「「社会的課題の解決に向けた数学と諸分野の協働」研究領域 領域活動・評価報告書
－2019 年度終了研究課題－

研究総括 國府 寛司

1．研究領域の概要

従来の科学技術の延長ではなかなか解決できない社会的課題に取り組み、ブレークスルーを起こすためには、現代の数学から幅広いアイデアや方法を取り入れた斬新な発想による解決が強く求められています。そのためには、代数、幾何、解析などの純粋数学や応用数学、統計数学、離散数学など、数学内の様々な分野において「社会的課題を数学的問題として取り上げる」ことが必要です。
本研究領域は、社会的課題の解決に向けて数学の力を最大限発揮するとともに、課題に取り組むプロセスの中で数学自体の発展をも目指すものです。研究推進においては、社会での様々な問題に対して研究者自らが現場に入り込んで課題を認識し、その解決に向けたアプローチを意識して基礎研究を推進することを重視します。数学分野の研究者が自然科学、情報科学、工学、生命科学の理論や実験の研究者と連携することや、諸分野の研究者が数学分野に参入し課題解決に取り組むことを期待します。研究領域の運営においては、研究者が相互に影響し合い、異分野横断・融合的な視点で問題解決に取り組む姿勢を重視します。これにより、新しい数理科学の分野の形成や牽引の担い手となる将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出を目指します。

2．事後評価対象の研究課題・研究者名

件数：13 件

※研究課題名、研究者名は別紙一覧表参照

3．事前評価の選考方針

選考の基本的な考えは下記の通り。

1）選考は、「数学協働」領域に設けた選考委員１１名の協力を得て、研究総括が行う。

2）選考方法は、書類選考、面接選考及び総合選考とする。

3）選考に当たっては、さきがけ共通の選考基準

（URL：http://www.jst.go.jp/pr/info/info1128/index.html （第一期）の他、以下の点を重視した。

領域の趣旨に合致している提案の中で、数理的アイデアや方法が斬新であり、それが社会的／人類的課題の解決につながると期待できる提案や、社会的／人類的課題の解決のための数理的方法がその有効性をこれまでにない新しい形で明確に示す提案を重視して選考を行った

4．事前評価の選考の経緯

一応募課題につき領域アドバイザー・外部評価者の内 12 名が書類審査し、書類選考会議において面接選考の対象者を選考した。続いて、面接選考および総合選考により、採用候補課題を選定した。

選　考	書類選考	面接選考	採択数
対象数	67 件	21 件	13 件

5．研究実施期間

2016 年 10 月～2020 年 3 月

※田嶋 達裕研究者は 2016 年 10 月～2017 年 8 月

6．領域の活動状況

領域会議：7 回（3 期生研究期間）

研究総括の研究実施場所訪問：9 回実施（3 期生対象）

7．事後評価の手続き

研究者の研究報告書を基に、評価会（研究報告会、領域会議等）での発表・質疑応答、領域アドバイザーの

意見などを参考に、下記の流れで研究総括が評価を行った。
（事後評価の流れ）
2020 年 2 月　研究総括による事後評価
2020 年 3 月　被評価者への結果通知

8．事後評価項目
（1）研究課題等の研究目的の達成状況
（2）研究実施体制及び研究費執行状況
（3）研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果（今後の見込みを含む）

9．評価結果
総論
本領域では、従来の方法ではなかなか解決できない様々な社会的・人類的課題を数学の問題として取り上げて現代の幅広い数学的理論や方法を用いてその解決を図ると共に、そこで開拓されたアイデアや方法を数学という学問の持つ普遍性・抽象性を活かして、予想もされなかった展開も目指そうとしている。今回終了する第 3 期 12 名の研究者は、いずれも挑戦的な課題を提案して採択され、3 年半のさきがけ研究の中でそれぞれの課題について多くの顕著な研究の成果を挙げると共に、本領域の特徴を発揮して、領域内外の様々な分野の研究者との間で活発な共同研究や研究交流を行い、数学協働という領域名にふさわしい実績を挙げてきた。また、数学キャラバンや講演会・著作物を通じたアウトリーチ活動にも積極的に取り組み、社会への研究成果の発信においても大きな活動を行ったと評価される。今後は、本領域での研究成果や研究者ネットワークを基盤として、数学的発想に基づいた諸分野や社会との新たな連携を目指す研究のリーダーとして、一層の活躍を期待したい。

1．李　聖林　研究者 「動的変形空間による細胞機能決定機構の解明及び In vitro 実験への検証」
評価結果
李聖林は、細胞の機能決定や分化の機構を、遺伝子だけではなく細胞内分子や細胞内のタンパク質などの空間構造から明らかにするというユニークな発想で研究に取り組んだ。特に細胞核内のクロマチンの空間構造形成に果たす細胞核の動的変形の役割や、非対称細胞分裂におけるパターン形成や細胞の形が極性形成に与える影響を解明するなど、興味深い研究成果をあげた。クロマチンの空間構造形成に関する結果は実験でも検証され、PLOS Computational Biology に掲載されるなど学会からの評価も高い。李聖林はさらにさきがけ研究の中で出会った蕁麻疹を研究する医学者との共同研究を開始し、蕁麻疹の病理的特徴である膨疹の形状を記述する数理モデルを構築して、これまで謎とされていた蕁麻疹の分子的仕組みを数学の視点から説明することに成功した。これらの結果は実験研究者や医学者の知見や課題に数理的視点を入れることで達成されたものであり、現場研究者との密接な対話と連携なくしては得られない優れた研究成果として高く評価される。
2．伊師　英之　研究者 「正定値対称行列の数理に関する革新的新技術」
評価結果
ビッグデータや人工知能などに関わって頻繁に現れる巨大サイズの行列計算のアルゴリズムの評価、改良、新規開発を目指して研究を行い、応用展開への可能性を持つ「準コレスキ構造」と呼ぶ美しい数学的機構を発見した。それは従来、表現論や微分幾何学に関係して研究されてきた等質錐の理論と、数理統計学や機械学習などに関係するグラフィカルモデルの凸錐の理論を統合し一般化したものであり、これによりこれまで個々の場合ごとに行われていた計算技法の関係が明確になり、適用対象が広がるなどの大きな進展が得られた。伊師研究者の研究成果は、数学の抽象性と普遍性という特質を見事に発揮したものであり、高く評価される。さらにこの研究成果を含む学術的発展を経済学や工学、情報幾何学などの他分野の研究者にも伝え、さらなる交流を図るためのワークショップや国際シンポジウムの開催なども積極的に行ったことは重要な学術的貢献であるといえる。
3．鍛冶　静雄　研究者 「かたちと動きの数理基盤」
評価結果
かたちや動きのような記述が容易でない対象に対して、トポロジー(位相幾何学)という数学のアイデアや理論を用いて迫り、それらをデータとして捉えるための数理的手法を開拓してさまざまな良い成果をあげた。かたちや動きは、映像や CG、3D 印刷などの技術の発達により、視覚情報としてますますその重要性が高まっているが、文字や音声に比べて定量化が困難なために、それを情報としてコンピューターなどで処理すること

には多くの課題が残されている。鍛冶研究者は、トポロジー、離散微分幾何、離散可積分系などの最新の数学理論を用いてこの課題に挑戦し、コンピューター画面上での操作性に優れた画像や形状変形アルゴリズムの開発、深層学習とトポロジーの融合によるハイブリッド画像・ボリュームデータ解析手法の開発などで研究成果をあげた。後者では大学病院と共同で低品質 CT 画像の画質改善による医療応用の貢献につながった。さらに1自由度リンク機構の数理的構造についての興味深い結果を得て、形状デザインとしての研究成果のみならず、数学理論としても新たな研究対象の発見につながる注目すべき研究成果をあげた。

4. 来嶋 秀治 研究者 「乱択アルゴリズム設計の技法と脱乱択化の数理」

評価結果

様々な場面で用いられる計算的技法におけるランダムネスの必然性について深く考察し、マルコフ連鎖モンテカルロ法などの乱択アルゴリズムによらない高次元多面体の体積の決定性近似可能性の証明や、カオス的決定系であるベータ展開の乱択アルゴリズム化による計算量改善など、乱択アルゴリズムと決定性アルゴリズムの差異をあぶり出すいくつかの興味深い重要な結果やその萌芽となる結果を得た。またそのような計算論的観点から安定マッチング、スケジューリング、分散計算など、現実社会におけるアルゴリズム設計に関する諸問題の解決にも取り組んで成果をあげた。人工知能や機械学習などでランダムネスが計算に使われる機会はますます増えており、そのような情報化社会の基盤を保証するためにも、乱択アルゴリズムの数理を明らかにし、その計算への信頼性を確保する来嶋研究者の研究は極めて重要な意味を持っており、今後のさらなる研究展開が期待される。

5. 齊木 吉隆 研究者 「ヘテロ次元サイクルに着目した同期理論の構築ー複雑現象の理解に向けてー」

評価結果

流体乱流や気象、金融などの予測や制御が困難な複雑現象に対し、それらに共通して見られる、平穏な状態(ラミナー)と急激な変動状態(バースト)を繰り返す間欠的振る舞いの発生メカニズムをヘテロカオス性という視点で数学解析と数値シミュレーションにより研究して、間欠性の発生機構についての興味深い結果を得た。また、流体乱流や複数為替時系列や鉱工業生産指数の同期現象の解析など、間欠性と同期という観点からの新しい数理的解析方法を開発し、流体乱流や経済データなどに見られる複雑現象の理解のためのアプローチとして整備することができた。特に経済データの同期の研究では、開発された数理的手法を実際のデータに適用して同期レベルと景気動向の関連などの興味深い結果を得ており、現場との密接な連携により得られた成果として評価される。

6. 田嶋 達裕 研究者 「大規模神経力学系のトポロジーと臨床応用」

評価結果

研究計画に沿って、下記の成果を挙げ、プレスリリース(共同発表)した。

神経ネットワークの大規模な「バースト」発生を予測する技術を開発

～てんかん発作の予測からネットワークの動態予測まで応用に期待～

7. 千葉 逸人 研究者 「一般化スペクトル理論に基づいたネットワーク上の大自由度力学系の同期現象の研究」

評価結果

振動する多数の素子が互いに相互作用をすることで集団としてのリズム運動を示す同期現象を取り上げて、その発生機構に関する数学理論を格段に進展させた。このような振動子集団の同期現象については、蔵本モデルと呼ばれる標準モデルがあり、千葉逸人は自身の先行研究で全素子が相互作用する場合の蔵本モデルの同期の発生に関する決定的な数学理論を証明したが、本さきがけ研究課題ではそれを、より一般のネットワーク上の結合振動子系の場合に一般化することに成功した。これは自身の手になる最新の数学理論の応用可能性を格段に広げ、電力ネットワークや脳神経系の数理モデルなどにおける同期やリズム運動の理解と制御に大きく貢献する成果であり、抽象性・普遍性のある数学理論の結果が全く異なる分野に現れるさまざまな社会的課題に展開されるという数学の特質をよく発揮した成功例として高く評価される。

8. 寺本 央 研究者 「特異点論の物質科学への応用」

評価結果

物質科学への特異点論の新たな応用を目指し、結晶内の電子のエネルギー準位がとるバンド構造の変化と物性との関係の理解や制御、量子化学における断熱エネルギー面交差の理解などのために、微分位相幾何学の一分野である特異点論を持ち込んでバンド構造や断熱エネルギー面交差の幾何学的構造を分類する新たな研究手法を開拓した。これは特異点論の単なる応用ではなく、その数学理論を新たに展開することでもたらされたもので、数学研究の成果としても高く評価される。その数学サイドからの評価の一つの現れとして、トポロジーシンポジウムというトポロジー(位相幾何学)分野の最も重要とされるシンポジウムにおいて招待講演を行なったことは注目に値する。また新たに開拓した特異点の分類アルゴリズムをソフトウェアとして

実装したことも、今後の科学技術イノベーションへの貢献につながることが強く期待される。

9. 中岡 慎治 研究者 「構成要素の多様性が変化する系の数学理論構築と細菌群集の関わる疾患制御への応用」

評価結果

腸内細菌などの細菌群集(細菌叢)の多様性の減少に伴う疾患の制御のために、構成要素の多様性が変化するシステムの数学理論構築を目指して研究を行い、興味深い研究成果をあげた。特に細菌叢の膨大な塩基配列データから細菌種の構成や存在量を抽出するシステムを開発し、それを用いて細菌叢の個体群ダイナミクスを記述する数理モデルの構築とそのシミュレーションを行って、多様性変化のメカニズムを解析し、生物種の存続条件に関する数学的条件の検討を行った。そこでは特に細菌叢の非時系列データから時間変化を推定する擬似時間再構成法と呼ぶ独自の方法が有効であり、今後の同様の研究課題への応用が大いに期待される。これらの研究成果は数理生物学の学識や研究実績に加えて、実験データに密着して課題を認識して解決するという本研究領域がねらいとする現場との密接な連携を実現して成果をあげたものであり、高く評価される。

10. 野津 裕史 研究者 「界面をもつポリマー流体の3次元挙動の数理解析」

評価結果

ポリマーなどの粘弾性流体の数値解析的研究で大きな成果をあげた。熱可塑性樹脂による高温ポリマー流体を金型に流し込んで所望の形状を成型する技術はさまざまな工業過程で用いられる極めて需要の高い技術であるが、その形状や物性値の予測が困難な場合も多く。射出過程での界面を高精度で数値シミュレーションすることは重要な課題である。野津研究者はポリマーなどの粘弾性流体の数理モデルに対する精密な数理解析を行い、それに基いて高品質な 3 次元数値シミュレーション手法を構築した。特に 3 次元アダプティブ・メッシュリファインメント手法を独自に実装し、界面付近において動的に空間的なメッシュ解像度を高める技術と最良誤差評価を得る手法の融合に成功し、高精度な数値計算を可能にしたことは、ポリマー成型技術の改良への著しい貢献である。今後は企業との共同研究などにおいて研究成果を実装するなど、技術革新につながることを大いに期待する。

11. 早水 桃子 研究者 「基礎医学と社会医学をつなぐ離散幾何学的モデリング」

評価結果

多様な生物学的現象やデータの扱いに離散幾何的な視点を導入し、細胞の分化や細菌・ウィルスの進化を記述するモデル構築のための新たな方法論を開拓して優れた研究成果をあげた。特に生物進化の系統樹のような木モデルを拡張した tree-based network に関する構造定理を証明し、それに基づいて全域系統樹の列挙、数え上げ、最適化などの問題を解く線形時間アルゴリズム(列挙については線形時間遅延アルゴリズム)を与え、tree-based network に関する問題の計算量についての未解決問題を解決したことは特筆に値する成果といえる。早水研究者はこの他にも離散数学と統計科学を駆使して幹細胞生物学を含む生命科学・医学分野に貢献する重要な研究成果をあげ、またその成果をアルゴリズムやソフトウェアとして実装もしており、その研究成果が科学技術イノベーションに貢献することが期待される。早水桃子の研究成果は、国内外でのさまざまな会議の招待講演や優秀講演賞などとして、学会でも高く評価されている。

12. 谷口 隆晴 研究者 「情報幾何学と離散力学の融合と社会ネットワーク解析への応用」

評価結果

時間変化するネットワークの数理モデル構築とその応用において興味深い研究成果をあげた。心理学や経済学、農学などで、人や金融機関、動物などのつながりがネットワークとして表現され、それが時間と共に変化する様子を理解することが重要になる。谷口研究者は、情報幾何学や離散力学、統計科学を活用して、そのような時間変化するネットワークの数理モデルの構築や実データへの適用の際の解析手法の開発を行い、それを放牧牛の関係を GPS データから推定する農学の問題、高齢化地区の人々の交流をアンケートデータから解析する心理学の問題など、これまで解析手法が乏しかった分野の問題に応用して良い研究成果を得た。特にこれらの問題に取り組む中でさまざまな解析手法やアルゴリズムが開発され、実装されたことは、今後のこのような分野への重要な貢献につながるものと期待される。

13. 横山 知郎 研究者 「流れの位相的な文字化理論とその計算機上への実装」

評価結果

横山知郎はトポロジー(位相幾何学)のアイデアを用いて水や空気の流れのデータを解析する手法の開発で大きな成果をあげた。航空機や自動車などの回りの空気の流れは時にその運行状態に重大な影響を及ぼすことがあるなど、物体の回りの水や空気などの流体の流れを理解し制御することは、さまざまな科学技術における重要な課題である。横山知郎は、そのような流体の流れを流線データとして捉えてトポロジーの観点から分類し、それを文字列によって簡潔に記述する手法を、先行研究の結果を大きく改良する形で一般

化することに成功した。これにより流体の流れをデータとして表現してそれを解析する方法が開拓され、それは位相流体データ解析(TFDA)という新しい分野として発展しつつあるが、横山知郎の研究成果はその大きな契機となったものである。この成果を基に、流れの構造がどのように変化するかを記述する遷移グラフや、流線データを比較する「距離」などの概念を定義して理論の整備も進めた。またそれらを自動計算するアルゴリズムの開発や、企業や JAXA, 首都大学東京との共同研究による流体に関わるデザイン設計への応用なども行なっており、今後さらなる研究成果の進展と科学技術イノベーションへの貢献が期待される。

10. 評価者

研究総括 國府 寛司 京都大学 大学院理学研究科・教授

領域アドバイザー(五十音順。所属、役職は 2020 年3月末現在)

石井 志保子 清華大学 Yau Center・教授
大島 利雄 城西大学 理学部数学科・教授
楠岡 成雄 東京大学 名誉教授
坂上 貴之 京都大学 大学院理学研究科・教授
高田 章 ロンドン大学 特任教授
田崎 晴明 学習院大学 理学部・教授
土谷 隆 政策研究大学院大学 政策研究科・教授
長山 雅晴 北海道大学 電子科学研究所・教授
藤重 悟 京都大学 数理解析研究所・特任教授
宮岡 礼子 東北大学 教養教育院・総長特命教授

外部評価者(五十音順。所属、役職は 2016 年 6 月末現在:査読時)

小川 知之 明治大学 総合数理学部・教授
重川 一郎 京都大学 大学院理学研究科・教授

(参考)

件数はいずれも、2020 年3月末現在。

(1)外部発表件数

	国 内	国 際	計
論 文	8	87	95
口 頭	145	132	277
その他	11	10	21
合 計	164	229	393

(2)特許出願件数

国 内	国 際	計
1	2	3

(3)受賞等

・早水 桃子
日本応用数理学会 2019 年研究部会連合発表会優秀講演賞(2019/6)
・谷口 隆晴
日本応用数理学会論文賞(2017/9)

(4)招待講演

国際 62 件
国内 56 件

別紙

「社会的課題の解決に向けた数学と諸分野の協働」領域　事後評価実施　研究課題名および研究者氏名

研究者氏名 （参加形態）	研　究　課　題　名	現　職（2019 年 12 月末現在） （応募時所属）	研究費 （百万円）
李　聖林 （兼任）	動的変形空間による細胞機能決定機構の解明及び In vitro 実験への検証	広島大学大学院理学研究科 准教授 （同　助教）	30.0
伊師　英之 （兼任）	正定値対称行列の数理に関する革新的新技術	大阪市立大学大学院理学研究科　教授 （名古屋大学　准教授）	13.5
鍛冶　静雄 （兼任）	かたちと動きの数理基盤	九州大学マス・フォア・インダストリ研究所　准教授 （山口大学　准教授）	14.2
来嶋　秀治 （兼任）	乱択アルゴリズム設計の技法と脱乱択化の数理	九州大学大学院システム情報科学　准教授 （同上）	9.0
齊木　吉隆 （兼任）	ヘテロ次元サイクルに着目した同期理論の構築―複雑現象の理解に向けて―	一橋大学大学院経営管理研究科　准教授 （同上）	18.9
田嶋　達裕 （兼任）	大規模神経力学系のトポロジーと臨床応用	ジュネーブ大学医学部　研究員 （同上）	11.4
千葉　逸人 （兼任）	一般化スペクトル理論に基づいたネットワーク上の大自由度力学系の同期現象の研究	東北大学材料科学高等研究所 教授 （九州大学　准教授）	7.1
寺本　央 （兼任）	特異点論の物質科学への応用	北海道大学電子科学研究所 准教授 （同　助教）	32.7
中岡　慎治 （兼任）	構成要素の多様性が変化する系の数学理論構築と細菌群集の関わる疾患制御への応用	北海道大学先端生命科学研究院　特任講師 （科学技術振興機構　さきがけ研究者）	42.0
野津　裕史 （兼任）	界面をもつポリマー流体の３次元挙動の数理解析	金沢大学理工研究域　教授 （同　准教授）	34.4
早水　桃子 （兼任）	基礎医学と社会医学をつなぐ離散幾何学的モデリング	情報・システム研究機構統計数理研究所　助教 （総合研究大学院大学複合科学研究科 5 年一貫制博士課程 5 年）	44.2
谷口　隆晴 （兼任）	情報幾何学と離散力学の融合と社会ネットワーク解析への応用	神戸大学大学院システム情報学研究科　准教授 （同上）	20.0
横山　知郎 （兼任）	流れの位相的な文字化理論とその計算機上への実装	京都教育大学教育学部数学科 准教授 （同上）	33.1

研　究　報　告　書

「動的変形空間による細胞機能決定機構の解明及び In vitro 実験への検証」

研究タイプ：通常型

研究期間：　2016 年 10 月～2020 年 3 月

研 究 者：　李　聖林

1.　研究のねらい

生物が人工物と大きく異なる点は、自らが自らを生成する自己組織化である。細胞は自分の機能を自分で制御し、自らの分化を決定する。このような細胞の機能決定は、遺伝子と言う設計図を基に極めてロバストに行われている。しかし、設計図となる遺伝子を解析しても、細胞の機能決定や分化仕組みというのは、全てが解明できているわけではない。細胞は上層の設計図を基にして自らの機能を的確に制御するための様々な仕組みを巧みに利用している。その仕組みを理解していくことこそが細胞の機能制御の仕組みを解明する重要な鍵になる。細胞核の遺伝子や細胞内の蛋白質が作りだす空間的パターンは、まさにその仕組みの一つである。

本研究は、細胞の機能決定に関わる、遺伝子、細胞内分子の空間パターンおよび細胞組織が作り出すパターン形成問題を空間（ドメイン）の形から着目し、生命の物理的性質による新しい細胞機能制御論を提唱することを目指す。また、数理から提案された、細胞核又は細胞のパターン形成における空間（ドメイン）の役割を In vitro 実験で検証することにより、理論的仮説の発見に留まらず、生物学的実在の可能性を示し、数学と生物、両方における新たなブレイクスルーを実現する。

本研究は、パターンを形成する主体である「物」（細胞内の蛋白質又は遺伝子）のみを中心に考える従来の手法から離れ、「物」が置かれている空間である「環境」（細胞又は細胞核）の観点から新たに考察し、実験観察では発見が不可能であった全く新しいパターン形成の仕組みを数理から提案する。さらに、これらの新しい理論を In vitro 実験で検証し、遺伝子操作を使わない新しい細胞分化機能の制御法の提案に繋げる。つまり、従来の、実験的発見を補充するための数理モデルの役割ではなく、「数学」から「生物と再生医療」へと新しい発見と概念を提示しようとする革新的な試みであり、生命の謎解明及び再生医療における数学の新たな可能性と役割を提唱することを狙いとする。

2.　研究成果

（1）概要

細胞核、一個の細胞、そして細胞組織で形成される様々なパターン形成の現象は細胞分化や機能決定に極めて重要に関わる生命の制御仕組みの一つである。本さきがけでは、そのようなパターン形成が空間ドメインと密接に相互作用しながら細胞の機能を決定していく可能性を数理モデルで提案し、生物実験で検証することを目指した。また、細胞レベルでのテーマにとどまらず、社会的問題において空間的要素が重要に関わる課題についても研究を発展させた。さきがけの研究期間で主に取り組んだ研究とその成果の概要を以下の3つの項目で纏めた。

A)　細胞核内のクロマチンパターン形成の仕組み解明：哺乳類の網膜にある桿体細胞の核

内では、クロマチンの空間構造が夜行性の動物と昼行性の動物の間で全く異なることが知られている。しかし、その根本的な仕組みが解明されていなかった。本研究ではその仕組みの背景には細胞核の動的な変形が重要であることを突き止めた。

B) 非対称細胞分裂におけるパターン形成の仕組み解明と細胞の形が極性形成に与える影響の解明：非対称細胞分裂は細胞の多様化における極めて重要な細胞機能制御の仕組みの一つであり、母細胞から作られる細胞内極性形成は極めて重要な役割を果たしている。本研究では、細胞内極性形成の未解決課題を細胞の形や細胞質の空間を考える新しい視点からアプローチし、数理モデルと数学解析を通じて明らかにすることに成功した。

C) 医療や社会的問題における数理的手法の発展：蕁麻疹の病理的特徴である「膨疹の形（パターン形成）」をシンプルな反応拡散数理モデルで捉えることに成功し、今まで謎にされてきた蕁麻疹の分子的仕組みを数学から提案することに成功した。また、日本の空き家問題を世界で初めて数理モデルで捉え、「空間」的影響に着目した結果、空き家を減らすだけではなく、空き家の空間的再配置によって自治体の財政圧迫を減らす政策の提案に成功した。

