ゼミ発表

金泉大介 (丸野研究室, 精度保証付き数値計算グループ OB)

2019年8月,@柏木研究室,数学応用数理専攻

本発表の流れ

- 📵 前半:皆さんからの質問に答えます
 - 離散可積分系と最適化問題の関係
 - q-類似と一意性
 - q-類似で特異性・多価性を回避(処理)したり解析接続できるか?
 - q-類似で定義域が狭まる例
 - 解析接続できる例
 - 特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧
 - *q*-特殊関数の微分はなぜ難しいのか?
- ② 後半:皆さんにお聞きします
 - 大域最適化
 - Derivative-free optimization (DFO)
 - 組み合わせ最適化
- ③ おまけ: JSIAM 年会 2019 注目講演 (独断)
- 4 最後に: 私からのお願い

離散可積分系と最適化問題の関係

離散可積分系と最適化問題に関係ありますか?

調べてみたらどうやらあるようです ^{1,2}.

近年の可積分系研究の動向の中で特筆すべきは応用数学/応用数理的側画の進展であろう。とりわけ、最適化アルゴリズム、固有値計算法、加速法などの数値計算法と可積分系との密接なかかわりの認識を足掛かりとして新しい研究領域が形成されつつある。

金泉大介 (丸野研究室 OB) ゼミ発表 2019 年 8 月, @柏木研究室 3

²V. Jurdjevic (2016), Optimal Control and Geometry: Integrable Systems, Cambridge University Press.

前回の質問1

Fact

q-類似の元は一意である.

(∵) 一意でない場合, 連続極限の一意性 (微積で既習) に反する.

Fact

q-類似は一意ではない \rightarrow これが q の世界を豊かにしている!!

反例1

q-Bessel は少なくとも3つある (Jackson q-Bessel imes 2, Hahn-Exton q-Bessel).

反例 2

Painleve 方程式は 6 つだけだが q-Painleve 方程式はそれ以上ある.

→ 沢山ある *q*-Painleve 方程式 (& 楕円 Painleve) を統一的に扱うのが Sakai 理論. 例えば https://arxiv.org/abs/1804.10341 Figure 1, Figure 2 を参照.

前回の質問2

q-類似で特異性·多価性を回避(処理)したり解析接続できるか?

Definition (解析接続)

Riemann 球面 $\mathbb{C} \cup \{\infty\}$ 上の領域で定義した有理型 (meromorphic, 極を除いて holomorphic) 関数に対する定義域の拡張. (cf: 直接接続)

神保道夫. (2003). 複素関数入門. 岩波書店.

Ablowitz, M. J., Fokas, A. S. (2003). Complex variables: introduction and applications. Cambridge University Press.

q-類似は特異性・多価性を回避(処理)したり解析接続することを主目的としたものではありませんが、まれにできることがあります。また、q-類似して定義域が狭まることもあります。

q-類似で定義域が狭まる例

q-指数関数

$$e_q(z):=\sum_{n=0}^{\infty}rac{z^n}{(q;q)_n},\quad |z|<1.$$

Jackson の第1種 q-Bessel 関数

$$J_{\nu}^{(1)}(x;q) := \frac{(q^{\nu+1};q)_{\infty}}{(q;q)_{\infty}} (x/2)^{\nu}{}_{2}\phi_{1}(0,0;q^{\nu+1};q,-x^{2}/4), \quad |x| < 2.$$

Gasper, G., Rahman, M., (2004), Basic Hypergeometric Series, Cambridge University Press.

 金泉大介 (丸野研究室 OB)
 ゼミ発表

 2019 年 8 月, @柏木研究室

解析接続できる例

 $_rF_{r-1}, \quad _r\phi_{r-1}$ の収束半径は |z|<1 だが, 楕円超幾何関数 3 :

$$_{r}E_{r-1}(a_{1},\cdots,a_{r};b_{1},\cdots,b_{r-1};p,q;z):=\sum_{n=0}^{\infty}rac{\displaystyle\prod_{i=1}^{r}(a_{i};p,q)_{n}z^{n}}{\displaystyle\prod_{i=1}^{r-1}(b_{j};p,q)_{n}(q;p,q)_{n}}.$$

$$(z;p,q)_n := \begin{cases} \prod_{k=0}^{n-1} \theta(zq^k;p) \ (n=1,2,\cdots) \\ 1/\prod_{k=0}^{-n-1} \theta(zq^{n+k};p) \ (n=-1,-2,\cdots) \\ 1 \ (n=0) \end{cases}$$

$$\theta(z;q) := (z;q)_{\infty} (qz^{-1};q)_{\infty}, \quad p,q \in (0,1).$$

の収束半径は無限である (cf: Gasper-Rahman, chapter 11).

