

MI<sup>2</sup>(情報統合型物質・材料開発)と数学連携による新展開ワークショップ

# 製造プロセスにおける数理的研究の現状と、 数理科学と物質・材料の連携の展開について

2016. 2. 26

JST(科学技術振興機構)東京本部 本館B1ホール

新日鐵住金株式会社  
先端技術研究所  
数理科学研究部  
中川淳一

# 製造プロセスにおける数理的研究の現状 (会社のテーマを題材に数学活用事例をご紹介します)

# 数学は鉄の製造現場の至るところに存在します。

## ●原料の前処理



焼結鉱  
(酸化鉄)



コークス  
(カーボン源)

## ●製鉄工程

高炉  
「高炉」と呼ばれる設備の中で、焼結鉱とコークスを化学反応させて、「鉄塊」を取り出す工程です。高炉の上部から焼結鉱とコークスを交互に投入し、下部から約1,200℃の熱風を吹き込むと、炉内温度は2,000℃以上という高温状態になり、化学反応が促進され焼結鉱から鉄が還元・分解されます。また、焼結鉱に含まれるさまざまな不純物は、「スラグ」として取り出されます。

鉄1トンつくるのに必要な原料

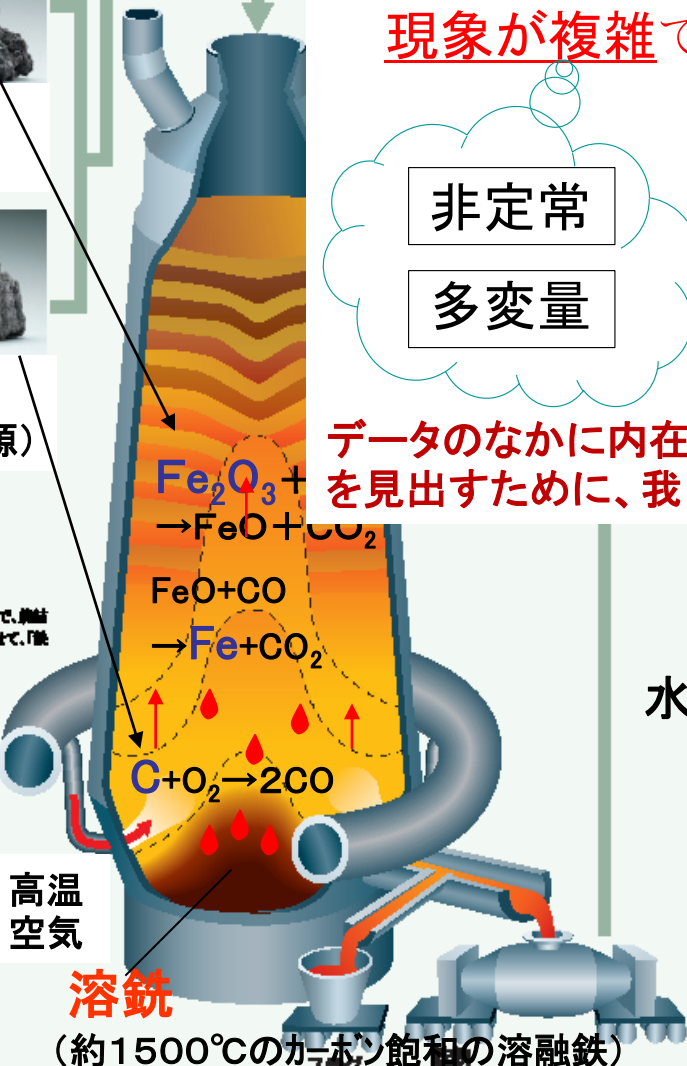
● 焼結石	1.8トン
● コークス	0.4トン
● 石灰石	0.1トン

高温  
空気

溶鉄

(約1500℃のカーボン飽和の溶融鉄)

## 高炉



## ●製鋼工程

高炉から、まだ溶融している不純物中高炉内で取り込んだ炭素分を除去す

現象が複雑で、計測情報が限定的

非定常

多変量

高温物質

大型装置

データのなかに内在する法則性(問題の本質)を見出すために、我々は数学を活用しています。

## 転炉



## 水冷鑄型

## 連続鑄造

### 連続鑄造

最終製品の形状・重量などに応じて、鋼を特定の大きさに固める工程です。約1,800℃で溶融状態にある鋼を連続的に流し込んで外側から徐々に水冷し、凝固した鋼をロールで引き抜いて必要な大きさに切断します。こうしてできた鋼の塊は「鋼片」と呼ばれます。鋼片は、最終製品の形状に応じて「スラブ」、「ブルーム」、「ビレット」の3種類に作り分けられます。



新日鐵住金

NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL

# 圧延工程

Rolling of Steel Products Reheating furnace

## 板の温度制御

1200°C

Hot-rolled sheets and coils  
Reheated slabs are continuously rolled to produce steel sheets (coils) with thicknesses ranging from 1.2 mm to 254 mm.

Slab  
( $\cong 10m^L \times 2m^W \times 0.25m^T$ )

## Hot-rolled sheets and coils

Plates  
Reheated slabs are rolled to produce plates with a maximum thickness of 200 mm.

Large Sections  
Reheated blooms are continuously rolled to produce wide-flange beams and other shapes for construction materials.

Wire Rods  
Reheated slabs are rolled to produce wire rods with diameters ranging from 15 mm.

## 板のサイズの制御

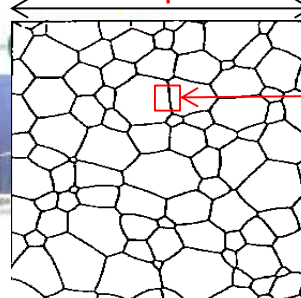
Thickness ranging from 1.2mm to 2mm

Cooling

Automobiles • Home Electric Appliances • Structural Members

## 結晶組織の形態制御

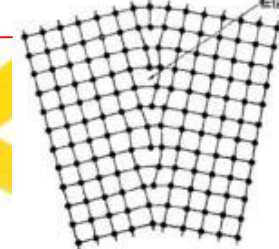
200 $\mu$ m



## 原子格子のダイナミクスの解明

20nm

dislocation



## Cold-rolled sheets and coils

Thickness ranging from 0.13mm to 3.2mm

### 製造現場の複雑で大規模な問題

マルチスケール問題、最適化、制御、ビッグデータ、逆問題等、多くの数学の問題を包含している。

我々は、既存技術のブレークスルーを図るため、  
純粋数学、応用数学の分け隔てなく、  
あらゆる数学を製造現場に導入している！



## 新日鐵住金

NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL

# 事例1: 数学が製造現場を変える

## 高炉の伝熱逆問題

異常の原因部位である煉瓦上面の入熱量を逆問題で解析

↳ (1) 逆問題で観察可能になる高炉内部の情報

膨大な熱が  
煉瓦に流入

溶銑 (1500°C)

溶銑流れ

煉瓦 B.C.