（2）詳細

研究テーマ A「細胞核内のクロマチンの空間形成の仕組み解明」

夜行性動物における網膜細胞の核内構造が昼行性動物のもつ構造から作られるパターン形成の過程は、2009 年初めてマウスの網膜細胞で発見された。しかし、核という極めて小さな空間の中でなぜ DNA のダイナミックな配置変換が起きるのかについては明らかにされておらず、生物学的にはそれらしい仮説すら存在していない難問として残っていた。無論、この現象の発見以来、実験系でも数理モデルにおいてもいくつかの研究は行われてきたが、すべてがミクロレベルからのアプローチであり、パターン形成のダイナミックな変化を染色体の移動と共に捉えることは難しかった。そこで従来のアプローチとは全く異なる巨視的な数理手法である Phase-field 法を用いて核の動的変形が核内 DNA の構造変換に極めて重要である事を発見した。主に材料科学で用いられてきた数理的手法である Phase-field 法を細胞核内のクロマチン動態を捉えるために用いた発想は世界初めての挑戦であり、その新規性は極めて高く評価された。本研究は、このような数理的手法を用いたアプローチの妥当性を証明するために、実際の現象でも細胞核の動的変形がクロマチンの空間構造形成に重要に関わる可能性を in vitro 実験と ex vivo 実験で示す事にも成功した。本研究成果は、生物学的なアプローチでは思いつく事の難しい全く新しい発見を数学から見出したことに大きな意義がある。本結果は、国際専門誌 PLOS Computational Biology に 2019 年度に発表され、同時にプレスリリースも行った。

研究テーマ B「非対称細胞分裂におけるパターン形成と細胞の幾何学的性質の役割を解明」

我々の体は260種類の細胞によって形成されている。しかしながら、その出発点は、受精卵という一個の細胞である。一個の細胞から出発した我々の体が数百もの異なる細胞で構成されるその基本仕組みの一つが非対称細胞分裂である。非対称細胞分裂では、母細胞が分

裂を行う前に自らが持つ様々な分子（蛋白質）を細胞膜又は細胞質に非対称に局在化させ、的確な大きさの制御と共にお互い異なる分子を持つ娘細胞を作り出す。このような母細胞の中で起きる局在化（極性）現象は非対称細胞分裂の全体を制御する鍵となる極めて重要な制御仕組みである。本研究では、Phase-field 法を用いて細胞の幾何学性質を反映した数理モデルを構築し、細胞質タンパク質が作る細胞質の極性と細胞膜で作られる PAR 極性の相互作用及び細胞質極性の役割について明らかにする事に成功した。また、細胞質の極性と細胞膜の極性の位置関係について普遍的な仕組みが存在する事を数理モデルで導きだし、数学的に証明する事に成功した。本研究の成果は、Journal of Mathematical Biology に出版された。

研究テーマ C「形と社会的問題」

蕁麻疹の病態解明：蕁麻疹は、局所の皮膚浮腫及びかゆみを伴う膨疹の急速な出現および消失を特徴とする一般的な皮膚疾患で約 5 人に 1 人が生涯において一度は経験する皮膚病であるが、その根本なる分子レベルでの仕組みは多くが謎とされている。本研究では、今まで未知であった蕁麻疹の分子的な仕組みと膨疹の多様な幾何学的発症を、数理モデルを用いて発見する事に成功した。本研究結果は、蕁麻疹の病因の理解を深め、臨床医療の現場で適切な治療のための意思決定に役に立てる可能性のみならず、幾何学的な発疹を伴うさまざまな皮膚疾患を分析し、インシリコ実験を通じて治療の有効性を予測する数学的アプローチのまったく新しい道を開く可能性を提示する。本研究成果は、国際専門誌 PLOS Computational Biology に 2019 年度に発表され、プレスリリースも同時に行った。

空き家問題の解決に向けて：超高齢者社会と人口減少に直面している現日本の社会で、空き家は 2033 年に日本全国で 30.5%に悪化すると予測されており、近い将来、日本の社会システムのみならず日本経済全体にも悪影響を及ぼすと考えらえている。このような日本の空き家問題を数理モデルで捉える事に成功した。本研究では、空き家の動向を現在の人口分布や経済規模から予測できる数理モデルを世界初めて構築し、地域性を反映する事で現実的に考えられる税金政策を提案し、地域の人口や経済力によって最適な政策が異なることを導き出した。また、空き家の有効活用における空間的政策を行えば、自治体の財政に一層有利になる空間政策も可能であることを提案した。本研究は、2019 年度に国際専門誌である Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics に発表され、同時にプレスリリースも行った。

3. 今後の展開

今回のさきがけの研究では「空間（ドメイン）の形」をキーワードに主に生命現象におけるドメインの役割の重要性を数理と実験の融合で示す事を目指した。また、生物実験だけでは発想つく事のできない生命現象を数理で提案する事を目指し、その成果を得られる事が出来た。しかし、現在の研究段階ではその「可能性」を理論で提案できた段階であり、数理で発見した定性的な性質をどう実現象に結びつけ、実装化に繋げるかについて多くの課題を残している。データ解析や情報化が進んでいる今、これらの手法を現在の課題に結びつけ、実装化に近づけるためには、新しい視点からの数学的アプローチが必要であり、発想が必要である。さきがけで得られた研究をベースに今後はこれらの課題解決に向けた数理手法の開発に展開させていきたいと考える。

4.　自己評価

今回のさきがけでは、当初目標していた研究成果を達成できただけではなく、数理的手法を中心に社会的課題に関連する様々なテーマへの発展も出来たことから、さきがけの研究期間内で 8 編の論文でその成果をまとめて国際専門誌に投稿する事が出来た。その研究成果のうち、二つの研究は新規性や挑戦性が極めて高く、今後さらなる発展が期待される。また、複数の研究テーマを同時に進めるために共同研究の体制や研究補助員の採用、更に、実験研究への研究費のサポートは研究をスムーズに進める上で非常に重要な役割を果たし、研究期間内で様々な成果に繋げる事が出来た。また、研究成果を積極的に発信するための多くの国際研究会の参加や海外研究機関の長期間訪問は、さきがけの研究発展のみならず国際共同研究を広めるきっかけにもなった。今回のさきがけで得られた成果は、今後社会実装に向けて更に発展させる予定であり、応用数学分野における日本の学術と科学の世界的な位置付けのみならず、日常で関わる生命科学・医学・社会問題の解決に応用数学が重要な解決の鍵を提案できることを示していきたい。

5.　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. S. Seirin-Lee, Fumitaka Osakada, Junichi Takeda, Satoshi Tashiro, Ryo Kobayashi, Takashi Yamamoto, Hiroshi Ochiai*(*Equal contribution), Role of dynamic nuclear deformation on genomic architecture reorganization. PLOS Computational Biology (2019) 15 (8): e1007289.
2. S. Seirin-Lee, Y. Yanase, S. Takahagi, M. Hide,　Multifarious Eruptions of Urticaria Solved by A Simple Mathematical Equation. PLOS Computational Biology (2020) https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1007590
3. S. Seirin-Lee, M. Nomata, M. Mukunoki, Mathematical modeling and regionality-based optimal policy to reduce empty houses, Akiya, in Japan. Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics (2019) DOI: 10.1007/s13160-019-00400-3
4. S. Seirin-Lee, T.Sukekawa, T. Nakahara,　H. Ishii, S-I. Ei, Transitions to slow or fast diffusions provide a general property for in-phase or anti-phase polarity in a cell. Journal of Mathematical Biology (2020), https://doi.org/10.1007/s00285-020-01484-z.
5. M. Kuwamura, S. Seirin-Lee, S-I. Ei, Dynamics of localized unimodal patterns in reaction-diffusion systems related to cell polarization by extracellular signaling. SIAM J. on Applied Mathematics (2018)78, No6, 3238-3257.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

主要な学会発表

1. ″ A challenging interdisciplinary approach to elucidate a mystery of remodeling process in nuclear architecture″ , CSIAM, A3 International Workshop, Qingtao, China , 12th-15th Oct, 2017.
2. ″生命科学の新たな道を開く数理理論 ” 日本皮膚科学会総会 , 会頭特別企画「皮膚科学の時空」、広島リーガロイヤルホテル、2018 年 5 月 31 日～6 月 3 日.
3. ″ 生命科学の美と不思議、そして謎解き屋の反応拡散方程式″ 数学のパワーが世界を変える研究会 2019, 東京 3 月 10 日-11 日
4. A general property for in-phase and anti-phase cell polarities in asymmetric cell division, Minisymposium Mathematical modeling, simulations and theories related to biological phenomena, Valencia, Spain, ICIAM2019, July 14-20.
5. 反応拡散方程式、生命のパターン形成におけるその無限の才能, 日本数学会年会, 応用数理分科会特別講演、日本大学 2020 年 3 月 16 日—19 日.

プレスリリース

1. August 29, 2019 :細胞核の動的変形が核構造の再編成を引き起こすことを世界で初めて発見! https://www.hiroshima-u.ac.jp/system/files/126099
2. September 11, 2019 : Mathematical modeling shows why animals see at night https://phys.org/news/2019-08-mathematical-animals-night.html
3. January 15, 2020: 蕁麻疹でみられる発疹の症状を数理モデルで再現 ～新たな治療法確立の可能性～ https://www.hiroshima-u.ac.jp/news/55726
4. January 28, 2020: Studying the geometry of a common skin disease (Two press releases) https://www.eurekalert.org/pub_releases/2020-01/hu-stg012720.php?fbclid=IwAR2bjrjrNhPVQl3oJEc8dM_luSv7JbmXK3SQvFCCVGXzBK0R3iu6gO8E3EU https://qswownews.com/research-geometry-of-a-common-skin-disease/
5. December 17, 2019: 日本の空き家問題を数学の力で解決！ https://www.hiroshima-u.ac.jp/system/files/132595/ 【プレスリリース】日本の空き家問題を数学の力で解決！.pdf

研　究　報　告　書

「正定値対称行列の数理に関する革新的新技術」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 伊師　英之

1．　研究のねらい

本研究の開始前に，我々はある種の良い構造をもつ正定値対称行列のなす凸錐を見通しよく扱う代数的枠組みを発明した．この道具を用いた，様々な問題に現れる巨大サイズの行列計算のアルゴリズムの評価，改良，および新開発が本研究の目標である．対称錐および等質錐についての先行研究を当面の研究の指針とし，それらの深化および現実問題への応用を通じて成果を上げる．さらに多くの問題解決に挑戦し，その結果として既存の理論を大きく包含するような体系の創造を目指す．一方で，本研究において得られた数学的成果を微分幾何学や表現論のコミュニティで発表し，多くの数学者が行列に関する数理工学の問題に取り組むきっかけを与えることも目標の一つである．

サイズが非常に大きいが殆どの成分が0であるような疎な行列の数理は，ビッグデータや人工知能など多様な分野で必要とされ，近年ますます盛んに研究されている．我々の考察のターゲットの一つは，このような行列である．この種の行列を扱うアプローチの一つにグラフィカルモデルの理論がある．これは大雑把にいえばデータの依存関係をグラフによって表すものであり，数理統計において発展し，現在では機械学習などにも応用されている．このグラフがコーダル（chordal）という条件をみたすときに，対応する対称行列に関して種々の計算が著しく簡単になる．とくに，この場合については，ある種の積分の値や尤度関数の最小値などの重要な量を（近似値ではなく）陽に表す公式が存在することが知られている．

私は純粋数学者として長年の間，豊富な対称性をもつ凸錐である等質錐の幾何と解析を研究してきたが，コーダルなグラフィカルモデルに関する上記の美しい公式たちが，等質錐の理論において研究してきた公式と類似していることを不思議に思っていた．一方で，等質錐および対称錐自体も凸計画法や数理統計への応用が研究されており，私も統計学者や応用数学者と共同研究を行ってきた．そのような中で，ついに等質錐とコーダルグラフィカルモデルに現れる凸錐の双方を含む広範なクラスの錐を，対称行列の集合として実現して研究する手法を確立した．グラフィカルモデルは，理論と応用において現在も活発に展開している分野であり，蓄積も膨大である．この分野に対し，我々の枠組みを通じて等質錐のアイディアや手法を導入することで，豊富な成果が得られることが期待できる．

2．　研究成果

（1）概要

正定値実対称行列を下三角行列とその転置行列の積として表すコレスキ分解は，応用数学において基本的な概念で，連立方程式の解法をはじめとする様々な場面において重要な役割を果たす．コーダルなグラフィカルモデルに現れる正定値対称行列はコレスキ分解においてゼロ成分の位置が保存される（fill-in free）という都合の良い振る舞いをすることが知られ

ている．我々はこの「良い振る舞い」を一般的なかたちで定式化し，等質錐の視点から徹底的に研究することで，コーダルなグラフィカルモデルのように綺麗な計算を許容する行列の単純な代数構造を発見し，準コレスキ構造と名付けた．これが何より重要な成果である．なお，本研究の出発点であった等質錐を含む枠組みも，この準コレスキ構造に自然に含まれる．

指数型分布族は，正規分布や二項分布，カイ2乗分布といった統計において重要なものを多数含む確率分布のクラスである．平均0・分散1の標準正規分布をアファイン変換することによって全ての正規分布が得られることは良く知られているが，このように一つの分布の変数変換によって全ての分布が得られるような性質をもつ指数型分布族を完全に分類することに成功した．このような指数型分布族は全て，上述の準コレスキ構造をもつランダム行列として具体的に構成される．

与えられた多変量データのサンプルから，どのような成分の入れ替えに関して不変なモデルを設定すればよいかをベイズ統計によって定量的に判定する方法を開発した．これは有限群の表現論と対称錐の理論を応用して得られたものであり，「色付きグラフィカルモデル」という比較的新しい研究テーマにおいて世界で初めて得られた一般的な結果といえる．

線形計画問題および半正定値計画問題の効率よい解法である主双対内点法においては，実行可能解の集合が双対錐においてどれだけ曲がっているかが最適解の計算コストに比例することが知られている．我々は，実行可能解の集合が双対錐においても平坦で，最適解が陽に計算できるような問題は，ジョルダン代数の部分代数に対応することを発見した．

以上の成果をまとめると，本来計算コストの大きい積分や最適解の計算に対し，反復計算による近似値ではなく正確な値が陽に計算できるような状況を我々は多数発見したといえる．ちょうど一般の力学系における可積分系のように，本研究で発見されたものは特殊ではあるが，少なくとも理論的には重要な存在になるであろう．

（2）詳細

研究テーマ A「準コレスキ構造の発見」

一般に多数のゼロ成分をもつ疎な対称行列であっても，コレスキ分解した結果として得られる三角行列は疎になるとは限らない．対称行列におけるゼロ成分が，コレスキ分解した三角行列においてゼロでなくなる現象は fill-in と呼ばれる．この fill-in が全く起こらない状況は fill-in free と呼ばれており，グラフィカルモデルにおいては，グラフがコーダルである（すなわち，長さ4以上のサイクルは必ずショートカットをもつ）ことと同値である．この fill-in free の状況では種々の計算が時として極めて容易になることは応用数学において良く知られていた．

我々は対称行列からなる一般的なベクトル空間 Z に対して，fill-in free を拡張する概念を次のように定義した：ベクトル空間 Z が『コレスキ構造をもつ』とは，Z に属する各正定値対称行列 x のコレスキ分解によって得られる下三角行列全体が生成するベクトル空間の次元と，もとの Z の次元が等しいことをいう．ゼロ成分を固定した疎な対称行列からなるベクトル空間については，2つのベクトル空間の次元の差が fill-in の生じた成分の個数とみられ，この意味でコレスキ構造は fill-in free の一般化になっている．我々は Z がコレスキ構造であるかどうかは，或る二項演算について Z が閉じていることと同値であることを発見した．さらに，このときベクトル空間 Z には等質錐を実現する空間と類似した構造があることが判明し，尤度関

数の積分や最適化問題の解，そして或る種の欠損データ問題の最尤解が，コーダルなグラフィカルモデルの場合と同様に明示的に求積できることを証明した．ある正則行列によるベクトル空間Ｚの共役がコーダル構造をもつとき，Ｚは準コレスキ構造をもつという．準コレスキ構造についても，上記問題に対する明示解が存在する．しかも，以下に述べる「等質指数型分布族」「色付きグラフィカルモデル」「正定値対称行列全体のなす凸錐の二重自己平行部分多様体」は全て準コレスキ構造の枠組みのなかで実現されることがわかった．すなわち，「準コレスキ構造」は本研究全体を包括する単純かつ普遍的な構造なのである．

研究テーマ B「等質指数型分布族」

いくつかのデータの期待値が与えられた中で，データの分布を出来るだけ妥当な形で推定するというのは基本的な問題である．妥当性の基準として，シャノンのエントロピーが最小であることを要請すると，問題の解として指数型分布族が現れる．確率分布族において，一つの分布の変数変換によって分布族全体が得られるものを等質と呼ぶ．１次元のパラメータ空間をもつ等質指数型分布族は，半直線上のガンマ分布と，分散を固定した1次元正規分布であり，これらは初等幾何における円と直線の役割を，情報幾何において担うと考えられる．

我々は，等質な指数型分布族のパラメータ空間には，微分幾何の概念である等質ヘッセ領域の構造が入ることを証明した．一方で，私がこれまで研究してきた等質錐の行列実現の方法を拡張して，全ての等質ヘッセ領域を対称行列の集合として実現することに成功した．これらから，結果として全ての等質指数型分布族を，研究テーマＡで述べたコレスキ構造をもつ対称行列に値をとるランダム行列として構成することが出来た．そこでは，上述のガンマ分布と正規分布が構成要素になっている．

研究テーマ C「色つきグラフィカルモデル」

単純グラフの頂点 a と頂点 b が結ばれていないとき，多変量データの第 a 成分と第 b 成分が条件付き独立であるとするのが，グラフィカルモデルのアイディアで，このとき対応する対称行列の(a, b)成分は 0 となる．このグラフィカルモデルの要請に加えて，もとの単純グラフの頂点や辺を着色し，同じ色ならば対応する対称行列の成分同士が等しいとするモデルを「色付きグラフィカルモデル」という．とくにグラフを自分自身に重ね合わせる操作によって，重なり合う頂点や辺の色を同じにすることは，多変量データの成分の入れ替えについての対称性を統計モデルに加味することになり，応用上重要である．実際，そのようなモデルがうまく見つかると，データは大幅に圧縮される．

我々は，全ての頂点が辺で結ばれている完全グラフの色付きグラフィカルモデルの研究を対称錐とジョルダン代数の理論をもとにして展開した．重要なことは，これが準コレスキ構造であり，共役をとる行列は有限群の表現論を通じて見つけられるということである．与えられたデータに最も良く適合する色付きグラフィカルモデルを探索するためには，可能性のある膨大な数の着色に対して計算を実行する必要があるが，そのための工夫を積み重ねることにより現状では16×16の行列に対して解を与える目処がたった．

研究テーマ D「正定値対称行列のなす凸錐の二重自己平行部分多様体」

半正定値計画法において，実行可能解の集合が（半）正定値対称行列からなる対称錐の二重自己平行部分多様体（すなわち，行列成分から定まる自然な座標系において平坦で，さらに逆行列の成分から定まる座標系においても平坦）である状況では，最適解は反復法ではなく，明示的に計算される．我々は，そのような二重自己平行部分多様体と，実対称行列のなすジョルダン代数の部分代数との間に一対一の対応があることを発見した．なお，ジョルダン部分代数も準コレスキ構造の一種であり，先述の完全グラフの色付きグラフィカルモデルに対応する対称行列の集合は，二重自己平行部分多様体の重要な例となっている．準コレスキ構造の一般論を適用して，原理的には（組合せ論的複雑さを不問にすれば），我々は可能な全ての二重自己平行部分多様体を記述することが出来る．

３．今後の展開

社会的な問題に実際に現れる巨大サイズの行列に，準コレスキ構造がそのまま当てはまることはあまり期待できない．与えられたデータに対して，それを近似する適切な準コレスキ構造を見つけること，そして，その準コレスキ構造に対する計算結果から，もとのデータに対する結果を引き出す手法を確立することが今後の課題である．Fill-in free な行列についての先行研究をヒントにして考えていきたい．

一方で，準コレスキ構造は純粋数学と応用数学の両方に興味ある問題を提供することが出来る対象であると確信している．本研究を遂行するにあたり，海外から幾人もの研究者を招聘したり，分野横断的な研究集会を開催したりすることによって，多様な分野の研究者のネットワークを築くことが出来た．このつながりのもとで，準コレスキ構造の理論をさらに豊かに発展させていきたいと考えている．

４．自己評価

本研究で得られた成果の数学的価値には自信をもっている．とくに，対称行列に対して定義した新しい二項演算から，単純な見かけからは思いも寄らないような豊富な結果を引き出せたのは，長年の等質錐の研究の経験と，本研究期間に実施した多くの研究者との研究討議の賜物であると考えている．欠損データ問題の最尤法による解法や，多変量データの成分の入れ替えに関するモデル選択など，この枠組で具体的な統計の問題に関する成果も得られたが，データの容れ物としての「佳いかたち」を発見したことの潜在的重要性が開花するのは今後のことであろう．その際に課題となるのは，一般のデータを「佳いかたち」のデータに帰着させて計算量を減らす方法論である．グラフィカルモデルの先行研究にヒントがあるように見えたが，考察を進めることは出来なかった．また，今回得られた成果の多くは国内外の研究集会で発表したものであるが，論文にまとめて出版するには時間が足りなかった．

本研究の予算の大半は，国内外の出張旅費と，研究者の招聘の費用として執行した．名古屋大学において，「行列解析の展開」というタイトルで，経済や工学を含む様々な分野の研究者が行列をテーマにアイディアの交流をはかるワークショプを開催した．このワークショップのあとに参加者同士の研究討議や共同研究が開始されたことが複数あり，大変意義深い催しとなった．さらに，第１８回名古屋数学コンファレンス「Information Geometry and Affine Differential Geometry III」というタイトルで，情報幾何の国際研究集会を開催した．純粋数学者

に情報幾何を紹介するという目標を掲げたこともあり，年度末にも関わらず70名ほどの参加者があった．こちらも国内外の研究者の相互交流を促進するという点で，大きな意義があった．このようにして築かれた多様な研究者のつながり，とくに純粋数学者と統計学者や工学者とのつながりは，今後も発展し，成果を産み出していくであろう．

一方で，海外の共同研究者（延べ10名）をそれぞれ数週間（2週～6週）名古屋大学に招聘した．とくに，Piotr Grazczyk 教授と Bartosz Kolodziejek 助手は何度も招聘し，大変充実した共同研究が実現できた．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1.Hideyuki Ishi, Matrix realizations of homogeneous Hessian domains, Lecture Notes in Comput. Sci. (2017) 10589, 195--202
2. Atsumi Ohara and Hideyuki Ishi, Doubly autoparallel structure on the probability simplex, Springer Proc. Math. Stat. (2018) 252, 323--334
3. Hideyuki Ishi and Bartosz Kolodziejek, Characterization of the Riesz exponential family on homogeneous cones, Colloq. Math. (2019) 158, 45--57
4. Piotr Graczyk, Hideyuki Ishi and Bartosz Kolodziejek, Wishart laws and variance function for homogeneous cones, Probab. Math. Statist. (2019) 30, 337--360

（2）特許出願

研究期間累積件数：0件（公開前の出願件名については件数のみ記載

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

学会発表

1. Wishart laws for a wide class of regular convex cones, CIRM Conference ‘Mathematical Methods of Modern Statistics’, Luminy, フランス, 2017.7.11
2. Matrix realization of a homogeneous Hessian domain, 3rd Conference on Geometric Science of Information, Paris, フランス, 2017.11.9
3. 凸錐上の「型積分，日本数学会年会，函数解析学分科会特別講演，東京大学，2018.3.19
4. On homogeneous exponential family, 第 18 回名古屋国際数学コンファレンス「Information Geometry and Affine Differential Geometry III」，名古屋大学, 2019.3.27

研　究　報　告　書

「かたちと動きの数理基盤」

研究タイプ：通常型

研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月

研 究 者： 鍛冶 静雄

1．研究のねらい

近年における計算機性能の大幅な向上と低価格化、ヘッドマウントディスプレイやタッチパネル、モーションキャプチャ、そして 3D プリンタといった新しい入出力デバイスの普及は、人とコンピューターのインタラクションに大きな変化を与え、新しい可能性を創出している。こうしたハードウェアの目覚ましい進歩により、ユーザーを含む現実世界とコンピューターの間で、従来の文字や音声に加えて、動きやかたちを介して情報伝達する手段は拡大し、その用途も多岐にわたっている。同時にそれらを実現するために解決しなければならないソフトウェア面での問題は多様化し複雑さを増した。こういった問題は従来、具体的な設定に応じて工学の広い分野に散在して扱われてきたが、体系的な記述言語と汎用性のある理論を用いた研究はまだ限られている。また、かたちと動きの計算が顕著に応用される領域は、映画やゲームといったエンターテイメント分野から、手術アシストや自動運転といったミッションクリティカルな場面にまたがるが、後者においては、確固たる理論的保証に基づいたアルゴリズムが必要とされる。本研究ではこの二点を重要視し、数学、特にトポロジーを用いて、動きとかたちの処理に関しての理論的基盤を与えることを目標とした。この目標における大きな要素として、自然さ、直感的な操作性、可視性、製造の容易さといった、簡単な指標では測れない情報を定量化するという課題がある。このようなデータに内在する構造を抽出するという用途において、トポロジーが非常に有効であることが近年多くの例からわかってきた。以上をふまえ、本研究では動きやかたちを計算機で扱うためのフレームワークを構築すると同時に、当該分野におけるトポロジー応用の実例となり、新しい研究の方向を示すこともねらいとした。さらに、応用上の要求から数学へのフィードバックを生むことで、応用対象とした分野と数学双方の発展に寄与することをめざした。

