様　式　C－１９、F－１９－１、Z－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　２ 年　６ 月 ３０ 日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：研究活動スタート支援
研究期間：2018～2019
課題番号：１８H０６４７８・１９K２１５４３

研究課題名（和文）自由境界問題における次元縮約理論の開発と応用

研究課題名（英文）Dimension reduction theories of free boundary problems: development and applications

研究代表者
白坂　将（Shirasaka, Sho）

大阪大学・情報科学研究科・助教

研究者番号：４０８２８１７５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,100,000円

研究成果の概要（和文）：　異なる法則の支配する相の境界が移動するような問題は自由境界問題と呼ばれ、流体構造連成系といった工学的・生物学的に重要なシステムに広くみられる。実現象はその典型的なふるまいが低次元の空間に制限されることが多く、この低次元の骨格を活用する次元縮約理論は、複雑な現象の解析を簡素化する強力な手段として発展してきた。
　本研究課題では、自由境界問題としてモデル化されるような複雑な現象の解析・理解・制御を目的として、次元縮約理論を自由境界問題に適用可能な形に拡張することを試みた。研究成果として、リズム現象の次元縮約理論や、データ駆動型の次元縮約手法の自由境界問題への拡張についての準備的な結果を得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義
　自由境界問題は、現実的な工学システムに広く現れる流体構造連成問題を記述するだけでなく、ヒトの感染症の８割以上に関与するといわれるバイオフィルム形成、死因の３割を占める循環器系疾患など、医学的課題にも関連する重要な対象である。自由境界問題は一般に複雑な非線形無限次元システムとなり、直接解析することは非常に困難であった。
　本研究成果は、このような自由境界問題を低次元モデルに縮約することで、その簡素な解析を促進するものである。本成果を発展させることで、強い薬剤に頼らないバイオフィルムの形成制御や、動脈硬化の早期発見・瘤の退縮を達成するための実用的なデータ駆動制御手法の開発につながると考えられる。

研究成果の概要（英文）：Free boundary problems, in which multiple phases governed by distinct evolutionary laws interact at moving interfaces, are widely found in engineering and biology. In many real-world systems, it is ubiquitously seen that their typical dynamic behaviors are confined to low-dimensional attractors. Dimension reduction theories make use of such low-dimensional skeletons of the dynamic processes. They have been developed as powerful tools that allow us to simplify analyses of complex systems.
In this project, it is attempted that the dimension reduction theories are extended to the free boundary problems for the purpose of facilitating the analysis, understanding and control of complex phenomena that can be modeled as free boundary problems. Some preliminary results on extension of a dimension reduction theory for rhythmic phenomena and a data-driven dimension reduction method to the free boundary problems are obtained.

研究分野：非線形力学系

キーワード：非線形力学系　自由境界問題　次元縮約理論　動的モード分解

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

■　　研究開始当初の背景：

葛飾北斎の富嶽三十六景にみられる砕波や雪の結晶成長など、異なる法則の支配する相の間の境界面が変動する問題は**自由境界問題**とよばれ、自然科学・工学・経済学など幅広い応用をもつ[1]。特に、柔らかな生体組織と流体との連成といった生物システムにみられる複雑な自由境界問題は、生物学における新しい数理的手法の発展を促進している[2,3]。自由境界問題は偏微分方程式系として記述される無限次元の問題であり、各相を記述するシステムが線形であるような場合でも非線形系としてふるまう。自由境界問題の現象解析として、分岐（系のふるまいの定性的変化）やパターン形成に関する定性的な問題は精力的に取り組まれているが、具体的なシステムの定量性を考慮し、簡素な解析を可能にするような枠組みの構築には至っていない。自由境界問題はヒトの感染症の８割以上に関与するといわれるバイオフィルム形成[4]や、世界全体の死因の３１％を占める循環器系疾患[5]とも密接にかかわっており[2]、こうした枠組みを開発することは医療といった社会的課題の解決にも貢献すると考えられる。

ニューロンやタンパク質といった機能的素子の典型的ふるまいや、このような素子の集団が示す協同的なふるまいが、エネルギーや物質の流出入といった散逸性の効果により低次元の空間に制限されることは広く観察される[6-9]。複雑な非線形ダイナミクスからこのような低次元の骨組みを抽出し、シンプルな数理モデルを構築する体系的な手法として**次元縮約理論**がある。次元縮約理論は、対象とする動的ふるまいのクラスに応じて、中心多様体縮約[8]や位相縮約[10]、inertial form の構成[11]などさまざまに発展してきた。また、近年では Koopman 作用素理論に基づく時系列データ駆動型の次元縮約モデリング手法（動的モード分解）も発展している[12,13]。これらの手法は反応拡散系や流体システムといった無限次元系に応用されているが、中心多様体に関するもの[14]を除いて、自由境界問題における取り組みは未発展である。