熱流束  $q = \lambda(\partial T / \partial x)$

【逆問題】  
数理モデル

1次元非定常  
熱伝導方程式

$$\partial T / \partial t = \alpha(\partial^2 T / \partial x^2)$$

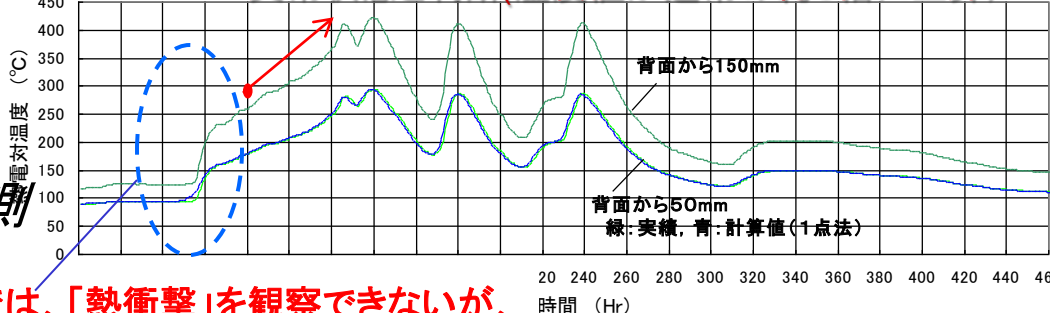
0.1m

温度計測

熱電対



異常状態と判断(温度値が通常の約3倍に上昇)



計測情報だけでは、「熱衝撃」を観察できないが、  
逆問題を介して初めて知ることができる。

# 逆問題の数学

$x=l$  における2種類の境界条件(ディレクレ型とノイマン型)が  
 $x=0$  におけるB.C.とI.C.の同時決定を可能にする。

Wang Yanbo (Fudan University, China), Jin Cheng (Fudan University, China),

Masahiro Yamamoto (the University of Tokyo, Japan), Junichi Nakagawa (Nippon Steel Corp, Japan.),

“A numerical method for solving the inverse heat conduction problem without initial value,”  
*Inverse Problems in Science and Engineering* (2010).

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

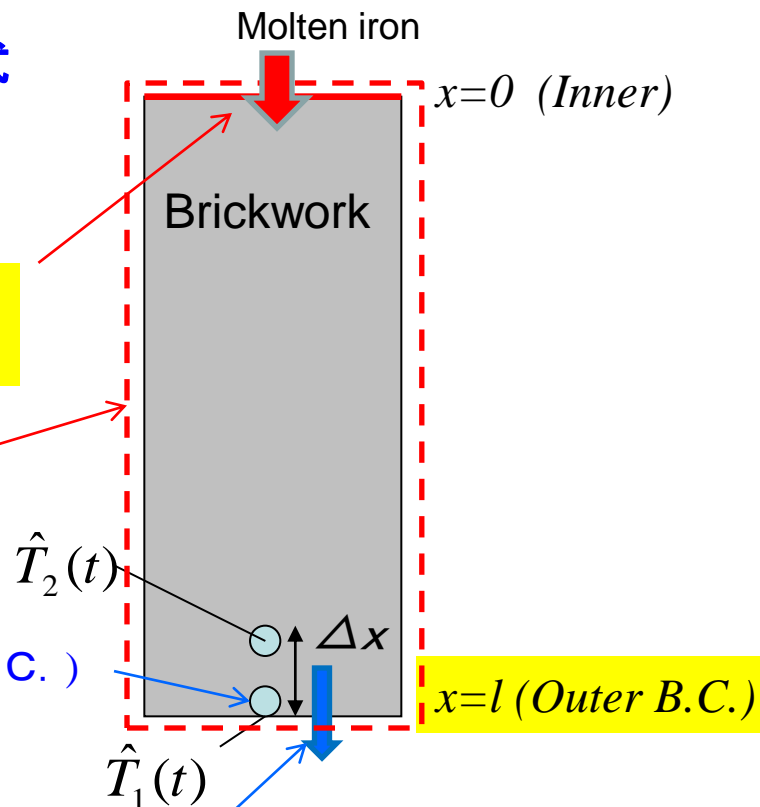
1次元非定常熱伝導方程式

●  $\frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = f(t)$   $x=0$  におけるB.C.: 未知変数  
 (系外から流入する熱流束)

●  $T(x, 0) = T_0(x)$  I.C.: 未知変数  
 (煉瓦の初期温度分布)

●  $T(l, t) = \hat{T}_1(t)$   $x=l$  におけるB.C.: 既知変数  
 (計測値 ⇔ ディレクレ型B.C.)

●  $\frac{\partial T}{\partial x}(l, t) = g(t) \approx (\hat{T}_2(t) - \hat{T}_1(t)) / \Delta x$   
 $x=l$  における新しいB.C.: 2箇所の温度から決定したノイマン型B.C.を新設 (→ 発明)



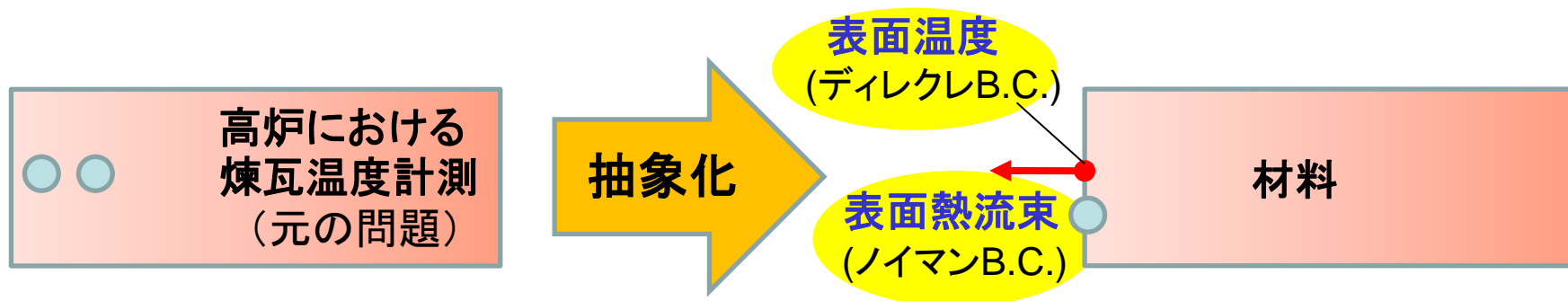
既知変数(1)と未知変数(2)の個数が一致しない。もうひとつの境界条件が必要!