2．研究成果

（1）概要

かたちや動きに代表される情報は、文字や音声と比較して記述が容易ではなく、いまだにコンピューターが苦手とする対象である。こういった、そのままでは定量化しにくい情報を記述し、その構造を捉えるというのが、本研究の学術的な根幹であった。次項で詳細を述べる通り、トポロジー、離散微分幾何、離散可積分系などの数学理論を用い、また発展させることで、形状にまつわるいくつかの対象に対して新しい視点を導入することができた。

純粋数学のバックグランドをもつ研究者として、数学の諸分野への応用を与えると同時に、応用から純粋数学の発展へ寄与するという循環を生むことも大きな狙いであった。これは特に、下の研究テーマ B で触れるリンク機構の解析において一つの成功例を提示できた。

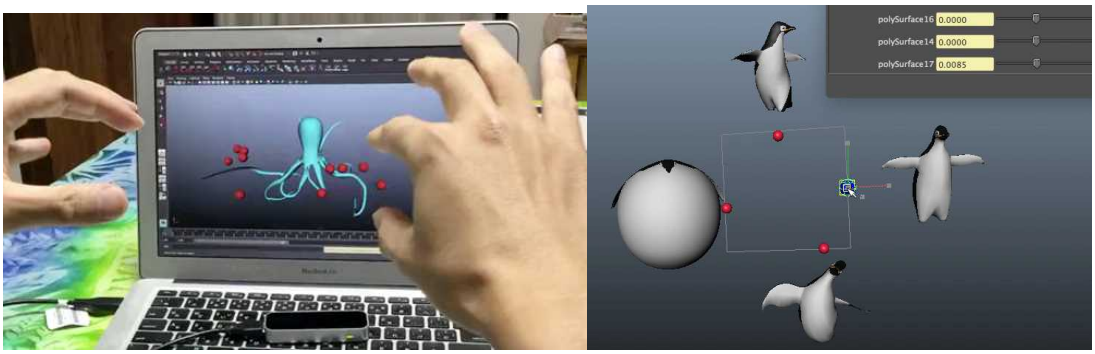
本研究は、実世界から数学的問題を抽出しその理論構築するというスタイルで実施された

が、さらに特色としては、理論にとどまらず、理論を実践し実際に役に立つ手法を与えた点である。多くの研究成果については、開発した手法のソフトウェア実装も行い、オープンソースソフトウェアとして公開している。広く社会に還元することを念頭に、自由なライセンスを設定している。

（2）詳細

研究テーマ A「形状デザインのための幾何学」

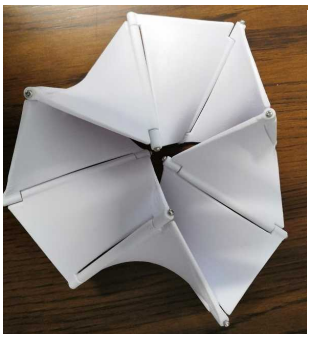
連続的な曲面を扱う幾何学として古くから微分幾何学が発展してきたが、コンピューター上で形状を扱うためには、無限の情報量を持つ連続曲面のままでは扱いづらい。コンピューターと相性が良い離散化された曲面を扱う幾何学として、近年離散微分幾何学が盛んに研究され、建築、造船、コンピューターグラフィックス、デジタル・ファブリケーションに応用されている。本テーマでは、直感的かつインタラクティブに動きやかたちを操ることを主題とし、理論的には離散微分形式やリー群論を下敷きとして、実用に耐えうる画像や形状変形のアルゴリズムを考案した[5](図 1)。



（図 1）左：形状を指の動きに合わせてリアルタイムに変形
右：複数の形状を足し合わせて新しいバリエーションを作成

研究テーマ B「形状・運動の解析」

研究全体を通して、もっとも成功したと自負する結果は、リンク機構の解析である。リンク機構は、複数の剛体が可動式のジョイントによって接合されたもので、動力の伝達など幅広い用途を持つ。その動作解析においては、自由度が最も重要である。特に応用上は狙った動きだけをする 1 自由度のリンク機構を設計することに大きな意義がある。[1](a)(d) では、ヒンジが捻じれて連なった環状のリンク機構を解析し、ヒンジ間の角度を特別に選ぶと 1 自由度になることを発見した。このリンク機構は、エネルギー的にも特異な性質を複数持ち、ロボット、機械、機能性分子など今後の応用も期待される。トポロジーに起因する制約をうまく用いて、望ましい形状や機能を達成する、という良い一例にもなっている。解析に際しては、リンク機構に様々な数学的構造を導入した。ヒンジからなる機構を定捩率離散閉曲線として捉えることは、後から見れば自然な発想であるが、リンク機構解析に新しい視点を開いたと言える。また、リンク機構の状態は実代数多様体として定式化され、リンク機構の動作がその上で定義される離散可積分系で記述できるというのも興味深い結果となった。トポロジー、代数幾何、解析の交錯する新しい数学的対象が見つかった。



（図 2） 左: 3 半ひねりのメビウスの帯上にヒンジが連結されたメビウス・カライドサイクル
右: 三洋結び目の形をした環状リンク機構

研究テーマ C「画像処理」
局所的な特徴を抽出するのに長けた深層学習と、大域的な特徴を捉えるトポロジーを組合せたハイブリッド画像・ボリュームデータ解析手法の開発に取り組んだ。トポロジーをうまく利用することで、深層学習の苦手な部分を補い、解釈・説明性を持ち、また、医療や土木などデータ取得コストの高い領域においてスモールデータで高パフォーマンスを達成する手法を提案した（c)。一例として、[2] では大学病院と共同で、低画質 CT の改善を行った。CT は侵襲的であり、高画質の画像を得るには大きな被爆を伴う。低被爆の CT 撮像法がいくつか提案されているが、画像が悪くなり、診断利用の精度が落ちてしまう。この研究では、深層学習を用いることで、低画質・低被爆 CT の画質を改善するソフトウェアを開発した。機械学習の医療応用においては、安全性や安定性が非常に重要であるが、出力の評価や失敗検知などのメカニズムを組み込むことでそれらを担保した。
また、[4]ではバーチャルリアリティー(VR)を用いて、高次元の対象を可視化する手法を考案した。高次元の”かたち”を扱うのは数学や物理に限らない。高次元(多変量)データの解析においては、まず最初に主成分分析でデータを可視化するであろう。この場合は従来、2 次元の静止画としてプロットすることが主流である。この研究では、直感的に把握しづらい高次元対象を VR を用いてインタラクティブに探索することを可能とし、まさに「百聞は一見に如かず」を実現した。

3. 今後の展開

・形状デザインに関して、基盤となる技術をいくつか整備することができたので、それらを既存技術と組み合わせて発展させたり、新しい利用法を与えたり、その分野の現場の声を聴きながら展開してゆきたい。
・リンク機構の研究については、学術的にも新しく興味深い対象を見つけることができた。より数学的な観点で研究を深めること、また不思議な特性を活かした応用を与えることを目指す。
・さきがけ研究に関連して、数多くのソフトウェアを開発した。公開しているものも多いが、さらなる活用のためには、ドキュメントの整備や広報活動が必要である。これは個人研究者にはなかなか困難であるが、さきがけ期間終了後も少しずつ整備を行ってゆく。
・現代の複雑化した問題を解決するためには、今後ますます異分野連携が重要姓を増す。その中で数学者の果たせる役割、また数学への学術的な還元について、経験をノウハウとして

まとめてゆく。また、異なる文化が協働する上で発生する摩擦や研究公正についても、自分の経験を元に発信してゆく。

4. 自己評価

計算機による情報処理、特に機械学習においては、まずデータが数値化されることが前提となる。かたちや動きといった、そのままでは数値化しづらい対象を構造化して定式化する、という大きな目標に対して、いくつか具体的な成果を、トポロジー的なものの見方の有効性を提示することができた。成果はオープンソースソフトウェアとして公開しており、今後、工業デザイン・映像制作・放射線医療・ロボット工学などの分野において、社会還元が期待できる。3 年半の研究期間を通して、かたちという抽象的なキーワードを軸に幅広い分野に分け入り、当該分野の研究者と議論を重ねることで、問題の抽出と解決を行ってきた。数学者が異分野連携を行う一つのロールモデルを提示できたと思う。特に、応用分野の問題を考察することで、純粋数学の複数の分野が融合する豊かな数学的対象を発見でき、応用と純粋数学の理想的な循環を例示できた。以上より、本研究は概ね成功したと評価できる。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

1. S. Kaji, K. Kajiwara, H. Park, Linkage Mechanisms Governed by Integrable Deformations of Discrete Space Curves, Nonlinear Systems and Their Remarkable Mathematical Structures. Volume 2, CRC Press, in press
2. S. Kida, S. Kaji (joint first author), et al., Visual enhancement of Cone-beam CT by use of CycleGAN, Medical Physics 47-3 (2020), 998--1010, Editor's Choice に選出
3. A. Fauré and S. Kaji, A circuit-preserving mapping from multilevel to Boolean dynamics, J. Theoretical Biology, Volume 440, pp. 71—79, 2018
4. K. Matsumoto, N. Ogawa, H. Inou, S. Kaji, Y. Ishii, and M. Hirose, Polyvision: 4D Space Manipulation through Multiple Projections, SIGGRAPH Asia 2019 Emerging Technologies
5. S. Kaji and H. Ochiai, A concise parametrisation of affine transformation, SIAM J. Imaging Sci., 9(3), 1355--1373, 2016

(2)特許出願

研究期間累積件数:1 件(公開前の出願件名については件数のみ記載)

1.
発　明　者: 鍛冶静雄, Johannes Schoenke, Eliot Fried, Michael Grunwald
発明の名称: メビウスのカライドサイクル(Moebius Kaleidocycle)
出　願　人: 沖縄科学技術大学院大学・山口大学
出　願　日: 2018 年 2 月 27 日 (PCT 出願 2019 年 2 月 26 日)
出 願 番 号: 特願 2018-033395, PCT/JP2019/007314

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

(a)（雑誌記事）数理のクロスロード／かたちと動きの数理基盤／(1) リンク万華鏡 (2) デザインの数学, 数学セミナー 2019 年 6 月号, 7 月号, 日本評論社

(b)（雑誌記事）木田智士,鍛冶静雄,今江禄一,名和要武,中川恵一, 芳賀昭弘, 敵対的生成ネットワーク（GAN）の放射線治療への応, Rad Fan Vol.16 No.12 (放射線治療情報 BOOK2018)

(c)（学会発表）Homology assisted neural networks for images, International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019), Valencia, 2019 年 7 月

(d)（学会発表&予稿集）曲線の幾何学から生まれた閉リンク機構, 精密工学会 2018 年春季大会 シンポジウム資料集, pp. 62--65 (2018)

研　究　報　告　書

「乱択アルゴリズム設計の技法と脱乱択化の数理」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 来嶋　秀治

1．　研究のねらい

情報環境の発達した現代において，計算は現実の社会に深く浸透し，計算の方法 = アルゴリズムは現代社会を支える基盤技術である．アルゴリズム設計において，確率的技法は，簡便さ，効率性，大数の法則に保証される頑強さを理由に，理論上も実用上も，もはや欠くことのできない基本的で重要な技術である．本課題のねらいは，確率的アルゴリズム設計の原理を解明し，社会における計算に係る諸課題に対する安心・便利なアルゴリズム設計の理論を進展させることにある．

本課題は特に，主に計算効率の観点からランダムネスの計算への寄与に焦点をあてる．逆説的ではあるが，確率的アルゴリズムの脱乱択化（derandomization）の可能性・不可能性を探り，確率的計算と決定性計算を比較することで，ランダムネスの計算への寄与にアプローチする．離散数学，確率論，数理論理学などの数学に基づき，乱択化と脱乱択化，理論と応用を連携させる研究である．本課題の特徴的なアプローチの一つが，決定性ランダムウォーク(deterministic random walk)である．これは，ランダムウォークと決定性過程を比較する試みで，マルコフ連鎖の mixing time の解析技術を応用し，漸近解析を超えて過渡状態の解析技法の開発が数理的な焦点である．また，高次元多面体の体積に対する決定性近似などの脱乱択可能性の研究や，安定マッチング，分散計算，スケジューリング，安定マッチング，実験計画など，社会的課題に関するアルゴリズム設計の研究にも取り組んだ．

2．　研究成果

（1）概要

乱択アルゴリズム設計の技術として，重要な未解決問題である対数優モジュラ分布からのサンプリングにも取り組んだ．この文脈で劣モジュラ関数の変数変換[1]や $M^\natural$凹関数の最小化元の特徴づけ[8]などの成果を得た．また脱乱択可能性に関して，高次元 V 多面体の体積に対する決定性近似可能性を示すことにも成功した[4]．決定性ランダムウォークの文脈においては，カオス的な決定性系列であるベータ展開に対して，これを記述するマルコフ連鎖を考案した．これを用いて，ベータ展開の乱択アルゴリズムを設計し，領域計算量が大きく改善する萌芽的知見を得た．社会的課題に関するアルゴリズム設計について，オンライン学習や分散制御の文脈で成果が得られた[2,3]．また，スケジューリング，安定マッチング，実験計画に関連する課題などにも取り組み，萌芽的な知見を得た．

（2）詳細

研究テーマ A「乱択アルゴリズム設計の技法」

正規分布に代表される対数凹分布は確率分布の主要クラスの一つで，現実的にも理論的

にも多くの場面に現れる．（一般に多変量の）対数凹分布 π は $-\log\pi$ が凸関数（“下に凸”）であり，すなわち極大値=全域最大値を満たし（単峰性），そのため取り扱いの良いクラスとして知られる．

劣モジュラ関数は有限集合の部分集合族上の実数値関数（集合関数）で，離散版の凸関数と言われる関数クラスである．離散最適化の文脈では，劣モジュラ関数は効率的に最小化できることが知られる．有限集合の部分集合族上の分布 π が対数優モジュラとは $-\log\pi$ が劣モジュラとなる分布である．劣モジュラ関数は効率的に最小化できることから，対数優モジュラ分布の最尤推定も効率的に行え，このため機械学習などで注目され，対数優モジュラ分布からのサンプリングにも大きな需要がある．しかし，対数優モジュラ分布からのサンプリングを効率的に行うアルゴリズムの存在性は，理論計算機科学の重要な未解決問題（#BIS の FPRAS 存在性問題として知られる）である．

本課題ではこの問題に取り組み，特に離散数学の文脈でいくつかの知見を得た．まずは，劣モジュラ関数の変数変換に関する研究である[1]．連続の凸関数の重要な性質に，アフィン変換（変数変換）に関する不変性がある．そこで，劣モジュラ関数の変数変換について考察した．アフィン変換に相当するものとして，（劣モジュラ関数の変数である）集合の対称差変換を考える．一般に劣モジュラ性は対称差変換に関して保存されない例が観測される．これに対して，[1]では劣モジュラ性が保存される対称差変換の特徴づけを与えた．また，与えられた集合関数が対称差変換によって劣モジュラ関数に変換できるかという問題を考え，変換後に劣モジュラ関数になる場合でも，この問題が一般には指数時間必要であることを示した．一方で，変換後に狭義劣モジュラ関数が得られる場合には，線形時間でこの問題が解けることを示した．

次は，対数優モジュラ分布の部分クラスの計算量の研究である[8]．劣モジュラ関数の最小化元集合は分配束をなすことが知られる．一方，任意の有限分配束が劣モジュラ関数の最小化集合として出現することも知られており，このことから，もし対数優モジュラ分布一般からの効率的サンプリングアルゴリズム（多項式時間アルゴリズム）が存在すれば，乱択計算量理論で重要な未解決問題である，二部グラフの独立集合の個数数え上げ（#BIS）に対する多項式時間乱択近似解法（FPRAS）の存在が導かれる（この事実を簡単に「#BIS 困難」という）．

$M^\natural$凹関数は離散凸解析の（離散版）Fenchel 双対で重要な役割を果たす離散関数のクラスである．$M^\natural$凹関数は経済学における粗代替性（gross substitutes property）と等価であることが知られ，オペレーションズ・リサーチの在庫管理や数理経済学，安定マッチングなどのゲーム理論などに応用を持つ．有限集合の部分集合族上の $M^\natural$凹関数は劣モジュラ関数の真の部分クラスをなすことが知られている．すなわち，$M^\natural$凹集合関数の最小化元集合は分配束をなす．では，任意の有限分配束は $M^\natural$凹集合関数の最小化集合として出現しうるであろうか？この問いを肯定的に解決した[8]．Birkhoff の表現定理を用い，分配束を表現する半順序集合から二部グラフのマッチングを利用した $M^\natural$凹集合関数を設計し，その最小化元集合が与えられた分配束に等しいことを示している．この結果は，部分集合族上の対数優モジュラ分布からのランダムサンプリングは，クラスを対数 $M^\natural$凸分布に制限しても#BIS 困難であることを意味する．否定的な側面として，対数 $M^\natural$凸に制限してもサンプリングアルゴリズムの設計は容易でない．肯定的な側面として，対数 $M^\natural$凸分布に対する FPRAS が設計できれば， #BIS は

FPRAS をもつ.

研究テーマ B「脱乱択化の数理」

乱数によって，計算量は真に改善されうるのであろうか？この問いに肯定的に答える有名な事実のひとつが，高次元凸体の体積計算である．メンバーシップオラクルで与えられた n 次元凸体（convex body）の体積計算は，多項式時間の決定性計算では 1.999^n 倍より良い近似比の達成が不可能であることが知られる．これに対して，1991 年の Dyer, Frieze, Kannan によるマルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）法を用いた FPRAS は乱択アルゴリズム設計の金字塔である．

一方で，凸体を凸多面体（convex polytope）に制限した場合，体積計算の多項式時間近似可能性は未解決である．本課題に先行して，0-1 ナップサック多面体の体積が決定性計算で近似可能であることを示している [Ando, Kijima 2016]．0-1 ナップサック多面体は，非負制約に不等式制約が 1 本課されただけの非常に素朴な多面体であるが，体積計算は#P 困難であることが知られる．通常，線形計画などで現れる多面体は不等式で与えられる．これを H 表現といい，不等式で与えられる多面体を H 多面体という．これに対し，端点で与えられる多面体を V 多面体という．たとえば V 多面体上の線形最適化は非常に容易に解くことができる．では，V 多面体の体積計算は易しいのであろうか．残念ながら，n 次元で頂点数が 2n+1 の V 多面体の体積計算は#P 困難であることが知られている．[4]では，この多面体の体積が決定性計算で近似可能であることを明らかにした．用いた手法は古典的な畳み込み和の計算であるが，サブルーチンとして，2 つの正軸体（L1 ノルム球）の交わり部分の体積の近似計算を用いる．興味深いことに，2 つの正軸体の交わり部分の体積計算自体が#P 困難であることも[4]では示している．

MCMC 法の脱乱択化を動機として，本課題に先行して決定性ランダムウォークの研究を行ってきた[Kijima et al. 2016, Shiraga et al. 2018, 他]．関連して，決定性過程を確率過程で模倣する，いわば逆向きの課題についてもこれまでに構想してきた．ベータ展開は，2 進展開の基数 2 をベータ（ベータは 1 より大きく 2 より小さい値）に置き換えたものである．ベータ展開は初期値鋭敏性があり，カオス系列であることが知られる．このベータ展開を記述するマルコフ連鎖を考案し，これを用いた乱択ベータ展開を設計した．すなわち，ベータ展開は乱択ベータ展開の決定性ランダムウォークとみなすことができる．興味深いことに，乱択ベータ展開は決定性のベータ展開の領域計算量を有意に改善する萌芽的事実を発見している．詳細な解析と発展応用については今後の課題である．

研究テーマ C「社会における計算に係る課題の解決」

安定マッチング，スケジューリング，オンライン学習，分散計算，実験計画など，現実社会におけるアルゴリズム設計に関する諸問題の解決にも取り組んだ．

安定マッチングは，研修医の配属や卒業研究配属，海外大学の入学割当などに実用される．一方で，Gale-Shapley のアルゴリズムは片側（例えば，研修医配属で有れば研修医側）に有利な解が出て，反対側（研修医配属では病院側）の満足度は低いことが知られている．この解決案としてメディアン安定マッチングの概念がある．メディアン安定マッチングの計算は

#BIS 困難であるが，実用的には MCMC 法に基づく素朴で多くの入力に対しては比較的効率よく動くアルゴリズムを提案している[Kijima, Nemoto 2012]．これを安定マッチングの一般化である安定割当問題に拡張するための研究に取り組み，構造に関する知見を得た．

数理最適化において，定式化ならびに多面体構造の理解は重要な基礎技術である．研究者はこれまでにたとえば，多面体構造を用いた最適スケジュールのオンライン学習アルゴリズムの設計などを行っている[Yasutake et al. 2011，他]．これに関連して，ジョブスケジューリングなどを対象として，緩和多面体への多段階射影を用いた新しいオンライン学習の枠組みを与えている[2]．また，線形緩和法と組み合わせた線形計画定式化は現実的な高速解法に不可欠な技法である．順序制約が与えられたスケジューリングに対し，拡張複雑度(extension complexity)が指数的であることがわかり，すなわち，うまい定式化は存在しえないことが分かった．この事実は，線形緩和にさまざまなヒューリスティクスを加える現実的解法の妥当性を支持するものである．

このほか，自律分散制御の文脈で近年研究が盛んな探索競合比解析に関して国際共同研究を推進し，スピードの異なる乗り物への乗り換えを考慮した最短路探索の探索競合比解析で成果を得た[3]．また，実験計画に関して，古典的な Steiner 三項系のランダムサンプリングに関する国際共同研究を推進し，萌芽的知見を得ている．

3．今後の展開

本課題を通じて，離散数学，確率論，論理学にまたがるいくつかの興味深い知見が得られた．ランダムネスの計算への寄与の観点から，決定性過程と確率過程の比較は重要な話題であり，今後の進展は大きな課題である．とくに MCMC の脱乱択可能性や，今回得られたカオス系列の乱択計算量の萌芽的知見は興味深い課題であり，物理シミュレーションなどの効率化に役立つ技術形成に取り組みたい．

深層学習をはじめとする昨今の人工知能技術において，もはや「乱択化」は欠くことのできない技術である．入力（データ）の不確実性に計算の乱択化もあいまって，計算機工学は古典的な決定論的アプローチから実験科学の様相を強くしつつある．しかし，計算とは偶発的ものであろうか？今後の情報社会の基盤を保証する上でも，乱択計算の信頼性は重要な課題であろう．決定性計算と確率的計算の差については，数学的に未解決な点も多く，社会を支える基盤技術に対する基礎研究として展開を図る．

4．自己評価

現代の情報化社会において乱択アルゴリズムの果たす役割は大きく，ランダムネスの計算への寄与に関する数理研究は，現実の諸システムの安全性の観点からも重要性の高い課題と考える．この課題に正面から取り組むことができたことには大きく満足しており，乱択ベータ展開に関する萌芽的知見を得られた点は僥倖であった．今後の展開は大きな課題である．乱択アルゴリズム設計の技術として，重要な未解決問題である対数優モジュラ分布からのサンプリングにも取り組むことができ，この文脈で離散数学の進展に貢献できた点も幸いに思う[1,8]．対数劣モジュラ分布と関連が深く同じく重要な未解決問題であったマトロイド基のサンプリングが 2018 年に解決されており，今後の乱択アルゴリズム設計の技術発展が予想される．また脱乱択可能性に関して，高次元 V 多面体の体積に対する決定性近似可能性を示すこと

にも成功した[4]．社会的課題に関するアルゴリズム設計について，オンライン学習や分散制御の文脈で成果が得られた[2,3]．一方で，スケジューリング，安定割当，Steiner 三項系などの課題は研究途上にあり，研究の完成は今後の課題である．

さきがけ研究費により，国際共同研究を推進することもできた．本課題で得られた知見を基に，産官との今後の連携にもつなげたい．

5．主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. J. Nakashima, Y. Yamauchi, S. Kijima, M. Yamashita, Finding submodularity hidden in symmetric difference, SIAM J. Discrete Math., 34(1), 571–585.
2. T. Fujita, K. Hatano, S. Kijima, E. Takimoto, Online combinatorial optimization with multiple projections and its application to scheduling problem, IEICE Transactions, 101-A(9), 1334–1343, 2018.
3. L. Gasieniec, S. Kijima, J. Min, Searching with increasing speeds, SSS 2018, 126–138.
4. E. Ando, S. Kijima, An FPTAS for the volume of some V -polytopes – it is hard to compute the volume of the intersection of two cross-polytopes, COCOON 2017, 13–24.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

[5]（解説記事） 来嶋秀治，グラフアルゴリズムの最先端，電子情報通信学会誌 101:3, 246—247, 2018.

