

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 21 日現在

機関番号：32682

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24340031

研究課題名(和文) 離散幾何解析学の展開

研究課題名(英文) Development of Discrete Geometric Analysis

研究代表者

砂田 利一 (Sunada, Toshikazu)

明治大学・公私立大学の部局等・教授

研究者番号：20022741

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 9,300,000円

研究成果の概要(和文)：数学的結晶理論の研究を行い、標準的実現がwavelet解析に登場するtight frameに密接に関連することを見出した。Tight frameの中でも、結晶的tight frameの概念が重要であり、その性質を詳細に研究した。これはグラスマン多様体上の有理点とも関連し、有理点の数え上げの問題が重要となることを指摘した。準結晶に関連する研究では、古典的なガウスの問題に登場する離散集合が、Poisson型の準結晶に「近い」ことを発見し、near quasicrystal の理論への出発点とした。

研究成果の概要(英文)：Motivated by the recent development in systematic design of crystal structures by both mathematicians and crystallographers, we studied interesting relationships among seemingly irrelevant subjects; say, standard crystal models, tight frames in the Euclidean space, rational points on Grassmannian, and quadratic Diophantine equations. Thus our view is quite a bit different from the traditional one in mathematical crystallography. The central object in this study was what we call crystallographic tight frames, which are, in a loose sense, considered a generalization of root systems. We also studied near quasicrystals of Poisson's type.

研究分野：幾何学

キーワード：tight frame quasicrystal

### 1. 研究開始当初の背景

現代結晶学では、結晶構造における原子を頂点、原子間の結合を辺とするネットワークと考えることにより、グラフ理論が有効に使われている。特に結晶に付随するグラフは有限グラフのアーベル被覆グラフであるから、ホモロジー群の理論と被覆理論という位相幾何学的手法が使える。これに加えて、研究代表者が提唱している離散的ラプラシアン解析学を主題とする「離散幾何解析学」の手法が有効であるとの認識から本研究が発せられた。これまで、離散幾何解析を用いて結晶格子上のランダムウォークに対する漸近的性質を見出しているが、中でも中心極限定理から導かれた標準的実現が最小原理を満たす最大対称実現であることが研究代表者の研究により知られている(ランダム性と対称性が結びつくことは興味深い)。それを用いて結晶構造のモデルを構成し、そのアルゴリズムを構築することにより、結晶デザインに応用することを目論んでいた。

### 2. 研究の目的

離散幾何解析学的手法により、結晶デザインの理論を確立するとともに、その背景にある数学理論を整理することを目的とした。特に、結晶格子上の量子ウォーク、準結晶とその数論的例、結晶的タイト・フレームの理論を具体的対象とした。特に結晶的タイトフレームの族をグラスマン多様体の有理点と対応させ、さらにディオファントス連立方程式との関連を見出すことを目的としていた。2次元結晶では、複素2次元曲面の有理点(ただし虚2次元体の数を座標とする)との関係を調べることになる。さらに、1次元量子ウォークの漸近挙動を精密に調べることにより、高次元量子ウォークの場合への拡張を試みることを考えた。準結晶の理論では、原始的格子点の集合のような、従来の定式化には当てはまらない離散集合を扱うことが目的であり、ポアソン型の準結晶をモデルとして、何らかの新しい(準結晶と呼ぶのにふさわしい)クラスを見出すことを目指した。恐らく、これに関連して、合同不定方程式を満たす原始的格子点の集合を扱う価値があるように思われる(原始的ピタゴラス数の数え上げに、このような集合が登場する)。

### 3. 研究の方法

離散幾何解析は離散的ラプラシアンの解析学を中心的対象としており、これを用いて研究を行った。理論的結晶学者の従来の研究は離散的ラプラシアンを用いることにより、相当部分が簡易化できる。また、離散的代数幾何学の考え方と標準的実現の間の関係に着目し、クロネッカーの「青春の夢」のグラフ版を構成することを考えた。さらに、準結晶の理論では、一般化されたリーマン和を定式化し、これを用いて研究を行った。リーマン和については、ポアソンの和公式の一般化を

