 1 ワードあたりの bit 数を 52bit に減らした表現（reduced-radix 表現）に変換する．52bit である理由は，AVX-512IFMA は浮動小数点数演算の仮数部を利用した整数の積和演算を行うため，オペランドは 64bit のうち 52bit のみが使用されるためである．これにより 52bit どうしの加算となり，53bit 目以降をキャリー蓄積の空間として利用する．蓄積したキャリーは乗算の後でまとめて処理する．

Algorithm 1 BasecaseMultiply [7]

Input: $A = \sum_{i=0}^{m-1} a_i\beta^i, B = \sum_{j=0}^{n-1} b_j\beta^j$
Output: $C = AB := \sum_{k=0}^{m+n-1} c_k\beta^k$
$C \leftarrow A \cdot b_0$
for $j \leftarrow 1$ **to** $n-1$ **do**
  $C \leftarrow C + \beta^j(A \cdot b_j)$
end for
return C.

Algorithm 2 KaratsubaMultiply

Input: $A = \sum_{i=0}^{n-1} a_i\beta^i, B = \sum_{j=0}^{n-1} b_j\beta^j$
Output: $C = AB := \sum_{k=0}^{2n-1} c_k\beta^k$
1: **if** $n \leq n_0$ **then**
2:   return **BasecaseMultiply**(A, B)
3: **end if**
4: $k \leftarrow \lceil n/2 \rceil$
5: $(A_0, B_0) := (A, B) \bmod \beta^k$
6: $(A_1, B_1) := \lfloor (A, B) \;/\; \beta^k \rfloor$
7: $(A_2, B_2) := (A_0 - A_1, B_0 - B_1)$
8: $C_0 \leftarrow$ **KaratsubaMultiply**(A_0, B_0)
9: $C_1 \leftarrow$ **KaratsubaMultiply**(A_1, B_1)
10: $C_2 \leftarrow$ **KaratsubaMultiply**(A_2, B_2)
11: return $C := C_0 + (C_0 + C_1 - C_2)\beta^k + C_1\beta^{2k}$.

4 Karatsuba 法

本研究では Karatsuba 法（Algorithm 2）による実装を行った．Algorithm 1 は Karatsuba 法でも用いられる筆算法 [7] である．ワード数 n の乗算の計算量について，筆算法と Karatsuba 法はそれぞれ $O(n^2)$ と $O(n^{\log_2 3}) \approx O(n^{1.585})$ である．本研究では Algorithm 2 の 7，11 行

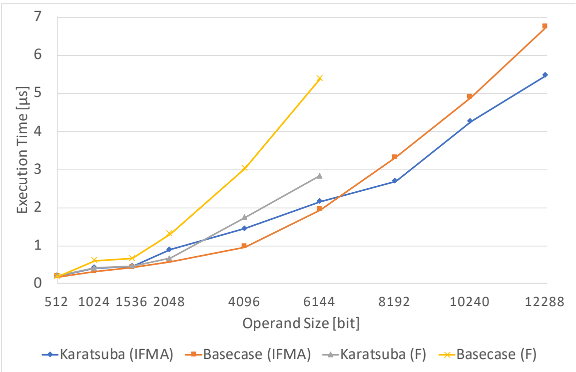


図 1. 筆算法と Karatsuba 法との実行時間の比較

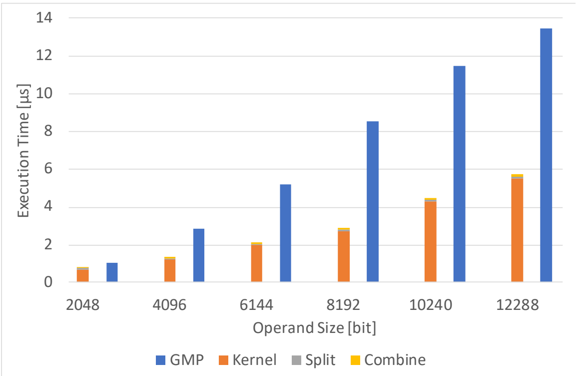


図 2. GMP と本研究の実装の実行時間

目には AVX-512F，2 行目の筆算法には AVX-512IFMA 命令を用いる．

5 性能評価

図 1 は筆算法と Karatsuba 法に AVX-512F と AVX-512IFMA を適用した 4 種類の多倍長整数乗算の実行時間を示している．オペランドが 512bit の場合はいずれもほぼ同等の実行時間であるが，6144bit までは AVX-512IFMA による筆算法が，それ以降のサイズでは AVX-512IFMA による Karatsuba 法が最も速い結果が得られたため，AVX-512IFMA 命令は AVX-512F 命令よりも高速に乗算を処理することが示された．また図 2 は本研究の実装と GMP との実行時間の比較を示している．図 1 の結果から，7168bit を境に筆算法から Karatsuba 法へと切り替える実装を行った．グラフからすべてのサイズで GMP よりも高速に乗算を処理することが示された．本研究は GMP に対し最大で約 2.97 倍の性能向上が得られている．

6 まとめ

本研究では多倍長整数乗算の高速化を目的とし，そのために reduced-radix 表現と AVX-512IFMA 命令を組合わせ，さらに筆算法よりも高速な Karatsuba 法による乗算を行った．その結果，従来の AVX-512F よりも高速で，さらに GMP に対し最大で約 2.97 倍の性能向上という結果が得られたため多倍長整数乗算の高速化を達成した．しかし Karatsuba 法よりも高速なアルゴリズムとして Toom-Cook 法 [8] が知られているため，このアルゴリズムに AVX-512IFMA 命令を用いて評価することが今後の課題として挙げられる．

参考文献

[1] Intel Corporation. Using Streaming SIMD Extensions (SSE2) to Perform Big Multiplications, version 2.0. 2000. `https://software.intel.com/sites/default/files/14/4f/24960`.

[2] A. Karatsuba and Y. Ofman. Multiplication of multidigit numbers on automata. *Soviet Physics Doklady*, Vol. 7, p. 595, 1963.

[3] A. Keliris and M. Maniatakos. Investigating Large Integer Arithmetic on Intel Xeon Phi SIMD Extensions. In *Proc. Design & Technology of Integrated Systems In Nanoscale Era (DTIS)*, pp. 1–6, 2014.

[4] The GNU MP. `https://gmplib.org/`.

[5] S. Gueron and V. Krasnov. Accelerating Big Integer Arithmetic Using Intel IFMA Extensions. In *Proc. 2016 IEEE 23rd Symposium on Computer Arithmetic (ARITH)*, pp. 32–38, 2016.

[6] T. Edamatsu and D. Takahashi. Acceleration of Large Integer Multiplication with Intel AVX-512 Instructions. In *Proc. 20th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2018)*, pp. 211–218, 2018.

[7] R. Brent and P. Zimmermann. *Modern Computer Arithmetic*. Cambridge University Press, 2010.

[8] A. L. Toom. The complexity of a scheme of functional elements realizing the multiplication of integers. *Soviet Mathematics Doklady*, Vol. 3, pp. 714–716, 1963.

尾崎スキームによる高精度かつ再現性のある BLAS 実装

椋木 大地 [1], 荻田 武史 [2], 尾崎 克久 [3], 今村 俊幸 [1]
[1] 理化学研究所，[2] 東京女子大学，[3] 芝浦工業大学
e-mail : daichi.mukunoki@riken.jp

1 はじめに

高精度行列積計算手法である尾崎スキーム [1] に基づく，内積ベースの Basic Linear Algebra Subprograms（BLAS）ルーチンの CPU・GPU（CUDA）実装と，疎行列反復解法への応用を報告する．本実装では倍精度 BLAS と同一のインタフェースにおいて，精度が可変な高精度計算と，実行環境に依存しないビットレベルの計算結果の一貫性（再現性）を実現する．本稿では CUDA における実装と性能を示す．

2 尾崎スキーム

尾崎スキームは内積･行列積の無誤差変換と高精度総和計算で実現される．$\mathbb{F}$ を浮動小数点数の集合，$\mathrm{fl}(\cdots)$ を最近接偶数丸めによる浮動小数点演算，$\mathbf{u}$ を浮動小数点数の丸め単位（IEEE 754 binary64 の場合 2^{-53}）とする．ベクトル $x, y \in \mathbb{F}^n$ の内積 $x^T y$ を次のように計算する：(1) Algorithm 1 で x, y を $x = x^{(1)} + x^{(2)} + \cdots + x^{(s_x)}, y = y^{(1)} + y^{(2)} + \cdots + y^{(s_y)}$ と分割，(2) $x^T y = (x^{(1)} + x^{(2)} + \cdots + x^{(s_x)})^T (y^{(1)} + y^{(2)} + \cdots + y^{(s_y)})$ と計算．ここで Algorithm 1 は $(x^{(p)})^T y^{(q)} = \mathrm{fl}((x^{(p)})^T y^{(q)})$ となるように分割しているため，分割ベクトル同士の積は通常の浮動小数点演算（BLAS）で計算可能，(3) 総和計算を高精度かつ再現可能な方法（本研究では NearSum[2] を使用）で計算する．なお，計算に使用する分割ベクトル数を変えることで再現性を確保したまま精度を可変できる．

3 実装・最適化

実装は (1) ベクトル・行列の分割，(2) 分割ベクトル・行列の計算，(3)NearSum による総和の 3 パートからなる．(1)，(3) はコーディングが必要であるが (2) の計算には通常の BLAS（例えば MKL や cuBLAS 等）が利用可能である．この計算はそれぞれ独立に実行できるため，GEMM では batched BLAS を用いることでコア数が多く行列サイズが小さい場合に高速化できる．またメモリ律速となる level-1/2 ルーチンでは複数本の分割ベクトルをまとめて行列積で計算することでデータ再利用性が向上し高速化できる．なお行列計算時には分割行列がメモリ使用量を圧迫するが，行列を内積方向に細長く分割しブロッキングすることでメモリ使用量を削減できる．

Algorithm 1 x and $x_{\mathrm{split}}[j]$ are vectors, and the others are scalar values. Lines 9 and 10 are computations of x_i and $x_{\mathrm{split}}[j]_i$ for $0 \le i \le n-1$)

1: **function** $((x_{\mathrm{split}}[s_x]) \leftarrow \mathtt{Split}(x, n))$
2: $\quad \rho := \mathtt{ceil}((\mathtt{log2}(\mathbf{u}^{-1}) + \mathtt{log2}(n+1))/2)$
3: $\quad \mu := \max_{0 \le i \le n-1}(|x_i|)$
4: $\quad j := 0$
5: $\quad$ **while** $(\mu \neq 0)$ **do**
6: $\quad\quad j := j + 1$
7: $\quad\quad \tau := \mathtt{ceil}(\mathtt{log2}(\mu))$
8: $\quad\quad \sigma := 2^{(\rho+\tau)}$
9: $\quad\quad x_{\mathrm{split}}[j] := \mathtt{fl}((x + \sigma) - \sigma)$
10: $\quad\quad x := \mathtt{fl}(x - x_{\mathrm{split}}[j])$
11: $\quad\quad \mu := \max_{0 \le i \le n-1}(|x_i|)$
12: $\quad$ **end while**
13: $\quad s_x := j$
14: **end function**

表 1. GEMM (1000×1000) における MPRF 2048-bit（結果は倍精度に丸めている）と比較した最大相対誤差．行列は $(\mathtt{rand} - 0.5) \times exp(\phi \times \mathtt{randn})$ で初期化．”double” は cublasDgemm の結果．

exp of min/ max input	-7/+1 (ϕ=1)	-10/+7 (ϕ=4)	-17/+13 (ϕ=7)
double	6.14E-10	2.95E-11	2.22E-10
$d = 2$	1.98E-06	4.61E-03	4.11E+01
$d = 3$	5.07E-13	1.17E-09	4.42E-05
$d = 4$	0	8.25E-16	7.79E-11
$d = 6$	0	0	0

4 精度・性能評価

表 1 に GEMM における MPFR（2048-bit）と比較した最大相対誤差を示す．尾崎スキームの精度は入力ベクトル・行列の絶対値レンジ，次元数，計算に使用する分割行列数（以下 d とする）に依存する．図 1 に NVIDIA Titan V，CUDA 10.0 における DOT･GEMM の cuBLAS の倍精度ルーチンに対する相対実行時間を示す．基準となる cuBLAS ルーチンは問題サイズが最大の時，理論ピーク性能の 90%以上が得られている．倍精度演算に対する理論上の相対実行時間は，DOT・GEMV 等のメモリ律速な演算で

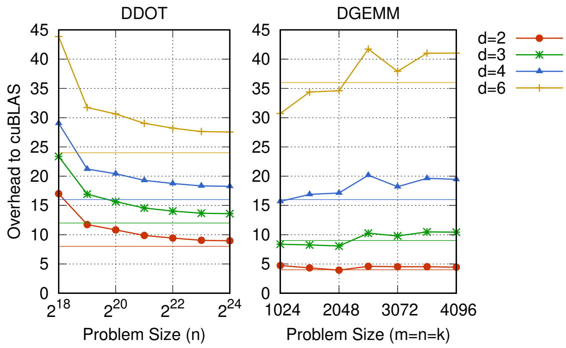


図 1. Titan V における cuBLAS 倍精度ルーチンに対する相対実行時間．マーカーなしの横線は理論性能．

はメモリ参照量に基づいて $4d$ 倍である．また GEMM 等の演算律速な演算では分割行列の計算コストが支配的となるため行列積計算回数に基づいて d^2 倍となる．なお本稿では示していないが，精度への影響が少ない分割行列同士の計算を省略すると若干の精度低下と引き換えに相対実行時間を $d(d+1)/2$ 倍にできる．

5　疎行列反復解法への応用

疎行列反復解法の Conjugate Gradient（CG）法は丸め誤差の影響により収束性の悪化や収束履歴が変化するケースがある．我々は MAGMA 2.5.0[3] の前処理なし CG 法ルーチンにおいて，CSR 形式の疎行列ベクトル積（SpMV）および DOT・NRM2 を，尾崎スキームによる実装に置き換えて収束履歴の変化を観察した．図 2 は 2 種類の GPU（Titan V，GeForce GTX 1080Ti）における行列 “bone010”（SuiteSparse Matrix Collection [4] から取得）の残差履歴である（右辺ベクトル b および初期近似ベクトル x_0 は $b = x_0 = (1, ..., 1)^T$）．MAGMA では GPU 間で履歴が異なるが，尾崎スキームによる実装では一致し（図では 1080Ti による結果は省いている），収束までの反復回数も減少した．なお d=4 の時に行列は実際には 3 分割で済んでおりベクトルのみ 4 分割されている．図 3 は Titan V における 100 反復分の実行時間内訳である．メモリ律速な演算では通常の倍精度演算に対する相対実行時間は理論上 $4d$ 倍であるが，SpMV では行列分割（SplitMat）は反復開始前に一度だけで済み，また計算に疎行列–密行列積（SpMM）を利用できるので d 倍で済む．この例は比較的理想的な結果であるが，行列の特性等で SpMV の実行効率が低下すると DOT のコストが支配的となり相対実行時間がさらに増加する場合がある．

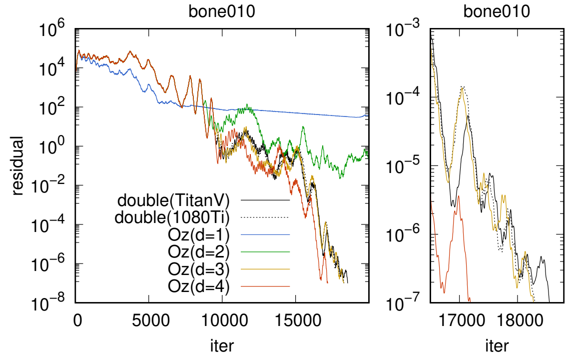


図 2. “bone010” の CG 法による収束履歴．“double” は MAGMA，“Oz” は尾崎スキームによる実装．右図は左図右下部の拡大．

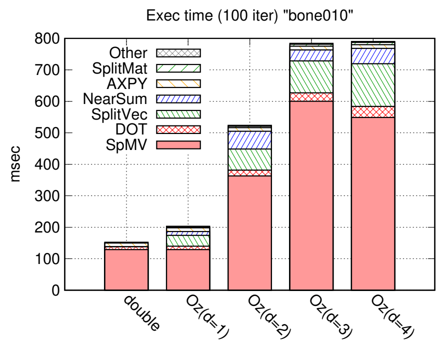


図 3. “bone010” の CG 法 100 反復の実行時間内訳．

謝辞　本研究の一部は文部科学省ポスト「京」萌芽的課題「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」および科研費#16K16062 の助成による．

参考文献

[1] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. Rump, Error-free transformations of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications, Numer.Algo., 59,1(2012), 95-118.

[2] S. Rump, T. Ogita, S. Oishi, Accurate Floating-Point Summation Part II: Sign, K-Fold Faithful and Rounding to Nearest, SIAM Journal on Scientific Computing, 31, 2 (2009), 1269-1302.

[3] University of Tennessee, MAGMA, `https://icl.cs.utk.edu/magma/`.

[4] T. Davis, Y. Hu, The University of Florida Sparse Matrix Collection, ACM Trans. Math. Softw. 38, 1 (2011), 1:1-1:25.

多倍長精度浮動小数点回路によるパイプライン型アクセラレータの性能評価

中里 直人 [1], 台坂 博 [2], 石川 正 [3]
[1] 会津大学，[2] 一橋大学, [3] 高エネルギー加速器研究機構
e-mail : nakasato@u-aizu.ac.jp

1 はじめに

数値計算や数値シミュレーションのための計算機システムが高速化, 並列化, 大規模化されるとともに, 倍精度よりも指数部・仮数部を拡張した多倍長精度浮動小数点演算 (多倍長演算) の必要性が高まっている． 多倍長演算のソフトウエア実装は倍精度演算より性能が大幅に低下するため, 我々はこれまでソフトウエア並列化 (OpenCL による多倍長演算手法) 及びハードウエア化 (再構成可能な集積回路 (FPGA) による多倍長演算データ並列型アクセラレータ GRAPE9-MPX) による高速化を実現した [1].

GRAPE9-MPX は多倍長演算を実行する多数の Processing Element(PE) を搭載する．各 PE は加算, 乗算, 逆数平方根演算の回路を持ち, 命令コードに従って任意演算を行うことができる．この方式には, PE 内の制約により加算と乗算が同時実行できない場合, 演算器の稼働率が低下するという問題がある．一方で, 本講演で発表するパイプライン型アクセラレータは, アプリケーションに特化して演算器を組み合わせるため, その稼働率を最大にすることができる．データ並列型アクセラレータとパイプライン型アクセラレータの比較を図 1 に示す.

図 1 左のデータ並列型では, アーキテクチャの制約により加算と乗算が実行できない場合, 加算器のみが稼働し, 乗算ユニットはアイドルになる．この方式では, 内積計算のような場合を除き演算器の稼働率は最大で 50%にとどまる． 一方図 1 右のパイプライン型では 2 個の加算器と 2 個の乗算器の合計 4 個の演算器が同時に稼働する．データ並列型アクセラレータの PE では全ての演算器は同じパイプライン段数であることが望ましいため, 高速化には制限がある． パイプライン型アクセラレータでは, データ並列型の PE とくらべてパイプライン段数を任意に調整可能であり, 動作周波数をより高速にすることができるため高速化の余地が大きい．図 1 の演算の場合, データ並列型は 4 個の加算器と 4 個の乗算器がある．同じハードウエアリソースが利用可能な場合, パイプライン型では演算パイプラインを複製して 2 個実装可能であり, より高性能となる.

本研究は, IEEE 754-2008 で規定されている四倍精度 binary128 フォーマット (仮数部 $n_{\mathrm{man}} = 113$ ビット, 指数部 $n_{\mathrm{exp}} = 15$ ビット) の演算器を VHDL で実装し, パイプライン型アクセラレータとして実装した場合の性能評価について報告する.

2 四倍精度 binary128 演算器の概要

我々は FPGA でパイプライン型アクセラレータを実装するために, 任意の n_{man} と n_{exp} の組み合わせで浮動小数点数演算回路を生成するためのライブラリ VeRB を実装した [2]. 特に binary128 フォーマットに特化して以下の最適化を行なった：

- force-1 丸めを採用する
- truncated mutliplier[3] により仮数部の乗算を最適化し回路規模を抑える

我々の採用した手法では, 仮数部の乗数と被乗数の下位 40 ビット同士の演算を省略することで, FPGA に搭載されているハードウエア乗算器の利用個数を半減することができた．FPGA での動作ターゲット周波数を 200MHz と想定して回路を最適化し, 浮動小数点加算器のパイプライン段数は 5 段, 浮動小数点乗算器のパイプライン段数は 6 段とした.

3 パイプライン型アクセラレータの性能評価

VeRB により生成された演算器の性能を評価するために, Intel FPGA SDK for OpenCL を利用して FPGA でアプリケーションを実装した．利用した FPGA は, 筑波大学計算科学研究センターの Cygnus システムに搭載された Nallatech 520N ボード (Intel Stratix10 GX2800 H-Tile) である．以下の 2 種のアプリケーションで性能評価をおこなった.

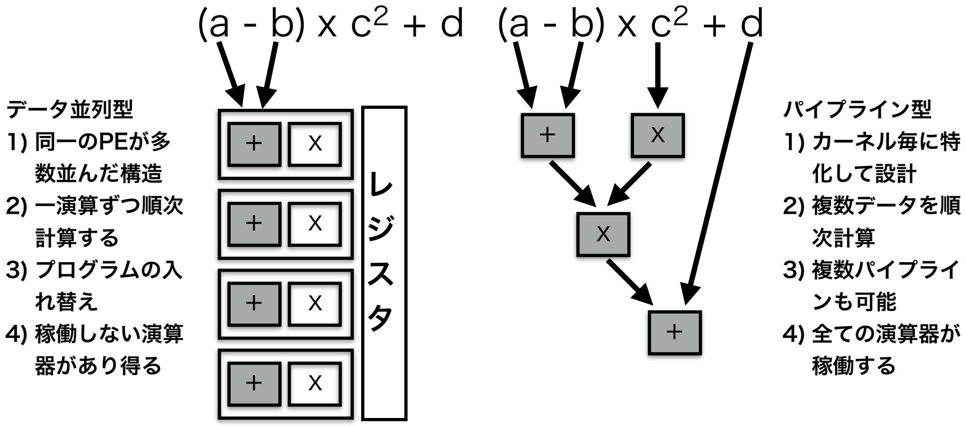


図 1. データ並列型とパイプライン型アクセラレータの比較

3.1　重力計算の場合

粒子数 N の重力多体問題における相互作用 (加速度 $\vec{f}$, ポテンシャルエネルギー ϕ) の計算は, 粒子 i の位置ベクトル $\vec{x}_i$ と質量 m_i の総和計算として

$$\vec{f}(\vec{x}_i) = -\sum_{j}^{N} \frac{m_j(\vec{x}_i - \vec{x}_j)}{(r^2+\epsilon^2)^{3/2}},$$

$$\phi(\vec{x}_i) = -\sum_{j}^{N} \frac{m_j}{(r^2+\epsilon^2)^{1/2}},$$

で表される. この計算を N 個の粒子について計算するプログラムは二重ループとなり, 最内側ループの演算数は 20 演算 (加算 10, 乗算 9, 逆数平方根 1 回) である. この最内側ループを完全にパイプライン化する OpenCL カーネルとして実装した. $N = 8,192$ としてしてカーネルの実行時間を計測した. パイプラインの個数 $\mathrm{N_{pipe}} = 1$ の時実行時間は 0.3013 秒, $\mathrm{N_{pipe}} = 8$ の時実行時間は 0.0409 秒となった. この場合の論理合成結果は, FPGA のロジックを 58%, ハードウエア乗算を 32%消費し, 動作周波数は 206MHz となった. これから理論性能を見積もると $8 \times 20 \times 206.0 \times 10^6 = 32.96$ GFLOPS であり, 実効性能は理論性能の 99.6%となった.

3.2　行列積の場合

本研究では, 正方行列 (A, B) 同士の行列積 $(C = C + AB)$ を計算するための OpenCL カーネルを実装した. 行列積を三重ループで実現した場合, 行列 A, B の読み出しあたりの演算量が $O(1)$ となるため適切ではない. 我々は 4×4 でブロック化された行列積カーネルを実装し性能評価をおこなった. この場合, カーネルの最内側ループは 4×4 の行列積となり, 64 回の積和算からなるパイプラインとなる. $N \times N$ の正方行列の行列積のカーネルの実行時間から演算性能を求めた. $N = 64, 128, 256, 512$ の際性能はそれぞれ 1.66, 2.97, 5.37, 6.40 GFLOPS となった. このカーネルの論理合成結果は, FPGA のロジックを 42%, ハードウエア乗算を 18%消費し, 動作周波数は 215MHz となった. これから理論性能を見積もると $2 \times 64 \times 215.0 \times 10^6 = 27.52$ GFLOPS となる. 結果, 実効性能との乖離が大きく, さらなる最適化が必要であることがわかった.

謝辞　本研究の一部は, 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 (Cygnus) を利用して得られたものです.

参考文献

[1] Daisaka etal., Procedia Computer Science, 51. (2015), 1323-1332

[2] Nakasato etal., In Proceeding of The 2018 International Conference on Field-Programmable Technology, 2018

[3] Petra etal., IEEE Transactions on Circuits and Systems I, vol. 57, no. 6, pp. 13121325, June 2010.

非線形遅延微分方程式の周期解の精度保証

大石 進一[1]
[1] 早稲田大学
e-mail：oishi@waseda.jp

1 概要

ダフィング型遅延微分方程式の厳密な周期解の存在証明を精度保証付き数値計算を用いて行い，様々なパラメータ値における解の振る舞いを調べている．

2 はじめに

筆者は時間遅延ダフィング方程式の厳密な周期解を精度保証付き数値計算を用いて求めることを議論してきた [1]．これは文献 [2] の中で提案した精度保証付き数値計算が遅延項の特性を考慮した変更によって遅延微分方程式の周期解の存在証明にも適用できることを示したものである．周期解の存在証明は，具体的には，まずガレルキン近似を用いて周期解の近似解を作る．次に，適当な関数空間 (Banach 空間や Hilbert 空間) を設定して，その近似解からスタートする無限次元の Newton 法を考える．そして設定した関数空間中で Newton 法が収束する十分条件が満たされることを精度保証付き数値計算を用いて証明するというものである．扱ってきた時間遅延ダフィング方程式は，

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + k\frac{dx(t)}{dt} + \Omega_0^2 x(t) + \gamma x(t)^3 + \alpha(x(t) - x(t-\tau)) = \beta\cos\omega t \qquad (1)$$

である．ただし，$\tau > 0$ は遅延時間である．前に考えたのは文献 [4] で考えられている $k = 0.1, \Omega_0^2 = 2, \gamma = 0.25, \alpha = 0.25$ の場合であったが，これを色々に変化させてどのような変化が生じるかを考えるのが本稿の目的である．まずは，$\alpha = -0.25$ の場合を扱う．また，次のパラメータ値を考える：$k = 0.1, \Omega_0^2 = 2, \gamma = 0.25, \alpha = -0.25$．独立変数の変換 $s = \omega t$ を行い，改めて s を t と書くと式 (1) は

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \frac{k}{\omega}\frac{dx(t)}{dt} + \frac{1}{\omega^2}[(2+\alpha)x(t) + \gamma x(t)^3 - \alpha x(t-\tau\omega) - \beta\cos t] = 0 \qquad (2)$$

となる．本稿では，精度保証付き数値計算をもとにした計算機援用証明によって解の変化について議論する．

2.1 基本周期解のなす一次元多様体のフラクタル構造

式 (2) は角周波数 ω に対して，少なくとも一つの同期する奇対称周期解を持っている．すべての ω について連結する奇対称周期解の一次元多様体を基本周期解の族と呼ぶ．図 1 は厳密な基本周期解の族を精度保証付き数値計算で包み込んだ結果を示したものである．ただし，$\omega = 0.5381$ のピーク付近に 2 箇所，精度保証ができていない部分があるが，これはサドル-ノード分岐である．この図に特徴的なのはピークの発生にフラクタル的な構造が見られる事である．基本周期解の一次元多様体を精度保証付

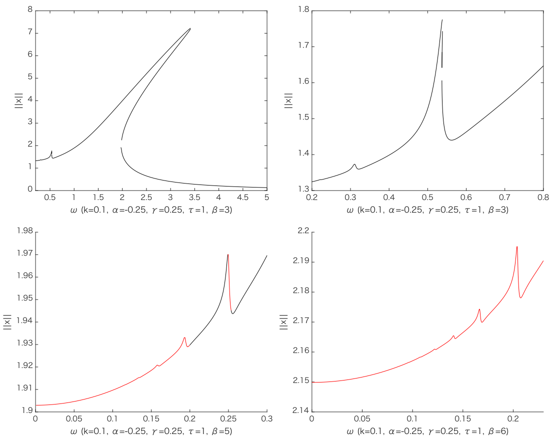


図 1. 厳密な基本周期解の一次元多様体の精度保証–β を変化させたときフラクタル構造の出現

き数値計算で包み込むのは $\beta = 5$ 以上の β で行うには時間がかかる．$\beta = 5$ で 1 日では終了しない．そこで図 1 には精度保証していない数値計算だけの結果も示した．すなわち，黒い線で書かれている部分は精度保証されている．赤い線の部分は精度保証されていない．ガレルキン近似は 34 次のものが使われている．ニュートン法は収束している．近似多様体の計算時間は 20 分程度である．図 1 を見ると基本周期解の一次元多様体はピークの現れる位置にフラクタル構造が見られる．

3　もう一つの場合

上田が発見したカオスアトラクタの存在する場合 [6] について，それに遅延項を加えた方程式を考える．

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}+k\frac{dx(t)}{dt}+\gamma x^3(t)-\alpha x(t-\tau) = \beta\cos\omega t, \tag{3}$$

まず，基本周期解の応答曲線を調べてみた．図 2 はその結果である．図 2 において，丸印は

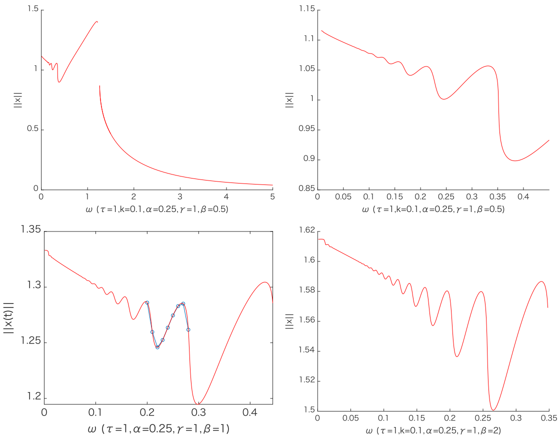


図 2. $\gamma = 1$ の場合の基本周期解の一次元多様体の精度保証と近似 (数値計算)

精度保証されている点である．また，赤い線は単に近似計算したものである．図 2 からわかるように，基本周期解の一次元多様体は，この場合にも，ピークを持ち，前の場合と形状は全く異なるが，フラクタル的にピークの数が増大していく様子が見える．また，その構造も，β を増やしていくと ω の小さな範囲に同じような構造が現れるフラクタル性が見られる．

4　非対称周期解や分数調波解の存在

以上では，２つの場合の遅延 Duffing 方程式を考えてきたが，パラメータを増やせば両方の場合は統合的に

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}+\frac{k}{\omega}\frac{dx(t)}{dt}+\frac{1}{\omega^2}[\mu x(t) \\ +\gamma x(t)^3-\alpha x(t-\tau\omega)-\beta\cos t] = 0 \tag{4}$$

と表すことができる．μ が増やされたパラメータである．これは，バネの線形項に対応する．

川上 [7] は学位論文において，(遅延のない)Duffing 方程式のガレルキン近似解を興味深い場合について示している．以下では，それをベースに連続変形によって，遅延のある場合の解を求める．式 (4) において $k = 0.1, \alpha = 0.25, \gamma = 1, \beta = 2.6, \mu = 1, \tau = 0.5, \omega = 1$ の場合を考える．このとき，非対称周期解の発生が見られる．非対称周期解の発生においては μ と γ の値が特定の範囲に入ることが条件になるようである．

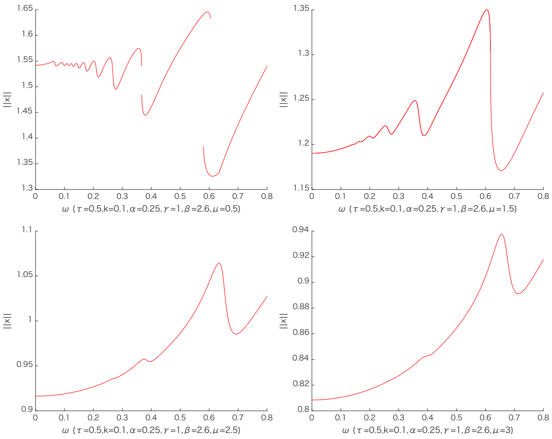


図 3. μ を変化させた時の基本周期解の一次元多様体の数値計算 ($k = 0.1, \alpha = 0.25, \gamma = 1, \tau = 0.5, \beta = 2.6$)

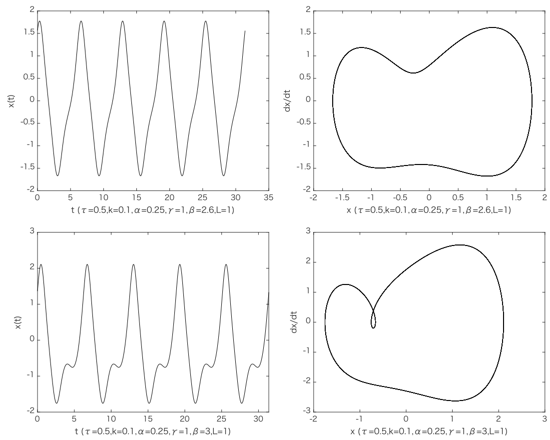


図 4. 厳密な非対称周期解の精度保証

参考文献

[1] Shin'ichi Oishi: Numerical Inclusion of Exact Periodic Solutions for Time Delay Duffing Equation, submitted to Journal of Computational and Applied Mathematics (2019, April) .

[2] Shin'ichi Oishi: Numerical Verification of Existence and Inclusion of Solutions for Nonlinear Operator Equations, J. Computational and Applied Math., **60**, pp.171-185 (1995)

[3] Yuchi Kanzawa and Shin'ichi Oishi: Calculating Bifurcation Points with Guaranteed Accuracy, IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics Communications and Computer Sciences **E82A(6)**, pp. 1055-1061 (June 1999).

[4] Rafal Rusinek and Mitura Jerzy Warminski: Time delay Duffing's systems: chaos and chatter control, Meccanica, Volume **49**, Issue 8, pp. 1869-1877 (August 2014).

[5] R. K. Mitra, S Chatterjee and A. K. Banik: Limit cycle oscillation and multiple entrainment phenomena in a duffing oscillator under time-delayed displacement feedback, Journal of Vibration and Control 2017, Vol. **23** (17) pp.2742-2756.

[6] 上田よし亮, **カオス現象論**, コロナ社, (現代非線形科学シリーズ 12) (2008 年 3 月)

[7] Hiroshi Kawakami, Qualitative Study on the Solutions of Duffing's Equation, Kyoto University (1974-09-24) (Dissertation), `https://doi.org/10.14989/doctor.r2610`

[8] 大石進一, **非線形解析入門**, コロナ社 (現代非線形科学シリーズ 1) (1997 年 4 月)

楕円型方程式の弱解に対する正値性証明法

田中 一成 [1]
[1] 早稲田大学　数理科学研究所
e-mail : tanaka@ims.sci.waseda.ac.jp

1 概要

本研究は以下の半線形楕円型境界値問題の弱解を対象とする：

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = f(u(x)), & x \in \Omega \\ u(x) = 0, & x \in \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

ここで $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ $(N = 1, 2, 3, \cdots)$ は有界領域 (特に境界の滑らかさは仮定しない)、$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は後に示す仮定を満たす非線形関数とする。

2 表記と仮定

本講演では以下の表記を用いる:

$H^1(\Omega)$: 領域 Ω 上の 1 階の L^2 ソボレフ空間

$V = H_0^1(\Omega) := \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$ (境界値はトレース作用素の意味で捉える)

$V^* = (V$ の共役空間$)$

埋め込み作用素 $V \hookrightarrow L^{p+1}(\Omega)$ のノルム (もしくはノルムの上界) を C_{p+1} と表記する。即ち、C_{p+1} は以下の不等式を満たす正の定数である。

$$\|u\|_{L^{p+1}(\Omega)} \le C_{p+1} \|u\|_V \quad \text{for all } u \in V \tag{2}$$

ただし $p \in [1, p*)$ である。ここで $N = 1, 2$ のとき $p^* = \infty$ であり、$N \ge 3$ のとき $p^* = (N+2)/(N-2)$ である。

次に f に課される仮定を述べる。f は C^1 級の関数で、ある $a, b \ge 0$ と $p \in [1, p*)$ に対して以下の不等式を満足するものとする：

$$|f(t)| \le a|t|^p + b \quad \text{for all} \quad t \in \mathbb{R} \tag{3}$$

次に作用素 F を

$$F : \begin{cases} u(\cdot) & \mapsto & f(u(\cdot)), \\ V & \to & V^*. \end{cases}$$

で定義し、更に $\mathcal{F} : V \to V^*$ を $\mathcal{F}(u) := -\Delta u - F(u)$ で定義する。より正確には、$\mathcal{F}$ は以下のように特徴づけられる。

$$\langle \mathcal{F}(u), v\rangle = (\nabla u, \nabla v)_{L^2} - \langle F(u), v\rangle \quad \text{for all} \quad u, v \in V \tag{4}$$

ここで $\langle F(u), v\rangle = \int_\Omega f(u(x))v(x)dx$ である。更に F と $\mathcal{F}$ の $\varphi \in V$ における Fréchet 微分をそれぞれ F'_φ, $\mathcal{F}'_\varphi$ 表記する。

上記の仮定のもと以下の作用素方程式の解 (即ち (1) の弱解) を考える。

$$\mathcal{F}(u) = 0 \tag{5}$$

特に本研究では任意の手法を用いて (5) の解 $u \in V$ が $\overline{B}(\hat{u}, \rho) := \{v \in V : \|v - \hat{u}\|_V \le \rho\}$ の中に存在することが示されていることを仮定し、その正値性を検証する一般的な手法を考える。ここで $\hat{u} \in V$ は u のコンピュータ上で表現された近似解で $\rho > 0$ は誤差上限と呼ぶ。

3 正値性の検証定理

2 節で述べたように真解 $u \in V$ と近似解 $\hat{u} \in V$ の間に不等式

$$\|u - \hat{u}\|_V \le \rho \tag{6}$$

が成立していることを仮定し、この情報から u の正値性を検証する。以下

$$\Omega_- = \{x \in \Omega : u(x) \le 0\}$$
$$\hat{u}_+ := \max\{\hat{u}, 0\}$$
$$\hat{u}_- := \max\{-\hat{u}, 0\}$$

と表記し、$\lambda_1(\Omega) > 0$ は Ω における同次 Dirichlet 境界条件を課した $-\Delta$ の最小固有値とする。

定理 1 ある $\lambda < \lambda_1(\Omega_-)$、非負係数 $a_1, a_2, \cdots, a_n$、劣臨界指数 $p_1, p_2, \cdots, p_n \in (1, p^*)$ に対して、非線形項 f が以下の不等式を満たすとする。

$$-f(-t) \le \lambda t + \sum_{i=1}^{n} a_i t^{p_i} \quad \text{for all} \quad t \ge 0 \tag{7}$$

ただし Ω_- が空集合のときは $\lambda_1(\Omega_-) = \infty$ と解釈する。このとき、不等式

$$\sum_{i=1}^{n} a_i C_{p_i+1}^2 \left(\|\hat{u}_-\|_{L^{p_i+1}} + C_{p_i+1}\rho\right)^{p_i-1} < 1 - \frac{\lambda}{\lambda_1(\Omega_-)}, \tag{8}$$

が成り立てば $\overline{B}(\hat{u}, \rho)$ 内に存在が示された解 $u \in V$ は非負である。

不等式 (8) の左辺の括弧内は、$\hat{u}$ が非負関数に近いほど、また精度保証結果 (6) が精密であるほど 0 に近づく。特に $\hat{u}$ が非負関数であるとき、十分小さい ρ に対して不等式 (8) は必ず成立する。ただし以上は全て、線形項の係数 λ について以下の不等式が成り立つことを前提としていることに注意する。

$$\lambda < \lambda_1(\Omega_-) \tag{9}$$

領域の自明な包含関係 $\Omega \supset \Omega_-$ より $\lambda_1(\Omega) \leq \lambda_1(\Omega_-)$ であるから $\lambda < \lambda_1(\Omega)$ が満たされるとき、不等式 (9) は成立する。しかし、そうでない場合は不等式 (6) の情報のみからでは一般に Ω_- の特定ができないため (9) のチェックが困難である。なお、L^∞ ノルムでの評価式 $\|u - \hat{u}\|_{L^\infty} \leq r$ $(r > 0)$ が得られている場合は Ω_- を包含する領域 $D(\supset \Omega_-)$ の特定が容易であることから、$\lambda_1(D)$ の下界を評価することで (9) のチェックが可能である。実際、$D \supset \Omega \backslash \{x \in \Omega : \hat{u} - r > 0\}$ を満たすように領域 D を設定すれば良い。この場合 D の具体的な形が分かるので、例えば [2] 等の手法を用いて $\lambda_1(D)$ の下界を精密に得ることができる。不等式 $\lambda_1(D) \leq \lambda_1(\Omega_-)$ より、これは $\lambda_1(\Omega_-)$ の下界としても採用できる。

一方、V のノルムでの評価式 (6) の情報のみからではそのような D を具体的に特定することはできない。本稿では (6) の情報のみから u の正値性を検証するために、以下の補題を準備する。

補題 2 ([1]) $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ $(N = 1, 2, 3, \cdots)$ を有界領域、λ_k を Ω における $-\Delta$ の第 k 固有値とする。このとき、

$$\lambda_k \geq \frac{4\pi^2 N}{N+2} \left(\frac{k}{B_N |\Omega|} \right)^{\frac{2}{N}} \tag{10}$$

が成り立つ。ここで B_N は N 次元単位球の体積、$|\Omega|$ は Ω の体積を表す。

これより、第一固有値 λ_1 について例えば $N = 2, 3$ のとき以下の評価が得られる。

系 3 補題 2 と同じ仮定のもと

$$\lambda_1 \geq 2\pi |\Omega|^{-1}, \qquad N = 2$$
$$\lambda_1 \geq \frac{3 \times 6^{\frac{2}{3}}}{5} \pi^{\frac{4}{3}} |\Omega|^{-\frac{2}{3}}, \qquad N = 3$$

が成り立つ。

補題 2 より $|\Omega_-|$ の上界が得られれば $\lambda_1(\Omega_-)$ の下界を評価できる。ここで補題 2 は Ω_- の具体的な形の情報は要求せず、その体積 $|\Omega_-|$ の上界のみを必要とすることに注意する。以下の定理は評価 (6) より $|\Omega_-|$ の上界評価を与える。

定理 4 近似解 $\hat{u}$ が Ω 上で連続、または区分的に連続であると仮定する。実数 m に対して

$$\hat{\Omega}_m := \{x \in \Omega : \hat{u}(x) \leq m\}$$

と定義する。任意に与えた $p \in [1, p^*)$ に対して

$$\|\hat{u}_+\|_{L^{p+1}(\hat{\Omega}_m)} \geq C_{p+1}\rho \tag{11}$$

が成立するとき、以下の評価が成り立つ。

$$|\Omega_-| \leq |\hat{\Omega}_m| \tag{12}$$

不等式 (12) より m が小さいほど $|\Omega_-|$ の精密な評価、およびそれと同時に補題 2 より $\lambda_1(\Omega_-)$ の大きい下界が得られることになる。従って、(11) を満たし、かつできるだけ小さい $m > 0$ を見つけることがポイントとなる。実用上は適当に定めた小さい $m > 0$ に対して、不等式 (11) をチェックする。更にその m から得られた $\lambda_1(\Omega_-)$ の下界評価が (8) を確かめるのに十分であれば目的が達成される。

不等式 (11) の左辺は m に関して単調非減少であるのに対し、右辺は ρ 小さいほど 0 に近づく。即ち精度保証結果 (6) が十分に精密であれば、ある小さく固定した m に対して (11) が成立することが期待される。

謝辞　本研究は JSPS 科研費 19K14601 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] Peter Li and Shing-Tung Yau, On the Schrödinger equation and the eigenvalue problem, Communications in Mathematical Physics, 88 (3) (1983), 309–318.

[2] Xuefeng Liu, Sin'ichi Oishi, Verified eigenvalue evaluation for the laplacian over polygonal domains of arbitrary shape, SIAM Journal on Numerical Analysis 51 (3) (2013), 1634–1654.

線形熱方程式の解と半離散近似解との誤差評価の改善

水口　信[1], 中尾　充宏[1], 関根　晃太[2], 大石　進一[1]
[1] 早稲田大学，[2] 東洋大学
e-mail : makoto.math@aoni.waseda.jp

1 概要

$\Omega \subset \mathbb{R}^N (N \in \mathbb{N})$ を有界な Lipschitz 領域とし, $J = [t_0, t_1]$ $(0 \le t_0 < t_1 < \infty)$ とする. Hilbert space Y に対して, 関数空間 $L^2(J;Y)$ と $H^1(J;Y)$ を $J \times \Omega$ 上で定義された関数の集合でそのノルムは $\|u\|_{L^2(J;Y)} := \left(\int_J \|u(s)\|_Y^2 ds\right)^{\frac{1}{2}}$ と $\|u\|_{H^1(J;Y)} := \left(\int_J \|\partial_s u(s)\|_Y^2 ds\right)^{\frac{1}{2}}$ とする. $H_0^1(\Omega)$ は Ω の境界 $\partial\Omega$ へのトレースの意味で 0 を満たす $H^1(\Omega)$ 関数の集合とする. $H_0^1(\Omega)$ のノルムは $\|u\|_{H^1(\Omega)} := \sqrt{a(u,u)}$ とする. ただし $a(\cdot,\cdot)$ は $H_0^1(\Omega)$ 内積とする. $H^{-1}(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega)$ の双対空間とし, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ は $H^{-1}(\Omega)$ と $H_0^1(\Omega)$ の双対積とする. V_h はパラメーター $h > 0$ に依存する $H_0^1(\Omega)$ の有限次元部分空間とする. 関数空間 $Z := H^1(J; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega))$ とおき, $V_{J,h} := H^1(J; V_h)$ とする. 本講演では以下の評価式:

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \le D_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \tag{1}$$

を考える. ただし $w \in Z$ に対して, $w_h \in V_{J,h}$ を

$$\begin{cases} \langle \frac{d}{dt}(w - w_h)(t), v_h \rangle + a((w - w_h)(t), v_h) = 0 \\ w_h(t_0) = \hat{w}_0. \end{cases} \tag{2}$$

と定義する. ただし任意の $v_h \in V_h$ と a.e. $t > t_0$ は任意であり, $\hat{w}_0 \in V_h$ は $w(t_0) \in L^2(\Omega)$ の近似である. $A : \mathcal{D}(A) \subset L^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$ を $(Au, v)_{L^2(\Omega)} := a(u, v)_{L^2(\Omega)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$ によって定義する. ただし A の定義域は $u \in \mathcal{D}(A) := \{u \in H_0^1(\Omega) \mid Au \in L^2(\Omega)\}$ である. Ritz 作用素 $R_h : H_0^1(\Omega) \to V_h$ を $a(w - R_h w, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h$ によって定義する. 任意の $u \in \mathcal{D}(A)$ に対して,

$$\|u - R_h u\|_{H_0^1(\Omega)} \le C_h \|Au\|_{L^2(\Omega)} \tag{3}$$

となる $C_h \to 0$ $(h \to 0)$ を満たす定数 C_h の存在を仮定する. このとき, $u \in H_0^1(\Omega)$ に対して,

$$\|u - R_h u\|_{L^2(\Omega)} \le C_h \|u - R_h u\|_{H_0^1(\Omega)} \tag{4}$$

が成り立つことが知られている. 不等式 (4) は Aubin-Nitsche の不等式 (トリック) と呼ばれている. 上記の 2 つの不等式 (3) と (4) は主に楕円型偏微分方程式の解析によく用いられる不等式である. C_h の収束性だけでなく, C_h の厳密な値の評価法や計算法も研究が進み (see e.g., [1, 2]), それらは半線形楕円型偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算法に広く応用されている. さらに楕円型だけでなく放物型方程式に対する評価法も登場するようになった. 中尾らは $w \in Z$ と $w_h \in V_{J,h}$ との事前誤差評価を以下のように導いた:

定理 1 ([3])**.** Ω を有界な凸領域とし, $t_0 = 0$ とする. $w \in Z$ は $w(t_0) = 0$ を満たすものとし, (2) で定義された $w_h \in V_{J,h}$ は $\hat{w}_0 = 0$ とする. そのとき,

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \le 4C_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))}$$

が成り立つ. ただし C_h は (3) で定義した定数である.

上述したように C_h の値が計算可能なため, 定理 1 の評価は評価式 (1) における定量的な評価式を与えている. よって, 定理 1 の評価は実際に半線形放物型方程式の解の精度保証付き数値計算法に応用されている (see e.g., [4, 5]). 我々は領域 Ω を有界 Lipschitz 領域, $w(t_0) \in L^2(\Omega)$ と $w_h(t_0) \in V_h$ を任意とした場合の定理 1 の評価の拡張とより精密な評価法を考える. その場合における定量的な評価法を提案するために [6] に書かれてある評価法から着想を得た. a.e. $t \ge t_0$ に対して, $z(t) \in \mathcal{D}(A)$ かつ $z_h(t) \in V_h$ をそれぞれ

$$a(z(t), v) = ((w - w_h)(t), v)_{L^2(\Omega)}$$
$$a(z_h(t), v_h) = ((w - w_h)(t), v_h)_{L^2(\Omega)}$$

と定義する. ただし $v \in H_0^1(\Omega)$, $v_h \in V_h$ は任意である. [6] の評価法は $w(t) - w_h(t)$ の $L^2(\Omega)$ ノルムにおける誤差を Aubin-Nitsche の不等式 (トリック) を用いて評価するものであった. [6] の評価法をもとに定理 1 の評価の拡張である以下の結果を得た.

定理 2. Ω を有界な *Lipschitz* 領域とし, 任意の $w \in Z$ と $w_h \in V_{J,h}$ に対して,

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \leq \sqrt{a(z_h(t_0), z_h(t_0)) + C_h^2 \|w - w_h\|^2_{L^2(J;H_0^1(\Omega))}}$$

が成り立つ. ただし C_h は (3) で定義した定数であり, $z_h(t_0) := R_h A^{-1}(w - w_h)(t_0)$ とする.

L^2 射影 $P_h : L^2(\Omega) \to V_h$ を

$$(w - P_h w, v_h)_{L^2(\Omega)} = 0 \quad \forall v_h \in V_h$$

と定義する. このとき, 定理 2 から以下のことも言える:

系 3. Ω を有界な *Lipschitz* 領域とする. 任意の $w \in Z$ と (2) において $\hat{w}_0 = P_h w_0$ とした $w_h \in V_{J,h}$ に対して,

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \leq C_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))}$$

が成り立つ. ただし C_h は (3) で定義した定数である.

系 3 は定理 1 の評価の改善を与えている. 本稿では, 定理 1 の一般化とより精密な定量的な評価を構築し, 定理 2 を得た. その評価は (2) の初期近似 $\hat{w}_0$ の取り方に依存して決まる. $\hat{w}_0 = P_h w_0$ ととると初期関数 w_0 に依存せず $L^2(J; L^2(\Omega))$ 評価が $L^2(J; H_0^1(\Omega))$ 評価のみによって与えられることがわかる. 詳細は数値実験とともに本講演で示す.

参考文献

[1] F. Kikuchi, L. Xuefeng, Determination of the babuska-aziz constant for the linear triangular finite element, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics (2006) 75–82.

[2] K. Kobayashi, A constructive a priori error estimation for finite element discretizations in a non-convex domain using singular functions, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics (2009) 493–516.

[3] M. T. Nakao, T. Kinoshita, T. Kimura, On a posteriori estimates of inverse operators for linear parabolic initial-boundary value problems, Computing (2012) 151–162.

[4] T. Kinoshita, T. Kimura, M. T. Nakao, On the a posteriori estimates for inverse operators of linear parabolic equations with applications to the numerical enclosure of solutions for nonlinear problems, Numerische Mathematik (2014) 679–701.

[5] M. T. Nakao, T. Kimura, T. Kinoshita, Constructive a priori error estimates for a full discrete approximation of the heatequation, SIAM Journal on Numerical Analysis (2013) 1525–1541.

[6] K. Chrysafinos, L. S. Hou, Error estimates for semidiscrete finite element approximations of linear and semilinear parabolic equation under minimal regularity assumptions, SIAM Journal on Numerical Analysis (2002) 282-306.

空間3次元 Allen-Cahn 方程式の正値時間大域解に対する精度保証付き数値計算法

松嶋 佑汰 [1], 田中 一成 [2], 大石 進一 [2]
[1] 早稲田大学大学院，[2] 早稲田大学
e-mail : matsu_shima-1111@akane.waseda.jp

1 はじめに

本研究は, 3次元領域 $\Omega = (a,b)^3$ $(a,b \in \mathbb{R})$ における Allen-Cahn 方程式：

$$\begin{cases} \partial_t u(x,t) - \Delta u(x,t) - f(u(x,t)) = 0, \\ \qquad\qquad (x,t) \in Q, & \text{(1a)} \\ u(x,0) - u_0(x) = 0, \quad x \in \Omega, & \text{(1b)} \\ u(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega,\ t \in (0,\tau), & \text{(1c)} \end{cases}$$

を対象とする．ただし, $\tau \in (0,\infty)$, $Q = \Omega \times (0,\tau)$, $f(s) = \varepsilon^{-2}(s - s^3)$ $(s \in \mathbb{R})$, $u_0 \in L^2_+(\Omega)$ （$L^2_+(\Omega)$ は $L^2(\Omega)$ の正錐）である．以下の表記を用いる．

- $H^1(\Omega)$: Ω 上の L^2-Sobolev 空間,
- $H^1_0(\Omega) := \{\phi \in H^1(\Omega) : tr(\phi) = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$,
- $H^{-1}(\Omega)$: $H^1(\Omega)$ の共役空間,
- $H^{-1}_0(\Omega)$: $H^1_0(\Omega)$ の共役空間,
- $W := \{u \in L^2(0,\tau; H^1(\Omega)) : u_t \in L^2(0,\tau; H^{-1}(\Omega))\}$,
- $W_0 := \{u \in L^2(0,\tau; H^1_0(\Omega)) : u_t \in L^2(0,\tau; H^{-1}_0(\Omega))\}$.

本講演では特に, 問題 (1) の弱解 $u \in W_0$ を数値的に包含する方法について考える．

Allen-Cahn 方程式は, 等温環境における2元合金の相分離過程を単純化したモデルとして, Allen と Cahn によって導出された [1]. 問題 (1) における u は二元合金のうち一種類の金属の濃度を表す．ε は interaction length と呼ばれ, 内部遷移層の厚みを実質的に表す．同方程式は二元合金の相分離過程の他にも, 多くの2相分離状態の時間変化を記述する数理モデルとして知られている．近年, 平均曲率流方程式が Allen-Cahn 方程式の特異極限（$\varepsilon \to +0$）として導出されることが明らかにされた [3][4]．このように Allen-Cahn 方程式は, 数学的な研究も多くなされている重要な方程式である．

一般に3次元領域における, 発展方程式の解に対する精度保証付き数値計算の実装には1次元や2次元の問題に比べメモリ等の多大な計算コストを必要とする．本稿では優解劣解法を用いることで近似解計算の数倍程度にメモリ使用量をおさえ, 高速に問題 (1) の正値時間大域解の数値的な包含が得られることを報告する．また同時に, 一般の発展方程式に対する本手法の適用可能性についても考察する．

2 優解劣解法を用いた精度保証付き数値計算法

優解劣解法を用いて, 問題 (1) の解に対する数値的な包含を得るために次の定理を用いる [2].

定理 1 問題 (1) の劣解 $\underline{u} \in W$ と優解 $\overline{u} \in W$ が $\underline{u} \le \overline{u}$ を満たし，かつ，f が *Carathéodory function* であって，

$$|f(s)| \le k(x,t), \\ \text{for a.e. } (x,t) \in Q,\ \forall s \in [\underline{u}(x,t), \overline{u}(x,t)], \tag{2}$$

を満たす $k \in L^2_+(Q)$ が存在するとき, 問題 (1) は解 $u \in W_0$ をもち, $u \in [\underline{u}, \overline{u}]$ が成り立つ．

問題 (1) に対する優解候補を次のように構成する．
十分大きな $n \in \mathbb{N}$ をとる．式 (1a) の右辺に摂動 $\delta > 0$ を加え, $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_n$ に対して, その摂動が与えられた問題の各時刻 t_i に対する近似解 $\overline{u}^*(\cdot, t_i) \in C^2_0(\Omega)$ と問題 (1) の定常問題に対する近似解 $\overline{u}^*(\cdot, t_{n+1}) \in C^2_0(\Omega)$ $(t_{n+1} := \tau)$ を数値計算する． $u(\cdot, t_i)$ と $u(\cdot, t_{i+1})$ $(i = 0, 1, \cdots, n)$ を線形補間することで, 問題 (1) に対する優解候補 $\overline{u} \in C(0,\tau; C^2_0(\Omega))$ を得る．問題 (1) に対する劣解候補は, 式 (1a) の右辺に摂動 $-\delta$ を加え, 同じ操作をすることにより得る．
ここで,

$$\mathcal{C} = \\ (C(0,\tau; C^2_0(\Omega))) \cap (\bigcap_{i=0}^{n} C^\infty(t_i, t_{i+1} C^2_0(\Omega))$$

とし, 作用素 F を

$$F : \mathcal{C} \to \mathbb{R}; u \mapsto \partial_t u - \Delta u - \varepsilon^{-2}(u - u^3)$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

と定義する．このとき，次の命題 2, 3 により，この優解候補 $\overline{u}^*$ と劣解候補 $\underline{u}^*$ がそれぞれ，問題 (1) に対する優解，劣解の定義を満たすこと確かめる．

命題 2 優解候補 $\overline{u}^* \in \mathcal{C}$ が

$$\frac{1}{2}(F(\overline{u}^*(x,t_i)) + F(\overline{u}^*(x,t_{i+1}))) \\ -(t_{i+1}-t_i)^2 M(x) \geq 0, \quad \text{for all } x \in \Omega,$$

を満たすとき，$\overline{u}^*(x,t) \in W_0$ であり，$\overline{u}^*(x,t)$ は問題 (1) の優解である．ただし，

$$M(x) = \max_{t\in(t_i,t_{i+1})} \partial_t^2 F(\overline{u}^*(x,t))$$

とする．

命題 3 劣解候補 $\underline{u}^* \in \mathcal{C}$ が

$$\underline{u}^*(x,t) \geq 0 \quad \text{かつ} \\ F(\underline{u}^*(x,t)) \leq 0, \quad \text{for all } (x,t) \in \Omega \times \{t_i, t_{i+1}\},$$

を満たすとき，$\underline{u}^*(x,t) \in W_0$ であり，$\underline{u}^*(x,t)$ は問題 (1) の劣解である．

3 数値実験方法

各時間 t_i における優解候補 $\overline{u}^*(\cdot,t_i)$，劣解候補 $\underline{u}^*(\cdot,t_i)$ は，特に，問題 (1) の式 (1a) に摂動を与えた式に対し，$H_0^1(\Omega)$ の内積で直交化された Legendre 多項式 [5] を用いた Galerkin spectral 法と後退 Euler 法を用いて近似計算する．その後，$\overline{u}^*$, $\underline{u}^*$ がそれぞれ，優解，劣解の定義を満たすことを示すために，領域を小さい領域に分割し，その全てについて命題 2, 3 の条件が成り立つことを区間演算によって示す．

命題 2, 3 の条件を示すプログラムのうち，メモリ使用量が大きい部分は，優解候補 $\overline{u}^*$，劣解候補 $\underline{u}^*$ を構成するための近似解法プログラムを区間演算用に変えた部分である．したがって，本手法による問題 (1) の解に対する精度保証付き数値計算プログラムは，近似解法プログラムの 2 倍から 4 倍程度のメモリ消費量で実行可能であると考えられる．

謝辞 ....
CREST, JST, JPMJCR14D4，JSPS 科研費 19K14601，および公益財団法人みずほ学術振興財団の助成を受けたものである．
....

参考文献

[1] S. Allen, J. W. Cahn, A microscopic theory for antiphase boundary motion and itsapplication to antiphase domain coarsening, Acta Metall, 27(1979), 1084–1095.

[2] S. Carl, V. K Le, D. Motreanu, Nonsmooth variational problems and their inequalities: comparison principles and applications, Springer Science & Business Media, 2007.

[3] X. Chen, Generation and propagation of interfaces for reaction-diffusion equations, Journal of Differential Equations, 96(1992), 116–141.

[4] Lawrence C. Evans, H. Mete Soner, Panagiotis E. Souganidis, Phase transitions and generalized motion by mean curvature, Communications on Pure and Applied Mathematics 45.9 (1992), 1097–1123.

[5] Mitsuhiro T. Nakao, Takehiko Kinoshita, On very accurate verification of solutions for boundary value problems by using spectral methods, JSIAM Letters, 1(2009), 21–24.

シフト付き $\boldsymbol{LR}$ 変換を与える dLVs 反復の収束性について

植田 旭 [1], 岩崎 雅史 [2], 中村 佳正 [1]
[1] 京都大学，[2] 京都府立大学
e-mail : ueda.asahi.38m@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

離散ロトカ·ボルテラ (discrete Lotka-Volterra) 系はもともと生物の捕食-被食関係を捉えた離散力学系として有名であるが，dLV 反復を利用すると実対称 3 重対角行列を対角化できることが報告されている [1]．実対称 3 重対角行列の相似変形を与える写像は上 2 重対角行列の特異値も変化させないため，dLV 反復で上 2 重対角行列の特異値も求められる．ハウスホルダ変換を施すと長方行列は特異値を保ちながら上 2 重対角化できるため，dLV 反復に基づく dLV アルゴリズムは汎用性の特異値計算高いアルゴリズムである．dLV アルゴリズムの収束を加速させるため，dLV 反復に対して原点シフトが導入された mdLVs (modied dLV with shift) 反復 [2] と dLVs (dLV with shift) 反復 [3] が提案されている．mdLVs 反復に対しては様々な研究が進み，dLV アルゴリズムよりも実用的な mdLVs アルゴリズムが定式化されている [2]．一方，dLVs 反復は mdLVs 反復と比べて提案されたのが比較的最近であるため，dLVs 反復に対する研究成果は皆無である．

本稿では，dLVs 反復の固有値および特異値への収束性について明らかにする．

2 $\boldsymbol{LR}$ 変換を与える dLV 反復

実対称3重対角行列の行数を m とすると dLV 反復の漸化式は

$$
\begin{aligned}
&v_k^{(n+1)}(1+\delta^{(n)}v_{k-1}^{(n+1)}) = v_k^{(n)}(1+\delta^{(n)}v_{k+1}^{(n)}),\\
&\quad (k=1,2,\dots,2m-1),\\
&v_0^{(n)}=0,\ v_{2m}^{(n)}=0
\end{aligned}
$$

で与えられる．ここで n は反復回数であり，k は行列の成分番号と対応する．また，$\delta^{(n)}$ は離散化パラメータであり，任意の正の数である．主対角成分は全て $1/\delta^{(n)}(1+\delta^{(n)}v_{2k-2}^{(n)})(1+\delta^{(n)}v_{2k-1}^{(n)})$ が並び，副対角成分すべて 1 である下 2 重対角行列を $L^{(n)}$ とし，主対角成分は全て 1 であり，副対角成分すべてに $\delta^{(n)}v_{2k-1}^{(n)}v_{2k}^{(n)}$ が並ぶ上 2 重対角行列を $R^{(n)}$ とする．このとき，dLVs 反復における $n \to n+1$ を行列形式で表現すると

$$
L^{(n+1)}R^{(n+1)} = R^{(n)}L^{(n)} - \left(\frac{1}{\delta^{(n)}} - \frac{1}{\delta^{(n+1)}}\right)
$$

となる．さらに，$T^{(n)} := L^{(n)}R^{(n)} - 1/\delta^{(n)}$ とおくと

$$
\begin{aligned}
T^{(n+1)} &= R^{(n)}L^{(n)} - \frac{1}{\delta^{(n)}}\\
&= R^{(n)}T^{(n)}(R^{(n)})^{-1}
\end{aligned}
$$

と書き換えられる．$(G^{(n)})^{-1}T_s^{(n)}G^{(n)} = T^{(n)}$ となる対角行列 $G^{(n)}$ と正定値実対称 3 重対角行列 $T_s^{(n)}$ が存在するので，dLV 写像は LR 変換に基づく $T_s^{(n)}$ の相似変形を与えることが分かる．

3 シフト付き $\boldsymbol{LR}$ 変換を与える dLVs 反復

dLVs 反復は

$$
\begin{cases}
v_{2k-1}^{(n+1)}(1+\delta^{(n+1)}v_{2k-2}^{(n+1)})\\
\quad = \dfrac{1}{\delta^{(n)}}(1+\delta^{(n)}v_{2k-1}^{(n)})(1+\delta^{(n)}v_{2k}^{(n)}),\\
\quad (k=1,2,\dots,m)\\
v_{2k}^{(n+1)}(1+\delta^{(n+1)}v_{2k-1}^{(n+1)}) = \delta^{(n)}v_{2k}^{(n)}v_{2k+1}^{(n)},\\
\quad (k=1,2,\dots,m-1)\\
v_0^{(n)} := 0, \quad v_{2m}^{(n)} := 0
\end{cases}
$$

で定められる写像 $\{v_1^{(n)},\ v_2^{(n)},\dots,\ v_{2m-1}^{(n)}\} \to \{v_1^{(n+1)}, v_2^{(n+1)},\dots,\ v_{2m-1}^{(n+1)}\}$ の繰り返しである．$w_k^{(0)} := v_k^{(0)}(1+\delta^{(0)}v_{k-1}^{(0)})$ が成分に現れる m 次の上 2 重対角行列

$$
B^{(0)} := \begin{pmatrix}
\sqrt{w_1^{(0)}} & \sqrt{w_2^{(0)}} & & \\
 & \sqrt{w_3^{(0)}} & \ddots & \\
 & & \ddots & \sqrt{w_{2m-2}^{(0)}}\\
0 & & & \sqrt{w_{2m-1}^{(0)}}
\end{pmatrix}
$$

に対して dLVs 反復の初期値を $v_k^{(0)} = b_k^2/(1+\delta^{(0)}v_{k-1}^{(0)})$ のように定めると，$B^{(0)}$ の上付き添

字 0 を n に置き換えた上 2 重対角行列 $B^{(n)}$ に対して

$$(B^{(n)})^\top B^{(n)} = (B^{(0)})^\top B^{(0)} + \sum_{N=1}^{n} \frac{1}{\delta^{(N)}}$$

が成り立つ．これは n 回の dLVs 反復で得られる $(B^{(n)})^\top B^{(n)}$ の固有値 $\lambda_k((B^{(n)})^\top B^{(n)})$ に関して $\lambda_k((B^{(n)})^\top B^{(n)}) = \lambda_k((B^{(0)})^\top B^{(0)}) + \sum_{N=1}^{n} 1/\delta^{(N)}$ が成り立つことを意味する．ただし，$\lambda_1(\cdot) \geq \lambda_2(\cdot) \geq \cdots \geq \lambda_m(\cdot)$ である．$\delta^{(n)}$ は $B^{(n)}$ の成分と無関係に定められる任意のパラメーターであることに注意したい．

4 dLVs 反復の漸近解析

$n \to \infty$ における dLVs 反復の漸近挙動を調べる際に有効な補助変数

$$u_{2k-1}^{(n)} := \frac{1}{\delta^{(n)}}(1 + \delta^{(n)} v_{2k-2}^{(n)})(1 + \delta^{(n)} v_{2k-1}^{(n)}),$$
$$u_{2k}^{(n)} := \delta^{(n)} v_{2k-1}^{(n)} v_{2k}^{(n)},$$
$$\bar{v}_k^{(n)} := \frac{u_k^{(n)}}{1 - \delta^{(n)} \bar{v}_{k-1}^{(n)}}$$

を導入する．$w_k^{(0)} > 0$ が成り立つとき，シフトパラメータ $\delta^{(n)}$ に制約を加えると，dLVs 変数と補助変数の正負について以下の命題が得られる．

命題 1 $w_k^{(0)} > 0$ のとき $\delta^{(n)} < 0$ かつ $\sum_{n=0}^{\infty} \left(-1/\delta^{(n)}\right) < \lambda_m((B^{(0)})^\top B^{(n)})$ ならば

$$u_k^{(n)}, \bar{v}_k^{(n)}, w_k^{(n)} > 0, \quad k = 1, 2, \ldots, 2m-1,$$
$$v_{2k-1}^{(n)} > 0, \quad k = 1, 2, \ldots, m,$$
$$v_{2k}^{(n)} < 0, \quad k = 1, 2, \ldots, m-1.$$

命題 1 を踏まえると $w_k^{(n)}$ と $w_k^{(0)}$ を関連付ける以下の補題が得られる．

補題 2 $w_k^{(0)} > 0$ のとき $\delta^{(n)} < 0$ かつ $\sum_{n=0}^{\infty} \left(-1/\delta^{(n)}\right) < \lambda_m\left((B^{(0)})^\top B^{(0)}\right)$ ならば

$$w_k^{(n)} = \left(\prod_{N=0}^{n-1} \frac{1}{\gamma_k^{(N)}} \frac{1 - \delta^{(N)} \bar{v}_{k+1}^{(N)}}{1 - \delta^{(N)} \bar{v}_{k-1}^{(N)}} \right) w_k^{(0)}.$$

ただし，k が奇数のとき $\gamma_k^{(n)} \geq 1$，k が偶数のとき $0 < \gamma_k^{(n)} \leq 1$ である．

dLVs 反復に内在する単調増加性と単調減少性が補題 2 から読み取れ，この性質と $w_k^{(n)}$ の有界性を組み合わせると以下の命題が導かれる．

命題 3 $w_k^{(0)} > 0$ のとき $\delta^{(n)} < 0$ かつ $\sum_{n=0}^{\infty} \left(-1/\delta^{(n)}\right) < \lambda_m\left((B^{(0)})^\top B^{(0)}\right)$ ならば

$$\lim_{n\to\infty} w_{2k-1}^{(n)} = c_k,$$
$$\lim_{n\to\infty} w_{2k}^{(n)} = 0.$$

ただし，c_k は $c_1 > c_2 > \cdots > c_m > 0$ をみたす定数である．

命題 1 と $\lambda_k((B^{(n)})^\top B^{(n)}) = \lambda_k((B^{(0)})^\top B) + \sum_{N=1}^{n} 1/\delta^{(N)}$ を併せると dLVs 反復の漸近挙動に関する主定理が導かれる．

定理 4 $w_k^{(0)} > 0$ のとき $\delta^{(n)} < 0$ かつ $\sum_{n=0}^{\infty} (-1/\delta^{(n)}) < \lambda_m\left((B^{(0)})^\top B^{(0)}\right)$ ならば

$$\lim_{n\to\infty} w_{2k-1}^{(n)} = \lambda_k\left((B^{(0)})^\top B^{(0)}\right) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\delta^{(n)}}$$
$$= \sigma_k^2(B^{(0)}) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\delta^{(n)}},$$
$$\lim_{n\to\infty} w_{2k}^{(n)} = 0.$$

ただし，$\sigma_k(B^{(0)})$ は $B^{(0)}$ の特異値である．

5 まとめと今後の課題

本稿では，dLVs 反復における実対称 3 重対角行列の固有値への漸近収束性を明らかにした．この成果から dLVs 反復に基づいた実対称 3 重対角行列の固有値計算アルゴリズム，さらには上 2 重対角行列の特異値計算アルゴリズムの定式化が期待できる．今後の課題は，パラメータ $\delta^{(n)}$ に制約を加えない場合の漸近収束性や計算精度と計算速度の両面で最適となるシフトパラメータ戦略，dLVs 反復の収束次数など，アルゴリズムの定式化に欠かせない基本性質を調べることである．

参考文献

[1] 中村佳正: 可積分系の機能数理, 共立出版, 2006

[2] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes, *Japan J. Indust. Appl. Math.* **23** (2006), 239–259

[3] 中村佳正: 可積分系の数理, 朝倉書店, 2018

離散相対論的戸田方程式が与えるシフト付き $\boldsymbol{LR}$ 変換について

簑下 尚也 [1], 岩崎 雅史 [1], 山本 有作 [2]
[1] 京都府立大学，[2] 電気通信大学
e-mail : n_minoshita@mei.kpu.ac.jp

1 はじめに

実対称 3 重対角行列の固有値計算に用いられる qd アルゴリズムの漸化式は，離散戸田方程式と一致することが知られている [1]．離散戸田方程式の拡張版の 1 つが離散相対論的戸田方程式であるが，離散相対論的戸田方程式と固有値計算アルゴリズムの結び付きについては報告されていない．本稿では，離散相対論的戸田方程式の巧みな行列表示をを見い出すことで，離散相対論的戸田方程式がヘッセンベルグ行列に対する原点シフト付き LR 変換を与えることを明らかにする．離散相対論的戸田方程式は，ローラン双直交多項式に対するクリストフェル変換とジェロニマス変換の非自励版の両立条件を考えることで導かれる．非自励化の際に追加されたパラメータが原点シフトの役割を果たす.

2 離散相対論的戸田方程式とシフト付き $\boldsymbol{LR}$ 変換

C 上のローラン多項式全体からなる線型空間を $C[z,z^{-1}]$ とし，線形汎関数 $\mathcal{L}: C[z,z^{-1}] \to C$ を考える．2 つのモニックな n 次多項式列 $\{\phi_n(z)\}_{n=0,1,\ldots}$,$\{\psi_n(z)\}_{n=0,1,\ldots}$ に対して

$$\mathcal{L}[\phi_n(z)\psi_m(z^{-1})] = h_n\delta_{mn}, \quad h_n \neq 0,$$

が成り立つとき,$\phi_n(z),\psi_n(z)$ は $\mathcal{L}$ に関するローラン双直交多項式と呼ばれる．ローラン双直交多項式 $\phi_n(z)$ に関するクリストッフェル変換とジェロニマス変換はそれぞれ

$$z\phi_n^{(k+1)} = \phi_{n+1}^{(k)}(z) + u_n^{(k)}\phi_n^{(k)}(z), \tag{1}$$

$$\phi_n^{(k+1)}(z) = \phi_n^{(k)}(z) + v_n^{(k)}\phi_{n-1}^{(k)}(z). \tag{2}$$

なので, パラメータ $\lambda^{(k)}$ を導入すると非自励なクリストフェル変換

$$(z-\lambda^{(k)})\phi_n^{(k+1)}(z) = \phi_{n+1}^{(k)}(z) + a_n^{(k)}\phi_n^{(k)}(z),$$

$$a_n^{(k)} := -\frac{\phi_{n+1}^{(k)}(\lambda^{(k)})}{\phi_n^{(k)}(\lambda^{(k)})} \tag{3}$$

と非自励なジェロニマス変換

$$(1+b_n^{(k)})\phi_n^{(k)}(z) = \phi_n^{(k+1)}(z) + b_n^{(k)}z\phi_{n-1}^{(k+1)}(z),$$

$$b_n^{(k)} := -\frac{v_n^{(k)}}{a_{n-1}^{(k)}}, \tag{4}$$

が得られ，(3),(4) の両立条件から離散相対論的戸田方程式 [2]

$$\begin{cases} a_n^{(k+1)} + \lambda^{(k+1)}(1+b_n^{(k+1)}) \\ \quad = a_n^{(k)}\dfrac{1+b_{n+1}^{(k)}}{1+b_n^{(k)}} + \lambda(1+b_{n+1}^{(k)}), \\ a_{n-1}^{(k+1)}b_n^{(k+1)} = a_n^{(k)}b_n^{(k)}\dfrac{1+b_{n+1}^{(k)}}{1+b_n^{(k)}} \end{cases} \tag{5}$$

が導かれる．以降，簡略化のため，上付き添字 (k) を省略し，上付き添字 $(k+1)$ を $*$ と書く．離散相対論的戸田方程式 (5) は適当な行列を導入すると

$$\begin{cases} (A^*+\lambda^*I) + B^*(A^*+\lambda^*I)J \\ \quad = (I+JB)(A+\lambda I), \\ B^*A^*(I+JB) = (I+JB)AB, \end{cases} \tag{6}$$

$$A := \begin{pmatrix} a_0 & & \\ & a_1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \quad J := \begin{pmatrix} 0 & 1 & \\ & 0 & 1 \\ & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$B := \begin{pmatrix} 0 & & & \\ b_1 & 0 & & \\ & b_2 & 0 & \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

のように書き換えられる．行列に関する恒等式

$$\begin{aligned}&(I-B^*A^*)^{-1}(I+\lambda B^*)(A^*+J) + \lambda^*I \\ &\quad = (A+J)(I-BA)^{-1}(I+\lambda B) + \lambda I\end{aligned} \tag{7}$$

において逆行列の部分をノイマン展開すると (6) が得られることに注意する．さらに，(7) を整理すると

$$RL - (\lambda^* - \lambda)I = L^*R^*, \tag{8}$$

$$
L := \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -a_0 b_1 & 1 & & \\ & -a_1 b_2 & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}^{-1}
$$

$$
\times \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \lambda b_1 & 1 & & \\ & \lambda b_2 & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix},
$$

$$
R := \begin{pmatrix} a_0 & 1 & & \\ & a_1 & 1 & \\ & & a_2 & \ddots \\ & & & \ddots \end{pmatrix}
$$

となるので，離散相対論的戸田方程式 (5) は陽的シフト付き LR 変換を与えることが分かる．

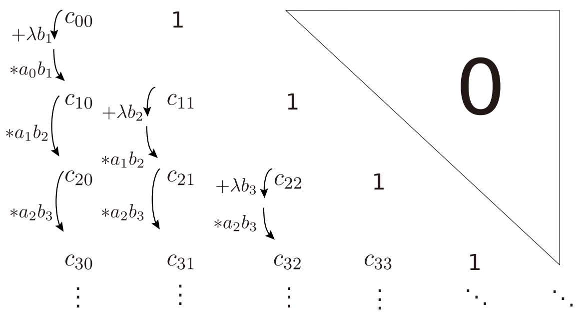


図 1. ヘッセンベルグ行列 $L^{(0)}R^{(0)}$ の構造

図 1 のような成分間のヘッセンベルグ行列ならば離散相対論的戸田方程式 (5) の初期値 $a_s^{(0)}$,$b_s^{(0)}$ は

$$
\begin{cases} a_s^{(0)} = c_{ss} - a_{s-1}^{(0)} b_s^{(0)}, \\ b_0^{(0)} = 0, \quad b_s^{(0)} = \dfrac{c_{s0}}{c_{s-10}\, a_{s-1}^{(0)}} \end{cases} \tag{9}
$$

のように定められる．補助変数 $w_n := a_n + \lambda(1 + b_n)$ を導入すると離散相対論的戸田方程式 (5) は

$$
\begin{cases} w_n^* = w_n \dfrac{1 + b_{n+1}}{1 + b_n}, \\ b_n^* = b_n \dfrac{w_n - \lambda(1 + b_n)}{w_{n-1}^* - \lambda^*(1 + b_{n-1}^*)} \dfrac{1 + b_{n+1}}{1 + b_n}, \end{cases} \tag{10}
$$

と書き換えられ, 離散相対論的戸田方程式 (5) に内在する単調性が見出される．　離散相対論的戸田方程式 (5) がシフト付き LR 変換を与えることを組み合わせると，$k \to \infty$ のとき $b_n \to 0$,$w_n \to \mu_n + \lambda - \sum^{\infty}(\lambda^* - \lambda)$,$a_n \to \mu_n - \sum^{\infty}(\lambda^* - \lambda)$ が示される．ただし，μ_n は $\mu_1 > \mu_2 > \ldots$ をみたすヘッセンベルグ行列 $L^{(0)}R^{(0)}$ の固有値である．

3　数値実験

図 1 の構造をもつ 6 次のヘッセンベルグ行列をテスト行列とする．離散相対論的戸田方程式 (5) を用いてテスト行列の固有値を求め，それに含まれる相対誤差と離散相対論的戸田方程式 (5) の反復回数について議論する．ただし，Mathematica の eigenvalues 関数で計算された値を真値とみなした．パラメータの選び方については

1)$\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)} = 0 \quad \lambda^{(0)} = 0$

2)$\lambda^{(k+1)} - \lambda^{(k)} = (0.1)^k \times \lambda^{(1)}, \quad k = 1, 2, \ldots,$
$\lambda^{(0)} = 0, \quad \lambda^{(1)} = 0.9 \times \mu_n$

のような 2 種類を考える．図 2 は反復回数 k に

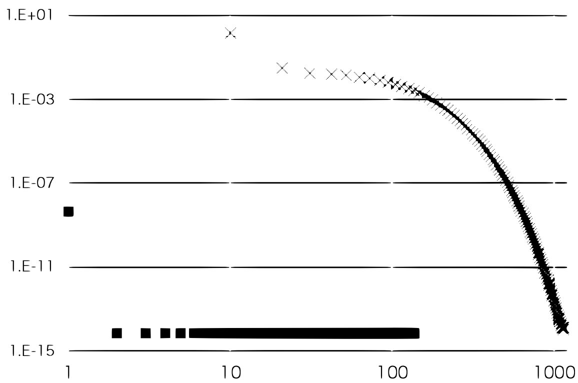


図 2. 真値 μ_5 に対する計算値 $a_5 + \sum(\lambda^* - \lambda)$ の相対誤差 $|(a_5 + \sum(\lambda^* - \lambda) - \mu_5)/\mu_5|$ の比較 (縦軸:相対誤差, 横軸:計算回数, × :$\lambda^* - \lambda = 0$, ■:$\lambda^* - \lambda = (0.1)^k \times \lambda^{(1)}$)

おける $a_5^{(k)} + \sum_{\ell=0}^{k-1}(\lambda^{\ell+1} - \lambda^{\ell})$ に含まれる相対誤差を表したグラフである．パラメータの選び方によらず，離散相対論的戸田方程式 (7) を用いると精度よく固有値を求められることが分かる．計算速度についてはパラメータの選び方に大きく左右されることが確認できる．その他の数値例については講演中に示す．

参考文献

[1] 中村佳正 (編), 可積分系の応用数理, 裳華房,2000.

[2] 中村佳正, 高崎金久, 辻本諭, 尾角正人, 井ノ口順一, 可積分系の数理, 朝倉書店,2018.

一般内積における直交化のための MGS-HP 法の誤差解析

山本 有作 [1], 今倉 暁 [2]
[1] 電気通信大学, [2] 筑波大学
e-mail : yusaku.yamamoto@uec.ac.jp

1 はじめに

$Z^{(0)} \in \mathbb{R}^{m\times n}$（$m \geq n$）を列フルランクの行列，$A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ を対称正定値行列とし，A-内積における thin QR 分解 $Z^{(0)} = QR$, $Q^\top AQ = I_n$ を考える．計算に修正グラム・シュミット（MGS）法を使う場合，従来は A とベクトルとの積が $2n$ 回必要とされてきたが，最近，今倉により，行列ベクトル積を n 回に削減でき，かつ，これらをまとめて 1 回の行列行列積として計算できる MGS-HP（MGS High Performance）法が提案された [1]．本講演では MGS-HP 法に対する誤差解析を行い，浮動小数点演算での残差および直交性の誤差について上界を導出する．

2 MGS-HP 法

MGS-HP 法のアルゴリズムを以下に示す．

[Algorithm 1: MGS-HP (col)]
$X^{(0)} = [\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \boldsymbol{x}_2^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{x}_n^{(0)}] = AZ^{(0)}$
do $j = 1, n$
  do $i = 1, j-1$
    $r_{ij} = \boldsymbol{p}_i^\top \boldsymbol{z}_j^{(i-1)}$
    $\boldsymbol{z}_j^{(i)} = \boldsymbol{z}_j^{(i-1)} - r_{ij}\boldsymbol{q}_i$
  end do
  $\boldsymbol{x}_j^{(j-1)} = \boldsymbol{x}_j^{(0)} - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij}\boldsymbol{p}_i$
  $r_{jj} = \sqrt{(\boldsymbol{z}_j^{(j-1)})^\top \boldsymbol{x}_j^{(j-1)}}$
  $\boldsymbol{q}_j = \boldsymbol{z}_j^{(j-1)}/r_{jj}$
  $\boldsymbol{p}_j = \boldsymbol{x}_j^{(j-1)}/r_{jj}$
end do

本手法では，最初に $X^{(0)} \equiv AZ^{(0)}$ を計算して像空間 $\mathcal{R}(AZ^{(0)})$ の基底を作っておき，$Z^{(0)}$ から $\mathcal{R}(Z^{(0)})$ の A-正規直交基底 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n$ を作ると同時に，同じ漸化式により，$AZ^{(0)}$ から $\mathcal{R}(AZ^{(0)})$ の基底 $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ を作ってゆく．すると，誤差がなければ $\boldsymbol{p}_i = A\boldsymbol{q}_i$ となるので，任意のベクトルと $\boldsymbol{q}_i$ との A-内積は，$\boldsymbol{p}_i$ との内積として計算できる．また，A-正規化の計算も，$\boldsymbol{q}_i$，$\boldsymbol{p}_i$ の漸化式に現れるベクトルを使って計算できる．したがって MGS-HP 法では，A とベクトルとの積が n 回で済み，しかもこれらを行列行列積 $X^{(0)} = AZ^{(0)}$ としてまとめて計算できる．行列行列積は多くの計算機で高い効率で実行できるため，MGS-HP 法は高性能計算の観点から有利である．ただし，$\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ を求める漸化式の計算が新たに必要になる．

MGS-HP 法は，従来の A-内積版 MGS 法や，行列ベクトル積を n 回に削減するもう一つの手法である MGS-HA 法に比べ，格段に高速であるという結果が報告されている [1].

3 MGS-HP 法の誤差解析

3.1 記号法と仮定

以下では，

$$
\begin{aligned}
Z^{(0)} &= [\boldsymbol{z}_1^{(0)}, \boldsymbol{z}_2^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{z}_n^{(0)}] \in \mathbb{R}^{m\times n}, && (1)\\
Q &= [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}, && (2)\\
P &= [\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}, && (3)\\
R &= (r_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n} && (4)
\end{aligned}
$$

とおく．また，$Z^{(0)}$，Q，P の第 i_1 列〜第 i_2 列からなる行列をそれぞれ $Z^{(0)}_{i_1:i_2}$，$Q_{i_1:i_2}$，$P_{i_1:i_2}$ と記し，R の第 i_1 行〜第 i_2 行，第 j_1 列〜第 j_2 列からなる小行列を $R_{i_1:i_2,j_1:j_2}$ と表記する．R の第 i_1 行〜第 i_2 行，第 i_1 列〜第 i_2 列からなる主小行列は簡単に $R_{i_1:i_2}$ と表記する．

また，アルゴリズム中の行列，ベクトル，スカラーについて，浮動小数点演算で計算した量を上付きのハットによって表す．行列，ベクトルのノルムは，特に表示しない限りは 2 ノルムである．A-内積，A-ノルムはそれぞれ $<\cdot,\cdot>_A$，$\|\cdot\|_A$ で表す．また，行列 A，ベクトル $\boldsymbol{b}$ の各要素の絶対値を要素とする行列，ベクトルをそれぞれ $|A|$，$|\boldsymbol{b}|$ と表す．また，丸め誤差の単位を $\mathbf{u}$ で表し，$\gamma_k \equiv k\mathbf{u}/(1-k\mathbf{u})$ とする．

3.2 残差の上界

グラム・シュミット法における $\boldsymbol{z}_j^{(i)}$ および $\boldsymbol{q}_j$ の更新式は次のように書ける．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{z}_j^{(i)} &= \boldsymbol{z}_j^{(i-1)} - \alpha_{ij}\boldsymbol{q}_i \quad (1 \leq i \leq j-1), && (5)\\
\boldsymbol{q}_j &= \boldsymbol{z}_j^{(j-1)}/r_{jj}. && (6)
\end{aligned}
$$

これらの式は，標準内積でも一般内積でも同じであり，CGS 法でも MGS 法でも同じであり，MGS-HP 法でも従来法でも同じである．違うのは r_{ij} の計算法のみである．

文献 [2, Theorem 3.1] では，式 (5)，(6) のみに基づき，浮動小数点演算での QR 因子 $\hat{Q}$，$\hat{R}$ の残差 $\Delta E^{(1)}$ について次の式を導出している．

$$Z^{(0)} + \Delta E^{(1)} = \hat{Q}\hat{R},$$
$$\|\Delta E^{(1)}\| \le O(n^{\frac{3}{2}})\mathbf{u}\left[\|Z^{(0)}\| + \|\hat{Q}\|\,\|\hat{R}\|\right].$$

MGS-HP 法でも式 (5)，(6) は同じであるから，残差について同じ形の評価式が成り立つ．

3.3 直交性誤差の粗い評価とその問題点

Rozloznik らによれば，A-内積の MGS 法における大域的な直交性誤差 $< \hat{\boldsymbol{q}}_i, \hat{\boldsymbol{q}}_j >_A$（$i < j$）は，局所的な直交性誤差 $< \hat{\boldsymbol{q}}_i, \hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i)} >_A$（すなわち $\hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i-1)}$ を $\hat{\boldsymbol{q}}_i$ に対して A-直交化した直後の直交化誤差）が行列 $\hat{R}^{-1}$ により伝播・集積されて生じるものと理解される [2]．局所的な直交性誤差は $\kappa_2(\hat{R})$ に依存しないことから，大域的な直交性誤差は $O(\kappa_2(\hat{R}))$ であることが示される．

一方，MGS-HP 法では，直交化における内積 $< \hat{\boldsymbol{q}}_i, \hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i-1)} >_A$ を，漸化式により計算した $\hat{\boldsymbol{p}}_i$ を用いて $\hat{\boldsymbol{p}}_i^{\top}\hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i-1)}$ と計算する．したがって，$\hat{\boldsymbol{p}}_i$ と $A\hat{\boldsymbol{q}}_i$ との差が局所的な直交性誤差に反映する．ところが，漸化式を行列表現すると，$\hat{\boldsymbol{p}}_i = fl((AZ^{(0)})\hat{R}^{-1})\boldsymbol{e}_i$，$A\hat{\boldsymbol{q}}_i = A\,fl(Z^{(0)}\hat{R}^{-1})\boldsymbol{e}_i$ (ただし $\boldsymbol{e}_i$ は第 i 単位ベクトル）であり，これらの差は $O(\|A\|\,\|Z^{(0)}\|\,\|\hat{R}^{-1}\|\mathbf{u})$ 程度まで大きくなりうる．これより，局所的な直交性誤差自体が $\kappa_2(\hat{R})$ に比例することになり，大域的な直交性誤差は $O((\kappa_2(\hat{R}))^2)$ となると予想される．

ところが数値実験によると，MGS-HP 法の大域的な直交性誤差は $O(\kappa_2(\hat{R}))$ であり，MGS-HA 法とほぼ等しい [1]．これは，上記のような粗い誤差解析では説明できない．

3.4 直交性誤差の詳細な評価

そこで，直交性誤差のより詳細な評価を行う．評価のための枠組としては Rozloznik らのものを用いるが，局所的な直交性誤差の評価と，局所的な直交性誤差から大域的な直交性誤差を評価する部分を，より注意深く行うようにする．その結果，局所的な直交性誤差 $< \hat{\boldsymbol{q}}_i, \hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i)} >_A$ は $\kappa_2(\hat{R})$ ではなく，その首座小行列の条件数 $\kappa_2(\hat{R}_{1:i})$ に比例し，局所的な直交性誤差と大域的な直交性誤差 $< \hat{\boldsymbol{q}}_i, \hat{\boldsymbol{q}}_j >_A$（$i < j$）とを結び付ける行列は，$\hat{R}$ ではなくその主小行列 $\hat{R}_{i+1:n}$ であることが示される．これより，大域的直交性を表す行列 $\hat{Q}^{\top}A\hat{Q} - I_n$ の狭義上三角成分 $\Delta E^{(3)}$ について，最終的に次の評価が得られる．

$$\|\Delta E^{(3)}\|_F \le O(mn\sqrt{mn})\mathbf{u}\cdot\|A\|\,\|\hat{Q}\|\times$$
$$\max_{1\le i\le n}\left\{\kappa_2(\hat{R}_{1:i})\kappa_2(\hat{R}_{i+1:n})\sqrt{1 + \frac{\|\hat{R}_{1:n,i+1:n}\|_F^2}{\|\hat{R}_{i+1:n}\|_F^2}}\right\}$$
$$\times \max_{i\le j}\frac{\|\hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i-1)}\|}{\|\hat{\boldsymbol{z}}_j^{(i-1)}\|_A}. \qquad (7)$$

一方，正規性については次の評価が得られる．

$$|\,\|\hat{\boldsymbol{q}}_i\|_A^2 - 1|$$
$$\le O(m\sqrt{m})\mathbf{u}\cdot\kappa_2(\hat{R}_{1:i})\|\hat{\boldsymbol{q}}_i\|\,\|A\|\,\|\hat{Q}_{1:i}\|_F.$$

式 (7) を MGS 法の大域的直交性の評価 [2] と比べると，n に関するオーダーが $\sqrt{n}$ だけ増えており，かつ $\kappa_2(\hat{R})$ が $\max_{1\le i\le n}\{\cdot\}$ に置き換わっている．MGS-HP 法の直交性誤差が粗い誤差評価から予想されるよりも小さいのは，この量が多くの場合，$\kappa_2(\hat{R})$ 程度になっているからではないかと考えられる．一方，正規性の誤差は，MGS 法では $\kappa_2(\hat{R})$ に依存しないが，MGS-HP 法では $\kappa_2(\hat{R})$ に比例する結果になっている．これらの結果について，数値実験により詳しい検証を行うことは，今後の課題である．

参考文献

[1] A. Imakura and Y. Yamamoto: Efficient implementations of the modified Gram-Schmidt orthogonalization with a non-standard inner product, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol. 36, No. 2 (2019), pp. 619–641.

[2] M. Rozložník, M. Tůma, A. Smoktunowicz and J. Kopal: Numerical stability of orthogonalization methods with a non-standard inner product, *BIT*, Vol. 52, No. 4 (2012), pp. 1035–1058.

[3] N. J. Higham: *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, 2nd Edition, SIAM, 2002.

未知の行列とその複素共役転置を同時に含む Sylvester 方程式について

佐竹 祐樹 [1], 曽我部 知広 [1], 剱持 智哉 [1], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻
e-mail : y-satake@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

本研究では，$*$-congruence Sylvester 方程式

$$AX + X^*B = C \tag{1}$$

について考える．ここで，$A \in \mathbb{C}^{m\times n}$，$B \in \mathbb{C}^{n\times m}$，$C \in \mathbb{C}^{m\times m}$ は既知であり，$X \in \mathbb{C}^{n\times m}$ は未知である．また，X^* は行列 X の複素共役転置を表す．$*$-congruence Sylvester 方程式は，T-congruence Sylvester 方程式

$$AX + X^{\mathrm{T}}B = C \tag{2}$$

の拡張であり，(1)，(2) は振動解析などに現れる palindromic 固有値問題に応用される [1].

