

令和 6 年 5 月 30 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19K03628

研究課題名(和文) 格子・代数計算の応用を創出する離散点集合の研究

研究課題名(英文) study on discrete point sets to produce new applications of lattice theory and algebraic computation

研究代表者

富安 亮子 (Ryoko, Tomiyasu)

九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・教授

研究者番号：30518824

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：近年に未解決問題として提示された黄金角の方法の一般曲面・一般次元への拡張に2020年に成功し、パッキング密度が2次元で0.7, 3次元で0.38程度の点群生成を行うことを可能にした。その後は様々な点群を生成するための、微分幾何の対角化計量・偏微分方程式系の解の存在と厳密解に関わる調査を実施し、点群生成のコードを実装した。また、数論・格子基底簡約理論の応用獲得を目指す研究として、3変数正定値2次形式のZ上表現、7角数の和による表現に関わる代数的・解析的整数論の研究を行った。格子基底簡約理論についても結晶学分野における応用開発を進める機会があった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

黄金角の方法が回転体表面の形成する魅力的なパターンは一般によく知られているが、我々の研究で、その重要な性質を保ったまま、一般曲面・一般次元にも同様の点群生成を行えることが示された。数論の応用になっており、一般層への宣伝、その具体的な応用開発は、これから行う予定である。3変数正定値2次形式、7角数に関わる整数論の研究については、応用で言及されることは少ないが、粉末回折と密接な関係がある。格子基底簡約理論の方は、ab-initio indexingやその後処理の観測誤差下でのブラベー格子決定などの処理が結晶学分野の基盤として有用であることは、論文の引用数からも示されていると思われる。

研究成果の概要(英文)：We succeeded in obtaining a generalized golden angle method that is applicable to general surfaces and general dimensions, which was recently raised as an open problem by researchers. The packing densities are bounded below by about 0.7 for surfaces and 0.38 for 3D bodies. After the success, we conducted investigations on diagonalized metrics on Riemannian manifolds and the existence of solutions and construction of exact solutions of a partial differential equation system, to implement a code for point cloud generation. We also conducted research on algebraic and analytic number theory related to the representations of ternary positive definite quadratic forms on \mathbb{Z} and the representations of sums of heptagonal numbers. We also had the opportunity to develop applications of lattice basis reduction theory to several problems in crystallography.

研究分野：応用代数・数論、数理結晶学、アルゴリズム

キーワード：パッキング生成 点群生成 マルコフ理論 数の幾何 応用代数 応用数学

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ユークリッド空間における離散点配置に関わる研究は、その歴史は古いものの、近年も新しい発見がなされ、物質構造などへの応用上の観点からも様々な重要な問題が存在する分野である。特に、以下に挙げる(1) 非周期構造のモデリング、(2) データ解析における大域的最適解の保証、に関わる研究は、結晶学を含む私がよく知る物理・化学のサイエンス諸分野で需要を持つと考えられるので、これらを実施する。

特に、(1)について、球面上積分を数値的に実施するため、球面に dense に分布した点列を生成する spiral algorithm と呼ばれる方法が知られる。Vogel spiral を用いると球面に限らず様々な回転体表面で同様のことができる。本研究は、この3次元版を開発する。

また(2)について、大域的最適化およびその解の保証の需要はサイエンス分野に広く存在するが、私は、実験家との共同研究で、半正定値計画緩和(SDR)を用いることで得られる「大域的最適化」「解の一意性の保証」「全ての大域的最適解の取得」が、占有率欠損・原子種の回折データからの解析や、磁気構造解析で有効であることを2018年に発表している。サイエンス分野には位相回復問題と呼ばれる「回折データから離散点配置の各点の座標と重みを決定する」非常に需要の高い問題があるが、この開発した方法は「原子座標の候補点それぞれの重みを決定する問題」にあたる。