考えることが必要との認識があった。

### 4. 研究成果

結晶デザインの研究では、線形代数の枠内で構成された内藤のアルゴリズムを用いて、数多くの結晶構造を構成し、その性質を調べた。1次元量子ウォークの精密な理論を構築。その漸近挙動は3つの区域に分かれて、振動区域、壁区域、大偏差区域になることが解明された。この結果はエルミート関数の挙動と類似しており、高次元への拡張を示唆している。少なくとも大偏差区域については、古典的ランダムウォークの大偏差と関係があることが期待される。これとは独立に、結晶的タイト・フレームの理論をグラスマン多様体の有理点の理論に結び付け、これまでの結果を統一的に扱うことに成功。この研究から、有理点の自然な「高さ(height)」を定義することができたが、この「高さ」に関する有理点の数え上げ関数の挙動を調べることは、将来に残された問題である。これに関連して、ディオファントス連立方程式との関連も見出すことができた。さらに2次元結晶の標準的実現と複素2次元曲面の有理点の間の関係を見出した。これに関連する方向としては、タイル張りから得られる2次元結晶の有理点による特徴づけであろう。この他、ユークリッド空間の離散集合の一様性を定式化することを目的にして、一般化されたリーマン和の研究を行った。特に、互いに素な自然数の数え上げについてのガウスの古典的結果、及び原始的ピタゴラス数の数え上げを統一的扱うことが可能になった。その副産物として、円周上の有理点の一様分布に関する知見を得ることができた。さらに加えて、準結晶との関係を研究した。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 14 件)

T. Sunada, Topics on mathematical crystallography, in the proceedings of the symposium, in the proceedings of the symposium "Groups, graphs and random walks", London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, 2016. 掲載決定、査読有

Tatsuya Tate, Quantum Walks in Low Dimension, Trend in Mathematics, Proceedings of XXXIV Workshop on Geometric Method in Physics, 243--263, Birkhauser, 2016 (出版予定、査読有).

K. Ahara, M. Suzuki, Y. Masutani, and T. Ueda 「Basic research for the patient-specific surgery support system -- an identification algorithm of the mesentery using 3D medical

images--」 proc. of Forum Math. for Industry, Kyushu University, to appear., 査読有

Y Higuchi, I Sato, A balanced signed digraph, Graphs and Combinatorics, 31 (2015), 2215-2230. 査読有

山下 哲, 阿原一志, KETpic による作図プログラミング書法の確立 (数学ソフトウェアとその効果的教育利用に関する研究), 数理解析研究所講究録 1951(2015), 200-208, 査読有

T. Sunada, Standard 2D crystalline patterns and rational points in complex quadrics, Southeast Asian Bulletin of Mathematics, 38(2014), 731-750. 査読有

S. Yamashita, Y. Maeda, H. Usui, K. Kitahara, H. Makishita, K. Ahara, Establishment of KETpic Programming Styles for Drawing, Lecture Notes in Computer Science 8592 (2014), 641-646. 査読有

Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices, Journal of Functional Analysis, 267 (2014), 4197-4235. 査読有

Y Higuchi, N Konno, I Sato, E Segawa, A remark on zeta functions of finite graphs via quantum walks, Pacific Journal of Mathematics for Industry 6 (2014), 査読有

T. Tate, An algebraic structure for one-dimensional quantum walks and a new proof of the weak limit theorem, Infin. Dimens. Anal. Quantum. Probab. Relat. Top., 16, 1350018 (2013) [12 pages] DOI: <http://dx.doi.org/10.1142/S0219025713500185> 査読有

Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA, A note on the discrete-time evolutions of quantum walk on a graph. Journal of Math-for-Industry 5(2013B-3), 103-109. 査読有

T. Tate, The Hamiltonians generating one dimensional discrete time quantum walks, Interdisciplinary Information Sciences, Vol. 19 (2013) No. 2 p. 149-156. 査読有

Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA, Quantum graph walks II: quantum walks on covering graphs. Yokohama Math. J. 59 (2013), 57--90. 査読有

Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA, Quantum graph walks I: mapping to quantum walks. Yokohama Math. J. 59 (2013), 34--56. 査読有

植辰哉, 「位相的結晶理論概観」日本金属学会「キンク研究会」平成 27 年度第 2 回研究会(共催: 新学術領域研究『シンク口型 LPSO 構造の材料科学』熊本大学先進マグネシウム国際研究センター)九州大学大学院理工学研究院 2016 年 2 月 19 日・20 日.(招待講演)

砂田利一, Generalized Riemann sums, 第 11 回代数・解析・幾何学セミナー、2016 年 2 月 15 日、鹿児島大学

砂田利一, 一般化されたリーマン和 (Generalized Riemann sums), 金沢大学理学部談話会、2016 年 2 月 8 日

Tatsuya Tate, "Localization for periodic unitary transition operators", 2016 Joint Mathematics Meetings, AMS Special Session on "Quantum Walks, Quantum Markov Chains, Quantum Computation and Related Topics", Washington state convention center, Seattle, USA, 2016 年 1 月 8 日.

