理学における代数的手法

石塚裕大 (数学・数理解析専攻)
太田洋輝 (物理学・宇宙物理学専攻)
林重彦 (化学専攻)

2019 年 4 月 12 日

内容

メイントピック

グレブナー基底を用いた計算や、類するアルゴリズム

アプローチできる問題

- 与えられた多項式（微分、差分）方程式系に解はあるか？
- 方程式系の解において、ある変数だけに着目したとき、どのような方程式を満たす必要があるか？
- ある数理モデルで、ある変数のみが得られるとき、もとのパラメータを一意的に推定できるか？ etc.

代数方程式系の例

具体例：代数方程式系

次の連立方程式の $(x, y, z) = (1, 2, 3)$ 以外の解を求めよ。

$$
\begin{aligned}
x^2 + y + z &= 6 \\
x + y^2 + z &= 8 \\
x + y + z^2 &= 12
\end{aligned}
$$

解答

z は次の方程式に従う：

$$z^7 + 3z^6 - 39z^5 - 113z^4 + 494z^3 + 1394z^2 - 2044z - 5648 = 0$$

また x, y は次のように z から一意的に復元される。

$$
\begin{aligned}
x &= -\frac{1}{4}z^6 + \frac{37}{4}z^4 - z^3 - 107z^2 + 11z + 391, \\
y &= \frac{1}{4}z^6 - \frac{37}{4}z^4 + z^3 + 106z^2 - 11z - 379.
\end{aligned}
$$

微分方程式系の例

具体例：Compartment model の identifiability

次の微分方程式系を考える：

$$x_1' = -k_{1,2}x_1 + k_{2,1}x_2 - \frac{V_e x_1}{k_e + x_1}$$
$$x_2' = k_{1,2}x_1 - k_{2,1}x_2$$

さらに次を仮定：

- $k_e = 7$ はわかっている
- 観測できるのは x_1（と、近似的にその微分や二階微分）のみ

このとき、$k_{1,2}, k_{2,1}, V_e$ は特定できるか？

微分方程式での例

グレブナー基底を使うと、x_1 は次の方程式に従うとわかる：

$$x_1''(x_1 + k_e)^2 + [\mathbf{k_{1,2}} + \mathbf{k_{2,1}}]x_1'(x_1 + k_e)^2 + [\mathbf{V_e}]x_1' k_e + [\mathbf{k_{2,1} V_e}]x_1(x_1 + k_e) = 0$$

$\rightarrow x_1, x_1', x_1''$ がそれぞれある三時点で得られると、

$$k_{1,2} + k_{2,1}, \quad V_e, \quad k_{2,1} V_e$$

に関する線形方程式が出る $\rightarrow$ 一般的には特定可能！

註

より複雑な方程式系からでも、理論的には同様の計算ができる。

目的と目標

目的

- グレブナー基底等の代数的手法について基礎と利用法を学ぶ
  - グレブナー基底の用語や理論の学習
  - 実際に計算を行う
- その実効的な利用法について探り、情報共有する
  - 計算量を抑える工夫？
  - あるいはこういう場面なら有用、という例は？
  - 結果をどう読み取ればいいのか？
  - どういう問題に利用できる（されている）のか？

具体的な予定

基本的には隔週での輪講と実習

- 輪講：『計算代数統計』（青木 敏著）などで基礎的な用語等を学習
- 実習：計算ソフトを利用して実際に問題を解く
- 論文の発表：理論面での展開や、応用の論文など

その他、外部セミナーなども行う予定

補足

- 曜日などは参加者に合わせる
- TA 雇用：大学院生以上で希望者のみ