2. 研究の目的

本研究「格子・代数計算の応用を創出する離散点集合の研究」の開始時は特に以下の2点を主要な研究としてあげている。

- (1) **一定方向の伸縮にロバストな充填密度をもつ格子を用いた非周期的パッキングの研究:** 本研究の目的は、格子による周期的パッキング(regular packing)とは異なる、非周期的パッキングのための格子の応用を確立すること、その結果から、産業上の応用に向けた研究を実施することである。様々な方法が乱立する高次元連分数の理論研究における、新しい視点に基づく理論を提案することも本研究の目的の一つである。副産物として、(i)高次元連分数に関わる数学の精密化・改善、(ii) 様々な n 次元物体内部の密な充填を与える点列の高速生成法、が得られる。特に(ii)は、数値計算の他、非周期構造のモデリングが必要なアモルファス研究など、産業上の新たな応用につながる。
- (2) **半正定値計画緩和による離散点配置の復元問題の解の一意性に関わる研究:** 半正定値計画緩和(SDR)による離散点配置の復元問題の解の一意性に関わる研究として、私が近年サイエンス分野の研究者と実施した、占有率欠損・原子種の回折データからの解析・磁気構造解析のケースを含む、解の一意性の理論的調査を実施する。すなわち、「SDRによる解の一意性の保証はどの範囲でまで実現可能なのか?」「多数の解が生じる状況を避けられる方法は?」といった問いに答える枠組みを準備し、応用のターゲットを拡大する。

また応募時、上記の(1), (2)を中心に、数学分野における私の専門分野である代数や2次形式の数論の新たな応用数学の場を獲得することも目標に設定していた。

3. 研究の方法

(1)については研究開始当初は、既存の高次連分数の議論を用いることを考えていたが、product of linear forms を用いて議論した方がより広いケースに拡張できることが分かったため、研究途中でそちらに切り替えた。いずれにしても格子基底簡約理論・代数体の議論は予定通り用いることができ、2020年度内に研究提案時に(1)で提案したことは全て実現した。

ただ一般化の結果、微分幾何の対角化可能計量が現れ、Lamé 方程式として知られる偏微分方程式系が出てきたので、代数の研究は一段階ついたということで、2021年からは解の存在や厳密解を議論するという解析の研究にシフトチェンジしている。さらに研究期間中は、具体的な点群を得るコードの開発を実施している。

(2)のSDP緩和の応用は、2021年度までサイエンス分野の研究者を含む社会実装のための議論を行い、大域最適解が複数ある場合のグレブナ基底を用いた分解に関する研究を行ったが、担当者が個人的な理由で研究を離れ、社会実装の場がなくなってしまった。ちょうど同じタイミングで、以下の(3)に関する需要もIUCrの数理結晶学を含むサイエンス分野から発生し、こちらはSDP緩和よりさらに前の私の研究に関わっており、やはり代数・数論の応用としての側面があることから、2022年に(1)、(3)中心の研究計画に移行している。

(3) 格子基底簡約理論に関わる応用(結晶学の格子決定に関わる問題、および3変数正定値2次形式に関わる数論研究を含む):

結晶格子決定の問題は結晶学では ab-initio indexing として知られ、回折・散乱データにおける各反射のミラー指数と結晶格子パラメータの決定に該当する。それらのパラメータ決定だけでなく、観測誤差下におけるブラベー格子決定や、格子の同一性判定の効率の良い方法が必要で、それ以外の前・後処理においても、また別途、数理の応用を実施できる。私は若い頃にこの分野で全般的に成果を出したが、その結果を電子線後方散乱回折やTEM画像に適用する話、また、近年の生成AIを用いた結晶構造予測研究の応用に関わる話があった。特に格子簡約基底の理論が応用できて、代数分野の応用にもなるが、詳しい人がサイエンスや応用数学の分野に少ない状況がある。

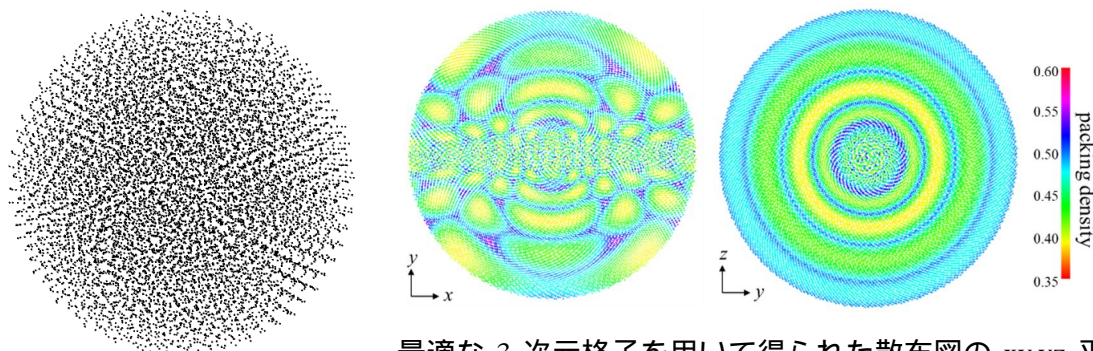
また粉末回折の方は、私の専門分野の一つである2次形式3変数に関わる数論の問題と密接に関わっている。これについても本報告書に挙げた全ての研究と同様、具体的な応用があり、かつ厳密な数学の証明に関わる議論を行った。

