

マス・フォア・インダストリ研究 No.3

A decorative graphic consisting of two circles, one yellow and one green, positioned above a thick, wavy line that transitions from yellow to green. The line curves under the main title.

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

(Various aspects of nonlinear mathematical models
: continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond)

Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

編集 笥三郎

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

About the Mathematics for Industry Research

The Mathematics for Industry Research was founded on the occasion of the certification of the Institute of Mathematics for Industry (IMI), established in April 2011, as a MEXT Joint Usage/Research Center – the Joint Research Center for Advanced and Fundamental Mathematics for Industry – by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) in April 2013. This series publishes mainly proceedings of workshops and conferences on Mathematics for Industry (MfI). Each volume includes surveys and reviews of MfI from new viewpoints as well as up-to-date research studies to support the development of MfI.

October 2014

Yasuhide Fukumoto

Director

Institute of Mathematics for Industry

Various aspects of nonlinear mathematical models : continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond

Mathematics for Industry Research No.3, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

ISSN 2188-286X

Editors: Saburo Kakei

Date of issue: 24 March 2015

Publisher:

Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

Motooka 744, Nishi-ku, Fukuoka, 819-0395, JAPAN

Tel +81-(0)92-802-4402, Fax +81-(0)92-802-4405

URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>

Printed by

Social Welfare Service Corporation Fukuoka Colony

1-11-1, Midorigahama, Shingu-machi Kasuya-gun, Fukuoka, 811-0119, Japan

TEL +81-(0)92-962-0764 FAX +81-(0)92-962-0768

非線形数理モデルの諸相

：連続，離散，超離散，その先

(Various aspects of nonlinear mathematical models)
(: continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond)

編集： 笥 三郎 (立教大学)

はじめに

本書は、『非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先』と題して，2014年8月6日から8日まで，九州大学マス・フォア・インダストリ研究所において行われた研究集会の記録です。

さまざまな非線形現象のモデル化において，最も基本となるのは微分方程式であり，それを何らかの意味で差分化することでシミュレーションが行われています。より現実に近い複雑なシミュレーションを行うために，数値解法としての差分化という枠組みを越えた手法も，セル・オートマトン，離散要素法など多岐に渡って開発されており，産業界における研究開発でも利用されています。

一方，可積分系の研究から生まれた「超離散化」という手法は，連続モデル，離散モデル，ひいてはセル・オートマトンまでも一つの視点でとらえるものです。近年では非可積分系に対しても適用する研究が進展しており，特にセル・オートマトンによるモデリングに大きな影響を与えています。このような状況に鑑み，研究・開発の現場で用いられている多種多様な非線形数理モデルを持ち寄り，「超離散化」を一つの典型例として，連続系，離散系，セル・オートマトン系等を貫く数理構造を抽出し，ひいてはシミュレーション技術における新たな発展の可能性を見いだすことを目的として，今回の研究集会を企画致しました。

研究集会で扱ったテーマの特色としては，連続系と離散系の境界に注目していることがあげられます。産業界においても，例えばコピー機内のトナーのような電磁場内の微粒子系など，連続と離散の両者の側面を併せ持つ系が注目されており，既存のシミュレーションツールを越えた手法が必要となっています。研究集会では，産業界の研究開発現場からの事例を紹介されるとともに，関連する数理的な話題も合わせて取り上げ，背後にある数理的なつながりを見いだすことを試みました。そこで提示される具体的な系の振舞いと，数学サイドで培われた，連続系と離散系とのつながりを見いだす研究とが結びつけば，新たな進展のきっかけとなることが期待できます。

この場をお借りして，講演者の皆様と参加者の皆様に，あらためて感謝致します。本書を手にとっていただいた皆さんにとって，本書が新たな研究成果を生み出す一助となれば幸いです。

研究代表者 笥 三郎 (立教大学理学部)

平成 26 年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

期間： 2014 年 8 月 6 日 (水) ～ 8 日 (金)

場所： 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
数理学研究棟 3 階 大講義室 1

8 月 6 日 (水)

- 12:20-12:30 Opening Remarks
- 12:30-13:20 ウィロックス・ラルフ [東大数理]
超離散化による自然現象のモデル化
- 13:30-14:20 松木平淳太 [龍谷大学]
粒子セルオートマトンの Max-Plus 代数による解析
- 14:40-15:30 宇佐美元宏 [リコー (株)]
電子写真設計プロセス革新のための粉体挙動シミュレータ開発
- 15:40-16:30 大槻道夫 [島根大学]
粉体のジャミング転移の臨界的性質

8 月 7 日 (木)

- 10:00-10:50 松家敬介 [東京大学]
血管新生の数理モデル
- 11:00-11:50 長山雅晴 [北海道大学]
表皮構造の数理モデル
- 13:30-14:20 松谷茂樹 [キヤノン (株)]
パーコレーション電気伝導の数理
- 14:30-15:20 岡野大 [愛媛大学]
代用電荷法による等角写像の数値計算法
- 15:30-16:20 増田哲 [青山学院大学]
離散冪函数の明示公式と諸性質

8 月 8 日 (金)

- 10:00-10:50 柳澤大地 [東京大学]
セルオートマトンを応用した群集運動の研究
- 11:00-11:50 丸野健一 [早稲田大学]
ソリトンと自己適合移動格子スキーム
- 13:30-14:20 高崎金久 [近畿大学]
溶解結晶模型の可積分構造
- 14:30-15:20 辻本論 [京都大学]
オートマトンに付随する遷移作用素のスペクトル解析について

講演の概要

[8月6日(水)]

ウィロックス・ラルフ (東大数理)

超離散化による自然現象のモデル化

本講演の前半では、可積分系という分野から得られたテクニックに基づき、常微分方程式を用いる数理モデルの「超離散化」という数学的手法を紹介する。特に、この手法により、元の連続の数理モデルと同じ性質を持つセルオートマトン・モデルが構築できることに注目する。後半では、超離散 sine-Gordon 方程式などの可積分なセルオートマトン・モデルについての最新の研究結果をいくつか紹介する。

松木平淳太 (龍谷大学)

粒子セルオートマトンの Max-Plus 代数による解析

多くの1次元粒子セルオートマトンが max-min-plus 表現を持つことが最近わかってきた。その表現を得るときに大きな役割を果たすのは基本図である。さらに超離散 Cole-Hopf 変換によって得られた発展方程式から確率モデルが構築できることもわかってきた。一方、高次の保存量を持つ CA との関連もごく最近発見した。これらの現状についてまとめて報告する。

宇佐美元宏 (リコー (株))

電子写真設計プロセス革新のための粉体挙動シミュレータ開発

複写機・レーザープリンタに代表させる電子写真機器設計において計算機シミュレーションの活用を考えると、電子写真特有のものとして、粉体挙動計算が必要となる。現在、離散要素法に電磁気的な作用力を組み込んだ現象挙動シミュレータが開発され、機器設計に活用されつつあるが、その適用範囲は限定的である。より広範な活用を実現するためには、粉体シミュレーションの大規模化・高速化が必要であり、その実現に有効な手段として、東工大 Tsubame に代表される産業利用のために開放された国内の大規模計算機の利用が考えられる。本報告では、スパコンの利用など、将来の電子写真機器設計における計算機シミュレーションの可能性について概説する。

大槻道夫 (島根大学)

粉体のジャミング転移の臨界的性質

散逸を持つ粒子の集合である粉体は、密度が低い場合は微小な応力で容易に流れる一方、密度が高い場合は剪断応力がしきい値（降伏応力）を超えない限り流動化しない。これらの密度による振る舞いの変化は、液体的な状態から固体的な状態へのある種の転移と考えられ、近年になってジャミング転移と呼ばれている。この転移点であるジャミング転移密度の近傍では、ダイナミクスや物性を含めて、様々な臨界的性質が観測される。こうした特異的な性質に関して、離散粒子シミュレーションや現象論によって明らかになってきた成果について報告する。

[8月7日(木)]

松家敬介 (東京大学)

血管新生の数理モデル

血管新生とは、生体内で既存の血管から新しい血管が分岐し、新しい血管網が構築される現象のことである。血管内皮細胞の挙動に関する近年の実験結果に基づき、本稿では、血管新生における血管内皮細胞の挙動のセルオートマトンモデルを提案する。このセルオートマトンモデルは、細胞間の追い越し現象及び血管の伸長と分岐の効果を取り入れたものとなっている。さらに、セルオートマトンモデルに対応する、求積可能な微分方程式モデルも提案する。

長山雅晴 (北海道大学)

表皮構造の数理モデル

表皮バリア機能の発現機能を数理的に理解するために、表皮構造の数理モデル化を行う。ここでは Ca^{2+} ダイナミクスを考慮した数理モデルを構築し、正常な表皮に見られる Ca^{2+} 局在化の再現を目指す。

松谷茂樹 (キヤノン (株))

パーコレーション電気伝導の数理

連続パーコレーション模型における電気伝導率の数値解析結果を示した後に、その背景にある数理科学的な構造（擬等角写像構造，フラクタル構造など）について紹介する。

岡野大 (愛媛大学)

代用電荷法による等角写像の数値計算法

等角写像の数値計算に複素対数ポテンシャルの重ね合せを用いた代用電荷法を利用する方法は天野によって提案され、単連結・多重連結領域の様々な等角写像の問題に適用し、簡潔で高精度の近似写像関数を得ることのできる方法として発展している。この方法の基本的なアイデアと最近の成果にもとづく種々の問題の統一的な取り扱いについて述べる。

増田哲 (青山学院大学)

離散冪函数の明示公式と諸性質

Bobenko らにより導入された離散冪函数が、第 6 パンルヴェ方程式の超幾何タウ函数を用いて明示的に表されることを示す。この事実は、離散冪函数を定める差分方程式系が、第 6 パンルヴェ方程式の Bäcklund 変換（の一部）であることに由来する。Bobenko らによるもとの定義では、離散冪函数の指数の値や定義域に対して強い制限が課されている。しかしながら、我々が得た明示公式から直ちにわかるように、指数については偶数を除く任意の複素数に、定義域については Riemann 面の離散類似にまで拡張できる。また、指数の実部が 1 に等しいとき、離散冪函数ははめ込みであることもわかる。

[8月8日(金)]

柳澤大地 (東京大学)

セルオートマトンを応用した群集運動の研究

セルオートマトンは、人の排除体積効果を簡単に取り入れることができ計算速度も早いいため、数多くの群集運動のシミュレーションに用いられてきた。本論文では、セルオートマトンを応用した退出過程と待ち行列のモデルを紹介する。退出過程のモデルでは、群集の密度と退出に対するモチベーションにより、流動係数が変化することが分かった。また待ち行列のモデルでは、人が列を詰める効果が待ち時間に及ぼす影響を調べることができた。

丸野健一 (早稲田大学)

ソリトンと自己適合移動格子スキーム

特異性のある解を持つソリトン方程式に対する自己適合移動格子スキームの構成法について解説する。例として Hunter-Saxton 方程式の自己適合移動格子スキームを構成するホドグラフ変換の離散化、保存則の離散化が自己適合移動格子スキームにおけるメッシュの自動調節の鍵となることを示す。

高崎金久 (近畿大学)

溶解結晶模型の可積分構造

溶解結晶模型の可積分構造に関する数年間の研究を紹介する。前半では最も基本的な模型の場合に焦点を絞り、平面分割による分配函数の定義、対角断面の方法による分配函数の書き換え、外部ポテンシャルによる変形、分配函数のフェルミオン表示、1次元戸田階層の τ 函数との関係を順次説明する。後半ではコニフォルドに関連する模型やオービフォルド版模型についての最近の結果を説明する。これらの模型の分配函数は2次元戸田階層の τ 函数と関係する。対応するラックス作用素は因子分解された特殊な形をもち、Ablowitz-Ladik (相対論的戸田) 階層など、2次元戸田階層に埋め込まれた可積分階層の解であることがわかる。

辻本諭 (京都大学)

オートマトンに付随する遷移作用素のスペクトル解析について

2状態オートマトンによって記述される点灯夫群と箱玉系について、付随する遷移作用素間の関係を明らかにすることでそのスペクトルが一致することを示す。さらに3状態オートマトンに対しても考察を加える。

Various aspects of nonlinear mathematical models: continuous, discrete, ultra-discrete, and beyond

Date: August 6 – 8, 2014

Venue: Institute of Mathematics for Industry

August 6

- 12:20-12:30 Opening Remarks
- 12:30-13:20 Ralph WILLOX (University of Tokyo)
Modelling of natural phenomena through ultradiscretisation
- 13:30-14:20 Junta MATSUKIDAIRA (Ryukoku University)
Analysis of particle cellular automata using max-plus algebra
- 14:40-15:30 Motohiro USAMI (Ricoh Company, Ltd.)
Powder flow simulation for electrophotographic process
- 15:40-16:30 Michio OTSUKI (Shimane University)
Critical behavior of jamming transition

August 7

- 10:00-10:50 Keisuke MATSUYA (University of Tokyo)
Mathematical models of angiogenesis
- 11:00-11:50 Masaharu NAGAYAMA (Hokkaido University, JST CREST)
Mathematical modeling for epidermal structure
- 13:30-14:20 Shigeki MATSUTANI (Canon Inc.)
Percolation model for conductivity
- 14:30-15:20 Dai OKANO (Ehime University)
Numerical conformal mapping by the charge simulation method
- 15:30-16:20 Tetsu MASUDA (Aoyama Gakuin University)
An explicit formula and some properties of a discrete power function

August 8

- 10:00-10:50 Daichi YANAGISAWA (University of Tokyo)
Applications of cellular automata for pedestrian dynamics
- 11:00-11:50 Kinichi MARUNO (Waseda University)
Solitons and self-adaptive moving mesh schemes
- 13:30-14:20 Kanehisa TAKASAKI (Kinki University)
Integrable structure of melting crystal models
- 14:30-15:20 Satoshi TSUJIMOTO (Kyoto University)
Spectral analysis on the transition operators for automata

Abstracts

[August 6]

Ralph WILLOX (University of Tokyo)

Modelling of natural phenomena through ultradiscretisation

We introduce a mathematical method called “ultradiscretisation” of ODE’s, based on techniques developed in the field of integrable systems. It will be shown that, by means of this method, it is possible to construct cellular automaton models that exhibit the same properties as the original ODE models. We shall also summarize and present recent results on integrable cellular automaton models such as the ultradiscrete sine-Gordon equation.

Junta MATSUKIDAIRA (Ryukoku University)

Analysis of particle cellular automata using max-plus algebra

Recent studies on particle cellular automata are reviewed. We show that many one-dimensional particle cellular automata admit max-min-plus expression. Applying a ultradiscrete version of the Cole-Hopf transformation, one can obtain evolution equations and corresponding stochastic models.

Motohiro USAMI (Ricoh Company, Ltd.)

Powder flow simulation for electrophotographic process

We report recent developments of computer simulation for electrophotographic process. Towards faster and larger-scale powder flow simulations, we use a large-scale supercomputer “TSUBAME” at Tokyo Institute of Technology, which is available to projects at outside research institutes and industries.

Michio OTSUKI (Shimane University)

Critical behavior of jamming transition

Various critical properties can be observed around the jamming transition in granular systems. We report recent results based on discrete particle simulation and phenomenological study.

[August 7]

Keisuke MATSUYA (University of Tokyo)

Mathematical models of angiogenesis

Angiogenesis is the morphogenetic phenomenon in which new blood vessels emerge from an existing vascular network and configure a new network. Based on the recent experiments with time-lapse fluorescent imaging, we propose a discrete cell-based model (cellular automaton model) for the dynamics of vascular endothelial cells in angiogenetic morphogenesis. The cellular automaton model successfully reproduces cell mixing effect, elongation and bifurcation of blood vessels. The corresponding differential equation model which is solved analytically is also proposed.

Masaharu NAGAYAMA (Hokkaido University, JST CREST)

Mathematical modeling of epidermal structure

We construct a mathematical model of the epidermal structure in order to mathematically understand the mechanisms of the epidermal barrier function. Our mathematical model considers Ca^{2+} dynamics and we aim at reproducing Ca^{2+} localization, which is a phenomenon that is observed in normal epidermal structures.

Shigeaki MATSUTANI (Canon Inc.)

Percolation model for conductivity

We report our numerical results on the electric potential distribution over a two-dimensional continuum percolation model. We then discuss the mathematical structure hidden behind, such as quasi-conformal structure, fractal structure.

Dai OKANO (Ehime University)

Numerical conformal mapping by the charge simulation method

The charge simulation method for numerical conformal mapping was proposed by Amano, and is regarded as simple and accurate method. We review the basic idea and recent results.

Tetsu MASUDA (Aoyama Gakuin University)

An explicit formula and some properties of a discrete power function

We present an explicit formula for the discrete power function introduced by Bobenko, which is expressed in terms of the hypergeometric τ functions for the sixth Painlevé equation. The original definition of the discrete power function imposes strict conditions on the domain and the value of the exponent. However, we show that one can extend the value of the exponent to arbitrary complex numbers except even integers and the domain to a discrete analogue of the Riemann surface. Moreover, we show that the discrete power function is an immersion when the real part of the exponent is equal to one.

[August 8]

Daichi YANAGISAWA (University of Tokyo)

Applications of cellular automata for pedestrian dynamics

Cellular automata (CA) has been applied to many simulations of pedestrian dynamics since it enables us to introduce excluded-volume effect into models and achieve fast calculation. In this paper, we study CA models for egress and queuing processes. We have elucidated that density and motivation for egress of pedestrians greatly affect pedestrian flow. Furthermore, we have succeeded to investigate the effect of closing up a queue on waiting time.

Kenichi MARUNO (Waseda University)

Solitons and self-adaptive moving mesh schemes

In this article, we show how to construct self-adaptive moving mesh schemes for soliton equations which have singularities in their solutions. As an example, we construct a self-adaptive moving mesh scheme of the Hunter-Saxton equation. It is shown that keys of self-adaptive moving mesh are discrete hodograph transformations and discrete conservation laws.

Kanehisa TAKASAKI (Kinki University)

Integrable structure of melting crystal models

We report our results on hidden integrable structure in the melting crystal model. Firstly we focus on the most basic model and explain various notions such as plain partitions, diagonal slice, fermionic expression, and so on. Secondly we explain more recent results on some generalizations related to conifolds and orbifolds. In these cases, the partition functions are solutions of integrable hierarchies such as the Ablowitz-Ladik hierarchy.

Satoshi TSUJIMOTO (Kyoto University)

Spectral analysis on the transition operators for automata

We discuss a relation between box-ball system and the lamplighter group generated by a two-state automaton. We present spectral analysis of the stochastic matrices induced by these automata, and verify their spectral coincidence. We also consider a three-state automaton.

目 次

1. 血管新生の数理モデル	1
松家敬介 (東大・数理科学)	
2. 表皮構造の数理モデリング	17
長山雅晴 (北大 電子科学研, JST CREST)	
小林康明 (北大 電子科学研)	
熊本淳一 (北大 電子科学研)	
澤武祐輔 (北大 理学院)	
傳田光洋 (資生堂 リサーチセンター)	
中田聡 (広大 理学研究科)	
北畑裕之 (千葉大 理学研究科)	
3. セルオートマトンを応用した群集運動の研究	27
柳澤大地 (東大・工)	
4. ソリトンと自己適合移動格子スキーム	39
丸野健一 (早稲田大・基幹理工)	
Bao-Feng Feng (テキサス大学パンアメリカン校)	
太田泰広 (神戸大・理学部)	
5. 溶解結晶模型の可積分構造	51
高崎金久 (近畿大・理工)	
6. 超離散化による自然現象のモデル化	69
ウィロックス・ラルフ (東大・数理科学)	
7. 粒子セルオートマトンの Max-Plus 代数による解析	93
松木平淳太 (龍谷大・理工)	
8. 電子写真設計プロセス革新のための粉体挙動シミュレータ開発	115
宇佐美元宏 (リコー (株))	
9. 粉体のジャミング転移の臨界的性質	131
大槻道夫 (島根大・総合理工)	
10. パーコレーション電気伝導の数理	145
松谷茂樹 (キヤノン (株))	
11. 代用電荷法による等角写像の数値計算法	165
岡野大 (愛媛大・工)	
12. 離散冪函数の明示公式と諸性質	185
増田哲 (青学大・理工)	

Table of Contents

1. Mathematical models of angiogenesis	1
<i>Keisuke MATSUYA (University of Tokyo)</i>	
2. Mathematical modeling of epidermal structure	17
<i>Masaharu NAGAYAMA (Hokkaido University, JST CREST)</i>	
<i>Yasuaki KOBAYASHI (Hokkaido University)</i>	
<i>Junichi KUMAMOTO (Hokkaido University)</i>	
<i>Yusuke SAWABU (Hokkaido University)</i>	
<i>Mitsuhiro DENDA (Shiseido Research Center)</i>	
<i>Satoshi NAKATA (Hiroshima University)</i>	
<i>Hiroyuki KITAHATA (Chiba University)</i>	
3. Applications of cellular automata for pedestrian dynamics	27
<i>Daichi YANAGISAWA (University of Tokyo)</i>	
4. Solitons and self-adaptive moving mesh schemes	39
<i>Kenichi MARUNO (Waseda University)</i>	
<i>Bao-Feng FENG (University of TexasPan American)</i>	
<i>Yasuhiro OHTA (Kobe University)</i>	
5. Integrable structure of melting crystal models	51
<i>Kanehisa TAKASAKI (Kinki University)</i>	
6. Modelling of natural phenomena through ultradiscretisation	69
<i>Ralph WILLOX (University of Tokyo)</i>	
7. Analysis of particle cellular automata using max-plus algebra	93
<i>Junta MATSUKIDAIRA (Ryukoku University)</i>	
8. Powder flow simulation for electrophotographic process	115
<i>Motohiro USAMI (Ricoh Company, Ltd.)</i>	
9. Critical behavior of jamming transition	131
<i>Michio OTSUKI (Shimane University)</i>	
10. Percolation model for conductivity	145
<i>Shigeki MATSUTANI (Canon Inc.)</i>	
11. Numerical conformal mapping by the charge simulation method	165
<i>Dai OKANO (Ehime University)</i>	
12. An explicit formula and some properties of a discrete power function	185
<i>Tetsu MASUDA (Aoyama Gakuin University)</i>	

血管新生の数理モデル

Mathematical Modelings for Angiogenesis

松家 敬介^{1,2}, 栗原 裕基^{2,3,4}, 時弘 哲治^{1,2,4}

Keisuke Matsuya^{1,2}, Hiroki Kurihara^{2,3,4} and Tetsuji Tokihiro^{1,2,4}

¹ 東京大学大学院数理科学研究科

Graduate School of Mathematical Sciences,
the University of Tokyo

² 数理科学連携基盤センター/生物医学と数学の融合拠点

Interdisciplinary Center of Mathematical Sciences
Institute for Biology and Mathematics of Dynamical Cell Processes

³ 東京大学大学院医学研究科代謝生理化学教室

Graduate School of Medicine and Faculty of Medicine,
the University of Tokyo

⁴CREST 科学技術振興機構

CREST Japan Science and Technology Agency

概要

血管新生とは、生体内で既存の血管から新しい血管が分岐し、新しい血管網が構築される現象のことである。血管内皮細胞の挙動に関する近年の実験結果に基づき、本稿では、血管新生における血管内皮細胞の挙動のセルオートマトンモデルを提案する。このセルオートマトンモデルは、細胞間の追い越し現象及び血管の伸長と分岐の効果をとり入れたものとなっている。さらに、セルオートマトンモデルに対応する、求積可能な微分方程式モデルも提案する。

Abstract

Angiogenesis is the morphogenetic phenomenon in which new blood vessels emerge from an existing vascular network and configure a new network. Based on the recent experiments with time-lapse fluorescent imaging, we propose a discrete cell-based model (cellular automaton model) for the dynamics of vascular endothelial cells in angiogenetic morphogenesis. The cellular automaton model successfully reproduces cell mixing effect, elongation and bifurcation of blood vessels. The corresponding differential equation model which is solved analytically is also proposed.

1 はじめに

生体内に血管が形成される過程には脈管形成 (Vasculogenesis) と血管新生 (Angiogenesis) の二種類がある。脈管形成は胚形成期に見られる過程であり、血管による循環網の形成がこの過程で行われる。一方、血管新生は既存の血管から新しい血管が分岐し、新しい血管網が構築される現象である。血管内皮細胞 (Vascular endothelial cell) の増殖と遊走によって形状が定まって管腔構造ができ、血管壁細胞などによって支持されて新しい血管が形成される。血管新生は、成人の場合、創傷治癒や胎盤形成において見られる。また、癌などの腫瘍細胞が酸素や栄養素を必要とした場合にも見られる現象である。数理モデルによる血管新生の理解が進むことで癌といった病気の理解にも繋がるのが期待される。

従来、血管新生による血管の伸長及び分岐は、図1の様に並んだ血管内皮細胞のうち、一つの細胞が血管内皮細胞増殖因子 (Vascular endothelial cell growth factor: VEGF) によって活性化され、図2の様に特殊な状態に変化し、図3の様にその細胞がフィロポディアといった仮足を伸ばし、周りの細胞をお互いの仮足で引っ張り合って移動することにより実現されると考えられていた [1, 2].



図 1: 活性化されていない細胞たち

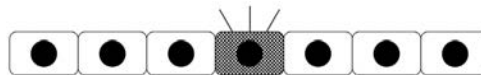


図 2: 網掛けされた細胞が活性化

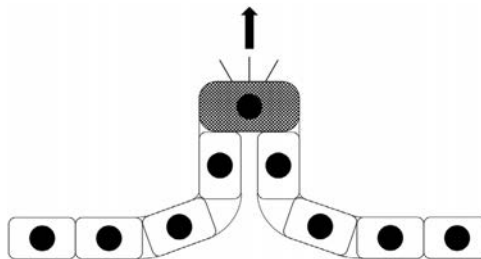


図 3: 活性化された細胞が周りの細胞を引っ張って移動

近年の実験において、血管内皮細胞の各を蛍光色に染色し血管新生における細胞の挙動を観察することが可能になった [3]. そこで、マウスの血管内皮細胞たちをコラーゲンの媒質上に配置し、それらの挙動を観察するという実験が行われた。従来考えられていたことが正しければ、ある細胞が先頭に立って血管を伸ばしていく様子が観察されるはずだった。しかし、実際には、血管が伸びていく際に先頭の細胞を含めて細胞たちは相対的な位置を頻繁に入れ替えていることが分かった。本稿ではこの現象を Cell-Mixing

と呼ぶことにする。また、違う実験において [4], ゼブラフィッシュの血管内皮細胞が、図 4 の様にいくつか動いているところで、図 5 の様に、先端の細胞のみを残してそれ以外の周りの細胞をレーザーで焼き殺した場合の挙動の観察が行われた。先端の細胞は、孤立した直後は殆ど動かないが時間の経過とともに、図 6 の様にほかの細胞が近づいてくると運動を再開している。

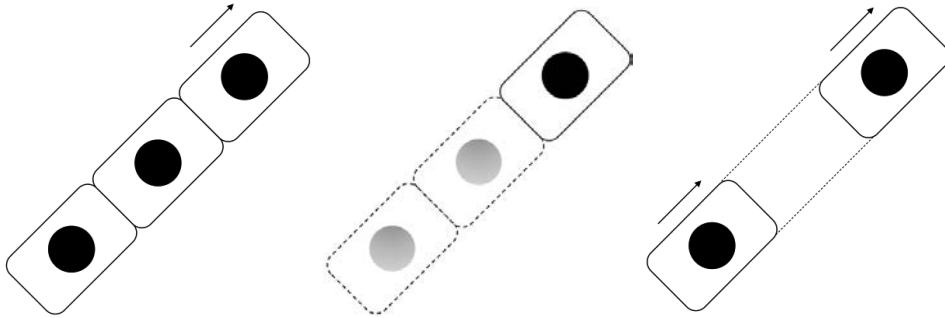


図 4: 血管新生において運動している細胞たち (右上が先端)
 図 5: 先端の細胞以外をレーザーで殺すと先端の細胞は殆ど動かなくなる。
 図 6: ほかの細胞が近づいてくると先端の細胞は運動を再開する。

この観察結果は、細胞の運動は細胞間の相互作用が大きな役割を果たしていることを示唆していると考えられる。

これまで、癌などの腫瘍細胞の周りで如何に血管網が構築されるかのシミュレーション等を目的として様々な血管新生の数理モデルが提案されてきた [5, 6, 7, 8]. 特に血管内皮細胞の挙動に基づいたもの [9] は、VEGF の分布や細胞自体の走化性が主体となったものがある [10, 11, 12]. さらに、出来上がった血管の形状について議論されている。

本稿では、これまでに紹介した実験結果を元にして、血管新生の数理モデルを二つ提案する。一つは、細胞間の相互作用による細胞の運動に基づいたセルオートマトンによるモデルである。これは、単純な数理モデルを用いて、Cell-Mixing や血管の伸長及び分岐といった現象を再現することを目標としている。セルオートマトンは、複数の粒子が運動する系を記述でき、交通流や生命現象への応用 [13, 15, 14] が知られている。生命現象への応用の一例として、菌類の成長のシミュレーション [16] などが挙げられる。もう一つは、このセルオートマトンモデルに基づいた微分方程式モデルである。これは、セルオートマトンモデルに近似を行って簡略化したモデルとなっている。さらに、このモデルは解析的に解くことができ、解の挙動についても議論する。

2 セルオートマトンモデル

2.1 1次元上のモデル

この小節では、血管内皮細胞が1次元上を運動する場合の数値モデルを考察する。モデルの説明のために、モデルを構成するための仮定といくつかの変数やパラメータを定義する。まず、ここで課す仮定は以下の通りである。

1. 細胞は定期的に特定の位置 (既存の血管) から供給される。
2. 細胞分裂は考慮しない。(実験では、5%/日程度で、殆ど見られなかったため。)
3. 細胞の挙動は摩擦と細胞間の相互作用のみに依存する。

x_n^t 及び v_n^t を時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ における $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ 番目の細胞の核の位置及び速度とする。ただし、 $x_n^t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}/M$, $v_n^t \in \mathbb{Z}/M$ とし、後述のシミュレーションでは $M = 20$ とした場合の結果を示す。一つ目の仮定から、細胞が $a \in \mathbb{Z}_{>0}$ ステップ毎に初速度 v_{ini} で原点から供給されるとする。即ち、 $x_n^{a0} = 0$, $v_n^{a0} = v_{ini}$. x_n^t 及び v_n^t の時間発展の規則は以下の様に定める。

$$x_n^{t+1} = \max[0, x_n^t + v_n^t] \quad (1)$$

$$v_n^{t+1} - v_n^t = -\gamma v_n^t + \sum_{k \neq n} F(x_n^t - x_k^t) \quad (2)$$

(1) の右辺に \max は、細胞が数直線の負の区間に行かないようにするためのものである。(2) は運動方程式を表しており、 $\gamma \in \mathbb{Z}/M$ ($0 < \gamma < 1$) は摩擦係数。さらに、 $F(x_n^t - x_k^t)$ は二つの細胞間の相互作用を表しており、 $F(r)$ ($r \in \mathbb{Z}/M$) は以下の様に定義する。

$$F(r) := \begin{cases} f_r \operatorname{sgn}(r) & 1 \leq |r| \leq R_r \\ -f_e \operatorname{sgn}(r) & R_r < |r| \leq R_e \\ -f_a \operatorname{sgn}(r) & R_e < |r| \leq R_a \\ 0 & R_a < |r| \end{cases}$$

これを図に表わすと図7の様になる。

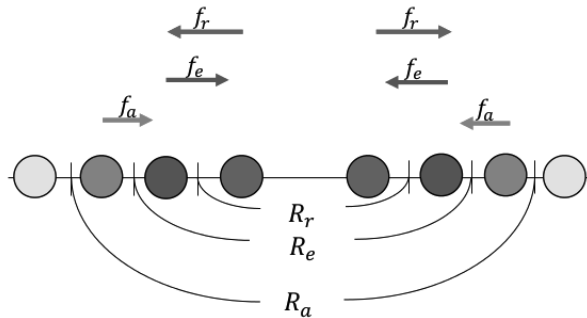


図 7: 相互作用の図

この相互作用は、二つの細胞間の距離が近いと、排除体積効果により斥力が働き、距離がある程度離れるとお互いの仮足同士を反応させて引力が働き、そして十分に離れると影響しないというものである。ここで、 $R_r, R_e, R_a, f_r, f_e, f_a \in \mathbb{Z}_{>0}/M$, $f_r > f_e > f_a$ とする。また、 $\text{sgn}(r)$ ($r \in \mathbb{Z}/M$) は r の符号を表す。もし、時刻 t において二つの細胞が同じ位置にいる場合は $(x_k^t = x_{k'}^t)$, x_k^{t-1} と $x_{k'}^{t-1}$ の大小を比較し、大きいほうに正の向きに大きさ f_r の力をかけ、もう一方には負の向きに大きさ f_r の力をかけるとする。

ここまでで、枝分かれをしていない出来かけの血管の中を動く血管内皮細胞の数理モデルが構成できた。この数理モデルに対して、 $a = 5$, $v_{ini} = 0.3$, $\gamma = 0.6$, $R_r = 0.1$, $R_e = 0.4$, $R_a = 0.7$ として f_r, f_e, f_a を変化させた場合の細胞たちの挙動を表した図が以下の三枚である。

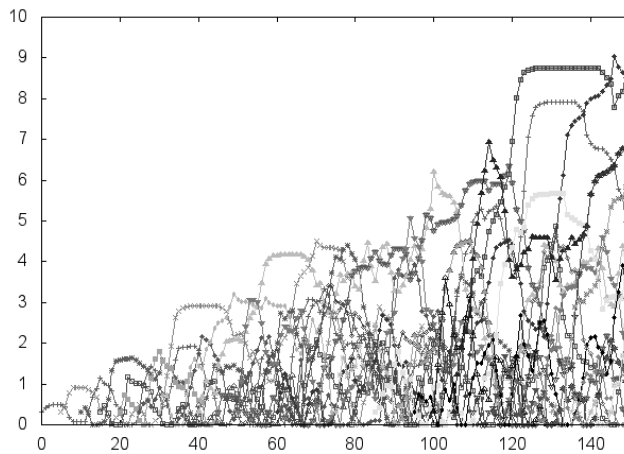


図 8: 引力のみ

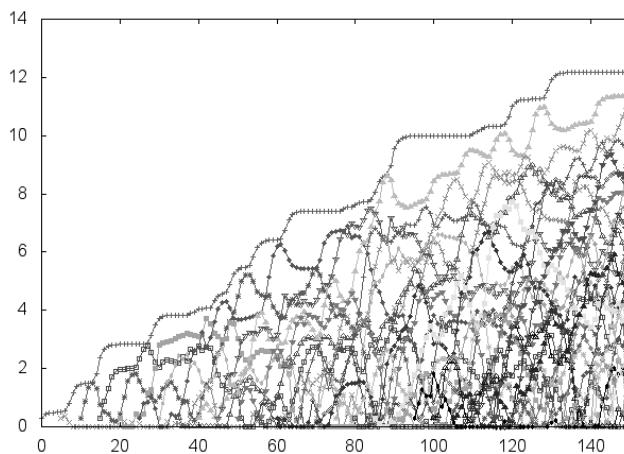


図 9: 斥力のみ

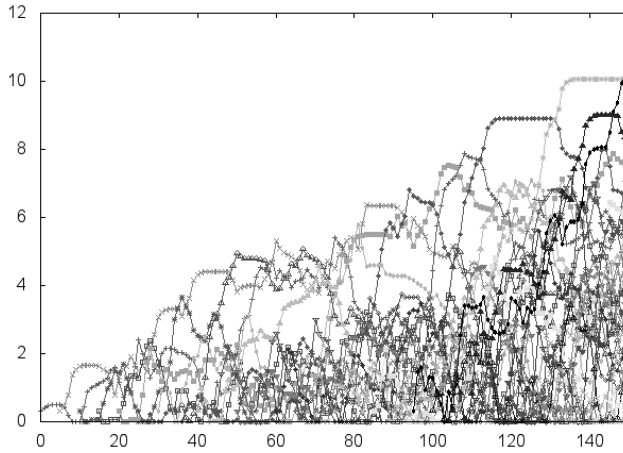


図 10: 引力及び斥力

それぞれの図の横軸は時間 t を表しており、縦軸は各細胞の位置を表している。また、相互作用の大きさは、図 8 では $f_r = 0, f_e = 0.25, f_a = 0.05$, 図 9 では $f_r = 0.45, f_e = -0.25, f_a = -0.05$, 図 10 では $f_r = 0.45, f_e = 0.25, f_a = 0.05$ としている。図 8 及び図 9 では f_r, f_e, f_a の値を定義と異なるものにしてはいるが、これは相互作用の種類による挙動の違いを見るために、この様な値を用いて数値計算を行っている。これらの図の中で特徴的なものは図 9 であり、斥力のみの場合、先頭の細胞において Cell-Mixing が起こっていない。一方で、図 8 と図 10 からは、引力のみでも引力と斥力両方を取り入れても Cell-Mixing が起こっていて違いが無い様に見える。そこで、以下の図を見てみる。

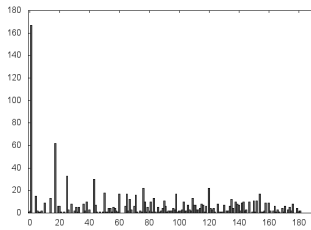


図 11: 引力のみ

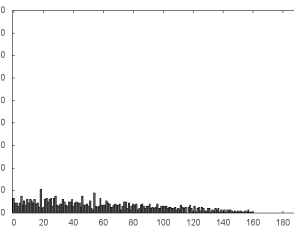


図 12: 斥力のみ

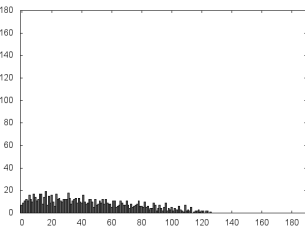


図 13: 引力及び斥力

これらは、時刻を $t = 5000$ としたときの細胞たちの分布を示した図である。それぞれの図の横軸は細胞の位置を表しており、縦軸は頻度を表している。これらの図の中で特徴的なものは図 11 であり、殆どの細胞が供給された位置の近辺に固まっていることが分かる。一方、図 12 及び図 13 からは、斥力のみでも斥力と引力の両方を取り入れても細胞はほぼ均等に分布することが分かる。以上から、細胞の相互作用として斥力と引力の両方の効果を取り入れることで、Cell-Mixing を再現しつつ細胞たちを均等に分布させることが出来る。

2.2 血管の伸長及び分岐の効果を取り入れたモデル

この小節では、前小節で構成したモデルに血管の伸長及び分岐の効果を取り入れる。そのために、実験の観察結果によるモデルに対する仮定を挙げる。

1. 血管が伸長するには、血管の先端に一定の圧力が必要。
2. 血管の分岐は殆ど血管の先端で起こっている。
3. 血管が分岐すると新しく二つの血管が出来る。
4. 血管が分岐するには、血管の先端に一定の圧力と血管内皮細胞の密集 (少なくとも三つ) が必要。

血管の伸長及び分岐は、細胞たちが動ける場所が徐々に広がっていくことで表現していく。まず、伸長及び分岐が起きるための仮定に基づいていくつかの変数とパラメータを定義する。そこで、図 14 のように、ある時刻 t において細胞が血管の先端 (時刻 t までに細胞たちが到達した最も遠方の位置: b^t) より先に進もうとしている場合を考える。

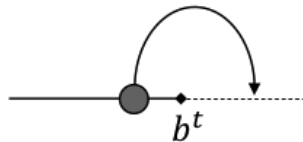


図 14: 細胞が血管の先端 (◆) より先に進もうとしている場合

ここで、次の二つの量を定義する。

$$X^t := \sum_n \max [0, x_n^t + v_n^t - b^t], \quad L^t := \#\{n | x_n^t + v_n^t - b^t > 0\}$$

X^t は血管の先端にかかる圧力を表す量であり、 L^t は血管の先端に密集している細胞の個数を表す量である。さらに、仮定から三つのパラメータ $X_e, X_b \in \mathbb{Z}_{>0}/M$, $X_e < X_b$, $L_b \in \mathbb{Z}_{\geq 3}$ を用意し、以下の図 15 に従って、伸長及び分岐が起こるとする。

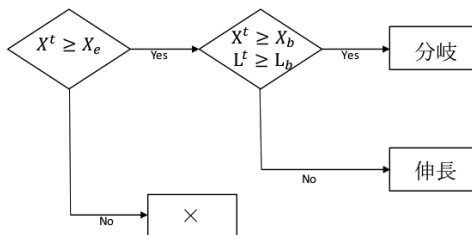


図 15: 分岐及び伸長を判定するアルゴリズム

図 15 に出てくる、分岐、伸長そして \times のそれぞれで起こる現象を説明したものが、図 16、図 17 そして図 18 となる。



図 16: 分岐



図 17: 伸長



図 18: ×

図 16 では、三つ以上の細胞がある程度の勢いで血管の先端より先に進もうとして、新しい血管ができ、一つだけもともとあった血管の先端の位置に残りそれ以外の細胞たちが半分ずつ新しくできた血管の先端に配置されている。もともとあった血管の先端の位置に細胞が一つ残っているのは、実験の観察結果に由来するものである。図 19 の様に、血管の先端にいる細胞を後続の細胞たちが追い越そうとしたときに、それぞれが異なる方向から追い越そうとして、進む向きがずれることで起きる現象が実験で観察されている [4].

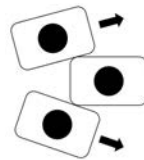


図 19: 分岐が起こるときの細胞間の追い越しを表す図

図 17 では、血管の先端の情報更新されて $b^{t+1} = b^t + 1$ となり、血管の先端より先に進もうとした細胞が新しい先端に配置されている。図 18 では、血管の先端より先に進もうとした細胞が従来の血管の先端に配置されている。また、血管の分岐が繰り返されることで増加していく細胞たちが動ける場所を図 20 にある二分木によるグラフで表現する。細胞たちは、グラフの辺上を移動する。また、グラフの辺のことを“枝”と呼ぶことにし、一つの枝 (A) から分岐している二つの枝 (B,C) を“A の子供”と呼び、A を“B(又は C) の親”と呼ぶことにする。例えば、図 20 にある 2 番の枝は、1 番の枝の子供であり、4 番と 5 番の枝の親である。また、1 番の枝は 4 番の枝の先祖もしくは 4 番の枝は 1 番の枝の子孫と呼んだりすることにする。さらに、細胞の位置を表す x_n^t は、例えば図 20 の 6 番の枝にいる細胞の場合、1 番と 3 番の枝の長さの和と 6 番の枝の左端の頂点からこの細胞が配置されている位置までの長さを足したものとする。

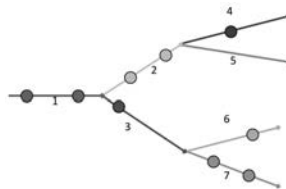


図 20: 細胞たち (円盤たち) が動けるグラフ (二分木)

そして、自分と同じ枝、その枝の祖先及び子孫にあたる枝にいる細胞同士で相互作用を及ぼすことにする。例えば図 21 の矢印で結んだ細胞同士がお互いに相互作用を及

ぼす。

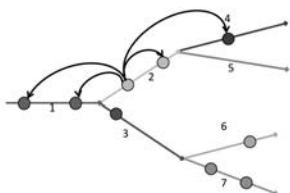


図 21: 相互作用をする細胞の組み合わせの例

細胞の位置を更新する際、今いる枝の子供の枝に進む場合がある。一つの枝には、既に分岐していれば、必ず二本の子供の枝がある。細胞がどちらの枝に進むかは、進みうる二つの枝それぞれの子孫にあたる枝たちにいる細胞たちから受ける相互作用の大きさを比較して大きいほうに進むことにする。相互作用が同じ場合は、半々の確率でいずれかに進むことにする。

以上で、血管の伸長及び分岐の効果を取り入れた数理モデルが構成できた。この数理モデルに対して、 $a = 5$, $v_{ini} = 0.3$, $\gamma = 0.6$, $R_r = 0.1$, $R_e = 0.4$, $R_a = 0.7$, $f_r = 0.45$, $f_e = 0.25$, $f_a = 0.05$, $X_e = 1.3$, $X_b = 1.8$, $L_b = 3$ とした場合の細胞たちの挙動及び血管の成長を以下に示す。

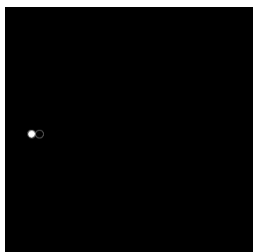


図 22: $t = 1$

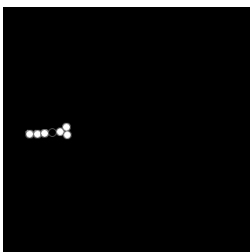


図 23: $t = 100$

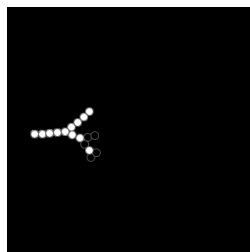


図 24: $t = 250$

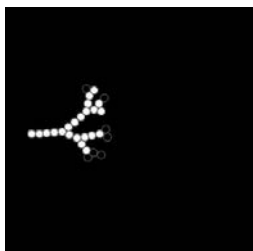


図 25: $t = 500$

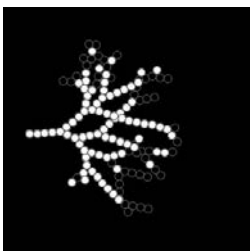


図 26: $t = 1000$



図 27: $t = 1500$

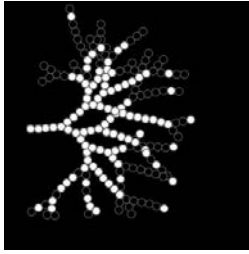


図 28: $t = 2000$



図 29: $t = 3000$

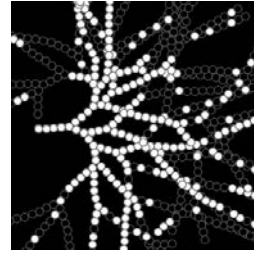


図 30: $t = 4000$

白い丸が血管内皮細胞を表しており、黒抜きの丸は細胞が通った道（出来かけの血管）を表している。血管が分岐して新しくできる血管たちがなす角度は実験で大体 60 度程度と言われており [3, 4], 可視化の際には 60 度近辺でランダムにばらつかせて描いている。また、血管が伸長する向きも一つの丸ごとに ± 5 度程度ばらつかせながら描いている。

3 微分方程式モデル

この節では、前節のセルオートマトンモデルに基づいた微分方程式モデルを提案する。前節で構成したモデルは、血管内皮細胞の圧力、言い換えると、血管の先端における細胞の個数が血管の伸長及び分岐に寄与したものであった。そこで以下の仮定の下で微分方程式モデルを構成する。

1. 血管の伸長及び分岐は血管の先端における血管内皮細胞の個数にのみ依存する。
2. 考えている血管網における血管内皮細胞の密度は時刻にのみ依存し、場所には依らないとする。
3. 血管内皮細胞は定期的に考えている血管網に供給される。
4. 血管網の形状は、前述のモデルと同じく、二分木の形とする。
5. 血管は円筒形とし、分岐するごとにその断面積が小さくなるとする。

三つめの仮定から、 $N(t)$ ($t \geq t_0 > 0$) を時刻 t における系全体の血管内皮細胞の数とし、 $N(t) := N_{ini} + a(t - t_0)$ とする。ただし、 $N_{ini} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $a > 0$ とする。ここで、時刻は自由にずらすことが出来るので一般性を失うことなく $t_0 = N_{ini}/a$ とできる。即ち、

$$N(t) = at. \quad (3)$$

また、 $L_k^{(i)}(t)$ を時刻 t における $k (\in \mathbb{Z}_{\geq 0})$ 回分岐して出来た i 番目 ($1 \leq i \leq 2^k$) の血管（以下：血管 (k, i) ）の長さとする。例えば、図 31 において 2 番の枝を血管 $(1, 1)$, 5 番の枝を血管 $(2, 3)$ と呼ぶ。 i は分岐して出来た順に番号をつけることにする。

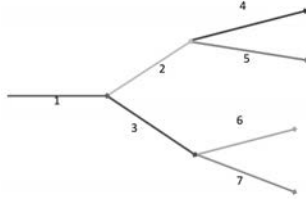


図 31: 血管のラベル付けについての説明

さらに, $s_k^{(i)}$ を血管 (k, i) の断面積とし, $\rho(t)$ を時刻 t における系全体の細胞密度とする. ここで, 二つ目と五つ目の仮定から,

$$\rho(t) = \frac{N(t)}{\sum_{k,i} s_k^{(i)} L_k^{(i)}(t)} \quad (4)$$

及び $s_k^{(i)} > s_{k+1}^{(j)}$ が得られる. ただし, 血管 $(j, k+1)$ は血管 i, k が分岐して出来た血管とする. そして, 一つ目の仮定にある血管 (k, i) の“先端にいる細胞の個数 $n_k^{(i)}(t)$ ”を以下で定める.

$$n_k^{(i)}(t) = \rho(t) s_k^{(i)} l \quad (5)$$

ただし, $l > 0$. 最後に前節のセルオートマトンモデルの発展規則に基づき, 分岐していない血管 (i, k) の長さ $L_k^{(i)}(t)$ が以下の微分方程式を満たすとす.

$$\frac{d}{dt} L_k^{(i)}(t) = \begin{cases} v_0 (n_k^{(i)}(t) - n_e) & (n_k^{(i)}(t) \geq n_b) \\ 0 & (n_k^{(i)}(t) < n_b) \end{cases} \quad (6)$$

ただし, $v_0, n_b > 0$ とし, $n_k^{(i)}(t) \geq n_e (> n_b)$ となった時に血管 (k, i) は, 血管 $(j, k+1)$ と血管 $(j+1, k+1)$ に分岐するとす. (3), (4), (5) そして (6) から $\rho(t)$ に関する微分方程式:

$$\frac{d}{dt} \frac{t}{\rho(t)} = V_m (\rho(t) - \rho_e) \quad (7)$$

が得られる. ただし, $V_m := \frac{v_0 l}{a} \sum' (s_k^{(i)})^2$, $\rho_e := \frac{n_e}{l} \frac{\sum' s_k^{(i)}}{\sum' (s_k^{(i)})^2}$. また, \sum' はまだ分岐していない血管 (i, k) であって $n_k^{(i)} \geq n_e$ を満たす i, k についての和を意味する. (7) は解を具体的に書き下すことが出来, 実際に

$$\left(\frac{t}{t_1} \right)^{(\alpha+\beta)V_m} = \left(\frac{\rho(t)}{\rho(t_1)} \right)^{\frac{\alpha+\beta}{\alpha\beta}} \frac{(\rho(t_1) + \beta)^{\frac{1}{\beta}} (|\rho(t_1) - \alpha|)^{\frac{1}{\alpha}}}{(\rho(t) + \beta)^{\frac{1}{\beta}} (|\rho(t) - \alpha|)^{\frac{1}{\alpha}}} \quad (8)$$

が得られる. ただし, α, β は $\alpha - \beta = \rho_e$, $\alpha\beta = 1/V_m$ を満たす定数. 分岐及び伸長をしていない血管が伸長を開始するときの密度や分岐していない血管が分岐するときの密度は, 断面積などの定数で定まるので, それぞれの場合の時刻は (8) から具体的に定まる. 分岐していない血管たちがいくつかある状況で, どの血管が分岐するかは断面積が最大のものが最初に分岐する. また, 分岐及び伸長をしていない血管たちがいくつか

ある状況でも、ある時刻において断面積が最大のものから伸長を開始する。分岐はしていないが伸長をしている二つの血管の長さ、断面積をそれぞれ $L_1(t), L_2(t), s_1, s_2$ としておくと、(6) の両辺を積分することで

$$L_1(t_*) - L_1(t_1) = v_0 l s_1 \int_{t_1}^{t_*} \rho(t) dt - v_0 n_e (t_* - t_1)$$

$$L_2(t_*) - L_2(t_1) = v_0 l s_2 \int_{t_1}^{t_*} \rho(t) dt - v_0 n_e (t_* - t_1)$$

が得られる。この二本の方程式から $\int_{t_1}^{t_*} \rho(t) dt$ を消去することで $L_1(t_*)$ は $L_2(t_*)$ の一次式で表せる。一方で、分岐及び伸長をしていない血管が伸長を開始する時刻や分岐が起こる時刻における系全体の体積は、断面積などの定数で定まっており、こういった時刻における分岐していない血管の長さもすべて求めることが出来る。実際にこの微分方程式モデルを計算して得られる血管網の形状の一例は以下に挙げるようなものとなる。

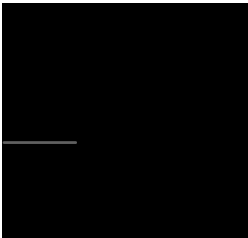


図 32: $t = 0.1413$

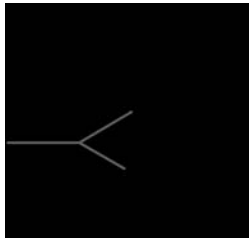


図 33: $t = 0.18957$

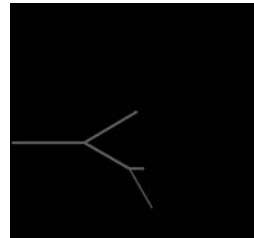


図 34: $t = 0.199386$

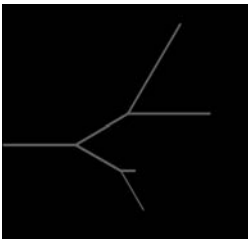


図 35: $t = 0.200613$

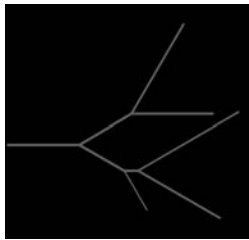


図 36: $t = 0.274697$

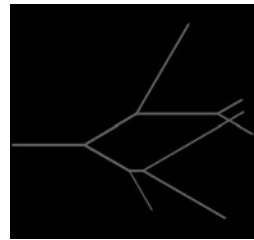


図 37: $t = 0.29043$

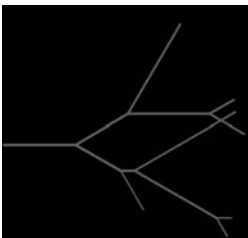


図 38: $t = 0.296851$

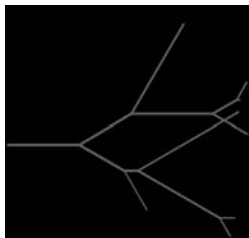


図 39: $t = 0.29993$

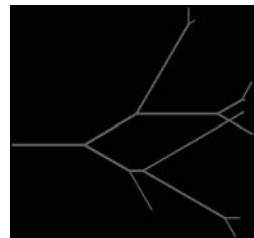


図 40: $t = 0.307023$

パラメータは, $a = 3, l = 5, v_0 = 0.1, n_e = 1, n_b = 3, L_{ini} = 0.7, t_0 = 0.1, s_0^{(1)} = 3, s_1^{(1)} = 2.271859, s_1^{(2)} = 2.168401, s_2^{(1)} = 0.902587, s_2^{(2)} = 2.156141, s_2^{(3)} = 1.626549, s_2^{(4)} = 1.513851, s_3^{(1)} = 1.554182, s_3^{(2)} = 1.452057, s_3^{(3)} = 1.485026, s_3^{(4)} = 1.526723, s_3^{(5)} = 1.127727, s_3^{(6)} = 0.939188, s_4^{(1)} = 0.626401, s_4^{(2)} = 1.296506, s_4^{(3)} = 1.457063, s_4^{(4)} = 0.514391$ としている.

また, それぞれの血管の断面積が分岐した回数 k にのみ依存するとした場合, すべての i に対して $s_k^{(i)} = s_k$ となり, その他の変数についても $n_k^{(i)}(t) = n_k(t), L_k^{(i)}(t) = L_k(t)$ となる. このとき, (6) 等から $n_k(t)$ が $n_k(t) \geq n_e$ のときに満たす微分方程式:

$$\frac{d}{dt}n_k(t) = -\frac{1}{t} \times \frac{v_0 2^k}{ad} n_k(t)(n_k(t) - \mu_k)(n_k(t) + \nu_k) \quad (9)$$

が得られる. ただし,

$$\mu_k := \frac{n_e}{2} + \sqrt{\frac{n_e^2}{4} + \frac{ad}{v_0 2^k}}, \quad \nu_k := -\frac{n_e}{2} + \sqrt{\frac{n_e^2}{4} + \frac{ad}{v_0 2^k}}.$$

$n_k(t) < n_e$ のときは, 一旦線形に増加し $n_k(t) \geq n_e$ となった時刻から (9) に従う. そして, 以下の図 41 及び図 42 に $n_k(t)$ の典型的な挙動を示す.

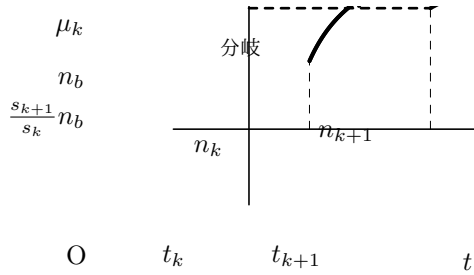


図 41

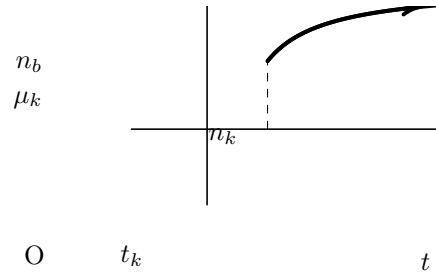


図 42

t_k を k 回目の分岐が起こる時刻としている. 図 41 では, (9) に従って, $n_k(t)$ の値が増加し, μ_k の値に近づこうとする. そして, $k+1$ 回目の分岐が起こる時刻 t_{k+1} に $n_k(t)$ の値が n_b に到達し, 今度は $n_{k+1}(t)$ が初期条件として $n_{k+1}(t_{k+1}) = \frac{s_{k+1}}{s_k} n_b (< n_b (\because s_k > s_{k+1}))$ を与えられ, (9) に従って, 変化していく. 一方, 図 42 では, $\mu_k \leq n_b$ であるために $n_k(t)$ の値が n_b に到達できない. そのため, これ以上分岐が起こらなくなっている. また, μ_k は k に関して狭義単調減少であるために, 分岐の最大の回数は以下で与えられる.

$$\left\lceil \log_2 \left(\frac{al}{v_0 n_b (n_b - n_e)} \right) \right\rceil$$

最後に, 前節で扱ったセルオートマトンモデルとこの節で扱った微分方程式モデルの比較を行いたい. それぞれの一回目の分岐が起こるまでにどれだけ血管が伸びるかを伸長及び分岐が起こるためのそれぞれの閾値を変化させたときにどの様になるかを考察する. 微分方程式モデルの場合は具体的に計算でき,

$$L_0(t_1) = \frac{al}{n_b} \frac{(\mu_0 - n_b)^{\frac{\nu_0}{\mu_0 + \nu_0}} \left(\nu_0 + \frac{at_0 l}{L_i n_i} \right)^{\frac{\mu_0}{\mu_0 + \nu_0}}}{(\nu_0 + n_b)^{\frac{\mu_0}{\mu_0 + \nu_0}} \left(\mu_0 - \frac{at_0 l}{L_i n_i} \right)^{\frac{\nu_0}{\mu_0 + \nu_0}}}$$

で与えられる. $a = 5$, $l = 1$, $v_0 = 0.1$, $t_0 = 2$, $L_0(t_0) = 4$ とした場合の $L_0(t_1)$ の n_e 及び n_b に関するグラフは, 図 43 のようになる.

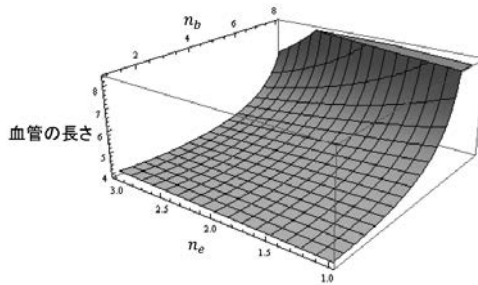


図 43: 微分方程式モデルの一回目の分岐までの長さ

一方で, セルオートマトンモデルに対して $a = 5$, $v_{ini} = 0.3$, $\gamma = 0.6$, $R_r = 0.1$, $R_e = 0.4$, $R_a = 0.7$, $f_r = 0.45$, $f_e = 0.25$, $f_a = 0.05$, $L_b = 3$ として, X_e, X_b を変化させたときに一回目の分岐が起こるまでに血管がどれだけ伸びたかを示したのが, 図 44 になる. これは各 X_e, X_b の組み合わせに対してそれぞれ 400 回ずつ計算し, 平均したものとなっている.

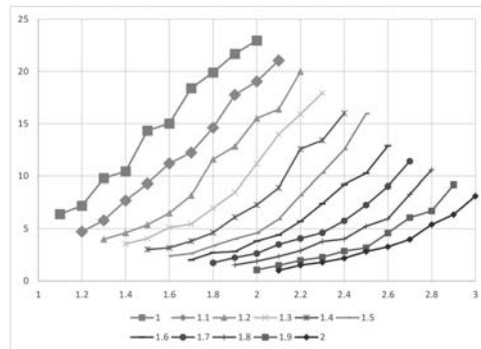


図 44: セルオートマトンモデルの一回目の分岐までの長さ

図 44 の縦軸は血管の長さを横軸は X_b の値を表しており, それぞれのデータ系列は X_e の値を変化させることに対応している.

図 43 から, 分岐の閾値である n_b を増加させると分岐までの長さが増加し, 伸長の閾値である n_e を増加させると分岐までの長さが減少する. 図 44 でも, 分岐の閾値である X_b を増加させると分岐までの長さが増加し, 伸長の閾値である X_e を増加させると分岐までの長さが減少する. 伸長及び分岐の閾値の変化に対する血管の分岐するまでの伸びの変化が一致しており, セルオートマトンモデルと微分方程式モデルが与える血管の形状について類似性が見られる.

4 まとめと今後の展望

本稿では、血管新生における血管内皮細胞の挙動に基づいたセルオートマトンモデルを提案した。この数理モデルは、Cell-Mixing や結果の伸長及び分岐を再現している。さらに、発展規則は二つの細胞間の斥力及び引力による相互作用で記述されていた。また、セルオートマトンモデルに基づいた微分方程式モデルも紹介した。この数理モデルは、解析的に求積できる方程式になっており、血管の分岐が起こる回数や血管がどれだけ伸びるかといった量が計算出来た。

今回、それぞれのモデルを計算した結果の可視化については、血管の分岐する角度を60度程度に設定するなどして行っていた。しかし、分岐の直後や伸長する際の向きについては、実験によるデータと合わせながらモデルに取り入れていく必要があり、今後の課題としたい。また、血管が伸びていく領域は化学物質である VEGF の濃度勾配にも依存していることが実験で知られている。今回のモデルには、このような化学物質の効果を取り入れていない。この様な、化学物質の効果や今回は考えなかった血管新生における細胞分裂の効果も、実験結果と合わせてモデルに取り入れていくことも今後の課題となる。

謝辞

本研究の一部は、科学技術振興機構「戦略的創造研究推進事業」(CREST)及び文部科学省「生命動態システム科学推進拠点事業」の支援を受けて実施されました。

参考文献

- [1] F. De Smet, I. Segura, K. De Bock, P. J. Hohensinner and P. Carmeliet, Mechanisms of vessel branching: filopodia on endothelial tip cells lead the way. *Arterioscler. Thromb. Vasc. Biol.* **29** (2009), 639–649.
- [2] M. T. Holderfield, and C. C. Hughes, Crosstalk between vascular endothelial growth factor, notch, and transforming growth factor-beta in vascular morphogenesis. *Circ. Res.* **102** (2008), 637–652.
- [3] S. Arima, K. Nishiyama, T. Ko, Y. Arima, Y. Hakozaiki, K. Sugihara, H. Koseki, Y. Uchijima, Y. Kurihara and H. Kurihara, Angiogenic morphogenesis driven by dynamic and heterogeneous collective endothelial cell movement, *Development* **138** (2011), 4763–4776.
- [4] K. Nishiyama, Private communication
- [5] A. R. A. Andersen and M. A. J. Chaplain, Continuous and discrete mathematical models of tumor-induced angiogenesis, *Bull. Math. Biol.* **60** (1998), 857–900.