- $(z; p, q)_n$ は $p \to 0$ のとき $(z; q)_n$ に戻るので, $p \to 0$ としたとき,

³Gasper, G., Rahman, M., (2004), Basic Hypergeometric Series, Cambridge University Press. 金泉大介 (丸野研究室 OB)

参考: 数値解析で使われる特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧

- Duffy 変換 4 (冪型特異点を含む数値積分)
- \rightarrow 除去可能特異点 (例: $f(x) = \sin(x)/x$ における x = 0) もできるかも?
- generalized Duffy 変換 ⁵ (4 次元以上の Duffy 変換)
 - →4 次元以上の数値積分はどんな時に必要? (cf: Davis-Rabinowitz)
 - →PDE の数値解法 (FEM 等) で 4 次元以上の数値積分は必要?
- 部分積分 → 冪型特異点を含む数値積分, 漸近展開 (cf: Ablowitz-Fokas)
- Schwartz 超函数 → 中尾理論で必要 (関数空間の設定 ⁶)
- 複素時間 →ODE/PDE で爆発時刻を回避 (高安先生など)

⁴Duffy, M. G. (1982). Quadrature over a pyramid or cube of integrands with a singularity at a vertex. SIAM journal on Numerical Analysis, 19(6), 1260-1262.

 $^{^{5}}$ Mousavi, S. E., & Sukumar, N. (2010). Generalized Duffy transformation for integrating vertex singularities. Computational Mechanics, 45(2-3), 127.

⁶http://mathsoc.jp/office/prize/haruaki/nakao2012aki.html

参考: 数値解析で使われる特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧(複素関数論)

- ullet 主値, Riemann 面 $^{7,8}
 ightarrow \log z \quad (orall z \in \mathbb{C} ackslash (\mathbb{R}_{<0}))$ を定めるのに必要 (数値計算との関連が研究されている9)
- Riemann 球面 (C∪∞, 実射影直線の2次元版) \rightarrow これも数値計算に役立つと信じられている 10 .

こういう分野を Applied and Computational Complex Analysis という.

⁷神保道夫. (2003). 複素関数入門. 岩波書店.

⁸Ablowitz, M. J., Fokas, A. S. (2003). Complex variables: introduction and applications. Cambridge University Press.

 $^{^9}$ Bobenko, A. I. (2011). Computational approach to Riemann surfaces. Springer Science & Business Media.

¹⁰https://tech.speee.jp/entry/2017/11/14/105047

参考: 数値解析で使われる特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧(複素関数論)

hyperfunction¹¹ (佐藤超函数, 正則関数同士の境界上での差)

$$f(x) = F(x + i0) - F(x - i0)$$

(Fourier 級数における不連続点もこんな感じで処理します.)

- 台形公式と組み合わせることで数値積分に応用 ^{12,13} (今度の JSIAM 年会で発表あり)
- Gauss-Legendre 等が導出できる ¹⁴

"補間, 数値微分, 数値積分, Fourier 解析のような数値解析の基礎的な問題を超函数 (hyperfunction) の立場から眺めてみると, 統一的な取り扱いが可能になる上に, 誤差評価などにおいて実用上有効な方法を得ることができる." (by 森正武先生)

"佐藤超函数は無限区間積分, Hadamard 有限部分積分にも応用できる. 今後は Fourier 変換, 積分方程式などでへの応用を考えていきたい."

¹¹ 今井功, 応用超関数論 I, II.

¹²http://www.uec-ogata-lab.jp/research/research1/

¹³緒方秀教, 平山弘, 数値積分に対する超函数法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.26 (2016) 33-43.