近年，T-congruence Sylvester 方程式 (2) が一般化 Sylvester 方程式と同値であることが示された [2, 3]．一般化 Sylvester 方程式は未知行列の転置を含まない行列方程式であり，これにより，T-congruence Sylvester 方程式 (2) に対して，一般化 Sylvester 方程式に関する研究の援用が可能となる．

しかし，$*$-congruence Sylvester 方程式 (1) に対しては，未知行列の複素共役が入るため，同様の理論を直接適用することは困難である．そこで本研究では，$*$-congruence Sylvester 方程式に対して未知行列の複素共役も転置も含まない行列方程式に帰着させる理論の構築について考察する．本研究の成果として，$*$-congruence Sylvester 方程式が一般化 Sylvester 方程式と同値であることを示す．

2 T-congruence Sylvester 方程式と一般化 Sylvester 方程式の関係について

本節では，T-congruence Sylvester 方程式 (2) と一般化 Sylvester 方程式の関係について述べる．

$m \geq n$ のときには，以下の主張が成り立つ．

定理 1. （[3, Theorem 6]）$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$B \in \mathbb{R}^{n\times m}$，$C \in \mathbb{R}^{m\times m}$，$X \in \mathbb{R}^{n\times m}$，$m \geq n$ とする．$B^{\mathrm{T}} = SA$ を満たす行列 $S \in \mathbb{R}^{m\times m}$ が存在し，S の固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ に関して $\lambda_i\lambda_j \neq 1$ $(1 \leq i, j \leq m)$ が成り立つとき，T-congruence Sylvester 方程式 (2) は一般化 Sylvester 方程式

$$AX - B^{\mathrm{T}}XS^{\mathrm{T}} = C - (SC)^{\mathrm{T}}$$

と同値である．

$m \leq n$ のときには，次の定理が成り立つ．

定理 2. （[3, Theorem 8]）$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$B \in \mathbb{R}^{n\times m}$，$C \in \mathbb{R}^{m\times m}$，$X \in \mathbb{R}^{n\times m}$，$m \leq n$ とする．$I_m = AD$ を満たす行列 $D \in \mathbb{R}^{n\times m}$ が存在し，$S := B^{\mathrm{T}}D$ の固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ に関して $\lambda_i\lambda_j \neq 1(1 \leq i, j \leq m)$ が成り立つとき，T-congruence Sylvester 方程式 (2) は一般化 Sylvester 方程式

$$A\hat{X} - B^{\mathrm{T}}\hat{X}S^{\mathrm{T}} = C$$

と同値である．ただし，$\hat{X}$ は，$X = \hat{X} - D\hat{X}^{\mathrm{T}}B$ を満たす．

これらの定理は，共通して以下のアプローチにより示される．

1) T-congruence Sylvester 方程式に vec 作用素を作用させて連立 1 次方程式に変形する．
2) 連立 1 次方程式に線形作用素を施すことで，他の適切な連立 1 次方程式に式変形する．
3) 式変形後の連立 1 次方程式に逆 vec 作用素を施して行列方程式にする．

vec 作用素とは，行列をベクトルに変換する線形作用素で，$X = [\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m] \in \mathbb{C}^{n\times m}$ に対して

$$\mathrm{vec}(X) := \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_m \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{mn} \tag{3}$$

と定義される．また，逆 vec 作用素は vec 作用素の逆作用素で，$\mathrm{vec}^{-1}(\mathrm{vec}(X)) = X$ である．T-congruence Sylvester 方程式 (2) に vec 作用素 (3) を施すと，連立 1 次方程式

$$\{I_m \otimes A + P_{mm}(I_m \otimes B^{\mathrm{T}})\}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c} \tag{4}$$

が得られる．ここで，I_m は m 次単位行列，$\boldsymbol{x} := \mathrm{vec}(X)$，$\boldsymbol{c} := \mathrm{vec}(C)$ であり，P_{mm} は次式で定義される置換行列である．

$$P_{mn} := \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}(\boldsymbol{e}_{kn} \otimes \boldsymbol{e}_{jm})(\boldsymbol{e}_{jm} \otimes \boldsymbol{e}_{kn})^{\mathrm{T}}. \quad (5)$$

ただし，$\boldsymbol{e}_{in}$ は i 番目の成分が 1，そのほかの全ての成分が 0 の n 次元ベクトルである．置換行列 (5) は任意の行列 $Y \in \mathbb{C}^{n\times m}$ に対して $\mathrm{vec}(Y^{\mathrm{T}}) = P_{mn}\mathrm{vec}(Y)$ を満たすため，2) において連立 1 次方程式 (4) の係数行列中の置換行列を消去するような線形作用素を施すことで，3) で逆 vec 作用素を用いたときに未知行列の転置を含まない行列方程式を得られることがわかる．

3 $*$-congruence Sylvester 方程式と一般化 Sylvester 方程式の関係について

本節では，$*$-congruence Sylvester 方程式 (1) に対して，未知行列の複素共役も転置も含まない行列方程式に帰着させる理論の構築を行う．$*$-congruence Sylvester 方程式に vec 作用素を用いると，$(I_m \otimes A)\boldsymbol{x} + P_{mm}(I_m \otimes B^{\mathrm{T}})\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{c}$ となり，$\boldsymbol{x}$ のみに関する連立 1 次方程式にならない．そのため，前節のアプローチをそのまま適用することができない．しかし，行列の実部と虚部を分けて考えることで，実数の連立 1 次方程式

$$\begin{bmatrix} G(A_{\mathrm{R}}, B_{\mathrm{R}}) & -G(A_{\mathrm{I}}, -B_{\mathrm{I}}) \\ G(A_{\mathrm{I}}, B_{\mathrm{I}}) & G(A_{\mathrm{R}}, -B_{\mathrm{R}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_{\mathrm{R}} \\ \boldsymbol{x}_{\mathrm{I}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{c}_{\mathrm{R}} \\ \boldsymbol{c}_{\mathrm{I}} \end{bmatrix} \quad (6)$$

が得られる．ただし，$G(A, B) := I_m \otimes A + P_{mm}(I_m \otimes B^{\mathrm{T}})$ であり，$(\cdot)_{\mathrm{R}}$，$(\cdot)_{\mathrm{I}}$ はそれぞれ行列・ベクトルの実部と虚部である．本研究では，(6) の係数行列に含まれる置換行列を消去するような線形作用素の構築を行った．結果として，定理 1，2 の拡張といえる以下の 2 つの定理を得た．

次の定理は定理 1 の拡張である．

定理 3. $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$，$B \in \mathbb{C}^{n\times m}$，$C \in \mathbb{C}^{m\times m}$，$X \in \mathbb{C}^{n\times m}$，$m \geq n$ とする．$B^{\mathrm{T}} = S\bar{A}$ を満たす行列 $S \in \mathbb{C}^{m\times m}$ が存在し，S の固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ に関して $\lambda_i\bar{\lambda}_j \neq 1 (1 \leq i, j \leq m)$ が成り立つとき，$*$-congruence Sylvester 方程式 (1) は一般化 Sylvester 方程式

$$AX - B^*XS^{\mathrm{T}} = C - (S\bar{C})^{\mathrm{T}}$$

と同値である．

以下は定理 2 の拡張である．

定理 4. $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$，$B \in \mathbb{C}^{n\times m}$，$C \in \mathbb{C}^{m\times m}$，$X \in \mathbb{C}^{n\times m}$，$m \leq n$ とする．$I_m = AD$ を満たす行列 $D \in \mathbb{C}^{n\times m}$ が存在し，$S := B^{\mathrm{T}}\bar{D}$ の固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ に関して $\lambda_i\bar{\lambda}_j \neq 1 (1 \leq i, j \leq m)$ が成り立つとき，$*$-congruence Sylvester 方程式 (1) は一般化 Sylvester 方程式

$$A\hat{X} - B^*\hat{X}S^{\mathrm{T}} = C$$

と同値である．ただし，$\hat{X}$ は，$X = \hat{X} - D\hat{X}^*B$ を満たす．

4 まとめと今後の課題

本研究では，$*$-congruence Sylvester 方程式が一般化 Sylvester 方程式と同値であることを示した．今後の課題は，本研究で示した理論を用いた効率的な数値解法の設計である．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18H05392 の助成を受けた．

参考文献

[1] D. Kressner, C. Schröder, and D. S. Watkins, Implicit QR algorithms for palindromic and even eigenvalue problems, Numer. Algorithms, 51 (2009), pp. 209–238.

[2] M. Oozawa, T. Sogabe, Y. Miyatake, and S.-L. Zhang, On a relationship between the T-congruence Sylvester equation and the Lyapunov equation, J. Comput. Appl. Math., 329, (2018), pp. 51–56.

[3] Y. Satake, M. Oozawa, T. Sogabe, Y. Miyatake, T. Kemmochi, and S.-L. Zhang, Relation between the T-congruence Sylvester equation and the generalized Sylvester equation, Appl. Math. Lett., 96 (2019), pp. 7–13.

より詳細な感染症流行データ解析に向けた、感受性の時系列変化によって引き起こされる感染症流行ダイナミクスの解析

大森　亮介[1]，中田　行彦[2]
[1]北海道大学，[2]島根大学
e-mail: omori@czc.hokudai.ac.jp

1　背景

感染症の流行制御は重要な社会的課題の一つであるが、新規感染者の期待値は感染しうる宿主の個体数と伝播させる宿主の個体数の両方に関係するという非線形なダイナミクスとなっており、観察データの解釈や予測を困難なものとしている。この新規感染の発生メカニズムを単純化した数理モデルの一つにSIRモデルがある。このモデルを拡張し、病原体の生活史、宿主の行動、介入行為がどのように流行ダイナミクスに影響を与えるか調べられ、流行ダイナミクスを非常に複雑化させる要因は多岐に渡る事が明らかになってきた。流行制御のためには、第一歩として観察データをある程度の精度をもって模倣できる数理モデルの構築が必要であり、そのモデルに記述されるべき要因は何であるかを知る必要がある。

新規感染の発生を模倣する上で感染しうる宿主の個体数は重要な因子であるが、すべての個体が等しく感染しうるとは限らない。最も単純な数理モデルであるSIRモデルは、宿主を感染しうる個体と完全に感染不可能である個体の２状態を考慮している。現実的には宿主の感染確率は母性免疫、過去に起きた感染からの獲得免疫等により宿主の病原体感染に対する感受性は多様である。これは、ある時刻における感受性は宿主個体レベルで多様性が観察されるだけでなく、一つの個体において感受性は時間とともに変化していく事を意味する。

これまでに、感染、再感染による感受性の低下（免疫による防御の増強）や、病原体に対して暴露されていない状態が続くことによる感受性の増強（免疫による防御の低下）を考慮した数理モデルが考案され、そのダイナミクスはこれらを考慮していないモデルと定性的に異なることが示されてきた。感受性の多様性が与える感染症流行ダイナミクスへの影響を理解することが、感染症流行データの解析に必須であることを説明するために、以下の事例を紹介する。マイコプラズマ肺炎の周期的な流行が感受性の変化によって説明されるという仮説の提案とその仮説の評価を行った[1]。また、感受性の時系列変化を単純化させたモデルを構築し解析したところ、現在の感染症疫学において主流である流行可能性を議論する手法では捉えられない流行ダイナミクスが存在することを示した[2]。

2　マイコプラズマ肺炎の流行周期性

マイコプラズマ肺炎は４年に一度大きな流行を引き起こしていたが、そのメカニズムは不明であった。その周期的流行メカニズムを探るために、マイコプラズマ肺炎に類似した感染症において周期的流行メカニズムの要因となっていると考えられている、1)学校の学期制による学童間での伝搬の周期性、2)系統間での交差免疫反応による流行干渉、3)感染状態の推移の待ち時間が指数分布よりも分散が小さい場合について、マイコプラズマ肺炎の流行を記述したSEIRSモデルを拡張した数理モデルの数値解析により、それぞれの流行周期性を調べた。これにより、マイコプラズマ肺炎の周期性を引き起こすためには、要因3)の、特に免疫が失われて再感染が可能となる状態になるまでの待ち時間の分散が指数分布の場合よりも小さい必要があることがわかった。これは、感受性が増加する過程を詳細に記述しないと流行ダイナミクスを定性的ですら模倣する事が出来ない可能性があることを示唆している。

3　既存手法では捉えられない流行

これまでに、感染症の流行ダイナミクスは数理モデルの解析により、流行が起き、かつ平衡状態に移行するendemic case、流行は一時的なものであり時間が無限大の時には感染者数は０に収束するepidemic case、一度も感染者数が増加しないextinction caseという３つの定性的な分類がなされてきた。この３つの分類が

全ての感染症流行ダイナミクスを包括していると仮定できれば、基本増殖率（人口のほぼ全てが感染が可能である状態である時の一人の感染者が引き起こす二次感染者数の期待値）を調べれば流行可能性を議論することが可能である。しかしながら、この分類の基となる数理モデルにおける宿主の感受性のモデリングは、終生免疫、もしくは指数分布に従う待ち時間で失われていく免疫のどちらかという様に極めて単純化されている。そこで、SIR モデルを拡張した、感染から回復した後に減衰し、自然暴露により増強される様な、時間変動する免疫レベルを考慮した以下の様な数理モデルを構築した。

$$S'(t) = -\beta S(t)I(t),$$
$$I'(t) = \beta\big(S(t)+\sigma\alpha R(t)\big)I(t)-\gamma I(t),$$
$$R'(t) = \gamma I(t)-\beta\sigma R(t)I(t),$$
$$B'(t) = \beta\sigma(1-\alpha)R(t)I(t)$$

このモデルを解析したところ、基本増殖率では流行可能性を議論できない、流行初期は感染者数が減少し流行が起きない様に見えるものの、その後に感染者数が増加に転じ流行が起きる、”delayed outbreak”と呼ばれるダイナミクスが存在することが明らかになった(図１)。

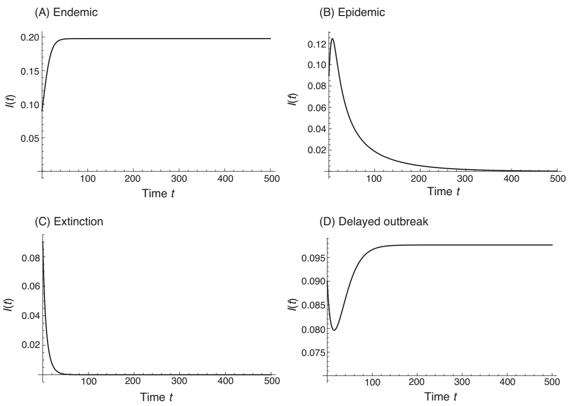


図 1. 流行ダイナミクスの分類

4　今後の課題

自然減衰や暴露による増強による宿主感受性の時系列変化の流行ダイナミクスに対する影響は、定性的にも理解がなされていない事が多くあると考えられる。現実に観察される感受性の時系列変化はより複雑である可能性があり、その様なデータの数理モデルによる解析の為には、宿主感受性の時系列変化の流行ダイナミクスに対する影響の網羅的な理解が必要となる。そのためには、宿主感受性の時系列変化の記述をより一般化したモデルの解析が必要である。

謝辞　本研究は JST CREST および JSPS 科研費(若手研究 19K20393)の助成を受けて行った。

参考文献

[1] R. Omori, Y. Nakata, HL. Tessmer, S. Suzuki, and K. Shibayama, The determinant of periodicity in Mycoplasma pneumoniae incidence: an insight from mathematical modelling., Sci. Rep., 5 (2015), 14473
[2] Y. Nakata and R. Omori, The change of susceptibility following infection can induce failure to predict outbreak potential by R0, Math. Bio. Eng., 16(2) (2019), 813-830.

偏微分方程式のリミット・トーラス解に対する位相縮約法

河村 洋史
国立研究開発法人海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究開発センター
e-mail : ykawamura@jamstec.go.jp

概要

本研究 [1] では，非圧縮性流体方程式における進行振動対流解の位相縮約法を定式化する．本手法は偏微分代数方程式におけるリミット・トーラス解の位相縮約法である．各点・各時刻に加えられた弱い摂動に対する進行振動対流の時空間的な位相応答を定量化する位相感受関数を導出し，弱く相互作用する一対の進行振動対流の間の時空間的な位相同期現象を解析する．

1 研究の背景

自然界にはさまざまな振動現象および同期現象が存在する [2, 3, 4, 5, 6]．近年，大気大循環の模型実験である回転水槽実験において，進行振動対流の同期現象が観察されている [7]．ここで，回転水槽は回転方向に連続並進対称性を持つため，回転水槽における進行振動対流は「空間に関する連続並進対称性の自発的な破れ」と「時間に関する連続並進対称性の自発的な破れ」という２つの「位相」を持つリミット・トーラス解によって記述される．このような進行振動対流の同期現象の数理的な理解を目指している．

以前，その第一歩として，シリンダー形状の Hele-Shaw セルにおける振動対流を考えた [8]．その系は水平方向に連続並進対称性を持つため，その系における振動対流も「空間の位相」と「時間の位相」を持つリミット・トーラス解によって記述される．その振動対流のダイナミクスを位相変数のみで記述する位相縮約法を定式化し，相互作用する２つの振動対流の間の空間的・時間的な位相同期現象を解析した．ここで，参考文献 [8] で定式化した，偏微分方程式の進行振動解に対する位相縮約法は，参考文献 [9, 10, 11, 12] 等で定式化した，偏微分方程式の振動解に対する位相縮約法の一般化である．

本研究 [1] では，回転水槽実験により近い問題として，非圧縮性流体方程式における進行振動対流解を考える．次節で述べるように，非圧縮性流体方程式は偏微分代数方程式である．つまり，偏微分代数方程式の進行振動解に対する位相縮約法を定式化する．

2 非圧縮性流体方程式の進行振動対流解

水平方向に周期境界条件を課して，次のような２次元非圧縮性流体方程式を考える：

$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{v}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} v(x,y,t) = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla v - \frac{\partial p}{\partial x} + \mathrm{Pr}\,\nabla^2 v, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} w(x,y,t) = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla w - \frac{\partial p}{\partial y} + \mathrm{Pr}\,\mathrm{Ra}\,\theta + \mathrm{Pr}\,\nabla^2 w, \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta(x,y,t) = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla \theta + w + \nabla^2 \theta. \tag{4}$$

ここで，圧力 p，水平方向の流速 v，鉛直方向の流速 w，温度の対流成分 θ を各成分とする変数 $\boldsymbol{X} = (p, v, w, \theta)^{\mathrm{T}}$ を導入すると，式 (1)(2)(3)(4) は，形式的に次のように記述することができる [1]：

$$\hat{M} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{X}(x,y,t) = \boldsymbol{\mathcal{F}}[\boldsymbol{X}] + \hat{D} \nabla^2 \boldsymbol{X}. \tag{5}$$

ここで，行列 $\hat{M} = \mathrm{diag}(0,1,1,1)$ と行列 $\hat{D} = \mathrm{diag}(0,\mathrm{Pr},\mathrm{Pr},1)$ を定義した．これらの行列は対角成分にゼロを持つので，特異行列である．特に，行列 $\hat{M}$ が特異行列であるため，非圧縮性流体方程式 (5) は偏微分代数方程式である．

適切な Prandtl 数 Pr と Rayleigh 数 Ra において，この系は安定な進行振動対流状態となり，その進行振動対流を表すリミット・トーラス解は一般に次のように書くことができる：

$$\boldsymbol{X}(x,y,t) = \boldsymbol{X}_0\big(x - \Phi(t), y, \Theta(t)\big). \tag{6}$$

ここで，対流の位置を表現する空間の位相 Φ と対流の振動を表現する時間の位相 Θ の時間発展は次のように与えられる：

$$\dot{\Phi}(t) = c, \qquad \dot{\Theta}(t) = \omega. \tag{7}$$

そして，進行速度 c と振動数 ω は定数である．次節では，弱く相互作用する２つの進行振動対流の間の空間的・時間的な位相同期現象を位相縮約法により解析する．

3 弱く相互作用する２つの進行振動対流

弱く相互作用する２つの進行振動対流を考える．各系の変数 $\boldsymbol{X}_\sigma(x,y,t)$ の時間発展は次のような方程式で記述できる：

$$\hat{M}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{X}_\sigma(x,y,t) = \boldsymbol{\mathcal{F}}[\boldsymbol{X}_\sigma] + \hat{D}\nabla^2\boldsymbol{X}_\sigma + \epsilon\boldsymbol{\mathcal{G}}[\boldsymbol{X}_\sigma,\boldsymbol{X}_\tau]. \quad (8)$$

ここで，$(\sigma,\tau) = (1,2),(2,1)$ である．相互作用強度 ϵ がゼロの場合には，各系の進行振動対流はリミット・トーラス解 (6) で記述されるとする．

ここにおいて，相互作用強度 ϵ が有限であるが十分小さい場合に，式 (8) から次のような位相方程式を導出することができる [1]：

$$\dot{\Phi}_\sigma(t) = c + \epsilon\Gamma_{\mathrm{s}}\left(\Phi_\sigma - \Phi_\tau, \Theta_\sigma - \Theta_\tau\right), \quad (9)$$

$$\dot{\Theta}_\sigma(t) = \omega + \epsilon\Gamma_{\mathrm{t}}\left(\Phi_\sigma - \Phi_\tau, \Theta_\sigma - \Theta_\tau\right). \quad (10)$$

ここで，２つの位相結合関数 $\Gamma_{\mathrm{s,t}}$ は空間位相差と時間位相差のみに依存していることに注意する．よって，空間位相差 $\mathit{\Delta}\Phi(t) = \Phi_1(t) - \Phi_2(t)$ と時間位相差 $\mathit{\Delta}\Theta(t) = \Theta_1(t) - \Theta_2(t)$ の時間発展方程式は次のように与えられる：

$$\frac{d}{dt}\mathit{\Delta}\Phi(t) = \epsilon\Gamma_{\mathrm{s}}^{(\mathrm{a})}\left(\mathit{\Delta}\Phi, \mathit{\Delta}\Theta\right), \quad (11)$$

$$\frac{d}{dt}\mathit{\Delta}\Theta(t) = \epsilon\Gamma_{\mathrm{t}}^{(\mathrm{a})}\left(\mathit{\Delta}\Phi, \mathit{\Delta}\Theta\right). \quad (12)$$

ここで，２つの位相結合関数の反対称成分 $\Gamma_{\mathrm{s,t}}^{(\mathrm{a})}$ を次のように定義した：

$$\Gamma_{\mathrm{s}}^{(\mathrm{a})}\left(\mathit{\Delta}\Phi, \mathit{\Delta}\Theta\right) = +\Gamma_{\mathrm{s}}\left(+\mathit{\Delta}\Phi, +\mathit{\Delta}\Theta\right) - \Gamma_{\mathrm{s}}\left(-\mathit{\Delta}\Phi, -\mathit{\Delta}\Theta\right), \quad (13)$$

$$\Gamma_{\mathrm{t}}^{(\mathrm{a})}\left(\mathit{\Delta}\Phi, \mathit{\Delta}\Theta\right) = +\Gamma_{\mathrm{t}}\left(+\mathit{\Delta}\Phi, +\mathit{\Delta}\Theta\right) - \Gamma_{\mathrm{t}}\left(-\mathit{\Delta}\Phi, -\mathit{\Delta}\Theta\right). \quad (14)$$

以上のように，連立偏微分代数方程式 (8) を連立常微分方程式 (11)(12) に縮約できる．そして，弱く相互作用する２つの進行振動対流の間の空間的・時間的な位相同期現象を式 (11)(12) から予測できる．実際，理論値は直接数値計算結果と定量的に一致する．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP18H03205，JP17H03279，JP16K17769 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Y. Kawamura, Phase reduction of limit-torus solutions to partial differential algebraic equations, (2019) submitted.

[2] Y. Kuramoto, Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence, Springer, 1984; Dover, 2003.

[3] A. Pikovsky, M. Rosenblum, and J. Kurths, Synchronization, Cambridge University Press, 2001.［徳田功 訳：同期理論の基礎と応用，丸善，2009.］

[4] S. H. Strogatz, SYNC, Hyperion Books, 2003.［蔵本由紀 監修／長尾力 訳：SYNC，早川書房，2005；2014.］

[5] 蔵本由紀，非線形科学，集英社，2007；蔵本由紀，同期する世界，集英社，2014.

[6] 蔵本由紀・河村洋史，同期現象の科学，京都大学学術出版会，2017.［（同期現象の数理，培風館，2010）の改訂版.］

[7] A. A. Castrejón-Pita and P. L. Read, Synchronization in a pair of thermally coupled rotating baroclinic annuli: Understanding atmospheric teleconnections in the laboratory, Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 204501.

[8] Y. Kawamura and H. Nakao, Phase description of oscillatory convection with a spatially translational mode, Physica D 295–296 (2015) 11–29.

[9] Y. Kawamura, H. Nakao, and Y. Kuramoto, Collective phase description of globally coupled excitable elements, Phys. Rev. E 84 (2011) 046211.

[10] Y. Kawamura and H. Nakao, Collective phase description of oscillatory convection, Chaos 23 (2013) 043129.

[11] H. Nakao, T. Yanagita, and Y. Kawamura, Phase-reduction approach to synchronization of spatiotemporal rhythms in reaction-diffusion systems, Phys. Rev. X 4 (2014) 021032.

[12] Y. Kawamura and R. Tsubaki, Phase reduction approach to elastohydrodynamic synchronization of beating flagella, Phys. Rev. E 97 (2018) 022212.

２次元デイジーワールドモデルにおける棲み分けパターン

陰山 真矢 [1], 八木 厚志 [2]
[1] 関西学院大学理工学部数理科学科，[2] 大阪大学名誉教授
e-mail : maya-kageyama@kwansei.ac.jp

1　概要

1972 年に J.E. Lovelock は，地球が，そこに住む生物相とそれを取り巻く環境が相互作用することによって，地球システム全体を安定化に向けて自己調節しているひとつのシステムであると考えた．このようなシステムを理想的に単純化したものが Watson-Lovelock[1] によるデイジーワールドである．

デイジーワールドは地球のような惑星で，太陽のような恒星の周りを公転している．この惑星上には黒色と白色の２種類のデイジーしか存在しておらず，これらは地球の植物と同様に互いの生育域を争っている．また，デイジーワールドの大域温度は恒星からの放射熱と地表面の光反射率（アルベド）によってのみ決まる．つまり，地表面の色が濃いほど恒星からの光を吸収して温度が上昇しやすく，色が薄いほど温度は上昇しにくい．

本講演では，２次元長方形上のデイジーモデルに対して，定数定常解の安定性について調べ，一様状態の不安定化が起こる条件について明らかにする（時間大域的一意解の構成および指数アトラクタの存在については Kageyama-Yagi[2] を参照）．さらに，数値シミュレーションによって得られたパターン解の一部を紹介する．

2　2 次元デイジーワールドモデル

2 次元長方形領域 $\Omega = (0, \ell_x) \times (-\ell_y, \ell_y)$ 上で以下の反応拡散方程式を考える．

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = d\Delta u + [(1-u-v)\Phi(u,v,w) - f]\,u & \text{in} \quad \Omega \times (0,\infty), \\
\dfrac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v + [(1-u-v)\Psi(u,v,w) - f]\,v & \text{in} \quad \Omega \times (0,\infty), \\
\dfrac{\partial w}{\partial t} = D\Delta w + [1-g(u,v)]R - \sigma w^4 & \text{in} \quad \Omega \times (0,\infty),
\end{cases}
\tag{1}
$$

未知変数 $u = u(x,y,t)$，$v = v(x,y,t)$ は，場所 $(x,y) \in \Omega$，時刻 t での白と黒のデイジーの被覆率をそれぞれ表し，$w = w(x,y,t)$ は場所 $(x,y) \in \Omega$，時刻 t での地表面温度を表している．d はデイジーの拡散率，D は熱拡散率を表す．$\Phi(u,v,w), \Psi(u,v,w)$ はそれぞれ白と黒のデイジーの成長率であり，デイジーの成長に最適な温度 $\overline{w}$ で最大値 1 をとるような放物型の正のカットオフ関数

$$
\Phi(u,v,w) = \left[1 - \delta\left(\overline{w} - T_w\right)^2\right]_+,
$$
$$
\Psi(u,v,w) = \left[1 - \delta\left(\overline{w} - T_b\right)^2\right]_+
$$

で与えられる．ここで，T_w, T_b は白と黒のデイジーの局所温度であり，

$$
T_w = w + q\left[g(u,v) - a_w\right],
$$
$$
T_b = w + q\left[g(u,v) - a_b\right]
$$

とする．$g(u,v)$ は地表面の平均アルベドを表し，u, v の関数として各点で次のように与えられる．

$$
g(u,v) = a_w u + a_b v + a_g(1-u-v).
$$

ここで，a_w, a_b, a_g はそれぞれ白いデイジー，黒いデイジー，裸地のアルベドであり，$1 > a_w > a_g > a_b > 0$ とする．γ はデイジーの枯死率，q, δ は適当な正定数である．温度 w についての方程式は Stefan-Boltzmann の法則とエネルギー平衡の方程式から導き出され，R は太陽から流入するエネルギー量，σ は Stefan-Boltzmann 定数を表す．また，境界条件は x 方向に周期境界条件，y 方向に Neumann 境界条件を課す．

3　定数定常解の不安定化条件

u, v, w に対して以下の連立方程式を考える．

$$
[(1-u-v)\Phi(u,v,w) - f]\,u = 0, \tag{2}
$$

$$
[(1-u-v)\Psi(u,v,w) - f]\,v = 0, \tag{3}
$$

$$
[1 - g(u,v)]\,R - \sigma w^4 = 0. \tag{4}
$$

各パラメータの値は [1] と同様に，

$$
\begin{gathered}
a_b = 0.25, a_g = 0.5, a_w = 0.75, \delta = 0.003265, \\
f = 0.3, \overline{w} = 295.5, q = 20, \sigma = 5.67 \times 10^{-8}
\end{gathered}
\tag{5}
$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

で与え，R は制御パラメータとする．このとき，連立方程式 (2)-(4) を解くと，$R \geq 4^4/3^3 q\sigma(\overline{w} - q/2)^3$ の場合に正の定数定常解 $U_* = (u_*, v_*, w_*)$ が存在することが分かる．さらに，モデリング上の仮定 $u_* \geq 0$, $v_* \geq 0$, $u_* + v_* \leq 1$ を満たすような正の定数定常解 U_* はただ一つに絞られることが確認できる．

さらに，このような正の定数定常解 U_* に対して，以下の 2 つの条件が満たされていれば，その解は不安定となることが計算によって確認できる．

- 温度の拡散係数 D に対して，デイジーの拡散係数 d が十分小さい
- デイジーの種間競争が種内競争よりも強い

反応拡散系において，拡散率の違いが空間的に一様な状態の不安定化を生み，空間的なパターンが自発的に形成されることが知られている．これは，拡散誘導不安定性（diffusion driven instability）と呼ばれている．この結果は，2 次元デイジーモデルにおいても拡散誘導不安定性のようなものが現れることを示している．

4　棲み分けパターン

図 1-3 は，長方形領域 $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, \pi]$ 上のモデル方程式 (1) に対する数値計算結果を示している．各パラメータは (5) と同様に与える．ただし，$D = 1, d = 10^{-5}$ とし，R は制御パラメータとして扱う．また，初期関数 $u_0(x, y)$, $v_0(x, y)$, $w_0(x, y)$ については，定数関数 $\overline{u}_0(x, y)$, $\overline{v}_0(x, y)$, $\overline{w}_0(x, y)$ に微小な擾乱を与えたものとする．

図 1-3 は，それぞれ $R = 820.715$, 864.731, 1160.922 に対する白と黒のデイジーの分布を示している．ここで，時刻 $t = 10,000$ であり，図のデータはいずれもほとんど定常状態となっている．

図 1-3 のパラメータ R に対しては，いずれも白いデイジーと黒いデイジーが同じ点上で共存することのない「棲み分けパターン」を形成する．図 1（$R = 820.715$）では，黒いデイジーが領域上に拡がり，その中で白いデイジーが斑点もしくは連銭状に生育領域を拡げている（黒優勢の連銭パターン）．図 2（$R = 864.731$）では，白いデイジーと黒いデイジーはほぼ均衡状態となっている（迷路パターン）．図 3（$R = 1160.922$）では，領域のほとんどを白いデイジーが覆い，黒いデイジーは小さな斑点模様をつくる（白優勢の斑点パターン）．

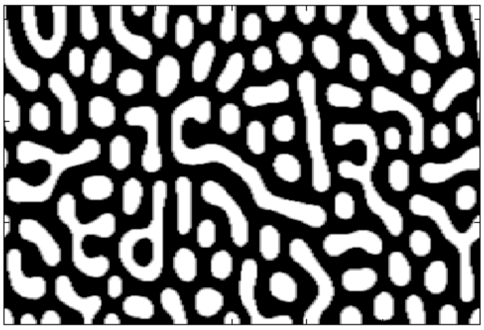


図 1. $R = 820.715$.

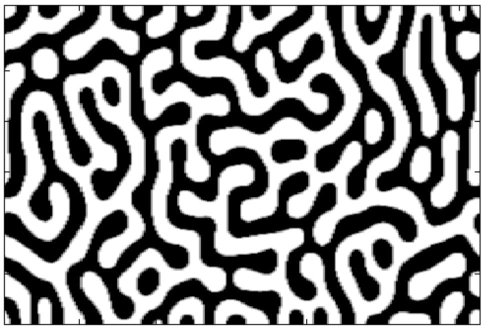


図 2. $R = 864.731$.

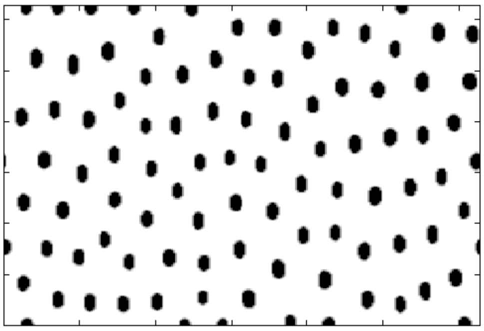


図 3. $R = 1160.922$.

参考文献

[1] A. J. Watson and J. E. Lovelock, Biological homeostasis of the global environment: the parable of Daisyworld, Tellus Vol. 35B (1983), 284–289.

[2] M. Kageyama and A. Yagi, Pattern formation for self-regulating homeostasis model in a rectangle, Sci. Math. Jpn., in press, online ver. e-2019-3.

大域的かつ非対称局所的に相互作用した双安定素子集団の超離散方程式に基づく考察

大森　祥輔 [1], 山崎　義弘 [1]

[1] 早稲田大学　先進理工学部　物理学科

e-mail : 42261timemachine@ruri.waseda.jp

1　概要

以下の四つの特徴を持つ力学系モデルのダイナミックスを考察する。

1) 双安定性
2) 非対称局所的な相互作用
3) 大域的相互作用
4) ノイズ

実際これまでに、これらの性質を持つ素子集団の力学系モデルとして以下の微差分方程式が提案されている [1].

$$\dot{\phi_j} = -(\phi_j - \alpha)(\phi_j - \beta)(\phi_j - \gamma) + D\{\theta(\phi_{j+1} - \phi_j) + \theta(\phi_{j-1} - \phi_j)\} - (\bar{\phi} - V) + \xi_j \quad (1)$$

ここで, $\phi_j > 0 (j = 1 \sim N)$ は状態変数, α, β, γ は定数で、$\alpha < \beta < \gamma$ を満たす．D, V は正定数, $\theta(x) = x (x > 0), 0 (x \le 0)$, $\bar{\phi} = \frac{1}{N}\Sigma_{j=1}^{N}\phi_j$, ξ_j は適当な乱数で与えられるノイズ項である．方程式 (1) の右辺第 1 項は双安定性を表しており, 第 2,3 項がそれぞれ非対称局所的相互作用, 大域的相互作用を表す部分である． なお、このモデルは、粘着テープの剥離実験 [2] でみられるパターン形成を再現するものとして提案された。

一方, 上記 1)-4) の性質をもつ素子集団のダイナミクスを再現する次の確率セルオートマトン (CA) モデルも発見的に得られている [3] : 先ず, 状態変数 $U_j^n (j = 1, \ldots, N)$ は, 系の双安定性を反映するために二値 0, 1 をとるものとする ($U_j^n \in \{0, 1\}$)． 次に, 非対称局所的相互作用をエレメンタリーセルオートマトン (ECA) の rule 254 として与え, rule 254 が作用した後の状態を $U_j^{n'}$ とする． ここで, n' は rule 254 が作用した後の時刻である．さらに, 大域的相互作用及びノイズの効果として, 状態 $U_j^{n'}$ はパラメータを r とした以下の確率ルールに従って, 状態 U_j^{n+1} へ遷移する ; (i) もし $\bar{U}^{n'} < r$ ならば状態は 0 から 1 へ確率 $(r - \bar{U}^{n'})/(1 - \bar{U}^{n'})$ で遷移する． (ii) もし $\bar{U}^{n'} \ge r$ ならば, 1 から 0 へ確率 $1 - (r/\bar{U}^{n'})$ で遷移する． ただし, $\bar{U}^{n'} = \frac{1}{N}\Sigma_{j=1}^{N}U_j^{n'}$ である．この確率 CA モデル (model A と呼ぶ) による CA パターンは力学系モデル同様, 粘着テープ剥離実験において得られる時空パターンを再現する．

これまでに我々は, 方程式 (1) の右辺第 1,2 項を, トロピカル離散化 [4] を通して超離散化し [5], 第 3 項及びノイズ項を確率関数を用いて離散的に扱うことによって, max-plus 代数によって記述される以下の確率 CA モデルを導出した [6].

$$U_j^{n+1} = f_{254}(U_{j+1}^n, U_j^n, U_{j-1}^n) - \theta_j^n(\bar{U}^n - c) \quad (2)$$

方程式 (2) の右辺第 1 項 $f_{254}(U_{j+1}^n, U_j^n, U_{j-1}^n)$ は系の非対称局所的相互作用に対応し, 以下の超離散化方程式を表している．

$$U_j^{n+1} = \max\{X_j^n, T + \max(\Gamma + 2X_j^n, A + B + \Gamma)\} - \max\{0, T + \max(2X_j^n, B + \Gamma)\} \quad (3)$$

ただし,

$$X_j^n = \begin{cases} \max(U_{j+1}^n, M + U_j^n, U_{j-1}^n), & (U_{j+1}^n > U_j^n,\ U_{j-1}^n > U_j^n) \\ \max(U_{j+1}^n, M' + U_j^n), & (U_{j+1}^n > U_j^n,\ U_{j-1}^n \le U_j^n) \\ \max(U_{j-1}^n, M' + U_j^n), & (U_{j-1}^n > U_j^n,\ U_{j+1}^n \le U_j^n) \\ U_j^n, & (U_{j+1}^n \le U_j^n,\ U_{j-1}^n \le U_j^n) \end{cases} \quad (4)$$

A, B, Γ, M, M' は定数であり, $A < B < \Gamma$ 及び $M, M' < \Gamma - A$ を満たす．ここで, 超離散方程式 (3) は, A, Γ を 0, 1 とそれぞれ対応させることで, ECA rule 254 を示す．また, 方程式 (2) の右辺第 2 項 $\theta_j^n(\bar{U}^n - c)$ は大域的相互作用及びノイズを考慮した項を示している．なお, c はパラメータであり, $\bar{U}^n = \dfrac{1}{N}\Sigma_{j=1}^{N}U_j^n$, θ_j^n は以下の確率関数である．

$$\theta_j^n(x) = \begin{cases} U_j^n, & \text{with the probability } x \\ 0, & \text{with the probability } 1 - x \end{cases}$$

ただし，もし $x < 0$ または $1 < x$，ならば $\theta_j^n(x) \equiv 0$ とする．確率 CA モデル (2) においても，model A と同様，$\theta_j^n(\bar{U}^n - c)$ に対して，$f_{254}(U_{j+1}^n, U_j^n, U_{j-1}^n)$ が系に作用した時刻 n' を導入することで，剥離実験の時空パターンを再現する [7]．すなわち，(2) の右辺第 2 項を $\theta_j^{n'}(\bar{U}^{n''} - c)$ と定義しなおす．ここで，n'' は n または n' であり，それぞれ model B, C と呼ぶ．この時，model B, C もまた，素子集団の時空パターンを CA パターンとして再現する．

本発表では，上述の先行研究のように、非対称局所的相互作用と確率的な大域相互作用を別々に扱うのではなく，tropical 差分化及び確率関数を用いて力学モデル (1) を一括で超離散化し，導出された確率超離散方程式の性質を議論する．特に，確率超離散方程式が確率セルオートマトンとして，双安定素子集団の時空パターンを再現できることを述べる．この時，これまでの研究で得られている model A, B, C, と異なり，非対称局所的相互作用が状態に作用する時刻 n' を導入することなく，適切な CA パターンが得られることを示す．また，確率超離散方程式と同値な確率 CA モデルを考察し，そのダイナミクスがこれまでの CA model の中で model B のダイナミクスに数学的に同じであることを示す．

具体的な発表の流れとして，まず，力学モデル (1) を超離散化することで，以下の確率超離散方程式が得られることを示す．

$$U_j^{n+1} = \begin{cases} \max(\Gamma + 2X_j^n, A + B + \Gamma) \\ -\max(2X_j^n + \Gamma - A, B + \Gamma) \\ \qquad\qquad \text{w. p. } \bar{U}^n - c \\ \max(\Gamma + 2X_j^n, A + B + \Gamma) \\ -\max(2X_j^n, B + \Gamma) \\ \qquad\qquad \text{w. p. } 1 - (\bar{U}^n - c) \end{cases} \tag{5}$$

ここで，X_j^n は (4) で与えており，各パラメータは (3) と同じ条件である．図 1 は，確率超離散方程式 (5) から形成される CA パターンである．ただし，黒を Γ，白を A としている．本発表では，この確率超離散方程式 (5) の CA パターン (図 1) が，これまで得られている CA model の CA パターンと統計的に同値である事をフラクタル物理の観点から述べる．

また，(5) は，以下の確率 CA モデルと同値であることを示す：もし，$U_j^n = U_{j+1}^n = U_{j-1}^n = A$ ならば，$U_j^{n+1} \equiv A$．それ以外の時，

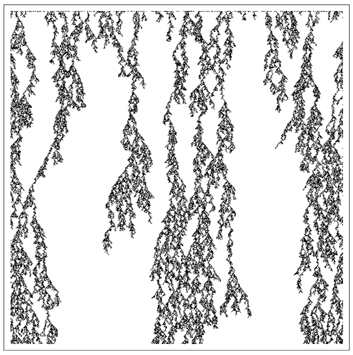


図 1. 確率超離散方程式 (5) の CA パターン．$c = -0.10$，$N = 512{,}512$ time step

$$U_j^{n+1} = \begin{cases} A & \text{w.p. } \bar{U}^n - c \\ \Gamma & \text{w.p. } 1 - (\bar{U}^n - c) \end{cases} \tag{6}$$

この確率 CA モデル (6) と，これまで得られている CA model A, B, C との関係性を議論し，特に，確率 CA モデル (6) と model B が数学的に同じダイナミクスをもつことを示す．

参考文献

[1] Y. Yamazaki, Prog. Theor. Phys. **125** 641 (2011).

[2] Y. Yamazaki and A. Toda, Physica D. **214**, 110 (2006).

[3] Y. Yamazaki, K. Yamamoto, D. Kadono and A. Toda, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 043002 (2012).

[4] M. Murata, J. Differ. Equations Appl. **19**, 1008 (2013).

[5] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira and J. Satsuma, Phys. Rev. Lett. **76**, 3247 (1996).

[6] S. Ohmori and Y. Yamazaki, Prog. Theor. Exp. Phys. 08A01 (2014).

[7] S. Ohmori and Y. Yamazaki, Advance in Science, Technology and Enviromentology, Special Issue on New Challenges in Complex Systems Science(NCCSS), Vol. B11 157 (2015).

カオス尺度の拡張とその効果について

井上　啓 [1], 真尾朋行 [2,3], 奥富秀俊 [2], 梅野　健 [3]
[1] 山陽小野田市立山口東京理科大学，[2] 京都大学大学院, [3] 東芝情報システム株式会社
e-mail : kinoue@rs.socu.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．

一方，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 [1]．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直接計算可能である．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が行われ，最近では，カオス尺度を拡張することによって，1 次元カオス写像に対しては，ある典型的な条件の下で，カオス尺度がリアプノフ指数と一致することが解析的に示されている [3]．

本稿では，文献 [4] に基づいて，多次元においてカオス尺度を拡張し，ある典型的な条件の下で，拡張されたカオス尺度 (拡張型カオス尺度) の極限が全リアプノフ指数の総和と一致することを紹介する．また，本発表では，拡張型カオス尺度の計算において，計算精度を維持したまま計算量を減少させるアルゴリズムについても紹介する．

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 n の確率分布 $\left(p_{i,A}^{(n)}(M)\right)$ と時刻 n と $n+1$ の同時確率分布 $\left(p_{i,j,A}^{(n,n+1)}(M)\right)$ を

$$p_{i,A}^{(n)}(M) = \frac{1}{M}\sum_{k=n}^{n+M-1} 1_{A_i}(x_k),$$

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

で与える．ここで，1_A は定義関数である．

このとき，軌道 $\{x_n\}$ のカオス尺度 D は以下で定義される [1]．

$$D^{(M,n)}(A,f) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{(n)}(M)\log\frac{p_{i,A}^{(n)}(M)}{p_{i,j,A}^{(n,n+1)}(M)} \quad (1)$$

なお，カオス尺度 D が時刻 n 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　カオス尺度の拡張

本節では，カオス尺度の拡張を考える [4]．

$$I = \prod_{k=1}^{d}[a_k,b_k] \subset \mathbf{R}^d,\ \ \mathbf{x} = (x_1,\ldots,x_d)^t$$
$$f(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}),\ldots,f_d(\mathbf{x}))^t,$$

とし，I の有限分割 $\{A_i\}$ を

$$I = \bigcup_{i=0}^{L^d-1} A_i,\quad A_i = A_{(i_1\cdots i_d)_L} = \prod_{k=1}^{d} A_{i_k}^{(k)},$$
$$i_k = 0,1,\ldots,L-1$$

とする (ただし，$A_{i_k}^{(k)}$ の定義については，文献 [4] を参照)．さらに，分割要素 A_i に対して，分割要素 A_j を $(S_{i,j})^d$ 個の小分割 $\left\{B_l^{(i,j)}\right\}_{0\le l\le (S_{i,j})^d-1}$ に等分割することを考える．

すなわち，

$$A_j = A_{(j_1\cdots j_d)_L} = \bigcup_{l=0}^{(S_{i,j})^d-1} B_l^{(i,j)},$$

$$B_l^{(i,j)} = B_{(l_1\cdots l_d)_{S_{i,j}}}^{(i,j)} = \prod_{k=1}^{d} B_{l_k}^{(i,j,k)}$$

とする (ただし，$B_{l_k}^{(i,j,k)}$ の定義については，文献 [4] を参照)．いま，$B_l^{(i,j)}$ に対して，関数 $g_{i,j}$ を以下で定義する．

$$g_{i,j}\left(B_l^{(i,j)}\right) \equiv \begin{cases} 1 & (B_l^{(i,j)} \cap f(A_i) \neq \emptyset) \\ 0 & (B_l^{(i,j)} \cap f(A_i) = \emptyset) \end{cases}$$

分割要素 A_i, A_j $(i \neq j)$ に対して，関数 $R(S_{i,j})$ を関数 $g_{i,j}$ によって

$$R(S_{i,j}) \equiv \frac{\sum_{l=0}^{(S_{i,j})^d-1} g_{i,j}\left(B_l^{(i,j)}\right)}{(S_{i,j})^d} \qquad (2)$$

で与える．

このとき，拡張型カオス尺度 $D_S^{(M,n)}(A,f)$ は以下で定義される [4]．

定義 1

$$\begin{aligned} & D_S^{(M,n)}(A,f) \\ = & \sum_{i=0}^{L^d-1} p_{i,A}^{(n)}(M) \times \\ & \left(\sum_{j=0}^{L^d-1} p_A^{(n)}(j|i)(M) \log \frac{R(S_{i,j})}{p_A^{(n)}(j|i)(M)}\right) \end{aligned}$$

ただし，$S = (S_{i,j})_{0\leq i,j\leq L^d-1}$ である．

それでは，拡張型カオス尺度とリアプノフ指数との関係について考える．いま，任意の $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)^t$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_d)^t \in A_i$ に対して，

$$\widehat{J}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \left(\frac{f_i(\mathbf{x}) - f_i(\mathbf{y})}{x_j - y_j}\right)_{1\leq i,j\leq d}$$

を考える．

このとき，$r_k(\mathbf{x},\mathbf{y})$ $(k = 1, 2, \ldots, d)$ を $\sqrt{\widehat{J}^t(\mathbf{x},\mathbf{y})\widehat{J}(\mathbf{x},\mathbf{y})}$ の固有値とし，以下の仮定をおく [4]．

仮定 2 十分大きな自然数 L, M に対して，以下の条件を満足する．

(1) 任意の分割要素 A_i $(i = 0, 1, \ldots, L^d-1)$ において，点 $\mathbf{x}$ は一様に分布している．

(2) 任意の分割要素 A_i $(i = 0, 1, \ldots, L^d-1)$ において，$r_k(\mathbf{x},\mathbf{y}) = r_k^{(i)}$(一定) であり，少なくとも一つの j に対して，$r_j(\mathbf{x},\mathbf{y}) \geq 1$．

このとき，以下の定理が成立する [4]．

定理 3 任意の分割要素 A_i $(i = 0, 1, \ldots, L^d - 1)$ に対して，仮定 *2* を満足するとする．このとき，以下の等式が成立する．

$$\lim_{S\to\infty} \lim_{L\to\infty} \lim_{M\to\infty} D_S^{(M,m)}(A,f) = \sum_{k=1}^{d} \lambda_k$$

ただし，

$$S \to \infty \Leftrightarrow S_{i,j} \to \infty \ (i,j = 0, 1, \ldots, L^d-1)$$

であり，$\{\lambda_1, \ldots, \lambda_d\}$ は写像 f のリアプノフスペクトラムである．

4 おわりに

本稿では，文献 [4] に基づいて，多次元のカオス写像に対して，写像点数及び分割数を無限とすることによって，典型的なある条件の下で，拡張型カオス尺度が全リアプノフ指数の総和と一致することを紹介した．なお，本発表では，写像点数及び分割数が有限個であるという条件を考慮した下で拡張型カオス尺度を計算するため方法及び典型的な 2 次元カオス写像に対する計算結果を紹介したいと考えている．

参考文献

[1] M.Ohya, Complexities and their applications to characterization of chaos, Int. J. Theor. Phys., **37**, No.1, 495–505, 1998.

[2] K. Inoue, M. Ohya and K. Sato, Application of chaos degree to some dynamical systems, Chaos, Solitons and Fractals, **11**, 1377-1385, 2000.

[3] T. Mao, H. Okutomi and K. Umeno, Investigation of the difference between chaos degree and Lyapunov exponent for asymmetric tent maps, JSIAM Letters, to be published.

[4] K. Inoue, T. Mao, H. Okutomi and K. Umeno, An extension of the entropic chaos degree and its positive effect, submitted.

カオス力学系によるエントロピーの変換公式とその相互情報量について

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

多対 1 写像によって与えられるカオス力学系によって変換される情報エントロピーの変換とその変換に伴う情報の流れについて考察する。

2　カオス力学系の逆確率

エルゴード性を持つ写像力学系 (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＝フロベーニウス方程式であり、本考察の全ての基礎となる。これに、ベイズ理論的な解釈を初めて与えたのが [1] の結果であり、カオス力学系に対して、与えた逆確率 $p(X|Y)$ が、

$$p(X|Y) = \frac{p(X)}{q(Y)\left|\frac{dF(X)}{dX}\right|} \tag{2}$$

と与えられることを示した。ここで、$p(X|Y)$ は、データ Y を得た時, その原因 (初期値) が X である確率でベイズ理論の逆確率とする。本稿では多対 1 の写像 F を考えるので、ある Y に対して、複数のプレイメージ X があるので逆確率が定義できる。

3　逆確率のエントロピー

逆確率のエントロピー関数 $S(Y)$ は、以下で与えられる。

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

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、

$$h \equiv H(X|Y) = \int_M S(Y)q(Y)dY \tag{4}$$

となる。但し、 式 (2), (3) から $S(Y)$ は

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

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。

$$h = H(X|Y) = A + B + C, \tag{5}$$

但し

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

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

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

となる。

4　カオス力学系による積分の変換公式

X から $Y = F(X)$ への変数変換に伴って確率測度が $p(X)dX$ から $q(Y)dY$ へ変化するが、次の関係が成立する。

$$\sum_{X \in F^{-1}(Y)} Q(X)p(X)dX = Q(Y)q(Y)dY$$

よって、両辺を M 上で積分すると、$Y = F(X)$ の変換に伴って、以下の定理が成立する。

Theorem 1

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

この **Theorem 1** を使うと前節の A, B, C のそれぞれが、

$$A = \int_M \ln \left| \frac{dF(Y)}{dY} \right| q(Y)dY \equiv \Lambda_q[Y]$$

$$B = -\int_M \ln[p(Y)] \cdot q(Y)dY$$

$$C = \int_M \ln[q(Y)] \cdot q(Y)dY$$

と書ける。よってカオス力学系の逆確率の情報エントロピー h に関して、以下の情報保存則 [1] が成立する。

Theorem 2

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

ここで, $D(q\|p)$ は以下の式で定義される KL 情報量であり、$\Lambda_q[Y]$ はデータ Y のリアプノフ指数である。

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

5 相互情報量と情報の時間の矢

$H(X), H(Y)$ 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 [1]

Theorem 3

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

が成立する。**Theorem 3** から 2 対 1 写像の**一般化ブール変換 (可解カオス)**$F(X) = \alpha(X - \frac{1}{X})$ $(0 < \alpha \leq 1)$ で相互情報量 R を最大にするのは、[2] の解析でリアプノフ指数が 0 であるオリジナルのブール変換 $\alpha = 1$ であることが分かる。決定論の場合、$H(Y|X) = 0$ となり、$X \to Y = F(X)$ の情報伝搬における以下の情報保存則 [1] が成立する。

Theorem 4

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

ここでは更に、力学系 $Y = F(X)$ によって変換され得られる系列 $X_0, X_1, \ldots, X_n$ に対して情報エントロピーを考えると、n 本の等式

$$H(X_0) + H(X_1|X_0) = H(X_1) + H(X_0|X_1),$$

$$\ldots,$$

$$H(X_{n-1}) + H(X_n|X_{n-1}) = H(X_n) + H(X_{n-1}|X_n)$$

が成立する．但し, $H(X_i|X_{i-1})$ は、$F(X_{i-1})$ にノイズ N_{i-1} を加えて X_i にする時のノイズ N_{i-1} の情報エントロピー $H(N_i)$ とする。すると、この n 本の等式を全て足すと、**Theorem 4** から以下の公式 (定理) が得られる。

Theorem 5

$$H(X_0) + \sum_{i=0}^{n-1} H(N_i) = H(X_n) + \sum_{i=0}^{n-1} \Lambda[X_i] + \sum_{i=0}^{n-1} D(p_{X_{i+1}} \| p_{X_i})$$

ここで、$n \to \infty$ の極限で確率測度は不変測度に近づくので (力学系の混合性を仮定)、

$$\lim_{i \to \infty} D(p_{X_{i+1}} \| p_{X_i}) = 0 \qquad (6)$$

である。この **Theorem 5(情報量とカオス性との一般関係式)** は完全に決定論的、つまり $H(N_i) = 0$ でカオスである場合には、有限の時間 n で X_n の情報エントロピー $H(X_n)$ が 0 となる。ブラックホール情報パラドックスは弦理論のホログラフィック原理により解決されることが示されているが、弦理論の枠組みを用いなくとも、情報が消えたことはカオス性の時間積分によって消えることで理解できる。つまり、ブラックホールの初期情報のエントロピー $H(X_0)$ が全て、カオス性 $\Lambda(>0)$ の時間積分によって吸収されたと考えると、辻褄が合うのである。今、リアプノフ指数 λ とノイズのエントロピー $H(N_i)$ の長時間平均 h_N とすると、**Theorem 5** と式 (6) から以下の定理が成立する。

Theorem 6

$$\lim_{n \to \infty} [H(X_n) - H(X_0)]/n = h_N - \lambda \quad a.e.$$

この定理の証明は、**Theorem 5** の等式を n で割り、$n \to \infty$ の極限を取ることによって得られる。h_Nーλ の正負が情報の時間の矢を決める。

参考文献

[1] 梅野健, 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 , 日本応用数理学会年会 (2018 年)

[2] K. Umeno and K. Okubo, "Exact Lyapunov exponents of the generalized Boole transformations", *Prog. Theor. Exp. Phys.* Vol. 2016, 021A01 (2016), 1–10.

心拍間隔（RRI）データからの力学系のアトラクタ再構成の試み

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]．

人体は自律神経系による制御によって恒常性が維持されている．心臓も自律神経の支配を受けて制御される臓器の一つであり，交感神経が心拍を促進する作用を，副交感神経が心拍を抑制する作用をそれぞれ心臓に及ぼすことにより，心臓の一拍ごとの時間間隔（心拍間隔，R-R interval : RRI）は一定ではなく変動・ゆらぎが生じる．この現象を心拍変動といい，自律神経の活動状態を定量化する手法として心拍変動解析が知られている．

いっぽう最近の研究で，てんかん発作時の典型的な脳波データから時間遅れ座標系への埋め込みを用いてアトラクタを再構成し，サークルマップ型の 1 次元力学系として理解する取り組みについて報告がある [3][4]．てんかん発作時の脳波データの特徴である，周波数スペクトルが $1/f$ 型で一部周波数に特徴的なピークが見られる点，およびリターンマップ上で楕円状の軌道を描く点が心拍間隔（RRI）データと類似する（図 1，図 2）ことから，同手法を RRI データに適用することにより，心拍変動の新たな理解に繋がる可能性がある．本研究では，状態が明確に異なる座位と立位の心拍間隔（RRI）データから時間遅れ座標系への埋め込みを用いてアトラクタの再構成を試み，特徴を比較する．

2　方法

てんかん発作時の脳波データから 1 次元力学系のアトラクタを再構成する手順の概略を図 3 に示す．まずデータの 1 階差分をとり，時間遅れ 1 の遅延座標系に埋め込む．さらに，極座標に変換した角度成分の系列を抽出し，遅延座標系への埋め込みを行う．

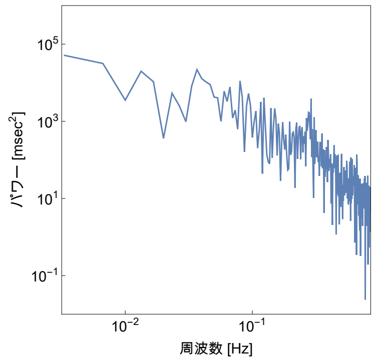


図 1. 心拍間隔（RRI）データのスペクトルの典型例（両対数プロット）

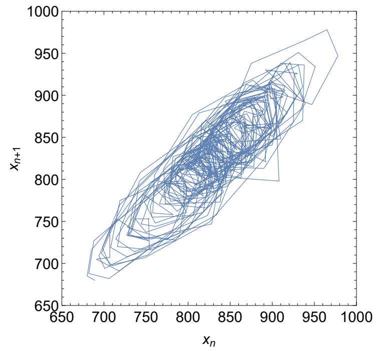


図 2. 心拍間隔（RRI）データのリターンマップの典型例

本稿では，上記と同様の手順でデータの 1 階差分をとらない場合の手順を心拍間隔（RRI）データに適用することにより，アトラクタの再構成を試みた結果を紹介する．なお，極座標に変換する際の原点の位置はデータの平均値により定めた．

3　結果

2 名の被験者について，座位（副交感神経が優位な状態）および立位（交感神経が優位な状態）において測定した心拍間隔データを用いてアトラクタの再構成を行った例を図 4 および図 5 に示す．

両被験者とも，座位・立位いずれの状態においても，図に示すような特徴的な角度成分の時系列およびリターンマップが得られた．

角度成分の時系列には間欠的な振る舞いが見られた．また，座位と立位とを比較すると，一定値付近に滞留する相において立位の方がより

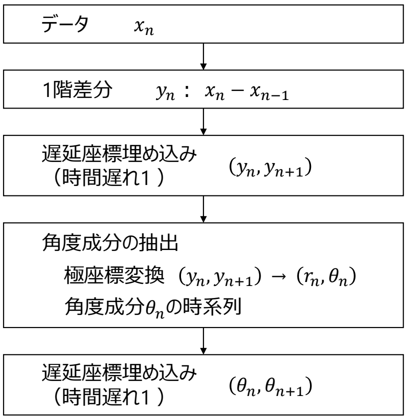


図 3. てんかん発作時の脳波データからのアトラクタ再構成手順

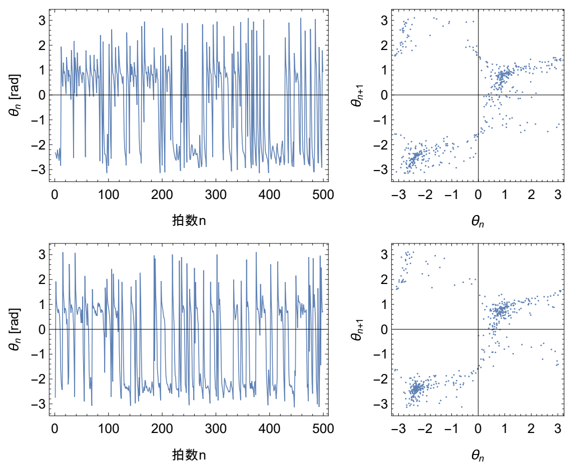


図 4. 被験者 1 の座位での心拍間隔（RRI）データから抽出した角度成分の時系列（上段左）と遅延座標系への埋め込み（上段右），および立位での心拍間隔（RRI）データから抽出した角度成分の時系列（下段左）と遅延座標系への埋め込み（下段右）

狭い範囲に滞留し，座位の場合の方がより広い範囲にばらつく傾向が両方の被験者に共通して見られた．

さらに，それぞれの角度成分時系列のカオス尺度を計算すると表 1 となり，いずれも座位の場合が大きい結果となった．カオス尺度の計算における分割数は 20 とした．

表 1. 角度成分時系列のカオス尺度

	座位	立位
被験者 1	1.507	1.385
被験者 2	1.626	1.382

4　まとめ

てんかん発作時の脳波データからの力学系アトラクタ再構成と同様の方法を心拍間隔（RRI）

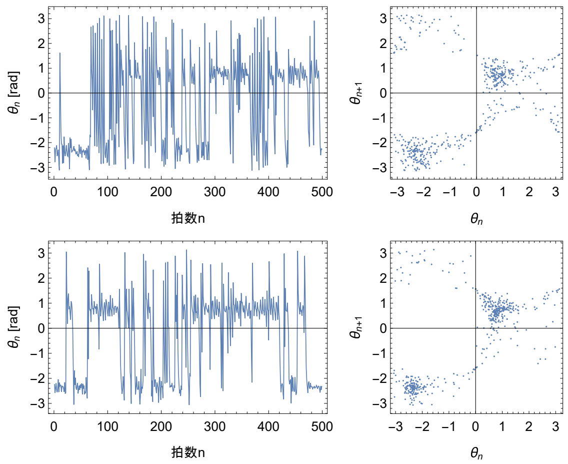


図 5. 被験者 2 の座位での心拍間隔（RRI）データから抽出した角度成分の時系列（上段左）と遅延座標系への埋め込み（上段右），および立位での心拍間隔（RRI）データから抽出した角度成分の時系列（下段左）と遅延座標系への埋め込み（下段右）

データに用いたところ，特徴的な角度成分の時系列およびリターンマップが得られた．異なる被験者や状態においても特徴が大きく変わらないことから，心拍変動を生じさせる普遍的なダイナミクスを反映している可能性がある．また，座位と立位での変動の様子やカオス性という点での違いに着目すれば，個人差の影響が少ない生理状態の判別方法への応用が期待できる．

心拍変動（RRI）データから得られる角度成分の振る舞いについて，より多くの被験者について日常生活の様々な状態にわたって特徴を調査するとともに，実際の心拍変動の発生機序との関連を調査しモデル化することが今後の課題である．

参考文献

[1] 真尾朋行，奥富秀俊，“心拍間隔のカオス尺度による分析”，JSIAM 第 12 回研究部会連合発表会 応用カオス (1)-2，2016.

[2] 真尾朋行，奥富秀俊，“心拍間隔データのカオス尺度と自律神経活動の関連について”，JSIAM 2016 年会 応用カオス (2)-1，2016.

[3] 行木孝夫，“高周波振動と非線形時系列解析”，てんかんの数学的研究，2019.

[4] 行木孝夫，田所智，津田一郎，國枝武治，松橋眞生，松本理器，池田昭夫，“てんかん脳波データと非線形時系列解析”，京都大学数理解析研究所講究録，2115-15，2019.

Sturm-Liouville 型微分方程式からできる直交関数系をカオスの観点から見る

杉本　哲 [1], 梅野　健 [2]
[1,2] 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.jp[1]
e-mail：umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp[2]

1　概要

今年の 3 月に実施された日本応用数理学会で筆者は Legendre 多項式などの具体的な直交関数系の系列に関して混合性が成り立つかどうか発表した. さらに, 相関と初期値鋭敏性を鞍点法という近似手法を用いて計算し, 数値計算の結果と一致することを示した. 一方, こうした直交関数系は Sturm-Liouville 型微分方程式の解として登場するものである. 今回は Sturm-Liouville 型微分方程式からできる一般直交関数系の相関や初期値鋭敏性について述べる. 相関・初期値鋭敏性も数式として整理できるが, 定理と言える状態でなく、さらなる整備が必要である。

2　事実・先行研究

(Sturm-Liouville 型微分方程式 [3])
区間 $[a,b]$ で与えられた微分方程式 (a,b は $\infty, -\infty$ でもよく, その時は $[0,\infty)$ のように自然に拡張する)

$$\frac{d}{dx}\left((x-a)(b-x)w(x)\frac{dy(x)}{dx}\right)+\lambda w(x)y(x)=0$$

を Sturm-Liouville 型微分方程式という. ただし,$a,b=\pm\infty$ のときはそれぞれ $x-a$ や $b-x$ を 1 とみなす. 表 1 代表的な直交多項式の例を挙げる. ただし $p(x)\equiv(x-a)(b-x)w(x)$ とする.

直交多項式	区間	$p(x)$	$w(x)$
Legendre	$[-1,1]$	$1-x^2$	1
Hermite	$(-\infty,\infty)$	e^{-x^2}	e^{-x^2}
Chebyshev	$[-1,1]$	$\sqrt{1-x^2}$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
Laugerre	$[0,\infty)$	$e^{-x}x^{\alpha+1}$	$e^{-x}x^{\alpha}$

表 1. 代表的な直交関数系とその性質

前回の発表では Legendre 多項式など具体的な直交関数系の相関や初期値鋭敏性しか議論していなかったが, これを Sturm-Liouville 型微分方程式のなす直交関数系に対しての拡張を試みる.

[7] によると,Hilbert 空間 $H_k\equiv L^2(p^k)$ と定義し, 作用素

$$D_k : H_k\to H_{k+1} \qquad D_k^* : H_{k+1}\to H_k$$

について,$D_k=\frac{d}{dx}, D_k^*=\frac{1}{p^k}\frac{d}{dx}p^{k+1}$ とすると,Sturm-Liouville 型微分方程式のなす直交関数系 $\{f_n\}_{n>=0}$ について,

$$f_k = D_0^*D_1^*\dots D_{k-2}^*D_{k-1}^*1=(-1)^n\left(\frac{d}{dx}\right)^n p^n$$

となる. これは Rodrigues の公式として知られる. 他にも様々な性質が知られているが、ここでは割愛する。

3　研究成果

これをもとに, 系列の相関

$$\epsilon_n=\left|\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}(\Delta F(x))(\Delta F(x'))\right|$$

を考える。今回は $n\to\infty$ にした時に相関が存在するときの極限に着目する。ただし,

- $F_i(x)=c_if_i(x)$(c_i は $(n!)^{-\frac{3}{2}}$ など, 級数が収束するようにとる.)
- $\Delta F_i(x)=\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1}(F_i(x)-F_j(x))$

とする. 以下これを変形していく.

$$\epsilon_n=\left|\frac{\sum_{k=0}^{n-1}\big(F_i(x)F_i(x')\big)}{n}-\frac{\sum_{i=0}^{n-1}F_i(x)}{n}\frac{\sum_{i=0}^{n-1}F_i(x')}{n}\right|$$

であるが,

$$F_n(x)=\frac{c_nn!}{2\pi i}\oint_C\frac{(-p(\zeta))^nd\zeta}{(\zeta-x)^{n+1}}$$

より,(C は適当な積分経路とする.)

$$\sum_{k=0}^{n-1} F_k(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{c_k k!}{2\pi i} \oint_C \frac{\left(\frac{p(\zeta)}{x-\zeta}\right)^k}{\zeta - x} d\zeta$$

以下簡単のため $c_n = n!^{-1}$ とすると,

$$\sum_{k=0}^{n-1} F_k(x) \longrightarrow \oint_C \frac{d\zeta}{\zeta - x + p(\zeta)} (n \longrightarrow \infty)$$

となる. $\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (F(x)F(x'))$ も同様に計算していくと,

$$-\frac{1}{4\pi^2} \oint_C \oint_C \frac{d\zeta_1 d\zeta_2}{(\zeta_1 - x)(\zeta_2 - x) + a(\zeta_1)a(\zeta_2)}$$

となる.

つぎに,([4]) に基づき, 関数の系列 $\{F_n\}_{n\geq 0}$ の初期値依存性を, $\delta_n = |F_n(x) - F_n(x')|$ の n におけるオーダーと定義し、これを調べる. これは一般によく用いられる初期値鋭敏性の定義

$$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{\ln |f_n(x) - f_n(x')|}{n}$$

を拡張したものといえる.Rodrigue の公式を代入すると,(以下 $c_n > 0$ とする.)

$$\delta_n = c_n \left| \frac{d^n p^n}{dx^n}(x) - \frac{d^n p^n}{dx^n}(x') \right|$$

である. これも相関の計算と同様に複素積分を用いると,$|x - x'|$ が十分小さい時は,

$$\delta_n = \left| \frac{c_n n!}{2\pi i} \oint_C p^n(\zeta) \left(\frac{1}{(\zeta - x)^{n+1}} - \frac{1}{(\zeta - x')^{n+1}} \right) d\zeta \right|$$

となる.

4 今後の課題

今回は解析的な相関の導出を試みた. 一般的にどう書けるかは示したが, 先行研究 [7] にある演算子を用いてより簡潔に書く方法はまだよくわかっていない. また, 今回導出した式は数学的に厳密でなく, 定理として厳密に記述できるようにすることも今後の課題である.

5 混合性の結果について (修正結果)

[8] で次の定理の証明を記した。

「Legendre 多項式を正規化した系列 $P'_n(z) = \left\{\sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(z)\right\}_{n=1,2...}$ は混合性を持つ。」

しかし、その証明で用いた変換が測度を保存せず、誤りであることが解ったので、本予稿にて修正する。現時点で混合性をもたせるような系列の変換は Chebyshev 多項式と第 2 種 Chebyshev 多項式以外みつかっていないが、おそらくないと思われる。そうした変換がないことを示すのは今後の課題といえる。のちに鞍点法による近似や数値実験を用いて分かった結果は表 2 の通りである。

直交関数系の系列	相関	初期値鋭敏性 λ
Legendre	$O(\frac{1}{n})$	なし
Hermite	発散	あり ($\lambda = 2$)
Chebyshev	$O(\frac{1}{n})$	なし
第 2 種 Chebyshev	$O(\frac{1}{n})$	なし
Laugerre	発散	あり $\left(\lambda = \frac{2}{3}\right)$

表 2. 各直交関数系の相関と初期値鋭敏性

参考文献

[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] 後藤 憲一, 山本 邦夫, 神吉 健,“詳解物理応用数学演習,” 共立出版,2007 年発行.

[4] C.Skokos,“The Lyapunov Characteristic Exponents and their computation,” hep-th:0811.0882v2.

[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)

[7] 重川一郎,1 次元拡散過程とスペクトル (2018 年 6 月 4 日 (月)〜 8 日 (金) 岡山大学理学部における講義ノートである.)

[8] 杉本哲, 力学系の混合性の電磁気学への応用, 日本応用数理学会 2018 年度年会, 応用カオス（2017）

置換トリチウムのベータ崩壊によるポリエチレンの構造変化の粗視化分子動力学シミュレーション

LI HAOLUN[1]，藤原 進[1]，中村 浩章[2,3]，水口　朋子[1]
[1]京工繊大院工芸，[2]核融合研，[3]名大院工
e-mail：m8672034@edu.kit.ac.jp

1　概要

2011年、地震と津波の影響により、福島第一原子力発電所で原子力事故が発生した。この事故においてトリチウムを含む大量のトリチウム水の処理が問題となった。トリチウム(tritium, T, or ^{3}H)は水素の同位体の一種であり、ベータ崩壊によりヘリウム3に壊変する。高分子材料がトリチウム水にさらされると、高分子材料において水素からトリチウムへの置換反応が起こる。更に、トリチウムのベータ崩壊により、高分子材料に損傷を与える。この損傷のメカニズムはまだ未解明のままである。本研究では、高分子を構成する置換トリチウムのヘリウム３への壊変に伴う高分子の構造変化を粗視化分子動力学（MD）シミュレーションにより明らかにする。具体的には、一本のポリエチレン鎖を対象として、折り畳まれた秩序構造からランダムに水素を取り除き、粗視化力場を用いたMDシミュレーションを行い、昇温による構造変化過程におけるポテンシャルエネルギーや大域的配向秩序パラメーターなどを解析した。

2　モデルと方法

直線状に連結した2998個のメチレン基(CH_2)の両端にメチル基（CH_3）が繋がったポリエチレン鎖をモデルとした。前回のシミュレーションはoriginal DREIDING力場[1]を用いたが、今回は、Hagita[2]のシミュレーション結果に基づき、より精度が良いmodified DREIDING力場を用いた。メチレン基およびメチル基は1つの粒子（united atom）として扱い、それぞれの質量は14 g/molと15 g/molとした。具体的な計算手順は以下の通りである。まず十分に大きい真空ボックス中で一本のポリエチレン鎖を800 Kから100 Kまで冷却し、折り畳まれた配向秩序構造の形成を確認した。次に、置換トリチウムが壊変したポリエチレンモデルを作るために、配向秩序構造の折り畳み鎖結晶から、一定の比率でランダムに水素を取り除いた。つまり、ポリエチレンモデルでのメチレン基（CH_2）をメチン基（CH、質量は13 g/molとした）に置き換えた。全炭素数に対する取り除いた水素数の比(f_H)はf_H =0, 0.001, 0.01, 0.1とした（取り除いた水素数はそれぞれ0, 3, 30, 300である）。その後、100 Kから200 Kまで、5 K/nsの昇温速度で段階的なMDシミュレーションを各温度で1,000,000ステップ(1ns)ずつ実行した。続いて、200 Kから400 Kまで、より遅い2 K/nsの速度で段階的に昇温して、MDシミュレーションを各温度で1,000,000ステップ(1ns)ずつ実行し、構造変化過程を解析した。そして、再度100 Kのポリエチレン鎖結晶からランダムに水素を取り除き、同様のMDシミュレーションを合計5回起った。全てのMDシミュレーションはLAMMPS[3,4]を用いて行った。

3　結果

Modified DREIDING力場を用いたMDシミュレーションにおいて、昇温速度2 K/nsでの200 Kから400 Kまでの昇温過程の結果は以下の通りである。図1はポテンシャルエネルギーの温度変化のグラフである。図1より、昇温と共に、ポテンシャルエネルギーも大きくになることが分かった。そして、325 Kから350 Kの間で曲線の傾きが急激に増加することが分かった。これは、325 Kから350 Kの間で構造変化が起こったことを示している。

大域的配向秩序パラメータ P_2の温度変化を図2に示す。P_2は、一本の高分子鎖の配向秩序度を示す。高分子鎖が直線形である場合P_2=1、高分子鎖がランダムな無配向構造である場合P_2=0である。図2より、折り畳み結晶の場合、P_2は0.5程度の値をとることが分かる。また、図2から、温度の上昇とともに、高分子が配向秩序構造から、ランダムな無配向構造へ変化したことが分かる。更に、今回のシミュレーション結果により、ポリエチレン構造変化の温度範囲は325 K～350 Kであることも分かった。現実のポリエチレンの平衡融点は約414 Kである

が、真空中の一本鎖の場合、融点が下がると予想されるので、modified DREIDING 力場の結果は妥当なものと言える。

シミュレーション結果の詳細については、発表の時に報告する予定である。

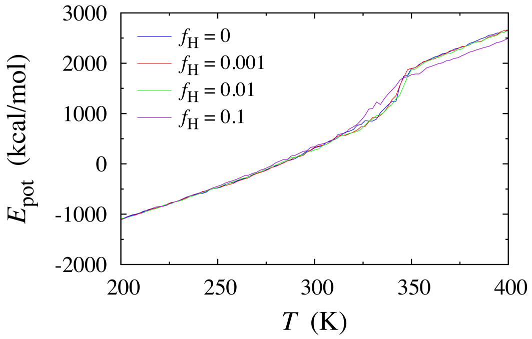


図 1. 各 f_H 値に対するポテンシャルエネルギーの温度依存性

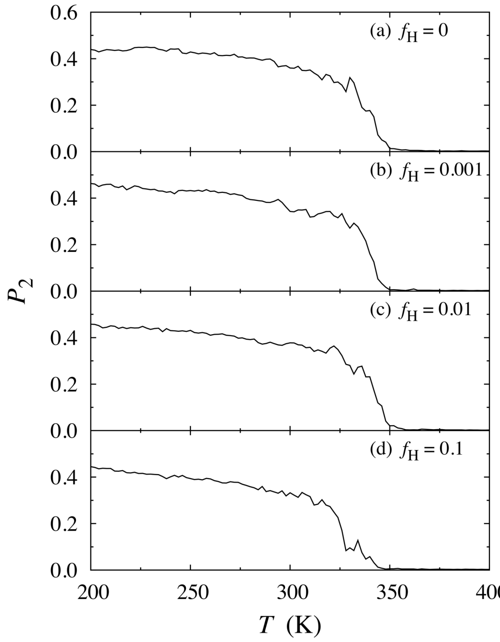


図 2. 各 f_H 値に対する大域的配向秩序パラメータ P_2 の温度依存性

参考文献

[1] S. L. Mayo, B. D. Olafson, and W. A. Goddard III, DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations, J. Phys. Chem., 94 (1990), 8897-8909.

[2] K. Hagita, S. Fujiwara, and N. Iwaoka, Structure formation of a quenched single polyethylene chain with different force fields in united atom molecular dynamics simulations, AIP Advances, 8 (2018), 115108.

[3] https://lammps.sandia.gov/.

[4] S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117 (1995), 1-19.

アモルファス炭素壁への水素入射の分子動力学シミュレーション

澤田 拓弥 [1], 中村 浩章 [1,2], 齋藤 誠紀 [3], 澤田 圭司 [4], 土生 柊 [1]
[1] 名古屋大学，[2] 核融合科学研究所, [3] 山形大学, [4] 信州大学
e-mail : naka-lab@nifs.ac.jp

1 はじめに

核融合炉内で発生した高エネルギーの粒子が壁材料へと衝突することで壁から粒子が放出されることがあり、それによる炉心プラズマの冷却や燃料の希釈化などが問題視されている。そのため、現象の解明のために核融合プラズマ装置のダイバータ板として用いられている炭素材から生じる水素原子・分子の回転・振動準位の分布を調べる必要がある。実験では得ることが困難であるため分子動力学法を用いた定量的なデータが望まれている。本研究ではアモルファス炭素壁をターゲットとして高エネルギーの重水素を入射する分子動力学計算を行い、壁から発生する水素原子・分子の回転・振動準位を得た。

2 分子動力学法

分子動力学法 (molecular dynamics) とは多数の粒子について体積一定、エネルギー一定の条件下でニュートンの運動方程式を数値積分し、力学量の時間平均をとおしてマクロな性質を調べる手法である。質量 m の粒子 i に働く力を $\vec{F_i} = (F_{xi}, F_{yi}, F_{zi})$ とするとニュートンの運動方程式は

$$m_i \frac{d^2\vec{r_i}}{dt^2} = \vec{F_i}, i = 1, 2, ..., N \qquad (1)$$

とあらわされる。ここで N は全粒子数とする。運動方程式は座標 $\vec{r_i}$ と速度 $\vec{v_i}$ について一階の連立微分方程式に分解できる。

$$\begin{cases} \dfrac{d\vec{r_i}}{dt} = \vec{v_i}, \\ \dfrac{d\vec{v_i}}{dt} = \dfrac{\vec{F_i}}{m_i} \end{cases} \qquad (2)$$

ニュートンの後退補間公式で表される補間多項式を非積分関数として代入し積分を実行すると AB 公式と呼ばれる多段階法の差分式を得るこれが開いた積分公式の解法である。閉じた積分では時間 $f_{n+1} \equiv f_n, f_{n-1}, f_{n-r}$ の未知量も用いて同様に積分し交代差分演算を実行すると AM 公式と呼ばれる公式を得ることができる。初期値に AB 公式の 0 次の項を用いてそれを修正した 1 次の項を次の近似解とする。これを繰り返して誤差が指定された判定量以下となるか予め決められた回数だけ繰り返す。これを AB 公式と AM 公式を組み合わせて収束した数値解を得る予測子-修正子法 [1] により各粒子の位置と運動量を更新して時間発展を得る。

3 水素分子の状態解析

多原子分子のシュレディンガー方程式 [2] は以下の形に表される。

$$\Big[-\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\nabla^2_\alpha + U(\vec{R_\alpha})\Big]\psi(\vec{R_\alpha}) = E\psi(\vec{R_\alpha}) \qquad (3)$$

簡単のため ν 個ある核の位置ベクトル
$\vec{R_1}, \vec{R_2}, \ldots, \vec{R_\nu}$ を波動関数では $\vec{R_\alpha}$ で代表させてある。M_α は α 番目の核の質量。
これが二原子分子の場合断熱ポテンシャル $U(R)$ が核間距離 R だけの関数なので重心運動を分離すれば中心力場のなかの粒子の運動と同じ形の問題に帰着する。そのため解は動径関数と角部分の関数の積の形をとり角部分は球面調和関数 $Y(\Theta, \Phi)$ となる。分子軸の方向を極座標 Θ, Φ で表して、求める解の形は

$$\psi(\vec{R}) = R^{-1}\psi_v(R)Y_{JM}(\Theta, \Phi) \qquad (4)$$

である。水素分子の場合に ψ_v の満たす方程式は以下の形となる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_v}{dR^2} + U(R)\psi_v + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{J(J+1)}{R^2}\psi_v = E_{v,j}\psi_v \qquad (5)$$

ここで $U(R)$ には以下に示す $REBO$ ポテンシャル [3] を用いる。この形のシュレディンガー方程式をヌメロフ法 [4] により解を導出する。ただし、ΔR は動径方向のメッシュの感覚である。これにより回転準位 J, 振動準位 v に依存したポテンシャル曲線が求められる。

4 シミュレーション手法

本研究では分子動力学コードを用いて図 1 に青い点で示された炭素原子が 3872 個、白い点

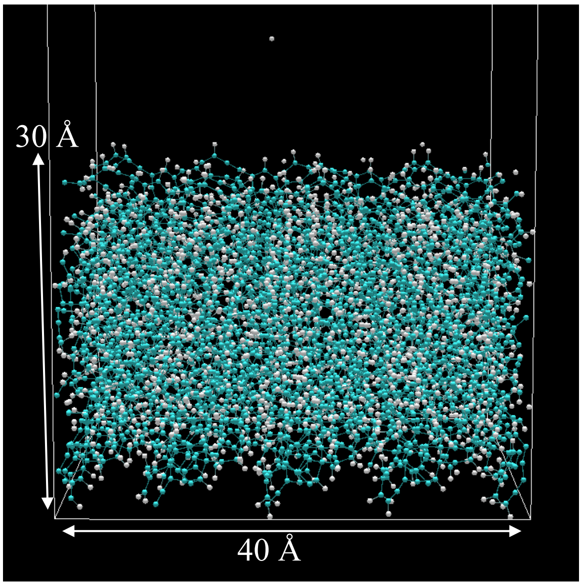


図 1. シミュレーションモデル.

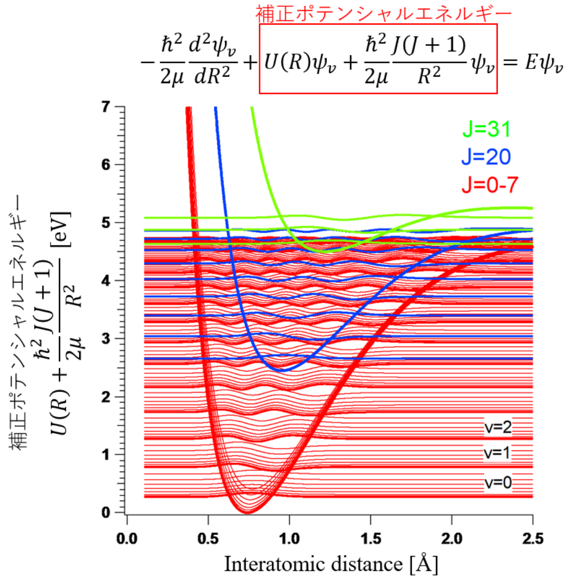


図 2. ポテンシャル曲線.

で示された重水素原子が 2080 個で構成された炭素アモルファス構造に 100 eV のエネルギーを持つ重水素原子 1 個を入射する計算を行う。炭素原子の質量は 12 u、重水素原子の質量は 1.008 u としシミュレーションボックスは横幅 40 Å 奥行 40 Å の周期境界条件とした。ただし、周期境界条件で計算すると現実では起こりえない熱の回り込みによって入射粒子のエネルギーが標的材を過剰に伝達してしまう。そのため、構造内部を分子動力学計算で、構造の外側を熱伝導方程式での計算領域と分割することで対策した。各粒子間に働くポテンシャルエネルギーとして $REBO$ ポテンシャルを用いた。標的材の高さは 30 Å で温度は 300 K であり、タイムステップを 0.01018 fs として $5,000,000$ ステップをエネルギー一定、体積一定の条件下 (NVE) で乱数を変えて 1500 パターンの計算を行った。

5 シミュレーション結果の考察

シミュレーションの計算時間中に標的材の表面から一定距離離れた原子または分子を標的材から飛び出したとみなしてそれらについて解析を行う。図 2 に示すように水素分子の状態はエネルギーと振動準位と回転準位に依存する。分子動力学法は古典力学を基にした計算方法であるため量子論における振動準位や回転準位は与えられていない。そのため、取り出した水素分子の角運動量と並進エネルギーを用いて量子論における回転準位を計算する。回転準位と分子の持つ全エネルギーをポテンシャル曲線と照らし合わせることで振動準位を導出する。その結果を軽水素打ち込みの場合 [5] と今回の重水素打ち込みとで比較検討する。

6 おわりに

本研究で重水素打ち込みの場合の放出分子の回転準位・振動準位を得ることができた。今後は標的材や入射原子の条件を変えた際に放出分子の数と回転準位・振動準位がどう変化するかに着目し、計算回数を増やすことでより統計的なデータを得ることとする。

. . . .

. . . .

参考文献

[1] 上田 顯, 分子シミュレーション-古典系から量子系手法まで-, 裳華房, 2015 年.

[2] 高柳 和夫, 原子分子物理学, 朝倉書店,2000 年

[3] D. W. Brenner, Phys. Rev. B 42, 9458 (1990).

[4] Numerov, Boris Vasil'evich (1927), "Note on the numerical integration of $d^2x/dt^2 = f(x,t)$", Astronomische Nachrichten,230, pp. 359–364

[5] 齋藤 誠紀 他, “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”, 日本応用数理学会年会, 2018

軸対称高温超伝導膜内遮蔽電流密度解析：等価回路法の適用

山口 敬済 [1], 高山 彰優 [2], 神谷 淳 [2], 大谷 寛明 [1,3]
[1] 総合研究大学院大学，[2] 山形大学，[3] 核融合科学研究所
e-mail : yamaguchi.takazumi@nifs.ac.jp

1 はじめに

高温超伝導体（HTS）は様々な分野で応用されている．HTS 装置の開発には遮蔽電流密度解析が必要不可欠である．等価回路モデルを用いると，遮蔽電流密度の時間発展を求める問題は回路方程式の初期値問題に帰着する [1].

近年，ヘリカル型磁場閉じ込め核融合炉のペレット入射法として，超伝導リニア加速（SLA）システムが提案された [2]．SLA システムでは，HTS 膜に作用する電磁力を用いて燃料ペレットを核融合プラズマへ入射する．大雑把な試算によれば，SLA システムは燃料ペレットを 5–10 km/s まで加速できる．しかしながら，実用規模の SLA システムはまだ開発されていないため，加速性能の詳細は不明である．

本研究の目的は，SLA システムの加速性能を調べるために，等価回路モデル・コードを開発することである．さらに，同コードで得た結果を用いて加速性能の向上を図る．

2 等価回路モデル

図 1 に示すように，SLA システムは電磁石とリング型 HTS 膜が取り付けられたペレット・コンテナで構成される．ここで，HTS 膜の内径及び外径，厚みをそれぞれ $R_{\rm in}$ 及び $R_{\rm out}$，b とする．また，電磁石は半径 $R_{\rm c}$，長さ $H_{\rm c}$ の円筒型であり，電磁石中にはコイル電流：

$$I_{\rm coil}(Z,t) = \begin{cases} \alpha t & (0 \le Z \le Z_{\rm limit}) \\ 0 & ({\rm otherwise}) \end{cases} \qquad (1)$$

が流れている．但し，α は電流増加率であり，Z は HTS 膜の z 座標である．また，$0 \le Z \le Z_{\rm limit}$ は加速区間を表す．SLA システムでは，HTS 膜中の遮蔽電流密度と電磁石が生み出す印加磁束密度の間に働く反発力によって，ペレット・コンテナは z 軸正方向に加速される．HTS 膜の形状と印加磁束密度の空間分布が軸対称であれば，遮蔽電流密度の空間分布を n 本の電流ループの集合として近似できる（図 2 参照）．半径 r_i の電流ループ Λ_i は厚み b，幅 Δr_i の矩形断面をもち，その断面には一様に電流 I_i が流れる．

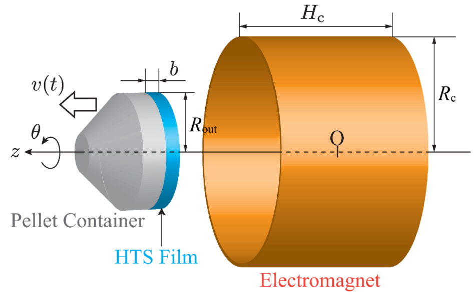


図 1. SLA システムの概念図.

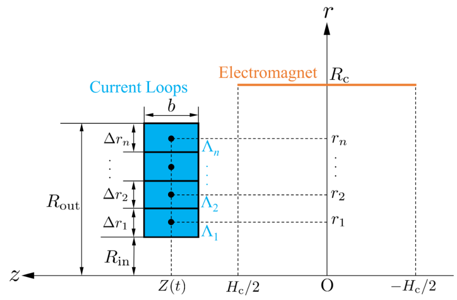


図 2. 等価回路モデルの断面図.

上記仮定の下では，Faraday 則から以下の回路方程式を導くことができる．

$$L\frac{d\boldsymbol{I}}{dt} = -\left[\boldsymbol{M}\frac{dI_{\rm coil}}{dt} + \frac{d\boldsymbol{M}}{dZ}vI_{\rm coil} + \boldsymbol{V}\right] \qquad (2)$$

但し，L 及び $\boldsymbol{M}(Z)$ はインダクタンス行列及び相互インダクタンス・ベクトルである．また，$\boldsymbol{I}$ は遮蔽電流ベクトルであり，$\boldsymbol{V}$ は誘導起電力ベクトルである．さらに，$v\ (\equiv dZ/dt)$ は HTS 膜の速度を表す．Λ_i 中の誘導起電力 V_i を決定するために，本研究ではべき乗則 [3]，$V_i = V_{{\rm C}i}\left(|I_i|/I_{{\rm C}i}\right)^N {\rm sgn}(I_i)$，を採用する．但し，臨界電圧 $V_{{\rm C}i}$ 及び臨界電流 $I_{{\rm C}i}$ はそれぞれ $V_{{\rm C}i} \equiv 2\pi(r_i + \Delta r_i/2)E_{\rm C}$ 及び $I_{{\rm C}i} \equiv j_{\rm C} b \Delta r_i$ で決定できる．ここで，$E_{\rm C}$ と $j_{\rm C}$ はそれぞれ臨界電界と臨界電流密度であり，N は正の整数である．一方，HTS 膜の運動は Newton の運動方程式：

$$m\frac{d^2 Z}{dt^2} = -2\pi \sum_{i=1}^{n} r_i B_r(r_i, Z, t) I_i(t) \qquad (3)$$

によって支配される．但し，m は HTS 膜とペレット・コンテナの総質量であり，$B_r(r,z,t)$ は印加磁束密度の r 成分である．

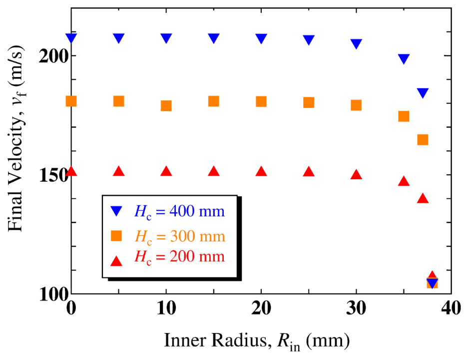


図 3. HTS 膜の内径 R_{in} が終端速度 v_{f} に及ぼす影響.

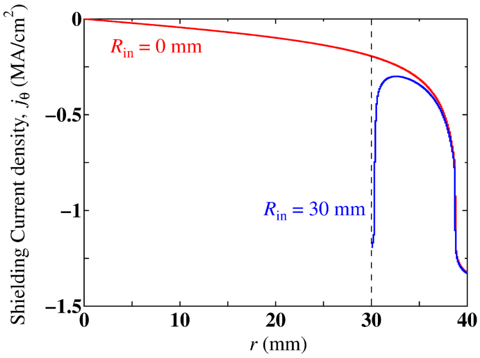


図 4. 遮蔽電流密度の空間分布（$H_{\mathrm{c}} = 400$ mm）.

(2) と (3) の連成方程式の初期値問題を解くことによって，遮蔽電流密度の時間発展とペレット・コンテナの運動を同時に決定できる．本研究では，初期条件として $\boldsymbol{I} = \mathbf{0}, v = 0, Z = Z_0$ at $t = 0$ を課す．但し，Z_0 は HTS 膜の初期位置である．また，初期値問題の数値解法として時間刻み幅自動調節アルゴリズム付き Runge–Kutta 法 [4] を用いる．

3 SLA システムの数値シミュレーション

本節では，等価回路モデル・コードを用いることによって，SLA システムの加速性能の向上を図る．本研究を通して，幾何学的及び物理的パラメタを以下の値に固定する：$R_{\mathrm{c}} = 50$ mm, $\alpha = 20$ kA/ms, $Z_{\mathrm{limit}} = 300$ mm, $R_{\mathrm{out}} = 40$ mm, $b = 1$ mm, $Z_0 = 1$ mm，$E_{\mathrm{C}} = 1$ mV/m, $j_{\mathrm{C}} = 1$ MA/cm^2, $\Delta r_i = 0.1$ mm.

まず，リング型 HTS 膜の内径 R_{in} が加速性能に及ぼす影響を調べる．図 3 に HTS 膜の内径 R_{in} が終端速度 v_{f} に及ぼす影響を示す．同図から明らかなように，内径 R_{in} が 30 mm 以下であれば，内径 R_{in} は終端速度 v_{f} に影響をほとんど及ぼさない．つまり，加速性能を損なうことなく総質量 m を軽くできる．特に，内径 R_{in} が 30 mm の場合，HTS 膜の質量は元の 40% まで削減できる．従って，リング型 HTS 膜を用いれば，加速性能の向上が期待できる．

次に，円板型とリング型の HTS 膜中における遮蔽電流密度の空間分布を調べ，これを図 4 に示す．円板型の場合，遮蔽電流密度分布は縁近傍に局在化する．一方，リング型の場合，遮蔽電流密度分布は外側だけでなく内側の縁近傍にも局在化する．内側の縁近傍に流れる遮蔽電流密度の影響によって，加速性能が保たれるのである．

4 おわりに

本研究では，等価回路モデルを用いて SLA システムの加速性能を調べた．本研究で得られた結論を簡潔に要約すると以下のようになる．リング型の HTS 膜を用いれば，加速性能を保ったまま，HTS 膜の質量を削減することができる．故に，さらなる加速性能の向上が期待できる．あるいは，より多くの燃料ペレットを核融合プラズマへ入射できるだろう．

SLA システムでは，電磁力と HTS 膜の間に働く電磁力を用いてペレット・コンテナを加速する．それ故，加速性能と電磁石中の電流分布が密接に関係している．従って，今後の研究課題は，トポロジー最適化に基づき，電磁石中の電流分布を最適化することである．

参考文献

[1] T. Yamaguchi, T. Takayama, A. Saitoh, and A. Kamitani, “Numerical investigation on superconducting linear acceleration system for pellet injection by using equivalent-circuit model,” IEEE Trans. Magn., vol. 55 (2019), no. 6, art no. 7204305.

[2] N. Yanagi and G. Motojima, private communication, National Institute for Fusion Science, Toki, Gifu, 2017.

[3] L. Makong, A. Kameni, P. Masson, J. Lambrechts, and F. Bouillault, “3-D modeling of heterogeneous and anisotropic superconducting media,” IEEE Trans. Magn., vol. 52 (2016), no. 3, art. no. 7205404.

[4] W. H. Press, S. A. Teukosky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, “Numerical recipes in Fortran 77,” Cambridge Univ. Press., 1992.

超伝導リニア加速システムの数値シミュレーション：ペレット入射速度の高速化

高山　彰優[1]，山口　敬済[2]，齋藤　歩[1]，神谷　淳[1]
[1] 山形大学大学院理工学研究科
[2] 総合研究大学院大学
e-mail：takayama@yz.yamagata-u.ac.jp

1　はじめに

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，高温超伝導（HTS）リニア加速システムによるペレット入射法が提案されている [1]．しかしながら，実験結果が得られていないため，現時点では，ペレット入射速度がわからない．このため，著者等は数値シミュレーションを用いたペレット入射法の加速性能を調べた．

昨年度の年会では，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 リニア加速システムによるペレット入射法の加速性能を調べた [2]．その結果，単一コイルの場合，最終速度は約 118 m/s が得られた．さらに，遮蔽電流密度は薄膜の縁近傍に分布することがわかった．

本研究の目的は，従来の加速用コイルの外側にもコイルを配置することによって，HTS リニア加速システムによるペレットの入射速度を高速化することである．

2　支配方程式と運動方程式

本研究では，中心対称軸を z 軸とした円柱座標 $\langle O : \boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_z \rangle$ を採用する．加速用 HTS 薄膜の形状には，単層かつ半径 R，厚み b のディスク型を用いる．このとき，HTS 内の遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ は $\boldsymbol{j} = (2/b)(\nabla S \times \boldsymbol{e}_z)$ で書き表すことができる．但し，$S(r,t)$ はスカラ関数であり，同関数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，$\boldsymbol{B}$ はコイルの印加磁束密度である．また，$\boldsymbol{E}$ は電界であり，電界 $\boldsymbol{E}$ には，超伝導特性を表すため，J-E 構成方程式：$\boldsymbol{E} = E(|\boldsymbol{j}|)(\boldsymbol{j}/|\boldsymbol{j}|)$ を与える．但し，関数 $E(j)$ にはべき乗則：$E(j) = E_{\mathrm{C}}(j/j_{\mathrm{C}})^N$ を採用する．E_{C} 及び j_{C} はそれぞれ臨界電界，臨界電流密度である．

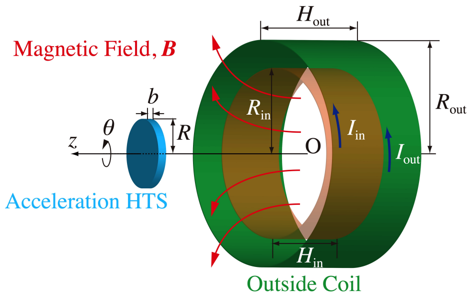


図 1. HTS リニア加速システムの概念図.