- [6] S. Tong and F. Yuan, Numerical simulations of angiogenesis in the cornea, *Microvasc. Res.* **61** (2001), 14–27.
- [7] R. M. H. Merks and P. Koolwijk, Modeling morphogenesis in silico and in vitro: Towards quantitative, cell-based modeling, *Math. Model. Nat. Phenom.* **4** (2009), 149–171.
- [8] T. W. Secomb, J. P. Alberding, R. Hsu, M. W. Deshirst and A. R. Pries, Angiogenesis: An adaptive dynamic biological patterning problem, *PLOS Comput. Biol.* textbf9 (2013), e1002983.
- [9] A. R. A. Anderson, M. A. J. Chaplain and K. A. Rejniak eds., *Single-Cell-Based Models in Biology and Medicine*, Birkh'auser/Mathematics and Biosciences in Interaction Series, Basel, 2007.
- [10] A. Gamba, D. Ambrosi, A. Coniglio, A. de Candia, S. D. Talia, E. Giraudo, G. Serini, L. Preziosi and F. Bussolino, Percolation, morphogenesis, and Burgers dynamics in blood vessels formation, *Phys. Rev. Lett.* textbf90 (2003), No. 11, 118101.
- [11] M. Scianna and L. Preziosi, Multiscale developments of the cellular potts model, *Multiscale Model. Simul.* textbf10 (2012), 342–382.
- [12] J. T. Daub and M. H. Merks, A cell-based model of extracellular-matrix-guided endothelial cell migration during angiogenesis, *Bull. Math. Biol.* textbf75 (2013), 1377–1399.
- [13] K. Nagel and M. Schreckenberg, A cellular automaton model for freeway traffic. *Journal de Physique* **I 2 (12)** (1992), 2221-2229.
- [14] M. S. Alber, M.A. Kiskowski, J. A. Glazier and Y. Jiang, On cellular automaton approaches to modeling biological cells, in *Mathematical Theory in Biology, Communication and Finance* eds. by J. Rosenthal and D. S. Gilliam, Springer-Verlag, New York, 2004, 1–40.
- [15] D. Chowdhury, L. Santen and A. Schadschneider, Statistical physics of vehicular traffic and some related systems, *Physics Reports* **329** (2000), 199–329.
- [16] K. E. P. Sugden, M. R. Evans, W. C. K. Poon and N. D. Read, Model of hyphal tip growth involving microtubule-based transport, *Phys. Rev. E* **75** (2007), 031909.

表皮構造の数値モデリング Mathematical modeling of epidermal structure

長山雅晴 (北海道大学電子科学研究所・JST CREST),
小林康明, 熊本淳一 (北海道大学電子科学研究所),
澤武祐輔 (北海道大学理学院)
傳田光洋 (資生堂リサーチセンター),
中田聡 (広島大学理学研究科), 北畑裕之 (千葉大学理学研究科)

Masaharu Nagayama (Hokkaido University, CREST),
Yasuaki Kobayashi, Jun-ichi Kumamoto, Yusuke Sawabu (Hokkaido University),
Hiromitsu Denda (Shiseido Research Center),
Satoshi Nakata (Hiroshima University), Hiroyuki Kitahata (Chiba University)

概要

表皮バリア機能の発現機能を数理的に理解するために、表皮構造の数値モデル化を行う。ここでは Ca^{2+} ダイナミクスを考慮した数値モデルを構築し、正常な表皮に見られる Ca^{2+} 局在化の再現を目指す。

Abstract

We construct a mathematical model of the epidermal structure in order to mathematically understand the mechanisms of the epidermal barrier function. Our mathematical model considers Ca^{2+} dynamics and we aim at reproducing Ca^{2+} localization, which is a phenomenon that is observed in normal epidermal structures.

1 はじめに

皮膚は真皮部分と表皮部分から成っており、その最も外側にある表皮は、基底層、有棘層、顆粒層、角層からなる層構造をなしている。そして表皮では、基底細胞が有棘細胞、顆粒細胞と分化し、最終分化によって角質細胞となるターンオーバーが繰り返されており、人間のターンオーバーは約 28 日であることが知られている [1]。皮膚の持つ重要な役割の一つに体内水分の保持機能（バリア機能）があるが、この機能は表皮の中の角層が担っている。角層は角質細胞と細胞間脂質より形成されており、角層が破壊されると体内水分を保持することができなくなるため、角層は破壊されると早急に回復することが知られている（マウスでは約 24 時間で 90 % 以上回復する）。角層が角層破壊からの早期回復機能を有しているために、体内の水分は保持されているのである [1]。バリア機能の恒常性維持は、角質細胞と細胞間脂質が担っていることはわかってきたが、その機能がどのようなメカニズムによって恒常的に維持されているのかほとんど分かっていない。本研究の目的はバリア機能の恒常性維持機能の仕組みを数理的立場から明らかにすることにある。

これまでの研究から角層の恒常的維持機能には角層直下でのカルシウムイオン (Ca^{2+}) の局在化と消失が重要であることがわかってきた [2]。また、培養表皮細胞の一部を空気暴露することにより Ca^{2+} 波が空気暴露した表皮細胞から培養液中の表皮細胞に伝播する現象が発見された [3]。このことは角層が破壊され表皮細胞が空気にさらされると表皮細胞間を Ca^{2+}

波が伝播し、皮膚表面で起こった事象を表皮内部に情報伝達できることを示唆しており、角層の早期回復機構に関わっているのではないかと考えられる。これらの事実から角層の持つ2つの機能には Ca^{2+} が深く関わっている可能性が出てきた。これまでの細胞における Ca^{2+} の数理モデルは FitzHugh-Nagumo 型のモデル方程式になっており [4]、局在構造を持つ解を構成することが困難であることがわかった。従って、表皮細胞における Ca^{2+} の振る舞いを定性的に記述する数理モデルの構成が必要となった。本研究では機械刺激を受けた培養表皮細胞の振る舞いに注目し、表皮細胞に対する Ca^{2+} の伝播形態を定性的に記述する数理モデルを構成する。

2 細胞間 Ca^{2+} 伝播現象に対する数理モデル

細胞間 Ca^{2+} 伝播現象に関し提案されている数理モデルについて紹介する。細胞間 Ca^{2+} 伝播現象に対する数理モデルとして1貯蔵庫モデルと呼ばれる数理モデルが提案されている [5]。このモデルに機械刺激実験や空気暴露実験を再現できるように改良した数理モデルとして、我々は次のような数理モデルを提案した [6]：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial A}{\partial t} = d_A \Delta A - G(A) + \sum_{i=1}^N I(c_i, \mathbf{x}_i), \\ \frac{dP_i}{dt} = \sum_{j \in \Lambda_i} I_n(S_{ki}) w_{ij} d_P (P_j - P_i) + H(A(t, \mathbf{x}_i)) - J(P_i), \\ \frac{dc_i}{dt} = \sum_{j \in \Lambda_i} I_n(S_{ki}) w_{ij} d_c (c_j - c_i) + F_c(P_i, c_i, h_i, B(t, \mathbf{x}_i)), \\ \frac{dh_i}{dt} = \frac{1}{\tau_h(S_{ki})} F_h(c_i, h_i), \\ \frac{dw_{ij}}{dt} = F_w(c_i, c_j, w_{ij}), \\ \frac{\partial B}{\partial t} = \varepsilon_B (d_B \Delta B - K_b B + F_B(S_{ki}, \mathbf{x}_i)). \end{array} \right. \quad (2.1)$$

ここで、 $A(t, \mathbf{x})$ ：細胞外の ATP 濃度、 $P_i(t)$ ： i 番目の細胞内 IP_3 濃度、 $c_i(t)$ ： i 番目の細胞内 Ca^{2+} 濃度、 $h_i(t)$ ： i 番目の細胞の小胞体から細胞内への Ca^{2+} 放出の活性効果、 $w_{ij}(t)$ ： i 番目の細胞と j 番目の細胞の GJ 開閉率、 $B(t, \mathbf{x})$ ：細胞外刺激物質の濃度、である。また、各関数は

$$F_c(P, c, h, B) = K_F \left(\mu_0 + \frac{\mu_1 P}{k_\mu + P} \right) \left(\alpha_0 + \frac{(1 - \alpha_0)c}{K_1 + c} \right) h - \frac{\gamma c}{K_\gamma + c} + \beta + \frac{K_{bc} B^{m_{b1}}}{H_b^{m_{b2}} + B^{m_{b2}}},$$

$$F_h(c, h) = \frac{K_2^2}{K_2^2 + c^2} - h, \quad G(A) = K_{aa} A,$$

$$F_w(c_i, c_j, w_{ij}) = 1.0 - w_{ij} + \frac{1}{2} \left(-1.0 + \tanh \left(\frac{w_d - |c_i - c_j|}{\varepsilon_{w2}} \right) \right),$$

$$H(A) = \frac{K_{pa}(S_k) A^{m_{a1}}}{H_0^{m_{a2}} + A^{m_{a2}}}, \quad J(P) = K_{pp} P,$$

$$I(c, \mathbf{x}_i) = \begin{cases} \frac{K_{ac}(c - c_c)^{m_{c1}}}{I_0^{m_{c2}} + (c - c_c)^{m_{c2}}} \chi_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i, r), & c \geq c_c, \\ 0, & c < c_c, \end{cases}$$

$$F_B(S_{ki}, \mathbf{x}_i) = \frac{1}{4} \left(1 + \tanh \left(\frac{S_{ki} - S_{k1}}{\sigma_1} \right) \right) \left(1 + \tanh \left(\frac{S_{k2} - S_{ki}}{\sigma_2} \right) \right) \chi_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i, r),$$

$$K_{pa}(S_k) = k_g + \frac{k_s - k_g}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{S_s - S_k}{\delta_k} \right) \right),$$

$$I_n(S_k) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{S_k - S_s}{\delta_I} \right) \right),$$

$$\tau_h(S_k) = \tau_g + \frac{\tau_s - \tau_g}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{S_s - S_k}{\delta_\tau} \right) \right)$$

となる。また、

$$\chi_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; r) = \begin{cases} 1, & \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \leq r, \\ 0, & \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| > r. \end{cases}$$

ただし、 i は細胞番号、 \mathbf{x}_i は i 番目の細胞の位置を表す。 $S_{ki}(t)$ は細胞分化の状態変数であり、その定義は次節で説明する、 r は細胞半径、 c_c は ATP を放出する Ca^{2+} 濃度、 d_A は細胞外 ATP の拡散速度、 d_P は IP_3 の伝播速度、 d_c は Ca^{2+} の伝播速度、 γ は細胞内から小胞体への Ca^{2+} の取り込み率、 β は小胞体から細胞質への Ca^{2+} のもれ。とする、各項は、 F_c は貯蔵庫からの Ca^{2+} 放出と細胞外への Ca^{2+} 汲み出し、細胞外からの Ca^{2+} 流入、 F_h は細胞内 Ca^{2+} 濃度による不活性効果、 G は ATP の自然分解、 F_w は細胞間の GJ 開閉効果、 H は細胞外 ATP 濃度による細胞内 IP_3 生成、 J は IP_3 の自然分解、 I は Ca^{2+} 興奮による ATP 放出、 F_B は状態変数に依存した細胞外刺激物質の放出。 K_{pa} は状態変数に依存した細胞外 ATP の感受性。 I_n は状態変数に依存した GJ 発現度。 τ_h は状態変数に依存した細胞の興奮性を表している。

3 細胞運動モデル

この節では細胞自体の動き、つまり細胞分裂や細胞移動などの細胞ダイナミクスを表現する細胞運動モデルについて説明する。秒単位でおこる Ca^{2+} ダイナミクスに比べ、細胞ダイナミクスの時間スケールは非常に大きい。

3.1 細胞成長の数理モデル

細胞を最大半径が r_{\max} の球体とし、 i 番目の細胞の半径を r_i とすると細胞の半径 r_i は以下の数理モデルによって成長するものとする：

$$\frac{d}{dt} r_i = k_r (r_{\max} - r_i) r_i. \quad (3.1)$$

ただし、 k_r は成長率である。

3.2 細胞移動の数理モデル

排除体積により細胞が押し上げられる様子を表現するため、レナード・ジョーンズ型ポテンシャル関数を用いた以下の運動方程式を考える：

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i(t) = \sum_{j \in \Lambda_i} \frac{4\varepsilon_m K}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \left(\left(\frac{r_i + r_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{12} - \left(\frac{r_i + r_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^6 \right) \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} - \mu \dot{\mathbf{x}}_i(t) \quad (3.2)$$

ただし

$$K = \begin{pmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix}$$

であり、 $\mathbf{x}_j(t) (j = 1, \dots, N)$ は細胞の質点、 m_i は細胞 i の質量、 Λ_i は細胞 i に隣接する細胞の集合を表す。ここで、細胞は小さくその運動は非常に遅いため、慣性項は無視できるほど小さいと考えられるため、慣性項を無視した次の運動方程式によって細胞移動の数理モデルとする：

$$\mu \dot{\mathbf{x}}_i(t) = \sum_{j \in \Lambda_i} \frac{4\varepsilon_m K}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \left(\left(\frac{r_i + r_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{12} - \left(\frac{r_i + r_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^6 \right) \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}. \quad (3.3)$$

3.3 状態変数の数理モデル

細胞分化については、個々の細胞に状態変数値を持たせることで細胞の分化を特徴づけることを考える。

3.3.1 有棘細胞、顆粒細胞の状態変数モデル

S_{k_i} を細胞 i の状態変数とすると、数理モデルは次のように記述される：

$$\frac{d}{dt} S_{k_i}(t) = \varepsilon_{S_k} (S_0 + \alpha_k (c_i - \bar{c})), \quad S_{k_i}(t_0) = 0. \quad (3.4)$$

ただし、 ε_{S_k} ：状態変数変化率、 S_0 ：細胞外 Ca^{2+} 濃度による状態変数変化率、 α_k ：細胞質内 Ca^{2+} 濃度による状態変数変化率、 c_i ：細胞 i の細胞質内 Ca^{2+} 濃度、 \bar{c} ： Ca^{2+} 濃度の定常解である。

数値計算によって S_{k_i} の値を求め、細胞の状態を次のように決定する。

- $0 \leq S_{k_i} < S_s$ ならば有棘細胞
- $S_s \leq S_{k_i} < S_c$ ならば顆粒細胞
- $S_{k_i} = S_c$ で角化

そしてこの S_{k_i} の値に応じて ATP 感受性や GJ 発現率、細胞の興奮性を決定する。

3.3.2 角質細胞の状態変数モデル

寿命を迎えて死んだ細胞である角質細胞は、脱核しており抜け殻のような細胞であるため細胞質内 Ca^{2+} 濃度を考えていない。よって角質細胞の状態変数モデルは有棘細胞、顆粒細胞の状態変数モデルの細胞質内 Ca^{2+} 濃度に依存した項を取り除いた形で表す。つまり S_{ki} を用いて次のように記述される：

$$\frac{d}{dt}S_{ki}(t) = \varepsilon_{S_k}S_0. \quad (3.5)$$

顆粒細胞において $S_{ki} = S_c$ で角化するとしているため

- $S_c \leq S_{ki} < S_z$ ならば角質細胞
- $S_{ki} = S_z$ で表皮から剥離

とする。

3.3.3 基底細胞の状態変数モデル

表皮の最下層である基底層の基底細胞は他の細胞と区別するため、 ϕ_{b_i} を基底細胞 i の状態変数とする。数理モデルを次のように記述する：

$$\frac{d}{dt}\phi_{b_i}(t) = \varepsilon_{\phi_b}(S_0 + \alpha_b(c_i - \bar{c})), \quad \phi_{b_i}(t_0) = 0. \quad (3.6)$$

ただし、 ε_{ϕ_b} ：状態変数変化率、 α_b ：細胞質内 Ca^{2+} 濃度による状態変数変化率、 c_i ：細胞 i 内の Ca^{2+} 濃度、 \bar{c} ： Ca^{2+} 濃度の定常解である。

基底層では細胞分裂するため、状態変数が $\phi_{b_i}(t) = S_{div}$ となったら細胞分裂すると仮定する。分裂後の二つの細胞の状態変数值 $\phi_{b_i}(t) = 0.0$ とする。実験結果から基底細胞の ATP 感受性などは有棘細胞と同じと考えられるため、基底細胞の ATP 感受性、GJ 発現度、 Ca^{2+} 興奮性の値は有棘細胞と同じ値とする。従って基底細胞がとる値は

$$K_{pa}(\phi_b) = k_s, \quad I_n(\phi_b) = 0.0, \quad \tau_h(\phi_b) = \tau_s$$

である。

3.4 基底細胞の細胞分裂

表皮基底細胞の細胞分裂機構は完全に解明されたわけではない。[7]によると基底層を構成する細胞には際限なく分裂できる基底幹細胞と有限な回数だけ分裂できる一時的増幅細胞があり、この一時的増幅細胞が分化していくことで表皮を形成することが示唆されている [7]。この数理モデルでは、一時的増殖細胞のことを娘幹細胞と呼び、次の仮定をして数値計算を行う。

1. 基底層は基底幹細胞と娘幹細胞で構成されるとし、分裂方向は水平方向のみとする。このとき基底幹細胞は非対称分裂、娘幹細胞は対称分裂を行なう。

ここで述べている対称分裂とは、基底細胞が自己と同じ特性を受け継ぐ細胞を複製することをさし、非対称分裂とは、異なる特性の細胞を生み出すことを意味する (図 3.1)。

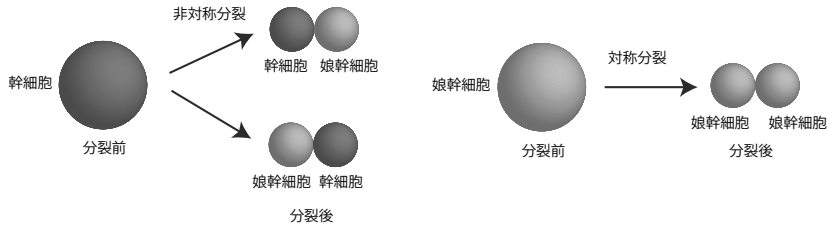


図 3.1: 基底細胞の分裂に対する仮定

3.4.1 細胞分裂の仮定

細胞分裂に関して次の仮定を用いる。

- 基底層は一層とし、無限回分裂可能な基底幹細胞と有限回分裂可能な娘幹細胞により構成されている。
- 基底細胞の状態変数値 ϕ_{bi} が $\phi_{bi} = S_{div}$ となると真皮に対して水平方向に分裂する。
- 基底幹細胞が分裂するときは非対称分裂により基底幹細胞と娘幹細胞になる、娘幹細胞が分裂するときは対称分裂により2つの娘幹細胞になる。
- 分裂後の基底細胞の Ca^{2+} 濃度や IP_3 濃度は分裂前の基底細胞の濃度を引き継ぐ。
- 分裂後の基底細胞の状態変数値はともに 0.0 である。
- 分裂後の基底細胞の細胞半径は分裂前の細胞の $\frac{1}{2}$ とする。

表皮構造を保つためには表皮表面から角質細胞が垢となって剥がれていくため、常に基底層から細胞が供給される必要がある。娘幹細胞は有限回しか分裂できないと仮定しているため、基底層には常に基底幹細胞がいる必要がある。[7]によると、表皮における基底幹細胞の性質は基底膜との接触によって維持されているのではないかと考えられているため基底幹細胞は常に基底層にとどまっている必要がある。そこで本数理モデルでもこの考え方にそって細胞分裂の数理モデルを構築する。基底膜とは真皮と基底層の間に存在する膜であるが、本研究では基底膜を考えていないため真皮と基底幹細胞との接触を考える。

3.4.2 細胞分裂後の位置座標

分裂前の基底細胞の位置座標を $\mathbf{x} = (x, y, z)$ とし、分裂後の座標を $\mathbf{x}_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $\mathbf{x}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ とすると、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ は

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \frac{r}{2} \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - \frac{r}{2} \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.7)$$

と書き表せる。ただし、 r : 分裂前の細胞の半径, (e_x, e_y, e_z) : 単位ベクトルである。

3.4.3 基底幹細胞と真皮の接着

上述したように、基底幹細胞は基底層にとどまる必要がある。今回のモデルでは基底膜を定義していないため、基底幹細胞は真皮と接着していると考え、実際の真皮は構成要素が膠原繊維であるため表皮のように細胞が積み重なり層構造をなしているわけではないが、本数理モデルでは半径 r_p の球を密に配置することで真皮を表現している。よって基底幹細胞は最も近い真皮質点とバネでつながることで、常に基底層にとどまっていると考えて以下の数理モデルを定義する：

$$\dot{\mathbf{x}}_i(t) = -k (\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p\| - (r_i + r_p)) \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p\|} \quad (3.8)$$

ただし、 \mathbf{x}_i ：基底幹細胞 i の座標、 r_i ：基底幹細胞 i の半径、 \mathbf{x}_p ：細胞 i に一番近い真皮の位置座標、 r_p ：真皮の半径、 k ：ばね定数である。

4 数値計算

4.1 計算領域

表皮形成で見られるダイナミクスを捉えるため、空間 3 次元の計算領域 $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ で数値計算を行う (図 4.1)。ただし本章及び本章以降では $L_x = 50$, $L_y = 50$, $L_z = 100$ としている。そして細胞の質点の座標 \mathbf{x} を $\mathbf{x} = (x, y, z)$ とし、球体による粒子シミュレーションを行う。ただし細胞外 ATP 濃度 A 、細胞外刺激物質 B の境界条件は z 方向は斉次ノイマン境界条件、 xy 方向は周期境界条件とした。また細胞は xy 方向は周期境界条件とし、基底層以下に位置固定の真皮細胞を置き壁の役割をさせている (図 4.1)。そして真皮細胞と相互作用するような表皮細胞を基底細胞とし、基底細胞は一層となるようなパラメータを選んだ。また真皮から一定の距離以上離れた基底細胞は表皮細胞になり、状態変数の更新を始めるとした。

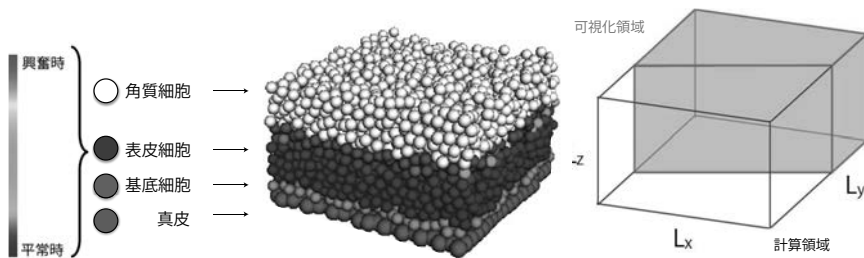


図 4.1: 左図は 3 次元空間での細胞配置図であり、右図は計算領域と可視化領域を示したもの。左図は計算領域内にある全ての細胞を表示している。左図における白い球が角質細胞、青い球が表皮細胞、緑色の球が基底細胞、赤色の球が真皮である。角質細胞と基底細胞の色は各々固定するが、表皮細胞は細胞内 Ca^{2+} 濃度に応じて色が変化するものとする。

4.1.1 局在化の再現

数値計算パラメータ

細胞運動のパラメータ： $k_r = 0.05$, $r_{max} = 1.4$, $\varepsilon_m = 0.01$, $k_x = 1.0$, $k_y = 1.0$, $k_z = 1.0$, $\mu = 1.0$, $\varepsilon_{S_k} = 0.05$, $S_0 = 0.122$, $\alpha_k = 1.0$, $S_s = 9.0$, $S_c = 22.0$, $S_z = 31.3$, $\zeta = 4.0$, $\varepsilon_{S_b} = 0.1$, $\alpha_b = 5.0$, $d_B = 0.0009$, $K_b = 0.03$, $S_{k1} = 21.5$, $S_{k2} = 22.6$, $\sigma_1 = 0.01$, $\sigma_2 = 0.05$.

Ca^{2+} ダイナミクス： $d_A = 1.0$, $d_P = 0.9$, $d_c = 0.03$, $S_s = 9.0$, $\delta_I = 1.5$, $K_F = 8.1$, $\mu_0 = 0.567$, $\mu_1 = 0.433$, $k_\mu = 4.0$, $\alpha_0 = 0.11$, $\gamma = 2.0$, $K_\gamma = 0.1$, $\beta = 0.02$, $K_2 = 0.7$, $K_{aa} = 0.2$, $K_{bc} = 1.0$, $H_b = 0.01$, $w_d = 0.1$, ε_{w2} , $m_{a1} = m_{a2} = 1$, $m_{b1} = m_{b1} = 2$, $H_0 = 0.5$, $K_{pp} = 0.3$, $K_{ac} = 0.02$, $c_c = 0.25$, $m_{c1} = 2$, $m_{c2} = 2$, $I_0 = 1.0$, $r = 1.0$, $k_g = 6.0$, $k_s = 4.0$, $\delta_k = 1.0$, $\delta_I = 1.5$, $\tau_g = 1.0$, $\tau_s = 0.2$, $\delta_\tau = 1.0$

図 4.2 は幹細胞を 16 個、娘幹細胞の分裂回数を 10 回としたときの数値計算結果である。 Ca^{2+} 局在化が維持されていることが数値計算結果から見て取れる (図 4.2)。さらに、このモデルを用いて空気暴露シミュレーションを行うと早期回復現象が再現されることもわかる [8]

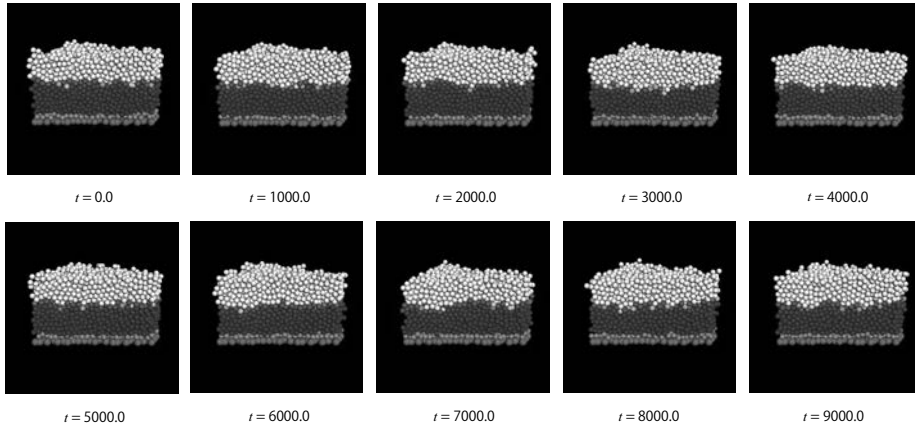


図 4.2: 局在化の再現. 幹細胞 16 個, 娘幹細胞の分裂可能回数 10 回の数値計算結果.

5 まとめ

表皮バリア機能の数理的取り扱いを可能とするために, Ca^{2+} ダイナミクスを考慮した表皮構造の数理モデルを構築した. この数理モデルの応用として表皮バリア機能の恒常性の理論的な取り扱いが可能となる. この数理モデルでは「角層の恒常性」と「細胞間脂質の恒常性」を数値的に定義することができ, これらの定義から表皮バリア機能の恒常性を定義することができる. このとき, Ca^{2+} 局在化が起こることで角層の恒常性が維持されることがわかり, Ca^{2+} 局在化がバリア機能の恒常性にとって重要な要因となっていることが示唆されている. 今後は, 皮膚疾患の発生機構を理解するために, 皮膚疾患の病態を再現することを可能とする真皮形状の変化を伴う表皮構造モデルの構築を行いたい.

参考文献

- [1] 傳田 光洋, 皮膚は考える (岩波科学ライブラリー 112), 岩波書店.
- [2] M. Denda, J. Hosoi and Y. Ashida, *Visual imaging of ion distribution in human epidermis*, Biochem. Biophys. Res. Commun., **272**, 789-795(2000).
- [3] M. Denda and S. Denda, *Air-exposed keratinocytes exhibited intercellular calcium oscillation*, Skin Research and Technology, **13**, 195-201(2007).
- [4] J. Keener, J. Sneyd[著], 中垣俊之 [監訳], 数理生理学 (上) , 日本評論社.
- [5] A. Atri, J. Amundson, D. Clapham, and J. Sneyd, *A single-pool model for intracellular calcium oscillations and waves in the *Xenopus laevis* oocyte* , Biophysical Journal, **65**, 1727-1739(1993).
- [6] Y. Kobayashi, Y. Sanno, A. Sakai, Y. Sawabu, M. Tsutsumi, M. Goto, H. Kitahata, S. Nakata, J. Kumamoto, M. Denda, M. Nagayama, *Mathematical modeling of calcium waves induced by mechanical stimulation in keratinocytes*, PLoS ONE 9(3): e92650.
- [7] Alberts B, Jonshon A, Lewis J, Raff M, Roberts K and Walter P. *Molecular biology of the cell*, 第4版, Newton Press.
- [8] M. Denda, S. Denda, M. Tsutsumi, M. Goto, J. Kumamoto, M. Nakatani, K. Takei, H. Kitahata, S. Nakata, Y. Sawabu, Y. Kobayashi, M. Nagayama, *Frontiers in epidermal barrier homeostasis – an approach to mathematical modeling of epidermal calcium dynamics*, Experimental Dermatology, 23(2014), 79-82

セルオートマトンを応用した群集運動の研究

Applications of Cellular Automata for Pedestrian Dynamics

柳澤 大地, 東京大学 大学院工学系研究科 航空宇宙工学専攻

Daichi YANAGISAWA,

Department of Aeronautics and Astronautics,

School of Engineering, The University of Tokyo

概要

セルオートマトンは、人の排除体積効果を簡単に取り入れることができ計算速度も早いので、数多くの群集運動のシミュレーションに用いられてきた。本論文では、セルオートマトンを応用した退出過程と待ち行列のモデルを紹介する。退出過程のモデルでは、群集の密度と退出に対するモチベーションにより、流動係数が変化することが分かった。また待ち行列のモデルでは、人が列を詰める効果が待ち時間に及ぼす影響を調べることができた。

Abstract

Cellular automata (CA) has been applied to many simulations of pedestrian dynamics since it enables us to introduce excluded-volume effect into models and achieve fast calculation. In this paper, we study CA models for egress and queuing processes. We have elucidated that density and motivation for egress of pedestrians greatly affect pedestrian flow. Furthermore, we have succeeded to investigate the effect of closing up a queue on waiting time.

1 はじめに

セルオートマトン (Cellular Automaton, (CA)) は、ジョン・フォン・ノイマンらによって発明され、スティーブン・ウルフラムによって体系が整備された空間・時間・状態量が離散なモデルである [1]。空間の最小単位はセルと呼ばれ、あるセルの状態はそのセルと周りのセルの状態に応じてルールによって更新される。

CA のイメージを具体的に掴むためには、ライフゲームが最適であろう。ライフゲームは、図 1 のような 2 次元のセルオートマトンである。空間は離散なので、将棋盤やチェス盤のようにマス状になっている。時間も離散なので、1 時間ステップ (時間の最小単位) ごとの変化を図 1 のように描くことができる。状態量は、0 と 1 の二通りであり、0 を白いマス、1 を黒いマスと定めると、図 1 のような模様になる。ライフゲームのルールは以下のようなものである。

1. あるセルの状態が 0 で、その周囲に状態 1 のセルがちょうど 3 つあるとき、次の時間ステップでそのセルは 1 になる。
2. あるセルの状態が 1 で、その周囲に状態 1 のセルが 1 個以下または 4 個以上のとき、次の時間ステップでそのセルは 0 になる。
3. 上記以外の場合、セルの状態は変化しない。

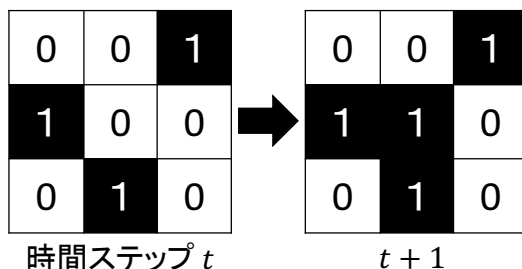


図1 ライフゲームの模式図。ライフゲームのルール1により、あるセルの周りにちょうど3つの状態1のセルがあると、そのセルは次の時間ステップに1になる。この図では、説明のために中心以外の8セルは変化しない場合を考えている。



図2 ASEP の模式図。右隣のセルが他の粒子に占有されている場合は、粒子はホップすることができない。

2ステップ分しかない図1では分かり辛いですが、この単純なルールの適用を繰り返していくと、あたかも生命の営みであるかのような非常に複雑な模様の変化を観測することができる。

セルオートマトンとは全く別の分野で、1968年に非対称単純排除過程 (Asymmetric Simple Exclusion Process, (ASEP)) というモデルが生まれた [2]。ASEPは長い間注目されることがなかったが、1992年にデリダらによって定常状態における粒子の分布などが厳密に解かれてから [3]、非平衡統計力学の分野で活発に理論的な研究が進められた。デリダらが解いたASEPは図2のようなものである。空間は一次元格子状、時間は連続であり、左端のセルからレート α で流入した粒子が、右隣のセルが空いていればレート p でホップして行き、右端のセルからレート β で流出する。ASEPは α, p, β の3つのパラメータの大小によって、入口、バルク (入口・出口を除くセル)・出口のどの部分で粒子の流れが悪くなっていて、どのパラメータが流れを律速しているかが変化する。この変化は相転移として観測され、3つの相にはそれぞれ自由相、最大流量層、渋滞相という名前が付けられている。

上記のようにCAとASEPは、全く別の起源を持ち、CAが離散時間、決定論的なモデルであるのに対し、ASEPは連続時間、確率的なモデルである。また、CAが単純なローカルルールから複雑な現象が発生するモデルとして様々な分野で応用されていったのに対し、ASEPは非平衡で解けるモデルの代表として注目を集めることになった。しかし研究が進むにつれ、確率的CAや離散時間のASEPも考えられるようになり、ウルフラムのElementary CA Rule 184と、離散時間パラレルアップデートのASEPでホップ確率 $p = 1$ としたものが同一になるということも分かった。そのため、両者の区別は次第になくなっていき、現在ではASEPもCAの1つと考えられることが多い。

CAは群集運動のモデル化に非常に適しており、21世紀になってから様々なモデルが生み出された [4]。群集運動をモデル化する上でのCAの最も大きなアドバンテージは、1つのセルには最大1人の人 (粒子) しか入れないという排除体積効果だろう。人の流れが渋滞する最大の原因は、人に大きさがあることである。これを力学的に扱おうとすると、大きさを持った粒子の多体問題になり、簡単ではない。CAではセルを考える

ことにより、始めから人の大きさがモデルに取り入れられることになる。また、離散空間・離散時間は人の移動ルールをシンプルにしてくれる。連続空間・連続時間のモデルでは、人の細かい移動が可能であるが、複雑な移動ルールを考えた際決定しなければならないパラメータが数多く発生する。CA では、空間と時間の最小単位が決まっているため、それを基準にルールを定めればパラメータの数を抑えることができる。これは理論解析を容易にすることにも繋がり、モデルの深い考察が可能になる。さらに、コンピュータによる計算が早いというメリットもある。連続のモデルでは、誤差が蓄積しないように、シミュレーションにおける最小時間間隔小さく取らなければならない場合があり、莫大な計算時間かかることもある。群集運動のシミュレータは、避難などでリアルタイムに使用されることも考えられるため、計算時間は短い方が望ましい。

もちろん CA を用いたモデル化には弱点も数多く存在する。まず、人の大きさはセルの大きさによって決まってしまう。また、人の移動は縦横斜め方向のみになり、現実の連続的な移動を再現できない。さらに、時間が離散の場合、観測に時間の最小単位 1 ステップ以上の解像度が必要な現象は再現することができない。

従って、CA によって目指すべき群集運動のモデルは、あらゆる状況に適用できる万能なものではなく、特定の現象をうまく扱う（空間や時間スケールを合わせた）ものであると筆者は考えている。また、CA による群集運動モデルに新しい人の振舞の効果を導入してその影響を調べる際は、ミクロスケールで導入した要素が総避難時間や待ち時間、流動係数などのマクロスケールの物理量にどのような影響を及ぼすかが重要であると思われる。シミュレータというと、一般にはどうしても見た目のリアルさが求められるが、CA を用いた時点で、ミクロスケールでのシミュレーションの見た目（アニメーション）のリアルさはすでにある程度損なわれてしまっているからである。

本論文では、上記のような CA の長所をうまく生かした退出過程と待ち行列のモデルについて簡単に紹介する。

2 退出過程

退出過程は双方向流（1本の道に互いに反対向きの2方向の群集の流れがある状況）と並んで、最も精力的に研究されている群集運動である。避難と呼ばれることもあるが、モデルの検証のために行われる実際の人による実験が避難のように切迫したものでないことが多いので、ここでは退出過程と呼ぶことにする。退出過程の CA モデルとしては、フロアフィールドモデル (Floor Field Model) [5, 4] が有名である。

2.1 フロアフィールドモデル

フロアフィールドモデルでは、それぞれのセルにフロアフィールドというポテンシャルが書かれており、人はこのフロアフィールドの値を見て移動する。最初のフロアフィールドモデルでは、出口からの距離を表す静的フロアフィールドと、自分の前を歩く人についていくという動的フロアフィールドの2種類のみが取り入れられていたが、その後、壁の効果 [6]、他人を押し効果 [7]、他人の動きを予測する効果 [8]、他人のパーソナルスペースを感じる効果 [9] など多くのフロアフィールドが考えられ、モデルが拡張されていった。フロアフィールドを用いたホップ確率の式は、

$$p_d = Z\xi_d \exp\left(\sum_f s^f k^f F_d^f\right) \quad (1)$$

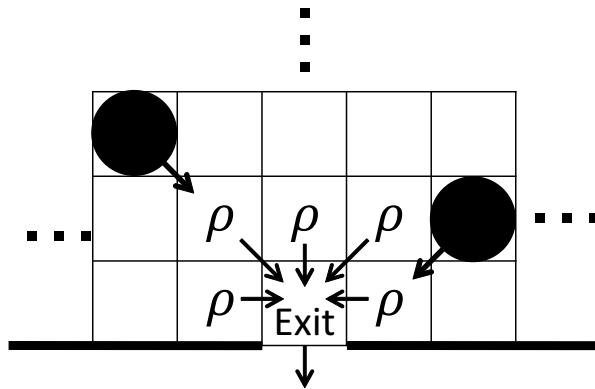


図3 流動係数の理論解析を行う際の退出モデルの模式図。出口セルのムーア近傍の5セルの密度が ρ であると仮定されている。

と書かれる。ここで、 d は移動先のセル、 Z は規格化定数、 ξ_d はセル d が壁を表すセルだったり、他人に占有されていたりしたら 0 を返し、それ以外では 1 を返す関数、 $k^f (\geq 0)$ はフロアフィールド f に関する感応度パラメータ、 F_d^f はセル d におけるフロアフィールド f の値である。 s^f は人が高い値を好むフロアフィールド f (人の追従効果を表す動的フロアフィールドなど) の場合は +1 を、低い値を好むフロアフィールド f (出口からの距離を表す静的フロアフィールドなど) の場合は -1 を返す。また、人が現在いるセルを (i, j) とすると、ノイマン近傍を採用したモデルの場合 $d \in \{(i+1, j), (i, j+1), (i-1, j), (i, j-1)\}$ である。ムーア近傍の場合の d はノイマン近傍の4近傍に $\{(i+1, j+1), (i-1, j+1), (i-1, j-1), (i+1, j-1)\}$ の4近傍が加わった8近傍になる。簡単な退出モデルは、出口からの距離を表す静的フロアフィールドのみで十分に構成できる。

フロアフィールドモデルでは、全ての人の移動を同時に考える離散時間のパラレルアップデートが用いられることが多い。そのため、1つのセルに同時2人以上の人が移動しようとすることがある。その場合、確率 $1-\psi$ でランダムに1人を移動させ、確率 ψ で誰も移動させないようにすると、人どうしの衝突の効果をうまく取り入れることができる。 ψ は、定数にして、競争的な集団や協力的な集団を表すのに用いたり [10]、衝突に巻き込まれた人数 m の関数にして、 m によって衝突の影響が変化するようにしたりすることができる [11]。

2.2 流動係数の理論解析

フロアフィールドモデルは厳密な理論解析は困難であるが、出口周りに注目した近似的な理論解析を行うことにより、流動係数(単位時間当たり単位幅の出口を通過する人の人数)の式を得て直観的に分かり易い示唆を得ることができる。ここでは、図3のような1セルの出口セルとそのムーア近傍の5セルからなる系を考える。出口周りのセルには人が密度(確率) ρ で存在し、確率1で出口セルに移動しようとしているとする。また出口にいる人は確率1で居室から退出する。図3には斜めのセルに移動可能なムーア近傍の場合を描いているが、以下の解析は近傍の種類によらない。そこで出口周りのセル数を n とすると、ある時間ステップに

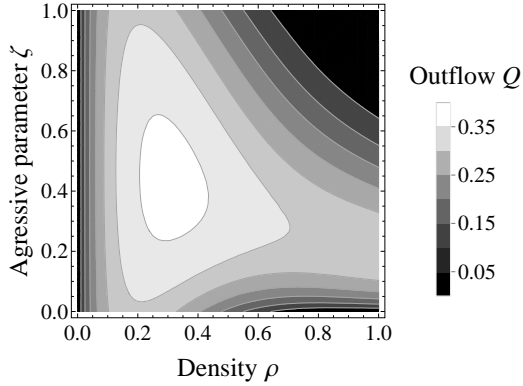


図4 流動係数 Q の等高線図 ($n = 5$)。

m 人の人が出口セルに移動する確率は、

$$b(m) = \binom{n}{m} \rho^m (1 - \rho)^{n-m} \quad (2)$$

と二項分布で表される。出口セルには 1 人しか入れないため、 m 人が同時に移動しようとするとう衝突が発生する。そこで、そのときに誰も出口セルに移動できない確率 ψ を

$$\psi(m) = \begin{cases} 0 & (m = 0, 1) \\ 1 - m\zeta(1 - \zeta)^{m-1} & (m \geq 2) \end{cases} \quad (3)$$

で記述する。 ζ は Aggressive parameter であり、衝突が起こっても譲ろうとせず、強引に出口セルに移動しようとする確率を表す。式 (3) 下段の第二項は、1 人だけ強引に出口セルに移動しようとし、残りの $m - 1$ 人が譲ろうとする場合に対応する。この 1 人だけが出口セルに移動する確率を引くことにより、誰も出口セルに移動できない確率が計算されている。式 (3) では、 m 人全員が譲ろうとした場合は誰も移動できない。従って、衝突が解消しない場合と全員が譲ってしまう場合両方で出口セルに人が移動できないので、 ψ は [11] における衝突関数とは異なる。式 (2) と (3) を用いることにより、出口周りのセルにいる 1 人の人が出口セルに移動できる確率は、

$$r(n) = \sum_{m=1}^n (1 - \psi(m)) b(m) \quad (4)$$

と計算できる。定常状態において出口セルに人がいない確率を $P(0)$ いる確率を $P(1)$ とすると、定常状態のマスター方程式は、

$$\begin{bmatrix} P(0) \\ P(1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - r(n) & 1 \\ r(n) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(0) \\ P(1) \end{bmatrix} \quad (5)$$

と書け、これと規格化条件を合わせて解くと、流動係数が、

$$Q(\rho, \zeta, n) = 1 \cdot P(1) = \frac{r(n)}{1 + r(n)} \quad (6)$$

と求まる。

図 4 は、出口周りのセル数が $n = 5$ のときの密度 ρ 、Aggressive parameter ζ に対する流動係数 Q の等高線図である。まず ρ が小さいときは衝突がほとんど起こらないので、 Q は ζ に依らないことが確認できる。

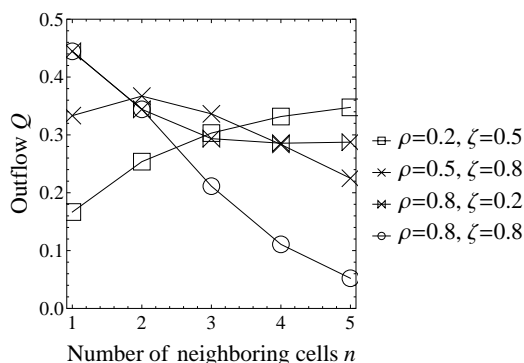


図5 出口セルの近傍セル n に対する流動係数 Q の変化。

ところが $\rho \simeq 0.2$ 以上では衝突の頻度が多くなるので、 ρ が一定のとき、 Q は ζ に対して最大値をとることが分かる。 ζ が小さいときは互いに譲り合ってしまう、逆に ζ が大きいときは衝突が解消しないため、どちらの場合も出口セルに誰も移動できず Q が小さくなってしまふのである。このような単純なモデルからでも、最大流動係数を達成するちょうどよい譲り合いの度合いが存在することが分かるのは非常に興味深い。

図5は、周りのセル数 n に対する流動係数 Q を四種類の (ρ, ζ) の組み合わせに対してプロットしたものである。 $(\rho, \zeta) = (0.2, 0.5)$ のときは、 n が増加すると Q も増加している。 ρ が低いと周りのセル一つ当たりからの流入が少ないので、 n が大きくなっても衝突の頻度があまり増加せず大きな Q を達成できる。 ζ の値が変化してもこの結果はあまり変わらない。 $(\rho, \zeta) = (0.5, 0.8)$ のときは、 $n = 2$ で Q が最大値をとる。 $n = 1$ では、周りのセルからの流入が少ない状態であるが、 $n \geq 3$ では大きな ζ のために衝突が解消できないことが多く、 Q が減少する。 $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.2)$ 及び $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.8)$ のときは、 ρ が大きいので n の増加に伴って Q は減少する。しかし $n \geq 3$ での減少の仕方は大きく異なっている。 $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.2)$ では、 $Q \simeq 0.3$ で減少が抑えられているのに対し、 $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.8)$ では、 $n = 5$ で $Q \simeq 0.05$ まで減少している。これは ζ の違いによる人のモチベーションに起因する。Aggressive parameter ζ が小さい $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.2)$ の場合、人は協力状態にあり、衝突が起こっても譲り合って解消できることが多い。しかし、 ζ が大きい $(\rho, \zeta) = (0.8, 0.8)$ の場合、人は競争状態にあり、衝突が起こったとき譲り合わないのになかなか出口セルに人が移動できない。

2.3 退出実験

以上の近似解析による考察を支持する実験結果は数多く得られている。[11] では出口回りに人の列を作り n をコントロールした退出実験を行った。その結果 $n = 2$ のときに流動係数が最大となることが分かった。[10] では競争状態の群集と協力状態の群集の飛行機からの避難実験が実施され、出口の幅が狭いときは協力状態の群集の方が早く避難できる（流動係数が大きくなる）ことが確認された。また [11] では障害物を設置した出口を用いた退出実験も行われた。障害物が出口前に配置されていると直観的には流動係数が減少すると予想されるが、障害物を設置することはモデルでは n を小さくすることに对应すると考えられ、流動係数が増加するという逆説的な結果が導かれる。実際の実験からは、障害物によって流動係数が増加するという結果が得られた。単純なモデルから示唆される驚くべき現象が、現実の実験によって確認されたことは非常に意義深い。

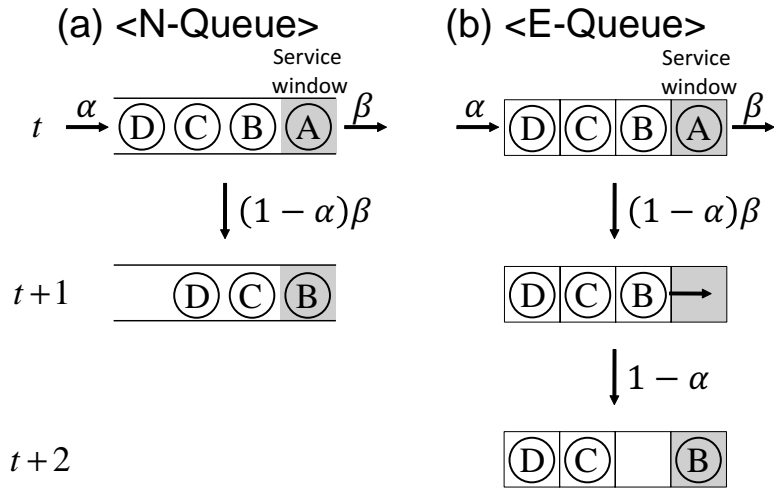


図6 N-Queue と E-Queue。

3 待ち行列

待ち行列理論は Erlang の電話交換の研究に始まり、現在ではサーバの設計などにも利用されている大変重要な理論である。最も基本となる M/M/1 型は、人の待ち行列で例えると、ポアソン過程による人の到着と、指数分布のサービス時間を考えており、行列に並んでいる人の人数や待ち時間の平均や分布を簡単に計算することができる。ただし、待ち行列理論では人の待ち行列を考える上で重要な排除体積効果が考慮されていない。そのため前の人が移動した「瞬間」に次の人は前の人がいた場所に移動する状況を考えていることになる(図6(a))。前の人が移動することが予め予想できれば図6(a)の移動は可能であり、人が足並みを揃えて行進している場合などがそれに当たる。しかし待ち行列に並んでいる人は、多くの場合止まっては進むということ繰り返すので、自分の前に人が動くのを待ち構えたりせずに、図6(b)のように一人分の空間ができたあと移動するのが普通である。そこで我々は、待ち行列と ASEP を組み合わせた、排除体積効果を取り入れた待ち行列 (E-Queue) を考え [12, 13]、通常の待ち行列 (N-Queue) と行列に並んでいる平均人数がどのように異なるか調べた。

3.1 排他待ち行列モデルの解析

本論文では、離散時間のパラレルアップデートの待ち行列について考える。離散時間の N-Queue は、連続時間の N-Queue と同じように定常状態のマスター方程式を解くことができ、極限をとると連続時間の場合の待ち人数や待ち時間を得ることができる。

以下では、離散時間の E-Queue について解析を行う。E-Queue の状態は、図6(b)のように人がいるセルとないセルの並びで表される。毎時間ステップ、確率 $\alpha \in [0, 1]$ で最後尾にひとり人が追加され、窓口セルに人がいれば確率 $\beta \in [0, 1]$ でサービスが終了してその人は待ち行列から出て行き、それ以外の人は自分の右

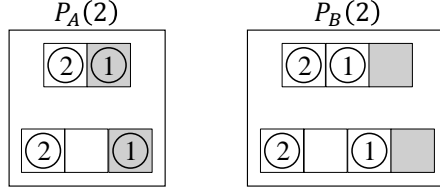


図7 $P_A(2)$ と $P_B(2)$ の例。

隣のセルが空いていれば移動する。

この論文では $n \in [0, \infty)$ 人の人が行列にいる確率 $P(n)$ とその期待値 N_s を求める。 $P(n)$ についての定常状態のマスター方程式を考える場合、窓口セルに人がいるかいないかで β を考える必要があるかないかが変わるため、場合分けをする必要がある。ここでは、行列に n 人いて、かつ窓口セルにも人がいる確率を $P_A(n)$ ($n \geq 1$)、行列に n 人いて、かつ窓口セルに人がいない確率を $P_B(n)$ ($n \geq 1$)、と書くことにする。 $P_A(n) + P_B(n) = P(n)$ である。待ち行列は無限に長くなる可能性があるので、 $P_A(n)$ 、 $P_B(n)$ に含まれる状態も一見無限にあるように思われる。しかし、図6(b)のように、空いた空間(セル)に確実に人が移動する場合、空いたセルが2つ以上連続する状態は定常状態とはならない。よって、例えば $n=2$ のとき、 $P_A(n)$ 、 $P_B(n)$ は図7のようなもののみとなるが、空いているセルへの移動が決定的であるため、 $P(n)$ を求める際はこれらを区別する必要がなく、状態遷移図は図8のようになる。従って、 $P_A(n)$ 、 $P_B(n)$ の定常状態におけるマスター方程式は、

$$P(0) = (1 - \alpha)P(0) + (1 - \alpha)\beta P_A(1) \quad (7)$$

$$P_A(1) = (1 - \alpha)(1 - \beta)P_A(1) + \alpha P(0) + (1 - \alpha)P_B(1) \quad (8)$$

$$P_A(n) = \alpha(1 - \beta)P_A(n - 1) + (1 - \alpha)(1 - \beta)P_A(n) + \alpha P_B(n - 1) + (1 - \alpha)P_B(n) \quad (n \geq 2) \quad (9)$$

$$P_B(n) = \alpha\beta P_A(n) + (1 - \alpha)\beta P_A(n + 1) \quad (10)$$

のようになる。これらを規格化条件 $\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = 1$ と合わせて解くと、

$$P(n) = \frac{r_N^n}{1 - \beta + \alpha\beta} \left[1 - \frac{\rho}{1 - \alpha} \right] \quad (11)$$

$$N_s = \sum_{n=0}^{\infty} nP(n) = \frac{\rho}{1 - \frac{\rho}{1 - \alpha}} \quad (12)$$

となる。ただし、

$$\rho = \frac{\alpha}{\beta} \quad (13)$$

$$r_N = \frac{1 - \beta + \alpha\beta}{(1 - \alpha)^2} \rho \quad (14)$$

である。

図9は、到着サービス比 ρ に対して行列に並んでいる平均人数 N_s をプロットしたものである。この図にはいくつか注目すべき点がある。連続時間の待ち行列では、 N_s は ρ のみによるが、離散時間では ρ と β (または α) の2変数によることが図より分かる。また β が小さいとき、すなわち列の間を詰める時間に対してサービス時間が長い場合は、N-Queue と E-Queue の N_s は近い値をとるが、 β が大きくなると列の間を詰め

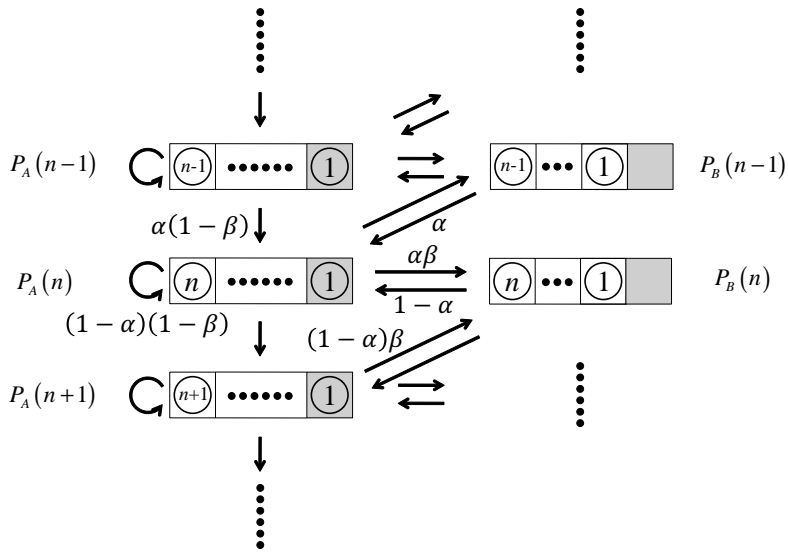


図8 状態遷移図。

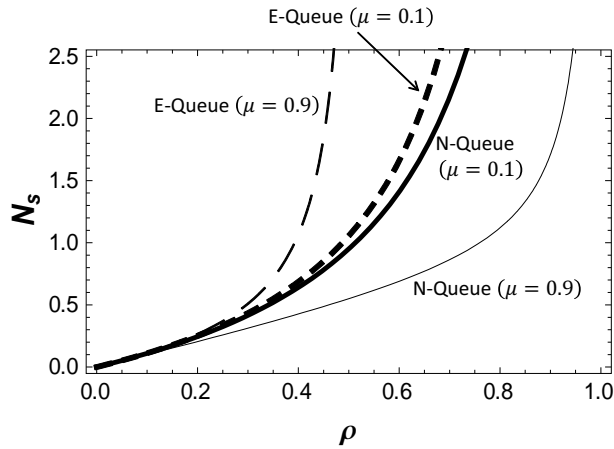


図9 ρ に対する行列に並んでいる平均人数 N_s 。

る影響が出てきて異なる値をとるようになる。最も注目すべき点は、この β が変化したときの N_s の変化である。N-Queue では、 ρ が一定のとき β が大きくなると N_s は小さくなる。つまり、同じ到着サービス比の場合、少人数の人が到着して長めのサービスを受ける場合よりも、多くの人が入って来てはすぐに出て行く方が、列に並んでいる平均人数が少なくなるということを言っている。しかし E-Queue の場合は全く逆で、人の入れ替わりが激しいと、詰める時間の影響のために列に並んでいる人数が増加してしまうのである。

4 まとめ

本論文では、セルオートマトンを応用した群集運動モデルの例として、退出過程と待ち行列のモデルについて述べた。退出過程のモデルでは、1つのセルに1人の人しか入ることができない性質を応用して人どうしの衝突の効果を取り入れている。これを解析すると、群集の密度と退出に対するモチベーションによって出口の流動係数が変化することや、障害物の設置により流動係数が増加する場合があることが分かった。また、待ち行列のモデルに排除体積効果を導入すると、人が列を詰める時間を考慮することができるより現実的なモデルを構成することができた。

参考文献

- [1] Stephen Wolfram. *Cellular Automata and Complexity: Collected Papers*. Westview Press, Boulder, 1994.
- [2] C T MacDonald, J H Gibbs, and A C Pipkin. Kinetics of biopolymerization on nucleic acid templates. *Biopolymers*, 6(1):1–5, January 1968.
- [3] B Derrida, E Domany, and D. Mukamel. An exact solution of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries. *J. Stat. Phys.*, 69(3-4):667–687, November 1992.
- [4] Andreas Schadschneider, Debashish Chowdhury, and Katsuhiro Nishinari. *Stochastic Transport in Complex Systems*. Elsevier, Amsterdam/Oxford, 2010.
- [5] C Burstedde, K Klauck, A Schadschneider, and J Zittartz. Simulation of pedestrian dynamics using a two-dimensional cellular automaton. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, 295(3-4):507–525, June 2001.
- [6] Katsuhiro Nishinari and Ansgar Kirchner. Extended floor field CA model for evacuation dynamics. *IEICE Trans. . . .*, (3):726–732, 2004.
- [7] Colin M. Henein and Tony White. Macroscopic effects of microscopic forces between agents in crowd models. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, 373:694–712, January 2007.
- [8] Yushi Suma, Daichi Yanagisawa, and Katsuhiro Nishinari. Anticipation effect in pedestrian dynamics: Modeling and experiments. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, 391(1-2):248–263, January 2012.
- [9] Takahiro Ezaki, Daichi Yanagisawa, Kazumichi Ohtsuka, and Katsuhiro Nishinari. Simulation of space acquisition process of pedestrians using Proxemic Floor Field Model. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, 391(1-2):291–299, January 2012.
- [10] Ansgar Kirchner, Hubert Klüpfel, Katsuhiro Nishinari, Andreas Schadschneider, and Michael Schreckenberg. Simulation of competitive egress behavior: comparison with aircraft evacuation data. *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, 324(3-4):689–697, June 2003.
- [11] Daichi Yanagisawa, Ayako Kimura, Akiyasu Tomoeda, Ryosuke Nishi, Yushi Suma, Kazumichi Ohtsuka, and Katsuhiro Nishinari. Introduction of frictional and turning function for pedestrian outflow with an obstacle. *Phys. Rev. E*, 80(3):036110, September 2009.
- [12] Daichi Yanagisawa, Akiyasu Tomoeda, Rui Jiang, and Katsuhiro Nishinari. Excluded Volume Effect in Queueing Theory. *SIAM Lett.*, 2:4, January 2010.
- [13] Chikashi Arita and Daichi Yanagisawa. Exclusive Queueing Process with Discrete Time. *J. Stat.*

Phys., 141(5):829–847, October 2010.

ソリトンと自己適合移動格子スキーム

Solitons and self-adaptive moving mesh schemes

早稲田大学応用数理学科 丸野健一

テキサス大学パンアメリカン校数学科 Bao-Feng Feng

神戸大学理学部数学科 太田泰広

Ken-ichi Maruno

Department of Applied Mathematics, Waseda University

Bao-Feng Feng

Department of Mathematics, The University of Texas–Pan American

Yasuhiro Ohta

Department of Mathematics, Kobe University

概要

特異性のある解を持つソリトン方程式に対する自己適合移動格子スキームの構成法について解説する。例として Hunter-Saxton 方程式の自己適合移動格子スキームを構成する。ホドグラフ変換の離散化、保存則の離散化が自己適合移動格子スキームにおけるメッシュの自動調節の鍵となることを示す。

Abstract

In this article, we show how to construct self-adaptive moving mesh schemes for soliton equations which have singularities in their solutions. As an example, we construct a self-adaptive moving mesh scheme of the Hunter-Saxton equation. It is shown that keys of self-adaptive moving mesh are discrete hodograph transformations and discrete conservation laws.

1 はじめに

最近, Camassa-Holm 方程式や短パルス方程式などの特異性がある解を持つソリトン方程式の可積分性を保存する離散化として, 急激に変位が変化する領域で格子間隔が自動的に調節される差分スキームが得られた. これは『自己適合移動格子スキーム』(self-adaptive moving mesh scheme) と呼ばれ, 数値計算法としても強力であることがいくつかの方程式で示されている [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7].