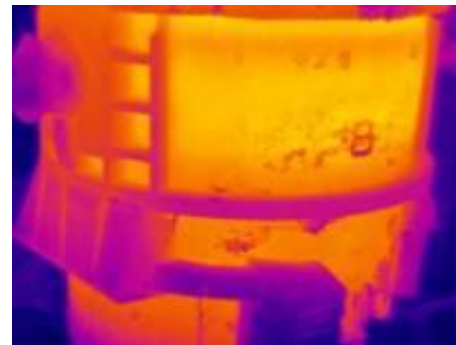
# 数学による抽象化から生まれる新たな発想

高炉の伝熱逆問題という個別化された問題が、

「同一場所で、温度と熱流束の時間変化を同時計測し  
材料内部の温度を推定する技術」として生まれ変わる。



この技術概念は、  
赤外線サーモグラフィによる  
装置材料の非破壊診断  
に適用できる。



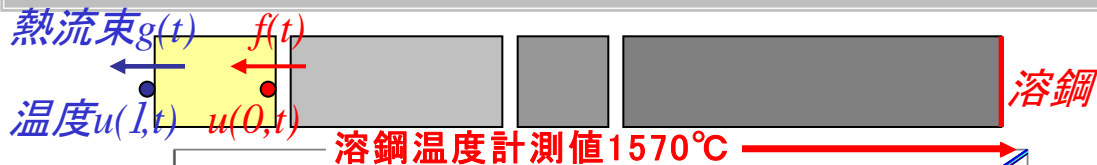
# 溶鋼鍋の伝熱逆問題

高炉と同じ式を使用

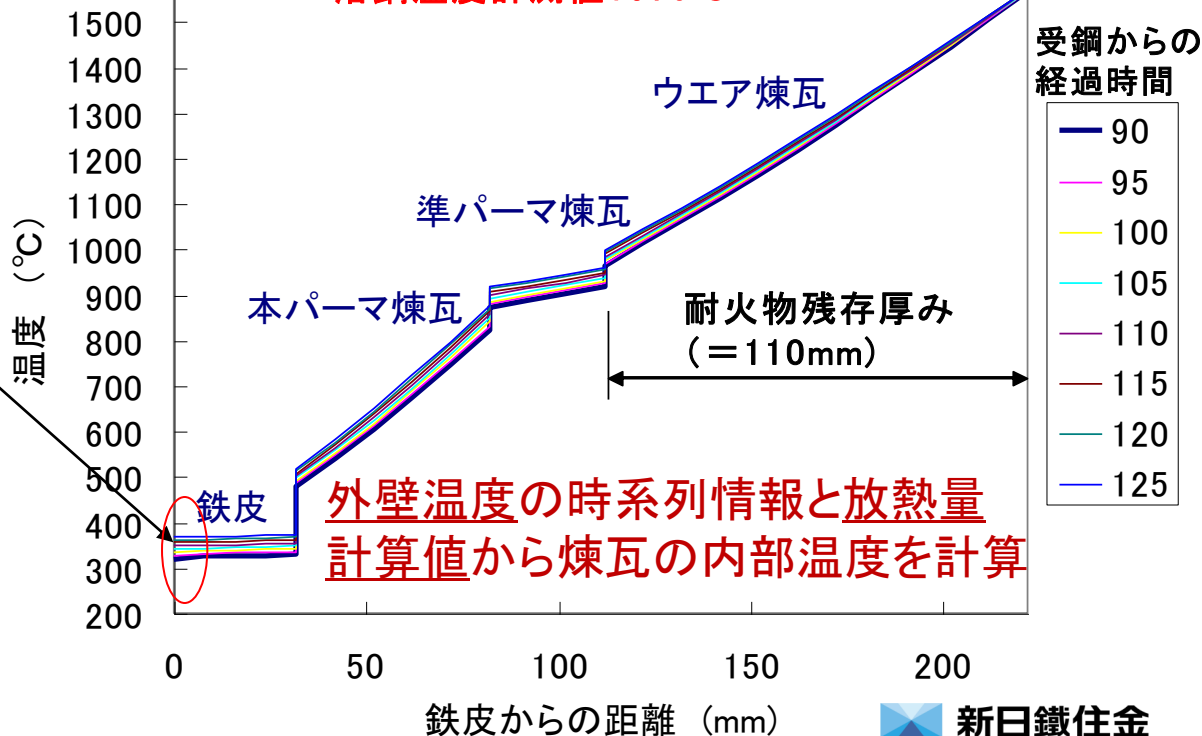
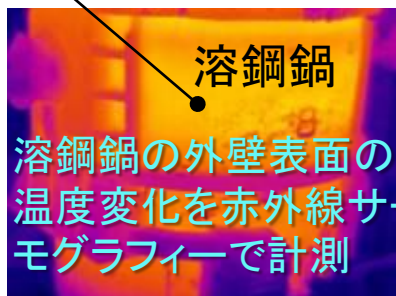
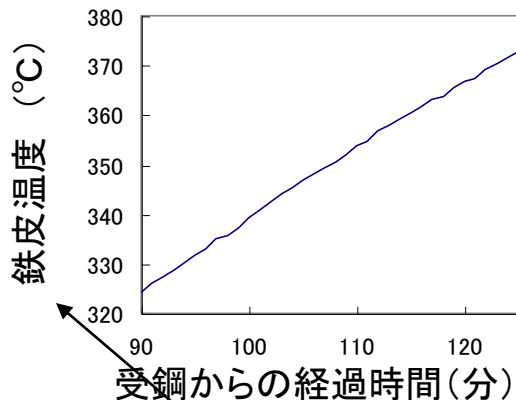
鉄皮表面温度の  
時間推移を支配する  
伝熱機構を数式化

外壁温度 (既知)  $\downarrow$  初期内部温度分布  $\downarrow$  内壁熱流束  $\downarrow$  外壁熱流束 (既知)

$$u(l,t) = \sum_{n=0}^2 A_n(l) e^{-\lambda_n t} - \int_0^t G(t-s, l, 0) f(s) ds + \int_0^t G(t-s, l, l) g(s) ds$$