[6]（解説記事） 来嶋秀治，乱択と計算，応用数理, 27:3, 15—23, 2017.

[7]（招待講演） S. Kijima, Approximating volume – randomized vs. deterministic, the 10th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, Budapest, Hungary, May 22–25, 2017 (May 22).

[8]（プレプリント） T. Fujii and S. Kijima, Any finite distributive lattice is isomorphic to the minimizer set of an $M^\natural$-concave set function, arXiv:1903.08343, 2019.

研　究　報　告　書

「ヘテロ次元サイクルに着目した同期理論の構築ー複雑現象の理解に向けてー」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 齊木　吉隆

1．　研究のねらい

流体乱流、気象、経済、金融等の複雑現象は、背後で多くの構成要素が絡み合っており、理解、予測、制御は困難です。その困難さの要因のひとつはそれらが示す間欠的なふるまいにあります。現象の高次元性から鑑みて、その間欠的なふるまいは不安定次元の異なる状態の共存に由来すると考えることは力学系理論の観点からみると自然です。不安定次元の異なる状態が共存する力学系研究は、これまで抽象理論の研究が主で、具体例の研究が不足していたため、その方向性の研究を推し進めることが期待されています。これまでに間欠性を示す力学系の理論的研究は同一素子の対称結合によるものが大半であったため、そうではない系を含めて間欠性を統一的に捉える手法を明らかにすることも求められています。一方、間欠的なふるまいを示す流体、気象、経済、金融時系列の分析はこれらの複雑現象の理解を目指す理論の構築を目指すために重要です。本研究ではこの種の複雑現象における間欠的な状態変化の理解、予測、制御につなげるために不安定次元の異なる状態が共存する力学系に関する具体例の研究を推し進めるとともに、間欠的現象の時系列分析をおこなって間欠的現象の理解を深めることが研究のねらいです。

2．　研究成果

（1）概要

流体力学等の間欠性を示す決定論的な複雑現象では常に持ち合わせると考えられるヘテロカオス（不安定次元の異なる状態を経巡るカオス）に関する数値的研究をおこなった。まず、複数の低次元写像、常微分方程式で記述されるカオス力学系に関して詳細な数値解析をおこない、周期軌道を検出してその不安定次元を計測しヘテロカオス性の検証をおこなった。また、そのヘテロカオス性が起こるメカニズム（分岐）を考察した。次に、ひな形となりうるシンプルな写像（2 次元写像、ならびにそれを可逆にした 3 次元写像）を提案して、実際、不安定次元の異なる周期点がそれぞれアトラクタで稠密であることや、その系がエルゴード的であることを証明した。また、ヒルベルト変換を用いた同期解析手法により、複数国為替時系列間にみられる購買力平価を基準とした同期・非同期状態間遷移を明らかにしたり、都道府県別鉱工業生産指数の月次データの間の同期・非同期状態間遷移を明らかにした。流体力学に関しては、リザーバーコンピューティングと呼ばれる機械学習を間欠性を示す流体マクロ変数に適用して、時間発展モデルを構築した。

（2）詳細

主に以下の研究に従事した。

i. ヘテロカオスの研究
ii. 流体乱流のリザーバーコンピューティング
iii. 準周期軌道とヘテロカオスにおけるその役割
iv. 複数経済時系列間の同期解析

以下が各項目の状況説明である。
i.流体乱流等の決定論的な複雑現象ではほぼ常に持ち合わせると考えられるヘテロカオス（不安定次元の異なる状態を経巡るカオス）に関するひな形となりうるシンプルな写像を提案した。実際、そこで提案した 2 次元写像ならびに 3 次元写像に対して、不安定次元の異なる周期点がそれぞれアトラクタで稠密であることや、その系がエルゴード的であることを証明した（論文執筆済）。そこで提案した 2 次元写像は非可逆写像であるが、それに 1 次元追加することによって 3 次元の可逆写像にすることによって不安定次元 1 と 2 の周期点集合がそれぞれアトラクタで稠密であることを証明した。また、いくつかの低次元写像や Edward Lorenz によって 1996 年に提案された高次元常微分方程式について数値計算を行い、それらがヘテロカオスである数値的証拠を得て、異なる不安定次元をもつ構造が混ざるメカニズムを明らかにした。また、それらの例を用いてヘテロカオスの発生メカニズム（分岐）を考察した（論文出版済）。いくつかのヘテロカオス写像において、ある不安定次元 n をもつ点で構成されている最大の不変集合として index-n set を定義し、その集合を数値的に求めて、各写像における不安定次元の異なる構造の混ざり方を考察した。
ii.リザーバーコンピューティングと呼ばれるリカーレントニューラルネットワークを用いた機械学習を、流体力学に関するマクロ時系列データに適用して、時間発展モデルを構築した。そのモデルは初期条件を与えるとしばらくの間、真の時間発展を良く近似する軌道を生成するとともに、時間発展の近似が破綻した以降のモデル軌道も真の統計性質を再現するものとなっている（論文出版済）。また、時系列として観測可能な変数が少ない場合に時間遅れ座標を用いて学習することが有効であることを示し、時間遅れ座標の遅れ時間ならびに次元の適切な取り方を提案した（論文採録決定済）。取るべき遅れ時間 τ は用いる変数の相関時間程度（自己相関関数を時間差tの関数と見たときに、はじめて 0.3 程度になる t）、ならびに次元 M は自己相関関数の包絡線が 0.3 程度になる t を T としたときに $M \fallingdotseq T/\tau$ と見積もるべきであると提案した。
iii.準周期軌道上バーコフ平均の計算は軌道長 N に対して素朴に計算した場合の収束オーダーは 1/N である。これまでの先行研究で $1/N^{10}$ 程度の高速化が図られていた。今回の手法では準周期軌道の回転数がディオファンタイン条件を満たす場合には、理論的には 1/{N に関する任意の多項式} より早い収束が得られ、実際の計算においても 4 倍精度計算で $1/N^{20}$～$1/N^{30}$ 程度の収束オーダーが得られることが明らかとなった。また、ディオファンタイン条件を満たす場合でもその瀬戸際にあるときに、どの程度実用的な観点で計算高速化に影響があるかについても明らかにした。この手法の応用として複素力学系のジーゲル板やジーゲル球の特徴づけを行ったり（論文出版済）、低次元に射影された準周期軌道の回転数を求めるために時間遅れ埋め込みを用いる手法を提案した（論文出版済）。また、ある 2 次元 skew-product 型力学系の間欠性の発生にサドル-リペラー分岐による周期点の消滅にともな

って準周期軌道がパラメタ空間で大量に生まれることを準周期軌道上のバーコフ平均の高速計算に基づいて明らかにした。
iv.購買力平価説に基づいて調整をおこなった複数為替時系列間（米ドル、日本円、ユーロ）にみられる同期レベルの時間的変化を明らかにするために、数年タイムスケールのバンドパスフィルターをかけた時系列に対してヒルベルト変換を適用して複素化し、各時刻の位相を同定して時々刻々の同期指標を計算した。米ドル－日本円や米ドル－ユーロ間の同期レベルの変動を抜き出し、時々刻々どの通貨が先行、遅行しているかについての情報を得ることにも成功した。また、都道府県別鉱工業生産指数（月次）に対して時系列間の同期レベルの変遷を為替時系列と同様の手法で計測し、政府の公表する景気指数と突き合わせることによって景気上昇局面においては同期レベルが比較的低く、景気下降局面においては同期レベルが比較的高いという知見を得た。

３．今後の展開

経済政策、金融政策を決定する際に、同期・非同期状態の遷移ならびにその背後にある力学系的構造を意識することにより、現在より政策の有効性を高めることができるようになると思われる。5-10 年のスパンでそれが実現されるように進めていきたい。そのためには、現在より踏み込んだ形の同期・非同期状態間遷移の理解ならびにそれに基づく制御方法の提案が必要になる。財務省、IMF、世界銀行などの実務家とパイプが出来たので、ある程度理論的に道筋が出来た段階で実行可能性を探るために実務家とも議論を深めていきたい。

４．自己評価

・研究目的の達成状況

研究開始時に想定していた研究目標（流体や経済などを同期・非同期状態間遷移の観点でみるために必要な知見）が概ね達成できた。非公開の研究成果に記載した内容に関する執筆中の論文が発表出来ると当初の研究目的がほぼ完全に達成できたことになる。また、さきがけ研究を通して得た知見により、当初計画していなかったリザーバーコンピューティングによる流体研究もおこなうことが出来た。

研究の進め方（研究実施体制及び研究費執行状況）：

i.　ヘテロカオスの研究

・数値的研究：

[研究実施体制]James A. Yorke 教授（メリーランド大学）、Miguel A. F. Sanjuan 教授（Rey Juan Carlos 大学）、小林幹准教授（立正大学）

[研究費執行状況]メリーランド大学出張滞在旅費

・理論的研究：

[研究実施体制]James A. Yorke 教授（メリーランド大学）、高橋博樹准教授（慶應義塾大学）

[研究費執行状況]メリーランド大学出張滞在旅費

ii.　流体乱流のリザーバーコンピューティング

[研究実施体制]中井拳吾氏（東京大学数理科学研究科博士課程）
[研究費執行状況]京都大学大型計算機借用料、講演出張旅費、計算機サーバー購入

iii.　準周期軌道とヘテロカオスにおけるその役割
[研究実施体制] James A. Yorke 教授（メリーランド大学）、Evelyn Sander 教授(George Mason 大学)、Suddhasattwa Das 博士(Courant 研究所)
[研究費執行状況]メリーランド大学出張滞在旅費

iv.　複数経済時系列間の同期解析
[研究実施体制]　武藤誠氏（一橋大学経営管理研究科博士課程）（さきがけ RA）
[研究費執行状況]　研究補助者への謝金(武藤氏)、計算機サーバー購入

研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果（今後の見込みを含む）
流体力学や経済・金融などの複雑現象の理解、制御等に本研究で得た方向性の知見が今後 10 年程度スパンで活用しうると期待している。

5.　主な研究成果リスト
（1）論文（原著論文）発表

1.K. Nakai and Y. Saiki, Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable using the delay-coordinate of a scalar observable, Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S, Online first, 2020.
2.S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke, Solving the Babylonian Problem of quasiperiodic rotation rates, Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S 12 (8), 2279-2305, 2019.
3. Y. Saiki, M. F. Sanjuán and J. A. Yorke, Low-dimensional paradigms for high-dimensional hetero-chaos, Chaos 28, 103110:1-7, 2018
4. K. Nakai and Y. Saiki, Machine-learning inference of fluid variables from data using reservoir computing, Physical Review E 98 (2), 023111:1-6, 2018
5. S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke, Quantitative Quasiperiodicity, Nonlinearity 30 (11), 4111-4140, 2017

（2）特許出願
研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）
（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

1. Machine-learning prediction of fluid variables from data using reservoir computations, Math colloquium, Howard University, 2018 年 4 月 6 日
2. Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable using the delay-coordinate of a scalar observable, Applied and Computational Math Seminar, George Mason University, 2019 年 2 月 1 日
3. 機械学習に基づいた流体マクロ変数に関する数理モデル構築ならびに時間発展予測，理論応用力学講演会, AIMaP　数学応用セッション　OS08（流体力学の新手法と流れの深層：

計算科学・機械学習・力学系・トポロジー), 北海道大学, 2019 年 6 月 30 日

4. 流体マクロ変数に関する数理モデルの機械学習に基づく構築, Prometech Simulation Conference, ベルサール東京日本橋, 2019 年 12 月 6 日
5. ヘテロカオス, MIMS 現象数理学拠点 2019 年度共同研究集会「Advancing Interaction among mathematical concepts and methods towards practical problems 2019」,明治大学, 2019 年 12 月 7 日

研　究　報　告　書

「一般化スペクトル理論に基づいたネットワーク上の大自由度力学系の同期現象の解明」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 千葉　逸人

1．　研究のねらい

電力ネットワークや，多数の素子のなす回路，脳神経細胞のつながりを表すネットワークなど，大規模・大自由度のネットワーク構造は身の回りに溢れている．また，脳神経細胞ネットワークや心筋細胞において起こる同期現象のように，大規模なネットワーク構造が創り出すダイナミクスが生命体の活動において本質的である現象も多い．例えば脳神経細胞ネットワークにおいては，個々の細胞の発火リズムが同期することで観測可能な脳波が生じ，我々の生活のリズムと直接関係すると考えられるが，脳神経細胞のネットワーク構造はいまだ解明されていない．

近年，実験技術の進歩によりそのような複雑な系に対して詳細なデータが取れるようになってきたことで，数学を用いたアプローチが可能になりつつある．そのため，大規模ネットワーク上の力学系の研究とその応用，特に同期現象の研究は今後ますます重要になるであろう．

本研究の目標は，大規模ネットワーク上の力学系のダイナミクスの研究である．特に同期現象を解明するための新しい数学理論の構築，およびその様々な社会的問題への応用である．応用上も数学の観点からも重要かつ挑戦的な問題は，「与えられたネットワーク構造がダイナミクスに与える影響を理解する」ことである．このような問題は非常に豊かな数学的構造を内包していると考えられ，問題の背後に潜むその本質を見出すことは応用上も純粋数学そのものの発展にも大きく寄与するだろう．

本研究者の先行研究により，自身が構築した数学理論である一般化スペクトル理論が大規模力学系の同期現象の研究に有効であることが分かっている．一般化スペクトルとは固有値の一般化概念であり，固有値だけでは解明できない大自由度・無限自由度の問題を扱うのに適している．そこで，一般化スペクトル理論を軸とした同期現象の新しい解析手法の開発，およびその様々な社会的問題への応用を遂行することが本研究のねらいである．

2．　研究成果

（1）概要

本研究の成果の概要を理論と応用の2つに分けて説明する．

（a）理論的な成果

本研究の目的の1つは，ネットワーク上の大規模力学系のダイナミクスの解析手法を構築することである．そのために，同期現象の数理モデルとしてよく用いられる蔵本モデルをネットワーク上に一般化した次のモデルを提案した．

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N}\sum_{j=1}^{N} a_{ij}\sin(\theta_j - \theta_i).$$

ここで θ_i は円周上を運動する振動子の位相，ω_i は自然振動数，N は考えている振動子の数，K は結合強度，a_{ij} は i 番目の振動子と j 番目の振動子が相互作用していれば値 1 をとり，そうでなければ 0 とする．すなわち a_{ij} はネットワーク構造を決めており，隣接行列と呼ばれる．本研究の成果として，ネットワーク構造と蔵本モデルのダイナミクスの関係を数学的に明らかにし，さらに一般化スペクトル理論を用いることで，上記モデルの結合強度 K がある値を超えると同期現象が起こることを証明した．詳細は次項，あるいは研究成果リスト（以下の項目５）の論文 2, 3, 4 を参照のこと．

（b） 応用上の成果

項目(a)で得られた理論をランダムグラフ，スモールワールド，スケールフリーなど自然界によく観られる様々なネットワーク上の蔵本モデルに適用し，同期現象の起こりやすさや同期のタイプの違いを調べた（論文 4）．

さらに脳神経細胞の同期発火のモデルに同理論を適用することで，ネットワークの複雑さと同期発火の起きやすさの関係を明らかにした．この研究により，ネットワークが複雑すぎると情報が混線して安定した脳波が生じ得ないことが初めて数学的に明らかにされた．同様の理論を電力ネットワークの数理モデルに適用し，電線で繋がれた発電所間の電流の位相が同期するための公式を導出した．

２）詳細

（a） 理論的な成果

結合強度 K を大きくしていくとある値で相転移が起きて同期が起こることを示すのが目的である．本研究においては振動子の数が十分大きいときの極限に興味があるため，まず上記の蔵本モデルの連続極限（流体力学極限）を導出した．これにより，隣接行列 a_{ij}はグラフ関数と呼ばれるある2変数関数 $W(x,y)$ に収束する．この $W(x,y)$ を積分核に持つフレドホルムの積分作用素の最大固有値を μ とするとき，相転移が起こる結合強度は次の公式

$$K = \frac{1}{\mu}\frac{2}{\pi g(0)}$$

で与えられることを証明した．ここで関数 g は自然振動数 ω_i の分布関数である．この公式を通して，ネットワーク構造を規定する積分作用素の最大固有値 μ が同期の起きやすさに直接関係することが明らかになった．さらに一般化スペクトル理論を用いて K がこの値を超えると生じる同期解の形状を求めた．その結果，最大固有値 μ の固有関数が同期解の形状にかかわることが分かった．ネットワーク構造の連続極限として得られるフレドホルムの積分作用素の固有値・固有関数が同期が起こる相転移点と同期解

の形状を決定する，という意味において，当初の目標であった「与えられたネットワーク構造がダイナミクスに与える影響を理解すること」は十分に達成された．

(b) 応用上の成果

論文4では，上記で得られた相転移点の公式をランダムグラフ，スモールワールド，スケールフリーに適用した．ネットワークの辺の数は順に少なくなっていくが，驚くべきことにスケールフリーの場合がもっとも μ が大きく，すなわち小さい K でも同期が起きることが明らかになった．スケールフリーとは，多数の辺とつながりがある頂点（ハブ）が少しだけあり，その他の大多数の頂点はあまり他とつながっていないという特徴を持つ．空港間のネットワークや SNS での人のつながりなど，多くの例が知られており，今回の結果の社会問題への応用が期待される．

また，一般化スペクトル理論を用いた解析手法を，脳神経細胞のネットワークの同期発火の問題に適用した．方程式は蔵本モデルよりもずっと複雑なので省略するが，脳神経細胞たちがシナプスによりあるネットワークで繋がっており，1つの細胞が発火すると，それと繋がっている細胞に化学物質が送られその発火を促す，というモデルである．1000 個程度の神経細胞が同期発火すると脳波が観測されるが，今回は記憶や認知に関わるガンマ波をターゲットにしている．このモデルに対して我々の理論を適用したところ，以下のことが分かった．シナプスの数が少ないときは同期しないが，徐々に大きくしていくとあるところで相転移が起きてガンマ波が生じる．しかしさらに大きくしていくと再び相転移が起きてガンマ波は生じなくなる．つまり，ガンマ波はシナプスの数が適度でないと生じない．実際，乳児期に脳が急速に発達する過程でシナプスの数も急速に増えるが，成長と共に不要なものはなくなっていく“刈り込み”という現象が知られている．今回の結果はこのような現象を数学的に説明するための研究の先駆けとなりうる．この研究は東京大学の小谷潔氏との共同研究である．

別の応用例として，我々の理論を発電所間のつながりを表す電力ネットワークの数理モデルに適用し，電流の周波数が同期するための条件を求めた．ここでの数理モデルは次で与えられる，蔵本モデルの2階微分版である：

$$\frac{d^2\theta_i}{dt^2} + \gamma\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N}\sum_{j=1}^{N} a_{ij}\sin(\theta_j - \theta_i)$$

このモデルに対し，蔵本モデルと同様に同期がおこる相転移点 K を求めた．

以上のように，我々が構築したネットワーク上の力学系の同期を解析するための数学理論は多方面に応用可能であり，「様々な社会的な問題に応用する」という当初の目的はおおむね達成された．

3. 今後の展開

数学全般に言えることであるが，一般化スペクトル理論の特徴は普遍的かつ抽象的な理論であるから問題の対象を選ばず広範囲な応用が考えられ，波及効果が大きいことが利点である．今後も様々な問題に適用することで，この研究で得られた成果の社会への普及に努めたい．一方で，実用化まで視野にいれる場合はさらに突き詰めるべき問題もある．例えば項目2で述

べた脳神経細胞の同期の問題では細胞の数が 1000 個程度の局在化した領域しか対象としていなかった．脳の情報伝達・統合が大域的なレベルでどのようなメカニズムで起きているかは，理論的にも実験的にも極めて難しい問題である．今後は医学や生物系の研究者と連携し，このような問題に数学的な視点から貢献していきたい．

4. 自己評価

当初の研究計画は，前半において同期現象を解析するための数学理論の構築（項目２の(a)），後半はその様々な社会的問題への応用（項目２の(b)）であったが，どちらも十分に達成された．研究の進捗，実施体制，研究費執行についてもおおむね研究計画通りである．

社会的な問題に対して数学的な視点からアプローチするだけではなく，問題解決を通して数学自体の発展にも寄与できたという点においては，本領域の戦略目標に沿った研究ができた．また，今回の研究を通して異分野の研究者との共同研究が生まれ，数学そのものの普及や研究者間のつながりにも貢献できたと思う．

今回得られた数学理論はその抽象性・普遍性のため適用範囲が広く，今後の社会への波及効果は十分に大きい．実際の現象を予測・説明するためには実験データとの比較が必要であり，それは今後の課題ではあるが，脳科学のように人間での実験が容易にできない問題に対しては，今回得られたような数学的なアプローチがますます重要になってくると期待される．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. H. Chiba, A center manifold reduction of the Kuramoto-Daido model with a phase-lag, **SIAM j. on Appl. Dyn. Syst.** (2017) Vol.16, No.3, 1235-1259.
2. H.Chiba, G. S. Medvedev, The mean field analysis for the Kuramoto model on graphs I. The mean field equation and transition point formulas, **Discret. Contin. Dyn. S.-A**, (2019) 39(1), 131-155.
3. H.Chiba, G. S. Medvedev, The mean field analysis ofthe Kuramoto model on graphs II. Asymptotic stability of the incoherentstate, center manifold reduction, and bifurcations, **Discret. Contin. Dyn. S.-A**, (2019) 39 (7), 3897-3921.
4. H.Chiba, G. S. Medvedev, M. S. Muzuhara, Bifurcations in the Kuramoto model on graphs, **Chaos**, (2018) 28, 073109.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

1. 2017 年 10 月 14 日，中国応用数理学会年会，青島，中国にて招待講演．「The Kuramoto Model on Networks」
2. 2019 年 7 月 10 日，Equadiff 2019，ライデン，オランダにて招待講演．「Dynamics of Neuronal oscillations on a Random Graph」
3. 2019 年 9 月 17 日，The international conference Dynamics, Equations and Applications,

ポーランドにて招待講演.「Bifurcation of the Kuramoto Model on Networks」

4. 2019 年 12 月 7 日，台湾数学会年会，台湾にて招待講演.「A Bifurcation of the Kuramoto Model on Networks」

研　究　報　告　書

「特異点論の物質科学への応用」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 寺本　央

1．　研究のねらい

本研究における特異点とは滑らかな写像における特異点を指し、その写像の定義域にある点がその写像の特異点であるとは、その点における写像のヤコビ行列のランクが可能な最大なランクよりも真に小さい点のことである。特異点論は大学の学部 1 年生で習うであろう逆関数定理や陰関数定理の自然な延長上にあり、微分解析学の基本的な道具立てとなっている。特異点とはそのような基本的対象である故に様々な数学および物理的現象において通有的に現れる。また、特異点の応用の歴史は古く、コンピュータービジョンやロボティクスにも応用されてきているが、まだその通有性と比して、その応用範囲は限定的である。その一つの要因は、一般に設定が複雑になり、対象とする写像の定義域と値域の次元が増大するにつれ、その写像に現れる特異点を分類することは困難となる、ということであると考えられる。本研究のねらいの一つはその要因を1．特異点論の一般論を整備することで、より多様な設定の下での特異点の分類を可能とすること、2．その一般論の元、実用に耐えうる特異点の自動分類アルゴリズムの構築およびその実装をすること、を通じて、その要因を取り除き、より多様な設定へとその応用先を広げることである。具体的な応用先としては次の三つを選んだ。一つは、近年、計算機の発達により大域的なパレート集合およびフロントが計算可能となったことにより、それらの微分位相幾何学的性質を理解することの重要性が再認識されるようになった多目的最適化問題。二つ目は近年ノーベル物理学賞等で注目を集めているトポロジカル物質。三つめは近年の制御技術の発展により現実味を帯びてきた光反応制御である。多目的最適化問題においては、目的関数が滑らかであり、目的関数の数が関数の定義域の次元以下の場合にはパレート集合は目的関数を成分に持つ写像の特異点集合の部分集合となり、パレート集合の微分位相幾何学的性質を調べる問題は写像の特異点を調べるという問題の部分問題となる。残りの二つに関しては、特異点はそれぞれ物質のトポロジカルな性質が変わる瞬間および断熱エネルギー面の交差の構造が分岐する瞬間に出現する。それらの特異点の分岐を理解し、操作できれば、それらの現象を制御することも可能になるだろうと期待される。以上が本研究のもう一つのねらいである。

2．　研究成果

（1）概要

本研究における特異点とは滑らかな写像における特異点を指し、その写像の定義域にある点がその写像の特異点であるとは、その点における写像のヤコビ行列のランクが可能な最大なランクよりも真に小さい点のことである。この特異点の応用の歴史は古く、古くはコンピュータービジョンやロボティクスにも使われているが、本研究では特に以下の三つの対象への応用を目指した。また、それらの応用を機動的に進めるため特異点論の一般論の整備