¹⁴森正武, 数値解析と超函数論, 京都大学数理解析研究所講究録, 145 (1972) 1-11.

参考: その他の特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧(代数幾何)

代数幾何における特異点解消 (resolution of singularities, cf: Wikipedia 英語版)

- blow up (日本語に直訳すると「爆発」だがこの言い方はあまりないと思う)
 - 中国語だと「拉開」
 - 可積分系研究者たちの大好物
 - 爆発解 (blow up solution) との関係?
- Newton, Riemann, Noether, Zariski, 広中, …
- → これらの技術が数値解析に使えると信じている先生たちもいる

cf: 数值代数幾何 (numerical algebraic geometry)

計算機で代数多様体を研究する学問

代数幾何は実験科学 (by 楫先生, 数学科パンフレット)

精度保証で力学系における安定多様体を研究するのと似ているかもしれない.

金泉大介 (丸野研究室 OB)

参考: その他の特異点・多価性回避(処理)テクニック一覧

除法の定義を変えて zero 除算を可能にする

- wheel theory (輪)¹⁵
- q-除算 16

$$x \bigcirc_q y := \left(x^{1-q} - y^{1-q} + 1\right)_+^{\frac{1}{1-q}}, \quad (A)_+ := \max\{A, 0\}.$$

無限遠点を含めた数の取り扱い

- affine 拡大実数 $[-\infty, \infty]$ \rightarrow extended interval arithmetic 17
- 超実数

金泉大介 (丸野研究室 OB)

¹⁵Carlstrom, J. (2004), "Wheels - On Division by Zero", Mathematical Structures in Computer Science, Cambridge University Press, 14 (1): 143-184.

¹⁶Borges, E. P. (2004). A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 340(1-3), 95-101.

¹⁷Moore, R. E., Kearfott, R. B., & Cloud, M. J. (2009). Introduction to interval analysis. SIAM.

- 1990 年代に「*q-*特殊関数を微分しよう」という研究が流行った (Swarttouw¹⁸ 等).
- しかし 20 年経った今ではそのような話を全く聞かなくなった.かつて取り組んでいた先生方も全員撤退したようだ.
- 研究者たちに直接聞いたわけではないので正確なことは分からないが, 何が 難しいのかを自分なりに考えてみました.

Koekoek, R., Lesky, P. A., & Swarttouw, R. F. (2010). Hypergeometric orthogonal polynomials and their q-analogues. Springer Science & Business Media.

¹⁸直交多項式業界で天才とも呼ばれる先生です。

Koekoek, R., & Swarttouw, R. F. (1996). The Askey-scheme of hypergeometric orthogonal polynomials and its q-analogue. arXiv preprint math/9602214.

Theorem (微分積分の復習, 項別微分)

$$\sum a_n z^n$$
 が収束するなら $rac{d}{dz} \sum a_n z^n = \sum a_n rac{d}{dz} z^n$

$$_{r}\phi_{s}(lpha_{1},\cdots,lpha_{r};eta_{1},\cdots,eta_{s};q,z):=\sum_{n=0}^{\infty}rac{\displaystyle\prod_{i=1}^{r}(lpha_{i};q)_{n}\left[(-1)^{n}q^{inom{n}{2}}
ight]^{1+s-r}z^{n}}{\displaystyle\prod_{j=1}^{s}(eta_{j};q)_{n}(q;q)_{n}}.$$

$$egin{aligned} \therefore rac{d}{dz}\left({}_r\phi_s(q,z)
ight) = \sum_{n=0}^\infty rac{\displaystyle\prod_{i=1}^r (lpha_i;q)_n \left[(-1)^n q^{inom{n}{2}}
ight]^{1+s-r} nz^{n-1}}{\displaystyle\prod_{j=1}^s (eta_j;q)_n (q;q)_n} \end{aligned}$$

ダランベールの判定法より収束半径は無限である。しかし微分したことで公比が大きくなるので精度が悪化し、nが陽的に現れるので overflow がより起きやすくなっている。

 金泉大介 (丸野研究室 OB)
 ゼミ発表
 2019 年 8 月, @柏木研究室
 14 /

$$\frac{d}{dz} \left({}_r \phi_s(q,z) \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\displaystyle \prod_{i=1}^r (\alpha_i;q)_n \left[(-1)^n q^{\binom{n}{2}} \right]^{1+s-r} n z^{n-1}}{\displaystyle \prod_{j=1}^s (\beta_j;q)_n (q;q)_n}.$$

overflow を回避するためには asymptotics (漸近展開) が必要なのだが, この関数 はもはや超幾何でもなければ q-超幾何でもないので超幾何, q-超幾何の道具が全く使えない.