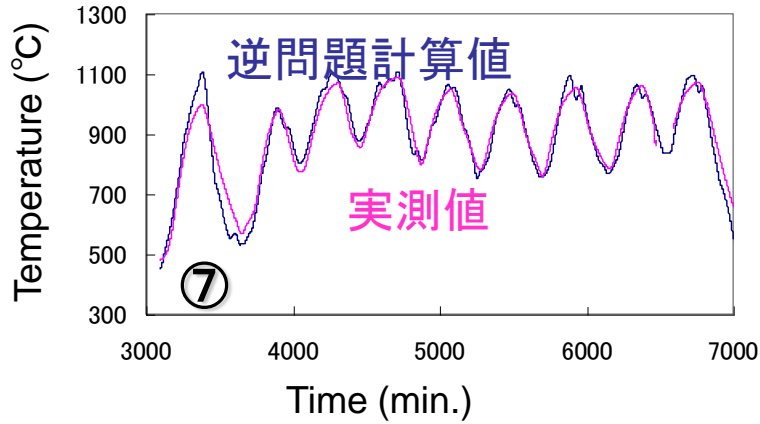
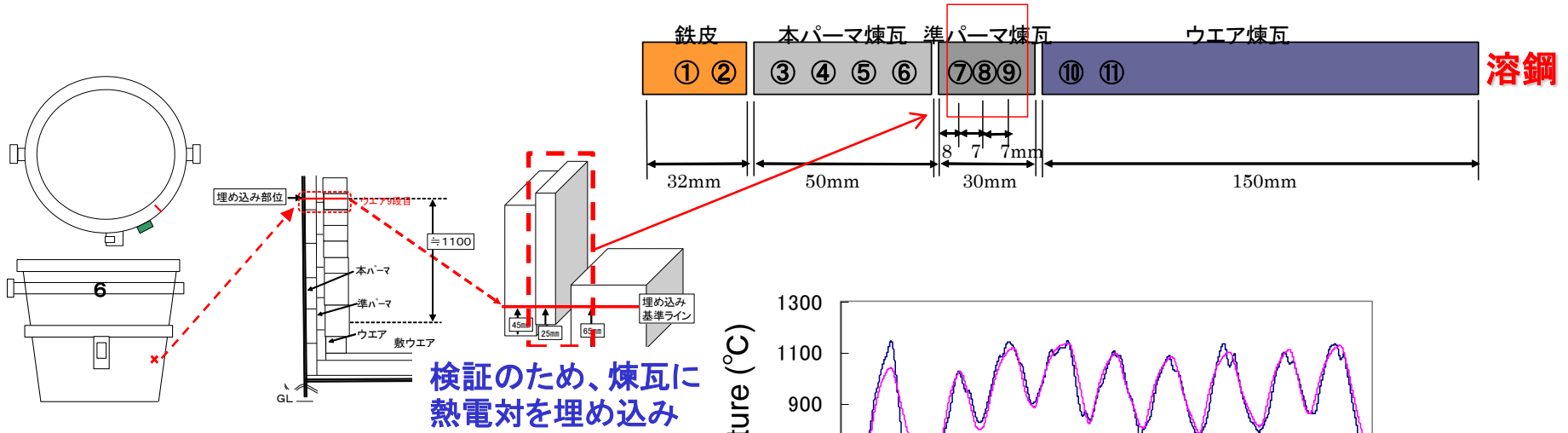
外壁温度の時系列計測情報



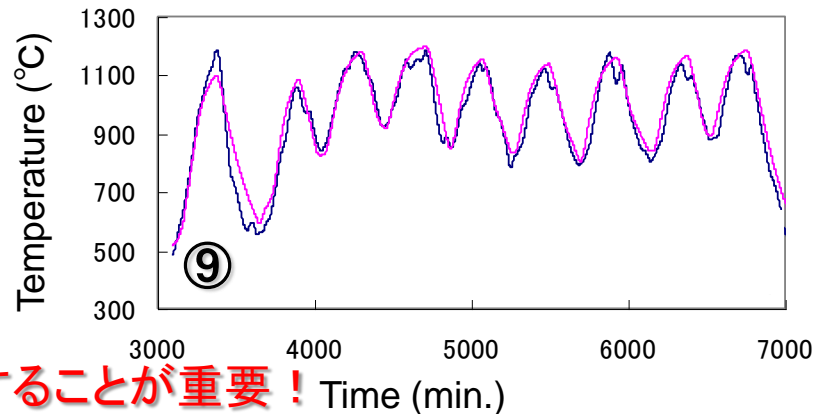
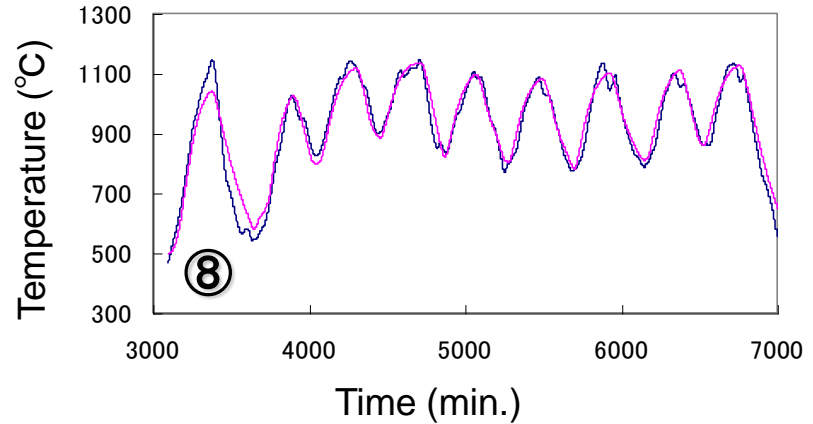
外壁温度の時系列情報と放熱量  
計算値から煉瓦の内部温度を計算



# 煉瓦内の温度実測値と逆問題計算結果の比較事例



逆問題計算値と実測値が現場が満足できるレベルで一致



数学モデルに求める精度を産学間で共有することが重要！

# 逆問題のインパクト

製造現場の問題を、逆問題の数学で考える思考の枠組みが出来上がった。

「データ科学」と「数学」の融合のひとつの姿

計測データ ↔ 逆問題

逆問題の有用性を製造現場が理解し、製造現場と数学の双方に変革をもたらした数学イノベーションの成功事例

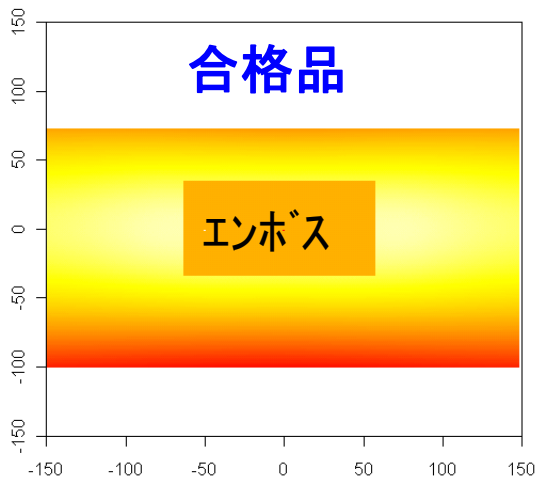
数学が製造現場を動かす。

製造現場からのフィードバックで、数学の応用領域が広がる。

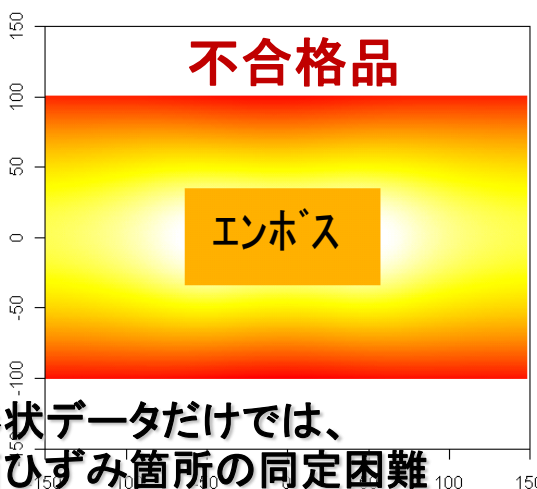
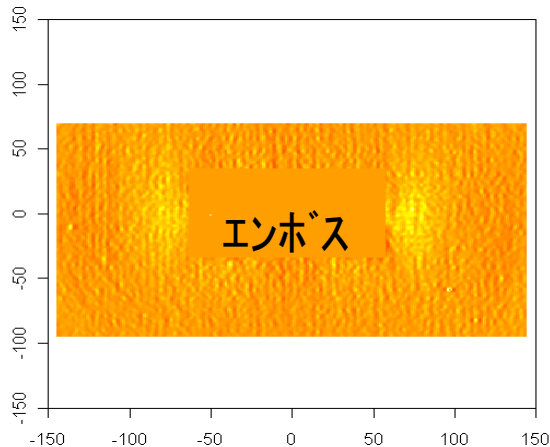
数学の新しい研究領域が生まれる。