（主な研究リスト(1) 2.)、特異点自動分類アルゴリズムの開発を行った。

一つ目は多目的最適化問題におけるパレート集合、パレートフロントの微分位相幾何学的構造の解明である。目的関数が滑らかであり、目的関数の数が関数の定義域の次元以下の場合にはパレート集合は目的関数を成分に持つ写像の特異点集合の部分集合となり、パレート集合の微分位相幾何学的性質を調べる問題は写像の特異点を調べるという問題の部分問題となる。ここではまず写像芽の間にパレート A 同値という概念を導入し、それにより写像芽を分類することにより局所的なパレート集合およびフロントの微分位相幾何学的分類を行った。次により限定的な場合に大域的なパレート集合とフロントの微分位相幾何学的構造を調べ、C^2 級、強凸写像で corank が高々1 の写像の場合にはパレート集合は目的関数の数より一つ次元が低い単体と微分同相なり、写像をパレート集合に制限したものは目的変数の空間への埋め込みとなることが分かった。

二つ目はバンド交差近傍のハミルトニアンの微分位相幾何学的分類である。結晶がそのトポロジカルな性質を変えるためには、バンドギャップが閉じる必要があり、その瞬間バンドが交差するわけであるが、ここではそのようなバンド交差の微分位相幾何学的分類を行うことにより、バンド交差の瞬間でどのような分岐が起きうるのかを、様々な対称性の下で分類した(主な研究リスト(1) 1.一部投稿準備中)。

三つめは断熱エネルギー面交差の微分位相幾何学的分類とそれを介した新規非断熱遷移機構の解明である。断熱エネルギー面交差は、励起状態にある分子が基底状態に失活するためのゲートウェイの役割を果たしており、その機構を理解し、交差の分岐とともにどのように失活のダイナミクスが変化するのかが解明できれば、その制御も可能になるかもしれない。ここではそのような断熱エネルギー面交差の微分位相幾何学的分類および分類のいくつかの交差に対しては、今まで知られてこなかった非断熱遷移機構が引き起こされることが解明された。

（2）詳細

研究テーマ A「多目的最適化問題におけるパレート集合、パレートフロントの微分位相幾何学的構造の解明」

n 個の状態変数に依存する p 個の滑らかな目的関数 $f_1, \cdots, f_p$ を最小化する多目的最適化問題を考える。p が 2 以上であれば、一般には目的関数をすべて最小にするような状態変数の値は存在せず、どれかの目的関数を最小化しようとすると、他の目的関数の値は増大してしまうというように個々の目的関数の最小化は互いにトレードオフの関係にある。パレート集合は状態変数の空間の部分集合であり、その集合上の点における一つの目的関数の値を下げようとすると他の少なくとも一つの目的関数は増大してしまう点全体の集合である。逆に、状態変数の値がパレート集合外にあれば、他の目的関数の値を増大させることなく少なくとも一つの目的関数の値を減らすように状態変数の値を変えることができ、その状態変数の値より良い値が存在する。したがって、状態変数の値を選ぶとするとパレート集合から選ぶのが最適といえる。パレート集合上のどの状態変数の値を選ぶべきかは状況に応じて変わりうるが、パレート集合全体の構造がわかっていない状況では、現在選択しうる可能な選択技にどのようなものがあるのか

わからないので、状況に応じて適切な状態変数の値を選ぶことは難しい。したがって、パレート集合全体の構造を理解することは重要である。近年においても多目的最適化は車のフレームの設計、飛行機の翼の設計等幅広く応用されており、例えば GECCO という進化計算関連の学会の RWA (Real World Application)等のセッション等でも多数の関連する発表がある。そのような応用の現場で求められていることは、まずどのような設計変数の組が許されるのかといったパレート集合およびパレートフロント全体の構造を把握することである。以上のような多目的最適化問題を解くためのアルゴリズムの開発も盛んにおこなわれているが、それらのアルゴリズムを正しく評価するためには、実問題の性質を正しく反映するようなベンチマークが必要であるが、既存のベンチマークに対しては、人工的であり実問題の性質をあまり反映していないのではないかという批判もあり(Martinez ら、IEEE Trans. Evol. Comp. 23, 130, 2019)、実問題に現れる多様な性質を反映するようなバラエティーに富んだベンチマーク問題を開発することが求められている。そのためにはまず実問題にあらわれる性質を定量的に特徴づける必要がある。近年のレビュー(Martinez ら、IEEE Trans. Evol. Comp. 23, 130, 2019)では 10 個のパレート集合の幾何構造、目的関数が状態変数にどのように依存するのか、といった 10 個の性質が挙げられているが、これらのより精密で定量的な特徴づけはなされておらず、また、他にも重要な特徴量が存在するかもしれない。本研究の目標の一つは状態変数の空間、目的変数の空間の座標の取り方によらない多目的最適化問題の内在的な性質とは何かをパレート A 同値という同値関係により、多目的最適化問題を分類し、その不変量により上記の特徴量を特徴づけることを目標とする。その目標の下、次の二つを行った。

(i) 写像芽のパレート A 同値による分類

(ii) C^2 級、強凸写像で corank が高々1 の写像のパレート集合、パレートフロントの微分位相幾何学的な型の同定

以下では各々の項目に対して詳細を書く。

(i) ある点における写像芽とは、その点の近傍において定義される二つの写像 f, g に次のような同値関係を入れたときの同値類のことである。これら二つ写像が同値であるとは、その点のある近傍が存在し、その近傍内で二つの写像が一致することをいう。この同値関係による同値類のことを以下では写像芽と呼ぶことにする。この写像芽の空間にさらに次のようなパレート A 同値と呼ぶ同値関係を導入する。二つの写像芽 f, g がパレート A 同値であるとは、状態変数の空間の適切な座標変換・ と値域の空間でパレート順序を保つ座標変換・ が存在し、

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^n & \xrightarrow{f} & \mathbb{R}^p \\ \phi \downarrow & & \psi \downarrow \\ \mathbb{R}^n & \xrightarrow{g} & \mathbb{R}^p \end{array}$$

が可換になることを指す。以上のような座標変換が存在するときには、写像芽 f が定める多目的最適化問題と写像芽 g が定める多目的最適化問題は状態変数の空間の座標変換と目的変数の空間の座標変換で互いに移りあうことができるので、それらの問題は

本質的には同じものだとみなせる。本研究では特に n が p よりも大きく、次元対(n, p)が Mather らによる結構領域 (nice region) (Mather ら J. Lecture Notes in Mathematics, 192:207 (1971).)における安定な写像芽に対して、その包括的な分類を行った。この結果は現在投稿準備中である。この分類の不変量が座標によらないパレート集合、パレートフロントの微分位相幾何学的構造を特徴づける特徴量となっていることが期待されるが、それらとレビュー(Martinez ら、IEEE Trans. Evol. Comp. 23, 130, 2019)にある 10 個の特徴量との関係を議論することは今後の課題として残っている。

なお、このパレート A 同値は近年我々が提案した A[・(G)]同値((主な研究リスト(1) 2.)の特殊な場合に相当しており、本結果を得るための基本的な道具立てとなっている。

(ii) 以上は写像芽に対する局所的な分類であるが、ここではより大域的なパレート集合とパレートフロントの微分位相幾何学的な構造を議論するため、より限定された C^2 級、強凸写像で corank が各点において高々1 の写像に対して、そのパレート集合とパレートフロントの微分位相幾何学的な性質を議論した。ここで強凸写像とは写像の各成分が強凸関数であるものを指し、写像のある点における corank とは、その点における写像のヤコビ行列のランクがその可能な最大のランクからいくつ減っているかという量である。以上の設定の下、パレート集合は($p-1$)単体と微分同相であり、写像をパレート集合に制限したものは、パレートフロントへの埋め込みとなっている、という事を示した。さらに目的関数 $f_1, \cdots, f_p$ の内いくつかを取り除いたものをその問題の部分問題と呼ぶが、その p' 個の目的関数が定める部分問題のパレート集合は($p'-1$)単体と微分同相になることも分かった。これはある一般的なクラスの写像に対して、パレート集合およびパレートフロントの微分位相幾何学的な構造を厳密に決定した初めての研究である。この結果を使うと、(ii)のクラスの写像に対しては、パレート集合およびフロントを少ない数の目的関数で定義される部分問題のそれらから出発し、全体のパレート集合およびフロントを計算する階層的アルゴリズムを用いることができる(主な研究リスト(1) 5.)。

研究テーマ B「バンド交差近傍のハミルトニアンの微分位相幾何学的分類、バンドエンジニアリングに向けて」

バンドエンジニアリングとは固体の複数のバンドを衝突させることにより、そのバンド構造を変化させ、それにより物性の制御を目指すものであり、Dirac-cone engineeringを含むより一般的な枠組みを指す。近年、ナノテクノロジーおよび観測技術の進歩により、バンド構造を物性パラメータを変化させることで制御したり、バンド構造を直接観測したりすることが可能となってきた。そのバンドエンジニアリングを実現するためには、与えられた結晶の対称性および時間反転対称性の下、二つのバンドを衝突させることでバンドにどのような幾何学的変化が生じ、それによりどのように物性が変わるのかを理解することが重要である。本研究ではまず時間反転対称性又は空間反転対称性が破れた状況で、二つのバンドが衝突する瞬間にバンドにどのような幾何学的な変化が生じうるのかの包括的なリストを作成した[JMP 58, 073502 (2017)]。以上のような時間反転対称性又は空間反転対称性が破れた場合には、クラマース縮重が解けワイル点と呼ばれるバンド交差が生じうる。ワイル点は近年二つの実験グループにより相次いでその存在が実験的にも証明されている。本研究ではそのよ

うなワイル点を含むより一般のバンド交差の包括的なリストを得た。それらは二つのバンドが衝突し、まさにバンドの幾何学的構造が変わろうとする分岐において現れる。そのような交差を持つハミルトニアンの普遍開折を調べることにより、その分岐点においてハミルトニアンを摂動すると衝突したバンドにどのような幾何学的変化が生じるのかを調べることができる。この結果は(Teramotoら、J. Math. Phys., 2016, 58, 073502)で報告したが、一部の分類結果に不備があることが分かったので、同紙のErratumおよび(主な研究リスト(1) 3.)にて、その不備を正した結果を報告した。

以上は、対称性のない場合であるが、時間反転対称性、点群の対称性等の様々な対称性を取り入れることもバンド交差の幾何構造とその分岐、不変量等を正しく理解するために重要である。そのような分類を可能とするため、泉屋らのK[r(G)]同値の理論を同変な場合に拡張し、その同値関係での分類を機動的に進めるため、その同値関係の下での自動分類アルゴリズムを構築し、Singularで実装した。実装の一部には田島らの代数的局所コホモロジーの理論(TajimaらAdvanced Studies in Pure Mathematics,56:341, 2009.)をパラメータ付に拡張したもの(NabeshimaらJ. Symb. Comp., 82:91, 2017.)のモジュール版を新たにSingularで実装し用いている。この結果は現在投稿準備中である。

ここまでは、局所的なバンド交差の幾何構造の分類であるが、そのバンド交差による局所的な分岐が大域的なトポロジーの変化をどのように引き起こすのかは、本研究期間内には解明できなかった。現在、五味清紀教授（東京工業大学）と共同研究中である。

研究テーマ C「断熱エネルギー面交差の微分位相幾何学的分類とそれを介した新規非断熱遷移機構の解明」

断熱エネルギー面交差は量子化学における非断熱遷移ダイナミクスを解析する上で重要な構造であることが知られているが、その非断熱遷移ダイナミクスの WKB 解析等が完成しているのは、交差が(Hagedorn,ら Molecular Propagation through Electron Energy Level Crossings, Mem. Amer. Math. Soc. 111, 1994.)の意味で非退化である場合のみであり、退化した状況でのダイナミクスの解析は 1 次元の場合を除き未踏の課題である。一般的な状況では非退化であることが期待されるが、次のような場合には退化した状況を考えることが本質的となる。一つは分子が対称性を持っている場合である。また、分子に近接場等を加えてコントロールする際には、一般的な非退化な状況だけではなく、その非退化な交差が外場のパラメーターに依存してどのように分岐していくのかという分岐を議論することも重要となる。

以上の動機から退化した状況を含めた断熱エネルギー面交差近傍でのハミルトニアンの微分位相幾何学的な分類を特異点論を用いて行い、Hagedorn による交差に係る準位の既約複表現により得られる 11type の交差の内、特に重要な Type B, I, J, K の 4 つの交差の微分位相幾何学的な分類を得た。また、その分類のいくつかに対して、その交差近傍でどのような非断熱遷移ダイナミクスが引き起こされるのかを数学漸近解析を用いて明らかにした。この結果は現在投稿準備中である。この結果をもとに量子化学の専門家と実際の分子で PoC を行う予定であったが、数学漸近解析の部分が考えていたよりも難しく、その部分は研究期間中に遂行することはできなかった。

3.　今後の展開

1．を踏まえ、以下が今後の展開である。

研究テーマ A:いくつか公開されている多目的最適化問題に対して、本研究で同定されたパレート A 同値の型および不変量を計算し、実問題においてどのような特異点が出現し、その不変量がどのような値をとっているのかを包括的に調べる。以上で、現在報告されている実問題の特質をつかむことができると期待される。その結果を用い、実問題で同定された特異点および不変量をもつベンチマーク問題を設計することを検討している。

研究テーマ B:1．で挙げた局所的なバンド交差の分岐がどのように大域的なトポロジーの変化を生み出すのかを解明することは今後の課題である。それ以外には、実在の結晶において、どのようなバンド交差があり、その結晶の物性パラメータを変化させることでどのようなバンド交差の分岐が引き起こされるのかを調べ、実在の結晶のトポロジー制御につなげたいと考えている。そのために、本研究で開発したバンド交差の微分位相幾何学的な型の自動分類アルゴリズムと結晶のバンドの第一原理計算ソフト VASP を結合させることで、バンド計算の結果から分岐を予測するためのソフトウェアの開発を検討しており、現在、量子化学の専門家である武次徹也教授（北海道大学）らと共同研究をしている。

研究テーマ C:結果をもとに量子化学の専門家と実際の分子で PoC(Proof of Concept)を行い、本研究で得られた新規非断熱遷移機構が実際の分子の光反応にどのように現れるのかを調べる。それが光励起された分子の失活制御等に利用できそうであれば、この機構に基づいた制御プロトコルの提案およびその実験的検証を行いたいと考えている。

4.　自己評価

研究自体は当初の研究計画に沿って進めることができたが、一年目は日立製作所基礎研究センタに勤務しており、本務の傍ら研究を遂行することとなり、あまり思うように研究を進めることができなかった。また、特異点の自動分類アルゴリズムの開発、および非断熱遷移ダイナミクスを解明するための数学的漸近解析が当初想像していたよりはるかに難しく、それらの固体物理、量子化学、多目的最適化問題への応用およびその社会実装に関しては十分にできたとは言い難い状況となってしまった。多目的最適化のベンチマーク問題の開発は進化計算学会でも取り上げられている課題であり、それが整備されればよりよい多目的最適化アルゴリズムの開発につながると期待される。多目的最適化は車のフレーム設計から飛行機の翼の設計等、幅広く社会で使われている現状を考えると、その波及効果は小さくないと期待される。また、結晶のトポロジカルな物性制御、分子の光化学反応制御の社会実装に関しては、正直未知数であるが、それらの有用性を示せれば、社会実装へとつながる可能性はゼロではないと考えている。

また、本研究で開発した特異点の自動分類アルゴリズムは数学サイドからも歓迎されている。特異点論の研究においては、まず特異点の分類をし、その分類をもとにその対象の幾何構造を分析する、というのが常であり、分類自体に間違いがあれば、その対象の幾何構造を見誤ってしまう危険性がある。このような先行研究の検証することにより特異点論のソリッドな基盤を提供すること、および、これまでは手では決して計算できなかった高次元における特異点の様相を明らかにすること、が本研究の数学サイドに向けた貢献である。また、特異点の分類結果

は特異点論のみならず結び目理論等他の様々分野の基盤となっており、それらの基盤を検証することにもつながる。

5.　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Hiroshi Teramoto, Kenji Kondo, Shyūichi Izumiya, Mikito Toda, and Tamiki Komatsuzaki, Classification of Hamiltonians in neighborhoods of band crossings in terms of the theory of singularities, J. Math. Phys., 2017, 58, 073502
2. Shyuichi Izumiya, Masatomo Takahashi, and Hiroshi Teramoto, Geometric equivalence among smooth map germs, METHODS AND APPLICATIONS OF ANALYSIS, 2018, 25, 337
3. Hiroshi Teramoto, Asahi Tsuchida, Kenji Kondo, Shyuichi Izumiya, Mikito Toda and Tamiki Komatsuzaki, Application of Singularity Theory to Bifurcation of Band Structures in Crystals, J. Singularity, 21, 268 (2020)..
4. Hiroshi Teramoto and Katsusuke Nabeshima, Parametric Standard System for Mixed Module and its Application to Singularity Theory, ISSAC 2018 - Proceedings of the 2018 ACM International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation. Association for Computing Machinery, accepted for publication.
5. Naoki Hamada, Kenta Hayano, Shunsuke Ichiki, Yutaro Kabata, and Hiroshi Teramoto, Topology of Pareto sets of strongly convex problems, SIAM Opt. accepted for publication.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

1. Hiroshi Teramoto, Asahi Tsuchida, Yutaro Kabata, Kenji Kondo, Katsusuke Nabeshima, Shyūichi Izumiya, Mikito Toda and Tamiki Komatsuzaki, 結晶点群、時間反転対称性の下でのバンド構造の幾何学的分類特異点論の観点から、第 65 回トポロジーシンポジウム, 2018 年 8 月 20 日, 信州大学

2. 寺本　央、応用特異点論研究会、神戸大学理学部 B 棟 3 階, B301, B314-16 教室、2018 年 12 月 18-21 日にて

「包括的グレブナー基底系のレビュー、特異点分類への応用の観点から」

「包括的グレブナー基底系等を用いた特異点分類のアルゴリズムの紹介」

「特異点分類のアルゴリズムの応用紹介」

という三つの基調講演を行った。

3. Hiroshi Teramoto, A Fully Automated Algorithm for Classification in Singularity Theory, Special Session on Real and Complex Singularities, I Room 406, Kuykendall Hall, University of Hawaii at Manoa, Honolulu, 03/22/2019, 10:00 -

4. 寺本　央、「特異点論によるバンド交差の幾何構造の分類、不変量および分岐の解析」、離散幾何解析とその周辺 2019、CIC 東京 5F、2019 年 12 月 7 日（土）

5. 寺本　央、「計算機で挑戦する写像の特異点の分類とその応用」、数学セミナー（日本評論社）、

数理のクロスロード（2020年3月および4月号）

研　究　報　告　書

「構成要素の多様性が変化する系の数学理論構築と細菌群集の関わる疾患制御への応用」

研究タイプ：通常型
研究期間：　2016 年 12 月～2020 年 3 月
研　究　者：　中岡　慎治

1．　研究のねらい

構成要素の多様性が変化する系は、生命現象で多くみられる。皮膚・腸の常在細菌叢（叢＝集まりを表す)で多様性が減少すると、免疫系による異常な炎症状態が持続するアトピー性皮膚炎や、腸炎を発症することがある。細菌叢の多様性減少を dysbiosis と呼ぶ。一方、進化によって多様性が増加するヒト免疫不全ウイルス（HIV）は、薬剤耐性能を獲得するため根治できない。

次世代シーケンサーによる遺伝子計測技術の発展により、ある環境中に存在する微生物群集（マイクロビオーム）を同定できるようになった。その結果、炎症性疾患発症に dysbiosis と免疫応答の異常が寄与しているという報告が近年増加している。また、細菌叢の多様性減少に伴い、ある特定の種が優先して増加することもわかってきた。たとえばアトピー性皮膚炎患者の皮膚では黄色ブドウ球菌、腸炎患者の腸ではクロストリジウム属菌といった病原体の増加が認められるが、dysbiosis に至る過程と機構は未だ不明である。一方、HIV が変異を繰り返して多様性を獲得し、薬剤耐性能を得て慢性感染を持続させることはしられているが、多様性増加と感染持続の関連は不明である。

多様性の維持に関わる研究分野である群集生態学は、マクロな動植物の観察と仮説形成を中心に発展してきた。一方、データ駆動で近年著しく発展している微生物生態学の間には乖離が存在する。また、多様性の減少は動的な過程であるため、細菌群集の破綻は、ダイナミクスの観点から捉える必要がある。ダイナミクスを取り扱うことのできる数理モデル研究に期待は高まっているものの、微生物群集生態系の生来的な複雑性も相まって、現状では数理モデル研究が常在細菌叢の多様性減少と炎症性疾患発症の解明に十分貢献できているとは言い難い。理論や知識は豊富に存在するが再現性・定量性に乏しい観察研究と、データは取れるが解釈に難を要するデータ駆動型研究の双方をつなぐ新しい数理科学手法が必要とされている。

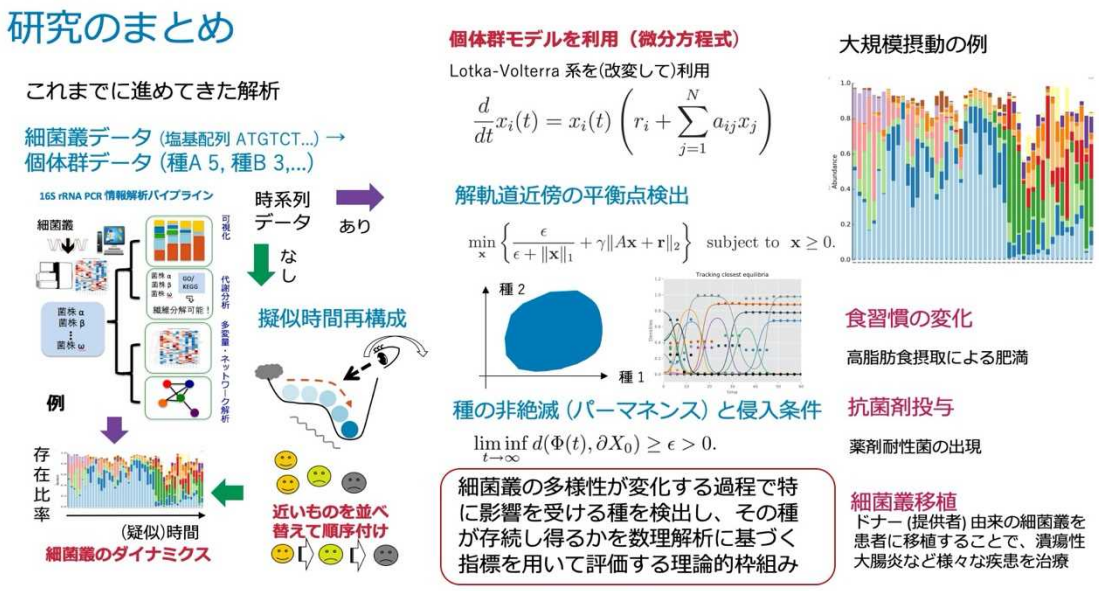
そこで本研究では、実証を念頭に置いた理論の構築と応用を進めるため、構成要素の多様性が変化する系に対する、汎用的かつ新しい数理研究を展開した。多様性増加・減少によって発症する疾患を仮説検証の対象として、数理実験融合研究を展開した。

2．　研究成果

（1）概要

本研究では、構成要素の多様性が変化する系の数学理論を構築し、その応用として、皮膚や腸に常在する細菌叢の変動と疾患発症の関連性を明らかにする目的をもって研究を進めている。細菌叢のデータは直接数理モデルで利用できる形式ではないため、前処理として情報解

析が必要である。はじめに数理モデルを構築するために必要な細菌叢データの取得と、情報解析パイプラインの構築を中心に進めた。続けて、整備した情報解析パイプラインを具体的に運用し、数理モデル構築に必要な時系列データの解析を進めた。また、細菌叢の個体群ダイナミクスを記述した数理モデル構築とシミュレーションを進めた。特に、存在する種数が最大となる平衡点を求める問題を最適化問題として定式化する方法の開発を進めることで、ある解軌道の近傍に存在する平衡点を検出することができるようになった。開発手法で検出した平衡点の性質を更に調べることで、たとえば存続できずに消滅してしまう細菌種の候補をデータから推定することが可能になる。一方、時系列の細菌叢データはあまり取得されていないが非時系列データは大量に蓄積している現状を踏まえて、非時系列データからも発症時に経る典型的な経路を推定する手法（擬似時間再構成法）の開発と応用を進めた。また、構成要素の多様性減少を予測して制御する手段の一つとして、生物種が絶滅しないことを保証する概念であるパーマネンス理論に着目し、種が絶滅しない条件を数学的に明らかにした。以上の解析を組み合わせることで、たとえば腸内環境で起き得る大規模な摂動（食習慣の変化、抗菌剤服用、細菌叢移植）後に細菌叢の多様性が変化する過程で特に影響を受ける種を検出し、その種が存続し得るかを数理解析に基づく指標を用いて評価する理論的枠組みが整った（理論的枠組を構成する各要素は以下の図に概要を示す）。



（2）詳細

以下の課題 A）から D）に着手した。

A）細菌叢データの取得、情報解析パイプライン構築と活用

【16S rRNA PCR アンプリコンデータの解析パイプライン構築と運用】皮膚や腸に常在する細菌叢のデータ（マイクロビオームデータ）の多くは、公共データベースから取得可能である。ただし、データは延期配列で得られるため、膨大な塩基配列データから細菌叢の種構成や存在量を表す OTU（Operational Taxonomy Unit）テーブル（サンプル 1 中に細菌 A が 50 個