一方，加速用 HTS の運動は Newton の運動方程式

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{4\pi}{m}\int_0^R \frac{\partial S}{\partial r}\langle \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{e}_r\rangle r dr, \quad (2)$$

で決定される．但し，m はコンテナの質量である．

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．なお，z_0 及び v はそれぞれ薄膜の初期位置及びコンテナの速度である．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．本研究では，空間の離散化に FEM を採用し，r 方向の区間 $[0, R]$ を n 等分割した．結果として，同問題は連立常微分方程式を解く問題になり，同方程式には，刻み幅自動調節付き Runge-Kutta 法を採用した．

3　HTS リニア加速システムによるペレット入射法の数値シミュレーション

上記手法を用いて，HTS 薄膜内に流れる遮蔽電流密度の時間発展と薄膜の運動を同時に解析する FEM コードを開発した．図 1 に HTS リニア加速システムによるペレット入射法の軸対称モデルを示す．内側のコイルには，半径 R_{c}

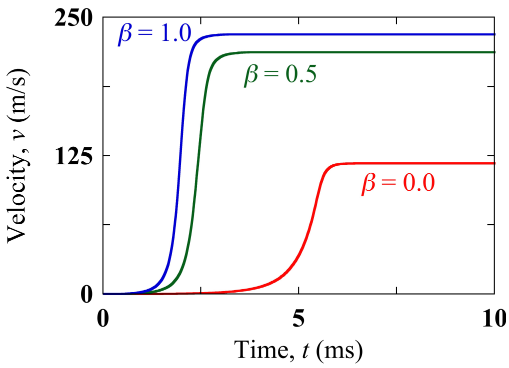


図 2. ペレット速度 v の時間変化.

及び高さ H_c のコイルを採用し，内側のコイル電流 $I_{\rm in}$ として，$I_{\rm in}(t, z) = \alpha t(z \geq 0)$ 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．また，外側のコイル電流を $I_{\rm out}(t, z) = \beta I_{\rm in}(t, z)$ で決定する．すなわち，$\beta = 0.0$ の場合，内側のコイルだけの配置となる．

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：$R_c = 5$ cm, $H_c = 10$ cm, $m = 10$ g, $z_0 = 1$ mm, $N = 20$, $j_C = 1$ MA/cm^2, $E_C = 1$ mV/m, $R = 4$ cm, $b = 1$ mm, $n = 101$.

HTS リニア加速システムによるペレット速度を数値的に調べよう．まず，図 2 にペレット速度 v の時間変化を示す．同図より明らかなように，どの β に対しても，ペレット速度 v は急激に加速し，$t \gtrsim 6$ ms ではペレット速度 v がほぼ一定値となる．加速性能を調べる尺度として，終端速度 $v_{\rm f}$ を導入する．これは $z = 20$ cm を薄膜が通過した直後の速度である．終端速度 $v_{\rm f}$ は $\beta = 0.0$, $\beta = 0.5$, $\beta = 1.0$ の場合，それぞれ $v_{\rm f} = 118$ m/s, $v_{\rm f} = 218$ m/s, $v_{\rm f} = 235$ m/s を得る．

次に，図 3 に終端速度の係数 β への依存性を示す．同図より，$\beta > 0.25$ の場合，β の増加と

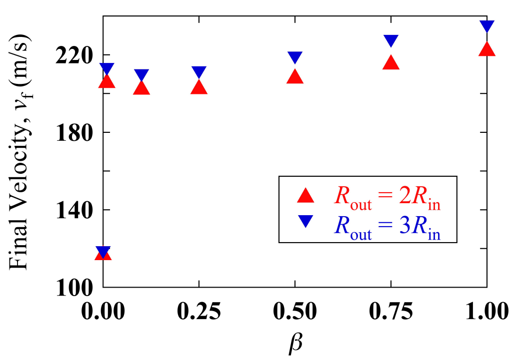


図 3. 終端速度 $v_{\rm f}$ と係数 β への依存性.

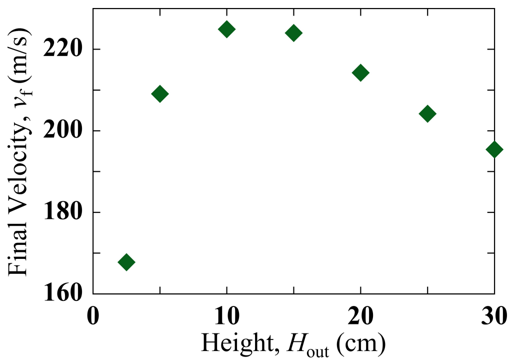


図 4. 終端速度 $v_{\rm f}$ とコイル長 $H_{\rm out}$ への依存性.

ともに終端速度が単調増加しているが，終端速度の増加は僅かであることがわかる．以上の結果から，外側にも加速用コイルを配置することによって，終端速度は約 2 倍の増加率となった．

最後に，外側のコイル長 $H_{\rm out}$ が終端速度に及ぼす影響を調べよう（図 4 参照）．同図より，コイルの長さが $H_{\rm out} = 2.5$ cm の場合，最も終端速度が遅い結果となるのに対して，$H_{\rm out} = 10.0$ cm の場合，最速の終端速度が得られた．この原因を探るため，外側コイルの磁束密度を調べた結果が，図 5 である．同図より明らかなように，ペレットの加速に重要となる B_r が最も大きいのが，$H_{\rm out} = 10.0$ cm であることがわかる．従って，B_r の値が大きいほど，ペレット速度を向上させることができる．

参考文献

[1] N. Yanagi and G. Motojima, private communication, National Institute for Fusion Science, (2017).

[2] 高山彰優，山口敬済，齋藤歩，神谷淳，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，日本応用数理学会 2018 年 年会講演予稿集，2018.

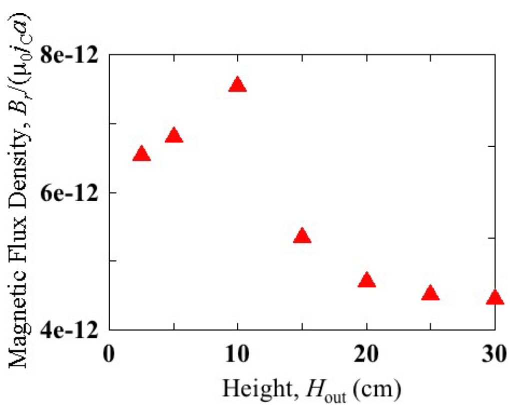


図 5. コイルによる生成磁場の B_r とコイル長 $H_{\rm out}$ への依存性.

多孔質媒質中の乱流に対する k と ε の解軌道及びそれらの初期状態依存性

鈴木 岳人 [1]
[1] 青学大理工
e-mail : t-suzuki@phys.aoyama.ac.jp

1 概要

多孔質媒質中の乱流は広く理論的・実験的に取り扱われてきており，それを記述するモデルの中で，$k-\varepsilon$ モデルは広く用いられてきた [1, 2, 3]．ここで k と ε はそれぞれ乱流エネルギーとその高波数領域への散逸率を表す．k と ε の時間発展を考えるにあたって，多孔質媒質中においては，平均流から擾乱へエネルギーの移送が起こり続けることに注意されたい．平均流が壁に衝突することで乱れが生成されるからである．それゆえ，一定の平均流を伴う定常状態で有限の k と ε が存在し得る [1]．これは通常の乱流においては起こり得ない．この事実は無限の定常状態が存在することを示唆し，$k-\varepsilon$ 平面上ではアトラクタが連続的な分布をすることを示す．このような特殊なアトラクタが存在する場合の解軌道の振る舞いを明らかにすることは，非線形動力学の観点からも重要である [4]．特にそれらの振る舞いの初期値依存性をここでは議論したい．

2 多孔質媒質中の $k-\varepsilon$ モデル

多孔質媒質中における k と ε を記述する．まず通常の乱流でなされるように，速度場 $\vec{u}$ を $\vec{u}=\overline{\vec{u}}+\vec{u}'$ と分解する．ここで上付きバーは短周期成分を取り除くための時間平均を意味する．$\overline{\vec{u}}$ は平均場，$\vec{u}'$ はそこからの擾乱とみなせる．この擾乱を用いて微視的な k と ε は

$$k=\frac{\overline{\vec{u}'^2}}{2},\quad \varepsilon=\nu\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\frac{\partial u_j'}{\partial x_i}}, \tag{1}$$

と書ける．ここで ν は流体の粘性率である．加えて，多孔質媒質中において物理量を取り扱うには，ある基準領域内での空間平均 $\langle\rangle$ もとらなければならない．すなわち $\langle k\rangle$ と $\langle\varepsilon\rangle$ の時間発展を考える．基準領域は空隙のスケールより十分大きく，系のサイズより十分小さく取る．

多孔質媒質中の $\langle k\rangle$ と $\langle\varepsilon\rangle$ に対する巨視的な支配方程式は [1] によって導出された．彼らの枠組みは広く使われており [2, 3]，ここでも採用する．方程式系は，速度場 $\vec{u}$ を用いて以下のように書ける：

$$\begin{aligned}\rho &\left[\frac{\partial}{\partial t}(\phi\langle k\rangle)+\nabla\cdot(\vec{u}_D\langle k\rangle)\right]\\ =&\ \nabla\cdot\left[\rho\left(\nu+\frac{\nu_T}{\sigma_k}\right)\nabla(\phi\langle k\rangle)\right]-\rho\phi\langle\overline{\vec{u}'\vec{u}'}\rangle:\nabla\vec{u}_D\\ &+c_k\rho\phi\frac{\langle k\rangle|\vec{u}_D|}{\sqrt{K}}-\rho\phi\langle\varepsilon\rangle,\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\rho &\left[\frac{\partial}{\partial t}(\phi\langle\varepsilon\rangle)+\nabla\cdot(\vec{u}_D\langle\varepsilon\rangle)\right]\\ =&\ \nabla\cdot\left[\rho\left(\nu+\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla(\phi\langle\varepsilon\rangle)\right]\\ &-C_{\varepsilon1}(\rho\phi\langle\overline{\vec{u}'\vec{u}'}\rangle:\nabla\vec{u}_D)\frac{\langle\varepsilon\rangle}{\langle k\rangle}\\ &+C_{\varepsilon2}\rho\phi\left(c_k\frac{\langle\varepsilon\rangle|\vec{u}_D|}{\sqrt{K}}-\frac{\langle\varepsilon\rangle^2}{\langle k\rangle}\right),\end{aligned} \tag{3}$$

ここで ρ は流体の密度，ϕ は空隙率，ν_T は渦粘性，K は媒質の透水係数，$\vec{u}_D\equiv\phi\langle\overline{\vec{u}}\rangle$, $\langle\overline{\vec{u}'\vec{u}'}\rangle:\nabla\vec{u}_D\equiv\langle\overline{u_i'u_j'}\rangle\partial(u_D)_i/\partial x_j$ であり，σ_k, σ_ε, c_k, $C_{\varepsilon1}$ 及び $C_{\varepsilon2}$ はモデルパラメータである．$i,j=1,2,3$ であり，繰り返されたものについては和を取る．最後に，支配方程式系を閉じるために渦粘性 ν_T を定義する．これは [1] に従って

$$\nu_T=C_\mu\frac{\langle k\rangle^2}{\langle\varepsilon\rangle} \tag{4}$$

とする．ここで C_μ は経験的な定数である．

3 ヌルクラインと解軌道

一様な $\vec{u}_D$ と等方一様な $\vec{u}'$ を考える．この仮定の下では，式 (2) 及び (3) 中の空間微分をすべて消去することができる．それゆえ $\phi\langle k\rangle$ と $\phi\langle\varepsilon\rangle$ を改めて k 及び ε と書けば，支配方程式は

$$\frac{\partial k}{\partial t}=\frac{c_ku_D}{\sqrt{K}}k-\varepsilon, \tag{5}$$

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}=C_{\varepsilon2}\frac{\varepsilon}{k}\left(\frac{c_ku_D}{\sqrt{K}}k-\varepsilon\right), \tag{6}$$

で与えられることになる．両式から

$$\varepsilon=\frac{c_ku_D}{\sqrt{K}}k \tag{7}$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京) Copyright (C) 2019 一般社団法人日本応用数理学会

で与えられる直線が，$k-\varepsilon$ 平面上で両変数に対する共通のヌルクラインになっていることが分かる．従って，解軌道とこの直線は，水平にも垂直にも交わらない [4]．他の系でも見られたように [4]，この直線は線状のアトラクタかリペラーになる．なお，直線 $\varepsilon=0$ (すなわち k 軸) も ε に対するヌルクラインである．

次に解軌道の解析的表現を得よう．まず式 (5) と (6) から

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial k}=C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon}{k} \tag{8}$$

という方程式を得る．ここで k と ε の初期値として，一定の $k_0\neq 0$ と $\varepsilon_0\neq 0$ をそれぞれ課す．これと式 (8) から，解軌道の表現として容易に

$$\varepsilon=\varepsilon_0\left(\frac{k}{k_0}\right)^{C_{\varepsilon 2}} \tag{9}$$

を得る．

4　解の運動方向の初期値依存性

ここで，共通のヌルクライン $\varepsilon=c_k u_D k/\sqrt{K}$ が線上のアトラクタになることを示す．そのために，時間に伴って k と ε がどのように運動するのかを考える．まず $k-\varepsilon$ 平面上で $0<\varepsilon<c_k u_D k/\sqrt{K}$ の領域を領域 I と定義し，$\varepsilon>c_k u_D k/\sqrt{K}>0$ の領域を領域 II と定義する．加えて，解軌道 (9) とヌルクラインが交わる点を (k_f,ε_f) と定義する．これらの定義によって，(k_0,ε_0) が領域 I にあるならば $k_0<k_f$ 及び $\varepsilon_0<\varepsilon_f$ という関係が得られる．これはヌルクライン上で $\varepsilon\propto k$ であるのに対して，解軌道上では $\varepsilon\propto k^{C_{\varepsilon 2}}$ でありかつ $C_{\varepsilon 2}>1$ であるからである．同様に考えて，(k_0,ε_0) が領域 II にあれば $k_0>k_f$ 及び $\varepsilon_0>\varepsilon_f$ を得る．次に，領域 I (II) においては，k 及び ε が時間とともに増加（減少）することに注意する．これは式 (5) 及び (6) の右辺が正（負）となることによる．ゆえに，(k_0,ε_0) が領域 I (II) にあれば，解は時間とともに $k-\varepsilon$ 平面上を右上（左下）に動くことになり，$t\to\infty$ の極限でヌルクライン上の点 (k_f,ε_f) に吸収される．すなわち共通のヌルクラインはリペラーではなく線状のアトラクタであることが結論付けられる．定常状態は $(k,\varepsilon)=(k_f,\varepsilon_f)$ で与えられる．なお，解軌道 (9) は通常の乱流に対しても適用可能であるが [5]，そこでは k と ε は $t\to\infty$ の極限で消えることに注意されたい．このことは，通常の乱流が $K\to\infty$ の極限で記述できることを考えると分かり易い．この時ヌルクラインは k 軸となり，領域 I が消滅してしまう．それゆえ，すべての解が原点に吸収される．有限の K を含んだ項があることで，等方一様な乱流が $t\to\infty$ の極限でも生き残ることができるのである．

5　まとめと今後の課題

多孔質媒質中の乱流において，初期状態に依存する解の時間発展が得られた．特に共通のヌルクラインが重要であり、線状のアトラクタが現れた．物理的には、一様な平均流下でも乱流が消滅せず残ることが重要である．加えて，共通のヌルクラインを持つ系では，発表者の過去の研究 [4] から初期値のずれに対する最終状態の鋭敏性が期待されるので，その点を解析的に示すのが今後の課題となる．

参考文献

[1] M. H. J. Pedras, and M. J. S. de Lemos, Macroscopic turbulence modeling for incompressible flow through undeformable porous media, Int. J. Heat Mass Transfer, 44 (2001), 1081-1093.

[2] E. Braga, and M. J. S. de Lemos, Simulation of turbulent natural convection in a porous cylindrical annulus using a macroscopic two-equation model, Int. J. Heat Mass Transfer, 49 (2006), 4340-4351.

[3] M. B. Saito, and M. J. S. de Lemos, A Correlation for Interfacial Heat Transfer Coefficient for Turbulent Flow Over an Array of Square Rods, J. Heat Transfer-Transactions of the ASME, 128 (2006), 444-452.

[4] T. Suzuki, Emergence and seismological implications of phase transition and universality in a system with interaction between thermal pressurization and dilatancy, Phys. Rev. E, 96 (2017), 023005, doi:10.1103/PhysRevE.96.023005.

[5] Y. Zhao, Stable computation of turbulent flows with a low-Reynolds-number $k-\varepsilon$ turbulence model and explicit solver, Adv. Eng. Software, 28 (1997), 487-499.

流体構造連成を考慮した形状最適化

片峯 英次 [1], 豊場 亮太 [2], 三宅 悠暉 [3]
[1] 岐阜工業高等専門学校 機械工学科，[2] 長岡技術科学大学 (学生)，[3] 金沢大学 (学生)
e-mail : katamine@gifu-nct.ac.jp

1 はじめに

定常の流体構造連成場問題 [1] に対して，弾性場領域において剛性最大化を目的とする，あるいは流れ場領域において散逸エネルギー最小化を目的とする二つ形状最適化問題を取り上げて，その解法を紹介する．問題を定式化し，随伴変数法を利用して形状修正の感度となる形状勾配密度関数を導出する．導出した感度に基づいて力法（あるいは H^1 勾配法）[2][3] を適用し，FreeFem++ [4] を利用して解析した数値解析結果を紹介する．

2 弾性場領域における剛性最大化

2.1 問題の定式化

図 1 に示すような定常の流体構造連成問題を考え，弾性体の剛性最大化のための平均コンプライアンス最小化を目的とする形状決定問題を考える．粘性流れ場領域を Ω^f，弾性場領域を Ω^s，流体構造連成を考慮する境界を Γ^s とする．また，u^f，p，w^f，q をそれぞれ Ω^f における流速，圧力，随伴流速，随伴圧力，u^s，w^s を Ω^s における変位，随伴変位とする．形状最適化問題は次のように定式化できる．

$$\begin{aligned}
&\text{Find} && {\Omega^s}_{opt} && \\
&\text{that minimize} && l^s(u^s)+d^s(u^s,u^s) && (1)\\
&\text{subject to} && a^f(u^f,w^f)+b^f(u^f,u^f,w^f) && \\
& && +c^f(p,w^f)=0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} && (2)\\
& && c^f(q,u^f)=0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} && (3)\\
& && a^s(u^s,w^s)-l^s(w^s) && \\
& && -d^s(u^s,w^s)=0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{s}} && (4)\\
& && \int_{\Omega^s} dx \le M && (5)
\end{aligned}$$

ただし，上記におけるそれぞれの項は次のように定義されている．

$$\begin{aligned}
a^f(u^f,w^f) &= \int_{\Omega^f} 2\mu\varepsilon^f_{ij}(u^f)\varepsilon^f_{ij}(w^f)\,dx,\\
b^f(u^f,u^f,w^f) &= \int_{\Omega^f} \rho^f w^f_i u^f_{i,j} u^f_j\,dx,\\
c^f(p,w^f) &= -\int_{\Omega^f} w^f_{i,i} p\,dx,\\
a^s(u^s,w^s) &= \int_{\Omega^s} \sigma^s_{ij}(u^s)\varepsilon^s_{ij}(w^s)\,dx,\\
l^s(w^s) &= \int_{\Omega^s} w^s_i f^s_i\,dx, \qquad (6)
\end{aligned}$$

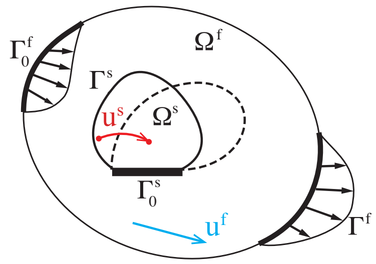


図 1. Fluid-Structure-Interaction problem

$$\begin{aligned}
d^s(u^s,w^s) &= \int_{\Gamma^s} w^s_i\sigma^s_{ij}(u^s)n^s_j\,d\Gamma\\
&= -\int_{\Gamma^s} w^s_i\sigma^f_{ij}(p,u^f)n^f_j\,d\Gamma \qquad (7)
\end{aligned}$$

また，粘性流れ場における応力 $\sigma^f_{ij}(p,u^f)$ および弾性場における応力 $\sigma^s_{ij}(u^s)$ は次のように定義されている．

$$\begin{aligned}
\sigma^f_{ij}(p,u^f) &= -p\delta_{ij}+\mu(u^f_{i,j}+u^f_{j,i}),\\
\varepsilon^f_{ij}(u^f) &= \frac{1}{2}(u^f_{i,j}+u^f_{j,i}),\\
\sigma^s_{ij}(u^s) &= C_{ijkl}\varepsilon^s_{kl}, \quad \varepsilon^s_{ij}(u)=\tfrac{1}{2}(u^s_{i,j}+u^s_{j,i})
\end{aligned}$$

ただし，μ は流体の粘性係数，ρ^f は流体密度，C_{ijkl} は剛性テンソル，f^s_i は弾性場における体積力を表している．

2.2 随伴方程式と形状勾配関数

Lagrange 乗数法を用いて，領域変動に対する Lagrange 関数 $L(u^f_i,p,w^f_i,q,u^s_i,w^s_i,\Lambda)$ の停留条件より，この問題に対する随伴方程式は次のように導出される．

$$\begin{aligned}
&a^f(u^{f\prime},w^f)+b^f(u^{f\prime},u^f,w^f)+b^f(u^f,u^{f\prime},w^f)\\
&+c^f(q,u^{f\prime})=0 \quad \forall u^{f\prime} \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} \qquad (8)\\
&c^f(p',w^f)=0 \quad \forall p' \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} \qquad (9)\\
&a^s(u^{s\prime},w^s)-d^s(u^{s\prime},w^s)\\
&=l^s(u^{s\prime})+d^s(u^{s\prime},u^s)+d^s(u^s,u^{s\prime}) \quad \forall u^{s\prime} \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{s}} \qquad (10)
\end{aligned}$$

またこの問題における形状勾配密度関数 G は次のようになる．

$$G = u^s_i f^s_i - \sigma^s_{ij}(u^s)\varepsilon^s_{ij}(w^s) + w^s_i f^s_i + \Lambda \qquad (11)$$

ただし，Λ は領域の大きさ制約のための Lagrange 乗数である．

3　粘性流れ場領域における散逸エネルギー最小化

領域 Ω^f における散逸エネルギーを最小化する問題は次のように定式化される．

$$
\begin{array}{rll}
\text{Find} & {\Omega^f}_{opt} & \\
\text{that minimize} & a^f(u^f, u^f) & (12) \\
\text{subject to} & a^f(u^f, w^f) + b^f(u^f, u^f, w^f) & \\
 & +c^f(p, w^f) = 0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} & (13) \\
 & c^f(q, u^f) = 0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} & (14) \\
 & a^s(u^s, w^s) - l^s(w^s) & \\
 & -d^s(u^s, w^s) = 0 \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{s}} & (15) \\
 & \displaystyle\int_{\Omega^s} dx \le M & (16)
\end{array}
$$

上記と同様な手順を用いて，この問題に対する随伴方程式次のように導出される．

$$
\begin{array}{ll}
a^f(u^{f\prime}, w^f) + b^f(u^{f\prime}, u^f, w^f) + b^f(u^f, u^{f\prime}, w^f) & \\
+c^f(q, u^{f\prime}) = 2a^f(u^f, u^{f\prime}) \quad \forall u^{f\prime} \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} & (17) \\
c^f(p', w^f) = 0 \quad \forall p' \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{f}} & (18) \\
a^s(u^{s\prime}, w^s) - d^s(u^{s\prime}, w^s) = 0 \quad \forall u^{s\prime} \quad \text{in } \Omega^{\mathrm{s}} & (19)
\end{array}
$$

またこの問題における形状勾配密度関数 G は次のようになる．

$$
\begin{array}{ll}
G = 2\mu\varepsilon^f_{ij}(u^f)\varepsilon^f_{ij}(u^f) - 2\mu\varepsilon^f_{ij}(u^f)\varepsilon^f_{ij}(w^f) & \\
-\rho^f w^f_i u^f_{i,j} u^f_j + \Lambda & (20)
\end{array}
$$

4　解析例

導出した形状勾配密度関数と力法を用いて解析した数値例を紹介する．

弾性体の剛性最大化の解析例として，図 2 に示す管内流れ中に存在する障害物モデルで数値解析を実施した． Re=10 の流れ場に対して，

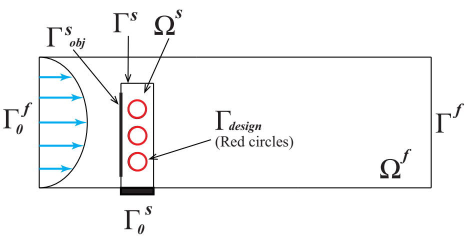
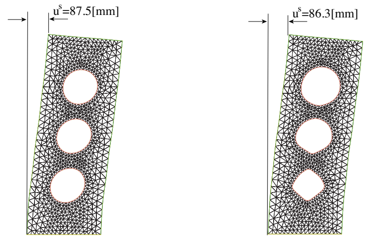


図 2. Numerical analysis problem 1

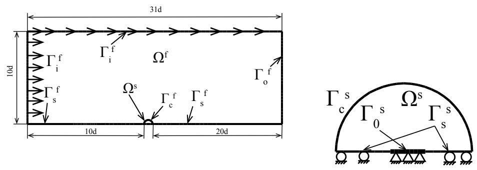
弾性体の左側境界 Γ^s_{obj} で定義されたコンプライアンス最小化を目的とし，面積一定制約の下で，弾性体の内部境界を設計境界として解析を行った．図 3 に初期形状および最適形状における変形状態を示す．また形状更新に対して目的汎関数が約 9%低減して収束した．



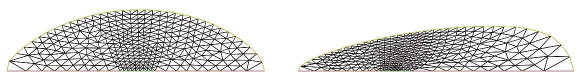
(a) Initial shape　(b) Optimum shape
図 3. Deformed shapes for problem 1

流れ場の散逸エネルギー最小化の解析例として，図 4 に示す一様流中に置かれた孤立弾性体モデルを設定した．Re=0.1, 40 の場合において散逸エネルギー最小化を目的して，面積一定制約の下で，設計境界を Γ^f_c として解析を行い，最適形状を図 5 に示す．目的汎関数はともに約 5%低減して収束した．

以上の結果から提案する手法の基本的な妥当性が確認できた．



(a) Numerical model　(b) Zooming
図 4. Numerical analysis problem 2


(a) Re=0.1　(b) Re=40
図 5. Optimum shapes for problem 2

参考文献

[1] 鈴木厚, 高石武史, 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, 日本応用数理学会 2018 年度年会 講演論文集, (2018), pp.245-246.

[2] 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.

[3] 畔上秀幸, 形状最適問題の正則化解法, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 24, No.2, (2014), pp.83-138.

[4] 大塚厚二, 高石武史, 日本応用数理学会監修, 有限要素法で学ぶ現象と数理—FreeFem++数理思考プログラミング—, (2014), 共立出版.

A Micromechanical simulation of Crack Propagation in Heterogeneous Composite Solid

Sayahdin Alfat[1], Masato Kimura [2]
[1] Physics Education Departement, Halu Oleo University, Kendari, 93132, Indonesia, and
[2] Faculty of Mathematics and Physics, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192, Japan
e-mail : sayahdin.alfat@uho.ac.id

1 Abstract

The simulation of crack propagation in heterogeneous solids has been studied. We applied two kinds of the different material characteristic which is assumed as linear elastic material. The loading mechanism consist of 2 modes, as follow; the mode I/open mode and the mode III/tearing mode. The used numerical study was AFEM with a phase field approach.

2 Introduction

Investigation of micromechanical behavior in cracking area is very interesting to discuss. Various approaches have often been used, one of them was numerical method [1]. Since could detect the position and path of cracks, combination of Adaptive Finite Element Method (AFEM) and phase field approach was more suitable to investigation micromechanical crack behavior [2]. In addition to these method is more simple to apply in complex domain. The objective of study is showing micromechanical behavior of the crack through combination of AFEM and phase field.

3 Numerical Setup

Here, we have modified a bit of Takaishi-Kimura model which their parameters were set as non-dimensional [2].

$$\begin{cases} -\tilde{\operatorname{div}}\left((1-z)^2\tilde{\sigma}[\tilde{u}]\right) = 0 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \tilde{\alpha}\frac{\partial z}{\partial t} = \big(\tilde{\epsilon}(\tilde{\gamma}\tilde{\nabla}^2 z) - \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\epsilon}}z & \\ \qquad +\tilde{\sigma}[\tilde{u}] : \tilde{e}[\tilde{u}](1-z)\big)_+ & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \tilde{u} = g(\tilde{\chi}, t) & \text{on } \Gamma_D \\ \tilde{\sigma}[\tilde{u}]n = q(\tilde{\chi}, t) & \text{on } \Gamma_N \\ \frac{\partial z}{\partial n} = 0 & \text{on } \Gamma \setminus \Gamma_N^1 \\ z = 0 & \text{on } \Gamma_N^1 \\ z|_{t=0} = z_0(\tilde{\chi}) & \text{in } \tilde{\Omega}. \end{cases} \tag{1}$$

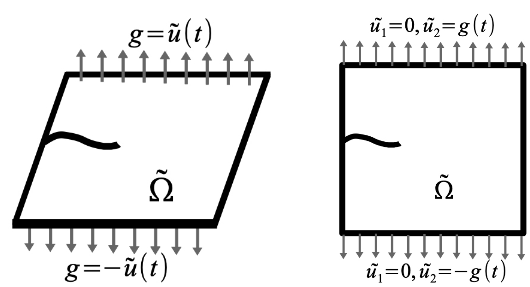
where $\tilde{\chi} = [x_1, x_2]$, $\tilde{\gamma}$, $\tilde{u}$, $\tilde{\sigma}[\tilde{u}]$, $\tilde{e}[\tilde{u}]$, $g(\tilde{\chi}, t)$, $q(\tilde{\chi}, t)$ represent position vector, fracture toughnes, displacement, stress tensor, strain tensor, given displacement and surface force, respectively. $\tilde{\alpha} = 400$[Pa] and $\tilde{\epsilon} = 5 \times 10^{-7}$[m] represent phase field parameters. In addition, z is damage variable which cracking area is represented by $z = 1$ and no-cracked $z = 0$.

Heterogeneous solid consist of two kinds material which have physical properties as shown Tabel 1, both of them are assumed as linear elastic material. Pattern material composite is particle [3]. Here, heterogeneous solid has initial crack $z_0(\tilde{\chi})$ where it growth up from soft material (B). The other assumption is neglected an interface material A and B.

Table 1: Physical properties of solid [4]

Physical properties	**Material A**	**Material B**
Young's Mod. (GPa)	3.5	2.7
Poisson's Ratio (-)	0.35	0.1
Fracture Toug. (Pa · m)	3×10^2	2×10^2

The computational gometry is square plate $\tilde{\Omega} = (0, 1[\text{mm}]) \times (0, 1[\text{mm}])$. The study applied two types of loading mechanism, the mode I/open and III/tearing, as shown in Figure 1.



Mode III Mode I

Figure 1: Computational domain profile

To solve equation (1), the authors used AFEM with semi-implicit scheme. Before it, we would show the weak form of equation (1). Let define test function (w, v), $V^{\tilde{u}} := \big(w \in H^1(\tilde{\Omega}) |\ w = 0 \text{ on } \Gamma_D\big)$ and $V^z := \big(v \in H^1(\tilde{\Omega}) |\ v = 0 \text{ on } \Gamma_N^1\big)$:

$$a_{\tilde{u}}(\tilde{u}^k, w) = l_{\tilde{u}}^k(w) \quad (\forall w \in V^{\tilde{u}}) \tag{2}$$

$$a_z(z^k, v) = l_z^k(v) \quad (\forall v \in V^z) \tag{3}$$

where;

$$(*)\begin{cases} a_{\tilde{u}}\big(\tilde{u}^k, w\big) = \int_\Omega (1 - z^{k-1})^2 \big(\lambda\big(\tilde{\operatorname{div}}(\tilde{u}^k)\big) \\ \qquad\qquad \big(\tilde{\operatorname{div}}(w)\big) + 2\mu \tilde{e}[\tilde{u}^k] : \tilde{e}[w]\big) d\chi \\ l^k_{\tilde{u}}\big(w\big) = 0 \end{cases}$$

$$(**)\begin{cases} a_z\big(z^k, v\big) = \int_\Omega \big(1 + \frac{\Delta t}{\tilde{\alpha}}\big(\frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\epsilon}} + \big(\lambda(\tilde{\nabla}(\tilde{u}^{k-1}))^2 \\ \qquad\qquad +2\mu(\tilde{e}[\tilde{u}^{k-1}])^2\big)\big)\big) z^k v \ d\chi \\ \qquad\qquad + \int_\Omega \frac{\tilde{\epsilon}\Delta t}{\alpha}\big(\tilde{\gamma}\tilde{\nabla} z^k\big) \cdot \tilde{\nabla} v \ d\chi \\ l^k_z\big(v\big) = \int_\Omega \frac{\Delta t}{\tilde{\alpha}}\big(\lambda(\tilde{\operatorname{div}}(\tilde{u}^{k-1}))^2 \\ \qquad\qquad +2\mu(\tilde{e}[\tilde{u}^{k-1}])^2\big) v d\chi + \int_\Omega z^{k-1} v d\chi \end{cases}$$

Due to AFEM, we set $h_{min} = 1 \times 10^-3$ and $nbvx = 50000$. Time simulation $t = \kappa\Delta t = 4000$ with $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ and $k = (0, 1, 2, \cdots)$. **Remarks**, remeshing process at each step time based on the changing of z. The the weak form is solved by FreeFEM++ [5] with P2-element.

4 Result and Summary

We supposed that the initial crack was straight propagation which satisfied $z_0 = e^{\left(-\frac{(y-1)}{10^{-3}}\right)^2}\big(1.+ e^{((x-0.25)/10^{-3})}\big)^{-1}$. Under two mechanical loading, the simulation of micromechanical behaviour in cracking area shown differences. In mode III, heterogeneous material have more branching propagation (see Figure 2). However, it is only one in mode I, it shown Figure 3.

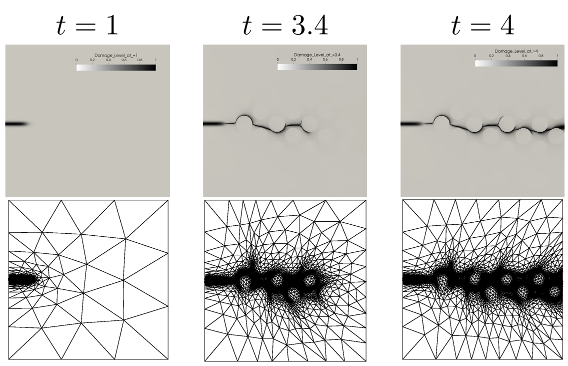


Figure 2: Snapshot of crack propagation (upper) and mesh (lower) by mode III

In heterogeneous material, the crack and damage area will be easily found in interface areas along the crack crossing area. By using AFEM, the areas could be detected or recognized. This is due to increasing of mesh numbers drastically in the areas, it shown in lower part of Figure 2 - 3. Numerically, The method also clarified that loading by mode III contributed greatly to the level of material damage. This was indicated by the increase in number of mesh in the mode (see Figure 4).

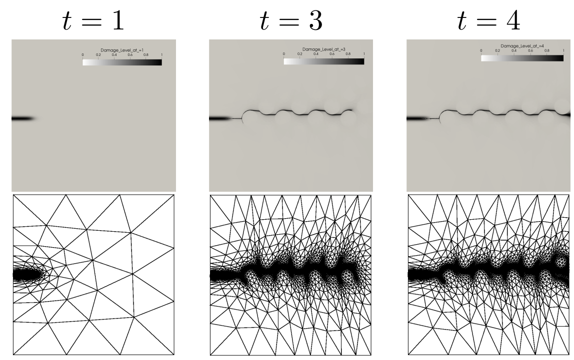


Figure 3: Snapshot of crack propagation (upper) and mesh (lower) by mode I

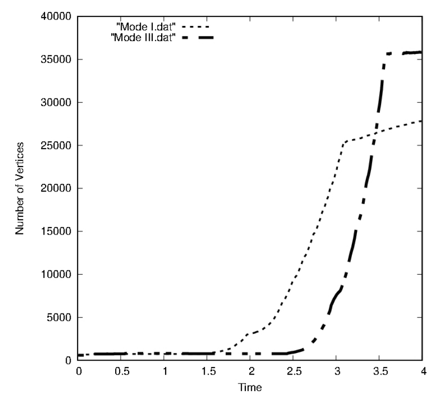


Figure 4: Number of vertices profile

Acknowledgments

The first author would like to acknowledge the financial supports under grants JASSO Follow-up Research Fellowship for fiscal 2019.

References

[1] Lan H., et al., Effect of heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behavior during compression loading, J. Geophy. Res.: Solid Earth, (2010), 115(B1).

[2] Takaishi, T., Kimura, M., Phase field model for mode III crack growth in two dimensional elasticity, Kybernetika, (2009), 45.4: 605-614.

[3] Michigan Tech. Univ. Web Page, https://bit.ly/2YEdZ4S.

[4] Herrez, M., et al., Transverse cracking of cross-ply laminates: A computational micromechanics perspective, Compo. Sci. & Tech., (2015), 110: 196-204.

[5] Hecht, Frederic., New development in FreeFem++, J. of num. math., (2012), 20.3-4: 251-266.

水素脆化効果を考慮したき裂進展モデルの解析

高石 武史 [1]
[1] 武蔵野大学　工学部
e-mail：taketaka@musashino-u.ac.jp

1　材質の変化とき裂進展

化学反応に起因する材料の劣化は，材料の経年変化によるパフォーマンスに大きく影響する．身近なところでは，鉄の酸化による錆は，鉄鉱石の還元反応で生成した鉄材が，金属表面の不安定な原子が水や酸素といった環境中の原子・分子と酸化反応を起こし安定な状態に戻ろうとする反応である．錆は表面に堆積するため，表面積を増すことで加速的に進展すると考えられる．一方，水素貯蔵容器等で問題となる水素の拡散による材料の脆化は，水素原子の小ささにより材料内部でも化学反応が進む．水素による脆化の効果については，材料内のき裂先端近傍領域に静水圧によって水素が凝集する現象が生じ，そのためにき裂進展に影響しているとの説はあるが [1, 2]，水素原子が非常に小さく，速やかに抜けてしまうため，その密度分布の計測は試みられているものの未だ確証は得られていない．

木村と筆者は Bourdin-Francfort-Marigo の近似エネルギー [3] に対して，エネルギー勾配流の時間発展方程式を導出することで，計算機シミュレーションに適した連続体によるき裂進展モデルを提案し，3 次元き裂進展も再現できることを示した [4, 5]．

このフェーズフィールドを用いたき裂進展モデルをさらに拡張し，水素による材料の脆化の効果を取り入れ，水素原子分布変化のき裂進展への影響を調べた．このモデルでは，水素原子の分布と材料の変位，フェーズフィールドが材料の脆化や水素原子の拡散という材料パラメータを介して結びついており，観測の難しいき裂進展時のき裂先端近傍での水素原子分布を調べることができる．

2　水素脆化の効果を含んだき裂進展モデル

ここでは，i) 水素原子は拡散的に材料に浸透するが，水素原子の密度分布は，ii) 材料の損傷 (フェーズフィールド) によって拡散速度が変わることによって影響を受け，また，iii) 水素原子の密度分布は材料の局所的な脆性を高める (靭性を弱める＝き裂に伴うエネルギー解放を低くする) ことでフェーズフィールドの時間発展に影響を及ぼすと仮定しよう．しかし，どちらも間接的な効果であるため，ここでは，統一的なエネルギー表式は作らず，水素原子の拡散方程式が，局所的な水素の拡散係数と破壊靭性 (エネルギー解放率) を通してフェーズフィールドの時間発展方程式と関係しあうとしてモデルを作った (図 1)．

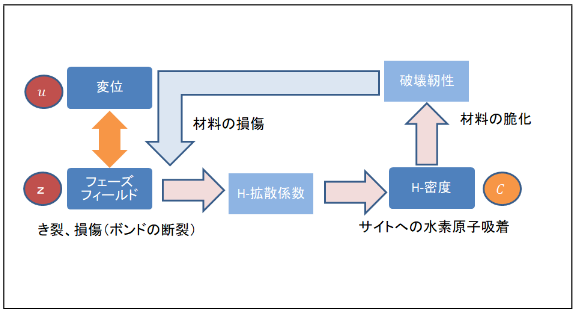


図 1．水素脆化の効果を含んだき裂進展モデル．水素原子濃度は間接的にき裂進展モデルと結合している．

3 次元の等方線形弾性体について考える．き裂を含む弾性体からなる有界領域 $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ において，その変位を $u \in \mathbf{R}^3$，き裂面を表すフェーズフィールドを $z \in [0,1]$ とする．筆者と木村が導出した，エネルギー勾配流に基づくき裂進展方程式は，次のように書ける [4, 5]．

$$\begin{cases} \alpha_u \dfrac{\partial u_i}{\partial t} = \mathrm{div}\left((1-z)^2\sigma[u]\right) + f(x,t) \quad x \in \Omega,\, t>0 \\ \alpha_z \dfrac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon\ \mathrm{div}\left(\gamma(x)\ z\right) - \dfrac{\gamma(x)}{\epsilon} z + (1-z)\ w(u)\right)_+ \\ \qquad\qquad x \in \Omega,\, t>0 \\ w(u) = \sigma[u] : e[u] \\ \text{with B.C and I.C.} \end{cases} \tag{1}$$

ここで，ひずみテンソル $e[u] = (e_{ij}[u](x))$ は $e_{ij}[u](x) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}(x) + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}(x)\right)$，応力テンソル $\sigma[u] = (\sigma_{ij}[u](x))$ は $\sigma_{ij}[u](x) = c_{ijkl}(x)e_{kl}[u](x)$ である．$f(x)$ は物体に働く外力，$\gamma(x) > 0$ 場所の関数として与えられる破壊靭性値，$\epsilon > 0$ は近似のための正則化パラメータである．

正規化された水素原子濃度を $C(x,t)$ とする

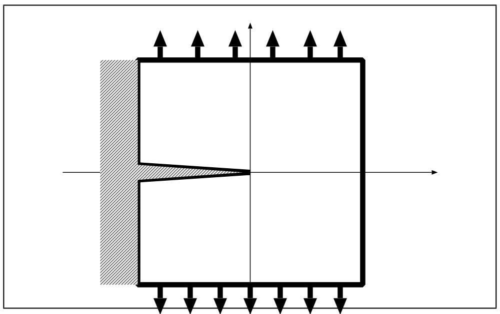


図 2. 計算領域．Dirichlet 境界 Γ_D $(x_2=-1,1)$ は時間と共に変位を与える．初期き裂は $x_1<0, x_2=0$.

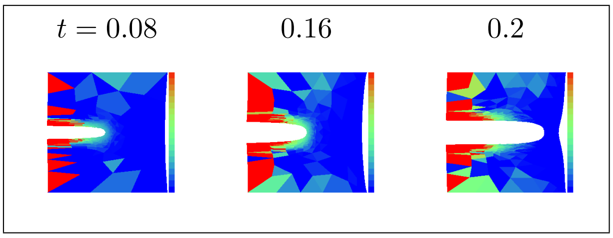


図 3. 変形とき裂進展の様子．色は正規化された水素原子濃度 C を示す．$(D_{C_0}=0.1, D_{C_1}=10, \gamma_0=0.5, \gamma_1=0.01)$.

と，仮定 i) より，水素原子濃度は，拡散係数 D_C を持つ次のような拡散方程式に従うと考える．

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathrm{div}\,(D_C \nabla C) \qquad (2)$$

ここで，フェーズフィールド z による表面エネルギーの上昇を念頭に置き，仮定 ii) より水素原子の拡散係数 D_C は活性化エネルギー $E_a \propto 1-z$ に関するアレニウス則に従うとすると $D_C[z](x,t) = (D_{C_0})^{1-z}(D_{C1})^z$ と書ける．また，仮定 iii) より破壊靭性は水素原子濃度の上昇に低下すると考え，き裂進展によるエネルギー開放率 γ は正規化された水素原子濃度 C の一次式で表せると仮定しよう ($\gamma[C](x,t) = \gamma_0(1-C)+\gamma_1 C$).

これらの仮定を用いると，次のモデル方程式が導かれる [6].

$$\begin{cases} \alpha_u \dfrac{\partial u_i}{\partial t} = \mathrm{div}\left((1-z)^2\sigma[u]\right) + f(x,t) \quad x\in\Omega,\ t>0 \\ \alpha_z \dfrac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon\,\mathrm{div}\,(\gamma(x)\ z) - \dfrac{\gamma(x)}{\epsilon} z + (1-z)\ w(u)\right)_+ \\ \qquad\qquad x\in\Omega,\ t>0 \\ \dfrac{\partial C}{\partial t} = \mathrm{div}\,(D_C\nabla C) \quad x\in\Omega \\ w(u) = \sigma[u] : e[u] \\ \text{with B.C and I.C.} \end{cases} \qquad (3)$$

図 2, 3 は FreeFEM を用いてこのモデルで 2 次元開口き裂モードの数値計算を行った結果である．

3　まとめと展望

水素原子の拡散による脆化を伴うき裂進展モデルを提案した．このモデルで数値シミュレーションによって水素原子分布を調べることで，材料部分の水素原子の拡散係数の大きさのみでなく，き裂部分と損傷していない材料部分の拡散係数のバランスにより，き裂先端部分に水素原子濃度の集中した領域が出現し，き裂進展の後に取り残される場合が生じることがわかった．今後はこの仮定が正しいメカニズムであるか検証するとともに，3 次元でのき裂進展が再現できるか確認したい．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K05378 の助成を受けて行われた．

参考文献

[1] A.R. Troiano, The role of Hydrogen and other interstitials in the mechanical behavier of metals, Trans. of ASM, Vol.52(1960), 54–80.

[2] C.D.Beachem, A new model for Hydrogen-asisted cracking, Metall. Trans., Vol.3(1972), 437–451.

[3] B. Bourdin, G. A. Francfort and J.-J. Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, J. Mech. Phys. Solids, Vol.48 (2000), 797–826.

[4] T.Takaishi and M.Kimura, Phase field model for mode III crack growth, Kybernetika, Vol.45(2009), 605–614.

[5] M.Kimura, T.Takaishi, A phase field approach to matehmatical modeling of crack propagation, A mathematical approach to research problems of science and technology Mathematics for Industry, Vol.5(2014), 161–170.

[6] Takeshi Takaishi, Phase Field Crack Growth Model with Hydrogen Embrittlement, Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications, Springer, 2016, 27–34.

年齢構造化 SIRS 感染症モデルの解析

大桑 健人 [1], 稲葉 寿 [1], 國谷 紀良 [2]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科，[2] 神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail : okuwa@ms.u-tokyo.ac.jp

1 概要

本研究では，免疫の減衰を考慮した感染症の時間発展を記述する年齢構造化 SIRS モデルの解析を行う．一般に感染症モデルに対して，基本再生産数 R_0 なる閾値が定まる．そこで本モデルでは，$R_0 > 1$ の場合にエンデミック定常状態が少なくとも 1 つ存在して，比例混合仮説の下，前方分岐したエンデミック定常状態が局所漸近安定となることを示した．さらに $R_0 > 1$ のとき，モデルの定める力学系は比例混合仮説のもと強パーシステントとなることが示された．

2 SIRS モデル

本研究では，年齢構造化 SIRS 感染症モデルの解析を行う．$S(t,a)$，$I(t,a)$，$R(t,a)$ をそれぞれ時刻 t における感受性個体，感染個体，回復個体の年齢分布，$N(t,a) = S(t,a)+I(t,a)+R(t,a)$ をホスト人口の年齢分布であるとして，次のような方程式を考える [1]:

$$
\begin{aligned}
&S_t(t,a) + S_a(t,a) \\
&\quad = -\mu(a)S(t,a) - \lambda(t,a)S(t,a) + \delta(a)R(t,a), \\
&I_t(t,a) + I_a(t,a) \\
&\quad = \lambda(t,a)S(t,a) - (\mu(a)+\gamma(a))I(t,a), \\
&R_t(t,a) + R_a(t,a) \\
&\quad = \gamma(a)I(t,a) - (\mu(a)+\delta(a))R(t,a), \\
&\quad \lambda(t,a) = \int_0^\omega \beta(a,\sigma)I(t,\sigma)d\sigma, \\
&\quad S(t,0) = \int_0^\omega m(a)N(t,a)da, \\
&\quad I(t,0) = R(t,0) = 0.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで，$\omega \in (0,\infty)$ は最大到達年齢，$m(a)$ と $\mu(a)$ はそれぞれ年齢別出生率と死亡率，$\gamma(a)$ と $\delta(a)$ はそれぞれ年齢別回復率と免疫の消失率，$\beta(a,\sigma)$ は年齢 a の感受性個体と年齢 σ の感染個体の間の感染係数である．パラメータ β,γ,δ は非負の本質的有界関数で，$\mu \in L^1_{loc,+}(0,\omega)$ とする．パラメータ δ をゼロとすれば，特殊な場合として SIR 感染症モデルが得られる．ホスト人口の年齢分布は次の安定人口モデルを満たす．

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial N(t,a)}{\partial t} + \frac{\partial N(t,a)}{\partial a} = -\mu(a)N(t,a), \\
&N(t,0) = \int_0^\omega m(a)N(t,a)da.
\end{aligned}
$$

ここで $\int_0^\omega m(a)e^{-\int_0^a \mu(z)dz}da = 1$ を仮定する．この条件はホスト人口が安定人口にあり，$N(a) = Be^{-\int_0^a \mu(z)dz}$ $(B > 0)$ の形で表されることを導く．

3 基本再生産数

次世代作用素 K は，感染したばかりの感染者の年齢分布 ϕ に対し，それらが生んだ 2 次感染者の年齢分布 $K\phi$ を対応させる作用素として解釈される．モデル (1) においては，$L^1(0,\omega)$ 上の有界線形作用素として次のように定められる:

$$
\begin{aligned}
&(K\phi)(a) \\
&\quad := \int_0^\omega \int_\eta^\omega \beta(a,\sigma)N(\sigma)e^{-\int_\eta^\sigma \gamma(z)dz}d\sigma\phi(\eta)d\eta.
\end{aligned}
$$

作用素 K のスペクトル半径を基本再生産数 R_0 として定めると，これは感受性人口のみからなる集団に侵入した感染者が 1 人あたり生産する 2 次感染者の総数を表す．特に比例混合仮説

$$
\beta(a,\sigma) = \beta_1(a)\beta_2(\sigma) \tag{2}
$$

を仮定すれば，R_0 は次の具体的な表示を得る．

$$
R_0 = \int_0^\omega \int_\eta^\omega \beta_2(\sigma)N(\sigma)e^{-\int_\eta^\sigma \gamma(z)dz}d\sigma\beta_1(\eta)d\eta.
$$

4 結果

まず，(1) の定常解の存在を論ずる．定常状態において感染力 λ^* の満たす方程式を導き，Krasnoselskii の不動点定理を適用することにより次の定理を得る．

定理 1 エンデミック定常状態は $R_0 > 1$ ならば少なくとも一つ存在し，$R_0 \leq 1$ ならば存在しない．

特に $R_0=1$ の近傍の局所的な振る舞いを調べると次が得られる．

定理 2 (2) を仮定する．$R_0=1$ において，エンデミック定常状態は感染者のいない定常状態から前方分岐する．

次に，定常解の局所的漸近安定性を論ずる．定常解からの摂動の漸近的な振る舞いを調べると次が得られる．

定理 3 感染者のいない定常状態は $R_0>1$ ならば不安定で，$R_0\leq 1$ ならば局所的漸近安定．

これは，$R_0>1$ ならば感染者のいない状態に感染症が侵入可能であることを表している．実は，さらに強く $R_0\leq 1$ のとき大域的漸近安定であることも示される．一方で定理 2 により確認された，感染者のいない定常状態から分岐したエンデミック定常解の局所的漸近安定性を調べることができ，次を得る．

定理 4 (2) を仮定する．$R_0=1$ において感染者のいない定常状態から分岐したエンデミック定常状態は，$|R_0-1|$ が十分小さいとき局所的漸近安定．

なお，一般的なエンデミック定常状態の安定性についてはまだ分かっていない．

次にパーシステンスに関する結果を紹介する．集合 X と X 上の関数 $\rho\colon X\to[0,\infty)$ をとる．一般にセミフロー $\Phi\colon[0,\infty)\times X\to X$ が弱 ρ-パーシステントであるとは，$\epsilon>0$ が存在して，任意の $x\in\{x\in X\mid\rho(x)>0\}$ に対し

$$\limsup_{t\to\infty}\rho(\Phi(t,x))>\epsilon$$

となることであり，$\limsup$ を $\liminf$ としたものが強 ρ-パーシステントの定義になる ([2])．そこでモデル (1) において $s(t,a)=\frac{S(t,a)}{N(t,a)}, i(t,a)=\frac{I(t,a)}{N(t,a)}, r(t,a)=\frac{R(t,a)}{N(t,a)}$ として正規化し，正規化されたシステムの状態空間を $X=\{(x_1,x_2,x_3)\in L^1_+(0,\omega)^3\mid x_1+x_2+x_3=1\}$，感染者数を表す関数 ρ を

$$\rho(x_1,x_2,x_3)=\int_0^\infty N(\sigma)x_2(\sigma)d\sigma$$

と定める．

定理 5 (2) を仮定する．$R_0>1$ ならば正規化された方程式の定めるセミフローは強 ρ-パーシステント．

参考文献

[1] K. Okuwa, H. Inaba and T.Kuniya, Mathematical analysis for an age-structured SIRS epidemic model, Math. Biosci. Eng., 16(5) (2019), pp. 6071-6102.

[2] H. L. Smith and H. R. Thieme, Dynamical Systems and Population Persistence, Graduate Studies in Mathematics 118, Amer. Math. Soc. Providence, Rhode Island, 2011.

Spread of mosquito borne diseases and the effects of sexual transmission on Zika Virus

Sasmal Sourav Kumar
Aoyama Gakuin University
e-mail : sourav.sasmal@gem.aoyama.ac.jp

概要

Mosquitoes are one of the deadliest animals in the world. More countries are reporting their first outbreak of mosquito borne disease, especially dengue. Sustained mosquito control efforts are important to prevent outbreaks from these diseases. However, unlike other mosquito borne disease, Zika can be transmitted through direct sexual contacts. There is an ongoing debate, whether Zika to be classify as a sexually transmitted infection (STI). As a public health perspective, it is very important to understand whether sexual transmission of Zika is sustained or sporadic. The extent of the sexual transmission of Zika is unknown, and it is of both interest and importance to better understand and quantify the relative role of the sexual transmission among the overall transmission of Zika. Moreover, mice experiment suggests that sexual transmission may lead to higher risk of microcephaly, associated with Zika virus. Our study objective is to quantify the relative role of sexual vs vector transmission in the spread of Zika virus, and identify the important factors, which fits real epidemic data.

異なる境界条件下での空間拡散を伴う感染齢構造化 SIR モデルの解析

Abdennasser Chekroun[1], 國谷 紀良 [2]
[1]University of Tlemcen，[2] 神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail : tkuniya@port.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

感染症の地理的伝播を考察する上で，空間拡散を伴う反応拡散方程式系の数理モデルを構築することが現実的と考えられる．感染症の初期侵入時における流行規模を表す指標として知られる基本再生産数 $\mathcal{R}_0$ [1] は，基本的な常微分方程式系のモデルであれば，感染人口の大域的な漸近挙動も決定する意味で完全な閾値となる．すなわち，$\mathcal{R}_0 < 1$ ならば感染症の根絶を意味する disease-free な自明定常解が大域的に漸近安定となる一方で，$\mathcal{R}_0 > 1$ ならば感染症の定着を意味するエンデミックな正の非自明定常解が大域的に漸近安定となる．一方で，複雑な構造をもつモデルにおいては，そのような閾値的性質が成立するかどうかは自明ではなく，例外的なケースも多く存在するため，個別の解析が求められる．本研究では，空間一様な係数をもつ感染齢構造化 SIR モデルに対し，ノイマン境界条件とディリクレ境界条件の 2 通りを考え，解の漸近挙動と $\mathcal{R}_0$ について比較考察を行う．

2 モデル

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \{1, 2, \ldots\}$ を，なめらかな境界 $\partial\Omega$ をもつ有界領域とする．本研究では，次のような空間拡散を伴う感染齢構造化 SIR モデルを考える：$t > 0$，$a > 0$ および $x \in \Omega$ に対し，

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S(t,x)}{\partial t} = d_1 \Delta S + b - [\lambda(t,x) + \mu] S, \\ \left(\dfrac{\partial}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial a}\right) I(t,a,x) = d_2 \Delta I - [\mu + \gamma(a)] I, \\ I(t,0,x) = \lambda(t,x) S, \\ \dfrac{\partial R(t,x)}{\partial t} = d_3 \Delta R + \displaystyle\int_0^{\infty} \gamma(a) I(t,a,x) \mathrm{d}a - \mu R, \\ \lambda(t,x) = \displaystyle\int_0^{+\infty} \beta(a) I(t,a,x) \mathrm{d}a. \end{cases} \tag{1}$$

ここで t は時間，a は感染齢（感染後の経過時間），x は位置を表す独立変数であり，S は未感染人口，I は感染人口，R は回復人口を表す．b は出生率，μ は死亡率，$\gamma(a)$ は回復率，$\beta(a)$ は感染伝達係数，d_1, d_2, d_3 は拡散係数を表し，次の仮定を満たすものとする．

(A1) $b, \mu, d_1, d_2, d_3 > 0$.

(A2) $\gamma(\cdot) \in L^{\infty}_{+}(\mathbb{R}_+)$.

(A3) $\beta(\cdot) \in L^{\infty}_{+}(\mathbb{R}_+) \cap L^1_+(\mathbb{R}_+)$ であり，ある $0 < a_1 < a_2 < +\infty$ が存在して，任意の $a \in (a_1, a_2)$ に対し，$\beta(a) > 0$.

モデル (1) に対し，本研究では 2 種類の境界条件についてそれぞれ考える．すなわち，ノイマン境界条件

$$\frac{\partial S(\cdot,x)}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial I(\cdot,x)}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial R(\cdot,x)}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad x \in \partial\Omega \tag{2}$$

およびディリクレ境界条件

$$S(\cdot,x) = I(\cdot,x) = R(\cdot,x) = 0, \quad x \in \partial\Omega \tag{3}$$

についてそれぞれ考える．初期条件は

$$S(0,x) = \phi_1(x), \quad I(0,a,x) = \phi_2(a,x), \\ R(0,x) = \phi_3(x), \quad a \geq 0, \quad x \in \overline{\Omega}$$

とする．

時間 t での位置 x における新規感染人口を $u(t,x) := I(t,0,x)$ と表す．特性線に沿った積分を行うことで，モデル (1) を次のように変換できる：$t > 0$ および $x \in \Omega$ に対し，

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S(t,x)}{\partial t} = d_1 \Delta S + b - u(t,x) - \mu S, \\ u(t,x) = F_{\phi_2}(t,x) S \\ +S \displaystyle\int_0^t \beta(a) \ell(a) \int_\Omega \Gamma_2(a,x,y) u(t-a,y) \mathrm{d}y \mathrm{d}a. \end{cases} \tag{4}$$

ここで $\ell(a) := \mathrm{e}^{-\int_0^a [\mu + \gamma(\sigma)] \mathrm{d}\sigma}$ および

$$F_{\phi_2}(t,x) := \\ \int_t^{+\infty} \beta(a) \frac{\ell(a)}{\ell(a-t)} \int_\Omega \Gamma_2(t,x,y) \phi_2(a-t,y) \mathrm{d}y \mathrm{d}a$$

であり，Γ_i $(i = 1, 2)$ は，次の性質を満たす（$d_i \Delta$ に関する）拡散方程式の基本解 [2] である．

(G1) 任意の $t > 0$ および $x, y \in \Omega$ に対し，$\Gamma_i(t,x,y) > 0$.

(G2) 任意の $t > 0$ および $x \in \overline{\Omega}$ に対し，$\int_\Omega \Gamma_i(t,x,y) \mathrm{d}y \leq 1$.

(G3) 任意の $t > 0$ および $x, y \in \overline{\Omega}$ に対し，$\Gamma_i(t,x,y) = \Gamma_i(t,y,x)$.

3 基本再生産数 $\mathcal{R}_0$

モデル (4) の disease-free な自明定常解 E_0 : $(S, u) = (S_0, 0)$ は，方程式

$$0 = d_1 \Delta S_0(x) + b - \mu S_0(x), \quad x \in \Omega$$

および各境界条件を満たすものであり，基本解 Γ_1 を用いて次のように与えられる．

$$S_0(x) = b \int_0^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mu a} \int_\Omega \Gamma_1(a, x, y) \mathrm{d}y \mathrm{d}a, \quad x \in \overline{\Omega}.$$

特にノイマン境界条件 (2) の場合は，$\int_\Omega \Gamma_1 \mathrm{d}y = 1$ であることから，$S_0(x) \equiv b/\mu$ となる．基本再生産数 $\mathcal{R}_0$ の定義 [1] に従い，次世代作用素

$$\mathcal{K}\varphi(x) := \\ S_0(x) \int_0^{+\infty} \beta(a)\ell(a) \int_\Omega \Gamma_2(a, x, y)\varphi(y) \mathrm{d}y \mathrm{d}a$$

のスペクトル半径 $r(\mathcal{K})$ として $\mathcal{R}_0$ が与えられる．ただし $\varphi \in C(\overline{\Omega}, \mathbb{R}_+)$ である．有界かつコンパクトな正値線形作用素に対するクレイン・ルトマンの定理 [3] より，$R_0 = r(\mathcal{K})$ は正の固有ベクトルに対応する $\mathcal{K}$ の固有値であることが分かる．特に，ノイマン境界条件 (2) の場合は，

$$\mathcal{R}_0 = \frac{b}{\mu} \int_0^{+\infty} \beta(a)\ell(a) \mathrm{d}a \tag{5}$$

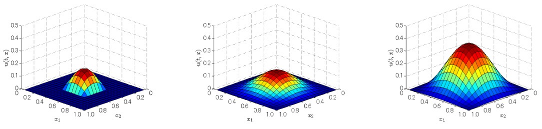
のように $\mathcal{R}_0$ は具体的に与えられる．

初期条件に関する適切な仮定のもとで，モデル (4) には有界な正の時間大域古典解が存在し，解の漸近挙動は $\mathcal{R}_0$ によって決定されることが分かる．すなわち，$\mathcal{R}_0 < 1$ ならば disease-free な自明定常解 E_0 が大域吸引的となる一方で，$\mathcal{R}_0 > 1$ ならばエンデミックな正の非自明定常解 E^* : $(S, u) = (S^*, u^*)$ が存在し，系が一様パーシステントとなることが分かる [4, 5]．これは，$\mathcal{R}_0$ が感染症の将来的な根絶と定着を左右する閾値であることを意味する．

4 数値実験

長方形領域 $\Omega = (0, \ell_1) \times (0, \ell_2)$ におけるディリクレ境界条件 (3) の場合を考える．適当に固定したパラメータのもとで，$\ell_1 = p$, $\ell_2 = 1/p$（$p > 0$）とし，p を変化させたときの $\mathcal{R}_0$ の変化と，それに伴う新規感染人口 $u(t, x)$ の漸近挙動を調べる．

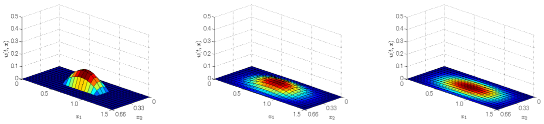
$p = 1$ としたとき，$\mathcal{R}_0 \approx 1.1450 > 1$ となる．このとき，$u(t, x)$ はある正の分布に収束する（図 1）．これは，感染症の定着を意味する．



(a) $t = 0$.　(b) $t = 1$.　(c) $t = 10$.

図 1. $u(t, x)$ の時間変化（$p = 1$, $\mathcal{R}_0 \approx 1.1450 > 1$）

一方，$p = 1.5$ としたとき，$\mathcal{R}_0 \approx 0.8694 < 1$ となる．このとき，$u(t, x)$ はゼロに収束する（図 2）．これは，感染症の根絶を意味する．



(a) $t = 0$.　(b) $t = 1$.　(c) $t = 10$.

図 2. $u(t, x)$ の時間変化（$p = 1.5$, $\mathcal{R}_0 \approx 0.8694 < 1$）

領域の面積 $|\Omega| = \ell_1 \ell_2 = 1$ が一定であることに注意すると，以上の結果は，ディリクレ境界条件 (3) の場合，$\mathcal{R}_0$ が空間領域 Ω の形状に依存して変化することを意味する．これは，$\mathcal{R}_0$ が Ω によらずに一定値 (5) で与えられるノイマン境界条件 (2) の場合とは対照的である．

謝辞　本研究は，JSPS 科研費（若手研究 B・15K17585 および若手研究・19K14594）の助成を受けたものです．

参考文献

[1] H. Inaba, Age-Structured Population Dynamics in Demography and Epidemiology, Springer, 2017.

[2] 伊藤清三，拡散方程式，紀伊國屋書店，1979.

[3] H. Amann, Fixed point equations and nonlinear eigenvalue problems in ordered Banach spaces, SIAM Review, Vol.18 (1976), 620–709.

[4] A. Chekroun, T. Kuniya, An infection age-space structured SIR epidemic model with Neumann boundary condition, Applicable Analysis, (2018). DOI: 10.1080/00036811.2018.1551997

[5] A. Chekroun, T. Kuniya, Global threshold dynamics of an infection age-structured SIR epidemic model with diffusion under the Dirichlet boundary condition, submitted.

免疫減衰をもつ感染症数理モデルにおける周期流行

中田 行彦[1], 大森 亮介[2], 楊 柳[3]
[1] 島根大学総合理工学部数理科学科 [2] 北海道大学人獣共通感染症リサーチセンター [3] 東北師範大学数学与統計学院
e-mail : ynakata@riko.shimane-u.ac.jp

1 Introduction

In the paper [1] we consider the determinant of the periodic outbreak of a childhood disease, it Mycoplasma Pneumoniae, in Japan. Mathematical modelling and analysis show that minor variation of the immunity period among individuals is essential to explain the periodic outbreak of the incidence. In this note and the presentation, we consider mathematical properties of a simplified mathematical model, yet produces instability of an equilibrium and periodic oscillation due to the small variation of the immunity period. We assume that the infectious period is exponentially distributed and that the infectious period is fixed among individuals (i.e. the variance is 0), see [4]. Such a model has been mathematically studied in [2, 3, 5]. In this note we sketch stability analysis of equilibria and proof for the existence of a periodic solution in a special setting.

To introduce a mathematical model, let us denote by $S(t)$ the fraction of susceptible population at time t and by $I(t)$ the fraction of infective population at time t. We consider

$$S'(t) = -\beta S(t)I(t) + \gamma I(t-\tau), \tag{1a}$$

$$I'(t) = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t). \tag{1b}$$

The model has parameters: transmission coefficient $\beta > 0$ and the recovery rate $\gamma > 0$. Note that $\gamma I(t-\tau)$ denotes the number of individuals who recover at time $t-\tau$. It is assumed that those individuals lose immunity at time t and return to the original susceptible class.

The fraction of recovered population is

$$R(t) = \int_0^\tau \gamma I(t-a)da.$$

The initial condition is given such that each variable is positive and the total population remains to be 1 ([6]). For the well-posedness of the problem, we refer the reader to [7, 8] and references therein.

2 Scalar delay differential equation

Using $S(t) = 1 - I(t) - R(t)$, we obtain the following scalar delay differential equation

$$I'(t) = I(t)(\beta(1-I(t)-\gamma\int_0^\tau I(t-s)ds)-\gamma). \tag{2}$$

Define the basic reproduction number as $R_0 := \frac{\beta}{\gamma}$. Then one sees that if $R_0 \le 1$ then the trivial equilibrium is asymptotically stable. If $R_0 > 1$ then the trivial equilibrium is unstable and the equation (2) has a positive equilibrium $\overline{I} := \frac{1-\frac{1}{R_0}}{1+\gamma\tau}$.

To analyze the differential equation (2), we normalize the equation (2) defining $x(t) := \frac{\gamma\tau}{1-1/R_0}I(t)$ and subsequently introduce the nondimensional time $t \to \frac{t}{\tau}$. Using t to denote the nondimensional time, we finally obtain

$$x'(t) = rx(t)(1-\alpha x(t) - \int_0^1 x(t-s)ds) \tag{3}$$

where $(r, \alpha) := (\gamma\tau(R_0-1), \frac{1}{\gamma\tau})$. For the equation (3) the initial condition is $x(\theta) = \psi(\theta) \ge 0,\ \theta \in [-1, 0],\ \psi(0) > 0$, where ψ is a continuous function.

3 Stability analysis

Let us assume $r > 0$, corresponding to $R_0 > 1$. The equation has a positive equilibrium $\overline{x} = \frac{1}{1+\alpha}$. The characteristic equation for the positive equilibrium is computed as

$$\lambda = -a - b\int_0^1 e^{-\lambda s}ds,\ \lambda \in \mathbb{C}. \tag{4}$$

where $a = \frac{r\alpha}{1+\alpha},\ b = \frac{r}{1+\alpha}$. One can analyze the characteristic equation (4), following Chapter XI of [7]. The equation has a root $\lambda = 0$ if and only if $a+b=0$, which is equivalent to $r=0$. The equation has a root $\lambda=\pm i\omega,\ \omega\in\mathbb{R}$ if and only if

$$r=\frac{\omega(\omega-\sin\omega)}{1-\cos\omega},\ \alpha=-\frac{\sin\omega}{\omega}. \qquad (5)$$

Using 5, stable and unstable parameter regions are visualized, where the positive equilibrium is stable or unstable, respectively, see [4, 7].

4 Periodic solution

If the parameter (r,α) is in the unstable parameter region, numerically one can observe that many positive solutions of the differential equation (3) tends to a periodic solution around the positive equilibrium.

In the paper [6], we study the periodic solution of the equation (3), letting $\alpha\downarrow 0$ (corresponding to $\gamma\tau\to\infty$). The differential equation (3) becomes

$$x'(t)=rx(t)(1-\int_0^1 x(t-s)ds). \qquad (6)$$

One can see that the equilibrium $x=1$ is unstable if $r>\frac{\pi^2}{2}$. We construct a periodic solution of (6), satisfying $x(t)=x(t+2),\ t\in\mathbb{R}$, by the application of Kaplan and York [9]. The periodic solution is given by the elliptic functions. Stability analysis of the periodic solution is a future work.

5 Boosting of the immunity

Let us assume that the immunity of recovered individuals is boosted by contacting with infectives ([10, 11]). The change of the number of recovered individuals can be given as

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial a}\right)r(t,a)=-\beta\sigma r(t,a)I(t),$$
$$r(t,0)=\gamma I(t)+\beta\sigma I(t)\int_0^\tau r(t,a)da.$$

Here σ denotes susceptibility of the recovered individuals. Existence and stability of equilibria of the mathematical model is studied in the paper [12].

6 Discussion

We study an SIRS epidemic model that has a simple looking, yet it shows destabilization of the endemic equilibrium. The study is motivated by the periodic outbreak of it Mycoplasma Pneumoniae in Japan ([1]). Asymptotic stability of equilibria is studied in [4]. In [12] stability analysis is performed for the model with boosting of immunity. However, many qualitative properties are not rigorously analyzed, such as global asymptotic stability of the positive equilibrium and the existence of periodic solutions. Population demography, which is ignored in this note, add another layer of complexity, and it may induce double Hopf bifurcation. Cross-immune reaction could introduce another nonlinearity. We plan to investigate the transmission dynamics that the SIRS model exhibits.

謝辞 The author was supported by JSPS Fellows, No. 16K20976 of Japan Society for the Promotion of Science.

参考文献

[1] R. Omori etal., Scientific Reports 5, 14473 (2015)
[2] S. Gonçalves etal., The European Phys. J. B-Cond. Matt. Comp. Sys., 81(3) pp. 363–371 (2011)
[3] Y.N. Kyrychko, K.B. Blyuss, Nonlinear Anal. RWA. 6 pp. 187-204 (2005)
[4] H.W. Hethcote etal., SIAM J. Appl. Math., 40 pp. 1-9 (1981)
[5] M.L. Taylor, T.W. Carr, J. Math. Bio. 59 (6) pp. 841-880 (2009)
[6] Y. Nakata, J. Dyn. Diff. Eqs. (in press)
[7] O. Diekmann etal., Springer Verlag (1991)
[8] H. Smith, Springer. (2010)
[9] J.L. Kaplan, J.A. Yorke, J. Math. Anal. Appl., 48, 317–324 (1974)
[10] H. Inaba, Springer (2017)
[11] J.L. Aron, Math. Biosci. (1983)
[12] L. Yang, Master thesis, Shimane University (2019)

離散二次元戸田方程式によるタイリングの数え上げ

上岡 修平 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : kamioka.shuhei.3w@kyoto-u.ac.jp

1 アステカダイヤモンドのタイリング

与えられた領域を決められた図形（タイル）で重複なく覆うことをタイリングという．ここではアステカダイヤモンド (Aztec diamond) をドミノでタイリングすることを考える．次数 n のアステカダイヤモンド AD_n は正方形 $\{(x,y) \in \mathbb{R}^2;\ |x|+|y| \le n+1\}$ に含まれかつ整数点に頂点を持つ単位正方形の合併である．またドミノは辺の長さが 1×2 または 2×1 の長方形である．図 1 にアステカダイヤモンドのタイリングの例を示す．

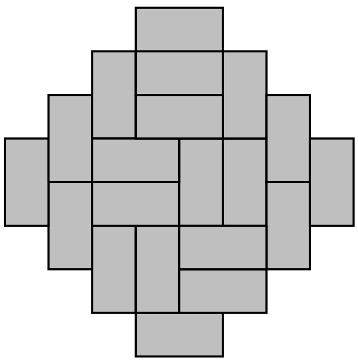


図 1. アステカダイヤモンド AD_4 のタイリング．

アステカダイヤモンドのタイリングは組合せ論においてよく研究されている．特に厳密に数え上げられるという面白い性質を持っている．

定理 1 (Elkies–Kuperberg–Larsen–Propp [1])**.** アステカダイヤモンド AD_n のタイリングの総数はちょうど $2^{\frac{n(n+1)}{2}}$ に等しい．

この定理に対してはさまざまな証明が与えられており，アステカダイヤモンドを最初に導入した Elkies 等は 4 つの異なる証明を与えている [1]．また本稿の著者もローラン双直交多項式の組合せ論的解釈に基づく証明を与えている [2]．本稿では可積分系の組合せ論への応用として，離散二次元戸田方程式による定理 1 の新しい証明を与える．この証明は，より一般の重みに対して適用可能な本稿の主定理（定理 2）に基づいている．

2 タイリングの母関数

アステカダイヤモンド AD_n に対して xy 座標の代わりに

$$\xi = \frac{x-(y+n+1/2)}{\sqrt{2}}, \tag{1a}$$

$$\eta = \frac{x+(y+n+1/2)}{\sqrt{2}} \tag{1b}$$

による $\xi\eta$ 座標を導入する．図 2 のように $\xi\eta$ 座標はアステカダイヤモンドを斜めに貫く．

アステカダイヤモンドのタイリングに含まれるドミノは $\xi\eta$ 座標を用いて次の 4 つに分類できる．

横 I 型 左右の縦辺に整数点を持つ横ドミノ．

横 II 型 内部に整数点を持つ横ドミノ．

縦 I 型 左縦辺の整数点が右縦辺の整数点より上にある縦ドミノ．

縦 II 型 左縦辺の整数点が右縦辺の整数点より下にある縦ドミノ．

図 1 のタイリングに対して各ドミノをこのように分類したものを図 2 に示す．青いドミノが横または縦 I 型で，赤いドミノが同 II 型である．

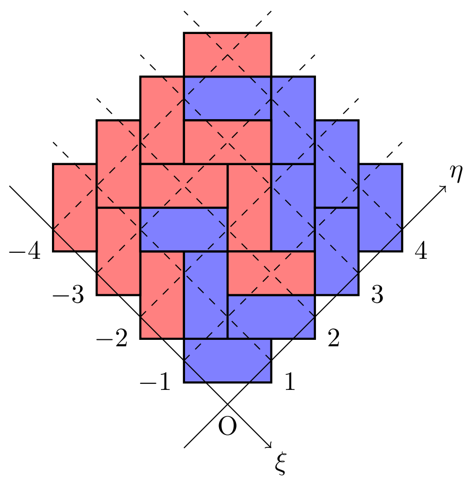


図 2. $\xi\eta$ 座標とドミノの分類．青いドミノが I 型で赤いドミノが II 型．

アステカダイヤモンドのタイリング T に対して，その重み $w(T)$ を次のように定める．K を任意の体とし，K 上の配列 $Y=(y_{i,j})$，$Z=(z_{i,j})$

を任意にとる．ただし $i,j\in\mathbb{Z}$ である．タイリングに含まれるドミノ t に対して，その重み $w(t)$ を次で定める．

- 縦 I 型 : 左縦辺に整数点 (i,j) を持つとき $w(t)=y_{i,j}$.
- 横 I 型 : 左縦辺に整数点 (i,j) を持つとき $w(t)=z_{i,j}$.
- 縦または横 II 型 : $w(t)=1$.

このとき $w(T):=\prod_{t\in T}w(t)$ とする．例えば図 2 のタイリングの重みは，縦および横 I 型ドミノの重みを集めた

$$
\begin{aligned}
w(T)=y_{-1,3}y_{-1,4}y_{-2,1}y_{-2,3}y_{-2,4}y_{-3,4}\\
\times z_{-1,0}z_{-1,1}z_{-3,1}z_{-4,3}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

である．

こうして定めたタイリングの重みを用いて母関数（または分配関数）

$$
g_n(Y,Z):=\sum_T w(T)
$$

を定める．ただし右辺の和において T はアステカダイヤモンド AD_n のタイリングすべてにわたって動く．

3 離散二次元戸田方程式

離散力学系

$$
b_{i,j}^{(t+1)}+c_{i,j}^{(t+1)}=b_{i,j+1}^{(t)}+c_{i,j}^{(t)}, \tag{3a}
$$

$$
b_{i,j}^{(t+1)}c_{i+1,j}^{(t)}=b_{i+1,j+1}^{(t)}c_{i,j}^{(t+1)}, \tag{3b}
$$

$$
t,i,j\in\mathbb{Z} \tag{3c}
$$

を考える．この系は可逆な独立変数変換により N ソリトン解を持つ離散可積分系である**離散二次元戸田方程式** [3]

$$
q_n^{(s,t+1)}+e_n^{(s+1,t)}=q_n^{(s,t)}+e_{n+1}^{(s,t)}, \tag{4a}
$$

$$
q_{n-1}^{(s,t+1)}e_n^{(s+1,t)}=q_n^{(s,t)}e_n^{(s,t)}, \tag{4b}
$$

$$
s,t,n\in\mathbb{Z} \tag{4c}
$$

に移る．そのため本稿では系 (3) を離散二次元戸田方程式とよぶ．

次が本稿の主定理である．

定理 2. b,c を離散二次元戸田方程式 (3) の解とする．このとき

$$
y_{i,j}=b_{i,j}^{(0)},\quad z_{i,j}=c_{i,j}^{(0)},\quad i,j\in\mathbb{Z} \tag{5}
$$

により定まる配列 $Y=(y_{i,j})$，$Z=(z_{i,j})$ に関して

$$
\begin{aligned}
&g_n(Y,Z)\\
&=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{n-i}\frac{b_{j-i+1,j+1}^{(i-1)}}{b_{i-1,i+j}^{(0)}}(b_{j-i,j+1}^{(i-1)}+c_{j-i,j}^{(i-1)})
\end{aligned}
\tag{6}
$$

が成り立つ．

この定理は離散二次元戸田方程式の任意の解から，積表示を持つアステカダイヤモンドのタイリングの母関数 $g_n(Y,Z)$ をつくれることを示している．

定理 1 は定理 2 の系として導くことができる．離散二次元戸田方程式 (3) は 0 ソリトン解

$$
b_{i,j}^{(t)}=c_{i,j}^{(t)}=1,\quad t,i,j\in\mathbb{Z}
$$

を持つ．従って定理 2 より配列 $Y=Z=\mathbf{1}$ に関して $g_n(\mathbf{1},\mathbf{1})=2^{\frac{n(n+1)}{2}}$ が成り立つ．一方このとき任意のタイリング T に対して $w(T)=1$ より $g_n(\mathbf{1},\mathbf{1})$ は AD_n のタイリングの総数に等しい．ゆえに AD_n のタイリングの総数は $2^{\frac{n(n+1)}{2}}$ に等しい．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K03402 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] N. Elkies, G. Kuperberg, M. Larsen and J. Propp, *Alternating-sign matrices and domino tilings, I–II*, J. Algebraic Combin. **1** (1992), 111–132 (I), 219–234 (II).

[2] S. Kamioka, *Laurent biorthogonal polynomials, q-Narayana polynomials and domino tilings of the Aztec diamonds*, J. Combin. Theory Ser. A **123** (2014), 14–29.

[3] R. Hirota, S. Tsujimoto and T. Imai, *Difference scheme of soliton equations*, in: Sūrikaisekikenkyūsho Kōkyūroku, 822, pp. 144–152, 1993.

Krawtchouk 多項式で表せる optimal design

飯田 明寛 [1]
[1] 京都大学大学院 情報学研究科
e-mail : iida.akihiro.56x@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

以下の多項式回帰モデルに対して, 未知パラメータベクトル $\boldsymbol{\theta}$ を推測するための観測を n 回行ったとする. i 回目の観測結果を

$$y_i = \boldsymbol{f}(x_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta} + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

とする. また, $\boldsymbol{f}(x) = (1, x, \ldots, x^{k-1})^{\mathrm{T}}$ で, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_{k-1})^{\mathrm{T}}$ は未知の実パラメータからなる k 次ベクトルである. ここで, ϵ は誤差を表す確率変数であり, 平均は $E(\epsilon|x) = 0$ を満たす. 観測点は $x \in [0, 1]$ を満たす.

データを取る観測点をうまく選ぶことにより, この回帰分析を精度良く行うことを考える. 最も精度が良くなる観測点 x_i と観測回数の割合 $w(x_i)$ の組は optimal design と呼ばれる. 本講演では, 特に, 精度の良さの指標として, 未知パラメータベクトル θ の最良線形不偏推定量の共分散行列の行列式を用いる D-optimal design を考える.

観測点 x_i と観測回数の割合 $w(x_i)$ は区間 $[0, 1]$ 上の確率測度と同一視することができる. また, $[0, 1]$ 上の確率測度において, カノニカルモーメントを定義することができる [1]. 多項式回帰モデルの D-optimal design を求める際に, 最適化問題をカノニカルモーメントを用いて書き直すことが有効となる場合があることが知られている [1, 2].

本講演では, 0 次から m 次までの重み付き多項式回帰モデルに対する D-optimal design をすべて同時に考慮する場合を考える. このとき, optimal design に対応するカノニカルモーメントが解析的に求められ, さらに, $2(m+1)$ 個のパラメータを特別な値に定めると, optimal design を Krawtchouk 多項式を用いて表せることを示す.

2 カノニカルモーメントと確率測度

本章では, カノニカルモーメントの定義と目的関数を最小化するカノニカルモーメント列 $(p_1, p_2, \ldots)$ が得られた後, それに対応する確率測度を求める方法を紹介する.

カノニカルモーメント p_k は

$$p_k = \frac{c_k - c_k^-}{c_k^+ - c_k^-}$$

で定義される. ただし, c_k は k 次モーメントであり, c_k^+, c_k^- は $k-1$ 次までのモーメントを固定したときの k 次モーメントの最大値と最小値である [1, p.11].

以下では, カノニカルモーメント列として $(p_1, p_2, \ldots, p_{2k-1}, 1)$ を考える. これに対応する離散的な確率測度を μ とするとき, μ に関する直交多項式列を $\{P_k\}$ とする.

ここで, 確率測度 μ の Stieltjes 変換は

$$S(z, \mu) = \sum_{k=1}^{l+1} \frac{w_k}{z - x_k} = \frac{P_l^*(z)}{z(z-1)P_{l-1}^{(\{0,1\})}(z)}$$

となることが知られている. このことから, 観測点 $x_1, x_2, \ldots, x_{l+1}$ は $z(z-1)P_{l-1}^{(\{0,1\})}(z)$ の零点となり, 観測回数の割合 w_k は

$$w_k = \lim_{z \to x_k} \frac{(z - x_k)P_l^*(z)}{z(z-1)P_{l-1}^{(\{0,1\})}(z)},$$
$$k = 1, 2, \ldots, l+1$$

で求められる [1, p.91]. ただし, $\{P_k^*\}$ はカノニカルモーメント列 $(1-p_1, 1-p_2, \ldots, 0)$ に対応する離散確率測度 μ^* に関する直交多項式列で, $\{P_k^{(\{0,1\})}\}$ は直交多項式列 $\{P_k\}$ をパラメータに 0 と 1 を選び, 2 回 Christoffel 変換して得られる直交多項式列である.

3 D-optimal design の例

重み付き多項式回帰モデルに対する D-optimal design を考える. 重み付き多項式回帰モデルでは不等分散性の場合を扱う. つまり, 観測結果の分散が

$$\frac{\sigma^2}{x^{1+\alpha}(1-x)^{1+\beta}}$$

と観測点 x に依存する状況を考える. ここで, 実数 $\alpha, \beta > -1$ を満たし, σ は正の定数である. $m+1$ 個の観測点で全て同じ回数だけ観測する

と仮定すると, 最適化問題の目的関数はカノニカルモーメントを用いて

$$\prod_{j=1}^{m+1} p_{2j-1}^{\alpha+m-j+2}(1-p_{2j-1})^{\beta+m-j+2}$$
$$\prod_{j=1}^{m} p_{2j}^{m-j+1}(1-p_{2j})^{\alpha+\beta+m-j+2} \qquad (1)$$

と書き下されることが知られている. このとき, optimal dsign の観測点 $x_1, x_2, \ldots, x_{m+1}$ は

$$z(z-1)J_{m+1}^{(\alpha,\beta)}(z)$$

の零点になることが知られている. ただし, $J_{m+1}^{(\alpha,\beta)}(z)$ は パラメータ α, β をもつ $m+1$ 次の Jacobi の直交多項式である [2].

4 複合的な optimal design

多種多様な要求にも対応できるように複数のモデルや最適性基準を同時に考慮した複合的な optimal design が考えられている. 本講演では, 複数のモデルの目的関数の積を新たな目的関数とした場合の optimal design を複合的な optimal design とする.

$k = 0, 1, \ldots, m$ について式 (1) の総積をとると, 複合的な optimal design を定める最適化問題の目的関数は,

$$\prod_{j=1}^{m+1} p_{2j-1}^{\sum_{k=j-1}^{m}(\alpha_k+m-k+1)} q_{2j-1}^{\sum_{k=j-1}^{m}(\beta_k+m-k+1)}$$
$$\prod_{j=1}^{m} p_{2j}^{\sum_{k=j}^{m}(m-k+1)} q_{2j}^{\sum_{k=j}^{m}(\alpha_k+\beta_k+m-k+2)} \qquad (2)$$

と表される. ただし, $q_k = 1 - p_k$ である.

目的関数 (2) の極値を調べることで最適解であるカノニカルモーメントは容易に求められ, $2m+2$ 個のパラメータ α_k, β_k $(k = 0, 1, \ldots, m)$ をある値に定めると,

$$p_{2j-1} = p, \quad j = 1, 2, \ldots, m,$$
$$p_{2j} = \frac{j}{N}, \quad j = 1, 2, \ldots, m-1,$$
$$p_{2m} = 1$$

と表せる. 2 章の手法を用いると, 観測点は,

$$K_m(Nx-1; p, N-2)$$

の零点と 0, 1 であり, 観測回数の割合は,

$$w_k = \lim_{z \to x_k} \frac{(z-x_k)K_m^*(Nz; p, N)}{z(z-1)K_{m-1}(Nz-1; p, N-2)}$$
$$k = 1, 2, \ldots, m+1$$

で求められることがわかった. $K_m(x; p, N)$ はパラメータ $p \in (0,1), N \geq m$ をもつ m 次のモニックな Krawtchouk の直交多項式である.

さらに, $m = N$ の場合の複合的な optimal design の数値結果を以下に記載する. ここで $p = 1/5, m = 10$ としている.

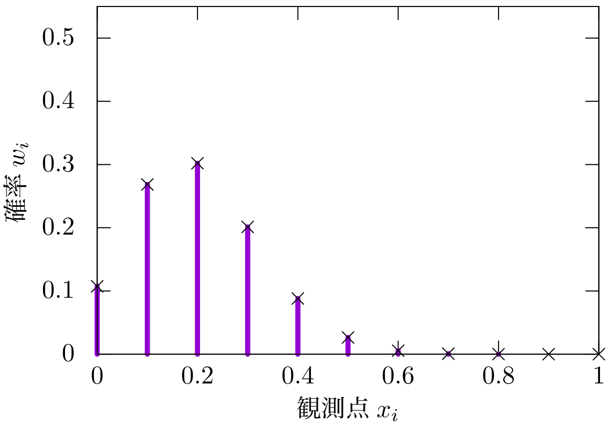


図 1. $p = 1/5, m = 10$ のときの複合的な optimal design

optimal design はパラメータ $p = 1/5$ の二項分布になっていることがわかる. これはカノニカルモーメントからも確かめられる結果である.

参考文献

[1] Dette H. and Studden W. J., The Theory of Canonical Moments with Applications in Statistics, Probability, and Analysis, John Wiley and Sons, New York, 1997.

[2] Antille G., Dette H. and Weinberg A., *A note on optimal designs in weighted polynomial regression for the classical efficiency functions*, Journal of Statistical Planning and Inference, **113**(2003), 285-292.

離散二次元戸田方程式を応用した平面分割の解析

伊藤 眞麻 [1], 上岡 修平 [1]
[1] 京都大学 大学院情報学研究科
e-mail : ito.mawo.65s@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

本研究は，上岡 [1] により発見された離散二次元戸田方程式の解と平面分割の積型母関数との一般的な関係を利用して，既存の母関数を拡張することを目的とする．そのために，Askey スキームに含まれる直交多項式から離散二次元戸田方程式の解を構成する．

2 平面分割と積型母関数

平面分割は自然数の分割の一般化として MacMahon [2] により導入され，以降活発に研究されている組合せ論的オブジェクトである．以下の二つの条件を満たす非負整数の二次元配列 $\pi = (\pi_{i,j})_{i,j\geq 1}$ を**平面分割**という．

1) 配列 π は各行，各列に関して単調非増加である．つまり任意の $i, j \in \mathbb{N}$ に対して $\pi_{i,j} \geq \pi_{i+1,j}$ かつ $\pi_{i,j} \geq \pi_{i,j+1}$ を満たす．
2) 配列 π の要素は有限個を除いて 0 である．

平面分割 π の成分の総和 $|\pi|$，トレース $\mathrm{tr}(\pi)$ をそれぞれ

$$|\pi| \triangleq \sum_{i,j\geq 1} \pi_{i,j}, \quad \mathrm{tr}(\pi) \triangleq \sum_{i\geq 1} \pi_{i,i}$$

と定める．例えば配列

$$\pi_{ex} \triangleq \begin{pmatrix} 4 & 4 & 2 & 2 & 0 & \cdots \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 & \cdots \\ 4 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

は，$|\pi_{ex}| = 27$, $\mathrm{tr}(\pi_{ex}) = 7$ の平面分割である．自然数 $r, c, n \in \mathbb{N}$ に対し平面分割の集合 $\mathrm{PP}(r, c, n)$ を，第 $m+1$ 行以降と第 $c+1$ 列以降の要素が全て 0 であり，全ての自然数 i, j について $\pi_{i,j} \leq c$ を満たす平面分割の集合と定める．

平面分割の特徴は，**積型母関数**を豊富に持つことである．積型母関数という言葉に厳密な定義はないが,「(和) = (積)」の形に書ける母関数を積型母関数とよぶ．代表的な例は MacMahon [2] により構成された以下の母関数である．

$$\sum_{\pi\in\mathrm{PP}(r,c,n)} q^{|\pi|} = \prod_{i=1}^{r}\prod_{j=1}^{c}\prod_{k=1}^{n} \frac{1-q^{i+j+k-1}}{1-q^{i+j+k-2}}$$

3 離散二次元戸田方程式と平面分割の積型母関数

離散二次元戸田方程式は戸田方程式の離散類似のひとつ

$$a_n^{(s,t+1)} + b_n^{(s+1,t)} = a_n^{(s,t)} + b_{n+1}^{(s,t)}, \tag{1a}$$

$$a_n^{(s,t+1)} b_{n+1}^{(s+1,t)} = a_{n+1}^{(s,t)} b_{n+1}^{(s,t)}, \tag{1b}$$

$$b_0^{(s,t)} = 0, \quad \forall s, t, n \in \mathbb{Z},\ n \geq 0 \tag{1c}$$

である．詳しくは広田ら [3] を参照のこと．上岡 [1] は，離散二次元戸田方程式を組合せ論的に解釈し τ 関数を平面分割の重み付き和と結びつけることにより，離散二次元戸田方程式の任意の非零解から平面分割の積型母関数を構成する一般的な手法を開発した．上岡の研究 [1] では，母関数の重みはある格子グラフの重みを用いて記述されるが，以下では本研究での用途に合わせ重みの書き方を変更している．

定理 1 (上岡 [1]) $a_n^{(s,t)}, b_n^{(s,t)}$ は，離散二次元戸田方程式 (1) を満たし，任意の $s, t, n \in \mathbb{Z}$, $n \geq 0$ で $a_n^{(s,t)} \neq 0$ であり，また任意の $s, t, n \in \mathbb{Z}$, $n \geq 1$ で $b_n^{(s,t)} \neq 0$ を満たすとする．このとき下式が成立する．

$$\sum_{\pi\in\mathcal{PP}(r,c,n)} \Phi(\pi, r, c, n)\Omega(\pi, r, c, n)\Psi(\pi, r, c, n) = \prod_{i=0}^{r-1}\prod_{j=0}^{c-1}\prod_{k=0}^{n-1} \frac{a_k^{(i,j+1)}}{a_k^{(i,j)}} \tag{2}$$

但し，式 (2) における関数 Φ, Ω, Ψ は，解 $a_n^{(s,t)}, b_n^{(s,t)}$ を用いて

$$\Phi(\pi, r, c, n) \triangleq \prod_{i=1}^{r}\prod_{j=1}^{c}\prod_{k=1}^{\pi_{i,j}} \frac{a_{n+j-k}^{(i-j-1,0)}}{a_{n+j-k-1}^{(i-j,0)}}, \tag{3a}$$

$$\Omega(\pi, r, c, n) \triangleq \prod_{i=1}^{\min\{r,c\}}\prod_{k=1}^{\pi_{i,i}} \frac{b_{n+i-k}^{(0,-i)}}{a_{n-k}^{(i-1,0)}}, \tag{3b}$$

$$\Psi(\pi,r,c,n) \triangleq \prod_{i=1}^{\min\{r,c\}} \prod_{j=1}^{c} \prod_{k=1}^{\min\{\pi_{i,i},\pi_{i,j}\}} \left(\frac{a_{n+j-k-1}^{(i-j,0)} b_{n+i-k}^{(0,j-i)}}{a_{n+j-k}^{(i-j-1,0)} b_{n+i-k}^{(0,j-i-1)}} \right) \quad (3c)$$

と定義する．

4 直交多項式から得られる離散二次元戸田方式の解と，平面分割の積型母関数

直交多項式に付随する可積分系である離散戸田方程式の解は，直交多項式のパラメータに対する変形操作である Christoffel 変換と Geronimus 変換の両立条件をとることにより構成できる．Spiridonov と Zhedanov [4] は Askey-Wilson 多項式から離散戸田方程式の解を構成している．本研究では Spiridonov と Zhedanov [4] による Askey-Wilson 多項式に対する Christoffel 変換の式を組合せることにより，離散二次元戸田方程式の非零解を構成する．

4.1 Askey-Wilson 多項式から得られる非零解と積型母関数

離散二次元戸田方程式 (1) の非零解として，パラメータ x, y, z, w を含む以下の解を考える．

$$a_n^{(s,t)} = \frac{(1-xwq^{s+n})(1-xzq^{s+n})}{2xq^s(1-xyzwq^{s+t+2n-1})} \times \frac{(1-xyq^{s+t+n})(1-xyzwq^{s+t+n-1})}{(1-xyzwq^{s+t+2n})}, \quad (4a)$$

$$b_n^{(s,t)} = \frac{yq^t(1-zwq^{n-1})(1-xwq^{s+n-1})}{2(1-xyzwq^{s+t+2n-2})} \times \frac{(1-xzq^{s+n-1})(1-q^n)}{(1-xyzwq^{s+t+2n-1})} \quad (4b)$$

式 (4) で表される解に対し，定理 1 を適用して整理すると，パラメータ a, b を含む以下の積型母関数が得られる．この母関数は，MacMahon [2] や上岡 [1] により構成された積型母関数の一般化となっている．

$$\sum_{\pi\in \mathrm{PP}(r,c,n)} q^{|\pi|} a^{\mathrm{tr}(\pi)} \varphi_{r,c,n}(\pi)\omega_{r,c,n}(\pi) = \prod_{k=1}^{n}\prod_{i=1}^{r}\prod_{j=1}^{c} \frac{(1-aq^{i+j+k-1})}{(1-aq^{i+j+k-2})} \frac{(1-abq^{i+j+k+n-2})}{(1-abq^{i+j+k+n-1})}$$

ただし，

$$\varphi_{r,c,n}(\pi) \triangleq \prod_{i=1}^{r}\prod_{j=1}^{c} \frac{1-abq^{2n-2\pi_{i,j}+i+j-1}}{1-abq^{2n+i+j-1}},$$

$$\omega_{r,c,n}(\pi) \triangleq \prod_{i=1}^{\min\{r,c\}} \prod_{k=1}^{\pi_{i,i}} \frac{(1-q^{n+i-k})(1-bq^{n+i-k})}{(1-aq^{n+i-k})(1-abq^{n+i-k})}$$

4.2 Little q-Laguerre 多項式から得られる非零解と積型母関数

離散二次元戸田方程式 (1) の非零解として以下の解を考える．

$$a_n^{(s,t)} = -q^{2n+s+t+1}, \quad (5a)$$

$$b_n^{(s,t)} = q^{n+s+t}(1-q^n) \quad (5b)$$

式 (5) で表される解に対し，定理 1 を適用すると以下の積型母関数が得られる．

$$\sum_{\pi\in \mathrm{PP}(r,c,n)} q^{|\pi|}(-1)^{\mathrm{tr}(\pi)} \prod_{i=1}^{\min\{r,c\}} \prod_{k=1}^{\pi_{i,i}} \frac{1-q^{n+i-k}}{q^{n+i-k}} = q^{rcn}$$

参考文献

[1] 上岡 修平, Partition functions for reverse plane partitions derived from the two-dimensional Toda molecule, 日本数学会無限可積分系特別セッション特別講演，2018.