# 自動車用鋼板の面ひずみの定量評価技術

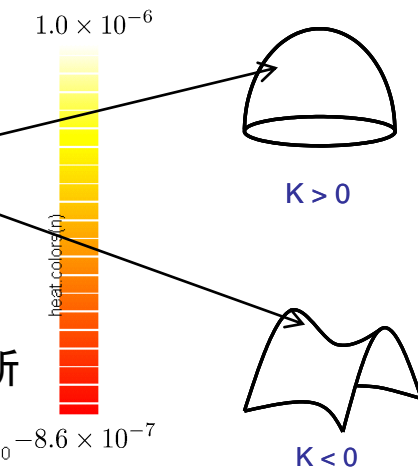
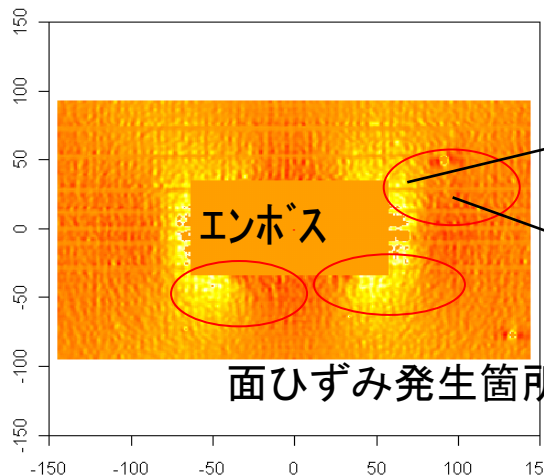
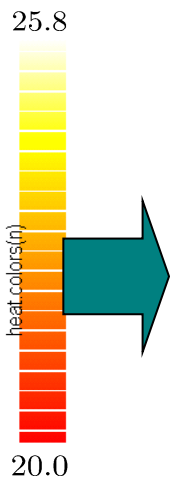
形状計測データ



本技術: **ガウス曲率変換**  
(図形のデコボコ具合の数学表現)



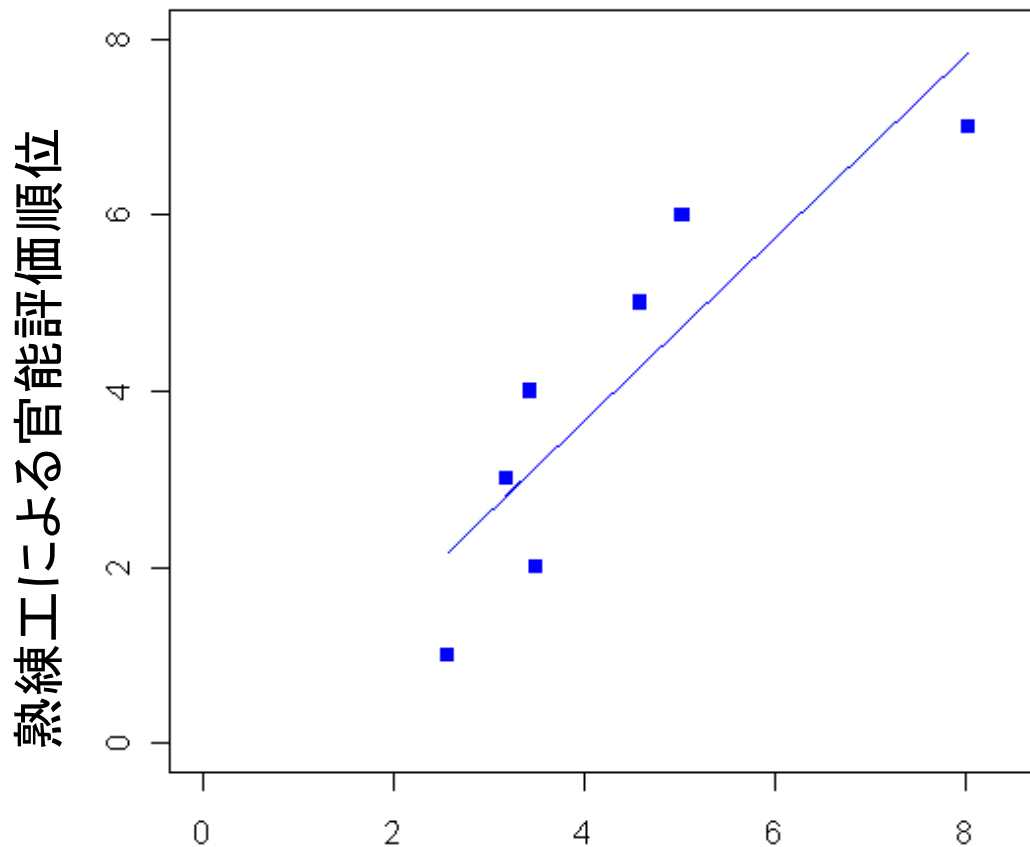
形状データだけでは、  
面ひずみ箇所の同定困難



# 自動車用鋼板の面ひずみの定量評価技術

熟練工による官能評価順位と良好な相関あることが判る。

**熟練工の匠の技を数学で表現できた事例！**



本技術による定量評価値(ガウス曲率の面積和)

# 数学の役割

いろいろな専門分野の実験結果 & 理論を、  
一貫性のある論理で統合する科学・技術の共通言語体系

⇒ 我々は「数学」を異分野融合の言語として活用している。


## 数学連携（数学者との連携）

「公理から始まるスタイルの厳密な数学」は、紀元前3世紀から現代に至るまで、数学者が築き上げてきた思考体系であり、数学で一度証明されたものは永遠の真理であることから、我々は膨大な叡智のリソースを手に入れている。

そのため、多岐にわたる数学の理論体系全体を自在に使いこなすことに真正面から向き合うため、数学連携がある。

# 数学で何が出来るか

- 1) 数学は普遍的であるがゆえに、個別の現象やデータに依存せずとも理論が成立し、世界中から有能な人材を見出し、適宜協力を仰ぐことは数学ゆえに容易
- 2) 観察事実(データ)の背後にあるべき数学理論を見出し、その理論体系を活用することで、「一部を知り全体を把握する」ことが可能
- 3) その結果、諸事実間の因果関係が合理的に繋がれば、既存技術のブレークスルーに導く着想を得るのは比較的容易