体、B が 20 個体,…,サンプル 2 中に細菌 A が 20 個体,…といった行列形式のデータ）に変換が必要である。研究の手始めとして、OTU テーブルを得るための情報解析パイプラインを構築し、数理解析が実施可能なデータを得るためのシステムを開発した。続けて、研究補助者の補助のもと、構築済みの情報解析パイプラインを用いて様々な細菌叢の公共データを取得・解析した（成果として、たとえば [1]）。

【WSG メタゲノム情報解析パイプライン構築と運用】上述の 16S rRNA PCR アンプリコンデータは、いわば細菌種それぞれのネームタグを用いて種構成や存在数を算出する方法である。しかしながら近年、ネームタグ（16S rRNA 領域）以外の全塩基配列を解読する（Whole Shot Gun: WSG）メタゲノム解析が普及しつつあり、ネームタグ以外の情報（たとえば食物繊維を分解できる酵素をもっているか等、細菌種の機能情報）に関するデータが得られるようになっている。腸内細菌の複雑な相互作用に関する情報を取得して数理モデル構築に活用するため、WSG メタゲノム情報解析パイプラインの構築を行った。運用段階では、主にアレルギーとの関連が深い乳児期の細菌叢データを対象に多変量解析を実施し、たとえばアレルギー発症時に重要な役割を果たす因子（生物種もしくは代謝物）の候補選定を行った。

B）細菌叢の個体群ダイナミクスを記述した数理モデル構築とシミュレーション

細菌叢の多様性が減少する過程を表現した数理モデルを構築するため、N 次元の微分方程式系である一般化 Lotka-Volterra（LV）方程式系の解析に着手した。一般化 LV 方程式系に対して、定常状態を表す平衡点は、相互作用行列 A, 内的自然増加率のベクトル r に対して、線形方程式 $Ax=-r$（ただし $x\geqq 0$）を解くことで得られる。一般に、LV 方程式系の平衡点は高々 $2N$ 個存在するが、細菌叢は N が 10^2–10^3 のオーダーであるため、全ての平衡点を求めるのは非現実的である。適切な生物学的解釈を導出できるようにするためには、細菌叢の動態も反映した平衡点を最適化問題の解として求められるような手法の提案が必要という結論に至った。そこで、微分方程式の数値解法を援用した最適化問題（Numerical Integration Guided ConVeX optimization: NIG-CVX）を提案することで、細菌叢の動態も反映した平衡点を最適化問題の解として求められるようになった。本課題と並行して、数理解析と数値シミュレーションを活用することで、細菌叢個体群数理モデルの解の定性的性質を調べる研究にも着手した。腸内細菌叢のデータが逐次的にモニタリング可能な場合、どのような制御が可能化かを時間遅れをもつ微分方程式系にて定式化し、数理解析を行った [2]。その他、微生物間の生態系相互作用の影響を考慮した時間遅れをもつ微分方程式系も考察し、数理解析を行った [3]。

C）擬似時間再構成法の適用

皮膚や腸に常在する細菌叢の変動と疾患発症の関連性を明らかにするためには、細菌叢の状態が経時的に変化している状況を捉えた時系列データが必要である。しかしながら、現実的には時系列の細菌叢データはあまり取得されていない一方、非時系列データは大量に蓄積している。このような現状を踏まえた上で、膨大に蓄積している公共データの新たな活用方法を提案する必要性が生じた。そこで、一細胞レベルの計測データで活用されている手法から着想

を経て、現実的な問題の代替案となる打開策を検討することとした。具体的には、疾患状態や疾患進行中、もしくは健康な状態を反映した非時系列細菌叢サンプルを収集後、サンプルを類似性の近いものから順次並べることで、擬似的な疾患発症の時間発展を再構成する手法の検討と応用を進めた。TSCAN と呼ばれる擬似時間再構成法の１つを用いて、アレルギーとの関連が深い乳児期の細菌叢データを対象に解析を実施し、非時系列データ群からアレルギー発症時に想定される典型的な発症ルートの推定に活用した [4]。

D）生物種の存続条件に関する数学的条件の検討

腸内環境で起き得る大規模な摂動（食習慣の変化、抗菌剤服用、細菌叢移植）後に細菌叢の多様性が変化する過程で特に影響を受ける種を検出するためには、該当種が摂動後に存続し続けるかどうかを調べることで理論上確認可能である。そこで、生物種が絶滅しないことを保証する概念であるパーマネンス理論に着目し、ある細菌種の存続に関して生物学的に解釈可能な数学的条件の導出に取り組んだ。その結果、ある平衡点に対して定義される線形化微分方程式の固有ベクトルの符号が、ある生物種が存続可能かどうかを決める重要な指標になることがわかった。具体的には、少なくとも１種が絶滅しているアトラクター（低次元の不変集合）がリペラーである条件と一致し、これを細菌種が存続し得るかの定量的指標として活用できることが明らかになった [5]。

３．今後の展開

微生物群集を対象にした数理科学的手法の開発を進めてきた本研究は、数理科学に基づく新しい生命科学の研究として更に発展させていく。また、構築した理論研究の応用課題として、微生物が関わる医療、環境問題、農業分野と関連する基礎科学分野で役立つ理論フレームワークとして展開していく。具体的には、母子の健康に関わる腸内細菌を調べる取り組み（医療）、赤潮発生メカニズムの解明に向けた取り組み（環境問題）、受粉によって農業を支えるミツバチ個体数減少の原因を探る取り組み（農業）において、本研究で構築した理論フレームワークの活用を予定している。

４．自己評価

本研究では、細菌叢の多様性が変化する過程で特に影響を受ける種を検出し、その種が存続し得るかを数理解析に基づく指標を用いて評価する理論的枠組みの構築を進めてきた。理論評価系を構成する各々の構成要素については完成したため、研究目的は概ね達成できたと考えている(研究成果（2）詳細参照)。

研究の進め方については、途中メンバー変更があったが、いずれの従事者も着実にデータ解析を中心とした補助業務を進めてくれた。腸内細菌叢の公共データの収集と解析が進み、手間がかかる本研究に必要な資材を得ることができた。研究費執行状況については、大きな費目間流用もなく、計画通りに執行した。以上、研究の進め方については順当な運用ができたと考えている。

微生物群集を対象にした数理科学的手法の開発を進めてきた本研究成果は、数理科学を用いた新しい生命科学の研究という位置づけに加えて、[3. 今後の展開]で紹介したように、微生物が関わる医療、環境問題、農業分野と関連する基礎科学分野においても、社会・経済

面でも波及効果が見込まれる。将来的に社会実装や経済へ貢献する点においても、十分な下準備ができたと考えられる。

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Shinji Nakaoka, Detection of responding factors to external perturbation in a microbial community, *Proc. of International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, NOLTA2017*, 116-119.
2. Yueping Dong, Moitri Sen, Malay Banerjee, Yasuhiro Takeuchi and Shinji Nakaoka, Delayed feedback induced complex dynamics in an *Escherichia coli* and *Tetrahymena* system, *Nonlinear Dynamics*, **94**(2), 1447-1466 (2018)
3. Yueping Dong, Yasuhiro Takeuchi, Shinji Nakaoka, Multiple delayed feedback regulation system of the gut microbiota – antibiotics injection controlled by measured metagenomics data, *Nonlinear Analysis RWA.*, Volume 43, 1-17 (2018).
4. 原 朱音，中岡 慎治，合原 一幸 (2018). アレルギー発症に関わる腸内細菌叢のビッグデータ解析，生産研究 70 巻 3 号 p.141-144.
5. Shinji Nakaoka, Mathematical description for invasibility threshold and persistence of pathogenic bacterial species, *Proc. of International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, NOLTA2018*.

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

なし

（2）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

主要な学会発表（海外での招待講演）

○ Shinji Nakaoka, Mathematical and informatics analysis of community composition change of the gut microbiota, INTERNATIONAL WORKSHOP ON MATHEMATICAL BIOLOGY, Cebu, Philippine, 2018.

○ Shinji Nakaoka, Trajectory inference of disease onset from non-time series microbiome datasets, South Lake Workshop in Bioinformatics and System Biology, 武漢理工大学, 中国, 2018.

著作物

○ Shinji Nakaoka, Data-driven mathematical modeling of microbial community dynamics, Handbook of Statistics Vol.39 Part A, pp.93—130 (2018).

プレスリリース

○ ヒトＴ細胞白血病ウイルス１型（HTLV－1）の新しい感染維持機構を解明 －HTLV－1 による白血病の発症機序解明と発症予防への応用に期待－
http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2017/180123_1.html

○ コア共生微生物で持続可能な農業生態系を設計する －微生物叢の機能を最大化する

新たな科学的戦略を提案ー

http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2018/180501_2.html

研　究　報　告　書

「界面をもつポリマー流体の3次元挙動の数理解析」

研究タイプ：通常型
研究期間：　2016 年 10 月～2020 年 3 月
研　究　者：　野津　裕史

1．　研究のねらい

特に熱可塑性樹脂によるポリマー製品成形過程を考え、界面をもつポリマー流体の3次元挙動を明らかにしようとするものです。例えば、ポリマーの射出成型では、高温となったポリマー流体が金型に流し込まれ、ポリマーと空気の2つの流体の境界（界面）が形成されます。このような界面をもつポリマー流体を3次元において精度よく数値シミュレーションし、その挙動を数理的・数値的に理解することが本研究の目的です。

ポリマーは、現在しばしば用いられ、改良されている材料で、総じて密度が低く、軽いという利点があります。しかしながら、製品の（とくに量産）製造においては，成形過程を経ることから、その製品の物性値や形状等が期待通りになるかどうかは、やってみなければわからない、という部分が少なくありません。

しかしながら、その高精度な数値シミュレーションは容易とはいえません。本研究を推進することにより、数学的視点から高品質な数値シミュレーションを実現し、製造工程を効率化することが期待できます。具体的には、車のバンパーなどのポリマー製品を成形する際における金型内部のポリマー充填のシミュレーションを行い、製造工程のデザインや金型製造コストを削減することが期待できます。また、射出成形の実験をせずに、起こりうる現象の予測や改良の可能性をシミュレーションから示すことが可能になります。

2．　研究成果

（1）概要

本研究において、界面をもつポリマー流体のための高品質な数値シミュレーション手法を開発し、3次元において実装しました。以下に述べる成果は、いずれも数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装的な観点から高度にバランスが取られています。

有限要素法を基礎として、2流体問題の定式化を採用し、任意領域における界面をもつ数値シミュレーションを可能としました。3次元におけるアダプティブ・メッシュ・リファインメント手法を独自に実装し、界面付近において動的に空間的なメッシュ解像度を高めることに成功しました。また、時間2次精度を達成し、精度を高めることに成功しました。ここに、オイラー座標とラグランジュ座標を自在に操り、それぞれ、長所を生かし短所を克服しています。ペテリン粘弾性流体モデルについて数値解析を行い、最良誤差評価を得ました。それまで知られていなかった圧力に関する誤差評価を得ることに成功しました。一方で、拡張マックスウェル粘弾性モデルに関する変分構造を明らかにしました。これらを踏まえて、数値シミュレーションを実施し、定性的な研究を遂行しました。定量的な研究の準備が整い、今後の発展が期待できます。詳細および今後の展開を以下に述べます。

（2）詳細

研究テーマ A「高品質アダプティブ・メッシュ・リファインメント手法の開発」

３次元空間内における2次元の界面を精度よく捉えることを可能にします。有限要素法で用いる3次元空間内の非一様な四面体要素分割を行います。細分および粗くする要素の指定は自由であり、界面付近を細分するように、（界面から遠い要素を粗くすることで、）高精度に界面を捉えます。このアダプティブ・メッシュ・リファインメント手法は、固定メッシュによる数値計算に対して得られている既存の理論結果を維持します。四面体要素の最も長い辺を細分するため、扁平な要素は現れません。また、メッシュは各ステップでアップデートされるため、プログラムに組み込むことが容易になります。[主な学会発表-1]

研究テーマ B「質量保存型時間2次精度ラグランジュ・ガレルキン法の構築」

流れ問題において、ラグランジュ座標に基づく数値解法は強力であることはよく知られています。しかしながら、移流方程式や移流拡散方程式がもつ質量保存性と時間 2 次精度を同時に達成する数値解法はこれまで存在しませんでした。これを達成することに成功しました。その達成には、上流点を与える写像にシンプルなものを選び、その写像のヤコビアンを掛ければ良いというシンプルな結果です。移流方程式については、質量保存性と 2 次精度打ち切り誤差を示しました。移流拡散方程式の場合には、さらに、厳密解への収束性を示しました。このアイデアは、ナヴィエ・ストークス方程式および界面を表現するレベルセット関数についての移流方程式に利用可能です。[主な学会発表-1, 3]

研究テーマ C「拡張マックスウェル粘弾性モデルに関する変分構造の発見」 研究成果[2]

拡張マックスウェル粘弾性モデルに対して、粘性と弾性の2つの効果を明確に表す関係式である勾配流構造を発見しました。変位量を表す関数とダッシュポットのような粘性効果を表す関数の間の関係を表しています。勾配流構造から自然にエネルギー評価が得られ、安定性を示すことができます。この発見により、数値シミュレーション手法開発への重要な示唆を得ることができます。実際に、拡張マックスウェル粘弾性モデルに対して、安定な数値計算法を提案しました。[論文発表-1]、[主な学会発表-2, 4]

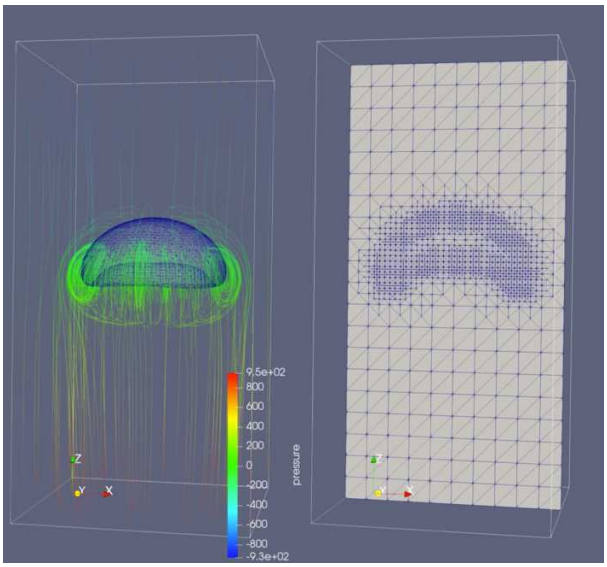
研究テーマ D「粘弾性流体の数値解析」

ペテリン粘弾性流体モデルのための安定化ラグランジュ・ガレルキンスキームを提案しました。移流項について線形化したオセーン型のモデルを考えて、その数値解析を行い、最良誤差評価を与えました。とくに、圧力の誤差評価は、それまで誰も成功していなかったため、重要な結果です。[論文発表-2]、[主な学会発表-5]

研究テーマ E「2流体問題の高品質数値シミュレーション手法の開発」

研究テーマ AB を融合させ、2流体問題の数値シミュレーション手法を開発しました。界面を符号付距離関数によるレベルセット関数により表現し、界面付近において、研究テーマ A によるアダプティブ・メッシュ・リファンメント手法を適用し、ナヴィエ・ストークス方程式の数値解法に研究テーマ B によるラグランジュ・ガレルキン法を用いています。なお、ラグランジュ・ガレル

キン法は、研究テーマ D により数学的信頼性があります。複雑な現象なため、まだ改良すべき点はあるものの、粘性2流体問題に対する高品質な数値シミュレーション手法の開発に成功しました。[主な学会発表-1]



3. 今後の展開

現在、開発した数値シミュレーション手法を基礎として、国際共同研究や企業等との共同研究への展開を進めています。具体的な製品のパラメータにおいて利用価値があること、および、複雑な系における未知の挙動を予想することを念頭において研究開発を続けます。具体的な予定として、様々な流体と接触角の関係への自然な展開を考えています。さらに、機械学習やデータサイエンスとの関わりが増えていくものと想定され、実際に、その方面の応用についても研究を進めています[その他の論文-3]。

本研究課題において、複雑な系の数値シミュレーション手法を数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装の観点からバランスよくデザインしたことは意義があります。開発した数値シミュレーション手法は、数学・数値解析理論を背景とした、シンプル・ローコスト・ハイクオリティーなものとなっています。実際、基本的なデザインにおいては、アイデアは精選されたシンプルかつ本質的なものを組み合わせており、高品質でありながらも個々の技術は難しいものではありません。また、スーパーコンピュータのような大規模並列計算機ではなく、市販の共有メモリ型計算機をターゲットにして開発し、さらに、プログラム開発が容易なように工夫しています。これらの知見を産学の研究者等と共有することで、誰でも無理なく高品質な数値シミュレーション手法を開発・利用でき、産学協働による研究推進と発展・展開が期待できます。

4. 自己評価

[研究目的の達成状況]

複雑な現象である界面をもつ粘弾性流体のための3次元数値シミュレーション手法を構築し

ました。定量的な検討は今後の課題ではありますが、当初実現したいと考えていた理論構築と数値シミュレーションの技術をほぼ全て妥協なく実現したことは重要な成果であり評価できます。（なお、本研究で得られた結果の論文執筆は続きます。）

[研究の進め方（研究実施体制及び研究費執行状況）]

・研究体制について：　学内外のネットワークを構築しました。学内では、金沢大学数理科学連携研究拠点(MIRS)の数理モデル解析部門の部門長を務めて、本研究課題を中心として、同部門の研究推進を牽引しました。学外においてもリーダーシップを発揮して、複数の国際研究集会を主催（次の予算についてを参照）して国際ネットワークを構築しました。研究者（野津）あるいは MIRS を中心に良好な研究体制が構築されました。

・予算について：　本研究を進める上で重要な計算機に予算を割き、また、国内（東京）および海外（ロンドン）において、国際研究集会（シンポジウム）を主催しました。必要十分な研究費を適切に使用しました。

[研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果（今後の見込みを含む）]

今後の展開でも述べたように、複雑な系の数値シミュレーション手法を数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装の観点からバランスよくデザインしたことは意義があります。収束性などの数学・数値解析理論を背景とした、シンプル・ローコスト・ハイクオリティーな数値シミュレーション手法は、次第に普及していくことが予想されます。また、その使い易さから、機械学習やデータサイエンスなどとの融合研究を効率的に推進するための基本ツールとしても期待できます。このような高い信頼性と使い易さを高レベルに両立する数値シミュレーション手法を構築したことは大きな成果であり、今後の展開・発展が期待できます。

5.　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. M. Kimura, H. Notsu, Y. Tanaka and H. Yamamoto. The gradient flow structure of an extended Maxwell viscoelastic model and a structure-preserving finite element scheme. *Journal of Scientific Computing*, Vol.78(2019), pp.1111-1131. doi:10.1007/s10915-018-0799-2
2. M. Lukacova-Medvidova, H. Mizerova, H. Notsu and M. Tabata. Numerical analysis of the Oseen-type Peterlin viscoelastic model by the stabilized Lagrange-Galerkin method, Part II: A linear scheme. *ESAIM: M2AN*, Vol.51(2017), pp.1663-1689. doi:10.1051/m2an/2017032

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等

主要な学会発表

1. H. Notsu. A Lagrange-Galerkin scheme with adaptive mesh refinement for two-fluid flow problems. AFSI 2019: Advances in Computational Fluid-Structure Interaction and Flow Simulation, June 25, 2019, Okinawa, Japan.

2. H. Notsu. The gradient flow structure of an extended Maxwell viscoelastic model. MAFELAP 2019: The Mathematics of Finite Elements and Applications 2019, June 18, 2019, Brunel University, London.
3. H. Notsu. A mass-conservative Lagrange-Galerkin scheme of second-order in time with AMR for convection problems. CJK2018: The Seventh China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, August 21, 2018, Shiinoki Cultural Complex, Kanazawa.
4. H. Notsu. The gradient flow structure of the Maxwell viscoelastic model and a structure-preserving finite element scheme. KSIAM 2018 Spring Conference, May 25, 2018, KAIST, Korea.
5. H. Notsu. Numerical analysis of the Oseen-type Peterlin viscoelastic model. 2018 A3 Fluid Mechanics Workshop, March 10, 2018, Zhejiang University, Hangzhou, China.

著作物

1. 流体シミュレーションの数理(1). 数学セミナー, 2019 年 4 月号, pp.68-72.
2. 流体シミュレーションの数理(2). 数学セミナー, 2019 年 5 月号, pp.81-85.

その他の論文

1. I. Wijaya and H. Notsu. Stability estimates and a Lagrange-Galerkin scheme for a Navier-Stokes type model of flow in non-homogeneous porous media. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - S*. doi:10.3934/dcdss.2020234
2. M.M. Murshed, K. Futai, M. Kimura and H. Notsu. Theoretical and numerical studies for energy estimates of the shallow water equations with a transmission boundary condition. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - S*. doi:10.3934/dcdss.2020230
3. T. Taniguchi, N. Akashi, H. Notsu, M. Kimura, H. Tsukahara, K. Nakajima. Chaos in nanomagnet via feedback current. *Physical Review B*, Vol.100(2019), 174425. doi:10.1103/PhysRevB.100.174425
4. M. Kimura, K. Matsui, A. Muntean and H. Notsu. Analysis of a projection method for the Stokes problem using an ε-Stokes approach. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol.36(2019), pp.959-985. doi:10.1007/s13160-019-00373-3
5. O. Fuchiwaki, Y. Tanaka, H. Notsu and T. Hyakutake. Multi-axial non-contact in situ micromanipulation by steady streaming around two oscillating cylinders on holonomic miniature robots. *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol.22 (2018), 80. doi:10.1007/s10404-018-2098-5

研　究　報　告　書

「基礎医学と社会医学をつなぐ離散幾何学的モデリング」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 早水　桃子

1．　研究のねらい

対象物同士の距離（非類似度）が与えられ，近さや遠さの全体像をグラフ（ネットワーク）で記述するという問題設定は幅広い分野に現れるが，特に医学や生物学分野では頻出する重要なものである．典型的な例はゲノム配列の違いに基づく生物同士の距離から進化系統樹を構築するというもので，系統樹で実現できる距離（木距離）については理論から応用まで多くの既存研究があるが，系統樹以外のグラフと距離の関係性について数学的に解明されていることは少なく，木距離から系統樹を構築する Saitou & Nei (1987) の Neighbor-Joining 法のように普及している計算手法もない．

本研究では，多様な生物学的現象のモデル化やデータ解析を可能にする方法論の創出によって社会的にも重要な基礎医学の課題解決に貢献することを目指し，有限距離空間からグラフ構造を抽出するデータ解析全般を「離散幾何学的モデリング」という枠組みで捉え，その枠組みの構築に関わる概念や方法を数理科学・生命科学の協働を通じて整備する．具体的には，細胞の分化と病原体の進化という二つの現象に関するデータ解析上の諸問題を取り上げる．

- **課題 A　細胞分化の木モデルを構築するための基礎と応用**
  個々の細胞における多数の遺伝子の発現量を網羅的に測定するシングルセル技術は近年の生物学の技術革新の一つである．この技術がもたらす細胞の詳細なデータは新発見の宝庫と期待されているが，その解析方法に関しては多くの問題が残されている．本研究では，シングルセルの遺伝子発現データから最小全域木問題を解くアルゴリズムを活用して細胞分化の木構造を解明するデータ解析手法を確立させ，細胞生物学者のニーズを満たす実用的なソフトウェアを開発する．
- **課題 B　細菌やウイルスなどの進化をモデル化するための基礎**
  木距離から系統樹を構築する Saitou & Nei (1987) の Neighbor-Joining 法は距離から系統樹を構築するツールとして普及しているが，例えば微生物の進化は遺伝子の水平伝播などが原因で複雑なネットワーク構造になり得るので，従来の系統樹モデルでは記述しきれない．また系統樹で十分に記述可能な現象を考察する場合でも，ノイズを含む現実のデータを木構造で完璧に記述することは不可能で，複雑なネットワークを分析して情報を抽出する方法が必要となる．本研究では，系統樹の拡張版といえる新しい進化のモデルを提案するとともに，系統ネットワークの数理的性質を解明することで革新的な系統解析の方法論を創出する。

2．　研究成果

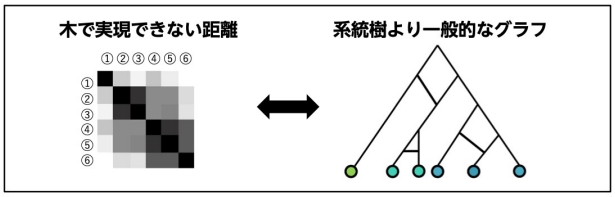
（1）概要

本研究では①色々なグラフと距離空間の関係性の解明，②新しいデータ解析を可能にする高速なアルゴリズムの設計，③実用的なデータ解析ソフトウェアの開発という幅広い成果を上げた．

