

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 9 日現在

機関番号：17104

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800082

研究課題名(和文) デザイン理論によるエネルギー最小化構造の総合的研究

研究課題名(英文) Comprehensive research on minimum energy structures by design theory

研究代表者

田上 真 (Tagami, Makoto)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・准教授

研究者番号：50380671

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：代数的組合せ論のデザイン理論的観点から、エネルギー最小化構造の探索を行った。ユークリッド空間の中の有限点配置でモーメント一定という条件の下、多くのポテンシャル関数に対して、エネルギーを最小にする構造の探索をするプログラムを作成した。そのプログラムを用いて、特に平面上で、エネルギー最小化構造のパターンを観察した。球面上の調和指数デザインの有限版を、符号理論でよく研究されているハミングスキームと呼ばれる空間上で考察し、その構成、分類を行った。

研究成果の概要(英文)：From the viewpoint of design theory in algebraic combinatorics, we carried out a search for minimum energy structures. Under the assumption of having the fixed moment, we constructed a computer program to make a search for distributions of finite points in Euclidean space which minimizes the energy for many kinds of potential functions. Using the program, we observed a pattern for the minimum energy structures on the plane. We considered the finite version for spherical designs of harmonic index  $t$  in the space, which is called Hamming scheme and studied well in coding theory. In particular, we gave the constructions and the classifications for designs of harmonic index  $t$  in Hamming scheme.

研究分野：代数的組合せ論

キーワード：デザイン エネルギー最小化構造 調和指数デザイン ハミングスキーム

### 1. 研究開始当初の背景

21世紀に入り、Sphere Packing 問題の分野で大きなブレイクスルーがあった。その内二つは代数的組合せ論の中の符号とデザインの相互間研究に強力な道具を与えるデルサル理論と呼ばれる方法を用いており、その観点から、デザイン理論とエネルギー最小化構造の関係が垣間見られていた。研究開始当初は、本研究課題の代表者らにより、ユークリッドデザインとポテンシャルエネルギー最小化との関係の研究、金属クラスター構造解析へのユークリッドデザインの応用、Mackay 結晶の安定構造の群論的研究などが行われ、実際に材料科学へのデザイン理論の応用が考えだされてきており、代数的組合せ論による材料科学への具体的応用のさらなる可能性が期待されていた。

### 2. 研究の目的

球面デザインは球面上の空間への組合せデザインの自然な拡張として定義され、球面全体を近似する良い有限部分集合として、主に代数的組合せ論の枠組みで研究が行われてきた。しかし近年、球面デザインによるポテンシャルエネルギー最小化の研究が Cohn - Kumar らを中心に盛んに行われ始めてきており、デザイン理論の材料科学への応用が期待され始めていた。エネルギー最小幾何構造解析は数学に限らず、数理物理、材料科学など、多くの他分野においても重要な研究テーマの一つであり、正多面体、準正多面体、格子など、一般的に有名な幾何構造は結晶格子や金属クラスター構造解析などで、実際すでに用いられているが、球面デザインは比較的新しい概念である為、未だその構造は十分に活用されているとは言えなかった。本研究の目的はデザイン理論によるエネルギー最小化構造の探索と調査にあり、さらにエネルギー最小化の観点からのデザイン理論の研究などを行い、相互間の総合的研究を行うことにある。

### 3. 研究の方法

(1) 球面はコンパクト空間であるため、有限点配置のエネルギーを距離を用いて自然に定義出来る。一方、ユークリッド空間は有限点配置を考えると、そこに現れる距離は無限に大きく出来るので、エネルギーを考えることが難しくなる。本研究ではユークリッド空間においても、有限点配置を考えるが、それらの全体の Moment は一定と言う条件をつける。このことにより、距離は無限に離れることはできない。この問題設定の下、UOC の候補となる例として Completely monotone ポテンシャル関数全てに対して、エネルギーを最小にするものをコンピュータ計算により構成する。

(2) Delsarte 理論はそれぞれの空間における調和関数を用いたデザインの定式化がある。

例えば、球面であればそれらの定式化は Gegenbauer 多項式で与えられ、ハミングスキームであれば、Krawtchouk 多項式で与えられる。調和関数との関係は加法公式と呼ばれ、その加法公式により、デザインとエネルギー最小化との関係が明らかになる。調和関数を用いることにより、エネルギー最小化構造の調査、探索を行う。

(3) Delsarte による符号とデザインに対するアソシエーションスキームの枠組みでの研究ではアソシエーションスキーム上の調和解析及び、線形計画法が主な道具として、用いられている。近年では Schrijver らの仕事により、線形計画法の部分を半正定値計画法に置き換えることにより、さらに精密な符号、デザインに対する研究が行うことができることが分かっている。エネルギー最小化構造の研究にも、Schrijver の方法を適用する。