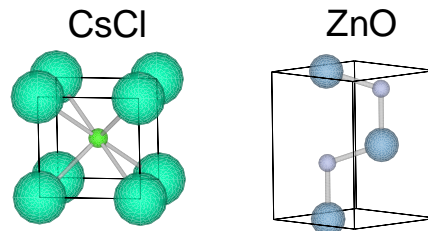
国内外の数学の人脈を背景に、  
数学連携により得られる最先端の数学理論と  
我々のソフトウェア力を駆使して、  
現場ニーズに対応する最良の技術を最速で提案する  
ことを目指している。



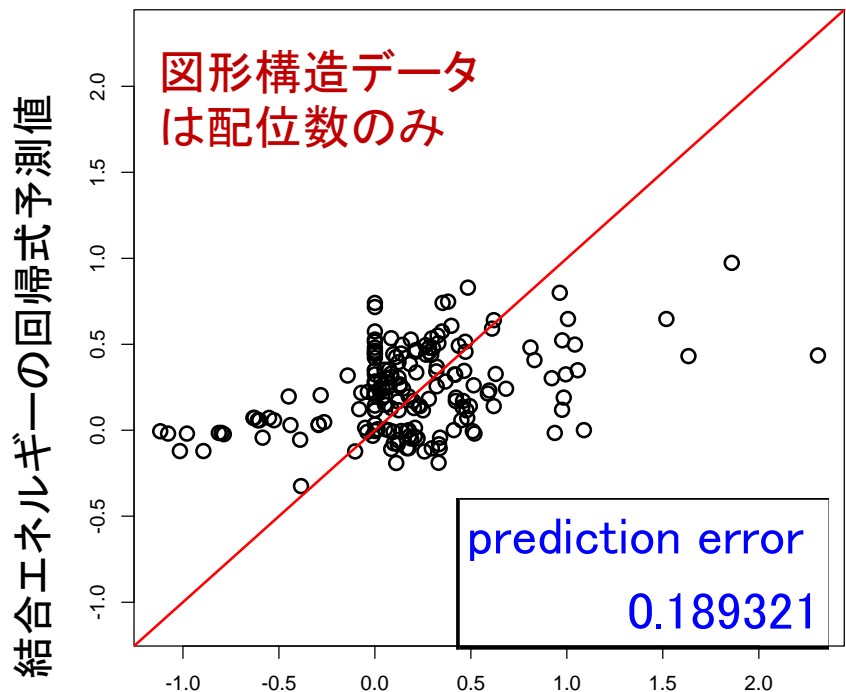
# 数理学と物質・材料の連携の展開について (過去5年間の純粋数学者達との学術連携の成果)

# マテリアルズインフォマティクスへの数学の適用

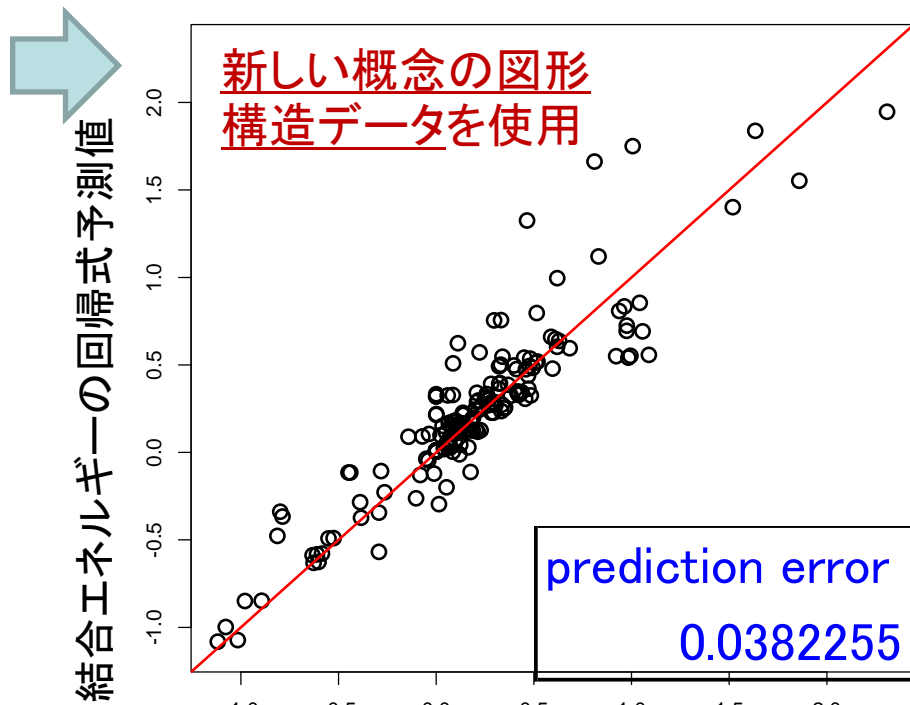
図形構造データの  
表現方法(数値化)がポイント!



- ・格子形状が違う
- ・原子配列が違う等



結晶の結合エネルギー(第1原理計算)



結晶の結合エネルギー(第1原理計算)

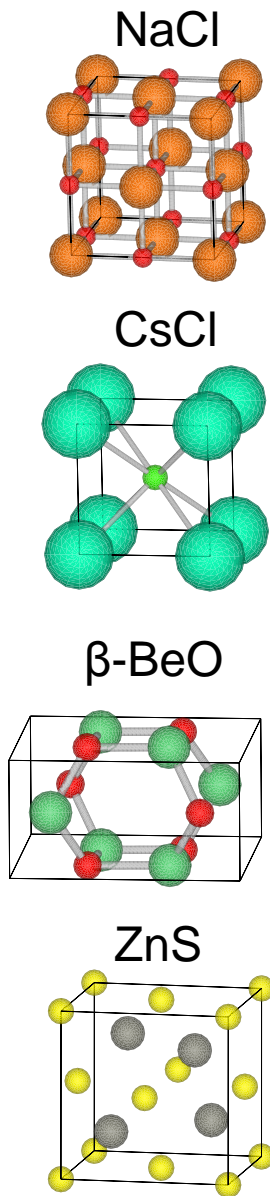
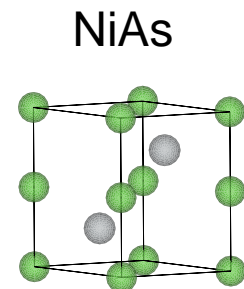
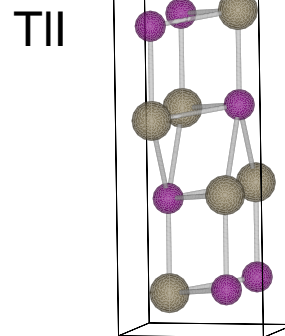
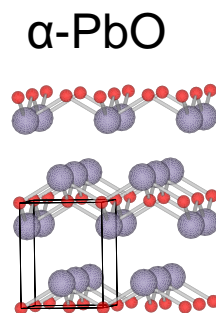
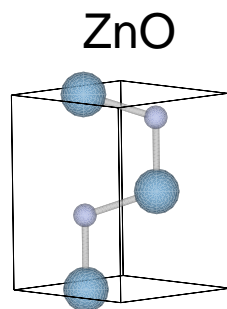
データは京都大学大学院工学系研究科材料工学専攻・田中功教授、世古准教授からのご提供