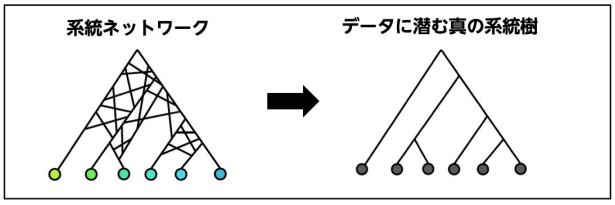
研究の概要

数理的な基礎研究から，諸分野との連携・融合により医学・生物学にインパクトを与える応用研究まで行う

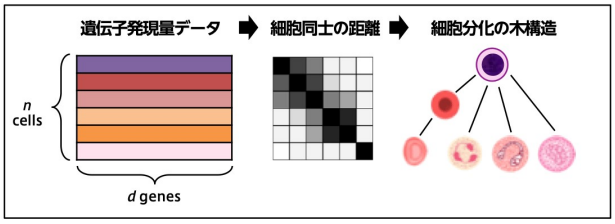
① 色々なグラフと距離空間の関係を調べる基礎研究



② 新しいデータ解析を可能にする高速なアルゴリズムの設計



③ 実用的なデータ解析ソフトウェアの開発，医学・生物学を含む諸分野との協働



課題 B は①と②に該当する．一つ目は系統樹の拡張版を創出するために木距離を一般化するという発想に基づくもので，系統樹／木距離の概念を一般化した系統カクタス／カクタス距離を提案し，カクタス距離が木距離と同様に多くの良い性質を持つことを示した（講演 5，論文 2）．またカクタス距離から系統カクタスを計算するための，Neighbor-Joining 法と同程度に効率的な方法も与えた（論文 2）．二つ目は理論系統学で話題の tree-based network（TBN）と全域系統樹に関するもので，全域系統樹の数え上げ・列挙・最適化といった一連の問題を定式化し，それらを統一的な視点で解く枠組みとなる TBN の構造定理を証明し，その系として各問題を解く線形時間／線形時間遅延アルゴリズムを与えた．これにより TBN に関する既知の結果をまとめて一般化し，全域系統樹の数え上げと列挙の計算量という複数の未解決問題を同時に解決し，さらに統計学的な応用も初めて開拓した（プレプリント 1，講演 2・3，受賞 1）．さらにランキング上位の全域系統樹を上から順に抽出する線形時間遅延アルゴリズムというより実用的な方法に発展させた（プレプリント 2）．

課題 A はどの側面もあるが特に③に該当する．近年の細胞生物学分野では，個々の細胞における大量の遺伝子の発現量を網羅的に計測したデータ（高スループットのシングルセル RNA-seq データ）を利活用して細胞分化などの全体像を推定するためのデータ解析技術の開発・確立が大きな課題になっており，細胞同士の遺伝子発現パターンの非類似度から細胞分化の全体像（木構造）を推定する問題に関しては離散数学の古典的な知見の一つである最小

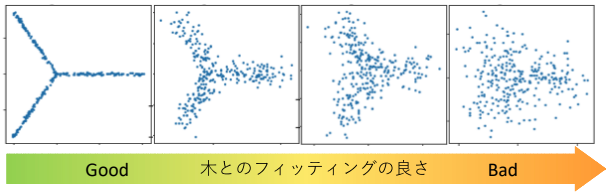
全域木（MST）を求めるアルゴリズムが経験則として定着し始めている．確かに高次元ユークリッド空間の点群データから距離行列を計算してMSTを求めればデータの可視化がしやすくなるので，MST を求めるアルゴリズムは便利なツールだが，それで意味のある木構造が得られるかはケースバイケースで，そもそもデータと木モデルのフィッティングの良さをはかる定量的尺度がないので，もとのデータの情報をどれほど良く反映した木構造が得られたのかを事後評価できないという大きな問題点がある．本研究では，データと木モデルが完璧にフィットするときはその木は MST に他ならないことを示した（論文 1）．また，データと木モデルのフィッティングの良さを定量的に評価する手法を提案し，“データの主成分”といえる木構造を抽出する方法も与え，シングルセルの遺伝子発現データから細胞分化の木構造を定量的に推定するデータ解析ソフトウェア Treefit を開発した（ソフトウェア 1）．

（2）詳細

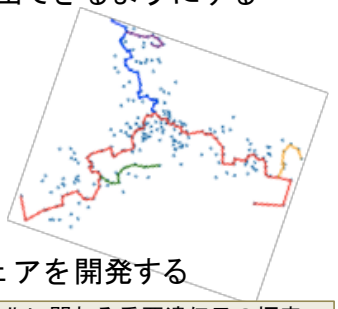
課題 A 「細胞分化の木モデルを構築するための基礎と応用」

研究を開始した当初は，木距離（tree metric）を特徴づける四点条件の類似物である「四点目条件」を活用することで「MST 距離空間（最小全域木で実現できる有限距離空間）」を厳密に特徴づけたり，「与えられた有限距離空間の MST-likeness」を定量化したりするアプローチを考えていた．この方向性による研究成果として論文 1 を発表したが，本さきがけ研究を進める中で細胞生物学，病理学，バイオインフォマティクス，コンピューターサイエンス，物理学，数学といった多様な専門分野の研究者や企業のエンジニアと協働したことにより，別のアプローチのほうが適切であると考えるようになった．具体的には MST-likeness の尺度はノイズに対して頑健であることが必要であると再認識したため，もとのデータに摂動を加えたときの最小全域木構造の安定性によってデータの MST-likeness を評価するという方針に至った．この方針転換によって，異なる木グラフ同士の非類似度をどのように定量化すれば良いかという新しい課題が生まれたが，木グラフのラプラシアンの固有ベクトルの集合同士の類似性をグラスマン距離を用いて評価するという方法で木グラフ同士の近さや遠さを定量的に評価できるようにするという解決策を与え，実際のデータ解析における有用性を実験的に示し，R および Python の両方でオープンソースのデータ解析ソフトウェア Treefit を開発して GitHub で公開した（ソフトウェア 1）．Treefit についてはホームページで生物学者向けの実践的なチュートリアルも公開し，また生物学分野の国際シンポジウムで招待講演を行うなど（講演 1），研究成果の普及促進にも努めた．

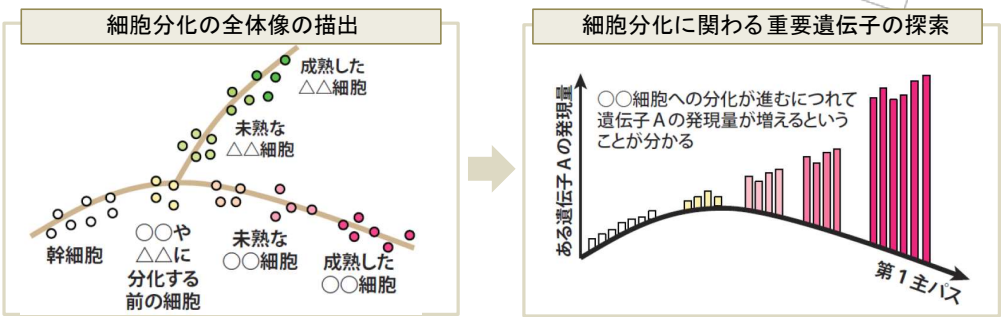
❶ 距離空間と木モデルのフィッティングを定量的に評価できるようにする



❷ 距離空間から主要な木構造を抽出できるようにする

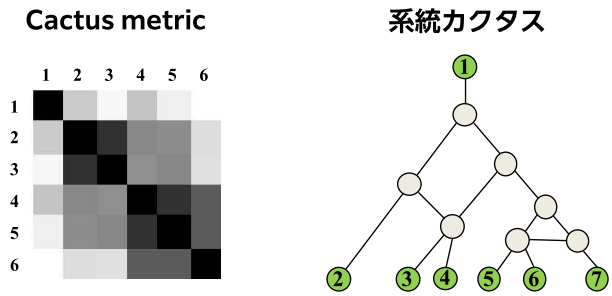


❸ 細胞の遺伝子発現データ解析に使えるソフトウェアを開発する



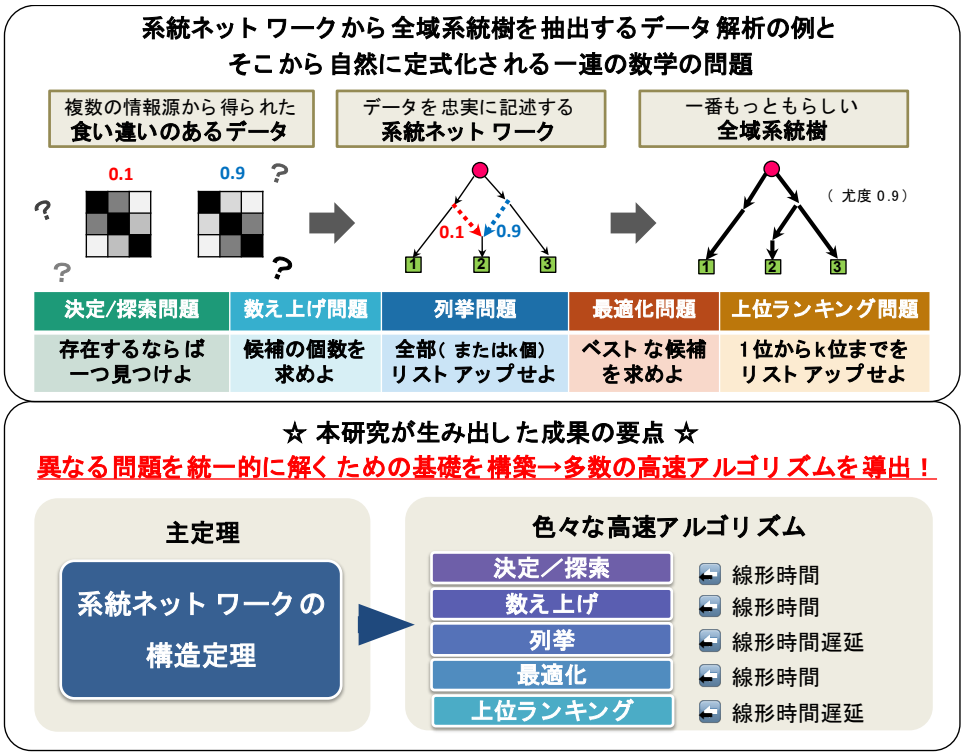
課題B「細菌やウイルスなどの進化をモデル化するための基礎」

進化は系統樹で記述されることが多いが，実際には植物の異種交雑や，微生物間の遺伝子の水平伝播といった現象があるため，全ての生物の進化を系統樹で記述することはできず，「系統樹の拡張版」といえる進化のモデルが必要とされている．本研究の1つ目の成果では，



木距離を拡張したカクタス距離（cactus metric）を提案して，カクタス距離を実現する最適な系統カクタスが一意に定まることや，カクタス距離から系統カクタスを計算する問題が，木距離から系統樹を計算する問題と同様に $O(n^3)$時間で解けることなどを示し（ただしnは距離空間の点の個数），木距離の良い性質の多くが系統カクタスに継承されていることを証明した．なお，どのようなときに距離の最適な実現は一意に定まるのかという一般的な問題についても考察し，部分的な場合の特徴づけを与えた（準備中論文1）．

もう一つの研究成果は，tree-based network という系統ネットワークに関するものである．現実的には系統樹モデルを使いたい場合も多数あるが，現実のデータにはノイズや不確実性がつきもので，単純な木構造では表現しきれないという難しさがある．系統ネットワークから真の系統樹を探る方法を創ることは進化生物学的に重要であるとともに，多様な理論的問題が自然に現れるため数学的にも興味深いテーマである．本研究では，全域系統樹にまつわる個々の問題の解き方を考えるのではなく，系統ネットワークの構造（どのような部分構造に一意的に分解されるのか）を解明し，様々な問題を統一的に解くための枠組みとなる構造定理を与え，その定理の系として多くの問題に対する高速なアルゴリズムを導出して，これまでにはできなかった様々な系統学的なデータ解析を可能にした．



3.　今後の展開

- 課題 A：実験研究者との連携をさらに強化し，本研究で開発したソフトウェアの応用を推進して生物学的に新しい知見の獲得を進めたい．最小全域木を活用したデータ解析の枠組みに関する理論的な考察を深めるとともに，将来的にはもっと複雑なグラフを用いたデータ解析ができるようにしたい．
- 課題 B：位相的データ解析（TDA）や統計学分野の研究者と融合して理論を深める．海外の系統学研究者コミュニティとも交流を続けるとともに，例えば感染症医学分野の研究者とも協力して，医学的な応用分野にも貢献したい．

4.　自己評価

全体を通して，「社会的課題の解決に向けた数学と諸分野の協働」という領域の趣旨に合致する当初の研究計画を完遂しただけでなく，さらにプラスアルファの良い成果も上げることができ

た．課題 A は数理科学の研究者・生命科学の研究者・統計科学の研究者・オープンソースソフトウェア開発者の良い協働事例になったと考えており，今後もこのような異分野・異業種連携の取り組みを続けたい．課題 B は当初の目標をクリアしただけでなく，当初の計画を上回る数学的成果（TBN の構造定理）を上げることができたと考えている．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Momoko Hayamizu and Kenji Fukumizu. On minimum spanning tree-like metric spaces. Discrete Applied Mathematics. 2017, 226, 51-57. DOI: 10.1016/j.dam.2017.04.001
2. Momoko Hayamizu, Katharina T. Huber, Vincent Moulton, Yukihiro Murakami. Recognizing and realizing cactus metrics. Information Processing Letters 2020, 157 (105916). DOI: 10.1016/j.ipl.2020.105916

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

【プレプリント】

1. Momoko Hayamizu. A structure theorem for tree-based phylogenetic networks. arXiv:1811.05849 [math.CO], 2018 年 11 月.
2. Momoko Hayamizu and Kazuhisa Makino, Ranking top-k trees in tree-based phylogenetic networks, arXiv:1904.12432 [math.CO], 2019 年 4 月.

【準備中論文】

1. Momoko Hayamizu and Andrew Francis: Optimal realisations of cubic graph metrics.

【講演】（※代表的な講演のみ）

1. （招待，国際）Momoko Hayamizu. How to reconstruct a cell differentiation trajectory using scRNA-seq snapshot data. The 1st International Symposium on Human InformatiX (X-Dimensional Human Informatics and Biology), ATR，京都, 2020 年 2 月 27-28 日
2. （招待，国際）Momoko Hayamizu, A structure theorem for tree-based phylogenetic networks and its algorithmic applications, Combinatorics Seminar, Institute of Mathematics, Academia Sinica（台湾）, 2019 年 4 月 19 日
3. Tree-based network の構造定理と系統樹推定に関する諸問題への応用，早水 桃子 日本応用数理学会 2019 年研究部会連合発表会 離散システム(1), 2019 年 3 月 4 日
   （▸下記の受賞情報を参照）
4. Universal tree-based network とその最小サイズについて 早水桃子（実講演者），鍛冶静雄 山口大学大学院創成科学研究科，藤重 悟 京都大学数理解析研究所 日本数学会 2017 年度秋季総合分科会, 2017 年 9 月 11 日
   （▸未解決問題ワークショップを通じた他のさきがけ研究者等との共同研究成果）
5. （国際） X-cactus trees and cactus tree metrics Momoko Hayamizu The 21st Annual New Zealand Phylogenomics Meeting (Waiheke 2017) - The Interface of Mathematics and

Biology　2017 年 2 月 14 日

【受賞】

1. 早水 桃子, 日本応用数理学会 2019 年研究部会連合発表会優秀講演賞,「Tree-based network の構造定理と系統樹推定に関する諸問題への応用」, 2019 年 6 月 28 日.

【ソフトウェア】

1. Momoko Hayamizu, Kouhei Sutou, Ryohei Suzuki, Hiromi Ishii. Treefit. 2020 年 2 月 7 日. https://hayamizu-lab.github.io/treefit/

【インタビュー取材】

1. 「数学の言葉で、世界を新たに描く」,『Someone』2018 年秋号, Vol.44 （研究者に会いに行こう！p.20-21）
   https://lne.st/download/40419/
2. 離散数学で解き明かす「細胞分化の木構造」,『統計数理研究所ニュース』No. 146, p.2-5,統数研プロジェクト紹介, 2019 年 11 月
   https://www.ism.ac.jp/gaiyo-news/News/No146.pdf

【寄稿】

1. 「進化の系統樹とデータ解析」,『数学セミナー』(リレー連載「数理のクロスロード」), 2020 年 1 月号・2 月号

研　究　報　告　書

「情報幾何学と離散力学の融合と社会ネットワーク解析への応用」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 谷口　隆晴

1．　研究のねらい

心理学や経済学，農学など，様々な研究分野で，人や金融機関，動物などの繋がりなどを表すためにネットワークが用いられるが，そのようなネットワークには，時間とともに変化するものも多く存在する．応用上は，それらの変化を自動的に検知する技術などが重要となるが，そのような技術を構築するためには，まず，時間変化するネットワークの数理モデルを構築する必要がある．

本研究の一つ目の狙いは，そのような時間発展型モデルとして，情報幾何学や解析力学を利用したモデルを構築することである．具体的には，まず，時間発展しない静的なデータに対する統計モデルの存在を仮定する．ここで，統計モデルの集合には，実は自然な Riemann 計量が定めることが知られており，その幾何学的性質は情報幾何学の分野で研究が進んでいる．そこで，情報幾何学の知見に基づき，静的な統計モデルを，幾何学的に自然な形で時間発展させることで，時間発展型モデルに拡張する．このとき，その時間発展モデルの構築に解析力学を利用する．解析力学はニュートンの運動方程式を，実用上，使いやすい形に拡張したものであるが，このとき，特に，物理法則が座標変換に対して不変性であるように理論が構築されており，理論は幾何学を中心に構成される．そのため，抽象的な多様体上で定義された，物理現象に限らない様々な現象に対して，運動方程式を定義することができる．従って，統計多様体上の統計モデルの変化を記述する運動方程式も定義可能であり，そのように定義された運動方程式に対しては，Noether の定理をはじめとする，力学の定理が成立する．ただし，力学理論は運動方程式を微分方程式として記述するが，実際に解析したいデータは，離散的な時刻におけるサンプルであることが多い．そのため，力学理論としては，時間方向に離散化された離散力学を用いる．本研究の二つ目の狙いは，時系列モデルとしての運動方程式の可能性を調べることである．ニュートンの運動方程式は，物理現象に対する基本的なモデルであるが，解析力学では，これに限らない，様々な微分方程式を運動方程式として導くことができる．そこで，運動方程式を時系列モデルとして利用した場合の可能性についても調査する．

また，これらに加え，実データからのモデリングを行う際には，パラメータ推定など，様々な技術が必要となる．そのような技術の開発も平行して行う．

2．　研究成果

（1）概要

本研究では，指数型分布族の定める統計多様体上で，尤度関数を利用して定めたラグランジアンから離散 Euler-Lagrange 方程式を導出することで，時間発展型の統計モデルを構築した．また，同様に統計多様体上の Riemann 幾何学的な構造を利用することでAR型のモデルも作成し，異常検知手法などを構築した．また，これらの手法の応用として，放牧牛に

取り付けたGPSデータから作成し，そのデータから構築したネットワークの解析に取り組み，ネットワークの異常を検知する手法を開発した．
次に，時系列モデルとして運動方程式を利用するというアプローチについて，運動方程式の時系列の近似能力についての研究も行った．このような問題意識は，ソフトロボット学の中でも morphological computation として着目されており，新たな制御手法への応用が期待されている．そこで，ソフトロボットのモデルの一つである質点バネ系の計算能力のシミュレーションによる評価や，微分代数を利用した，与えられた系の計算能力を評価する手法の構築に取り組んだ．質点バネ系の計算能力評価については，morphological computation の基礎理論となっているリザバーコンピューティングにおいて重要となる echo state 性の有無に類似したような評価結果が得られた．また，微分代数によるアプローチとしては，化学反応系を利用した計算では，離散化したモデルにおいて echo state 性が満たされないことが示された．
また，実データの解析手法として「交流のある人の人数」というアンケート結果から，交流の様子を推定し，ネットワークとして可視化する手法を考案した．ここで，アンケート結果に矛盾しないようなネットワークは無数に存在するが，自治体等で利用する際には，想定される状況のうち，好ましくない状況を推定することが望ましい．そのため，考案した手法は，期待されるネットワークのうち，交流の少ない，粗なネットワークを重点的に推定するように設計した．また，交流人数などのアンケート結果は，5 の倍数など，きりの良い数字に回答が偏るヒーピングと呼ばれる現象が存在する．これを補正する手法の開発も行った．

（2）詳細

【テーマA】統計多様体上の離散力学による時間発展型ネットワークに対する統計モデル
本研究では，まず，静的な統計モデルが与えられると仮定し，そのパラメータを時間的に変化させることで，時間発展型モデルを構築することを目指した．特に，統計モデルの集合は，モデルパラメータを局所座標系とする多様体と見なすことができることが知られている．この多様体には Riemann 幾何学的な構造が入り，自然な計量が定まる．また，この計量の他，Kullback-Leibler 距離のような，擬似的な距離も用いることができる．これらの量は，十分統計量への変換に関して不変であることが知られており，その結果として，最尤法などによるパラメータ推定結果の不変性などが保証される．
本研究では，まず，この Riemann 的な構造を用い，統計多様体上の AR モデルや，状態空間モデルなどを構築した．また，特に，ネットワークに対する静的なモデルとして，指数ランダムグラフモデルを基礎として，時間発展型ネットワークモデルを構築した（学会発表 2-4）．ただし，このモデルでは，計量の計算が必要になるのであるが，その計算量は膨大になってしまい，最も単純な Erdős-Rényi モデル以外では，計算が困難であった．
そこで，モデルの各時刻の尤度と，対象化した Kullback-Leibler 距離で測ったモデルパラメータの変化の大きさの和をラグランジアンとして，離散 Euler-Lagrange 方程式を導出し，モデルを構築した．このモデルは，観測結果に合わせて観測量を修正していくタイプのアルゴリズムを導出する．このアルゴリズムは，多くの場合，計算が非常に容易であり，一般の指数ランダムグラフモデルにも適用可能である．

これらに加え，離散力学を多様体上で展開するために，離散版の微分幾何に関する研究も進めた．特に，Discrete Exterior Calculus と呼ばれる離散版の微分形式について，その誤差評価を行った（論文 5）．

【テーマB】開発したネットワークモデルを活用した統計的手法の開発
本研究では，心理学や経済学，農学などに現れる時間発展型ネットワークの解析に動機づけられているが，その全ての応用先において，共通して重要であったのは異常検知手法の開発であった．そこで，本研究では，開発したネットワークモデルに基づき，異常検知手法を主に開発した．基本的には，過去のデータに適合するようにネットワークモデルを定め，それに基づき，ネットワークの異常を検知する．また，実問題への適用例として，Erdős–Rényi モデルの定める統計多様体上のARモデルを用いて，放牧牛の位置を取得した GPS データから構築したネットワークの異常検知を行った．

【テーマC】実問題への応用
本研究では，実問題として，老年心理学における社会実験から得られたネットワークデータやアンケートデータ，放牧牛の位置情報から構築したネットワークデータなどの解析を行った．
老年心理学に関する研究としては，高齢化地区における助け合いを促進するための健康教室の効果を検証する手法を構築した（論文 1，2）．この健康教室は日を変えて複数回行われ，被験者には，毎回，実際に教室を開始する少し前に集合してもらう．そして，集合時刻から教室が始まる前までの，自由な時間における会話の有無を観測し，それを元にして交流の様子をネットワークとして可視化した．本研究では，このネットワークが，健康教室を行うことで変化したかどうかを統計的に検定する手法を考案し，実際に，この健康教室によって，統計的に有意な変化が生じたことを示した．
次に，アンケートデータの解析についてであるが，このアンケートは，ある高齢化地区において，困ったときに助け合える人が何人くらいいるかなどの質問をしたものである．ただし，質問は人数だけであり，実際に誰と助け合うことができるかについては，質問していない．この研究では，この質問から，どのようなネットワークが構成されうるか，また，そのときの期待されるネットワーク構造はどのようなものであるかを推定することに取り組んだ．実際には，アンケート結果に矛盾しないネットワークは無数にあり，それらを網羅的に調べ，期待される構造を調査することは不可能である．従って，モンテカルロ法のようなサンプリングに基づく手法で構造を推定することになるが，モンテカルロ法を利用したとしても，ネットワーク構造の取り得るパターンは膨大であり，正確な期待値の計算は不可能であった．そこで，実務的には，交流の様子が予想より悪い場合に対策をすることが重要であることに着目し，「期待される構造」のうち，交流状況が悪い場合を重点的にサンプリングする手法を考案した．
　また，アンケートデータは，人数を回答するものであったが，このようなアンケートの回答は 5 の倍数など，きりの良い数字に偏りやすい．この現象はヒーピングと呼ばれる．ヒーピングしているデータは，本当の回答であるとは考えにくいため，データを補正してから解析する必要がある．しかし，正確な回答は，回答者自身も把握していない場合があるため，どのよ

うに補正すべきかは自明ではない．特に，複数の補正法が存在するときに，そのどちらが好ましい方法なのかを決めることも難しい．本研究では，これに対し，回答者の回答時の思考過程をランダムウォークでモデル化した統計モデルで表し，WAIC と呼ばれる情報量規準によってモデル選択することで，ヒーピングの影響を除去する手法を考案した．