本稿では、一例として Hunter-Saxton 方程式

$$w_{txx} - 2\kappa^2 w_x + 2w_x w_{xx} + w w_{xxx} = 0 \quad (1)$$

を用いて、自己適合移動格子スキームの構成法とその数理的性質について解説する。この方程式は massive ネマチック液晶の弱非線形波動を記述するモデルであり、可積分系であることが知られている [8, 9, 10, 11]。可積分系理論からみた Hunter-Saxton 方程式の数理解造については文献 [12] に詳しい解説がある。第二項 $-2\kappa^2 w_x$ はスケール変換 $t' = \kappa t$, $x' = \kappa x$ により第二項の κ^2 は 1 に規格化できる。

方程式 (1) は Camassa-Holm 方程式 [13]

$$w_t + 2\kappa^2 w_x - w_{txx} + 3w w_x = 2w_x w_{xx} + w w_{xxx} \quad (2)$$

の短波長極限としても得られる。論文 [14, 15, 16] に従って、新しい変数

$$\tilde{t} = \epsilon t, \quad \tilde{x} = \epsilon^{-1} x$$

を導入する。ここで ϵ は微小量である。今、 w_i ($i = 0, 1, \dots$) は \tilde{t} と \tilde{x} の関数として、 w が $w = \epsilon^2(w_0 + \epsilon w_1 + \dots)$ と書けるとする。 ϵ の最低次で

$$w_{0,\tilde{t}\tilde{x}\tilde{x}} - 2\kappa^2 w_{0,\tilde{x}} + 2w_{0,\tilde{x}} w_{0,\tilde{x}\tilde{x}} + w_0 w_{0,\tilde{x}\tilde{x}\tilde{x}} = 0 \quad (3)$$

が得られる。これは Hunter-Saxton 方程式 (1) である。この事実を利用して、松野は Camassa-Holm 方程式の N -ソリトン解の短波長極限をとることで、(1) の N -ソリトン解 (頂点がかがっているのがカスプ・ソリトンと呼ばれる) を得た [17, 18]。

Hunter-Saxton 方程式の可積分性を保存する離散化については、著者らの論文 [3] においてなされたが、その後、自己適合移動格子スキームの研究が大きく進展したので論文には書かれていない事実も多い。そこで、本稿ではその後の研究の進展を取り込み解説する。

2 Hunter-Saxton 方程式とホドグラフ変換

本稿では、Hunter-Saxton 方程式

$$w_{txx} - 2w_x + 2w_x w_{xx} + w w_{xxx} = 0 \quad (4)$$

を考える。これは

$$(\partial_t + w \partial_x)(1 - w_{xx}) = -2w_x(1 - w_{xx}) \quad (5)$$

と書くこともできる。この方程式は Camassa-Holm 方程式の短波長極限で導出できる。

sinh-Gordon 方程式 ($A_1^{(1)}$ 型二次元戸田格子)

$$\frac{1}{2}(\ln \rho)_{XT} = \frac{\rho}{2} - \frac{2}{\rho} \quad (6)$$

はホドグラフ変換

$$x = \int w(X, T) dT = \int \rho(X, T) dX = X_0 + \int^X \rho(\tilde{X}, T) d\tilde{X}, \quad t = T \quad (7)$$

によって Hunter-Saxton 方程式に変換できることを示そう。ここで X_0 は左側の境界から決まる値であり、左側境界では w は 0 となるとする。左側が無限境界の場合には $X_0 = 0$ とする。このホドグラフ変換は逆変換可能であるが、逆変換可能なホドグラフ変換のことを Reciprocal 変換と呼ぶ場合もある。ホドグラフ変換とは、従属変数と独立変数を入れ替える変換であり、流体力学で複雑な流れを解析するのに応用されている。ここではそれを拡張したものを考えている。流体力学でのホドグラフ変換の応用については文献 [19] に詳しい。ホドグラフ変換とソリトン、微分幾何学との関係についての文献は [20, 21, 22, 23, 24, 25] などがある。

ホドグラフ変換より

$$\frac{\partial x}{\partial X} = \int^T \frac{\partial w}{\partial X} dT' = \rho, \quad \frac{\partial x}{\partial T} = w \quad (8)$$

となり、微分則

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial X} = \rho \frac{\partial}{\partial x}, \\ \frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial t} + w \frac{\partial}{\partial x}, \end{cases} \quad (9)$$

が与えられる。(8) より

$$\rho_T = w_X \quad (10)$$

であるから

$$(\ln \rho)_T = \frac{w_X}{\rho} \quad (11)$$

であることがわかる。方程式 (10) は保存則であり、 ρ は保存密度である。ホドグラフ変換と保存則には密接な関係があり、このことが自己適合移動格子スキームの鍵となる。方程式 (6) を

$$\frac{4}{\rho^2} = 1 - \frac{1}{\rho} (\ln \rho)_{XT} \quad (12)$$

と変形し、(11) を用いると

$$\frac{4}{\rho^2} = 1 - \frac{1}{\rho} \left(\frac{w_X}{\rho} \right)_X \quad (13)$$

となる。(11) と (13) にホドグラフ変換 (7) (すなわち微分則 (9)) を適用すれば

$$(\partial_t + w \partial_x) \ln \rho = w_x, \quad (14)$$

$$\frac{4}{\rho^2} = 1 - w_{xx}, \quad (15)$$

となる。この方程式系は

$$(\partial_t + w \partial_x) \ln(1 - w_{xx}) = -2w_x \quad (16)$$

と一本の方程式として書くことができ、これを整理すると Hunter-Saxton 方程式

$$(\partial_t + w\partial_x)(1 - w_{xx}) = -2w_x(1 - w_{xx}) \quad (17)$$

になる。ホドグラフ変換 (7) は逆変換可能であるから、これを逆にたどれば HS 方程式から sinh-Gordon 方程式 (6) を導くことができる。以上のことから、HS 方程式は sinh-Gordon 方程式 (6) とその保存則 (10) とホドグラフ変換 (7) の組と等価であると言える：

$$\text{sinh-Gordon 方程式: } \frac{1}{2}(\ln \rho)_{XT} = \frac{\rho}{2} - \frac{2}{\rho}, \quad (18)$$

$$\text{保存則: } \rho_T = w_X, \quad (19)$$

$$\text{ホドグラフ変換: } x = \int w(X, T) dT = X_0 + \int^X \rho(\tilde{X}, T) d\tilde{X}, \quad t = T. \quad (20)$$

⇕

$$\text{Hunter-Saxton 方程式: } (\partial_t + w\partial_x)(1 - w_{xx}) = -2w_x(1 - w_{xx}). \quad (21)$$

今, (10) と (13) において

$$w = -2(\ln f)_{TT}, \quad \rho = 2 - 2(\ln f)_{XT} = 2\frac{g^2}{f^2} \quad (22)$$

とおくと、双線形線形方程式

$$\left(\frac{1}{2}D_X D_T - 1\right) f \cdot f + g^2 = 0, \quad (23)$$

$$\left(\frac{1}{2}D_X D_T - 1\right) g \cdot g + f^2 = 0, \quad (24)$$

が導かれる。ここで、 D_X と D_T は $D_X^m f \cdot g = (\partial_X - \partial_{X'})^m f(X)g(X')|_{X'=X}$ で定義される広田演算子である。この双線形方程式は 2次元戸田格子の双線形方程式

$$\left(\frac{1}{2}D_X D_T - 1\right) \tau_n \cdot \tau_n + \tau_{n+1}\tau_{n-1} = 0 \quad (25)$$

に 2 周期性

$$\tau_{n+2} = \gamma\tau_n$$

を課し

$$f = \tau_0, \quad g = \tau_1$$

と置くことによって得られる。N-ソリトン解は以下で与えられる [3]：

$$f = \det(\psi_i^{(j-1)})_{1 \leq i, j \leq N}, \quad g = \det(\psi_i^{(j)})_{1 \leq i, j \leq N}, \quad (26)$$

$$\psi_i^{(j)} = p_{2i-1}^j e^{p_{2i-1}X + p_{2i-1}^{-1}T + \theta_{2i-1,0}} + (-p_{2i-1})^j e^{-p_{2i-1}X - p_{2i-1}^{-1}T + \theta_{2i,0}}.$$

2.1 Hunter-Saxton 方程式の自己適合移動格子スキーム

Hunter-Saxton 方程式 (4) の (空間) 離散化法について以下に解説する. 論文 [7] において双線形形式を用いた離散化法と Lax ペアを用いた離散化法が提案されているが, 本稿では双線形形式を用いた離散化法を用いる.

双線形形式を用いた離散化

- ステップ 1: Hunter-Saxton 方程式 (4) をホドグラフ変換 (7) によって sinh-Gordon 方程式 (10), (13) に変換する.
- ステップ 2: sinh-Gordon 方程式 (10), (13) を双線形方程式に変換する.
- ステップ 3: sinh-Gordon 方程式の双線形方程式を (空間) 離散化する.
- ステップ 4: (空間) 離散化された双線形方程式から半離散 sinh-Gordon 方程式を作る.
- ステップ 5: ホドグラフ変換を離散化し, 離散ホドグラフ変換を用いて離散 sinh-Gordon 方程式を変換すると, 半離散 Hunter-Saxton 方程式, すなわち Hunter-Saxton 方程式の自己適合移動格子スキームが得られる.

連続の場合には HS 方程式は sinh-Gordon 方程式 (6) とその保存則 (10) とホドグラフ変換 (7) の組と等価であったが, 空間離散の場合にも同様の関係が成立する.

以下に, Hunter-Saxton 方程式の自己適合移動格子スキームの具体的な構築手順の詳細を示す.

方法 1:

ステップ 1: Hunter-Saxton 方程式 (4) をホドグラフ変換 (7) によって sinh-Gordon 方程式 (10), (13) に変換する.

ステップ 2: sinh-Gordon 方程式 (10), (13) は従属変数変換

$$w = -2(\ln f)_{TT}, \quad \rho = 2 - 2(\ln f)_{XT} = 2\frac{g^2}{f^2} \quad (27)$$

により双線形方程式

$$\left(\frac{1}{2}D_X D_T - 1\right) f \cdot f + g^2 = 0, \quad (28)$$

$$\left(\frac{1}{2}D_X D_T - 1\right) g \cdot g + f^2 = 0, \quad (29)$$

に変換される.

ステップ 3: 双線形方程式 (28), (29) の変数 X を離散化する:

$$\left(\frac{1}{a}D_T - 1\right) f_{k+1} \cdot f_k + g_{k+1}g_k = 0, \quad (30)$$

$$\left(\frac{1}{a}D_T - 1\right) g_{k+1} \cdot g_k + f_{k+1}f_k = 0. \quad (31)$$

ステップ4: 従属変数変換

$$w_k = -2(\ln f_k)_{TT}, \quad (32)$$

$$\rho_k = 2 - \frac{2}{a} \left(\ln \frac{f_{k+1}}{f_k} \right)_T = 2 \frac{g_{k+1}g_k}{f_{k+1}f_k}, \quad (33)$$

を考える. これは (27) の離散版である. 双線形方程式 (30), (31) を

$$-\frac{1}{a} \left(\ln \frac{f_{k+1}}{f_k} \right)_T = \frac{g_{k+1}g_k}{f_{k+1}f_k} - 1, \quad (34)$$

$$-\frac{1}{a} \left(\ln \frac{g_{k+1}}{g_k} \right)_T = \frac{f_{k+1}f_k}{g_{k+1}g_k} - 1, \quad (35)$$

と変形し, (34) を T に関して微分すると

$$\partial_T \rho_k = \frac{w_{k+1} - w_k}{a} \quad (36)$$

が得られる. これより

$$\partial_T (\ln \rho_k) = \frac{w_{k+1} - w_k}{a \rho_k} \quad (37)$$

が得られる. 方程式 (36) は離散版の保存則であり ρ_k は保存密度である. (34) から (35) を引くと

$$-\frac{1}{a} \left(\ln \frac{f_{k+1}g_k}{f_k g_{k+1}} \right)_T = \frac{g_{k+1}g_k}{f_{k+1}f_k} - \frac{f_{k+1}f_k}{g_{k+1}g_k} \quad (38)$$

が得られる. この式の k を $k-1$ にシフトすると

$$-\frac{1}{a} \left(\ln \frac{f_k g_{k-1}}{f_{k-1} g_k} \right)_T = \frac{g_k g_{k-1}}{f_k f_{k-1}} - \frac{f_k f_{k-1}}{g_k g_{k-1}} \quad (39)$$

が得られる. (38) と (39) を足すと

$$-\frac{1}{a} (\partial_T (\ln \rho_{k-1}) - \partial_T (\ln \rho_k)) = \frac{\rho_k}{2} - \frac{2}{\rho_k} + \frac{\rho_{k-1}}{2} - \frac{2}{\rho_{k-1}} \quad (40)$$

が得られる. これは半離散 sinh-Gordon 方程式である. (37) を用いると

$$-\frac{1}{a^2} \left(\frac{w_k - w_{k-1}}{\rho_{k-1}} - \frac{w_{k+1} - w_k}{\rho_k} \right) = \frac{\rho_k}{2} - \frac{2}{\rho_k} + \frac{\rho_{k-1}}{2} - \frac{2}{\rho_{k-1}} \quad (41)$$

となる.

ステップ5: ホドグラフ変換 (7) の変数 X に関する離散化を考える:

$$x_k = \int w_k dT = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} a \rho_j, \quad t = T. \quad (42)$$

ここで $x_0 = X_0$ であり, 左側境界の座標である. また, $w_k \equiv w(X_k, T)$ は時刻 T , 位置 $X_k = X_0 + ak$ での w の値を意味する. 今, 格子間隔

$$\delta_k = x_{k+1} - x_k \quad (43)$$

を導入すると、離散ホドグラフ変換より格子間隔は関係式

$$\delta_k = a\rho_k \quad (44)$$

を満たすことがわかる。よって、半離散 sinh-Gordon 方程式 (40), (36) は離散ホドグラフ変換 (42) によって自己適合移動格子スキーム

$$\partial_T \delta_k = w_{k+1} - w_k, \quad (45)$$

$$\left(\frac{w_{k+1} - w_k}{\delta_k} - \frac{w_k - w_{k-1}}{\delta_{k-1}} \right) = \frac{\delta_k}{2} - \frac{2a^2}{\delta_k} + \frac{\delta_{k-1}}{2} - \frac{2a^2}{\delta_{k-1}}, \quad (46)$$

に変換される。格子間隔 δ_k は格子点 x_k と $\delta_k = x_{k+1} - x_k$ の関係にあるが、この関係式は離散ホドグラフ変換

$$x_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \delta_j \quad (47)$$

に起因している。点の集合 $\{(x_k, w_k)\}_{k=0,1,\dots}$ は半離散 Hunter-Saxton 方程式の解を与える。離散ホドグラフ変換は離散的空間におけるオイラー的記述とラグランジュ的記述の間の変換であると解釈することができる [5]。数値計算をするには、メッシュの格子間隔 δ_k を (leapfrog 法など適当な時間発展の数値解法を用いて) 方程式 (45) によって計算し、新しく生成されたメッシュを用いて方程式 (46) によって w_k を計算すればよい。格子点 x_k は離散ホドグラフ変換 (47) で計算する。方程式 (46) は代数方程式であるので、 w_k を計算するには連立方程式を計算することになる。

離散ホドグラフ変換 (47) は微分-差分公式

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{\Delta X_k} &= \frac{\Delta}{a} = \frac{\Delta x_k}{a} \frac{\Delta}{\Delta x_k} = \rho_k \frac{\Delta}{\Delta x_k} = \rho_k \frac{\Delta}{\delta_k}, \\ \frac{\partial}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x_k}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\partial \delta_j}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x_k} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} + \left(\sum_{j=0}^{k-1} (w_{j+1} - w_j) \right) \frac{\partial}{\partial x_k} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} + (w_k - w_0) \frac{\partial}{\partial x_k} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} + w_k \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad (w_0 = 0 \text{ の場合}) \end{aligned} \quad (48)$$

を与える。ここで Δ は差分作用素 $\Delta \equiv e^{\partial_k} - 1$ であり、 $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$, $\Delta w_k = w_{k+1} - w_k$ となる。また、 $X_k = X_0 + ak$ である。この微分-差分公式を方程式 (45), (46) に適用すると

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + w_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \delta_k = w_{k+1} - w_k, \quad (50)$$

$$\frac{\delta_k}{a} \frac{\Delta}{\Delta x_k} \left(\frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \right) = \frac{\delta_k}{2a} - \frac{2a}{\delta_k} + \frac{\delta_{k-1}}{2a} - \frac{2a}{\delta_{k-1}}, \quad (51)$$

となる。(51)を

$$1 - \frac{2\delta_k}{\delta_k + \delta_{k-1}} \frac{\Delta}{\Delta x_k} \left(\frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \right) = \frac{4a^2}{\delta_k \delta_{k-1}} \quad (52)$$

と変形して、両辺の対数をとって T で微分すると

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln \left(1 - \frac{2\delta_k}{\delta_k + \delta_{k-1}} \frac{\Delta}{\Delta x_k} \left(\frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \right) \right) = -\frac{\partial}{\partial T} \ln \delta_k - \frac{\partial}{\partial T} \ln \delta_{k-1} \quad (53)$$

となる。これに (50) と (49) を用いると

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + w_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \ln \left(1 - \frac{2\delta_k}{\delta_k + \delta_{k-1}} \frac{\Delta}{\Delta x_k} \left(\frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \right) \right) \\ &= -\frac{w_{k+1} - w_k}{\delta_k} - \frac{w_k - w_{k-1}}{\delta_{k-1}} \end{aligned} \quad (54)$$

が得られる。右辺を書きかえると

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + w_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \ln \left(1 - \frac{2\delta_k}{\delta_k + \delta_{k-1}} \frac{\Delta}{\Delta x_k} \left(\frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \right) \right) = \frac{\Delta w_k}{\Delta x_k} + \frac{\Delta w_{k-1}}{\Delta x_{k-1}} \quad (55)$$

となり、これは連続極限 $\delta_k = \Delta x_k \rightarrow 0$ で Hunter-Saxton 方程式 (5) になる。

Remark 1: 方程式 (45) は格子間隔 δ_k の発展を記述する。これは保存則 (10) の空間離散版に他ならず、格子間隔 δ_k は保存密度に対応している。つまり、メッシュの格子間隔 δ_k は時間連続・空間離散の保存則に従う。空間離散の保存則より、自己適合移動格子スキームは以下の性質を持つことがわかる:

(i) $w_{k+1} - w_k < 0$ が成り立つ時、すなわち、流束 $-w_k$ と $-w_{k+1}$ の間の傾き (差分商) が正の時、保存密度は減少するので、格子間隔 δ_k は減少する。

(ii) $w_{k+1} - w_k > 0$ が成り立つ時、すなわち流束 $-w_k$ と $-w_{k+1}$ の間の傾き (差分商) が負の時、保存密度は増大するので、格子間隔は増大する。

このことから、このスキームは与えられたデータ $\{x_k, w_k\}$ ($k = 0, 1, 2, \dots, N$) に対してメッシュの格子間隔を自動的に調節していくことがわかる。自己適合移動格子スキームにおけるメッシュの自動調節の鍵は、メッシュの格子間隔が保存則の保存密度になっていることにある。これは、連続系におけるホドグラフ変換と保存則の関係がそのまま離散に持ち込まれた結果である。連続系においては、ホドグラフ変換は方程式の背後に隠れており見えないが、離散系ではメッシュの格子点を与える式として表に現れる。

Remark 2: 左側境界が無限の場合には、(42) は

$$x = \int_{-\infty}^X \rho(\tilde{X}, T) d\tilde{X} \Rightarrow x_k = \sum_{j=-\infty}^{k-1} a \rho_j \quad (56)$$

となる。この時、(49)は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x_k}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{j=-\infty}^{k-1} \frac{\partial \delta_j}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x_k} \\
&= \frac{\partial}{\partial t} + \left(\sum_{j=-\infty}^{k-1} (w_{j+1} - w_j) \right) \frac{\partial}{\partial x_k} \\
&= \frac{\partial}{\partial t} - w_k \frac{\partial}{\partial x_k}
\end{aligned} \tag{57}$$

となる。

Remark 3: 双線形方程式 (30) と (31) は 2次元戸田格子の Bäcklund 変換の双線形方程式

$$\left(\frac{1}{a} D_T - 1 \right) \tau_n(k+1) \cdot \tau_n(k) + \tau_{n+1}(k+1) \tau_{n-1}(k) = 0 \tag{58}$$

に 2 周期性

$$\tau_{n+2}(k) = \gamma \tau_n(k)$$

を課し

$$f_k = \tau_0(k), \quad g_k = \tau_1(k)$$

と置くことによって得られる。N-ソリトン解は以下で与えられる [3] :

$$f_k = \det(\psi_i^{(j-1)}(k))_{1 \leq i, j \leq N}, \quad g_k = \det(\psi_i^{(j)}(k))_{1 \leq i, j \leq N}, \tag{59}$$

$$\psi_i^{(j)}(k) = p_{2i-1}^j (1 - ap_{2i-1})^{-k} e^{p_{2i-1}^{-1} T + \theta_{2i-1,0}} + (-p_{2i-1})^j (1 + ap_{2i-1})^{-k} e^{-p_{2i-1}^{-1} T + \theta_{2i,0}}.$$

Remark 4: ホドグラフ変換の τ 関数表示は

$$x = 2X - 2(\ln f)_T \tag{60}$$

であり、

$$\frac{\partial x}{\partial T} = -2(\ln f)_{TT} = w \tag{61}$$

となる。離散ホドグラフ変換の τ 関数表示は、

$$x_k = X_k - 2(\ln f_k)_T \tag{62}$$

であり、

$$\frac{\partial x_k}{\partial T} = -2(\ln f_k)_{TT} = w_k \tag{63}$$

となる。ただし、有限区間の場合には $f_0 = 1$ とする。

3 おわりに

特異性のある解を持つソリトン方程式の可積分性を保存する離散化を行い格子間隔が自動的に調節される自己適合移動格子スキームを Hunter-Saxton 方程式を例にして解説した。メッシュの格子間隔は保存密度になっており、そのことが自己適合移動格子スキームにおけるメッシュの自動調節の鍵となっている。このことは、論文 [7] において短パルス方程式および結合型短パルス方程式で示されたが、Hunter-Saxton 方程式でも同様であることを本稿で示した。

Camassa-Holm 方程式は Hunter-Saxton 方程式の拡張と考えることができるので、Camassa-Holm 方程式の自己適合移動格子スキームについてもほぼ同様の議論が適用できる。Camassa-Holm 方程式の場合には、sinh-Gordon 方程式の代わりに変形 sinh-Gordon 方程式とするだけで、以降の議論はほぼ同じとなる。これについては別の機会に解説することにした。

本論文で提案した方法の適用範囲は空間 1 次元の可積分系に限定されているが、文献 [5] で示されているように自己適合移動格子スキームは離散微分幾何学との深い関係もあり、その関係を追求していくことで自己適合移動格子スキームの適用範囲をさらに拡大できる可能性がある。

参考文献

- [1] Ohta, Y., Maruno, K. and Feng, B. F., “An integrable semi-discretization of the Camassa-Holm equation and its determinant solution”, *J. Phys. A* **41** (2008) 355205.
- [2] Feng, B. F., Maruno, K. and Ohta, Y., “A self-adaptive moving mesh method for the Camassa-Holm equation”, *J. Comput. Appl. Math.* **235** (2010) 229–243.
- [3] Feng, B. F., Maruno, K. and Ohta, Y., “Integrable discretizations for the short-wave model of the Camassa-Holm equation”, *J. Phys. A* **43** (2010) 265202.
- [4] Feng, B. F., Maruno, K. and Ohta, Y., “Integrable discretizations of the short pulse equation”, *J. Phys. A* **43** (2010) 085203.
- [5] Feng, B. F., Inoguchi, J., Kajiwara, K., Maruno, K. and Ohta, Y., “Discrete integrable systems and hodograph transformations arising from motions of discrete plane curves”, *J. Phys. A* **44** (2011) 395201.
- [6] Feng, B. F., Inoguchi, J., Kajiwara, K., Maruno, K. and Ohta, Y., “Integrable discretizations of the Dym equation”, *Front. Math. in China* **8** (2013) 1017–1029.
- [7] Feng, B. F., Maruno, K. and Ohta, Y., “Self-adaptive moving mesh schemes for short pulse type equations and their Lax pairs”, *Pacific J. Math. for Industry* **6** (2014) 8.
- [8] Hunter, J. K. and Saxton, R. A., “Dynamics of director fields”, *SIAM J. Appl. Math.* **51** (1991) 1498–1521.

- [9] Hunter, J. K. and Zheng, Y., “On a completely integrable nonlinear hyperbolic variational equation”, *Physica D* **79** (1994) 361–386.
- [10] Hunter, J. K. and Zheng, Y., “On a nonlinear hyperbolic variational equation: I. Global existence of weak solutions”, *Arch. Rat. Mech. Anal.* **129** (1995) 305–353.
- [11] Hunter, J. K. and Zheng, Y., “On a nonlinear hyperbolic variational equation: II. The zero-viscosity and dispersion limits”, *Arch. Rat. Mech. Anal.* **129** (1995) 355–383.
- [12] Wang, J. P., “The Hunter-Saxton equation: remarkable structures of symmetries and conserved densities”, *Nonlinearity* **23** (2010) 2009–2028.
- [13] Camassa, R. and Holm, D., “An integrable shallow water equation with peaked solitons”, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 1661–1664.
- [14] Manna, M. A. and Merle, V., “Asymptotic dynamics of short waves in nonlinear dispersive models”, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 6206–6209.
- [15] Manna, M. A., “Nonlinear asymptotic short-wave models in fluid dynamics”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** (2001) 4475–4491.
- [16] Faquir, M., Manna, M. A. and Neveu, A., “An integrable equation governing short waves in a long-wave model”, *Proc. R. Soc. A* **463** (2007) 1939–1954.
- [17] Matsuno, Y., “Cusp and loop soliton solutions of short-wave models for the Camassa-Holm and Degasperis-Procesi equations”, *Phys. Lett. A* **359** (2006) 451–457.
- [18] Matsuno, Y., “Parametric representation for the multisoliton solution of the Camassa-Holm equation”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 1983–1987.
- [19] 永田雅人, “高速流体力学”, (森北出版, 2010).
- [20] Rogers, C. and Shadwick, W.F., “*Bäcklund transformations and their applications*” (Academic Press, New York, 1982)
- [21] Rogers, S. and Schief, W. K., “*Bäcklund and Darboux Transformations: Geometry and Modern Applications in Soliton Theory*”, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [22] Ishimori, Y., “On the modified Korteweg-de Vries soliton and the loop soliton”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50** (1981) 2471–2472.
- [23] Ishimori, Y., “A relationship between the Ablowitz-Kaup-Newell-Segur and Wadati-Konno-Ichikawa schemes of the inverse scattering method”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **51** (1982) 3036–3041.

- [24] Goldstein, R. E. and Petrich, D. M., “The Korteweg-de Vries hierarchy as dynamics of closed curves in the plane”, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 3203–3206.
- [25] 井ノ口順一, “曲線とソリトン”, (朝倉書店, 2010).

溶解結晶模型の可積分構造

Integrable structure of melting crystal models

高崎金久 近畿大学理工学部

Kanehisa Takasaki

Faculty of Science and Engineering, Kinki University

概要

溶解結晶模型の可積分構造に関する数年間の研究 [1, 2, 3, 4, 5] を紹介する。前半では最も基本的な模型の場合に焦点を絞り、平面分割による分配関数の定義、対角断面の方法による分配関数の書き換え、外部ポテンシャルによる変形、分配関数のフェルミオン表示、1次元戸田階層の τ 関数との関係を順次説明する。後半ではコニフォードに関連する模型やオービフォード版模型についての最近の結果を説明する。これらの模型の分配関数は2次元戸田階層の τ 関数と関係する。対応するラックス作用素は因子分解された特殊な形をもち、Ablowitz-Ladik (相対論的戸田) 階層など、2次元戸田階層に埋め込まれた可積分階層の解であることがわかる。

1 溶解結晶模型

溶解結晶模型 [6, 7] は xyz 空間の第1象限を占める結晶の角が溶解する状況 (現実の物理系を想定しているわけではない) を平衡統計力学系として定式化したものである。結晶は単位立方体からなり、第1象限における補集合が**3次元ヤング図形**の形をしているとする (図1)。このような3次元ヤング図形を整数データで表現するために**平面分割** [8, 9, 10] を用いる。

通常の意味の**分割** (整数分割) は

$$\lambda = (\lambda_i)_{i=1}^{\infty} = (\lambda_1 \ \lambda_2 \ \cdots), \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq 0$$

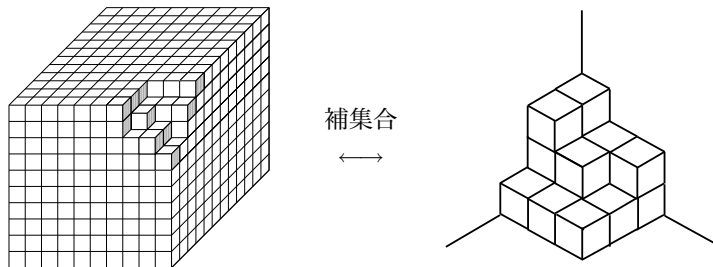


図 1: 角の溶けた結晶 (左) と 3次元ヤング図形 (右)

という形の単調減少非負整数列（0 と異なる要素は高々有限個）である。このような分割 λ には i 番目の行が λ_i 個の単位正方形からなるヤング図形が対応する。要素の総和

$$|\lambda| = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i$$

はヤング図形の面積である。

平面分割はこのような 1 次元的配列を 2 次元化したもの

$$\pi = (\pi_{ij})_{i,j=1}^{\infty} = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \cdots \\ \pi_{21} & \pi_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

であり、その要素は 2 方向に単調減少するという条件

$$\begin{array}{c} \pi_{ij} \geq \pi_{i,j+1} \\ \vee \\ \pi_{i+1,j} \end{array}$$

を満たす。ここでも 0 と異なる要素は高々有限個である。このような平面分割 π に対して、 xy 平面上の (i, j) 番目のます目 $[i-1, i] \times [j-1, j]$ の上に高さ π_{ij} の単位立方体の柱を積み、3 次元ヤング図形ができる (図 2)。 π_{ij} の総和

$$|\pi| = \sum_{i,j=1}^{\infty} \pi_{ij}$$

は 3 次元ヤング図形の体積を与える。

これ以降は、分割 λ 、整数分割 π とそれが表すヤング図形、3 次元ヤング図形を同一視して、「ヤング図形 λ 」、「3 次元ヤング図形 π 」という言い方をすることにしよう。

3 次元ヤング図形 π (あるいはその補集合である結晶) のボルツマン重みを $q^{|\pi|}$ ($0 < q < 1$) と定める。平面分割全体の集合 \mathcal{PP} にわたるこの重みの総和

$$Z = \sum_{\pi \in \mathcal{PP}} q^{|\pi|}$$

として溶解結晶模型の分配関数が定義される。この分配関数は**対角断面** (diagonal slicing) の方法によって計算できる [6, 11].

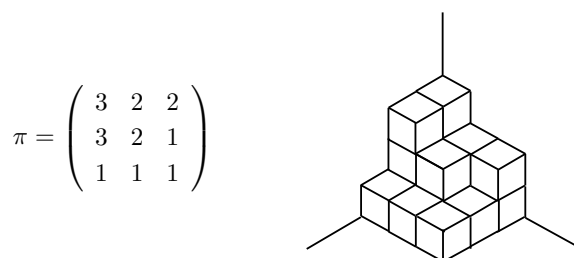


図 2: 平面分割の定める 3 次元ヤング図形

2 対角断面の方法

2.1 対角断面

平面分割 $\pi = (\pi_{ij})_{i,j=1}^{\infty}$ に対して m 番目 ($m \in \mathbf{Z}$) の対角断面 $\pi(m)$ を

$$\pi(m) = \begin{cases} (\pi_{i,i+m})_{i=1}^{\infty} & \text{if } m \geq 0, \\ (\pi_{j-m,j})_{j=1}^{\infty} & \text{if } m < 0 \end{cases}$$

と定義する. これらは 1 次元的な分割であり, ヤング図形に対応する. 幾何学的には, $\pi(m)$ は $y = x + m$ という平面による 3 次元ヤング図形の断面 (slice) を表す (図 3).

2.2 ヤング図形の成長列と半標準盤

対角断面を用いて, 3 次元ヤング図形 π を **主対角断面** $\lambda = \pi(0)$ とその上の 1 対の **ヤング盤** T, T' からなる 3 つ組 (λ, T, T') にコーディングする.

まず, 主各断面の左側の対角断面列

$$\pi_{\leq 0} = \{\pi(-m)\}_{m=0}^{\infty}$$

と右側の対角断面列

$$\pi_{\geq 0} = \{\pi(m)\}_{m=0}^{\infty}$$

に注目する. これらは \emptyset から λ に至るヤング図形の成長列

$$\begin{aligned} \emptyset &\subseteq \cdots \subseteq \pi(-n) \subseteq \pi(-n+1) \subseteq \cdots \subseteq \lambda, \\ \emptyset &\subseteq \cdots \subseteq \pi(n) \subseteq \pi(n-1) \subseteq \cdots \subseteq \lambda \end{aligned}$$

を定める. 実際には, 隣り合った対角断面は単なる包含関係よりも強い条件

$$\pi(-n) \prec \pi(-n+1), \quad \pi(n-1) \succ \pi(n) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

を満たしている. \succ は **交錯関係** (interlacing relation) [6, 11] と呼ばれるもので, 一般に $\lambda = (\lambda_i)_{i=1}^{\infty}$ と $\mu = (\mu_i)_{i=1}^{\infty}$ に対して

$$\lambda \succ \mu \iff \lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2 \geq \mu_2 \geq \cdots$$

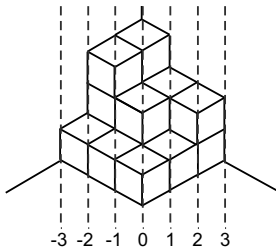


図 3: 3 次元ヤング図形の対角断面

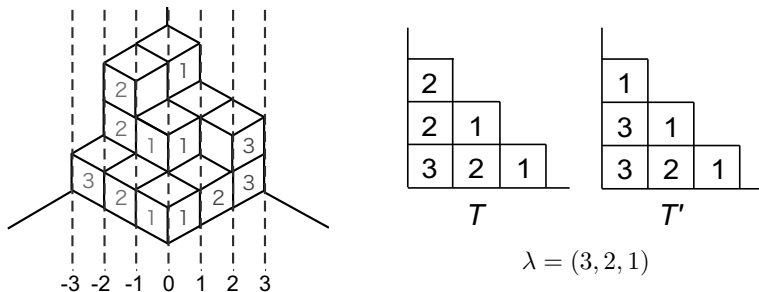


図 4: 3次元ヤング図形から決まる3つ組 (λ, T, T')

と定義される. 歪ヤング図形 λ/μ (λ, μ の定める2つのヤング図形の差集合) を横1行のヤング図形に分けて考えれば, $\lambda \succ \mu$ はこれらの1行ヤング図形の水平の辺が互いに重ならない (すなわち, いわゆる boundary strip[10] をなす) という条件と同値である. 逆に, このような交錯関係にあるヤング図形の成長列から3次元ヤング図形が復元できるので, 3次元ヤング図形 π はヤング図形 λ とヤング図形の成長列 $\pi_{\leq 0}, \pi_{\geq 0}$ からなる3つ組 $(\lambda, \pi_{\leq 0}, \pi_{\geq 0})$ に1対1対応する.

次に, ヤング図形の成長列からヤング図形 λ 上のヤング盤 T, T' を定める. T, T' はヤング図形 λ の各箱に正整数を書き込んだ一種の表

$$T = \{T(i, j)\}_{(i, j) \in \lambda}, \quad T' = \{T'(i, j)\}_{(i, j) \in \lambda}$$

であり,

$$T(i, j) = n \iff (i, j) \in \pi(-n+1)/\pi(-n),$$

$$T'(i, j) = n \iff (i, j) \in \pi(n-1)/\pi(n),$$

すなわちが歪ヤング図形 $\pi(\pm n \mp 1)/\pi(\pm n)$ に属する箱に対して n を書き込むことによって得られる (図4). T, T' は次の条件を満たす**半標準盤** (通常とは増減が逆だが[10]) になる:

$$\begin{array}{ccc} T(i, j) & \geq & T(i, j+1) & & T'(i, j) & \geq & T'(i, j+1) \\ \vee & & & & \vee & & \\ T(i+1, j) & & & & T'(i+1, j) & & \end{array}$$

これは隣り合う対角断面の交錯関係からの帰結である. 逆に, λ 型の任意の半標準盤の対 T, T' から, λ を主対角断面とする平面分割が復元できる. こうして, 平面分割 π は (λ, T, T') という3つ組と1対1対応する.

2.3 分配函数を3つ組 (λ, T, T') に関する総和とみなす

平面分割 π のボルツマン重み $q^{|\pi|}$ は

$$q^{|\pi|} = q^T q^{T'},$$

$$q^T = \prod_{n=1}^{\infty} q^{(n-1/2)(|\pi(-n-1)| - |\pi(-n)|)},$$

$$q^{T'} = \prod_{n=1}^{\infty} q^{(n-1/2)(|\pi(n-1)| - |\pi(n)|)}$$

というように因子分解される。したがって、分配函数は $\lambda \in \mathcal{P}$ に関する総和と λ 型半標準盤全体の集合 $T(\lambda)$ にわたる部分和に分解できる：

$$Z = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} \left(\sum_{T \in T(\lambda)} q^T \right) \left(\sum_{T' \in T(\lambda)} q^{T'} \right).$$

ここに現れた T, T' に関する部分和は無限変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots)$ の**シューア函数** $s_\lambda(\mathbf{x})$ の特殊値である。シューア函数は

$$s_\lambda(\mathbf{x}) = \sum_{T \in T(\lambda)} \mathbf{x}^T, \quad \mathbf{x}^T = \prod_{(i,j) \in \lambda} x_{T(i,j)}$$

という**ヤング盤表示**をもつ [10]. \mathbf{x} を

$$q^{-\rho} = (q^{1/2}, q^{3/2}, \dots, q^{n-1/2}, \dots)$$

に特殊化したものはちょうど前述の部分和になる：

$$\sum_{T \in T(\lambda)} q^T = \sum_{T' \in T(\lambda)} q^{T'} = s_\lambda(q^{-\rho}).$$

2.4 分配函数の最終的表示

T, T' に関する部分和が $s_\lambda(q^{-\rho})$ という形にまとまるので、分配函数はその2乗を分割全体の集合 \mathcal{P} にわたって総和したもの

$$Z = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda(q^{-\rho})^2$$

になる。これは一種の**ランダム分割模型**である。要するに、対角断面の方法によって**ランダム平面分割模型**である溶解結晶模型がランダム分割模型に帰着したのである。

この総和はシューア函数に対する**コーシー等式** [10]

$$\sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda(x_1, x_2, \dots) s_\lambda(y_1, y_2, \dots) = \prod_{i,j=1}^{\infty} (1 - x_i y_j)^{-1}$$

によって実行できて、次のような無限乗積表示が得られる（右辺の函数は**MacMahon 函数**と呼ばれる）。

$$Z = \prod_{i,j=1}^{\infty} (1 - q^{i+j-1})^{-1} = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^n)^{-n}$$

この結果はよく知られた分割の数え上げ母関数

$$\sum_{\lambda \in \mathcal{P}} q^{|\lambda|} = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^n)^{-1}$$

に似ていて、無限積の各項のべき指数が -1 から $-n$ に変わっただけ、と言えなくもないが、背後の仕組みはまったく異なる。

3 外部ポテンシャルによる変形

3.1 簡単な変形

正值パラメータ Q を導入して、 $Q^{|\pi(0)|}$ という因子をボルツマン重みに乗じた分配関数

$$Z = \sum_{\pi \in \mathcal{PP}} q^{|\pi|} Q^{|\pi(0)|}$$

を考えることもできる。これは $|\pi(0)|$ を外部ポテンシャル、 $\log Q$ を結合定数とする模型の変形とみなせる。対角断面の方法はこの場合にもそのまま適用できて、

$$Z = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_{\lambda}(q^{-\rho})^2 Q^{|\lambda|} = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - Qq^n)^{-n}$$

という無限乗積表示が得られる。ここに現れた関数も MacMahon 関数と呼ばれる。

3.2 外部ポテンシャルの系列

可積分階層に関係する変形を得るために、整数値の離散変数 s に依存するポテンシャルの系列

$$\Phi_k(\lambda, s) = \sum_{i=1}^{\infty} q^{k(\lambda_i + s - i + 1)} - \sum_{i=1}^{\infty} q^{k(-i + 1)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

を考える。ただし、これは形式的表現 ($|q| > 1$ では収束するが、これは分配関数の収束域 $|q| < 1$ とは重ならない) であり、正確には総和を

$$\Phi_k(\lambda, s) = \sum_{i=1}^{\infty} \left(q^{k(\lambda_i + s - i + 1)} - q^{k(s - i + 1)} \right) + \sum_{i=1}^{\infty} q^{k(s - i + 1)} - \sum_{i=1}^{\infty} q^{k(-i + 1)}$$

というように組み替えて解釈する。最初の総和は有限和になり、後の2つの総和の項は有限個を除いて互いに打ち消し合う。最初の形式的表現の引き算項も、この解釈の仕方、後述するフェルミオンフォック空間上の作用素の**正規順序**に由来する。

こうして再定義された $\Phi_k(\lambda, s)$ は

$$\Phi_k(\lambda, s) = \sum_{i=1}^{\infty} \left(q^{k(\lambda_i + s - i + 1)} - q^{k(s - i + 1)} \right) + \frac{1 - q^{ks}}{1 - q^k} q^k$$

と表せる。 s は戸田格子の格子座標の役割を果たす。

3.3 変形された分配関数

結合定数の組 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \dots)$ を導入してポテンシャル $\Phi_k(\lambda, s)$ の線形結合

$$\Phi(\lambda, s, \mathbf{t}) = \sum_{k=1}^{\infty} t_k \Phi_k(\lambda, s)$$

をつくり, それによって分配関数を次のように変形する [1, 2].

$$Z(s, \mathbf{t}) = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda (q^{-\rho})^2 Q^{|\lambda|+s(s+1)/2} e^{\Phi(\lambda, s, \mathbf{t})}$$

$Q^{|\lambda|}$ も s に依存する形 $Q^{|\lambda|+s(s+1)/2}$ に修正されたことに注意されたい. この分配関数が 1 次元戸田階層と関係すること [1, 2] を説明するために, 分配関数のフェルミオン表示を用いる.

4 フェルミオン表示と可積分構造

4.1 フェルミオン演算子とフォック空間

分配関数をフェルミオン表示するために以下のものを用意する [1, 2, 6, 11, 12].

- 2次元複素自由フェルミ場 $\psi(z), \psi^*(z)$ のフーリエモードとして得られる生成消滅演算子 ψ_n, ψ_n^* ($n \in \mathbf{Z}$) の代数

$$\begin{aligned} \psi_m \psi_n^* + \psi_n^* \psi_m &= \delta_{m+n, 0}, \\ \psi_m \psi_n + \psi_n \psi_m &= \psi_m^* \psi_n^* + \psi_n^* \psi_m^* = 0 \end{aligned}$$

- フォック空間のチャージ s の部分空間における基底状態

$$\langle s | = \langle -\infty | \cdots \psi_{s-1}^* \psi_s^*, \quad |s\rangle = \psi_{-s} \psi_{-s+1} \cdots |-\infty\rangle$$

と励起状態 (分割 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$ でラベル付けされる)

$$\langle \lambda, s | = \langle -\infty | \cdots \psi_{\lambda_2+s-1}^* \psi_{\lambda_1+s}^*, \quad |\lambda, s\rangle = \psi_{-\lambda_1-s} \psi_{-\lambda_2-s+1} \cdots |-\infty\rangle$$

からなる正規直交系

- フェルミオン演算子の特別な 2 次形式

$$L_0 = \sum_{n \in \mathbf{Z}} n : \psi_{-n} \psi_n^* :, \quad H_k = \sum_{n \in \mathbf{Z}} q^{kn} : \psi_{-n} \psi_n^* :, \quad J_k = \sum_{n \in \mathbf{Z}} : \psi_{-n} \psi_{n+k}^* :$$

ここで $:$ は $\langle 0 |, |0\rangle$ に関する正規順序を表す. すなわち,

$$: \psi_{-n} \psi_m^* : = \psi_{-n} \psi_m^* - \langle 0 | \psi_{-n} \psi_m^* | 0 \rangle$$

- 頂点作用素

$$\begin{aligned} \Gamma_{\pm}(z) &= \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k} J_{\pm k} \right), \quad \Gamma_{\pm}(x_1, x_2, \dots) = \Gamma_{\pm}(x_1) \Gamma_{\pm}(x_2) \cdots, \\ \Gamma_{\pm}(q^{-\rho}) &= \prod_{i=1}^{\infty} \Gamma_{\pm}(q^{i-1/2}) \end{aligned}$$

4.2 分配函数のフェルミオン表示

$L_0, H_k, J_k, \Gamma_{\pm}(z)$ のフォック空間への作用はチャージを保つ. L_0, H_k は互いに可換で $|\lambda, s\rangle$ を固有ベクトルにもち,

$$L_0|\lambda, s\rangle = (|\lambda| + s(s+1)/2)|\lambda, s\rangle, \quad H_k|\lambda, s\rangle = \Phi_k(\lambda, s)|\lambda, s\rangle$$

となる. これから分配函数のポテンシャル部分が

$$Q^{|\lambda|+s(s+1)/2} e^{\Phi(\lambda, s, t)} = \langle \lambda, s | Q^{L_0} e^{H(t)} | \lambda, s \rangle,$$

$$H(t) = \sum_{k=1}^{\infty} t_k H_k,$$

と表せることがわかる. これを行列要素の言葉で言い換えれば

$$\langle \lambda, s | Q^{L_0} e^{H(t)} | \mu, s \rangle = Q^{|\lambda|+s(s+1)/2} e^{\Phi(\lambda, s, t)} \delta_{\lambda\mu}$$

となる.

他方, J_k はハイゼンベルグ代数の交換関係

$$[J_m, J_n] = m\delta_{m+n, 0}$$

を満たす. それから構成される多変数頂点作用素 $\Gamma_{\pm}(\mathbf{x})$ の行列表素は

$$\langle \mu, s | \Gamma_+(\mathbf{x}) | \lambda, s \rangle = \langle \lambda, s | \Gamma_-(\mathbf{x}) | \mu, s \rangle = s_{\lambda/\mu}(\mathbf{x})$$

というように歪シュア函数になる [10, 12]. 特に, ボルツマン重みの構成要素 $s_{\lambda}(q^{-\rho})$ は

$$s_{\lambda}(q^{-\rho}) = \langle s | \Gamma_+(q^{-\rho}) | \lambda, s \rangle = \langle \lambda, s | \Gamma_-(q^{-\rho}) | s \rangle$$

と表せる.

以上のことから, 分配函数は

$$Z = \sum_{\lambda, \mu \in \mathcal{P}} \langle s | \Gamma_+(q^{-\rho}) | \lambda, s \rangle \langle \lambda, s | Q^{L_0} e^{H(t)} | \mu, s \rangle \langle \mu, s | \Gamma_-(q^{-\rho}) | s \rangle$$

と表せる. $\sum_{\lambda \in \mathcal{P}} |\lambda, s\rangle \langle \lambda, s|$ と $\sum_{\mu \in \mathcal{P}} |\mu, s\rangle \langle \mu, s|$ はチャージ s の部分空間における 1 の分解であるから, 結局, 次のような**分配函数のフェルミオン表示**が得られる [1, 2].

$$Z(s, t) = \langle s | \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} e^{H(t)} \Gamma_-(q^{-\rho}) | s \rangle$$

これは一見, 戸田階層の τ 函数のフェルミオン表示 [13] に似ているが, 構造はまったく異なる. τ 函数では $\Gamma_{\pm}(q^{-\rho})$ のところに時間変数に依存する作用素が現れるのに対して, 上の分配函数の表示では中央の $Q^{L_0} e^{H(t)} = e^{H(t)} Q^{L_0}$ が時間変数 t に依存する.

4.3 1次元戸田階層の τ 関数との関係

2重の添え字 $k, m \in \mathbf{Z}$ をもつフェルミオン演算子の2次形式

$$V_m^{(k)} = q^{k/2} \oint_{|z|=R} \frac{dz}{2\pi i} z^m :\psi(q^{k/2}z)\psi^*(q^{-k/2}z): = q^{-km/2} \sum_{n \in \mathbf{Z}} q^{kn} :\psi_{m-n}\psi_n^*:$$

を考える. H_k, J_k はその一部として

$$H_k = V_0^{(k)}, \quad J_k = V_k^{(0)}$$

というように含まれている. $V_m^{(k)}$ は

$$[V_m^{(k)}, V_n^{(l)}] = \begin{cases} (q^{(lm-kn)/2} - q^{(kn-lm)/2})(V_{m+n}^{(k+l)} - \delta_{m+n,0} \frac{q^{k+l}}{1-q^{k+l}}) & \text{if } k+l \neq 0, \\ (q^{-k(m+n)} - q^{k(m+n)})V_{m+n}^{(0)} + m\delta_{m+n,0} & \text{if } k+l = 0. \end{cases}$$

という交換関係を満たして, **量子トーラス代数**の実現を与える.

さらに $V_m^{(k)}$ は次の2種類の代数的関係式も満たす. これらを**シフト対称性**という [1, 2].

(i) $k > 0, m \in \mathbf{Z}$ に対して

$$\begin{aligned} \Gamma_+(q^{-\rho}) \left(V_m^{(k)} - \frac{q^k \delta_{m,0}}{1-q^k} \right) \Gamma_+(q^{-\rho})^{-1} \\ = (-1)^k \Gamma_-(q^{-\rho})^{-1} \left(V_{m+k}^{(k)} - \frac{q^k \delta_{m+k,0}}{1-q^k} \right) \Gamma_-(q^{-\rho}) \end{aligned}$$

(ii) $k, m \in \mathbf{Z}$ に対して

$$q^{W_0/2} V_m^{(k)} q^{-W_0/2} = V_m^{(k-m)}$$

ここで

$$W_0 = \sum_{n \in \mathbf{Z}} n^2 :\psi_{-n}\psi_n^*:$$

このシフト対称性から $H_k = V_0^{(k)}$ と $J_k = V_k^{(0)}$ を結ぶ関係式

$$\begin{aligned} (-1)^k J_k \cdot q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) q^{W_0/2} \\ = q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} \left(H_k - \frac{q^k}{1-q^k} \right) \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) q^{W_0/2} \\ = q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) q^{W_0/2} \cdot (-1)^k J_{-k} \end{aligned}$$

が得られる. これを用いて $Z(s, t)$ のフェルミオン表示の中央にある $e^{t_k H_k}$ を作用素積の左端や右端へ移動することができる. こうして次のような**1次元戸田階層の τ 関数**との関係がわかる.

定理 [1, 2] $Z(s, t)$ は

$$g = q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) q^{W_0/2}$$

という生成作用素から得られる 1 次元戸田階層の τ 函数

$$\tau(s, t) = \langle s | \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} t_k J_k \right) g | s \rangle = \langle s | g \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} t_k J_{-k} \right) | s \rangle$$

によって次のように表せる：

$$Z(s, t) = \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{t_k q^k}{1 - q^k} \right) q^{-s(s+1)(2s+1)/6} \tau(s, \iota(t)),$$

$$\iota(t) = (-t_1, t_2, -t_3, \dots, (-1)^k t_k, \dots)$$

注意 シフト対称性によって $Z(s, t)$ を 2 通りに書き換えられることから、 $\tau(s, t)$ が上に示した 2 通りの表示をもつことがわかるが、実際には g 自体が

$$J_k g = g J_{-k}, \quad k = 1, 2, \dots,$$

という等式を満たすこともわかる。これもシフト対称性からの帰結である。一般に、この等式 (**1 次元戸田階層への簡約条件**) のもとで、2 次元戸田階層の τ 函数のフェルミオン表示 [13]

$$\tau(s, t, \bar{t}) = \langle s | \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} t_k J_k \right) g \exp \left(- \sum_{k=1}^{\infty} \bar{t}_k J_{-k} \right) | s \rangle$$

は

$$\tau(s, t, \bar{t}) = \langle s | \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} (t_k - \bar{t}_k) J_k \right) g | s \rangle = \langle s | g \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} (t_k - \bar{t}_k) J_k \right) | s \rangle$$

というように書き直されて、 s と $t - \bar{t}$ のみの函数 $\tau(s, t - \bar{t})$ 、すなわち 1 次元戸田階層の τ 函数に帰着する。

5 溶解結晶模型の変種

5.1 コニフォールドに関連する溶解結晶模型

位相的弦理論 [14] では、コニフォールド (resolved conifold) と呼ばれる 3 次元カラビ・ヤウ多様体に関連して、ボルツマン重みを

$$s_\lambda(q^{-\rho})^2 \rightarrow s_\lambda(q^{-\rho}) s_{t\lambda}(q^{-\rho})$$

($t\lambda$ は λ の共役、すなわちヤング図形の転置を表す) というように置き換えた分配函数

$$Z' = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda(q^{-\rho}) s_{t\lambda}(q^{-\rho}) Q^{|\lambda|}$$

も登場する [15]. この分配関数はもう 1 つのコーシー等式

$$\sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_{\lambda}(x_1, x_2, \dots) s_{t_{\lambda}}(y_1, y_2, \dots) = \prod_{i,j=1}^{\infty} (1 + x_i y_j)$$

によって次のような無限乗積に書き直せる (すなわち, MacMahon 関数の逆数になる).

$$Z' = \prod_{n=1}^{\infty} (1 + Qq^n)^n$$

可積分構造の考察対象となるのは, この分配関数を次のように 2 系列の外部ポテンシャル $\Phi_k(\lambda)$, $k = 1, 2, \dots$, $\Phi_{-k}(\lambda)$, $k = 1, 2, \dots$ によって変形したものである.

$$Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_{\lambda}(q^{-\rho}) s_{t_{\lambda}}(q^{-\rho}) Q^{|\lambda|+s(s+1)/2} e^{\Phi(\lambda, s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}})},$$

$$\Phi(\lambda, s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \sum_{k=1}^{\infty} t_k \Phi_k(\lambda, s) + \sum_{k=1}^{\infty} \bar{t}_k \Phi_{-k}(\lambda, s)$$

2 系列のポテンシャルに対応して 2 系列の結合定数 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \dots)$, $\bar{\mathbf{t}} = (\bar{t}_1, \bar{t}_2, \dots)$ を導入した. これらの結合定数を時間変数として, この分配関数は **2次元戸田階層** の τ 関数と関係している. その証明にはやはりシフト対称性を利用する [3]. 実際には, この τ 関数は **Ablowitz-Ladik 階層** (あるいはそれと同値な**相対論的戸田階層**) と関係していることがわかるが, その証明は Lax 作用素の構造を調べることによって行われる [4].

5.2 分配関数のフェルミオン表示

あらたに

$$\Gamma'_{\pm}(z) = \exp\left(-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-z)^k}{k} J_{\pm k}\right) = \Gamma_{\pm}(-z)^{-1},$$

$$\Gamma'_{\pm}(x_1, x_2, \dots) = \Gamma'_{\pm}(x_1) \Gamma'_{\pm}(x_2) \cdots, \quad \Gamma'_{\pm}(q^{-\rho}) = \prod_{n=1}^{\infty} \Gamma'_{\pm}(q^{n-1/2})$$

という頂点作用素を導入する [16]. その行列要素は

$$\langle \mu, s | \Gamma'_{+}(\mathbf{x}) | \lambda, s \rangle = \langle \lambda, s | \Gamma'_{-}(\mathbf{x}) | \lambda, s \rangle = s_{t_{\lambda} / t_{\mu}}(\mathbf{x})$$

となる. これとすでに導入した $\Gamma_{\pm}(q^{-\rho})$ を組み合わせれば, 分配関数 $Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}})$ に対して次のようなフェルミオン表示が得られる.

$$Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \langle s | \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} e^{H(\mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}})} \Gamma'_-(q^{-\rho}) | s \rangle,$$

$$H(\mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \sum_{k=1}^{\infty} t_k H_k + \sum_{k=1}^{\infty} \bar{t}_k H_{-k}$$

これを2次元戸田階層の τ 関数に書き直すには、前述の (i), (ii) 型のシフト対称性に加えて、次の型のシフト対称性も用いる [3].

(iii) $k > 0, m \in \mathbf{Z}$ に対して

$$\Gamma'_+(q^{-\rho}) \left(V_m^{(-k)} + \frac{1}{1-q^k} \delta_{m,0} \right) \Gamma'_+(q^{-\rho})^{-1}$$

$$= \Gamma'_-(q^{-\rho})^{-1} \left(V_{m+k}^{(-k)} + \frac{1}{1-q^k} \delta_{m+k,0} \right) \Gamma'_-(q^{-\rho}).$$

上付き添え字の動く範囲が (i) 型と (iii) 型では異なることに注意されたい。

これらのシフト対称性から、 $k > 0$ にわたって次の等式が成立することがわかる：

$$(-1)^k J_k \cdot q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) = q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) \left(H_k - \frac{q^k}{1-q^k} \right),$$

$$\left(H_{-k} + \frac{1}{1-q^k} \right) \Gamma'_-(q^{-\rho}) \Gamma'_+(q^{-\rho}) q^{-W_0/2} = \Gamma'_-(q^{-\rho}) \Gamma'_+(q^{-\rho}) q^{-W_0/2} \cdot J_{-k}.$$

これらを用いて $Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}})$ のフェルミオン表示の中央にある $e^{t_k H_k}$ を作用素積の左端へ、 $e^{\bar{t}_k H_{-k}}$ を右端へ移動することができる (逆向きに移動することはできない)。

こうして次のような2次元戸田階層の τ 関数との関係がわかる。

定理 [3] $Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}})$ は

$$g' = q^{W_0/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q^{L_0} \Gamma'_-(q^{-\rho}) \Gamma'_+(q^{-\rho}) q^{-W_0/2}$$

という生成作用素から得られる2次元戸田階層の τ 関数

$$\tau'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \langle s | \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} t_k J_k \right) g' \exp \left(- \sum_{k=1}^{\infty} \bar{t}_k J_{-k} \right) | s \rangle,$$

によって次のように表せる：

$$Z'(s, \mathbf{t}, \bar{\mathbf{t}}) = \exp \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{t_k q^k - \bar{t}_k}{1-q^k} \right) \tau'(s, \mathbf{t}, -\bar{\mathbf{t}})$$

5.3 Lax 作用素の構造

以下では、2次元戸田階層のLax作用素を $\mathbf{Z} \times \mathbf{Z}$ 行列

$$L = \Lambda + u_1 + u_2 \Lambda^{-1} + \cdots, \quad \bar{L}^{-1} = \bar{u}_0 \Lambda^{-1} + \bar{u}_1 + \bar{u}_2 \Lambda + \cdots$$

として扱う. Λ^n はシフト行列

$$\Lambda^n = \sum_{i \in \mathbf{Z}} E_{i, i+n}$$

を表し, u_n, \bar{u}_n は対角行列

$$u_n = \sum_{i \in \mathbf{Z}} u_n(i) E_{ii}, \quad \bar{u}_n = \sum_{i \in \mathbf{Z}} \bar{u}_n(i) E_{ii},$$

である. E_{ij} は (i, j) 要素のみ 1, 他の要素は 0 の行列である.

$Z(s, t)$ に付随する τ 関数 $\tau(s, t)$ は 1 次元戸田階層の解であり, よく知られているように, Lax 作用素は

$$L = \bar{L}^{-1} = \Lambda + b + c\Lambda^{-1}$$

(b, c は対角行列, 今の場合には $b = u_1, c = \bar{u}_0$) という形をした 3 重対角行列である. $Z'(s, t, \bar{t})$ に付随する τ 関数 $\tau'(s, t, \bar{t})$ が定める 2 次元戸田階層の解はそれとはまったく異質の, 次のような特徴をもつ.

定理 [4] $\tau'(s, t, \bar{t})$ が定める 2 次元戸田階層の解の Lax 作用素は

$$\begin{aligned} L &= BC^{-1}, \quad \bar{L}^{-1} = -CB^{-1}, \\ B &= \Lambda + b, \quad C = 1 + c\Lambda^{-1} \end{aligned}$$

というように因子分解された形をもつ. ここで b, c は対角行列であり, C^{-1} と B^{-1} はそれぞれ

$$C^{-1} = 1 - c\Lambda^{-1} + \dots, \quad B^{-1} = b^{-1} - b^{-1}\Lambda b^{-1} + \dots$$

という展開をもつ下三角行列・上三角行列を意味する.

この因子分解された形 (上の B^{-1}, C^{-1} の解釈から, $\bar{L} = -L$ という自明な場合に退化しないことがわかる) は Ablowitz-Radik 階層 (実際には相対論的戸田階層) を 2 次元戸田階層の簡約系として特徴付ける条件 [17] に他ならない. こうして, $\tau'(s, t, \bar{t})$ が Ablowitz-Radik 階層の解を定める τ 関数であることがわかる.

もともと Brini ら [17] はコニフォルドの Gromov-Witten 理論 (物理的には位相的弦理論) が Ablowitz-Radik 階層と関係するという予想 [18] から出発して, ミラー理論 (Frobenius 構造) の観点から予想を解決する試みの中で, Ablowitz-Radik 階層自体の研究も行った. 上の結果は Brini らの予想に別の方向から答えるものである.

以下では上の結果の証明 [4] のアイデアを紹介する.

5.4 無限行列表示

L, \bar{L}^{-1} の因子分解形を導くために, フェルミオン 2 次形式と $\mathbf{Z} \times \mathbf{Z}$ 行列の対応 [12]

$$\hat{X} = \sum_{i, j \in \mathbf{Z}} x_{ij} : \psi_{-i} \psi_j^* : \longleftrightarrow X = \sum_{i, j \in \mathbf{Z}} x_{ij} E_{ij}$$

を利用する. この対応によって L_0, W_0, H_k, J_k は

$$L_0 = \Delta, \quad W_0 = \Delta^2, \quad H_k = q^k \Delta, \quad J_k = \Lambda^k$$

というように行列表現される. ここで Δ は

$$\Delta = \sum_{i \in \mathbf{Z}} i E_{ii}$$

という対角行列である. Λ と Δ は差分作用素に基づく Lax 形式では e^{∂_s} と s に対応している,

$$[\Lambda, \Delta] = \Lambda$$

という交換関係を満たす.

フェルミオン 2 次形式と $\mathbf{Z} \times \mathbf{Z}$ 行列の対応はリー代数の構造を保っている (正確に言えば, 1次元中心拡大の部分の無視している). これをリー群に持ち上げることもできる. これによって $e^{\hat{X}}$ と e^X が対応する [12]. たとえば, 頂点作用素 $\Gamma_{\pm}(z), \Gamma'_{\pm}(z)$ は

$$\Gamma_{\pm}(z) = (1 - z\Lambda^{\pm 1})^{-1}, \quad \Gamma'_{\pm}(z) = 1 + z\Lambda^{\pm 1}$$

というように行列表示される (行列表示の方も同じ記号で表そう). $\Gamma_{\pm}(q^{-\rho})$ と $\Gamma'_{\pm}(q^{-\rho})$ はこのような行列の無限乗積になる:

$$\Gamma_{\pm}(q^{-\rho}) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^{n-1/2} \Lambda^{\pm 1})^{-1},$$

$$\Gamma'_{\pm}(q^{-\rho}) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 + q^{n-1/2} \Lambda^{\pm 1})$$

これらの無限乗積は行列値の量子ダイログ関数 [19, 20] とみなすことができる. (i) 型と (iii) 型のシフト対称性はこの無限乗積構造からの帰結としても説明できる.

ちなみに, τ 関数のフェルミオン表示では $\Gamma_{\pm}(q^{-\rho}), \Gamma'_{\pm}(q^{-\rho})$ が $\Gamma_- \Gamma_+$ や $\Gamma'_- \Gamma'_+$ のような組合せで現れる. これは Jacobi の 3 重積公式

$$\vartheta(z) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^n) \prod_{n=1}^{\infty} (1 + q^{n-1/2} z) \prod_{n=1}^{\infty} (1 + q^{n-1/2} z^{-1}),$$

を通じて楕円テータ関数との関係を暗示している.

5.5 Lax 作用素の因子分解形の証明の方針

上の対応によって, $\tau'(s, t, \bar{t})$ を定める作用素 g' は

$$U = q^{\Delta^2/2} \Gamma_-(q^{-\rho}) \Gamma_+(q^{-\rho}) Q \Delta \Gamma'_-(q^{-\rho}) \Gamma'_+(q^{-\rho}) q^{-\Delta^2/2}$$

という無限行列に対応する.

一般に, このような行列 U に対して

$$\exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} t_k \Lambda^k\right) U \exp\left(-\sum_{k=1}^{\infty} \bar{t}_k \Lambda^{-k}\right) = W^{-1} \bar{W}$$

という等式を満たす下三角行列 W (対角成分 1) と上三角行列 \bar{W} を求めること (分解問題) ができれば, W, \bar{W} 自体は 2 次元戸田階層の佐藤方程式を満たす. それらから

$$L = W\Lambda W^{-1}, \quad \bar{L}^{-1} = \bar{W}\Lambda^{-1}\bar{W}^{-1}$$

というように定義される L, \bar{L}^{-1} は Lax 方程式を満たす. 特に, U が τ 関数のフェルミオン表示 [13] における生成作用素 g の表現行列ならば, L, \bar{L} は τ 関数に対応する Lax 形式での戸田階層の解に他ならない [21, 22, 23].

U から W, \bar{W} を直接に求めることは一般的には困難だが, 今の場合には U が特殊な行列なので, 初期時刻 $t = \bar{t} = \mathbf{0}$ においてこの分解問題が具体的に解ける. それから L, \bar{L}^{-1} が初期時刻において前述の因子分解形をもつことがわかる. 他方, Brini らが示しているように [17], 因子分解形は時間発展で保たれる. こうして, すべての時刻において L, \bar{L}^{-1} が求める形をしていることがわかるのである.

5.6 オービフォールド型溶解結晶模型

最近, これまで解説してきた結果をオービフォールド型溶解結晶模型に拡張することができた [5]. これらは 3 次元カラビ・ヤウ多様体の $\mathbf{Z}_a \times \mathbf{Z}_b$ オービフォールド (a, b は正整数) の位相的不変量に由来する模型である [24].