- 超幾何関数 := 公比が n の有理関数
- ullet q-超幾何関数 := 公比が q^n の有理関数

Theorem (超幾何は微分しても超幾何のまま)

$$\frac{d}{dz}\exp(z) = \exp(z), \quad \frac{d}{dz}\sin(z) = \cos(z), \quad z\frac{d}{dz}\frac{dJ_{\nu}(z)}{dz} - \nu J_{\nu}(z) = -zJ_{\nu+1}(z),$$

$$\frac{d}{dz}({}_2F_1(a,b;c;z)) = \frac{ab}{c}\,{}_2F_1(a+1,b+1;c+1;z).$$

時弘哲治, 工学における特殊関数, 共立出版, 2006.

$$\frac{d}{dz} \left({}_r \phi_s(q,z) \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\displaystyle \prod_{i=1}^r (\alpha_i;q)_n \left[(-1)^n q^{\binom{n}{2}} \right]^{1+s-r} nz^{n-1}}{\displaystyle \prod_{j=1}^s (\beta_j;q)_n (q;q)_n}.$$

overflow の回避には asymptotics (漸近展開) が必要だが、この関数は積分表示が現時点で分からないので Watson の補題、Mellin 変換、WKB 近似などが使えない.

Reference

Ablowitz, M. J., Fokas, A. S. (2003). Complex variables: introduction and applications. Cambridge University Press.

Chapter 6: Asymptotic Evaluation of Integrals

こうなってくると、使える道具が微積ぐらいしかない.

金泉大介 (丸野研究室 OB)

ゼミ発表

項別微分可能かどうか分からないケースもある (できても計算が面倒).

Theorem (q-Bessel 関数の別表現)

$$J_{\nu}^{(2)}(x;q) = \frac{(x/2)^{\nu}}{(q;q)_{\infty}} \ _{1}\phi_{1}(-x^{2}/4;0;q,q^{\nu+1}).$$

$$J_{\nu}^{(3)}(x;q) = x^{\nu} \frac{(x^2q;q)_{\infty}}{(q;q)_{\infty}} \ _{1}\phi_{1}(0;x^2q;q,q^{\nu+1}).$$

級数の中身に x^n を持たないような別表現である.

Koelink, H. (1993). Hansen-Lommel Orthogonality Relations for Jackson's q-Bessel Functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 175, 425-437.

Daalhuis, A. (1994). Asymptotic Expansions for q-Gamma, q-Exponential, and q-Bessel functions. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 186, 896-913.

Theorem (微分積分の復習, 項別微分)

$$\sum a_n z^n$$
 が収束するなら $rac{d}{dz} \sum a_n z^n = \sum a_n rac{d}{dz} z^n$

後半:皆さんにお聞きします

ここまで, 前回に皆さんからいただいた質問に答えたのでここからは逆に皆さん にお聞きします.

- 大域最適化
- Derivative-free optimization (DFO)
- 組み合わせ最適化

最近, 最適化関連ニュースが多い気がするが, 最適化は世界的に流行っているのだろうか? (最適化問題を精度保証する需要が高まってる?)

大域最適化ニュース

最近こんなニュースがありました (2019 年 7 月) ¹⁹.