[2] P. A. MacMahon, Combinatory analysis, volume 2, Cambridge University Press, Cambridge, 1916.

[3] R. Hirota, S. Tsujimoto, and T. Imai, Difference scheme of soliton equations (State of the art and perspectives of studies on nonlinear integrable systems)，数理解析研究所講究録 822 (1993), 144-152.

[4] V. Spiridonov and A. Zhedanov, Discrete Darboux transformations, the discrete-time Toda lattice, and the Askey-Wilson polynomials, Methods Appl. Anal. 2 (1995), 369-398.

離散 Gray-Scott モデルの時空パターンと平衡解の Turing 不安定性

松家 敬介 [1]

[1] 武蔵野大学工学部数理工学科

e-mail : keimatsu@musashino-u.ac.jp

1 概要

Gray-Scott モデルは自己触媒反応の数理モデルであり [1], 解として様々な時空パターンを与える反応拡散系として知られている [2]. これまでの研究で, Gray-Scott モデルの超離散化可能な離散化とその差分方程式系のパラメータを変えることで様々な時空パターンを与える解が得られている [3]. 本講演は [4] に基づくもので, これまでの研究で得られている離散化に対して Turing 不安定性を議論し, その差分方程式系の解が示す一部の時空パターンが Turing 不安定性によって切り替わることが分かった.

2 離散 Gray-Scott モデルとその時空パターン

本講演では, 以下に挙げる差分方程式:

$$\begin{cases} u_n^{s+1} = \dfrac{m_p\left(u_n^s\right) + \delta\left\{2m_p\left(u_n^s\right)w_n^{s+1} + a\right\}}{1 + \delta\left\{\left(w_n^{s+1}\right)^2 + a + 1\right\}} \\ w_n^{s+1} = \dfrac{m_q\left(w_n^s\right)}{1 + \delta\left\{2m_p\left(u_n^s\right) + b\right\}} \\ \qquad + \dfrac{\delta\left[m_p\left(u_n^s\right)\left\{m_q\left(w_n^s\right)^2 + 1\right\} + b\right]}{1 + \delta\left\{2m_p\left(u_n^s\right) + b\right\}} \end{cases} \tag{1}$$

の解が与える時空パターンについて議論する. ただし, $s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $n \in \mathbb{Z}$, $a, b, \delta > 0$, $p, q \in \mathbb{Z}_{>0}$,

$$m_p\left(u_n^s\right) = \frac{u_{n+p}^s + u_{n-p}^s}{2},$$
$$m_q\left(w_n^s\right) = \frac{w_{n+q}^s + w_{n-q}^s}{2}$$

とする. (1) は反応拡散系の一つである Gray-Scott モデル:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - uv^2 + a(1-u) \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} + uv^2 - bv \end{cases} \tag{2}$$

の離散化の一つとして提案されたものである. ただし, $u := u(t,x)$, $v := v(t,x)$, $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$, $D > 0$ とする. 実際に, (1) のパラメータ $\delta > 0$ は (2) の変数 t の差分間隔パラメータであり, $w = v + 1$ として, $\xi := \sqrt{2\delta}/p$ で (2) の変数 x の差分間隔パラメータを定義し, $\delta \to 0$ の極限を取ると (1) から $D = (q/p)^2$ とした (2) が得られる.

適当な境界条件 (例えば周期境界条件など) における (1) の解は様々な時空パターンを与える. この時空パターンは, 初期条件だけでなく方程式に含まれるパラメータを変化させることで様々なものに変化する. 実際に, $p = 3$, $q = 1$, $\delta = 0.1$ とし, 初期条件として

$$u_n^0 = \begin{cases} 1 - 0.3\cos\left(\dfrac{\pi n}{50}\right) & |n| \leq 25, \\ 1 & |n| > 25, \end{cases}$$
$$w_n^0 = \begin{cases} 1 + 0.5\cos\left(\dfrac{\pi n}{50}\right) & |n| \leq 25, \\ 1 & |n| > 25. \end{cases}$$

を与えた場合の w_n^s をプロットしたものが以下の図である. 横軸が空間変数 n の軸, 縦軸が時間変数 s の軸, 色の寒暖で w_n^j の値を表している.

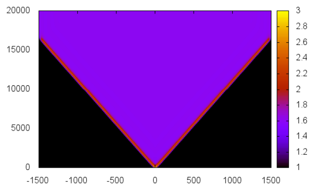


図 1. $a = 0.04$, $b = 0.05$

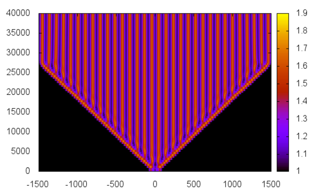


図 2. $a = 0.04$, $b = 0.09$

これらの時空パターンのほかにもいくつかのパターンが得られる. 以下に挙げる図はパラメータ a, b で得られるパターンを分類した相図であり, 横軸が a, 縦軸が b に対応する. 特に,

図 1 の時空パターンは「+」に対応する a, b の値で得られ, 図 2 の時空パターンは「×」に対応する a, b の値で得られる. これら以外の時空パターンについては [3] で解説されている.

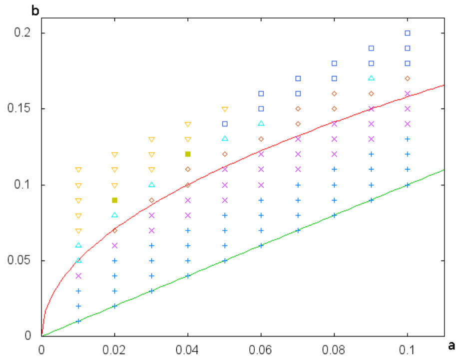


図 3. パラメータ a, b による時空パターンの分類

3 離散 Gray-Scott モデルの平衡解

(1) の空間一様な解は以下の差分方程式:

$$\begin{cases} u^{s+1} = \dfrac{u^s + \delta\left(2u^s w^{s+1} + a\right)}{1 + \delta\left\{\left(w^{s+1}\right)^2 + a + 1\right\}} \\ w^{s+1} = \dfrac{w^s + \delta\left[u^s\left\{\left(w^s\right)^2 + 1\right\} + b\right]}{1 + \delta\left(2u^s + b\right)} \end{cases} \tag{3}$$

を満たす. (3) の平衡解は,

$$\begin{aligned} &(u_0, w_0) = (1, 1) \\ &(u_\pm, w_\pm) \\ &= \left(\frac{1}{2}\left(1 \mp \sqrt{M}\right), 1 + \frac{a}{2b}\left(1 \pm \sqrt{M}\right)\right) \end{aligned}$$

である. ただし, $M = 1 - \dfrac{4b^2}{a}$ とする. 本講演では (3) の平衡解を (1) の平衡解と呼ぶ. これらの平衡解の線形安定性を調べると (u_0, w_0) はパラメータに依らず線形安定であり, (u_-, w_-) はパラメータに依らず不安定であり, (u_+, w_+) は以下の不等式:

$$\begin{aligned} &b - \frac{a^2}{2b^2}\left(1 + \sqrt{M}\right) \\ &+\delta\left[(2b - a)\left\{1 + \frac{a}{2b}\left(1 - \sqrt{M}\right)\right\} - a\right] < 0 \end{aligned}$$

を満たすとき線形安定であると分かる.

4 平衡解の Turing 不安定性について

Turing 不安定性とは, 安定な平衡解が空間方向の変化によって不安定化することである. そこで, (1) を安定な平衡解で特に (u_+, w_+) のまわりで線形化すると

$$\begin{cases} U_n^{s+1} = \dfrac{1}{1 + \delta\left\{\left(w_+\right)^2 + a + 1\right\}} \\ \quad \times \left[\left(1 + 2\delta w_+\right)\left(\cos p\theta_k\right) m_p\left(U_n^s\right) \right. \\ \qquad\qquad \left. -2\delta b W_n^{s+1}\right] \\ W^{s+1} = \dfrac{1}{1 + \delta(2u_+ b + 1)} \\ \quad \times \left[\delta\left(w_+\right)^2\left(\cos p\theta_k\right) m_p\left(U_n^s\right) \right. \\ \quad \left. + \left\{1 + 2\delta\left(u_+ b + 1\right)\right\}\left(\cos q\theta_k\right) m_q\left(W_n^s\right)\right] \end{cases}$$

が得られる. この線形偏差分方程式系に対して

$$\begin{aligned} &\left(U_n^s, W_n^s\right) \\ &\quad = \left(c_1\left(\lambda_\kappa\right)^s \exp\left(i\kappa n\right), c_2\left(\lambda_\kappa\right)^s \exp\left(i\kappa n\right)\right) \end{aligned}$$

という形の解を考えると λ_κ は上記の線形偏差分方程式系の右辺の係数からなる 2 次正方行列の固有値となっている. λ_κ の絶対値が 1 より大きければここで考えている解の絶対値は独立変数 s の増加とともに指数関数的に増加するため, 安定だった平衡解が不安定化していることを意味する. 本講演では, 2 節で与えた数値計算の結果に対応する $p = 3,\ q = 1,\ \delta = 0.1$ の場合について, パラメータ a, b の値を変えて λ_κ の絶対値と 1 の大小関係を考察する. その結果, Turing 不安定化する境目となるパラメータ a, b の値の組み合わせで図 1 のパターンと図 2 のパターンが切り替わることを説明する.

参考文献

[1] P. Gray and S. K. Scott, Sustained oscillations and other exotic patterns of behaviour in isothermal reactions, J. Phys. Chem., 89 (1985), 22–32.

[2] W. Mazin, K. E. Rasmussen, E. Mosekilde, P. Borckmans and G. Dewel, Pattern formation in the bistable Gray-Scott model, Math. Comput. Simulat., 40 (1996), 371–396.

[3] K. Matsuya and M. Murata, Spatial pattern of discrete and ultradiscrete Gray-Scott model, Discrete Continuous Dyn. Syst. Ser. B, 20 (2015), 173–187.

[4] 松家 敬介, 離散 Gray-Scott モデルの時空パターンと平衡解の Turing 不安定性, 武蔵野大学数理工学センター紀要, 3 (2018), 53–64.

ブロック積型反復解法の近似解精度劣化の原因解析と高精度化

倉本　亮世 [1], 多田野　寛人 [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 : kuramoto@hpcs.cs.tsukuba.ac.jp

1　はじめに

格子量子色力学や大規模固有値問題の分野では複数右辺ベクトルを持つ線形方程式 $AX = B, A \in \mathbb{C}^{n\times n}, X, B \in \mathbb{C}^{n\times L}$ が現れる．これらの分野ではこの線形方程式の求解が計算の主要部であり，これを効率よく解くことが重要な課題となっている．

この線形方程式の求解法には，ブロック積型反復解法がある．同法は積型反復解法をブロッククリロフ部分空間に基づいて拡張した手法で，複数の右辺を一度に解くことができる．ブロック積型反復解法は右辺ベクトルを 1 本ずつ解くよりも，複数右辺をまとめて解くことで，右辺ベクトル 1 本あたりの求解時間が減ることがある．しかしながら，右辺ベクトル数が増えると近似解の精度劣化が発生することがある．

そこで本研究では，Block BiCGStab 法 [1], 及び GPBiCG 法 [2] をブロック版に拡張した手法に注目し，精度向上のための改善法の提案を行う．

2　ブロック積型反復解法

近似解 $X_{k+1} \in \mathbb{C}^{n\times L}$ とそれに対する残差行列 $R_{k+1} = B - AX_{k+1} \in \mathbb{C}^{n\times L}$ は，

$$
\begin{aligned}
X_{k+1} &= X_k + P_k\alpha_k + Z_k,\\
R_{k+1} &= R_k - (AP_k)\alpha_k - \eta_k Y_k - \zeta_k(AT_k),
\end{aligned}
$$

で計算される．ここで，$P_k, Z_k, Y_k, T_k \in \mathbb{C}^{n\times L}$, $\alpha_k \in \mathbb{C}^{L\times L}$ である．この時，$\zeta_k, \eta_k \in \mathbb{C}$ の決め方によって様々な解法に帰着できる．Block GPBiCG 法では $\|R_{k+1}\|_F$ が最小となる ζ_k, η_k を選択する．Block BiCGStab 法では $\eta_k = 0$ とし，$\|R_{k+1}\|_F$ が最小となる ζ_k を選択する．ブロック積型反復解法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す．

Algorithm 1 ブロック積型反復解法

X_0 is an initial guess,
$\tilde{R}_0$ is an arbitary matrix, such that $\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} R_0 \neq O$,
$P_0 = R_0 = B - AX_0$,
$W_{-1} = U_{-1} = Z_{-1} = T_{-1} = O$,
for $k = 0, 1, \ldots$ until $\|R_k\|_F / \|B\|_F \leq \varepsilon$,
　$S_k = AP_k$,
　$\alpha_k = (\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} S_k)^{-1} \tilde{R}_0^{\mathrm{H}} R_k$,
　$T_k = R_k - S_k\alpha_k$,
　$Y_k = T_{k-1} - T_k - W_{k-1}\alpha_k$,
　$M_k = AT_k$,
　Compute ζ_k, η_k,
　$U_k = \zeta_k S_k + \eta_k(T_{k-1} - R_k + U_{k-1}\beta_{k-1})$,
　$Z_k = \zeta_k R_k + \eta_k Z_{k-1} - U_k\alpha_k$,
　$X_{k+1} = X_k + P_k\alpha_k + Z_k$,
　$R_{k+1} = T_k - \eta_k Y_k - \zeta_k M_k$,
　$\beta_k = (\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} S_k)^{-1} (\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} M_k)$,
　$W_k = M_k - S_k\beta_k$,
　$P_{k+1} = R_{k+1} - (P_k - U_k)\beta_k$,
end for

k 回目の反復の近似解と残差行列の更新量をそれぞれ，$\Delta X_k, \Delta R_k \in \mathbb{C}^{n\times L}(X_{k+1} = X_k + \Delta X_k, R_{k+1} = R_k - \Delta R_k)$ とする．この時，$R_{k+1} = B - AX_{k+1}$ の関係から，ΔX_k と ΔR_k は $\Delta R_k = A\Delta X_k$ を満たす．しかしながら，数値計算では計算順序の違いなどにより $\Delta R_k \neq A\Delta X_k$ となる．その結果，真の残差行列 $B - AX_{k+1}$ と漸化式の残差行列 R_{k+1} に乖離が起こる．

真の残差行列 $B - AX_{k+1}$ と漸化式の残差行列 R_{k+1} の間の誤差行列 $E_{k+1} \equiv B - AX_{k+1} - R_{k+1}$ を考える．誤差行列 E_{k+1} は，近似解と残差行列の更新量を用いて，次のように計算できる．

$$
\begin{aligned}
E_{k+1} \quad = \quad & \sum_{i=0}^{k} [(AP_k)\alpha_k + \eta_k Y_k + \zeta_k(AT_k)]\\
& -A\sum_{i=0}^{k}(P_k\alpha_k + Z_k).
\end{aligned}
$$

この時，理論的には $E_{k+1} = O$ である．しかしながら，$\Delta R_k \neq A\Delta X_k$ によって $E_{k+1} \neq O$ となる．これにより，$\|R_{k+1}\|$ が十分小さくても，$\|B - AX_{k+1}\| \approx \|E_{k+1}\|$ となり，近似解の精度劣化の原因となることがわかる．そこで，$\Delta R_k \neq A\Delta X_k$ によって発生する誤差を小さくすることを考える．

3　提案手法

近似解と残差行列の更新量によって発生する誤差は 2 つの誤差行列 $E_k^{(Y)}, E_k^{(P)}$ を用いて，$\Delta R_k - A\Delta X_k = E_k^{(Y)} + E_k^{(P)}$ と表せる．ここで，

$$
\begin{aligned}
E_k^{(Y)} &= \eta_k Y_k + \zeta_k(AT_k) - AZ_k,\\
E_k^{(P)} &= (AP_k)\alpha_k - A(P_k\alpha_k)
\end{aligned}
$$

である．本節では，この 2 つの誤差行列を小さくするための方法について提案する．

3.1　改善案 1

まず，$E_k^{(Y)}$ について考える．$\eta_k Y_k + \zeta_k (AT_k)$ は理論的に AZ_k と等しく，漸化式で AZ_k を計算していることに対応する．この時，AT_k は陽的に A が乗じられているが，Y_k は陰的に A が乗じられているため，$E_k^{(Y)}$ に大きく影響している．そこで，新しく $\hat{Y}_k \equiv A^{-1} Y_k$ を計算し，陽的に A を乗じることで，$E_k^{(Y)}$ を小さくすることを考える．また，これにより $Z_k = \eta_k \hat{Y}_k + \zeta_k T_k$ で計算される．ここで，Block BiCGStab 法では $\eta_k = 0$ より，$Y_k = O$ であるため，$E_k^{(Y)}$ については無視して良い．

しかしながら，この手法を適用すると行列ベクトル積の回数が 1 反復あたり 2 回から 3 回に増えるため，計算量が増大してしまう．そこで，行列ベクトル積を 2 回実行するのではなく，$[T_k, \hat{Y}_k] \in \mathbb{C}^{n \times 2L}$ と A の行列積を 1 回行う．この計算を適切に実装することで，計算時間の増加を抑えることができる．

3.2　改善案 2

次に，$E_k^{(P)}$ について考える．$(AP_k)\alpha_k$ は AP_k を計算した後に α_k を掛けている．そのため，計算順序の違いによって誤差が混入し，近似解と残差行列の更新量の関係が失われてしまう可能性がある．単純な改善法に $P_k \alpha_k$ に A を掛けて $A(P_k \alpha_k)$ を計算するというものがある．しかしながら，アルゴリズム中で AP_k も必要とされていることから，AP_k と $A(P_k \alpha_k)$ の 2 回の行列ベクトル積が必要となり計算量が増えてしまう．そこで，漸化式中の AP_k を使う計算を回避することで行列ベクトル積の回数を増やさずに誤差行列への影響を小さくすることを考える．

まず，α_k, β_k の AP_k に関する部分を次のように変更する．

$$\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} (AP_k) = (A^{\mathrm{H}} \tilde{R}_0)^{\mathrm{H}} P_k.$$

この時，$A^{\mathrm{H}} \tilde{R}_0$ は反復開始前に 1 回計算するだけでよいため，計算量はほぼ変わらない．

次に，漸化式中の AP_k について考える．Block BiCGStab 法では $\gamma_k \equiv \alpha_k^{-1} \beta_k$ を定義することで，漸化式中の AP_k の計算を回避することができる．Block GPBiCG 法については，$\gamma_k, \hat{U}_k \equiv U_k - \zeta_k (AP_k)$ を定義することで，漸化式中の AP_k の計算を回避することができる．

4　数値実験

数値実験により，改善案の性能評価を行う．ここで，Block BiCGStab 法には改善案 2 を，Block GPBiCG 法には両改善案を適用した．また，残差の収束性の改善のために，残差行列の正規直交化を適用した．実験結果を図 1,2 に示す．naive は改善案の適用なし，modify は改善案の適用ありを表す．テスト行列には SuiteSparse Matrix Collection の majorbasis(n = 160,000, nnz = 1,750,416) を用いた．実験結果から，改善案を適用することで，高精度な近似解が得られていることがわかる．

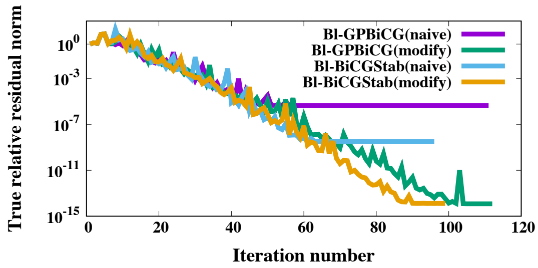


図 1. 各手法における残差履歴 (L = 120)

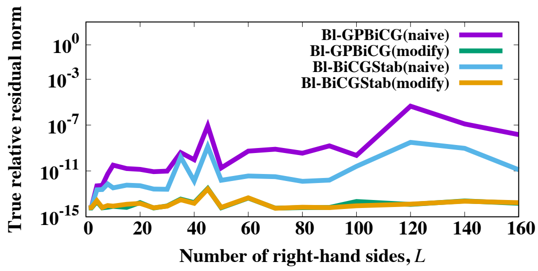


図 2. 右辺ベクトル数 L に対する近似解精度の推移

参考文献

[1] A. El Guennouni, K. Jbilou and H. Sadok, A block version of BiCGSTAB for linear systems with multiple right-hand sides. Electronic Transactions on Numerical Analysis,**16** (2003), 129–142.

[2] S.-L. Zhang, GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Comput., **18**(1997), 537–551.

特異対称系での GMRES 法と RRGMRES 法の数値検証と，RRGM-RES(m) 法の収束定理

杉原 光太 [1], 速水 謙 [1,2]
国立情報学研究所 所属 1，総合研究大学院大学 所属 2
e-mail：sugihara@nii.ac.jp

1 概要

特異対称系において，右辺が係数行列の値域に属さない場合，丸目誤差のある計算では，MINRES 法より，GMRES 法や Range Restricted GMRES (RRGMRES) 法などを用いる方が収束性がよいことがある．本発表では両手法を数値実験により比較し，手法選択の指標を与える．さらに，RRGMRES 法においてリスタート計算を行う RRGMRES(m) 法を特異対称系に適用した場合の収束定理を示す.

2 RRGMRES 法の実装法と解く系と，GMRES 法が解く系

$A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ を特異対称行列とし，$\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$ は必ずしも A の値域に入るとは限らないとする．GMRES 法の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ を $\mathbf{0}$ とする．GMRES 法，RRGMRES 法は丸目誤差がない計算では，特異対称系に対し，最小二乗解に収束する [1],[2]．RRGMRES 法の実装法は，文献 [3] にある Algorithm 2.2 に従い，最小二乗問題は,

$$\boldsymbol{y}_k = \arg\min_{\boldsymbol{y}} \| \|b\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_{k+1} Q_{k+1} \bar{I}_k \boldsymbol{y} \|_2 \quad (1)$$

で求めた $\boldsymbol{y}_k \in \mathbf{R}^k$ を使い，$W_k \in \mathbf{R}^{n\times k}$($W_k$ は行列 $V_{k+1}Q_{k+1}$ の最初の k 列で構成される行列) を使い，解 $\boldsymbol{x}_k = W_k \boldsymbol{y}_k$ を求める．なお，$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{b}\|_2}$ とした Arnoldi 分解，$AV_k = V_{k+1}\bar{H}_k$ である．ここで，$V_{k+1} = [\boldsymbol{v}_1, ., \boldsymbol{v}_{k+1}] \in \mathbf{R}^{n\times(k+1)}$ の各列ベクトルは正規直交ベクトルであり，Krylov 空間 $K_{k+1}(A, \boldsymbol{b})$ を張る基底になる．さらに，QR 分解 $\bar{H}_k = Q_{k+1}\bar{R}_k$ を行い，$Q_{k+1} \in \mathbf{R}^{(k+1)\times(k+1)}$ は直交行列，$\bar{R}_k \in \mathbf{R}^{(k+1)\times k}$ は最初の $(k \times k)$ 部分が上三角部分行列 R_k で，最後の行がゼロベクトルで構成される行列になる．よって $R(W_k) = K_k(A, Ab)$ になる．GMRES 法は

$$\boldsymbol{y}_k \in \mathbf{R}^k \quad s.t. \quad \| \|b\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_k \boldsymbol{y}_k \|_2 = \min_{\boldsymbol{y}} \| \|b\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_k \boldsymbol{y} \|_2 \quad (2)$$

で求めた $\boldsymbol{y}_k$ を使い，解 $\boldsymbol{x}_k = V_k \boldsymbol{y}_k$ を求める.

3 GMRES 法と RRGMRES 法の収束性の数値検証

悪条件対称行列 plat1919[4] を使って GMRES 法と RRGMRES 法の収束性の数値検証を行う.

表 1. Characteristics of the coefficient matrix of the test problems

Matrix	n	nnz	rank	$\kappa(A)$
plat1919	1,919	32,399	1,916	5.4×10^{16}

n は次元数，nnz は非零要素数，rank，$\kappa(A)$ は各々MATLAB の関数 **rank** と **svd** に基づいて計算された行列の階数，条件数 (最大特異値と非零の最小特異値の比) である．右辺 $\boldsymbol{b}$ は以下の二通りで設定する．$\boldsymbol{u}(0,1)$ は FORTRAN90 の $[0,1)$ の一様擬似乱数関数 random_number により各成分を生成した n 次元ベクトルである．また $\boldsymbol{b}_{N(A)}, \boldsymbol{b}_{N(A)2}$ は各々A の最小固有値，次に小さい固有値に対する正規化された固有ベクトルである．ϵ は実数のスカラ変数である.

$$\frac{A \times (1, ...1)^{\mathrm{T}}}{\|A \times (1, ...1)^{\mathrm{T}}\|_2} + (\boldsymbol{b}_{N(A)} + \boldsymbol{b}_{N(A)}) \times \epsilon \quad (3)$$

$$\frac{A \times (1, ...1)^{\mathrm{T}}}{\|A \times (1, ...1)^{\mathrm{T}}\|_2} + \frac{u}{\|u\|_2} \times \epsilon \quad (4)$$

3.1 収束結果と係数行列の条件数，特異値

残差ベクトルを $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ とする．$\frac{\|A\boldsymbol{r}\|_2}{\|A\boldsymbol{b}\|_2}$ の値の範囲と，GMRES 法なら $\bar{H}_k$，RRGMRES 法なら $\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k$(解 $\boldsymbol{x}_k$ を求める行列）の条件数と，最小特異値，2 番目に小さい特異値を示す．GMRES 法，RRGMRES 法は Fortran 90 で実装し，$\boldsymbol{b}$ が式 (3) の場合は倍精度，式 (4) は 4 倍精度演算で行った．$\bar{H}_k$，$\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k$ の条件数と特異値計算は各々MATLAB の **cond**, **svd** で行った．ϵ は 1 とした．(D) は倍精度，(Q) は 4 倍精度演算を示す.

$\boldsymbol{b}$ が式 (3) の場合について検証する.

表 2. Condition number of the coefficient matrix for GMRES (Double) and RRGMRES (Double) when $\boldsymbol{b}$ is given by (3)

k	$\kappa(\bar{H}_k)$	$\kappa(\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k)$
819	2.15×10^{12}	5.30×10^{5}

表 3. 1st,2nd smallest singular values of the coefficient matrix for GMRES (Double) and RRGMRES (Double) when $\boldsymbol{b}$ is given by (3)

k	$\sigma(\bar{H}_k)$
819	$1.36 \times 10^{-12}, 5.51 \times 10^{-6}$
k	$\sigma(\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k)$
819	$5.51 \times 10^{-6}, 1.21 \times 10^{-5}$

- $\bar{H}_k$ の最小特異値は，2 番目に小さい特異値に比べ，10^{-6} のオーダである．
- $\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k$ の最小特異値は，2 番目に小さい特異値に比べ，10^{-1} のオーダである．

式 (3) の場合，表 2 が示すように，RRGMRES の係数行列の条件数は GMRES の係数行列に比べ，10^{-6} 以下のオーダになる．よって GMRES では $10^{-6} < \frac{\|A\boldsymbol{r}\|_2}{\|A\boldsymbol{b}\|_2} < 10^{-5}$ になり，RRGMRES 法は 819 反復で $\frac{\|A\boldsymbol{r}\|_2}{\|A\boldsymbol{b}\|_2} < 10^{-8}$ を満たした．

一方，$\boldsymbol{b}$ が，式 (4) の場合について検証する．

- $\bar{H}_k$ の最小特異値は，2 番目に小さい特異値に比べ，10^{-2} のオーダである．
- $\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k$ の最小特異値は，2 番目に小さい特異値に比べ，同じオーダである．

式 (3) と比較し，GMRES 法の $\bar{H}_k$ の最小特異値と 2 番目に小さい特異値の比が 10^4 のオーダ大きくなり，最小特異値は大幅には小さくなっていない．式 (4) の場合，式 (3) に比べ，値域に入らない成分は小さい．また H_{k+1}($\bar{H}_{k+1}$ に対し，Givens 変換を行った行列) の最小特異値，2 番目に小さい特異値は，6.95×10^{-10},2.32×10^{-8} と最小特異値は，2 番目に小さい特異値に比べ，$\bar{H}_k$ 同様，10^{-2} のオーダで小さくなっている．以上の議論から，式 (4) の場合，収束条件が $\frac{\|A\boldsymbol{r}\|_2}{\|A\boldsymbol{b}\|_2} < 10^{-8}$ の時，4 倍精度演算の GMRES 法と RRGMRES 法は各々1,617，1,633 回の反復数で収束し，反復数では性能が同程度である

表 4. 1st, 2nd smallest singular values of the coefficient matrix for GMRES (D) when $\boldsymbol{b}$ is given by (3)

k	$\sigma(\bar{H}_{k+1})$ (GMRES)
819	$1.36 \times 10^{-12}, 5.51 \times 10^{-6}$

表 5. Condition number of the coefficient matrix for GMRES (D) and RRGMRES (D) when $\boldsymbol{b}$ is given by (4)

k	$\kappa(\bar{H}_k)$	$\kappa(\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k)$
1,499	4.05×10^{9}	1.26×10^{8}

表 6. 1st,2nd smallest singular values of the coefficient matrix for GMRES (Double) and RRGMRES (Double) when $\boldsymbol{b}$ is given by (4)

k	$\sigma(\bar{H}_k)$	$\sigma(\bar{H}_{k+1}Q_{k+1}\bar{I}_k)$
1,499	$7.2 \times 10^{-10}, 2.4 \times 10^{-8}$	$2.3 \times 10^{-8}, 6.1 \times 10^{-8}$

結果は，係数行列の特異値分布，条件数から妥当な結果である．

4 RRGMRES(m) の特異対称系に対する収束定理

RRGMRES(m) を特異対称系に適用した場合，以下の定理が成立する．詳細は講演時に報告する．なお，$M(A^2) = \frac{(A^2)^{\mathrm{T}}+A^2}{2}$ とし，$\mathrm{N}(A), \mathrm{R}(A)$ は各々A の核空間，値域を表す．

定理 1 $\mathrm{N}(A) = \mathrm{N}(A^{\mathrm{T}})$ が成立し，$M(A^2)$ が $\mathrm{R}(A)$ において定値ならば，RRGMRES(m) は最小二乗解に破綻することなく収束する．

参考文献

[1] Brown, P.N., and Walker, H.F., GMRES on (nearly) singular systems. *SIAM J. Matrix Anal.Appl.* **18** (1997) 37–51.

[2] Calvetti, D., Lewis, B., and Reichel, L., GMRES-type methods methods for inconsistent systems. *Linear Algebra Appl.* **316** (2000) 157–169.

[3] Neuman, A., Reichel, L., and Sadok, H., Implementations of range restricted iterative methods for linear discrete ill-posed problems. *Linear Algebra Appl.* **436** (2012) 3974–3990.

[4] Davis, T.A., *Suite Sparse Matrix Collection.* https://sparse.tamu.edu/

空間座標の 2 次までの多項式を用いた Deflated CG 法の性能検討

高谷　周平

e-mail : shuhei.takaya@gmail.com

1　概要

近年注目を集めている deflated CG 法の性能は deflation subspace の選択によって大きく左右される．本講演では, 弾性変形問題に対して領域分割に基づく subdomain deflation 法 [1] を適用する．

弾性変形問題では Aubry et al.　[2] の様に各 subdomain の剛体運動を deflation subspace として用いる事が多い．その一方で Yadav et al.[3] はソリッド要素でモデル化された板と梁のそれぞれに対して Kirchhoff-Love と Bernoulli-Euler の仮説に基づく式を提案し, 収束性を改善している．

しかし, ソフトウェアを開発していく上で, 個別の現象毎に検討していくのは些かの煩雑さが伴うように思われる．

そこで, 本講演ではオープンソースの構造解析ソフトウェア FrontISTR[4] を使用して, 空間座標の 2 次までの多項式を用いて得られる 4 種の deflation subspace を, 剛体運動によるものと併せて比較検討する．

2　Deflated CG 法のアルゴリズム

本講演では n 次の正定値対称行列 $\boldsymbol{K}$ を係数とする連立一次方程式 $\boldsymbol{Ku} = \boldsymbol{f}$ を, Vuik の分類で DEF1[1] と呼ばれる deflated CG 法のバリアントによって解く．

Algorithm 1 DEF1

$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Z}\left(\boldsymbol{Z}^T\boldsymbol{K}\boldsymbol{Z}\right)^{-1}\boldsymbol{Z}^T$, $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{KQ}$
$\rho_0 = 1.0$, $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{0}$, $\alpha_0 = 0.0$
$\boldsymbol{u}_0$: intial guess, $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{f} - \boldsymbol{K}\boldsymbol{u}_0$
$\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{u}_0$, $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{P}\boldsymbol{r}_0$
for $i = 1$ to N or converged. **do**
　$\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{r}_i$
　$\rho_i = (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{z}_i)$, $\beta_i = \rho_i/\rho_{i-1}$
　$\boldsymbol{p}_i = \beta_i\boldsymbol{p}_{i-1} + \boldsymbol{z}_i$, $\boldsymbol{w}_i = \boldsymbol{PK}\boldsymbol{p}_i$
　$\mu_i = (\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{w}_i)$, $\alpha_i = \rho_i/\mu_i$
　$\boldsymbol{u}_{i+1} = \boldsymbol{u}_i + \alpha\boldsymbol{p}_i$, $\boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i - \alpha\boldsymbol{w}_i$
end for
$\boldsymbol{u}_{approx} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{Qf}$

ここで $\boldsymbol{M}$ は前処理行列,$\boldsymbol{Z}$ は $m(\ll n)$ 個の線型独立な n 次元列ベクトルを並べた deflation subspace matrix, $\boldsymbol{Q}$ は correction matrx, $\boldsymbol{P}$ は deflation matrix である．

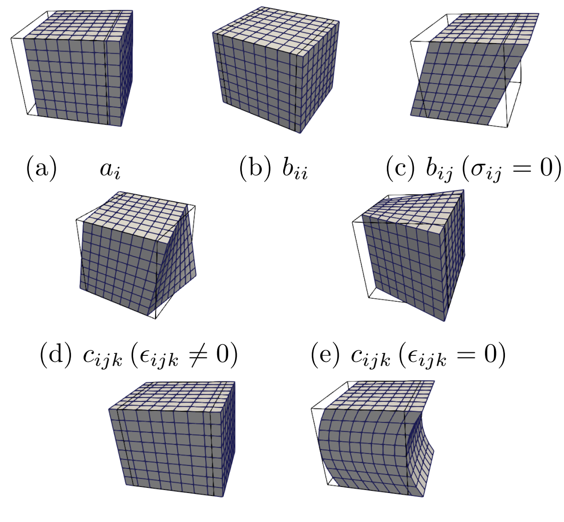
3　Deflation subspace の構築

解析対象を subdomain に分割し, 各節点の変位が, 所属する subdomain の重心に関する相対座標の二次多項式となるように, deflation subspace を構築する．すなわち, アインシュタインの縮約記号を用いて

$$
\begin{aligned}
u_i = {} & a_i + b_{ij}x_j + \frac{1}{2}(1-\delta_{jk})c_{ijk}x_jx_k \\
& + (1-\delta_{ij})d_{ij}x_j^2 + d_{ii}\frac{x_i^3}{|x_i|} \quad (i,j,k = 1,2,3)\,.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで i, j 及び k は 3 次元デカルト座標系の基底の番号, u_i と x_i はそれぞれ変位と相対座標の成分, δ_{jk}とδ_{ij} はクロネッカーのデルタである．また $c_{ijk} = c_{ikj}$ とした．

式 (1) で定義される deflation subspace による変形は各項の係数に基づいて図 1 に示す 7 種類に分類できる．なお図 1 の ϵ_{ijk} はエディントンのイプシロンである．



(a)　a_i　(b) b_{ii}　(c) b_{ij} $(\sigma_{ij} = 0)$
(d) c_{ijk} $(\epsilon_{ijk} \neq 0)$　(e) c_{ijk} $(\epsilon_{ijk} = 0)$
(f) d_{ii}　(g) d_{ij} $(\sigma_{jk} = 0)$

図 1: Deflation subspace による変形

4 Deflated CG 法の実装

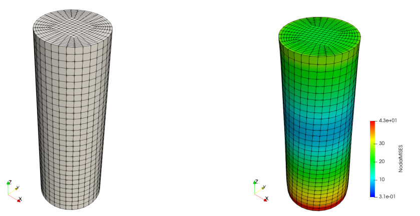
オープンソースの構造解析ソフトウェア FrontISTR[4] の vesion 5.0β をベースにして deflated CG 法を実装した.

5 Deflation subspace の性能比較

式 (1) の係数のうち a_i のみが非ゼロ (定数), a_i と b_{ij} のみが非ゼロ (1 次),d_{ij} と d_{ii} 以外が非ゼロ (2 次), すべての係数が非ゼロ (2 次) の計 4 通りの多項式と, 剛体運動による deflation subspace を比較検討する. 以降はこれらを DS1, DS2, DS3, DS 4 並びに DS0 と略記する. 前処理 $\boldsymbol{M}$ は ILU(0) を使う.

計算は AWS[5] の t2.micro インスタンスを用いて 1 プロセスで行う.

検証例題は直径 1m, 高さ 3m のコンクリート製の柱を捩りながら押す問題を考える. メッシュの概観を図 2a に示す. 9600 個の四面体一次要素から構成され, 節点数は 10447 である.



(a) メッシュ　　(b) 解析結果

図 2: 検証例題の概観

物性値は, ヤング率を 2.2×10GPa, ポアソン比を 0.2, 質量密度を $2.4\ \mathrm{ton} \cdot \mathrm{m}^{-3}$ とする. 境界条件は, 柱の底面を完全に固定し, 上面を柱の軸周りに 1° 回転させ, 下方に 1mm 押し下げる. また重力加速度 $9.8\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}^{-2}$ を加える. Subdomain 数は 4 とする.

解析で得られたミーゼス応力コンターと変形を図 2b に示す. 変形倍率は 100 倍である.

最後に, 表 1 に DS0 から DS4 までの $\boldsymbol{Z}$ のランク, $\boldsymbol{Q}$ と $\boldsymbol{M}$ の設定に要した時間, そして deflated CG 法の求解に要した反復回数と時間を示す.

表 1 より, 今回の例題では $\boldsymbol{Z}$ のランクが上がるとともに収束性は良くなったものの, 計算時間の短縮にはつながらなかった事が分かる. これを改善するには,$\boldsymbol{Q}$ に関する処理を高速化すると同時に, subdomain の形状や向きを推定して式 (1) から寄与の低い項を除外するアルゴリズムの開発が必要と考えられる.

表 1: 各 deflation subspace の計算時間と反復回数

	rank($\boldsymbol{Z}$)	設定時間 [msec]	反復回数	求解時間 [msec]
DS0	24	272	72	468
DS1	12	254	114	704
DS2	48	308	65	457
DS3	84	358	53	422
DS4	120	428	42	378

謝辞　本講演の内容は筆者が東京大学地震研究所に在所していた 2017 年から 2018 年にかけて行った文献調査によるところが大きい. 筆者に調査の機会を提供して下さった国立研究開発法人海洋研究開発機構付加価値情報創生部門部門長堀宗朗先生と, 東京大学地震研究所特任研究員秋葉博先生 (肩書きは当時) に心よりお礼申し上げる.

参考文献

[1] J. M. Tang, Two-level preconditioned conjugate gradient methods with applications to bubbly flow problems (Doctoral disassertion, Delft University of Technology, Delft , Netherlands), Retrieved from Institutional Repository, ISBN 978-90-8559-398-0, (2008)

[2] R. Aubry, F. Mut, S. Dey and R. Lohner, Deflated Solvers For Linear Elasticity and Helmholz Equation, Proc. of 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference (2011)

[3] P. Yadav, Krishnan, Suresh, Large Scale Finite Element Analysis via Assembly-Free Deflated Conjugate Gradient, Journal of Computing and Information Science in Engineering , **14**, (2014), 041008

[4] 一般社団法人 FrontISTR Commons `https://www.frontistr.org/`

[5] Amazon Web Services `https://aws.amazon.com/jp/about-aws/`

融合積和演算を利用した特異値分解のための両側ヤコビ法の実装について

荒木 翔 [1], 高田 雅美 [2], 木村 欣司 [3], 中村 佳正 [1]
[1] 京都大学, [2] 奈良女子大学, [3] 福井大学
e-mail : araki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

特異値分解のためのヤコビ法は, すべての特異値と特異ベクトルを高い精度で計算することができる. ヤコビ法には, 片側および両側ヤコビ法が提案されており, このうち片側ヤコビ法は, LAPACK に既に実装されている [1]. 一方で両面ヤコビ法の実装には, 改善できる部分がいまだ多く残されている. 本講演では融合積和演算を利用した両側ヤコビ法の実装を示し, 片側ヤコビ法との計算精度の違いについて述べる.

2 両側ヤコビ法による特異値分解

2.1 両側ヤコビ法の概略

固有値分解のための両側ヤコビ法によって, 実対称行列の固有値と固有ベクトルを計算できる. また対象となる行列をエルミート行列に拡張することも可能である. さらに特異値分解の場合には, 任意のサイズの複素長方行列に対して計算を実行するように設計することも可能であるが, 本稿では, 簡単のため, 実上三角行列の場合についてのみ論じる.

$J^{(i)}$, $K^{(i)}$, $N^{(i)}$, $M^{(i)}$ は回転行列の積とする. $R^{(i)}$ は上三角行列, $L^{(i)}$ は下三角行列である. 両側ヤコビ法による特異値分解の計算は, 以下の式 (1), (2) にように表される.

$$K^{(i)}R^{(i)}J^{(i)} = L^{(i)}, \tag{1}$$

$$N^{(i)}L^{(i)}M^{(i)} = R^{(i+1)}, \quad i = 0, 1, \ldots \tag{2}$$

反復を繰り返すと, $R^{(i)}$ と $L^{(i)}$ は, 対角行列に収束する. 十分に収束した段階において, 左右の特異ベクトルからなる直交行列 U, V は, それぞれ次のように計算することができる.

$$\begin{aligned} U =& \left(K^{(0)}\right)^\top \left(N^{(0)}\right)^\top \left(K^{(1)}\right)^\top \left(N^{(1)}\right)^\top \\ & \cdots \left(K^{(m-1)}\right)^\top \left(N^{(m-1)}\right)^\top, \qquad (3) \\ V =& J^{(0)}M^{(0)}J^{(1)}M^{(1)} \cdots J^{(m-1)}M^{(m-1)}. \qquad (4) \end{aligned}$$

m は, 収束段階における反復の回数である. 式 (3) と式 (4) における回転行列の乗算は, ギブンス回転によって実装される.

$R^{(i)}$ から $L^{(i)}$ への変換では, 回転行列 P と Q を用いて, $R_{j,k}$ を 0 に変換する操作を繰り返す. 以下, 行列 P, Q, R のうち, それぞれ値の変化する部分のみについて述べる.

$$\begin{bmatrix} c_1 & s_1 \\ -s_1 & c_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{j,j} & R_{j,k} \\ 0 & R_{k,k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_2 & -s_2 \\ s_2 & c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{R}_{j,j} & 0 \\ 0 & \hat{R}_{k,k} \end{bmatrix}. \tag{5}$$

$R^{(i)}$ から $L^{(i)}$ を計算するために, 式 (5) の操作を繰り返し適用する. $L^{(i)}$ から $R^{(i+1)}$ を求める場合も同様である.

2.2 オーダーリングと収束の判定条件

上三角行列 $R^{(i)}$ の非対角成分を 0 に変換する際, 下三角行列 $L^{(i)}$ に 0 でない成分が現れる. 今回実装を行った両側ヤコビ法では, 上三角行列 $R^{(i)}$ の非対角成分を以下の順序で変換する.

- $\left|R^{(0)}_{1,1}\right| \geq \left|R^{(0)}_{n,n}\right|$ の場合
  $R^{(i)}$ から $L^{(i)}$ を得るときは, 行巡回 $R_{1,2}$, $R_{1,3}, \ldots, R_{1,n}, R_{2,3}, R_{2,4}, \ldots, R_{n-2,n-1}$, $R_{n-2,n}$, $R_{n-1,n}$ の順で変換する. $L^{(i)}$ から $R^{(i+1)}$ を得るときは, 列巡回 $R_{2,1}$, $R_{3,1}, \ldots, R_{n,1}, R_{3,2}, R_{4,2}, \ldots, R_{n-1,n-2}$, $R_{n,n-2}$, $R_{n,n-1}$ の順で変換する.
- $\left|R^{(0)}_{1,1}\right| < \left|R^{(0)}_{n,n}\right|$ の場合
  $R^{(i)}$ から $L^{(i)}$ を得るときは, 下側からの列巡回 $R_{n-1,n}, R_{n-2,n}, \ldots, R_{1,n}, R_{n-2,n-1}$, $R_{n-3,n-1}, \ldots, R_{1,3}, R_{1,2}$ の順で変換を行う. $L^{(i)}$ から $R^{(i+1)}$ を得るときは, 下側からの行巡回 $R_{n,n-1}, R_{n,n-2}, \ldots, R_{n,1}$, $R_{n-1,n-2}, R_{n-1,n-3}, \ldots, R_{3,1}, R_{2,1}$ の順で変換を行う.

両側ヤコビ法により上記の計算を続けると, すべての非対角成分は 0 に収束する. 実装上は, 非対角成分が完全に 0 になる前に以下の式 (6)

の判定条件を用いて収束を判定する．

$$|R_{j,k}| \le \varepsilon\sqrt{|R_{j,j}|} \times \sqrt{|R_{k,k}|}. \qquad (6)$$

すべての非対角成分に対して式 (6) が満たされたとき，計算を終了する．

2.3　ギブンス回転を用いた実装法

$R_{j,j}, R_{j,k}, R_{k,k}$ から c_1, s_1, c_2, s_2, $\hat{R}_{j,j}$, $\hat{R}_{k,k}$ を求めるには Algorithm 1 を適用する．ここで必要となるギブンス回転の実装は，[2] を適用する．なお，Algorithm 1 中の関数 SIGN(A, B) は A の値の絶対値に B の符号を付加した値を返す．Algorithm 1 中の計算のうち，二重下線で示した計算については融合積和演算により実装する．融合積和演算では各演算で値を丸めず一度に積和演算を行うため，演算結果が高精度となる．

なお，一連のギブンス回転の計算の際，対角成分の値が降順になるよう c_1,s_1,c_2,s_2 を選ぶ．この操作を加えることにより，両側ヤコビ法に特異値をソーティングする機能 [3] を付加することができる．最後に，得られた c_1, s_1, c_2, s_2 を割線法で補正する [4] 際にも融合積和演算を適用する．

Algorithm 1 ギブンス回転を用いた実装法

$f_1 \leftarrow R_{j,j} - R_{k,k}$
$f_1 \leftarrow f_1 + \mathrm{SIGN}\left(\underline{\sqrt{f_1^2 + R_{j,k}^2}}, f_1\right)$ The Givens rotation is adopted in underlined part
$g_1 \leftarrow \mathrm{SIGN}\left(R_{j,k}, R_{j,k}/f_1\right)$
$f_1 \leftarrow |f_1|$
$f_2 \leftarrow R_{j,j} + R_{k,k}$
$f_2 \leftarrow f_2 + \mathrm{SIGN}\left(\underline{\sqrt{f_2^2 + R_{j,k}^2}}, f_2\right)$ The Givens rotation is adopted in underlined part
$g_2 \leftarrow \mathrm{SIGN}\left(R_{j,k}, -R_{j,k}/f_2\right)$
$f_2 \leftarrow |f_2|$
if $f_1 \ge f_2$ **then**
  $t_1 \leftarrow g_1/f_1$
  $\hat{c}_1 \leftarrow \underline{\underline{-t_1 \times g_2 + f_2}}$
  $\hat{s}_1 \leftarrow \underline{\underline{t_1 \times f_2 + g_2}}$
  $\hat{c}_2 \leftarrow \underline{\underline{t_1 \times g_2 + f_2}}$
  $\hat{s}_2 \leftarrow \underline{\underline{t_1 \times f_2 - g_2}}$
else
  $t_2 \leftarrow g_2/f_2$
  $\hat{c}_1 \leftarrow \underline{\underline{-g_1 \times t_2 + f_1}}$
  $\hat{s}_1 \leftarrow \underline{\underline{f_1 \times t_2 + g_1}}$
  $\hat{c}_2 \leftarrow \underline{\underline{g_1 \times t_2 + f_1}}$
  $\hat{s}_2 \leftarrow \underline{\underline{-f_1 \times t_2 + g_1}}$
end if
Compute c_1 and s_1 using the Givens rotation for $f \leftarrow \hat{c}_1$ and $g \leftarrow \hat{s}_1$
Compute c_2 and s_2 using the Givens rotation for $f \leftarrow \hat{c}_2$ and $g \leftarrow \hat{s}_2$
$u \leftarrow c_1 + c_2$
$\hat{R}_{j,j} \leftarrow \underline{\underline{R_{j,j} + \frac{s_2}{u} \times R_{j,k}}}$
$\hat{R}_{k,k} \leftarrow \underline{\underline{R_{k,k} - \frac{s_1}{u} \times R_{j,k}}}$

参考文献

[1] Z. Drmac and K. Veselic, New fast and accurate Jacobi SVD algorithm: I., SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 29, pp. 1322–1342, 2008.

[2] M. Aoki, M. Takata, K. Kimura, and Y. Nakamura, Improvement of the Thick-Restart Lanczos Method in Single Precision Floating Point Arithmetic using Givens Rotations, in: Proc. of PDPTA 2019, pp. 149–155, 2019.

[3] S. Araki, M. Takata, K. Kimura, and Y. Nakamura, On an Implementation of Two-Sided Jacobi Method, in: Proc. of PDPTA 2019, pp. 156–162, 2019.

[4] H. Rutishauser, The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices, Numerische Mathematik, Vol. 9, No. 1, pp. 1–10, 1966.

深層ニューラルネットにおける加算と結合のスキップ接続の対応

長瀬 准平 [1], 石渡 哲哉 [2]
[1] 芝浦工業大学大学院，[2] 芝浦工業大学
e-mail : mf18061@shibaura-it.ac.jp

1 概要

現代において，深層ニューラルネットを用いた機械学習は，コンピュータサイエンスの必要不可欠な技術となりつつある．一方で，提案されている多くの手法は実験結果などの経験則にのみ基づいており，体系的な理論は未だ確立されていない．本研究では，近年のニューラルネットがもつ特徴の一つであるスキップ接続に着目し，表現集合の観点から ResNet[1] タイプのモデルと DenseNet[2] タイプのモデルを考察する．それぞれのスキップ接続は加算と結合で実現されており，パラメータ行列の分割と分解に関する結果を得ることができる．

2 導入

機械学習の基本となる線形回帰モデルの派生として単層パーセプトロンモデルを説明し，表現力の概念を導入する．また，本稿の研究対象として，パーセプトロンを拡張する構造であるスキップ接続について導入する．

2.1 単層パーセプトロンモデル

機械学習の問題の中で，一つの基本的なモデルとして線形回帰モデルが挙げられる．線形回帰モデルでは，入力 $\boldsymbol{x}$ に対してある基底関数 ϕ を適用し，その結果 $\phi(\boldsymbol{x})$ と重み係数 $\mathbf{w}$ の線形和 $\mathbf{w}^T\phi(\boldsymbol{x})$ を用いて予測を行う．ここで重み係数はパラメータであり，データから $\mathbf{w}$ を同定することで学習が進められる．線形回帰モデルの設計については，より性能の高い基底関数を考えるだけでなく，基底関数を学習可能にすることで性能を向上させることが考えられる．その一つの例が単層パーセプトロンモデル（Single Layer Perceptron;SLP）であり，次のように表すことができる．

$$\mathrm{SLP}(\boldsymbol{x}; \mathbf{w}, W, \boldsymbol{b}) = \mathbf{w}^T\boldsymbol{\sigma}(W\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}).$$

ここで，$\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$, $W \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ はパラメータである．$\boldsymbol{\sigma}$ は活性化関数と呼ばれ，要素ごとに非線形変換 σ を行う関数である．本稿では σ として任意の $\mathbb{R}$ 上 $\mathbb{R}$ 値関数を考えるが，近年では $\mathrm{ReLU}(x) = \max(x, 0)$ などが使われることが多い．単層パーセプトロンを繰り返し合成することで多層パーセプトロンも定義される．

2.2 表現集合

機械学習モデルが取り得る関数の集合を表現集合と呼び，その近似性能を表現力などと呼ぶ．本稿では，表現集合を次のように定義する．

定義 1 (表現集合) パラメータ θ をもつ機械学習モデル $f(\cdot;\theta)$ について，パラメータが集合 Θ 上で定義される場合に表現し得る関数の集合：

$$\{\, f(\cdot;\theta) \mid \theta \in \Theta \}$$

を機械学習モデル f の Θ 上の表現集合と呼ぶ．

したがって，単層パーセプトロンモデルの表現集合は次式で与えられる：

$$\left\{ \mathrm{SLP} : \boldsymbol{x} \mapsto \mathbf{w}^T\boldsymbol{\sigma}(W\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) \;\middle|\; (\mathbf{w}, W, \boldsymbol{b}) \in \Theta \right\}.$$

2.3 スキップ接続

パーセプトロンは，関数の合成によって関数が直列に接続されているモデルと捉えることができる．さらに一般のニューラルネットの場合，接続の分岐や並列な接続を考えることができる．そのための最も単純な構造がスキップ接続であり，ResNet[1] で特徴的な構造として提案されて以来多くの提案モデルに組み込まれている．

スキップ接続は，合成によって直列に接続されている複数の関数をバイパスするような接続である．スキップ接続によりバイパスされるいくつかの関数のまとまりを以下ではブロックと呼ぶ．ResNet[1] では，ブロックの変換を B として，$B(x) + x$ のように，入力を恒等的に足し合わせたものを新たな出力とするモデルを提案した．本稿では，ResNet[1] タイプの加算のスキップ接続が線形変換 $\boldsymbol{s}$ をもつ場合に拡張し：$B(x) + \boldsymbol{s}(x)$，DenseNet[2] タイプの結合のスキップ接続：$(B(x), \boldsymbol{s}(x))^T$ との比較を行う．

3　本論

本稿では，スキップ接続をパーセプトロンに付け加えた場合の表現集合について議論する．3.1 節で単層の場合について議論し，加算と結合の場合の基本形を導く．3.2 でその基本形を多層化し，スキップ接続付きのパーセプトロンを多層化した場合に現れる性質について議論する．

3.1　スキップ接続をもつ単層パーセプトロンモデルの表現集合

単層パーセプトロンモデルは活性化関数 $\boldsymbol{\sigma}$ と Affine 関数 $\boldsymbol{w}$ が繰り返し合成されているものである．したがって，$\boldsymbol{w}_2 \circ \boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1$ と書くことができるので，スキップ接続を導入する場合，$\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{w}_2$ の各関数をバイパスするかしないかによって 8 種類のスキップ接続を得ることができる．ここで，次の性質が知られている．

補題 2 単層パーセプトロンモデルに，活性化層をバイパスしないスキップ接続を付け加えても表現集合は変化しない．

したがって，スキップ接続付き単層パーセプトロンの表現集合を議論する場合，活性化層をバイパスする下記の 4 つのみを考えれば良いことがわかる．

$$\boldsymbol{w}_2 \circ \boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1 \oplus \boldsymbol{s}, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{w}_2 \circ (\boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1 \oplus \boldsymbol{s}), \tag{2}$$

$$(\boldsymbol{w}_2 \circ \boldsymbol{\sigma} \oplus \boldsymbol{s}) \circ \boldsymbol{w}_1, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{w}_2 \circ (\boldsymbol{\sigma} \oplus \boldsymbol{s}) \circ \boldsymbol{w}_1. \tag{4}$$

上式の $\oplus$ それぞれについて，加算の場合と結合の場合を考えることで，次の定理が導かれる．

定理 3 加算の線形スキップ接続をもつ単層パーセプトロンモデルの中で最も表現集合の大きいモデルは上式 (1) であり，

$$\boldsymbol{w}_2 \circ \boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1 + \boldsymbol{s} \tag{5}$$

である．結合の線形スキップ接続をもつ単層パーセプトロンモデルの中で最も表現集合の大きいモデルは上式 (2) であり，

$$\boldsymbol{w}_2 \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1 \\ \boldsymbol{s} \end{pmatrix} \tag{6}$$

である．さらに，上式 (6) のスキップ接続の線形変換 $\boldsymbol{s}$ を恒等変換に置き換えたモデル；

$$\boldsymbol{w}_2 \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1 \\ \mathrm{id} \end{pmatrix} \tag{7}$$

と，(5), (6) は同じ表現集合をもつ．

3.2　スキップ接続をもつ多層パーセプトロンモデルの表現集合

定理 3 で得られた加算と結合のスキップ接続をもつモデルの基本形を多層化することで，多層パーセプトロンがスキップ接続をもつ場合を議論する．式 (5) のモデルの合成を変形すると，

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{w}_2 \circ \boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1 + \boldsymbol{s}) \circ (\boldsymbol{w}_2' \circ \boldsymbol{\sigma} \circ \boldsymbol{w}_1' + \boldsymbol{s}') \\
\to & \boldsymbol{w}_2 \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1 \\ \mathrm{id} \end{pmatrix} \circ \boldsymbol{w}_2' \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1' \\ \mathrm{id} \end{pmatrix} \\
= & \boldsymbol{w}_2 \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1 \circ \boldsymbol{w}_2' \\ \boldsymbol{w}_2' \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1' \\ \mathrm{id} \end{pmatrix} \\
= & \boldsymbol{w}_4 \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_3 \\ \mathrm{id} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \sigma \circ \boldsymbol{w}_1' \\ \mathrm{id} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

のように変形することができる．ここで，$\boldsymbol{w}_3$ と $\boldsymbol{w}_4$ は Affine 関数の合成で記述されており，パラメータ行列は行列積の形で記述される．この考察から次の定理が得られる．

定理 4 スキップ接続付き単層パーセプトロンの基本形の多層形は，スキップ接続が結合の場合のほうが大きな表現集合をもつ．

スキップ接続が加算と結合で異なる場合にはパラメータ行列に制限が現れることがわかると共に，表現集合の意味では，両者に大きな差異がないことがわかる．また，制限されたパラメータが行列積で記述されていることに注目すると，行列積として適切な分解を考えることで，両者のモデルが最良の推定を行った際の誤差を得ることができる．

参考文献

[1] H.Kaiming, et al. Deep residual learning for image recognition. Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2016. p. 770–778.

[2] H.Gao, et al. Densely connected convolutional networks. CVPR. 2017. p. 3.

双対平坦多様体における自己双対測地線に基づく双対葉層化

熊谷 敦也
日本大学商学部
e-mail : kumagai.atsuya@nihon-u.ac.jp

1 はじめに

双対平坦多様体は，e-平坦な部分多様体への分解と m-平坦な部分多様体への分解をそれぞれ考え，かつ至る所で e-平坦な部分多様体と m-平坦な部分多様体が直交するようにすることができる．これは双対葉層化と呼ばれる．すると一般化ピタゴラスの定理により，任意のダイバージェンスを 2 つの部分多様体上の測地線に沿ったものに分解できる [1].

このことから，双対平坦多様体上でいくつかの点が与えられた場合の次元削減に双対葉層化を利用することが考えられる．本研究では測地線の自己双対性に着目してこれに基づく双対葉層化を考察し，一般のダイバージェンスからの部分多様体間のダイバージェンスの抽出を試みる．具体的な確率分布を取り上げ，抽出されたダイバージェンスの意味するところを明らかにする．

2 自己双対測地線

アフィン座標 θ の凸関数 $\psi(\theta)$ が与えられたとすると，θ と双対な座標 η および凸関数 $\phi(\eta)$ が，ルジャンドル変換 $\phi(\eta) = \theta^i\eta_i - \psi(\theta), \theta^i = \partial\phi/\partial\eta_i, \eta^i = \partial\psi/\partial\theta_i$, によって定まる．$\partial\phi/\partial\eta_i$ を $\partial^i\phi(\eta)$ と書くと，ダイバージェンスは

$$d_{\iota\kappa} = \phi(\eta^\iota) - \phi(\eta^\kappa) - (\eta_i^\iota - \eta_i^\kappa)\partial^i\phi(\eta^\kappa) \quad (1)$$

と表される．ここで，η^κ で表される点からの相対座標 $x^\iota = \eta^\iota - \eta^\kappa$, $z_\iota = \theta_\iota - \theta_\kappa$ を導入すると，ダイバージェンスおよび相対座標 z_ι^i は

$$d_{\iota 0} = \frac{g^{ij}}{2}x_i^\iota x_j^\iota + T^{ijk}\frac{x_i^\iota x_j^\iota x_k^\iota}{6} \quad (2)$$

$$z_\iota^i = \left(g^{ij} + T^{ijk}x_k^\iota/2\right)x_j^\iota \quad (3)$$

と展開される [2]．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 階テンソル $T^{ijk} = \partial^i\partial^j\theta^k = \partial^i\partial^j\partial^k\phi$.

与えられた 2 点に対して，一方の座標系でまっすぐな測地線と，双対座標系でまっすぐな双対測地線が考えられるが，接空間近似では，2 つの測地線は一致する．接空間近似から離れるにつれて，(3) の第 2 項の効果として，特別な方向を除いて双対測地線は曲がるようになる．

ここでダイバージェンスの対称部 $g^{ij}x_i^\iota x_j^\iota/2$ を定数 c に固定したとしてダイバージェンスの反対称部 $T^{ijk}x_i^\iota x_j^\iota x_k^\iota/6$ の停留点を探す．そのためラグランジュ乗数 λ を導入し関数

$$\begin{aligned} f(x^\iota, \lambda) = T^{ijk}x_i^\iota x_j^\iota x_k^\iota/6 \\ - \lambda(g^{ij}x_i^\iota x_j^\iota/2 - c) \end{aligned} \quad (4)$$

を考える．これの x^ι に関する微分を 0 とおいて得られる $T^{ijk}x_j^\iota x_k^\iota/2 = \lambda g^{ij}x_j^\iota$ を (3) に代入すると， $\lambda = T^{ijk}x_i^\iota x_j^\iota x_k^\iota/2g^{ij}x_i^\iota x_j^\iota$ として

$$z_\iota^i = (1+\lambda)g^{ij}x_j^\iota \quad (5)$$

を得る．(5) は座標 z_ι^i が接空間近似 $g^{ij}x_j^\iota$ と同じ方向を持っており，双対測地線がこの方向では曲がっていないことを意味する．このようにどちらの座標系でもまっすぐな線を自己双対測地線と呼ぶことにする．

3 自己双対測地線に基づく双対葉層化

双対平坦多様体が，至る所で自己双対測地線に直交する部分多様体に分解されるとし，この部分多様体のそれぞれをリーフと呼ぶことにする．2 点 ι, κ があるとして，ι は自己双対測地線 G_ι とリーフ L_ι の交点，κ は自己双対測地線 G_κ とリーフ L_κ の交点とする．G_ι と L_κ の交点を λ，G_κ と L_ι の交点を λ' としてダイバージェンスの分解を考える．

L_κ が e-平坦ならば，一般化ピタゴラスの定理より $d_{\iota\kappa} = d_{\iota\lambda} + d_{\lambda\kappa}$ という分解が成り立つ．一方，L_ι が m-平坦ならば同様に $d_{\iota\kappa} = d_{\iota\lambda'} + d_{\lambda'\kappa}$ という分解が成り立つ．どちらの場合も

$$d_{\iota\kappa} = d_{\iota\kappa}^{(t)} + d_{\iota\kappa}^{(l)} \quad (6)$$

と書け，リーフ内のダイバージェンス $d_{\iota\kappa}^{(t)}$ およびリーフ間のダイバージェンス $d_{\iota\kappa}^{(l)}$ に分解される．後者はリーフ内の特定の点によらないことから，そこにはリーフ L_ι, L_κ それぞれを特徴付ける大域的な情報が反映されると考えられる．

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京)

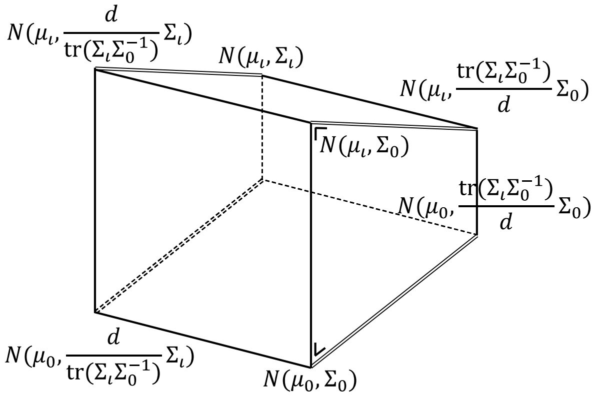


図 1. $N(\mu_\iota, \Sigma_\iota)$ は $N(\mu_0, \Sigma_0)$ を含む e-平坦なリーフに射影される．二重線が自己双対測地線．

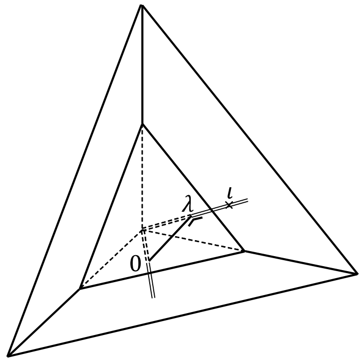


図 2. 四項分布は三項分布全体からなる m-平坦なリーフに射影される．

4 双対葉層化の例

4.1 多変量正規分布からなる多様体

まず，d 次元の多変量正規分布からなる多様体を取り上げる．期待値ベクトル μ，共分散行列 Σ の多変量正規分布 $N(\mu, \Sigma)$ は座標 $\eta = (\mu, \Sigma + \mu\mu')$, $\theta = (\Sigma^{-1}\mu, -\Sigma^{-1}/2)$ で表される．この場合，共分散行列の定数倍が自己双対測地線をなし，これに直交するリーフは e-平坦である．ここで $N(\mu_\iota, \Sigma_\iota)$ と $N(\mu_0, \Sigma_0)$ のダイバージェンス $d_{\iota 0}$ を考え，図 1 に前者の射影を示す．

上記の射影によって，$d_{\iota 0}$ の各成分は以下のように表される：

$$d_{\iota 0}^{(t)} = (\mu_\iota - \mu_0)'\Sigma_0^{-1}(\mu_\iota - \mu_0)/2 + \left[\log\det(\Sigma_\iota^{-1}\Sigma_0) - d\log a\right]/2, \quad (7)$$

$$d_{\iota 0}^{(l)} = \left[\mathrm{tr}(\Sigma_\iota\Sigma_0^{-1}) - d + d\log a\right]/2. \quad (8)$$

ただし $a = d/\mathrm{tr}(\Sigma_\iota\Sigma_0^{-1})$．$d_{\iota 0}^{(l)}$ は $\mathrm{tr}(\Sigma_\iota\Sigma_0^{-1})$ のみに依存し，共分散行列の大きさの違いを表す．一方，$d_{\iota 0}^{(t)}$ の第 1 項は期待値ベクトルの違いを，第 2 項は共分散行列の「向き」の違いを表す．

4.2 多項分布からなる多様体

次に k カテゴリの多項分布からなる多様体を取り上げる．試行回数は 1 とする．確率 $[p_i]_{i=1}^k$ に相当する点を 0，確率 $[q_i]_{i=1}^k$ に相当する点を ι として，ダイバージェンス $d_{0\iota}$ を考える．

この場合，$(c_i \cdots c_{k-1})$ を定ベクトルとして，直線 $(\eta_i \cdots \eta_{k-1}) = t(c_i \cdots c_{k-1})$ が自己双対測地線をなし，これに直交するリーフ $\sum_{i=1}^{k-1}\eta_i = c$（$c$ は定数）が m-平坦となる．この場合，ダイバージェンスの分解は $d_{0\iota} = d_{0\lambda} + d_{\lambda\iota}$ で表される．図 2 に点 ι の射影を示す．

$d_{0\iota}$ の各成分は以下で表される：

$$d_{0\iota}^{(t)} = \sum_{i=1}^{k-1} p_i \log\frac{p_i}{q_i} - (1-p_k)\log\frac{1-p_k}{1-q_k}, \quad (9)$$

$$d_{0\iota}^{(l)} = p_k\log\frac{p_k}{q_k} + (1-p_k)\log\frac{1-p_k}{1-q_k}. \quad (10)$$

$d_{0\iota}^{(l)}$ は p_k, q_k のみに依存し，二項分布 $B(1, p_k)$ と $B(1, q_k)$ のダイバージェンスである．一方，$d_{0\iota}^{(t)}$ は $p_i' = p_i/(1-p_k)$, $q_i' = q_i/(1-q_k)$ を用いて $d_{0\iota}^{(t)} = (1-p_k)\sum_{i=1}^{k-1} p_i'\log(p_i'/q_i')$ と書け，$(k-1)$ カテゴリの多項分布間のダイバージェンスの $(1-p_k)$ 倍である．このように $d_{0\iota}$ は二項分布の違いによる部分と $(k-1)$ カテゴリの多項分布の違いによる部分に分解される．これを繰り返すと，$d_{0\iota}$ は最終的に $(k-1)$ 個の二項分布間ダイバージェンスまで分解される．

5 まとめ

自己双対測地線とそれらに直交するリーフによる双対葉層化を考察し，典型的な確率分布からなる多様体を挙げ，リーフ間・リーフ内のダイバージェンスを抽出した．このような扱いにより，確率分布としてデータが与えられる状況等において次元削減が可能となると考えられる．

参考文献

[1] Amari, S, Information geometry on hierarchy of probability distributions, IEEE Transactions on Information Theory, Vol. **47** (2001), pp. 1701–1711.

[2] Kumagai, A, A perturbative picture of cubic tensors in dually flat spaces, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. **35** (2018), pp. 107–115.

Filippov の方法の特徴付けについて

須田　智晴 [1]
[1] 京都大学大学院人間・環境学研究科
e-mail : suda.tomoharu.88s@st.kyoto-u.ac.jp

1　はじめに

区分的に連続なベクトル場は応用上さまざまな状況で現れる [1]．例えば，乾燥摩擦を伴う運動はその一例である．しかし，こうした問題を常微分方程式として扱うとき，不連続点が存在するため，連続なベクトル場と同様に解を定義することはできない．そこで解の概念を改めて定義する必要があるが，その方法の一つは通常の微分方程式としての解をつなぎあわせることである．この際，不連続点集合の上にスライディングベクトル場を定める必要があるが，その方法は一通りではない [2]．なかでも，応用上よく用いられるのは凸結合に基づく Filippov の方法である [3]．本研究では，Filippov の方法がどのような仮定に基づいているのかを，その特徴づけを与えることにより明らかにする．

2　準備

定義 1 (区分的に連続なベクトル場) $n \geq 2$ に対し，$u : \mathbb{R}^{n-1} \to \mathbb{R}$ を C^1-関数とする．$\mathbb{R}^n$ 上で定義された，

$$\Sigma = \{(\tilde{\mathbf{x}}, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid x_n = u(\tilde{\mathbf{x}})\}$$

を不連続点集合に持つ区分的に連続なベクトル場とは，ベクトル場の組 (X_1, X_2) であって，X_1 と X_2 がそれぞれ $G_1 := \{\mathbf{x} \mid u(\tilde{\mathbf{x}}) > x_n\}$ と $G_2 := \{\mathbf{x} \mid u(\tilde{\mathbf{x}}) < x_n\}$ の閉包上で連続なものである．区分的に連続なベクトル場を (X_1, X_2, Σ) と書く．

Σ の $\mathbf{x}$ における法線ベクトルは

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}) := \frac{-1}{\sqrt{1+|\nabla u(\mathbf{x})|^2}}\Big(\frac{\partial u}{\partial x_1}(\mathbf{x}), \cdots, \frac{\partial u}{\partial x_{n-1}}(\mathbf{x}), -1\Big)^T$$

と定義する．また，$X_{1N}(\mathbf{x}) := X_1(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$, $X_{2N}(\mathbf{x}) := X_2(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$ と定義する．$\mathbb{R}^n$ 上で定義された，Σ を不連続点集合にもつ区分的に連続なベクトル場全体の集合を $C_*(\mathbb{R}^n, \Sigma)$ と表記する．また，$P := \{x_n = 0\}$ とする．以下では微分同相写像は C^1 級を仮定する．

一般的に，微分同相写像は区分的に連続なベクトル場を保つとは限らない．そこで，不連続点集合 Σ を保つ微分同相写像全体の集合を $\mathcal{G}(\Sigma)$ と書く．特に，Σ のパラメータの取り直しはこの集合に含まれる写像によって記述される．また，$P = \{x_n = 0\}$ を Σ に写す標準的な写像が存在して，具体的には $\Psi_\Sigma(\mathbf{x}) = (x_1, \cdots, x_{n-1}, x_n + u(x_1, \cdots, x_{n-1}))$ で与えられる．

不連続点集合 Σ 上で部分的に定義されたベクトル場全体の集合を $\Xi(\Sigma)$ と書く．

3　スライディングベクトル場の定義

以上の準備の下で，ある区分的に連続なベクトル場に対するスライディングベクトル場は次のように定義できる．

定義 2 (スライディングベクトル場) ベクトル場 $X_0 \in \Xi(\Sigma)$ が区分的に連続なベクトル場 (X_1, X_2, Σ) に関する Σ 上のスライディングベクトル場であるとは，X_0 が スライディング領域

$$R_s(X_1, X_2, \Sigma) := \{\mathbf{x} \in \Sigma \mid X_{1N}(\mathbf{x})X_{2N}(\mathbf{x}) \leq 0 \ \mathit{and}\ X_{1N}(\mathbf{x}) \neq X_{2N}(\mathbf{x})\}$$

上で定義されていることである．

区分的に連続なベクトル場 (X_1, X_2, Σ) に対して，スライディングベクトル場の定め方は一通りではなく，選択の余地がある．そこで，その選び方を次のように定義する．

定義 3 写像 $S_\Sigma : C_*(\mathbb{R}^n, \Sigma) \to \Xi(\Sigma)$ が Σ 上のスライディングベクトル場の生成写像であるとは，各 $(X_1, X_2, \Sigma) \in C_*(\mathbb{R}^n, \Sigma)$ に対して $S_\Sigma(X_1, X_2, \Sigma)$ が 区分的に連続なベクトル場 (X_1, X_2, Σ) に関する Σ 上のスライディングベクトル場となることである．

定義 4 Filippov の方法の生成写像 F_Σ は次で与えられる：

$$F_\Sigma(X_1, X_2, \Sigma)(\mathbf{x}) = \frac{X_{2N}(\mathbf{x})}{X_{2N}(\mathbf{x}) - X_{1N}(\mathbf{x})}X_1(\mathbf{x}) + \frac{X_{1N}(\mathbf{x})}{X_{1N}(\mathbf{x}) - X_{2N}(\mathbf{x})}X_2(\mathbf{x}).$$

写像 $\Phi \in \mathcal{G}(\Sigma)$ を用いて Σ のパラメータを変換することを考えると，Φ の適用の仕方により，$S_\Sigma\left(D\Phi(X_1, X_2, \Sigma)\right)$ と $D\Phi\left(S_\Sigma(X_1, X_2, \Sigma)\right)$ という二つのベクトル場が得られる．これらは一致するとは限らないため，次の条件を考える．

定義 5 スライディングベクトル場の生成写像 S_Σ が **パラメータの変換について整合的**であるとは，に任意の $\Phi \in \mathcal{G}(\Sigma)$ について，$D\Phi \circ S_\Sigma = S_\Sigma \circ D\Phi$ となることである．

スライディングベクトル場を選ぶことは，X_1 と X_2 を基に Σ 上にベクトル場を補完することに相当する．その最も簡単な方法は，X_1 と X_2 の各点での値により決めることであろう．

定義 6 Σ 上のスライディングベクトル場の生成写像 S_Σ が $\mathbf{x} \in \Sigma$ **において各点的**であるとは，$X_1(\mathbf{x}) = X_1'(\mathbf{x})$ かつ $X_2(\mathbf{x}) = X_2'(\mathbf{x})$ ならば

$$S_\Sigma(X_1, X_2, \Sigma)(\mathbf{x}) = S_\Sigma(X_1', X_2', \Sigma)(\mathbf{x})$$

となることである．ただし，$\mathbf{x} \in R_s(X_1, X_2, \Sigma) \cap R_s(X_1', X_2', \Sigma)$ とした．

生成写像 S_Σ が各 $\mathbf{x} \in \Sigma$ で各点的であるとき，単に各点的であるという．

定理 7 スライディングベクトル場の生成写像 S_Σ がパラメータの変換に関する整合性をもち，各点的であれば次の条件を満たす写像

$$\alpha_\Sigma : D = \{(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid u_{1n} u_{2n} \leq 0 \ \textit{and}\ u_{1n} \neq u_{2n}\} \to \mathbb{R}^{n-1},$$

が存在する．

(i) 正則行列 A が $F_A(P) \subset P$ をみたせば，

$$A(\alpha_\Sigma(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2), 0)^T = (\alpha_\Sigma(A\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_2), 0)^T$$

となる．ただし，$F_A(\mathbf{x}) := A\mathbf{x}$ である．

(ii) 各 $\mathbf{x} \in R_s(X_1, X_2, \Sigma)$ について，

$$\begin{aligned} &S_\Sigma(X_1, X_2, \Sigma)(\mathbf{x}) \\ &= ((\Psi_\Sigma)_* \circ \alpha_\Sigma)(X_1, X_2)(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{1}$$

である．ただし，Ψ_Σ は P を Σ に写す標準的な写像であり，$(\Psi_\Sigma)_*$ はその *push-forward* である．

逆に，写像 $\alpha_\Sigma : D \to \mathbb{R}^{n-1}$ が上記の条件を満たせば，式 *(1)* で定義された写像 $S_\Sigma : C_*(\mathbb{R}^n, \Sigma) \to \Xi(\Sigma)$ はスライディングベクトル場の生成写像であり，パラメータの変換に関する整合性をもち，各点的である．

4　Filippov の方法の特徴づけ

$X_1(\mathbf{x}) = X_2(\mathbf{x}) = \mathbf{u} \in T_\mathbf{x}\Sigma$ が $\mathbf{x} \in \Sigma$ で成りたてば，これは連続な場合であり，$\mathbf{x}$ でのベクトルは $\mathbf{u}$ と選ぶべきであろう．このような状況はスライディングベクトル場の定義域には含まれていないが，その極限点ではある．そこで，次の条件を考える．

定義 8 スライディングベクトル場の生成写像 S_Σ が次の条件を満たすとき，**連続な場合と整合的である**という:区分的に連続なベクトル場の族 $\{(X_1^m, X_2^m, \Sigma)\}_{m\in\mathbb{N}}$ が $\mathbf{x} \in \bigcap_m R_s(X_1^m, X_2^m, \Sigma)$ について $i = 1, 2$ に対し

$$\lim_{m\to\infty} X_i^m(\mathbf{x}) = \mathbf{u} \in T_\mathbf{x}\Sigma$$

ならば，

$$\lim_{m\to\infty} S_\Sigma(X_1^m, X_2^m, \Sigma)(\mathbf{x}) = \mathbf{u}$$

が成り立つ．

Filippov の方法の特徴づけとして，次の結果が成り立つ．

定理 9 スライディングベクトル場の生成写像 S_Σ がパラメータの変換に関する整合性と連続な場合との整合性を持ち，各点的であるとき，定理 *7* の写像 $\alpha_\Sigma(\mathbf{p}, q, \mathbf{r}, s)$ が D 上で C^1 ならば，S_Σ は *Filippov* の方法の生成写像である．

謝辞　本研究は特別研究員奨励費 (17J03931) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] M. Bernardo, C. Budd, A. R. Champneys, and P. Kowalczyk, Piecewise-smooth dynamical systems: theory and applications, Springer, 2008.

[2] M. R. Jeffrey, Hidden dynamics in models of discontinuity and switching, Physica D: Nonlinear Phenomena, 273(2014), 34–45.

[3] A. F. Filippov, Differential equations with discontinuous righthand sides, Springer, 1988.

[4] T. Suda, A characterization of Filippov vector fields, submitted, arXiv:1901.06333 [math.DS].

ルジャンドル陪関数の変形と応用１３

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、
定数係数が異なる関数、
（ｓｉｎθ）＾m*Ｒｎ.ｍ（ｘ）に変形する。
ｘ＝ｃｏｓθ。Ｒｎ.ｍ（ｘ）は、
ｎ次の多項式で、最高次ｘ＾ｎの
定数係数を、１／ｎ！で決める。
δ/δｘ｛Ｒｎ.ｍ｝＝Ｒｎ-1.ｍ+1
の式を得る。[1]

２　軸対称の外部流れ

ｚ軸方向に減衰運動をする球体の
軸対称の流れを、ストークス近似で解く。
連続の式は、ｄｉｖ｛V｝＝０とする。
ρδV/δｔ項を、ρωＶとおく。
ｋ＾2＝－ρω／η。
ｋ＾2*V＋Δ｛V｝＝ｇｒａｄＰ／η。
非同次のヘルムホルツ式を解く。
境界条件は、境界上、
ｒ＝ａで、Ｖｚ＝V0ｚ。
無限遠で、Ｖ＝０。
Ｕｎを、スカラーのヘルムホルツ解とする。
Ｕｎ＝ｃｏｓｍφ*
ｒ＾（-1/2）*Ｊν（ｋｒ）*Ｒｎ.ｍ*
（ｓｉｎθ）＾m。ν=-ｎ-m-1/2。
流れの解を、ＶＡ＋ＶＢとする。
ＶＡ、ＶＢは非同次のヘルムホルツ解で、
粘性圧力を造る。

ＶＡ＝ｇｒａｄ｛β*Ｕｎ｝。
ＶＢ＝Σｒ*Ｕｎ*ｇｒａｄ｛ｒ｝。
β＝ｒ*ｃｏｓθ。
関係式、ｄｉｖ｛Ｕｎ*ｇｒａｄβ｝＝
（ｇｒａｄ｛Ｕｎ｝・ｇｒａｄβ）＝
ｋ*ｃ9*Ｕｎ-1＋ｋ*ｃ11*Ｕｎ+1。
を応用する。ｃ11＝ｎ＋１。
ｃ9＝－（ｎ＋２ｍ）／
｛（２ｎ＋２ｍ－１）（２ｎ＋２ｍ＋１）｝。

３　連続の式

ｄｉｖ｛ＶＡ＋ＶＢ｝を計算する。
ＶＢ＝「－ｋ*ｃ9*ｒ*Ｕｎ-1
－ｋ*ｃ11*ｒ*Ｕｎ+1」*ｇｒａｄ｛ｒ｝。
と、粘性圧力、Ｐ／η＝
－２ｋ*ｃ9*Ｕｎ-1－２ｋ*ｃ11*Ｕｎ+1
を得る。ＶＡも粘性圧力を造るが、
ＶＢとは符号が逆で、加算すると、０になる。
ＶＡ＋ＶＢ流れは、見かけ上、粘性圧力を
造らないヘルムホルツ解となる。
連続の式は、ｄｉｖ｛ＶＡ＋ＶＢ｝＝
－ｋ*ｃ9（ｎ＋m）Ｕｎ-1
＋ｋ*ｃ11（ｎ＋m＋１）Ｕｎ+1。
連続の式を満足するために、MMとＭＰの
ヘルムホルツ解を加算する。MM＝－ｃ9*
（ｎ＋m）*ｇｒａｄ｛Ｕｎ-1｝／ｋ。
ＭＰ＝ｃ11（ｎ＋m＋１）*
ｇｒａｄ｛Ｕｎ+1｝／ｋ。

４　境界条件

Ｖ＝ＶＡ＋ＶＢ流れは、
境界上、ｒ＝ａで、Ｊν（ｋａ）＝０のとき、

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集（2019.9.3-5，東京）

Ｖｒ＝Ｖθ＝Ｖφ＝０となる。
MMの流れは、
境界上、ｒ＝ａで、Ｊν（ｋａ）＝０のとき、
δ/δｒ｛Ｕn-1｝＝
（ｎ＋ｍ－１）Ｕn-1／ｒ。
この形は、境界条件の、Ｖｚ＝V0ｚ、
ｒ＾ｎ型ポテンシャル流、
ｇｒａｄ｛ｓn.m｝と同形で、
Ｖθ、Ｖφが同じであれば、ｒ＝ａで、
Ｖ＝V0ｚ*a*ｇｒａｄ｛ｓ1.0｝と一致
させることができる。このためには、
ｎ＝２、ｍ＝０が必要。ｓｎ.ｍ＝
ｃｏｓｍφ*（ｓｉｎθ）＾m*
（ｒ／ａ）＾（n+m）*Ｒｎ.ｍ。
ＶＡの定数係数Ｃ１も決まる。
Ｃ１＝－ｋ／（２ｃ9）*ａ＾（3/2）*
１／Ｊ-3/2（ｋａ）*V0ｚ。
同様に、ｒ＝ａで、ＭＰと一致する、
ポテンシャル流ＶＰ２は、
ＶＰ２＝－１３５／4*V0ｚ*ａ*
ｇｒａｄ｛u3.0｝。u3.0はスカラーの
ラプラス解。ｕｎ.ｍ＝ｃｏｓｍφ*
（ｓｉｎθ）＾m*
（ａ／ｒ）＾（n+m+1）*Ｒｎ.ｍ。
境界上で、Ｖｚ＝V0ｚのみにするため、
ポテンシャル流、－ＶＰ２を加算する。
流れの解は、
Ｖ＝ＶＡ＋ＶＢ＋MM＋ＭＰ－ＶＰ２。
ポテンシャル流の造る粘性圧力が決まる。
Ｐ／η＝（ｋａ）＾2*１３５／４*u3.0*
V0ｚ／ａ。

５　球に働く抗力

抗力は、
ΔＦ＝「－Ｐ*ｃｏｓθ
＋２ηδ/δｒ｛Ｖｚ｝
＋η（ｒｏｔＶ）φ*ｓｉｎθ」*ΔＳ。
Ｖｚ＝（Ｖ・ｇｒａｄβ）。
ルジャンドル陪関数の変形、
（ｓｉｎθ）＾m*Ｒｎ.ｍ（ｘ）は、
直交関数系を造る。
Ｐ∝Ｒ1.0のときのみ、
δ/δｒ｛Ｖｚ｝∝Ｒ0.0のときのみ、
（ｒｏｔ｛Ｖ｝）φ∝ｓｉｎθ*Ｒ0.1
のときのみ抗力は存在する。
抗力は、
Ｆ＝－η*4／3*πａ*（ｋａ）＾2*V0ｚ。
Ｊ-5/2（ｋａ）＝０より、ｋａ≒3.9595。
Ｆ＝－η*20.9*πａ*V0ｚ。

６　まとめ

ルジャンドル陪関数Ｐｎ+m.ｍの変形で、
ｒｏｔ等の微分演算が簡略化されると
考える。

参考文献

[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

時間遅れフィードバック法を用いた決定論的拡散の制御

小林 幹 [1], 安東 弘泰 [2]
[1] 立正大学, [2] 筑波大学
e-mail : miki@ris.ac.jp

1 概要

カオス制御とはカオスに起因する乱雑運動を周期的な運動に制御することを目的とする．カオス制御を目的として使用される制御法の中で最も有名な方法の一つが時間遅れフィードバック法である．時間遅れフィードバック法は, カオスアトラクターに埋め込まれている不安定周期軌道を安定化することでカオスを周期に制御することができる [1]. 時間遅れフィードバック法は, 他のカオス制御法と比較して実験的にもセットアップが容易であることもあり, 工学分野のみならず様々な分野で最も応用されているものの一つである．最近, この時間遅れフィードバック法がカオス制御のみならず, 確率システムの拡散過程を制御できることが分かった [2]. ここでは, 時間遅れフィードバック法を用いて, 確率過程における拡散過程だけでなく, カオス系における決定論的拡散をも制御可能であることを数値的に示す．

2 はじめに

本節ではまず確率システムにおける時間遅れフィードバック法の適用について紹介する．確率システムの例として最もシンプルなランダムウォークを考え, ランダムウォークに時間遅れフィーバック法を適用する．

$$x_{n+1} = x_n + D\xi_n + K(x_{n-\tau} - x_n), \quad (1)$$

ただし, x_n は時間 n におけるランダムウォーカーの位置を表し, ξ_n はノーマル分布 $N(0,\ 1)$ に従うランダム変数, そして D はノイズの振幅を表す．$K(x_{n-\tau} - x_n)$ が制御項であり過去のランダムウォーカーの位置と現在の位置の差がフィードバックされていることが重要な点である．制御入力が入っていないとき, つまりゲイン $K = 0$ のとき, このシステムは拡散係数 D をもつ拡散を示すことが知られているが, K の値を適当にとり制御入力がシステムに加わると拡散が抑えられることが示される (図 1). さらに, τ を大きくすると拡散係数の値は一様に小さくなることも知られている [2].

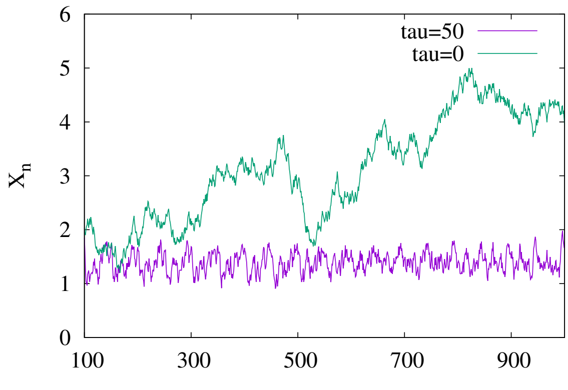


図 1. (1) 式の数値計算 ($D = 0.5$). 紫線は $\tau = 50$ を, そして緑線 $\tau = 0$(つまり制御入力が入っていない系) をそれぞれ表す．時間遅れフィードバックが入力されることにより拡散が抑えられていることが分かる．

3 決定論的拡散の制御

前節では, 確率的拡散過程の制御を行ったが, 本節ではカオス的乱雑さが起因して引き起こされるいわゆる決定論的拡散について考察する [3, 4, 5]. 決定論的拡散を引き起こすシステムに制御項を加えた系として以下を考える．

$$x_{n+1} = x_n + Dw_n + K(x_{n-\tau} - x_n), \quad (2)$$

ただし, x_n は時間 n におけるランダムウォーカーの位置を, そして D はノイズ強度を表す．$K(x_{n-\tau} - x_n)$ が制御項であり, これは前節と同様である．重要なことはランダム変数に対応するのが w_n であり, これはロジスティック写像により生成されることである．つまり, $w_n = \tilde{w}_n - \langle \tilde{w} \rangle$, $\tilde{w}_{n+1} = 3.75\tilde{w}_n(1 - \tilde{w}_n)$, ただし, $\langle\rangle$ は長時間平均 $\langle x \rangle = \sum_{n=1}^{T} x_n/T$, $(T >> 1)$ を表す．長時間平均された量を引いている $(\tilde{w}_n - \langle \tilde{w} \rangle)$ のは w の長時間平均を 0 にしてランダムウォーカーがドリフトしないようにするためである．このシステム (2) のノイズ (w_n) はカオスにより発生しているので, 前節で扱ったガウシアンノイズをもつシステム (1) より複雑である．ロジスティック写像のパラメタである a をここでは 3.75 にしているがこれはカオスの不変密度

関数が特異的になる領域であり, 非常に複雑なランダムさであることが分かる.

結果として, 前節で扱った純粋な確率過程により発生する拡散と同様に, 図 2 よりカオスにより発生した決定論的拡散も時間遅れフィードバック法により拡散が制御されていることが分かる. また, 決定論的拡散係数も τ を大きくすることにより一様に小さくなることも数値的に明らかになっている [6].

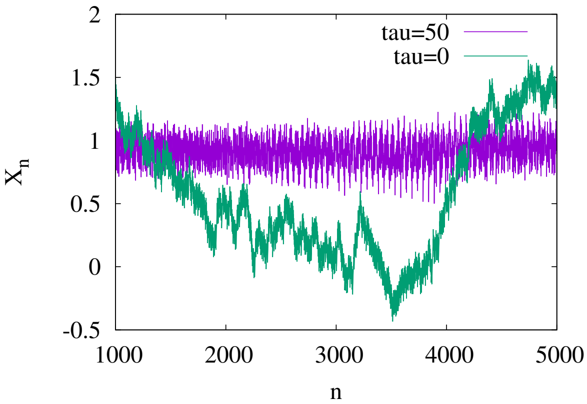


図 2. (2) 式の数値計算 ($D = 0.5$). 紫線は $\tau = 50$ を, そして緑線 $\tau = 0$(つまり制御入力が入っていない系) をそれぞれ表す. 時間遅れフィードバックが入力されることにより拡散が抑えられていることが分かる.

4　まとめ

時間遅れフィードバック法を決定論的拡散に適用した結果を報告した. 時間遅れフィードバック法を用いることで, 決定論的拡散係数が制御できる. より正確には時間遅れを増やすと決定論的拡散係数がより小さくなることが示される. 本論文では, ランダム項に対応する変数をロジスティック写像に限定したが, ロジスティック写像のみならずシフト写像を修正した系においても同様の結果が得られることはすでに報告済みである [6]. カオス制御で用いられる時間遅れフィードバック法はカオスアトラクターに埋め込まれている不安定周期軌道を安定化することでカオスを周期に制御しているが, ここでは周期軌道を安定化することで拡散を制御しているわけではないことに注意が必要である. カオス制御では, 時間遅れ τ の値が非常に重要でありアトラクターに埋め込まれている不安定周期軌道の周期にかなり近い値に時間遅れ τ を設定しないと制御がうまくいかないことが知られている. 一方, 拡散制御では, 時間遅れ τ を大きくとればとるほど拡散係数を小さくできるという意味で τ の設定は非常に簡単であることも特徴的である.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP18K03433 と立正大学経済研究所の助成を受けたものです. .

参考文献

[1] K. Pyragas, *Phys. lett. A*, vol. 170, pages 421–428, 1992.

[2] H. Ando, K. Takehara and M. U. Kobayashi, *Phys. Rev. E*, 96, 012148, 2017.

[3] S. Grossmann and H. Fujisaka, *Phys. Rev. A*, 26, 1779, 1982.

[4] H. Fujisaka and S. Grossmann, *Z. Phys. B*, 48, 261, 1982.

[5] R. Klages and J. Dorfman, *Phys. Rev. Lett.*, 74, 387, 1995.

[6] M. U. Kobayashi, *NOLTA Journal, Special issue on The second step of the FIRST*, vol. 9, issue 2, pages 196–203, 2018.

Stochastic bifurcation in a turbulent swirling flow

佐藤 譲

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

概要

We report the experimental evidence of the existence of a random strange attractor in a fully developed turbulent swirling flow. By defining a global observable which tracks the asymmetry in the flux of angular momentum imparted to the flow, we first reconstruct the associated turbulent attractor and then follow its route to chaos. We show that the experimentally observed attractor can be modeled by stochastic Duffing equations, that match the quantitative properties of the experimental flow, namely, the number of quasi-stationary states and transition rates among them, the effective dimensions, and the continuity of the first Lyapunov exponents. Furthermore, a random map extracted from the experimental time series exhibits qualitatively same stochastic bifurcation as the experimentally observed transitions. Our findings open the way to low-dimensional dynamical system modeling of systems featuring a large number of degrees of freedom and multiple quasi-stationary states.

あるシンプレクティック写像の Anosov 性について

大久保　健一 [1], 梅野 健 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻
e-mail : okubo.kenichi.65z@st.kyoto-u.ac.jp

1　カオス写像と Anosov 性

時間反転対称性とは, 時刻 $t \to \infty$ の方向でのダイナミクスの関数形と時刻を $t = -t$ と変換した場合の関数形が同じになる性質のことである. すなわち, 時間を巻き戻した運動に対応する $t \to -\infty$ 方向の運動が存在し, それが $t \to \infty$ 方向と同一であることを意味する.

ミクロなダイナミクスは時間反転対称性をもつ時間発展則で記述される一方で, マクロな描像は時間反転対称性を破り, 時間の一方向性を示すような振る舞いを示すことが経験的に知られている. 19 世紀に Boltzmann は分子混合仮説を仮定することで, この矛盾を解決しようと試みたが, Zermelo や Loschmidt らによる反論を受けた. 1970 年代には Sinai, Ruelle, Bowen[1] らによって SRB 分布の概念が提唱された. 彼らの結果によると, 系を記述する写像が Anosov 可微分同相写像であり, 力学系が SRB 測度を持てば, 初期密度関数は SRB 測度に対応する SRB 分布に収束するという, マクロな意味での時間の一方向性を示すことが証明される.

Anosov 写像の例は, Sinai billiards[2] のように, 壁などの存在によって, Anosov 性を満たすようにしたもの, または, Arnold の猫写像のように, 位相空間上の各点でのヤコビアンが定数行列になるような単純なものが知られている.

本講演では時間反転対称性をもつシンプレクティック写像を考え, 証明の簡単化のため変数変換し, 得られた写像が局所不安定の時に Anosov 性を持つこと示す. この力学系には障害物はなく, 位相空間の各点におけるヤコビアンも定数行列ではない. これによって, ミクロな系では完全な時間反転対称性をもつ一方で, マクロでは時間の一方向性をもつことを示したことになる.

2　考える力学系

以下の古典ハミルトニアンを考える [3].

$$\begin{aligned} H(p_1,p_2,q_1,q_2) &\overset{\text{def}}{=} \frac{p_1^2}{2}+\frac{p_2^2}{2}+V(q_1,q_2), \\ V(q_1,q_2) &\overset{\text{def}}{=} -\frac{\varepsilon}{\pi}\log\left|\cos\left\{\pi(q_1-q_2)\right\}\right|. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで, 変数の定義域は $p_1, p_2 \in \mathbb{R}$, $q_1, q_2 \in I_{\delta_N} \overset{\text{def}}{=} \left(-\frac{1}{2}+\frac{\delta_N}{\pi}, \frac{1}{2}-\frac{\delta_N}{\pi}\right]$ である. なお δ_N はある与えられた N に対して式 (4) を満たすように定義される. このハミルトニアンに対して, 時間反転対称な 2 次のシンプレクティックインテグレータ (リープフロッグ法) を用いて, 式 (5) で定義される写像

$$T_{\varepsilon,\Delta\tau} : (\mathbb{R}^2 \times I_{\delta_N}^2)\backslash\Gamma \to (\mathbb{R}^2 \times I_{\delta_N}^2)\backslash\Gamma. \tag{2}$$

を考える. ここで, 集合 Γ は有限回のイテレーションで, $\tan\left[\pi\left\{q_1(n)+\frac{\Delta\tau}{2}p_1(n)-q_2(n)-\frac{\Delta\tau}{2}p_2(n)\right\}\right]$ が発散するような初期値 (p_1,p_2,q_1,q_2) の集合である. また, $\Delta\tau$ はステップサイズを表す.