外部ポテンシャルを入れて変形する前の模型の分配関数は

$$Z_{a,b} = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda(p_1 q^{-\rho}, \dots, p_a q^{-\rho}) s_\lambda(r_1 q^{-\rho}, \dots, r_b q^{-\rho}) Q^{|\lambda|},$$

$$Z'_{a,b} = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} s_\lambda(p_1 q^{-\rho}, \dots, p_a q^{-\rho}) s_{t\lambda}(r_1 q^{-\rho}, \dots, r_b q^{-\rho}) Q^{|\lambda|}.$$

という形をしている. p_1, p_2, \dots, p_a と r_1, r_2, \dots, r_b は模型のパラメータである. 要するに, これらは Z, Z' のボルツマン重みに対して

$$s_\lambda(q^{-\rho})^2 \rightarrow s_\lambda(p_1 q^{-\rho}, \dots, p_a q^{-\rho}) s_\lambda(r_1 q^{-\rho}, \dots, r_b q^{-\rho})$$

ならびに

$$s_\lambda(q^{-\rho}) s_{t\lambda}(q^{-\rho}) \rightarrow s_\lambda(p_1 q^{-\rho}, \dots, p_a q^{-\rho}) s_{t\lambda}(r_1 q^{-\rho}, \dots, r_b q^{-\rho}).$$

という置き換えを行ったものである. これらのシューア関数は, 無限個の引数を a 組や b 組の無限変数に組み分けしただけで, これまで考えていたものと同じである (シューア関数は対称関数なので, このような組み分けは自在にできる). さらに, シューア関数の斉次性によってパラメータの組 p_1, \dots, p_a と r_1, \dots, r_b の中の一つ, たとえば p_a と r_b は 1 に正規化できる.

$Z(s, t)$, $Z'(s, t, \bar{t})$ の場合にならって外部ポテンシャルで変形した分配関数 $Z_{a,b}(s, t)$, $Z'_{a,b}(s, t, \bar{t})$ はいずれも 2 次元戸田階層のある τ 関数 $\tau_{a,b}, \tau'_{a,b}$ と関係している. さらに, Lax 形式で見た解は次のような特徴をもつ.

1. $\tau_{a,b}$ に対応する Lax 作用素に対して

$$L^a = D^{-1} \bar{L}^{-b}$$

という等式が成立する. D は模型のパラメータから決まる定数である. この等式の両辺は

$$\Lambda^a + \alpha_1 \Lambda^{a-1} + \cdots + \alpha_{a+b} \Lambda^{-b}$$

($\alpha_1, \dots, \alpha_{a+b}$ は対角行列) という形の $a+b$ 重対角行列になる. これは 2 次元戸田階層の (a, b) 型簡約として知られる可積分階層 (**bi-graded Toda hierarchy**) [25, 26] を特徴づけるものである. t はこの可積分階層の時間変数 (2 系列あるが) の一部と対応する.

2. $\tau'_{a,b}$ に対応する Lax 作用素のべき乗 L^a, \bar{L}^{-b} は因子分解された形

$$L^a = BC^{-1}, \quad \bar{L}^{-b} = DCB^{-1}$$

をもつ. ここで B, C は

$$B = \Lambda^a + \beta_1 \Lambda^{a-1} + \cdots + \beta_a, \quad C = 1 + \gamma_1 \Lambda^{-1} + \cdots + \gamma_b \Lambda^{-b}$$

(β_i, γ_j は対角行列) という行列, D は模型のパラメータから決まる定数である. Brini らが示したように [27], $a = b = 1$ の場合と同様, この因子分解形も時間発展で保たれて, 2 次元戸田階層の一種の簡約を定める. ただし, t, \bar{t} はそれぞれ 2 次元戸田階層の 2 系列の時間変数の一部と対応する. Brini らはコニフォールドのオービフォールドの Gromov-Witten 理論においてこの形の簡約系が現れることを Frobenius 構造の観点から論じている [27]. 上の模型は彼らの結果を別の方向から説明するものと考えられる.

6 まとめ

1. 溶解結晶模型は 3 次元ヤング図形の統計力学的模型 (ランダム平面分割模型) であるが, 対角断面の方法によって一種のランダム分割模型に書き直せる.
2. 1 系列の外部ポテンシャルによって変形した分配関数は 1 次元戸田階層の τ 関数に簡単な関数をかけたものになる. このことを示すために分配関数をフェルミオン表示し, 量子トーラス代数のフェルミオン実現における特別な代数的関係式を利用する.
3. ボルツマン重みを少し変更することによって溶解結晶模型の変種が得られる. 分配関数を 2 系列の外部ポテンシャルによって変形したものは 2 次元戸田階層の τ 関数になる. さらに, ラックス形式における考察から Ablowitz-Ladik (相対論的戸田) 階層との関係がわかる.
4. ランダム行列との比較の観点では, これら 2 つの溶解結晶模型はエルミート行列模型とユニタリ行列模型に対応する.
5. これらの結果はオービフォールド版の模型にも拡張される.

参考文献

- [1] T. Nakatsu and K. Takasaki, Commun. Math. Phys. **285** (2009), 445–468, arXiv:0710.5339 [hep-th].
- [2] T. Nakatsu and K. Takasaki, Integrable structure of melting crystal model with external potentials, Adv. Stud. Pure Math. vol. 59, Mathematical Society of Japan, Tokyo, 2010, pp. 201–223, arXiv:0807.4970 [math-ph].
- [3] K. Takasaki, Integrable structure of modified melting crystal model, arXiv:1208.4497 [math-ph].
- [4] K. Takasaki, Modified melting crystal model and Ablowitz-Ladik hierarchy, J. Phys. A: Math. Theor. **46** (2013), 245202 (23 pages), arXiv:1302.6129 [math-ph].
- [5] K. Takasaki, Orbifold melting crystal models and reductions of Toda hierarchy, arXiv:1410.5060 [math-ph].
- [6] A. Okounkov, N. Reshetikhin and C. Vafa, Quantum Calabi-Yau and classical crystals, P. Etingof, V. Retakh and I.M. Singer (eds.), *The unity of mathematics*, Progr. Math. vol. 244 (Birkhäuser, 2006), pp. 597–618, arXiv:hep-th/0309208.
- [7] T. Maeda, T. Nakatsu, K. Takasaki and T. Tamakoshi, Five-dimensional supersymmetric Yang-Mills theories and random plane partitions, JHEP **0503** (2005), 056, arXiv:hep-th/0412327.
- [8] 高崎金久, 線形代数と数え上げ, 日本評論社, 2012.
- [9] D.M. Bressoud, Proofs and Confirmations: The Story of the Alternating Sign Matrix Conjecture, Cambridge University Press, 1999.
- [10] I. G. Macdonald, Symmetric functions and Hall polynomials, Oxford University Press, 1995.
- [11] A. Okounkov and N. Reshetikhin, Correlation function of Schur process with application to local geometry of a random 3-Dimensional young diagram, J. Amer. Math. Soc. **16**, (2003), 581–603, arXiv:math.CO/0107056.
- [12] T. Miwa, M. Jimbo and E. Date, *Solitons: Differential equations, symmetries, and infinite-dimensional algebras*, Cambridge University Press, 2000.
- [13] T. Takebe, Representation theoretical meanings of the initial value problem for the Toda lattice hierarchy I, Lett. Math. Phys. **21** (1991), 77–84.
- [14] M. Mariño, *Chern-Simons theory, matrix models, and topological strings*, Oxford University Press, 2005.
- [15] J. Bryan and R. Pandharipande, The local Gromov-Witten theory of curves, J. Amer. Math. Soc. **21** (2008), 101–136, arXiv:math/0411037.

- [16] J. Bryan and B. Young, Generating functions for coloured 3D Young diagrams and the Donaldson-Thomas invariants of orbifolds, *Duke Math. J.* **152** (2010), 115–153, arXiv:0802.3948 [math.CO].
- [17] A. Brini, G. Carlet and P. Rossi, Integrable hierarchies and the mirror model of local \mathbb{CP}^1 , *Physica* **D241** (2012), 2156–2162, arXiv:1105.4508 [math-ph].
- [18] A. Brini, The local Gromov-Witten theory of \mathbb{CP}^1 and integrable hierarchies, *Commun. Math. Phys.* **313** (2012), 571–605, arXiv:1002.0582 [math-ph].
- [19] L. Faddeev and A. Yu. Volkov, Abelian current algebra and the Virasoro algebra on the lattice, *Phys. Lett.* **B315** (1993), 311–318, arXiv:hep-th/9307048.
- [20] L. D. Faddeev and R. M. Kashaev, Quantum dilogarithm, *Mod. Phys. Lett.* **A9** (1994), 427–434. arXiv:hep-th/9310070.
- [21] K. Takasaki, Initial value problem for the Toda lattice hierarchy, *Adv. Stud. Pure Math.* vol. 4 (Kinokuniya, Tokyo, 1984), pp. 136–163.
- [22] T. Nakatsu, K. Takasaik and S. Tsujimaru, Quantum and classical aspects of deformed $c = 1$ strings, *Nucl. Phys.* **B443** (1995), 1550-197, arXiv:hep-th/9501038.
- [23] K. Takasaki, Toda lattice hierarchy and generalized string equations, *Commun. Math. Phys.* **181** (1996), 131–156, arXiv:hep-th/9506089.
- [24] J. Bryan, C. Cadman and B. Young, The orbifold topological vertex, *Adv. Math.* **229** (1) (2012), 531–595. arXiv:1008.4205 [math.AG].
- [25] B. A. Kuperschmidt, *Discrete Lax equations and differential-difference calculus*, Asterisque No. 123 (Société Mathématique de France, Paris, 1985).
- [26] G. Carlet, The extended bigraded Toda hierarchy, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** (2006), 9411–9435, arXiv:math-ph/0604024.
- [27] A. Brini, G. Carlet, S. Romano and P. Rossi, Rational reductions of the 2D-Toda hierarchy and mirror symmetry, arXiv:1401.5725 [math-ph].

超離散化による自然現象のモデル化

(Modelling of natural phenomena through ultradiscretisation)

ウィロックス・ラルフ, 東大・数理科学

(Ralph Willox, University of Tokyo)

概要

本講演の前半では、可積分系という分野から得られたテクニックに基づき、常微分方程式を用いる数理モデルの「超離散化」という数学的手法を紹介する。特に、この手法により、元の連続の数理モデルと同じ性質を持つセルオートマトン・モデルが構築できることに注目する。後半では、超離散 sine-Gordon 方程式などの可積分なセルオートマトン・モデルについての最新の研究結果をいくつか紹介する。

Abstract

We introduce a mathematical method called “ultradiscretisation” of ODE’s, based on techniques developed in the field of integrable systems. It will be shown that, by means of this method, it is possible to construct cellular automaton models that exhibit the same properties as the original ODE models. We shall also summarize and present recent results on integrable cellular automaton models such as the ultradiscrete sine-Gordon equation.

超離散化による自然現象のモデル化

Ralph WILLOX (東大数理)

平成 26 年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会
2014 年 8 月 6～8 日

Overview

- 超離散化による自然現象のモデル化：
 - 超離散化とは？ → logistic 方程式の離散化と超離散化
 - 2つの実例（+それにおける問題）
- 可積分な超離散系：
 - 超離散系におけるソリトン現象の忠実さ → ud-KdV
 - 超離散系におけるソリトン現象の由来 → ud-sG

logistic 方程式の離散化

$$\boxed{\frac{dN}{dt} = N(r - hN)} \quad (r, h > 0)$$

特殊型 Riccati 方程式 → 簡単に線形化可能：

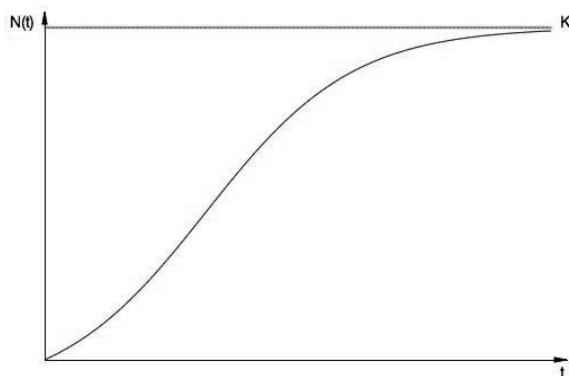
$$N(t) = \frac{1}{X(t)} \Rightarrow \frac{dX}{dt} = h - rX$$

$$\longrightarrow N(t) = \frac{K}{1 + \left(\frac{K}{N_0} - 1\right) e^{-r(t-t_0)}} \quad (K := \frac{r}{h})$$

(logistic 関数)

logistic 方程式の離散化

$$\boxed{N(t) = \frac{K}{1 + \left(\frac{K}{N_0} - 1\right) e^{-r(t-t_0)}}} \quad (0 < N_0 < K)$$



logistic 方程式の離散化

問題： $\frac{dN}{dt} = N(r - hN)$ に現れるパラメーター r, h は実際の観察データから測定できるのか？ [M. Morishita, Res. Popul. Ecol. VII (1965) 52]

→ 時間の flow を差分間隔 τ で離散化し： $N_n := N(t + n\tau)$

新しいパラメーター

$$\alpha = r\tau + \mathcal{O}(\tau^2), \quad \beta = h\tau + \mathcal{O}(\tau^2)$$

を導入すると：

$$N_{n+1} - N_n = N_n(\alpha - \beta N_{n+k})$$

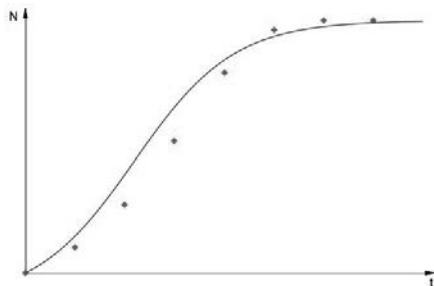
この差分方程式は， $\forall k \in \mathbb{Z}$ に対し， $\tau \rightarrow 0$ において logistic 方程式帰着する。

→ $k = 0, 1$ にすると Cauchy 問題は不変！

logistic 方程式の離散化

i) $k = 0$ (Euler method) $N_{n+1} - N_n = N_n(\alpha - \beta N_n)$ ($\alpha = r\tau, \beta = h\tau$)

1) τ が十分小さいときには良い離散化であるが， τ が小さくない場合には \times ！



2) さらに、可逆系ではない： α が大きくなるとカオスが生じる！

$$N_n = \frac{1 + \alpha}{\beta} X_n \Rightarrow \text{logistic map: } X_{n+1} = (1 + \alpha) X_n (1 - X_n)$$

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

logistic 方程式の離散化

線形安定性： $N = N_\infty + \xi$

$$\frac{dN}{dt} = N(r - hN) \Rightarrow \frac{d\xi}{dt} = \lambda\xi \quad \text{with } \lambda = r - 2hN_\infty$$

$$N_\infty = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda = r > 0 \quad : \quad \text{反発的}$$

$$N_\infty = \frac{r}{h} = K \quad \rightarrow \quad \lambda = -r < 0 \quad : \quad \text{吸引的}$$

Euler method:

$$N_{n+1} = (1 + \alpha)N_n - \beta N_n^2 \Rightarrow \xi_{n+1} = \lambda\xi_n \quad \text{with } \lambda = (1 + \alpha) - 2\beta N_\infty$$

$$N_\infty = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda = 1 + \alpha > 1 \quad : \quad \text{反発的}$$

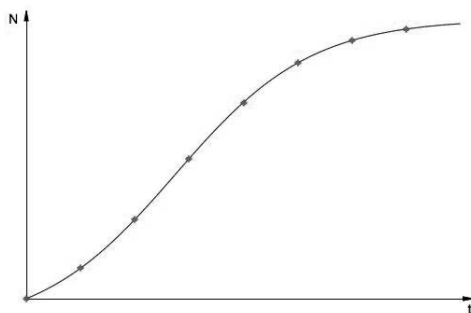
$$N_\infty = \frac{\alpha}{\beta} \quad \rightarrow \quad |\lambda| = |1 - \alpha| \geq 1 \quad ?$$

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

logistic 方程式の離散化

ii) $k = 1$ (双有理写像)

$$N_{n+1} = \frac{(1 + \alpha)N_n}{1 + \beta N_n}, \quad \alpha = e^{r\tau} - 1, \quad \beta = \frac{\alpha}{K}$$



→ この有理写像による離散化は，ある意味で，logistic 方程式の‘正確な’離散化！

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

logistic 方程式の離散化

線形安定性： $N = N_\infty + \xi$

$$\frac{dN}{dt} = N(r - hN) \Rightarrow \frac{d\xi}{dt} = \lambda\xi \quad \text{with } \lambda = r - 2hN_\infty$$

$$N_\infty = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda = r > 0 \quad : \quad \text{反発的}$$

$$N_\infty = \frac{r}{h} = K \quad \rightarrow \quad \lambda = -r < 0 \quad : \quad \text{吸引的}$$

双有利写像：

$$N_{n+1} = \frac{(1 + \alpha)N_n}{1 + \beta N_n} \Rightarrow \xi_{n+1} = \lambda\xi_n \quad \text{with } \lambda = \frac{1 + \alpha}{(1 + \beta N_\infty)^2}$$

$$N_\infty = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda = 1 + \alpha > 1 \quad : \quad \text{反発的}$$

$$N_\infty = \frac{\alpha}{\beta} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{1}{1 + \alpha} < 1 \quad : \quad \text{吸引的}$$

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

logistic 方程式の離散化

実は， $N_{n+1} = \frac{(1 + \alpha)N_n}{1 + \beta N_n}$ は線形化可能である！

$$N_n = \frac{1}{X_n} \Rightarrow X_{n+1} = (1 + \alpha)^{-1}(X_n + \beta)$$

勿論， $N_{n+1} = \frac{(1 + \alpha)N_n}{1 + \beta N_n}$ は \mathbb{P}^1 上の線形写像である。

$$N_n = [A_n : B_n] \quad (\text{斉次座標}) \quad \begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \alpha & 0 \\ \beta & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow N_n = \frac{\alpha/\beta}{1 + \left(\frac{\alpha}{\beta N_0} - 1\right)(1 + \alpha)^{-n}} = \frac{K}{1 + \left(\frac{K}{N_0} - 1\right)e^{-rn\tau}} \equiv N(t = n\tau)$$

$$\text{iff } 1 + \alpha = e^{r\tau}, \quad \frac{\alpha}{\beta} = K$$

logistic 方程式の超離散化

- $1 + \alpha = e^{r\tau}$, $\frac{\alpha}{\beta} = K$ にすると, $N_{n+1} = \frac{(1 + \alpha)N_n}{1 + \beta N_n}$ の軌道は, 任意の差分間隔 τ に対して, 連続方程式の解の 'sampling' である. \rightarrow 巨大な差分間隔のときでも!
- '超離散化': $\tau \rightarrow \infty$ つまり, $\tau = \frac{1}{\varepsilon}$, $\varepsilon \rightarrow 0^+$!

$$0 < N_n = K e^{U_n/\varepsilon} \leq K, \quad 1 + \alpha = e^{A/\varepsilon} \quad (\forall n : U_n \leq 0, A, \varepsilon > 0)$$

$\varepsilon \rightarrow 0^+$ のとき, $U_\infty = 0$ ($\leftrightarrow N_\infty = K$) という不動点は, 位相空間の任意の点 $U_n \leq 0$

に対し, 吸引的になり (固有値 = $\frac{1}{1 + \alpha} = e^{-A/\varepsilon}$),

任意の初期値が, 有限個のステップで, その不動点に辿り着く!

logistic 方程式の超離散化

$$\begin{aligned} \varepsilon \searrow 0^+: \quad \varepsilon \log e^{U_{n+1}/\varepsilon} &= \varepsilon \log \frac{e^{A/\varepsilon} e^{U_n/\varepsilon}}{1 + (e^{A/\varepsilon} - 1)e^{U_n/\varepsilon}} \\ \Leftrightarrow \quad U_{n+1} &= U_n + A - \varepsilon \log(1 + (e^{A/\varepsilon} - 1)e^{U_n/\varepsilon}) \\ \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} \quad &\boxed{U_{n+1} = U_n + A - \max[0, A + U_n]} \end{aligned}$$

このように \max と $+$ で書かれている方程式は「超離散系」と呼ばれる.

$$\text{さらに, } \underline{U_n < -A}: \quad U_{n+1} = U_n + A > U_n \quad (\text{単調増加})$$

$$\Rightarrow \quad U_n = U_0 + nA \quad (\text{for } U_0 \leq -nA)$$

$$\text{そして, 結局, } U_n \geq -A: \quad \boxed{U_{n+1} = 0}$$

logistic 方程式の解の超離散化

$$N_n = \frac{K}{1 + \left(\frac{K}{N_0} - 1\right) (1 + \alpha)^{-n}}$$

$$\Leftrightarrow e^{U_n/\varepsilon} = \frac{1}{1 + e^{-nA/\varepsilon}(e^{-U_0/\varepsilon} - 1)}$$

$$\Leftrightarrow U_n = -\varepsilon \log [1 + e^{-nA/\varepsilon}(e^{-U_0/\varepsilon} - 1)]$$

$$\varepsilon \rightarrow 0^+ \Rightarrow \boxed{U_n = -\max[0, -U_0 - nA] \equiv \min[0, U_0 + nA]}$$

離散化・超離散化によるモデル化の方針

連続モデル



① 自然現象をミクロのレベルではなく，マクロのレベルで自然現象を記述するときに見える方法。

→ レート方程式（離散的なモデルより直感的）

例： - logistic 方程式

- SIR モデル

⋮

離散モデル



② まず，精度の高い離散的近似（“integrator”）を構築する。

③ 差分間隔が大きいつきにも，連続系の挙動を忠実に記述し，観察データと比較できるような離散系を構築する。

→ 超離散化可能な模型

超離散モデル



④ 正值解をもつ離散系の超離散極限によって得られる。

⑤ 超離散系をセル・オートマトンとして用い，有限の位相空間を走査し，様々な attractor の存在や性質が容易に調べられる。（attractor への収束は ‘finite time’ で完成する等の利点がある。）

超離散極限から少しずつ離れて行くと，離散系の挙動も分析できる。

例 1：SIR モデル（伝染病の流行モデル）

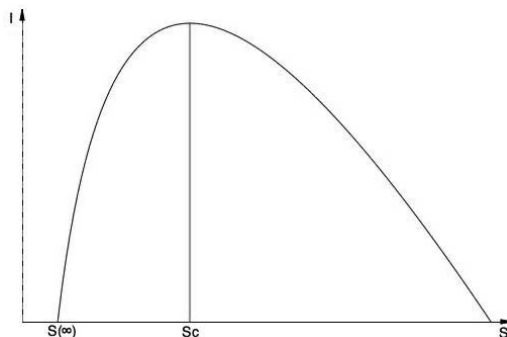
[W.O. Kermack, A.G. McKendrick, Proc. R. Soc. Edinb. A 115 (1927) 700]

S : 免疫を持たない人数
 I : 感染者の人数
 R : 免疫を持っている人数
 $(s, r, S_0, I_0, R_0 > 0)$

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -rSI \\ \frac{dI}{dt} = rSI - sI \\ \frac{dR}{dt} = sI \end{cases} \quad \begin{cases} S + I + R = c^t \\ r(S + I) - s \log S = c^t \end{cases}$$

- $S_c := \frac{s}{r} < S_0 \Rightarrow I \nearrow, S \searrow$
- $I_{\max} \leftrightarrow S = S_c$
- $S < S_c \Rightarrow I \searrow_0, S \searrow_{S_\infty}$

$$e^{rS_\infty} = \left(\frac{S_\infty}{S_0}\right)^s e^{r(S_0+I_0)}$$



例 1：SIR モデルの離散化

[R.W. et al. Physica A 328 (2003) 13]

$$\begin{cases} x_n = x_{n-1} \frac{1 + cy_n}{1 + y_n} \\ y_{n+1} = y_n \frac{a + x_n}{1 + bx_n} \end{cases} \quad \begin{cases} x = \epsilon S, y = \epsilon I, \\ t = \epsilon n, a = 1 - \epsilon s, \\ b = c = 1 - r \end{cases} \quad \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \quad \begin{cases} \frac{dS}{dt} = -rSI \\ \frac{dI}{dt} = rSI - sI \end{cases}$$

$(0 < a, b, c < 1, x_0, y_0 > 0)$

- このモデルにおける挙動は連続とほぼ一緒：

$$x_0 > \frac{1-a}{1-b} \Rightarrow y_n \nearrow, x_n \searrow ; \quad x_0 < \frac{1-a}{1-b} \Rightarrow y_n, x_n \searrow$$

- この模型には，場合によって保存量がある。
- この方程式系は超離散化可能である。

例 1：SIR モデルの超離散化

[R.W. et al., Physica A 328 (2003) 13]

$$x = e^{X/\varepsilon}, \quad y = e^{Y/\varepsilon}, \quad a = e^{-\alpha/\varepsilon}, \quad b = e^{-\beta/\varepsilon}, \quad c = e^{-\gamma/\varepsilon} \quad (\alpha, \beta, \gamma > 0)$$

$$\begin{cases} X_n = X_{n-1} + \max[0, Y_n - \gamma] - \max[0, X_n] \\ Y_{n+1} = Y_n + \max[-\alpha, X_n] - \max[0, X_n - \beta] \end{cases}$$

$X_0 > 0$: $Y_n \nearrow, X_n \searrow$, 　　つまり，伝染病が流行する

$X_0 < 0$: Y_n and $X_n \searrow \rightarrow Y_n < 0 \Rightarrow X_n = c^{\underline{t}} = X_\infty$

例： $(\alpha, \beta, \gamma) = (7, 4, 3)$ の場合

$$(X_0, Y_0) = (20, -1), (20, 3), (17, 7), (13, 11), (9, 15), (5, 19), (1, 20), (-3, 17), (-7, 10),$$

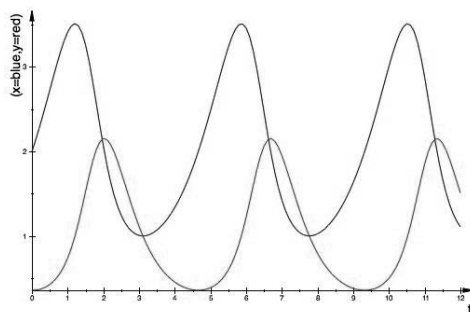
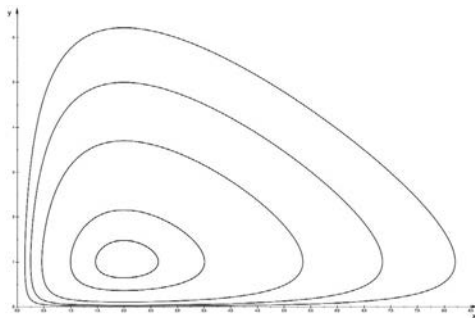
$$(-11, 3), (-14, -4), (-14, -11), \dots$$

$$(X_0, Y_0) = (20, -3), (20, 1), (19, 5), (15, 9), (11, 13), (7, 17), (3, 20), (-1, 19), (-5, 14), (-9, 7),$$

$$(-13, 0), (-13, -7), (-13, -14), \dots$$

捕食者・被食者モデル Lotka-Volterra

$$\begin{cases} x' = x(\lambda - y) \\ y' = y(x - \mu) \end{cases} \quad \text{保存量：} \quad H = x + y - \ln x^\mu y^\lambda$$



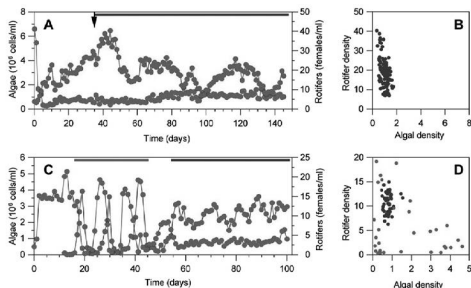
• x と y の振動の間に，周期の 4 分の 1 のずれがある。

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

捕食者・被食者モデル cryptic oscillations : (輪形動物・原生動物)

実験： [T. Yoshida et al., Nature 424 (2003) 303]

模型： [T. Yoshida et al., PLoSBiology 5 (2007) e235]



理由(?)：被食者の表現型 (phenotype) は実験において同じであるが，遺伝子変化で，遺伝子型 (genotype) が異なり，それぞれの種類の捕食者による被食率は違う。

それぞれの遺伝子型の個体数は捕食者に対して，Lotka-Volterra のように周期の四半分のずれで振動するが，被食者の総個体数の振動は小さくて，さらに，捕食者と半周期でずれる。

doi:10.1371/journal.pbio.0050235.g002

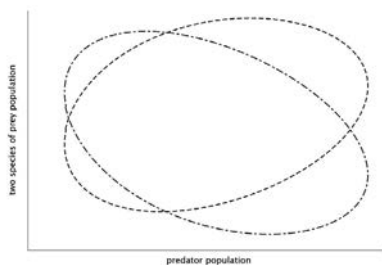
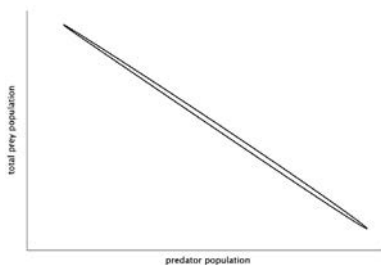
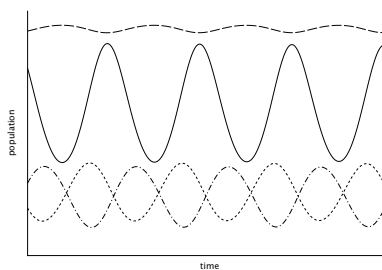
非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

捕食者・被食者モデル (モデル1)

[R.W. et al., Physica D 238 (2009) 2238]

連続系 : cryptic oscillations

実線：捕食者
破線：被食者総個体数
点線：高被食率の藻類
二点鎖線：低被食率の藻類



非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

捕食者・被食者モデル cryptic oscillations [R.W. et al., Physica D 238 (2009) 2238]

モデル 2

$$\begin{cases} x' = x(1-x-y) - \frac{xz}{1+\alpha(x+\rho y)} \\ y' = y(1-\delta-x-y) - \nu xy - \lambda \frac{yz}{1+\alpha(x+\rho y)} \\ z' = -\gamma z + \mu z(x+\rho y) \end{cases} \longrightarrow$$

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n \frac{1+\epsilon}{1+\epsilon \left(x_n + y_n + \frac{z_n}{1+\alpha(x_n+\rho y_n)} \right)} \\ y_{n+1} = y_n \frac{1+\epsilon(1-\delta)}{1+\epsilon \left((1+\nu)x_n + y_n + \frac{\lambda z_n}{1+\alpha(x_n+\rho y_n)} \right)} \\ z_{n+1} = z_n \frac{1+\epsilon\mu(x_n+\rho y_n)}{1+\epsilon\gamma} \end{cases}$$

x = 高被食率藻類, z = 輪虫,
 y = 低被食率藻類, $\alpha, \nu, \gamma, \mu > 0$,
 $0 < \rho < \lambda < 1$, $0 < \delta < 1$

超離散系： $x = e^{X/\epsilon}$, $y = e^{Y/\epsilon}$, $z = e^{Z/\epsilon}$ ($X, Y \leq 0$),

$\epsilon = e^{E/\epsilon}$, $\alpha = e^{A/\epsilon}$, $1-\delta = e^{-\Delta/\epsilon}$, $1+\nu = e^{C/\epsilon}$, $\gamma = e^{G/\epsilon}$, $\lambda = e^{-L/\epsilon}$, $\mu = e^{M/\epsilon}$, $\rho = e^{-R/\epsilon}$, ($E, \Delta, C, L, R > 0$)

$$\begin{cases} X_{n+1} = X_n - \max[-E, X_n, Y_n, Z_n - \max[0, A + Q_n]] \\ Y_{n+1} = Y_n - \Delta - \max[-E, C + X_n, Y_n, Z_n - L - \max[0, A + Q_n]] \\ Z_{n+1} = Z_n + \max[-E, M + Q_n] - G \end{cases}$$

$L < R$, $E > \Delta$
 $E + G > 0$

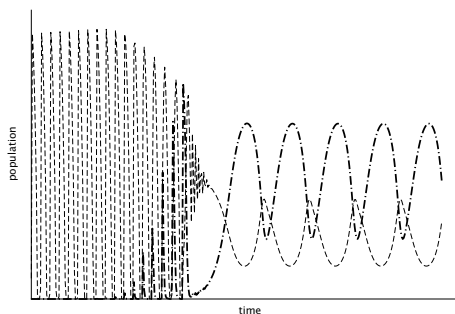
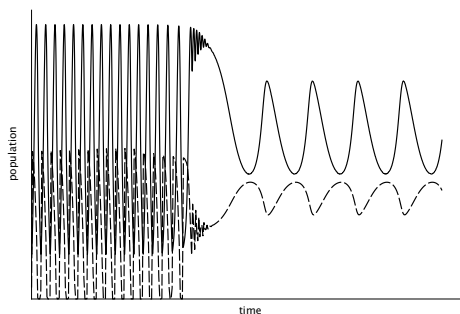
($Q_n = \max[X_n, Y_n - R]$)

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

捕食者・被食者モデル (モデル 2)

[R.W. et al., Physica D 238 (2009) 2238]

transition + cryptic oscillations



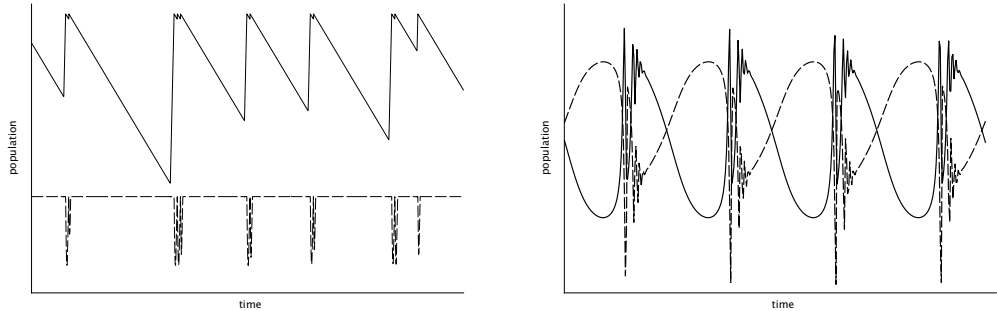
実線：捕食者，破線：被食者総个体数

点線：高被食率の藻類，二点鎖線：低被食率の藻類

捕食者・被食者モデル (モデル2)

[R.W. et al., Physica D 238 (2009) 2238]

intermittency: chaos? (超離散系で発見され，それから離散系及び連続系でも確認。)



実線：捕食者，破線：被食者総个体数

Q.: 他の捕食者・被食者系にも chaos が示されたか [P.A. Abrams, Ecology 80 (1999) 608]
この現象は模型の特徴なのか，自然にも現れるのか？

箱玉系

[D. Takahashi & J. Satsuma, J. Phys. Soc. J. 59 (1990) 3514-3519]

$$U_\ell^{t+1} = \min \left[1 - U_\ell^t, \sum_{k=-\infty}^{\ell-1} (U_k^t - U_k^{t+1}) \right]$$

$U_\ell^0 \in \{0, 1\}$ の Cauchy データで $\{0, 1\}$ 上で発展する。

t=0	·	1	1	·	·	1	1	·	1	1	·	1	·	·	·	·	·	·	·	·
t=1	·	·	·	1	1	·	·	1	·	·	1	·	1	1	·	·	·	·	·	·
t=2	·	·	·	·	·	1	1	·	1	·	·	1	·	·	·	1	1	1	·	·
t=3	·	·	·	·	·	·	·	1	·	1	1	·	1	·	·	·	·	·	1	1
t=4	·	·	·	·	·	·	·	·	·	1	·	·	1	·	·	·	·	·	·	1

- 任意の初期値は漸近的に何本の '1' の列に分裂する。このような '1' の列をソリトンと言う。
- それぞれのソリトンは，自分の長さと同じ速度で右進行する。
- 「2体」の相互作用しなく，相互作用したソリトンは両方とも一番遅いソリトンの長さの 2 倍の位相の 'ずれ' を受ける。

KdV, 離散 KdV とその超離散極限

$$\underline{\text{KdV}}: \quad u_t + u_{3x} + 6uu_x = 0$$

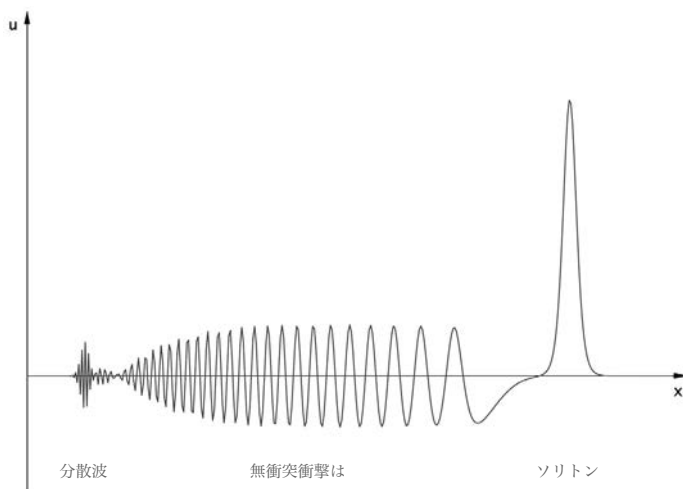
$$\underline{\text{dKdV}}: \quad \frac{1}{u_{\ell+1}^{t+1}} - \frac{1}{u_{\ell}^t} = \delta [u_{\ell+1}^t - u_{\ell}^{t+1}]$$

離散 KdV 方程式の Yang-Baxter 形式 ($u_{\ell}^{t+1} = \frac{1}{\delta u_{\ell}^t + v_{\ell}^t}$, $v_{\ell+1}^t = \frac{u_{\ell}^{t+1}}{u_{\ell}^t} v_{\ell}^t$) から

$$U_{\ell}^{t+1} = \min \left[1 - U_{\ell}^t, \sum_{k=-\infty}^{\ell-1} (U_k^t - U_k^{t+1}) \right]$$

が得られる. ($U_{\ell}^t = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log u_{\ell}^t$, $V_{\ell}^t = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log \frac{1 - \delta}{v_{\ell}^t}$, $\varepsilon = -\log \delta > 0$)

連続の KdV 方程式

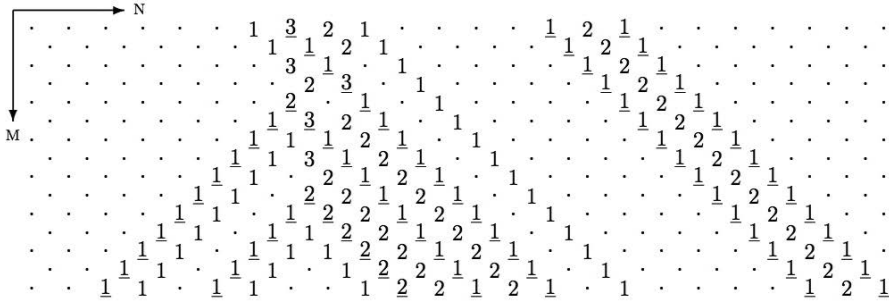


超離散 sine-Gordon 方程式

$$Z: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z},$$

$$Z_{N+1}^{M+1} + Z_{N+1}^{M-1} = \max \left[-1, Z_{N+2}^M + Z_N^M \right] - \max \left[0, -1 + Z_{N+2}^M + Z_N^M \right]$$

に対し， $M + N$ が一定の parity を持つ格子点のみで初期値を与える。



[B. Grammaticos, A. Ramani & R.W., J. Phys. A 46 (2013) 145204]

超離散 sine-Gordon 方程式

$$Z: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z},$$

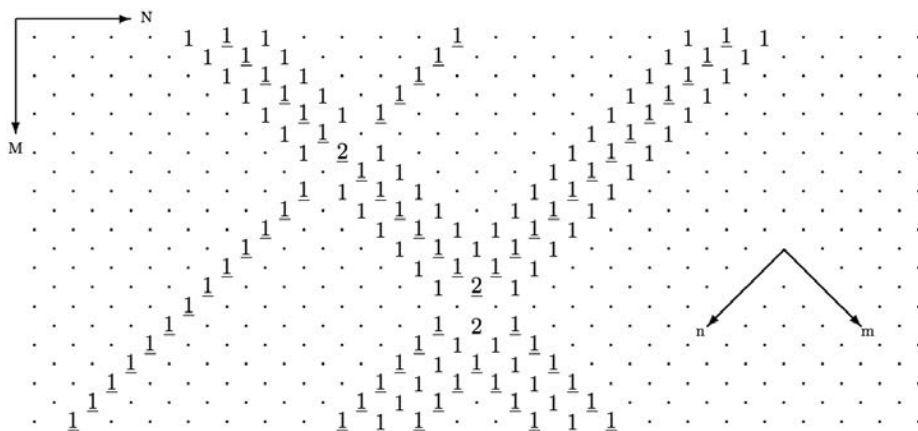
$$Z_{N+1}^{M+1} + Z_{N+1}^{M-1} = \max \left[-1, Z_{N+2}^M + Z_N^M \right] - \max \left[0, -1 + Z_{N+2}^M + Z_N^M \right]$$

に対し， $M + N$ が一定の parity を持つ格子点のみで初期値を与える。

- M 方向を“時間”と考え，初期値を $M = 0, 1$ のとき， $M + N$ even の格子点で与える
- 初期値は全て有限な台を持つ： $\exists R: Z_N^0, Z_N^1 = 0$ if $|N| > R$
- すべての M, N に対し， $|Z_{N+2}^M + Z_N^M| \leq 1$ をみたす‘列’は一つのソリトンを成す
- ソリトンは常に速度 ± 1 で進行する

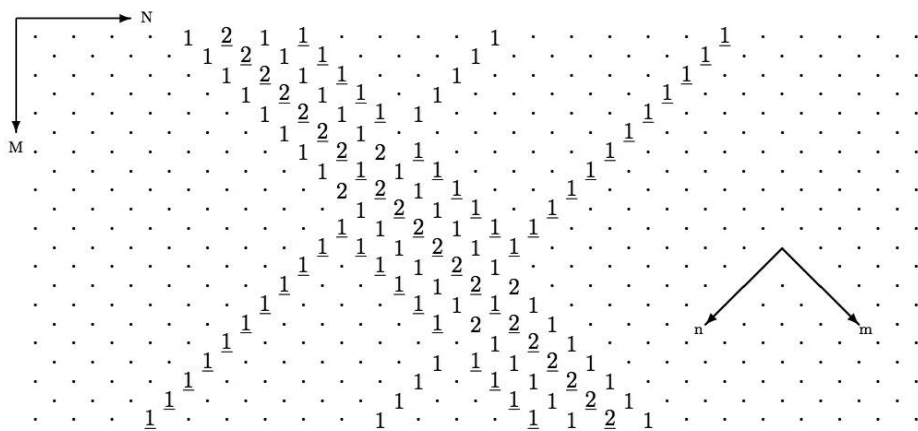
非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

ソリトン相互作用の例：



非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

ソリトン相互作用の例：



超離散 sine-Gordon 方程式

$$Z: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z},$$

$$Z_{N+1}^{M+1} + Z_{N+1}^{M-1} = \max \left[-1, Z_{N+2}^M + Z_N^M \right] - \max \left[0, -1 + Z_{N+2}^M + Z_N^M \right]$$

ソリトンの相互作用は，

- 自明な場合がある
- 弾性的であるとき， phase-shift による符号の変換が見える
- 非弾性的である可能性もある：ソリトンの ‘dressing’ と ‘undressing’ が見える！
- ソリトンの dressing 現象に対し，最大 と 最小 の状態が存在する

$$\begin{array}{ccc} (1 & -2 & 1) & \xrightarrow{\text{dressing}} & (1 & -2 & 1 & -1) \\ \text{dressing} \downarrow & & & & & & \downarrow \text{dressing} \\ (-1 & 1 & -2 & 1) & \xrightarrow{\text{dressing}} & (-1 & 1 & -2 & 1 & -1) \end{array}$$

超離散 sG 方程式の由来：

離散 sG 方程式 $z: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{R} :$
$$z_{N+1}^{M+1} z_{N+1}^{M-1} = \frac{\delta + z_{N+2}^M z_N^M}{1 + \delta z_{N+2}^M z_N^M} \quad (\delta \in \mathbb{R})$$

は Lax pair を持ち，ソリトン系であり，sine-Gordon 方程式への連続極限を持つ。

さらに，超離散化可能な方程式である： $z = e^{Z/\varepsilon}$ ， $\delta = e^{-1/\varepsilon}$ (for $\varepsilon > 0$ ， $\delta < 1$)

$\varepsilon \rightarrow +0$ という極限において：

$$Z_{N+1}^{M+1} + Z_{N+1}^{M-1} = \max \left[-1, Z_{N+2}^M + Z_N^M \right] - \max \left[0, -1 + Z_{N+2}^M + Z_N^M \right]$$

超離散 sG 方程式の時間発展

しかし，

$$z_{N+1}^{M+1} z_{N+1}^{M-1} = \frac{\delta + z_{N+2}^M z_N^M}{1 + \delta z_{N+2}^M z_N^M}$$

↓

$$Z_{N+1}^{M+1} + Z_{N+1}^{M-1} = \max \left[-1, Z_{N+2}^M + Z_N^M \right] - \max \left[0, -1 + Z_{N+2}^M + Z_N^M \right]$$

は形式的な導出である：

- 離散 sine-Gordon 方程式の正值の厳密解は知られていない
- 離散 sine-Gordon 方程式のソリトン解は正值ではないので，超離散化不可能である

→ 超離散 sine-Gordon 方程式におけるソリトン現象の由来は大きな謎！

超離散 sG 方程式の時間発展

14 年間以上の難問：

- Grammaticos et al. (2000)：超離散 sine-Gordon における非弾性的相互作用の発見
- Isojima et al. (2004)：離散 sine-Gordon 方程式のソリトンの非正值性
- Bobenko et al. (1993)：有限体上の離散 sine-Gordon 方程式
- ソリトン相互作用の漸近的な記述は可能である！

→ ‘oiston’ という超離散 sG の保存量を用いた，離散 KdV 方程式の Yang-Baxter 写像と関係する表現に基づく記述。

[B. Grammaticos, A. Ramani & R.W., J. Phys. A 46 (2013) 145204]

[R.W. et al. , RIAM report No.25AO-S2 (2014) Article No.5 (29–34)]

oiston とは何か？

- 離散 sine-Gordon 方程式は Miura 変換で離散 KdV 方程式と繋がっている

$$z_{N+1}^{M+1} z_{N+1}^{M-1} = \frac{\delta + z_{N+2}^M z_N^M}{1 + \delta z_{N+2}^M z_N^M} \xrightarrow{y_n^m = (z_N^M)^{(-1)^m}} \frac{1}{u_{n+1}^{m+1}} - \frac{1}{u_n^m} = \Delta(u_{n+1}^m - u_n^{m+1})$$

$$\text{with: } u_n^m = \frac{(1 + \delta)y_n^m}{\delta y_n^{m-1} + y_{n-1}^m} = \frac{(1 + \delta)y_{n-1}^{m-1}}{y_n^{m-1} + \delta y_{n-1}^m} \quad \text{and} \quad \Delta = \frac{1 - \delta}{1 + \delta}$$

- 超離散化を実行するためには，離散 KdV 方程式を次の形で表す必要がある：

$$u_n^{m+1} = \frac{1}{\Delta(u_n^m + v_n^m)}, \quad v_{n+1}^m = \frac{u_n^{m+1}}{u_n^m} v_n^m$$

oiston とは何か？

変数 V と W はある種の超離散 KdV 方程式と関係する

- $u_n^m = e^{U_n^m/\varepsilon}$, $v_n^m = \frac{2\delta}{1-\delta} e^{V_{n-1}^m/\varepsilon}$, $\delta = e^{-1/\varepsilon}$ と置き， $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限をとると，

$$U_n^{m+1} = \min[-U_n^m, 1 - V_{n-1}^m], \quad V_n^m = V_{-\infty}^m + \sum_{k=-\infty}^n (U_k^{m+1} - U_k^m)$$

$$\text{with: } U_n^m = Y_n^m - \max[Y_{n-1}^m, Y_n^{m-1} - 1] = Y_{n-1}^{m-1} - \max[Y_n^{m-1}, Y_{n-1}^m - 1]$$

$$\text{and } V_n^m = \max[Y_n^{m+1}, Y_n^{m-1}] - Y_n^m, \quad Y_n^m = (-1)^m Z_N^M$$

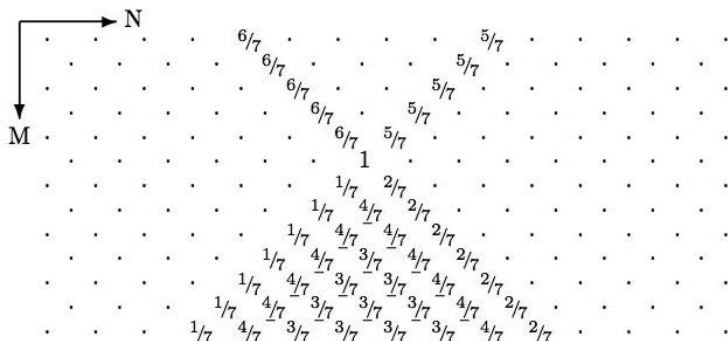
が得られる。

- 注意：この「超離散 KdV 方程式」は普通の箱玉系と違う！

$$U_n^{m+1} = \min[1 - U_n^m, -V_{n-1}^m]$$

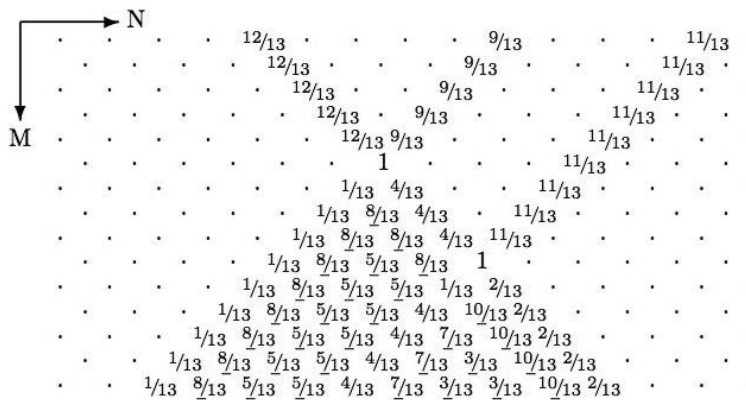
非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

超離散 SG 方程式のソリトンとは？



非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

超離散 SG 方程式のソリトンとは？



超離散 SG 方程式のソリトンとは？

離散 sG の正值解はすべて分散する！ [R. Willox et al., J. Phys. A 47 (2014) 125202]

離散 sG 方程式：
$$z_N^{M+1} z_N^{M-1} = \frac{\delta + z_{N+1}^M z_{N-1}^M}{1 + \delta z_{N+1}^M z_{N-1}^M}$$

→ N

M=0 :	1	1	1	1	w/δ	1	1	1	1	1
M=1 :	1	1	1	1	1	★	1	1	1	1
	1	1	1	1	·	·	1	1	1	1
	1	1	1	·	·	·	1	1	1	1
	1	1	1	·	·	·	·	1	1	1
	1	1	·	·	·	·	·	1	1	1

★ = $(w/\delta + \delta)/(w + 1)$

$$z = e^{Z/\varepsilon}, \quad \delta = e^{-1/\varepsilon}, \quad w \approx \delta^\nu = e^{-\nu/\varepsilon} \quad (0 \leq \nu < 1)$$

超離散 SG 方程式のソリトンとは？

摂動的なアプローチ：

$$z = \frac{1+y}{1-y} \Rightarrow \frac{y_N^{M+1} + y_N^{M-1}}{1 + y_N^{M+1} y_N^{M-1}} = \lambda \frac{y_{N+1}^M + y_{N-1}^M}{1 + y_{N+1}^M y_{N-1}^M} \quad (\lambda = \frac{1-\delta}{1+\delta})$$

‘light-cone’ の中には： $y_{-M}^M = 0, \quad y_M^M = \frac{w-\delta}{w+\delta} \lambda^M \quad (M \geq 0),$

$$y_{M-2p}^M = -1 + \frac{1}{1 + (M-p)w} + \frac{2(p-1)w P_{M-p}(w)}{(1 + (M-p)w)^2} \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \quad \text{for } M \geq p > 0,$$

$$\text{with } P_k(w) = \frac{2}{3} k^2 (k^2 - 1) w^2 / 3 + \frac{k}{3} (4k^2 - 1) w / 3 + k^2$$

超離散 SG 方程式のソリトンとは？

$$\Rightarrow 1) \quad z_{M-2p}^M = \frac{1}{1 + 2(M-p)w} + \mathcal{O}(\delta) \quad \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \quad Z_{M-2p}^M = 0$$

$$z_M^M = \frac{(w + \delta) + (w - \delta)\lambda^M}{(w + \delta) - (w - \delta)\lambda^M} \quad \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \quad Z_M^M = 1 - \nu$$

$$2) \quad z_M^M \approx 1 + 2 \frac{w - \delta}{w + \delta} \lambda^M \quad \xrightarrow{M \rightarrow +\infty} \quad 1 \quad (!)$$

漸近的には， y_N^M が次の分散的偏差分方程式を満たす：

$$y_N^{M+1} + y_N^{M-1} = \lambda(y_{N+1}^M + y_{N-1}^M)$$

$$\text{つまり，} \quad \lim_{M \rightarrow +\infty} y_N^M = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{M \rightarrow +\infty} z_N^M = 1 \quad (!)$$

まとめ

- 超離散化により，適切な離散化の後，連続力学系の本質的な振る舞いをセルオートマトンで捉えることができる。
- しかし，連続系の解の‘すべて’の性質が捉えるかどうかは難しい問題。
- 超離散極限において，解の主な振る舞いだけではなく，連続系の根本的な数学的性質が生き残る場合もある。
- 一方，超離散系に現れる現象がすべてその元にある離散系や連続系に‘単純に’存在する訳ではない。

粒子セルオートマトンの Max-Plus 代数 による解析

(Analysis of particle cellular automata using max-plus algebra)

松木平淳太, 龍谷大・理工

(Junta Matsukidaira, Ryukoku University)

概要

多くの1次元粒子セルオートマトンが max-min-plus 表現を持つことが最近わかってきた。その表現を得るときに大きな役割を果たすのは基本図である。さらに超離散 Cole-Hopf 変換によって得られた発展方程式から確率モデルが構築できることもわかってきた。一方、高次の保存量を持つ CA との関連もごく最近発見した。これらの現状についてまとめて報告する。

Abstract

Recent studies on particle cellular automata are reviewed. We show that many one-dimensional particle cellular automata admit max-min-plus expression. Applying a ultra-discrete version of the Cole-Hopf transformation, one can obtain evolution equations and corresponding stochastic models.