【テーマD】古典力学的手法の応用

本研究では，離散力学という離散版の古典力学理論を用いて時系列モデルを構築し，力学理論を応用した解析手法の構築を目指していたが，そのためには，そもそも，古典力学は時系列モデルとして，どの程度，有効であるのかという問題を考える必要がある．これに非常に近い問題が，近年，ソフトロボット学の分野で morphological computation として注目されている．ソフトロボット学は柔らかい物質でできたロボットに関する学問である．柔らかい物質は複雑な動きをすることが多く，一般に，制御が難しいと言われている．これに対して，morphological computation は，柔らかい物質の複雑な動きを，制御を助けるための計算に利用しようとする研究である．具体的な計算の例としては，時系列予測などが行われており，運動そのものを時系列予測に利用しようとしているという意味で，本研究が目指す運動方程式による時系列モデルと非常に近いアプローチであると言える．

そこで，本研究では，質点バネ系などを用いた morphological computation の性能の評価などを行った．具体的には，質点バネ系の物理定数を変えることで，どの程度，予測性能が変化するかを評価した（論文 4）．また，その他の性能予測手法として，微分代数のグレブナー基底を利用することで，系の入力と出力の関係を抽出する手法を応用し，実際にどのような時系列が近似可能となるかを調べる手法も考案した（論文 5）．

【その他】

その他，実データを用いたモデリングの研究として，アレルギー物質を摂取した際のヒトの体内動態に関するモデルも構築した（論文 3）．また，このモデルは，モデルの複雑さに対してデータがあまり取得できないという特徴をもっていたため，モデルパラメータが一意には定まらない．そこで，力学理論を利用してパラメータを探索する手法（学会発表 1）や，微分代数を利用し，データに適合するモデルパラメータの集合を代数多様体として抽出する手法を構築した．その他，楽器の物理モデリングのために，楽器を構成する複数の部品が連成した場合の自然な物理モデルを構築し，それに対する数値計算手法を提案した．

3．今後の展開

今後は，本研究で開発した手法を実問題へ適用するために，さらに発展させていく．まず，ネットワーク解析手法については，離散力学的に導出したアルゴリズムに対しては Noether の定理が成り立つため，何らかの保存則をもつ可能性が高い．そこで，そのような保存則をデータから抽出する手法を考案する．また，実データの解析のためには，ネットワークの頂点数の変化や，データ欠損に対応する必要がある．頂点数の変化やデータ欠損は，どの分野のデータにも見られる一方，その原因は分野ごとに異なり，従って，原因にあわせて対応法を考案しなくてはならない．そのため，各応用分野に特化した方法を個別に考案する．

また，アンケートデータからの交流状況の推定手法として，ネットワークの様子の推定やヒーピ

ングの影響の除去などを行った．これらについても，プログラムを整備して公開するとともに，解析結果の信頼性を保証するため，実際のネットワークとの乖離がどの程度であるかなどを，実データを用いて調べる必要がある．

4．　自己評価

【研究目的の達成状況】

まず，情報幾何学と離散力学を組み合わせた時系列モデルの構築については，指数型分布属を仮定したモデルを構築することができた．特に，これを指数ランダムグラフモデルと組み合わせれば，発展型ネットワークモデルを構築することも可能である．ただし，これを実データに適用するためには，頂点数の変化に対応する手法の構築が必要であった．これに対応する手法が考案できたのは最終年度の後半になってしまったため，上記のモデルの実データへの適用については不十分であった．一方，上記のモデル以外の手法による実データの解析手法については，いくつかの手法を提案することができた．特にアンケートデータの解析手法は，実データとの乖離の程度が明確になり，安心して使えるようになれば有用であるため，ライブラリ化などを進めていきたい．

【研究の進め方】

研究期間のある時期において，学内業務とのバランスを取ることが難しくなってしまったが，プログラムの作成などについては，研究補助者をつけることが出来たため，アイデアの検証などは可能であった．ただし，研究を進める上で重要なアイデアの実現や論文としての公表は最終年度が中心となってしまった．今後は，数年間のうちに担当する可能性のある学内委員の仕事量などを考慮しつつ，より計画的に研究を進める必要がある．

【研究成果の科学技術および社会・経済への波及効果】

開発した手法のうち，ヒーピングの除去や，交流の様子の推定といったアンケートデータの解析手法は，高齢化が進んだ地区の自治体が，孤立している高齢者の様子を推定することが出来るようになるなど，実務上，非常に有用である．ただし，現時点では，推定結果が真の解に，どの程度，一致するかを実験的に確かめておらず，自治体の意思決定に利用するために十分な信頼性が確保できていない．これを確保次第，プログラムを公開する．時間発展型ネットワークモデルの構築については，モデル自体は構築できたものの，当初予定していた実データへの適用は，データ欠損など，様々な問題から困難であった．今後，当初の研究計画で予定していたもの以外のデータで有効な例を探し，発展させていく必要がある．

5．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. 河崎素乃美，谷口隆晴，増本康平，近藤徳彦，岡田修一，アクティブエイジングプロジェクトにおける住民交流ネットワークの解析，応用数理, 2017, 27, 13-20.
2. 河崎素乃美，谷口隆晴，増本康平，近藤徳彦，岡田修一，交流ネットワークの構造変化に対するネットワークモデルを用いた統計的検定手法，　日本応用数理学会論文誌，2017,

27, 112-146.
3. 小松瑞果, 谷口隆晴, Husby らの実験データに対するアレルギー発症メカニズムの解析に向けた抗原・抗体の体内動態モデルの構築, 日本応用数理学会論文誌, 2018, 28, 162-204.
4. Y. Yamanaka, T. Yaguchi, K. Nakajima, H. Hauser, Mass-Spring Damper Array as a Mechanical Medium for Computation, Lecture Notes in Computer Science (vol. 11141): International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN2018), 2018, 781-794.
5. M. Komatsu, T. Yaguchi, K. Nakajima, Algebraic approach towards the exploitation of "softness": the input-output equation for morphological computation, International Journal of Robotics Research, to appear.

（2）特許出願

研究期間累積件数:0 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

1. Mizuka Komatsu, Takaharu Yaguchi, Application of Hamiltonian Flows to Exploring Parameters of Mathematical Models in Situations with Insufficient Data, The 13th World Congress in Computational Mechanics, New York, 2018.
2. Takaharu Yaguchi, Mizuka Komatsu, Autoregressive models on statistical Riemannian manifolds for analysis of evolutionary networks, DSSV2018, Wien, 2018.
3. T. Yaguchi, Regression model on statistical manifolds and its application to evolutionary network analysis, the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2017 (SciCADE 2017), UK, 2017.
4. T. Yaguchi, Geometric-mechanics-inspired model of stochastic dynamical systems, IMI-La Trobe Joint Conference "Geometric Numerical Integration and its Applications," Australia, 2016.
5. 日本応用数理学会論文賞（理論部門）受賞. 2017.

研　究　報　告　書

「流れの位相的な文字化理論とその計算機上への実装」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 横山　知郎

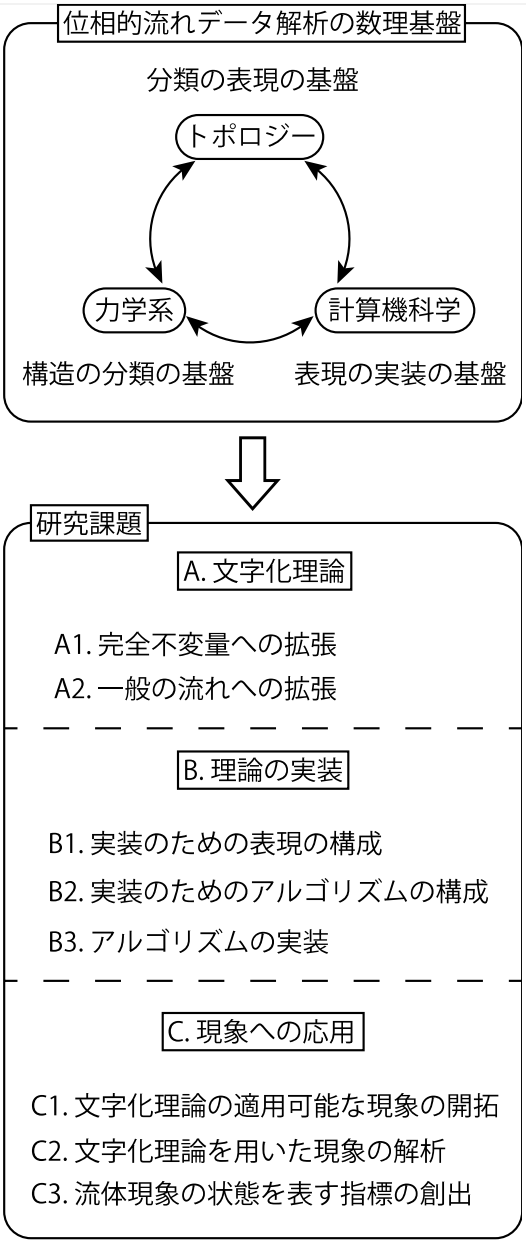
1．　研究のねらい

本研究で用いているトポロジーと力学系とは，親和性の高い分野であり，両分野とも Henri Poincaré と深く関係している分野である．実際，力学系は Poincaré によって始められた分野であり，天体力学における制限 3 体問題の可積分な系の摂動系が一般には非可積分であることが示された頃に，個々の方程式を調べることはできなくとも，ある種の微分方程式系に共通する性質を調べるという定性的な研究分野である．他方，トポロジーは，コーヒーカップとドーナツが同じ形とみなすような柔らかい構造によって分類をする幾何学である．特に，Poincaré によって，基本群，ホモトピー，単体的複体などの概念が提案され，現代のトポロジーの基礎が構築された．このように，トポロジーと力学系は，空間や流れを摂動しても不変な性質を調べるという共通した思想がある．一方，流体の研究において，摂動をしてもトポロジーが変わらないという構造安定性という性質はあまり注目されていなかった．また，力学系理論においても局所的な分岐の分類はされていたが，一般に起こりえる全ての遷移を記述するのに適した位相不変量がなかったため，一般に起こりえる全ての遷移を辺とするような流れの遷移グラフは構成されていなかった．そこで，流れの遷移グラフを構成できるような位相不変量を構成し，流れのデータを解析し，実社会での問題を解決することが本研究のねらいである．実際，本研究の開始時点では，穴あき円板上の Hamilton 流を多対一対応という粗い分類とその遷移グラフの局所的な遷移規則という理論のみが構成されていた．したがって，特定の曲面上の特定の流れを多対一という粗い記述しかできず，3 次元の流れのスライスなどとして得られる一般の流れは圧縮性をもっているため，実データへの文字化理論の適用が困難であった．そこで，Hamilton 曲面流に対する文字化理論を一般の曲面流や 3 次元空間内の流れに対して拡張することを目指す．さらに，この多対一対応というあいまいさをなくした一対一対応を構成することを目指す．また，さまざまな流体現象に理論を適用する上で，大量のデータを扱う必要があるので，遷移グラフの自動生成や流線データの位相の自動生成や流れデータの距離の自動検出というプログラムの実装を目指す．加えて，これらの理論と実装を用いて，社会問題の解決のための協働を目指す．

2．　研究成果

（1）概要

本研究は，トポロジーを用いて流れのデータを解析するという流体現象を解析するための数理的な基盤を構築し，実社会の流体現象に関わる問題解決のための新しい流れの解析手法を提案した．実際，理論面では，さまざまな流れのクラスに適用できるような位相的流れデータ解析の理論を構築した．特に，有限的な曲面流の完全不変量を構成し，数値計算で扱うような流れを記述できるようにし，穴あき球面上の Hamilton 流の一般的な遷移を全て記述できるようなった［論文 3]．さらに，既存の理論では難しかった再帰的な高次元の流れの構造を記述できるような位相不変量を構成した．実装面では，文字化理論の計算機上での実装に適した表現を構成し，これらを用いて，穴あき球面上の一般の曲面流に対して完全不変量の計算可能な表現を構成し，本研究成果は国内特許出願を行った．また，穴あき球面上の Hamilton 流の一般的な遷移を生成するアルゴリズムを計算機上に実装し，これらの流れのトポロジーに関する(擬)距離とそれらを生成するアルゴリズムを構成した．さらに，Hamilton 流のデータから流れのトポロジーを抜き出す計算可能なアルゴリズムを構成した[論文 5]．異分野協働面では，異分野協働面では，これらの理論と実装を用いて，定性的な流体現象の解析を行った．特に，本研究によって発展した一般の流れの文字化理論を用いて，3 次元空間内の流れの解析を行い，工学機械の改良を行った[プレスリリース 1]．



（2）詳細

研究テーマ A「流れの文字化理論の創出」

－ テーマ A1 完全不変量の構成

本サブテーマは，既存の Hamilton 流のトポロジーを多対一で分類する位相不変量の拡張を行った．この位相不変量は文字列として表現されるものであり，この表現を用いて，一般に起こりえる全ての遷移を記述した遷移グラフも構成されていた．一方，この文字列という表現は，多対一対応という特徴があるため，一般には起こりえる全ての遷移を記述できるが，一般に起こりえない遷移も記述してしまうという問題点があった．そのため，この一対一対応の完全不変量を構成し[論文 3]， Hamilton 流の一般的な遷移を全て記述できるようなった．

－ テーマ A2 一般の流れに対する文字化理論

本サブテーマは，既存の穴あき平面上のHamilton流の文字化理論をより一般の曲面流や3次元空間内の流れに対する理論への拡張を行った．実際，理論的に，穴あき平面のみならず全てのコンパクト曲面上の一般の曲面流の完全不変量を構成した．この拡張によって，力学系理論において重要な双曲的な流れや非圧縮な流れやその特殊な場合であるHamilton流をまとめて扱えるようになった．

研究テーマ B「流れの文字化理論の実装」

- テーマ B1 実装のための表現の構成

流れのデータを解析するために，流れの遷移規則を項の付け替えとして簡潔に表現できることが好ましい．さらに，理論の理解しやすさだけでなく，幅広いユーザーに使用してもらうために，表現がわかりやすいことも重要である．そこで，形式言語理論において，木構造を持ったデータを表すのに広く使われている正規木表現というものがあり，この表現に流体構造として現れる局所的な円順序構造を付加して，部分円順序木表現(partially Cyclically Ordered rooted Tree (COT) representation)という流体現象のトポロジーの表現を構成した．

- テーマ B2 実装のためのアルゴリズムの構成

流れの文字化理論を計算機上で実装する上で，実現可能な流れのトポロジーを全て自動生成可能で表現であることが好ましい．そこで，既存の表現を改良することにより，実現可能な Hamilton 曲面流のトポロジーを全て自動生成するアルゴリズムを構成した．さらに，与えたられたデータから流れのトポロジーを出力するアルゴリズムを構成し，そのトポロジーの違いを比較する基盤として遷移グラフを自動生成するアルゴリズムを構成した．

- テーマ B3 アルゴリズムの実装

オートマトンを用いることにより，実現可能な Hamilton 曲面流のトポロジーを全て自動生成するアルゴリズムを実装し，遷移規則を簡潔に記述し，遷移グラフを自動生成するアルゴリズムを実装した．本質的にパーシステントホモロジーを用いることで，与えたられたデータから流れのトポロジーを出力するアルゴリズムをプログラミングできることを見出した[論文 4]．さらに，COT 表現を入力として流線図を出力するアルゴリズムを実装した．

研究テーマ C「流体現象への文字化理論の応用」

- テーマ C1. 文字化理論の適用可能な現象の開拓

さきがけ研究者を中心とした異分野(液晶，フォログラフィー，CG，流体力学)の研究者を招聘しワークショップを開催し，異分野協働の可能性を探索し，研究者間のネットワークを拡張した．さらに，SciFoS(Science For Society)の活動を通して，企業や研究開発機構の研究者と議論をすることにより，さまざまな乗り物の周りの流体解析などに対して文字化理論を用いた解析が有効であるのではないかという示唆を得た．

- テーマ C2. 文字化理論を用いた現象の解析

3 次元空間内の流体現象であっても，軸回転対称性のある流れや一様性のある流れに対しては，そのスライスを取ることで得られる曲面流を解析することできる場合がある．一方，これらのスライスとして得られる曲面流は一般に非圧縮でも双曲的でないため，一般の流れの文字化理論を用いることにより解析できる．実際，分級機は回転対称性を持っているため，そのトポロジーを解析することにより，その性能を向上させた[プレスリリース 1]．さらに，これらの研究成果の元となる数理基盤に関する特許の国内出願を行った

- テーマ C3. 流体現象の状態を示す指標の創出

流れのトポロジーの距離という指標を提案した．これは，流れの遷移グラフの定義からくる副産物であり，異なる複数の流れがお互いにどれだけ遠いのかという指標として流体解析に用いることができる．実際，この流れのトポロジカルな距離は，流体機械の設計や制御をコントロールする新しい基準の一つとして活用できる．さらに，このトポロジーを用いた現象の距離を測るという手法は，流れ以外のデータに活用することもでき，さまざまな距離の基本となる．

3. 今後の展開

流れの文字化理論は，トポロジーを用いた流れのデータ解析という枠組みとして発展し，位相的流れデータ解析という新しい解析(Topological flow data analysis(TFDA))の枠組みの提唱へと繋がった．一方，Hamilton 曲面流の遷移グラフの理論と実装を行なったが，実際の流体現象の解析のためには，一般の曲面流の遷移グラフの構成や高次元の位相不変量の計算可能な表現の構成を実現する必要があり，今後はこれらの理論と実装を展開していく．

他方，本研究で発展させた曲面流のトポロジーの完全不変量や高次元空間内の流れの位相不変量を用いた実社会の問題解決のための協働は開始したばかりである．そのため，価値観を共有することにより問題意識を共有し，どのようなデータや解析を提供できるのか理解し，お互いにとって有意義な問題を見出し，問題解決を目指す．特に，これらの協働を通して，文字化理論を用いて，どのようなデータに対してどのような不変量や指標を提示できるかを明確にし，気軽に使えるような定性的な流体解析の道具となるように，位相的流れデータ解析の手法を確立する．

4. 自己評価

理論面では，流れの位相的な文字化理論を構成する研究は概ね実現できた．特に，曲面流については，ほとんどの流れに対する完全不変量を構成した．さらに，高次元空間内の流れについては，既存の理論で使われていた位相不変量を一般位相空間論や半順序理論の枠組みに翻訳することにより位相不変量を一般化した．特に，高次元内の流れに適用できるこの位相不変量は，これまでの位相不変量では区別が難しかった再帰的な不変集合内の振る舞いを分類でき，精度の高い分類能力を持ち，流れの分類の強力な道具であり，評価できる．さらに，数学の理論を現実問題に応用するという一方的な関係ではなく，反対の方向についても，現実の問題を解決するために力学系の曲面流の理論を発展させるという良い関係にあった．このように数学と現実問題が良い循環を成した点は非常に評価できる．実装面では，業務に適した人材の確保に時間を要し，アルゴリズムの実装の部分に遅れが出たが，計算機科学を用いて不変量の計算可能な表現の構成し，組み合わせ論や位相的データ解析の手法を用いて表現の実装の理論的な基盤を見出し，流れの文字化理論の実装を実現し，一定以上の成果が挙げられた．一方，計算機科学やプログラミングやデータ解析を一から学び直し，計算機やソフトウェアの購入し，データの解析やプログラミングを実行した．本研究を開始した当初は，データの解析やプログラミングについては全くの素人であったが，現在も素人の域を抜け出していないが，個人でデータ解析をするようになったことは，将来の研究や協働を行なっていく上で大きな意義がある．応用面では，協働をする研究者を見つけるきっかけを探すのが大変であったが，当初の予定していないかった数学領域内のワーキング

グループの立ち上げに伴い，異分野の研究者を招聘してワークショップを開催するなど，異分野連携が加速された．さらに，さきがけ交流会や数学領域内のワーキンググループの活動や SciFoS(Science For Society)の活動などの機会を通して，協働研究者と出会うことができ，協働のための議論を始められた．特に，目に見える結果につながっていない部分が多いが，さまざまな機会で交流を深め，流体力学や CG や計算機科学などの異分野の研究者とのネットワークを作れたことにより，自身の研究の幅も広げられ，今後の応用研究においてさらなる展開の基盤を構築できたことは，将来の研究や協働を行なっていく上で大きな意義がある．

5. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Y. Nakano, T. Yokoyama, Existence and Non-existence of Length Averages for Foliations, Communications in Mathematical Physics, (2019) 372(2), 367-383.
2. T. Yokoyama, Properness of foliations, Topology and its Applications (2019) 254, 171-175.
3. T. Sakajo, T. Yokoyama Tree representations of streamline topologies of structurally stable 2D Hamiltonian vector fields, IMA Journal of Applied Mathematics (2018) 83, Issue 3, 380-411
4. 宇田 智紀，横山 知郎，坂上 貴之，パーシステントホモロジーとレーブグラフを用いた 2 次元ハミルトンベクトル場の流線位相構造の自動抽出アルゴリズム，日本応用数理学会論文誌 (2019) 29, 2 187-224
5. 横山哲郎，横山知郎，ハミルトン曲面流に対応する流れの向きを考慮した極大語の列挙アルゴリズム，電子情報通信学会論文誌 (2018) J101-D, 8, 1220-1222

（2）特許出願

研究期間累積件数：1 件（公開前の出願件名については件数のみ記載）

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

主要な学会発表

1. Tomoo Yokoyama, Topological fluid data analysis: COT representations of surface flows and their implementations, 3rd Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, 中国，2019，招待講演
2. Tomoo Yokoyama, Topological invariants of generic flows on compact surfaces and topological flow data analysis, Seminar cathedral on Monday, Moscow State University, Russia, 2019
3. 横山知郎，曲面流について，第 65 回トポロジーシンポジウム，信州大学，2018
4. Tomoo Yokoyama, Topological transitivity and representability of surfaces flows, DynamIC Seminars, Imperial College London, UK, 2017

プレスリリース

1. 流れの「かたち」解析による装置開発 ～流線位相データ解析による効率的粉体分級

装置の開発～

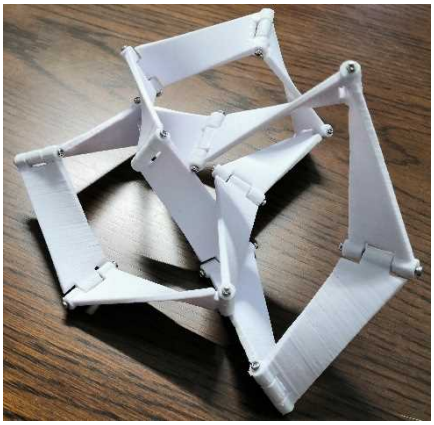
https://www.jst.go.jp/pr/announce/20190930-2/index.html

さきがけ「数学協働」研究領域　研究総括：國府 寛司　（京都大学 大学院理学研究科　教授）

かたちがつなぐ

鍛冶　静雄（九州大学　マス・フォア・インダストリ研究所・准教授）

研究課題名：「かたちと動きの基盤数理」　研究期間：2016.10～2020.03



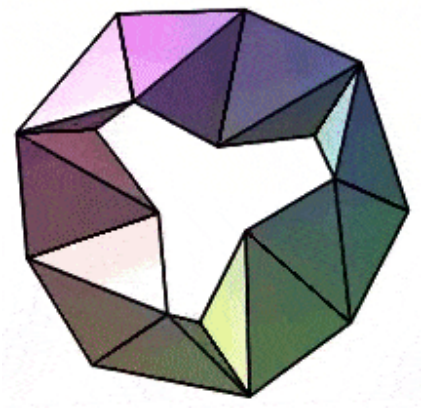


図　メビウス・カライドサイクル

3半ひねりのメビウスの帯の形をしたクルクル回る器械(リンク機構)で、動きの自由度が1であるなど特殊な性質を数多く持ちます。ロボット工学、運動学、合成化学など広範な応用を持ちうると同時に、代数学、幾何学、解析学にまたがる豊かな数学的対象でもあります。この不思議なかたちが多くの分野をリンクしています。

たくさんのものの中から似ている形を探し出したり、粘土をこねて思い通りの形を造形したり、形に関しては、人間には簡単にできるのに、コンピューターで扱うのは難しいことがまだたくさんあります。急速に AI が進歩する中で、人間の直感の偉大さと不思議さあらためて実感させられる対象の一つと言えるでしょう。本研究では、人間の持つ俯瞰的な空間把握を、コンピューターにも理解できるように厳密に記述することに挑みました。数学の一分野であるトポロジーを用い、形状やその動きを解析する方法を開発することで、CG や工業意匠における三次元モデルのデザイン、折り紙・動力伝達の機構(リンク機構)の解析に新しい方法を提供しました。また、現代数学を形状デザインに応用することで、数学と工学の双方を発展させることができました。

>>参考情報

- **論文**
  1. 日本評論社　数学セミナー2019 年 6 月号　数理のクロスロード／ (1) リンク万華鏡
  2. 日本評論社　数学セミナー2019 年 7 月号　数理のクロスロード／ (2) デザインの数学
  3. 精密工学会 2018 春季大会シンポジウム資料集　曲線の幾何学から生まれた閉リンク機構
  4. CRC Press. Nonlinear Systems and Their Remarkable Mathematical Structures Volume 2. Linkage Mechanisms Governed by Integrable Deformations of Discrete Space Curves by Shizuo Kaji, Kenji Kajiwara, and Hyeongki Park.
- **特許出願**
  1. **MOEBIUS KALEIDOCYCLE**, S. Kaji, J. Schoenke, E. Fried, and M. Grunwald, PCT/JP 2019/007314(2019)