4. 研究成果

まず特記事項を述べておくと、2020—2021年の九大海外研修 SENTAN-Q の実施と、上述の共同研究者のポスト異動に伴い、若干の研究計画の変更があった。特に(1)の研究について、2020年の1年間、九大留学生が参加し論文の共著者になっている。また2020-2022年のコロナ禍と、2022年9月—2023年1月に育産休を取得したため、出張計画に影響が出た。Web上でも登録した研究成果の論文等とは、分かりやすさのため、関係するものは以下にも再掲している。

(1) 一定方向の伸縮にロバストな充填密度をもつ格子を用いた非周期的パッキングの研究:

近年に未解決問題として提示された黄金角の方法の一般曲面・一般次元への拡張に2020年に成功し、パッキング密度が2次元で0.7, 3次元で0.38程度の点群生成を行うことを可能にした。以下に比較のため、研究提案時に作成した3次元のパッキングの図と、今回の改善によって得られた散布図を示す。



最適な3次元格子を用いて得られた散布図の xy, yz 平面における断面図。この手法では局所的なパッキング密度が求められるのでその値で色付けした。
 研究提案時(用いた3次元格子は最適なものでない)

一般化に成功した後は様々な点群を生成するための、微分幾何の対角化計量・偏微分方程式系の解の存在と厳密解に関わる調査を実施し、点群生成のコードを実装した。黄金角の方法が回転体表面の形成する魅力的なパターンは一般によく知られているが、我々の研究で、その重要な性質を保ったまま、一般曲面・一般次元にも同様の点群生成を行えることが示された。数論の応用になっており、今後は一般層への宣伝、その具体的な応用開発を予定している。

本研究については2020年の1年間参加した学生との共著論文[1]がarxivに出ているがジャーナルの手違い等もあって査読に時間がかかっている。先日ようやく返事が来たが好意的なので近々受理されると思われる。2021年より特許出願中である。また2024年日本数学会年会, ANZIAM 2024, 大阪大学 談話会, JCCA-DMIA-2023, 2022年応用数理学学会年会, JST 未来社会創造事業 新技術説明会, 研究集会「数論とエルゴード理論」, 筑波大セミナー, 第一部会シンポジウム, HKU Number Theory Days@香港大学, SNU-KYUSHU Workshop in Number Theory, 九州代数的整数論 2021 春 hybridなどで研究発表を実施した。啓蒙活動としてサイエンス社数理科学で日本語記事を執筆している。

(2) 半正定値計画緩和による離散点配置の復元問題の解の一意性に関わる研究:

本研究は2018年に論文が出た結果の、応用の需要に基づいて実施していたため、共同研究者側の事情もあって研究期間中に活発な活動を続けることが難しくなりましたが、研究期間中に啓蒙活動としてサイエンス社数理科学で日本語の記事を執筆し、最適化の本の翻訳を企画・出版している。また、ICIAM 2023 Tokyo, 25th IUCr Congress, La trobe seminar@九州大学, 2019年日本結晶学会年会などで研究発表を実施した。

最適化・代数幾何の融合、サイエンス分野におけるニーズが背景にあるが、全てのコミュニティが同じ学会でない状況と、数学研究は研究結果が得られてから反応が得られるまでに時間を要するという状況があることから、本件は、複数のコミュニティの相互理解を目的として今後も継続する予定である。

(3) 格子基底簡約理論に関わる応用(結晶学の格子決定に関わる問題, および3変数正

定値 2 次形式に関わる数論研究を含む):

以下のそれぞれについて得られた研究の概要を述べる .

