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、

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^n \arrow[r, "f"] \arrow[d, "\phi"'] & \mathbb{R}^p \arrow[d, "\psi"'] \\ \mathbb{R}^n \arrow[r, "g"] & \mathbb{R}^p \end{tikzcd}$$

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）