砂田利一, Counting Problems in History, 連続講演、東北大学 2015 年 11 月 16 日、17 日

Tatsuya Tate, "Quantum walks in one dimension", Colloquium at Shanghai Mathematical Center, Fudan University, Shanghai, China, 2015 年 11 月 5 日.

Tatsuya Tate, "Localization for periodic unitary transition operators", Geometry Seminar at Shanghai Mathematical Center, Fudan University, Shanghai, China, 2015 年 11 月 4 日.

砂田利一, Generalized Riemann sums, 微分幾何学シンポジウム、2015 年 8 月 27 日、東京理科大学

砂田利一, 最小原理、数理の翼、京都府セミナーハウス、2015 年 8 月 16 日

Tatsuya Tate, "Quantum walks in one dimension", XXXIV Workshop on Geometric Method in Physics (招待講演), Bialowieza, Poland, 2015 年 7 月 1 日.

T.Sunada, Near quasi crystals, 「Periodic and Ergodic Spectral Problems」, Cambridge University, June 23, 2015

T.Sunada, Near Quasi Crystals, 「Geometry in History」, Strasbourg University, June 11, 2015

阿原一志, 対話型幾何ソフトウェアと自動証明 - シンデレラとキッズシンディ, 高信頼な理論と実装のための定理証明とよび定理証明器 (TPP) 2014, 2014 年 12 月 5 日, 九州大学

阿原一志, On a system allowing us to

simulate Reidemeister moves, 「トポロジーとコンピュータ」, 2014年11月14日, 東京大学

阿原一志, 「 $S^1$ 作用と慣性写像の周辺」, ワークショップ「服部セミナー」, 東京大学数理科学研究所, 2014年6月29日

T.Sunada, Standard 2D crystalline patterns and rational points in complex quadrics, 「Groups, Graphs, and Random Walks」 Cortona (Italy) June 2 - 6, 2014

砂田利一, 21世紀の数学と教育、数学教育学会、特別講演、2014年3月16日

阿原一志, 「数式処理を活用した数学教材開発について」数式処理学会招待講演 2014年1月26日

T.Sunada, Discrete Geometric Analysis, 「Discrete Mathematics and its Applications」, the Graduate School of Mathematical Sciences, the University of Tokyo, 3-8-1, Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8914, Japan, November 3 - 10, 2013.

阿原一志, 「高校のカリキュラムを踏まえた geogebra の日本語マニュアルづくりにむけて」 「GeoGebra の数学、数学教育、および統計教育での利用」統計数理研究所 2013年10月25日

②1 T.Sunada, Random walks, Diophantine Equation, and rational points on a quadric, 「Facets of Geometry」2013年6月7日ストックホルム大学(スウェーデン)

②2 阿原一志, 「2次元単体複体のホモロジー群と基本群のコンピュータ計算」CREST ワークショップ「医療画像診断と幾何学・数値解析学の接点」2013年1月18日

〔図書〕(計 2 件)

砂田利一・他, 現象数理学, 「タイル貼りの数理 ---位相的結晶学序論---」, 157~175, 明大出版会, 2014年

T.Sunada, Topological Crystallography --With a View Towards Discrete Geometric Analysis ---, Surveys and Tutorials in the Applied Mathematical Sciences, Vol. 6, Springer, 2013.

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

砂田 利一 (SUNADA Toshikazu)  
明治大学・総合数理学部・教授  
研究者番号：20022741

(2) 研究分担者

楯 辰哉 (TATE Tatsuya)  
東北大学・理学系研究科・教授  
研究者番号：00317299

樋口 雄介 (HIGUCHI Yusuke)  
昭和大学・教養部・講師  
研究者番号：20286842

阿原 一志 (AHARA Kazushi)  
明治大学・総合数理学部・教授  
研究者番号：80247147