ベトナムを代表する数学者で、応用数学における「大域的最適化 $(Global\ Optimization)$ 」分野の父とされ、 $Institutes\ of\ Development\ Studies\ (IDS)$ の創設者でもあるホアン・トゥイ $(Hoang\ Tuy)$ 博士が 7 月 14 日、ハノイ市で死去した。92 歳だった。(中略) 研究にまい進し、100 本以上の論文が国際的に有名な雑誌に掲載された。ライナー・ホースト $(Reiner\ Horst)$ 博士と共同執筆した大域的最適化に関する書籍 20 は、大域的最適化分野の「聖書」とされている。 $1980\sim1990$ 年には数学研究所の所長を務め、IDS を創設。同研究所は1994 年に第三世界科学アカデミーから発展途上国の優れたセンターとして認められた。トゥイ博士は科学への多大な功労により、1996 年にベトナム政府から科学技術分野のホーチミン賞を授与された。

大域最適化の精度保証ってどれぐらい進んでるんですか?

→ 大石先生の本には INTLAB で解いた例が一つだけ載っている (304 ページ).

¹⁹https://www.viet-jo.com/news/social/190716165705.html

 $^{^{20}\}mbox{Horst},$ R., & Tuy, H. (2013). Global optimization: Deterministic approaches. Springer Science & Business Media.

DFO ニュース

これまで説明しているように, 私は derivative-free algorithm の研究を志しているのだが, 最適化の分野でもこのような動きがあることを最近知った. 先週, NAG (Numerical Algorithms Group) からこんな発表があった (2019年7月26日)

A new set of Derivative-free Optimization (DFO) solvers are now available in the latest NAG Library. The DFO solvers for general nonlinear objective with bound constraints and for least squares (data fitting, calibration) problems with bound constraints, are available with both direct and reverse communication interfaces. These solvers should show an improved convergence rate compared to the existing DFO solutions in the NAG Library. They also have features designed to specifically handle noisy or expensive problems.

DFO の精度保証ってどれぐらい進んでるんですか? → 大石先生の本には記載なし.

組み合わせ最適化ニュース

2019年7/30の記事21

今、量子コンピュータの一種である「量子アニーリングマシン」で高速 に解けるとされる「組合せ最適化問題」をより速く・大規模に解くべ く、各社がしのぎを削っている。(中略)

各社が組合せ最適化計算に取り組むのは、これを高速に解けると交通 渋滞の解消や金融ポートフォリオの最適化など、社会問題の解決やビ ジネスへ応用が見込めるからだ。

8/2 の記事 (東芝の組み合わせ最適化最速アルゴリズム, クラウドで一般公開) 22

東芝はこのほど、組み合わせ最適化計算に特化した既存の量子コンピュータよりも高速・大規模に問題を解ける「シミュレーテッド分岐アルゴリズム」を実装したマシンをクラウド上に公開した。Amazon Web Services 上の仮想サーバ利用料金(1時間約3ドル)のみで利用できる。

組み合わせ最適化の精度保証ってどれぐらい進んでるんですか? → 大石先生の本には記載なし

21 / 27

²¹https://www.itmedia.co.jp/news/articles/1907/30/news030.html

²²https://www.itmedia.co.jp/news/articles/1908/02/news104.html

おまけ: JSIAM 年会 2019 注目講演 (独断)

高安先生が (NLS の研究に続いて) またしても可積分系に引きずり込まれた!! Gauss の超幾何微分方程式のモノドロミー行列に対する精度保証付き数値計算 (高安先生 et. al., 9月4日:09:00-10:20: C (K213), 計算の品質(1))

Gauss の超幾何微分方程式に対して,解の多価性を表現するモノドロミー行列の値を得た. 精度保証付き数値計算を用いてある特異点周りの閉経路に沿った解析接続を行うことで,特異点周りのモノドロミー行列を厳密に包含することができた. Gauss の超幾何微分方程式の場合はモノドロミー行列を得る陽的な公式があり,この数値結果が真の値を含むことを確認できる.

モノドロミー行列:可積分系研究者たちの大好物

→ これが分かれば ODE の解が解析接続によりどう変わるかを完全に把握できる.

悲報

応用可積分系セッションに q 関連の講演なし

神保道夫. (2003). 複素関数入門. 岩波書店.

22 / 27

これまでのゼミでいろんな話をしていますが、超幾何・Painleve eq. を教わった気にならないで下さい. (超幾何・Painleve 方程式の退化は少しだけ説明しました.)

Painleve eq. を教わる ← Okamoto 初期値空間を理解できる.

Young 図形, Dynkin 図形を使いこなせる.