Outline

- ① 決定論的粒子セルオートマトン
 - Burgers 方程式とルール 184
 - 多近傍セルオートマトン

- ② 確率論的粒子セルオートマトン
 - ASEP
 - 確率 4,5 近傍粒子セルオートマトン

2/41

超離散化

KdV equation

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0$$

- 無限個の保存量
- N ソリトン解

↓ 超離散化

箱玉系

$$u_j^{n+1} = \min\left(\sum_{k=-\infty}^{j-1} (u_k^n - u_k^{n+1}), 1 - u_j^n\right)$$

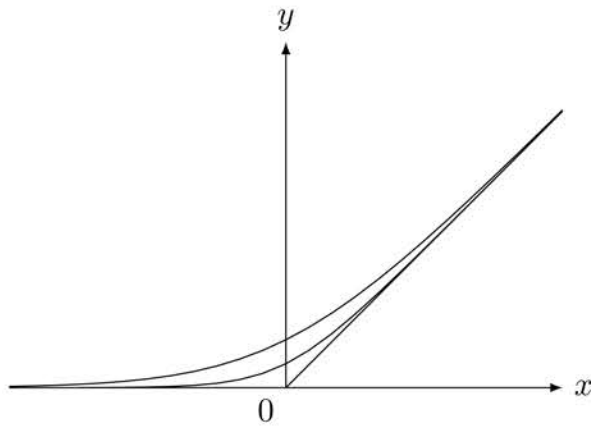
- 無限個の保存量
- N ソリトン解

Takahashi and Satsuma, Journal of the Physical Society of Japan, 59(10), 3514-3519 (1992)

3/41

超離散化

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \log \left(1 + e^{\frac{x}{\epsilon}} \right) = \max(0, x)$$



Tokihiro, Takahashi, Matsukidaira, and Satsuma, Physical Review Letters 76, 3247(1996)

Matsukidaira, Satsuma, Takahashi, Tokihiro, and Torii, Physics Letters A 225, 287-295(1997)

4/41

Burgers 方程式とルール 184

Burgers 方程式

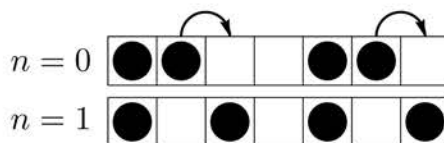
$$u_t = 2uu_x + u_{xx}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u dx \text{ は保存量}$$

↓ 超離散化

ルール 184

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \min(u_{j-1}^n, 1 - u_j^n) - \min(u_j^n, 1 - u_{j+1}^n)$$



$$\sum_{j=1}^L u_j^n \text{ は保存量}$$

5/41

Cole-Hopf 変換

Burgers 方程式

$$u_t = 2uu_x + u_{xx}$$

$$\begin{array}{c} \text{Cole-Hopf 変換} \\ \xrightarrow{u = (\log f)_{xx}} \end{array}$$

拡散方程式

$$f_t = f_{xx}$$

↓ 超離散化

ルール 184

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \min(u_{j-1}^n, 1 - u_j^n) - \min(u_j^n, 1 - u_{j+1}^n)$$

$$\begin{array}{c} \text{超離散 Cole-Hopf 変換} \\ \xleftarrow{u_j^n = F_j^n - F_{j-1}^n} \end{array}$$

超離散拡散方程式

$$F_j^n = \max(F_{j-1}^n, F_{j+1}^n - 1)$$

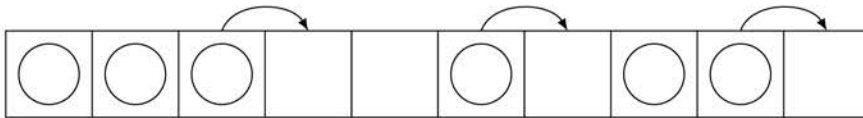
Nishinari and Takahashi, J. Phys. A: Math. Gen, Vol.31, 5439 (1998)

6/41

ルール 184

ルール

- 右側のセルが空いていたら動ける。空いていなかったら、動けない。
- 車の最大速度は 1 である。



$$\frac{u_{j-1}^n u_j^n u_{j+1}^n}{u_j^{n+1}} = \frac{111}{1}, \frac{110}{0}, \frac{101}{1}, \frac{100}{1}, \frac{011}{1}, \frac{010}{0}, \frac{001}{0}, \frac{000}{0}$$

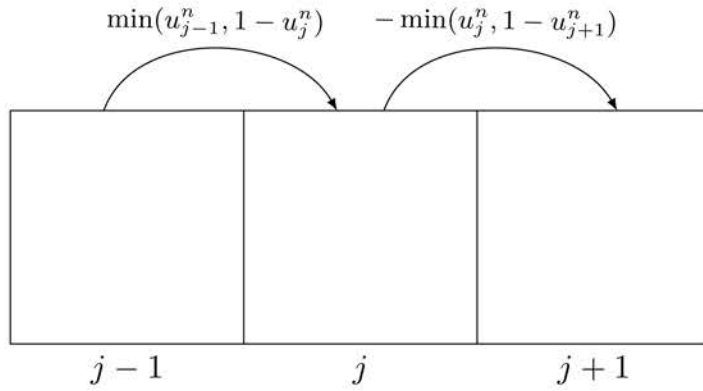
$$10111000_2 = 184_{10}$$

7/41

ルール 184

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \min(u_{j-1}^n, 1 - u_j^n) - \min(u_j^n, 1 - u_{j+1}^n)$$

u_j^n は時刻 n における j 番目のサイトの車の台数

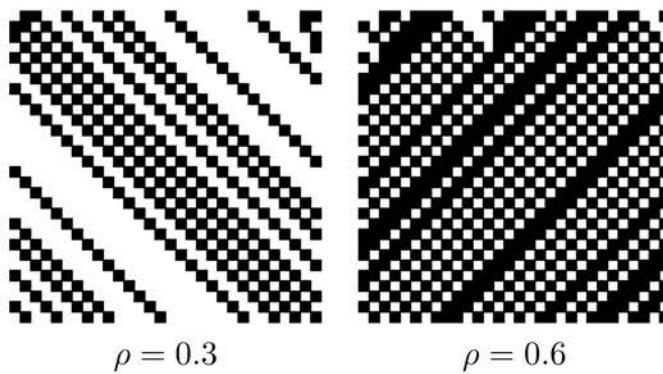


流束の物理的意味

$$\min(\text{車の台数}, \text{セルの空き})$$

8/41

ルール 184 の時空図

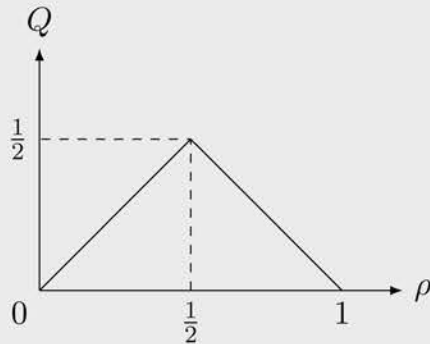


9/41

基本図

$$\rho = \frac{\sum_{j=1}^L u_j^n}{L}, \quad Q^n = \frac{\sum_{j=1}^L \min(u_{j-1}^n, 1 - u_j^n)}{L}, \quad Q = \lim_{n \rightarrow \infty} Q^n$$

ルール 184 の基本図



$$Q = \min(\rho, 1 - \rho)$$

10/41

多近傍セルオートマトン

$l + r + 1 (= R)$ 近傍セルオートマトン

$$u_j^{n+1} = f(u_{j-l}^n, u_{j-l+1}^n, \dots, u_{j+r}^n)$$

$$\downarrow \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_j^{n+1} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} u_j^n$$

粒子セルオートマトン

$$u_j^{n+1} = u_j^n + q(u_{j-l}^n, u_{j-l+1}^n, \dots, u_{j+r-1}^n) - q(u_{j-l+1}^n, u_{j+l+2}^n, \dots, u_{j+r}^n)$$

11/41

服部・武末の定理

$$q(u_1, u_2, \dots, u_{R-1})$$

0	0	0	0	0	u_1	u_2	...	u_l	u_{l+1}	...	u_{R-1}	u_R
0	u'_{-r+1}	...	u'_{-1}	u'_0	u'_1	u'_2	...	u'_l	u'_{l+1}			

$$\begin{aligned} u'_{l+1} - u_{l+1} &= f(u_1, u_2, \dots, u_R) - u_{l+1} \\ &= q(u_1, u_2, \dots, u_{R-1}) - q(u_2, u_3, \dots, u_R) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q(u_1, u_2, \dots, u_{R-1}) &= \sum_{k=1}^l u_k - \sum_{k=1}^{R-1} u'_{k-r} \\ &= \sum_{k=1}^l u_k - \sum_{k=1}^{R-1} \underbrace{f(0, 0, \dots, 0)}_k, u_1, u_2, \dots, u_{R-k} \end{aligned}$$

12/41

3、4 近傍粒子セルオートマトン

- ルール 184: $u_j^{n+1} = u_j^n + q(u_{j-1}^n, u_j^n) - q(u_j^n, u_{j+1}^n)$

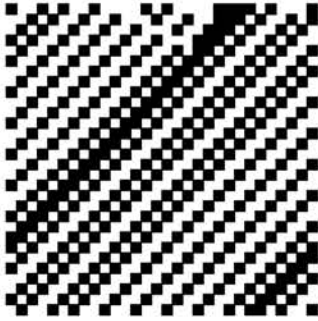
ab		11	10	01	00
$q(a, b)$		0	1	0	0

- 4 近傍粒子 CA: $u_j^{n+1} = u_j^n + q(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n) - q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n)$

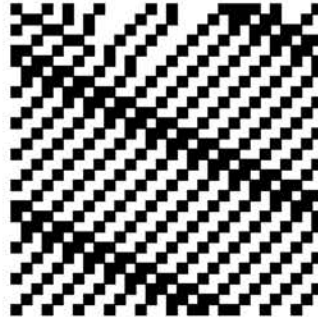
4-1	abc		111	110	101	100	011	010	001	000
	$q(a, b, c)$		0	1	0	1	0	1	0	0
4-2	abc		111	110	101	100	011	010	001	000
	$q(a, b, c)$		0	1	0	0	0	0	-1	0
4-3	abc		111	110	101	100	011	010	001	000
	$q(a, b, c)$		0	1	0	0	0	0	0	0
4-4	abc		111	110	101	100	011	010	001	000
	$q(a, b, c)$		0	0	0	0	0	1	0	0

13/41

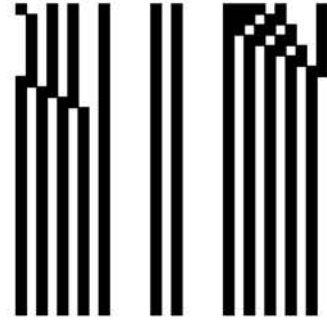
4 近傍粒子セルオートマトンの時空図



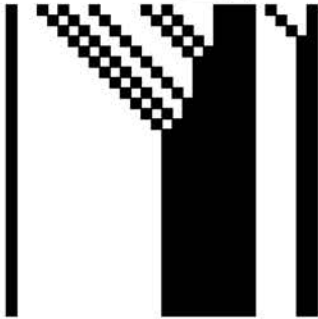
4-1 の時空図



4-2 の時空図



4-3 の時空図



4-4 の時空図

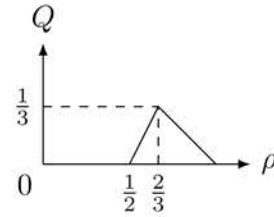
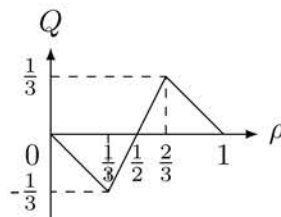
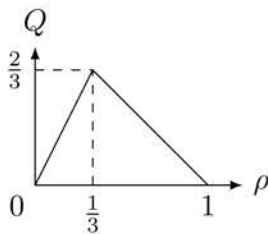
14/41

4 近傍粒子セルオートマトンの Max-Min-Plus 表現による 時間発展式と基本図

$$4-1: u_j^{n+1} = u_j^n + \min(u_{j-2}^n + u_{j-1}^n, 1 - u_j^n) - \min(u_{j-1}^n + u_j^n, 1 - u_{j+1}^n)$$

$$4-2: u_j^{n+1} = u_j^n + \min(\max(-u_j^n, u_{j-2}^n + u_{j-1}^n - 1), 1 - u_j^n) \\ - \min(\max(-u_{j+1}^n, u_{j-1}^n + u_j^n - 1), 1 - u_{j+1}^n),$$

$$4-3: u_j^{n+1} = u_j^n + \min(\max(0, u_{j-2}^n + u_{j-1}^n - 1), 1 - u_j^n) \\ - \min(\max(0, u_{j-1}^n + u_j^n - 1), 1 - u_{j+1}^n),$$



Takahashi, Matsukidaira, Hara and Feng, Journal of Physics A 44 135102 (2011)

15/41

超離散 Cole-Hopf 変換

超離散 Cole-Hopf 変換

$$u_j^n = F_j^n - F_{j-1}^n$$

$$4-1: F_j^{n+1} = \max(F_{j-2}^n, F_{j+1}^n - 1)$$

$$4-2: F_j^{n+1} = \max(\min(F_{j+1}^n, F_{j-2}^n + 1), F_{j+1}^n - 1)$$

$$4-3: F_j^{n+1} = \max(\min(F_j^n, F_{j-2}^n + 1), F_{j+1}^n - 1)$$

16/41

5 近傍粒子セルオートマトン

2863377064, 2881005752, 2881267852, 2881398914, 2881464448, 2944969912,
2945232012, 2945363074, 2945428608, 2947326124, 2947457186, 3098065832,
3099375756, 3099506818, 3099572352, 3102247912, 3103295736, 3103557836,
3103688898, 3103754432, 3116153216, 3120335296, 3132144268, 3132275330,
3136326348, 3136457410, 3136522944, 3137047048, 3148921728, 3153103808,
3153627912, 3163077816, 3163470978, 3163536512, 3165434028, 3165630624,
3167259896, 3167521996, 3167653058, 3167718592, 3169616108, 3169812704,
3180117376, 3182211488, 3184299456, 3186393568, 3196108428, 3198202540,
3200290508, 3200487104, 3201011208, 3202384620, 3202581216, 3203105320,
3213933712, 3214980000, 3216027824, 3216289924, 3217067968, 3217592072,
3218115792, 3218639896, 3219162080, 3219686184, 3220209904, 3220472004,
3220734008, 3220996108, 3221127170, 3366517672, 3367565496, 3367827596,
3370699752, 3372009676, 3384605056, 3388787136, 3400596108, 3404778188,
3421555648, 3422079752, 3431529656, 3431791756, 3435711736, 3448569216,
3450663328, 3452751296, 3454845408, 3464560268, 3482385552, 3484479664,
3484741764, 3486043912, 3486567632, 3487091736, 3487613920, 3488138024,
3488923844, 3489185848, 3639663552, 3640187656, 3703627712, 3704151816,
3705199640, 3705721824, 3706245928, 3706769648, 3707031748, 3707293752,
3771264248, 3822120144, 3822644248, 3824214256, 3824738360, 3888178416,
4040228048

115 個

17/41

Particle CA5-34 (ルール 3163536512)

Particle CA5-34 (ルール 3163536512) のルール表

<i>abcde</i>	11111	11110	11101	11100	11011	11010	11001	11000	10111	10110	10101	10100	10011	10010	10001	10000
$f(a, b, c, d, e)$	1	0	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	1	1	1	1
<i>abcde</i>	01111	01110	01101	01100	01011	01010	01001	01000	00111	00110	00101	00100	00011	00010	00001	00000
$f(a, b, c, d, e)$	1	0	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0

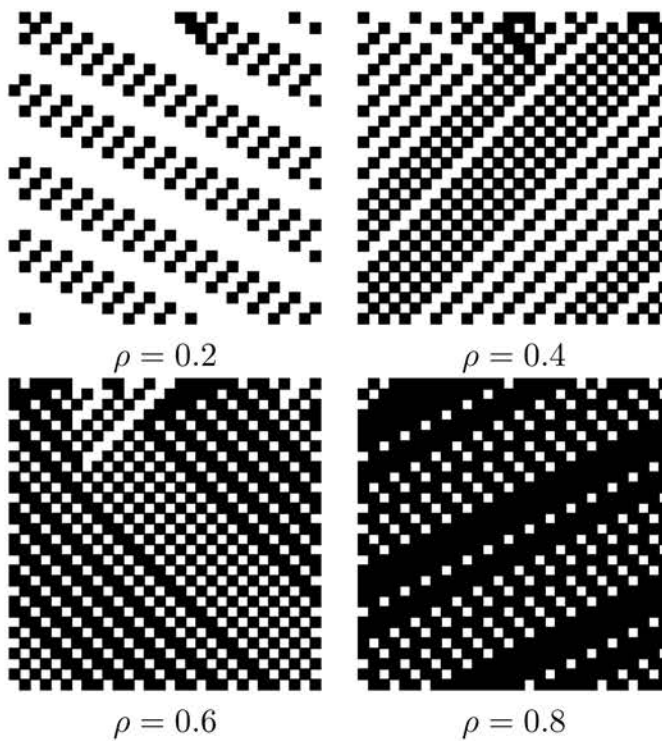
$$\downarrow \quad q(u_1, u_2, u_3, u_4) = \sum_{k=1}^2 u_k - \sum_{k=1}^4 \underbrace{f(0, 0, \dots, 0, u_1, u_2, \dots, u_{5-k})}_k$$

Particle CA5-34 (Rule 3163536512) の流束表

<i>abcd</i>	1111	1110	1101	1100	1011	1010	1001	1000	0111	0110	0101	0100	0011	0010	0001	0000
$q(a, b, c, d)$	0	1	1	1	0	0	1	1	0	1	1	1	0	0	0	0

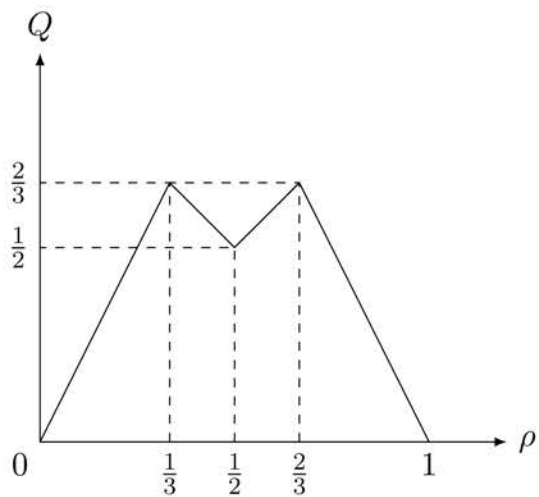
18/41

Particle CA5-34 の時空図

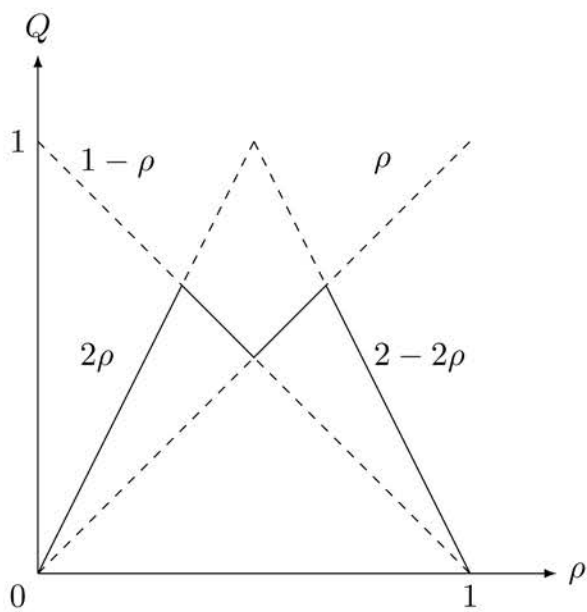


19/41

Particle CA5-34 の基本図



20/41



$$Q(\rho) = \max(\min(2\rho, 1 - \rho), \min(\rho, 2 - 2\rho))$$

21/41

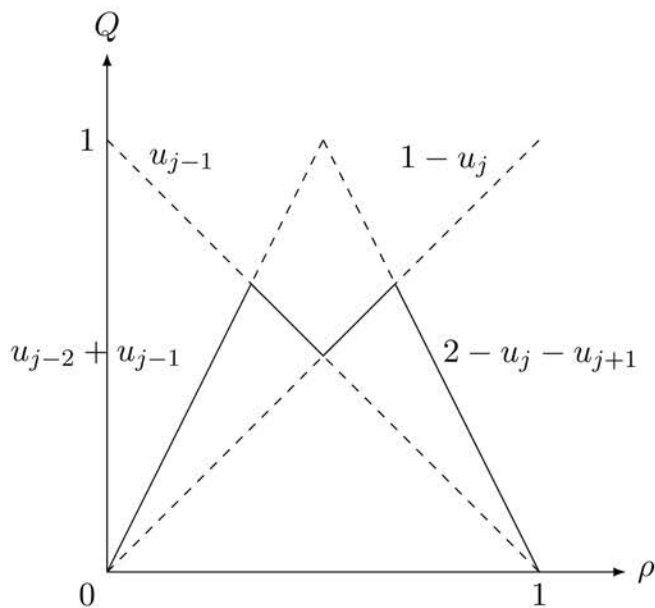
基本図から流束の max-min-plus 表現を作る

$$\max(\min(2\rho, 1 - \rho), \min(\rho, 2 - 2\rho))$$

$$\downarrow \quad m\rho \rightarrow \begin{cases} \sum_{k=1}^m u_{j-k}^n & (m > 0) \\ -\sum_{k=1}^{-m} u_{j+k-1}^n & (m < 0) \end{cases}$$

$$\max(\min(u_{j-2}^n + u_{j-1}^n, 1 - u_j^n), \min(u_{j-1}^n, 2 - u_j^n - u_{j+1}^n))$$

22/41



$$q(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) = \max(\min(u_{j-2}^n + u_{j-1}^n, 1 - u_j^n), \min(u_{j-1}^n, 2 - u_j^n - u_{j+1}^n))$$

23/41

超離散 Cole-Hopf 変換

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \max(\min(u_{j-2}^n + u_{j-1}^n, 1 - u_j^n), \min(u_{j-1}^n, 2 - u_j^n - u_{j+1}^n)) - \max(\min(u_{j-1}^n + u_j^n, 1 - u_{j+1}^n), \min(u_j^n, 2 - u_{j+1}^n - u_{j+2}^n))$$

↓ 超離散 Cole-Hopf 変換

$$u_j^n = F_j^n - F_{j-1}^n$$

$$F_j^{n+1} = \min(\max(F_{j-2}^n, F_{j+1}^n - 1), \max(F_{j-1}^n, F_{j+2}^n - 2))$$

24/41

基本図から F の発展方程式を得る

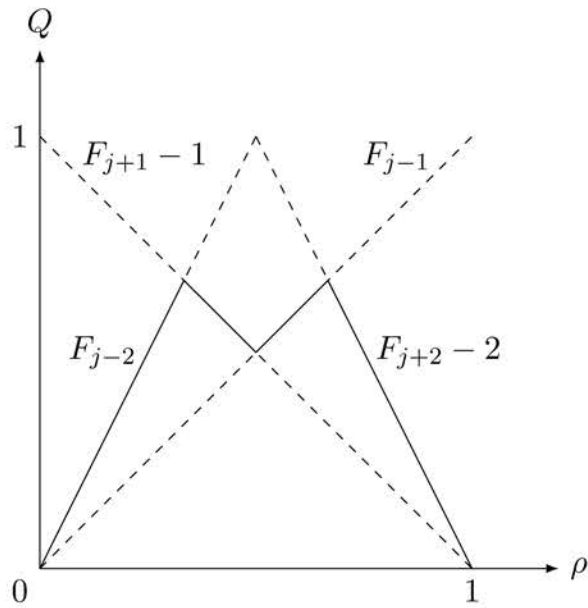
$$\max(\min(2\rho, 1 - \rho), \min(\rho, 2 - 2\rho))$$

↓

$m\rho + a$	→	$F_{j-m}^n - a$
max	→	min
min	→	max

$$\min(\max(F_{j-2}^n, F_{j+1}^n - 1), \max(F_{j-1}^n, F_{j+2}^n - 2))$$

25/41



$$F_j^{n+1} = \min(\max(F_{j-2}^n, F_{j+1}^n - 1), \max(F_{j-1}^n, F_{j+2}^n - 2))$$

26/41

Euler-Lagrange 変換

$$F_j^{n+1} = \min(\max(F_{j-2}^n, F_{j+1}^n - 1), \max(F_{j-1}^n, F_{j+2}^n - 2))$$

↓ Euler-Lagrange 変換

$$F_j^n = \sum_{i=1}^N H(j - x_i^n)$$

$$x_i^{n+1} = \max(\min(x_i^n + 2, x_{i+1}^n - 1), \min(x_i^n + 1, x_{i+2}^n - 2))$$

27/41

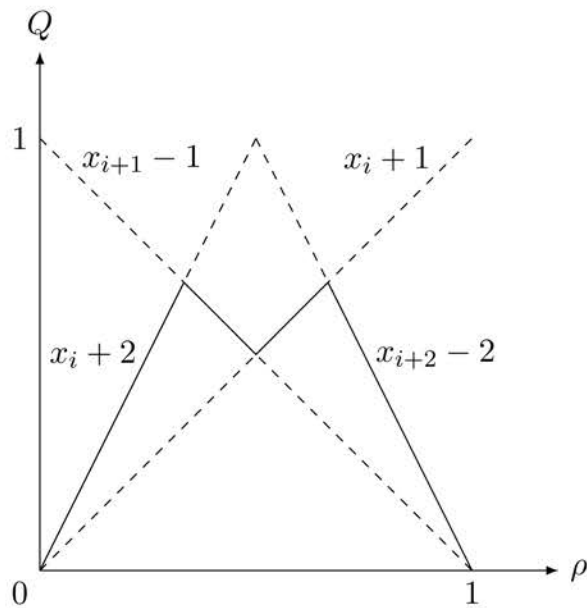
基本図から Lagrange 表現を得る

$$\max(\min(2\rho, 1 - \rho), \min(\rho, 2 - 2\rho))$$

$$\downarrow \quad m\rho + a \rightarrow x_{i+a} + m$$

$$\max(\min(x_i^n + 2, x_{i+1}^n - 1), \min(x_i^n + 1, x_{i+2}^n - 2))$$

28/41



$$x_i^{n+1} = \max(\min(x_i^n + 2, x_{i+1}^n - 1), \min(x_i^n + 1, x_{i+2}^n - 2))$$

29/41

Type-A

m	$N(f)$	$\phi(F_{j-2}, F_{j-1}, F_j, F_{j+1}, F_{j+2})$
1	2863377064	$\max(F_{j-2}, F_{j+2} - 1)$
3	2881267852	$\min(F_{j+1}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 1))$
4	2881398914	$\min(F_{j+2}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 1))$
5	2881464448	$\max(F_{j-2}, F_{j+2} - 2)$
33	3163470978	$\min(F_{j+2}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+1}), \max(F_{j-1} + 1, F_{j+2} - 1))$
34	3163536512	$\min(\max(F_{j-2}, F_{j+1} - 1), \max(F_{j-1}, F_{j+2} - 2))$
38	3167521996	$\min(F_{j+1}, \max(F_{j-2} + 2, F_{j+2} - 1))$
39	3167653058	$\min(F_{j+2}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+1}), \max(F_{j-2} + 2, F_{j+2} - 1))$
40	3167718592	$\min(\max(F_{j-2}, F_{j+1} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
50	3200487104	$\min(\max(F_{j-2}, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-1}, F_{j+1} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
54	3203105320	$\min(\max(F_{j-2}, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
59	3217067968	$\min(\max(F_{j-1}, F_{j+1} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
64	3219686184	$\min(\max(F_{j-1}, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
65	3220209904	$\min(F_j, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
68	3220996108	$\min(F_{j+1}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
69	3221127170	$\min(F_{j+2}, \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
96	3488138024	$\min(\max(F_{j-1}, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+1} - 1))$

30/41

Type-B

m	$N(f)$	$\phi(F_{j-2}, F_{j-1}, F_j, F_{j+1}, F_{j+2})$
2	2881005752	$\max(\min(F_j, F_{j-2} + 1), F_{j+2} - 1)$
13	3099375756	$\min(F_{j+1}, \max(F_j, F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 1))$
14	3099506818	$\min(F_{j+2}, \max(F_j, F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 1))$
15	3099572352	$\min(F_j - 1, F_{j-2}, F_{j+2} - 2)$
53	3202581216	$\min(\max(F_{j-2}, \min(F_j, F_{j+2} - 1)), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
63	3219162080	$\min(\max(F_{j-1}, \min(F_j, F_{j+2} - 1)), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
67	3220734008	$\min(\max(F_j, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+2} - 2))$
95	3487613920	$\min(\max(F_{j-1}, \min(F_j, F_{j+2} - 1)), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+1} - 1))$
98	3489185848	$\min(\max(F_j, F_{j+2} - 1), \max(F_{j-2} + 1, F_{j+1} - 1))$

Okumura, Matsukidaira and Takahashi, Journal of Physics A, Vol.46, No.29,295101 (2013)

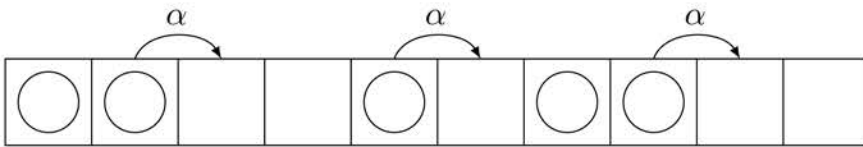
31/41

確率論的粒子セルオートマトン

ASEP

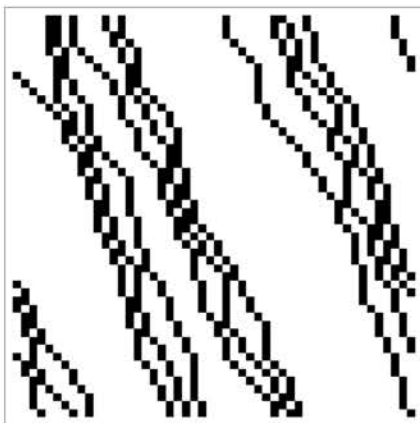
確率入りルール 184

- 右側のセルが空いていたら確率 α で動ける。空いていなかったら、動けない。
- 車の最大速度は 1 である。



32/41

ASEP の時空図



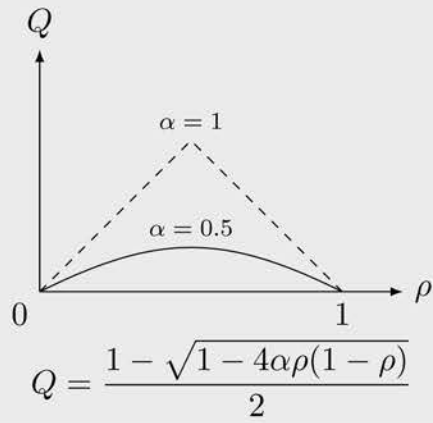
$\rho = 0.2$



$\rho = 0.5$

33/41

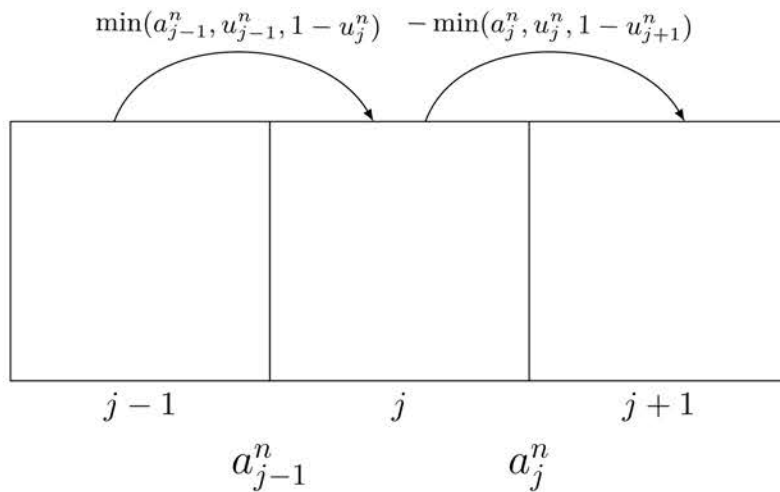
ASEP の基本図



34/41

ASEP の Max-Plus 表現

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \min(a_{j-1}^n, u_{j-1}^n, 1 - u_j^n) - \min(a_j^n, u_j^n, 1 - u_{j+1}^n)$$



35/41

流束と基本図

流束

$$\min(a_{j-1}^n, u_{j-1}^n, 1 - u_j^n)$$

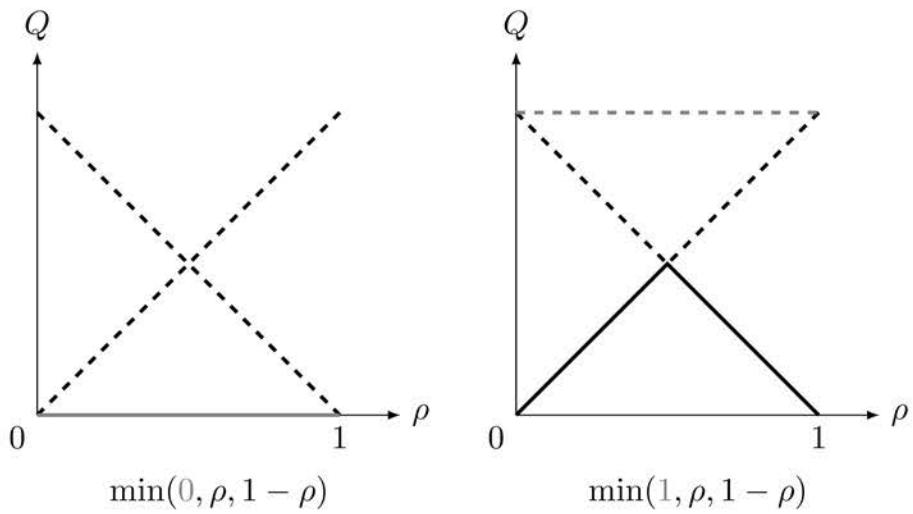
↓

基本図

$$\min(a, \rho, 1 - \rho)$$

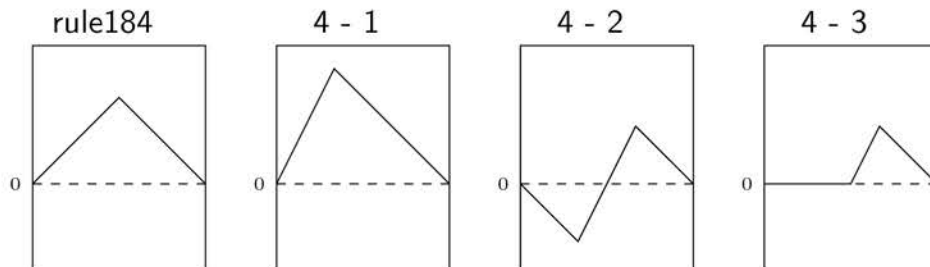
36/41

基本図



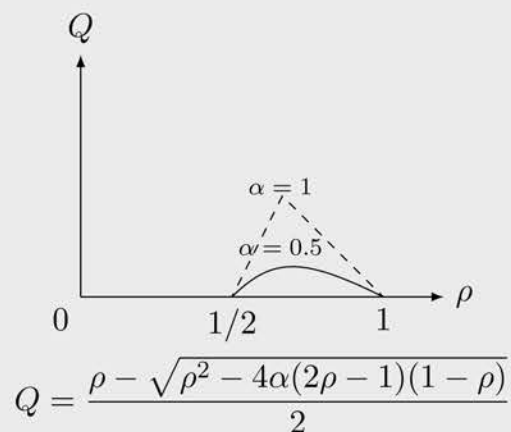
37/41

確率 4 近傍粒子セルオートマトン



38/41

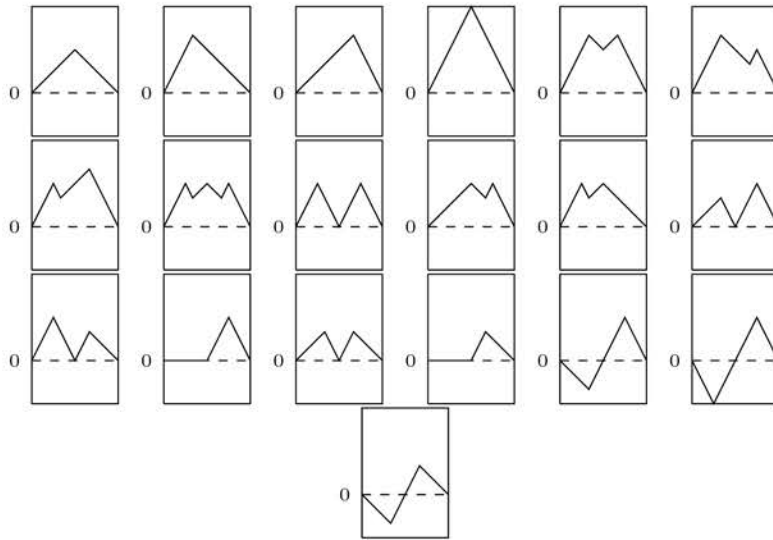
確率 4-3



桑原、池上、高橋、日本応用数学会論文誌 Vol.23 No.1 2013. pp. 1-13

39/41

確率5近傍粒子セルオートマトン



40/41

今後の展望

- 保存量によるセルオートマトンの分類
- 確率化
- 代数的な構造は?
 - ▶ 一般の ECA : \max と \min による束
 - ▶ 粒子系に近いもの (保存量を持つもの? 超離散 Cole-Hopf 変換)

41/41

電子写真設計プロセス革新のための 粉体挙動シミュレータ開発

(Powder flow simulation for electrophotographic process)

宇佐美元宏, リコー (株)

(Motohiro Usami, Ricoh Company, Ltd.)

概要

複写機・レーザープリンタに代表させる電子写真機器設計において計算機シミュレーションの活用を考えると、電子写真特有のものとして、粉体挙動計算が必要となる。現在、離散要素法に電磁気的な作用力を組み込んだ現像剤挙動シミュレータが開発され、機器設計に活用されつつあるが、その適用範囲は限定的である。より広範な活用を実現するためには、粉体シミュレーションの大規模化・高速化が必要であり、その実現に有効な手段として、東工大 TSUBAME に代表される産業利用のために開放された国内の大規模計算機の利用が考えられる。本報告では、スパコンの利用など、将来の電子写真機器設計における計算機シミュレーションの可能性について概説する。

Abstract

We report recent developments of computer simulation for electrophotographic process. Towards faster and larger-scale powder flow simulations, we use a large-scale supercomputer “TSUBAME” at Tokyo Institute of Technology, which is available to projects at outside research institutes and industries.

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会
「非線形数理モデルの諸相:連続, 離散, 超離散, その先」

『電子写真設計プロセス革新のための

粉体挙動シミュレータ開発』

株式会社リコー 宇佐美元宏

電子写真とは

- コピー機やレーザープリンターに用いられる複写技法
- ゼログラフィ(Xerography)、Electrophotographyとも呼ばれる
- 電子写真技術を用いた自動複写機が1960年に発売

電子写真	インクジェット	オフセット印刷
コピー機(複写機) レーザープリンター	インクジェットプリンター	オフセット印刷機
トナー	インク	
粉体	液体/流体	
離散	連続	

アウトライン

- 電子写真とは
- 粉体挙動計算の課題/過去の振り返り
- 粉体挙動計算の高速化技術
 - マルチスレッドによる並列計算
 - 分散コンピュータによる並列計算
 - 新たなハードウェアによる並列計算
- スパコンの活用
 - GPUコンピューティング
 - 学外利用について
 - セキュリティー
 - 計算例
- 設計プロセス革新を目指して

粉体挙動解析の課題/過去の振り返り

- 10年前、電子写真に使える粉体挙動シミュレータはなかった
 - 粉体挙動が関わる設計にもCAE(事前検討支援)ツールを活用したい.
 - 熱流体や構造系とは異なり、粉体計算用のCAEツールがない
粉体を取り扱う計算モデルはある(離散要素法:DEM)
⇒⇒⇒自作する
 - 計算速度向上が大きな技術課題
⇒⇒⇒粗子化(大きなモデル粒子で代表する)
⇒⇒⇒並列計算



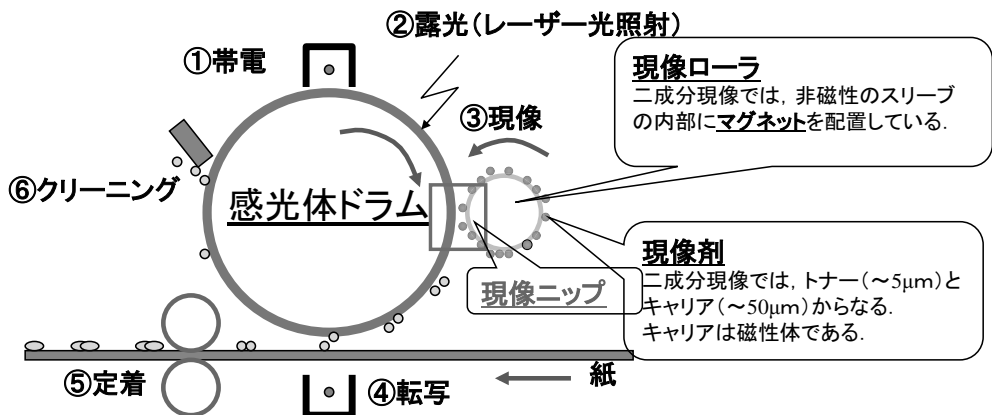
スプーン一杯のトナー
約3g
↓
230億個

粉体挙動計算の高速化

- 過去の振り返り・・・10年前の計算事例紹介

10年前の計算事例紹介

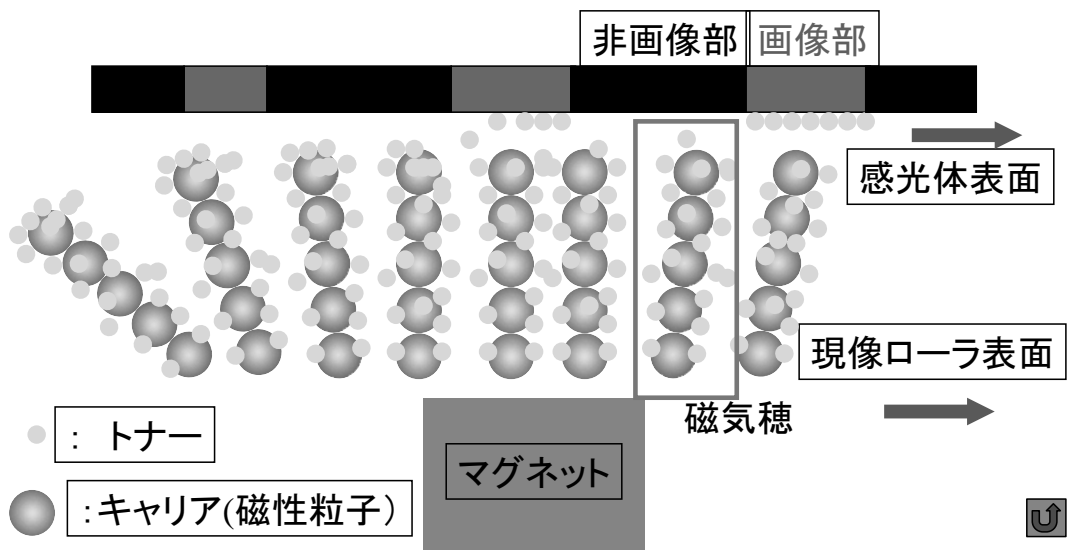
電子写真プロセス



10年前の計算事例紹介

現像ニップにおける粉体挙動

<<二成分現像の例>>



10年前の計算事例紹介

背景と目的

- 電子写真の粉体挙動は磁気力が重要
(二成分現像の場合)
- 現像ニップ部の観察が困難
- 大規模かつ高速な粒子計算の必要性
- PCクラスタを用いた粒子計算の並列化

10年前の計算事例紹介

プログラム開発(1)

<<粒子計算モデル:離散要素法(DEM)>>

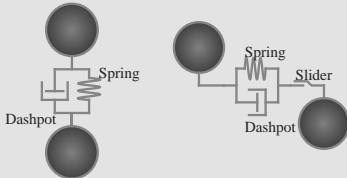
運動方程式

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}_C + \mathbf{F}_B$$

全ての粒子について計算する

接触相互作用

$$\mathbf{F}_C = f_n \mathbf{n} + f_t \mathbf{t}$$



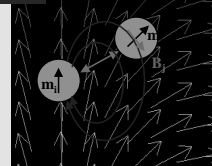
$$f_n = -k_n \delta_n - v_n \dot{\delta}_n$$

$$f_t = -k_t \delta_t - v_t \dot{\delta}_t + \text{sgn}(\dot{\delta}_t) \mu f_n$$

磁気相互作用

$$\mathbf{F}_B = (\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{B}$$

- m: magnetic moment
- B: magnetic flux density
- F_B : magnetic interaction force
- μ_0 : Permeability of free space
- μ_r : Relative permeability of particle
- B_{ex} : External magnetic field
- d: Radius of a particle



$$\mathbf{m} = \frac{4\pi}{\mu_0} \frac{\mu_r - 1}{\mu_r + 2} d^3 (\mathbf{B}_{ex} + \mathbf{B}_{int})$$

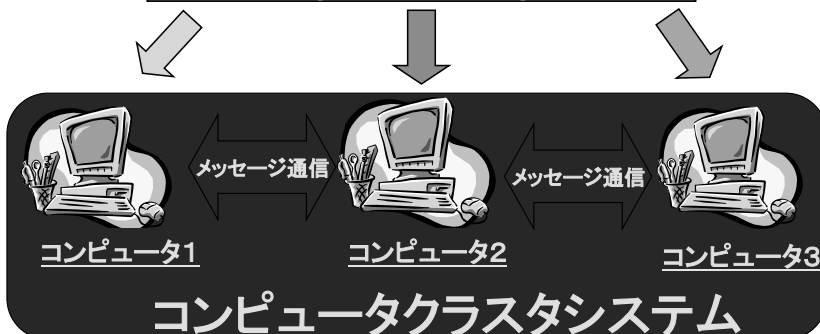
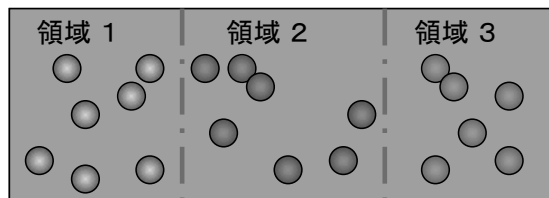
$$\mathbf{B}_{int} = \sum \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ji}}{|\mathbf{r}_{ji}|^5} \mathbf{r}_{ji} - \frac{\mathbf{m}_j}{|\mathbf{r}_{ji}|^3} \right)$$

カットオフ距離: $D_c = 16d$

10年前の計算事例紹介

プログラム開発(2)

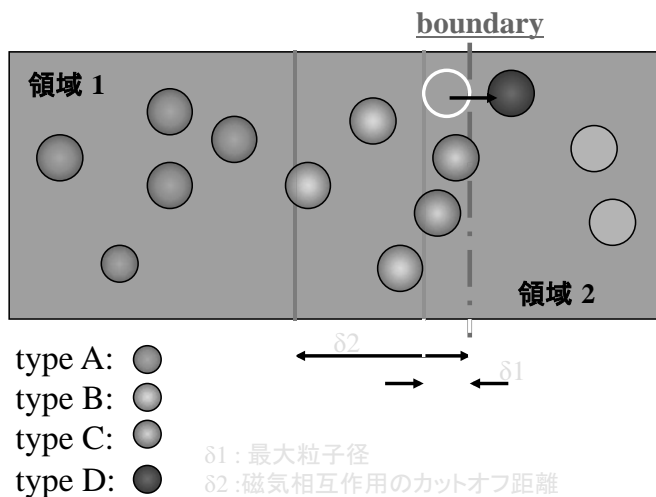
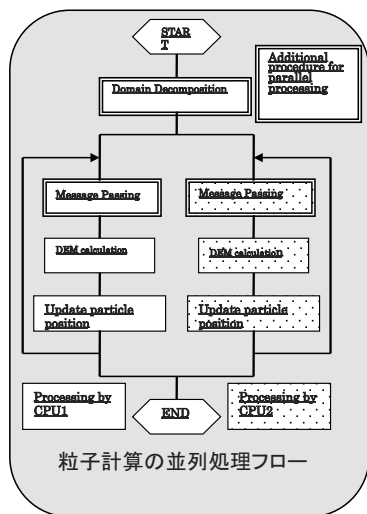
<<粒子計算の並列化>>



10年前の計算事例紹介

プログラム開発(3)

<<粒子データの送受信>>



B,C,Dに分類された粒子データが領域2の粒子挙動計算に必要となる。

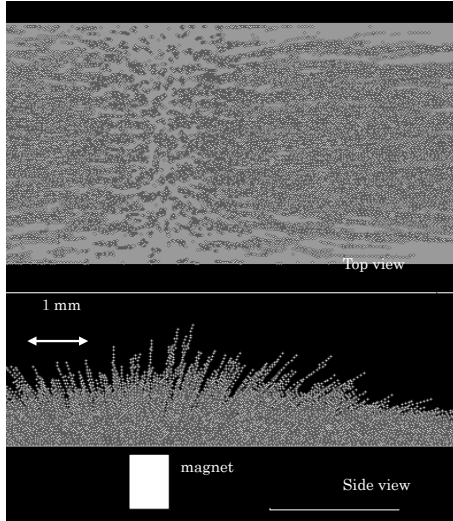
10年前の計算事例紹介

PCクラスタの仕様

- 各ノードのハードウェア仕様
 - Dual Intel Xeon Processor (2.2GHz)
 - 512MB RDRAM
 - Intel Pro/100 NIC on M/B
- ノード数(CPU数): 6(12)
- OS: REDHAT Linux7.2J
- MPI: mpich1.2.1
- 費用: \1,000,000 (2003年当時の価格)

10年前の計算事例紹介

磁気相互作用を考慮した計算結果



各粒子間の磁気相互作用を考慮することで、静的な磁気穂形成を再現

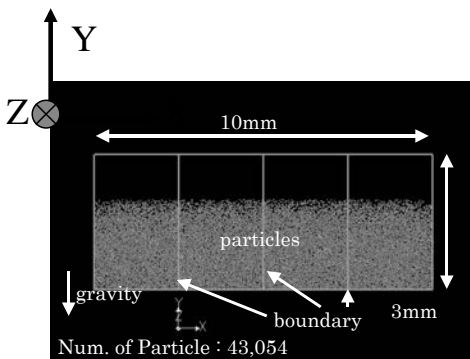
PCクラスタを用いた並列計算により、従来比5倍程度の高速化を達成

粒子径: 55 μ m (平均値)
粒子数: 約40,000個

10年前の計算事例紹介

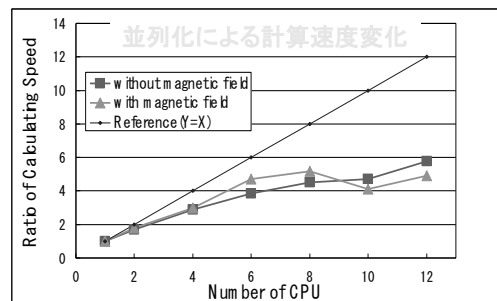
PCクラスタの計算性能評価

<< 粒子計算での速度比較 >>



Initial state of particle conformation for performance test

- 粒子数 : 43,054
- 粒子径 (ave.): 55 $\times 10^{-6}$ [m]
- 計算領域 :
X: 10 $\times 10^{-3}$ [m]
Y: 3 $\times 10^{-3}$ [m]
Z: 3 $\times 10^{-3}$ [m]



計算時間と通信時間の比

# of CPU	Elapsed Time E (sec)	data transfer time - D (sec)	E/D
1	2,166	0	0.00
2	1,199	2	0.17
4	729	8	1.10
6	461	22	4.78
8	420	40	9.54
10	526	58	11.0
12	441	100	22.7

10年前の計算事例紹介

搬送過程での磁気穂形成

<<動的な磁気穂形成の再現>>

Plate speed : 0.1 [m/s] (X direction)

Blade gap : 0.5×10^{-3} [m]

Particle Num.: 94,287

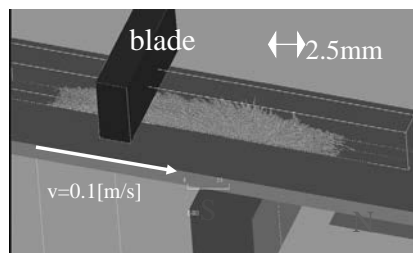
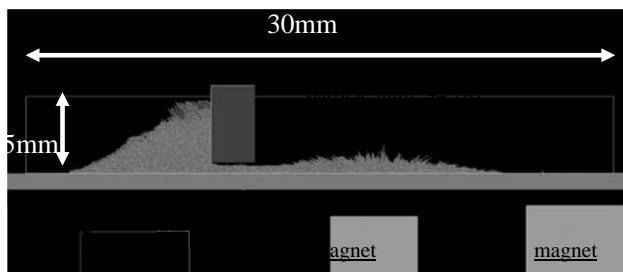
Time step : 5×10^{-7} [Sec]

Calculating area :

X: 30×10^{-3} [m]

Y: 3.5×10^{-3} [m]

Z: 1.5×10^{-3} [m]



Z ⊗ → X

計算時間: 約1週間



10年前の計算事例紹介

まとめ

- 並列計算可能な粒子シミュレータを開発した.
- PCクラスタを用いた並列計算(12CPU)で、計算速度を6倍程度向上させることができた.
- 磁気相互作用のある電子写真の粉体挙動について、現実に近い粒子密度(現像ニップ近傍で粒子数10万規模)での計算解析の見通しを得た.

10年前の計算事例紹介

- これからわかること
 - 磁気相互作用を考慮した計算ができ、磁気穂形状も再現できる
 - 粒子数は10万個程度なら、何とか使える
 - MPI並列は有効だが、ノード増加による通信負荷が問題.

現在の状況

- 電子写真に使える自作の粉体挙動シミュレータがある.
 - 活用範囲は限定的だが、とりあえず設計・開発で活用
- 10年間で計算機環境は大きく変化
 - マルチスレッド(ノード内)による並列計算能力向上
 - 分散コンピューティング(ネットワーク通信)による並列計算能力向上
 - 新たなハードウェアによる並列計算
- 粉体シミュレータの新たな可能性

現在の状況：マルチスレッドによる並列計算

- CPUのマルチコア化
 - CPUクロックは頭打ちながら，計算性能は向上
 - PCで6コア，WSだと16コア～60コア（XeonPhi）の並列計算が可能
- OpenMPの性能向上
 - 少ノードであれば，MPIと遜色ない性能向上
- 64ビットOS
 - メモリの制約が大幅に緩和

現在の状況：分散コンピューティングによる並列計算

- 通信性能の大幅アップ
 - 100base-T Ethernet (100Mbps)から InfiniBand (40Gbps)へと 10年間で400倍に
- Thread safe MPI
 - マルチスレッド並列プログラム（OpenMP）でもMPI化が可能
- 開発環境は少しずつ進展
 - MicrosoftもMPI開発環境を提供している。

現在の状況：新たなハードウェアによる並列計算

- GPGPU
 - グラフィクス用のチップGPUを汎用計算に使う
 - NVIDIAでは, CUDAというC言語拡張の開発環境を無償提供
 - CPUとの比較で100倍以上の高速化の報告例もある(数年前).

現在の状況：まとめ

- ノード間通信の飛躍的な高速化は, 分散コンピューティングの大規模化を可能にする.
- ノード内の計算は, スレッド並列の性能向上と新たなハードウェアGPGPUにより, 飛躍的に向上させる.
- これらの要素を備えた計算機/スパコンが日本にある
 - TOP500の40位内にランクインしている日本のスパコンが5つ (2014年6月時点)

TOP500:世界で最も高速なコンピュータシステムの上位500位までを定期的にランク付けするプロジェクト

TOP500

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	National Super Computer Center in Guangzhou China 天河2号(中国)	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT Xeon Phi	3120000	33862.7	54902.4	17808
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560640	17590.0	27112.5	8209
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1572864	17173.2	20132.7	7890
4	RIKEN Advanced Institute for Computational Science Japan 京(理研)	K computer, SPARC64 VIIIx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705024	10510.0	11280.4	12660
13	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan TSUBAME2.5(東工大)	TSUBAME 2.5 - Cluster Platform SL390s G7, Xeon X5670 6C 2.93GHz, Infiniband QDR, Hitachi K20x NEC	76032	2785.0	5735.7	1399
30	International Fusion Energy Research Centre (IFERC), EU(F4E) - Japan Broader Approach Collaboration Japan ヘリオス(IFERC)	Helios - Bullx B510, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband QDR Full SA Hitachi	70560	1237.0	1524.1	2200
36	Information Technology Center, The University of Tokyo Japan Oakleaf-FX(東大)	Oakleaf-FX - PRIMEHPC FX10, SPARC64 IXx 11C 1.848GHz, Tofu interconnect Hitachi	76800	1043.0	1135.4	1177
37	Research Institute for Information Technology, Kyushu University Japan QUARTETTO(九大)	QUARTETTO - HA8000-1c HT210/PRIMERGY CX400 Cluster, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20/K20x, Xeon Phi Hitachi/Fujitsu	222072	1018.0	1502.2	

TSUBAME2.0の活用(3年前)

- GPUコンピューティング
- 学外利用について
- セキュリティーについて
- 計算事例

TSUBAME2.0の活用：GPUコンピューティング

- 東工大のTSUBAME2.0はTOP500の5位にランクインする計算機システム(2011年時点)
- 計算性能の90%はGPU
 - 「TSUBAME2.0を使う=GPUを使う」と考えてよい
 - 必然的にGPUコンピューティングになる

TSUBAME2.0の活用：学外利用について

- 最先端研究施設の産業利用の推進
 - 国の施策として実施
 - 多額の税金を投じたにも関わらず、活用されていない設備が多かった・・・
- TSUBAME2.0も有償で学外利用が可能
 - 成果公開と非公開の2パターン
 - トライアルユースの公募も継続中

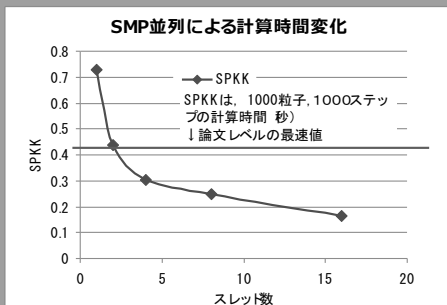
TSUBAME2.0の活用：セキュリティについて

- 学外からは、公開鍵によるssh接続に限定
 - 使い勝手とセキュリティが両立している
- 一般的なセキュリティレベルと同等
 - LINUXにおける一般的なレベル
 - 多少の不安を感じる人は少ないだろう。
- 考え方・使い方次第
 - 試行段階であればOKだが・・・
 - 実際の設計利用だとNGになるかも・・・

TSUBAME2.0の活用：計算例（一部）

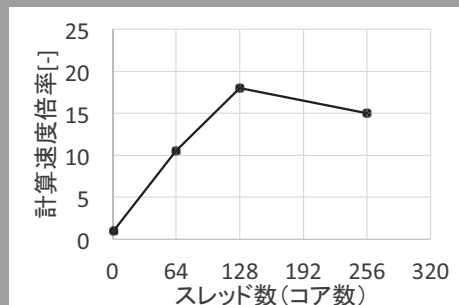
- 粒子計算（離散：DEM）と電界計算（連続場：差分法）の連成計算
 - 今までは計算時間がかかりすぎて、現実的では無かった
- OpenMP+MPIの大規模ハイブリッド並列計算(256コア)
 - GPGPUの検討も行ったかったが、まずはCPUベースの検討を行った

(1) 粉体計算部分の高速化



12スレッドで4倍程度

(2) 電界計算部分の高速化



128スレッドで18倍程度、256スレッドで悪化

効率が悪く、まだチューニングが必要⇒実際に計算することで課題が見えた

設計プロセス革新の現実味

- 計算機性能向上
 - 10年前は、12CPUのMPI並列計算で10万粒子の計算に1週間
 - スパコンの世界では、10年間で計算性能が250倍～1000倍に
⇒1週間あれば、2千5百万～1億粒子の計算ができる。
 - さらに10年後、250倍～1000倍の計算性能になれば・・・
⇒2千5百万～1億粒子の計算が40分で計算できるようになる？
 - 現像部の画像形成予測には十分な粒子数
- スパコンの活用
 - 日本が誇るスパコンを活用しない手はない。
 - 10年後の計算機性能に期待し、いまから設計プロセス革新のためのプログラム開発とノウハウを蓄積を図る。
 - 実際に計算することで設計プロセス革新に現実味が出てくる

まとめ

- 世界トップクラスのスパコンが容易に使える環境がそこにある
- 計算機の性能向上により、粉体シミュレータをCAEツールとして活用する電子写真設計プロセス革新に現実味が出てきた
- 設計プロセス革新を実現したところが、この業界で生き残る

粉体のジャミング転移の臨界的性質

(Critical behavior of jamming transition)

大槻道夫, 島根大・総合理工

(Michio Otsuki, Shimane University)

概要

散逸を持つ粒子の集合である粉体は、密度が低い場合は微小な応力で容易に流れる一方、密度が高い場合は剪断応力がしきい値（降伏応力）を超えない限り流動化しない。これらの密度による振る舞いの変化は、液体的な状態から固体的な状態へのある種の転移と考えられ、近年になってジャミング転移と呼ばれている。この転移点であるジャミング転移密度の近傍では、ダイナミクスや物性を含めて、様々な臨界的性質が観測される。こうした特異的な性質に関して、離散粒子シミュレーションや現象論によって明らかになってきた成果について報告する。

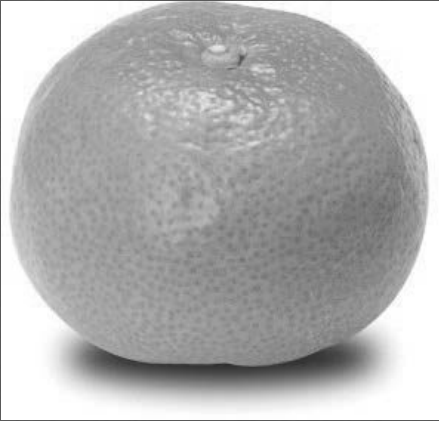
Abstract

Various critical properties can be observed around the jamming transition in granular systems. We report recent results based on discrete particle simulation and phenomenological study.

物質の分類

固体

- 有限の力を支える



流体

- 無限小の力で流れる

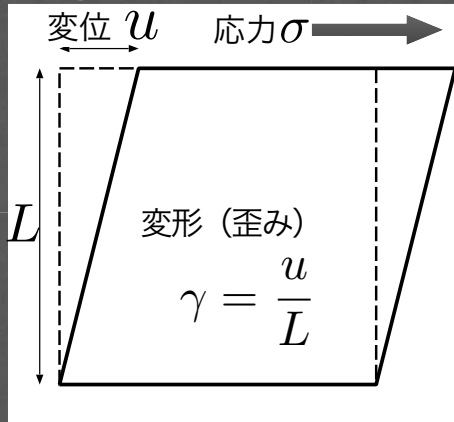


力（応力 σ ）に対する挙動

応力 σ ：単位面積に加わる力

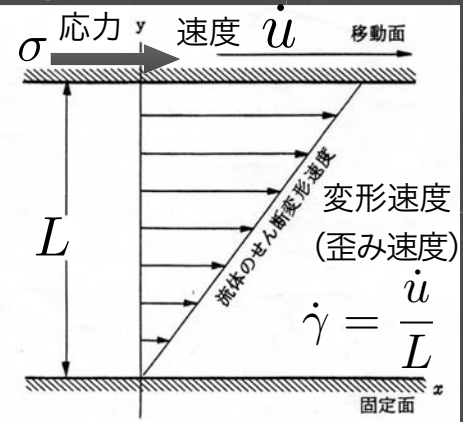
固体

- 有限の力を支える



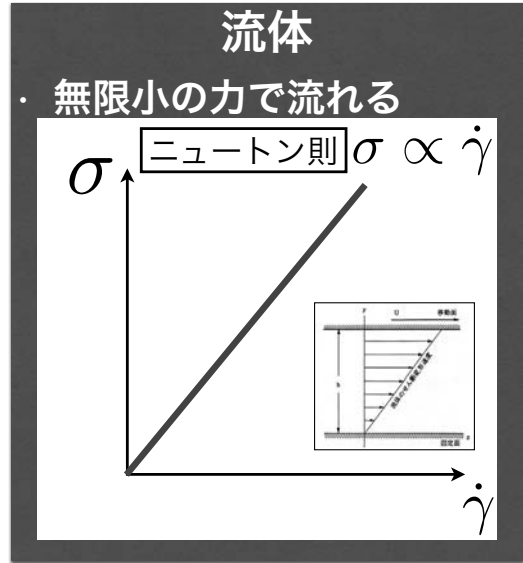
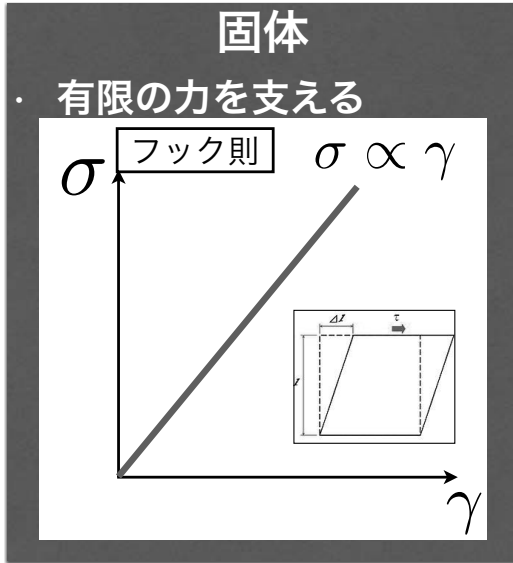
流体

- 無限小の力で流れる



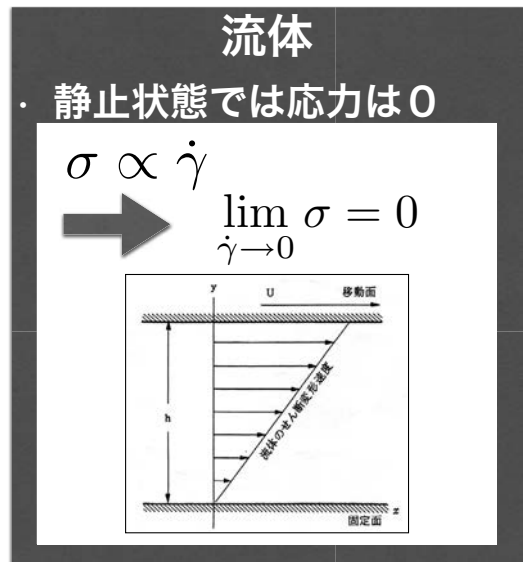
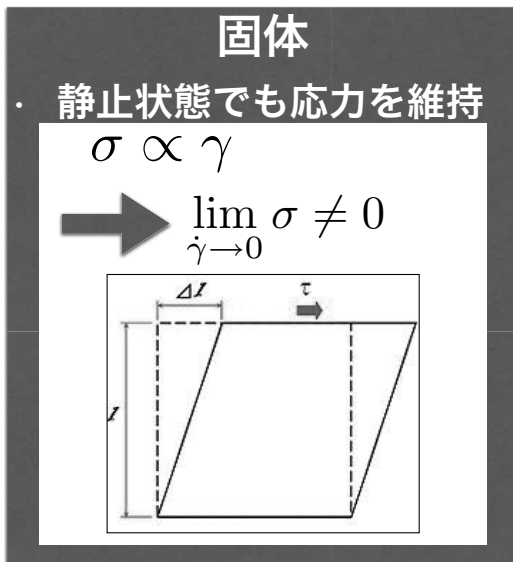
応力と変形・流動

応力： σ ，歪み： γ ，歪み速度： $\dot{\gamma}$

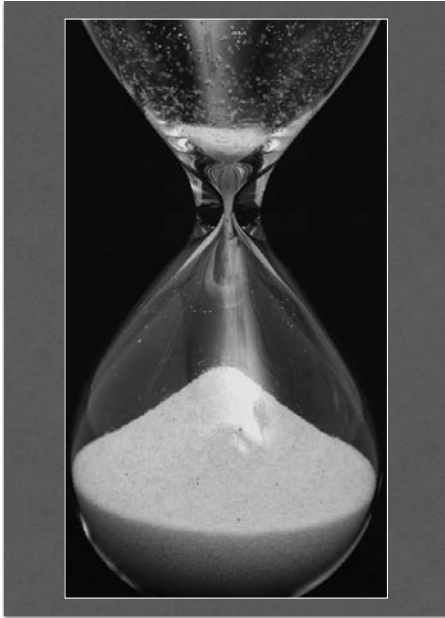


固体・流体の分類法

応力： σ ，歪み： γ ，ひずみ速度： $\dot{\gamma}$



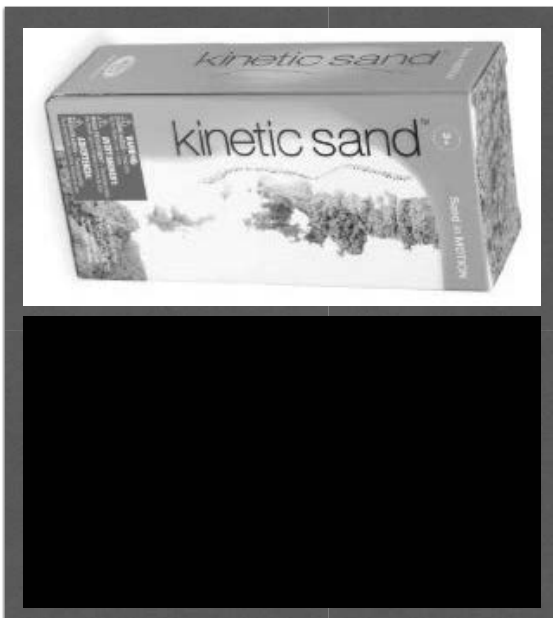
砂 (粉体) : 固体? 流体?



- ・ 粉体 : マクロな粒子の集合体
- ・ 例 : 砂、粉、岩
- ・ 粒子の衝突でエネルギーが散逸
- ・ 要素は固体⇒全体としては?



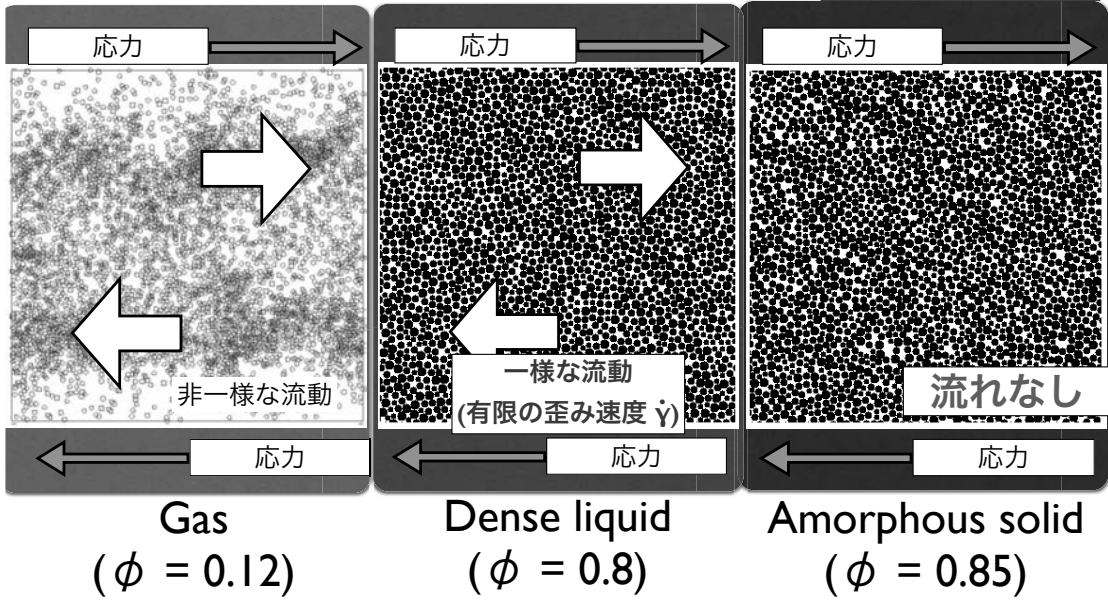
砂 (粉体) : 固体? 流体?