これらのことから、どのような条件下で無限次元の自由境界問題が有限次元縮約モデルとして記述可能か、数理モデルや時系列データから縮約モデルをつくる具体的手続きはどのようなものか、これらの成果は複雑な生体システムにどのように応用できるか、を核心的問いとして本研究課題を開始した。

■　　着想に至った経緯：

本研究課題申請の前年度、報告者らはデータ駆動型の次元縮約手法を与える動的モード分解の血流動態実計測データへの応用に取り組んでいた。血流動態は典型的な自由境界問題であるが、実データを解析するにあたって、相界面に関わる時系列データの扱いについての問題から、モード分解結果の解釈性及び信頼性といった議論をするための基盤が不十分であった。そして、自由境界問題における動的モード分解については、可解系のようなシステムを対象に理論的な基礎付けを与えるべきであるという認識に至った。他方で、報告者は以前より非線形リズム現象に対する次元縮約手法である位相縮約の発展および応用に取り組んでおり、また、報告者の現所属研究室の構成員は無限次元系の有限次元表現可能性についての基礎付けを与える理論を専門としていた。これらについても、自由境界問題における議論は未発展であるように思われた。自由境界問題は、前章に挙げたもの以外にも腫瘍の成長や創傷治癒といった医療課題に関わる重要なテーマであり、その簡素な解析を可能とする次元縮約理論の発展は大きな社会的意義を持つと考えたため、本研究課題の着想に至った。

【参考文献】

1) J. Crank, Oxford University Press, (1984); 2) A. Friedman, Phil. Trans. R. Soc. A, **373**, (2014); 3) Y. Du and Z. G. Lin, SIAM J Math. Anal. **42**, (2010); 4) NIH, PA-03-047, (2002); 5) WHO, http://www.who.int/en/news-room/fact-sheets/detail/cardiovascular-diseases-(cvds); 6) T. B. Kepler *et al.*, Biol. Cybern. **66**, (1992); 7) Y. Togashi and A. Mikhailov, PNAS **104**, (2007); 8) H. Haken, Springer, (2004); 9) M. C. Cross and P. C. Hohenburg, Rev. Mod. Phys. **65**, (1993); 10) Y. Kuramoto, Dover Publications, (2003); 11) R. Temam, Springer, (1997); 12) M. Budisic *et al.*, Chaos **22**, (2012); 13) K. Taira *et al.*, AIAA J. **55**, (2017); 14) J. Escher and G. Simonett, J. Diff. Equ. **143**, (1998).

２．研究の目的

自由境界問題に関して、上に述べた核心的問いに答えるため、本研究の目的を以下のように設定した。

[a] 典型的ふるまい（アトラクタ）の有限次元性の判定、および次元の評価手法の確立

従来の偏微分方程式系のアトラクタの有限次元性評価には、スペクトルギャップ性を示すもの [11]、系が縮小写像のコンパクト摂動で記述されることを示すもの [15]といった理論的手法、リアプノフベクトルの双曲的分離を評価する数値的手法 [16]などが用いられている。これらの手法の応用・拡張として自由境界問題のアトラクタの次元の有限性、および具体的な値を評価する手法を開発する。

[b] 数理モデルからの次元縮約モデル構築手法の確立

リズム現象に関する次元縮約の枠組みである位相縮約理論を自由境界問題に拡張する。位相縮約モデルを用いて、周期的入力に対する同期現象などを簡素に解析できるかどうか調べることで、その有効性・妥当性を検証する。[a]でアトラクタの有限次元性が示された無限次元系に対しては、有限次元縮約モデルが構成できることが期待される。この具体的構成に関する理論的 [17]・数値的 [18]取り組みを自由境界問題に対して拡張する。縮約モデルから分岐ダイアグラムを再構成できるか [18]、などを調べることでその有効性を評価する。

[c] 時系列データからの次元縮約モデル構築についての検討

データ駆動型の次元縮約モデリング手法としての発展が期待される、動的モード分解 [12,13]の自由境界問題への応用にあたって、時間発展する相境界面がまたぐような空間上の点から得られる時系列データの扱いはどのようにすればよいか、といった問題が生じる。自由境界問題の力学的性質を反映したモード分解結果を与えるには、どのような観測の下での時系列を扱うことが適切か、を明らかにする。