### 4. 研究成果

(1) ユークリッド空間におけるエネルギー最小化構造の候補としての Universally optimal code の定式化の研究を行い、有限点集合の全体のモーメント一定という条件の下、多くのポテンシャル関数に対して、エネルギー最小化構造を与えるプログラムを構成した。Universally optimal code (UOC) とは多くのポテンシャル関数に対して、そのエネルギーを最小にする構造を言い、エネルギーの観点から非常にまれな幾何構造になっている。球面上では UOC の探索シミュレーションは Cohn らによりすでに実行されていたが、ユークリッド空間ではまだなされてなかった。特に平面においては、s-距離集合の研究でよく現れる三角格子の一部がエネルギー最小化構造の候補として現れ、頂点数が増えていった時にある種のパターンがあることが観察された。

(2) 東京大学の藤田誠氏、藤田大士氏らによる「セレンフェン配位子を用いた巨大  $MnL_{2n}$  錯体の自己集合」の研究において、得られた unexpected 構造が Glodtberg-Coxeter Construction (GCC) を正 8 面体に適用して得られる構造の類になっていることが藤田大士氏との議論により分かった。また、藤田大士氏により作成されたコンピュータプログラムで、結合された頂点間が等距離という条件の下、正 8 面体に GCC を適応して、球面上に実現できる構造の中で、実際に合成されたものと、球面デザインの関係が観察された。

(3) 離散空間上の有限点配置のエネルギー最小化構造の候補として、ハミングスキーム上の調和指数 t-デザインの研究を行った。この研究は九州工業大学大学院修士の堀亮太氏との共同研究である。ハミングスキーム上の調和指数 t-デザインを Krawtchouk 多項式の言葉で定式化し、Delsarte 理論を用いて、

頂点数に対して自然な下界である Fisher 型不等式を与えた。一方で、Krawtchouk 多項式による定式化によって、与えられる頂点数に関する線形計画問題を与え、線形計画境界式を計算した (Delsarte 理論の標準的方法)。上記の Fisher 型不等式において、等号が成り立つ時、そのデザインは tight 調和指数 t-デザインと言う。Delsarte 理論において、この Fisher 型不等式で等号が成立する tight t-デザインの分類は重要な問題の一つである。実際、球面においては tight t-デザインは UOC になることが知られており、エネルギー最小化構造として、重要なものであることが分かっている。本研究において、Fisher 型不等式の整数条件を考えることにより、多くの場合に tight 調和指数 t-デザインの非存在を証明した。また、いくつかの tight 調和指数 t-design の一般的構成法を与えた。しかし、今回与えたこれらの構成法はまだ不十分で、もっと多くの構成法を与える必要がある。

通常の組合せデザインはジョンソンスキーム上のデザインと解釈され、ハミングスキーム上のデザインは直交配列という組合せ構造と対応していることが知られている。しかし、一般に、アソシエーションスキーム上の調和指数デザインがどんな組合せ構造と対応しているかはいまだ分かっていなかった。本研究で、ハミングスキーム上の調和指数デザインの組合せ構造の一つの特徴づけを与えることができた。この特徴づけにより、調和指数デザインの具体的構成を与える一つの指針を与えることができるのではないかと期待している。

(4) グラフが与えられた時、グラフの距離をできるだけ保存したまま、ユークリッド空間に埋め込む方法を考察するグラフの Euclidean 歪みについての研究を行った。この研究は歪みをエネルギーと考え、歪みを最小化する構造 (安定構造) を決定することを目的としている。この研究は九州工業大学大学院修士の林美香氏との共同研究である。Linial-London-Rabinovic (1995) らはグラフの最小ユークリッド歪みを求める問題のある半正定値計画問題を解くことへ帰着させ、いくつかのグラフの無限系列で最小ユークリッド歪みが決定されていた。また、この結果を用いて、多くの研究者が距離正則グラフや Generalized polygon などのグラフで最小ユークリッド歪みの研究が行われるなど、グラフ理論でホットな研究対象となっている。本研究では、小さい頂点数のグラフに対して、具体的に半正定値計画問題を設定し、Matlab の Sedumi を用いて解くことで、最小ユークリッド歪みを与える点配置を数値的 (近似的) に求め、それを用いて真の解を幾何的に推測し、半正定値計画問題の最適解を弱双対定理を用いて求めた。これにより、多くの小さい頂点数のグラフの最小ユークリ

ッド歪みを与える点配置を決定した。この結果により、多くの研究者が考えていた「最小ユークリッド歪みを与える配置に自由度はない」という推察を反証する点配置を求めることができ、グラフのユークリッド歪みの研究に新しい感覚を与えることができた。

## 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 0 件)

[学会発表](計 2 件)

Makoto Tagami, On the classification of Mackay crystals by Group action, International workshop on topology/geometry-driven Electron Systems, Nagoya University(愛知県名古屋), 2015 年 12 月 12 日

Makoto Tagami, Finite upper half planes and Ramanujan graphs, The 3<sup>rd</sup> Institute of Mathematical Statistics, Asia Pacific Rim Meeting, Taipei(台湾), 2014 年 6 月 30 日

[図書](計 0 件)

[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

<https://sites.google.com/site/tagami77/>

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

田上 真 (TAGAMI, Makoto)

九州工業大学・大学院情報工学研究院・准教授

研究者番号: 50380671

(2)研究分担者 ( )

研究者番号：

(3)連携研究者 ( )

研究者番号：

(4)研究協力者 ( )