モノドロミー保存変形を使いこなせる.

Fuchs 型 ODE の一般論を知る.

超幾何 eq. を教わる ⇒ GKZ, Aomoto-Gelfand を理解できる. Grassman 多様体を使いこなせる.

岡本和夫. (2009). パンルヴェ方程式. 岩波書店.

野海正俊. (2000). パンルヴェ方程式-対称性からの入門. 朝倉書店.

Aomoto, K., Kita, M., et. al. (2011). Theory of hypergeometric functions. Tokyo: Springer. 木村弘信 (2007): 超幾何関数入門-特殊関数への統一的視点からのアプローチ. サイエンス社.

木村弘信 (2007): 超幾何関数入門-特殊関数への統一的視点からのアプローチ, サイエンス社. 原岡喜重. (2002). 超幾何関数. 朝倉書店.

これまでのゼミでいろんな話をしてますが、可積分系を教わった気にならないで下さい. (離散可積分系と数値計算の関係については少しだけ説明しました.)

広田良吾. (1992). 直接法によるソリトンの数理. 岩波書店.

Ablowitz, M. J., & Segur, H. (1981). Solitons and the inverse scattering transform. SIAM. 梅村浩. (2000). 楕円関数論. 東京大学出版会.

Vein, R., & Dale, P. (2006). Determinants and their applications in mathematical physics. Springer Science & Business Media.

広田良吾, & 高橋大輔. (2003). 差分と超離散. 共立出版.

可積分系は厳密な定義がない (可積分系を定義することが目標となっている)²³. 集合論が集合を定義しようとしているのと一緒です. そのため, 人によって解釈 が違うことに留意する必要があります.

解釈が異なる例

私の解釈: q-類似, q-解析学 \in 可積分系 \cap 整数論よくある解釈: q-類似, q-解析学 \in 数学 \setminus 可積分系

例えば東大数理だと可積分系の教員が 5 人いる (時弘, Willox, 中田, 西成, 国場). よって学生たちは教員ごとにどう定義しているか見極める必要がある.

(RIMS では) 可積分系の理論をキーワードに, 常微分方程式論, 確率論, 組み合わせ論, 実解析, 応用数理, 代数幾何学, 微分幾何学, 数論など幅 広い分野の研究者の情報交換を目的としています ²⁴.

²³https://mathoverflow.net/questions/6379/what-is-an-integrable-system

²⁴https://sites.google.com/math.kindai.ac.jp/rims2019integrablesystems/

一方で, 今年の日中可積分系集会はこのようなラインナップになっている.

The main themes of this workshop are devoted to the reviews of the research topics by both the Chinese and Japanese communities in integrable systems, which include (but not limited to)²⁵:

- Algebra and combinatorics of integrable systems
- Backlund and Darboux transformations
- Discrete and ultradiscrete integrable systems
- Geometry of integrable systems
- Hamiltonian systems
- Hirota bilinear method and au-functions
- Numerical algorithms and numerical computations
- Painlevé systems
- Solitons and applications
- Special functions and orthogonal polynomials
- Symmetry and supersymmetry of integrable systems

このように,可積分系は人によって指す範囲が異なるのである.

²⁵http://www.f.waseda.jp/kmaruno/cjjwis2019.html

「ゼミ」という言葉は分野によって意味が違うので注意が必要です.

- 数値解析などの工学系: 研究打ち合わせ
- 可積分系: 河東先生方式²⁶ (都数方式²⁷) で GTM, GSM²⁸ 等を輪読する.
 → 河東先生が1996 年にセミナーのやり方を提唱して以来, 全国の数学科・ 純粋数学のあらゆる分野に広まった.

河東泰之先生 (@東大数理)

専門は作用素環論 (中略), さらにこれらと他の分野 (量子群, 共形場理論, 可解格子模型など) との関連です. 関数解析的, 組合せ論的側面の双方が好き.

→ 可積分系にものすごく近い.

https://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~yasuyuki/

²⁶https://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~yasuyuki/sem.htm

²⁷https://twitter.com/tosuu_set

²⁸Graduate Texts in Mathematics (Springer), Graduate Studies in Mathematics (AMS).