粉体の状態

系全体の密度を固定して応力を加える

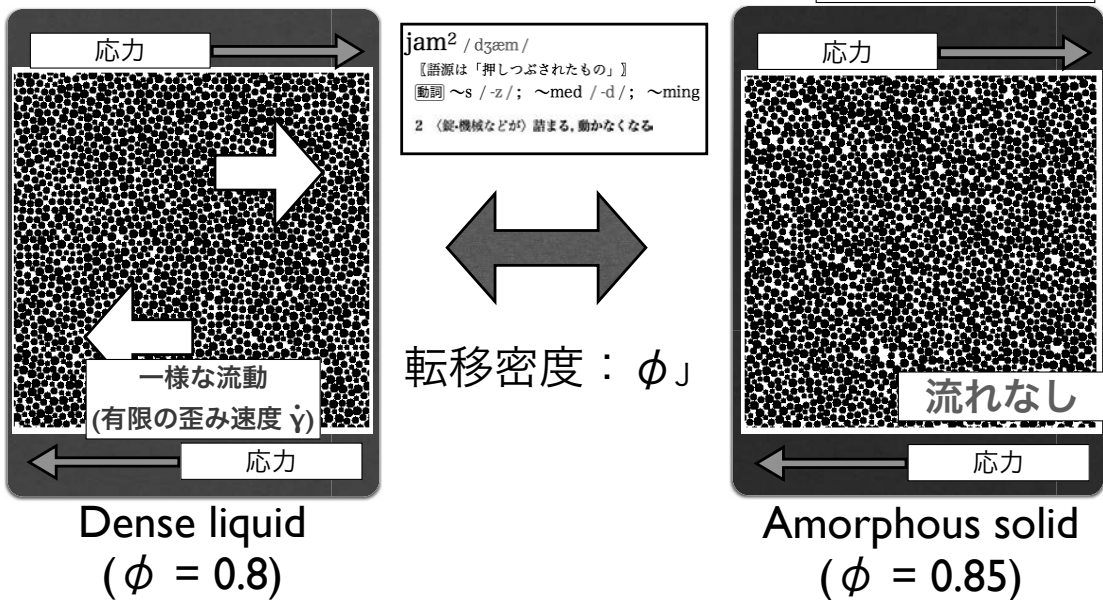
密度 (体積分率) : ϕ



ジャミング転移

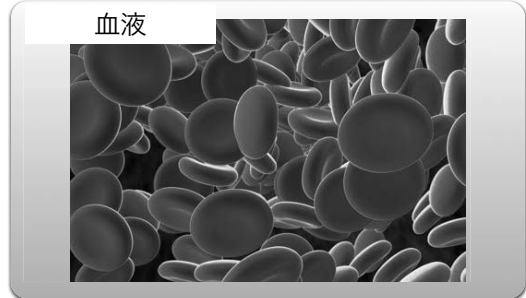
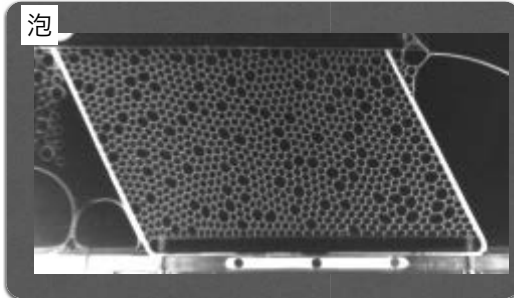
系全体の密度を固定して剪断応力を加える

密度 (体積分率) : ϕ



様々な系のジャミング転移

熱揺らぎの無い”粒子”の集合系で普遍的にみられる



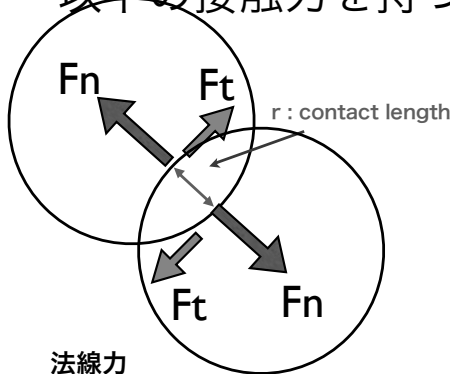
問題

- ・ ジャミング転移を相転移として調べる
- ・ ジャミング転移点近傍で粉体はどのように振る舞うのか？(臨界的性質)

粉体のモデル

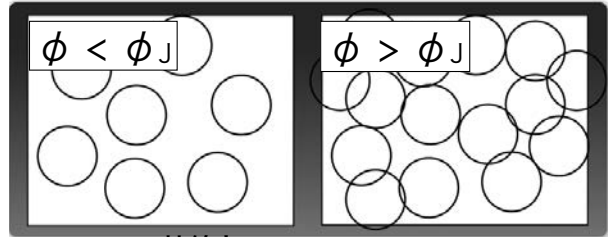
離散要素法

以下の接触力を持つ多体粒子系(粉体の定性的挙動を再現)



法線力

- $F_n = k r^\Delta - \eta \dot{r}$
 - Elastic part
 - Dissipative part
- $\Delta = 1$ (Disk)
- $\Delta = 3 / 2$ (Sphere)



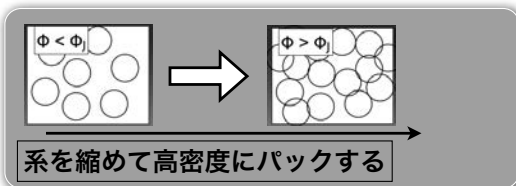
接線力

- 摩擦係数 : μ
- $F_t < \mu F_n$ (クーロンの摩擦則)
- Frictionless : $\mu = 0$
- Frictional : $\mu > 0$

基本はFrictionless → 後にFrictionalの影響

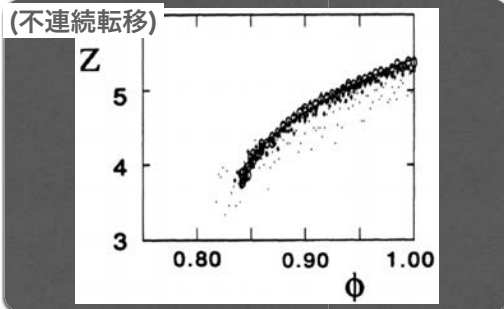
ジャミング転移

staticな物理量の臨界的性質



C. S. O'Hern, et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 075507 (2002).

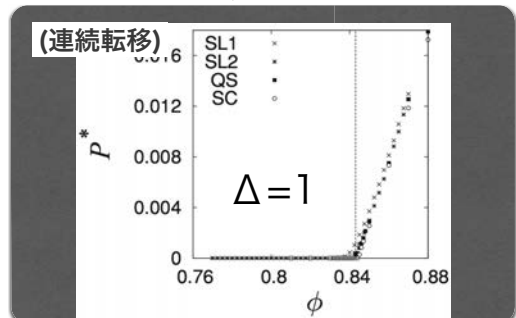
1 粒子あたりの接触点数 Z



$$Z = \begin{cases} 0, & \phi < \phi_J \\ Z_c + a(\phi - \phi_J)^{1/2}, & \phi > \phi_J \end{cases}$$

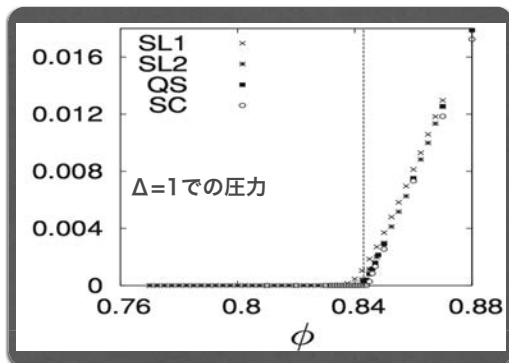
高密度領域での固体的挙動の発生

圧力 P



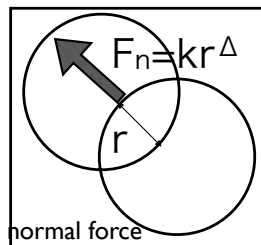
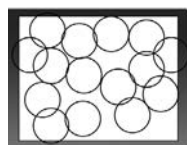
$$P = \begin{cases} 0, & \phi < \phi_J \\ b(\phi - \phi_J)^\Delta, & \phi > \phi_J \end{cases}$$

圧力の臨界的性質



$$P = \begin{cases} 0, & \phi < \phi_J \\ b(\phi - \phi_J)^{y'}, & \phi > \phi_J \end{cases}$$

接触力： F_n



考察

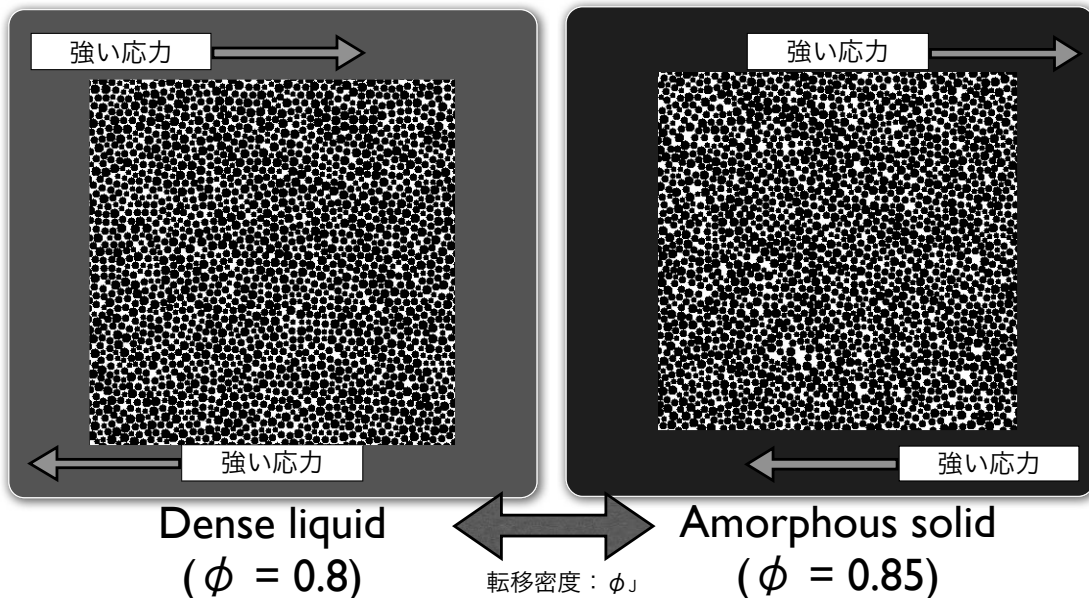
圧力 P は接触力 F_n に比例
 \Rightarrow 接触力は接触距離の Δ 乗
 \Rightarrow 接触距離 r は転移密度 ϕ_J で0
 $\Rightarrow r$ は転移密度からのずれ $(\phi - \phi_J)$ に比例

$$y' = \Delta$$

粉体の流動性

高密度状態でも強い応力を加えれば流動する

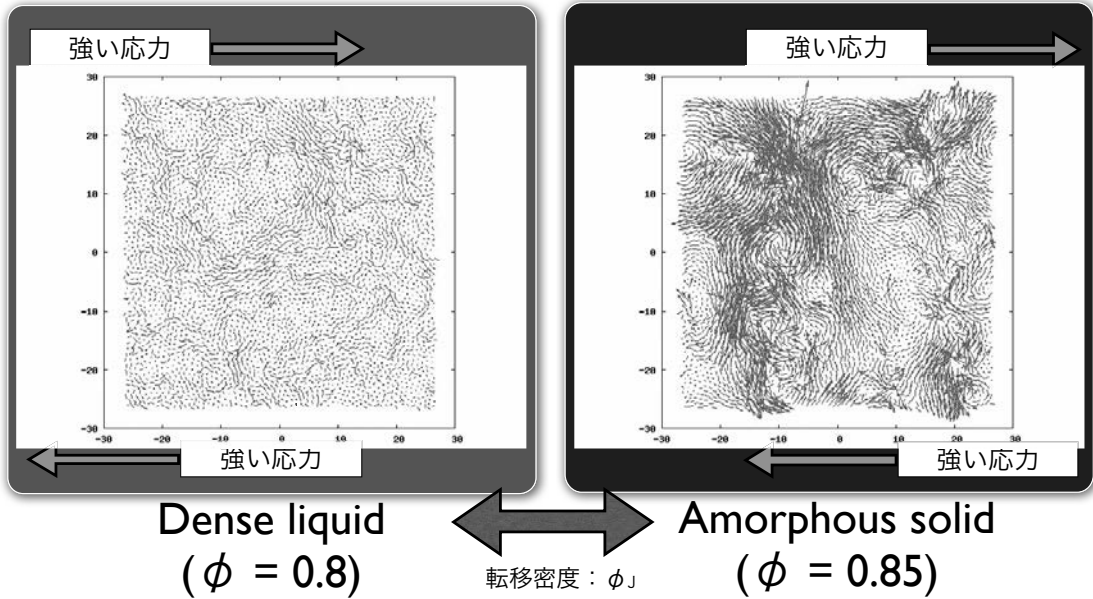
密度 (体積分率) : ϕ



粉体の流動性

剪断粉体の速度揺らぎ

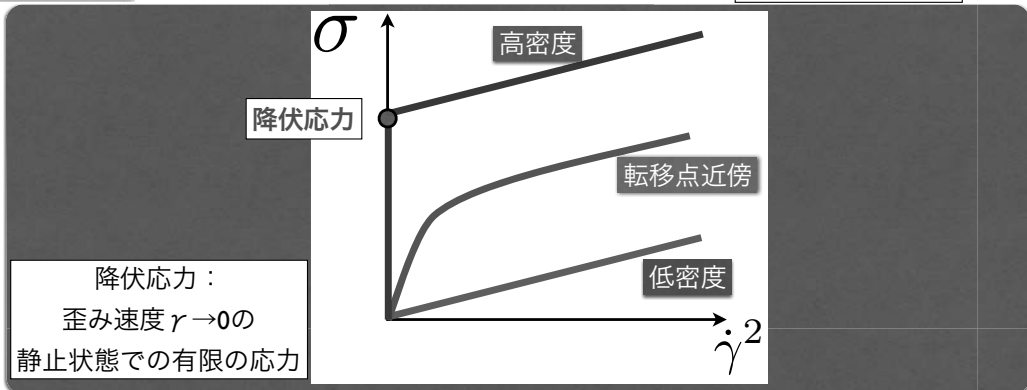
密度 (体積分率) : ϕ



応力と歪み速度



応力 σ , 歪み速度 $\dot{\gamma}$



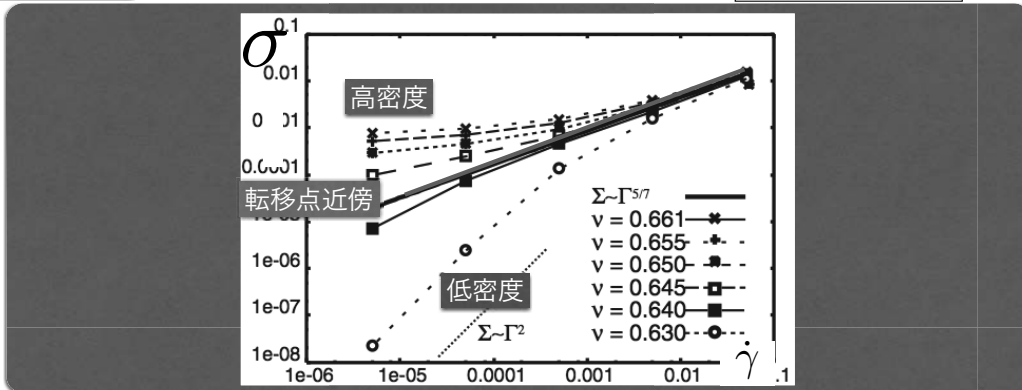
- 低密度領域では歪み速度の2乗に比例 (液体的な挙動: 冪は粉体特有)
- 高密度領域では降伏応力が発生 (固体的挙動・静止摩擦の発生)
- 中間領域では臨界的な振る舞い



ジャミング転移

剪断系でのレオロジー特性 (外場の大きさと流動の関係)

T. Hatano, M. Otsuki, and S. Sasa, JPSJ. 76, 023001(2007).



$$\sigma \propto \begin{cases} \dot{\gamma}^2 (\phi_J - \phi)^{-a} & \text{for } \phi < \phi_J \\ \dot{\gamma}^b & \text{for } \phi \sim \phi_J \\ (\phi - \phi_J)^c & \text{for } \phi > \phi_J \end{cases}$$

3つの領域を特徴付ける
 臨界指数 a, b, c
臨界指数の値は？

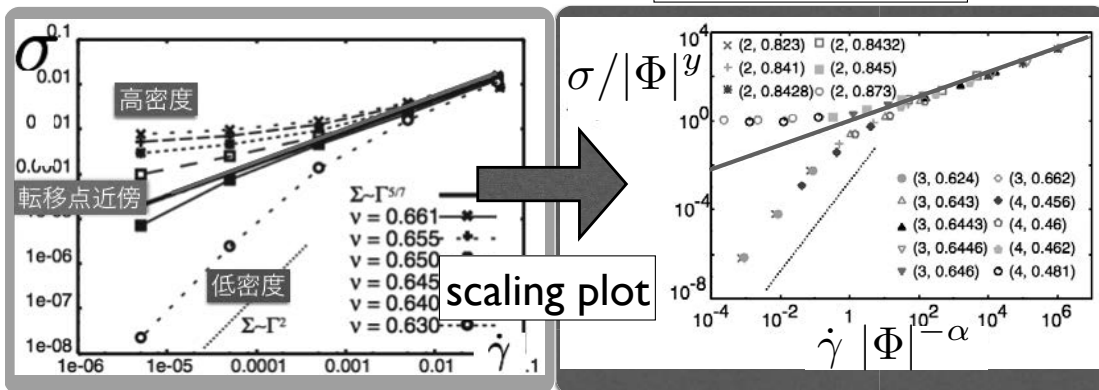
私的な興味としては粉体の液体的でも固体的でもない振る舞いを特徴付けるbが知りたい

臨界スケーリング

T. Hatano, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 123002 (2008).

3つの領域のデータがきれいにスケールされる

応力 σ , 歪み速度 $\dot{\gamma}$, 密度 ϕ



$$\sigma \propto \begin{cases} \dot{\gamma}^2 (\phi_J - \phi)^{-a} & \text{for } \phi < \phi_J \\ \dot{\gamma}^b & \text{for } \phi \sim \phi_J \\ (\phi - \phi_J)^c & \text{for } \phi > \phi_J \end{cases}$$

$$\sigma = |\Phi|^y \mathcal{S}_{\pm}(\dot{\gamma} |\Phi|^{-\alpha})$$

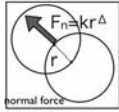
($\Phi = \phi - \phi_J$)

独立な指数は二つ
臨界指数の値は？

$a = 2\alpha - y, \quad b = y/\alpha, \quad c = y,$

臨界指数の理論 (結果のみ)

$$\sigma = |\Phi|^y S_{\pm}(\dot{\gamma} |\Phi|^{-\alpha})$$

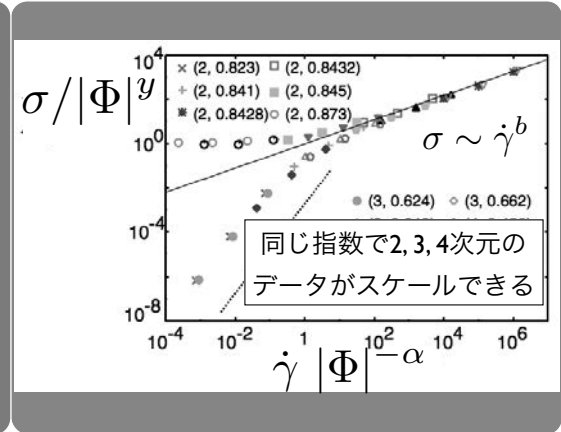
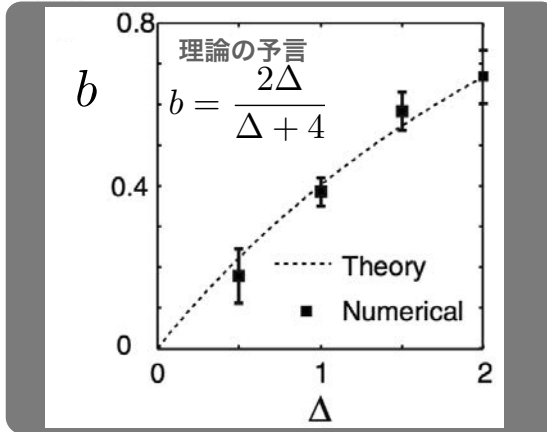


応力 σ , 歪み速度 $\dot{\gamma}$

$$y = \Delta, \alpha = (\Delta + 4)/2$$

$$b = y/\Delta = 2\Delta/(\Delta + 4)$$

圧力の指数の導出と類似の現象論

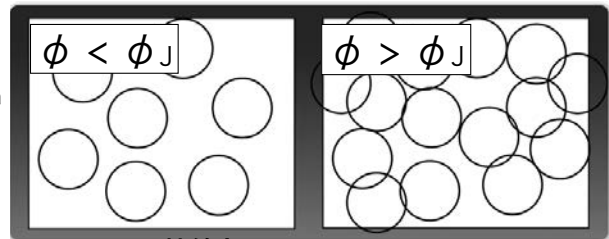
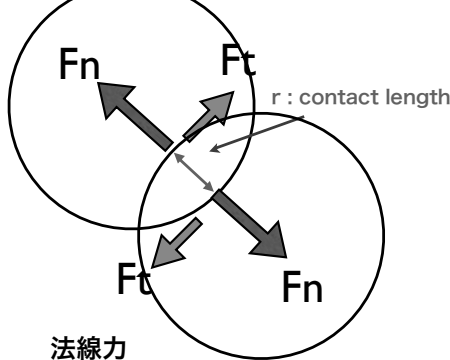


● 臨界指数は相互作用のタイプ (Δ) に依存する

M. Otsuki and H. Hayakawa, PTP. **121**, 647 (2009). PRE **80**, 011308 (2009).

粉体のモデル

以下の接触力を持つ多体粒子系 (粉体の定性的挙動を再現)



接線力

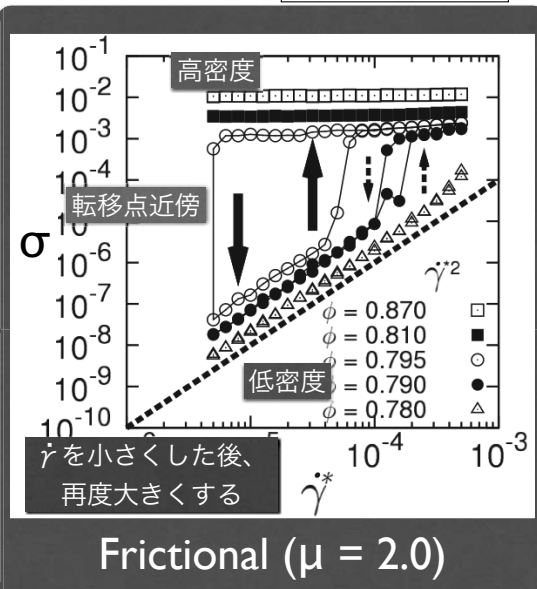
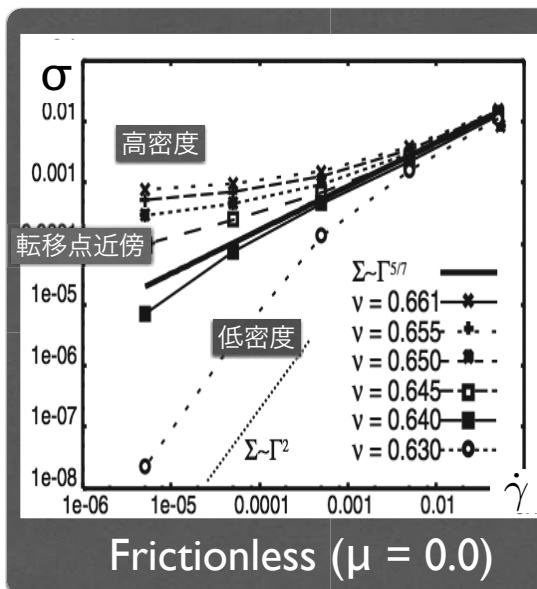
- $F_n = k r^\Delta - \eta \dot{r}$
Elastic part Dissipative part
- $\Delta = 1$ (Disk)
- $\Delta = 3/2$ (Sphere)

- 摩擦係数 : μ
- $F_t < \mu F_n$ (Coulomb's friction)
- Frictionless : $\mu = 0$
- Frictional : $\mu > 0$

基本はFrictionless → 後にFrictionalの影響

粒子間摩擦の影響

応力 σ , 歪み速度 $\dot{\gamma}$



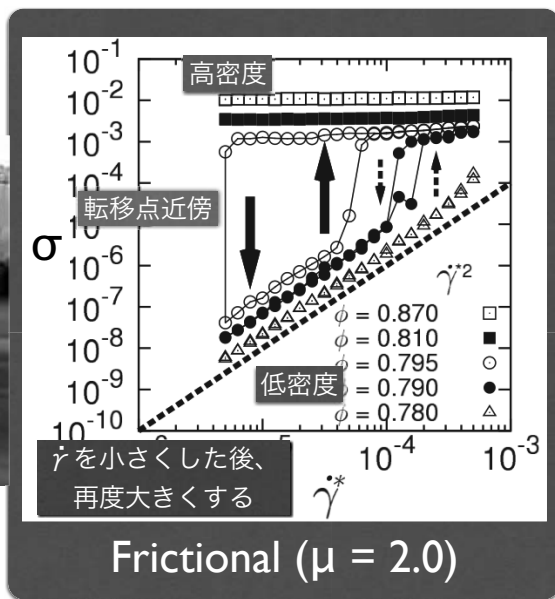
ジャミング転移点近傍で履歴依存性

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

粒子間摩擦の影響



コーンスターチのペースト

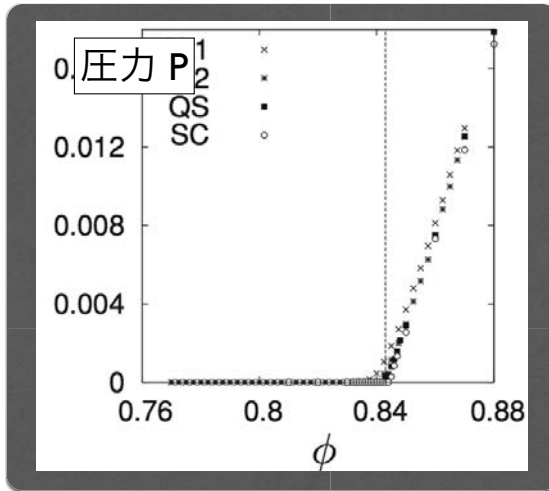


歪み速度の違いで液体から固体へ

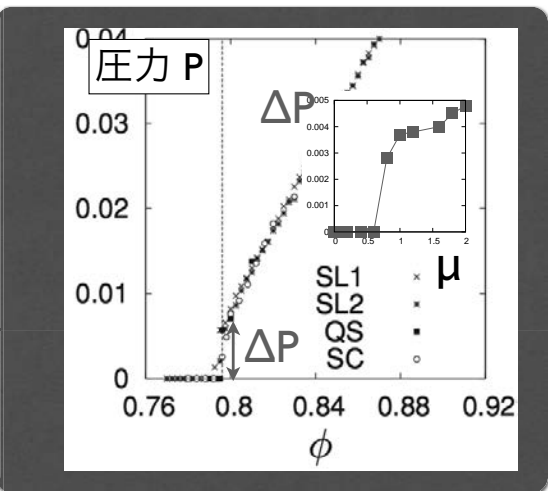
Shear thickening

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

粒子間摩擦の影響



Frictionless ($\mu = 0.0$)
連続転移

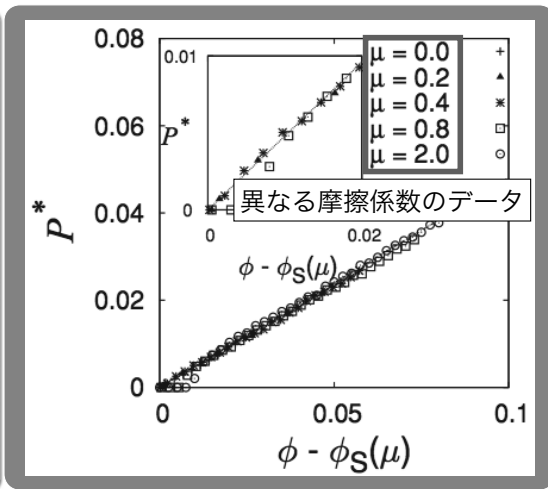
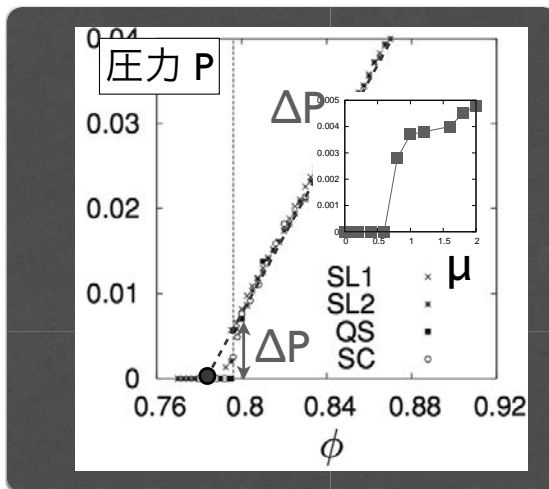


Frictional ($\mu = 2.0$)
不連続転移

- 摩擦が入ると圧力も不連続転移を示す

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

粒子間摩擦の影響

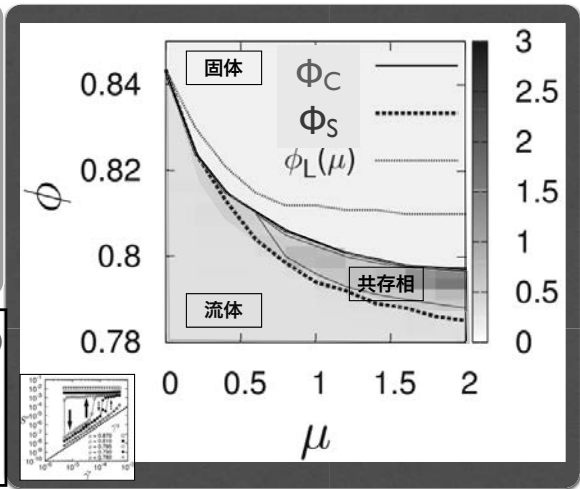
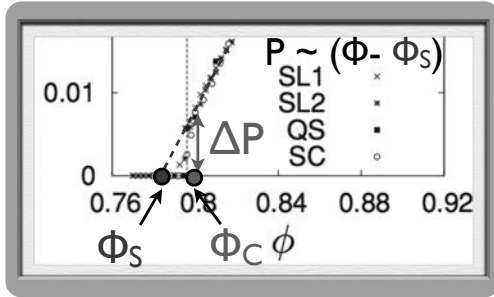


- スケーリングは普遍： $P(\phi, \mu) = a[\phi - \phi_S(\mu)]^\Delta$
- 異なる摩擦係数でも転移点をずらすだけで一致する

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

ジャミング転移の相図

グレースケールは履歴依存性の面積



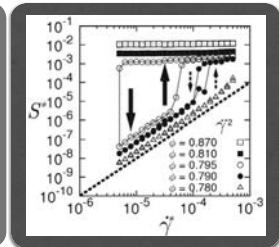
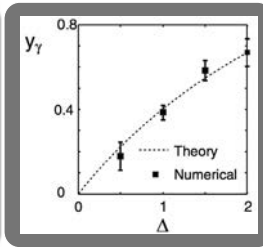
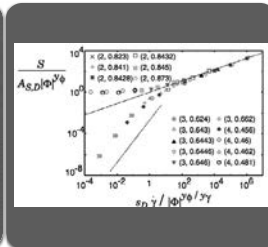
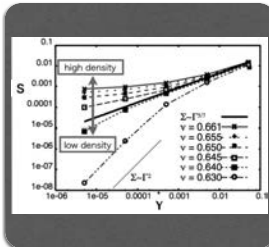
ϕ_c : 圧力が0になる点 (真の臨界点)
 ϕ_s : 圧力のスケールを支配する点 (仮想的な臨界点)

- 粒子間摩擦の影響で転移点が複数に分裂する
- 二つの摩擦係数の間の領域で履歴依存性が発生

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

まとめ：ジャミング転移

- 液体的状態から非結晶固体への転移
- 転移点近傍で様々な臨界的挙動
- 次元依存性はみられない
- 臨界指数、転移のタイプは相互作用に依存



M. Otsuki and H. Hayakawa, PTP. **121**, 647 (2009). PRE **80**, 011308 (2009).

M. Otsuki and H. Hayakawa, PRE **83**, 051301 (2011).

パーコレーション電気伝導の数理

(Percolation model for conductivity)

松谷茂樹, キヤノン(株)

(Shigeki Matsutani, Canon Inc.)

概要

連続パーコレーションモデルにおける電気伝導率の数値解析結果を示した後に、その背景にある数理科学的な構造（擬等角写像構造、フラクタル構造など）について紹介する。

Abstract

We report our numerical results on the electric potential distribution over a two-dimensional continuum percolation model. We then discuss the mathematical structure hidden behind, such as quasi-conformal structure, fractal structure.

パーコレーション電気伝導の数理 ～フラクタル構造について～

2014年8月7日(木)
九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所

キヤノン(株)
解析技術開発センター
数理工学研究部
松谷茂樹
2014年8月7日

1

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

2

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

3

キヤノンの関わる製品

カメラ コピー機 LBP インク 医療X 半導体露
ジェット 線装置 光装置 ...

関係する物理現象

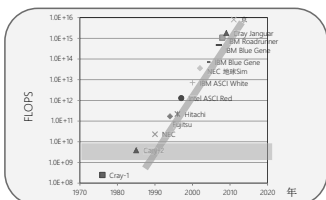
光学 電磁気 粉体 流体 構造力学 ...

支える数理

偏微分 常微分 形状 ランダ 数値計
方程式 方程式 表現 ムネス 算手法 最適化 ...

4

世の中の動向:



2000年代に入って、コンピュータ技術(ハードウェア、ソフトウェア)が急速に発展した。
・1990年代初頭のスーパーコンピュータは2010年代のパーソナルコンピュータと同等
・ノートPCでも数値計算が行えるようになっている。

5

世の中の動向:

ハードウェア、ソフトウェアの発展により、
今まで、計算できなかった現象が計算機上で
計算、予測できるようになっている。



製造業の研究開発現場においても、計算機を積極的に利用して、開発・設計を行うようになっている。

→各種汎用シミュレーションツールが市販!

キヤノンでは、1970年代から、
光学設計は数値計算をベースに行ってきた!

6

intel Pentium 4 3.07
3.8GHz 7.6 GFLOPS
<http://www.ipa.go.jp/about/NYreport/201002.pdf>

キヤノン 数理工学研究部の役割

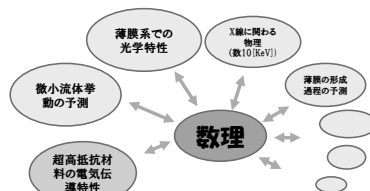
キヤノン総合R&D本部
解析技術開発センター
数理工学研究部

最先端のデバイスや材料開発において、市販の汎用シミュレーションツールで計算するだけでは判らない事がある

→ デバイス・材料の物理現象を数学により表現することで、物理現象を予測し、機能の発現を制御できるようにする。

数理工学研究部の役割

数学を言語として利用し、物理現象を数学により表現することで、物理現象を予測し、機能の発現を制御できるようにする。



8

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

9

パーコレーションとは

パーコレーションとは浸透:

- ・山火事の延焼(伝搬)
- ・伝染病の感染広がり(伝搬)
- ・多孔質媒体への液体のしみこみ
- ・ランダム媒質の電気伝導

を表現する統計学、統計力学の数理モデルである

Fields賞:

- Wendelin Werner 2006年
- Stanislav Smirnov 2010年
- Schramm-Lawner-evolution (SLE)
- ・Oded Schramm (1961-2008)
- ・Lawner: ビーベルバツハ予想



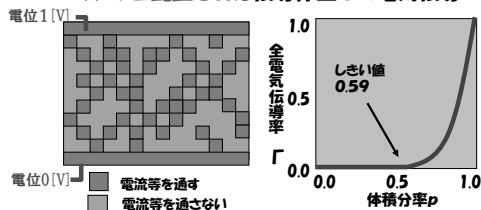
Robert Langlands, John Cardy

10

パーコレーションの種類

格子パーコレーション(電気伝導の場合)

ランダム配置された伝導体■での電気伝導



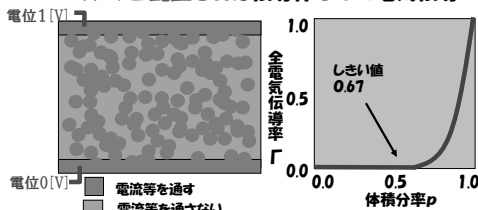
無限の領域を仮定すると
全電気伝導率は体積分率(■の密度)のみに依存

11

パーコレーションの種類

連続パーコレーション(電気伝導の場合)

ランダム配置された伝導体●での電気伝導

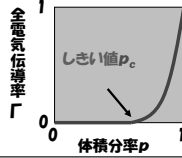


無限の領域を仮定すると
全電気伝導率は体積分率(●の密度)のみに依存

12

パーコレーションの性質

- ・次元によって大きく異なる
- ・しきい値 p_c 以下では流れない
- ・しきい値 p_c 以上では流れる
- ・全伝導率(抵抗)は桁で変わる



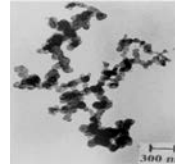
$$G \sim (p - p_c)^t \Rightarrow R = \frac{1}{(p - p_c)^t} \text{ より}$$

$$p \geq p_c \quad t > 0 \quad p \sim p_c \text{ で } R \rightarrow \infty$$

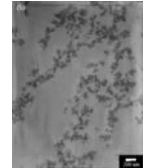
13

対象とするもの:

絶縁体の中のランダムに配置された電気伝導微粒子
+ 微粒子の例



Preparation and Some Properties of a Nanocomposite of Polycarbonate with Acetylene Black Aggregates and Glass Beads
Polymer Journal, Vol. 36 (2004) No. 10 pp.812-816



Preparation and Property Characterization of Nanoscale Silica Filled and Spherical Epoxy Nanocomposites
Jin Lin, Chang-Hu Shu and Chang-Chin Kwan Polymer Journal, Vol. 37 (2005) No. 4 pp.292-295

実際の物質:
「電流が流れない = 抵抗が非常に大きい」
「電流が流れる = 抵抗が金属レベル」

全体での電気伝導率(電気抵抗)をパーコレーションを利用して制御する。

14

パーコレーションの電気伝導で判りたいこと (ものづくりの観点から)

ケルビン: 「測定(数値化)できれば、科学になる」
(1889) ⇒ 予測でき、制御可能となる

パーコレーションの電気伝導で判りたいこと

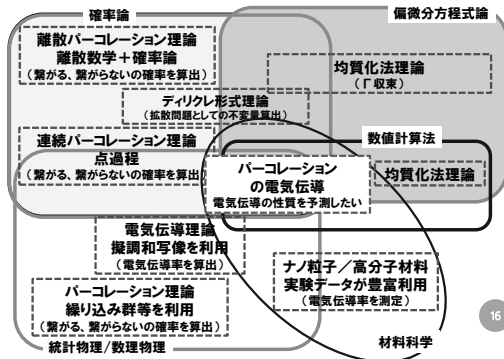
伝導微粒子を含有した材料の抵抗にどのようなパラメータが効いているのか?

- 形は電気伝導にどのように影響するのか?
- 凝集は電気伝導にどのように影響するのか?
- 電位分布の特徴は?

⇒ 大小関係などの傾向でよいので定量化したい。

15

パーコレーション理論を取り巻く分野



16

モンテカルロ法 + 数値解析(差分法) で電気伝導率を計算する!

差分法では精度がでない

例: 2次元の連続パーコレーションの円形:
・しきい値 $p_c = 0.6763475(6)$ (従来手法)
・しきい値 $p_c = 0.66 \pm 0.02$ (差分法)

⇒ 絶対精度はアカデミックレベルではないが、
パラメータの依存性は知る事ができる!

- 形は電気伝導にどのように影響するのか?
- 凝集は電気伝導にどのように影響するのか?
- 電位分布の特徴は?

17

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

18

モンテカルロ計算による
連続パーコレーションの差分法での
電気伝導率の計算

19

モンテカルロ計算における
連続パーコレーションの電位決定問題

疑似乱数を利用して粒子の配位 X を一様乱数で決定!
 X は、疑似乱数の種 i_S と体積分率 p の関数

$$X = X(i_S, p) \subset B$$

$$:= \left\{ z \in (D_j \cap B) \mid \begin{array}{l} D_j: j\text{-番目の円盤、} \\ \text{中心位置を乱数で決定} \\ \text{vol}(\cdot \cap D_j) = p, \text{種は } i_S \end{array} \right\}$$

電位1 [V]



電位0 [V]

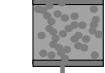
円盤の半径は一定にするモデル
 B :領域

20

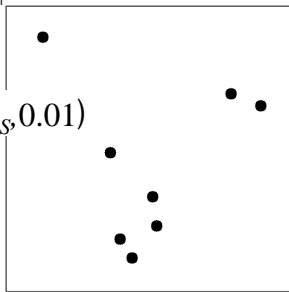
$p=0.01$

$X(i_S, 0.01)$

電位1 [V]



電位0 [V]

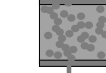


21

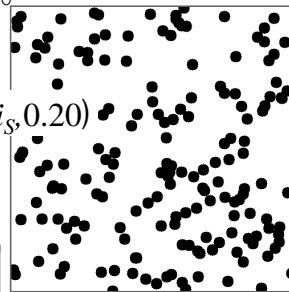
$p=0.20$

$X(i_S, 0.20)$

電位1 [V]



電位0 [V]

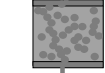


22

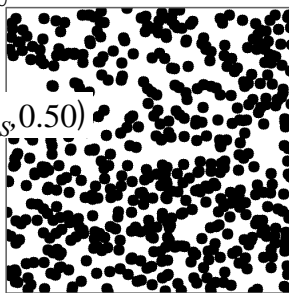
$p=0.50$

$X(i_S, 0.50)$

電位1 [V]



電位0 [V]

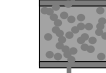


23

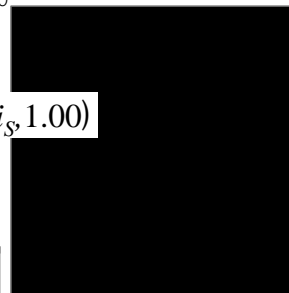
$p=1.00$

$X(i_S, 1.00)$

電位1 [V]



電位0 [V]



24

**モンテカルロ計算における
連続パーコレーションの電位決定問題**

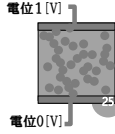
疑似乱数を利用して粒子の配位 X を一様乱数で決定!
 X は、疑似乱数の種 i_s と体積分率 p の関数
 $X = X(i_s, p) \subset B$

$$:= \left\{ z \in (D_j \cap B) \mid \begin{array}{l} D_j: \text{ j番目の円盤,} \\ \text{中心位置を乱数で決定} \\ \text{vol}(\cdot D_j) = p, \text{ 種は } i_s \end{array} \right\}$$

$$X(i_s, p) \subset X(i_s, p'), \quad p < p'$$

自然なフィルター構造(包含関係)がある
(FKG不等式に関連するもの)

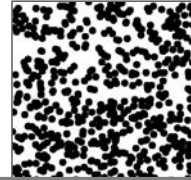
Path空間としても表現できる



問題:
2次元の電気伝導率分布のある
一般化ラプラス方程式

$$\Delta_\gamma f = \text{div}(\gamma \cdot \text{grad } f) = 0$$

を解く!



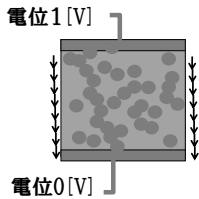
$$\gamma(x) = \begin{cases} \gamma_1 = 1 & x \in X: \text{伝導体} \\ \gamma_0 = \varepsilon \ll 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

26

問題:
3次元の電気伝導率分布のある一般化ラプラス方程式
 $\text{div}(\gamma \cdot \text{grad } u) = 0$
を解く!

$$\gamma(x) = \begin{cases} 1 & x \in X: \text{伝導体} \\ \varepsilon \ll 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

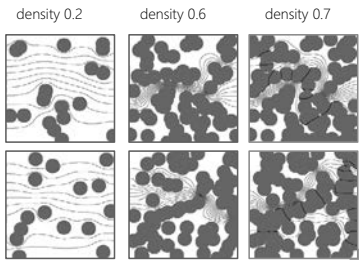
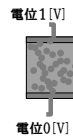
Bimaterial(2元物質)のために超関数の意味では微分方程式がB全域で定義されている。



**境界値問題
(ディリクレ・ノイマン問題)
を解く**

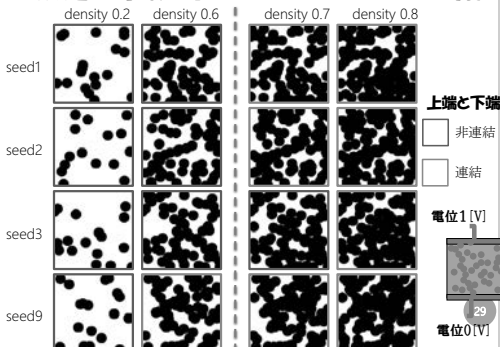
27

パーコレーションの電気伝導



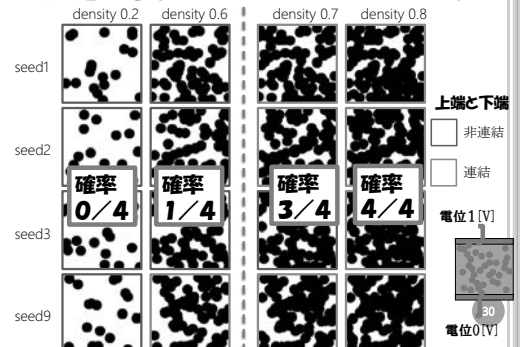
28

浸透確率(通常のパーコレーション理論)

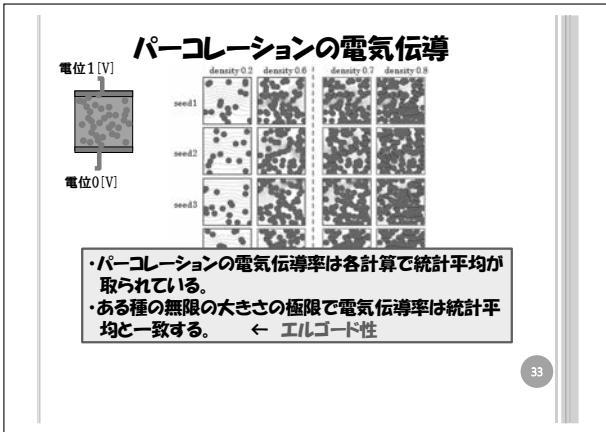
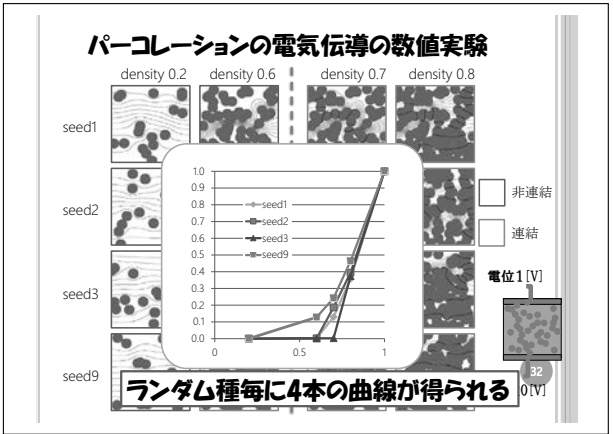
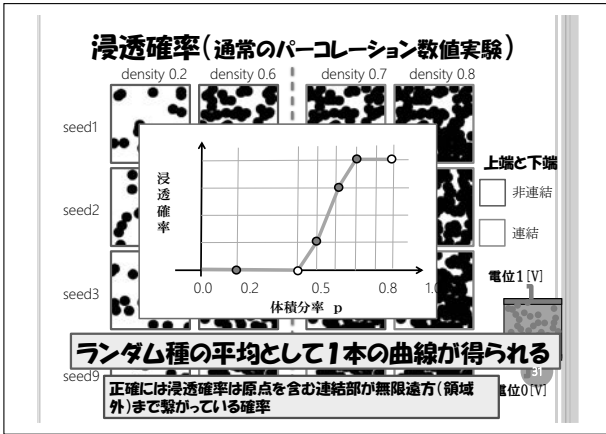


29

浸透確率(通常のパーコレーション数値実験)

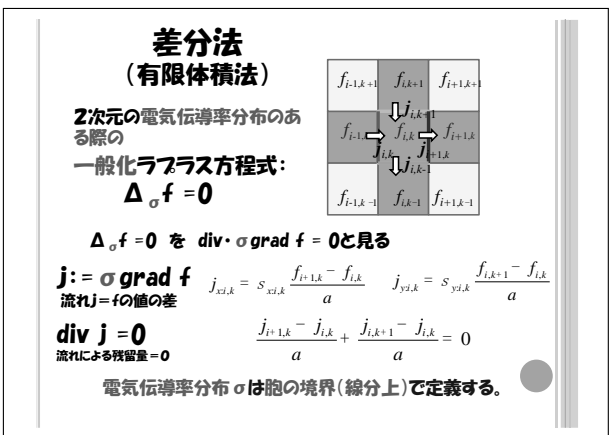
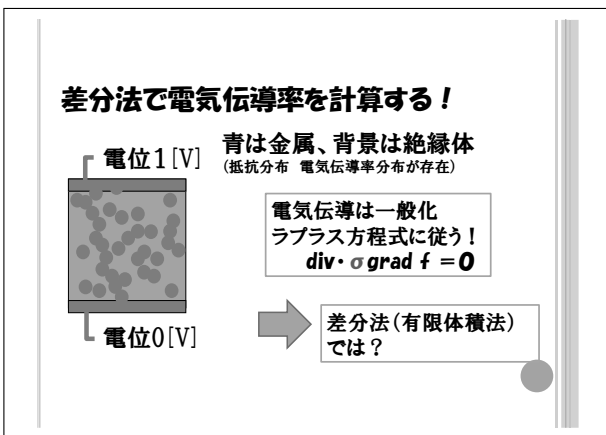


30

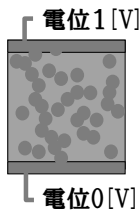


差分法での電気伝導率の興味深い結果

34



差分法で電気伝導率を計算する！



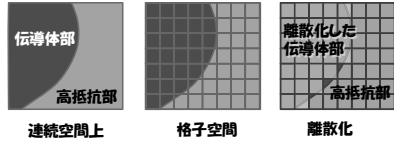
差分法で計算すると簡単に計算できる

$$\Delta_\sigma f = 0$$



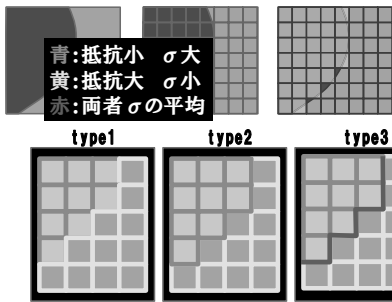
問題点:
電気伝導率分布 σ の与え方に任意性が存在する

差分法では電気伝導率分布の与え方に任意性がある

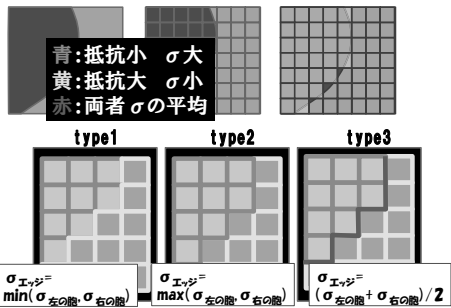


電気伝導率分布 σ 大 を格子胞の境界上に置く!
電気伝導率分布 σ 小

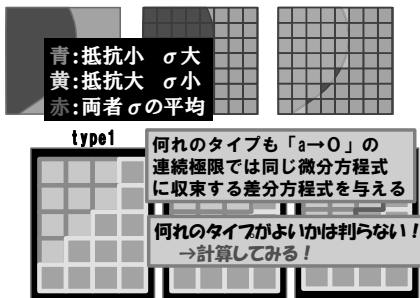
差分法では電気伝導率分布の与え方に任意性がある



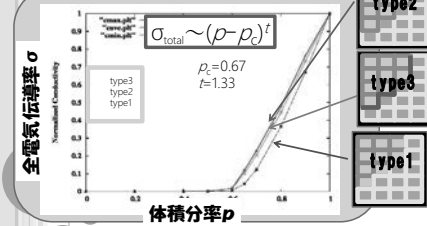
差分法では電気伝導率分布の与え方に任意性がある



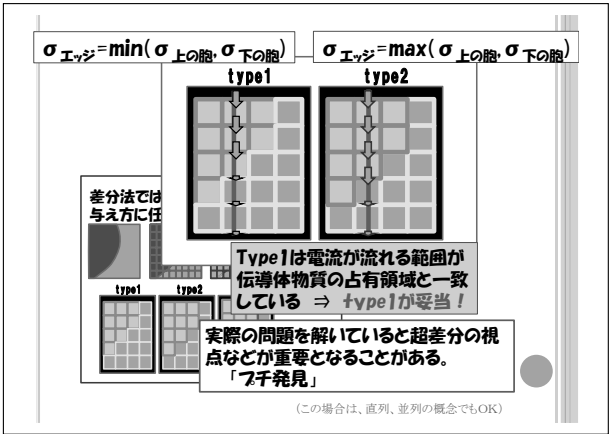
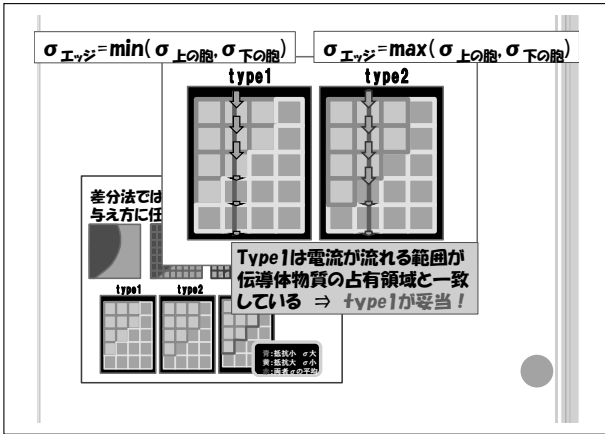
差分法では電気伝導率分布の与え方に任意性がある



Pc_min = 0.627 t_min = 1.34
Pc_ave = 0.806 t_ave = 1.15
Pc_max = 0.619 t_max = 0.99



- 差分の仕方では答えが異なる
- type1 が良さそう



モンテカルロ法+差分法による連続パーコレーションの電気伝導の計算の結果と考察

45

2次元上の円盤形状に対する連続パーコレーションモデル

電位 1[V]

重なりを許す一様ランダムな円盤の伝導微粒子(半径は一定)をばら撒いた際

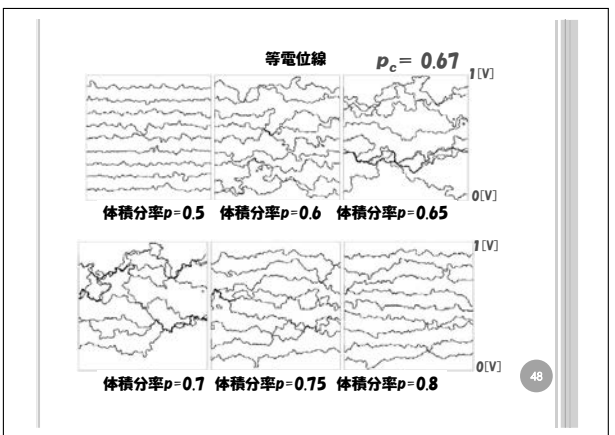
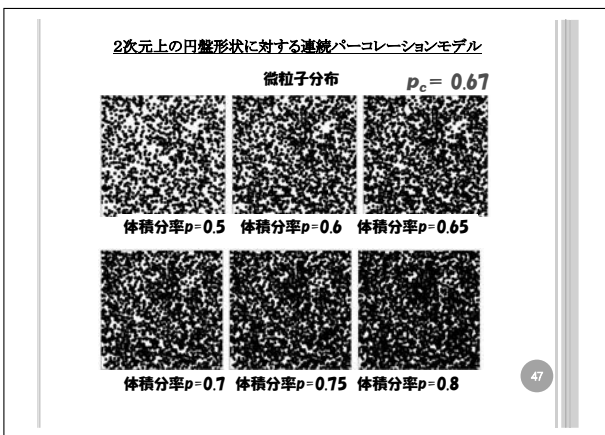
電位 0[V]

●伝導微粒子

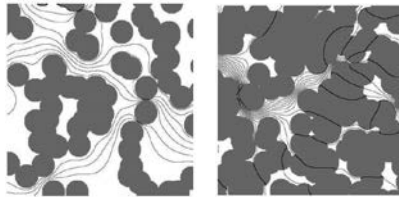
1. 上下に電極をつけて、電圧を印加した際、電位分布はどのようになるか?
2. ディリクレ・ノイマン境界として $\text{div}(\gamma \cdot \text{grad } u) = 0$ 解はどのように振舞うか?

Matsutani, Shimosako, Wang
Physica A 391 (2012) 5802-5809
Fractal Structure of Equipotential Curves on a Continuum Percolation Model

46



等電位線(拡大図)

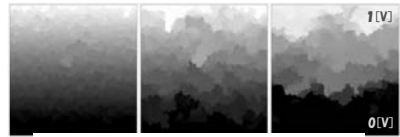


体積分率 $p=0.5$

体積分率 $p=0.8$

49

電位分布 $p_c = 0.67$



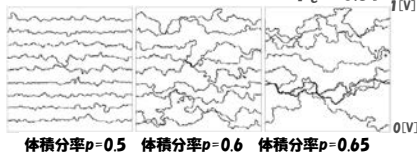
体積分率 $p=0.5$ 体積分率 $p=0.6$ 体積分率 $p=0.65$

水墨画に似ている。
⇒ 背景にフラクタル幾何が隠れている

体積分率 $p=0.7$ 体積分率 $p=0.75$ 体積分率 $p=0.8$

50

等電位線 $p_c = 0.67$

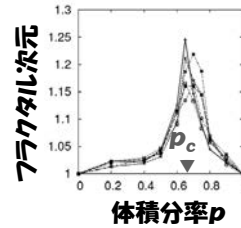


体積分率 $p=0.5$ 体積分率 $p=0.6$ 体積分率 $p=0.65$



体積分率 $p=0.7$ 体積分率 $p=0.75$ 体積分率 $p=0.8$

51

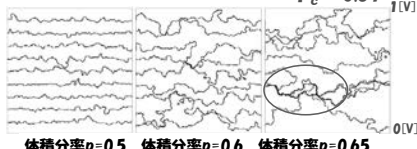


電位分布の特徴は？
● p_c の近傍で、電位分布はフラクタル的になる。

Matsutani, Shimosako, Wang, arXiv:1107.2983

52

等電位線 $p_c = 0.67$



体積分率 $p=0.5$ 体積分率 $p=0.6$ 体積分率 $p=0.65$

○ p_c 近傍で等電位線が、
1. 寄り集まる
2. パーコレーションクラスターの線に寄る
○ パーコレーションクラスターの境界のフラクタル次元は数値実験で $4/3$
⇒ 等電位線のフラクタル次元は p_c で $4/3$? Ziff

53

動機:

このフラクタル性を少しでも
数理的に理解したい

54

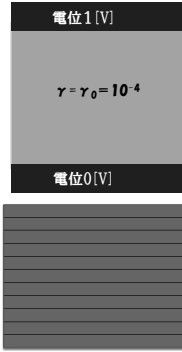
電位分布の双対性 計算例

双対なものを考えてみる

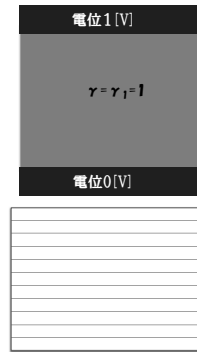
Keller-Dykhneの双対性として知られているもの

55

γ : 電気伝導分布

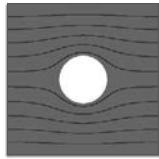
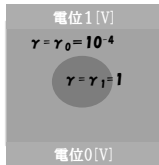


γ^* : 双対分布

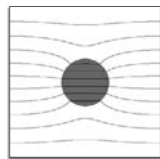
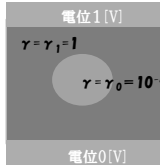


56

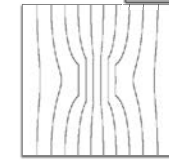
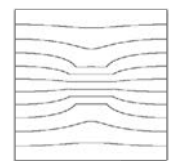
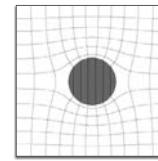
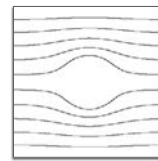
γ : 電気伝導分布
導電体/絶縁体



γ^* : 双対分布
絶縁体/導電体



57

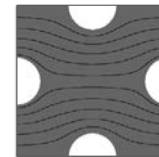
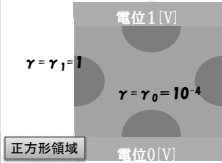


一方を90°回転
させて合成

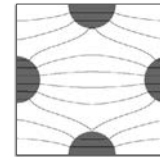
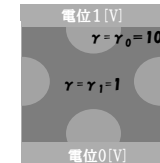
直交している!

58

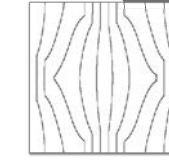
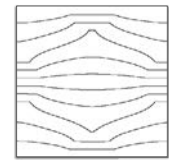
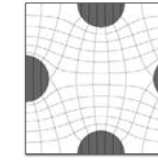
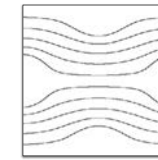
γ : 電気伝導分布
導電体/絶縁体



γ^* : 双対分布
絶縁体/導電体



59

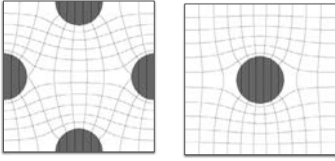


一方を90°回転
させて合成

直交している!

60

・双対性により、擬調和写像(γ 調和写像)
擬共形性を持ち、ある状態では複素構造が導入できる?