(3-a) 3 変数正定値 2 次形式, 7 画数に関わる数論の研究

数論のジャーナルに掲載された数学の Kaplansky 予想に関わる結果については代数セミナー@九州大学, 整数論・保型形式セミナー@大阪大学, Conference on the Arithmetic Theory of Quadratic Forms", Seoul National University において研究発表を実施した . ソウル大で講演を聞いた Jangwon Ju 氏が, 私の論文の計算結果をもとに Kaplansky 予想の反例を見つけたが, 私の論文では Kaplansky 予想の別の側面 (無限系列) の存在の制約を議論しており, その側面ではまだ未解決の部分も残っている . また本件は, 粉末回折として知られる解析にも具体的な応用があり, サイエンス分野向けでもすでに過去に異なる内容の 2 本の記事を出版し, 分野の基盤として引用されている話題になる .

7 画数の和に関する研究は, 香港大の Ben Kane 氏と彼の学生との共同研究である . この shifted lattice の modular form の話も粉末回折に応用がある . こういった数論の応用は, 今後コミュニティを育てる必要もある .

(3-b) 格子基底簡約理論の応用(観測誤差下でのブラベー格子決定, 格子の同一性判定等)

私は, 過去に(3-c)の研究に関連してこの項目に関わる研究を行ったが, 近年の結晶構造予測 (生成 AI) において関連した需要が生じたため, 未発表であった 2 次元格子の場合の結果, 整数論の関連するあまり他分野で知られていない話題, 3 次元格子用コードの整備 (特にユーザビリティの改善) をまとめた記事[2]を発表した . この件については研究を実施したものの, 研究期間中に執筆が終わらなかった記事もある . 東北大学 AIMR セミナー, satellite of ECM, MIF++ seminar@University of Liverpool, IOCC2020, MaThCryst satellite meeting (ECM32), 2020 年日本数学会特別企画講演で研究発表を実施した . 日本語では一般向けにサイエンス社数理解科学で紹介した .

(3-c) Ab-initio indexing の電子線後方散乱回折 (EBSD), TEM 画像への適用

本研究は, 過去の私の ab-initio indexing における成果に基づいて他分野から持ち込まれた問題で, EBSD については論文とコードの公開を行った . TEM でも, 難しいケースとして依頼のあった ab-initio indexing の解析には成功したが, 今のところまだ論文は出ていない . 前者について, 研究集会「結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析」@九州大学などで研究発表を実施した . また, 結晶学会誌でもトポグラフの応用として CONOGRAPH の紹介を行った .

・ 論文 (査読有)

*著者順は alphabetical order による .