この写像 $T_{\varepsilon,\Delta\tau}$ には保存量 $C = p_1(0)+p_2(0) = p_1(n)+p_2(n)$ が存在する. この C を用いて位置変数の間には, $q_1(n)+q_2(n) = q_1(0)+q_2(0)+nC = q_0+nC$ の関係がある. これらの関係を用いて p_2, q_2 を削除することで, 式 (6) で定義される写像 $\widehat{T}_{\varepsilon,\Delta\tau}$ を導く. この写像 $\widehat{T}_{\varepsilon,\Delta\tau}$ に対して, さらに変数変換をして, 式 (7) で定義される写像

$$\widetilde{T}_{\varepsilon,\Delta\tau} : I_{\delta_N}^2 \to I_{\delta_N}^2 \tag{3}$$

を構成する. 従来考えられてきたシンプレクティック写像 (standard map や tangent map[4]) と, 提案する写像の違いを表 1 にまとめる.

3　Anosov 性

定義 1 (Anosov diffeomorphism) *[5, 6, 7]* $\mathcal{M}^*$ をコンパクトな多様体とし, $\|\cdot\|$ をノルム, $f : \mathcal{M}^* \to \mathcal{M}^*$ を可微分同相写像とする. 各点 $x \in \mathcal{M}^*$ に対して, 接空間 $T_x\mathcal{M}^*$ を考える. 写像 f が以下の条件を全て満たす時, *Anosov* 可微分同相写像と呼ばれる.

1) $T_x\mathcal{M}^* = E_x^u \oplus E_x^s$ を満たすような部分空間 E_x^u, E_x^s が存在する,

2) $(D_xf)E_x^u = E_{f(x)}^u$, $(D_xf)E_x^s = E_{f(x)}^s$,

3)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} \in E_x^u \Longrightarrow \|(D_xf^n)\boldsymbol{\xi}\| &\geq K\left(\tfrac{1}{\lambda}\right)^n\|\boldsymbol{\xi}\|, \\ \boldsymbol{\xi} \in E_x^s \Longrightarrow \|(D_xf^n)\boldsymbol{\xi}\| &\leq K\lambda^n\|\boldsymbol{\xi}\|, \end{aligned} \tag{8}$$

$$\frac{|2\left(1-\frac{2\delta_N}{\pi}\right)-2\varepsilon(\Delta\tau)^2\left[\tan\left(\frac{\pi}{2}-\delta_N\right)-\tan\left(-\frac{\pi}{2}+\delta_N\right)\right]|}{\left(1-\frac{2\delta_N}{\pi}\right)}=N\in\mathbb{N}. \tag{4}$$

$$\begin{pmatrix} p_1(n+1) \\ p_2(n+1) \\ q_1(n+1) \\ q_2(n+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1(n)-\varepsilon\Delta\tau\tan\left[\pi\left\{q_1(n)+\frac{\Delta\tau}{2}p_1(n)-q_2(n)-\frac{\Delta\tau}{2}p_2(n)\right\}\right] \\ p_2(n)+\varepsilon\Delta\tau\tan\left[\pi\left\{q_1(n)+\frac{\Delta\tau}{2}p_1(n)-q_2(n)-\frac{\Delta\tau}{2}p_2(n)\right\}\right] \\ q_1(n)+p_1(n)\Delta\tau-\frac{\varepsilon(\Delta\tau)^2}{2}\tan\left[\pi\left\{q_1(n)+\frac{\Delta\tau}{2}p_1(n)-q_2(n)-\frac{\Delta\tau}{2}p_2(n)\right\}\right]\mathrm{mod}I_{\delta_N} \\ q_2(n)+p_2(n)\Delta\tau+\frac{\varepsilon(\Delta\tau)^2}{2}\tan\left[\pi\left\{q_1(n)+\frac{\Delta\tau}{2}p_1(n)-q_2(n)-\frac{\Delta\tau}{2}p_2(n)\right\}\right]\mathrm{mod}I_{\delta_N} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$\begin{pmatrix} p_1(n)-\varepsilon(\Delta\tau)\tan\left[\pi\left\{2q_1(n)+\Delta\tau p_1(n)-q_0-C\Delta\tau\left(n+\frac{1}{2}\right)\right\}\right] \\ q_1(n)+p_1(n)\Delta\tau-\frac{\varepsilon(\Delta\tau)^2}{2}\tan\left[\pi\left\{2q_1(n)+\Delta\tau p_1(n)-q_0-C\Delta\tau\left(n+\frac{1}{2}\right)\right\}\right]\mathrm{mod}I_{\delta_N} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

$$\begin{pmatrix} s_{n+1}, \\ t_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(t_n) \\ h(s_n,t_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_n \\ 2t_n-s_n+2\varepsilon(\Delta\tau)^2\tan(\pi t_n) \quad \mathrm{mod}\ I_{\delta_N} \end{pmatrix}. \tag{7}$$

表 1. Loschmidt と Zermelo の条件を満たすかの有無に関する系ごとの比較

	$T_{\varepsilon,\Delta\tau},\widehat{T}_{\varepsilon,\Delta\tau}$ (提案する写像)	standard map	tangent map[4]
可逆性	○	○	○
Loschmidt (運動量の符号を入れ替える意味での時間反転対称性)	○ (満たす)	× (満たさない)	×
Zermelo(測度保存性)	○	○	○

を満たすような, x で決まり, $\boldsymbol{\xi}$ と n では決まらないような $K>0$ と $0<\lambda<1$ が存在する.

定理 2 *[3]* 写像 $\widetilde{T}_{\varepsilon,\Delta\tau}$ は局所不安定条件

$$\varepsilon<0 \quad or \quad \frac{2}{\pi(\Delta\tau)^2}<\varepsilon, \tag{9}$$

を満たす時, *Anosov* 可微分同相写像となる.*[3]*

系 3 *[3]* 力学系 $(I^2_{\delta_N},\widetilde{T}_{\varepsilon,\Delta\tau},\mu)$ は局所不安定条件 $\varepsilon<0, \frac{2}{\pi(\Delta\tau)^2}<\varepsilon$ が成り立つ時, K 系であり, 混合性をもつ. μ は *Lebesgue* 測度を表す.

4 Anosov 性と密度関数の収束

力学系 $(\mathcal{M}^*,f,\mu)$ において, 写像 f が Anosov 可微分同相写像の時, 測度 0 の領域を除いて定義された初期密度関数は, 時間 $t\to\infty$ の極限で SRB 測度 μ に対応する分布 ρ^* に混合性の意味で収束する [5]. 定理 2 より力学系 $(I^2_{\delta_N},\widetilde{T}_{\varepsilon,\Delta\tau},\mu)$ において局所不安定条件 (9) を満たす時, 初期密度関数 $\rho(t=0)$ は時間 $t\to\infty$ の極限で一様分布に混合性の意味で収束する. これは, 時間反転対称性をもつ古典離散写像において, 力学系の性質のみによって, 時間の一方向性が現れることを示している.

参考文献

[1] Ya G. Sinai, *Russ. Math. Surv.* **27**, 21 (1972). D. Ruelle, *Am. J. Math.* **98**, 619 (1976). R. Bowen and D. Ruelle, *Inventiones Mathematicae* **29**, 181 (1975).

[2] Y. G. Sinai, *Russ. Math. Surv.* **25**, 137 (1970).

[3] K. Okubo and K. Umeno, Proof of Time's Arrow with Perfectly Chaotic Superdiffusion, arXiv 1703.10888, (2017).

[4] R. Venegeroles and A. Saa, *J. Stat. Mech. Theor. Exp.* **2008**, P01005 (2008).

[5] G. Gallavotti, *Nonequilibrium and Irreversibility*, Springer, 2014.

[6] J. Franks, *Trans. Amer. Math. Soc.* **145**, 117 (1969).

[7] R. Mañé, *Ergodic Theorey and Differentiable Dynamics*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1987).

HOMOCLINIC BIFURCATION IN PLANE COUETTE FLOW

Julius Rhoan T. Lustro[1], Yudai Shimizu[1,2], Genta Kawahara[1]
[1]Graduate School of Engineering Science, Osaka University, [2]Measurement Instrumentation and Digital Development Innovation Division, Toyota Motor Corporation
e-mail: juliusrhoanlustro@gmail.com

1 Introduction

The past two decades saw the extensive use of dynamical systems theory in fluid mechanics, especially in attempting to give theoretical explanation on the problem of transition to turbulence in wall-bounded shear flows. In this study, we investigate the bifurcation scenario in plane Couette flow with a slightly longer streamwise period than the minimal unit by Kawahara & Kida[1]. Here we show the presence of homoclinic bifurcation in this plane Couette flow, which is the earliest of such outcome for a system that is governed by the Navier-Stokes equation.

2 Flow configuration and numerical computation

We study plane Couette which is flow of Newtonian fluid between two parallel plates separated by a distance of $2h$ and moving at a constant speed U opposite each other. The Reynolds number is defined as $Re = Uh/\nu$, where ν is the kinematic viscosity of the fluid. Spatial periodicity is imposed on the flow in the x- & z- directions. The streamwise period is $L_x = 1.93\pi h$ and the spanwise period is $L_z = 1.2\pi h$. In this computational domain, the Nagata steady solution[2] exists together with a periodic solution[3]. We use a resolution of 16 x 33 x 16 number of grid points in the x-, y-, & z- directions, respectively. Dealiased Fourier expansions are employed on the x- & z-directions. Also, Chebyshev-polynomial expansion is used on the y-direction. We solve the incompressible Navier-Stokes equation using a spectral method similar to the one used by Kim, Moin, & Moser[4]. The periodic & steady solutions are obtained using Newton-GMRES iteration. We use edge tracking method[5] to search for a suitable initial condition to feed into the Newton-GMRES solver. The linear stability analysis is done by using Arnoldi iteration.

3 Bifurcation diagram

Fig. 1 displays the bifurcation diagram of the slightly longer plane Couette flow which shows the value of input energy I as a function of Re. The steady solution has a saddle-node bifurcation at $Re \approx 161.700$. The lower branch of the steady solution is unstable and has only one real unstable eigenvalue. On the other hand, the upper branch is initially stable but encounters a Hopf bifurcation at $Re \approx 163.400$.

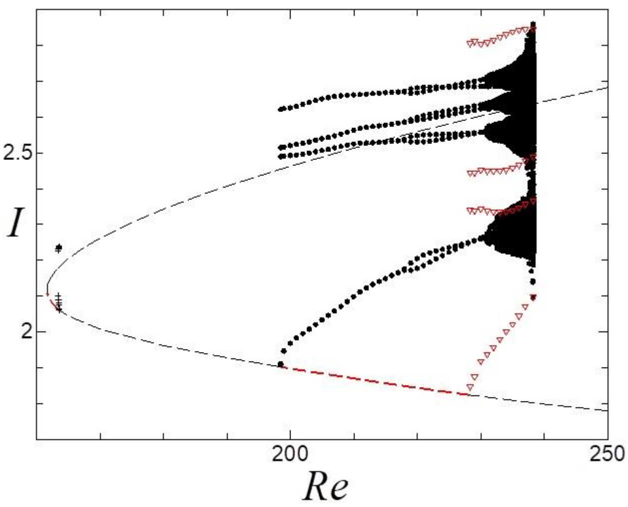


Figure1. Bifurcation Diagram

A periodic solution UPO1 (black cross) arises from this Hopf bifurcation, where it meets a homoclinic bifurcation HB1 at *Re* ≈ 163.582. HB1 is exhibited by the approach of the UPO1 to the lower branch of the steady solution. UPO1 disappears for *Re* above HB1.

Another homoclinic bifurcation HB2 occurs at *Re* ≈ 198.509 and a new periodic solution UPO2 (black dots) arises. HB2 is exhibited by the approach of the UPO2 to the lower branch of the steady solution. UPO2 starts as stable but encounters a period-doubling cascade that leads to a chaotic attractor. The chaotic attractor experiences a boundary crisis leading to transient turbulence at *Re* ≈ 238.260. The boundary crisis is exhibited by the contact of another periodic solution UPO3 (inverted red open triangle) and the chaotic attractor (see how the inverted red open triangles overlaps with the black dots at *Re* ≈ 238.260 in Fig. 1).

UPO3 appears from a homoclinic bifurcation HB3 at *Re* ≈ 228.302, which is exhibited by the approach of the UPO3 to the lower branch of the steady solution.

We observe an increase of the period of the UPOs that is due to the portion that extends as it approaches the lower-branch steady solution for *Re* very close to where the homoclinic bifurcation occurs. Looking into the flow structures on this extended part of the UPOs at *Re* very close to their respective homoclinic bifurcation shows remarkable similarity to the flow structures of the lower-branch steady solution at the same *Re*. Edge states [5] are shown in color red in Fig. 1. At higher *Re*, we see that the edge state change from steady solution to UPO3 (see the change of the red color from the dashed line to the inverted open triangles in Fig. 1). Note that the boundary crisis at *Re* ≈ 238.260 occurs at this periodic edge state UPO3.

4 Final Remarks

Similar bifurcation scenario of period-doubling cascade which leads to a chaotic attractor that encounters boundary crisis have been described as well in plane Coutte flow of different computational domain and resolution. The homoclinic bifurcation that is observed in this study is the first of such result to be reported in plane Couette flow, more importantly, in a system which is governed by the Navier-Stokes equation. The resolution used in this study, however, is small enough to be useful directly to fluid dynamicist to correlate with transition to turbulence. A reproduction of the results in a higher resolution and/or a search for a Silnikov-type homoclinic orbit to the fixed point steady solution is the logical next step. Nevertheless, the results presented here are meaningful for bifurcation study in Navier-Stokes systems.

Reference

[1] Kawahara G. & Kida S., Periodic motion embedded in plane Couette turbulence: regeneration cycle and burst. *J. Fluid Mech.* **449**, 291-300 (2001).

[2] Nagata M., Three-dimensional finite-amplitude solutions in plane Couette flow: bifurcation from infinity. *J. Fluid Mech.* **217**, 519-527 (1990).

[3] Jiménez J., Kawahara G., Simens M. P., Nagata M., & Shiba M., Characterization of near-wall turbulence in terms of equilibrium and 'bursting' solutions. *Phys. Fluids* **17**, 015105 (2005).

[4] Kim J., Moin P., & Moser R. D. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.* **117**, 133-166 (1987).

[5] Schneider T. M., Gibson J. F., Lagha M., De Lillo F., & Eckhardt B., Laminar-turbulent boundary in plane Couette flow. *Phys. Rev. E* **78**, 037301 (2008).

平板物体の3次元落下運動シミュレーション

宮尻 拓[1]，藤田 宜久[1]，仲田 晋[1]
[1] 立命館大学
e-mail: is0283ir@ritsumei.ac.jp

1 概要

映像制作において，紙や葉っぱのような平板の落下はしばしば視覚効果として取り入れられている．平板は不規則な軌跡を描きながら落下するため，意図した運動を撮影することは困難である．そこで，コンピュータグラフィックスにより平板の落下運動を再現する試みが行われている．空気のような流体中の運動はナビエ・ストークス方程式によって記述されるが，3 次元空間においては直接解くことは困難である．上記問題の解決策として，パターンの組み合わせ[1]や運動方程式を用いたモデル化[2]が行われている．パターンの組み合わせによる落下では，挙動が事前に準備したパターンに依存する．故に，様々な動きのパターンを用意しなければならないが，全てパターンを網羅することは困難であることが予想される．一方，運動方程式によるモデル化は，パラメータの選択により容易に理想的な運動を再現することができる．加えて，平板間の相互作用も比較的簡単に組み込むことが可能である．先行研究では 2 次元空間での再現にとどまっており，3 次元空間へ拡張させるためには運動方程式を改良させる必要がある．

本研究では3次元空間における平板落下運動を運動方程式によりモデル化する．映像制作では運動の厳密性が重視されないことを踏まえ，影響の少ない項の消去による簡略化を行い，映像制作における平板落下の新たな枠組みを提案する．

2 手法

平板の重心を原点に相対座標系を考える．2 次元空間における運動は重力，不安定モーメント，遠心力，揚力，空気抵抗の 5 つにより記述できる．揚力は重力や空気抵抗に比べて十分小さいため，映像制作を目的とする本研究の計算モデルには組み込まないこととする．平行移動の空気抵抗は 2 つの軸の迎え角を反映させた独自モデルとする．回転運動の空気抵抗は平板の表面の各質点の抗力を求め，平板領域で積分することで定義する．3 次元への拡張に当たり，以下の改良を行った．

- **遠心力** 3 次元への拡張に当たり，平板の奥行きも考慮する必要がある．そこで回転軸を増やす．x 軸方向の式を以下に示す．
  $$F_x^{cent} = m_y v_y \omega_z - m_z v_z \omega_y$$
  ここでF_x^{cent}は x 軸方向の遠心力，m は付加質量を考慮した平板の質量，v は速度，ω は角速度を表す．
- **歳差モーメント** 3 次元の場合は常にゼロとは限らないため，新たに導入する．x 軸回りの式を以下に示す．
  $$T_x^{gyro} = \left(I_y - I_z\right)\omega_y \omega_z$$
  ここで T_x^{gyro} は x 軸周りのトルク，I は付加慣性モーメントを考慮した慣性モーメントである．
- **空気抵抗** 3 次元への拡張に当たり，考慮する軸を増やす．
  x 軸方向の平行移動の空気抵抗の式を以下に示す．
  $$F_x^{drag} = \rho_f AW \cos 2\alpha \, D \cos 2\beta \, |\boldsymbol{v}| v_x$$
  ここで F_x^{drag} は x 軸方向の平行移動の空気抵抗，ρ_f は流体の密度，A はパラメータ，W, D は平板の長さ，α, β は迎え角，$\boldsymbol{v}$ は速度である．x軸の周りの回転運動の空気抵抗の式を以下に示す．
  $$T_x^{drag} = \rho_f MAX(W,H) D^3 C_d |\omega_x| \omega_x$$
  ここで T_x^{drag} は x 軸周りの回転運動の空気抵抗，H は平板の厚さ，C_d はパラメータである．

以上により，3 次元空間における任意の平板落下運動を再現することができる．また，平板の落下運動を制御するパラメータは平板の大きさ，速度，角速度，角度の 4 つである．

3 結果と考察

本研究において，解析領域は無限遠まで続く，1 気圧の流体中とする．また，領域内は無風とする．解析領域内に縦横 0.052 m で密度が上質紙と同じ 820 kg/m³ の平板を配置し，初速度と初角速度を 0 m/s で落下させる．このとき，平

板落下を代表する運動:折り返し，曲線，直線，ねじれ回転の４つを再現する．

まず，平板に平行な２つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0 rad, 1.4, 0.00004 とした場合の結果を図 1-(a)に示す．同図より折り返し運動が再現できたことがわかる．折り返し運動は，平板が 1 回転しない．平板が回転するときは正面を向けながら回転する．平行な軸周りの角度２つとも０ rad であると自由落下してしまう．そのため，平板に平行な軸周りの角度２つと，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0 rad, 1.4, 0.00004 のように設定する必要がある．

続いて，平板に平行な 2 つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，1.5 rad, 0 rad, 1.4, 0.00004 とした場合の結果を図 1-(b)に示す．同図より曲線運動が実現できたことがわかる．曲線運動は，平板の角速度が０ rad/s の時に，平板が鉛直方向に平行に近いときに起こる運動である．平行であると自由落下してしまうため，平行にしてはならない．平板の角度が鉛直方向に平行に近くするため，平板に平行な２つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，1.5 rad, 0 rad, 1.4, 0.00004 のように設定する必要がある．

続いて，平板に平行な 2 つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0 rad, 1.2, 0.00002, とした場合の結果を図 1-(c)に示す．同図より直線運動が実現できたことがわかる．直線運動は同じ方向に回転し続ける運動である．回転運動を持続させるため平板に平行な 2 つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0 rad, 1.2, 0.00002 のように設定する必要がある．

最後に，平板に平行な 2 つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0.35 rad, 1.4, 0.00004 とした場合の結果を図 1-(d)に示す．同図よりねじれ運動が実現できたことがわかる．ねじれ運動は２次元空間では行えない運動である．平板に平行な 2 つの軸周りの角度を 0 rad 以外にする必要があるため平板に平行な２つの軸周りの角度，平行移動の空気抵抗の係数，回転運動の空気抵抗の係数をそれぞれ，0.5 rad, 0.35 rad, 1.4, 0.00004 のように設定する必要がある．

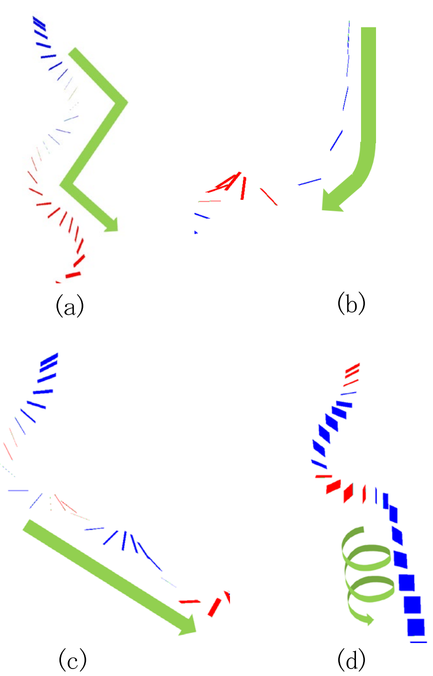


図 1. 平板の軌跡．(a)折り返し運動，(b)曲線運動，(c)直線運動，(d)ねじれ回転運動

平板の落下運動の計算は成功したといえる．現在は平板と他の物体との接触判定を行っていない．接触判定は今後の課題とする．

参考文献

[1] H. Xie and K. Miyata, Real-time Simulation of Lightweight Rigid Bodies, The Visual Computer, Vol.30, No.1 (2014) 81-92.

[2] A. Andersen, U. Pesavent and Z. Wang, Unsteady Aerodynamics of Fluttering and Tumbling Plates, Journal of Fluid Mechanics, Vol.541 (2005) 65-90.

漸化式動的グループ化による Block GWBiCGSTAB 法の収束性・近似解精度改善

多田野 寛人 [1]
[1] 筑波大学計算科学研究センター
e-mail : tadano@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式:

$$AX = B,\ A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ X, B \in \mathbb{C}^{n\times L} \tag{1}$$

は，素粒子物理学分野や疎行列に対する固有値問題の内部問題等で現れる．式 (1) に対する数値解法として，ブロッククリロフ部分空間反復法がある．同法は，反復回数，計算時間の観点でクリロフ部分空間反復法よりも効率良く (1) を求解できることが多い．しかしながら，近似解精度に関しては右辺ベクトル数の増加に伴い，精度劣化が発生することがある．

我々は，Block BiCGSTAB 法 [1] の近似解精度の改善を図った手法として Block GWBiCGSTAB 法 [2] を構築した．同法は s 反復分の近似解更新量をグループ化して，精度劣化の原因となる計算を回避することで精度向上を実現している．パラメータ s は同法の残差の収束性や近似解精度に影響を及ぼし，より良い s の設定は解く問題にも依存することから，統一的な指標を用いてグループ化することが望ましい．そこで本研究では，Block GWBiCGSTAB 法の漸化式を動的にグループ化する仕組みを構築し，近似解精度，収束性の観点からその性能を評価する．

2 Block GWBiCGSTAB 法

Block BiCGSTAB 法の第 $k+1$ 番目の近似解を $X_{k+1} \in \mathbb{C}^{n\times L}$，対応する残差を $R_{k+1} = B - AX_{k+1} \in \mathbb{C}^{n\times L}$ とする．これらは，以下の漸化式：

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= X_k + P_k\alpha_k + \zeta_k T_k, \\ R_{k+1} &= R_k - (AP_k)\alpha_k - \zeta_k(AT_k) \end{aligned} \tag{2}$$

で計算される．但し，$P_k, T_k \in \mathbb{C}^{n\times L}, \alpha_k \in \mathbb{C}^{L\times L}$, $\zeta_k \in \mathbb{C}$ である．真の残差 $B - AX_{k+1}$ と漸化式の残差 R_{k+1} の差 $E_{k+1} \equiv B - AX_{k+1} - R_{k+1}$ は,

$$E_{k+1} = \sum_{i=0}^{k} [(AP_i)\alpha_i + \zeta_i(AT_i)] - A\sum_{i=0}^{k}(P_i\alpha_i + \zeta_i T_i)$$

で与えられる．誤差行列 E_{k+1} は理論的には零行列であるが，数値的に $E_{k+1} \neq O$ となった場合は，$\|R_{k+1}\|$ が十分小さくなったとしても $\|B - AX_{k+1}\| \approx \|E_{k+1}\|$ となる．特に，$(AP_k)\alpha_k$ の計算で発生する誤差が E_{k+1} に大きな影響を与える．

そこで，複数反復分の漸化式更新量をグループ化することで，誤差が発生しやすい計算を回避することを考える．第 m 回目の外部反復での最初の反復番号を $\pi(m)$ とする．内部ループの反復回数を s に固定する場合，$\pi(m) = ms$ となる．反復番号 k は $k = \pi(m) + j$ と表される．漸化式 (2) の更新量をグループ化すると，

$$X_{\pi(m)+j+1} = X_{\pi(m)} + U^{(m)}_{\pi(m)+j+1}, \tag{3}$$

$$U^{(l)}_{\pi(l)+j} \equiv \sum_{i=\pi(l)}^{\pi(l)+j-1} (P_i\alpha_i + \zeta_i T_i)$$

となる．但し，$U^{(l)}_{\pi(l)} = O$ とする．対応する残差 $R_{\pi(m)+j+1}$ は以下の漸化式で計算する．

$$R_{\pi(m)+j+1} = R_{\pi(m)} - AU^{(m)}_{\pi(m)+j+1}. \tag{4}$$

この解法を Block GWBiCGSTAB 法 [2] と呼ぶ．行列 $U^{(m)}_{\pi(m)+j+1}$ に A を乗じることで，誤差の発生しやすい $(AP_k)\alpha_k$ の計算を回避できる．

誤差行列を $G_{\pi(m)+j+1} \equiv B - AX_{\pi(m)+j+1} - R_{\pi(m)+j+1}$ と定義する．$G_{\pi(m)+j+1}$ は，以下で表される．

$$\begin{aligned} G_{\pi(m)+j+1} = &\sum_{l=0}^{m-1} AU^{(l)}_{\pi(l+1)} + AU^{(m)}_{\pi(m)+j+1} \\ &- A\left(\sum_{l=0}^{m-1} U^{(l)}_{\pi(l+1)} + U^{(m)}_{\pi(m)+j+1}\right) \end{aligned}$$

s を限りなく大きくすると，$m = 0$ のまま内部ループのみが実行されるため，誤差行列は $G_{j+1} = AU^{(0)}_{j+1} - AU^{(0)}_{j+1} = O$ を満たす．

3 残差行列の正規直交化による安定化

右辺ベクトル数 L が多い場合，縦長行列を構成する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．収束性を改善する手法として，残差行列の正規直交化が有効であることが知られている．残差行

列を $R_k = R'_k \xi_k$ と thin QR 分解する．ここで，$R'_k \in \mathbb{C}^{n\times L}$ は ${R'_k}^{\mathrm{H}} R'_k = I$ を満たす列ユニタリ行列で，$\xi_k \in \mathbb{C}^{L\times L}$ は上三角行列である．これを用いると，式 (3), (4) は

$$X_{\pi(m)+j+1} = X_{\pi(m)} + V^{(m)}_{\pi(m)+j+1}\xi_{\pi(m)},$$
$$R'_{\pi(m)+j+1}\tau_{\pi(m)+j+1} = \mathtt{qr}\left(R'_{\pi(m)} - AV^{(m)}_{\pi(m)+j+1}\right)$$

となる．但し，$V^{(m)}_{\pi(m)+j+1} \equiv U^{(m)}_{\pi(m)+j+1}\xi^{-1}_{\pi(m)} \in \mathbb{C}^{n\times L}$, $\tau_{\pi(m)+j+1} \equiv \xi_{\pi(m)+j+1}\xi^{-1}_{\pi(m)} \in \mathbb{C}^{L\times L}$ であり，$\mathtt{qr}(\cdot)$ は縦長行列の thin QR 分解を表す．残差行列の正規直交化を組み込んだ手法を，Block GW-BiCGSTABrQ 法と呼ぶ．$\|R_k\|_{\mathrm{F}} = \|R'_k\xi_k\|_{\mathrm{F}} = \|\xi_k\|_{\mathrm{F}}$ を満たすため，収束判定には $\|\xi_k\|_{\mathrm{F}}$ を用いる．

4　漸化式の動的グループ化手法の構築

パラメータ s を大きくとると，真の相対残差 $\|B - AX_k\|_{\mathrm{F}}/\|B\|_{\mathrm{F}}$ は小さくなる傾向にある一方，反復回数は増加する傾向にある [2]．より良い s の設定は，解く問題によっても異なる．内部ループが長く続くと，その過程で行列 $R'_{\pi(m)} - AV^{(m)}_{\pi(m)+j+1}$ の条件数が増加し，残差の収束性の悪化を招く．また，thin QR 分解に Cholesky QR 法等を用いた場合は分解が失敗することがある．

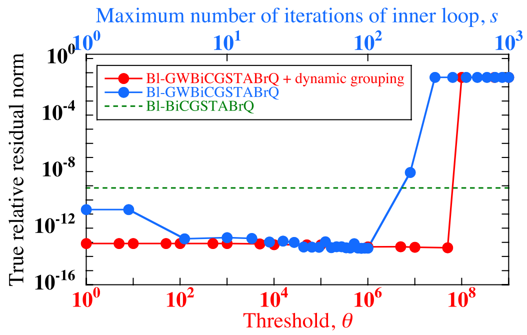
この状況を回避するために，行列 $\tau_{\pi(m)+j+1}$ の条件数を用いて動的グループ化を行うことを考える．ある閾値 $\theta \geq 1$ を設定し，$\tau_{\pi(m)+j+1}$ の条件数が θ 以上になったらグループ化を終了する．しかしながら，相対残差が大きくなったタイミングでグループ化を終了すると，近似解精度が悪化することがある．そのため，内部ループの相対残差 $\|\xi_{\pi(m)+j+1}\|_{\mathrm{F}}/\|\xi_{\pi(m)}\|_{\mathrm{F}}$ が 1 以下であることも終了条件とし，

$$\mathrm{cond}(\tau_{\pi(m)+j+1}) \geq \theta \text{ and } \frac{\|\xi_{\pi(m)+j+1}\|_{\mathrm{F}}}{\|\xi_{\pi(m)}\|_{\mathrm{F}}} \leq 1 \qquad (5)$$

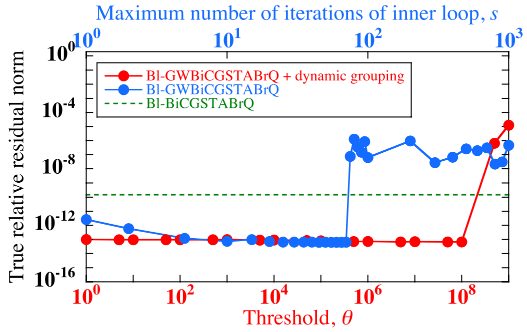
を満たした場合に漸化式のグループ化を終了する．右辺ベクトル数 L が 1 の場合は $\tau_{\pi(m)+j+1}$ の条件数は常に 1 であるため，θ を 1 より大きく設定すると条件 (5) が満たされずに内部ループが継続し，残差の収束性悪化を招くことがある．そのため，$L = 1$ の場合は $\theta = 1$ と設定する．

5　数値実験

数値実験により，提案手法の近似解精度を評価する．テスト行列として，SuiteSparse Matrix Collection の epb2 (n = 25,228, nnz = 175,027), 及び poission3Da (n = 13,514, nnz = 352,762) を用いた．初期解は $X_0 = O$，右辺項 B は乱数で与え，右辺ベクトル数は $L = 20$ とした．反復の停止条件は $\|R_k\|_{\mathrm{F}}/\|B\|_{\mathrm{F}} \leq 10^{-16}$ とし，thin QR 分解には Cholesky QR2 法を用いた．



(a) 行列 epb2 の結果.



(b) 行列 poisson3Da の結果.

図 1. 各解法における真の相対残差のパラメータ依存性.

図 1 に各解法における真の相対残差のパラメータ依存性を示す．漸化式の動的グループ化を行わない場合は，パラメータの設定によって真の相対残差にばらつきが見られるが，条件 (5) による動的グループ化を行うことで，真の相対残差のばらつきはなくなった．一方，両解法ともパラメータの値を大きくしていくと Cholesky QR2 法による thin QR 分解が失敗し，真の相対残差が大きい状態のまま計算が終了した．

参考文献

[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] H. Tadano and R. Kuramoto, Accuracy improvement of the Block BiCGSTAB method for linear systems with multiple right-hands by group-wise updating technique, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., **6** (2019), 100–117.

並列処理を前提とした
通信回避 Krylov 部分空間解法の収束特性と性能評価

松元 朗[1]，藤田 宜久[2]，伊東 拓[3]，阿部 邦美[4]，生野 壮一郎[1]
[1] 東京工科大学，[2] 立命館大学，[3] 日本大学，[4] 岐阜聖徳学園大学
e-mail：c0115306ab@edu.teu.ac.jp

1 序論

Krylov 部分空間法は主に行列ベクトル積と内積で構成されており並列化が容易である一方，各反復において内積を数回計算するため集団通信が頻発する．集団通信は並列化効率を低下させる要因であるため，通信回避アルゴリズムによって並列化効率を向上させる手法が研究されている．しかしながら，k-skip CG 法などの通信回避 Krylov 部分空間法では，収束性能が劣化する問題が知られている．[1]

近年，Rutishauser によって提案された交代漸化式を利用する最小化に基づく解法である，MrR 法という Krylov 部分空間法が提案された [2]．MrR 法は一部の問題に対して，収束性能と実行速度の点において CG 法よりも有効であると数値的に示された．

本研究の目的は，MrR 法の通信回避手法を提案し，k-Skip CG 法との比較を行い，収束特性と並列化効率の評価を行うことである．

2 k-skip MrR 法の導出

通常の MrR 法では 1 回の反復において，$(\boldsymbol{y}_{n+1}, \boldsymbol{y}_{n+1})$，$(\boldsymbol{y}_{n+1}, A\boldsymbol{r}_{n+1})$，$(\boldsymbol{r}_{n+1}, \boldsymbol{s}_{n+1})$，$(\boldsymbol{s}_{n+1}, \boldsymbol{s}_{n+1})$ の 4 つの内積を求める必要がある．(1)，(2)，(3) を代入し整理すると，前述の 4 つの内積は前の反復で求めた $(\boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{y}_n)$，$(\boldsymbol{y}_n, A\boldsymbol{r}_n)$，$(\boldsymbol{r}_n, A\boldsymbol{r}_n)$，$(\boldsymbol{r}_n, A^2\boldsymbol{r}_n)$ によって書き表わせる．

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \eta_n \boldsymbol{y}_n + \zeta_n A\boldsymbol{r}_n \tag{1}$$

$$\boldsymbol{r}_{n+1} = \boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{y}_{n+1} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{s}_{n+1} = A\boldsymbol{r}_{n+1} - \gamma_{n+1}\boldsymbol{y}_{n+1} \tag{3}$$

さらに $n+k$ 反復までの内積を n 反復の値によって求めるには，以下の係数が必要となる．

$$\alpha_{n,0} = (\boldsymbol{r}_n, \boldsymbol{r}_n), \cdots, \alpha_{n,2k+2} = (\boldsymbol{r}_n, A^{2k+2}\boldsymbol{r}_n)$$
$$\beta_{n,0} = 0, \cdots, \beta_{n,2k+1} = (\boldsymbol{y}_n, A^{2k+1}\boldsymbol{r}_n)$$
$$\delta_{n,0} = (\boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{y}_n), \cdots, \delta_{n,2k} = (\boldsymbol{y}_n, A^{2k}\boldsymbol{y}_n)$$

ここで $\beta_{n,0} = 0$ となるのは，MrR 法が $(\boldsymbol{r}_n, \boldsymbol{y}_n) = 0$ という直交性を満たすためである．また係数行列 A の対称性を利用すると，例えば $(\boldsymbol{r}_n, A^{2k+2}\boldsymbol{r}_n)$ は実際には $(A^{k+1}\boldsymbol{r}_n, A^{k+1}\boldsymbol{r}_n)$ によって計算可能であるため，事前に求めておくべき行列ベクトル積，すなわち Krylov 基底は半分でよい．以上によって得られた k-skip MrR 法のアルゴリズムを，Algorithm 1 に示す．

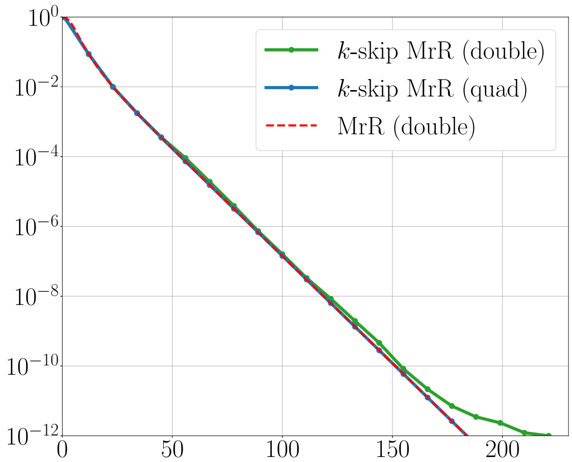


図 1. 通常の MrR 法と，$k=10$ における k-skip MrR 法の倍精度版と四倍精度版の残差履歴の比較

k-skip MrR 法は MrR 法の各ベクトルの更新式に基づいて内積を展開しているだけのため，数学的には MrR 法と等価である．しかしながら，アルゴリズムとしては大きく変化しており，計算機誤差の影響によって収束性能が変化する可能性がある．

3 数値実験

k-skip MrR 法の収束特性を調査する数値実験として，1000 元の連立 1 次方程式を解く．係数行列は対角要素が 2.005，副対角要素が-1 の三重対角行列であり，条件数は 670 となる．右辺ベクトルは全ての要素が 1 であり，収束判定子は 10^{-12} である．

通常の MrR 法と $k=10$ における k-skip MrR 法の倍精度版と四倍精度版の残差履歴の比較を，図 1 に示す．反復 50 回目前後から $k=10$ における k-skip MrR 法の倍精度版の残差履歴が，通常の MrR 法とは変化していることがわかる．それに対し四倍精度版は，通常の MrR

Algorithm 1 k-skip MrR method

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess.

Set $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0, \zeta_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0)}$,

$\boldsymbol{y}_1 = \zeta_0 A\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{z}_1 = -\zeta_0\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_1$

for $n = 1, 2, \cdots$, until $\|\boldsymbol{r}_n\|_2/\|\boldsymbol{b}\|_2 \le \varepsilon$ **do**

  calculate $A\boldsymbol{r}_n, A^2\boldsymbol{r}_n, \cdots, A^{k+1}\boldsymbol{r}_n$

  calculate $A\boldsymbol{y}_n, A^2\boldsymbol{y}_n, \cdots, A^k\boldsymbol{y}_n$

  $\alpha_{n,0} = (\boldsymbol{r}_n, \boldsymbol{r}_n), \cdots, \alpha_{n,2k+2} = (\boldsymbol{r}_n, A^{2k+2}\boldsymbol{r}_n)$

  $\beta_{n,0} = 0, \cdots, \beta_{n,2k+1} = (\boldsymbol{y}_n, A^{2k+1}\boldsymbol{r}_n)$

  $\delta_{n,0} = (\boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{y}_n), \cdots$

   $\delta_{n,2k} = (\boldsymbol{y}_n, A^{2k}\boldsymbol{y}_n)$

  for $i = n, n+1, \cdots, n+k$ **do**

   $\sigma_i = \alpha_{i,2}\,\delta_{i,0} - \beta_{i,1}^2$,

   $\zeta_i = \alpha_{i,1}\,\delta_{i,0}/\sigma, \eta_i = -\alpha_{i,1}\,\beta_{i,1}/\sigma_i$

   $\boldsymbol{y}_{i+1} = \eta_i\boldsymbol{y}_i + \zeta_i A\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{z}_{i+1} = \eta_i\boldsymbol{z}_i - \zeta_i\boldsymbol{r}_i$

   $\boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{y}_{i+1}$, $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{z}_{i+1}$

   for $j = 0, 1, \cdots, 2(k-i)$ **do**

    $\delta_{i+1,j} = \eta_i^2\,\delta_{i,j} + 2\eta_i\zeta_i\beta_{i,j+1}$

     $+\zeta_i^2\alpha_{i,j+2}$

    $\tau_j = \eta_i\beta_{i,j} + \zeta_i\alpha_{i,j+1}$

    $\beta_{i+1,j} = \tau_j - \delta_{i+1,j}$

    $\alpha_{i+1,j} = \alpha_{i,j} - \tau_j - \zeta_i\alpha_{i,j+1}$

   end for

  end for

end for

法と一致していることがわかる．これらのことから MrR 法の k-skip 化による収束性能の劣化は，計算機誤差が大きな原因といえる．

$k = 5, 10$ における，k-skip CG 法と k-skip MrR 法の残差履歴の比較を，図 2 に示す．$k = 5$ においては k-skip MrR 法の反復回数が 187 回であり，k-skip CG 法の反復回数が 204 回である．しかしながら，$k = 10$ においては反復 175 回目前後から k-skip MrR 法の収束性能が劣化しており，k-skip MrR 法の反復回数が 221 回となり，k-skip CG 法の反復回数が 209 回となっている．

4 結論

本稿では通信回避 Krylov 部分空間法として k-skip MrR 法を提案し，収束性能の評価を行なった．本稿の結論は，以下のようにまとめられる．

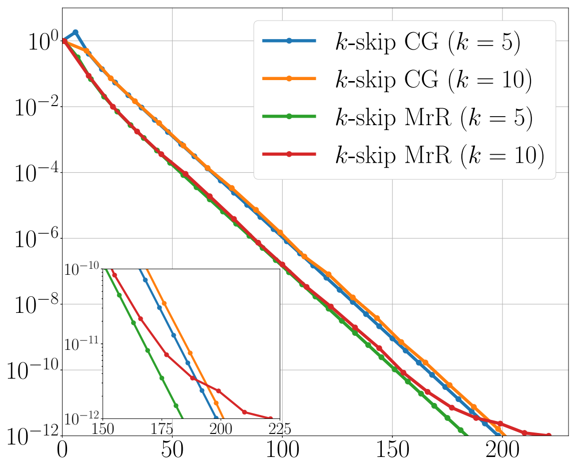


図 2. $k = 5, 10$ における，k-skip CG 法と k-skip MrR 法の残差履歴の比較

- k-skip MrR 法は MrR 法の内積を展開することによって得られ，数学的には MrR 法と等価である
- 計算機誤差の影響により，k-skip MrR 法の残差履歴が MrR 法と乖離することがある
- 本稿の問題においては，基本的に k-skip MrR 法の方が k-skip CG 法よりも収束が速かったが，k の増加に対しては k-skip CG 法の方が安定性を示した

口頭発表においては，直交性の積極的利用によるさらなる収束性能の向上方法，通信回避によるパフォーマンスの評価などについても述べる．

参考文献

[1] A. Matsumoto, Y. Fujita, T. Itoh, K. Abe, S. Ikuno, Improvement of Convergence Property of Communication Avoiding Conjugate Gradient Method for Linear System Obtained from Meshless Approaches, Special Issue on Recent Advances in Simulation in Science and Engineering, Vol.6 (2019), pp.43–55.

[2] K. Abe, S. Fujino, S. Ikuno, A Numerical Study for MrR Algorithm for Linear Equations with Symmetric Matrices, Special Issue on Recent Advances in Simulation in Science and Engineering, Vol.6 (2019), 128–140.

行列式の次数計算による重み付き線形マトロイド交差アルゴリズムについて

古江 弘樹, 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 : hiroki_furue@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 マトロイド交差問題

同じ集合に対して定義された 2 つのマトロイドに対して，要素数最大の共通独立集合を求める問題をマトロイド交差問題と呼ぶ．この問題は最大マッチング問題や有向木問題など，多くの組合せ最適化問題の一般化となっており，Edmonds[1] によって提案された，有向グラフの最短パスを利用したアルゴリズムが広く知られている．

また，上の問題に対して，さらに集合の要素それぞれに重みが与えられたとき，重みの和が最大になるような共通独立集合を求める問題を重み付きマトロイド交差問題と呼ぶ．重み付きマトロイド交差問題に関しては，Lawler(1975), Edmonds(1979) らによって多項式時間アルゴリズムが提案されているほか，Frank[2] によって提案された，各要素の重みを分割して考えるアルゴリズムが広く知られている．

本研究では，その中でも，重み付き線形マトロイド交差問題と呼ばれる，線形マトロイド（ベクトルの線形独立性によって構成されるマトロイド）における重み付きマトロイド交差問題について考える．

2 多項式行列の行列式の次数

変数付き行列 $A = A_0 + A_1x_1 + A_2x_2 + \cdots + A_mx_m$ のランクが効率的に計算できるかという問題を Edmonds 問題 (1967) といって，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．具体的には，2 部グラフ G の各枝 $e_k = ij$ に対して，A_k を (i, j) 要素が 1，それ以外の成分がゼロである行列，A_0 をゼロ行列とすると，A のランクは G の最大マッチング数に一致する．この問題は素朴にやると，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．乱択多項式時間アルゴリズムが Lovász(1979) によって与えられている一方で，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いない．しかしこの問題は，変数 x_i たちが互いに非可換であるとして A の斜体上のランクである非可換ランクについて考えると，Garg et al.(2015) は A_i が $\mathbf{Q}$ 上の行列であるとき，Ivanyos et al.(2017) は A_i が一般の体上の行列であるときについて，それぞれ非可換ランクが多項式時間で計算できることを示している．

上述の 2 部グラフ G において，各枝に重み c_k が与えられているときの，重みが最大の完全マッチングを求めたいときは，変数 t を用意して，変数付き行列の各項に t^{c_k} をかけたものの，行列式の t に関する次数を求めればよい．このように，変数付き行列 $A(t) = A_0(t)+A_1(t)x_1+\cdots + A_m(t)x_m$ の行列式の t に関する次数の計算は，重み付きの組合せ最適化の線形代数バージョンと言うことができる．この問題についてもランクのときと同様に，一般の問題に対する決定性多項式時間アルゴリズムは知られていないが，x_i たちが互いに非可換，t とは可換であるとして，斜体上の行列式概念である Dieudonné 行列式 $\mathrm{Det}\, A$ について考えると，擬多項式時間で $\deg \mathrm{Det}$ を求めるアルゴリズムが Hirai[3] によって提案されている．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 [4] の拡張（変種）となっている．

3 本研究の動機

いま，$\mathbb{Q}$ 上の n 次元ベクトル $a_1, \ldots, a_m$ と $b_1, \ldots, b_m$ を用意して，集合 $E := \{1, \ldots, m\}$ に対して a_i と b_i の線形独立性によってそれぞれ定まる線形マトロイドを考える．さらに，E のそれぞれの要素 i に対して，重み $c_i \in \mathbb{Z}$ が与えられている状況を考えると，要素数 n の共通独立集合のうちの重みの和の最大値は，多項式行列 $A(t) = \sum_{i=1}^{m} t^{c_i} x_i a_i b_i^{\top}$ の行列式の t に関する次数と等しくなることがわかっている．また，多項式行列 $A(t) = \sum_{i=1}^{m} t^{c_i} x_i a_i b_i^{\top}$ に対しては，本来の $\deg \det$ と，x_i たちが互いに非可換であるとして考えた $\mathrm{Det}\, A(t)$ についての $\deg \mathrm{Det}$ とが一致することが示されており，上で述べた Hirai による $\deg \mathrm{Det}$ を求めるアルゴ

リズム [3] によって，$\deg\det$ を求めることができる．

Hirai によるアルゴリズムでは，$\deg \mathrm{Det}\, A$ の値が，以下の最適化問題：

$$\begin{aligned}
\text{Min.} \quad & -\deg\det P - \deg\det Q \qquad (1)\\
\text{s.t.} \quad & \deg(PA_kQ)_{ij} \leq 0\\
& (0 \leq k \leq m, 1 \leq i, j \leq n),\\
& P, Q : \mathbb{Q}(t) \text{ 上の正則行列.}
\end{aligned}$$

の最適値に一致することを利用している．上の条件を満たす P, Q に対して，$PAQ = (PAQ)^0 + \mathrm{O}(t^{-1})$ と分解したとき，$(PAQ)^0$ にゼロブロックができるように P と Q を選ぶ．ゼロブロックが存在する行の集合を I，列の集合を J とおくと，要素数 n の共通独立集合が存在するならば，最適値が達成されていないとき，$|I| + |J| > n$ となるようにゼロブロックをとることができる．$P \leftarrow (t^{\kappa \mathbf{1}_I})P, Q \leftarrow Q(t^{-\kappa \mathbf{1}_{[n] \setminus J}})$ というように P, Q を更新すると，そのゼロブロックの部分のみで t の次数が上がり，P, Q が上の条件を満たしたまま，目的関数の値を増加させている．

本研究の動機は，この擬多項式時間アルゴリズムを，重み付き線形マトロイド交差問題に対応する行列 $A(t) = \sum_{i=1}^{m} t^{c_i} x_i a_i b_i^\top$ に対して改良することである．

4 本研究の成果

本研究では，Hirai[3] による $A(t) = A_0(t) + A_1(t)x_1 + \cdots + A_m(t)x_m$ の $\deg \mathrm{Det}$ を求めるアルゴリズムを改良することによって，行列 $A(t) = \sum_{i=1}^{m} t^{c_i} x_i a_i b_i^\top$ の行列式の t に関する次数を求める強多項式時間アルゴリズムを提案した．具体的には，Hirai によるアルゴリズムの $(PAQ)^0$ に注目すると，この行列は変数 t を含まない行列になっている．よって，この行列は，重みなしの線形マトロイド交差問題に対応しており，これに対して，重みなしのマトロイド交差問題に対するアルゴリズムである，Edmonds のマトロイド交差アルゴリズム [1] を利用することができる．Edmonds のアルゴリズムにおける補助グラフ G_X をもとに，条件を満たすようなゼロブロックを作るための P, Q を構成することができ，これにによって $\mathrm{O}(mn^3 \log n)$ 時間で $\deg\det$ を求めることが可能になった．

さらに，本論文では本アルゴリズムが Frank の重み付きマトロイド交差アルゴリズム [2] と対応関係を持つことも示している．具体的には，$(PAQ)^0$ に非ゼロ成分が存在するような x_i について，その x_i に対して P, Q によって左右からかかっている t の次数をそれぞれ α, β とすると，$-\alpha, -\beta$ が Frank のアルゴリズムにおける分割した重み c_1, c_2 に対応していると考えることができる．このように考えると，本アルゴリズムは重みの更新の方法を一部修正した Frank のアルゴリズムと，最短パスを求める際の自由度を除いて完全に一致することがわかった．さらには，Frank のアルゴリズムを線形マトロイドに対して適用したときと比較して，本アルゴリズムでは，行列での掃き出しを実行する回数が小さくなっていることがわかった．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17K00029 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] J. Edmonds, Matroid Intersection, in: Annals of Discrete Mathematics, Vol. 4, pp. 39–49, 1979.

[2] A. Frank, A Weighted Matroid Intersection Algorithm, Journal of Algorithms, Vol. 2 (1981), 328–336.

[3] H. Hirai, Computing the Degree of Determinants via Discrete Convex Optimization on Euclidean Buildings, SIAM Journal of Applied Geometry and Algebra, to appear.

[4] K. Murota, Matrices and Matroids for Systems Analysis, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

スパイダー上での r-gather クラスタリング問題に対する FPT アルゴリズムと NP 困難性

隈部 壮 [1,2], 前原 貴憲 [2]
[1] 東京大学，[2] 理研 AIP
e-mail : soh_kumabe@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1　概要

距離空間 $\mathcal{M}$ 上に与えられた利用者の集合の分割であって, どのクラスタも r 人以上の利用者を含むようなもののうち, クラスタの直径の最大値を最小にするものを求める問題を **r-gather クラスタリング問題**という．本研究では, $\mathcal{M}$ が**スパイダー**, すなわち端点を共有する d 本の半直線からなる場合に対し, d のみをパラメータとする FPT 時間のアルゴリズムを与え, NP 困難性の証明を行った:

定理 1 *スパイダー上の r-gather クラスタリング問題を $O(2^d d^4 r^5)$ 時間で解くアルゴリズムが存在する．ただし, d はスパイダーの脚の本数, n は利用者の人数である．*

定理 2 *r-gather クラスタリング問題はスパイダー上でも NP 困難である．*

以下これらの定理の証明の概略を示す．詳細は [1] を参照されたい．

2　FPT 時間アルゴリズム

スパイダーを構成する半直線の集合を $\mathcal{L} = \{l_1, \ldots l_d\}$ とし, 共有される端点を o とする．o をスパイダーの**中心**と呼び, 各 $l_1, \ldots l_d$ を**脚**と呼ぶ．脚 l 上の中心からの距離が x である点を (l, x) で表す．距離 $\texttt{dist}((l, x), (l', x'))$ を $l \neq l'$ のとき $x + x'$, $l = l'$ のとき $|x - x'|$ と定める．

利用者 u の座標を $(l(u), x(u))$ で表し, 利用者は中心からの距離の昇順に並べられているとする．利用者の集合を表すためにこの順序を用いることがある．例えば, 脚 l の最初/最後 k 人の利用者と言えば, $l(u) = l$ なる利用者のうちこの順序において最初/最後に並んでいるほうから k 人の利用者の集合を指す．l を用いて l 上の利用者の集合を表すこともある．一本の脚に属する利用者のみからなるクラスタを**単脚クラスタ**, 複数の脚に属する利用者からなるクラスタを **複脚クラスタ**とする．以下の補題が成り立つ．

補題 3 ([2]) *すべての脚に対し, 前から何人かの利用者はすべて複脚クラスタに含まれ, それ以降の利用者はすべて単脚クラスタに含まれる最適解が存在する．*

距離空間が直線の場合は線形時間の厳密アルゴリズムが知られている [3]．よって, 単脚クラスタと複脚クラスタの「切れ目」が定まれば, その「外側」に対しては最適な分割を簡単に得ることができる．実際, [2] では, 「切れ目」を全探索する方針で r, d の両方をパラメータとする FPT 時間アルゴリズムを得ている．以下, 複脚クラスタについて考察する．

複脚クラスタ C の最後の利用者を u, $C \setminus l(u)$ の最後の利用者を u' とする．u' およびそれ以前の利用者全体の集合を $B(u')$ とする．$C = l(u) \cup B(u')$ が成り立つとき, 複脚クラスタ C を**良い複脚クラスタ**と呼ぶことにする．以下の補題が成り立つ．

補題 4 ([2, 4]) *利用者を複脚クラスタのみに分割する最適解が存在するとする．このとき, $2r-1$ 人以下の利用者を含む良い複脚クラスタを含む最適解が存在する．*

補題 4 を繰り返し用いれば, 最適解のクラスタの族 $\{C_1, ..., C_k\}$ を, すべての i に対して C_i が $C_i, ..., C_k$ の利用者のみ考えたときに良い複脚クラスタとなるように取れる．

アルゴリズムは動的計画法に基づく．あらかじめ各脚に対して [3] のアルゴリズムを用いて単脚クラスタへの分割を求めておく．$\texttt{DP}[i][S][j][k]$ を「最初 i 人の利用者を見て, S に属さない脚の利用者はすべてクラスタに割り当て終わり, 現在のクラスタのサイズが j で, 現在のクラスタの最後の利用者が k である場合の直径最大のクラスタの直径の最小値」とする．$\texttt{DP}$ の更新式を記述することにより定理 1 を得る．

3　NP 困難性

定理 2 を示すため, 補助問題として, 以下の問題を導入する．

問題 1 非負整数対からなる n 個の集合 $S_i, \ldots, S_n$ および m 個の非負整数対 $(b_1, q_1), \ldots, (b_m, q_m)$ が与えられる; $S_i = \{(a_{i,1}, p_{i,1}), \ldots, (a_{i,|S_i|}, p_{i,|S_i|})\}$ とする. n 個の整数 $z_1, \ldots, z_n$ であって, すべての $j = 1, \ldots, m$ について $\sum_{a_{i,z_i} \leq b_j} p_{i,z_i} \leq q_j$ を満たすものが存在するかどうか判定せよ.

証明は以下の 2 つのステップからなる.

命題 5 問題 *1* が強 *NP* 困難であるとする. このとき, スパイダー上の *r-gather* クラスタリング問題は *NP* 困難である.

命題 6 問題 *1* は強 *NP* 困難である.

3.1 命題 5 の証明の概略

問題 1 のインスタンス $\mathcal{I}$ を, 判定版のスパイダー上の r-gather クラスタリング問題のインスタンス $\mathcal{I}'$ に変換する: r, L を十分大きな整数とする. 各集合 S_i に対し, r 人以上 $2r$ 人未満の利用者をもつ脚を 1 本用意する. 最後の利用者を中心から距離 L より遠くに置けば, その利用者を含むクラスタは単脚クラスタとなり, 残りの利用者は複脚クラスタに含まれる. 複脚クラスタが中心から距離 $L - a_{i,1}, \ldots, L - a_{i,|S_i|}$ までの利用者を含む場合が, それぞれ $z_i = 1, \ldots, |S_i|$ を選ぶ場合に対応する. $b_0 = q_0 = 0, b_0 < b_1 < \cdots < b_m$ とし, 各 $j = 1, \ldots m$ に対し, 中心からの距離 $b_{j-1} + 1$ の位置に利用者の 1 人だけ存在する $q_j - q_{j-1}$ 本の脚を用意すれば各制約を記述できる. 最後に, 余剰の利用者をクラスタに含めるため, 中心から距離 $L/2$ の位置に利用者の 1 人だけ存在する脚を r 本用意して構成が完了する.

3.2 命題 6 の証明の概略

NP 完全であることで知られている 1-IN-3SAT 問題のインスタンス $\mathcal{I}$ を, 問題 1 の出現するすべての整数が入力サイズの多項式で抑えられるようなインスタンス $\mathcal{I}'$ に変換する. 1-IN-3SAT 問題は以下に示す問題である.

問題 2 (1-IN-3 SAT 問題 [5]) 全ての節がちょうど 3 つのリテラルを含むような *CNF* 式が与えられる. どの節もその中のちょうど 1 つのリテラルが真になるような真偽値割当が存在するかどうか判定せよ.

十分大きな整数 K をとる. 各変数 x と $i = 1, \ldots, 2K$ に対し, $S_{x,i} = \{(a_{x,i,1}, p_{x,i,1}), (a_{x,i,2}, p_{x,i,2})\}$ の形で表される集合を用意する. x を真にすることが $i = 1, \ldots, K$ について $z_{x,i} = 1$ と選び, $j = K+1, \ldots, 2K$ について $z_{x,j} = 2$ と選ぶことと対応するようにする. $\mathcal{I}$ と $\mathcal{I}'$ の実行可能解を対応させるため, 各 $a_{x,i,k}, p_{x,i,k}, b_j, q_j$ の値を, $\mathcal{I}'$ の実行可能解において以下を満たすように決めなければならない.

- どの変数 x に対しても $z_{x,i} = 1$ $(i = 1, \ldots, K)$, $z_{x,j} = 2$ $(j = K+1, \ldots, 2K)$ もしくは $z_{x,i} = 2$ $(i = 1, \ldots, K)$, $z_{x,j} = 1$ $(j = K+1, \ldots, 2K)$ が成り立つ.
- どの節もちょうど 1 つの真のリテラルを含む.

十分大きい整数 B に対し $p_{x,i,1}, p_{x,i,2}, q_j$ の値を $e_4 B^4 + e_3 B^3 + e_2 B^2 + e_1 B + e_0$ の形で書き, 各係数を適切に設定することで, これらを満たすようにする. 具体的には, ある整数 D に対しすべての x, i に対し $a_{x,i,1} \leq D < a_{x,i,2}$ とし, 前者を $b_j \leq D$ に対する制約で, 後者を $b_j > D$ に対する制約で, それぞれ適切に記述する.

参考文献

[1] S. Kumabe and T. Maehara. r-gather clustering and r-gathering on spider: Fpt algorithms and hardness. *arXiv preprint arXiv:1907.04088*, 2019.

[2] S. Ahmed, S. Nakano, and M.Saidur Rahman. r-gatherings on a star. In *WALCOM'19*, pages 31–42, 2019.

[3] S. Anik, S. Wing-kin, and M. S. Rahman. A linear time algorithm for the r-gathering problem on the line. In *WALCOM'19*, pages 56–66, 2019.

[4] S. Nakano. A simple algorithm for r-gatherings on the line. In *WALCOM'18*, pages 1–7, 2018.

[5] T. J. Schaefer. The complexity of satisfiability problems. In *STOC'78*, pages 216–226, 1978.

無制約 XOS 関数最大化に対する最適近似アルゴリズム

河瀬 康志[1], 小林 佑輔[2], 山口 勇太郎[3,*]
[1] 東京工業大学，[2] 京都大学，[3] 大阪大学
e-mail：*yutaro_yamaguchi@ist.osaka-u.ac.jp

1　概要

いくつかの加法的な集合関数の最大値を取る形で表現できる集合関数は，XOS 関数と呼ばれ，劣モジュラ関数などを含むことが知られている．本稿では，関数値オラクルで与えられた XOS 関数を最大化する問題を考え，最適な近似比を達成する多項式時間アルゴリズムを提案する．本稿の内容は [1] に基づく．

2　問題と結果

V を有限集合とし，$f\colon 2^V \to \mathbb{R}$ を V 上の集合関数とする．f が**加法的**であるとは，$f(X) = \sum_{v\in X} f(\{v\})$ $(\forall X \subseteq V)$ が成り立つことをいい，f が *XOS* である[1]とは，いくつかの加法的な集合関数 $f_i\colon 2^V \to \mathbb{R}$ $(i \in [k] \coloneqq \{1, 2, \ldots, k\})$ が存在して，$f(X) = \max_{i\in[k]} f_i(X)$ $(\forall X \subseteq V)$ が成り立つことをいう．そのような f_i $(i \in [k])$ による表現を 1 つ固定したとき，k を**幅**と呼び，幅が k 以下の表現をもつ XOS 関数を *k-XOS* 関数と呼ぶ．特に，1-XOS 関数は加法的であり，逆も成り立つ．

本稿で扱う問題は以下のように定式化される．

<u>無制約 (k-)**XOS 関数最大化問題**</u>

要素数 n の集合 V が入力され，V 上の (k-)XOS 関数 $f\colon 2^V \to \mathbb{R}$ の関数値オラクルが利用可能[2]であるとき，$X^* \in \arg\max_{X\subseteq V} f(X)$ を求めよ．

これらの問題に対し，以下の意味で最適な近似比を達成する多項式時間アルゴリズムを提案する．ここで，$\alpha \geq 1$ に対し，$\tilde{X} \subseteq V$ が **α 近似解である**とは，$\alpha \cdot f(\tilde{X}) \geq \max_{X\subseteq V} f(X)$ が成り立つことをいい，任意のインスタンスに対して α 近似解を出力するアルゴリズムを **α 近似アルゴリズム**と呼ぶ．

定理 1. 任意の $\epsilon > 0$ に対し，無制約 XOS 関数最大化問題に対する $\mathrm{O}(n^{\lceil 1/\epsilon\rceil})$ 時間 ϵn 近似アルゴリズムが存在する．

[1]XOS は XOR-of-OR-of-Singletones の略．
[2]部分集合 $X \subseteq V$ を任意に指定すると，その関数値 $f(X)$ を知ることができるという設定．

定理 2. $\epsilon > 0$ を固定する．このとき，無制約 XOS 関数最大化問題に対する任意の $n^{1-\epsilon}$ 近似アルゴリズムは，n に関して指数回の関数値オラクル呼び出しを行う．

定理 3. 無制約 k-XOS 関数最大化問題に対する $\mathrm{O}(k^2 n)$ 時間 $(k-1)$ 近似アルゴリズムが存在する．さらに，アルゴリズムは k の値を知る必要は無く，特に，$k = 2$ の場合，線形時間厳密アルゴリズムとなる．

定理 4. $k \geq 3$, $\epsilon > 0$ を固定する．このとき，無制約 k-XOS 関数最大化問題に対する任意の $(k-1-\epsilon)$ 近似アルゴリズムは，n に関して指数回の関数値オラクル呼び出しを行う．

3　アルゴリズム

3.1　XOS 関数最大化の ϵn 近似

$\epsilon > 0$ を固定する．このとき，要素数が $\lceil 1/\epsilon\rceil$ 以下の部分集合の中で，f の関数値が最大のものを $\tilde{X}$ とし，これを出力するアルゴリズムを考える．候補の数は $\sum_{i=0}^{\min\{n,\lceil 1/\epsilon\rceil\}} \binom{n}{i} = \mathrm{O}(n^{\lceil 1/\epsilon\rceil})$ であり，これらを適切な順で列挙すれば，部分集合 1 つあたり定数時間で計算可能であるので，全体の計算時間は定理 1 の通りである．

また，$\tilde{X}$ が ϵn 近似解であることは以下のように確認できる．最適解 $X^* \subseteq V$ と，$f(X^*) = f_i(X^*)$ となる $i \in \arg\max_j f_j(X^*)$ をそれぞれ 1 つ固定する．このとき，$f_i(\{v\})$ $(v \in X^*)$ の降順で $\min\{|X^*|, \lceil 1/\epsilon\rceil\}$ 個の要素を集めた部分集合 $\hat{X} \subseteq X^*$ を作ると，$|X^*| \leq n$ より，

$$f(\tilde{X}) \geq f(\hat{X}) \geq f_i(\hat{X}) \geq \frac{1}{\epsilon n} f_i(X^*) = \frac{1}{\epsilon n} f(X^*)$$

が成り立つ．

3.2　k-XOS 関数最大化の $(k-1)$ 近似

各 $i \in [k]$ に対して，

$$V_i^* \coloneqq \{\, v \in V \mid f_i(\{v\}) = f(\{v\})\ (> 0)^3 \,\}$$

[3]$f(\{v\}) \leq 0$ であるような要素 $v \in V$ は，f の関数値に正の貢献をすることが無いため，存在しないとする．この仮定は線形時間で判定可能で，満たさない場合にも満たすように修正可能であるので，一般性を失わない．

を，派閥と呼ぶ．さらに，

$$Y_i^* \coloneqq V_i^* \cup \{\, v \in V \setminus V_i^* \mid f(V_i^* + v) > f(V_i^*) \,\}$$

を，拡大派閥と呼ぶ．

まず，$k = 2$ の場合には，次の補題が鍵となる．

補題 5. f が 2-XOS のとき，拡大派閥 Y_1^*, Y_2^* のいずれかが最適解である．

各派閥が求まれば，対応する拡大派閥は定義に従って線形時間で構成可能である．さらに，派閥は，単元集合 $X \coloneqq \{v\}$ から始めて，$f(X + u) = f(X) + f(\{u\})$ となる要素 $u \in V \setminus X$ を 1 つずつ貪欲に追加すれば構成できることが確認でき，全体の計算時間は $\mathrm{O}(n)$ となる．ここで，最初に構成した派閥が全体集合 V となる場合には V が最適解であることが確認でき，そうでなければ，その派閥に属さない要素の単元集合から始めれば，必ず異なる派閥が構成できることに注意されたい．

次に，$k \geq 3$ の場合には，派閥と拡大派閥に加え，以下の集合 Z_{ij}^v $(i, j \in [k],\ v \in V)$ も候補とすることで，$(k-1)$ 近似を達成できる：

$$Z_{i,j}^v \coloneqq V_i^* \cup V_j^* \cup \{v\}.$$

補題 6. f が k-XOS のとき，派閥 V_i^* $(i \in [k])$，拡大派閥 Y_i^* $(i \in [k])$，および，Z_{ij}^v $(i, j \in [k],$ $v \in V)$ のうち，少なくとも 1 つは $(k-1)$ 近似解である．

$k = 2$ の場合と同様に，構成済みの派閥に属さない要素の単元集合から始めて，異なる派閥を貪欲に構成することを繰り返す．異なる派閥は高々k 個なので，これは $\mathrm{O}(kn)$ 時間でできる．もし，k 個未満の派閥で全体集合 V が被覆できた場合には，そのいずれかが $(k-1)$ 近似解であることが確認でき，そうでなければ，補題 6 によって $(k-1)$ 近似解が $\mathrm{O}(k^2 n)$ 時間で求まる．

4 困難性

4.1 XOS 関数最大化の $n^{1-\epsilon}$ 近似困難性

$\epsilon > 0$ に対し，$\epsilon' \coloneqq \epsilon/2$ とする．簡単のため，$V = [n]$ とし，n は偶数であるとする．要素数 $n/2$ の部分集合 $S \subseteq V$ を任意に 1 つ固定し，加法的関数 f_i $(i \in [n+1])$ を以下のように定め，それらの最大値で $(n+1)$-XOS 関数 f を定める：

$$f_i(\{v\}) \coloneqq \begin{cases} n/2 & \text{if } v = i, \\ 0 & \text{if } v \neq i, \end{cases} \quad (\forall i \in [n]),$$

$$f_{n+1}(\{v\}) \coloneqq \begin{cases} n^{1-\epsilon'} & \text{if } v \in S, \\ -n^2 & \text{if } v \notin S. \end{cases}$$

このとき，最適解は S で，$f(S) = n^{2-\epsilon'}/2$ である．一方,「S の部分集合で要素数が $n^{\epsilon'}/2$ を超えるもの」以外の任意の非空部分集合 $X \subseteq V$ に対して，$f(X) = n/2$ が成り立つ．したがって，$n^{1-\epsilon}$ 近似を達成するためには,「」内の条件を満たす部分集合を少なくとも 1 つ見つける必要があり，これには指数回の関数値オラクル呼び出しを要する．

4.2 k-XOS 関数最大化の $(k-1-\epsilon)$ 近似困難性

$\tilde{n}$ を十分大きい整数，$\gamma > 0$ を十分小さい有理数とし，互いに素な要素数 $\tilde{n}^i$ の集合 V_i $(i \in [k-1])$ の和集合を V とする．要素数 $(1-\gamma)\tilde{n}^i$ の部分集合 $S_i \subseteq V_i$ をそれぞれ任意に 1 つ固定し，加法的関数 f_i $(i \in [k])$ を以下のように定め，それらの最大値で k-XOS 関数 f を定める：

$$f_i(\{v\}) \coloneqq \begin{cases} \tilde{n}^{k-i} & \text{if } v \in V_i, \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (\forall i \in [k-1]),$$

$$f_k(\{v\}) \coloneqq \begin{cases} (1-\gamma)\tilde{n}^{k-i} & \text{if } \exists i \in [k-1] \colon v \in S_i, \\ -\tilde{n}^{k+1} & \text{otherwise}. \end{cases}$$

このとき，最適解は $S = \bigcup_{i \in [k-1]} S_i$ で，$f(S) = (k-1)(1-\gamma)^2 \tilde{n}^k$ である．一方，$\tilde{n}^k$ を超える関数値を達成するには，ある i に関して「十分大きな S_i の部分集合」を見つける必要があり，これには指数回の関数値オラクル呼び出しを要する．

謝辞 本研究の一部は，JST ACT-I JPMJPR17U7, JPMJPR17UB，および，JSPS 科研費 JP15H05711, JP16H03118, JP16K16005, JP16K16010, JP18H05291 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] Y. Kawase, Y. Kobayashi, Y. Yamaguchi: Tight approximation for unconstrained XOS maximization. arXiv:1811.09045, 2018.

群ラベル制約付き最短路問題に対する強多項式時間アルゴリズム

山口 勇太郎 [1]
[1] 大阪大学
e-mail : yutaro_yamaguchi@ist.osaka-u.ac.jp

1 概要

群ラベル付きグラフにおける制約付き最短路問題に対し，制約に用いられる群に依らない強多項式時間アルゴリズムを提案する．提案アルゴリズムは，Dijkstra の最短路アルゴリズムと，Edmonds のマッチングアルゴリズムにおける花縮約技法という初等的な手法を応用して設計されており，この結果は,「無向グラフで最短奇数長パス（or 閉路）を効率的に計算できる」ことと,「曲面埋め込みグラフで最短非可縮閉路を効率的に計算できる」ことの背後にある組合せ的な扱いやすさを，共通の枠組みで捉えている．本稿の内容は [1] に基づく．

2 最短非零パス問題

Γ を群とし，乗法的記法を採用する．また，1_Γ でその単位元を表す．**Γ ラベル付きグラフ**とは，無向グラフ $G = (V, E)$ に，以下の性質を満たす**ラベル関数** $\psi_G \colon E \times V \to \Gamma$ が付帯したものである：$\psi_G(e, v) = \psi_G(e, u)^{-1}$ ($\forall e = \{u, v\} \in E$)．$G$ 中の**歩道**とは，頂点と枝の交互列 $W = (v_0, e_1, v_1, \ldots, e_k, v_k)$ であって，$e_i = \{v_{i-1}, v_i\} \in E$ ($\forall i \in [k]$) を満たすものである．全ての頂点が異なる歩道を**パス**（特に，v_0–v_k **パス**）と呼び，$v_0 = v_k$ であって，その他の頂点と枝がすべて異なる歩道を**閉路**と呼ぶ．

枝長 $\ell \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$ が定まっているとき，歩道 W の**長さ**を，$\ell(W) \coloneqq \sum_{i=1}^{k} \ell(e_i)$ で定義する．また，歩道 W の**ラベル**を次のように定義する：

$$\psi_G(W) \coloneqq \psi_G(e_1, v_1) \cdot \psi_G(e_2, v_2) \cdots \psi_G(e_k, v_k).$$

ラベルが 1_Γ に等しくない歩道を**非零**という．

本稿で扱う問題は以下のように定式化される．簡単のため，本稿では実行不能な場合については考えないものとする．

<u>最短非零パス問題</u>

入力: 連結な Γ ラベル付きグラフ $G = (V, E)$，枝長 $\ell \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$，端点 $s, t \in V$．

目標: $\psi_G(P) \neq 1_\Gamma$ を満たす G 中の s–t パス P で，$\ell(P)$ が最小のものを求める．

本稿では，この問題に対し，Γ に依らない強多項式時間アルゴリズムを提案する．以下では，グラフに関する基本的な操作と，枝長に関する四則演算と比較に加え，Γ に関して，群の演算，要素の同一性判定，逆元の取得を基本演算と見なす．また，入力グラフの頂点数と枝数をそれぞれ n と m で表す．

定理 1 最短非零パス問題を，$\mathrm{O}(nm)$ 回の基本演算で解く決定性アルゴリズムが存在する．

アルゴリズムの方針は以下の通りである．まず，前処理として，最短 s–t パス P を求める．もしそれが非零であれば，明らかに P は最短非零 s–t パスである．そうでなければ，最短非零 s–t パスを求める問題は，以下の問題に帰着されるので，この問題を $\mathrm{O}(nm)$ 時間で解く決定性アルゴリズムを設計する．

<u>最短不一致パス問題</u>

入力: 連結な Γ ラベル付きグラフ $G = (V, E)$，枝長 $\ell \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$，$G$ 中の最短 s–t パス P．

目標: $\psi_G(Q) \neq \psi_G(P)$ を満たす G 中の s–t パス Q で，$\ell(Q)$ が最小のものを求める．

3 正準非零閉路

最短不一致パス問題を解く上で鍵となる概念として，**正準非零閉路**を導入し，その性質を述べる．

まず，前処理として，最短 s–t パスを求める代わりに，**始点 s からの最短路木**を Dijkstra 法を用いて計算しているものとする．

定義 2 (最短路木) 始点 s からの**最短路木**とは，全域木 $T \subseteq E$，距離 $d \in \mathbb{R}^V_{\geq 0}$，ラベル $\alpha \in \Gamma^V$ の 3 つ組 (T, d, α) であって，各頂点 $v \in V$ に関して，T 中の唯一の s–v パス P_v が，G 中で最短であり，$\ell(P_v) = d(v)$ と $\psi_G(P_v) = \alpha(v)$ を満たすものをいう．

以下では，始点 s からの最短路木 (T, d, α) を任意に 1 つ固定する．枝 $e = \{u, v\} \in E \setminus T$ が $\psi_G(e, v) \neq \alpha(u)^{-1} \cdot \alpha(v)$ を満たすとき，T に対して**不一致**であるという．不一致な枝を T に

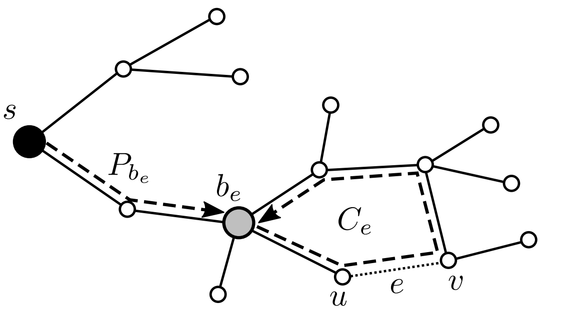


図 1. 不一致な枝 $e = \{u, v\} \in E \setminus T$ に対応する（正準）非零閉路 C_e とその基点 b_e.

加えたときにできる閉路は非零であり，そのような非零閉路のうち，始点 s からある意味で最も近いことを正準性として定義する．

定義 3 (正準非零閉路) T に対して不一致な枝 $e = \{u, v\} \in E \setminus T$ で，$d(u) + d(v) + \ell(e)$ の値を最小にするものを T に加えたときにできる閉路 C_e を，**正準非零閉路**と呼ぶ．また，C_e の中で s に最も近い頂点 b_e を，その**基点**と呼ぶ．（図 1 参照）

基点 b の正準非零閉路 C に対し，以下の 2 つの性質が成り立つ．ここで，s–w パス Q_w が T に対して**不一致**であるとは，$\psi_G(Q_w) \neq \alpha(w)$ を満たすことをいう．

補題 4 C 上の b 以外の任意の頂点 w に対し，T から C で迂回して得られる s–w パス Q_w は，最短不一致 s–w パスである．

補題 5 C を b に縮約する操作（図 2 参照）を適切に定めれば，縮約後のグラフにおける任意の最短不一致 s–w パスは，元のグラフの最短不一致 s–w パスに展開可能である．

4 アルゴリズム

前処理を Dijkstra 法に変更した後の最短不一致パス問題に対し，前節の内容に基づき以下のようにアルゴリズムを設計する．

$\underline{\mathrm{SIP}(G, \ell, s, t, T, d, \alpha)}$

入力: 連結な Γ ラベル付きグラフ $G = (V, E)$，枝長 $\ell \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$，端点 $s, t \in V$，始点 s からの最短路木 (T, d, α).

出力: T に対する G 中の最短不一致 s–t パス．

Step 1. $d(u) + d(v) + \ell(e)$ の値を最小にする不一致な枝 $e = \{u, v\} \in E \setminus T$ を選び，対応する正準非零閉路を C，その基点を b とする．（定義 3 参照）

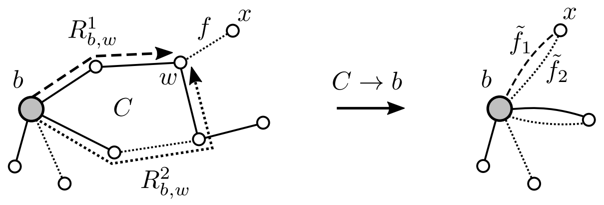


図 2. 正準非零閉路 C の基点 b への縮約．各枝 $f = \{w, x\} \in E$ に対し，2 種類の b–x パス $R^1_{b,w} * f$, $R^2_{b,w} * f$ に関する情報（ラベルと長さ）を，2 本の枝 $\tilde{f}_1, \tilde{f}_2$ としてそれぞれ保持する．

Step 2. t が C 上の b 以外の頂点であれば，$T \cup \{e\}$ 中で e を通る唯一の s–t パス Q_t を出力して終了する．（補題 4 参照）

Step 3. そうでなければ，C を b に縮約して小さいインスタンス $(\tilde{G}, \tilde{\ell}, s, t, \tilde{T}, \tilde{d}, \tilde{\alpha})$ を作り，再帰的に $\mathrm{SIP}(\tilde{G}, \tilde{\ell}, s, t, \tilde{T}, \tilde{d}, \tilde{\alpha})$ で最短不一致パス問題を解き，得られた $\tilde{G}$ 中の s–t パスを G 中の s–t パスに展開して出力する．（補題 5 参照）

正当性は，3 節の定義と補題から直ちに従う．

計算時間に関しては，以下のように確認できる．縮約が起こると，頂点が必ず 1 つ以上減るため，再帰は（最初も含め）高々 $(n-1)$ 回しか起こらない．再帰以外の部分は，縮約操作を各枝につき定数時間でできることを確認し，全体で $\mathrm{O}(m)$ 時間と見積もることができる．したがって，総計算時間は $\mathrm{O}(nm)$ となる．

ここで，縮約によって多重枝が大量に発生し，再帰の途中で枝数が増えすぎてしまう可能性を考慮する必要があるが，今回の問題に対しては，各頂点対に関して 3 本以上の多重枝がある状況は冗長であることが，以下のように観察できる．もし同じラベルの多重枝があれば，その中で最も短い 1 本を残しておけば十分である．また，異なるラベルの多重枝が 3 本以上ある場合，短い方から 2 本を残しておけば，最短パスと最短不一致パスを考える上では十分である．したがって，縮約の際に，冗長な枝が生成されたら取り除くという簡約操作を適宜行うことで，再帰中に現れるグラフの枝数が元の枝数の 2 倍を超えないことが保証できる．

参考文献

[1] Y. Yamaguchi: A strongly polynomial algorithm for finding a shortest non-zero path in group-labeled graphs. arXiv:1906.04062, 2019.

Barron 評価を達成するニューラルネットの構成法

園田 翔 [1]
[1] 理化学研究所・革新知能統合研究センター（理研 AIP）
e-mail : sho.sonoda@riken.jp

1 概要

積分表現されたニューラルネット $S[\mu](x) = \int_{\mathcal{A}} \varphi(x;a)\mathrm{d}\mu(a), (x \in \mathcal{X})$ に対し，L^2 近似誤差を $C_\varphi \|\mu\|_{TV}/\sqrt{p}$ で押さえるような有限ニューラルネット $S[\mu_p](x) = \sum_{j=1}^{p} w_j \varphi(x;a_j), (x \in \mathcal{X})$ が存在する。ここで $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^m$ はデータ空間，$\mathcal{A} \subset \mathbb{R}\ d$ はパラメータ空間，$\varphi : \mathcal{A} \to (\mathcal{X} \to \mathbb{C})$ は特徴量写像，μ はパラメータの分布を表す $\mathcal{A}$ 上の Borel 測度であり，C_φ は φ に依存して決まる定数，μ_p は Dirac 測度の単結合 $\mu_p := \sum_{j=1}^{p} w_j \delta_{a_j} (w_j \in \mathbb{C}, a_j \in \mathcal{A})$ で定義される特異測度である。この近似誤差評価を Barron 評価といい，まず Maurey-Jones-Barron [1, 2, 3] がシグモイド関数を用いた標準的なニューラルネットに対して 示し，続いて Kurkova [4] が φ が一般の非線形写像の場合に対してこれを示した。ただし，特徴量写像 $a \mapsto \varphi(\cdot;a)$ の非線形性により，μ_p を具体的に構成する方法は難しい問題とされてきた。例えば，Bengio et al. [5] は p に対して逐次的に μ_p を構成するアルゴリズムを提案したが，レートを達成する保証は与えていない。Bach [6, 7] はランダム特徴量展開を用いる方法を用いて汎化誤差を評価したが，レートを達成するために必要な最適分布の実現は困難であると結論付けている。Nitanda & Suzuki [8] や Chizat & Bach [9] は p を固定したうえで関数空間上で a_j を最適化する方法を提案した。本研究では，μ および μ_p を再生核 Hilbert 空間（RKHS）に埋め込み，凸最適化を用いて逐次近似を行うことで，μ_p を構成する方法を提案する。再生核としてユニタリ・カーネルと呼ばれるクラスのカーネルを取ることにより，提案アルゴリズムが Barron 評価を達成することを示す。また，サンプルサイズ n が有限の場合の汎化誤差評価も与えた。本研究の詳細は [10] を参照せよ。

2 パラメータ分布のユニタリ・カーネル求積

パラメータ空間 $\mathcal{A}$ 上の複素数値 Borel 測度の全体を $\mathcal{M}$ と書く。$\mathcal{A}$ 上の再生核 K をひとつ固定し，対応する RKHS を $\mathcal{H}_K$ と書く。パラメータ分布 $\mu \in \mathcal{M}$ の K によるカーネル埋め込み（kernel mean embedding; KME）とは，積分 $K[\mu](a) := \int_{\mathcal{A}} K(a,a')\mathrm{d}\mu(a'), (a \in \mathcal{A})$ によって定義される関数 $K[\mu]$ で，$\mathcal{H}_K$ の元になるものをいう。K による KME $\mathcal{M} \to \mathcal{H}_K$ の定義域を $\mathcal{M}_K$ と書く。

任意の $\mu, \nu \in \mathcal{M}_K$ に対する maximum mean discrepancy (MMD) を $\mathrm{MMD}(\mu,\nu) := \|K[\mu] - K[\nu]\|_K$ と定義する。作り方から明らかに，KME が単射であれば MMD は $\mathcal{M}_K$ 上の距離を定める。また，次の等長関係 $\|K[\mu]\|_K = \|S[\mu]\|_{L^2(\mathbb{P})}, (\mu \in \mathcal{M}_K)$ を満たすとき，カーネル K はユニタリであるという。例えば，$U(a,a') := \int_{\mathcal{X}} \varphi(x;a)\overline{\varphi(x;a')}\mathrm{d}\mathbb{P}(x)$ とおくと，これはユニタリ・カーネルである。

$\mu \in \mathcal{M}_K$ のカーネル求積（kernel quadrature; KQ）とは，$\mathrm{MMD}(\mu,\mu_p)$ を p に関して逐次的に最小化することによって，$O(1/\sqrt{p})$ またはそれよりも早い収束レートで近似元 μ_p を構成する方法である。厳密には，簡単のため $\|\mu\|_{TV} = 1$ と仮定して，$\{zK(\cdot,a) \mid |z| \le 1, a \in \mathcal{A}\}$ を含む最小の凸集合を $\mathcal{K}$ とおき，$\mathcal{K}$ 上で条件付き勾配法（conditional gradient; CG, Frank-Wolfe 法）を実行することで，遅くとも $\mathrm{MMD}(\mu,\mu_p) \le C_\varphi/\sqrt{p}$ を達成できる。

KQ にユニタリ・カーネルを用いると，$\mathrm{MMD}(\mu,\mu_p) = \|S[\mu] - S[\mu_p]\|_{L^2(\mathbb{P})}$ なので，KQ は Barron レートを達成することが期待される。実際，ユニタリ・カーネルとして前述の U をとると，MMD は訓練データ $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^{n} \subset \mathcal{X} \times \mathbb{C}$ から容易に推定できるようになり，KQ は計算機で実行可能なアルゴリズムになる。一連の手続きを実行するうえで，μ を直接計算する必要はないことも，提案アルゴリズムの強みである。

謝辞 本研究は早稲田大学の村田昇教授，同修士課程の松原拓夫氏，東京大学・理研 AIP の鈴木大慈准教授および二反田篤史助教との議論を経て，現在の形に収束しました。皆様の建設的なご意見に感謝致します。

参考文献

[1] G. Pisier. Remarques sur un résultat non publié de B. Maurey. *Séminaire d'Analyse Fonctionnelle 1980-1981*, I(12):1–12, 1981.

[2] L K Jones. A simple lemma on greedy approximation in Hilbert space and convergence rates for projection pursuit regression and neural network training. *The Annals of Statistics*, 20(1):608–613, 1992.

[3] Andrew R Barron. Universal approximation bounds for superpositions of a sigmoidal function. *IEEE Transactions on Information Theory*, 39(3):930–945, 1993.

[4] Věra Kůrková. Complexity estimates based on integral transforms induced by computational units. *Neural Networks*, 33:160–167, 2012.

[5] Yoshua Bengio, Nicolas Le Roux, Pascal Vincent, Olivier Delalleau, and Patrice Marcotte. Convex neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems 18*, pages 123–130, Vancouver, BC, 2006. MIT Press.

[6] Francis Bach. On the Equivalence between Kernel Quadrature Rules and Random Feature Expansions. *Journal of Machine Learning Research*, 18(21):1–38, 2017.

[7] Francis Bach. Breaking the Curse of Dimensionality with Convex Neural Networks. *Journal of Machine Learning Research*, 18(19):1–53, 2017.

[8] Atsushi Nitanda and Taiji Suzuki. Stochastic Particle Gradient Descent for Infinite Ensembles. dec 2017.

[9] Lenaic Chizat and Francis Bach. On the Global Convergence of Gradient Descent for Over-parameterized Models using Optimal Transport. In *Advances in Neural Information Processing Systems 32*, pages 3036–3046, Montreal, BC, 2018. Curran Associates, Inc.

[10] Sho Sonoda. Numerical Integration Method for Training Neural Network. feb 2019.

識別問題に対する高次元ニューラルネットの勾配降下法の大域収束性と汎化性能解析

二反田 篤史 [1,2], 鈴木 大慈 [1,2]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科，[2] 理化学研究所 革新知能統合研究センター
e-mail : {nitanda, taiji}@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

深層学習モデルを含む高次元ニューラルネットは多大な成功を収めているが，その成功の理論的裏付けを得る為には次の二つの問題を解決する必要がある : (I) 非凸最適化問題に対する最適化手法の大域収束性，(II) データが完全フィット可能な状況下での汎化誤差保証．これらは機械学習コミュニティにおける重要な問題であるが，Neural Tangent Kernel (NTK) と呼ばれるニューラルネット由来のカーネルの解析を通して部分的に解決され始めている．回帰問題を対象とする既存研究では NTK の正定値性が大域収束性の為の重要な役割を担うが，識別問題では NTK によるデータの識別可能性がより本質的な仮定である事を本研究で示す．更にこの仮定の下で，既存研究の結果に比べ極めて現実的なサイズの二層ニューラルネットに対して勾配降下法の大域収束性と汎化誤差評価を与える．

2 序文

近年，深層ニューラルネットが様々な分野で成功を収めているが，その優れた性能を理論的に裏付ける為には次の二つの問題を解決する必要がある．(I) 非凸最適化問題であるニューラルネット学習に対する最適化手法の大域収束性，(II) 高次元ニューラルネットが訓練データに完全にフィット可能な条件下での汎化誤差保証．

高次元二層ニューラルネットに対しては勾配降下法の大域収束性は部分的に解決され始めている．証明の鍵はいずれも高次元性が重要であるが，モデルの出力スケールに応じて Wasserstein 勾配流 [1, 2, 3] に基づくものと Neural Tangent Kernel (NTK) [4, 5] と呼ばれるニューラルネット由来のカーネル理論に基づくものに大別される．本研究は特に後者の NTK を用いた理論に注目する．NTK はニューラルネットに対する勾配法に関数空間（NTK が定める再生核ヒルベルト空間）での勾配法としての再解釈を与え，大域収束性の議論を可能にする有用な概念である．事実，[5] ではこの性質とニューラルネットの高次元性による NTK の正定値性を利用し，勾配降下法の大域収束性を示した．更に，この結果は [6] によ精緻化され，勾配降下法の汎化性能保証も与えられた．これらの研究は高次元ニューラルネットにおける問題 (I), (II) に対して重要な貢献をしたが，非現実的な高次元性（超高次元ニューラルネット）を仮定していた．

そこで，本研究では識別問題ではその問題特性から NTK 理論がより小さい現実的なサイズの二層ニューラルネットに適用可能である事を示す．具体的には，NTK の正定値性ではなく，NTK の陽的表現 (NTF) でデータがマージン付で完全識別可能である事が大域収束性を示す為に十分である事を示した．この仮定は識別問題では NTK の正定値性よりも自然であり，その結果，現実的なサイズのニューラルネットに対して大域収束性と汎化誤差保証が与えられる．即ち，本研究は既存研究に比べてより広い範囲の二層ニューラルネットの勾配降下法に対し理論保証を与えるものである．

3 主結果

特徴空間と二値ラベルの集合をそれぞれ $\mathcal{X}=\mathbb{R}^d$，$\mathcal{Y}=\{-1,1\}$ で定める．ν を $\mathcal{X}\times\mathcal{Y}$ 上の真の確率測度，$(x_i,y_i)_{i=1}^n$ を ν^n に従うサンプルとする．ロジスティック損失を $l(\zeta,y)=\log(1+\exp(-y\zeta))$ $(\zeta\in\mathbb{R},\ y\in\mathcal{Y})$ で定める．この時，本研究が対象とする経験損失最小化問題は

$$\mathcal{L}(\Theta)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l(f_\Theta(x_i),y_i).$$

となる．$f_\Theta:\mathcal{X}\to\mathbb{R}$ は次で定義される二層ニューラルネットである: パラメータ $\Theta=(\theta_r)_{r=1}^m$ $(\theta_r\in\mathbb{R}^d)$ と定数 $(a_r)_{r=1}^m\in\{-1,1\}^m$ に対し

$$f_\Theta(x)=\frac{1}{m^\beta}\sum_{r=1}^{m} a_r\sigma(\theta_r^\top x).$$

ここで，m は中間ノード数，$\beta\in[0,1)$ はスケーリングの次数, $\sigma:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ は滑らかな活性

化関数である．ニューラルネットの訓練では，$(a_r)_{r=1}^m \in \{-1,1\}^m$ は定数とし $\Theta = (\theta_r)_{r=1}^m$ のみ最適化し，θ_r は確率測度 μ_0 に従い初期化する．

NTF は $\partial_\theta \sigma(\theta^{(0)\top}\cdot)$ が定める無限次元空間への非線形特徴抽出写像であり，$\mathrm{supp}(\nu)$ 上のデータは NTF を通してマージン付きで完全識別可能とする: $\exists v : \mathbb{R}^d \to \{w \in \mathbb{R}^d \mid \|w\|_2 \leq 1\}$, $\forall (x,y) \in \mathrm{supp}(\nu)$,

$$\mathbb{E}_{\theta^{(0)} \sim \mu_0}[y \partial_\theta \sigma(\theta^{(0)\top} x)^\top v(\theta^{(0)})] \geq \rho.$$

定理 1 は上記仮定及び活性化関数や初期化についての種々の仮定の下，勾配降下法：

$$\Theta^{(t+1)} \leftarrow \Theta^{(t)} - \eta \nabla_\Theta \mathcal{L}(\Theta^{(t)})$$

の大域収束性及び汎化誤差保証を与える．

定理 1 (略式)**.** 任意の $\epsilon > 0$ に対し，ハイパーパラメータ *(*m*:* 中間ノード数，n*:* 訓練データ数，η*:* 勾配降下法の学習率*)* を次のように設定する：$m = \Omega(\epsilon^{-1})$, $\eta = \Theta(m^{-1})$, $n = \tilde{\Omega}(\epsilon^{-4})$. この時，高確率で期待 ϵ-識別誤差を達成するパラメータが勾配降下法の $T = \Theta(\epsilon^{-2})$-反復以内で得られる．

既存研究，例えば設定が最も近い [7] でも中間ノード数 $m = \tilde{\Omega}(\epsilon^{-14})$ を必要した事に比べ本結果は中間ノード数を $\Omega(\epsilon^{-1})$ にまで大幅に削減している．これは現実的なサイズの二層ニューラルネットに対して大域収束性・汎化誤差保証を与える重要な結果である．

参考文献

[1] Atsushi Nitanda and Taiji Suzuki. Stochastic particle gradient descent for infinite ensembles. *arXiv preprint arXiv:1712.05438*, 2017.

[2] Lenaic Chizat and Francis Bach. On the global convergence of gradient descent for over-parameterized models using optimal transport. In *Advances in Neural Information Processing Systems 31*, pages 3040–3050, 2018.

[3] Song Mei, Andrea Montanari, and Phan-Minh Nguyen. A mean field view of the landscape of two-layer neural networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(33):E7665–E7671, 2018.

[4] Arthur Jacot, Franck Gabriel, and Clément Hongler. Neural tangent kernel: Convergence and generalization in neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems 31*, pages 8580–8589, 2018.

[5] Simon S Du, Xiyu Zhai, Barnabas Poczos, and Aarti Singh. Gradient descent provably optimizes over-parameterized neural networks. *International Conference on Learning Representations 7*, 2019.

[6] Sanjeev Arora, Simon S Du, Wei Hu, Zhiyuan Li, and Ruosong Wang. Fine-grained analysis of optimization and generalization for overparameterized two-layer neural networks. In *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning-Volume 97*, pages 322–332, 2019.

[7] Yuan Cao and Quanquan Gu. A generalization theory of gradient descent for learning over-parameterized deep relu networks. *arXiv preprint arXiv:1902.01384*, 2019.