61

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

62

ポアソン点過程に関わる フル型パーコレーション

$$B_L := [-L, L]^2$$

$\bullet := \{C = \mathbb{R}^2 \text{ 上の点過程(ランダムな点の集まり)}\}$

$(\bullet, \bullet^*, P_\nu)$: ポアソン点過程

フル型パーコレーション:

$\rightarrow := \{X := \{ \bigcup_{p \in S} (D_p \cap B_L) \mid S \in \bullet \}, D_p: \text{半径} r \text{ の円盤}$

$X \in \rightarrow$ を、 P_ν -almost surely で論じる

63

ポアソン点過程

$$B_L := [-L, L]^2$$

$\bullet := \{C = \mathbb{R}^2 \text{ 上の点過程(ランダムな点の集まり)}\}$

$(\bullet, \bullet^*, P_\nu)$: ポアソン点過程

$\bullet A: \mathbb{R}^2$ 上のボレル部分集合、 $Q: \text{点の集合}$

$$N_A: \bullet \rightarrow \mathbb{Z}_{\geq 0}, N_A(Q) := \#(Q \cap A)$$

$(\bullet, \bullet^*, P_\nu)$ がポアソン点過程 \Leftrightarrow

・任意の disjoint なボレル部分集合族 A_1, \dots, A_n に対して、 $N_{A_i}(Q)$ は互いに独立変数、

$$\bullet P_\nu(N_A = n) = \frac{(\nu A)^n}{n!} \exp(-n \nu A)$$

64

ポアソン点過程の性質

(S, M, P_ν) : ポアソン点過程

$f: S \rightarrow \mathbb{R}$: 可測

群の作用: $S = \{p_a \in S \mid a \in \mathbb{I}\} \in S$

・ $T_x S := \{p_a + x\}$, $g_x S := \{g(p_a - x)\}$
 $g \in SO(2), x \in \mathbb{R}^2$

エルゴード性: $S \in S$

・ $E_\nu(f(T_x g S)) = E_\nu(f(S))$,
・ユークリッド移動しても期待値は変わらない。

homothety (均一拡大):

・ $E_\nu(f(g S)) = E_{g\nu}(f(S))$

65

フル型パーコレーションの性質

$Q := \{X := \{ \bigcup_{p \in S} (D_p \cap B_L) \mid S \in \bullet \}, D_p: \text{半径} r \text{ の円盤}$

$X \in Q$ の性質:

体積占有率 $\rho_A(X) := \frac{|X \cap A|}{|A|}$

$$\rho(X) := \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_{B_{nL}}(X)$$

エルゴード定理

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_{B_{nL}}(X_0) = E_\nu(\rho(X)), P\text{-a.s.}$$

66

ポアソン点過程に関わる
フル型パーコレーションの電位決定問題

67

$X \in Q$

$X = \cup X_i$

$r_0 \ll r_i = 1$

	X (円盤内)	X^c (円盤外)
γ	$\gamma(z) = r_1$	$\gamma(z) = r_0$
γ^*	$\gamma^*(z) = r_0$	$\gamma^*(z) = r_1$

$z = x + iy$

68

解く問題

$\text{div}(\gamma \cdot \text{grad } u) = 0$

$\text{div}(\gamma^* \cdot \text{grad } v) = 0$

69

エネルギー(電力)の最小問題:

$$W(\gamma, B_L) = \int_{B_L} d^2z \gamma(z) (\nabla u(z))^2$$

$$W^*(\gamma, B_L) = \int_{B_L} d^2z \gamma^*(z) (\nabla v(z))^2$$

$L \rightarrow \infty$ で W, W^* の最小となる u, v を求めたい

	X (円盤内)	X^c (円盤外)
γ	$\gamma(z) = r_1$	$\gamma(z) = r_0$
γ^*	$\gamma^*(z) = r_0$	$\gamma^*(z) = r_1$

$z = x + iy$

70

エネルギー(電力)の最小問題の問題

$\lim_{n \rightarrow \infty} W(\gamma, B_{nL})$

$B_{nL} := [-nL, nL]^2$

$nL \rightarrow \infty$

関数空間

u, v

71

最小問題が ill posed になる可能性がある。

Γ 収束

- $X := (X, d)$: 距離空間, $h \in \mathbb{N}$
- $F_h: X \rightarrow [0, +\infty]$
- $\{F_h\}_{h \in \mathbb{N}}$ が $x_0 \in X$ で $r \in [0, +\infty]$ に $\Gamma(d)$ -収束する ($\Gamma(d)$ - $\lim_h F_h(x_0) = r$) とは
- For $\forall \{x_h \in X\}_{h \in \mathbb{N}}$ s.t. $d(x_h, x_0) \rightarrow 0$, $r \leq \liminf_h F_h(x_h)$
 - $\exists \{x_h \in X\}_{h \in \mathbb{N}}$ s.t. $d(x_h, x_0) \rightarrow 0$ and $r = \lim_h F_h(x_h)$

72

Γ 収束

$X=(X,d)$: 距離空間, $h \in \mathbb{N}$
 $F_h: X \rightarrow [0, +\infty]$
 $\{F_h\}_{h \in \mathbb{N}}$ が $x_0 \in \mathbb{R} \in [0, +\infty]$ に $\Gamma(d)$ -収束する ($\Gamma(d)\text{-}\lim F_h(x_0)=r$) とは

i) For $\forall \{x_h \in X\}_{h \in \mathbb{N}}$ s.t. $d(x_h, x_0) \rightarrow 0$,
 $r \leq \liminf_h F_h(x_h)$

ii) $\exists \{x_h \in X\}_{h \in \mathbb{N}}$ s.t. $d(x_h, x_0) \rightarrow 0$ and
 $r \geq \limsup_h F_h(x_h)$

73

Γ 収束

関数 $F: X \rightarrow [0, +\infty]$ が存在し
 $\{F_h\}_{h \in \mathbb{N}}$ が $\forall x \in X$ で $F(x)$ に $\Gamma(d)$ -収束するとき「 $\{F_h\}_{h \in \mathbb{N}}$ は F に $\Gamma(d)$ -収束する」といい、
 $\Gamma(d)\text{-}\lim_h F_h(x) = F(x)$
 と記す。

74

Γ 収束

$X=(X,d)$:
 $\{F_h: X \rightarrow [0, +\infty]\}_{h \in \mathbb{N}}$ が d -equicoercive (d -等強圧的) であるとは、
 $\exists d$ -コンパクト部分集合 $K \subset X=(X,d)$ s.t.
 $\inf\{F_h(x): x \in X\} = \inf\{F_h(x): x \in K\}$

Γ 収束の基本定理:
 $\{F_h\}_{h \in \mathbb{N}}$ が d -等強圧的で F に $\Gamma(d)$ -収束する
 $\Rightarrow \min\{F(x): x \in X\} = \liminf_h \{F_h(x): x \in X\}$
 \Rightarrow If for $x_h \rightarrow x$, $\lim_h F_h(x) = \lim_h \inf F_h$,
 then, x is minimizer for F .

75

Γ 収束と均質化問題

$$W_0 = \min \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_B d^2 z \gamma\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) (\nabla u(z))^2$$

$$W_\varepsilon = \min \int_B d^2 z \gamma\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) (\nabla u(z))^2$$

$$= W_0 + \varepsilon W_1 + \varepsilon^2 W_2 + \varepsilon^3 W_3 + \dots$$

↑
均質化項: これを求めたい

- 関数空間内のコンパクト集合を選択
- 基本定理を利用して、最小問題に置き換える
- 均質化の基本は周期系、エルゴード性で代用

76

Γ 収束

Ω : ソボレフ空間
 $\{W_\varepsilon: \Omega \rightarrow [0, +\infty]\}$ は自然なノルム Δ で
 d -等強圧的である。

Γ 収束の基本定理より

- $\{W_\varepsilon\}_{\varepsilon \in \mathbb{N}}$ が W に $\Gamma(d)$ -収束する
- $\min\{W(u): u \in \Omega\} = \liminf_\varepsilon \{W_\varepsilon(u): u \in \Omega\}$

$$= \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_B d^2 z \gamma\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) (\nabla u(z))^2$$

77

命題: 上記の設定で

$$W_0 = \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_B d^2 z \gamma\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) (\nabla u(z))^2$$

$$\sim \lim_{n \rightarrow \infty} \min \int_{B_{nL}} d^2 z \gamma(z) (\nabla u(z))^2$$

は、Γ 収束の基本定理により、収束する。
 (well-defined な問題となる)

78

$$W_0^\pm(B;X) = \min_{u \in S(BC)} \int_B d^2z \gamma_X^\pm(z) (\nabla u(z))^2$$

$$W_0^\pm(X) = \lim_{n \rightarrow \infty} W_0^\pm(B_{nL};X)$$

エルゴード定理

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W_0^\pm(B_{nL};X_0) = E_\nu(W_0^\pm(X)), \text{ P-a.s.}$$

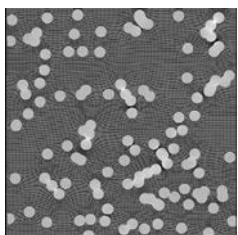
79

パーコレーション電気伝導の数理

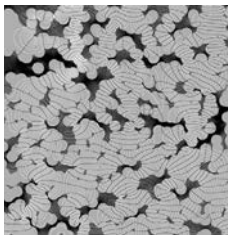
1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

80

$p < p_c$



$p > p_c$



81

擬等角写像、擬調和写像と双対性

$$\psi := v + iu: B_L \rightarrow \mathbb{C} = \mathbb{R}^2 \quad B_L := [-L, L]^2$$

$$(v, u: B_L \rightarrow \mathbb{R}, \text{ generalized func.})$$

$$\mu_\psi := \frac{\bar{\partial} \psi}{\partial \psi} \quad \text{Beltrami Coefficient}$$

$$\mu_\psi = 0 \Leftrightarrow \psi \text{ is conformal}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = (\partial_x - i \partial_y) / 2, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = (\partial_x + i \partial_y) / 2$$

82

擬等角写像、擬調和写像と双対性

命題: η -調和関数

η : 可測な B 上の正関数,

a : 次のPDEの弱解:

$$\nabla \eta \nabla a = 0 \quad (1)$$

→ a は次で定義される η -調和共役 b をもつ

$$\partial_x b = \eta \partial_y a, \quad \partial_y b = -\eta \partial_x a,$$

但し、 b は次のPDEの弱解である:

$$\nabla \frac{1}{\eta} \nabla b = 0 \quad (2)$$

→ $f := b + ia$, に対して $\mu_f = \frac{\eta - 1}{\eta + 1}$

83

擬等角写像、擬調和写像と双対性

証明:

関係式 $\partial_x b = \eta \partial_y a, \quad \partial_y b = -\eta \partial_x a$, よし

(2) は $\partial_x \frac{1}{\eta} \partial_x b + \partial_y \frac{1}{\eta} \partial_y b = [\partial_x, \partial_y] a = 0$

(1) は $\partial_x \eta \partial_x a + \partial_y \eta \partial_y a = [\partial_x, \partial_y] b = 0$

可積分条件により、両者は結び付いている

84

擬等角写像、擬調和写像と双対性

命題: η -調和関数

η : 可測な B 上の正関数.

a : 次のPDEの弱解:

$$\nabla \eta \nabla a = 0 \quad (1)$$

→ a は次で定義される η -調和共役 b をもつ

$$\partial_x b = \eta \partial_y a, \quad \partial_y b = -\eta \partial_x a,$$

但し、 b は次のPDEの弱解である:

$$\nabla \frac{1}{\eta} \nabla b = 0 \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} f := b + ia, \text{ に対して } \mu_f = \frac{\eta - 1}{\eta + 1} \\ (\nabla b, \nabla a) = 0 \text{ 直交している} \end{array} \right.$$

85

擬等角写像、擬調和写像と双対性

命題 ($1/\gamma$ と γ^* との関係)

$$1. \quad \gamma^*(z) = \frac{\gamma_0 \gamma_1}{\gamma(z)} \left(\eta(z) = \frac{\gamma(z)}{\gamma_0}, \quad \frac{1}{\eta(z)} = \frac{\gamma^*(z)}{\gamma_1} \right)$$

$$2. \quad \begin{array}{|c|c|} \hline a = \beta u & \beta \text{ は定数} \\ \hline \text{ディリクレ境界条件} & \text{ノイマン境界条件} \\ \hline \text{ノイマン境界条件} & \text{ディリクレ境界条件} \\ \hline \end{array}$$

u と v は本質的に γ 調和写像になっている。

Dirichlet-Neumannの関係を写像として考えると逆問題と関連する。(Calderón's問題、Tao-Thiele) Nonlinear Fourier Analysis

86

擬等角写像、擬調和写像と双対性

命題: γ -調和関数

u : 次のRDEの弱解:

$$\nabla \gamma \nabla u = 0$$

→ u は次で定義される γ -調和共役 v をもつ

$$\gamma_0 \beta \partial_x v = \gamma \partial_y u, \quad \gamma_0 \beta \partial_y v = -\gamma \partial_x u,$$

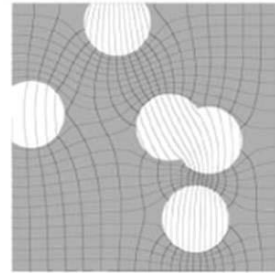
但し、 v は次のPDEの弱解である:

$$\nabla \gamma^* \nabla v = 0.$$

$$\rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \psi := \beta v + iu, \text{ に対して } \mu_\psi(z) = \frac{\gamma(z) - \beta \gamma_0}{\gamma(z) + \beta \gamma_0} \\ (\nabla v, \nabla u) = 0 \text{ 直交している} \end{array} \right.$$

87

擬等角写像、擬調和写像と双対性



88

擬等角写像、擬調和写像と双対性

Keller-Dykhne reciprocity law:

Keller(1964), Dykhne(1971)

$$\Gamma := \frac{1}{u_0} \int_{\partial B_\Gamma} dx \gamma \partial_y u$$

$$\Gamma^* := \frac{1}{v_0} \int_{\partial B_\Gamma^*} dx \gamma^* \partial_x v$$

For every configuration, we have

$$\Gamma \Gamma^* = \gamma_0 \gamma_1$$

89

擬等角写像、擬調和写像と双対性

KD相互法則の証明:

$$\Gamma = \frac{1}{u_0} \int_{\partial B_\Gamma} dx \gamma \partial_y u = \frac{1}{u_0} \int_{\partial B_\Gamma} dx \beta \gamma_0 \partial_x v = \frac{\beta \gamma_0 v_0}{u_0}$$

$$\Gamma^* = \frac{1}{v_0} \int_{\partial B_\Gamma^*} dy \gamma^* \partial_x v = \frac{1}{v_0} \int_{\partial B_\Gamma^*} dy \frac{\gamma_1}{\beta} \partial_y u = \frac{\gamma_1 u_0}{\beta v_0}$$

For every configuration, we have

$$\Gamma \Gamma^* = \gamma_0 \gamma_1$$

$$v_0 = \frac{\Gamma}{\beta \gamma_0} u_0$$

90

擬等角写像、擬調和写像と双対性

Keller-Dykhne reciprocity law:

Keller(1964), Dykhne(1971)

$$\Gamma := \frac{1}{u_0} \int_{\partial B_{\overline{x}}} dx \gamma \partial_{\nu} u$$

$$\Gamma^* := \frac{1}{v_0} \int_{\partial B_{\underline{x}}} dx \gamma^* \partial_{\nu} v$$

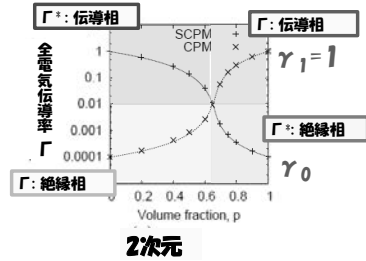
For every configuration, we have

$$\Gamma \Gamma^* = \gamma_0 \gamma_1$$

$$v_0 = \frac{\Gamma}{\beta \gamma_0} u_0$$

91

KD相互法則の数値計算 $\Gamma \Gamma^* = \gamma_0 \gamma_1$



2次元

$\Gamma(p)$: 単調増加, 連続ならば $\Gamma(p_c) = \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}$

92

数値解からの推定関数形

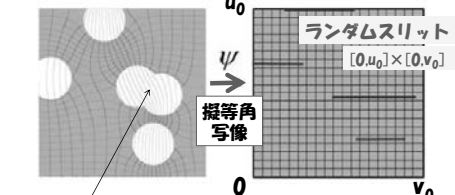
$$\Gamma(p) = \gamma_1 \frac{(p-p_c)^{\dagger}}{(1-p_c)^{\dagger}} \theta(p-p_c) + \frac{p_c^{\dagger} \sqrt{\gamma_1 \gamma_0}}{(p_c-p)^{\dagger} \sqrt{\gamma_1 / \gamma_0} \theta(p_c-p) + p_c^{\dagger}}$$

$$\Gamma^*(p) = \gamma_1 \frac{(p_c-p)^{\dagger}}{(p_c)^{\dagger}} \theta(p_c-p) + \frac{(1-p_c)^{\dagger} \sqrt{\gamma_1 \gamma_0}}{(p-p_c)^{\dagger} \sqrt{\gamma_1 / \gamma_0} \theta(p-p_c) + (1-p_c)^{\dagger}}$$

93

擬等角写像、擬調和写像と双対性

$p < p_c \lim: \gamma_0 \rightarrow +0$ $\psi := \beta v + iu$
 β は定数

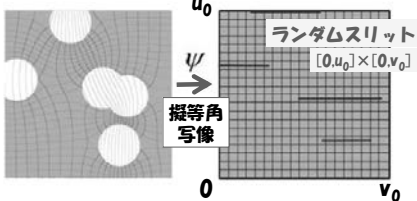


・uの等電位線は($\gamma_0 \rightarrow 0$ で)染み込まない
 $\Leftrightarrow u$ は各孤立要素で等電位

94

擬等角写像、擬調和写像と双対性

$p < p_c \lim: \gamma_0 \rightarrow +0$ $\psi := \beta v + iu$
 β は定数



等電位線は ψ の逆像で記述される。

95

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

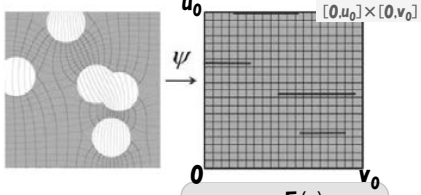
96

擬等角写像と双対性

$\beta = 1, \gamma_0 \rightarrow +0:$

$$\mu_\psi = \frac{\gamma - \beta \gamma_0}{\gamma + \beta \gamma_0}$$

ψ 共形写像 on X^c for $p < p_c$

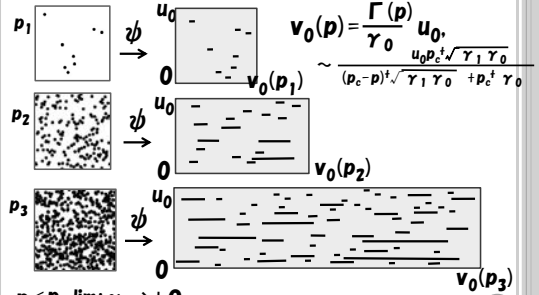


$$v_0(p) = \frac{\Gamma(p)}{\beta \gamma_0} u_0$$

$$\Gamma(p_c) = \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}$$

97

等角写像と双対性



$p < p_c, \lim: \gamma_0 \rightarrow +0$

$p \rightarrow p_c$ で像の長さ $v_0(p)$ は発散する

98

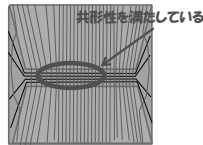
等角写像と双対性

・期待値の振る舞い: $E(s) = \langle s \rangle$: s の期待値

$$E(\partial_y u) = \frac{u_0}{2L} \quad E(\partial_x v) = \frac{v_0}{2L} = \frac{\Gamma(p)}{2L \gamma_0} u_0$$

・共形性: $\partial_x v = \partial_y u$ over X^c ・発散する $\begin{cases} \gamma_0 \rightarrow 0 \\ p \rightarrow p_c \end{cases}$

・ u の等電位線が集中して、強い強度を持っている。



99

等角写像と双対性

・期待値の振る舞い: $E(s) = \langle s \rangle$: s の期待値

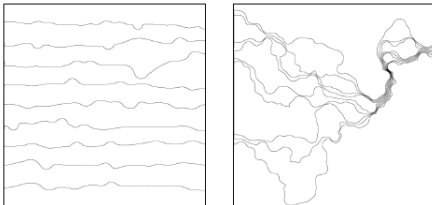
$$E(\partial_y u) = \frac{u_0}{2L} \quad E(\partial_x v) = \frac{v_0}{2L} = \frac{\Gamma(p)}{2L \gamma_0} u_0$$

・共形性: $\partial_x v = \partial_y u$ over X^c ・発散する $\begin{cases} \gamma_0 \rightarrow 0 \\ p \rightarrow p_c \end{cases}$



・ u の等電位線が集中して、強い強度を持っている。

100



p_c に近づくと、等電位線が集まってくる。

→ パーコレーションクラスタの線に集中する。

(パーコレーションクラスタの線はフラクタル的になる)

→ 等電位線はフラクタルとなる?!

101

希薄極限での等電位線のスケールレス性

102

ポアソン点過程

$$B_L := [-L, L]^2$$

$S := \{ C = R^2 \text{ 上の点過程 (ランダムな点の集まり)} \}$

(S, M, P_ν) : ポアソン点過程

• $A: R^2$ 上のボレル部分集合, $Q: \text{点の集合}$

$$N_A: S \rightarrow \mathbb{Z}_{\geq 0}, N_A(Q) := \#(Q \cap A)$$

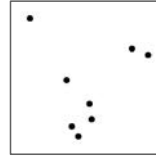
(S, M, P_ν) がポアソン点過程 \Leftrightarrow

• 任意の disjoint なボレル部分集合族 A_1, \dots, A_n に

対して, $N_{A_i}(Q)$ は互いに独立変数,

$$\bullet P_\nu(N_A = n) = \frac{(\nu|A|)^n}{n!} \exp(-\nu|A|)$$

希薄極限での等電位線のスケールレス性



$2\pi r^2 \nu = p$ において,
 $r \rightarrow +0, p \rightarrow +0$ を考える。

領域 A 内の数密度 N_A **ポアソン性**

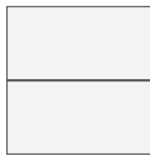
$E(N_A) = \nu|A|$
数密度の揺らぎ

$$D(N_A) = E(N_A^2) - E(N_A)^2 = \nu|A|$$

領域 A_1 と A_2 の数密度 N の差 (但し $|A_1| = |A_2| = |A|$)

$$E((N_{A_1} - N_{A_2})^2) = E_A(N_{A_1}^2 - 2N_{A_1}N_{A_2} + N_{A_2}^2) = 2\nu|A|$$

104



期待値の振る舞い:

$$E(u(x,y)) = \frac{u_0(\nu+L)}{2L} =: \overline{u(x,y)}$$



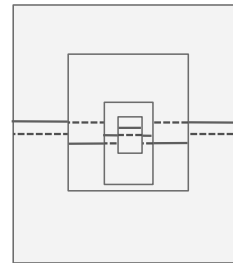
個々を考えると:

$$E\left(\left(\int_A u(x,y) d^2x - \int_A \overline{u(x,y)} d^2x\right)^2\right) \propto 8\pi^2 r^4 \nu |A|$$

$$\text{Diagram} = \left\langle \text{Diagram 1}, \text{Diagram 2}, \text{Diagram 3}, \dots \right\rangle$$

105

$2\pi r^2 \nu = p$ において,
 $r \rightarrow +0, p \rightarrow +0$ を考え、スケールレス



等電位線は
フラクタル的

106

連続パーコレーションの電気伝導問題において、
双対性により

1. ランダムスリット図形への擬共形写像が得られた。
2. 幾つかの仮定の下、等電位線の集中が起こることが観測できた。
3. クラスターの縁が転移点でフラクタルになることを認めると等電位線はフラクタルになる。
4. 希薄極限では等電位線はスケールレスで揺らぐ \rightarrow フラクタル的になる

107

パーコレーション電気伝導の数理

1. キヤノンの研究開発現場での数学
2. パーコレーション電気伝導
 - 2-0. パーコレーションとは
 - 2-1. パーコレーション電気伝導の数値解析
 - 2-2. パーコレーション電気伝導の数理 定式化
 - 2-3. パーコレーション電気伝導の数理 双対性
 - 2-4. パーコレーション電気伝導の数理 等角写像
3. 最後に

108

キヤノン 数理工学研究部の役割

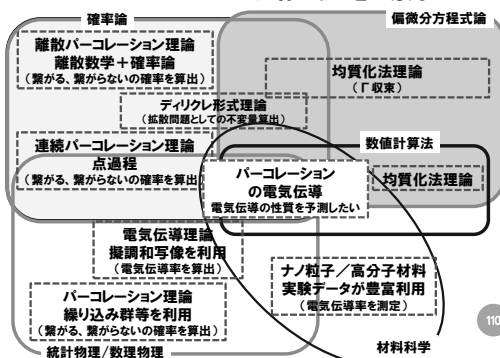
キヤノン総合R&D本部
解析技術開発センター
数理工学研究部

最先端のデバイスや材料開発において、市販の汎用シミュレーションツールで計算するだけでは判らない事がある

→ デバイス・材料の物理現象を数学により表現することで、物理現象を予測し、機能の発現を制御できるようにする。

数理工学研究部の役割

パーコレーション理論を取り巻く分野



110



オイラー
梁の形状の研究
→
変分原理、
楕円積分、
楕円曲線のモデュライ



ガウスの
数論での2次元体のガウス括弧
(連分数表現)を光学に応用

SL(2, R), PSL(2, Z)

18世紀、19世紀には通常だった科学・技術と純粋数学の
コラボレーションが21世紀に入って活性化している。

111

純粋数学と産業数学との関係については

線型代数学周遊
応用をめざして
松谷茂樹
現代数学社



112

数学を言語として利用し、
物理現象を数学により表現することで、
物理現象を予測し、
機能の発現を制御できるようにする。

多様な数学を道具として利用して、
様々な現場の課題を解決している。

- ・課題は機密なものが多く、表には出てこない
- ・現場の課題を理解し、解決できる
⇔ ものづくりの数理解析屋の特権
- ・表に出ないが、種々の道具は利用されている

113

数学を言語として利用し、
物理現象を数学により表現することで、
物理現象を予測し、
機能の発現を制御できるようにする。

多様な数学を道具として利用できるのは
応用数学者、純粋数学者が
数学を磨いているから！

**数学が豊かになると、ものづくりの数学
も豊かになる！**

114

代用電荷法による等角写像の数値計算法

(Numerical conformal mapping by the charge simulation method)

岡野大, 愛媛大・工

(Dai Okano, Ehime University)

概要

等角写像の数値計算に複素対数ポテンシャルの重ね合せを用いた代用電荷法を利用する方法は天野によって提案され, 単連結・多重連結領域の様々な等角写像の問題に適用し, 簡潔で高精度の近似写像関数を得ることのできる方法として発展している。この方法の基本的なアイデアと最近の成果にもとづく種々の問題の統一的な取り扱いについて述べる。

Abstract

The charge simulation method for numerical conformal mapping was proposed by Amano, and is regarded as simple and accurate method. We review the basic idea and recent results.

代用電荷法による等角写像の数値計算法

岡野 大(愛媛大学)

2014.8.6-8

平成26年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究会
「非線形数理モデルの諸相: 連続, 離散, 超離散, その先」

本日の概要

単連結領域の数値等角写像

天野の方法

代用電荷法

誤差の指数関数的減少

多重連結領域の数値等角写像

直線スリット領域への数値等角写像

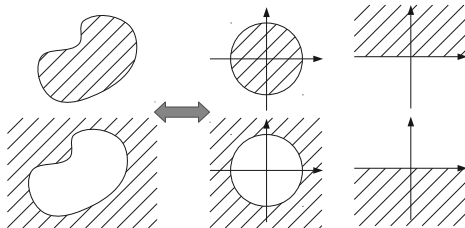
螺旋スリット領域への数値等角写像

正準スリット領域の統一的取扱

標準・正準領域を介した数値等角写像
まとめ

単連結領域の数値等角写像

- 単連結領域の問題では、与えられた問題領域と標準領域との間の等角写像について問われることが一般的である



単連結領域の数値等角写像

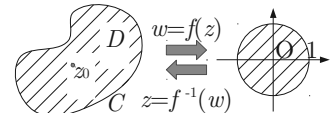
- Riemannの写像定理
複素平面中に滑らかな境界閉曲線で囲まれた有界な単連結領域を考える

C : 自身と交わらない滑らかな閉曲線

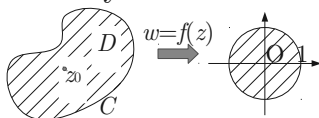
D : C を境界とする有界な単連結領域

D は単位円板と等角同値で z 平面の D から w 平面の単位円板への等角写像の写像関数 $w=f(z)$ は次の条件のもと一意に定まる

$$f(z_0)=0, f'(z_0)>0$$



Symmの方法



$$f(z)=(z-z_0)\exp a(z) \text{ とし, } a(z)=\int_C \sigma(\zeta) \log(z-\zeta)|d\zeta|$$

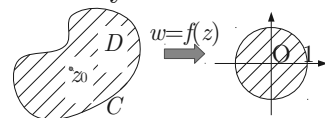
$$\text{とおけば, } z \in C \Rightarrow |f(z)|=1 \text{ より } \operatorname{Re} a(z)=-\log|z-z_0|$$

$\sigma(z)$ の境界値問題を導けば、

$$z \in C \Rightarrow \int_C \sigma(\zeta) \log|z-\zeta||d\zeta| = -\log|z-z_0|,$$

これを満たすソース密度関数 $\sigma(z)$ を求めれば良い

Symmの方法



例えば、 C を C_1, \dots, C_n に分けて階段関数近似すれば

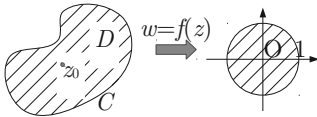
$$a(z) \approx A(z) = \sum_j \int_{C_j} \sigma_j \log(z-\zeta)|d\zeta|$$

標本点における境界条件と併せ連立方程式を得る

$$\operatorname{Re} A(\zeta_k) = \sum_j \sigma_j \int_{C_j} \log|\zeta_k-\zeta||d\zeta| = -\log|\zeta_k-z_0|$$

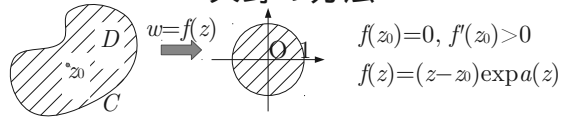
ζ_1, \dots, ζ_n は、それぞれ $\zeta_k \in C_k$ $k=1, \dots, n$ においた標本点

Symmの方法



- Symmの方法[1]の解くべき方程式は線形で簡明、 σ の離散化や方程式の構成・解法の工夫が様々
- [1]Symm, G.T., An integral equation method in conformal mapping, Numer. Math. **9**, 250-258 (1966).
 - [2]Hayes, J.K. et al, An improved method of numerical conformal mapping, Math. Comp. **26**, 118, 327-334 (1972).
 - [3]Hough, and Papamichael, The use of splines and singular functions in an integral equation method for conformal mapping, Numer. Math. **37**, 250-258 (1981).
 - [4]Nasser, M.M.S., A fast boundary integral equation method for conformal mapping of multiply connected regions, SIAM J. Sci. Comp. **35**, 3, 1730-1736 (2013).

代用電荷法による数値等角写像 ～天野の方法～



天野[5]は $a(z)$ の近似に複素対数関数を用いる

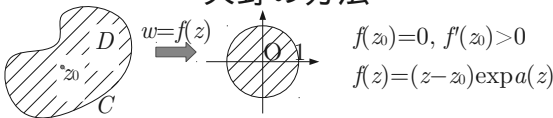
$$a(z) \approx A(z) = Q_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log(z - x_j) \quad x_1, \dots, x_N \notin C \cup D$$

境界条件 $|f(z \in C)| = 1$ より得た補間条件(拘束条件)

$$\operatorname{Re} A(y_k) = -\log |y_k - z_0| \quad y_1, \dots, y_N \in C.$$

[5]天野 要, 代用電荷法に基づく等角写像の数値計算法, 情報処理学会論文誌 **28**, 7, 689-704 (1987).

代用電荷法による数値等角写像 ～天野の方法～



拘束条件に不変性条件を併せた連立方程式

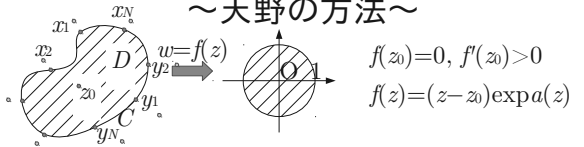
$$G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log |y_k - x_j| = -\log |y_k - z_0|, \quad \sum_{j=1}^N Q_j = 0$$

$k=1, \dots, N$ で $G(z) = \operatorname{Re} A(z)$ を定め、正規化条件

$$H_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \arg(z_0 - x_j) = 0 \quad \because f'(z_0) > 0 \Rightarrow \operatorname{Im} a(z_0) = 0$$

で H_0 すなわち $H(z) = \operatorname{Im} A(z)$ を定める。($G_0 + iH_0 = Q_0$)

代用電荷法による数値等角写像 ～天野の方法～



電荷点 x_1, \dots, x_N ・拘束点(標本点) y_1, \dots, y_N を配置

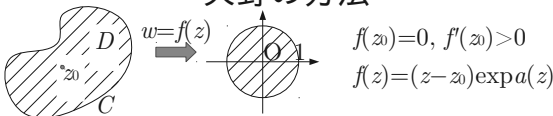
$$G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log |y_k - x_j| = -\log |y_k - z_0| \quad k=1, \dots, N,$$

$$\sum_{j=1}^N Q_j = 0, \quad H_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \arg(z_0 - x_j) = 0$$

連立方程式を解いて、拘束条件(境界条件)・不変性条件・正規化条件を満たす係数を定める

$$f(z) \approx F(z) = (z - z_0) \exp \left[Q_0 + \sum_j Q_j \log(z - x_j) \right]$$

代用電荷法による数値等角写像 ～天野の方法～



解析関数 $a(z) = g(z) + ih(z)$ の実部の近似を

$$g(z) \approx G(z) = G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log |z - x_j|$$

$x_1, \dots, x_N \notin C \cup D$

とおき、境界条件 $|f(z \in C)| = 1$ より得た拘束条件

$$G_0 + \sum_j Q_j \log |y_k - x_j| = -\log |y_k - z_0| \quad y_1, \dots, y_N \in C$$

を満たすように係数を定める代用電荷法を適用する。

等角写像の問題



$f(z) = (z - z_0) \exp a(z)$ において

$z \in C \Rightarrow \operatorname{Re} a(z) = -\log |z - z_0| \quad (\Leftrightarrow |f(z)| = 1)$

$a(z) = g(z) + ih(z)$ と分けて

$z \in C \Rightarrow g(z) = -\log |z - z_0|, \quad z \in D \Rightarrow \Delta g(z) = 0$ (代用電荷法)

$$g(z) \approx G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log |z - x_j| \quad x_1, \dots, x_N \notin C \cup D$$

$z \in D \Rightarrow \Delta h(z) = 0, \quad h(z_0) = 0 \quad (\Leftrightarrow \operatorname{Im} a(z_0) = 0 \Rightarrow f'(z_0) > 0)$

$$h(z) \approx H_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \arg(z - x_j),$$

$$H_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \arg(z_0 - x_j) = 0 \quad \text{代用電荷法による数値等角写像} \sim \text{天野の方法}$$

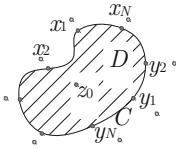
代用電荷法

Laplace方程式
の境界値問題



$$z \in D \Rightarrow \Delta g(z) = 0$$

$$z \in C \Rightarrow g(z) = -\log|z - z_0|$$



$x_1, \dots, x_N \notin C \cup D$: 電荷点

$$g(z) \approx G(z) = G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log|z - x_j|$$

$\Rightarrow \Delta G(z) = 0$ を満たす

$y_1, \dots, y_N \in C$: 拘束点

選点的境界条件 $g(y_k) \approx G(y_k) = -\log|y_k - x_k|$

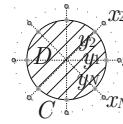
= 拘束条件 $= G_0 + \sum_{j=1}^N Q_j \log|y_k - x_j|$

不変性条件 $\sum_{j=1}^N Q_j = 0,$

[6] 室田一雄, 代用電荷法におけるスキームの「不変性」について, 情報処理学会論文誌 34, 3, 533-535 (1993).

適切な電荷点・拘束点配置

円板領域に等角同相配置したとき



$$C = \{z \mid |z| = r\}, D = \{z \mid |z| < r\}$$

$$x_j = \rho \exp[i2\pi(j-1)/N] \quad j=1, \dots, N, \rho > r,$$

$$y_k = r \exp[i2\pi(k-1)/N] \quad k=1, \dots, N.$$

問題 $\Delta g(z) = 0$ in $D, g(z) = b(z)$ on C の厳密解 g が C を超えて $|z| < r_0$ まで調和拡張できるとき、

$\exists c > 0, \tau > 1$ s.t. $\|g - G\|_\infty \leq c\tau^{-N}$ 誤差の指数関数的減少

G は代用電荷法による近似解, $\tau \approx \min\{\rho/r, \sqrt{r_0/r}\}$

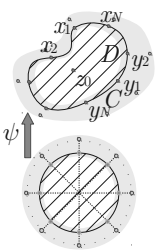
[7] Katsurada and Okamoto, A mathematical study of charge simulation method I, J. Fac. Sci. u-tokyo, SectIA, Math. 35, 507-518 (1988)

[8] Katsurada, M., A mathematical study of charge simulation method II, J. Fac. Sci. u-tokyo, SectIA, Math. 36, 135-162 (1988)

適切な電荷点・拘束点配置

~ 周辺等角写像 ψ による方法 ~

周辺領域に等角写像した等角同相配置の点



単位円を C に写し, 単位円を含む円環を C を含む帯状の周辺領域に写す等角写像 ψ で等角同相配置の点を写す;

$$x_j = \psi(\rho\omega^{j-1}), y_k = \psi(\omega^{k-1}), \rho > 1, \omega = e^{2\pi i/N}.$$

円板領域の等角同相配置と同様に代用電荷法による近似について、誤差の指数関数的減少が言える

$$\exists c > 0, \tau > 1 \text{ s.t. } \|g - G\|_\infty \leq c\tau^{-N}$$

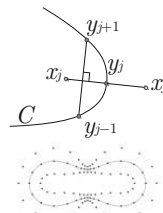
[9] Katsurada and Okamoto, The collocation points of the fundamental solution method for the potential problem, Comp. Math. Applic. 31, 1, 123-137 (1996).

電荷点・拘束点の配置法

~ 境界接続法 ~

周辺等角写像を含め電荷点・拘束点配置に等角写像を用いるのは割に合わない

等角写像を模した簡潔な配置法 (境界接続法)



1. 境界閉曲線上に均等に拘束点 y_1, \dots, y_N を置く
2. 次式で拘束点 y_j 毎に電荷点 x_j を定める。

$$x_j = y_j \pm i(y_{j+1} - y_{j-1})$$

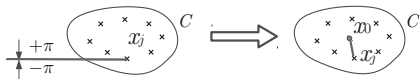
[10] 薩摩, 大石, 杉原編, 応用数理ハンドブック「代用電荷法」の項目, 474-475 朝倉書店 (2013).

連続な写像関数の構成

実際の計算では複素対数ポテンシャルの主値をとる

$$\log(z - x_j) \Rightarrow \text{Log}(z - x_j) = \log|z - x_j| + i\text{Arg}(z - x_j)$$

$-\pi < \text{Arg}(z) \leq \pi$ とすれば不連続を生じる



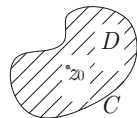
C の中央付近に z_0 をおき、

$$\sum_{j=1}^N Q_j \text{Log}(z - x_j) = \sum_j Q_j \text{Log}(z - x_j) - \sum_j Q_j \text{Log}(z - x_0)$$

$$= \sum_{j=1}^N Q_j \text{Log} \frac{z - x_j}{z - x_0}$$

とすれば、不連続は領域 D 外に閉じ込められる

逆関数の近似



$$w = f(z)$$

$$z = f^{-1}(w)$$

$z_0 = 0$ の場合を考える

$$f^{-1}(0) = 0, f^{-1}'(0) > 0$$

$$f^{-1}(w) = w \exp(bw)$$

$$b(w) \approx B(w) = Q_0^* + \sum_{j=1}^N Q_j^* \log(w - x_j^*) \quad |x_1^*|, \dots, |x_N^*| > 1$$

境界条件 $f^{-1} \circ f(z \in C) = z$ より得た補間条件 (拘束条件)

$$\text{Re} B(F(y_k)) = -\log|F(y_k)| \quad y_1, \dots, y_N \in C.$$

近似写像関数 $F(z)$ はあらかじめ求めておく

[11] 天野 要, 代用電荷法に基づく双方向的な数値等角写像の方法, 情報処理 31, 5, 623-632 (1990).

写像関数の誤差

天野の方法において、誤差の評価は

$$f(z) = (z - z_0) \exp[g(z) + ih(z)] \\ \approx F(z) = (z - z_0) \exp[G(z) + iH(z)]$$

の中で代用電荷法を用いた $g \approx G$ 部分のみで写像関数自体の近似について評価ができていない

定理 JSIAM2005 岡野

$f: D \rightarrow$ 円板の近似 F について

$$D' \subset \bar{D} \text{ で } \|g - G\|_\infty \leq c\tau^{-N} \text{ ならば } \|h - H\|_\infty \leq c'\tau'^{-N} \text{ が言えて} \\ \|f - F\|_\infty \leq c''\tau''^{-N} \text{ が言える}$$

写像関数の誤差

証明の概略

定理 (桂田・岡本 [7,8])

適切な電荷点・拘束点のもと代用電荷法による近似解とその導関数について誤差の指数関数的減少が言える

$$z = x + iy \text{ としたときの } x, y \text{ に関する導関数 } g_x, g_y \text{ について} \\ \|g - G\|_\infty \leq c\tau^{-N} \Rightarrow \|g_x - G_x\|_\infty \leq c_1\tau_1^{-N}, \|g_y - G_y\|_\infty \leq c_1\tau_1^{-N}$$

を実現する $1 < \tau_1 < \tau$ が存在する。

さらに、等角写像の問題を想定した場合の滑らかな境界閉曲線を持つ領域 D では、上述の誤差の指数関数的減少は、 D とその境界を含む領域 $D \subset \subset CUD$ でも実現する。

写像関数の誤差

定理 Riemannの写像定理 (竜沢 [12])

Jordan閉曲線で囲まれた領域 D を単位円板上へ1対1に等角写像する写像関数 $w = f(z)$ は存在し、条件

$$f(\xi) = 0, \quad \arg f'(\xi) = \theta \quad \xi \in D \text{ は正規化点}$$

のもと一意に定まる。このとき、

$$f(z) = (z - \xi) \exp[g(z) + ih(z)]$$

とすれば、 $g(z)$ を Laplace 方程式の境界値問題の解として定め、 $h(z)$ を次式で定めることができる。

$$h(\xi) = \theta, \quad h(z) = \theta + \int_\xi^z -g_y dx + g_x dy$$

[12] 竜沢周雄, 関数論, 共立書店 (1980)

写像関数の誤差

天野の方法で求めた近似写像関数を

$$F(z) = (z - z_0) \exp[G(z) + iH(z)]$$

とすれば、 $G(z), H(z)$ は陽に得られ竜沢の証明に現れる $\xi = z_0$ としたときの等式

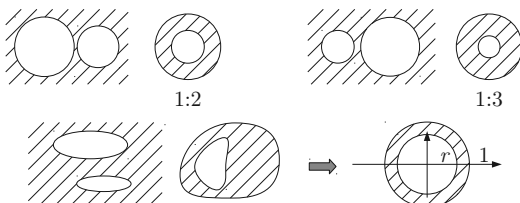
$$H(\xi) = \theta, \quad H(z) = \theta + \int_\xi^z -G_y dx + G_x dy$$

を厳密に満たし、岡本・桂田の導関数に関する指数関数的減少の評価式を当てはめることで、結論を得る。

$$|f(z) - F(z)| = |1 - \exp\{G(z) - g(z) + i[H(z) - h(z)]\}| \\ \leq |G(z) - g(z) + i[H(z) - h(z)]| \times \\ \exp\{|G(z) - g(z)| + |H(z) - h(z)|\}$$

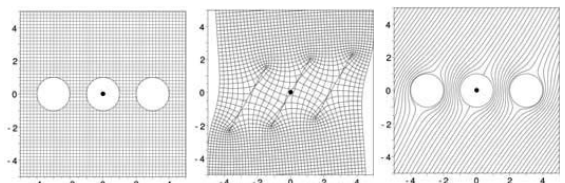
多重連結領域の等角写像と正準領域

- 単連結領域: 任意の領域間に等角写像が存在
∴ Riemannの写像定理
- 多重連結領域: 多重度が一致してもNG



正準スリット領域とポテンシャル流

- 複素ポテンシャルを等角写像によって得る
今井功「流体力学 (物理テキストシリーズ 9)」
岩波書店 (1993年)



直線スリット領域への数値等角写像



D : C_1, \dots, C_n を境界とし ∞ を含む n 重連結領域
 S : 実軸との角度 $\theta_1, \dots, \theta_n$ の直線スリットを伴う領域
 $f(\infty) = \infty$ かつ無限遠点の Laurent 級数が

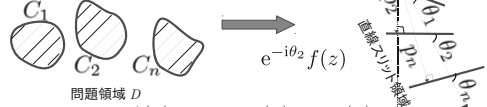
$$f(z) = z + \frac{a_1}{z} + \frac{a_2}{z^2} + \dots$$

であるという正規化条件のもとに一意に定まる
 写像関数 $f(z)$ を S_1, \dots, S_n とともに求める

[13] Shiba, M., On the Riemann-Roch theorem on open Riemann surfaces, J. Math. Kyoto Univ. 11, 3, 495-525 (1971).

直線スリット領域への数値等角写像

ポテンシャル問題の導出



正規化条件 $\lim_{z \rightarrow \infty} |f(z) - z| = 0 \Rightarrow u(\infty) + iv(\infty) = 0$
 境界条件 $C_m \mapsto S_m \Rightarrow \text{Im}[e^{-i\theta_m} f(z)] = p_m$ for $z \in C_m$
 $\Rightarrow \text{Im}\{e^{-i\theta_m} [g(z) + ih(z)]\} - p_m = -\text{Im}[e^{-i\theta_m} z]$ for $z \in C_m$.

代用電荷法を用いて $g(z) + ih(z)$ の境界値問題を解き p_1, \dots, p_n を定める。

直線スリット領域への数値等角写像

代用電荷法の適用

$$g(z) + ih(z) \approx G(z) + iH(z) = Q_0 + \sum_{l=1}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log(z - x_{lj})$$

1価性条件 $\oint_{C_l} dH = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0 \quad l = 1, \dots, n.$

正規化条件 $G(\infty) + iH(\infty) = 0 \rightarrow Q_0 = 0.$

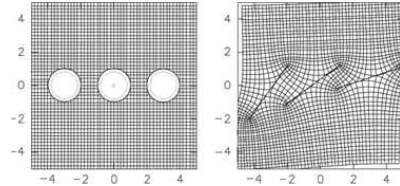
拘束条件 (境界条件)

$$\text{Im}\{e^{-i\theta_m} [G(y_{mk}) + iH(y_{mk})]\} - P_m = \text{Im}\{e^{-i\theta_m} y_{mk}\}$$

$$\sum_l \sum_j Q_{lj} [-\log |y_{mk} - x_{lj}| \sin \theta_m + \arg(y_{mk} - x_{lj}) \cos \theta_m] - P_m = -\text{Im}[e^{-i\theta_m} y_{mk}] \quad y_{m1}, \dots, y_{mN_m} \in C_m, \quad m = 1, \dots, n.$$

数値実験例、3つの円の外部領域

問題領域 D : $0, \pm 3$ 中心、半径1の3円の外部
 正準領域 S : $\theta_1 = 0.1\pi, \theta_2 = 0.2\pi, \theta_3 = 0.3\pi.$
 電荷点・拘束点: 半径比0.8の等角同相配置



問題領域中の直交グリッドとその写像

スリットからのズレによる誤差の指標

$$E_m^N = \max_{C_m} |e^{-i\theta} F_N(z) - P_m|,$$

m	1	2	3
E_m^{65}	2.1E-8	2.6E-8	3.4E-8

境界毎の誤差の指数関数的減少

$n=1$ の場合の連立方程式

$$G_{11} Q_1 = B_1 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ -1 & g_{11} & \dots & g_{1N_1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & g_{N_1 1} & \dots & g_{N_1 N_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ Q_{11} \\ \vdots \\ Q_{1N_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \text{Im}[e^{-i\theta_1} y_{11}] \\ \vdots \\ \text{Im}[e^{-i\theta_1} y_{1N_1}] \end{bmatrix}$$

$$g_{kj} \equiv -\log |y_{mk} - x_{lj}| \sin \theta_m + \arg(y_{mk} - x_{lj}) \cos \theta_m$$

多重連結領域 $n > 1$ の連立方程式

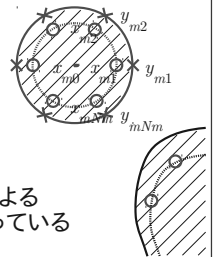
$$GQ = B \Leftrightarrow \begin{bmatrix} G_{11} & \dots & G_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n1} & \dots & G_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ \vdots \\ B_n \end{bmatrix}$$

境界毎の誤差の指数関数的減少

境界 C_m 上の補間に関わる部分を抜き出すと

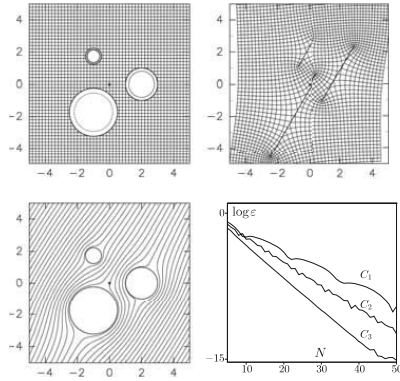
$$G_{mm} Q_m = B_m - \sum_{l \neq m} G_{ml} Q_l$$

$$G_{mm} = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ -1 & & & \\ \vdots & \left\{ \log \left| \frac{y_{mk} - x_{mj}}{y_{mk} - x_{m0}} \right| \right\} & & \\ -1 & & & \end{bmatrix}$$

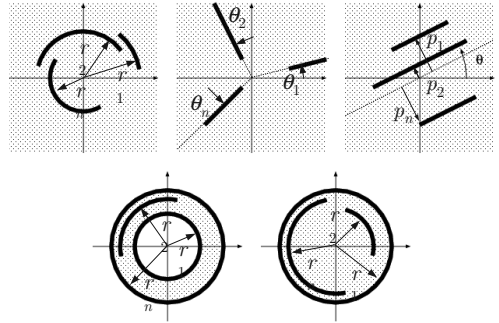


円形境界に適切な電荷点・拘束点による調和拡張可能な厳密解の補間になっている
 \Rightarrow 条件を満たし、誤差の指数関数的減少が期待できる

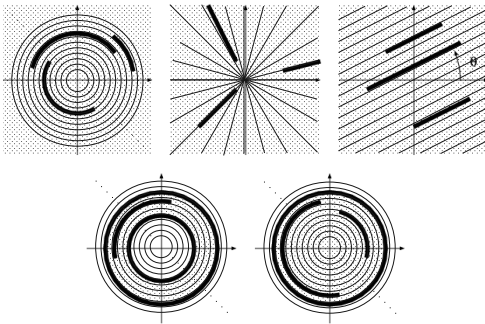
平行スリット領域への数値等角写像



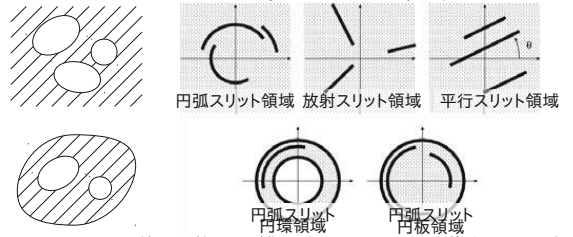
Nehariの正準スリット領域



Nehariの正準スリット領域



代用電荷法による数値等角写像と Nehariの正準スリット領域

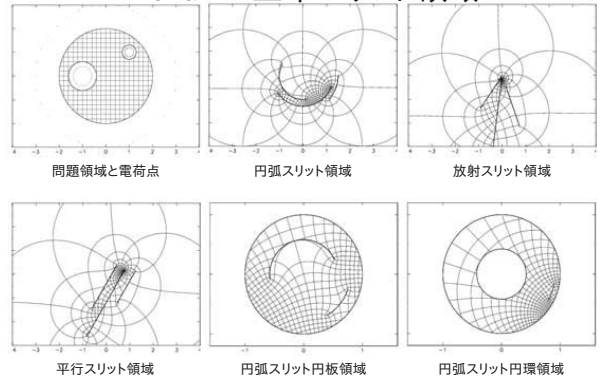


- [14] 天野要, 岡野大, 緒方秀教, 下平博巳, 杉原正顕, 代用電荷法による非有界な多重連結領域の統一的な数値等角写像の方法, 情報処理学会論文誌42, 3, pp.385-395(2001)
- [15] Okano, Ogata, Amano, and Sugihara, Numerical conformal mappings of bounded multiply connected domains by the charge simulation method, J.CAM 159, 109-117 (2001).

代用電荷法による数値等角写像と Nehariの正準スリット領域

円弧スリット領域 $f(z) = \frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty} \exp a(z)$
 放射スリット領域 $f(z) = \frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty} \exp ia(z)$
 平行スリット領域 $f(z) = \frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty} + e^{i\theta} ia(z)$
 正規化条件 $f(z_0) = 0, f(z_\infty) = \infty, \text{Res} f(z_\infty) = 1.$
 $\text{Re} a(z) = g(z)$ の境界条件と正規化条件
 $z \in C_m \Rightarrow g(z) - p_m = -t(z), a(\xi) = 0.$
 円弧スリット領域 $t(z) = \log \left| \frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty} \right|, \xi = z_\infty$
 放射スリット領域 $t(z) = \arg \left[\frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty} \right], \xi = z_\infty$
 平行スリット領域 $t(z) = \text{Im} \frac{1}{z_\infty - z_0} \frac{z - z_0}{z - z_\infty}, \xi = z_0$

代用電荷法による数値等角写像と Nehariの正準スリット領域



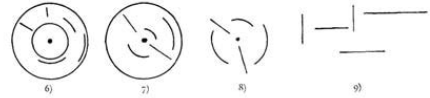
Koebe (1916)

- Abbildung mehrfach zusammenhängender schlichter Bereiche auf Schlitzbereiche, Paul Koebe, Acta Math. 41, pp.306--344(1916)
- 39種の正準スリット領域が提示されている
- 1~5番目はNehariの標準スリット領域に対応

sehen Gestalten des Bereichs B gelangen wir, wenn wir irgend ein Orthogonalkreissystem



in der z -Ebene ins Auge fassen entweder mit getrennten Hauptpunkten (*elliptisch*) mit den Nullpunkt als Zentrum angenommen. In diesem Falle ist unvermeidlich,



dass die beiden Hauptpunkte dem Innern des charakteristischen Bereichs zuge-

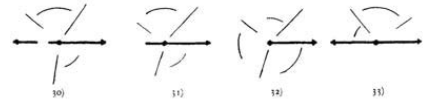
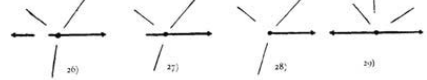
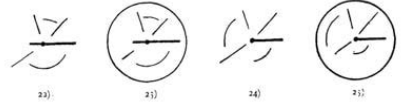
12-16- 4+7



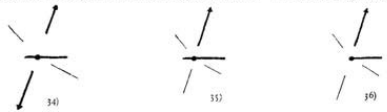
12. Der Bildbereich soll begrenzt sein von m , gegen das fundamentale Ge-



Das Wesentliche übersehen wir ohne Schwierigkeit. Sei L die linke Randlinie



begegnet grundsätzlich neuen Schwierigkeiten nicht. Wir erhalten *logarithmische*



Unstetigkeiten auf der Bezeichnung. Die Stellen, an welchen diese Unstetigkeiten

~13)までは済み、14)以降は準備中

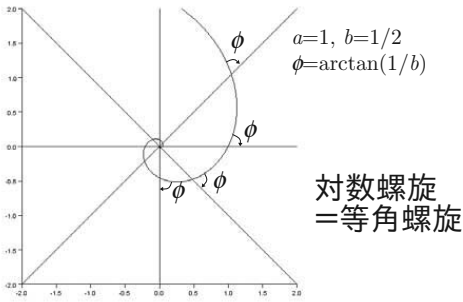
Koebe (1916)

- 12, 13番目に螺旋形のスリットを持つ領域



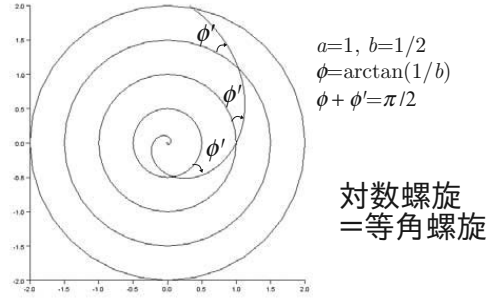
対数螺旋

- 極座標系 (r, θ) において $a=be^\theta$ を満たす曲線



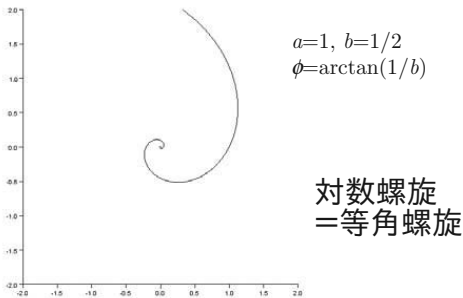
対数螺旋

- 極座標系 (r, θ) において $a=be^\theta$ を満たす曲線



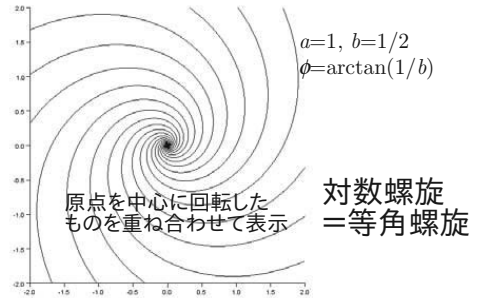
対数螺旋

- 極座標系 (r, θ) において $a=be^\theta$ を満たす曲線



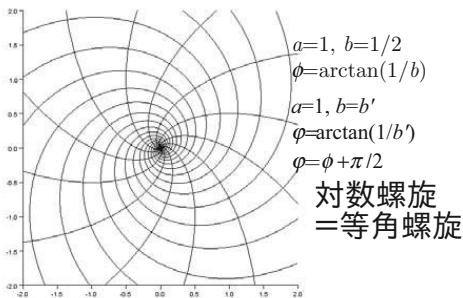
対数螺旋

- 極座標系 (r, θ) において $a=be^\theta$ を満たす曲線



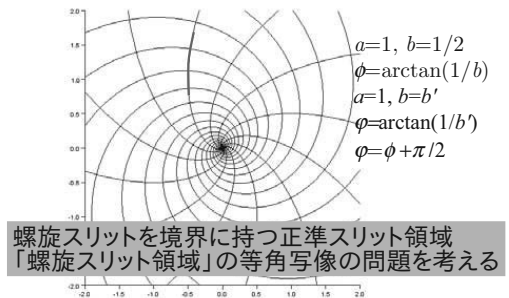
対数螺旋

- 極座標系 (r, θ) において $a=be^\theta$ を満たす曲線



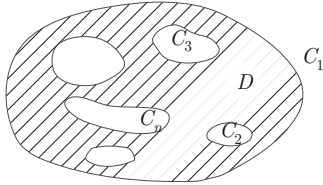
螺旋スリット

- ある(対数)螺旋の部分曲線を螺旋スリットと呼ぶ



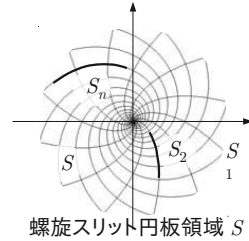
有界な n 重連結の問題領域

$C_1 \subset \mathbb{C}$: 有限長の滑らかな閉曲線
 C_2, \dots, C_n : C_1 に囲まれた交わらない滑らかな閉曲線
 D : C_2, \dots, C_n を境界とする有界な n 重連結問題領域



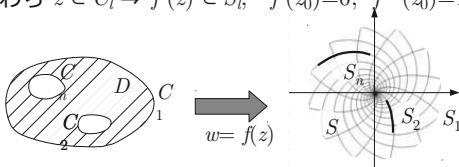
螺旋スリット円板領域

S_1 : 原点中心、半径 r_1 の円
 S_{jl} : 原点を端点とする対数螺旋の部分曲線 ($l=2, \dots, n$)
 $n-1$ 個の螺旋のパラメタ $b(\phi, \varphi)$ は予め与えておく



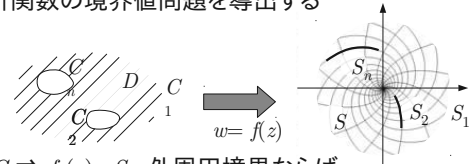
n 重連結領域 D から螺旋スリット円板領域への等角写像

- 問題領域 D から螺旋スリット円板領域 S への等角写像 $w = f(z)$ は次の条件のもと一意に定まる
 - 境界閉曲線 C_l はスリット S_l に写る ($l=1, \dots, n$)
 - 正規化点 $z_0 \in D$ は回転・拡大伸長なしに S の中心である原点に写る
- すなわち $z \in C_l \Rightarrow f(z) \in S_l, f(z_0)=0, f'(z_0)=1$.