# 原子格子の図形構造の表現方法の新概念

結晶格子と対称性の異なる二種原子からなる八種類の分子

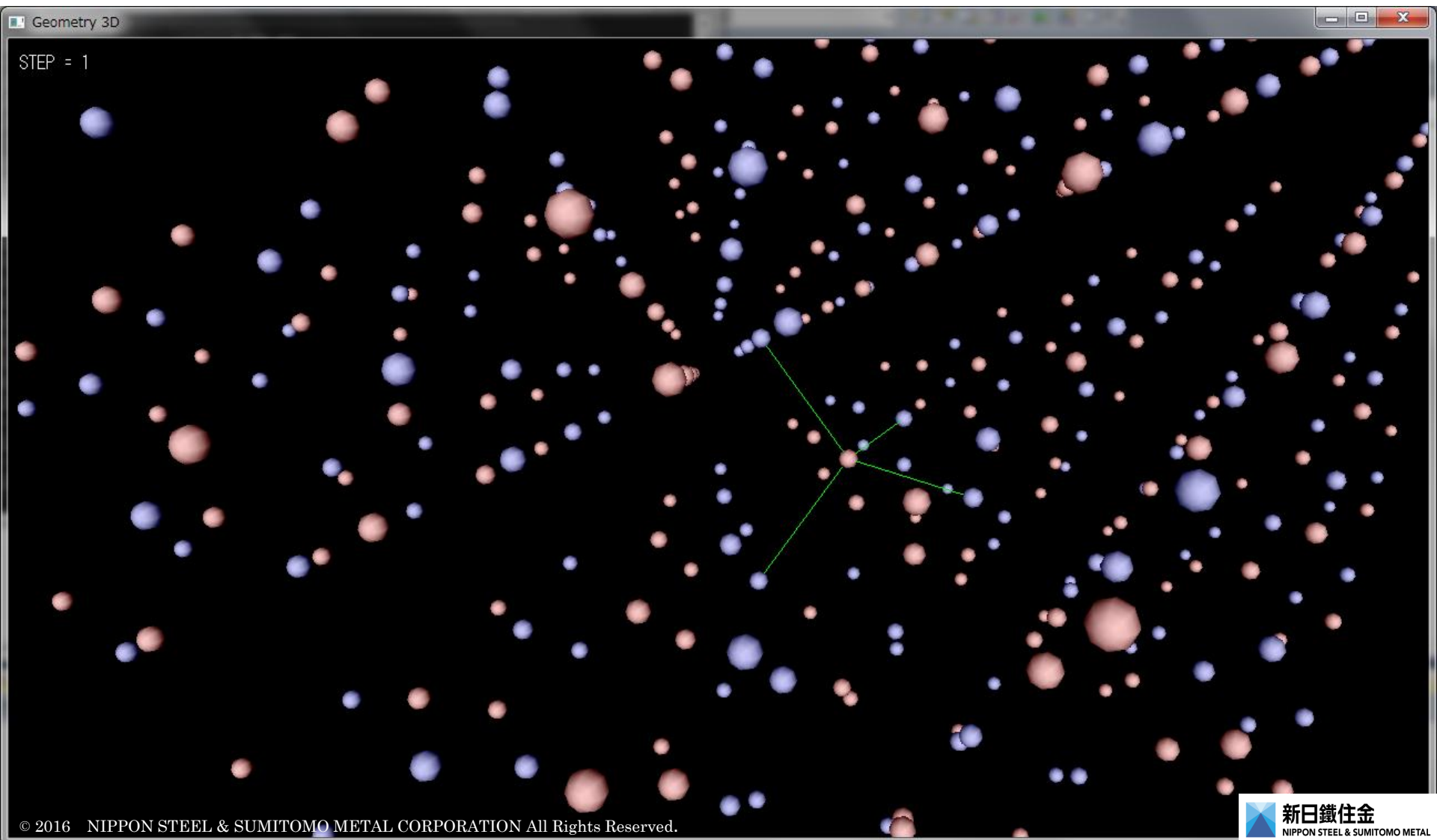
分子種	結晶格子	対称性 (点群の位数)	Growth 数 / 多重度			
			1st	2nd	3rd	4th
NaCl	立方晶	48	6 / 12	18 / 40	38 / 84	66 / 144
CsCl	立方晶	48	8 / 30	26 / 96	56 / 198	98 / 336
β-BeO	正方晶	16	4 / 1	11 / 8	18 / 23	41 / 38
ZnS	立方晶	24	4 / 0	12 / 12	24 / 18	42 / 44
ZnO	六方晶	12	4 / 0	12 / 11	25 / 20	44 / 45
α-PbO	正方晶	16	4 / 8	8 / 8	12 / 12	16 / 16
TlI	直方晶	8	7 / 20	22 / 65	47 / 135	82 / 230
NiAs	六方晶	24	6 / 10	20 / 48	42 / 88	74 / 168

材料分野の指標である配位数に着目 ⇒ 配位数を数学で普遍化したもの



Growth数:  
赤い原子の近傍  
にある青い原子  
の個数を数える.