機械学習を利用した結晶界面構造決定と物性の予測

溝口 照康[1]，清原 慎[1]，大谷 龍剣[1]
[1] 東京大学生産技術研究所
e-mail：teru@iis.u-tokyo.ac.jp

1　概要

実用に供されている材料の中には，点欠陥や粒界，表面などの様々な格子欠陥が存在する．それらはバルクとは異なる元素や原子配列を伴うために，機械的・機能的物性に多大な影響を与えることが知られている．また，薄膜法を用いて作成される人工超格子のヘテロ界面では，二次元電子ガスの形成など特異的な物性の発現も報告されている．これら様々な格子欠陥における機能発現を理解するためには，格子欠陥の原子構造を明らかにし，その構造と特異的な物性との相関性を明らかにする必要がある．一方で,格子欠陥が0次元(点欠陥),1次元(転位),2次元(表面,界面)の構造を有しており，その構造を決定するためには結晶内部とは異なる固有の自由度を考慮する必要がある．その自由度を網羅するような構造に対してすべて計算することは一般的に困難である．

また，放射光や電子顕微鏡を用いた計測においても，近年測定されるデータ（スペクトル）数が膨大となり，専門の研究者が専門知識をもってスペクトルを解釈する「研究者駆動型のスペクトル解釈」が困難な状況になりつつある．

そのような中，米国発のマテリアルズインフォマティクスに関する研究成果が注目をあつめている．そのような様々な背景をふまえ，本発表では機械学習の手法を利用した効率的な結晶界面の構造決定と，界面における構造機能相関，さらに機械学習をもちいたスペクトルの解釈に関する研究を報告する．

2　機械学習を利用した界面構造決定

各欠陥は構造の自由度を持ち，同じ物質内の同じ種類の欠陥であったとしても，その原子構造は多様である．例えば，結晶界面においては，同相界面（粒界）やヘテロ界面においても9個の自由度が存在している．二つの結晶の相対方位関係を決める巨視的な自由度が5個と，相対的な剛体変位や粒界面に関する微視的な自由度の4個である．対応格子理論(Coincidence Site Lattice (CSL) theorty)に基づくCSL粒界は，Σ値を用いて粒界を規定する理論であるが，モデル化されたΣ粒界でも，微視的な自由度4個を決定する必要がある．

そのような格子欠陥の構造を決定する上で，原子・電子レベルのシミュレーションが以前からもちいられてきた．しかし，前述の自由度のために，シミュレーションによりその構造を決定することは容易ではない．粒界の種類や対称性にもよるが，候補構造の数は数百から時には数万個にも及ぶ．候補構造は結晶を切って張り合わせたため，その中からどれが最安定な構造を与えるかは，候補構造を作った時点ではわからない．そのため，一つずつの候補構造に対して，第一原理計算や，MD計算，静力学計算を行うなどして，初期構造を構造緩和し，さらに得られた全エネルギーから粒界エネルギーを算出する必要がある．

さらに，粒界はその方位関係や，回転角によって無数の種類が存在する．例えば，立方晶系における[001]軸対称傾角粒界であれば，Σ値が100以下の粒界が26種類存在する．さらに，粒界には[011]軸や[111]軸，対称傾角に加え，非対称傾角粒界，さらにねじれ粒界も存在する．また，一般的な多結晶体にはランダム粒界が主成分である．これまでに非対称傾角粒界の第一原理計算は若干あるものの，ランダム粒界のモデリングの報告は皆無である．つまり，複雑な粒界も含めて多結晶体における界面の物性を理解するためには，様々な粒界の構造を決定し，さらにそれら粒界における構造と物性との相関性を理解する必要がある．

そのような膨大な量を実施することは非現実的であり，界面における理解をより深化させるためには，界面構造を決定するスピードを向上させる必要がある．以上の様な背景を踏まえ，我々のグループでは情報科学の手法を活用することで，界面構造を決定するスピードを向上させるための研究に数年前から取り組んできた．

ここでは，仮想スクリーニングという機械学習法を用いた界面構造決定について説明する．

仮想スクリーニングでは，候補構造が膨大であり，それらを全て計算もしくは実験することが困難な場合，いくつかの候補構造において実際の計算を行い，予測モデル（Predictor）を構築する．得られたPredictorを用いることで，実際に計算を行わなかった他の候補構造の予測を行い，その中から最安定（最適）なものを探索するという手法である．

ここでは，単純な面心立方構造を有する Cu の[001]軸対称傾角粒界について，仮想スクリーニングを用いた界面構造決定を行った．目的変数は粒界エネルギー，説明変数は構造緩和前の期医科学的な値を用いた．回帰については，非線形回帰法の一種であるサポートベクトル回帰を用いた．Predictor を構築するためのデータ（学習データ）として，Σ5[001]/(210), Σ5[001]/(310), Σ17[001]/(350), Σ17[001]/(410)を選択した．この４つの粒界については全候補の網羅的な計算を行い，目的変数=粒界エネルギーに対して説明変数（特徴量）=幾何的情報を回帰することで Predictor を構築した．Σ25[001]/(710), Σ29[001]/(520), Σ29[001]/(730), Σ37[001]/(610), Σ37[001]/(750), Σ41[001]/(910), Σ41[001]/(540), Σ53[001]/(720), Σ53[001]/(950), Σ61[001]/(11 1 0), Σ125[001]/(11 2 0)にも適用した．その結果を図 1 に示す．相対方位角度にたいして上に凸な関係であり，各所にエネルギーが下がる点（cusp）が報告されており，過去の報告と一致していることが分かる．

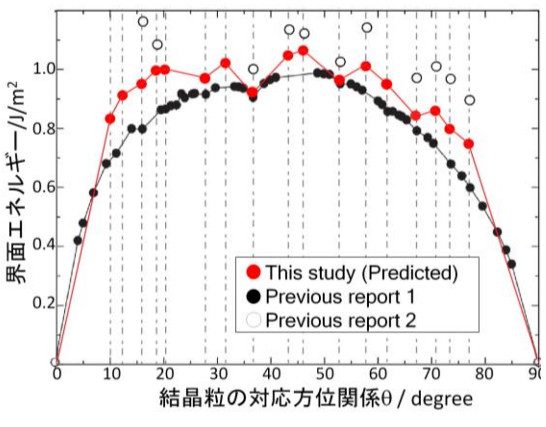


図 1 Predictor に予測された他粒界のエネルギー

このように，仮想スクリーニングを用いることにより，粒界を非常に効率的に探索することが出来る[1].

さらに，ガウス過程回帰に基づく空間補間法であるクリギング（Kriging）や転移学習も有効であることが分かっている[2-3].

また，界面におけるドーパント偏析構造決定[4-5]や，界面における構造機能相関の解明[6]にも機械学習は有効である.

3　機械学習を利用したスペクトル解析

さらに，計測と機械学習を組み合わせた解析も行っている．前述のように装置発展により膨大な数のスペクトルを取得することができるようになり，そのような多くのスペクトルを解釈するための手法開発が求められている.

これまでに機械学習を活用した「データ駆動型」のスペクトル予測や解釈法などを開発してきた[7-8].

本発表では機械学習を利用した界面構造解析やスペクトル解析について紹介する.

参考文献

[1] S. Kiyohara, et al., Sci. Adv. 2, e1600746 (2016).
[2] S. Kiyohara, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55, (2016)045502. S. Kikuchi et al., Physica B, 532 (2018) 24.
[3] H. Oda, et al, J. Phys. Soc. Japan 86, (2017)123601.
[4] H. Oda, et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 034005
[5] S. Kiyohara et al., J. Chem. Phys., 148 (2018) 241741
[6] S. Kiyohara et al., Physica B, 532 (2018) 9
[7] S. Kiyohara, et al, Sci. Rep. 8 (2018)13548.
[8] S. Kiyohara, et al, J. Phys. Mater. 1 (2019) 024003.

パーシステントホモロジーと機械学習の組み合わせによるデータ解析

大林 一平 [1]
[1] 理化学研究所 AIP
e-mail：ippei.obayashi@riken.jp

1 はじめに

位相的データ解析は数学のトポロジーのアイデアを活用した様々なデータ解析手法であり，データの「かたち」の情報を抽出するために有用なツールである．パーシステントホモロジー(PH)[1] は位相的データ解析の重要なツールで，マルチスケールな幾何的情報を抽出することを可能とする．一方機械学習はデータの背後に隠されたパターンを発見することを可能とする．するとこの 2 つの組み合わせによって特徴的幾何パターンをデータから取り出すとが可能となると考えられる．

本講演では [2] で講演者が提案したデータ解析手法について紹介する．本研究は京大の平岡氏，KEK の木村氏との共同研究による．

2 パーシステントホモロジー

PH とは理論的にはフィルトレーション上のホモロジー理論であるフィルトレーション (位相空間の増大列) にスケールの情報をエンコードすることで通常のホモロジー理論では扱えないようなスケールの情報を取り扱えるようにし，さらにノイズに対する頑健性を実現している．

ここでは例として図 1(a) のような 4 点からなるデータ (ポイントクラウド) を考える．この点のトポロジー的情報を調べることを考える．このままでは 4 点の連結成分があるだけだが，より意味のあるトポロジカルな構造を調べるため，図 1(b) のように各点に同じ半径の円盤を置く．するとこの図のように元のポイントクラウドにはなかった位相的構造を持つようになる．さらにこの半径を徐々に大きくすることで位相的構造の変化を考えることができるようになる．この図では半径 r_2 で穴が生じ，r_3 でそれが 2 つに分かれ，r_4 で穴の一方が埋まり，r_5 でもう一方の穴も消滅する．PH の理論を用いると，これは r_2 で生じた穴が r_5 で消滅し，r_3 で生じた穴が r_4 で消滅する，と解釈することが可能となる．PH の理論はこのようなホモロジー生成元の発生と消滅のペアを一意に作ることを可能としている．この $(r_2, r_5), (r_3, r_4)$ というペアを birth-death pair と呼び，birth-daeth pair 全体の集合をパーシステント図 (PD) と呼ぶ．PD はしばしば図 1(c) のような図で可視化される．PD は情報を定量的かつ効率的に縮約していると考えられ，様々なデータ解析に利用されている．ここで一つ注意しておくと，生存時間，すなわち消滅半径と生成半径の差，が小さい birth-death pair は消滅してすぐ消えるわけなので重要度が低い，ということである．

PH に関する重要なテクニックの一つとして「逆解析」がある．これはPD から入力データへと戻る手法であり、これによって各 birth-death pair に対応するホモロジー的構造を取り出すことができる．

3 機械学習との組み合わせ

基本的なアイデアとしては機械学習の入力として PD を使うことでデータの特徴的幾何的情報を抽出することを目指す．機械学習の用語で言うと PD に基づく特徴量を利用するということである．機械学習の入力は通常ベクトルであるので，何らかの意味で PD をベクトル化することが必要である．この部分については各種カーネルなど様々な手法が 10 以上提案されている．ここでは機械学習の解釈性を高めるため，Persistence Image(PI)[3] と呼ばれるシンプルなベクトル化手法を用いる．直感的説明としてはヒストグラムの各ビンの値を一列に並べたものをベクトルとみなすものである．PDD_q に対して，平面上の分布 ρ を

$$\rho(x, y) = \sum_{(b,d)\in D_q} W(x, y \mid b, d)$$

$$W(x, y \mid b, d) = w(b, d) \exp\left(\frac{(x-b)^2 + (y-d)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$w(b, d) = \arctan(C(d-b)^p)$$

で定義し，これを L^2 関数とみなすことで内積空間のベクトルとみなす．w は pair の生存時間による重要度を反映させるための重み関数である．実際にはこの関数を有限グリッドで離散化することで有限次元ベクトル空間のベクトルとみなす．

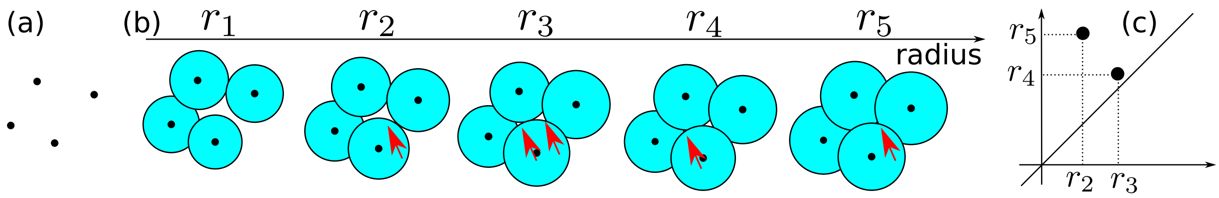


図 1. フィルトレーション

機械学習の手法としても解釈性を高めるため線形なモデルを利用する．例えば線形回帰，ロジスティック回帰, PCA, NMF などである．ここではロジスティック回帰を用いることにする．機械学習とは有限個の学習データ $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ から x と y の関係を推定することである．ロジスティック回帰は $x \in \mathbb{R}^m$, $y \in \{0, 1\}$ の間の確率的な関係を

$$
\begin{aligned}
P(y = 1 \mid x, a, b) &= \zeta(a \cdot x + b) \\
P(y = 0 \mid x, a, b) &= 1 - \zeta(a \cdot x + b) \\
&= \zeta(-a \cdot x - b) \\
\zeta(z) &= 1/(1 + e^{-z})
\end{aligned}
$$

と仮定し, 学習データから適切な $a \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R}$ を調整することで x と y の間の関係を記述する．PH との組み合わせのためにはこの x に PI で計算したベクトルを用いれば良い．

PI と線形モデルの良い点として，学習結果の解釈がしやすい点がある．ここで考えている内積は L^2 内積 (の離散化による近似) なので，近似的に

$$
\begin{aligned}
P(y = 1 \mid x, a, b) &= \zeta\Big(\sum_{(b,d) \in D_q} I(b, d, a) + b\Big) \\
I(b, d, a) &= \int a(x, y) W(x, y \mid b, d) dxdy
\end{aligned}
$$

と書ける ($a(x, y)$ は学習結果を PI のルールで逆に平面上の区分的定数関数と見なしたものである)．するとこの $I(b, d, a)$ は各 birth-daeth pair (b, d) の重要度を表現している．符号によって $y = 1, y = 0$ のいずれの確率に寄与しているか, 絶対値の大きさによってその寄与の大きさ，をそれぞれ知ることができる．これで特定された重要な birth-daeth pair から逆解析で対応する元データの形を知ることができ，さらなる解析が可能となる．この手法はすでに焼結鉱 [4] の解析などに活用されている．

4 おわりに

本講演では PH と機械学習の組み合わせの 1 手法について紹介した．PI と線形モデルの組み合わせというシンプルな手法を組合せることで各 birth-death pair の重要度を数値で表現できるようになっている．さらにこれで特定した重要な birth-death pair を逆解析で元の形にマッピングすることで学習結果を直感的に理解し，より深い解析を可能とする．本講演の手法はデータの形のデータ解析に広く活用できる手法であると期待される．今後の課題としては，解釈性を損わず非線形性を導入するにはどうすれば良いのか，といった課題がある．

謝辞　本研究は科研費 JP 16K17638, JST CREST 数理モデリング領域，SIP 革新構造材料 (D66, D72) の助成を受けたものである。

参考文献

[1] H. Edelsbrunner, D. Letscher, and A. Zomorodian. Topological Persistence and Simplification. Discrete Comput. Geom. 28(4) (2002), 511 - 533.

[2] I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura. Persistence diagrams with linear machine learning models. Journal of Applied and Computational Topology **1**, 3-4, 421 - 449, (2018)

[3] H. Adams, S. Chepushtanova, T. Emerson, E. Hanson, M. Kirby, F. Motta, R. Neville, C. Peterson, P. Shipman, and L. Ziegelmeier. Persistence Images: A Stable Vector Representation of Persistent Homology. Journal of Machine Learning Research **18**(8)(2017), 1–35.

[4] M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao, and Y. Hiraoka. Nonempirical identification of trigger sites in heterogeneous processes using persistent homology. Scientific Reports **8**, 3553, (2018).

六角格子上の離散冪函数：ABS 方程式系と Garnier 系からの導出

Joshi Nalini[1], 梶原 健司 [2], 中園 信孝 [3], 増田 哲 [4]
[1]University of Sydney，[2] 九大 IMI，[3] 東京農工大工，[4] 青学大理工
e-mail : kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

1 はじめに

論文 [1] で提示された Painlevé VI 方程式 (P_{VI}) の Bäcklund 変換で記述される離散冪函数に対して，P_{VI} の超幾何 τ 函数を用いた明示公式 [2]，立方格子上で $3A_1^{(1)}$ 型 affine Weyl 群対称性をもつ Adler-Bobenko-Suris(ABS) 系 (Q1,H1) からの導出 [3] が知られている．本研究では [4, 5, 6] で導入された六角格子上の離散冪函数を議論し，その定義方程式が $4A_1^{(1)}$ 型の affine Weyl 群対称性をもつ 4 次元立方格子上の ABS 系 (Q1,H1)，および 2 変数 Garnier 系の Bäcklund 変換から得られることを示す．

2 六角格子上の離散冪函数

$l_i \in \mathbb{Z}$ $(i = 1, 2, 3)$ を独立変数，$f \in \mathbb{C}$ を従属変数とする偏差分方程式系を考える．以下，$f = f_{l_1,l_2,l_3}$ で添字 $\pm i$ は l_i 方向の ± 1 シフト．例えば $f_{\pm 1} = f_{l_1 \pm 1,l_2,l_3}$, $f_{23} = f_{l_1,l_2+1,l_3+1}$.

$$\begin{aligned} \frac{(f-f_1)(f_{12}-f_2)}{(f_1-f_{12})(f_2-f)} &= \frac{1}{x_1}, \\ \frac{(f-f_2)(f_{23}-f_3)}{(f_2-f_{23})(f_3-f)} &= \frac{1}{x_2}, \\ \frac{(f-f_3)(f_{13}-f_1)}{(f_3-f_{13})(f_1-f)} &= \frac{1}{x_3}, \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \alpha_0^0 f = \ & (l_1-\alpha_1^1)\frac{(f_1-f)(f-f_{-1})}{f_1-f_{-1}} \\ & + (l_2-\alpha_1^2)\frac{(f_2-f)(f-f_{-2})}{f_2-f_{-2}} \\ & + (l_3-\alpha_1^3)\frac{(f_3-f)(f-f_{-3})}{f_3-f_{-3}}. \end{aligned} \tag{2}$$

ここで，x_i $(i = 1, 2, 3)$, α_0^0, α_1^k $(k = 1, 2, 3)$ は複素パラメータであり，$x_1x_2x_3 = 1$ を満たす．パラメータを $x_i = e^{2i\alpha_i}$ $(\alpha_i > 0)$ $(i = 1, 2, 3)$, $\alpha_0^0 = \frac{c}{2}$ $(0 < c < 2)$ と特殊化し，初期条件

$$f_{1,0,0} = 0,\ f_{0,1,0} = e^{ic(\alpha_2+\alpha_3)},\ f_{0,0,1} = e^{ic\alpha_3}$$

によって定まる解 f_{l_1,l_2,l_3} のうち，$|l_1 + l_2 + l_3| \le 1$ を満たす部分格子上の解は冪函数 z^c に対応する六角格子上の離散冪函数を与える．

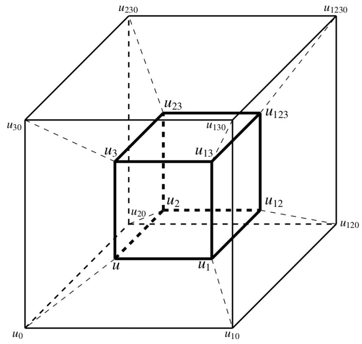


図 1. 4 次元超立方体と u 変数の配置

3 ABS 系 (Q1,H1)

図 1 のように，4 次元超立方体の 3 次元部分立方体上の各面に以下の差分方程式を配置する．以下，$u = u_{l_1,l_2,l_3,l_0}$ とし，添字の記法は上と同様である．

$$\begin{aligned} \frac{(u+u_1)(u_2+u_{12})}{(u+u_2)(u_{12}+u_1)} &= \frac{\mu_{l_1}^{(1)}}{\mu_{l_2}^{(2)}}, \\ \frac{(u+u_2)(u_3+u_{23})}{(u+u_3)(u_{23}+u_2)} &= \frac{\mu_{l_2}^{(2)}}{\mu_{l_3}^{(3)}}, \\ \frac{(u+u_3)(u_1+u_{13})}{(u+u_1)(u_{13}+u_3)} &= \frac{\mu_{l_3}^{(3)}}{\mu_{l_1}^{(1)}}, \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{u}+\frac{1}{u_1}\right)(u_0+u_{10}) &= -\mu_{l_1}^{(1)}\mu_{l_0}^{(0)}, \\ \left(\frac{1}{u}+\frac{1}{u_2}\right)(u_0+u_{20}) &= -\mu_{l_2}^{(2)}\mu_{l_0}^{(0)}, \\ \left(\frac{1}{u}+\frac{1}{u_3}\right)(u_0+u_{30}) &= -\mu_{l_3}^{(3)}\mu_{l_0}^{(0)} \end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$\{\ldots,\mu_{-1}^{(i)},\mu_0^{(i)},\mu_1^{(i)},\ldots\}_{i=0,1,2,3}$ はパラメータである．差分方程式系 (3)(Q1), (4)(H1) は multidimentionally consistent，すなわち各 3 次元部分立方体上で consistency around the cube property を持っていることを確かめることができる．

$$\mu_l^{(1)} = \frac{1}{x_1}, \quad \mu_l^{(2)} = 1, \quad \mu_l^{(3)} = x_2,$$
$$\mu_l^{(0)} = (\alpha_0^0 + l)(\alpha_0^0 + l + 1), \quad x_3 = \frac{1}{x_1x_2}$$

とおき，さらに α_i^k $(k=0,\dots,4, i=0,1)$ を条件 $\alpha_0^k = 1-\alpha_1^k$ をみたすパラメータとする．このとき，変換 s_i^k, π_k $(k=0,\dots,3, i=0,1), \sigma_{12}$, σ_{23} を

$$
\begin{aligned}
&s_0^k : (\alpha_0^k, \alpha_1^k) \mapsto (-\alpha_0^k, 2-\alpha_1^k),\\
&s_1^k : (\alpha_0^k, \alpha_1^k) \mapsto (2-\alpha_0^k, -\alpha_1^k),\\
&\pi_k : (\alpha_0^k, \alpha_1^k, \alpha_0^4, \alpha_1^4) \mapsto (\alpha_1^k, \alpha_0^k, \alpha_1^4, \alpha_0^4),\\
&\sigma_{12} : (\alpha_0^1, \alpha_1^1, \alpha_0^2, \alpha_1^2, x_1, x_2, x_3)\\
&\quad \mapsto (\alpha_0^2, \alpha_1^2, \alpha_0^1, \alpha_1^1, {x_1}^{-1}, {x_3}^{-1}, {x_2}^{-1}),\\
&\sigma_{23} : (\alpha_0^2, \alpha_1^2, \alpha_0^3, \alpha_1^3, x_1, x_2, x_3)\\
&\quad \mapsto (\alpha_0^3, \alpha_1^3, \alpha_0^2, \alpha_1^2, {x_3}^{-1}, {x_2}^{-1}, {x_1}^{-1}),
\end{aligned}
$$

(u 変数への作用は省略する) で導入すると，方程式系 (3), (4) はこれらの変換に共変であり，これらの変換は拡大 affine Weyl 群 $\widetilde{W}(4A_1^{(1)})$

$$
\widetilde{W}(4A_1^{(1)}) = \langle s_0^1, s_1^1\rangle \times \langle s_0^2, s_1^2\rangle \times \langle s_0^3, s_1^3\rangle \times \langle s_0^0, s_1^0\rangle \rtimes \langle \pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_0, \sigma_{12}, \sigma_{23}\rangle
$$

をなす．さらに，$f_{l_1,l_2,l_3} = (-1)^{l_1+l_2+l_3} u_{l_1,l_2,l_3,0}$ とおくことで (1) が得られ，(2) も整合的に成り立つことが示される．

4 Garnier 系

2 変数の Garnier 系は次の Hamilton 系として与えられる [7]，独立変数 t_i, 従属変数 p_i, q_i $(i = 1,2)$ に対する偏微分方程式系である．

$$
\frac{\partial q_j}{\partial t_i} = \frac{\partial H_i}{\partial p_j}, \quad \frac{\partial p_j}{\partial t_i} = -\frac{\partial H_i}{\partial q_j} \quad (i,j=1,2), \quad (5)
$$

$$
\begin{aligned}
t_i(t_i-1)H_i &= q_i(q_1p_1+q_2p_2+\alpha)(q_1p_1+q_2p_2+\alpha+\kappa_\infty)\\
&+t_ip_i(q_ip_i-\theta_i) - \frac{t_j(t_i-1)}{t_i-t_j}(q_jp_j-\theta_j)q_ip_j\\
&-\frac{t_i(t_i-1)}{t_i-t_j}(q_ip_i-\theta_i)q_jp_i - \frac{t_i(t_j-1)}{t_j-t_i}q_jp_j(q_ip_i-\theta_i)\\
&-\frac{t_i(t_j-1)}{t_j-t_i}q_ip_i(q_jp_j-\theta_j) - (t_i+1)(q_ip_i-\theta_i)q_ip_i\\
&+(\kappa_1t_i+\kappa_0-1)q_ip_i, \qquad (i,j)=(1,2),(2,1),
\end{aligned}
$$

$$
\alpha = -\frac{1}{2}(\theta_1+\theta_2+\kappa_0+\kappa_1+\kappa_\infty-1).
$$

Garnier 系は以下の変換を許容する [7, 8, 9].

$$
\begin{aligned}
r_i &: \theta_i \mapsto -\theta_i, \quad p_i \mapsto p_i - \frac{\theta_i}{q_i} \quad (i=1,2),\\
r_3 &: \kappa_0 \mapsto -\kappa_0, \quad p_i \mapsto p_i - \frac{\kappa_0}{t_i(g_t-1)},\\
r_4 &: \kappa_1 \mapsto -\kappa_1, \quad p_i \mapsto p_i - \frac{\kappa_1}{g_1-1},\\
r_5 &: \kappa_\infty \mapsto -\kappa_\infty,\\
r_{34} &: \theta_i \mapsto -\theta_i\,(i=1,2), \quad \kappa_0 \mapsto -\kappa_0+1,\\
&\quad \kappa_1 \mapsto -\kappa_1+1, \quad \kappa_\infty \mapsto -\kappa_\infty,\\
&\quad q_i \mapsto \frac{t_ip_i(q_ip_i-\theta_i)}{(q_1p_1+q_2p_2+\alpha)(q_1p_1+q_2p_2+\alpha+\kappa_\infty)},\\
&\quad q_ip_i \mapsto -q_ip_i.
\end{aligned}
$$

加えて，パラメータ $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$（ただし $(\theta_3, \theta_4, \theta_5) = (\kappa_0, \kappa_1, \kappa_\infty)$）の互換に対応する変換がある．$\tau$ 変数を導入してこれらの変換を τ 変数に持ち上げ，f 変数を導入すると，ABS 系 (3), (4) がこれらの変換が作る格子の中に埋め込まれていることを示すことができる．

以上をまとめて，以下の定理を得る．

定理 1 *1)* 差分方程式系 (1), (2) は *ABS* 系 (3), (4) の *Bäcklund* 変換から導かれる．
2) 差分方程式系 (1), (2) は 2 変数 *Garnier* 系 (5) の *Bäcklund* 変換から導かれる．

謝辞 本研究は Australian Laureate Fellowship # FL120100094, Australian Research Council grant # DP160101728 および JSPS 科研費 JP16H03941, JP19K14559, JP17J00092 の支援を受けた．

参考文献

[1] A.I. Bobenko, in *Symmetries and integrability of difference equations* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999) 97–108,

[2] H. Ando, M. Hay, K. Kajiwara and T. Masuda, Funkcial. Ekvac. **57** (2014) 141.

[3] N. Joshi, K. Kajiwara, T. Masuda, N. Nakazono and Y. Shi, Proc. Royal Soc. A **473**(2017) 20170312.

[4] A.I. Bobenko, T. Hoffmann, and Y.B. Suris, Int. Math. Res. Not.**2002**(3)(2002) 111–164.

[5] S.I. Agafonov and A.I. Bobenko, J. Math. Phys. **44**(8) (2003) 3455–3469.

[6] A.I. Bobenko and T. Hoffmann, Duke Math. J. **116**(2003) 525–566.

[7] K. Iwasaki, H. Kimura, S. Shimomura and M. Yoshida, *From Gauss to Painlevé. A modern theory of special functions* (Vieweg, Braunschweig, 1991).

[8] T. Tsuda, Int. Math. Res. Not. **43** (2003) 2341-2358.

[9] T. Suzuki, Funkcial. Ekvac. **48**(2)(2005) 203–230.

相似幾何とユークリッド幾何に基づく離散対数型美的曲線の生成

井ノ口 順一[1], 梶原 健司[2], 三浦 憲二郎[1,2]
[1] 筑波大, [2] 九大 IMI, [3] 静岡大
e-mail : kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

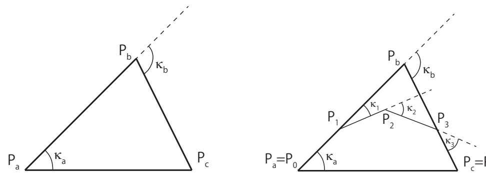
1 はじめに

対数型美的曲線 (log-aesthetic curve: LAC) は相似幾何に基づく定式化により，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いう特徴付けがなされた [1]．本研究ではその可積分離散化である離散対数型美的曲線 (dLAC) を研究対象とする．dLAC は，相似幾何に基づきセグメント間の方向変化量 κ を一定として，セグメント長 q_n(n は整数) を変化させることで生成される離散平面曲線で，$q_n = (c_1 n + c_2)^{1/(\alpha-1)}$, c_1 と c_2 は任意定数であり，α は形状パラメータである [2]．本研究では端点とそこでの接線方向を指定して曲線を生成する，いわゆる G^1 Hermite 補間する dLAC 曲線を生成する方法を提案する．

上の相似幾何の枠組みでは生成される形状に制約があり，例えば，変曲点を持つような曲線は生成できない．その弱点を克服するため，本研究ではユークリッド幾何における dLAC の生成法を提案する．相似幾何とユークリッド幾何における離散曲線は曲率円に相当するある特徴的な円に対応関係がある．この対応関係を用いて，相似幾何による dLAC の定義は自然にユークリッド幾何に移行することができる．この定式化ではセグメント長を一定値 q とし，セグメント間の方向変化量 κ_n を変化させて離散曲線を生成するため，変曲点を持つような曲線も生成することができる．

2 相似幾何に基づく定式化

G^1 Hermite 補間では，曲線の両端点，およびそこでの接線方向を指定して，それらの境界条件を満足する曲線を生成する．形状パラメータ α はユーザが任意に指定できると仮定する．したがって，両端点を指定する 2 点 $\boldsymbol{P}_a, \boldsymbol{P}_c$ とそれらの点での接線ベクトルを指定するための 1 点 $\boldsymbol{P}_b$ を入力とする (図 1(a) 参照)．セグメント間の角を一定とし，セグメントの長さを変数とすることで dLAC を生成する．離散曲線の内点の数を N(両端点を含めると $N+2$)，i 番目のセグメントの長さを $q_i \geq 0$ とする $(i = 0, \ldots, N)$．



(a) G^1 Hermite 補間　　(b) 方向角 ($N = 3$)

図 1. dLAC の実装

このセグメントの方向角は $\kappa_a - i \times \kappa_b/N$ となる．底辺 $\boldsymbol{P}_a\boldsymbol{P}_c$ の長さを ℓ とすると，両端点を曲線が通過することから，

$$\sum_{i=0}^{N} q_i \cos\left(\kappa_a - i\frac{\kappa_a}{N}\right) = \ell, \tag{1}$$

$$\sum_{i=0}^{N} q_i \sin\left(\kappa_a - i\frac{\kappa_a}{N}\right) = 0, \tag{2}$$

が成り立つ．$a = \alpha - 1$ とすると，q_i^a の曲線長に対する線形性から，$i = 1, \cdots, N-1$ に対して，

$$q_i^a = \frac{(N-i)q_0^a + i\, q_N^a}{N} \tag{3}$$

が成り立つ．したがって，q_0 と q_N が与えられれば，q_i $(i = 1, \ldots, N-1)$ が定まる．

dLAC 生成アルゴリズムの概要は以下である．ここでは，Yoshida and Saito[3] と同じように，相似性を利用するスケーリング法を用いて探索すべきパラメータの数を 1 個としている．

1) $q_0 = \ell/(N+1)$ (> 0) と定め，q_N を変数として与えると，式 (2) の正負が計算できる．
2) 式 (2) は q_N に関する非線形方程式であり，2 分法によりその解を求める．
3) q_N, q_0 を用いて，式 (3) より q_i が求まる．
4) 式 (1) より曲線長 L を求め，q_i を ℓ/L 倍して各セグメントの長さを決定する．
5) dLAC の頂点を $\boldsymbol{P}_i$ $(i = 0, \cdots, N+1)$ とすると，$\boldsymbol{P}_0 = \boldsymbol{P}_a$ である．底辺 $\boldsymbol{P}_a\boldsymbol{P}_c$ の方向角を κ とすると，次の漸化式で $\boldsymbol{P}_{i+1}$ $(i = 0, \cdots, N)$ が求まる:

$$\boldsymbol{P}_{i+1} = \boldsymbol{P}_i + q_i \begin{pmatrix} \cos\left(\kappa + \kappa_a - i\frac{\kappa_b}{N}\right) \\ \sin\left(\kappa + \kappa_a - i\frac{\kappa_b}{N}\right) \end{pmatrix} \tag{4}$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5, 東京)

図 2 に，様々な a, N に対する生成例を示す．

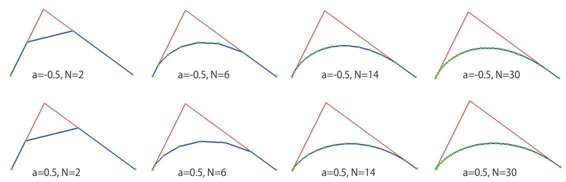
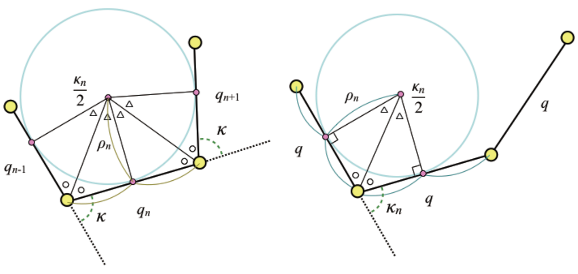


図 2. dLAC(相似幾何)

3　ユークリッド幾何に基づく定式化



(a) 相似幾何　(b) ユークリッド幾何

図 3. (a) 相似幾何, (b) ユークリッド幾何.

図 3 において，(a) では中央のセグメントの中点で接し，隣接する 2 セグメントにも接する円が存在する．一方，(b) では隣接する 2 つのセグメントでそれぞれの中点で接する円が存在する．これら 2 つの円の半径は共通で，円の半径 ρ_n は，$1/\rho_n = 2\tan(\kappa_n/2)/q_n$ であり，相似幾何では $\kappa_n = \kappa$（定数），ユークリッド幾何では $q_n = q$（定数）である．本研究ではこの観察に基づき，セグメント長は定数，セグメント間の角度 κ_n が $\tan(\kappa_n/2) = (d_1 n + d_2)^{(-1/\alpha)}$ (d_1, d_2 は任意定数) で与えられる離散曲線をユークリッド幾何における dLAC と定義する．これで変曲点を含む離散曲線を生成することができる．

両端点を指定する 2 点 $\boldsymbol{P}_a, \boldsymbol{P}_c$ とそれらの点での接線ベクトルを指定するための 1 点 $\boldsymbol{P}_b$ を入力とするのは前節と同様である (図 1(a) 参照)．離散曲線の内点の数を N(両端点を含めると $N+2$) とし，セグメントの長さは一定値 q とする．図 1(b) に示すように，i 番目と $i+1$ 番目のセグメント間の角度をを符号に注意しつつ κ_i ($i = 1, \ldots, N$) とする．このとき $\sum_{i=1}^{N} \kappa_i = \kappa_b$ となる．底辺 $\boldsymbol{P}_a\boldsymbol{P}_c$ の長さを ℓ とすると，両端点を曲線が通過することから，$\kappa_0 = 0$ として

$$\sum_{i=0}^{N} \cos\left(\kappa_a - \sum_{j=0}^{i} \kappa_i\right) = \frac{\ell}{q}, \tag{5}$$

$$\sum_{i=0}^{N} \sin\left(\kappa_a - \sum_{j=0}^{i} \kappa_i\right) = 0, \tag{6}$$

が成り立つ．$\left(\frac{2\tan\frac{\kappa_i}{2}}{q}\right)^{-\alpha}$ の曲線長に対する線形性から，$\left(\frac{2\tan\frac{\kappa_i}{2}}{q}\right)^{-\alpha} = c\,i\,q + d$ ($i = 1, \cdots, N$) が成り立つ．q は式 (5) を用いて決定すればよいので $q = 1$ と仮定する．したがって，

$$\left(2\tan\frac{\kappa_i}{2}\right)^{-\alpha} = c\,i + d, \tag{7}$$

また $\sum_{i=1}^{N} \kappa_i = \kappa_b$ より，

$$\tan\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \kappa_i\right) = \tan\frac{\kappa_b}{2}. \tag{8}$$

が成り立つ．式 (8) により，c と d は独立ではないので，与えられた c に対する d を求め，式 (6) より c を求めればよい．最後に式 (5) より q を求める．この方法でも相似性を利用して探索すべきパラメータの数を 1 個としている．

図 4 に $\alpha = -0.5$ の生成例を示す．生成された曲線は変曲点を含んでおり，このような曲線は [3] の方法では生成できず，指定した境界条件の drawable region の外となっている．

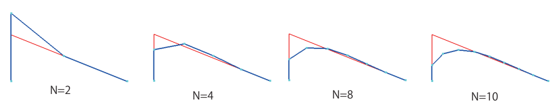


図 4. dLAC(ユークリッド幾何), $\alpha = -0.5$

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 25289021, 16H03941, 挑戦的萌芽研究 26630038，および ImPACT「タフ・ロボティクス・チャレンジ」の助成，および H30 年度九大 IMI 短期共同研究「離散微分幾何の新展開．意匠設計から建築設計へ」の支援を受けた．

参考文献

[1] J. Inoguchi, K. Kajiwara, K. T. Miura, M. Sato, W. K. Schief, Y. Shimizu, Comp. Aided Geom. Design **61**(2018) 1–5.

[2] J. Inoguchi, K. Kajiwara, K. T. Miura, H. Park, W. K. Schief, preprint, arXiv:1808.03104v1.

[3] N. Yoshida and T. Saito, The Visual Computer (Pacific Graphics), **22**(9-11) (2006) 896–905.

糸のたわみ問題と離散ソボレフ不等式の最良定数

山岸 弘幸[1]，永井 敦[2]
[1] 都立高専，[2] 津田塾大
e-mail：yamagisi@metro-cit.ac.jp

1 糸のたわみ問題

水平な天井から一様に分布したバネ定数 q のゴム膜で支えられたロープ（以下，糸と書く）がある．荷重密度 $f(x)$ を加えたときの糸のたわみ $u(x)$ は 2 階常微分方程式

$$-u'' + q\,u = f(x)$$

をみたす [1]．この微分方程式に境界条件を付加した問題を糸のたわみ問題と呼ぶことにする．本稿は長さ L とした有限長の糸に境界条件を課した糸のたわみ問題

BVP

$$\begin{cases} -u'' + q\,u = f(x) \qquad (0 < x < L) \\ \begin{cases} u^{(m)}(0) = u^{(n)}(L) = 0 & (m,n) \\ u^{(i)}(L) - u^{(i)}(0) = 0 \;\; (i = 0,1) & (\mathrm{P}) \end{cases} \end{cases}$$

を考える．$u^{(0)} = u,\ u^{(1)} = u'$ である．(m,n) は (m,n) 型境界条件とし，m と n はそれぞれ 0（固定端またはディリクレ）または 1（自由端またはノイマン）の 2 つの値をとる．片側 2 通り，両側合わせて 4 通りの問題

$$(m,n) = (0,0),\ (0,1),\ (1,0),\ (1,1)$$

がある．(P) は周期境界条件である．4 つの (m,n) と (P) を含めた 5 つの境界値問題は自己共役境界値問題である．$(0,1)$ と $(1,0)$ に対応するソボレフ不等式の最良定数は同値のため，以降の議論では $(1,0)$ を省略する．

2 糸のたわみ問題の離散化

$N = 2,3,4,\cdots$，$q = a\ (0 < a < \infty)$ とする．糸のたわみ問題 BVP の独立変数を離散化 [2, 3] すると

BVP

$$\begin{cases} -u(i-1) + (2+a)u(i) - u(i+1) = f(i) \\ (0 \le i \le N-1) \\ \mathrm{BC} \end{cases}$$

境界条件 BC は

$$\begin{cases} u(-1) = u(N) = 0 & (0,0) \\ u(-1) = u(N-1) - u(N) = 0 & (0,1) \\ u(-1) - u(0) = u(N-1) - u(N) = 0 & (1,1) \\ u(-1) = u(N-1),\ u(0) = u(N) & (\mathrm{P}) \end{cases}$$

である．ベクトル

$$\boldsymbol{u} = {}^t(u(0),\cdots,u(N-1)) \in \boldsymbol{C}^N$$
$$\boldsymbol{f} = {}^t(f(0),\cdots,f(N-1)) \in \boldsymbol{C}^N$$

と，$N \times N$ 単位行列 $\boldsymbol{I}$ を用いて，BVP を連立一次方程式

$$\mathrm{BVP} \quad (\boldsymbol{A} + a\boldsymbol{I})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$$

と表すとき，$N \times N$ 行列である離散ラプラシアン $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(\mathrm{X})$ は

$$\boldsymbol{A}(0,0) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}(0,1) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}(1,1) = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}(\mathrm{P}) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

である．$\boldsymbol{A}(1,1)$ と $\boldsymbol{A}(\mathrm{P})$ は固有値 0 をもち，その固有空間は 1 次元で基底は ${}^t(1,1,\cdots,1)$ である．BVP の解は，グリーン行列 $\boldsymbol{G}$ を用いて

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{f}, \qquad \boldsymbol{G}=(\boldsymbol{A}+a\boldsymbol{I})^{-1}$$

である．

3 再生核

任意の $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in\mathbf{C}^N$ に対して

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})_H=\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{A}+a\boldsymbol{I})\boldsymbol{u}, \qquad \|\boldsymbol{u}\|_H^2=(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})_H$$

を導入する．$\boldsymbol{v}^*={}^t\overline{\boldsymbol{v}}$ である．k を固定する毎に

$$\boldsymbol{\delta}_k={}^t(\cdots,\delta(i-k),\cdots)_{0\le i\le N-1}$$

ただし $\delta(i)=1\ (i=0),\ 0\ (i\neq 0)$ とする．このとき，$0\le j\le N-1$ を 1 つ固定する毎に次の再生等式が成り立つ．

$$u(j)=(\boldsymbol{u},\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_j)_H, \qquad {}^t\boldsymbol{\delta}_j\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_j=\|\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_j\|_H^2$$

$\boldsymbol{G}$ はベクトル空間 $\mathbf{C}^N$ で再生行列である．

4 離散ソボレフ不等式

再生等式の第 1 式にシュワルツ不等式を適用すると，離散ソボレフ不等式が導出できる．

定理 1 任意の $\boldsymbol{u}\in\mathbf{C}^N$ に対し，$\boldsymbol{u}$ によらない正定数 C があって，離散ソボレフ不等式

$$\left(\max_{0\le j\le N-1}|\,u(j)\,|\right)^2\le C\,\|\boldsymbol{u}\|_H^2$$

が成り立つ．C のうち最良定数 C_0 はグリーン行列の対角成分の最大値であり

$$C_0=\max_{0\le j\le N-1}{}^t\boldsymbol{\delta}_j\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_j={}^t\boldsymbol{\delta}_{j_0}\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_{j_0}=$$

$$\begin{cases} \dfrac{U_{[\frac{N+1}{2}]}(x)U_{[\frac{N+2}{2}]}(x)}{U_{N+1}(x)} & (0,0)\\[2ex] \dfrac{U_N(x)}{U_{N+1}(x)-U_N(x)} & (0,1)\\[2ex] \dfrac{U_N(x)-U_{N-1}(x)}{U_{N+1}(x)-2U_N(x)+U_{N-1}(x)} & (1,1)\\[2ex] \dfrac{U_N(x)}{2\,(T_N(x)-1)} & (\mathrm{P}) \end{cases}$$

ただし $x=(2+a)/2$ である．$T_N(x)$ は $T_N(\cos(\theta))=\cos(N\theta)$ と定義される第 1 種チェビシェフ多項式，$U_N(x)$ は $U_N(\cos(\theta))=\sin(N\theta)\big/\sin(\theta)$ と定義される第 2 種チェビシェフ多項式である．C を C_0 で置き換えるとき，$\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_{j_0}$ で等号が成り立つ．j_0 は

$$j_0=\begin{cases} \left[\frac{N-1}{2}\right] & (0,0)\\ N-1 & (0,1)\\ 0,\ N-1 & (1,1)\\ \textit{any of}\ \{0,1,\cdots,N-1\} & (\mathrm{P}) \end{cases}$$

ただし $[x]=\sup\{n\le x\mid n\in\mathbf{Z}\}$ である．

糸のたわみ問題と対応する離散ソボレフ不等式の工学的な意味は次の通りである．BVP を解くと糸に荷重密度 $\boldsymbol{f}$ を加えたときのたわみ $\boldsymbol{u}$ は $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{f}$ と表示できる．グリーン行列 $\boldsymbol{G}$ はインパルス応答として知られ，デルタ荷重 $\boldsymbol{f}=\boldsymbol{\delta}_{j_0}$ をかけたときの糸のたわみは $\boldsymbol{G}\boldsymbol{\delta}_{j_0}$ である．BVP に対応する離散ソボレフ不等式は，糸のたわみの絶対値の上限の 2 乗を上から糸のポテンシャルエネルギーの定数倍で評価する不等式である．最良定数はグリーン行列の対角成分の最大値で与えられ，最良ベクトルはグリーン行列のある列ベクトルで与えられる．離散ソボレフ不等式の最良定数と最良関数がわかると，糸のたわみの最大幅を正確に見積もることができ，かつ，そのときのたわみ形状を知ることができる．

参考文献

[1] Y. Kametaka, K. Watanabe, A. Nagai, H. Yamagishi and K. Takemura, *The best constant of Sobolev inequality which correspond to a bending problem of a string with periodic boundary condition*, Sci. Math. Jpn. **e-2007** (2007) 283–300.

[2] A. Nagai, Y. Kametaka, H. Yamagishi, K. Takemura and K. Watanabe, *Discrete Bernoulli polynomials and the best constant of discrete Sobolev inequality*, Funkcial. Ekvac. **51** (2008) 307–327.

[3] 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 J. Math. **25** (2012) 1–15.

ロジスティック不等間隔差分方程式による欠損データ対処法

佐藤 大輔 [1], 松村 龍太郎 [1]
[1] 日本電信電話株式会社, NTT ネットワーク基盤技術研究所
e-mail : daisuke.satoh.cm@hco.ntt.co.jp, ryutaro.matsumura.sa@hco.ntt.co.jp

1　はじめに

ロジスティック曲線モデルは需要予測によく用いられるモデルである．データに欠損値が存在する場合，従来は欠損値に関わるデータを全て削除するか，欠損値を補間するかのいずれかがなされている．本稿では厳密解を持つ不等間隔差分方程式を用いることで従来よりも曲線への当てはまりが良くなることを示す．

2　従来法

回帰式は差分方程式から作られているため，1 つの欠損値があると 2 つの差分値の計算が不可能になる．これら 2 つの差分値を削除することで欠損値が無い状態と同じ状況にして分析する方法が削除法 [1] である．削除法によりデータサイズが減少するがそれは推定精度の劣化につながるため好ましくない．特に元々のデータサイズが小さい場合にはその影響は大きい．

欠損値を何らかの補間法により補完し，元々のデータに補間されたデータを加えることで欠損値が存在しない状態にして分析を行う方法が補間法 [1] である．本稿では隣接する 4 つのデータを用いたラグランジュ補完 [5] による補間法を用いる．

3　不等間隔差分による方法

ロジスティック不等間隔差分方程式 [2] は

$$L_{n+1} - L_n = \delta_{n+1}\frac{r}{k}L_{n+1}(k - L_n). \qquad (1)$$

であり，厳密解

$$L_n = \frac{k}{1 + m\prod_{i=1}^{n}(1-\delta_i r)}. \qquad (2)$$

を持つ．

提案法を説明するために，データサイズ n に対して欠損値が無い場合の番号付け $\nu(n)$ を

$$\nu(n) = \sum_{i=1}^{n}\mu_i, \qquad (3)$$

と定める．

$$\mu_i = \begin{cases} 1 & (L_{i-1} \text{ と } L_i \text{ との間に欠損値が無い場合}), \\ \sigma_i & (L_{i-1} \text{ と } L_i \text{ との間に欠損値がある場合}), \end{cases} \qquad (4)$$

とする．ここで σ_i は L_{i-1} と L_i との間の連続した欠損値数である．L_{i-1} と L_i との間の連続した欠損値を 1 つのグループとみなす．σ_i の個数がグループ数に相当する．いまデータセットに p 個のグループがあるとして σ_i の番号 i を i の順に $\sigma'_j, (j = 1, 2, \ldots, p)$ と番号を振り直す．結果，すべての欠損値の数は $\sum_{i=1}^{p}\sigma'_i$ で表される．

式 (1) から回帰式

$$Y_n = A + BL_n, \qquad (5)$$

を得る．ここで

$$Y_n = \frac{L_{n+1} - L_n}{L_{n+1}\delta_{n+1}}, (n = 1, \ldots, N-1) \qquad (6)$$

であり，N は欠損値を含めない実際のデータサイズである．L_n と L_{n+1} との間に欠損値が無い場合の差分間隔は $\delta_{n+1} = 1$ であり，欠損値がある場合の差分間隔は自由パラメータとする．

差分間隔 $\delta_{n+1}(\neq 1)$ の番号付けを式 (6) 内の番号 $n+1$ の順に従い，$\delta'_1, \delta'_2, \ldots, \delta'_p$ と振り直す．パラメータ k, r, m は回帰分析から $\boldsymbol{\delta'} = (\delta'_1, \delta'_2, \ldots, \delta'_p)$ の関数として求まり

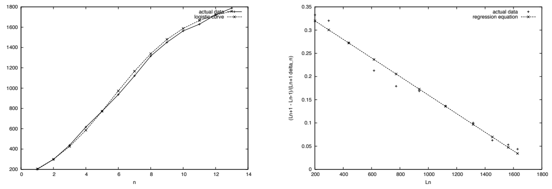
$$\hat{k}(\boldsymbol{\delta'}) = -\frac{\hat{A}}{\hat{B}}, \qquad (7)$$

$$\hat{r}(\boldsymbol{\delta'}) = \hat{A}, \qquad (8)$$

$$\hat{m}(\boldsymbol{\delta'}) = \frac{\sum_{n=1}^{N}(\hat{k}(\boldsymbol{\delta'}) - L_n)}{\sum_{n=1}^{N} L_n\,(1-\hat{r}(\boldsymbol{\delta'}))^{\nu(n)}}, \qquad (9)$$

となる．ここで $\hat{A}$ と $\hat{B}$ はそれぞれ A と B の推定値である．自由パラメータベクトル $\boldsymbol{\delta'}$ は $0 < 1-\delta'_j\hat{r} < 1, (j = 1, 2, \ldots, p)$ の制約の下，当てはめ誤差最小化により以下のように決定する．

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } C(\boldsymbol{\delta'}) \\ &\text{subject to} \\ &\mathbf{0} < \mathbf{1} - \hat{r}(\boldsymbol{\delta'})\boldsymbol{\delta'} < \mathbf{1}, \end{aligned} \qquad (10)$$



(a) 成長曲線　(b) 散布図

図 1: 実データ

ここで

$$
\begin{aligned}
\mathbf{0} &= (0, 0, \ldots, 0) \qquad (11)\\
\mathbf{1} &= (1, 1, \ldots, 1). \qquad (12)
\end{aligned}
$$

である．$\hat{L}_n, (n = 1, 2, \ldots, N)$ は $\hat{k}(\boldsymbol{\delta}')$, $\hat{r}(\boldsymbol{\delta}')$ で記述されるため，当てはめ誤差は $\boldsymbol{\delta}'$ の関数とみなせる．

4　実データ検証

4.1　擬似的欠損データ

提案法の性能を確認するために実データによる評価を行った．使用した実データは出版された記事数の成長曲線データ [3] である．図 1a からこの実データはロジスティック曲線に良く適合していることがわかる．(L_n, Y_n) の散布図を図 1b に示す．決定係数はほぼ 1 である．

実データには欠損データが無いために擬似的に欠損データを作り出した．簡単のため欠損値はひとつのみとして，その欠損値を 2 番目のデータから最後から 2 番目のデータまで動かした．

4.2　比較

当てはめの性能評価尺度として C [4]

$$
C = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{X_i - \hat{L}_i}{X_i}\right)^2}, \qquad (13)
$$

を採用した．ここで N は欠損値を除いたデータサイズで，X_i は i 番目の実データの値，$\hat{L}_i$ は X_i の推定値である．欠損値を除いたすべてのデータを用いてパラメータ当てはめを行った．実データの当てはめ性能について提案法を従来法（削除法と補間法）と比較した．補間法については欠損値の周囲 4 つのデータを用いたラグランジュ補間を用いた．ただし 3 番目と N-2 番目のデータを欠損値とした場合には欠損値の周囲 3 つのデータを用いた．

図 2 に C の値を示す．提案法がどの欠損値の場合でも最も良い性能を示した．さらに提案法はどの欠損値であっても安定した精度を保ち，補間法に対して C の値を 0.0025 向上させている．

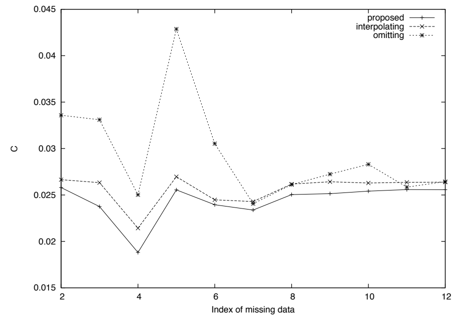


図 2: 当てはまり指標 C での比較

5　まとめ

本稿ではデータに欠損値がある場合のロジスティック曲線による予測法を提案した．提案法は厳密解を持つ不等間隔差分方程式を基にしている．そのため微分方程式の厳密解上の点をデータとして与えた場合，欠損値があっても完全に元のパラメータを復元することができる．従来法と比較すると，提案法は欠損値を除くすべてのデータを利用してパラメータ推定しており，無駄にデータを削除することがない．実データによる評価では，２つの従来法よりも当てはめ性能が勝っていた．今後はより多くの実データによる評価を行い提案法の持つ特性を明らかにしていく．

参考文献

[1] P.D. Allison, *Missing Data*, 2nd ed., Emerald Group Pub. Ltd., 2010.

[2] R. Hirota, *Lecture on discrete equations*, Saiensu-sha, 2000, (in Japanese).

[3] D. Kucharavy and R.D. Guio, *Application of logistic growth curve*, Procedia Engineering 131 (2015), pp. 280–290.

[4] D. Satoh and S. Yamada, *Discrete equations and software reliability growth models*, Proceedings of 12th International Symposium on Software Reliability Engineering (2001), pp. 176–184.

[5] J.F. Steffensen, *Interpolation*, Dover Publications, 1950.

分子動力学における共有結合ポテンシャル剛性行列の不定値性について

鷲尾 巧
所属（株）UT-Heart 研究所，東京大学　フューチャーセンター推進機構
e-mail：washio@ut-heart.com
久田 俊明
所属（株）UT-Heart 研究所

1　概要

分子動力学においては，共有結合ポテンシャルの大きな剛性が時間ステップ幅の制約となっている．そこで時間ステップ幅を大きくとるために共有結合長を拘束したり，剛性を陰的に考慮する準陰解法が考えられる．しかし，結合長が自然長よりも短い場合の剛性行列は動径に垂直な接線方向に負の固有値を有するのでその効果は限られる．本講演では，このような困難を克服する解法を考える．

2　準陰解法の構築とその安定性について

３次元空間内の n 個の粒子から構成される分子のランジュバン運動方程式

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{a}(t) = -\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big) + \boldsymbol{R}_t$$

を取り扱う．ここで $\boldsymbol{a}(t)$ と $\boldsymbol{v}(t)$ は加速度および速度ベクトルであり，$\boldsymbol{M}$ は質量行列，$\boldsymbol{G}$ は摩擦行列でともに対角行列である．$\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big)$ は粒子の座標 $\boldsymbol{r}(t)$ での骨格構造を特徴づける結合距離，結合角，二面角に関する局所的ポテンシャルおよびクーロンやファンデルワールスなどの非局所的ポテンシャルの勾配ベクトルとして定められた力，$\boldsymbol{R}_t$ は周りの溶媒分子の衝突を考慮したランダム力である．以下の議論は一般の時間積分法に適用できるが，ここでは上記運動方程式に対して，特に次のような時間軸に沿っての補間関係を成立させる場合を考える．

$$\begin{cases} \boldsymbol{M}\boldsymbol{a}(t+h) = -\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}(t+h) + \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big) + \boldsymbol{R}_{[t,t+h]} \\ \boldsymbol{v}(t+h) = \boldsymbol{v}(t) + \dfrac{h}{2}\big(\boldsymbol{a}(t) + \boldsymbol{a}(t+h)\big) \\ \boldsymbol{r}(t+h) = \boldsymbol{r}(t) + h\boldsymbol{v}(t+h) + \dfrac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t+h) \end{cases}$$

ここで $\boldsymbol{R}_{[t,t+h]}$ は $[t,t+h]$ 間のランダム力を積分したものである．具体的に時間積分を行う際は，以下のように速度の補間式を第一式に代入し，加速度，速度，位置ベクトルの順に更新すれば良い．

$$\begin{cases} \left(\boldsymbol{M} + \frac{h}{2}\boldsymbol{G}\right)\boldsymbol{a}(t+h) = \\ \quad -\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{v}(t) + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(t)\right) + \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big) + \boldsymbol{R}_{[t,t+h]} \\ \boldsymbol{v}(t+h) = \boldsymbol{v}(t) + \frac{h}{2}\big(\boldsymbol{a}(t) + \boldsymbol{a}(t+h)\big) \\ \boldsymbol{r}(t+h) = \boldsymbol{r}(t) + h\boldsymbol{v}(t+h) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t+h) \end{cases} \qquad (1)$$

上記解法の安定性について考えるために，式(１)第１式の力の項 $\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big)$ を $\boldsymbol{r}(t-h)$ での線形近似で置き換える．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t)\big) &\cong \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t-h)\big) + \boldsymbol{K}\big(\boldsymbol{r}(t)\big)\big(\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}(t-h)\big) \\ &= \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t-h)\big) + \boldsymbol{K}\big(\boldsymbol{r}(t)\big)\left(h\boldsymbol{v}(t) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t)\right) \\ &= \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{r}(t-h)\big) + h^2\boldsymbol{K}\big(\boldsymbol{r}(t)\big)\boldsymbol{a}(t) + \cdots \end{aligned}$$

ここで，$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{r}) = -\partial\boldsymbol{f}/\partial\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r})$ は剛性行列であり，最終式の…は $t-h$ での $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{v}$ で表される項である．式(１)において時刻 t と $t+h$ における関係が，$\boldsymbol{a} \to \boldsymbol{v} \to \boldsymbol{r}$ 順の前進代入式で表され，しかも $\boldsymbol{v}$ および $\boldsymbol{r}$ の t と $t+h$ での関係を表す対角項が単位行列であることを鑑みれば，$\boldsymbol{a}$ の t と $t+h$ での関係に着目することにより，この時間積分法が安定であるために h は以下の条件を満たさなければならないことがわかる．

$$h^2\,\lambda_{max}\left(\left(\boldsymbol{M} + \tfrac{h}{2}\boldsymbol{G}\right)^{-1}\boldsymbol{K}\right) < 1 \qquad (2)$$

ここでλ_{max}は括弧内行列の絶対値が最大の固有値を表す．式(２)は$\boldsymbol{K}$の絶対値が大きな固有値が時間刻み幅 h の制約になっていることを示す．分子動力学においては，一般的にファンデルワールス力など粒子間距離が異常に小さくなった場合に大きな剛性を示す非局所的な力を除けば，もっとも大きな固有モードは結合距離に関するポテンシャルから生成される．

$$\psi_B(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = \frac{k}{2}\|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\|^2 \tag{3}$$

上記ポテンシャルが生み出す振動が解析対象の物理現象の本質に関係のない場合には，時間刻み幅 h を大きくとるためにこのポテンシャルに関わる剛性を陰的に取り扱う解法が有用である．そこで式(１)第１式右辺 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}(t))$ を以下のようにψ_Bから生成される力のみを$t+h$での線形近似に置き換える．

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{f}_B(\boldsymbol{r}(t+h)) + \boldsymbol{f}_R(\boldsymbol{r}(t)) \\
&\cong \boldsymbol{f}_B(\boldsymbol{r}(t)) - \boldsymbol{K}_B(\boldsymbol{r}(t))(\boldsymbol{r}(t+h)-\boldsymbol{r}(t)) + \boldsymbol{f}_R(\boldsymbol{r}(t)) \\
&= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}(t)) - \boldsymbol{K}_B(\boldsymbol{r}(t))\left(h\boldsymbol{v}(t) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t) + h^2\boldsymbol{a}(t+h)\right)
\end{aligned}$$

ここで $\boldsymbol{f}_B = -\partial\psi_B/\partial\boldsymbol{r}$ ， $\boldsymbol{K}_B = -\partial\boldsymbol{f}_B/\partial\boldsymbol{r}$ ， $\boldsymbol{f}_R = \boldsymbol{f} - \boldsymbol{f}_B$である．すると式(１)第１式を以下で置き換えた次のような時間積分法が構築できる．

$$\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{M} + \frac{h}{2}\boldsymbol{G} + h^2\boldsymbol{K}_B\right)\boldsymbol{a}(t+h) \\
&\quad = -\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{v}(t) + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(t)\right) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}(t)) \\
&-\boldsymbol{K}_B(\boldsymbol{r}(t))\left(h\boldsymbol{v}(t) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t)\right) + \boldsymbol{R}_{[t,t+h]}
\end{aligned} \tag{4}$$

この時間積分法の安定性条件は，先ほどと同様の考察から以下のようになる．

$$h^2\,\lambda_{max}\left(\left(\boldsymbol{M} + \frac{h}{2}\boldsymbol{G} + h^2\boldsymbol{K}_B\right)^{-1}(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}_B)\right) < 1 \tag{5}$$

上式は，$\boldsymbol{K}_B$が逆行列側にあるために$\boldsymbol{K}$の中に含まれる$\boldsymbol{K}_B$が，もはやhの制約にはならないことを示している．

式(４)に基づき時間積分を実行する場合には，左辺が対角行列ではないので$\boldsymbol{K}_B$から決まる非ゼロパターンを持つ連立一次方程式を解く必要が生じる．しかしタンパク分子のようにその骨格構造が一次元のループがない分岐構造になっている場合には未知数を末端から並べることにより，変数消去時のフィルインを避けることができるので 計算量は O(n)で抑えられる．

このような準陰解法で注意しなければならないことは$\boldsymbol{K}_B$に負の固有値が含まれる場合にはかえって逆効果になることである．ψ_Bのヘシアン行列は距離 $d = \|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\|$ ，半径方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})/d$ およびそれに垂直な方向への射影 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{e}$ により次のように表される．

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2\psi_B}{\partial^2\boldsymbol{p}} & \dfrac{\partial^2\psi_B}{\partial\boldsymbol{p}\partial\boldsymbol{q}} \\ \dfrac{\partial^2\psi_B}{\partial\boldsymbol{q}\partial\boldsymbol{p}} & \dfrac{\partial^2\psi_B}{\partial^2\boldsymbol{q}} \end{bmatrix} &= k\begin{bmatrix} \boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{e} & -\boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{e} \\ -\boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{e} & \boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{e} \end{bmatrix} \\
&+ k\frac{d-d_0}{d}\begin{bmatrix} \boldsymbol{P} & -\boldsymbol{P} \\ -\boldsymbol{P} & \boldsymbol{P} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

ここで右辺第１項は１次元調和振動子と同じ動径方向の剛性でゼロ以外に正の固有値$2k$を 1 個有する．第２項は動径方向に垂直な面内の剛性であり，ゼロ以外に固有値$2k(d-d_0)/d$を２個有する．その符号は距離が自然長d_0より大きいか，それとも小さいかに応じて反転し，$d < d_0$の場合は負となる．本講演ではこのような負の固有モードから生じる不安定性に対処する方法について議論する．

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, hp180210)

粒子法を使用した電子状態計算

廣野 史明[1], 岩沢 美佐子[2], 狩野 覚[1], 善甫 康成[1]
法政大学 [1]情報科学部, [2]理工学部
e-mail: fumiaki.hirono.5k@stu.hosei.ac.jp

1 概要

粒子法はメッシュを用いない計算手法であるため計算点の配置の自由度が高い．粒子法を電子状態に適用した場合，高精度な計算が必要な領域へ集中的に計算点を配置することで効率的な計算を行うことが期待できる．粒子法の中でも比較的計算精度が高い Symmetric Smoothed Particle Hydrodynamics (SSPH) が開発されている[1,2]．これを用いて固有状態を算出することを行ってきた[3]．この場合，粒子の位置は任意である．一方で動的な時間依存の電子状態を解析するためには計算点である粒子を電子状態の変化とともに動かす必要がある．そこで我々は電子状態を表す波動関数を Bohm 形式で記述することにより[4]，この課題を解決することができた．解析的な解がある単純な系での計算結果について報告する．

2 計算手法

電子状態計算に SSPH を用いて解析するとき，波動関数は積分形式で表現される．波動関数は次のような恒等式で表す．

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}') &= \int_\Omega \psi(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r} \\ &\simeq \int_\Omega \psi(\boldsymbol{r})W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',h)\,d\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{1}$$

この $\delta(\boldsymbol{r})$ は Kernel 関数 $W(\boldsymbol{r},h)=W(|\boldsymbol{r}|,h)$ として近似する．ここで h は smoothing length でありWの広がりを表す指標である．Kernel 関数としては，δ 関数的な性質があれば何でもよい．我々は数値計算上の負荷が少ない Wendland 関数を採用している[5]．

我々が用いている SSPH では，式(1)とその k-次のモーメント式(2)について Taylor 展開を行う．そうすると$MD=P$ の形で表される 1 次連立方程式となる．最終的に電子状態計算で必要になる $\psi,\nabla\psi,\nabla^2\psi$ などの項は $MD=P$を解きDを求めればよい．波動関数に合わせ粒子を動的に配置する場合，時間依存の Schrödinger 方程式を$\psi(\boldsymbol{r},t)=R(\boldsymbol{r},t)\exp[iS(\boldsymbol{r},t)/\hbar]$ の Bohm 形式で表すと，次のような Hamilton–Jacobi の運動方程式と連続の式が得られる．連続の式により粒子について Lagrange 描像での解析が可能になる．

$$\begin{aligned}&\int_\Omega (\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)^k\psi(\boldsymbol{r})W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i,h)\,d\boldsymbol{r} \\ &\simeq \sum_{l=0}^{m}\left(\int_\Omega (\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)^{k+l}W\,d\boldsymbol{r}\right)\left(\frac{1}{l!}\frac{\partial^l\psi}{\partial\boldsymbol{r}^l}\bigg|_{r_i}\right) \\ &\qquad (k=0,1,\ldots,m)\end{aligned} \tag{2}$$

$$-\frac{\partial S(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\nabla}S)^2+V(\boldsymbol{r},t)+Q(\boldsymbol{r},t) \tag{3}$$

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho\frac{1}{m}\boldsymbol{\nabla}S\right)=0 \tag{4}$$

ここで Q は量子ポテンシャルであり次式で表され量子効果を与えるものである．

$$Q=-\frac{1}{2m}\frac{\boldsymbol{\nabla}^2R(\boldsymbol{r},t)}{R(\boldsymbol{r},t)} \tag{5}$$

3 結果と考察

粒子法の効果が良くわかる2次元調和ポテンシャル上での波束の運動と，波束の広がりと干渉が端的にわかる単純な系である二重スリットについて波束の動的な解析を行った．これらは何れも解析的な解が良く知られており[6]，精度の確認が容易である．

図1は2次元調和ポテンシャル $V=(x^2+y^2)/2$ に基底状態の Gaussian 波束 $\psi=\exp[-(x^2+y^2)/2]$を置き，初期の波束に初速度を与え時間発展をさせ、その動的な解析を行ったものである．計算領域に粒子を配置し，そこでの波束の様子を動的に観測できる．それ以外に電子状態を計算する粒子（計算点）はない．

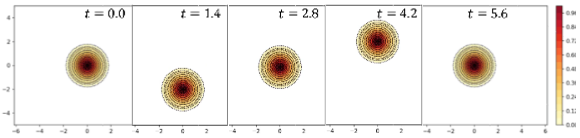


図1. 粒子の分布とGaussian 波束の振動.

Gaussianが変形することなく十分な時間にわたり時間発展を行うことが可能となった．粒子を等間隔な直交メッシュ位置に配置しても，またランダムに配置しても時間発展を行うことが可能であった．波束の移動に従って粒子が移動していくので，計算上の精度にも問題が生じない．これは粒子配置に制約がないという粒子法の特徴によるものである．これらの結果は解析解と非常によく一致している．

図2 は二重スリットによる波束の干渉を粒子法で解析したものである．この系では二重スリットからは波源を同一とするGaussianがそれぞれ放出される．得られた電子密度と量子ポテンシャルの時間変化を解析解と比較したものである．解析解と非常によく一致していることがわかる．

この系は粒子法で表現する場合に非常に難しい例である．式(3)のポテンシャル V がなく，波束により生じる量子ポテンシャル Q のみが存在するからである．$R(\boldsymbol{r},t) \simeq 0$ となる場合 Q の計算が数値的に不安定となる．これを解決するために次の2つの手法を導入している．非常に大きな1つのGaussian波束とスリット放出

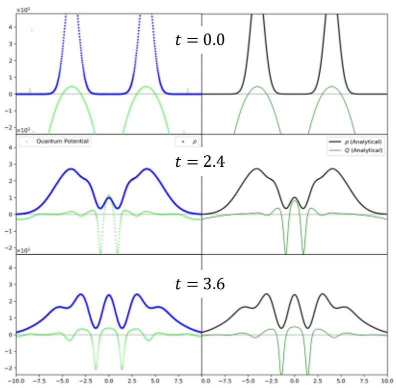


図 2. 二重スリットにおける干渉の様子．時刻 0.0, 2.4, 3.6 a.u.における密度分布(青，黒)と量子ポテンシャル(緑) の SSPH による計算(右) と解析解(左).

された波束との線形結合を用いて節のない波束をつくり，後で加えた波束を差引くことで数値的不安定性を取り除いた．次に粒子の分布が疎な場合は粒子の追加を行い，集中している場合には粒子の消去を動的に行う手法を導入した．これは粒子があくまで計算点であるという特徴を用いたものである．

4　まとめ

実空間における電子状態計算の空間離散化の手法として粒子法の1つであるSSPHを適用した．また波動関数をBohm形式で記述することで動的な波動関数の変化を粒子法に基づきLagrange描像で記述できることを示した．精度は解析解と比較して確認できた．また非常によく一致することが分かった．

謝辞

この研究は JSPS 科研費 16K05047 の助成支援を受けたものである.

参考文献

[1] R. C. Batra and G. M. Zhang, *SSPH basis functions for meshless methods, and comparison of solutions with strong and weak formulations*, Comput. Mech. **41**, 527 (2008)

[2] S. Sugimoto and Y. Zempo, *Smoothed Particle Method for Real-Space Electronic Structure Calculations*, J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012037 (2014)

[3] K. Kitayama, M. Toogoshi and Y. Zempo, *Device Simulation using Symmetric Smoothed Particle Hydrodynamics*, J. Phys.: Conf. Ser. **905**, 012011 (2017)

[4] C. L. Lopreore and R. E. Wyatt, *Quantum wave packet dynamics with trajectories*, Phys. Rev. Lett. **82**, 5190 (1999)

[5] H. Wendland, *Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree*, Adv. Comput. Math. **4**, 389 (1995)

[6] *e.g.*, L. I. Schiff, 3rd ed., “Quantum Mechanics”, McGraw Hill (1968)

遅延ピボットと内部反復改良を用いた大規模疎行列の高精度直接法

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 概要

疎行列の直接法では演算量を減らすオーダリングと LDU 分解の安定性を確保するピボット軸選択が重要である. Nested-dissection オーダリングに対角軸選択を用い, 分解途中に表れる極端に小さな対角成分を分離する遅延ピボットを導入することで並列計算が可能かつ安定したアルゴリズムが得られる. 条件数が非常に大きい場合は 4 倍精度演算が必要となるが, 本稿では反復改良を導入し, 4 倍精度による演算を削減する高速なアルゴリズムを提案する.

2 対角軸選択による LDU 分解

$N\times N$ 行列 A は偏微分方程式を有限体積法あるいは有限要素法で離散化して得られる大規模疎行列とする. 例えば N は 100 万自由度規模になることを想定している. 疎行列の係数は非零要素のみが倍精度浮動小数点実数データとして記憶されているものとする. この疎行列 A を Π を置換として,

$$A = \Pi^T LDU \Pi \qquad (1)$$

と分解する. ここで, D は対角行列, L, U はそれぞれ, 対角成分が 1 の下, 上三角行列である.

行列が強圧性を持つことは, 行列の対称部分が正定値であることと等価である

$$0 \leq (A\,v, v) = ((A+A^T)/2\,v, v) \quad \forall v \in \mathbb{R}^N .$$

V を $\mathbb{R}^N$ の部分空間とすると A は部分空間でも強圧性を持つため

$$u\in V \text{ が } \ (A\,u\,, v) = 0 \ \forall v \in V \text{ を満せば } u = 0$$

により, A を V に制限した行列は V に逆を持つことが分る. 対角軸選択付き LDU 分解では e_i $(1\leq i\leq N)$ を標準基底とすると, 部分空間 $V_m (1\leq m\leq N)$ はこの標準基底をある順序 $\{i_1, i_2, \cdots, i_m\}$ で並べたものになる

$$V_m = \mathrm{span}[e_{i_1}, e_{i_2}, \cdots, e_{i_m}]$$

数学的に厳密な誤差のない計算が行なわれる場合, 強圧的な行列 A は任意の対角軸選択を用いて LDU 分解を実行できる. しかしながら行列の条件数が大きく丸め誤差がある場合には, 適切な軸選択を用いる必要がある.

対角軸選択は, LDU 分解の過程で対角成分の絶対値が最大なものを順に選びだす手続である. $m-1$ ステップまでの LDU 分解が得られているとき, m ステップの計算は次のように行う. Π_{m-1} を $\{1,\cdots,N\}$ の添字から $m-1$ 個のエントリー $\{i_k\}$ を並べる置換とする. $\Pi_{m-1}(k) = i_k$ $(1\leq k\leq m-1)$ とする,

$$A = \Pi_{m-1}^T \begin{bmatrix} \widetilde{A_{11}} & \widetilde{A_{12}} \\ \widetilde{A_{21}} & \widetilde{A_{22}} \end{bmatrix} \Pi_{m-1}$$

$m-1$ ステップでの分解が完了し, $\widetilde{A_{11}} = L_{m-1} D_{m-1} U_{m-1}$ が得られ, Schur 補行列はランク $m-1$ 更新で計算されている.

$$S_{22} = \widetilde{A_{22}} - \widetilde{A_{21}}\widetilde{A_{11}}^{-1}\widetilde{A_{12}}$$

$\max_{1\leq k\leq N-m+1} |[S_{22}]_{k,k}|$ を達成する $k = i_m$ を選択し, $\Pi_m(m) = i_m$ と更新する. $\widetilde{a_{m,m}} = [\widetilde{A_{22}}]_{i_m,i_m}$ とするとき m ステップでの対角成分 $d_{m\,m}$ は Schur 補行列の成分として

$$d_{m,m} = \widetilde{a_{m,m}} - [\widetilde{A_{21}}]_{i_m,\rightarrow}\widetilde{A_{11}}^{-1}[\widetilde{A_{12}}]_{\downarrow,i_m} \qquad (2)$$

と求められている. ここで, $\rightarrow$ は列の添字 $1\leq k\leq m$ また $\downarrow$ は行の添字 $1\leq k\leq m$ を表わす. 行列 A が V_m で強圧性を持つことより $m\times m$ の行列

$$\begin{bmatrix} \widetilde{A_{11}} & [\widetilde{A_{12}}]_{\downarrow,i_m} \\ [\widetilde{A_{21}}]_{i_m,\rightarrow} & \widetilde{a_{m,m}} \end{bmatrix}$$

は逆を持つことがわかり, $\widetilde{a_{m,m}}$ の Schur 補行列の成分は $d_{m,m}\neq 0$ である. 下三角行列 L_m の m 行目は

$$[L_m]_{m,k} = [\widetilde{A_{21}}]_{i_m,k} U_{m-1}^{-1} D_{m-1}^{-1} \quad 1\leq k < m$$
$$[L_m]_{m,m} = 1$$

となる. 上三角行列の m 列目も同様である.

行列 A が強圧性を持たないとき, S_{22} のランクは A のランクに等しいが, 対角成分がすべて

0 になる可能性がある．この状況が発生した場合は Schur 補行列 S の絶対値最大の成分を行列の全てのエントリーから探索し, A が対称行列の場合は 2×2 ピボットを, 非対称行列の場合は非対称置換を用いる.

3　Nested-dissection 法と遅延ピボット

行列 A は疎行列であり, 偏微分方程式を起源としているため, 対象とする計算領域を領域分割により分割し, 複数のインデックスから同時に LDU 分解を開始することができる．Nested-dissection 法は George [1] によって提案された方法で, このマルチフロンタル分解を実現する. 計算領域を二つに分けると, 部分領域とその境界に分けられる．内部の人工境界の添字の集合を 1, 左右の部分領域の添字の集合を 2, 3 とすると行列 A は

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

と分解できる．それぞれの部分領域 2 と 3 に再び, 二分割を適用する．この分解を, 再帰的に l 回繰り返すと l レベルで, $\sum_{0\leq i<l}2^i=2^l-1$ のノードを持つ二分木が得られる.

マルチフロンタル分解は対角軸選択の探索範囲を狭め, LDU 分解を不安定化させる可能性がある．安定な分解のために次の遅延ピボットを導入する.

閾値 τ を設定し, 連続する $m-1$ と m ステップでの対角成分 (2) の比の絶対値が閾値以下になった場合,

$$|d_{m,m}|/|d_{m-1,m-1}|<\tau$$

そのブロック内の LDU 分解を中断して, 次の二分木のノードに進む．実問題ではこの閾値は $\tau=10^{-2}$ 程度に取る．最終ブロックの後に, 遅延した成分からなる Schur 補行列 $\widehat{S}$ を計算する．この $\widehat{S}$ は, それ以前の過程で部分行列の逆が得られていることから, そのランクは行列 A と同じである.

マルチロンタル分解に遅延ピボットを組合せて得られた LDU 分解は

$$A=\Pi^T\begin{bmatrix}\widehat{A_{11}} & \widehat{A_{12}}\\ \widehat{A_{21}} & \widehat{A_{22}}\end{bmatrix}\Pi,\ \widehat{S}=\widehat{A_{22}}-\widehat{A_{21}}\widehat{A}_{11}^{-1}\widehat{A_{12}}$$

となる．$\widehat{S}$ は遅延ピボットが適用された回数 K のサイズの正方行列である．行列 A が正則でない場合 $\widehat{S}$ は零行列である可能性がある．行列が数値的に零行列であるかを判断するアルゴリズム [2] を導入するため $\widehat{A_{11}}$ のエントリーの後ろを M 個分除き $N-M-K$ のサイズの正方行列をあらためて A_{11} と書く,

$$A=\Pi^T\begin{bmatrix}A_{11} & A_{12}\\ A_{21} & A_{22}\end{bmatrix}\Pi,\ S=A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}\,.$$

ここで得られた分解に関し次のことが期待される．A_{11} は LDU 分解の対角成分 D に $1/\tau$ の値以上のジャンプを持たないため, その条件数は穏やかである．一方 S は行列 A の条件数が大きい場合は, 大きな条件数を持つ．さらに A が特異な場合は, S も特異である.

4　4 倍精度演算と内部反復改良

A の条件数が大きく, 倍精度演算では精度が不足する場合は, 4 倍精度演算を用いて LDU 分解を実行する必要がある．`double-double` 型による演算を `C++` を用いて実装した `qd` ライブラリー [3] がある．Dissection 直接法コード [2] は `C++` のテンプレート機能を用いて記述しているため, `BLAS` ライブラリーの `dgemm` や `dtrsm` などを `double-double` データ型に拡張したものを準備すれば, 上記のマルチフロンタル法と遅延ピボットを組み合せたアルゴリズムを 4 倍精度で実行可能である．しかしながら, `double-double` 型は最新の Intel CPU で提供されている `FMA` 命令セットを用いても 20 倍以上の計算時間が必要である.

疎行列入力データは倍精度浮動小数点で準備されており, A_{11} の条件数は大きくなりすぎないと期待されるため, A_{11} の LDU 分解を倍精度で行い, $X=A_{11}^{-1}A_{12}$ の計算を反復改良によって, 4 倍精度に近い精度で実行できる．これにより S を高精度かつ高速に計算することができる．反復改良内部での残差の計算 $A_{12}-A_{11}X$ は 4 倍精度を用いることに注意する.

講演時に数値例を示す.

参考文献

[1] A. George, SINUM, 14 (1977) 161–179. doi:10.1137/0714011

[2] A. Suzuki, F.-X. Roux, IJNME, 100 (2014), 136–164, doi:10.1002/nme.4729

[3] Y. Hida et al., https://www.davidhbailey.com/dhbsoftware/qd-2.3.22.tar.gz

動的モード分解のノイズ除去の効果に対する統計解析

相島健助 [1]
[1] 法政大学
e-mail : aishima@hosei.ac.jp

1　概要

多次元時系列データに対する有力な解析手法として，動的モード分解 [1] が近年注目されている．データの特徴を捉え，ノイズの除去を行うことを目的に特異値分解が用いられるが，特異値分解の対象とするデータ行列の与え方はいくつか異なる方法がある．本発表では，ある種の行列の特異値分解を行う場合に着目し，統計解析により，サンプル数の増加に伴うノイズ除去の効果の定量的な評価を与え，動的モードへの収束を理論保証する．

以下，$r < n < m$ として $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\mathrm{Rank}(A) = r$ であり，$Y \approx AX$ とする．目的は，X, Y を既知として，未知の行列 A の非零固有値とそれに対応する固有ベクトルを効率よく計算することである．

2　標準的な動的モード分解の計算手法

標準的な動的モード分解では，まず次の特異値分解 $X = U\Sigma V^\top, U \in \mathbb{R}^{m\times n}, \Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}, V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を計算する．特異値分布から A の（数値）ランク r を推定し，U の第 1 列から第 r 列までのベクトルから成る行列を U_r とおく．同様に Σ の $r\times r$ 首座小行列を Σ_r，V の第 1 列から第 r 列までのベクトルから成る行列を V_r とおく．そして

$$U_r^\top Y V_r \Sigma_r^{-1} =: \widetilde{A} \in \mathbb{R}^{r\times r} \tag{1}$$

を計算し，$\widetilde{A}$ の固有値 $\widetilde{\lambda}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ と固有ベクトル $\widetilde{z}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ を求める．この $\widetilde{\lambda}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ が求めるべき A の近似固有値であり，対応する固有ベクトルは $U_r\widetilde{z}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ と計算する．

上記の技法は，固有値問題に対する射影法，より正確には Rayleigh-Ritz の技法になっており，U_r が射影に用いる部分空間を表す．そして $\widetilde{\lambda}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ と $U_r\widetilde{z}_i$ $(i = 1, \dots, r)$ は Ritz 値，Ritz ベクトルである．

計算量の観点から，$m \times m$ の大規模行列 A を陽に構成することなく r 個の固有値・固有ベクトルを推定できることが上記の技法の重要な長所である．

3　Total least squares 型の計算手法

既知の X と Y に微小摂動 ΔX と ΔY を加えることで，$Y + \Delta Y = A(X + \Delta X)$ が成立するような A を推定したい．これは Total least squares と呼ばれる次の最適化問題である．

$$\min_{A,\Delta X,\Delta Y} \|\Delta X\|_{\mathrm{F}}^2 + \|\Delta Y\|_{\mathrm{F}}^2$$
$$\text{s.t. } Y + \Delta Y = A(X + \Delta X)$$

一般に，この最適化問題は，X, $Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ において $2m \le n$ の場合を想定し，以下のように特異値分解を用いて解く．まず Z を次のように与え特異値分解を求める．

$$Z = \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix},\ Z = U\Sigma V^\top. \tag{2}$$

ここで

$$U = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{bmatrix},$$
$$U_{11}, U_{12}, U_{21}, U_{22} \in \mathbb{R}^{m\times m}$$

のように分割すると

$$A := U_{21}U_{11}^{-1} \tag{3}$$

が得られる．

しかしながら，本稿で考える問題設定ではデータ次元 m の方がサンプル数 n より大きい場合を考えており，また，A は低ランク行列であることを仮定するが，上記の方法はそのような条件に合致していない．

上の問題に対して，[2] では，何らかの方法で X と Y の像空間を近似する直交基底 $Q \in \mathbb{R}^{m\times r}$ が与えられることを仮定する．この Q を用いて $\widehat{X} = Q^\top X$, $\widehat{Y} = Q^\top Y$ を計算し，X, Y の代わりに $\widehat{X}, \widehat{Y}$ を用いることで，対応する $\widehat{A}$ は (1) と同様の $r \times r$ 行列となり目的の固有対が得られる．

一方，[3] では，データ次元 m の方がサンプル数 n より大きい場合も上の X, $Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ をそ

のまま用いて (2) の特異値分解を計算することが提案されている．そして（数値）ランク r を推定し，V の第 1 列から第 r 列までのベクトルから成る行列を V_r として $X \leftarrow XV_r$, $Y \leftarrow YV_r$ とし，第 2 節の標準的な動的モード分解の計算を行う．まとめると次のアルゴリズムとなる．

アルゴリズム 1 TLS に基づく [3] の手法.

入力: $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

1: $Z = [X^\top, Y^\top]^\top \in \mathbb{R}^{2m\times n}, Z =: U\Sigma V^\top$
2: $\widehat{X} = XV_r \in \mathbb{R}^{m\times r}, \widehat{Y} = YV_r \in \mathbb{R}^{m\times r}$
3: $\widehat{X} =: \widehat{U}\widehat{\Sigma}\widehat{V}^\top$
4: $\widehat{A} = \widehat{U}^\top\widehat{Y}\widehat{V}\widehat{\Sigma}^{-1} \in \mathbb{R}^{r\times r}$
5: $\widehat{A}$ の固有対 $(\widehat{\lambda}_i, \widehat{z}_i)$ $(i = 1, \ldots, r)$ を計算
6: $\widehat{U}\widehat{z}_i$ $(i = 1, \ldots, r)$：固有ベクトル計算

この手法はもはや Total least squares との厳密な対応関係が非自明であるが，実験的に動的モードの計算における有用性が示されている．本研究ではこの手法の理論解析を行う．

4 確率分布で与えられるノイズの影響

Total least squares を解くことで得られる A から，動的モード分解における目的の固有対を近似的に得られるかは別問題である．それは $Y \approx AX$ に対する数理的な問題設定に依存し，本稿で焦点を当てる問題設定を以下に示す．

今，観測である X, Y には確率分布で表される誤差が加わっていると仮定する．具体的には，$E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ の成分は平均 0 で分散および 4 次モーメントが有限の独立同一分布とし

$$X = \bar{X} + E,\ Y = \bar{Y} + F,\ A\bar{X} = \bar{Y}$$

とする．この問題設定の下で，[4] では，$\bar{X}$ のランクが m であるなら，Total least squares を解くことで推定される行列が，サンプル数 n を大きくすることで，真の A に収束することを保証する．この結果に基づき [3] はアルゴリズム 1 のノイズへの頑健性を主張するが，アルゴリズム中で $r < m$ となる場合，$\bar{X}$ のランクも m 未満であるため，上記の収束のための仮定は成立しない．

一方，純粋に Total least squares に対する理論研究として，[5] では $\bar{X}$ のランクが m より小さい場合について [4] の結果を拡張している．具体的には，この場合は解となる A は一意でなく集合となるが，(3) の逆行列を最小ノルム型一般逆行列に拡張して A を推定する．この時，推定される A は解集合の中で最小ノルム解に収束することを証明している．

しかしながら，上記の収束理論とアルゴリズム 1 の固有対との関係を示す既存の文献は見受けられない．また，動的モード分解における目的の固有対が上の最小ノルム解 A の固有対でよいかどうかは議論を要するはずである．

5 主定理

本研究では，動的モード分解におけるスナップショットの特徴を込みにしたノイズの確率モデルを考える．具体的には，時系列データの特徴から $\bar{X}$ の像空間も A の像空間に等しいため，この性質を最適化を行う際の制約とする．さらに，$n^{-1}\bar{X}\bar{X}^\top$ に関する仮定の下で，次の収束定理が成り立つ．

定理 1 $\bar{X}$ の像空間が A の像空間に等しいとする．さらに，$\lim_{n\to\infty} n^{-1}\bar{X}\bar{X}^\top$ はランク r の行列に収束すると仮定する．このときアルゴリズム *1* で計算される固有値・固有ベクトルは，サンプル数について $n \to \infty$ とすると A の非零固有値と対応する固有ベクトルに確率収束する．

参考文献

[1] P. Schmid, Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, J. Fluid Mech. 656 (2010), pp. 5–28

[2] S. Dawson, M. Hemati, M. Williams, C. Rowley, Characterizing and correcting for the effect of sensor noise in the dynamic mode decomposition, Exp. Fluids 57(42) (2016)

[3] M. Hemati, C. Rowley, E. Deem, L. Cattafesta, De-biasing the dynamic mode decomposition for applied Koopman spectral analysis of noisy datasets, Theor. Comput. Fluid Dyn. 31 (2017), pp. 349–368

[4] L. Gleser, Estimation in a multivariate ”errors in variables” regression model: large sample results, Ann. Statist. 9 (1981), no. 1, pp. 24–44

[5] S. Park, D. O’Leary, Implicitly-weighted total least squares, Linear Algebra Appl. 435 (2011), pp. 560–577

連結ピン組織構造に伝達長の小さい関係を追加するモデル

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

連結ピン組織構造 [1] は，上下関係のみで形成されるピラミッド組織構造 [2] に，同じ部署内の横関係を追加形成した組織構造である．ピラミッド組織構造が組織内メンバーを頂点としメンバー間関係を辺とした根付き木として表現されるのに対し，連結ピン組織構造は根付き木の兄弟（同じ親を持つ頂点）を隣接化した構造として表すことができる．

筆者らは，これらの組織構造に，組織全体の情報伝達効率を最大にする追加関係，すなわち根付き木全体の経路長を最小にする追加辺を求める問題に取り組んでおり，特に完全 K 分木を基本にした構造に対する辺追加モデルをいくつか提案してきた（例えば，文献 [3]）．

ここでは，完全 K 分木のピラミッド組織構造の全兄弟を隣接化した完全 K 分木型連結ピン組織構造を対象として，同じ階層の 2 メンバー間に 1 つの関係を追加したときの最適な関係追加位置を求めることを考える．すわなち，高さ H の完全 K 分木型連結ピン組織構造に対して，同じ深さ N の 2 頂点間に 1 つの辺を追加する．このモデルに対して筆者はすでに，完全 K 分木型連結ピン組織構造の各辺の長さと追加辺の長さが同じである場合について，最適な辺追加位置を求めている [4]．ただし，最適な辺追加位置は，辺を追加したときの完全 K 分木型連結ピン組織構造の総頂点間経路長（全頂点間の最短経路長の総和）を最小にすることにより求められる．

本研究では，組織メンバー間の元々の関係より，追加された関係の方が伝達長が小さい場合のモデルを考える．すなわち，完全 K 分木型連結ピン組織構造の各辺の長さ 1 に対して，追加辺の長さを $L(0 < L < 1)$ とし，上述のモデルと同様に高さ $H(H = 1, 2, \ldots)$ の完全 K 分木型連結ピン組織構造 $(K = 2, 3, \ldots)$ に対して，同じ深さ $N(N = 1, 2, \ldots, H)$ の 2 頂点間に 1 つの辺を追加するモデルを提案する．ここでは，辺追加前と比べて総頂点間経路長がどれだけ短縮されたか（以後，総頂点間短縮経路長と呼ぶ）を定式化する．

2 総頂点間短縮経路長の定式化

深さ N の 2 頂点間に追加する辺は，深さ $M(M = 0, 1, 2, \ldots, N-1)$ の頂点の異なる子の子孫同士に追加する N 通りある．ただし，子孫はその頂点自身も含む．深さ N の 2 頂点間のうち，深さ M の頂点の異なる子の子孫間に 1 辺を追加するときの総頂点間短縮経路長を $R_H(N, M)$ とする．また，$M = 0$，すなわち組織構造の根の異なる子の子孫間に辺を追加するときの総頂点間短縮経路長を $S_H(N)$ とする．このとき，深さ M の頂点の子孫同士以外は経路長が短縮されないことから，

$$R_H(N, M) = S_{H-M}(N - M) \qquad (1)$$

が成り立つ．以下では，$M = 0$ のときの総頂点間短縮経路長 $S_H(N)$ を定式化する．

辺追加により隣接化される深さ N の 2 頂点を v_0^X，v_0^Y とし，v_0^X，v_0^Y の祖先のうち深さが $N - k(k = 1, 2, \ldots, N-1)$ の頂点をそれぞれ v_k^X，v_k^Y とする．また，v_0^X，v_0^Y の子孫の集合をそれぞれ V_0^X，V_0^Y とする．v_k^X の子孫のうち v_k^X と v_{k-1}^X の子孫を除いた頂点の集合を V_k^X，v_k^Y の子孫のうち v_k^Y と v_{k-1}^Y の子孫を除いた頂点の集合を V_k^Y とする．

このとき，V_0^X の頂点と V_0^Y の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$A_H(N) = \left\{W(H - N)\right\}^2 (2N - L - 1) \quad (2)$$

と表される．ただし，$W(h)(h = 0, 1, 2, \ldots)$ は高さ h の完全 K 分木の頂点数を表す．次に，$v_k^X(k = 1, 2, \ldots, N-1)$ の頂点と V_0^Y の頂点，および $v_k^Y(k = 1, 2, \ldots, N-1)$ の頂点と V_0^X の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$B_H(N) = 2W(H - N) \sum_{i=1}^{N-1} (2i - L - 1), \quad (3)$$

V_0^X の頂点と $V_k^Y(k = 1, 2, \ldots, N-1)$ の頂点，および V_0^Y の頂点と $V_k^X(k = 1, 2, \ldots, N-1)$

の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$C_H(N) = 2W(H-N)\sum_{i=1}^{N-1}(K-1) \times W(H-i-1)(2i-L) \quad (4)$$

で与えられる．さらに，$v_k^X(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点と $v_k^Y(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$D_H(N) = \sum_{i=1}^{N-2}\sum_{j=1}^{i}(2j-L-1)\,, \quad (5)$$

$V_k^X(k = 1,2,\ldots,N-1)$ の頂点と $V_k^Y(k = 1,2,\ldots,N-1)$ の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$E_H(N) = \sum_{i=1}^{N-1}(K-1)W(H-i-1) \times \sum_{j=1}^{i}(K-1)W(H-N+i-j) \times (2j-L-1)\,, \quad (6)$$

$v_k^X(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点と $V_k^Y(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点，および $v_k^Y(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点と $V_k^X(k=1,2,\ldots,N-1)$ の頂点との間の短縮経路長の総和は，

$$F_H(N) = 2\sum_{i=1}^{N-2}(K-1)W(H-i-2) \times \sum_{j=1}^{i}(2j-L) \quad (7)$$

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，$M = 0$ のときの総頂点間短縮経路長 $S_H(N)$ は，

$$S_H(N) = A_H(N)+B_H(N)+C_H(N) + D_H(N)+E_H(N)+F_H(N) \quad (8)$$

と定式化される．

3 最適な辺追加位置

$M=0,1,2,\ldots,N-2$ について，

$$R_H(N,M+1)-R_H(N,M) < 0 \quad (9)$$

であることから，$M=0$ のとき $R_H(N,M)$ が最大となる．すなわち，高さ H の完全 K 分木型連結ピン組織構造の同じ深さ N の 2 頂点間に 1 辺を追加する場合，根の異なる子の子孫間に追加したときに総頂点間短縮経路長が最大となる．

$M=0$ のときの総頂点間短縮経路長 $S_H(N)$ を最大にする辺追加深さ N^* については，発表時に数値例を示す．

参考文献

[1] R. Likert and J. G. Likert, New Ways of Managing Conflict, McGraw-Hill, 1976.

[2] Y. Takahara and M. Mesarovic, Organization Structure: Cybernetic Systems Foundation, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2003.

[3] K. Sawada and R. Wilson, Models of adding relations to an organization structure of a complete K-ary tree, European Journal of Operational Research, Vol.174 (2006), pp.1491–1500.

[4] K. Sawada, Adding relations in the same level of a linking pin type organization structure, IAENG International Journal of Applied Mathematics, Vol.38 (2008), pp.20–25.