境界値問題の導出

- $z \in C_l \Rightarrow f(z) \in S_l, f(z_0)=0, f'(z_0)=1$ を満たす等角写像の写像関数 $w=f(z)$ を求める
- 解析関数の境界値問題を導出する



- $z \in C_1 \Rightarrow f(z) \in S_1$: 外周円境界ならば $|f(z)|=r_1$ を満たす (r_1 は未知量)

境界値問題の導出

- $z \in C_l \Rightarrow f(z) \in S_l$: パラメタ a, b の螺旋スリットならば $|f(z)|=a \exp[b \arg f(z)]$ より $\log|f(z)| - b \arg f(z) = \log a$
 $b = \cot \phi$ より $\sin \phi \log|f(z)| - \cos \phi \arg f(z) = \text{Im}[e^{i\phi} \log f(z)]$
 境界条件: $z \in C_l \Rightarrow \text{Im}[e^{i\phi} \log f(z)] = \sin \phi_l \log a_l$
 ※螺旋スリット S_l のパラメタ ϕ_l は与定数、 a_l は未知量

境界値問題の導出

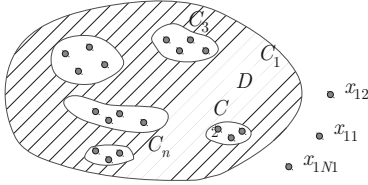
- D から S への写像関数 $w = f(z)$ の満たす境界条件 $z \in C_1 \Rightarrow \log|f(z)| = \log r_1,$
 $z \in C_l \Rightarrow \text{Im}[\exp(i\phi_l) \log f(z)] = \sin \phi_l \log a_l \quad l = 2, \dots,$
 ※パラメタ ϕ_l は与定数、 r_1, a_l は未知量
- さらに $f(z) = (z - z_0) \exp a(z)$ とおけば
 正規化条件: $f(z_0)=0, f'(z_0)=1 \rightarrow a(z_0)=0$
 $z \in C_1 \Rightarrow \text{Re}[a(z)] - \log r_1 = -\log|z - z_0|,$
 $z \in C_l \Rightarrow \text{Im}[\exp(i\phi_l) a(z)] - \sin \phi_l \log a_l = -\text{Im} \exp(i\phi_l) \log(z - z_0) \quad l = 2, \dots, n.$

近似解析関数の構成

$a(z) \approx A(z)$ を複素対数ポテンシャルの重ね合せで表す

$$A(z) = Q_0 + \sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log(z - x_{1j}) + i \sum_{l=2}^n e^{-i\phi_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log(z - x_{lj})$$

電荷点 x_{lj} は、それぞれ境界 C_l を越えた D の外部にとる



定数項 Q_0 の消去

• $a(z_0) = 0$ より $A(z_0) = 0$ とすれば Q_0 が定まる

$$A(z_0) = Q_0 + \sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log(z_0 - x_{1j}) + i \sum_{l=2}^n e^{-i\phi_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log(z_0 - x_{lj}) = 0$$

• $A(z)$ を書きなおして

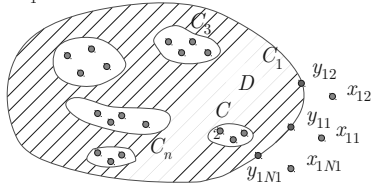
$$A(z_0) = \sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log \frac{z - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} + i \sum_{l=2}^n e^{-i\phi_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - x_{lj}}{z_0 - x_{lj}}$$

境界条件と拘束条件

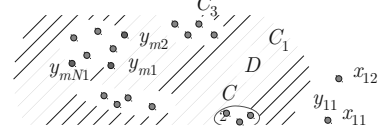
• $z \in C_1 \Rightarrow \text{Re}[a(z)] - \log r_1 = -\log|z - z_0|$ より

$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log \left| \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right| - \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \text{Im} \left[e^{-i\phi_l} \log \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] - \log R_1 = -\log|y_{1k} - z_0|$$

$y_{11}, \dots, y_{1N_1} \in C_1$: 拘束点



境界条件と拘束条件



$z \in C_m \Rightarrow \text{Im}[e^{i\phi_m} a(z)] - \sin \phi_m \log a_m = -\text{Im}[e^{i\phi_m} \log(z - z_0)]$

$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \text{Im} \left[e^{i\phi_m} \log \frac{y_{mk} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] + \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \text{Re} \left[e^{i(\phi_m - \phi_l)} \log \frac{y_{mk} - x_{lj}}{z_0 - x_{lj}} \right] - \sin \phi_m \log a_m = -\text{Im} \log [e^{i\phi_m} \log(y_{mk} - z_0)]$$

$m=2, \dots, n, y_{m1}, \dots, y_{mNm} \in C_m$ は拘束点

拘束条件

$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log \left| \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right| - \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \text{Im} \left[e^{-i\phi_l} \log \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] - \log R_1 = -\log|y_{1k} - z_0|$$

$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \text{Im} \left[e^{i\phi_m} \log \frac{y_{mk} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] + \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \text{Re} \left[e^{i(\phi_m - \phi_l)} \log \frac{y_{mk} - x_{lj}}{z_0 - x_{lj}} \right] - \sin \phi_m \log a_m = -\text{Im} \log [e^{i\phi_m} \log(y_{mk} - z_0)]$$

$m=2, \dots, n, y_{m1}, \dots, y_{mNm} \in C_m$ は拘束点

不変性条件と一価性条件

• 代用電荷法の不変性条件より $\sum_{l=1}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0$

• $A(z)$ の一価条件より $l=2, \dots, n$ において

$$\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0$$

• 両者を併せて $l=1, \dots, n$ において

$$\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0$$

連立方程式と未定係数

- 以下の連立方程式により近似解析関数の重み Q_{lj} と外周円・螺旋スリットのパラメタ近似値 $\log R_1, \log A_m$ を定める

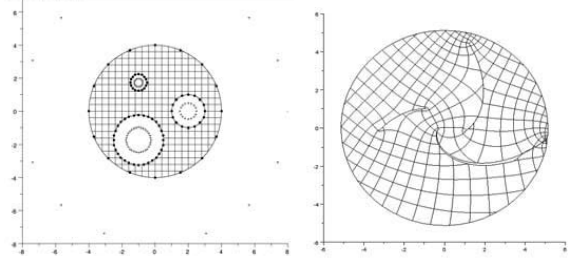
$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \log \left| \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right| - \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \operatorname{Im} \left[e^{-i\phi_l} \log \frac{y_{1k} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] - \log R_1 = -\log |y_{1k} - z_0|$$

$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} \operatorname{Im} \left[e^{i\phi_m} \log \frac{y_{mk} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] + \sum_{l=2}^n \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \operatorname{Re} \left[e^{i(\phi_m - \phi_l)} \log \frac{y_{mk} - x_{1j}}{z_0 - x_{1j}} \right] - \sin \phi_m \log a_m = -\operatorname{Im} \log [e^{i\phi_m} \log (y_{mk} - z_0)]$$

$m=2, \dots, n, y_{m1}, \dots, y_{m N_m} \in C_m$ は拘束点

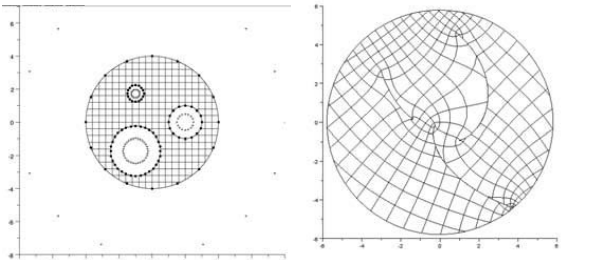
$$\sum_{j=1}^{N_1} Q_{1j} = 0 \quad m=1, \dots, n.$$

数値実験例



4重連結の円孔領域 螺旋スリット円板領域 ($\phi_{1,2,3} = \pi/3$)
 左下の孔にのみ32点の電荷を配置、他の境界は16点

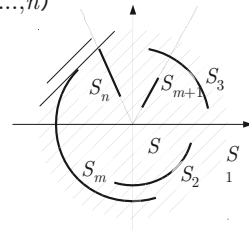
数値実験例



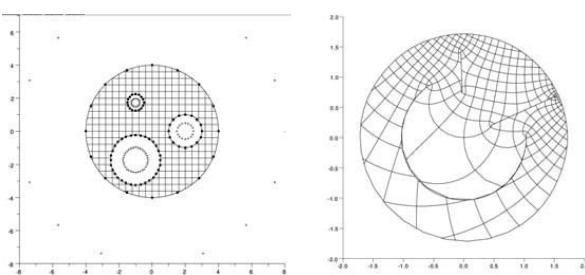
4重連結の円孔領域 螺旋スリット円板領域 ($\phi_1 = \pi/6, \phi_2 = \pi/3, \phi_3 = -\pi/6$)
 左下の孔にのみ32点の電荷を配置、他の境界は16点

(円弧・放射スリット円板領域)

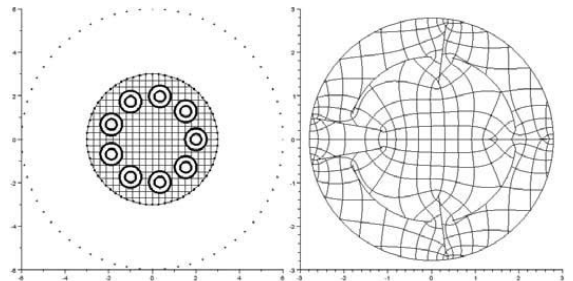
- S_1 : 原点中心、半径 r_1 の円
- S_j : 原点中心、半径 $r_j (< r_1)$ の円弧スリット ($j=2, \dots, m$)
- 原点中心、偏角 θ_j の放射スリット ($j=m+1, \dots, n$)

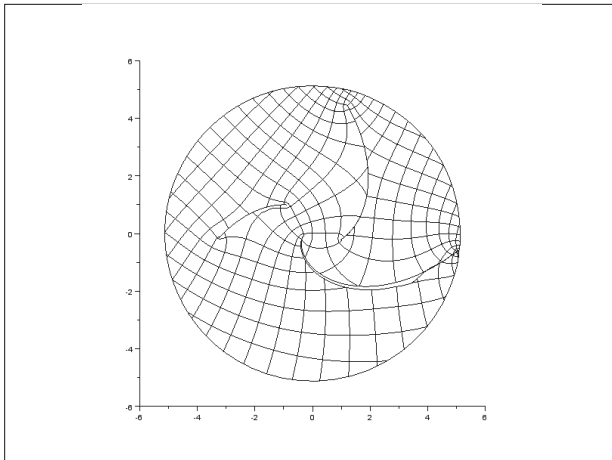
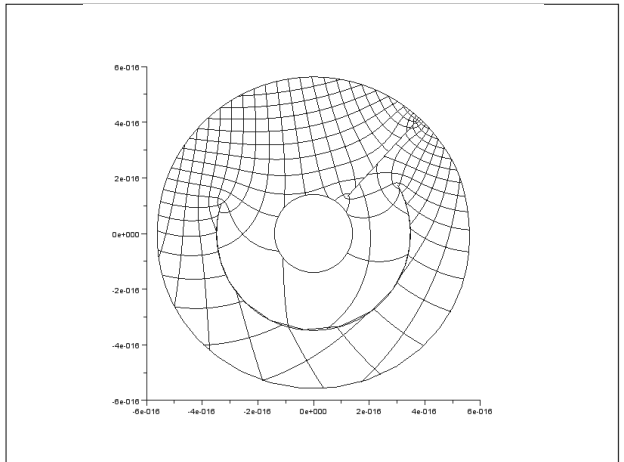
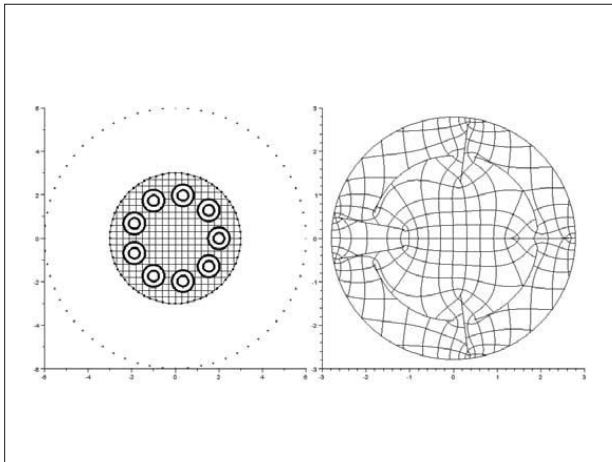


数値実験例



4重連結の円孔領域 円弧・放射スリット円板領域
 左下の孔にのみ32点の電荷を配置、他の境界は16点





正準スリット領域への数値等角写像 ～統一的取扱～

直線スリット領域 $f(z) = z + a(z)$

螺旋スリット領域 $f(z) = (z - z_0) \exp a(z)$

近似 $a(z) \approx A(z) = i \sum_{l=1}^n e^{i\theta_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - x_{lj}}{z - z_{l0}}$

連立方程式 $\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0 \quad l = 1, \dots, n,$
 $\sum_l \sum_j \text{Im}[e^{i(\theta_l - \theta_m)} Q_{lj} \log \frac{y_{mk} - x_{lj}}{y_{mk} - z_{l0}}] - P_m = t(y_{mk})$

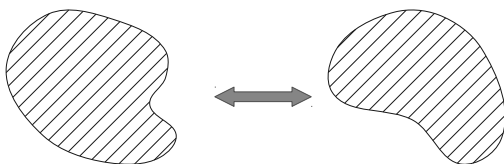
直線スリット領域 $t(z) = \text{Im}[e^{-i\theta_m} z],$

螺旋スリット領域 $t(z) = \text{Im}[e^{-i\theta_m} \log(z - z_0)].$

拘束点 $y_{mk} \in C_m \quad k = 1, \dots, N_m, m = 1, \dots, n.$

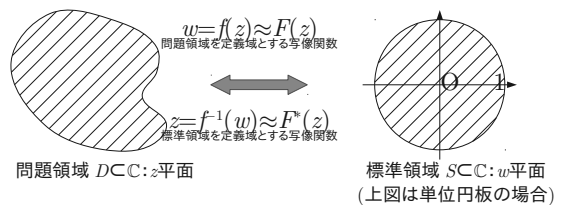
標準領域を介した数値等角写像

Riemannの写像定理のもと、任意の単連結領域は等角同値で2領域間には等角写像が存在



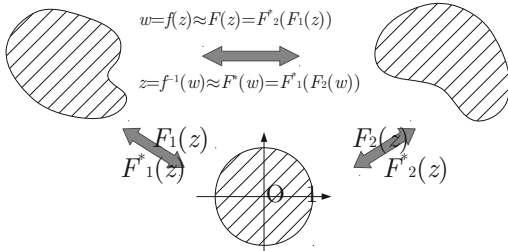
標準領域を介した数値等角写像

代用電荷法による数値等角写像の方法は、2つの写像関数をほぼ同様の形式で近似する方法



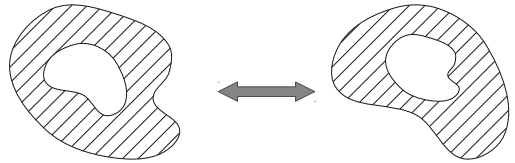
標準領域を介した数値等角写像

標準領域を介して、任意の単連結領域間の数値等角写像を定めることができる



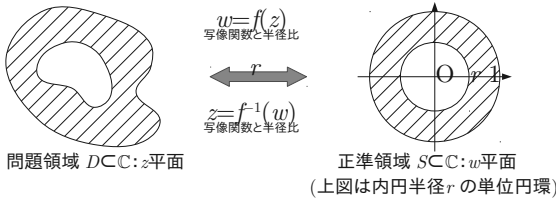
正準領域を介した数値等角写像

多重連結領域の等角同値性は保証されず、多重度が一致しても等角写像の存在は不明



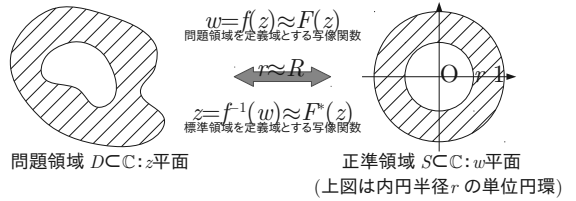
正準領域を介した数値等角写像

等角写像の問題では、標準領域の代わりに、正準領域を置き、一定の自由度のもと写像を求める



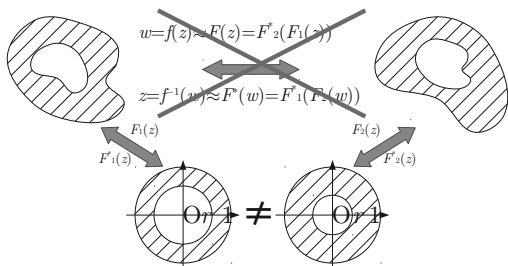
正準領域を介した数値等角写像

多重連結領域についても、2つの写像関数をほぼ同様の形式で近似する方法は実現している

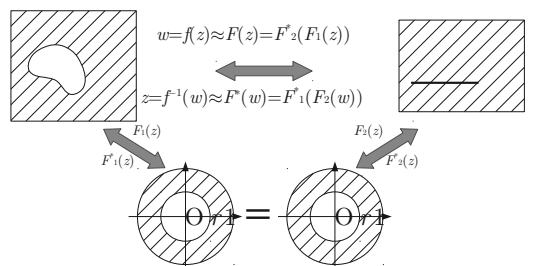


正準領域を介した数値等角写像

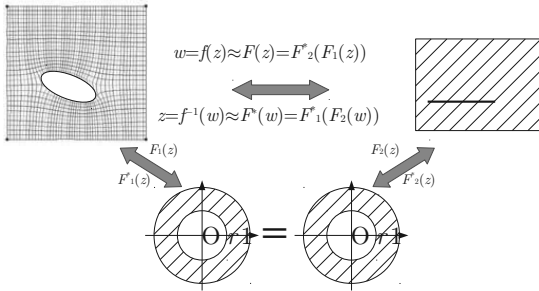
等角同値でない領域の正準領域は異なり、合成関数による等角写像の構成はできない。



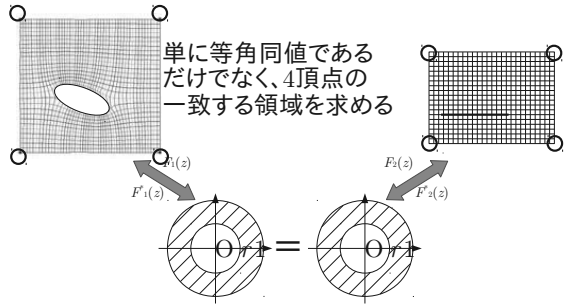
円孔を伴う矩形領域からスリットを伴う矩形領域への数値等角写像



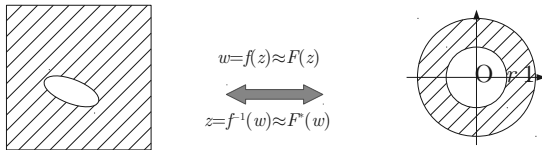
円孔を伴う矩形領域からスリットを伴う矩形領域への数値等角写像



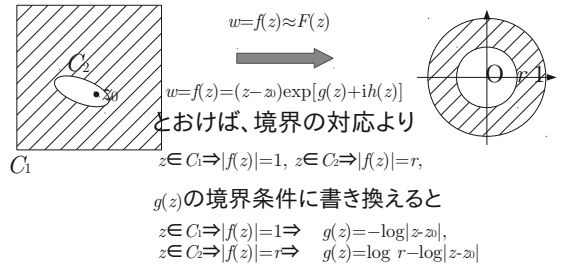
円孔を伴う矩形領域からスリットを伴う矩形領域への数値等角写像



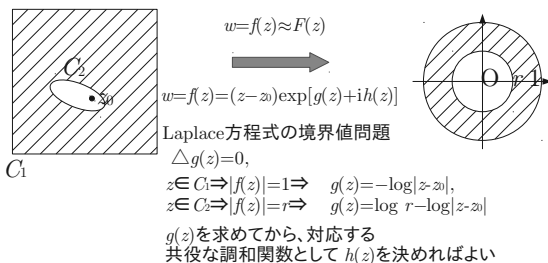
有界な二重連結領域から単位円環領域への数値等角写像



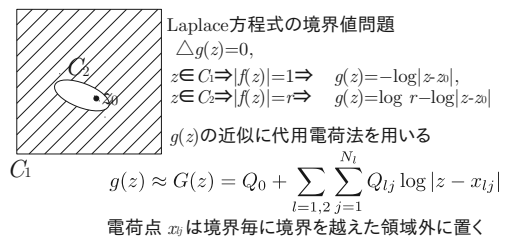
有界な二重連結領域から単位円環領域への数値等角写像



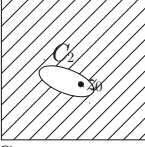
有界な二重連結領域から単位円環領域への数値等角写像



有界な二重連結領域から単位円環領域への数値等角写像



有界な二重連結領域から 単位円環領域への数値等角写像



$$g(z) \approx G(z) = Q_0 + \sum_{l=1,2} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log |z - x_{lj}|$$

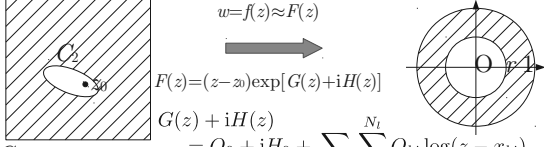
$$G(y_{mk}) = Q_0 + \sum_{l=1,2} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log |y_{mk} - x_{lj}| = \log r_m,$$

境界上の拘束点 $y_{mk} \in C_m$ で境界条件を満たし

$$\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0 \quad l = 1, 2$$

1価性条件・不変条件を満たすよう Q_0 を決める

有界な二重連結領域から 単位円環領域への数値等角写像



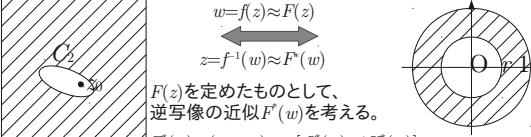
$$w = f(z) \approx F(z)$$

$$F(z) = (z - z_0) \exp[G(z) + iH(z)]$$

$$G(z) + iH(z) = Q_0 + iH_0 + \sum_{l=1,2} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log(z - x_{lj})$$

適切な条件を課して回転の自由度に対応する定数 H_0 を決めればよい

有界な二重連結領域から 単位円環領域への数値等角写像



$$w = f(z) \approx F(z)$$

$$z = f^{-1}(w) \approx F^*(w)$$

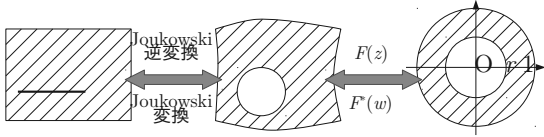
$F(z)$ を定めたものとして、逆写像の近似 $F^*(w)$ を考える。

$$F^*(w) = (w - w_0) \exp[G^*(w) + iH^*(w)]$$

$$G^*(w) + iH^*(w) = Q_0^* + iH_0^* + \sum_{l=1,2} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj}^* \log(w - x_{lj})$$

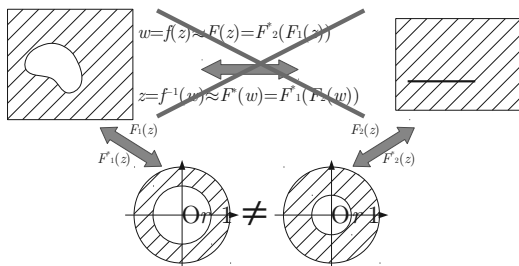
$w = F(z)$ を境界条件として用いる: $F^*(F(y_{mk})) = y_{mk} \quad y_{mk} \in C_m$

スリットを伴う矩形領域から 単位円環領域への数値等角写像



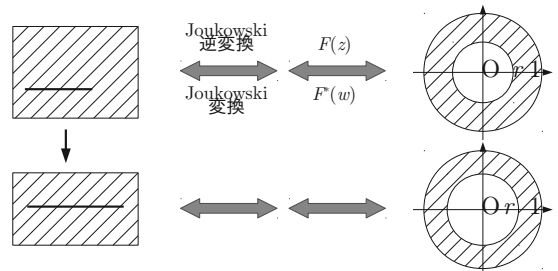
スリットを伴う矩形領域に直接数値等角写像の方法を適用することができないので、Joukowski変換・逆変換を用いて得られる二重連結領域を介した数値等角写像を考える。

それぞれの領域と単位円環領域との間の近似写像関数は得られたが、等角同値でない領域間の等角写像を得ることはできない。

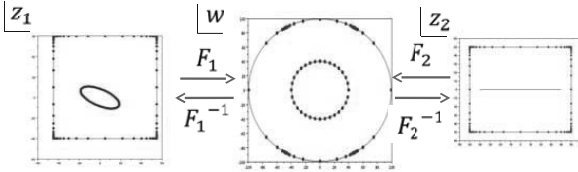


そこでスリットを伴う矩形領域のスリットの位置や大きさを変え、場合によっては長方形境界の形を変えてもう一方の領域と等角同値な領域を探索することを考える。

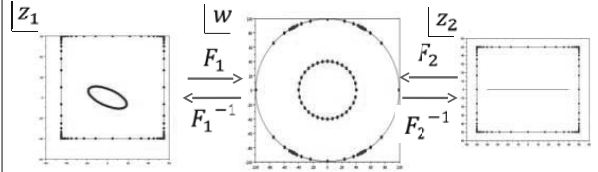
具体的には写像後の単位円環領域の内円半径を一致させる。



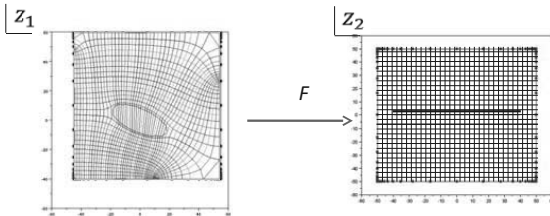
実際に直線スリットを矩形領域の中央に置き、スリットの長さを内円半径の大小関係を元に反復改良するだけでおおよその場合に目的の単位円環領域を得ることができた。



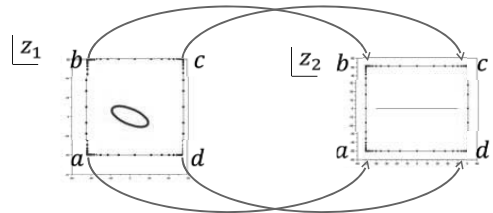
実際に直線スリットを矩形領域の中央に置き、スリットの長さを内円半径の大小関係を元に反復改良するだけでおおよその場合に目的の単位円環領域を得ることができた。



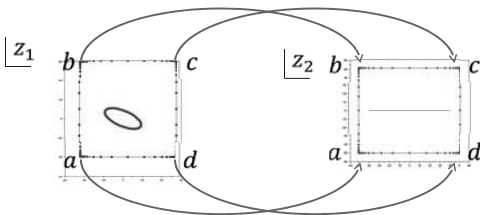
単位円環領域が一致するだけでは矩形メッシュに対応するメッシュを取ることはできない。



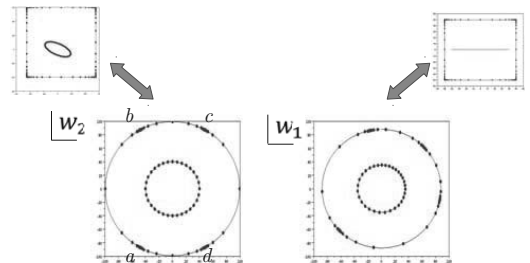
2つの矩形領域長方形境界に沿ったメッシュを生成するためには、2つ長方形境界の4つの頂点が等角写像によって対応していなければならない



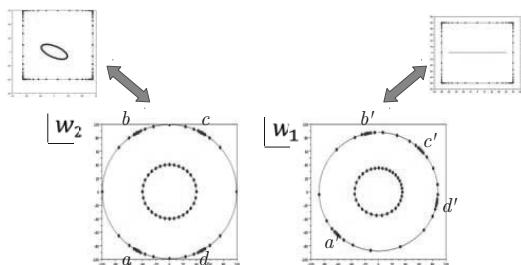
2つの矩形領域長方形境界に沿ったメッシュを生成するためには、2つ長方形境界の4つの頂点が等角写像によって対応していなければならない



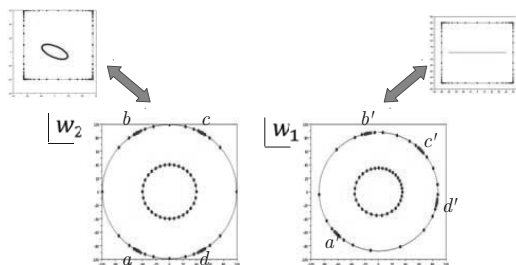
まず孔の空いた矩形領域と単位円環領域の等角写像を確定し、長方形境界の4頂点に対応する単位円上の偏角 (a, b, c, d) を定める。



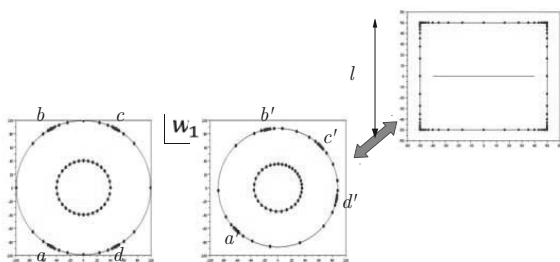
スリットを伴う矩形領域についても数値等角写像を求め、同様に4頂点に対応する単位円上の偏角を(a, b, c, d)とする。



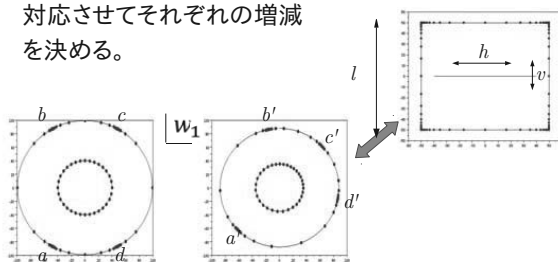
回転の自由度を念頭に、偏角の一つを基準とし残りの3頂点に対応する偏角をそれぞれ比較してズレを求める。



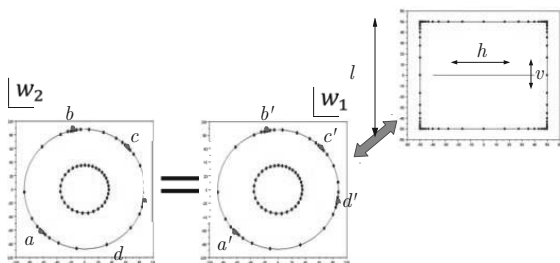
b' のズレを長方形境界の高さ l に対応づけて $b-a$ と $b'-a'$ の差を元に l の増減を決める。



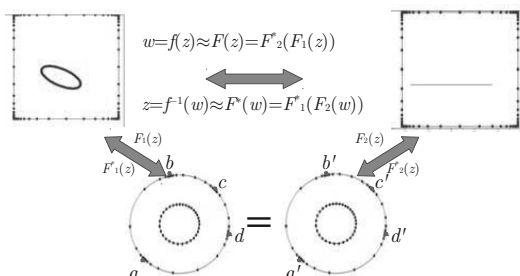
同様に c' のズレをスリットの実軸方向の位置 h と d' のズレをスリットの虚軸方向の位置 v と対応させてそれぞれの増減を決める。



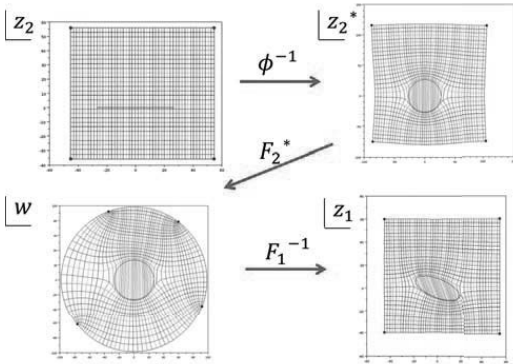
パラメタを反復的に調整することで長方形境界の4つの頂点の写像先を揃えることができる。



長方形境界の4頂点に対応し、等角同値な矩形領域を得ることが出来た



境界に並行で垂直なメッシュの描画



おわりに

- 等角写像の数値計算法について、代用電荷法を用いる「天野の方法」を紹介した単連結・多重連結領域の問題への様々な適用を示した
- 多重連結領域の正準スリット領域について統一的な取扱いができることを示した
- 正準領域を介した双方向の数値等角写像を利用することで、より広い応用の可能性があることを示した

おわりに

- Koebeの正準スリット領域について、14番以降についての計算法が存在する

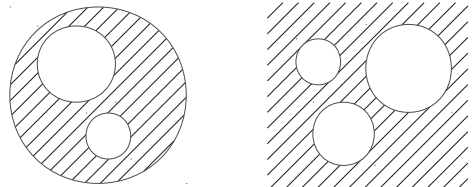
[4]Nasser, M.M.S., A fast boundary integral equation method for conformal mapping of multiply connected regions, SIAM J. Sci. Comp. **35**, 3, 1730-1736 (2013).

[16]Nasser, M.M.S., Numerical conformal mapping of multiply connected regions onto the fifth category of Koebe's canonical slit regions, J. Math. Analysis and Applications **398**, 2, 729-743 (2013).

円孔領域

今後取り組むべき正準領域

- 円形境界からなる正準領域
- 「Koebeの方法」が知られている



離散冪函数の明示公式と諸性質

(An explicit formula and some properties of a discrete power function)

増田哲, 青学大・理工

(Tetsu Masuda, Aoyama Gakuin University)

(共同研究者: 安藤央, 梶原健司, Mike Hay)

概要

Bobenko らにより導入された離散冪函数が, 第 6 パンルヴェ方程式の超幾何 τ 函数を用いて明示的に表されることを示す。この事実は, 離散冪函数を定める差分方程式系が, 第 6 パンルヴェ方程式の Bäcklund 変換 (の一部) であることに由来する。Bobenko らによるもとの定義では, 離散冪函数の指数の値や定義域に対して強い制限が課されている。しかしながら, 我々が得た明示公式から直ちにわかるように, 指数については偶数を除く任意の複素数に, 定義域については Riemann 面の離散類似にまで拡張できる。また, 指数の実部が 1 に等しいとき, 離散冪函数ははめ込みであることもわかる。

Abstract

We present an explicit formula for the discrete power function introduced by Bobenko, which is expressed in terms of the hypergeometric τ functions for the sixth Painlevé equation. The original definition of the discrete power function imposes strict conditions on the domain and the value of the exponent. However, we show that one can extend the value of the exponent to arbitrary complex numbers except even integers and the domain to a discrete analogue of the Riemann surface. Moreover, we show that the discrete power function is an immersion when the real part of the exponent is equal to one.

解析函数の離散類似

- circle packings や circle patterns の理論に基づいて発展
 - Thurston のアイデア：
circle packings を Riemann 写像の近似として用いる。
- 多くの重要な性質が明らかにされている。
- 最大値原理や Schwarz の補題の離散類似 [Rodin]
 - 一意化定理の離散類似 [Beardon & Stephenson]

1

可積分系との関連

- 四角格子の組合せ論に付随する circle patterns
 $e^z, \operatorname{erf}(z)$ [Schramm] $z^\gamma, \log z$ [Bobenko-Pikall, Agafonov-Bobenko]
- 六角格子に付随する circle patterns
 $z^\gamma, \log z$ [Bobenko-Hoffmann-Suris]

離散冪函数

- P_{VI} と密接に関係

講演の流れ

- 離散冪函数の明示公式
- 定義域の「離散 Riemann 面」への拡張
- $\operatorname{Re} \gamma = 1$ のとき「はめ込み」であること

2

離散正則函数 Bobenko, Pinkall (1996)

定義 写像 $f : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ を考え, $f_{n,m} = f(n, m)$ と記す.

任意の $(n, m) \in \mathbb{Z}^2$ に対し,

$$\frac{(f_{n,m} - f_{n+1,m})(f_{n+1,m+1} - f_{n,m+1})}{(f_{n+1,m} - f_{n+1,m+1})(f_{n,m+1} - f_{n,m})} = -1$$

が成り立つとき, f は離散正則であるという.

3

- Cauchy-Riemann 関係式の離散類似である.
- $f : D \subset \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ が正則ならば, 任意の $(x, y) \in D$ に対し,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(f(x, y) - f(x + \epsilon, y))(f(x + \epsilon, y + \epsilon) - f(x, y + \epsilon))}{(f(x + \epsilon, y) - f(x + \epsilon, y + \epsilon))(f(x, y + \epsilon) - f(x, y))} = -1$$

$$\left(\iff \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = 0 \right)$$

注釈

- (この定義による) 離散正則函数の具体例としては, 指数函数, 対数函数, 冪函数しか知られていない.

4

離散冪函数 Bobenko, Pinkall (1999)

定義 $\gamma \in \mathbb{R} - 2\mathbb{Z}$ とする. 離散正則函数 $f : \mathbb{Z}_+^2 \rightarrow \mathbb{C}$ を考える.

任意の $(n, m) \in \mathbb{Z}_+^2$ に対し,

$$\begin{aligned} \gamma f_{n,m} = 2n & \frac{(f_{n+1,m} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n-1,m})}{f_{n+1,m} - f_{n-1,m}} \\ & + 2m \frac{(f_{n,m+1} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n,m-1})}{f_{n,m+1} - f_{n,m-1}} \end{aligned}$$

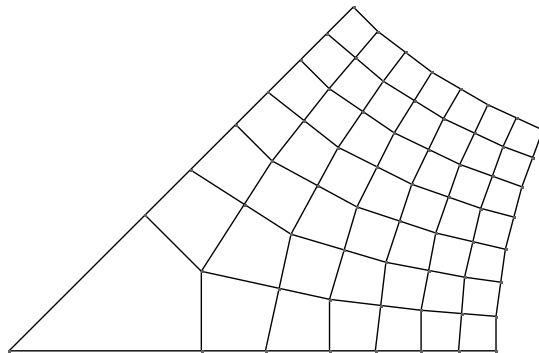
が成り立つとする. 但し, 初期条件は,

$$f_{0,0} = 0, \quad f_{1,0} = 1, \quad f_{0,1} = e^{\pi i \gamma / 2}$$

で与えられる. このとき, $f = f_{n,m}$ を離散冪函数と呼ぶ.

連続極限: $\gamma f = z \frac{\partial f}{\partial z}$

5



離散冪函数: $\gamma = 1/2$

6

注釈

- なぜ $\gamma \in \mathbb{R} - 2\mathbb{Z}$ か?
なぜ定義域を第 1 象限に限るのか?
 \implies ある幾何的な要請に由来
- 幾何を一旦忘れれば, γ の値がとり得る範囲は
$$\gamma \in \mathbb{C} - 2\mathbb{Z}$$
にまで拡張できる (更に, $\gamma \in \mathbb{C}$ とすることも可能).
- 定義域も, \mathbb{Z}^2 に拡張できる.
 \implies さらに「離散 Riemann 面」にまで拡張できる.

7

離散 Schwarzian KdV 方程式 (LSKdV)

$$\frac{(f_{n,m} - f_{n+1,m})(f_{n+1,m+1} - f_{n,m+1})}{(f_{n+1,m} - f_{n+1,m+1})(f_{n,m+1} - f_{n,m})} = \frac{1}{t}$$

これと, 差分方程式

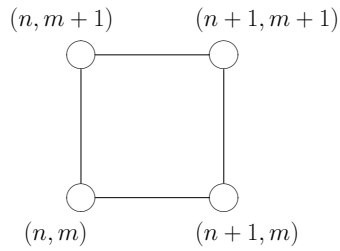
$$\begin{aligned} \gamma f_{n,m} = 2n \frac{(f_{n+1,m} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n-1,m})}{f_{n+1,m} - f_{n-1,m}} \\ + 2m \frac{(f_{n,m+1} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n,m-1})}{f_{n,m+1} - f_{n,m-1}} \end{aligned}$$

とを連立させて考える.

8

離散 Schwarzian KdV 方程式

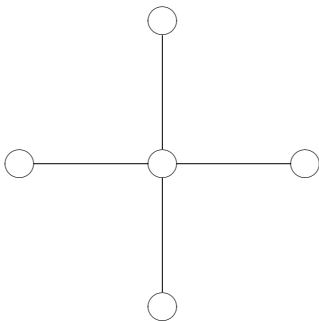
$$\frac{(f_{n,m} - f_{n+1,m})(f_{n+1,m+1} - f_{n,m+1})}{(f_{n+1,m} - f_{n+1,m+1})(f_{n,m+1} - f_{n,m})} = \frac{1}{t}$$



9

差分方程式

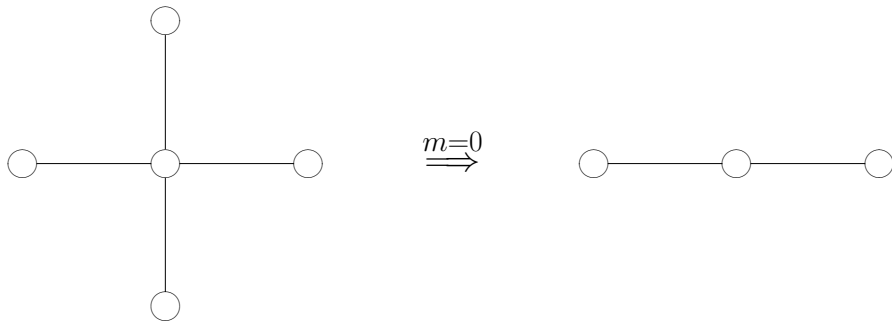
$$\begin{aligned} \gamma f_{n,m} = 2n & \frac{(f_{n+1,m} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n-1,m})}{f_{n+1,m} - f_{n-1,m}} \\ & + 2m \frac{(f_{n,m+1} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n,m-1})}{f_{n,m+1} - f_{n,m-1}} \end{aligned}$$



10

差分方程式 ($m = 0$)

$$\gamma f_{n,0} = 2n \frac{(f_{n+1,0} - f_{n,0})(f_{n,0} - f_{n-1,0})}{f_{n+1,0} - f_{n-1,0}}$$



10

初期条件も一般化

$$f_{0,0} = 0, \quad f_{1,0} = c_0, \quad f_{0,1} = c_1 t^r$$

ここで, $c_0, c_1 \in \mathbb{C}^\times$ であり, $\gamma = 2r$ とした.

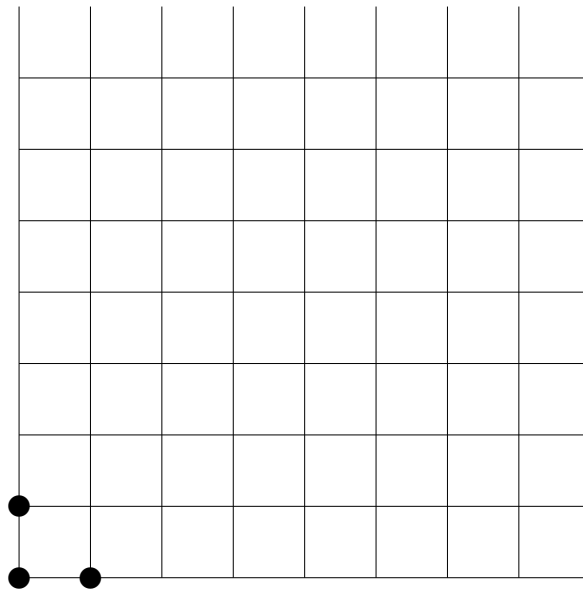
注釈

- 離散冪函数の明示公式を得るには,

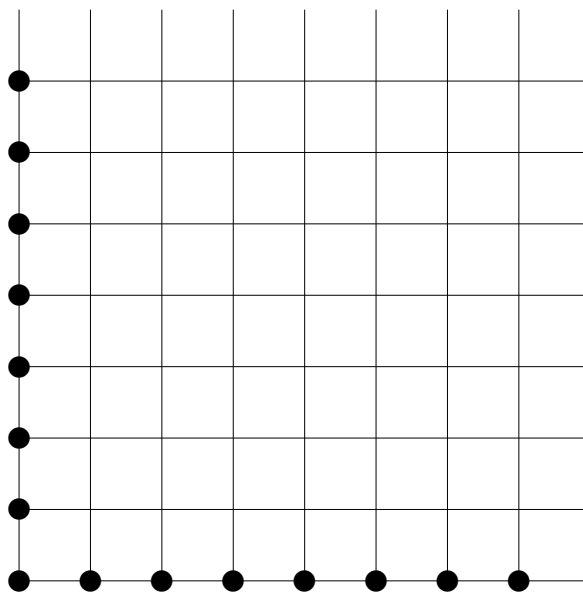
$$c_0 = c_1 = 1 \quad \text{および} \quad t = e^{\pi i} (= -1)$$

と特殊化すればよい.

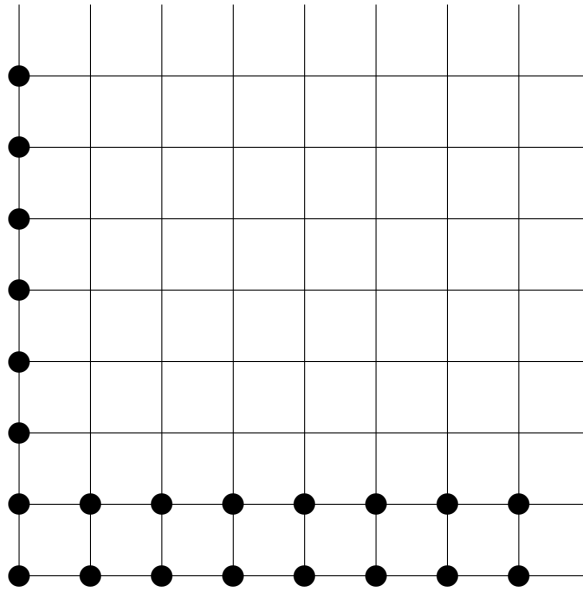
11



12



12



12

Painlevé VI 方程式との関係

LSKdV と差分方程式 = P_{VI} の Bäcklund 変換の一部

変数 $v_{n,m}$ を導入

$$\begin{cases} f_{n,m} - f_{n+1,m} = t^{-\frac{1}{2}} v_{n,m} v_{n+1,m} \\ f_{n,m} - f_{n,m+1} = v_{n,m} v_{n,m+1} \end{cases}$$

変数 t への依存性を以下で要請

$$-2t \frac{d}{dt} \log v_{n,m} = n \frac{v_{n+1,m} - v_{n-1,m}}{v_{n+1,m} + v_{n-1,m}}$$

13

命題 変数 $w = w_{n,m} = w_{n,m}(t)$ を

$$w_{n,m} = t^{\frac{1}{2}} \frac{v_{n+1,m}}{v_{n,m+1}}$$

で導入すると, w は P_{VI}

$$\begin{aligned} \frac{d^2 w}{dt^2} = & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{w} + \frac{1}{w-1} + \frac{1}{w-t} \right) \left(\frac{dw}{dt} \right)^2 - \left(\frac{1}{t} + \frac{1}{t-1} + \frac{1}{w-t} \right) \frac{dw}{dt} \\ & + \frac{w(w-1)(w-t)}{2t^2(t-1)^2} \left[\kappa_{\infty}^2 - \kappa_0^2 \frac{t}{w^2} + \kappa_1^2 \frac{t-1}{(w-1)^2} + (1-\theta^2) \frac{t(t-1)}{(w-t)^2} \right] \end{aligned}$$

を満たす. 但し,

$$\begin{aligned} \kappa_{\infty}^2 = & \frac{1}{4}(\mu - \nu + m - n)^2, \quad \kappa_0^2 = \frac{1}{4}(\mu - \nu - m + n)^2, \\ \kappa_1^2 = & \frac{1}{4}(\mu + \nu - m - n - 1)^2, \quad \theta^2 = \frac{1}{4}(\mu + \nu + m + n + 1)^2 \end{aligned}$$

であり, $\gamma = 1 + 2\mu$ および $\nu = (-1)^{m+n}\mu$ である.

超幾何タウ函数: $\tau_{n'}(a, b, c; t)$

$$\tau_{n'}(a, b, c; t) = \det(\varphi(a+i-1, b+j-1, c; t))_{1 \leq i, j \leq n'}$$

$$\begin{aligned} \varphi(a, b, c; t) = & c_0 \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(c)} {}_2F_1(a, b, c; t) \\ & + c_1 \frac{\Gamma(a-c+1)\Gamma(b-c+1)}{\Gamma(2-c)} t^{1-c} {}_2F_1(a-c+1, b-c+1, 2-c; t) \end{aligned}$$

註釈

- 超幾何微分方程式の, 原点 ($t=0$) 近傍での解で, 特性指数が $0, 1-c$ であるものの線型結合

命題 M. (2004)

$$w = \frac{\tau_{n'}(a+1, b+1, c+1)\tau_{n'+1}(a, b+1, c)}{\tau_{n'}(a, b+1, c)\tau_{n'+1}(a+1, b+1, c+1)}$$

は, P_{VI} を満たす. 但し,

$$\kappa_\infty = a + n', \quad \kappa_0 = b - c + 1 + n', \quad \kappa_1 = c - a, \quad \theta = -b$$

である.

定理 $(n, m) \in \mathbb{Z}_+^2$ に対し, $f_{n,m}$ は以下の表示を持つ.

1. $n \leq m$ のとき

$$f_{n,m} = \begin{cases} c_1 t^{r-n} N \frac{(r+1)_{N-1}}{(-r+1)_N} \frac{\tau_n(-N, -r-N+1, -r; t)}{\tau_n(-N+1, -r-N+2, -r+2; t)} \\ \quad n+m \text{ が偶数のとき} : N = \frac{n+m}{2} \\ c_1 t^{r-n} \frac{(r+1)_N}{(-r+1)_N} \frac{\tau_n(-N, -r-N, -r; t)}{\tau_n(-N+1, -r-N+1, -r+2; t)} \\ \quad n+m \text{ が奇数のとき} : N = \frac{n+m-1}{2} \end{cases}$$

ここで,

$$(a)_k = a(a+1) \cdots (a+k-1)$$

2. $n \geq m$ のとき

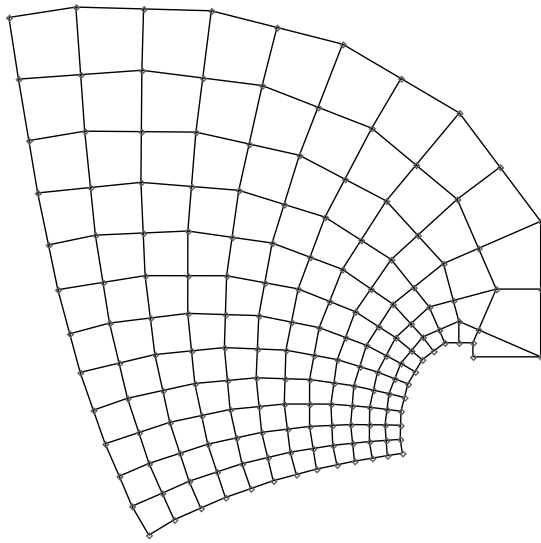
$$f_{n,m} = \begin{cases} c_0 N \frac{(r+1)_{N-1} \tau_m(-N+2, -r-N+1, -r+2; t)}{(-r+1)_N \tau_m(-N+1, -r-N+2, -r+2; t)} \\ \quad n+m \text{ が偶数のとき : } N = \frac{n+m}{2} \\ c_0 \frac{(r+1)_N \tau_m(-N+1, -r-N, -r+1; t)}{(-r+1)_N \tau_m(-N, -r-N+1, -r+1; t)} \\ \quad n+m \text{ が奇数のとき : } N = \frac{n+m-1}{2} \end{cases}$$

18

注釈

- これらの表示は, $r \in \mathbb{C} - \mathbb{Z}$ ($\gamma \in \mathbb{C} - 2\mathbb{Z}$) の場合に有効
- 実際には, r, t, t^r の有理関数
- $t = -1$ (および $c_0 = c_1 = 1$) とすれば, $r, e^{\pi i r}$ の有理関数

19



$$\gamma = 1 + i$$

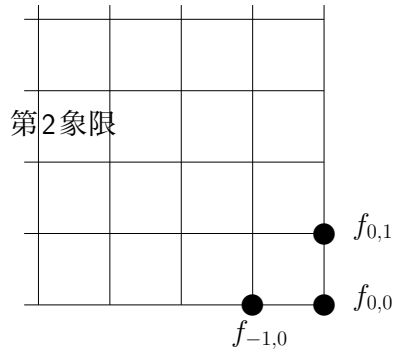
20

定義域の拡張

- 定義域を \mathbb{Z}_+^2 から, (ひとまず) \mathbb{Z}^2 へ拡張
- 第 2, 3, 4 象限での $f_{n,m}$ の値を定めるには, 初期条件として, 更に

$$f_{-1,0} \quad \text{および} \quad f_{0,-1}$$

の値を与えなければならない.



21

初期値

$$f_{1,0} = c_0, \quad f_{0,1} = c_1 t^r, \quad f_{-1,0} = c_2 t^{2r}, \quad f_{0,-1} = c_3 t^{3r}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{元の設定では,} \\ f_{1,0} = 1, \quad f_{0,1} = e^{\pi i r}, \quad f_{-1,0} = e^{2\pi i r}, \quad f_{0,-1} = e^{3\pi i r} \end{array} \right)$$

↓

第 2 象限 :

$$f_{-n,m} = f_{n,m} \mid_{c_0 \mapsto c_2 t^{2r}}$$

第 3 象限 :

$$f_{-n,-m} = f_{n,m} \mid_{c_0 \mapsto c_2 t^{2r}, c_1 \mapsto c_3 t^{2r}}$$

22

第4象限について

同様にして,

$$f_{n,-m} = f_{n,m} \Big|_{c_1 \mapsto c_3 t^{2r}}$$

となるが, これでは離散冪函数に多価性は生じない.

Riemann 面の離散類似

- \mathbb{Z}^2 平面を可算無限個だけ用意
- 各々の実軸の正の部分に切れ目を入れて貼り合わせる.
(連続の場合と同じ)

23

- 初期条件を「極表示」で表す.

$$f_{1,0} = c_0, \quad f_{0,1} = c_1 t^r, \quad f_{-1,0} = c_2 t^{2r}, \quad f_{0,-1} = c_3 t^{3r}$$

↓

$$f(1, \pi k/2) = c_k t^{kr} \quad (k = 0, 1, 2, 3)$$

⇒ そのまま任意の $k \in \mathbb{Z}$ に一般化

↓

各象限ごとに離散冪函数の明示公式が得られる.

24

- 例

$$\frac{3}{2}\pi \leq \arg(n + im) \leq 2\pi$$

初期条件

$$f(1, 3\pi i/2) = c_3 t^{3r}, \quad f(1, 2\pi i) = c_4 t^{4r}$$

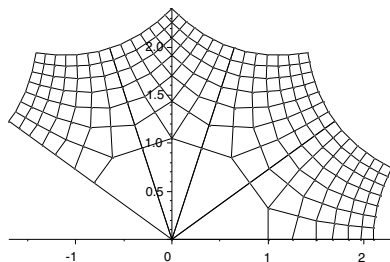
↓

$$f_{n,-m} = f_{n,m} |_{c_0 \mapsto c_4 t^{4r}, c_1 \mapsto c_3 t^{2r}}$$

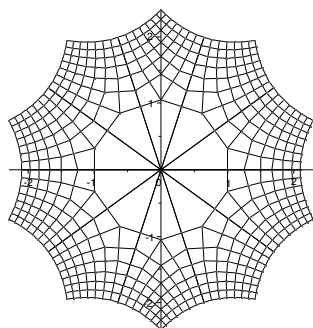
- 離散冪函数 $f_{n,m}$ が一価

$$\iff (t = e^{\pi i}, c_k = c_{k+4} \text{ および}) e^{4\pi i r} = 1$$

$$\iff 2r \in \mathbb{Z} \iff \text{冪指数 } \gamma \text{ が整数}$$



$\gamma = 5/2$ 定義域は \mathbb{Z}^2



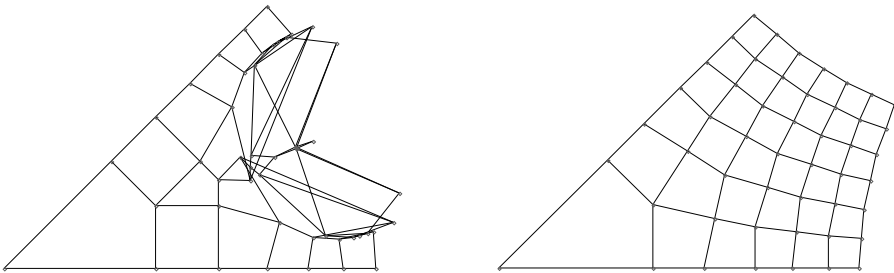
$\gamma = 5/2$
定義域は離散 Riemann 面

幾何的性質

定義 離散正則函数 $f_{n,m}$ がはめ込みである.



隣接する基本四辺形 ($f_{n,m}, f_{n+1,m}, f_{n+1,m+1}, f_{n,m+1}$) の内部が交わらない.



- 指数 γ が実ならば, 離散冪函数は「はめ込み」である.
[Agafonov-Bobenko]

問題 離散冪函数が「はめ込み」である場合が，他にあるか？

定理

$f : \mathbb{Z}_+^2 \rightarrow \mathbb{C}; (n, m) \mapsto f_{n,m}$ を離散冪函数，すなわち，

$$\frac{(f_{n,m} - f_{n+1,m})(f_{n+1,m+1} - f_{n,m+1})}{(f_{n+1,m} - f_{n+1,m+1})(f_{n,m+1} - f_{n,m})} = -1,$$

$$\gamma f_{n,m} = 2n \frac{(f_{n+1,m} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n-1,m})}{f_{n+1,m} - f_{n-1,m}} + 2m \frac{(f_{n,m+1} - f_{n,m})(f_{n,m} - f_{n,m-1})}{f_{n,m+1} - f_{n,m-1}} \quad (E)$$

および初期条件

$$f_{0,0} = 0, \quad f_{1,0} = 1, \quad f_{0,1} = e^{\pi i \gamma / 2}$$

を満たす写像とする．このとき， $\operatorname{Re} \gamma = 1$ ならば， f は「はめ込み」である．

25

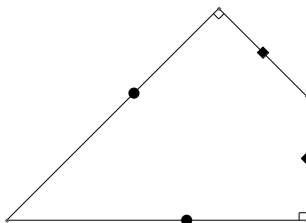
命題 $\operatorname{Re} \gamma = 1$ とする． $f_{n,m}$ を初期条件

$$f_{0,0} = 0, \quad f_{1,0} = 1, \quad f_{0,1} = c_1 e^{\pi i \gamma / 2} \quad (c_1 > 0) \quad (C)$$

の下での (E) の解とする．このとき，すべての基本四辺形

$$(f_{n,m} \quad f_{n+1,m} \quad f_{n,m+1} \quad f_{n+1,m+1})$$

は凧型である．

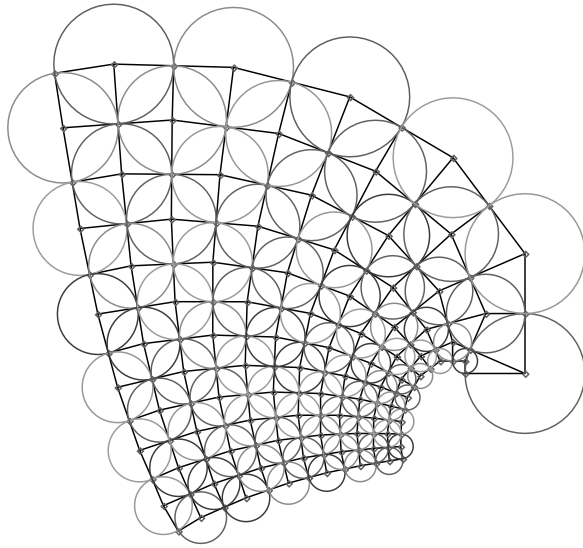


- $n + m$ が奇：点 $f_{n,m}$ から出る 4 辺の長さがすべて等しい．

$$|f_{n+1,m} - f_{n,m}| = |f_{n,m+1} - f_{n,m}| = |f_{n-1,m} - f_{n,m}| = |f_{n,m-1} - f_{n,m}|$$

- $n + m$ が偶：点 $f_{n,m}$ から出る 4 辺がなす角がすべて直角である．

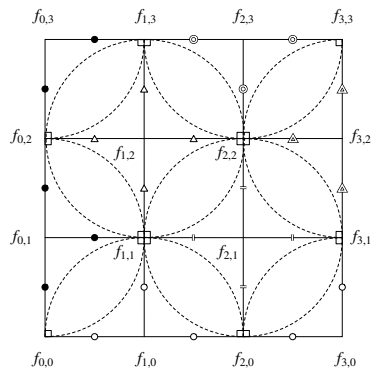
26



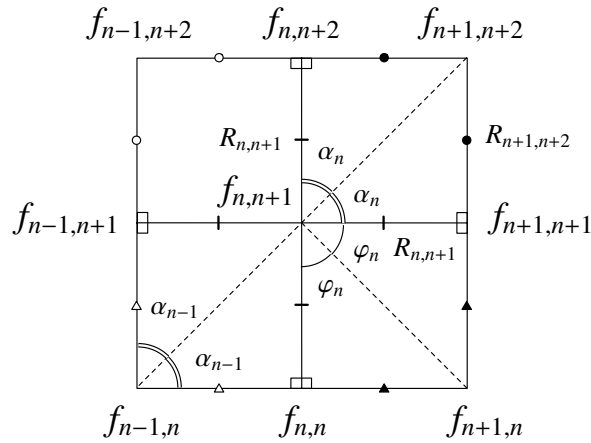
$n + m$ が奇数ならば、四辺形 $(f_{n-1,m}, f_{n,m-1}, f_{n+1,m}, f_{n,m+1})$ の外接円は、Schramm 型 circle patterns を成す。

Schramm 型 circle patterns とは？

- 隣接する四辺形の外接円は、互いに直交する。
- 頂点をひとつ共有する四辺形の外接円は、互いに接する。



点 $f_{n,n+1}$ の周りの概略図



- はめ込みかどうかは，上の凧型の凸性に帰着する。

29

命題

$\gamma = 1 + i\delta$ とする．差分方程式 (E) および初期条件

$$f_{0,0} = 0, \quad f_{1,0} = 1, \quad f_{0,1} = i\zeta \quad (\zeta > 0)$$

で定まる写像 $f : \mathbb{Z}_+^2 \rightarrow \mathbb{C}$ が「はめ込み」である．



差分方程式系

$$y_{n+1} = \frac{1 + x_n^2 - 2x_n y_n}{x_n^2 y_n + y_n - 2x_n},$$

$$x_{n+1} = \frac{(2n + 2 + \gamma)x_n + \gamma y_{n+1}}{y_{n+1}[(\gamma - 2)x_n + (\gamma - 2n - 4)y_{n+1}]}, \quad x_0 = -\frac{1 + i\delta}{1 - i\delta} \frac{1}{y_0}$$

が，初期条件 $y_0 = \frac{\zeta + i}{\zeta - i}$ の下で，

$$x_n = e^{2i\alpha_n}, \quad y_n = e^{2i\varphi_n}, \quad \alpha_n, \varphi_n \in (0, \pi/2)$$

という形の解を持つ．

30

命題

条件

$$x_n, y_n \in A_I := \{e^{2i\beta} \mid \beta \in (0, \pi/2)\}$$

を満たす解が、唯一つ存在する。この解を与える初期条件は

$$y_0 = \frac{e^{-\pi\delta/2} + i}{e^{-\pi\delta/2} - i}$$

である。

証明の概略

○ 存在: 初期条件の集合 S_I を

$$S_I := \{y_0 \in A_I \mid \text{任意の } n \in \mathbb{Z}_+ \text{ に対し } x_n, y_n \in A_I\}$$

で定める。このとき、 $S_I \neq \emptyset$ である。

31

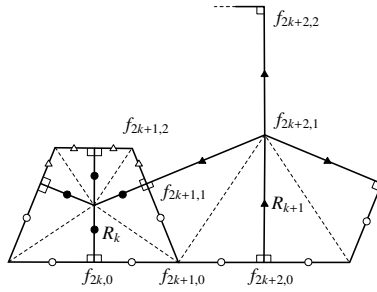
○ 一意性

- $y_0 \in S_I$ なる解を選び、対応する circle patterns を考える。
- R_k : 点 $f_{2k,1}$ を中心とする円の半径

$$\lim_{l \rightarrow \infty} R_{2l} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{R_{2l-1}} = \frac{(1 - e^{-\pi\delta/2}) + \zeta(1 + e^{-\pi\delta/2})}{(1 + e^{-\pi\delta/2}) - \zeta(1 - e^{-\pi\delta/2})}$$

- 離散冪函数の明示公式
- 超幾何函数 ${}_2F_1$ の特殊値に関する公式
- Γ -函数の漸近公式

32



- 3点 $f_{2k,0}, f_{2k+1,0}, f_{2k+2,0}$ は漸近的に, 同一直線上に並ぶ.
 - 4点 $f_{2k+1,1}, f_{2k+2,1}, f_{2k+2,2}, f_{2k+1,2}$ は四辺形を成す.
- $\implies k \gg 1$ ならば $R_k = R_{k+1}$
 $\implies k$ の偶奇に関わらず, $\lim_{k \rightarrow \infty} R_k = 1$
 $\implies \zeta = e^{-\pi\delta/2}$ すなわち $f_{0,1} = ie^{-\pi\delta} = e^{\pi i\gamma}$

33

今後の課題

- $r \in \mathbb{Z}$ および離散対数函数の場合

特性指数の差が整数になり，対数項が現れる場合

$$\tilde{f}_{n,m} := \begin{cases} \lim_{r \rightarrow j} \frac{1(-r+1)_j}{j(r+1)_{j-1}} f_{n,m} & (\gamma = 2j \in 2\mathbb{Z}_{>0} \text{ のとき}) \\ \lim_{r \rightarrow -j} \frac{(-r+1)_j}{(r+1)_j} f_{n,m} & (\gamma = -2j \in 2\mathbb{Z}_{<0} \text{ のとき}) \end{cases}$$

および

$$\hat{f}_{n,m} := \lim_{r \rightarrow 0} \frac{f_{n,m} - 1}{r}$$

- 六角格子上的 circle pattern に付随する離散冪函数および離散対数函数

34

中園による観察

- $(A_1 + A_2)^{(1)}$ 型 q -Painlevé 系 (に対応する双有理表現)
 \implies 冪函数が満たすべき方程式の q -類似
- $(A_1 + A'_1)^{(1)}$ 型 q -Painlevé 系 (に対応する双有理表現)
 \implies 指数函数が満たすべき方程式の q -類似

35

「マス・フォア・インダストリ研究」シリーズ刊行にあたり

本シリーズは、平成 23 年 4 月に設立された九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 (IMI) が、平成 25 年 4 月に共同利用・共同研究拠点「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」として、文部科学大臣より認定を受けたことにともない刊行するものである。本シリーズでは、主として、マス・フォア・インダストリに関する研究集会の会議録、共同研究の成果報告等を出版する。各巻はマス・フォア・インダストリの最新の研究成果に加え、その新たな視点からのサーベイ及びレビューなども収録し、マス・フォア・インダストリの展開に資するものとする。

平成 26 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長 福本康秀

非線形数理モデルの諸相：連続，離散，超離散，その先

マス・フォア・インダストリ研究 No.3, IMI, 九州大学

ISSN 2188-286X

発行日 2015 年 3 月 24 日

編集 笈 三郎

発行 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

〒819-0395 福岡市西区元岡 744

九州大学数理・IMI 事務室

TEL 092-802-4402 FAX 092-802-4405

URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>

印刷 社会福祉法人 福岡コロニー

〒811-0119 福岡県糟屋郡新宮町緑ヶ浜 1 丁目 11 番 1 号

TEL 092-962-0764 FAX 092-962-0768

シリーズ既刊

Issue	Author / Editor	Title	Published
マス・フォア・インダストリ 研究 No.1	穴田 啓晃 安田 貴徳 Xavier Dahan 櫻井 幸一	Functional Encryption as a Social Infrastructure and Its Realization by Elliptic Curves and Lattices	26 February 2015
マス・フォア・インダストリ 研究 No.2	滝口 孝志 藤原 宏志	Collaboration Between Theory and Practice in Inverse Problems	12 March 2015



Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

〒819-0395 福岡市西区元岡744
URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>