- [1] S. E. Graiff-Zurita, R. Oishi-Tomiyasu, Packing theory derived from phyllotaxis and products of linear forms, submitted (arxiv: <https://arxiv.org/abs/2106.12333>).
- [2] R. Oishi-Tomiyasu, "Ideas of lattice-basis reduction theory for error-stable Bravais lattice determination and ab-initio indexing", accepted by a special issue "Crystal lattices", Acta. Cryst. A. (arxiv: <https://arxiv.org/abs/2312.07909>)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Kamaraj, R., Kane, B. & Oishi-Tomiyasu, R.	4. 巻 249
2. 論文標題 Universal sums of generalized heptagonal numbers	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Number Theory	6. 最初と最後の頁 500--536
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jnt.2023.02.003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Oishi-Tomiyasu, R., Tanaka, T. & Nakagawa	4. 巻 54
2. 論文標題 Distribution rules of systematic absences and generalized de Wolff figures of merit applied to electron backscatter diffraction ab initio indexing	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Crystallography	6. 最初と最後の頁 624-635
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1107/S1600576721002120	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ryoko Oishi-Tomiyasu, Tomohito Tanaka, Jun'ichi Nakagawa	4. 巻 54 (2)
2. 論文標題 Distribution rules of systematic absences and generalized de Wolff figures of merit applied to electron backscatter diffraction ab initio indexing	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Crystallography	6. 最初と最後の頁 624--635
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1107/S1600576721002120	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Ryoko Oishi-Tomiyasu	4. 巻 62
2. 論文標題 Mathematical Tools that Connect Different Indexing Analyses	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings, IOCC 2020	6. 最初と最後の頁 1--8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/proceedings2020062008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 R. Oishi-Tomiyasu	4. 巻 16
2. 論文標題 On positive-definite ternary quadratic forms with the same representations over Z	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Int. J. Number Theory	6. 最初と最後の頁 1493-1534
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1793042120500785	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計19件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 黄金角の方法の一般化による多様体のメッシュ・パターン生成法
3. 学会等名 日本応用数理学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoko Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 Reduction theory for unit-cell parameters containing observation errors
3. 学会等名 Satellite of the 33rd European Crystallographic Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoko Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 Packing theory derived from phyllotaxis and products of linear forms
3. 学会等名 HKU Number Theory Days 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R, Oishi-Tomiyasu, K. Tomiyasu, M. Hagihala
2. 発表標題 Global optimization of magnetic structure analysis by semidefinite relaxation method (SDR)
3. 学会等名 25th IUCr Congress (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 富安 亮子
2. 発表標題 植物に由来する新しいパッキング・パターン生成法
3. 学会等名 第一部会シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryoko Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 Mathematical Tools that Connect Different Indexing Analyses
3. 学会等名 The 2nd International Online Conference on Crystals (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 富安 (大石) 亮子
2. 発表標題 数理結晶学における格子の問題 Lattice
3. 学会等名 日本数学会 2020年度秋季総合分科会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 富安 (大石) 亮子
2. 発表標題 数論の実社会への応用について
3. 学会等名 九州代数的整数論2021春 (KANT2021) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 Rigorous global optimization for crystal/magnetic structure analysis
3. 学会等名 MathCryst satellite meeting (ECM32) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安 亮子
2. 発表標題 数理結晶学における格子の問題
3. 学会等名 日本数学会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 バラ曲線とフィボナッチ
3. 学会等名 サイエンスカフェ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 A class of semidefinite programs in crystal structure analysis
3. 学会等名 La trobe seminar (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 2次形式論の数理結晶学への応用について
3. 学会等名 代数セミナー
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 同じZ上表現を持つ正定値3変数2次形式に関する Kaplansky 予想と関連する結果について
3. 学会等名 整数論・保型形式セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子 & 富安啓輔
2. 発表標題 SDP 緩和に基づく厳密大域的最適化の磁気・結晶構造解析への適用
3. 学会等名 日本結晶学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 Conographを用いた指数付けの方法
3. 学会等名 2019年度初級者向けZ-Code講習会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 EBSD(電子線後方回折) 菊池パターンのab-initio indexing
3. 学会等名 結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富安亮子
2. 発表標題 Conographを用いた指数付けの方法
3. 学会等名 2019年度中級者向けZ-Code講習会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Oishi-Tomiyasu
2. 発表標題 Rigorous global optimization for crystal/magnetic structure analysis
3. 学会等名 MathCryst satellite meeting (ECM32) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計3件

1. 著者名 J. A. De Loera, R. Hemmecke, M. Koeppel (著), 佐久間 雅, 富安 亮子, 八森 正泰, 脇 克志 (翻訳)	4. 発行年 2023年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 458
3. 書名 代数的・幾何的アプローチによる離散最適化入門	

1. 著者名 橋本幸士, 田中貴浩, 藤井啓祐, 細谷暁夫, 米谷民明, 白水徹也, 山崎雅人, 杉本茂樹, 西岡辰磨, 小澤正直, 富安亮子	4. 発行年 2024年
2. 出版社 サイエンス社	5. 総ページ数 81
3. 書名 数理科学 2024年1月号「重力と量子力学」: 研究室の窓	

1. 著者名 岩田寛, 高松瑞代, 小林佑輔, 寒野善博, 富安亮子, 中務佑治, 佐藤一宏, 山崎和俊, 山下真, S.Safarina, T.J.Mullin, 森口聡子, 丹下基生, 戸田正人	4. 発行年 2019年
2. 出版社 サイエンス社	5. 総ページ数 81
3. 書名 数理科学 2019年11月号「最適化の数理」	

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 パターン生成方法、パターン生成装置、及びパターン生成プログラム	発明者 富安亮子	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2021-103968	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

・ Instructions for EBSD-CONOGRAPH (CUI version)
<http://ebds-conograph.osdn.jp/InstructionsEBSDConograph.html>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------