有限離散確率分布族の指数型測地線系の可積分性と平均化 Hebb 型学習方程式への応用

上野 嘉夫（うわの）
京都薬科大学 基礎科学系
e-mail : uwano@mb.kyoto-phu.ac.jp

1 はじめに

平均化 Hebb 型学習方程式 (AHLE) とは，$n-1$ 次元単体（境界除く）

$$\mathcal{S}_{n-1}=\left\{\xi\in\mathbf{R}^n\,|\,\xi_j>0,\,\sum_{k=1}^{n}\xi_k=1\right\} \tag{1}$$

上の 1 階常微分方程式

$$\dot{\xi}_j=2c_j\xi_j-2\left(\sum_{k=1}^{n}c_k\xi_k\right)\xi_j \tag{2}$$

$(j=1,\cdots,n)$ をいう [1]．講演者は [2] において，Nakamura による AHLE の勾配系表現 [1] の一般化に相当する勾配系を量子統計多様体 (QSM）上に構成した．これを行列平均化 Hebb 型学習方程式 (MAHLE) と呼ぶ．[2] に続く [3] で，MAHLE の全ての解軌道が QSM の指数型測地線であることを示した．

以上の経緯から，行列化以前の AHLE と古典情報幾何との関連性への興味が自然に生じる．本講演では以下の結果を報告する．

1) 有限離散確率分布族（以下「確率」省略）の指数型測地線を記述する，統計多様体の余接バンドル $T^*\mathcal{S}_{n-1}$ 上のハミルトン系が存在し，可積分で陽な解表示を持つ．
2) 上記ハミルトン系のハミルトン関数内の保存量を一部定数化して，AHLE の解を表現するハミルトン系が得られ，可積分性と求解性が上と同じ意味で成立する．
3) 有限離散分布族の指数型測地線は AHLE (の族) の解軌道であり，逆も成立する．

1)-3) を得るには，$T^*\mathcal{S}_{n-1}$ より高次元の余接バンドルから $T^*\mathcal{S}_{n-1}$ へのシンプレクティック簡約化が活用される．

2 シンプレクティック簡約化

$\mathbf{R}^n$ において，(デカルト) 座標成分がすべて正の点のなす集合 B_n を考える．B_n に $\mathbf{R}$-作用 $\psi_s:x\in B_n\mapsto e^s x\in B_n$ を与えると，B_n は $\mathcal{S}_{n-1}$ を底空間とし，

$$\mu:x\in B_n\mapsto(\sum_{k}^{n}x_k)^{-1}x\in\mathcal{S}_{n-1} \tag{3}$$

を射影とする主 $\mathbf{R}$-バンドルである．$T^*B_n\cong B_n\times\mathbf{R}^n$ に標準的シンプレクティック形式 $d\tilde{\sigma}=\sum_{k=1}^{n}dy_k\wedge dx_k$ を導入し，ψ_s 作用のシンプレクティックな持ち上げ $\tilde{\psi}_s:(x,y)\in T^*B_n\mapsto(e^s x,e^{-s}y)\in T^*B_n$ によって，$(T^*B_n,d\tilde{\sigma})$ を簡約化する．簡約化空間は，モーメント写像 $J(x,y)=x^Ty$ のレベル集合 $J^{-1}(0)$ の $\mathbf{R}$ 作用による商空間 $J^{-1}(0)/\mathbf{R}$ であり，写像

$$\nu:(x.y)\in J^{-1}(0)\mapsto \left(\Big(\sum_{k=1}^{n}x_k\Big)^{-1}x,\,\Big(\sum_{k=1}^{n}x_k\Big)y\right)\in T^*\mathcal{S}_{n-1} \tag{4}$$

によって，$T^*\mathcal{S}_{n-1}$ として実現される．本講演の場合，$T^*\mathcal{S}_{n-1}$ の標準シンプレクティック形式 $d\sigma$ が，簡約化形式として誘導される（cf. Kummer (1981), $\iota^*d\tilde{\sigma}=\nu^*d\sigma$，$\iota:J^{-1}(0)\hookrightarrow T^*B_n$）．

補題 1 (U-) $(T^*B_n,d\tilde{\sigma})$ は，$\mathbf{R}$-作用 $\tilde{\psi}_s$ により $(T^*\mathcal{S}_{n-1},d\sigma)$ に簡約化される．

3 指数型測地線のハミルトン形式

Nakamura [1] による，$\mathcal{S}_{n-1}$ の接バンドル上での AHLE のハミルトン形式を検討すると，$\tilde{K}(x,y)=\sum_{k=1}^{n}(x_ky_k)^2$ をハミルトン関数とする $(T^*B_n,d\tilde{\sigma},\tilde{K})$ の想起に到る．ハミルトン方程式は，$\dot{x}_j=2x_j^2y_j$, $\dot{y}_j=-2x_jy_j^2$ $(j=1,\ldots,n)$ で，可換な保存量 $\{x_jy_j\}_{j=1,\ldots,n}$ を許容し，直ちに

$$\begin{aligned}x_j(t)&=\exp(2tx_j(0)y_j(0))x_j(0)\\ y_j(t)&=\exp(-2tx_j(0)y_j(0))y_j(0)\end{aligned} \tag{5}$$

$(j=1,\cdots,n)$ と求解可能である．

定理 2 (U-) ハミルトン系 $(T^*B_n,d\tilde{\sigma},\tilde{K})$ は，可積分で陽な解表示を持つ．

ハミルトン系 $(T^*B_n, d\tilde{\sigma}, \tilde{K})$ は，$\mathbf{R}$-作用 $\tilde{\psi}_s$ で $(T^*\mathcal{S}_{n-1}, d\sigma)$ 上のハミルトン系に簡約化される．その系のハミルトン関数は，$K(\xi,\eta) = \sum_{k=1}^{n}(\xi_k\eta_k)^2$ で，ハミルトン方程式は，

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_j &= 2(\xi_j\eta_j)\xi_j - 2\left(\sum_{k=1}^{n}(\xi_k\eta_k)\xi_k\right)\xi_j \\ \dot{\eta}_j &= -2(\xi_j\eta_j)\eta_j - 2\left(\sum_{k=1}^{n}(\xi_k\eta_k)\xi_k\right)\eta_j \end{aligned} \tag{6}$$

$(j = 1,\cdots,n)$ で，$\{\xi_j\eta_j\}_{j=1,\cdots,n}$ を保存する．(6) の解は，$x(0)^T y(0) = 0$ を満たす (5) の解曲線を (4) の ν で射影した

$$\begin{aligned} \xi_j(t) &= S(t)^{-1}\exp\bigl(2t\xi_j(0)\eta_j(0)\bigr)\xi_j(0) \\ \eta_j(t) &= S(t)\exp\bigl(-2t\xi_j(0)\eta_j(0)\bigr)\eta_j(0) \end{aligned} \tag{7}$$

$(j = 1,\cdots,n)$ である．ただし，

$$S(t) = \sum_{k=1}^{n}\exp\bigl(2t\xi_k(0)\eta_k(0)\bigr)\xi_k(0).$$

さて，$\mathcal{S}_{n-1}$ は有限離散分布族の空間としての指数型座標系 $\zeta = (\zeta_\ell) = (\log(\xi_\ell/\xi_n))_{\ell=1,\cdots,n}$ を許容する [4]．指数型測地線とは，ζ に関する直線 $\zeta(t) = tu + \zeta(0)$ であって [4]，それは $\xi_j(0)\eta_j(0) = u_j - (\sum_{k=1}^{n-1}u_k)/n$ $(j = 1,\cdots, n-1)$，$\xi_n(0)\eta_n(0) = -(\sum_{k=1}^{n-1}u_k)/n$ のときの (7) の第 1 式と同値である．

定理 3 (U-) ハミルトン系 $(T^*\mathcal{S}_{n-1}, d\sigma, K)$ は有限離散分布族の指数型測地線を記述し，可積分で陽な解表示を持つ．

系 4 (U-) 任意の指数型測地線 (7) は $\xi_j(0)\eta_j(0) = c_j$ $(j = 1,\cdots,n)$ なる AHLE（式 (2)）を満たし，その逆も成り立つ．

$\tilde{K}(x,y)$ において，$(x_jy_j)^2$ を $c_jx_jy_j$ $(j = 1,\cdots,n, \sum_{k=1}^{n}c_k\ 0)$ に置換したハミルトン関数 $\tilde{K}_c(x,y)$ を持つ系も簡約化可能で，その簡約化系 $(T^*\mathcal{S}_{n-1}, d\sigma, K_c)$ のハミルトン方程式は，

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_j &= 2c_j\xi_j - 2\left(\sum_{k=1}^{n}c_k\xi_k\right)\xi_j \\ \dot{\eta}_j &= -2c_j\eta_j - 2\left(\sum_{k=1}^{n}c_k\xi_k\right)\eta_j \end{aligned} \tag{8}$$

$(j = 1,\cdots,n)$ となり，AHLE の解を実現する．

定理 5 (U-) ハミルトン系 $(T^*\mathcal{S}_{n-1}, d\sigma, K_c)$ は AHLE を記述し，可積分で陽な解表示を持つ．

4 おわりに

以上のように，有限離散分布族の指数型測地線は AHLE の族の解で尽くされ，逆も示せた．これらを記述するハミルトン系はいずれも可積分で陽な解表示を持つ．

今回構成した余接バンドル上のハミルトン形式は，Nakamura による接バンドル上での先行研究 [1] と比較して①QSM 上への行列化（MAHLE 化)），②（簡約化法の活用による）可積分性の議論，などを容易ならしめる特徴がある．また，古典統計多様体上のハミルトン解析は従来から展開されているが（例えば [5, 6]），いずれも統計多様体自体（必然的に偶数次元のみ）を相空間としている．本講演では相空間は統計多様体の余接バンドルであり，測地線が統計多様体上の 2 階常微分方程式にしたがうことと親和する自然な枠組みである．

参考文献

[1] Y.Nakamura, Neurodynamics and nonlinear integrable systems of Lax type, Japan J. Indust. Appl. Math., **11** (1994), 11-20.

[2] Y.Uwano, H.Yuya, A Hebb-Type Learning Equation on the Quantum Information Space -A Clue to a Fast Principal Component Analyzer, Far East Journal of Applied Mathematics, **47** (2010), 149-167.

[3] Y.Uwano, All the trajectories of an extended averaged Hebbian learning equation on the quantum state space are the e-geodesics, Mathematical Modeling and Geometry, **4** (2016), 19-33.

[4] S.Amari, H.Nagaoka, Methods of Information Geometry, AMS(Providence, RI), 2000.

[5] A.Fujiwara, S.Amari, Gradient systems in view of information geometry, Physica D **80** (1995), 317-327.

[6] N.Boumuki, T.Noda, On gradient and Hamiltonian flows on even dimensional duality spaces, Fundamental Journal of Mathematics and Mathematical Sciences **6** (2016), 51-66.

ネットワーク最適化問題の双対理論から導く min-plus 行列式の別表現

西田 優樹 [1], 渡邉 扇之介 [2], 渡邉 芳英 [3]
[1] 同志社大学大学院理工学研究科，[2] 小山工業高等専門学校，[3] 同志社大学理工学部
e-mail：cyjc1901@mail4.doshisha.ac.jp

1 概要

min-plus 代数とは，実数に無限大を加えた集合上に，加法 $\oplus$ として min をとる演算，乗法 $\otimes$ として和をとる演算を定義した冪等半環である．min-plus 代数はネットワーク上の最短経路問題を起源に持ち，さまざまなネットワーク最適化問題と深く関連していることが知られている [1]．そこで，本講演ではその中で min-plus 行列式と割り当て問題の対応に焦点を当てる．まず，割り当て問題を線形計画問題として定式化し，その双対問題を考えることで min-plus 行列式の別表現を与えることを試みる．次に，その結果を応用して min-plus 行列式の積についての性質を示す．min-plus 代数上の 2 つの正方行列について，2 つの積の行列式は一般には 2 つの行列式の積と等しくはならない．そこで，ネットワーク最適化問題の双対理論から得られる行列式の別表現を用いて，それらが等しくなるための必要十分条件を与える．

2 min-plus 代数

実数全体の集合 $\mathbb{R}$ に ∞ をつけ加えた集合を $\mathbb{R}_{\min}$ と表す．$a, b \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して加法 $\oplus$ と乗法 $\otimes$ を以下のように定義する：

$$a \oplus b = \min\{a, b\}, \quad a \otimes b = a + b.$$

加法の単位元は ∞，乗法の単位元は 0 である．また，加法の逆演算は存在せず，乗法の逆演算は $a \oslash b := a - b$ である．このとき $\mathbb{R}_{\min}$ は加法 $\oplus$ について冪等な半環になり，これを min-plus 代数という．

次に min-plus 代数上の行列を考える．$\mathbb{R}_{\min}$ の元を成分にもつ $m \times n$ 行列の全体を $\mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ と表す．特に $\mathbb{R}_{\min}^{n\times 1} = \mathbb{R}_{\min}^{n}$ とする．行列の和，積，スカラー倍については以下のように定義する：

1) $A = (a_{ij}), B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ に対して

$$A \oplus B = (a_{ij} \oplus b_{ij}).$$

2) $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{l\times m}, B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ に対して

$$A \otimes B = \left(\bigoplus_{k=1}^{m} a_{ik} \otimes b_{kj} \right).$$

3) $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}, c \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して

$$c \otimes A = (c \otimes a_{ij}).$$

3 min-plus 行列式と割り当て問題

min-plus 代数上の行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ に対して，行列式を

$$\det A = \bigoplus_{\sigma \in S_n} \bigotimes_{i=1}^{n} a_{i\sigma(i)}$$

で定義する．この値は，割り当て問題と呼ばれる組み合わせ最適化問題の最適値と等しいことが知られている [1]．2 つの頂点集合の組 $\{1, 2, \ldots, n\}$，$\{1', 2', \ldots, n'\}$ とそれらを結ぶ辺集合 $\{\{i, j'\} \mid a_{ij} \neq \infty\}$ からなる 2 部グラフを考え，辺 $\{i, j'\}$ の重みを a_{ij} で定義する．この 2 部グラフの重み最小完全マッチング，すなわちどの 2 つも端点を共有しない n 本の辺の集合で，重みの和が最小になるものを求める問題が割り当て問題である．この問題を整数計画問題として定式化すると以下のようになる．

$$\begin{aligned}
&\text{minimize} \quad \sum_{a_{ij} \neq \infty} a_{ij} x_{ij} \\
&\text{subject to} \\
&\quad \sum_{j=1}^{n} x_{ij} = 1 \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \\
&\quad \sum_{i=1}^{n} x_{ij} = 1 \quad (j = 1, 2 \ldots, n) \\
&\quad x_{ij} \geq 0, x_{ij} \in \mathbb{Z} \quad (i, j = 1, 2 \ldots, n)
\end{aligned} \tag{P1}$$

4 双対理論を用いた min-plus 行列式の別表現

上に挙げた問題 (P1) の変数 x_{ij} の整数制約を取り払って線形緩和し，さらにその双対問題

を考えると次のようになる．

$$\begin{aligned} &\text{maximize} \quad \sum_{i=1}^{n} u_i + \sum_{j=1}^{n} v_j \\ &\text{subject to} \quad u_i + v_j \le a_{ij} \quad (a_{ij} \ne \infty) \end{aligned} \tag{D1}$$

問題 (P1) の制約条件の係数行列が完全ユニモジュラーであること，および線形計画問題に対する双対定理より，問題 (P1) の目的関数の最小値と問題 (D1) の目的関数の最大値は等しくなる．そこで，問題 (D1) の制約条件を min-plus の立場で書き直すと

$$\boldsymbol{u} = A \otimes (-\boldsymbol{v})$$

となる．ただし，$\boldsymbol{u} = {}^t(u_1, u_2, \ldots, u_n)$，$\boldsymbol{v} = {}^t(v_1, v_2, \ldots, v_n)$ である．よって，$\boldsymbol{z} = -\boldsymbol{v}$ とおき，$\boldsymbol{z} = {}^t(z_1, z_2, \ldots, z_n)$ に対して

$$\rho(\boldsymbol{z}) = z_1 + z_2 + \cdots + z_n$$

とおけば，問題 (D1) は

$$\max_{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n} \rho(A \otimes \boldsymbol{z}) \oslash \rho(\boldsymbol{z})$$

という制約なしの問題に書き直すことができる．このことから，

$$\det A = \max_{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n} \rho(A \otimes \boldsymbol{z}) \oslash \rho(\boldsymbol{z})$$

という行列式の別表現を得る．Hook et al. [2] の特徴づけを用いれば，行列式を実現するベクトルの集合

$$\{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \det A = \rho(A \otimes \boldsymbol{z}) \oslash \rho(\boldsymbol{z})\}$$

が min-plus 線形空間であることを示すことができる．

5 min-plus 行列の積の行列式

min-plus 代数では，2 つの正方行列 $A, B \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ に対して

$$\det(A \otimes B) \le \det A \otimes \det B$$

が成り立つが，等号は一般には成り立たない．等号が成り立つためには，例えば「$\det(A \otimes B)$ における最小値が奇置換のみあるいは偶置換のみで実現される」という十分条件が知られている [3]．そこで，本講演では等号が成り立つための必要十分条件をネットワーク最適化問題の双対理論を用いて導く．

まず，$\det(A \otimes B)$ を求めるネットワーク最適化問題を次のように定式化する．

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad \sum_{a_{ij} \ne \infty} a_{ij} x_{ij} + \sum_{b_{jk} \ne \infty} b_{jk} y_{jk} \\ &\text{subject to} \\ &\quad -\sum_{j=1}^{n} x_{ij} = -1 \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \\ &\quad \sum_{i=1}^{n} x_{ij} - \sum_{k=1}^{n} y_{jk} = 0 \\ &\qquad\qquad (j = 1, 2 \ldots, n) \\ &\quad \sum_{j=1}^{n} y_{jk} = 1 \quad (k = 1, 2, \ldots, n) \\ &\quad x_{ij}, y_{jk} \ge 0, x_{ij}, y_{jk} \in \mathbb{Z} \\ &\qquad\qquad (i, j, k = 1, 2 \ldots, n) \end{aligned} \tag{P2}$$

問題 (P2) の変数 x_{ij}, y_{jk} の整数制約を取り払って線形緩和し，その双対問題を変形することで，等式

$$\det(A \otimes B) = \max_{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n} \rho(A \otimes \boldsymbol{z}) \otimes \rho({}^tB \otimes (-\boldsymbol{z}))$$

を得る．これと先ほどの行列式の別表現を比較することで，次の結果を得る．

定理 1 行列 $A, B \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ に対して

$$\det(A \otimes B) = \det A \otimes \det B$$

が成り立つための必要十分条件は，ある $\boldsymbol{z}^* \in \mathbb{R}^n$ があって

$$\begin{aligned} \det A &= \rho(A \otimes \boldsymbol{z}^*) \oslash \rho(\boldsymbol{z}^*) \\ \det B &= \rho({}^tB \otimes (-\boldsymbol{z}^*)) \oslash \rho(-\boldsymbol{z}^*) \end{aligned}$$

が成り立つことである．

参考文献

[1] P. Butkovič, Max-linear systems: Theory and Algorithms, Springer, 2010.

[2] J. Hook, J. Pestana, F. Tisseur and J. Hogg, Max-balanced Hungarian scalings, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 40 (2019), 320–346.

[3] G. J. Olsder and C. Roos, Cramer and Cayley-Hamilton in Max Algebra, Linear Algebra and its Applications, 101 (1988), 87–108.

双向臨界グラフの構成的特徴付け

喜多 奈々緒 [1]
[1] 東京理科大学
e-mail : kita@rs.tus.ac.jp

1 はじめに

双向グラフ（bidirected graph）[1] とは（無向）グラフの各枝の各端点に + または − の符号が割り当てられたものであり，これはダイグラフ（directed graph, digraph）および符号グラフ（signed graph）の共通の一般化である．双向グラフは Edmonds ら（1970）によってマッチングやネットワークフローの分野などにおける様々な種類の最適化問題を統一的にある整数線形計画問題として定式化するために導入された．その他双向グラフは nowhere-zero 整数流や完全単模行列の研究においても利用される．

ダイグラフの場合とアナロジカルに，双向グラフに対しても**有向歩道・小道・パス**（diwalk, ditrail, dipath）ひいては強連結性の概念を自然に定義することができるが，双向グラフの強連結性については基本的なことがまだ明らかになっていない．強連結性とはグラフ中の二点間の有向小道あるいはパスの存在を問うものであり，連結度ひいてはグラフ研究の基本となる．ダイグラフについては，**強連結分解**によって強連結構造が明らかにされている．しかし，双向グラフにおいてこれらに相当する成果は知られていない．

また，ダイグラフにおいては有向小道と有向パスによる強連結性は同等であるが，双向グラフにおいては同等でないため，それぞれの強連結性に対して別個の理論を構築する必要がある．

そこで本研究では，双向グラフにおける有向小道に関する強連結理論（以下，**小道強連結理論**）を構築することをねらいとし，**ラディアル**（radial）の概念の導入およびその構成的特徴付けを与える．無向グラフにおいて特定の条件を満たす枝の集合を一般に**因子**と呼び，さまざまな因子に関する研究分野は因子理論と呼ばれるグラフ理論の代表的な分野である．符号グラフの強連結分解も知られていないが，因子理論における成果である無向グラフの**カテドラル分解** [2] は，因子と符号グラフの対応関係を以って，特殊な符号グラフにおける強連結分解とみなせる．この構造において強連結性の記述に中心的な役割を果たすのが，**因子臨界グラフ**（factor-critical graph）と呼ばれるクラスである．また Lovász (1972) による古典的な定理である因子臨界グラフの構成的特徴付け [1] が導出において有用である．

本研究では因子臨界グラフの双向グラフへの一般化としてラディアルを定義し，その構成的特徴付けを与える．これは Lovász の定理の一般化に相当する．一方で有向グラフにおけるラディアルは**フローグラフ**（flowgraph）と呼ばれるものに相当する．有向グラフが特にフローグラフであるとは，ある一点 r までどの点からも有向パスで到達可能であることをいう．フローグラフの構成的特徴付けは，有向グラフの強連結分解と強連結グラフの耳分解による構成的特徴付けによって明らかである．

ラディアルも因子臨界グラフやフローグラフに類似の帰納的方法で以って構成的特徴付けがなされるが，これらよりはるかに複雑な構造を呈する．本研究では，ラディアルの緩和として**偽ラディアル**の概念を定義する．さらにこれらの部分クラスとして**絶対ラディアル**，**完全ラディアル**，**準完全ラディアル**，**線形ラディアル**，および**線形偽ラディアル**の四つのクラスを導入し，それぞれの構成的特徴付けを与える．（偽）ラディアルは因子臨界グラフとフローグラフの共通の一般化であるが，線形偽ラディアルおよび準完全ラディアルはそれぞれフローグラフ的および因子臨界グラフ的な互いに相反する構造の表現である．一般の偽ラディアルおよびラディアルは，それぞれ絶対ラディアルまたは完全・準完全・線形ラディアルから構築されるあるラディアルを初期値とした，線形偽ラディアルと準完全ラディアルの交互の逐次的な和として一意に分解あるいは構成できることが明らかになった．これらの成果により一般のラディアルおよび偽ラディアルの帰納的特徴付けが得られた．

2 ラディアルと偽ラディアル

双向グラフの枝 xy の両端 x と y の符号が α および β であるとき，これを (α,β)**-枝**と呼ぶ．

双向グラフにおいてその台無向グラフの歩道があたえられたとき，これが**有向歩道**であるとは，点 v が二つの枝 e と f に隣接するならば e と f に関する v の符号は異なることをいう．有向歩道において始点および終点の隣接する枝における符号がそれぞれ β および γ であるとき，これを (β, γ)-小道と呼ぶ．枝の重複がない有向歩道を**有向小道**，さらに点の重複がない有向小道を**有向パス**と呼ぶ．

以下 G を双向グラフ，r をその一点とする．

定義 1. G において，どの点 x からも r に至る $(\alpha, -\alpha)$-有向小道（または α で始まる有向小道）が存在するとき，G を r を**起点**とする **α-ラディアル** *(*または **α-偽ラディアル**）という．

さらに，起点 r の α-偽ラディアル G において，どの点から r に至る $-\alpha$-で始まる有向小道が存在する（または存在しない）とき，G は特に**絶対**（または**線形**）であるという．

いま G を起点 r の α-ラディアルとする．どの点 x からも r に至る $(-\alpha, -\alpha)$-有向小道が存在するとき，G は特に**完全**であるという．一方で，r と異なるどの点 x からも r に至る $(-\alpha, -\alpha)$-有向小道が存在するが，r を端点とするいかなる $(-\alpha, -\alpha)$-有向閉小道も存在しないとき，G は特に**準完全**であるという．

定理 1. G が r を起点とする絶対ラディアルであることと以下で定義される $\mathcal{C}^\alpha(r)$ の元であることは同値である．

(i) r を端点とする有向閉小道からなる双向グラフは $\mathcal{C}^\alpha(r)$ の元である．

(ii) G を $\mathcal{C}^\alpha(r)$ の元とし，P を G の 2 点を端点とし G に内素な有向小道，または最初と最後の枝のみが重複する有向歩道とする．このとき G と P の和は $\mathcal{C}^\alpha(r)$ の元である．

さらに G が特に完全 α-ラディアルであることと G が $\mathcal{C}^\alpha(r)$ の元として r を端点とする $(-\alpha, -\alpha)$-有向閉小道から構成されることは同値である．

定理 2. G が r を起点とする準完全 α-ラディアルであることと以下で定義される $\mathcal{D}^\alpha(r)$ であることは同値である．

(i) 起点 s の完全 β-ラディアル G（ただし $\beta \in \{+, -\}$）に対して，新しい点 r と枝 rs を $(-\alpha, \beta)$-枝として加えた双向グラフは $\mathcal{D}^\alpha(r)$ の元である．

(ii) $G \in \mathcal{D}^\alpha(r)$ であるとき，G の任意の点 x に対し枝 rx を r における符号を α として加えた双向グラフは $\mathcal{D}^\alpha(r)$ の元である．

(iii) r 以外の点を共有しないような $\mathcal{D}^\alpha(r)$ の任意の 2 元の和は $\mathcal{D}^\alpha(r)$ の元である．

定理 3. G が起点 r の線形 α-偽ラディアルであることは以下と同値である．G はあるダイグラフ D に対し新しい点 r を付加し，D の強連結分解の極大元に属する一点以上のいくつかの点を r と枝でつなぎ D 側を符号 α としたもの，あるいはこれにさらに任意に (α, α)-枝を付加したものである．ただし D の各有向枝を始点と終点がそれぞれ符号 α と $-\alpha$ の双向枝とみなす．

定理 4. G が起点 r の α-偽ラディアルであることと，以下を満たす $G_1, \ldots, G_k$（$k \geq 1$）から次のように構成されることは同値である．G_1 は起点 r（$:= r_1$）の絶対ラディアル，i（$i \geq 1$）が偶数（または奇数）のとき，G_i は起点 r_i の線形 α-偽ラディアル（または準完全 α-ラディアル）H_i に対し，r_{i-1} を $H_i - r_i$ 任意に同一視することで G_{i-1} と和をとったものとする．このとき G は G_k あるいは G_k に対してさらに H_i（i は偶数）の点と H_j（$j \geq 1$）の点を H_i 側端点が符号 α であるような枝で任意に繋いだものである．

これらの定理により，偽ラディアルの構成的特徴付けが明らかになったこととなる．詳細は割愛するが，偽ラディアルの構成において，G_1 がある条件を満たす α-ラディアル U であることが，G が特に α-ラディアルであることの必要十分条件となる．この U の構成的特徴付けも明らかとなっており，これにより一般のラディアルの構成的特徴付けが得られている．

謝辞　本研究は科学研究費補助金 18K13451 の補助を受けて行われた．

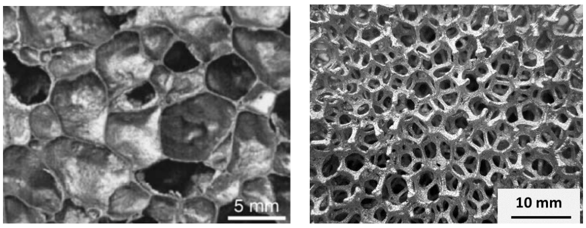
参考文献

[1] Schrijver, A. (2003). Combinatorial optimization: polyhedra and efficiency (Vol. 24). Springer Science & Business Media.

[2] Kita, N. (2017). New canonical decomposition in matching theory. arXiv preprint arXiv:1708.01051.

陰関数曲面による発泡金属のソリッドモデル生成

花岡 佑哉 [1], 伊東 拓 [2], 仲田 晋 [3], 渡辺 圭子 [3]
[1] 日本大学大学院, [2] 日本大学, [3] 立命館大学
e-mail : ciyu19013@g.nihon-u.ac.jp



(a) (b)

図 1: (a) Closed Cell [1] および，(b) Open Cell の発泡金属 [2]

1 はじめに

発泡金属とは，大量に気孔を含む金属であり，Closed Cell と Open Cell の２種類の形状をもつ (図 1(a)，(b) 参照)．この金属は軽量で高い衝撃吸収能力などを有することから，工学での応用が期待されている．それに伴い，発泡金属の性能を数値シミュレーションによって評価する必要性も高まり，同金属の数理モデルを生成する研究が進められている．

発泡金属のモデリングにおいて，同金属の特徴である，丸みを帯びた気孔形状を表現することは，現実の発泡金属の特性を再現する上で重要となる．先行研究 [3] では，物体表面を滑らかに表現できる陰関数曲面を導入することで，丸みを帯びた気孔形状をもつ発泡金属モデルを生成可能にした．しかしながら，この手法によって表現できるモデルの気孔形状は，Closed Cell のみであり，Open Cell の発泡金属の形状を表現できていない．本研究の目的は，簡易な形状を重ね合わせ，不要な面を取り除くことによって，Open Cell の発泡金属モデルを生成することである．

2 陰関数曲面の気孔形状表現

本研究では，発泡金属の気孔形状として球を採用する．すなわち，スカラー場

$$f(\boldsymbol{x}) = (x-a)^2 + (y-b)^2 + (z-c)^2 - r^2$$

を考え，陰関数曲面 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ によって気孔形状を表現する．ただし，(a, b, c) は球の中心座標，r は球の半径である．

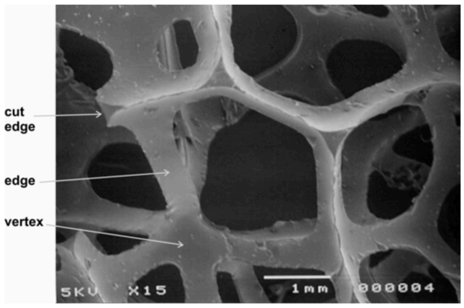


図 2: Open Cell の発泡金属における Plateau 境界の断面 (cut edge) と結合部 (vertex)[4]

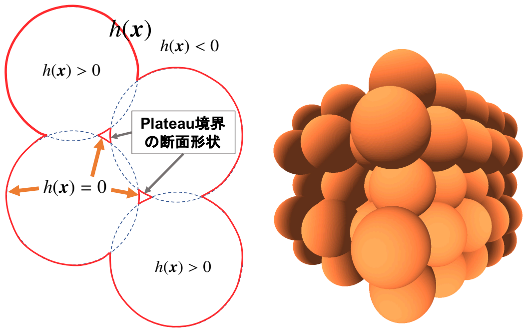
3 球の組み合わせによる Open Cell 形状の表現

Closed Cell の発泡金属は気孔同士が薄い壁面によって隔てられる．一方，Open Cell のものでは壁面は存在せず，図 2 に示すように edge によって構成される．edge は Plateau 境界と呼ばれる．また，同図の vertex は Plateau 境界同士の結合部であり，cut edge は Plateau 境界の断面を示しており，その形状は凹辺三角形になっている．

この形状を表現するために，本研究では，球を図 3(a) のように配置し，CSG (Constructive solid geometry)[5] によってスカラー場 $h(\boldsymbol{x})$ を生成する．同図の $h(\boldsymbol{x}) = 0$ において，四方を球の曲面に囲まれている部分は，生成されるモデルにおける Plateau 境界を表す曲面となる．図 3(b) は，図 3(a) の球の配置を３次元的に行った結果である．このモデルの内部形状は，図 4 のようになり，Plateau 境界とその結合部を再現していることが分かる．また，図 5 に図 4 の Plateau 境界の断面と結合部の拡大図を示した．同図より，Plateau 境界の断面形状は現実の発泡金属のものと近い形状になっていることが確認できる．

4 ソリッドモデルへの変換

生成した Open Cell の曲面モデル (図 4 参照) を FEM などの数値シミュレーションで扱うためには，生成されたモデルの Plateau 境界に相当する部分の内部を要素分割する必要がある．



(a) (b)

図 3: (a) Closed Cell 形状表現のための球体の配置図と CSG によって生成された $h(\boldsymbol{x})$ および，(b) (a) の 3 次元配置例

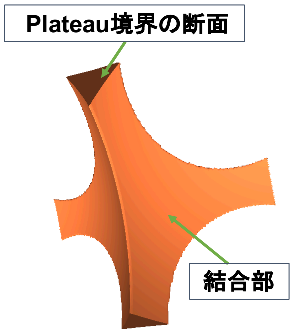


図 5: 生成したモデルにおける Plateau 境界の断面と結合部

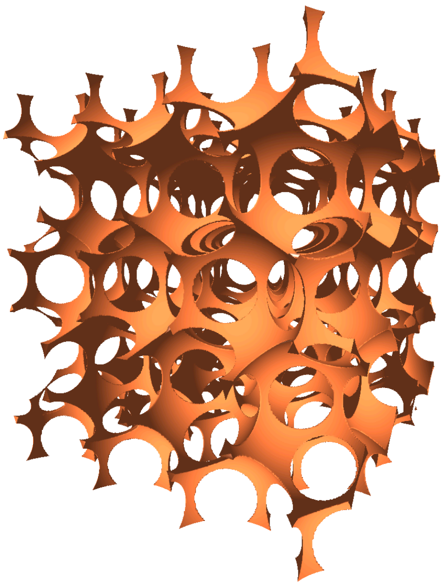


図 4: 図 3(b) の内部形状

本研究では，図 4 に示すモデルの陰関数曲面生成時に Marching Cubes 法 [6] を用いることで，曲面を構成する節点と各節点に付随する法線情報を取得している．これらの情報をもとに，法線情報付き節点に対する Delaunay 分割 [7] によって，曲面モデルからソリッドモデルを生成できる可能性がある．また，ソリッドモデルへの変換時に想定外の不要な面が生成された場合であっても，陰関数曲面の性質を利用してそれらの面を取り除けると考えられる [8]．

参考文献

[1] A. Kennedy, Porous Metals and Metal Foams Made from Powders, Powder Metallurgy, (2012), 33–46.

[2] O. Smorygo, V. Mikutski and V. Hancharou, Open-Cell Superalloy Foams via the Combined Electrolytic-Suspension Route, Euro PM Congress & Exhibition, (2017), 1–5.

[3] Y. Hanaoka, M. Nojiri, T. Itoh, S. Nakata and K. Watanabe, Three-Dimensional Shape Modelling of Metal Foam with Rounded Cells by Implicit Surfaces, JASSE, Vol. 6 (2019), 195–214.

[4] N. J. Mills, The High Strain Mechanical Response of the Wet Kelvin Model for Open-Cell Foams, International Journal of Solids and Structures, Vol. 44 (2007), 51–65.

[5] J. C. Hart, Sphere Tracing: a Geometric Method for the Antialiased Ray Tracing of Implicit Surfaces, The Visual Computer, Vol. 12 (1996), 527–545

[6] W. Lorensen and H. E. Cline, Marching Cubes: A High Resolution 3D Surface Construction Algorithm, ACM SIGGRAPH Computer Graphics, Vol. 21 (1987), 163–169.

[7] 山下優耶，森脇清明，谷口健男，3 次元体表面上の点座標が与えられた場合の形状生成法，Trans. on JSCES (2001), Paper no. 20010032.

[8] T. Itoh and Y. Kanda, Surface Reconstruction from 3D Scattered Points with Normals Using Both Delaunay Tetrahedralization and Implicit Function, in: Proc. of Asia Simulation Conference 2008, pp. 780–785, 2008.

蛍光顕微鏡によるDNA画像のための画像処理技術の開発

大谷寛明[1,2], 松元　朗[3]、生野壮一郎[3]、剣持貴弘[4]、中村浩章[1,5]、波多野雄治[6]、藤原　進[7]
[1]核融合科学研究所、[2]総合研究大学院大学、[3]東京工科大学、[4]同志社大学、[5]名古屋大学、
[6]富山大学、[7]京都工芸繊維大学
e-mail: ohtani.hiroaki@nifs.ac.jp

1　研究の背景

トリチウムを燃料とする核融合炉の研究を推進するうえで、トリチウムがもたらす健康被害を定量的に評価することは重要である。ここで懸念される健康被害とは、トリチウムのベータ線によるがんの発生や遺伝的影響等であり、放射線によるDNA損傷、主に二本鎖切断に起因する被害である。我々のグループでは、蛍光顕微鏡を用いたDNA一分子観察法を用いて、切断の速度、トリチウム濃度依存性、直接作用と間接作用の割合等を解析することで、トリチウムによるDNA二本鎖切断の機構を定量的に明らかにすることを目的に研究を進めている[1,2,3]。

DNA二本鎖切断の速度計測では、蛍光顕微鏡で撮影された画像からフリーソフトImageJ[4]によって解析を行い、DNAの長さを計測している。トリチウム水にDNAを浸してからの時間経過とともにDNA長さの分布の変化を観察することで、トリチウムによるDNA二本鎖の切断への影響を解析する[1]。このDNA長さはImage Jを使って手動で計測しているが、数多く存在するDNAについてそれぞれ長さの計測を手動で行うのは困難が伴う。そこで、本研究グループではDNA長さや二本鎖の切断回数を自動計測するためのソフトウェア開発を進めている。本発表ではこのソフトウェア開発の現状について報告する。

2　蛍光顕微鏡によるDNA画像

蛍光顕微鏡を用いたDNA一分子観察法では、トリチウム水にT4GT7バクテリオファージのDNAを添加して1日から2週間、静置する[1]。DNAの可視化は、蛍光シアニン色素であるYOYO-1を、DNAを含む溶液と混合して行う。これはYOYO-1がDNAに結合すると緑色蛍光強度が1000倍以上に増加するためである。DNA溶液の液滴をガラス基板に滴下したのち放射状に広げ、カバーガラスをかけて観察用試料とする。倒立型リサーチ顕微鏡を使用して、蛍光フィルタを通して光照射と観察を行い、超高感度カメラを用いて画像を取得する(図1)。

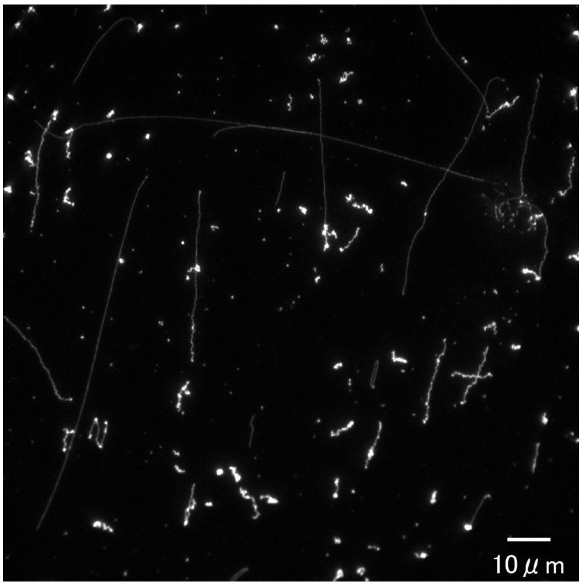


図1．蛍光顕微鏡によるDNAの画像。

3　画像処理及びDNA長さの自動計測

これまでに開発したソフトウェアでは、画像処理を以下の手順で進めている。

1. 原画像からのノイズを除去
2. DNA構造の強調
3. 自動閾値法による2値化およびDNAのセグメンテーション
4. 骨格線の抽出
5. DNA長さの計測

自動計測されたDNA長さとImage Jを用いて手動計測した値とを比較した際、長さが9μm以上であればよい一致を示したが、長さが9μm以下の場合にはややずれが大きくなった。また、DNAが重なっている場合の長さの自動計測は困難である。

現在、これらの困難を解決するために新たなソフトウェア開発を進め、DNAのセグメンテーションを行う際に、ディープラーニングを用いた手法を検討している。セグメンテーションでは、FastFCNを利用する[5]。FastFCNは発表時

点(2019 年 3 月 28 日)で最高の精度を持っていて、GPU を利用して 512x512 の画像に対して 37.56fps での処理を実現している手法である。

ディープラーニングを用いてセグメンテーションを行うため、学習用の画像が必要である。しかし、現在得られている蛍光顕微鏡の画像数は不十分なので、学習用画像の自動生成システムをUnity[6]を用いて開発した(図２)。この自動生成システムでは、背景のノイズや、DNA・共存物の出現割合、DNA 長さの分布、色合いや発光具合、セグメンテーションの色をパラメータによって調整可能となっている。

トリチウムによるDNA二本鎖切断への影響を調べるため、DNA 長さを計測する。長さの計測では、DNA は幅を持っていないと見なして、セグメンテーションをした領域に対して線をフィッティングし、線を構成するピクセル数と縮尺から長さの計算を行う。トリチウム水に浸す前の DNA 長さの平均$\langle L_0 \rangle$と後の長さ平均$\langle L \rangle$、DNA 分子１本あたりの二本鎖切断回数 n には、$\langle L \rangle \approx \langle L_0 \rangle/(n+1)$ の関係が仮定される[7]。

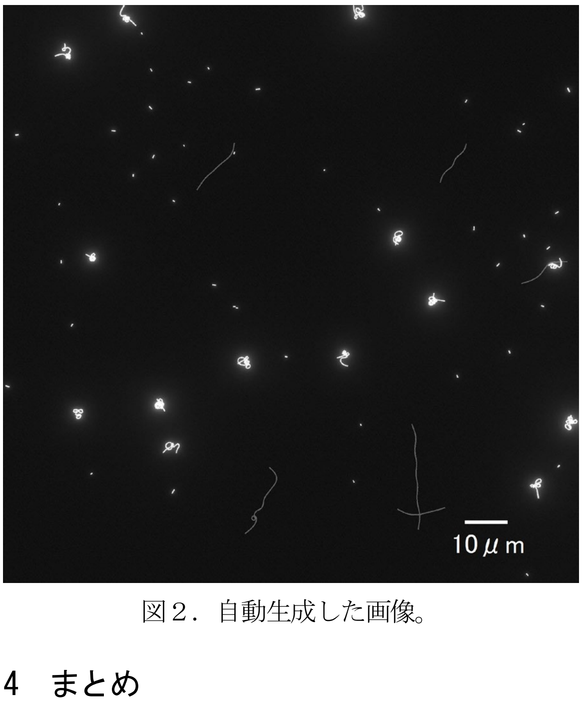


図２．自動生成した画像。

4 まとめ

蛍光顕微鏡によるDNA一分子観察法で得られた画像からDNA長さを計測するためのソフトウェア開発を進めている。

現在、ディープラーニングによるセグメンテーションを行うため、学習用画像の自動生成システムを開発し終えた。これら学習用画像を用いて、FastFCN の学習を行い、自動生成した画像による学習の精度検証を行う。検証を進めるとともに、DNA 長さの計測システムの開発も進めている。このシステム開発では解析結果の可視化を行い、セグメンテーションをどのように行ったか、領域に対してどのような線が得られたか、どの DNA の長さを計測したかなど、可視化結果を確認しながら、必要であれば手動で領域や計測する線を修正するような対話的なシステムとする予定である。

謝辞 ....
本研究は、大学共同利用機関法人自然科学研究機構分野融合型共同研究事業（NINS program No. 01111708）の助成及び、平成 30 年度自然科学研究機構分子科学研究所共同利用研究（課題番号：101)、2019 年度自然科学研究機構核融合科学研究所一般共同研究（NIFS19KKGS025）の支援を受けたものである。

参考文献

[1] Y. Hatano, Y. Konaka, H. Shimoyachi, T. Kenmotsu, Y. Oya, H. Nakamura, Fusion Engineering and Design, in press.
[2] S. Fujiwara, H. Nakamura, H. Li, H. Miyanishi, T. Mizuguchi, T. Yasunaga, T. Otsuka, Y. Hatano, S. Saito, Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol.6 (2019), 94-99.
[3] H. Li, S. Fujiwara, H. Nakamura, T. Mizuguchi, T. Yasunaga, A. Nakata, T. Miyazaki, T. Otsuka, T. Kenmotsu, Y. Hatano, S. Saito, Plasma and Fusion Research, in press.
[4] https://imagej.nih.gov/ij/
[5] https://arxiv.org/abs/1903.11816
[6] https://unity.com/
[7] Y.Yoshikawa, T.Mori, M.Suzuki, T.Imanaka, K.Yoshikawa, Chemical Physics Letters, 501 (2010), 146-151.

Visual Analytical System for Analyzing State-Transition in Dynamical Systems

WANG Ting[1], NATSUKAWA Hiroaki[2], KOYAMADA Koji[2]
[1]Graduate School of Engineering, Kyoto University, [2]Academic Center of Computing and Media Studies, Kyoto University
e-mail: wang.ting.22z@st.kyoto-u.ac.jp

1 Introduction

Time series data is collected in various fields, such as ecology, economy and so on. Several effective approaches were proposed to study the states of the dynamical system and conclude the general rules of dynamical systems. Attractor study is an effective approach to identify and predict the system states. The snapshot-to-point method is a method to identify the states of the whole dynamical system and understand the evolution of the dynamical system[1]. However, attractor construction from high dimensional data set is complex and is difficult to interpret the correspondence with variables and the shape of trajectory. Moreover, the snapshot-to-point method is focused on the evolution and state identification. It is hard to gain the general trend of state transition. What's more, it is also a challenge of comparison among dynamical systems.

Therefore, we identify system states from multiple time series data, and propose the state-transition graph that represents the transition of the state along with a trajectory to facilitate understanding about dynamical system states. State-transition graph is an abstract representation of data on the phase space. We refer to the snapshot-to-point method and cluster the resulting points. So, the main data process of one dynamic system is: Normalization, Vectorization, Dimension Reduction, Clustering and State Generation.

We cluster the resulting points to generate the states. After we gain information about the state, we can calculate the main information about the state and state transition. In the aspect of comparison, data processing is a little different. Considering that different new coordinate systems can be created after dimensional reduction of different data sets, we concatenate the dynamical systems before dimensional reduction. After dimensional reduction, we divide the resulting data sets and then implement clustering separately.

2 Approach and System Introduction

Attractor trajectory is a good way to investigate the dynamical system state. Investigating the dynamical system states and constructing the attractor trajectory directly is a way. To deal with the problem that it is difficult to investigate when the construction of attractor trajectory is in high dimension, we use snapshot-to-point method to reduce the dimensions. In the 2D trajectory graph after dimensional reduction, each point represents the state of each snapshot. The amount of states is too large to investigate, so we cluster the snapshots to simplify the system states and gain the migration information between these states. Because all the information in these states is compressed after dimensional reduction, we also need a way to investigate the original data and understand the main features of cluster states. Comparison is also an important and valid way to investigate the dynamical system state. So in all the described solutions, we also need to consider about how to compare dynamical system states more conveniently.

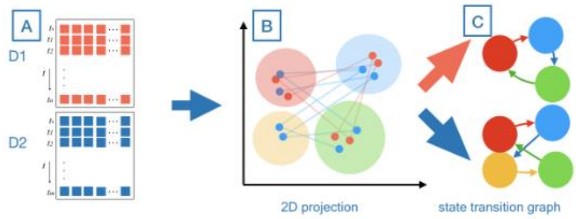


Fig. 1. Overview

The visual analytic approach consists of three steps: applying snapshot-to-point method[1], clustering and states generation, attractor interaction. In the first step, data should be normalized, vectorized and concatenated if necessary. Then the 2D projection graph is gained. In the next step, clustering and states generation step, points in the 2D projection graph are clustered as multiple states. We can use clustering algorithms or manual interaction to cluster the states. Then state-transition graph can be generated based on states information. The state of the dynamical system is difficult to define. In a dynamical system, the features of the state are not represented by only original time series data. The similar structure of dynamical system in specific timestamp can also be called a state. So for a better understanding of the states, we develop the attractor interaction of states and attractor manifold graph.

3 Case Study

For the evaluation of the proposed method, we have applied our approach to an artificial ecological data set[2].

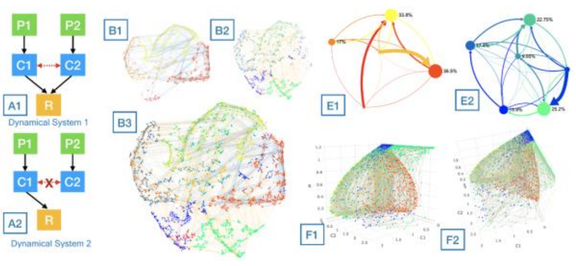


Fig. 2. Case Study

This data set is a classic linked food chains. The original food chains linked as A1. It consisting of two Consumer(C) C1 and C2, their respective predators(P) P1 and P2, their shared resource(R). So P1 feeds on C1 while P2 feeds on C2. Both C1 and C2 feeds on R. Because C1 and C2 prey upon one resource(R), C1 and C2 have a negative interaction. We call this classic food chains Dynamical System 1 (D1).

For comparison, there is another data set. Its food chains linked as A2. In this linked food chains, C1 and C2 prey on different resources. R is the only resource for C1. So, C1 and C2 are not represented a competitive relationship. For another word, the quantity of C1 will not influence the quantity of C2. This type of data set is called Dynamical System 2 (D2).

Before applying these data sets, we assume that we only know the food chains of D1 and is unknown about D2. We only know the name of five pieces of fish. First, we divide the state according to the position in coordinate. As we can see, there is a new state colored as green exists in D2, which is not gained in D1. Investigating the attractor manifold views F1 and F2, the green state represents the C1 and C2 are both in the sufficient condition. This condition is not existed in D1, because C1 and C2 are the negative relationship. In F1 and F2 we can see the trajectory of D1 (colored in warm colors) is convergence, especially in C1-C2, R-C2 coordinate. But we cannot identify this convergence in D2 (colored in cool colors). So we can conclude the C2 is not influenced by both C1 and R according to state-transition views and attractor view. The green state in D2 is the only new state compared with D1, which means other relationships are similar to D1. So we can speculate the food chains of D2 according to D1, and the conclusion is satisfied.

Reference

[1] S. van den Elzen, D. Holten, J. Blaas, and J. J. van Wijk. Reducing snapshots to points: A visual analytics approach to dynamic network exploration. IEEE transactions on visualization and computer graphics, 22(1):1-10, 2016.
[2] D. M. Post, M. E. Conners, and D. S. Goldberg. Prey preference by a top predator and the stability of linked food chains. Ecology, 81(1):8-14, 2000.

Visualization of the magnetic field lines in a large helical device

Hu Kunqi[1], Koyamada Koji[1], Ohtani Hiroaki[2]
[1]Kyoto University, [2]National Institute for Fusion Science
e-mail: rooomfox@yahoo.co.jp

1 Introduction

Using the magnetic fields to confine the hot fusion fuel in the form of a plasma can realize controlled nuclear fusion, which is one of the non-pollution energy sources. A device called Force Free Helical Reactor (FFHR) [1], which uses helical coils to generate a magnetic trap, is being designed by the National Institute for Fusion Science (NIFS) in Japan. Due to the complicated structure in FFHR, one of the processes is to predict the possible area the plasma will reach in this device for avoiding collision between the plasma and components. It is vital for the control of its operation and also for diagnostic purposes. Before the FFHR, there is a completed version, called the Large Helical Device (LHD) [1]. The existing data was observed from this one.

General approaches follow the same way by comparing the plasma flux profile with the sectional drawings of the device in a 2D graph [2-3]. For lack of efficiency and integrality, we need an overall perception of the plasma movement in three-dimensional space. In this article, we use the magnetic field lines traced by MGTRC code to obtain the Poincare plot in each certain degree from toroidal orientation. Then, we try using the Alpha Shape algorithm to obtain the outermost profile of each Poincare plot and arrange these profiles into an annulus to build a donut like 3D model. Finally, the polygon data will be transmitted into Shade 3D for further processing. If this approach is proved to be effective, it will be applied to into FFHR. This research is a collaborative research with NIFS. We will continue the optimization of this model according to the feedback from NIFS. The model will then be used for the design of FFHR or some scientific visualizations.

2 Preparation works

Some preparation works are introduced in this part. The data we use to build a 3D model is collected by the NIFS from the LHD. The NIFS has its way to record the paths of the magnetic field lines by the sensors around the reactor with the three-dimensional Variational Moments Equilibrium Code (VMEC code) [4] and MGTRC code [5]. Readers can find the detail in the paper accordingly. Each magnetic field line is described as the combination of line segments and the vertex coordinates are stored in a list. We will have all the lines like the following figure.

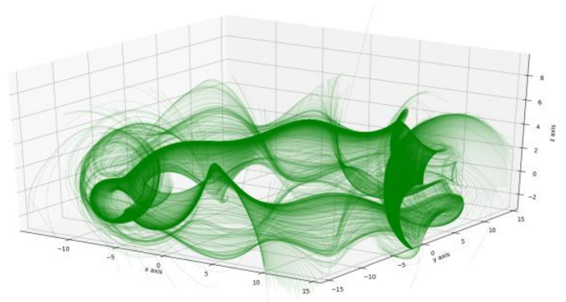


Fig. 1. The visualization of magnetic field lines

To check the collision between the plasma and components, we barely consider the lines that don't belong to the outermost surface, like the line surrounded by other lines. However, these streamlines go through between each other and it's impossible to check lines one by one to figure out whether they will serve as part of the outermost surface. Therefor, we cut the lines from the toroidal orientation in every 5 degrees and got the Poincare plots. The points belonging to the profile will then be extracted from all the points at each Poincare plots. Before we do that, we screen out those magnetic field lines with a length of less than half a circle but more than two circles at toroidal orientation. For the reason that those shorter lines basically won't have connections with plasma movement. They are usually the magnetic field lines generated between a coil and another coil. On the other hand, those longer lines can't provide prominent features at the Poincare plots. Figure 2 shows the Poincare plots at different toroidal angles.

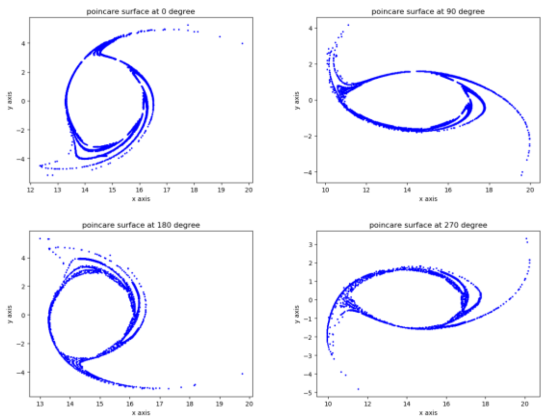


Fig. 2. Poincare plots at different toroidal angles in 45 90 180 and 270 degrees.

In next section, the main approach used to build a 3D model will be introduced.

3 Approach

As mentioned in the last section, the points belong to the profile of each Poincare plots need to be separated.

Here, we apply a searching method, the Alpha Shape with the Delaunay triangulation. An Alpha Shape, is a family of piecewise linear simple curves in the Euclidean plane associated with the shape of a finite set of points from all the points. Here, the set of points refers to the one we are eager to separate from the Poincare plots. This Alpha Shape avoid the situation that the line segments are too long to lose the feature of the profile by setting an Alpha Shape value. The relationship between the Alpha Shape and the Delaunay triangulation is that the latter one provides an optimal partition of the points, and make it easily to compare the candidate points which are represented as a triangle with the former one, the Alpha Shape value.

Fig 3 shows the comparison of the results with different Alpha Shape value. When the value equals 0, the profile we got is totally as the same as using Convex Hull algorithm, it’s unsatisfied as the two tailors can’t be recognized. When the value was changed into 0.5, the shape is close to what we need, and it start to recognize points of the innermost layer, it may be useful in our later research. However, the points at the end of one tailor are lost because the number of points in that area is too small. The value

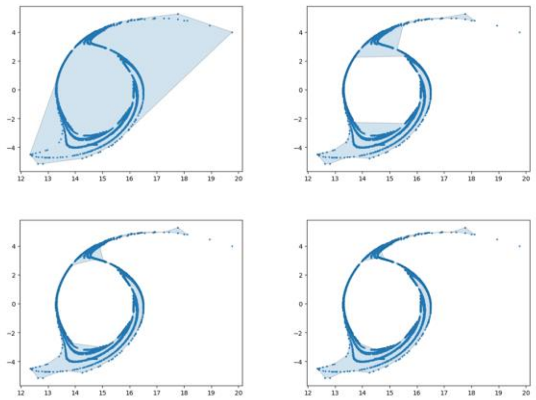


Fig. 3. The results of applying the Alpha Shape with the value of 0, 0.5, 1, 2.

continue being increased, the profile becomes rough, as the inner points are selected as the points which form the profile.

4 Summary

For now, the Alpha Shape seems to be a potential approach to find the profile of each Poincare plot. We still have the improvement of the approach. After that, we will connect the selected points of each plot into an annulus and try building a 3D model and visualizing it with the model of the reactor to check the collision.

References

[1] Sagara, Akio, et al. "Helical reactor design FFHR-d1 and c1 for steady-state DEMO." *Fusion Engineering and Design* 89.9-10 (2014): 2114-2120.

[2] Ogawa, Kunihiro, Mitsutaka Isobe, and Kazuo Toi. "Design study of a lost fast-ion probe in Large Helical Device." *Plasma and Fusion Research* 3 (2008): S1082-S1082.

[3] Suzuki, Yasuhiro, et al. "Effects of the Stochasticity on Transport Properties in High-β LHD." *Plasma and Fusion Research* 4 (2009): 036-036.

[4] Terranova, D., et al. "Self‐Organized Helical Equilibria in the RFX‐Mod Reversed Field Pinch." *Contributions to Plasma Physics* 50.8 (2010): 775-779.

[5] National Institute for Fusion Science (Japan) 2009 *LHD Experiment Technical Guide 2009*.

On pseudo-randomness of digraphs and ranking tournaments

佐竹 翔平 [1]

[1] 神戸大学 大学院システム情報学研究科 情報科学専攻

e-mail : 155x601x@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

Pseudo-randomness は, 所与のダイグラフがいかにランダムダイグラフに「近い」かを表す尺度である. 特に, 隣接行列が正規行列となる正則ダイグラフに関しては, pseudo-randomness をその隣接行列の固有値で表現できることが知られている. この pseudo-randomness に着目して, これまでグラフ理論の様々な問題に対するアプローチが行われてきた. 本講演では, トーナメント (完全グラフの向き付け) のランキング付けの問題への, 固有値に着目した pseudo-randomness の応用に関する結果を報告する.

2 ランダムダイグラフと pseudo-randomness

まず, $0 < p \le 1/2$ とする. **辺確率 p のランダムダイグラフ**は, 大雑把に言えば, 頂点集合 V とその各 2 点部分集合 $\{x, y\}$ に対して, (有向) 辺 (x, y), (y, x) または辺がない状態を, それぞれ確率 p, p, $1-2p$ で独立に選ぶことで得られる. ランダムダイグラフなどを用いる**確率的手法**は, グラフ理論や関連する組合せ論の幅広いトピックにおけるモダンな手法の 1 つとなっている (例えば, [1]). その利点の一つは, 所望または必要なダイグラフの確率を評価することで, その存在性を非構成的に証明できることである (一般に, 明示的な構成は非自明である).

一方で, **構成的**な存在証明を与えることも数学的に興味深く, しばしば重要な問題となる. そのような存在証明に対する有効なアプローチの一つとして, 次に述べるものがある. (以下では, 本講演で扱うダイグラフで示すが, 他のグラフ構造でも同様のアプローチがある.)

1 まずランダムダイグラフを用いて, 問題にアプローチする.
2 次に決定的なダイグラフに対して, それがいかにランダムダイグラフに「近い」かを測る適当な尺度に基づき, ダイグラフを構成する.

具体的にどのような尺度を適用すればよいかは問題に依存するが, これまで幅広く応用されている尺度の一つが, 本講演で扱う **pseudo-randomness** とよばれるものである. Pseudo-randomness は, (p, α)-jumbled という性質で説明される. この性質は, 本質的には, Thomason の論文 [2] で定義された.

定義 1 *D を n 頂点ダイグラフとする. このとき, 任意の互いに素な D の頂点部分集合 A, B に対して, 次を満たすとき, D は (p, α)-jumbled であるという.*

$$\left|e_D(A, B) - p|A||B|\right| \le \alpha \cdot \sqrt{|A||B|}.$$

ここで, $e_D(A, B)$ は A から B に向かう D の辺の数である.

この性質で, p に応じて α をどこまで小さく抑えられるかで, いかに辺確率 p のランダムダイグラフに近いかを表現できる. さらに, 辺確率 p の n 頂点ランダムダイグラフ $D(n, p)$ は, Chernoff の不等式から, 高い確率で $(p, O(\sqrt{np}))$-jumbled となる. よって, $(p, O(\sqrt{np}))$-jumbled である n 頂点ダイグラフの無限列は, ランダムダイグラフに近しいとみなせる.

また, 隣接行列が正規である正則グラフに関しては, (p, α)-jumbled という性質は, その固有値で表現できる. これは, ダイグラフに対する次の定理 (例えば, Vu [3]) から従う.

定理 2 *D を, 隣接行列の d 以外のすべての固有値の絶対値が λ 以下であるような, n 頂点 d-正則ダイグラフとする. このとき, 任意の互いに素な D の 頂点部分集合 A, B に対して,*

$$\left|e_D(A, B) - \frac{d}{n}|A||B|\right| \le \lambda \cdot \sqrt{|A||B|}.$$

よって, 次数 d が頂点数 n に依存するなら, $\lambda = O(\sqrt{d})$ であるような, 上記を満たす d-正則ダイグラフの無限列は, ランダムダイグラフに近しいとみなせる.

3 トーナメントのランキング付けの問題

トーナメントの頂点集合 V から自然数の集合 $\{1, 2, \ldots, n\}$ への全単射 π と辺 $e = (x, y)$ に

対して, $\pi(x) < \pi(y)$ であるならば, e は π に対して *consistent* であるという．トーナメント T に対して, $c(\pi, T)$ を π に対して consistent な辺の数とし, $c(T) := \max_\pi c(\pi, T)$ とおく．ここで, π は V から $\{1, 2, \ldots, n\}$ への全単射全体を動く．まず, 比較的簡単な議論から, すべての自然数 n と n 頂点トーナメント T に対して, $C(T) \geq \binom{n}{2}/2$ が成り立つ．また, T が n 頂点の推移的トーナメントならば, $C(T) = \binom{n}{2}$ となる．一方で, Spencer [4], [5] は $p = 1/2$ のランダムダイグラフ (ランダムトーナメント) を考えることで, ある定数 $c_1, c_2 > 0$ に存在して, 次が成り立つことを (非構成的に) 示した．

$$\left|\min_T C(T) - \frac{1}{2}\binom{n}{2}\right| = \Theta(n^{\frac{3}{2}}) \qquad (1)$$

ここで, T は n 頂点トーナメント全体を動く．

一方で, (1) を満たすようなトーナメントを明示的に構成することは可能だろうか．この問題は, Erdős-Moon [6] と Spencer [7] によって言及された．現在のところ, 著者の知る限り, 明示的な構成例は Alon-Spencer [1, Section 9.1] でしか与えられていない．実際には, 素数 $p \equiv 3 \pmod 4$ に対し, 頂点数 $n = p$ の Paley トーナメントとよばれる代数的に構成されるトーナメント T_n が次を満たすことが示された．

$$\left|C(T_n) - \frac{1}{2}\binom{n}{2}\right| = O(n^{\frac{3}{2}} \log n).$$

さらに, Alon [8] は, 最適化問題の 1 つであるトーナメントに対する Feedback arc set problem (FAST) が NP 困難であることを構成的に証明した．(確率的手法による証明は, その前に [9] で与えられた)．証明では, 上述の Paley トーナメントに関する結果が重要な役割を果たす．

4　主結果

まず, 次の定理は, Alon-Spencer [1, Section 9.1] の構成の一般化を与える．

定理 3 ([10], [11]) *素数 $p \equiv 3 \pmod 4$ に対し, 次を満たす頂点数 $n = p^3$ の互いに非同型な $2^{p+1}/p^4$ 個のトーナメントを構成できる．*

$$\left|C(T) - \frac{1}{2}\binom{n}{2}\right| = O(n^{\frac{3}{2}} \log n).$$

証明は, $\lambda = O(\sqrt{n})$ となる $(n-1)/2$-正則トーナメントの無限列を組合せデザイン論における結果を応用して構成したのち, Alon-Spencer [1] の議論の一部と定理 2, そして有限群論における結果を少し用いて行う．

次に, FAST の NP 困難性の Alon [8] による証明に着目し, 定理 3 の構成法や定理 2 を応用して, Alon の証明で用いられた Paley トーナメントに基づく構成手法を一般化する．

また, もし可能なら, 2 部的トーナメントに関しても議論したい．

謝辞　本研究は, JSPS 特別研究員奨励費 18J11282 の助成を受けています．

参考文献

[1] N. Alon, J. H. Spencer, The Probabilistic Method, Fourth edition, John Wiley & Sons, Inc., 2016.

[2] A. Thomason, Pseudorandom graphs, *Ann. Discrete Math.*, **33** (1987), 307–331.

[3] V. H. Vu, Sum-product estimates via directed expanders, *Math. Res. Lett.*, **15** (2008), no. 2, 375–388.

[4] J. Spencer, Optimal ranking of tournaments, *Networks* **1** (1971), 135–138.

[5] J. Spencer, Optimally ranking unrankable tournaments, *Period. Math. Hungar.* **11** (1980), no. 2, 131–144.

[6] P. Erdős, J. W. Moon, On sets of consistent arcs in a tournament, *Canad. Math. Bull.* **8** (1965), 269–271.

[7] J. Spencer, Probabilistic methods, *Graphs Combin.* **1** (1985), no. 4, 357–382.

[8] N. Alon, Ranking tournaments, *SIAM J. Discrete Math.* **20** (2006), no. 1, 137–142.

[9] N. Ailon, M. Charikar, A. Newman, Aggregating inconsistent information: ranking and clustering, *J. ACM*, 55 (2008), no. 5, Art. 23.

[10] S. Satake, On explicit random-like tournaments, arXiv:1901.10733.

[11] S. Satake, A constructive solution to a problem of ranking tournaments, To appear in Discrete Mathematics (arXiv:1902.10204).

非正な曲率をもつ束と半束のクラスについて

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 オーソスキーム複体

Brady–McCammond [2] は，幾何学的群論の動機から，階層的な半順序集合 $\mathcal{P}$ に対して，オーソスキーム複体 (orthoscheme complex) という距離空間 $K(\mathcal{P})$ を構成した．$K(\mathcal{P})$ は $\mathcal{P}$ のチェインの形式的凸結合の全体からなる．すなわち，$K(\mathcal{P})$ は $x = \sum_{k=0}^{m} \lambda_k p_k$, $p_0 \prec p_1 \prec \cdots \prec p_m$, $\sum_{k=0}^{m} \lambda_k = 1$，$\lambda_k \geq 0$ $(\forall k)$ となる元 x たちからなる．一つのチェインの凸結合全体を単体と呼ぶことにする．$K(\mathcal{P})$ に距離構造は以下のように導入される．極大な単体 C(長さ n) から $\mathbf{R}^n$ への写像 φ_C を

$$\varphi_C(x) := \sum_{k=1}^{n} \lambda_k(e_1+\cdots+e_k) \quad (x = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k p_k).$$

と定める．ここで単体 C は，極大チェイン $p_0 \prec p_1 \prec \cdots \prec p_n$ の凸結合とし，e_i は $\mathbf{R}^n$ の単位ベクトルである．そして，C 内の 2 点 x, y の距離 $d(x,y)$ を $\|\varphi_C(x) - \varphi_C(y)\|_2$ で定める．次に，$K(\mathcal{P})$ 内のパス $\gamma : [0,1] \to K(\mathcal{P})$ の長さ $d(\gamma)$ を

$$d(\gamma) := \sup \sum_{i=0}^{k-1} d(\gamma(t_i), \gamma(t_{i+1}))$$

と定義する．ここで sup は $\gamma(t_i), \gamma(t_{i+1})$ が同じ単体に属するような十分細かい区間分割 $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_k = 1$ $(k > 0)$ についてとる．そして，$K(\mathcal{P})$ の 2 点の距離をその 2 点を結ぶパスの長さの下限として定義する．$\mathcal{P}$ が階層的であることから，この定義は well-defined で，$K(\mathcal{P})$ は距離空間となり，$\mathcal{P}$ のオーソスキーム複体と呼ぶ．直感的にいうと，各極大チェインに対して頂点 $0, e_1, e_1+e_2, \ldots, e_1+e_2+\cdots+e_n$ を持つ $\mathbf{R}^n$ の単体を詰めて得られる空間が $K(\mathcal{P})$ である (図 1)．$\mathcal{P}$ の順序複体（order complex）の幾何学的実現に特殊な距離を入れたものともいえる．

我々は，$\mathcal{P}$ の組合せ構造と距離空間 $K(\mathcal{P})$ の幾何構造の関係に興味がある．

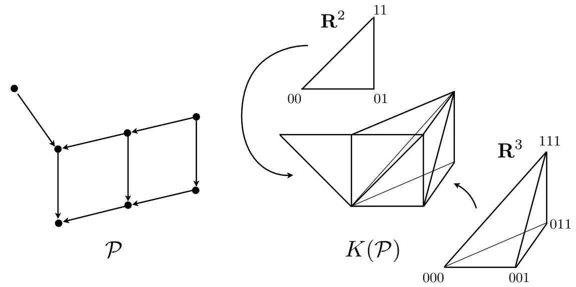


図 1. オーソスキーム複体

2 CAT(0) 空間

距離空間 (X,d) の測地線とは，パス $\gamma : [0,1] \to X$ であって

$$d(\gamma(s), \gamma(t)) = |s-t| d(\gamma(0), \gamma(1)) \ (s,t \in [0,1])$$

となるものである．任意の 2 点に対して，それらを結ぶ測地線が存在するとき，X を測地的距離空間という．

測地的距離空間 X には，次のようにして「非正な曲率をもつ」という性質— CAT(0) 性—が定義される [4]．X の 3 点 x, y, z に対し，

$$d(x,y) = \|\bar{x} - \bar{y}\|_2,$$
$$d(y,z) = \|\bar{y} - \bar{z}\|_2,$$
$$d(z,x) = \|\bar{z} - \bar{x}\|_2$$

を満たす $\mathbf{R}^2$ 上の 3 点 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ を考える．y, z を結ぶ測地線 γ の中点 $p = \gamma(1/2) \in X$ と $\bar{y}, \bar{z}$ の中点 $\bar{p} = (\bar{y} + \bar{z})/2 \in \mathbf{R}^2$ に対し，不等式

$$d(x,p) \leq \|\bar{x} - \bar{p}\|_2$$

を考える．測地的距離空間 X が CAT(0) であるとは，この不等式が任意の 3 点 x, y, z と y, z を結ぶ測地線について成り立つことをいう．詳しくは [1] を参照されたい．直感的には，X 上の三角形がユークリッド空間のそれに比べて「痩せている」ということである．ユークリッド空間，双曲空間，より一般に，非正曲率リーマン多様体は，CAT(0) で，(非多様体である）ツリーも CAT(0) 空間である．

階層的な半順序集合 $\mathcal{P}$ の極大チェインの長さが定数でバウンドされているとき，オーソ

スキーム複体 $K(\mathcal{P})$ は測地的距離空間となる．Brady–McCammond [2] は，

(P) どのような半順序集合 $\mathcal{P}$ ならばオーソスキーム複体 $K(\mathcal{P})$ が CAT(0) 空間になるか？

という問題を提起している．彼らは，$\mathcal{P}$ が，非交差分割束 (noncrossing partition lattice) であれば $K(\mathcal{P})$ が CAT(0) になるのではないか，と予想している．この予想が正しいと，幾何学的群論の未解決予想である「組み紐群は CAT(0) 群である」が導かれる．

本研究では，この予想を動機の一つとして問題 (P) を考察する．そのほかの応用数学における動機は講演で述べる．

3 既存結果と本研究の成果

代表的な束 (ラティス) のクラスについて，オーソスキーム複体の CAT(0) 性についての知られている結果を述べる．

定理 1 ([2]) $\mathcal{L}$ がランク n のブール束なら，$K(\mathcal{L})$ はユークリッド空間の超立方体 $[0,1]^n$ と等長であり，CAT(0) である．

これは自然に分配束に一般化される．

定理 2 ([3]) $\mathcal{L}$ がランク n の分配束なら，$K(\mathcal{L})$ はユークリッド空間の凸多面体

$$\{x \in [0,1]^n \mid x_i \geq x_j \ (i,j \in [n] : a_i \preceq a_j)\}$$

と等長であり，CAT(0) である．$a_1, a_2, \ldots, a_n$ は $\mathcal{L}$ のジョイン既約元である．

この多面体は，順序多面体（order polytope）と呼ばれるものである．上の例では，オーソスキーム複体がユークリッド空間内の凸集合として実現できた．分配束をさらに一般化したモジュラ束では，そうはならないが CAT(0) 性は成り立つ．

定理 3 ([3]) $\mathcal{L}$ がランク n のモジュラ束なら，$K(\mathcal{L})$ は CAT(0) である．

モジュラ束をさらに一般化した半モジュラ束では，CAT(0) 性は一般に成立しないことがわかっている（林興養，東京大学修士論文 2019 年）．

次に半束（セミラティス）の場合の既存結果について述べる．ブール半束 $\mathcal{L}$ とは，任意の主イデアルがブール束であって，さらに，フラッグ条件

$$a \vee b, b \vee c, c \vee a \in \mathcal{L} \Rightarrow a \vee b \vee c \in \mathcal{L} \quad (1)$$

を満たす半束である．このとき定理 1 によって，$K(\mathcal{L})$ は超立方体を貼り合わせた立方複体となるが，フラッグ条件が CAT(0) 立方複体の特徴付け [4] に対応しており次が得られる．

定理 4 ([4]) $\mathcal{L}$ がランク n のブール半束なら，$K(\mathcal{L})$ は CAT(0) である．

この結果は，定理 2 に対応して，メディアン半束へと一般化される．メディアン半束 $\mathcal{L}$ とは，任意の主イデアルが分配束であって，フラッグ条件 (1) を満たす半束である．[3] では，定理 3 に対応して，CAT(0) 性がモジュラ半束にも成り立つと予想している．モジュラ半束とは，任意の主イデアルがモジュラ束であって，フラッグ条件 (1) を満たす半束である．

本研究の主結果は，その予想を証明したことである．

定理 5 ([5]) $\mathcal{L}$ がランク n のモジュラ半束なら，$K(\mathcal{L})$ は CAT(0) である．

証明の概要は講演において述べる．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K00029 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M. Bridson and A. Haefliger, *Metric Spaces of Non-Positive Curvature*, Springer, Berlin, 1999.

[2] T. Brady and J. McCammond, Braids, posets and orthoschemes, *Algebraic & Geometric Topology* **10**, pp. 2277–2314, 2010.

[3] J. Chalopin, V. Chepoi, H. Hirai, and D. Osajda, Weakly modular graphs and nonpositive curvature, *Memoirs of the AMS*, to appear.

[4] M. Gromov, Hyperbolic groups, In: *Essays in Group Theory* (G. M. Gersten, ed.), pp. 75–263, Math. Sci. Res. Inst. Publ., 8, Springer, New York, 1987.

[5] H. Hirai, A Nonpositive Curvature Property of Modular Semilattices, (2019), `arXiv:1905.01449`.

ホッジランクを用いた選好意識データからのネットワーク構築

谷口 隆晴 [1,2], 小松瑞果 [1]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻，[2] JST さきがけ
e-mail : yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

近年，様々な観測データから構築されるネットワークに対する解析が注目されている．コミュニティ検出をはじめ，様々な解析手法が既に開発されており，ネットワークが与えられれば，その解析は容易になりつつある．しかし，一方，通常，解析対象となるネットワークは，何らかのデータに基づいて作成される．例えば，動物のインタラクションに関する研究においては，動物に取り付けたGPSなどを元にして，その行動を分析することで，ネットワークを構築することがある．また，金融ネットワーク解析などでも，一定期間ごとの取引量などからネットワークの構造を決定することがある．このような手法でネットワークを構築する場合，何らかの閾値を設定し，取引量などがその閾値を超えるかどうかで枝の有無を決めることが多い．しかし，この閾値の与え方によって，構築されるネットワークは大きく変化し，従って，その解析結果も変わってしまう．

これを踏まえ，本研究では，データからネットワークを構築する方法を検討する．本研究で考案する方法は，ホッジランク [1] と呼ばれる頂点に対する順位付け手法に基づく．ホッジランクは，組み合わせ的ホッジ理論に基づく順位付け手法であり，選好意識データなどから，可能な限り無矛盾な順位付けを行う方法である．ホッジランクの計算では，通常，予めネットワークの構造は与えられているものと仮定されているが，ここで，ホッジ理論が多様体上の関数と多様体の構造を関係づける理論であることに着目すると，組み合わせホッジ理論を用いた工夫により，データから，自然なネットワーク構造を推定する方法が構築できる可能性がある．本研究では，このような試みとして，選好意識データから，ホッジランクを利用してネットワーク構造を推定する方法を考案する．

2 ホッジランク

この節では，ホッジランク [1] について説明する．これは，特定の分野の映画や，旅行を計画しているときの旅行先など，いくつかの興味のある対象に対して，順位付けをする方法である．ただし，アンケートなどによって，順位付けしたい対象の集合から 2 つを選んで作成したペアのうち，いくつかについて，どちらがどの程度好ましいかという数字が得られているとする．例えば，A,B,C,D という 4 つの映画があり，このうち「A と B を比較すると A より B が 1 だけ好ましい」，「B と C を比較すると B より C が 2 だけ好ましい」などといったデータである．また，与えられるデータには，比較できないものが含まれている場合も考える．映画の例では，分野があまりにも違うため，どちらが好ましいか判断できない，などという状況が当てはまる．このようなデータを用いて大域的な順位付けを行いたいが，データによっては，矛盾無く順位を付けることが不可能な場合も存在する．例えば，上記の例に「A と C を比較すると，C より A が 1 だけ好ましい」というデータがあったとすると，全てのデータに矛盾なく順位付けをすることは不可能である．ホッジランクは，このような A, B, C のように，2 つを比較した場合の優劣が循環している場合に矛盾無く順位付けができなくなることに着目する．このような順位の循環があるかどうかは，優劣を有向グラフで表したときにサイクルが出来ているかどうかで判断できる．

順位付けしたい対象の集合を $\mathcal{V}$ とし，2 つの対象の向き付けられたペア $\langle v_1, v_2\rangle \in E_0$, $E_0 \subset \mathcal{V}\times\mathcal{V}$ に対して，v_2 より v_1 がどれだけ好ましいかを表す実数 $A_{\langle v_1,v_2\rangle}$ が与えられているとする．ただし，$A_{\langle v_1,v_2\rangle} = -A_{\langle v_2,v_1\rangle}$ が成り立つと仮定する．$\mathcal{V}$ と E_0 の組 $(\mathcal{V}, E_0)$ はデータに関連したネットワークを定めると考えることが出来る．$\mathcal{V}$ の各要素に大域的な順位付けをするために，$\mathcal{V}$ の各点 v_j に好ましさを表す実数 $\phi(v_j)$ を割り当てたい．ただし，$\phi(v_j)$ は，なるべく

$$A_{\langle v_1,v_2\rangle} = \phi(v_1) - \phi(v_2)$$

を満たすように定めたい．これは

$$\min_{\vec{\phi}} \|\mathcal{G}\vec{\phi} - \vec{a}\| \qquad (1)$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京) Copyright (C) 2019 一般社団法人日本応用数理学会

という形の最小化問題に帰着される．ただし，$\|\cdot\|$ は適当なノルムであり，$\vec{\phi}$ は $\phi(v_j)$ を並べたベクトルである．本研究では簡単のため $\|\cdot\|$ は 2 ノルムであるとする．$\mathcal{G}$ は大きさが $|E_0| \times |\mathcal{V}|$ である行列であり，$\langle v_i, v_j \rangle \in E_0$ に対応する行は，第 i 列が 1，第 j 列が -1，他は全て 0 とする．$|\mathcal{V}|$，$|E_0|$ は $\mathcal{V}$，E_0 の要素数を表す．$\mathcal{G}$ は，$\mathcal{V}$ 上の勾配を計算する，$\mathcal{V}$ から E_0 への線形写像と考えることができる．$\vec{a}$ は，大きさが $|E_0|$ であり，$\langle v_i, v_j \rangle \in E_0$ に対応する成分が $A_{\langle v_i, v_j \rangle}$ であるようなベクトルである．$\|\cdot\|$ が 2 ノルムであれば (1) は単純な最小 2 乗問題に帰着される．この問題の残渣は，前述のようなループの存在のため，大域的な順位付けがどの程度できないかを定量的に表している．

3 ホッジランクを用いたネットワーク構造推定

通常のホッジランクの計算では，評価データが得られている対象のペアの全てに枝を設定していたが，このような枝の定め方が必ずしも自然なものであるとは限らない．そこで，本研究では，ネットワーク構造も含めた最適化問題

$$\min_{E,\vec{\phi}} \|\mathcal{G}_E\vec{\phi} - \vec{a}_E\| \tag{2}$$

を考える．ただし，$\mathcal{G}_E$，$\vec{a}_E$ は $\mathcal{G}$, $\vec{a}$ の E への制限である．

ここでは，(2) の定める問題をヒューリスティックに解く．具体的には E を固定して $\vec{\phi}$ について最小化する問題

$$\min_{\vec{\phi}} \|\mathcal{G}_E\vec{\phi} - \vec{a}_E\| \tag{3}$$

と，そのようにして得られた $\vec{\phi}$ を固定して E について最小化する問題

$$\min_{E} \|\mathcal{G}_E\vec{\phi} - \vec{a}_E\| \tag{4}$$

を交互に解く．(3) は通常の最小 2 乗問題であり，正規方程式を解くことで最小化が可能である．(4) については，量子アニーリングを用いる．

量子アニーリングは，イジングモデルの基底状態を探索する方法として考案されたものであるが，近年では，組み合わせ最適化問題に対するヒューリスティック解法として注目されている [2]．量子アニーリングで組み合わせ最適化問題を解く際には，解きたい問題を対応するイジングモデルの基底状態探索問題に変換する．特に，イジングモデルのエネルギーは変数の 2 次関数として表されるため，解きたい問題をそのような問題に変換する必要がある．

本研究で扱う問題 (4) では，目的関数は，$\mathcal{G}$ や $\vec{a}$ の E への制限を通して E に依存する．E への制限は，基本的には射影に対応し，行列を用いて表現することが出来る．従って，(4) の代わりに

$$\min_{E} \|\mathcal{G}_E\vec{\phi} - \vec{a}_E\|^2 \tag{5}$$

を考えれば，目的関数は E に関する 2 次関数として表され，PyQUBO[3] などのソルバー等で素直に解くことが可能である．

数値実験の結果やその考察については発表時に報告する．

謝辞　本研究は JST さきがけ (JPMJPR16EC) の補助を受けている．

参考文献

[1] X. Jiang, L.H. Lim, Y. Yao and Y. Ye, Statistical Ranking and Combinatorial Hodge Theory, Mathematical Programming, Vol. 127 (2011), 203–244.

[2] 西森秀稔, 大関真之, 量子アニーリングの基礎, 共立出版, 2018.

[3] PyQUBO, Recruit Communications Co., Ltd , `https://pyqubo.readthedocs.io/en/latest/`.

FreeFEM 講習会：変分不等式の数値解法

鈴木 厚 [1], 高石 武史 [2]
[1] 大阪大学 サイバーメディアセンター, [2] 武蔵野大学
e-mail : [1] atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp, [2] taketaka@musashino-u.ac.jp

1 概要

変分不等式は弾性体の接触問題の数学的モデルに現れる．例えば, 弾性体が壁面境界にめり込まないように変位に不等式制約を課す問題などがある．FreeFEM のマニュアルをもとに, スカラー値の二階の楕円型方程式を例に, 連続問題での反復計算アルゴリズムと離散化後の制約付き最小化問題を解く IPOPT ソフトウェアを FreeFEM から利用する方法について解説する.

2 変分不等式と制約付き最小化問題

計算領域を 2 次元の有界領域 Ω とする変分不等式によって記述された問題を考える．Ω の境界を $\partial\Omega$, その境界で値が 0 となる Sobolev 空間を $H^1_0(\Omega)$ とする．L^2 内積と $H^1_0(\Omega)$ での双一次形式を

$$(f,v)=\int_\Omega f\,v\,,\quad a(u,v)=\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v\,,$$

また, エネルギーを表わす汎関数を

$$J(u)=\frac{1}{2}a(u,u)-(f,u)$$

とする．障害物 $g\in H^1(\Omega)$, $g\geq 0$ on $\partial\Omega$ を除く不等式制約を課す集合を

$$K=\left\{u\in H^1_0(\Omega)\,;\,u\leq g\right\}$$

とする．この集合は閉凸集合になっている．変分不等式による問題 [1] は "$\forall v\in K$ に対して

$$a(u,v-u)\geq(f,v-u) \tag{1}$$

を満す $u\in K$ を見付けよ" となる．この問題は次の最小化問題 "$\forall v\in K$ に対して

$$J(u)\leq J(v) \tag{2}$$

を満す $u\in K$ を見付けよ" と等価である．エネルギー汎関数を斉次境界条件を実現する全空間 $H^1_0(\Omega)$ で最小化する場合は変分等式が等価な問題となる．"$\forall v\in H^1_0(\Omega)$ に対して

$$a(u,v)=(f,v)$$

を満す $u\in H^1_0(\Omega)$ を見付けよ"．以下の説明のため, この解を f^* と表すことにする．まず変分不等式の問題 (1) の解が制約付き最小化問題 (2) を満すことを確認する．$H^1_0(\Omega)$ 上の対称な双一次形式 $a(\cdot,\cdot)$ は連続で強圧性を持つため, 内積として考えることができる.

$$\begin{aligned}0&\leq a(u,v-u)-a(f^*,v-u)\\&=a(u-f^*,v-f^*+f^*-u)\\&=-a(u-f^*,u-f^*)+a(u-f^*,v-f^*)\end{aligned}$$

であり, Schwarz の不等式を用いることで

$$a(u-f^*,u-f^*)^{\frac{1}{2}}\leq a(v-f^*,v-f^*)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

が得られる.

$$J(u)=\frac{1}{2}a(u-f^*,u-f^*)-\frac{1}{2}(f^*,f^*)$$

より, (1) の解は $J(v)$ を $v\in K$ で最小化していることが分る．(3) は変分不等式の解は $a(\cdot,\cdot)$ を内積として, 全空間での解 f^* を閉凸集合 K に正射影することで得られることを示している.

つぎに制約付き最小化問題 (2) の解が変分不等式の解になることを [2] に従い確認する．K は閉凸集合のため, 解 $u\in K$ と任意の $v\in K$ に対して $0\leq t\leq 1$ による内分点 $u+t(v-u)$ も K に含まれ,

$$J(u+t(v-u))\geq J(u)$$

の最小値は $t=0$ で達成される．これは

$$\begin{aligned}\Phi(t)=&J(u+t(v-u))-J(u)\\=&ta(u,v-u)-t(f,v-u)\\&+\frac{t^2}{2}a(v-u,v-u)\end{aligned}$$

とすると $\Phi'(0)\geq 0$ であることより, 変分不等式 (1) が得られる.

3 セミスムース Newton 法

凸集合 K は不等式条件で記述されてるため, より扱い易く表現したい．積分による制約条件

$$\int_\Omega \mu\max(0,u-g)=0\quad \forall\mu\in L^2(\Omega),\mu\geq 0$$

を用いて表すことはできるが，この条件は u に関して線形ではない．したがって，この積分による制約付最小化問題を Lagrange 乗数を介して扱うアルゴリズムを構築することは難しい．

Ω のある部分領域で，等式による制約条件 $u = g$ を課す $H_0^1(\Omega)$ の部分集合で最小化問題を解き，相補する Lagrange 乗数を求め，その値から次のアクティブな部分集合を決定する反復アルゴリズム [3] により (2) の解を構成できる．

アルゴリズム

$c > 0$ を定める．

$\mathcal{I}_0 = \Omega, \mathcal{A}_0 = \Omega \setminus \mathcal{I}_0 = \emptyset$

loop $k = 0, 1, \cdots$

$V^{k+1}(g) := \{v \in H_0^1(\Omega)\,;\, v = g \text{ on } \mathcal{A}_k\}$

$V^{k+1}(0) := \{v \in H_0^1(\Omega)\,;\, v = 0 \text{ on } \mathcal{A}_k\}$

$\forall v \in V^{k+1}(0)$ に対して

$a(u_{k+1}v) = (f, v)$

を満す $u_{k+1} \in V^{k+1}(g)$ を見付けよ (P).

$\forall v \in H_0^1(\Omega)$ に対して

$< \lambda_{k+1}, v >= a(u, v) - (f, v)$

を満す $\lambda_{k+1} \in H^{-1}(\Omega)$ を見付けよ．

$\mathcal{I}_{k+1} := \{x \in \Omega\,;\, \lambda_{k+1} + c(u_{k+1} - g) \leq 0\}$

$\mathcal{A}_{k+1} = \Omega \setminus \mathcal{I}_{k+1}$

loop end.

これは λ_k に関する反復アルゴリズムであり，セミスムース Newton 法と呼ばれる．

$V^{k+1}(0)$ に試験関数を取る部分集合での $J(u)$ の最小化問題 (P) は "$\forall v \in H_0^1(\Omega)$ に対して

$$a(u_{k+1}, v) + < \lambda_{k+1}, v >= (f, v)$$

を満す $u_{k+1} \in V^{k+1}(g)$ を見付けよ" となっており，$\mathcal{I}_k$ では $\lambda_{k+1} = 0$ が分かる．

4 FeeFEM による実装

$\Omega = (0,1)\times(0,1)$ で P1 要素を用いた FreeFEM による記述はつぎのようになる．

```
mesh Th=square(20, 20);
fespace Vh(Th, P1);
int n = Vh.ndof;
Vh uh;
Vh Ik, Ak;
real[int] rhs(n), Aii(n), Aiin(n), b(n);
real c = 10.0;
func f = 1.0; // external force
Vh g = 0.05;  // inequality constraint
real tgv = 1.0e+30; // for penalty
varf a(uh,vh) =
    int2d(Th)( dx(uh)*dx(vh) +
               dy(uh)*dy(vh) )
  + on(1,2,3,4,uh=0.0) ;
varf ff(uh, vh) =
    int2d(Th)( f * vh );
matrix A = a(Vh, Vh, tgv = tgv,
             solver = CG);
matrix AA = a(Vh, Vh);
Aii = A.diag;  // access to diagonal
rhs = ff(0, Vh);
Vh lambda = 0.0;
Ik = 1.0;
for(int iter = 0; iter < 100; ++iter)
{
  b = rhs;
  Ak = 1.0;
  Ak[] -= Ik[];       // complement set
  b = Ak[] .* g[];    // on active set
  b *= tgv;           // penlty method
  b += Ik[] .* rhs; // on inactive set
  Aiin = Ak[] *  tgv;
  Aiin += Ik[] .* Aii;
  A.diag = Aiin;
  set(A, solver = CG); // A:symmetric
  uh[] = A^-1 * b;
  lambda[] = AA * uh[]; // < > duality
  lambda[] -= rhs;
  Ik = (lambda + c * (uh - g)) <= 0.0;
}
```

$V^{k+1}(g)$ での解は $\mathcal{A}_k$ で値 g をとるが，これはペナルティー法を用いて $\mathcal{A}_k$ の節点で剛性行列の対角成分を大きな値 tgv=10^{30}，対応する右辺を tgv$\times g$ と設定することで実現している．最終行の I_{k+1} の更新は FreeFEM での論理型が C/C++ と同様に整数の 0 あるいは 1 であることを利用している．

5 IPOPT の利用

$\mathbb{R}^n$ での離散的な最小化問題を制約条件 V のもとで解く．$C \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $x_l, x_u \in \mathbb{R}^n$ を用いて

$$V = \{x \in \mathbb{R}^n\,;\, C\,x = 0,\ x_l \leq x \leq x_n\}$$

と構成されているものとする． IPOPT では $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ をこの集合 V で最小化する解を求めることができる．FreeFEM からは

$$f(x) = \frac{1}{2}(A\,x, x) - (b, x)$$

を構成する $n \times n$ 行列 A と $b \in \mathbb{R}^n$ を IPOPT に渡すことができる．

参考文献

[1] R. Glowinski, Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems, Springer 1984.

[2] D. Kinderlehrer, G. Stampacchia, An Introduction to Variational Inequalities and Their Applications, Acadmeic Press, 1980.

[3] K. Ito, K. Kunisch. M2AN, 37 (2003) 41–62, doi:10.1051/m2an:2003021

和型の max-plus 方程式の数理モデル

高橋 大輔
早稲田大学 理工学術院 応用数理学科
e-mail : daisuket@waseda.jp

1 ライフゲームの max-plus 拡張

空間パターンの時間発展を記述する 2 + 1 次元セルオートマトン (CA) のうち，時間変化が中央値と近傍の和に依存するようなタイプを考える．よく知られている例としてライフゲームがある．整数時刻 t における整数 2 次元座標 (i,j) の状態値を $u_{ij}^t \in \{0,1\}$ とし，(i,j) の周囲 8 近傍（Moore 近傍）の状態値の和を s_{ij}^t とする．このときライフゲームの時間発展則は

$$u_{ij}^{t+1} = \begin{cases} 1 & \begin{array}{l}(u_{ij}^t = 0 \ \&\ s_{ij}^t = 3 \\ \text{or } u_{ij}^t = 1 \ \&\ s_{ij}^t = 2,\, 3)\end{array} \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

で与えられる．この時間発展則を max-plus 方程式で表現し，状態を連続値 $u \in [0,1]$ に拡張することを考える．そのような方程式の候補として

$$\begin{aligned} u_{ij}^{t+1} = {} & \max(0, s_{ij}^t + u_{ij}^t - 2) \\ & - \max(0,\ s_{ij}^t + u_{ij}^t - 3) \\ & - \max(0,\ s_{ij}^t - 3) + \max(0,\ s_{ij}^t - 4) \end{aligned} \tag{1}$$

がある．(1) の右辺は $[0,1]$ の範囲の値しか取らないことが容易に示せるので，u の値域を最初から $[0,1]$ に閉じた範囲で考える．

(1) の特徴は，もし u の値を 0, 1 の 2 値に限定するとそれでも閉じ，ライフゲームの時間発展則に一致するという点である．したがって，(1) はライフゲームの状態値を実数に拡張した系と捉えることができる．

2 統一解

ライフゲームにはさまざまなパターンを提示する特解が存在することが知られている．拡張された系 (1) は当然それら解をすべて含むが，さらに，それらをより一般化した解が存在する．その一例として図 1 の解がある．両矢印の左右はそれぞれある時刻の解の様子を表しており，時刻が 1 増える毎に左→右→左→右→⋯というように，周期 2 で振動する周期解となっている．また，各セルの値が色付き四角で表示

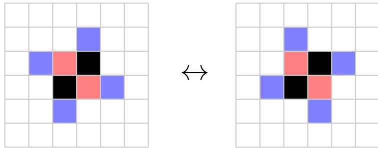


図 1. (1) の特解

されており，その意味は図 2 の通りである．ただし a を $[0,1]$ の範囲の任意定数とする．また，図 1 で表示している領域の外側はすべて $u = 0$ である．

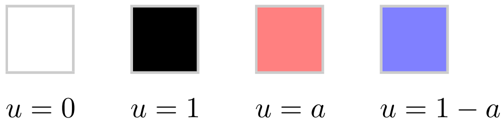


図 2. セルが表す値

図 1 の解が各セルで (1) を満たしていることは容易に示せるが，この解の特別な場合として $a = 0, 1$ のときの解の様子を図 3 に示す．これ

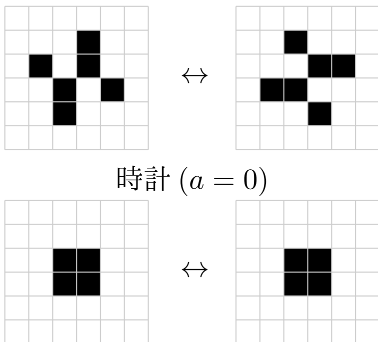


図 3. 図 1 の特別な場合

らはライフゲームで個別に知られている解であるが，max-plus 方程式で拡張することにより，パラメータ a を通じて 2 つの解が統一されたということは興味深い．このような統一解が (1) に多数発見されている．

3 和型の max-plus 方程式による連続化

さらに，(1) 自体も「多近傍」による拡張ができる．次図のように，任意のセル (i,j) に対して半径 r_{in}, r_{out} の同心円で囲まれた内部領域

と外部領域を考える．状態変数 u の内部，外部

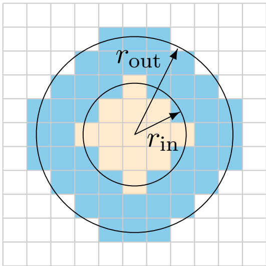


図 4. 内部領域と外部領域

領域における和を面積で割った平均値をそれぞれ M_{ij}^t, N_{ij}^t とし，次図のように時間発展を定義する．

$$u_{ij}^{t+1} = S(M_{ij}^t, N_{ij}^t) \tag{2}$$

ただし，$S(M,N)$ は図 5 で示すような $[0,1]$ の範囲の値を取る関数である．さらに，$r_{\text{in}} = 0.5$, $r_{\text{out}} = 1.5$ というような小さい半径では内部領域は (i,j) セルのみになり，外部領域は Moore 近傍のみとなり，(2) は (1) に帰着させることができる．したがって (2) は (1) ひいてはライフゲームを特別な場合として含む多近傍拡張となる．拡がりのある領域の平均値を用いること

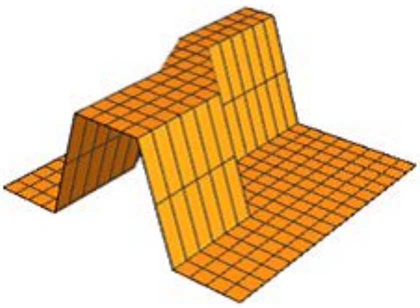


図 5. $S(M,N)$ の概形

によって，図 6 のような滑らかな動くパターンが (2) より生成される．

4　パターン形成系への応用

ライフゲームを題材に和型の max-plus 方程式について述べてきた．最後に，文献 [1] 第 7 章に登場し，ターゲットやスパイラルのパターンを生み出す系

$$u_{ij}^{t+1} = \max(u_{ij}^t, u_{i-1j}^t, u_{i+1j}^t, u_{ij-1}^t, u_{ij+1}^t) - u_{ij}^{t-1} \tag{3}$$

図 6. (2) の解のスナップショット

への応用について簡単に触れる．この系は $u \in \{0,1\}$ の CA を定義しており，時刻 $t+1$ の値が時刻 t, $t-1$ の自らの値と時刻 t での Neumann 近傍に依存するが和型ではない．そこで

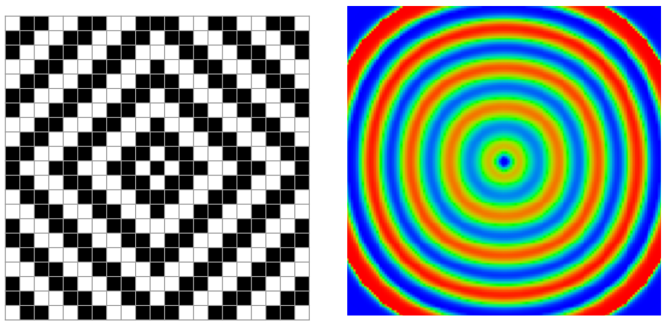
$$\begin{cases} u_{ij}^{t+1} = R(\alpha L_{ij}^t) - M_{ij}^t, \\ R(x) = \max(0,x) - \max(0,x-1) \end{cases} \tag{4}$$

という方程式を考える．M_{ij}^t は図 4 の内部領域の平均値，L_{ij}^t は内部と外部を合わせた領域の平均値とする．$r_{\text{in}} = 0.5$, $r_{\text{out}} = 1$, $\alpha = 5$ のとき，(4) は

$$u_{ij}^{t+1} = R(u_{ij}^t + u_{i-1j}^t + u_{i+1j}^t + u_{ij-1}^t + u_{ij+1}^t) - u_{ij}^t$$

となり，$u \in \{0,1\}$ のときは (3) と等価になる．

図 7 に，この場合のターゲットパターンと $r_{\text{in}} = 2$, $r_{\text{out}} = 5$, $\alpha = 10$ のときのターゲットパターンを示す．和型の max-plus 方程式を多



(a) $r_{in} = 0.5$, $r_{out} = 1$, $\alpha = 5$　(b) $r_{in} = 2$, $r_{out} = 5$, $\alpha = 10$

図 7. (4) の解のスナップショット

近傍に拡張することにより，滑らかなパターン形成が観察できることがわかる．

参考文献

[1] 広田良吾・高橋大輔,「差分と超離散」, 共立出版，2003.