[d] 生体システムにおける次元縮約理論の応用

具体的な生体システムモデルについて次元縮約モデルを構成し、その有用性を明らかにする。循環器系疾患やバイオフィルム形成をモデル化した自由境界問題を対象に、次元縮約モデルを用いたその制御手法を提案し、応用する。

【参考文献】

15) M. Efendiev *et al.*, C. R. Acad. Sci. Paris, **330**, (2000); 16) H.-l. Yang, *et al.*, Phys. Rev. Lett., **102**, (2009); 17) Y. Morita, J. Dyn. Diff. Equ., **2**, (1990); 18) M. S. Jolly *et al.*, Physica D, **44**, (1990).

３．研究の方法

ここでは、本課題の遂行にあたって実質的な進捗が得られた研究目的についてのみ研究方法を報告する。

[b] 数理モデルからの次元縮約モデル構築手法の確立

位相縮約理論について、縮約モデルの標準的構築手法である随伴法 [19]を自由境界問題に拡張する。導出した随伴法の妥当性検証のためには数値計算プログラムの実装が必要であるが、反応拡散系や流体システムといった無限次元システムにおいては、単相の場合であってもしばしばその境界条件の扱いが煩雑となる [20]ため、これを簡便に扱う手法を開発する。随伴法の妥当性を検証したのち、構築した位相縮約モデルを用いて、同期現象を簡素に解析できるかどうか調べることで、その有効性・妥当性を検証する。

[c] 時系列データからの次元縮約モデル構築についての検討

時間発展する相界面がまたぐような空間上の点から得られる時系列データの適切な扱いを考えるにあたり、Stefan 問題といった可解系、自由境界問題を固定境界問題に変形する手法 [21]によって固定境界問題に帰着された系、標準形を簡便に計算でき、分岐点近傍で時間発展の特性が良く理解される系、などを対象にして、動的モード分解により得られるスペクトル分解が理論的に妥当な結果を与えているかどうかを、さまざまな観測時系列取得方法について調べる。この結果から、理論的に妥当な結果を与える観測時系列の取得方法を抽出し、さらにその観測時系列を用いた動的モード分解が、背景にある Koopman 作用素理論の視点からも理論的に妥当であることを示す。

【参考文献】

19) G. B. Ermentrout and D. H. Terman, Springer, (2010); 20) Y. Kawamura and H. Nakao, Chaos, **23**, (2013); 21) J. Pruss and G. Simonett, Springer, (2016).

４．研究成果

下記の内容については、課題を解決次第、その成果を国際論文誌等へ投稿する予定である。

[b] 数理モデルからの次元縮約モデル構築手法の確立

自由境界問題における随伴方程式を導出し、そこから得られた位相応答特性を用いて、安定な周期ダイナミクスを示す Stefan 問題の変種間における同期ダイナミクスを予測することができた。しかしながら、境界条件の数値的扱いの煩雑さや、計算機資源の効率的な利用などに課題がある。また、同期ダイナミクスを予測した Stefan 問題の変種について、Stefan 系間の相互作用は物理的な自然さを考慮していないものとなっている。随伴方程式のより簡素な数値解析方法を導入し、自然な物理的相互作用をする自由境界問題を扱うことで、自然現象の解析手法としての位相縮約理論の説得力を高めていくことが課題となっている。

[c] 時系列データからの次元縮約モデル構築についての検討

可解の Stefan 問題、および固定境界問題への変形が容易なレイリー・ベナール系の変種のダイナミクスを数値実装した。後者については分岐点近傍のダイナミクスを考えることで Koopman 作用素のスペクトルを評価した。これらの系に対して、動的モード分解により得られるスペクトルが、理論的に与えられる Koopman 作用素のスペクトルをよく近似するような観測時系列取得法を特定することができた。しかしながら、このような観測時系列取得法の理論的妥当性や、その適用範囲を示すことが課題として残っている。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計0件

〔学会発表〕　計0件

〔図書〕　計1件

１．著者名	４．発行年
Alexandre Mauroy, Igor Mezic, Yoshihiko Susuki	2020年
２．出版社	５．総ページ数
Springer International Publishing	556
３．書名	
The Koopman Operator in Systems and Control	

〔産業財産権〕

〔その他〕

白坂　将(Sho Shirasaka)
https://sites.google.com/site/shoshirasakajp/home
大阪大学　研究者総覧　白坂将
http://www.dma.jim.osaka-u.ac.jp/view?u=10009174

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