一般化離散 BKP 方程式から導かれる混合ソリトン解について

長井 秀友[1], 新澤 信彦[2]
[1] 東海大学，[2] 西日本工業大学
e-mail : hdnagai@tokai-u.jp, shinzawa@nishitech.ac.jp

1 概要

一般化離散 BKP 方程式は離散 BKP 方程式や離散 KP 方程式を含む離散ソリトン方程式である．本研究ではこの方程式にリダクションを行い，2 種の異なるソリトン解が混在した解を持つ離散ソリトン方程式を与える．この解はパラメータの取る値によってソリトンの振幅の正負および進行方向が変わる．本研究ではさらにこれらの超離散対応物を与える．超離散化して得られるソリトン解は離散ソリトン解同様，振幅の正負，進行方向が異なる波同士の衝突を表す解挙動を示す．なお，本稿では簡単のため 2 ソリトン解に限定して紹介をする．

2 一般化離散 BKP 方程式とソリトン解

一般化離散 BKP 方程式は次で与えられる．

$$\begin{aligned}&z_1\tau(p+1,q,r)\tau(p,q+1,r+1)\\&+z_2\tau(p,q+1,r)\tau(p+1,q,r+1)\\&+z_3\tau(p,q,r+1)\tau(p+1,q+1,r)\\&-z_4\tau(p,q,r)\tau(p+1,q+1,r+1)=0,\end{aligned}\tag{1}$$

ここで z_1, z_2, z_3, z_4 は $z_1+z_2+z_3-z_4=0$ を満たす任意定数とする．この方程式はソリトン解を持つ [1]．例えば 2 ソリトン解は次のように表される．

$$\begin{aligned}\tau(p,q,r)=&1+c_1\frac{\phi(t_1)}{\phi(s_1)}+c_2\frac{\phi(t_2)}{\phi(s_2)}\\&+c_1c_2b_{12}\frac{\phi(t_1)\phi(t_2)}{\phi(s_1)\phi(s_2)},\end{aligned}$$

ここで t_i, s_i, c_i はそれぞれ任意パラメータであり，関数 $\phi(t)$ および b_{12} は次で定義される．

$$\begin{aligned}&\phi(t)=(a_1(t))^p(a_2(t))^q(a_3(t))^r\\&a_1(t)=\frac{z_2z_4+z_3t}{z_1-t},\\&a_2(t)=\frac{z_1z_4-z_3t}{z_2+t},\\&a_3(t)=t,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}b_{12}&=\frac{cf(t_1,t_2)cf(s_1,s_2)}{cf(s_1,t_2)cf(t_1,s_2)},\\cf(t,s)&=\frac{t-s}{tsz_3+z_1z_2z_4}.\end{aligned}$$

3 離散ソリトン方程式

一般化離散 BKP 方程式に変換

$$p=n-m-2l,\quad q=-l,\quad r=m+l,$$

および条件 $\tau(l+1,m,n)=\tau(l,m,n)$ を課し，さらに

$$z_1=d_1,\ z_2=d_2,\ z_3=1-d_1,\ z_4=1+d_2,$$

を行うことで

$$\begin{aligned}&(1+d_2)f_n^{m-1}f_{n+1}^{m+1}=d_1f_n^{m+1}f_{n+1}^{m-1}\\&\quad+d_2f_{n-1}^{m}f_{n+2}^{m}+(1-d_1)f_n^mf_{n+1}^m\end{aligned}\tag{2}$$

が得られる．ただしここで $0<d_2<d_1<1$ とし，$f_n^m=\tau(l,m,n)$ と表す．

(2) の 2 ソリトン解は次で与えられる．

$$\begin{aligned}f_n^m=&1+c_1\frac{\hat\phi(t_1)}{\hat\phi(s_1)}+c_2\frac{\hat\phi(t_2)}{\hat\phi(s_2)}\\&+c_1c_2b_{12}\frac{\hat\phi(t_1)\hat\phi(t_2)}{\hat\phi(s_1)\hat\phi(s_2)},\end{aligned}$$

$$\widehat{\phi}(t)=\left(\frac{a_3(t)}{a_1(t)}\right)^m(a_1(t))^n.\tag{3}$$

ここで t_i, s_i は次を満たすものとする．

$$\frac{a_3(t_i)}{(a_1(t_i))^2a_2(t_i)}=\frac{a_3(s_i)}{(a_1(s_i))^2a_2(s_i)}\tag{4}$$

特に t_i が条件

$$\frac{z_1z_4}{z_3}<t_i,\tag{5}$$

$$0<t_i<z_1,\tag{6}$$

のいずれかを満たすとき，(4) を満たす $s_i(\neq t_i)$ が存在することが $a_i(t)$ の定義から確かめられる．パラメータ t_i が (5), (6) のどちらを取るかによって，ソリトン解の挙動が変わる．例

として $(t_1,t_2,c_1,c_2) = (3,\frac{3}{10},1,1)$, $d_1 = \frac{1}{2}$, $d_2 = \frac{1}{3}$，すなわち t_1 が (5), t_2 が (6) を満たすときのソリトン解を図 1 に示す．ここで $u_n^m = f_{n+1}^m f_n^{m+1}/f_n^m/f_{n+1}^{m+1}$ とし，m, n をそれぞれ時間，空間変数としている．振幅の正負および波の進行方向が相異なる波同士の衝突を表していることが図から見て取れる．一般に N ソリトン解の場合も t_i が (5) を満たすときは振幅が正で右に進む波を，(6) を満たすときは振幅が負で左に進む波を表す．

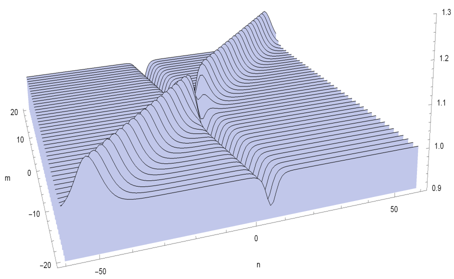


図 1. 混合離散ソリトン解の挙動.

4 超離散ソリトン方程式

前節で得られた方程式 (2) は変換 $d_i = e^{-\delta_i/\varepsilon}$, $f_n^m = e^{F_n^m/\varepsilon}$ のもとで以下のように超離散化が可能である [2].

$$\begin{aligned} F_{n+1}^{m+1} + F_n^{m-1} = \max(&F_{n+1}^m + F_n^m, \\ &F_n^{m+1} + F_{n+1}^{m-1} - \delta_1, F_{n+2}^m + F_{n-1}^m - \delta_2), \end{aligned} \tag{7}$$

ここで $0 < \delta_1 < \delta_2$ とする．ソリトン解についてはパラメータを

$$t_1 = t^{(1)} + \frac{z_1 z_4}{z_3}, \qquad t_2 = \frac{t^{(2)} z_1}{1 + t^{(2)}},$$

のように置きなおす．これにより任意の正の実数 $t^{(1)}$, $t^{(2)}$ に対して t_1, t_2 は (5), (6) を満たしている．このもとで変換 $t^{(i)} = e^{-T^{(i)}/\varepsilon}$ を行うことで超離散化が可能となる．特に，$T^{(i)}$ を適当に取り直すことで 2 ソリトン解を以下のように表すことができる．

$$\begin{aligned} F_n^m = &\max(0, \Phi_1(m,n), \Phi_2(m,n), \\ &\Phi_1(m,n) + \Phi_2(m,n) + B_{12}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_1(m,n) =& \Omega m + K n + C_1, \\ \Phi_2(m,n) =& Q m + P n + C_2. \end{aligned}$$

ここで P, Ω, C_i は任意実数であり，K, Q は次の分散関係式を満たすものとする．

$$K = \frac{1}{2}\left(|\Omega - \delta_1| - |\Omega + \delta_1|\right), \tag{8}$$

$$Q = \max(0, P - \delta_2) + \min(0, P + \delta_2). \tag{9}$$

B_{12} は P, Ω が正の時，次で与えられる．

$$\begin{aligned} B_{12} = -\max(&\min(\Omega_i + 2K, 2Q), \\ &\min(\Omega_i + 2K - P + \delta_2, 0)). \end{aligned}$$

関係式 (8), (9) はそれぞれ超離散 KdV 方程式，超離散戸田方程式のソリトン解が満たす分散関係式と一致していることに注意されたい [3]．離散ソリトン解同様，超離散ソリトン解も振幅の正負および進行方向が異なるソリトン同士の衝突を表す．例として $(P,\Omega,C_1,C_2) = (3,3,0,0)$, $\delta_1 = 1, \delta_2 = 2$ としたときのソリトン解を図 2 に示す．ここで $U_n^m = F_{n+1}^m + F_n^{m+1} - F_n^m - F_{n+1}^{m+1}$ としている．N ソリトン解についてもパラメータの取り方に応じて波の性質が分かれる．

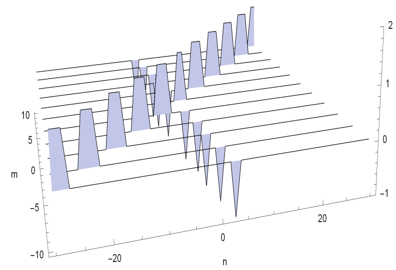


図 2. 混合超離散ソリトン解の挙動.

参考文献

[1] N. Shinzawa, Soliton solution to the generalized discrete BKP equation and its Bäcklund transformation equations, Japan J. Indust. Appl. Math, **35** (2018), 915–937.

[2] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira and J. Satsuma, From Soliton Equations to Integrable Cellular Automata through a Limiting Procedure, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), 3247–3250.

[3] J. Matsukidaira, J. Satsuma, D. Takahashi, T. Tokihiro and M. Torii, Toda-type cellular automaton and its N-soliton solution, Phys. Lett. A **225** (1997), 287–295.

交通流を記述する非線形離散モデルであるルール 184FCA の超離散解析

東 康平 [1]，薩摩 順吉 [2]，時弘 哲治 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科，[2] 武蔵野大学工学部数理工学科
e-mail : kohei h@ms.u-tokyo.ac.jp

1 交通流を記述する非線形離散モデル

時刻 t（$t = 0, 1, 2, ...$），サイト n ($n \in \mathbb{Z}$) における粒子密度を ρ_n^t，流量を J_n^t とする 1 次元の離散化した連続の方程式

$$\rho_n^{t+1} - \rho_n^t = -\left(J_{n+1}^t - J_n^t\right) \tag{1}$$

を考える．ここで $J_n^t = (1-\rho_n^t)\rho_{n-1}^t$ とすると，次の離散方程式を得る [1].

$$\rho_n^{t+1} = (1-\rho_n^t)\rho_{n-1}^t + \rho_{n+1}^t \rho_n^t \tag{2}$$

式 (2) は，ρ_n^t を区間 n における車の密度と考えると，単位時間あたりに区間 n に入る車の流量 J_n^t が，区間 $n-1$ における車の密度 ρ_{n-1}^t と区間 n における空きスペース $(1-\rho_n^t)$ に比例すると仮定した交通流のモデル方程式とみなすことができる．実際，初期値 $\rho_n^{t=0}$ ($n \in \mathbb{Z}$) を $\{0, 1\}$ に限定すると，交通流を記述する単純なモデルとして知られる，ウルフラムによるルール 184 セルオートマトンに一致する．また，区間 $[0, 1]$ の任意の実数値を初期値に選ぶと，その時間発展は $[0, 1]$ で閉じており，ファジーセルオートマトン（Fuzzy Cellular Automaton, FCA）と考えることもできる．

2 定常状態の安定性と基本図

以下では，(2) に対して次の周期的境界条件を課すことにする．

$$\rho_i^t = \rho_{i+N}^t \quad (i \in \mathbb{Z}) \tag{3}$$

また，N は正の偶数とし，$N = 2M$ とおく[1]．初期条件として，$\forall n,\ \rho_n^0 \in [0, 1]$ とする．すなわち (2) を FCA として考察する．全区間における車の密度を s_t，平均流量を Q_t とすると，

$$s_t := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \rho_i^t \tag{4a}$$

$$Q_t := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i^t = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \rho_{i-1}^t (1-\rho_i^t) \tag{4b}$$

[1] N が奇数の場合は取り扱いが異なる．この点については，本講演内で説明する．

である．

周期境界条件の下では $s_t = s$ (一定) であり，次の命題が成り立つ：

命題 1 任意の初期条件に対して，(s_t, Q_t) は s-Q 平面内の領域

$$D := \{(s, Q) \,|\, s(1-s) \le Q \le \min[s, 1-s]\} \tag{5}$$

に存在する．

また，定常状態については次の命題が成立する．

命題 2 境界条件 (3) の下で，(2) には次の 3 種類の定常解が存在し，これらの解はすべて準安定状態[2]にある；

- **一様解：** $\rho_n^t \equiv s$.
  このとき，流量 $Q_t = Q$ は，$Q = s(1-s)$ で与えられる．
- **2 周期解：** $\rho_n^{t+1} = \rho_{n-1}^t$ かつ $\rho_{2m-1}^0 = \alpha,\ \rho_{2m}^0 = \beta$ $(m = 1, 2, ..., M)$．ただし，$\alpha, \beta \in [0, 1]$ は，$\alpha + \beta = 2s$ を満たす任意の定数である．
  このとき $Q = s(1-s) + c^2$ $(c := \frac{\alpha-\beta}{2})$ であり，$s(1-s) \le Q \le \min[s, 1-s]$ である．
- **速度 1 の自由走行解：** $s \le \frac{1}{2}$ のとき，次の解が存在する；
  $\rho_n^{t+1} = \rho_{n-1}^t$ かつ $\rho_{2m-1}^0 = \gamma_m,\ \rho_{2m}^0 = 0$, または $\rho_{2m-1}^0 = 0,\ \rho_{2m+1}^0 = \gamma_m$ $(m = 1, 2, ..., M)$.
  ただし，$\gamma_m \in [0, 1]$ は $\sum_{m=1}^{M} \gamma_m = 2Ms$ を満たす任意の定数である．
  このとき，$Q = s$.

命題 1, 2 により，この交通流モデルの基本図に関して次の定理が成り立つ．

定理 3 境界条件 (3) の下で，(2) 式で表される交通流モデルの基本図は命題 1 における領域 D で与えられる．

[2] 線形化して得られる微小変位の離散時間発展を表す行列の固有値において，絶対値はすべて 1 以下であるが，絶対値 1 のものが存在する．

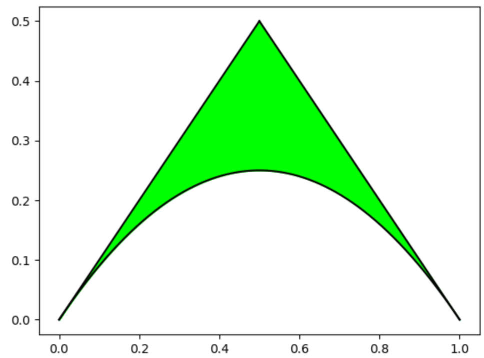


図 1. 横軸を車の密度，縦軸を流量とした基本図．領域内の任意の点は準安定点である．

また，次の予想を得ている．

予想 4 一般的な初期値 ρ_n^0 $(n=1,2,...,N)$ に対する定常状態は，命題 2 の 2 周期解であり，

$$s=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\rho_n^0,\quad \delta:=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(-1)^n\rho_n^0 \tag{6}$$

として，$\alpha=s+\delta$, $\beta=s-\delta$ である．

3 超離散解析

交通流に対する非線形離散モデルの超離散化を行う．

式 (2) において，$\rho_n^t=\mathrm{e}^{\frac{-U_n^t}{\epsilon}}$, $1-\rho_n^t=\mathrm{e}^{\frac{-V_n^t}{\epsilon}}$ とし，超離散極限をとると，

$$\begin{cases} U_n^{t+1}=\min\left[V_n^t+U_{n-1}^t,\, U_n^t+U_{n+1}^t\right] & \text{(7a)}\\ V_n^{t+1}=\min\left[U_n^t+V_{n+1}^t,\, V_n^t+V_{n-1}^t\right] & \text{(7b)}\\ \min\left[U_n^t,\, V_n^t\right]=0 & \text{(7c)} \end{cases}$$

となる．ただし，$0\le\rho_n^t\le 1$ より，$U_n^t, V_n^t\in\mathbb{R}_{\ge 0}\sqcup\{\infty\}$ である．時間発展の式 (7a), (7b) より，$t=0$ で (7c) が成り立てば，任意の t で (7c) は成り立つ．したがって，(7a)–(7c) は，決定論的な力学系である．もとの方程式 (2) において，$t=0$ で ${}^\forall n$, $\rho_n^0<1$ である場合は，${}^\forall n$, $V_n^0=0$ に対応すると考えてよい．この場合, 周期境界条件, または $|n|\gg 1$ で一定の値をとる境界条件の下で，この超離散系は有限のステップで必ず速度 1 の進行波解に収束するという性質をもつ．すなわち次の定理が成り立つ．

定理 5 $t=0$ で ${}^\forall n$, $V_n^0=0$ とする．このとき，以下の境界条件 (a) または (b) の下では，ある有限な時間ステップ $T\in\mathbb{Z}_{\ge 0}$ が存在し，$t\ge T$ ならば任意の n に対して $U_n^t=U_{n-t+T}^T$ が成り立つ．

(a) ${}^\exists N\in\mathbb{Z}_{>0}$, ${}^\forall n$, $U_{N+n}^0=U_n^0$.

(b) ${}^\exists N\in\mathbb{Z}_{>0}$, ${}^\exists c_-$, $c_+>0$,

$n\le -N\to U_n^0=c_-$, $n\ge N\to U_n^0=c_+$.

超離散方程式 (7a)–(7c) の初期値問題は比較的容易に解くことができ，解を具体的に表示することもできる．例えば，衝撃波に対応するものとして，初期値を V_n^0 はすべて 0, U_n^0 はステップ関数的に $[...,21,21,21,1,1,1,...]$ と選ぶと (図 2)，数タイムステップ後に間隔がフィボナッチ数をなして拡がり速度 1 で進行する定常解が得られる (図 3)．

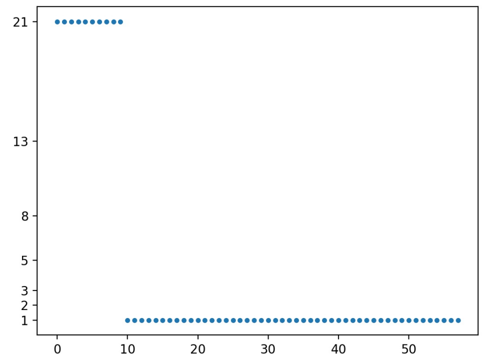


図 2. 初期条件 : 各サイトの値は $[...,21,21,21,1,1,1...]$.

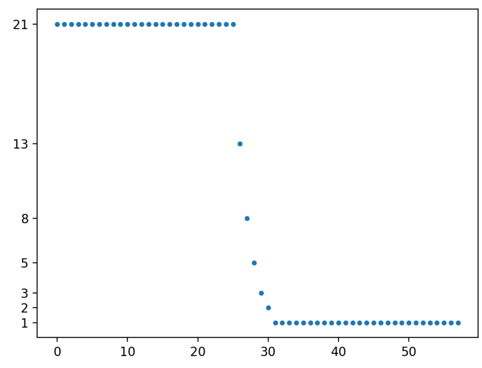


図 3. 進行波解 : $[...,21,21,13,8,5,3,2,1,1,...]$ であり速度 1 で進む.

参考文献

[1] 東康平, 糠谷樹, 薩摩順吉, 友枝明保, 交通流を記述する新しい非線形離散モデルについて, 武蔵野大学数理工学センター紀要, 第 4 号 (2019), 42–49.

アフィン型ミューテーションの可積分性について

野邊 厚 [1], 松木平 淳太 [2]
[1] 千葉大学教育学部，[2] 龍谷大学理工学部
e-mail : nobe@faculty.chiba-u.jp

1 はじめに

ランク 2 のクラスターミューテーションから導かれる双有理写像力学系においては、有限型もしくはアフィン型であることが可積分性の十分条件である [1, 2, 3]。(必要性についても成り立つと考えられるが、まだ示されてはいない。) 一方、ランク 3 以上については、有限型であれば可積分であることは示されているが [4]、アフィン型であることと可積分性との関係はよく分かっていない。本講演では、ランク N の $A_{N-1}^{(1)}$ 型ミューテーションの可積分性を示す。

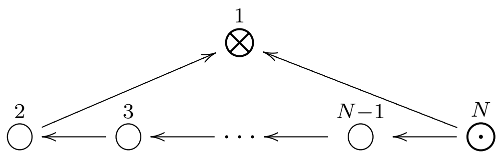
2 $A_{N-1}^{(1)}$ 型ミューテーション

$N \geq 3$ を自然数とし、初期種子 $\Sigma_0 = (\boldsymbol{x}_0, B_0)$

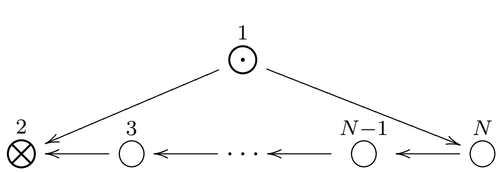
$$\boldsymbol{x}_0 = (x_1, x_2, \cdots, x_N),$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & \ddots & & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 & 0 \\ 0 & & \ddots & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を与える。ただし、B_0 は N 次反対称行列である。対応するクイバー Q_0 は次のようになる：



ここで、頂点 1 のみが sink（$\otimes$ で表す）であり、頂点 N のみが source（$\odot$ で表す）であることに注意しよう。1 方向のミューテーション μ_1 により、Q_0 は $Q_1 = \mu_1(Q_0)$ となる：



μ_1 により sink が 2 へ移り、source が 1 へ移るので、Q_1 は Q_0 に次の置換 σ を施したものに他ならない：

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N-1 & N \\ 2 & 3 & \cdots & N & 1 \end{pmatrix}$$

続けて、ミューテーション μ_2、μ_3、$\cdots$ を順番に適用して得られるクイバーをそれぞれ $Q_2 = \mu_2(Q_1)$、$Q_3 = \mu_3(Q_2)$、$\cdots$ とおく。このとき、$Q_N = Q_0$ であり、Q_{mN+l} は頂点 $l+1$ のみに sink をもち、頂点 l のみに source をもつ（$m = 0, 1, 2, \ldots$）。また、Q_l に置換 σ を施したものが Q_{l+1} である。したがって、各クイバー Q_l は周期 1 の mutation-periodic クイバーである [5]。

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（$m = 0, 1, 2, \ldots$）：

$$\boldsymbol{x}_{mN} \overset{\mu_1}{\longmapsto} \boldsymbol{x}_{mN+1} \overset{\mu_2}{\longmapsto} \cdots \overset{\mu_N}{\longmapsto} \boldsymbol{x}_{mN+N},$$
$$B_{mN} \overset{\mu_1}{\longmapsto} B_{mN+1} \overset{\mu_2}{\longmapsto} \cdots \overset{\mu_N}{\longmapsto} B_{mN+N}$$

また、各成分を次のように表すことにする：

$$\boldsymbol{x}_l = (x_{1;l}, x_{2;l}, \cdots, x_{N;l})$$

各 B_l に対応する一般化 Cartan 行列 $A(B_l)$ はすべて $A_{N-1}^{(1)}$ 型となるため、このミューテーションを $A_{N-1}^{(1)}$ 型とよぶ [4]。

3 双有理写像力学系

ミューテーション列 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_N$ の作用を一回の時間発展 $t \to t+1$ と見なして、新しい変数 x_i^t を次のように導入する：

$$x_i^t := x_{i;tN} \quad (i = 1, 2, \ldots, N)$$

このとき、クラスターのミューテーションから次の N 次元双有理写像力学系 $\varphi : \boldsymbol{x}^t \mapsto \boldsymbol{x}^{t+1}$ が導出される（$\boldsymbol{x}^t = (x_1^t, x_2^t, \cdots, x_N^t)$）：

$$x_i^{t+1} = \frac{x_{i-1}^{t+1} x_{i+1}^t + 1}{x_i^t} \quad (i = 1, 2, \ldots, N)$$

ただし、次のようにおく：

$$x_0^{t+1} = x_N^t, \quad x_{N+1}^t = x_1^{t+1}$$

日本応用数理学会 2019 年 年会 講演予稿集 (2019.9.3-5，東京) Copyright (C) 2019 一般社団法人日本応用数理学会

図 1 に、$N = 3$ とし、初期値を $(x_1^0, x_2^0, x_3^0) = (4, -3, 4)$ とした場合の解軌道を示す。時刻 t の偶奇に応じて、交叉しない 2 次曲線上を交互に時間発展する様子が見て取れる。

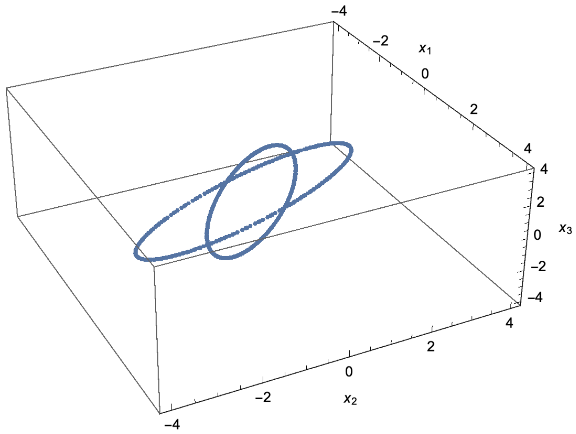


図 1. 解軌道

一般の N に対しては、$N-1$ 本の交叉しない 2 次曲線上を順番に時間発展する。したがって、$N-1$ 階の時間発展 $\varphi^{N-1} : \boldsymbol{x}^t \mapsto \boldsymbol{x}^{t+N-1}$ は 2 次曲線を不変曲線にもつことが分かる。

4　保存量

N 次元双有理写像 φ^{N-1} は $N-2$ 個の 1 次保存量 λ_i（$i = 1, 2, \ldots, N-2$）と 1 個の 2 次保存量 ν をもつので Liouville 可積分である：

$$\lambda_i = \frac{x_i^t + x_{i+2}^t}{x_{i+1}^t} \tag{1}$$

$$\nu = \frac{1 + x_1^t x_{N-1}^t + x_2^t x_N^t}{x_1^t x_N^t} \tag{2}$$

$N-2$ 個の超平面 (1) の共通部分として定まる 2 次元平面と超曲面 (2) の交わりである 2 次曲線が φ^{N-1} の不変曲線となる。

$N = 3$ の例を図 2 に示す。初期値は図 1 と同様にとり、偶数時刻の軌道をプロットする。また、保存量の定める平面および曲面も図示する。

初期値 (x_1^0, x_2^0, x_3^0) によって定まる平面

$$\frac{x_1^t + x_3^t}{x_2^t} = \lambda_1 = \frac{x_1^0 + x_3^0}{x_2^0}$$

と曲面

$$\frac{1 + x_1^t x_2^t + x_2^t x_3^t}{x_1^t x_3^t} = \nu = \frac{1 + x_1^0 x_2^0 + x_2^0 x_3^0}{x_1^0 x_3^0}$$

の交わりである 2 次曲線が偶数時刻の時間発展の不変曲線（解軌道）である。

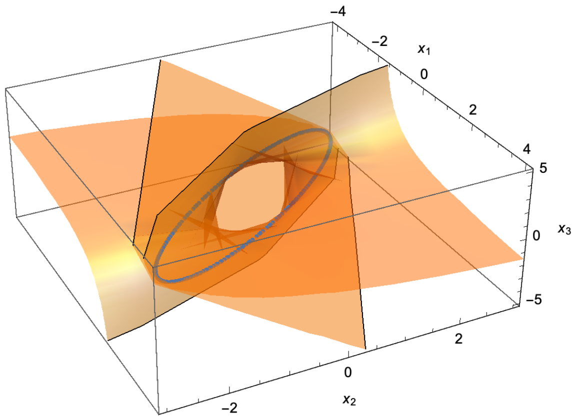


図 2. 2 階の時間発展の不変曲線

注意　次数の増大度を用いてミューテーションの可積分性を調べる研究も行われており、$A_{N-1}^{(1)}$ 型ミューテーションの次数が線形に増大することが示されている [6]。

謝辞　本研究は 2019 年度千葉大学研究費獲得推進プログラム（多様型 B）の助成を受けている。

参考文献

[1] Zelevinsky A, Semicanonical basis generators of the cluster algebra of type $A_1^{(1)}$, *Electron. J. Comb.*, **14** (2007), ♯N4.

[2] Nobe A, Generators of rank 2 cluster algebras of affine types via linearization of seed mutations, *J. Math. Phys.*, **60**, 072702 (2019).

[3] Nobe A and Matsukidaira J, A family of integrable and non-integrable difference equations arising from cluster algebras, arXiv:1904.02853 (2019), to appear in *RIMS Kôkyûroku Bessatsu*.

[4] Fomin S and Zelevinsky A, Cluster algebras II: Finite type classification, *Invent. Math.*, **154** (2003), 63–121.

[5] Fordy A P and Marsh R J, Cluster mutation-periodic quivers and associated Laurent sequences, *J. Algebr. Com.*, **34** (2011), 19–66.

[6] Hone A, Lampe P and Kouloukas T, Cluster algebras and discrete integrability, arXiv:1903.08335 (2019)

行列実数乗の計算に対する数値積分法のための前処理について

立岡 文理 [1], 曽我部 知広 [1], 剱持 智哉 [1], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻
e-mail：f-tatsuoka@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ は，全ての固有値が $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ に属する行列とする．このとき，$\alpha \in (0,1)$ に対して，行列 A の α 乗は

$$A^\alpha = \frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi} A \int_0^\infty (t^{1/\alpha} I + A)^{-1} \, \mathrm{d}t \quad (1)$$

と表されることが知られている [1]．本発表では式 (1) による A^α の計算を考える．

積分 (1) の被積分関数は指数関数的減衰でなく，そのままでは数値積分の際に多くの積分点が必要になる．そのため，変数変換を用いて効率よく積分 (1) を計算するための研究が行われてきた．例えば，変数変換 $t = (1+x)^\alpha/(1-x)^\alpha$ を行い Gauss–Jacobi (GJ) 求積を適用する研究 [2] や，二重指数関数型 (DE) 公式を用いる研究 [1] が挙げられる．

また，文献 [2, 3] では A が正定値対称である（及び A の全ての固有値が正の実数である）ときの GJ 求積・DE 公式の収束性解析が行われており，どちらの積分公式も A が 1 から離れた固有値を有するときに積分公式の収束速度が悪化することが明らかにされている．

加えて，文献 [2, 3] では，収束性解析の結果を基に A が正定値対称行列であるときの前処理の研究も行われた．ここでの前処理とは，

$$A^\alpha = (AP)^\alpha P^{-\alpha} \quad (2)$$

が成り立つような行列 $P \in \mathbb{C}^{n\times n}$ を用いて，A^α の代わりに式 (2) の右辺を計算するものである．なお，式 (2) が成り立つための条件は第 2 節に示す．P を，AP のすべての固有値が 1 の近くになるように，かつ，$P^{-\alpha}$ が計算しやすいように選ぶことで計算の高速化が期待できる．文献 [2, 3] で提案された前処理は，P を単位行列の定数倍，具体的には $P = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}} I$ と選ぶものである．なお，$\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ は A の最大固有値及び最小固有値である．

しかし，A の条件数 $\kappa(A) \coloneqq \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ が大きいときは，定数倍の前処理を用いたとしても AP の最大･最小固有値は 1 から離れている．ゆえに，条件数が大きい A に対する定数倍の前処理の効果は不十分であり，新たな前処理が必要である．

そこで，本研究では条件数が大きい正定値対称行列 A に対して，少ない積分点数で A^α を計算するために，$\kappa(AP) < \kappa(A)$，かつ，$\kappa(P) < \kappa(A)$ となる P の選び方を提案する．提案する前処理では 2 つの行列関数 $(AP)^\alpha, P^{-\alpha}$ の計算が必要となるが，それぞれの計算に必要な積分点数は A^α の計算に必要な積分点数より少なくなるため，前処理によって全体の積分点数を削減できる可能性がある．本発表では具体的な P の選び方を示した後に，数値実験で前処理の有用性を検証する．

2 P の選び方

本節では $\kappa(AP)$ および $\kappa(P)$ を小さくするような P の選び方を提案する．

前処理を行うためには式 (2) が成り立つような P を選ぶ必要がある．そこで，まず A が正定値対称行列であるときに式 (2) が成り立つ条件を以下の補題に示す．

補題 1. $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ は正定値対称行列であり，$P \in \mathbb{C}^{n\times n}$ は全ての固有値が $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ に属する行列とする．このとき，A と P が可換ならば式 (2) が成り立つ．

証明の詳細は紙面の都合上割愛するが，行列対数関数に基づく行列実数乗の定義 [4, Problem 7.2] と行列対数関数の性質 [4, 定理 11.3] を用いると補題 1 が示される．

補題 1 の仮定を満たす P として，A の有理関数が挙げられる．そこで，本研究では P を集合 $\Phi \coloneqq \{(A + pI)^{-1} \colon p > 0\}$ から，$\kappa(AP)$ と $\kappa(P)$ とが小さくなるように選ぶことを提案する．具体的には

$$P = P_* \coloneqq (A + \sqrt{\lambda_{\max}\lambda_{\min}} I)^{-1}$$

と選ぶ．なお，この P_* を用いて前処理を行うと，$\kappa(AP_*) = \kappa(P_*) = \sqrt{\kappa(A)}$ となり条件数が下がる．加えて，P_* は以下の命題の意味で最適である．

命題 2. 正定値対称行列 A に対して

$$P_* = \mathop{\arg\min}_{P \in \Phi} \max \left\{ \kappa(AP), \kappa(P) \right\} \qquad (3)$$

が成り立つ.

紙面の都合上, 証明の概略のみを述べる．$P \in \Phi$ のとき式 (3) の右辺は 1 変数関数の最適化問題に帰着するが，この最適化問題は解析的に解くことができる.

3　数値実験

本節では前処理の積分点数削減の効果を確かめるための実験結果を示す．本実験では，テスト行列に Matrix Market の bcsstk04 ($n = 132$, $\kappa(A) \approx 2.3 \times 10^6$) を用いて $A^{0.8}$，$P_*^{-0.8}$，$(AP_*)^{0.8}$ を計算した．実験は，Julia 1.1.1 を用いて実装し，3.40GHz の CPU，16GB の RAM を搭載するコンピュータで行った．また，4 倍精度演算を用いた計算結果を厳密解とした．まず，GJ 求積と DE 公式 [1, Algorithm 1] の収束履歴を図 1 及び図 2 に示す.

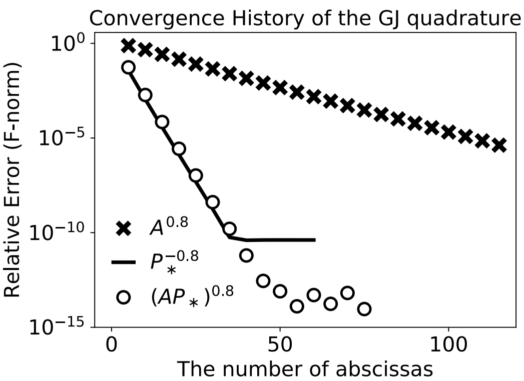


図 1. $A^{0.8}, P_*^{-0.8}, (AP_*)^{0.8}$ に対する GJ 求積の誤差履歴

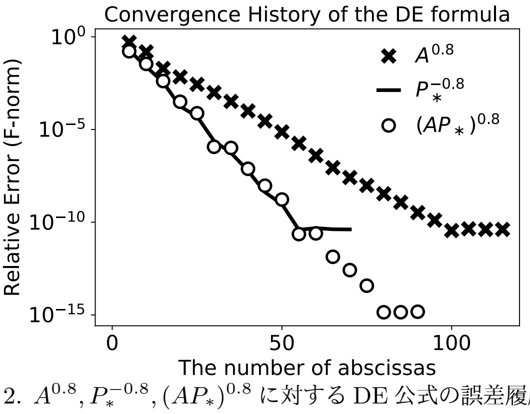


図 2. $A^{0.8}, P_*^{-0.8}, (AP_*)^{0.8}$ に対する DE 公式の誤差履歴

図 1 及び 図 2 より，前処理によって GJ 求積と DE 公式の収束が速くなったことが分かる．次に，相対誤差が 10^{-10} 以下になったときの積分点数とその積分点数での数値積分の計算時間を表 1 に示す.

表 1. 相対誤差が 10^{-10} 以下になったときの積分点数とその積分点数での数値積分の計算時間．太字は積分点数であり，括弧の中は計算時間（秒）である.

	GJ 求積	DE 公式
$A^{0.8}$	**216** (4.3×10^0)	**96** (1.9×10^{-1})
$(AP_*)^{0.8}$	**36** (7.2×10^{-2})	**55** (1.0×10^{-1})
$P_*^{0.8}$	**35** (6.6×10^{-2})	**55** (1.0×10^{-1})

実際に行列実数乗を計算する際は，GJ 求積と DE 公式のうち収束の速い積分公式を選ぶであろう．そこで，表 1 において，2 つの積分公式のうち積分点数が少ないものに着目すると，前処理なしでは 96 点（DE 公式），前処理をすると 71($= 35 + 36$) 点（GJ 公式）であり，前処理により積分点数が削減された．同様に，計算時間も削減された.

4　まとめ・今後の課題

本研究では，正定値対称行列の実数乗を少ない積分点数で計算するために，条件数を下げる前処理を提案し，数値実験でその効果を確認した．今後の課題は，提案した前処理が収束速度以外に影響を与えるかを調査すること，また，提案した前処理が他の数値積分以外の計算手法に有用かを調査することである.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 18J22501，及び 18H05392 の助成を受けた.

参考文献

[1] 立岡文理, 曽我部知広, 宮武勇登, 張紹良, 二重指数関数型数値積分公式を用いた行列実数乗の計算, 日本応用数理学会論文誌, 28 (2018), 142–161.

[2] M. Fasi and B. Iannazzo, Computing the weighted geometric mean of two large-scale matrices and its inverse times a vector, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 39 (2018), 178–203.

[3] 立岡文理, 曽我部知広, 宮武勇登, 張紹良, 行列実数乗に対する二重指数関数型公式の定数倍による前処理について, 数値解析シンポジウム 2019 予稿集, 77–80, 2019.

[4] N. J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM, 2008.

Fast validation for the Perron pair of an irreducible nonnegative matrix

Shinya Miyajima
Faculty of Science and Engineering, Iwate University
e-mail : miyajima@iwate-u.ac.jp

1 Introduction

We are concerned with accuracy of numerically computed solutions to the matrix eigenvalue problem $Ax = \lambda x$, where $\lambda \in \mathbb{C}$ is an eigenvalue, $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ is an eigenvector corresponding to λ, and $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. For $v \in \mathbb{R}^n$ and $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$, let v_i and M_{ij} be the i-th component and (i,j) element of v and M, respectively. For $v, w \in \mathbb{R}^n$ and $M, N \in \mathbb{R}^{n\times n}$, let $v \le w$ and $M \le N$ denote $v_i \le w_i$, $\forall i$ and $M_{ij} \le N_{ij}$, $\forall i, j$, respectively. We say M is nonnegative if $M \ge 0$. We also say $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ is reducible if and only if for some permutation matrix P, the matrix $P^T AP$ is block upper triangular. If A is not reducible, we say A is irreducible. The following is a well-known property for irreducible nonnegative matrices:

Theorem 1 (Frobenius [1, 2]) *Let $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ be irreducible and nonnegative, $\rho(A)$ be the spectral radius of A, and λ_i, $i = 1, \dots, n$ be eigenvalues of A such that $|\lambda_1| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$. Then, the followings are true:*

(a) $\lambda_1 = \rho(A) > 0$.
(b) *There exists an eigenvector x^* corresponding to λ_1 such that $x^* > 0$.*
(c) *If $A \ge B \ge 0$ for $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$, then $\lambda_1 \ge \rho(B)$ holds. The equality $\lambda_1 = \rho(B)$ follows only if $A = B$.*
(d) *The algebraic multiplicity of λ_1 is one.*

We call λ_1, x^*, and (λ_1, x^*) the Perron root, vector, and pair, respectively.

We consider computing rigorous error bounds for $\tilde{\lambda}$ and $\tilde{x}$, where $\tilde{\lambda}$ and $\tilde{x}$ are numerical results for λ_1 and x^*, respectively. For computing the error bounds, we can apply verification methods for a few specified eigenpairs (e.g., [3]), which require $\mathcal{O}(n^3)$ operations in general. To the author's best knowledge, only Nagato and Ishii [4] propose a verification algorithm designed specifically for the Perron root of a nonnegative matrix. Although this algorithm is applicable not only to irreducible matrices but also to reducible matrices and requires only $\mathcal{O}(n^2)$ operations, it does not compute the error bound for $\tilde{x}$.

The purpose of this talk is to propose two verification algorithms for the Perron pairs of an irreducible nonnegative matrix. Particular emphasis is put on the computational efficiency of these algorithms which has only $\mathcal{O}(n^2)$ operations under an assumption. The algorithms do not assume but prove A to be irreducible. We introduce a technique for obtaining smaller error bounds.

For $v \in \mathbb{R}^n$, let $\min(v) := \min_i(v_i)$, $\max(v) := \max_i(v_i)$, and $|v| := [|v_1|, \dots, |v_n|]^T$. Let $\mathbb{R}_{++} := (0, \infty)$, $\mathbb{R}^n_{++} := \{v \in \mathbb{R}^n : v > 0\}$, and $\mathbb{R}^{n\times n}_{+} := \{M \in \mathbb{R}^{n\times n} : M \ge 0\}$. Let I_n be the $n \times n$ identity matrix, ./ be pointwise division, and $\mathbb{1}_n := [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^n_{++}$. Let $e^{(k)}$ be the k-th column of I_n, and $I^{(k)} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times n}$ and $J^{(k)} \in \mathbb{R}^{n\times(n-1)}$ be I_n without the k-th row and column, respectively. A real square matrix A is called a Z-matrix if $A_{ij} \le 0$, $\forall i \ne j$. It is clear that any Z-matrix can be written as $\mu I_n - B$ with $B \ge 0$. A Z-matrix $\mu I_n - B$ is called an M-matrix if $\mu > \rho(B)$.

2 Verification theory

We first present

Theorem 2 *Let $A \in \mathbb{R}^{n\times n}_{+}$, $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n_{++}$, $\tilde{\lambda} \in \mathbb{R}_{++}$, $r := A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x}$ and $\varepsilon := \max(|r|./\tilde{x})$. It then follows that $|\tilde{\lambda} - \rho(A)| \le \varepsilon$.*

Let $k \in \{1, \dots, n\}$ satisfy $\tilde{x}_k = \max(\tilde{x})$, and $x^* \in \mathbb{R}^n_{++}$ be a Perron vector of A such that $x^*_k = \tilde{x}_k$. Since $J^{(k)}I^{(k)}$ coincides with I_n except $(J^{(k)}I^{(k)})_{kk} = 0$, we have $x^* = \tilde{x}_k e^{(k)} + J^{(k)}I^{(k)}x^*$ and $\tilde{x} = \tilde{x}_k e^{(k)} + J^{(k)}I^{(k)}\tilde{x}$, so that $x^* - \tilde{x} = J^{(k)}I^{(k)}(x^* - \tilde{x})$. Premultiplying $(\rho(A)I_n - A)x^* = 0$ by $I^{(k)}$ gives

$$I^{(k)}(\rho(A)I_n - A)(\tilde{x}_k e^{(k)} + J^{(k)}I^{(k)}x^*) = 0.$$

From this and some calculation, we have

$$\begin{aligned}&(\rho(A)I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)})I^{(k)}(x^* - \tilde{x})\\&= I^{(k)}(A\tilde{x} - \rho(A)\tilde{x}).\end{aligned}$$

Therefore, if $\rho(A)I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)}$ is nonsingular, we obtain

$$\begin{aligned}&I^{(k)}(x^* - \tilde{x})\\&= (\rho(A)I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)})^{-1}I^{(k)}(A\tilde{x} - \rho(A)\tilde{x}).\end{aligned}$$

In order to show the nonsingularity, we present

Lemma 1 *Let $k \in \{1, \ldots, n\}$ and $A \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ be irreducible. Then, $\rho(A)I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)}$ is an M-matrix.*

From Lemma 1, there exists $v \in \mathbb{R}_{++}^{n-1}$ such that $(\rho(A)I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)})v > 0$, which can be obtained by solving $(\tilde{\lambda}I_{n-1} - I^{(k)}AJ^{(k)})v^* = \mathbb{1}_{n-1}$ via an iterative method. We then have

Theorem 3 *Let $v, w \in \mathbb{R}_{++}^{n-1}$, $s := I^{(k)}(|r| + \varepsilon\tilde{x})$, $\underline{\lambda} := \min((A\tilde{x})./\tilde{x})$, $t := (s + \max(s./w)$ $I^{(k)}AJ^{(k)}v)/\underline{\lambda}$, and $u := J^{(k)}t$. If $w \le (\rho(A)I_{n-1}$ $-I^{(k)}AJ^{(k)})v$, then $|x^* - \tilde{x}| \le u$.*

The algorithms compute ε and u. If the computational cost of the iterative method is $\mathcal{O}(n^2)$, then that of the algorithms is also $\mathcal{O}(n^2)$.

We need to verify that A is irreducible. If $A > 0$, then the irreducibility is obvious. Otherwise, we can verify it by showing that the digraph associated to A is strongly connected. By executing a graph algorithm, we can check the strong connectivity.

3 A technique for smaller error bounds

We need r such that $\|r\|_2$ is small. Thus, more accurate $\tilde{\lambda}$ and $\tilde{x}$ are necessary. We can obtain them via a Newton method.

Since $x_k^* = \tilde{x}_k$, we correct the unknown quantities $I^{(k)}x^*$ and $\rho(A)$ into $y \in \mathbb{R}^n$, i.e., we consider finding y with $y_k = \rho(A)$ and $I^{(k)}y = I^{(k)}x^*$. Then, $(\rho(A)I_n - A)x^* = 0 \Leftrightarrow \mathcal{F}(y) = 0$, where

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(y) \ := \ &(\tilde{x}_k e^{(k)}e^{(k)T} - AJ^{(k)}I^{(k)})y\\&+e^{(k)T}yJ^{(k)}I^{(k)}y - \tilde{x}_k Ae^{(k)}.\end{aligned}$$

Let $\tilde{y} \in \mathbb{R}_{++}^n$ satisfy $I^{(k)}\tilde{y} = I^{(k)}\tilde{x}$ and $\tilde{y}_k = \tilde{\lambda}$. The Fréchet derivative $\mathcal{F}'_{\tilde{y}}(h)$ of $\mathcal{F}$ at $\tilde{y}$ applied to $h \in \mathbb{R}^n$ can be written as

$$\mathcal{F}'_{\tilde{y}}(h) = (\tilde{x}e^{(k)T} - (A - \tilde{\lambda}I_n)J^{(k)}I^{(k)})h.$$

If $\tilde{x}e^{(k)T} - (A - \tilde{\lambda}I_n)J^{(k)}I^{(k)}$ is nonsingular, we can define a Newton operator

$$\mathcal{N}(y) := y - (\tilde{x}e^{(k)T} - (A - \tilde{\lambda}I_n)J^{(k)}I^{(k)})^{-1}\mathcal{F}(y).$$

Since $\mathcal{F}(\tilde{y}) = -r$, a correction term for $\tilde{y}$ is the solution $z^* \in \mathbb{R}$ to the linear system

$$(\tilde{x}e^{(k)T} - (A - \tilde{\lambda}I_n)J^{(k)}I^{(k)})z^* = r. \qquad (1)$$

We can not assert that $\tilde{x}e^{(k)T} - (A - \tilde{\lambda}I_n)J^{(k)}I^{(k)}$ is nonsingular. As Theorem 4 implies, however, we can expect the nonsingularity.

Theorem 4 *There exists $k_* \in \{1, \ldots, n\}$ such that $x^*e^{(k_*)T} - (A - \rho(A)I_n)J^{(k_*)}I^{(k_*)}$ is nonsingular.*

We numerically solve (1) via the iterative method and obtain an approximate solution $z \in \mathbb{R}^n$. Then, we can expect $\tilde{\lambda} + z_k$ and $\tilde{x} + J^{(k)}I^{(k)}z$ are more accurate than $\tilde{\lambda}$ and $\tilde{x}$, respectively. Numerical results will be given at the talk.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number JP16K05270.

References

[1] G. Frobenius, Über Matrizen aus positiven Elementen, 1, Sitzungsber. Königl. Preuss. Akad. Wiss., (1908), 471–476.

[2] G. Frobenius, Über Matrizen aus positiven Elementen, 2, Sitzungsber. Königl. Preuss. Akad. Wiss., (1909), 514–518.

[3] T. Yamamoto, Error bounds for computed eigenvalues and eigenvectors, Numer. Math., 34 (1980), 189–199.

[4] K. Nagatou and Y. Ishii, Validated computation tool for the Perron-Frobenius eigenvalues, Kyushu Univ. Preprint Series in Math., (2008), `https://catalog.lib.kyushu-u.ac.jp/opac_download_md/10751/2008-1.pdf`

有理関数の合成による伝達関数の改良とそれに対応するフィルタの構成について

村上 弘 [1]
[1] 首都大学東京 数理科学専攻
e-mail : mrkmhrsh@tmu.ac.jp

概要　有理関数であるフィルタの伝達関数に対して，その遷移域の幅を狭める変換を行なう有理関数を合成することにより，弁別の鋭さを増した伝達関数を表す有理関数が得られる．その変換に用いる有理関数あるいは多項式として，これまで電気回路論の典型フィルタ 4 種類のうちで，バターワース型，チェビシェフ型，逆チェビシェフ型と呼ぶ 3 種類に倣ったものを採用して構成されるフィルタを具体的に示してきた．今回は残っていた楕円型に倣った構成を示す．

はじめに　実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ で固有値 λ が指定区間 $[a, b]$ にあるものをフィルタ対角化法を用いて解くとする．これまで「単一のレゾルベントの多項式型のフィルタ」の伝達関数に対してうまく選んだ実有理関数を合成することにより特性の改良された伝達関数を作り，それに対応するフィルタを構成して用いる方法を扱ってきた [1, 2, 3]．合成用の実有理関数の次数が ℓ のとき，合成から導かれるフィルタは $\lceil \ell/2 \rceil$ 個のレゾルベントを用いて構成できる．レゾルベントの作用を与える連立 1 次方程式を直接法で解く場合は，レゾルベントと同数の行列分解が必要なので，良い特性をなるべく小さい次数 ℓ で実現したい．

1. 有理関数合成によるフィルタ特性の改善

1.1 単一のレゾルベントの多項式型フィルタ

$\lambda \in [a, b]$ と $t \in [0, 1]$ の間の線形変換で固有値座標に対する正規化座標 t を定義する．フィルタは単一のレゾルベントの n 次多項式で，多項式として Chebyshev 多項式を用いる簡易型とし，その伝達関数 $g(t)$ を $g(t) = g_{\mathrm{s}} T_n(2x(t) - 1)$, $x(t) \equiv (\mu + \sigma)/(t + \sigma)$ とする．ただし $\mu{>}1$, $\sigma{>}0$ である．この伝達関数の定義域 $[0, \infty]$ を通過域 $[0, 1]$，遷移域 $(0, \mu)$，阻止域 $[\mu, \infty]$ に 3 分割する．通過域と遷移域では $g(t)$ は単調減少で，通過域での最小値 $g(1)$ を g_{p} とし，最大値 $g(0)$ は 1 に規格化する．また阻止域では $|g(t)| \le g_{\mathrm{s}}$ になる．すると n，g_{s}，g_{p} が指定されると $u_h \leftarrow \frac{1}{2n}\cosh^{-1}(1/g_{\mathrm{s}})$，$u_\ell \leftarrow \frac{1}{2n}\cosh^{-1}(g_{\mathrm{p}}/g_{\mathrm{s}})$，$\sigma \leftarrow \frac{\cosh^2 u_\ell}{\sinh(u_h+u_\ell)\sinh(u_h-u_\ell)}$，　$\mu \leftarrow \sigma \sinh^2 u_h$ により σ と μ が求まり，伝達関数 $g(t)$ が決まる．しかし，簡易型でもあり，この構成法では伝達関数 $g(t)$ の特性をあまり良いものにはできない．そこで有理関数の合成により遷移域の幅を狭める．

1.2 関数合成による特性の改善

$g(t)$ にうまく選んだ実有理関数 $h(t)$ を合成して $\widehat{g}(t) \equiv g(h(t))$ を作り，Chebyshev 多項式の次数 n や 2 つの閾値 g_{p} と g_{s} は変えずに，合成された関数 $\widehat{g}(t)$ の遷移域の幅だけを縮小する．それに用いる合成用の実有理関数 $h(t)$ は次の性質を持つとする．

- 区間 $[0, 1]$ で $[0, 1]$ への全射.
- 区間 $(1, \xi)$ で $(1, \mu)$ への全射で単調増加.
- 区間 $[\xi, \infty]$ での値域は $[\mu, \infty]$.

すると合成関数 $\widehat{g}(t) = g(h(t))$ も有理関数で，$\widehat{g}(t)$ の通過域，遷移域，阻止域を $[0, 1]$，$(1, \xi)$，$[\xi, \infty]$ とすれば，それぞれに対する値域は $[g_{\mathrm{p}}, 1]$，$(g_{\mathrm{s}}, g_{\mathrm{p}})$，$[-g_{\mathrm{s}}, g_{\mathrm{s}}]$ となり，伝達率の閾値 g_{p} と g_{s} は合成前の $g(t)$ と同じになる．そうして遷移域と阻止域の境界の座標 μ は合成により ξ に変わり，$\mu = h(\xi)$ から $\xi < \mu$ であれば遷移域の幅は縮小される．なお $h(t)$ が偶関数なら，$\widehat{g}(t)$ の定義域と各区間は自然に原点対称に拡張できる．

1.3 典型フィルタを模倣した合成用の関数

電気回路論の 4 種類の典型フィルタの構成法を模倣して，合成用の ℓ（≥ 2）次の実有理関数 $h(t)$ を次のように定義する．B-合成の場合は $h(t) \equiv t^\ell$ で $\xi = \mu^{1/\ell}$ であり，C-合成の場合は $h(t) \equiv \frac{1}{2}\{1 + T_\ell(t)\}$ で，$\xi = \cosh(\frac{2}{\ell}\sinh^{-1}\sqrt{\mu - 1}\,)$ であり，I-合成の場合は $h(t) \equiv \{1 + T_\ell(\xi)\}/\{1 + T_\ell(\xi/t)\}$ で，$\xi = \cosh(\frac{2}{\ell}\sinh^{-1}\sqrt{\mu - 1}\,)$（C-合成と同じ式）である．今回導入する楕円型を模倣した E-合成の場合については次節で述べる．

2. E-合成によるフィルタ

2.1 楕円有理関数

楕円関数 cd を用いた媒介変数 ϕ による楕円有理関数 $R_\ell(\xi, t)$ の表示を $R_\ell(\xi, t) = \mathrm{cd}\big(\ell\phi K(L^{-1}), L^{-1}\big)$，$t = \mathrm{cd}\big(\phi K(\xi^{-1}), \xi^{-1}\big)$ とする [4]．ただし $\xi{>}1$，$L{>}1$ で，$K(k)$ は母数 k の第 1 種完全楕円積分 $K(k) \equiv \int_0^{\pi/2}(1 - k^2\sin^2\theta)^{-1/2}d\theta$ であり，$\mathrm{cd}(u, k)$ は母数 k のヤ

コビの楕円 sn 関数を用いて $\mathrm{cd}(u,k) \equiv \mathrm{sn}(u+K(k),k)$ として定義される偶関数である．

2.2「次数方程式」 媒介変数表示の $R_\ell(\xi,t)$ が ℓ 次の有理関数であるには，次数方程式と呼ばれる関係 $K'(L^{-1})/K(L^{-1}) = \ell\, K'(\xi^{-1})/K(\xi^{-1})$ を L と ξ が満たす必要がある [4]．ここで $k' = \sqrt{1-k^2}$ を k の補母数として $K'(k) \equiv K(k')$．

楕円ノーム関数 $q(k) \equiv \exp\{-\pi K'(k)/K(k)\}$ の逆関数は $q^{-1}(z) = 4\sqrt{z}\,\{\sum_{m=1}^{\infty} z^{m(m-1)}\}^2/\{1+2\sum_{m=1}^{\infty} z^{m^2}\}^2$ を用いて計算できる．すると次数方程式は $q(L^{-1}) = \{q(\xi^{-1})\}^\ell$ とも表せるので，この形の式を次数が ℓ のときに楕円ノーム関数とその逆関数を用いて解くと ξ から L が，あるいは逆に L から ξ が，計算できる．

2.3 楕円有理関数の性質 楕円有理関数 $R_\ell(\xi,t)$ は t の ℓ 次の実有理関数で，以下の性質を持つ（$\xi{>}1$ と $L{>}1$ は次数方程式を満たすとする）[4]．

- 次数 ℓ の偶奇に従って偶関数，奇関数．
- $t \in [0,1]$ では関数値は等幅振動性を持ち，$|R_\ell(\xi,t)| \le 1$，$R_\ell(\xi,1) = 1$．
- $t \in (1,\xi)$ では関数値は単調増加．
- $t \in [\xi,\infty]$ では関数値の逆数は等幅振動性を持ち，$|R_\ell(\xi,t)| \ge L$，$R_\ell(\xi,\xi) = L$．

そのほか $R_\ell(\xi,\xi/t) = L/R_\ell(\xi,t)$ も成り立つ．

2.4 E-合成用の有理関数 いま $h(t) \equiv \frac{1}{2}(L+1)\{1+R_\ell(\xi,t)\}/\{L+R_\ell(\xi,t)\}$ と定義すると，$h(t)$ は ℓ 次の実有理関数で関数の合成用に要請された性質を満たすことが確認できる．ただし $\mu = h(\xi)$ から，関係 $\mu = (L+1)^2/(4L)$ あるいはその逆 $L = (\sqrt{\mu}+\sqrt{\mu-1})^2$ が必要である．

2.5 E-合成による伝達関数の設計法の例 多項式の次数 n と，閾値 g_{p} と g_{s} をそれぞれ指定すれば，σ と μ が決まる．L の値も μ から決まる．あとは次数 ℓ が決まれば $h(t)$ が決まる．

- ℓ を指定する場合は，次数方程式により L から ξ を求めれば，$\widehat{g}(t)$ の決定は完了．
- ξ の上限 $\xi_{\max}$ を指定する場合は，実数値 $\{K'(L^{-1})/K(L^{-1})\}/\{K'(\xi_{\max}^{-1})/K(\xi_{\max}^{-1})\}$ 以上の整数値を ℓ に選べば，次数方程式により L から求めた ξ は $\xi_{\max}$ 以下になる．

2.6 フィルタの $\widehat{g}(t)$ からの構成 ℓ 次の実有理関数 $\widehat{x}(t) = x(h(t))$ の複素数での部分分数分解を $\widehat{x}(t) = c_\infty + \sum_{j=1}^{\ell} c_j/(t-t_j)$ とする．極は ℓ 個で重複がなく，実数の極は ℓ が奇数の場合にだけ 1 つ存在する．虚数の極は複素共役対をなし，複素共役対の極の係数は複素共役対である．

部分分数分解は以下の手順で構成できる．係数 c_∞ は ℓ が奇数なら $\frac{2(\mu+\sigma)}{L+(2\sigma+1)}$，$\mathrm{mod}(\ell,4){=}0$ なら 1，$\mathrm{mod}(\ell,4){=}2$ なら 0 である．$F(u,k)$ を第 1 種楕円積分とし，$\varphi = \cos^{-1}\frac{\sqrt{L^2+2(2\sigma+1)L+1}}{(2\sigma+1)L+1}$ から実数 $y = F(\varphi,(L^{-1})')$ を求めて $\omega_j = \frac{1}{\ell}\{4j-2-\sqrt{-1}\,y/K(L^{-1})\}$ とおくと，極とその係数は $t_j = -\mathrm{sn}\{(\omega_j-1)K(\xi^{-1}),\xi^{-1}\}$，$c_j = \frac{-2(\mu+\sigma)(L^2-1)}{\{L+(2\sigma+1)\}\{(2\sigma+1)L+1\}} \times \frac{1}{\Psi(t_j)}$，$j{=}1,2,\ldots,\ell$ である．ここで $\Psi(t) \equiv \mathrm{mod}(\ell,2)/t + 2t\sum_{i=1}^{\lfloor \ell/2 \rfloor}\{1/(t^2-x_i^2) - 1/(t^2-\widetilde{x}_i^2)\}$ は $R_\ell(\xi,t)$ の対数微分で $x_i = \mathrm{sn}\left[\frac{1}{\ell}\{2i-1+\mathrm{mod}(\ell,2)\}K(\xi^{-1}), \xi^{-1}\right]$，$\widetilde{x}_i = \xi/x_i$，$i{=}1,2,\ldots,\lfloor \ell/2 \rfloor$ である．

いま $\widehat{x}(t)$ の部分分数分解に対応するレゾルベントの線形結合を $\widehat{\mathcal{X}} = c_\infty I + \sum_{j=1}^{\ell}\gamma_j \mathcal{R}(\rho_j)$ とすると $\lambda \in [a,b]$ と $t \in [-1,1]$ を対応させるなら $\rho_j = \frac{a+b}{2} + (\frac{b-a}{2})t_j$，$\gamma_j = (\frac{b-a}{2})c_j$ である．

実ベクトルに対する $\widehat{\mathcal{X}}$ の作用を，複素対称性を用いて虚部が非負のシフト ρ_j を持つレゾルベントの項 $\gamma_j\mathcal{R}(\rho_j)$ を適用した結果のベクトルの実部を合計して構成すると，必要なレゾルベントはシフトの虚部が正のもの $\lfloor \ell/2 \rfloor$ 個と，ℓ が奇数の場合にシフトが実数のもの 1 つになる．

伝達関数 $\widehat{g}(t) = g_{\mathrm{s}} T_n(2\widehat{x}(t)-1)$ に対応するフィルタは $\widehat{\mathcal{F}} = g_{\mathrm{s}} T_n(2\widehat{\mathcal{X}}-I)$ である．実ベクトルに作用素 $2\widehat{\mathcal{X}}-I$ の n 次 Chebyshev 多項式を適用する計算は，漸化式の形で実装できる．

※会場で E-合成によるフィルタの実験例を示す

参考文献

[1] 村上 弘, 少数のレゾルベントの多項式型フィルタを用いた一般固有値問題の解法, 情報処理学会研究報告, Vol.2018-HPC-165, No.15(2018), pp.1–21.

[2] 村上 弘, フィルタにレゾルベントの線形結合の多項式を用いた複素エルミート定値一般固有値問題の解法, 情報処理学会研究報告, Vol.2018-HPC-166, No.10(2018), pp.1–17.

[3] Hiroshi Murakami, Filters Consist of a Few Resolvents to Solve Real Symmetric-Definite Generalized Eigenproblems, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol.36, No.2(2019),pp.579–618.

[4] Miroslav D. Lutovac, Dejan V. Tošić and Brian L. Evans : §12, §13, *Filter Design for Signal Processing*, Prentice Hall, 2001.

確率微分方程式の弱い近似で使用される近似正規確率変数について

齊藤 善弘 [1], 中島 貴志 [2]
[1] 岐阜聖徳学園大学経済情報学部，[2] 岐阜聖徳学園大学大学院経済情報研究科 M2
e-mail : saito@gifu.shotoku.ac.jp

1 はじめに

1 次元すなわちスカラー自励系の伊藤型確率微分方程式に対する確率初期値問題 (SIVP)

$$\begin{aligned} \mathrm{d}X(t) = \quad & f(X(t))\,\mathrm{d}t + g(X(t))\,\mathrm{d}W(t), \\ & t > 0, \quad X(0) = X_0 \end{aligned} \tag{1}$$

を考える．ここで $W(t)$ は標準ウィナー過程である．確率微分方程式の数値スキームの安定性について研究されている [1, 2, 3, 4, 5]．特に Bryden and Higham [1] や Higham [3] は θ・丸山スキーム (θ-Maruyama scheme) に対する漸近安定性の結果を与えた．本講演ではオイラー・丸山スキーム ($\theta = 0$) のみを取り扱う．オイラー・丸山スキームは，SIVP(1) の $t = t_n = nh$ ($h > 0$) における解 $X(t_n)$ に対する近似解を X_n とすると，次式で与えられる．

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n)h + g(X_n)\xi_n\sqrt{h}. \tag{2}$$

ここで $h = t_{n+1} - t_n$ はステップ幅を意味し，各 ξ_n は平均 0，分散 1 の独立な標準正規確率変数 $N(0;\ 1)$ である．また，$\xi_n\sqrt{h}$ でもってウィナー過程の増分 $\Delta W_n = W(t_{n+1}) - W(t_n)$ を模擬する [4]．オイラー・丸山スキームの強い収束次数は 1/2，弱い収束次数は 1 である [4]．オイラー・丸山スキームを弱い近似として使用する場合，標準正規確率変数 ξ_n の代わりにつぎの性質を満たす近似正規確率変数 $\hat{\xi}_n$ で代用しても収束次数 1 を達成することが知られている．

$$\mathbb{E}[\hat{\xi}_n] = \mathbb{E}[(\hat{\xi}_n)^3] = 0, \quad \mathbb{E}[(\hat{\xi}_n)^2] = 1 \tag{3}$$

ここで，$\mathbb{E}[\cdot]$ は期待値を表す．性質 (3) を満たす確率変数として，たとえば

$$P(\hat{\xi}_{2,n} = \pm 1) = \frac{1}{2} \tag{4}$$

や

$$\hat{\xi}_{r,n} = \sqrt{12}(u_n - 1/2) \tag{5}$$

がある [4, 7]．ここで u_n は区間 $[0, 1)$ に分布する一様分布確率変数である．近似正規確率変数 (4) は 2 点分布確率変数と呼ばれる．近似正規確率変数を用いたスキームを簡易スキーム (simplified scheme) と呼ぶことにし，

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n)h + g(X_n)\hat{\xi}_n\sqrt{h} \tag{6}$$

と表す．齊藤は，2 つの近似正規確率変数 (4) および (5) を取り上げ，オイラー・丸山簡易スキームの漸近安定性について調べた [8]．そして，新しい近似正規確率変数を提案し，そのオイラー・丸山簡易スキームの漸近安定性を調べ，結果を述べた [9]．これと同様の構成法で弱い 2 次法および 3 次法に対する近似正規確率変数をつくることができ、多点分布確率変数、矩形近似確率変数および折れ線近似確率変数をオイラー・丸山簡易スキームに装着した場合の漸近安定性を調べた [10]．また弱い近似に対して安定性の面で優れ、かつ実用的な確率変数の探索が課題であると述べた．本講演では，弱い 2 次法に対する近似正規確率変数を弱い 1 次法の条件 (3) を満たすように一般化し，オイラー・丸山簡易スキームの場合に安定性の面で優れた近似正規確率変数を提案する．

2 漸近安定性解析

オイラー・丸山簡易スキーム (6) の漸近安定性を調べる場合，つぎの乗法的ノイズをもつスカラー線形テスト方程式

$$\begin{aligned} \mathrm{d}X(t) = \quad & \lambda X(t)\mathrm{d}t + \mu X(t)\mathrm{d}W(t), \\ & t > 0, \quad X(0) = 1 \end{aligned} \tag{7}$$

を考える．ここで，定数 λ と μ は実数，ただし $\mu \geq 0$ とする．テスト方程式 (7) の厳密解は

$$X(t) = \exp\left(\left(\lambda - \frac{1}{2}\mu^2\right)t + \mu W(t)\right) \tag{8}$$

となるから，解 (8) は $\lambda - \frac{1}{2}\mu^2 < 0$ のとき，平衡解 $X(t) \equiv 0$ が大域的確率漸近安定になる．すなわち

$$\lim_{t\to\infty} |X(t)| = 0, \quad \text{w.p.1}$$

を満たす．他方，数値スキームによる近似解 X_n が，大域的確率漸近安定性と同様の性質，

$$\lim_{n\to\infty} |X_n| = 0, \quad \text{w.p.1} \tag{9}$$

を満たすことが期待される．そこで，数値スキームによる近似解 X_n が性質 (9) を満たすとき，数値スキームは漸近安定性をもつと呼ぶことにする [1, 3]．

さて，オイラー・丸山簡易スキーム (6) をテスト方程式 (7) に適用すると漸化式

$$X_{n+1} = \left(1 + p + \sqrt{q}\hat{\xi}_n\right) X_n$$

を得る．ここで，$p = \lambda h$, $q = \mu^2 h$ とおいた．

オイラー・丸山簡易スキームの安定領域 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^2$ を次のように定義する．

$$\mathcal{R} := \{(p,q) : q \geq 0 \text{ かつオイラー・丸山簡易スキームが漸近安定性をもつ}\}$$

テスト方程式 (7) が大域的確率漸近安定となる条件 $\lambda - \mu^2/2 < 0$ は $q > 2p$ となることに注意する．

弱い 2 次法に対して，つぎの 3 点分布確率変数

$$P(\hat{\xi}_{3,n} = \pm\sqrt{3}) = \frac{1}{6}, \quad P(\hat{\xi}_{3,n} = 0) = \frac{2}{3} \tag{10}$$

がある [4]．弱い 1 次法の条件 (3) を満たすようにするには

$$P(\hat{\xi}^x_{3,n} = \pm x) = \frac{1}{2x^2}, P(\hat{\xi}^x_{3,n} = 0) = 1 - \frac{1}{x^2} \tag{11}$$

とする．ここでパラメータ $x \geq 1$ で，$x = 1$ のとき 2 点分布確率変数 (4), $x = \sqrt{3}$ のとき 3 点分布確率変数 (10) と一致することに注意する．近似正規確率変数 (11) を一般 3 点分布確率変数と呼ぶことにし，一般 3 点分布確率変数をオイラー・丸山簡易スキームに装着した場合の安定領域を $\mathcal{R}^x$ と表す．領域 $\mathcal{R}^x$ の部分集合で，つぎのような長方形の領域 $\mathcal{R}^*$

$$\mathcal{R}^* := \{(p,q) : -2 < p < 0,\ 0 \leq q < b\}$$

を考え，講演では $\mathcal{R}^* \subset \mathcal{R}^x$ となり，$\mathcal{R}^*$ が最大，すなわち b の値が最大となる場合の x の値を定め，オイラー・丸山簡易スキームの場合に，安定性の面で優れた近似正規確率変数を提案する．

謝辞　本研究は，令和元年度岐阜聖徳学園大学研究助成金を受けた．

参考文献

[1] Bryden, A. and Higham, D. J., On the boundedness of asymptotic stability regions for the stochastic theta method, BIT Numerical Mathematics, **43** (2003), 1–6.

[2] Burrage, K. and Tian, T., The composite Euler method for stiff stochastic differential equations, J. Comput. Appl. Math., **131**(2001), 407–426.

[3] Higham, D. J., Mean-square and asymptotic stability of the stochastic theta method, SIAM J. Numer. Anal., **38**(2000), 753–769.

[4] Kloeden, P.E., and Platen, E., Numerical Solution of Stochastic Differential Equations, Springer-Verlag, Berlin, 1992.

[5] 三井斌友，小藤俊幸，齊藤善弘, 微分方程式による計算科学入門, 共立出版, 東京，2004.

[6] Maruyama, G., Continuous Markov processes and stochastic equations, Rend. Circ. Mat. Palermo, **4**(1955), 48–90.

[7] Greiner, A., Strittmatter, W., and Honerkamp, J., Numerical integration of stochastic differential equations, J. Statist. Physics **51**(1987), 95–108.

[8] 齊藤善弘，オイラー・丸山簡易スキームの漸近安定性，応用数学分科会講演アブストラクト，日本数学会 2012 年度年会，93–96.

[9] 齊藤善弘，θ・丸山簡易スキームの数値的漸近安定性，応用数学分科会講演アブストラクト，日本数学会 2012 年度秋季総合分科会，87–88.

[10] 齊藤善弘，確率微分方程式の弱い近似で使用される確率変数について，日本応用数理学会論文誌，**25** (2015), 267–283.

辞書式順序に関するブーリアングレブナー基底の再帰生成アルゴリズム

佐川 嘉信 [1], 井戸川 知之 [2]
[1] 芝浦工業大学大学院理工学研究科, [2] 芝浦工業大学システム理工学部
e-mail： mf19034@sic.shibaura-it.ac.jp

1 準備

変数列 $X_1,\ldots,X_n$ を $\bar{X}$ で表す．ブール環 $\mathbb{B}$ を係数にもつ多項式環 $\mathbb{B}[\bar{X}]$ に対し, 剰余環

$$\mathbb{B}(\bar{X})=\mathbb{B}[\bar{X}]/\left\langle X_1^2-X_1,\ldots,X_n^2-X_n\right\rangle$$

はブール環であり, $\mathbb{B}(\bar{X})$ をブール多項式環という．ブール多項式 f の先頭項を $\mathbb{B}[\bar{X}]$ 上と同様に定義し, $\mathrm{LT}(f)$ で表す.

定義 1. イデアル $I\subseteq\mathbb{B}(\bar{X})$ に対し,

$$\langle\mathrm{LT}(I)\rangle=\langle\mathrm{LT}(G)\rangle$$

なる有限な $G\subseteq I$ を, I のブーリアングレブナー基底という.

一般のブール環上の議論は [1] に詳しい．ここでは, $\mathbb{B}=\mathbb{Z}_2$ のみを扱う．$f\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ に対し, $\mathrm{Var}(f)$ で f に含まれる変数の集合を表す. 非定数 f に対し, $\mathrm{Top}(f)=\max\mathrm{Var}(f)$ で定義する．また, $f\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ に対し, 変数 X_i に $a\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ を代入したものを $f|_{X_i=a}$ で表す.

2 再帰的アルゴリズム

命題 2. $I\subseteq\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ をイデアル, $\{f_1,\ldots,f_s\}$ を I の基底とし, $g=f_1\vee\cdots\vee f_s$ とおく．ここで, $p\vee q=p+q+pq$. このとき, $I=\langle g\rangle$. すなわち, $\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ は単項イデアル環である.

以降, 単項式順序として辞書式順序を用いる.

定理 3. $g\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})\backslash\mathbb{Z}_2$ に対し, $X_i=\mathrm{Top}(g)$, $p=g|_{X_i=1}$, $q=g|_{X_i=0}$ とおく．このとき, $\langle pq\rangle$, $\langle p\vee q\rangle$ のブーリアングレブナー基底をそれぞれ G_1,G_2 とすると, $G_1\cup\{X_ih+qh\mid h\in G_2\}$ は $\langle g\rangle$ のブーリアングレブナー基底である.

定理 3 からアルゴリズム 1 が導かれる．g が定数であるとき, ブーリアングレブナー基底は自明に求まる．アルゴリズム 1 は, これを終端として, ブーリアングレブナー基底を再帰的に構成する．$\mathrm{Var}(pq)$, $\mathrm{Var}(p\vee q)\subsetneq\mathrm{Var}(g)$ に注意すれば, 再帰は有限階の深さで停止する.

一般に, アルゴリズム 1 で得られる基底は, ブーリアングレブナー基底としては冗長である．そこで, 定理 3 で G_1 と G_2 に条件を加えることで, 構成されるブーリアングレブナー基底の極小性, 簡約性を保証することができる.

アルゴリズム 1

Require: $g\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ a generator
Ensure: G a Boolean Gröbner basis of $\langle g\rangle$

```
procedure RECBGB(g)
    if Var(g) = ∅ then
        G := {g}\{0}
    else
        X_i := Top(g)
        p := g|_{X_i=1}; q := g|_{X_i=0}
        G := RECBGB(pq)
        G' := RECBGB(p ∨ q)
        for all h ∈ G' do
            G := G ∪ {X_i h + qh}
        end for
    end if
    return G
end procedure
```

系 4. 定理 3 で, G_1,G_2 の極小性を仮定すると, $G_1\cup\{X_ih+qh\mid h\in G_2,\ \mathrm{LT}(h)\notin\mathrm{LT}(G_1)\}$ は $\langle g\rangle$ の極小ブーリアングレブナー基底である.

系 5. 定理 3 で, G_1,G_2 の簡約性を仮定すると, $G_1\cup\{X_ih+\overline{qh}^{G_2}\mid h\in G_2,\ \mathrm{LT}(h)\notin\mathrm{LT}(G_1)\}$ は $\langle g\rangle$ の簡約ブーリアングレブナー基底である.

ここで, $\overline{qh}^{G_2}$ は qh の G_2 に対する正規形を表す．正規系は, $\mathbb{Z}_2[\bar{X}]$ 上と同様の手順で求まる.

定理 3 と類似の考えから, 再帰的簡約化手法も得られる．非自明なイデアル $I\subseteq\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ に対して, I 自身 I のブーリアングレブナー基底であることに注意する．$I=\langle g\rangle$ による簡約を考えると, 以下の定理 6 が得られる.

定理 6. 定数でない $f,g\in\mathbb{Z}_2(\bar{X})$ に対し, $X_i=\max(\mathrm{Top}(f),\mathrm{Top}(g))$, $p_1=f|_{X_i=1}+f|_{X_i=0}$, $p_2=f|_{X_i=0}$, $q_1=g|_{X_i=1}$, $q_2=g|_{X_i=0}$ とおく．このとき,

$$r_1=\overline{p_1}^{\langle q_1\vee q_2\rangle},\ r_2=\overline{(p_1+r_1)q_2+p_2}^{\langle q_1q_2\rangle}$$

とすると, $\overline{f}^{\langle g\rangle}=X_ir_1+r_2$.

アルゴリズム 2

Require: $f, g \in \mathbb{Z}_2(\bar{X})$
Ensure: $r = \overline{f}^{\langle g \rangle}$
  procedure $\textsc{nf}(f, g)$
    if $\textsc{IsTrivial}(f, g)$ **then**
      $r := \textsc{TrivialResult}(f, g)$
    else
      $X_i := \max(\mathrm{Top}(f), \mathrm{Top}(g))$
      $p_2 := f|_{X_i=0}$; $p_1 := f|_{X_i=1} + p_2$
      $q_1 := g|_{X_i=0}$; $q_2 := g|_{X_i=1}$
      $r_1 := \textsc{nf}(p_1,\ q_1 q_2)$
      $r_2 := \textsc{nf}((p_1 + r_1)q_2 + p_2,\ q_1 \vee q_2)$
      $r := X_i r_1 + r_2$
    end if
    return r
  end procedure

定理 6 からアルゴリズム 2 を得る．ここで，$\textsc{IsTrivial}(f, g)$ は $\overline{f}^{\langle g \rangle}$ が自明なときに真を返し，$\textsc{TrivialResult}(f, g)$ はその $\overline{f}^{\langle g \rangle}$ を返す．例えば，f, g のいずれかが定数であるとき，$\overline{f}^{\langle g \rangle}$ は自明に求まる．アルゴリズム 2 は，これらを終端として，簡約を再帰的に求める．停止性は $\max(\mathrm{Top}(f), \mathrm{Top}(g))$ の減少性から得られる．

3 実験

系 5 に基づくアルゴリズム 1 の改良版を，アルゴリズム 2 による簡約とともに実装し，実験を行った．ブール多項式の計算には BDD (binary dicision diagram)[2] を主に用い，部分的に ZDD (zero-suppressed —) による表現手法 [3] も用いた．実験として，Type IV の MQ 問題 [4] によって与えられる基底の簡約ブーリアングレブナー基底を求め，その計算時間を計測した．実験環境は，OS Linux Mint 19 Tara 64-bit, CPU Intel Atom x5-Z8350 1.44GHz, メモリ 4GB である．比較のために，数式処理システム Risa/Asir[5] の `nd_f4`，及び，SageMath[6] に含まれるブール多項式処理系 PolyBoRi[3] の `Groebner` メソッド (デフォルトオプション) を用いた．実験結果を表 1, 図 1 に示す．記録は秒単位であり，パラメータの各値に対して 10 通りの計算を行い，その平均を取った．

実験結果から，本手法 (Recbgb) と PolyBoRi の計算時間の増加傾向は類似しており，変数の数に応じた指数的な増加となっている．これは，Risa/Asir での爆発的な増加よりも穏やかである．また，本手法の計算時間は，PolyBoRi のものと比較して数百倍程度高速である．既存手法と比較して，本手法によるブーリアングレブナー基底計算が効率的であると推測できる．

表 1. 簡約ブーリアングレブナー基底の計算時間 [s]

Vars.	Pols.	Recbgb	PolyBoRi	Risa/Asir
11	7	0.007	2.514	0.146
12	8	0.011	3.438	0.361
14	9	0.027	6.701	7.739
15	10	0.041	9.972	27.828
17	11	0.118	32.912	3204.800
18	12	0.192	145.505	*overflow*
20	13	0.593	469.586	
21	14	1.038	861.415	
23	15	3.391	*overflow*	
⋮	⋮	⋮		
29	19	160.646		
30	20	333.770		

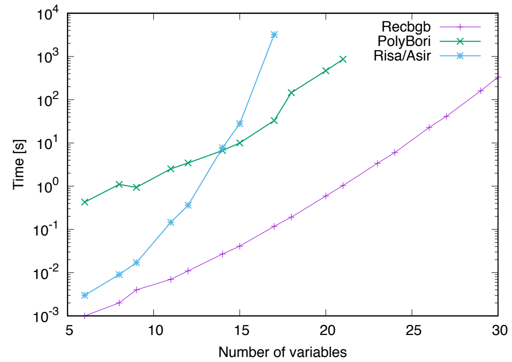


図 1. 計算時間の比較

参考文献

[1] Y. Sato, et al., Boolean Gröbner bases, J. Symb. Comput., **46** (2011), pp.622–632.

[2] S. B. Akers, Binary Decision Diagrams, IEEE Transactions on Computers, **C-27** (1978), pp.509–516.

[3] M. Brickenstein, A. Dreyer, A framework for Gröbner-basis computations with Boolean polynomials, J. Symb. Comput., **44** (2009), pp.1326–1345.

[4] T. Yasuda, et al., MQ Challenge: Hardness Evaluation of Solving Multivariate Quadratic Problems, `https://www.mqchallenge.org`.

[5] Risa/Asir, `http://www.math.kobe-u.ac.jp/Asir/asir-ja.html`.

[6] SageMath, `http://www.sagemath.org`

境界フィードバックループに無駄時間要素を含む1階双曲型システムの安定性解析

佐野 英樹 [1]
[1] 神戸大学 システム情報学研究科
e-mail : sano@crystal.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

本講演では, 境界フィードバックループに無駄時間要素を含む1階双曲型システムの安定性について論じる. この1階双曲型システムは, 向流型熱交換器のモデルとなるものである. 我々の先の研究 [1] では, 無駄時間要素を輸送方程式で置き換えた後にポート・ハミルトニアンの手法 [2] を用いて, システムが指数安定になる条件を導出したが, そこでは無駄時間が小さい場合が除外されていた [1, Proposition 2.2]. 本講演では, 任意の無駄時間に対して, 閉ループ系の安定性が保証されるフィードバックゲインの上限が, ある複素関数の H_∞-ノルムの計算によって求められることを示す. また, 数値例を通して, その上限の値を [1] による結果と比較し, 本提案手法の有効性を示す.

2 遅延境界フィードバックを伴う向流型熱交換方程式

2.1 既存結果

領域 $(0,l)$ 上で定義された次の遅延境界フィードバックを伴う向流型熱交換方程式を考えよう.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\theta_1}{\partial t}(t,x) = -\nu_1\dfrac{\partial\theta_1}{\partial x}(t,x) \\ \qquad\qquad +h_1(\theta_2(t,x)-\theta_1(t,x)) \\ \dfrac{\partial\theta_2}{\partial t}(t,x) = \nu_2\dfrac{\partial\theta_2}{\partial x}(t,x) \\ \qquad\qquad +h_2(\theta_1(t,x)-\theta_2(t,x)) \\ \theta_1(t,0)=0,\ \theta_2(t,l)=-k\theta_1(t-\tau,l) \\ \theta_1(0,x)=\theta_{10}(x),\ \ \theta_2(0,x)=\theta_{20}(x) \\ \theta_1(s,l)=\phi(s),\ \ s\in(-\tau,0) \end{cases} \tag{1}$$

ここで, $\theta_1(t,x)$, $\theta_2(t,x)$ は時刻 t, 場所 x における流体の温度, ν_1, ν_2 は流速, h_1, h_2 は熱交換率, k はフィードバックゲインを表す. τ は境界フィードバックに含まれる無駄時間である.

システム (1) の境界条件に含まれる $\theta_1(t-\tau,l)$ を, 領域 $(0,l)$ 上の速さ $\mu := \frac{l}{\tau}$ を有する輸送方程式で置き換えると (例えば [3] を参照), システム (1) は等価的に以下のように表せる.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\theta_1}{\partial t}(t,x) = -\nu_1\dfrac{\partial\theta_1}{\partial x}(t,x) \\ \qquad\qquad +h_1(\theta_2(t,x)-\theta_1(t,x)) \\ \dfrac{\partial\theta_2}{\partial t}(t,x) = \nu_2\dfrac{\partial\theta_2}{\partial x}(t,x) \\ \qquad\qquad +h_2(\theta_1(t,x)-\theta_2(t,x)) \\ \theta_1(t,0)=0,\ \ \theta_2(t,l)=-kw(t,l) \\ \theta_1(0,x)=\theta_{10}(x),\ \ \theta_2(0,x)=\theta_{20}(x) \\ \dfrac{\partial w}{\partial t}(t,x) = -\mu\dfrac{\partial w}{\partial x}(t,x) \\ w(t,0)=\theta_1(t,l) \\ w(0,x)=w_0(x) := \phi\big(\frac{1}{\mu}(l-x)\big) \end{cases} \tag{2}$$

命題 1 ([1, Proposition 2.2]) $k^2 < \frac{h_2\nu_1}{\nu_2 h_1}$ を仮定する. このとき, 無駄時間 τ が $\frac{h_1 l}{\nu_1} < \tau < \frac{h_2 l}{\nu_2 k^2}$ を満たしていれば, (2) のシステム作用素はヒルベルト空間 $[L^2(0,l)]^3$ 上で指数安定な C_0-半群を生成する. すなわち, システム (1) は指数安定である.

注意 2 無駄時間がないとき, すなわち $\tau=0$ のとき, 次の事実が知られている: (i) システム (1) は $k=0$ のとき, 指数安定である [4]. (ii) システム (1) は $k^2 < \frac{h_2\nu_1}{\nu_2 h_1}$ のとき, 指数安定である [2].

2.2 主要結果

はじめに, システム (2) を内積 $\langle f,g\rangle_X := a\langle f_1,g_1\rangle + b\langle f_2,g_2\rangle + \langle f_3,g_3\rangle$, $f=[f_1,f_2,f_3]^T\in X$, $g=[g_1,g_2,g_3]^T\in X$ を有するヒルベルト空間 $X := [L^2(0,l)]^3$ で定式化する. ここで, $a := \frac{\mu h_1}{\nu_1}$, $b := \frac{\mu h_2}{\nu_2 k^2}$, $\langle\varphi,\psi\rangle := \int_0^l \varphi(x)\overline{\psi(x)}dx$, $\varphi,\psi\in L^2(0,l)$. 非有界線形作用素 $A: D(A)\subset X\to X$ を次のように定義する.

$$Af = \begin{bmatrix} -\nu_1\frac{d}{dx}-h_1 & h_1 & 0 \\ h_2 & \nu_2\frac{d}{dx}-h_2 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu\frac{d}{dx} \end{bmatrix} f$$

$$D(A) = \{f=[f_1,f_2,f_3]^T\in[H^1(0,l)]^3;\ f_1(0)=0,\ f_2(l)=-kf_3(l),\ f_3(0)=f_1(l)\} \tag{3}$$

このとき, システム (2) は以下のように表せる.

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\theta_1(t,\cdot)\\ \theta_2(t,\cdot)\\ w(t,\cdot)\end{bmatrix} = A\begin{bmatrix}\theta_1(t,\cdot)\\ \theta_2(t,\cdot)\\ w(t,\cdot)\end{bmatrix} \tag{4}$$
$$[\theta_1(0,\cdot),\theta_2(0,\cdot),w(0,\cdot)]^T = [\theta_{10},\theta_{20},w_0]^T$$

ここで, $\theta_{10},\theta_{20},w_0 \in L^2(0,l)$ が仮定されているとする. このとき, 以下の定理を得る.

定理 3 任意の $k \in \mathbf{R}$ に対して, (3) で定義される作用素 A は X 上で C_0-半群 e^{tA} を生成する. したがって, (4) は一意的な軟解をもつ.

以降, $\alpha_1 := \frac{h_1}{\nu_1}$, $\beta_1 := \frac{h_2}{\nu_2}$, $\alpha_2 := \frac{1}{\nu_1}$, $\beta_2 := \frac{1}{\nu_2}$, $\lambda_\pm := -\frac{(\sqrt{\alpha_1}\pm\sqrt{\beta_1})^2}{\alpha_2+\beta_2}$, $k_\pm := \pm\sqrt{\frac{\beta_1}{\alpha_1}}e^{\lambda_\pm \tau}(1\mp\frac{1}{l\sqrt{\alpha_1\beta_1}})$ (複号同順) とおく. 次の補題は, 作用素 A のスペクトルを具体的に求めているものではないが, その特徴付けを与えている.

補題 4 $S = \{\lambda \in \mathbf{C}\,;\, [C(\lambda)+2k\alpha_1 e^{-\tau\lambda}]\sinh z + \frac{2z}{l}\cosh z = 0\}$ とする. ここで $z := \frac{l}{2}\sqrt{\Delta(\lambda)}$, $\Delta(\lambda) := C(\lambda)^2 - 4\alpha_1\beta_1$, $C(\lambda) := \alpha_1+\beta_1+(\alpha_2+\beta_2)\lambda$ であり, $\sqrt{\Delta(\lambda)}$ は非負の実部をもつ方をとる. このとき, A のスペクトルは次のように特徴付けられる:

- $k \neq k_\pm$ のとき, $\sigma(A) = S$
- $k = k_+$ のとき, $\sigma(A) = S \cup \{\lambda_+\}$
- $k = k_-$ のとき, $\sigma(A) = S \cup \{\lambda_-\}$

補題 4 の結果に基づき, 以下の定理を得る.

定理 5 $\alpha_1 \neq \beta_1$ とし, $|k| < \frac{\gamma}{2\alpha_1}$ を仮定する. このとき, システム (1) は任意の無駄時間 $\tau > 0$ に対して漸近安定である. ここで

$$\gamma := \inf_{\mathrm{Re}(\lambda)\geq 0}\left|C(\lambda)+\frac{2z}{l}\frac{\cosh z}{\sinh z}\right| \tag{5}$$

注意 6 (5) 式の γ の計算は, 次の H_∞-ノルムの計算と等価である.

$$\gamma = \left\|\left(C(\lambda)+\frac{2z}{l}\frac{\cosh z}{\sinh z}\right)^{-1}\right\|_\infty^{-1}$$

3 数値例

システム (1) において, $l = 1$, $\nu_1 = 0.68$, $\nu_2 = 0.72$, $h_1 = 1.586$, $h_2 = 1.635$ とする. 命題 1 より, $|k|$ の上限, すなわち $\sqrt{\frac{h_2\nu_1}{\nu_2 h_1}}$ $(= \sqrt{\frac{\beta_1}{\alpha_1}})$ は 0.9867 のように計算できる. よって, ゲイン k が $|k| < 0.9867$ を満たしているとき, システム (1) に対して許容できる無駄時間は $2.3324 < \tau < \frac{2.2708}{k^2}$ となる. 一方, 定理 5 より, システム (1) が $|k| < 1.4157$ を満たしているとき, 任意の無駄時間 $\tau > 0$ に対して漸近安定となる. これは, 本提案手法が漸近安定性の十分条件を大幅に緩めていることを示す結果である.

4 おわりに

近年, フィードバックループにおける微小な遅れに関して, ロバストでないシステムの報告がなされている (例えば, [5] とその参考文献を参照). 本研究では片方のみを考え, 両端が遅延境界フィードバックによって支配されている場合を考察しなかったが, [5] の中で述べられているように, ある双曲型境界フィードバック制御系では, ある種のフィードバック則における微小な遅れが系を不安定化する. 両端が遅延境界フィードバックによって支配された熱交換方程式の安定性解析が今後の課題である.

参考文献

[1] H. Sano, Exponential stability of heat exchangers with delayed boundary feedback, IFAC – PapersOnLine, 49-8 (2016), 43–47.

[2] J.A. Villegas, H. Zwart, Y. Le Gorrec, and B. Maschke, Exponential stability of a class of boundary control systems, IEEE Trans. Automatic Control, Vol. 54, No. 1 (2009), 142–147.

[3] M. Krstic and A. Smyshlyaev, Backstepping boundary control for first-order hyperbolic PDEs and application to systems with actuator and sensor delays, Systems Control Lett., Vol. 57 (2008), 750–758.

[4] C.Z. Xu, J.P. Gauthier, and I. Kupka, Exponential stability of the heat exchanger equation, in: Proc. of the Second European Control Conference, Vol. 1, pp. 303–307, 1993.

[5] J. Auriol, U.J.F. Aarsnes, P. Martin, and F. Di Meglio, Delay-robust control design for two heterodirectional linear coupled hyperbolic PDEs, IEEE Trans. Automatic Control, Vol. 63, No. 10 (2018), 3551–3557.

Convergence analysis of inner-iteration preconditioned GMRES method for least squares problems

Zeyu Liao[1] and Ken Hayami[1,2]

1. Department of Informatics, School of Multidisciplinary Science, SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies, Japan)
2. National Institute of Informatics, Japan

Abstract. We will explain the super-linear convergence of the inner-iteration preconditioned GMRES method for least squares problems, by considering the effect of clustered eigenvalues of the preconditioned coefficient matrix. We show that the theoretically predicted convergence behavior matches numerical experiment results.

Keywords: least squares problem · inner-iteration preconditioning · GMRES.

1 Introduction

Consider solving the least squares problem

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \qquad b \in \mathbb{R}^m, \tag{1}$$

by BA-GMRES [1] which is equivalent to applying GMRES to

$$BAx = Bb, \qquad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \qquad B \in \mathbb{R}^{n \times m}, \qquad b \in \mathbb{R}^m, \tag{2}$$

when $\mathrm{R}(B^{\mathsf{T}}BA) = \mathrm{R}(A)$. Here, $\mathrm{R}(A)$ denotes the range space of A. Then, consider using the stationary iterative method NRSOR as the preconditioner $B^{(l)}$ as in [2]. This gives a cheap preconditioner for relatively small l. Yet, it has an effect on speeding up the convergence of BA-GMRES. To understand this effect, let us look at the following [3,4].

$$\|B^{(l)} r_k\| = \min_{p_k} \|p_k(B^{(l)}A)B^{(l)} r_0\| \tag{3}$$

Here p_k is a polynomial of degree $\leq k$ which satisfies $p(0) = 1$. In [2] an upper bound of $\|B^{(l)} r_k\|$ is obtained using the spectral radius of H, where $B^{(l)}A = I - H^l$. However, the bound is pessimistic and does not explain the observed fast convergence.

Why is the inner-iteration preconditioning so effective and why is the bound so loose? If one only considers the spectral radius, one ignores the distribution of eigenvalue values of $B^{(l)}A$. The stationary iterations ensures that the spectral radius of $\rho(H)$ is not larger than 1. Thus, the eigenvalues of $B^{(l)}A$ moves towards 1 as l increases. The eigenvalues of $B^{(l)}A$ cluster but the spectral radius of $\rho(H)$ only changed a little. This is why the spectral radius of $\rho(H)$ alone can not illustrate the superlinear convergence of inner-iteration preconditioning.

After l steps of inner-iteration preconditioning, their exists a cluster near 1. Then, one can choose some eigenvalue λ_i as centers, and choose ϵ_i as the corresponding radius. Let $\epsilon = \max \epsilon_i$. Assume there are $j+1$ clusters of eigenvalues of $B^{(l)}A$. If $B^{(l)}A$ is diagonalizable we prove that at step $j+1$, the upper bound of the residual $\|B^{(l)}r_k\|$ is $\mathbf{O}(\prod_1^j(1-\lambda_j)\epsilon)$. This estimation illustrates the reason why the inner-iteration preconditioning needs less iteration steps to converge. From the clustering of the eigenvalues, at $j+1$ steps $\|B^{(l)}r_k\|$ can converge to a tiny value. Our discussion can be expand to be more general case when A contains multiple eigenvalues.

References

1. Ken Hayami, Jun-Feng Yin, and Tokushi Ito. Gmres methods for least squares problems. *SIAM J. Matrix Anal. and Appl.*, 31(5):2400–2430, 2010.
2. Keiichi Morikuni and Ken Hayami. Convergence of inner-iteration gmres methods for rank-deficient least squares problems. *SIAM J. Matrix Anal. and Appl.*, 36(1):225–250, 2015.
3. Anne Greenbaum. *Iterative methods for solving linear systems*, volume 17. SIAM, Philadelplia, 1997.
4. Youcef Saad and Martin H Schultz. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *Sci. stat. comput.*, 7(3):856–869, 1986.

日本応用数理学会 2019 年度年会実行委員会

大会委員長	時弘 哲治	東京大学大学院数理科学研究科
実行委員長	齊藤 宣一	東京大学大学院数理科学研究科
	國場 敦夫	東京大学大学院総合文化研究科
	岩田 覚	東京大学大学院情報理工学系研究科
	松尾 宇泰	東京大学大学院情報理工学系研究科
	宮本 安人	東京大学大学院数理科学研究科
	米田 剛	東京大学大学院数理科学研究科
	柏原 崇人	東京大学大学院数理科学研究科
	田内 大渡	東京大学大学院数理科学研究科
	友枝 明保	武蔵野大学工学部
	松家 敬介	武蔵野大学工学部
	山中 脩也	明星大学情報学部

問い合わせ先：annual2019@ml.jsiam.org

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics JSIAM