**ZnO**  
**the 1<sup>st</sup> growth=4 (配位数に相当)**



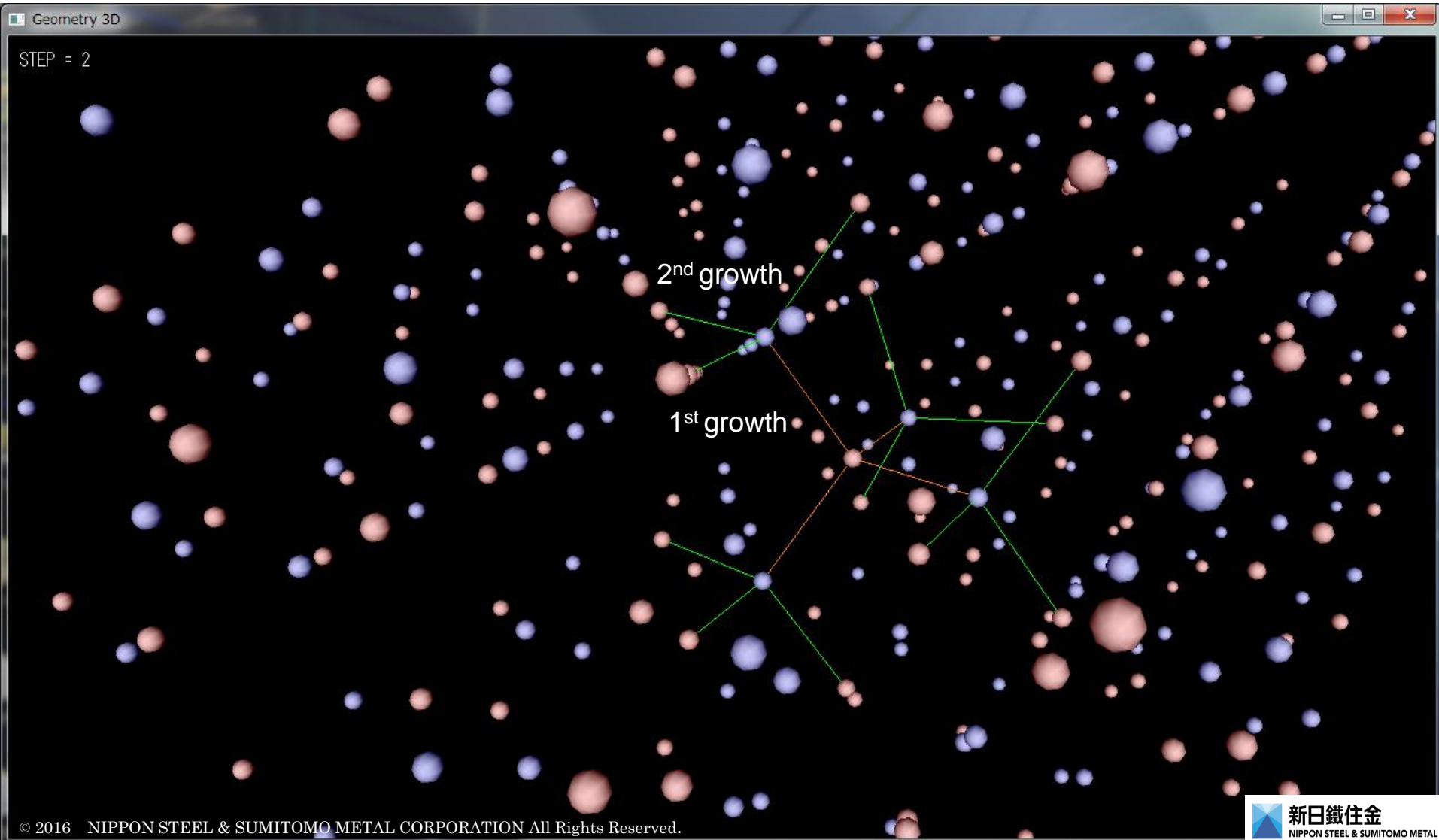
Growthを数える.

1<sup>st</sup> growth (赤色の線)

+追加されるgrowth  
(緑色の線)

# ZnO

## the 2<sup>nd</sup> growth=12

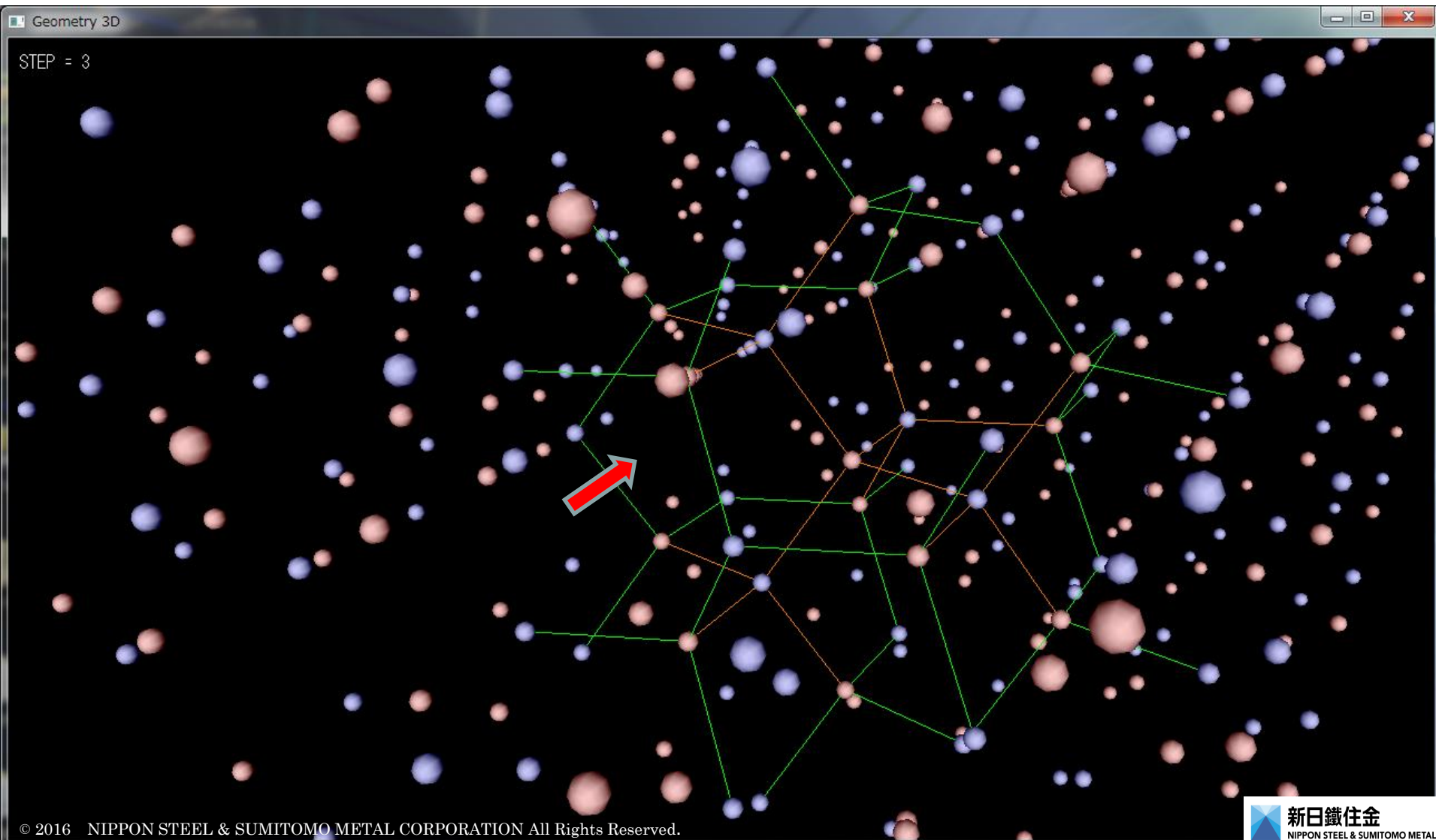




原子を共有する  
リングの存在を  
観察できる。

# ZnO

## the 3<sup>rd</sup> growth=25





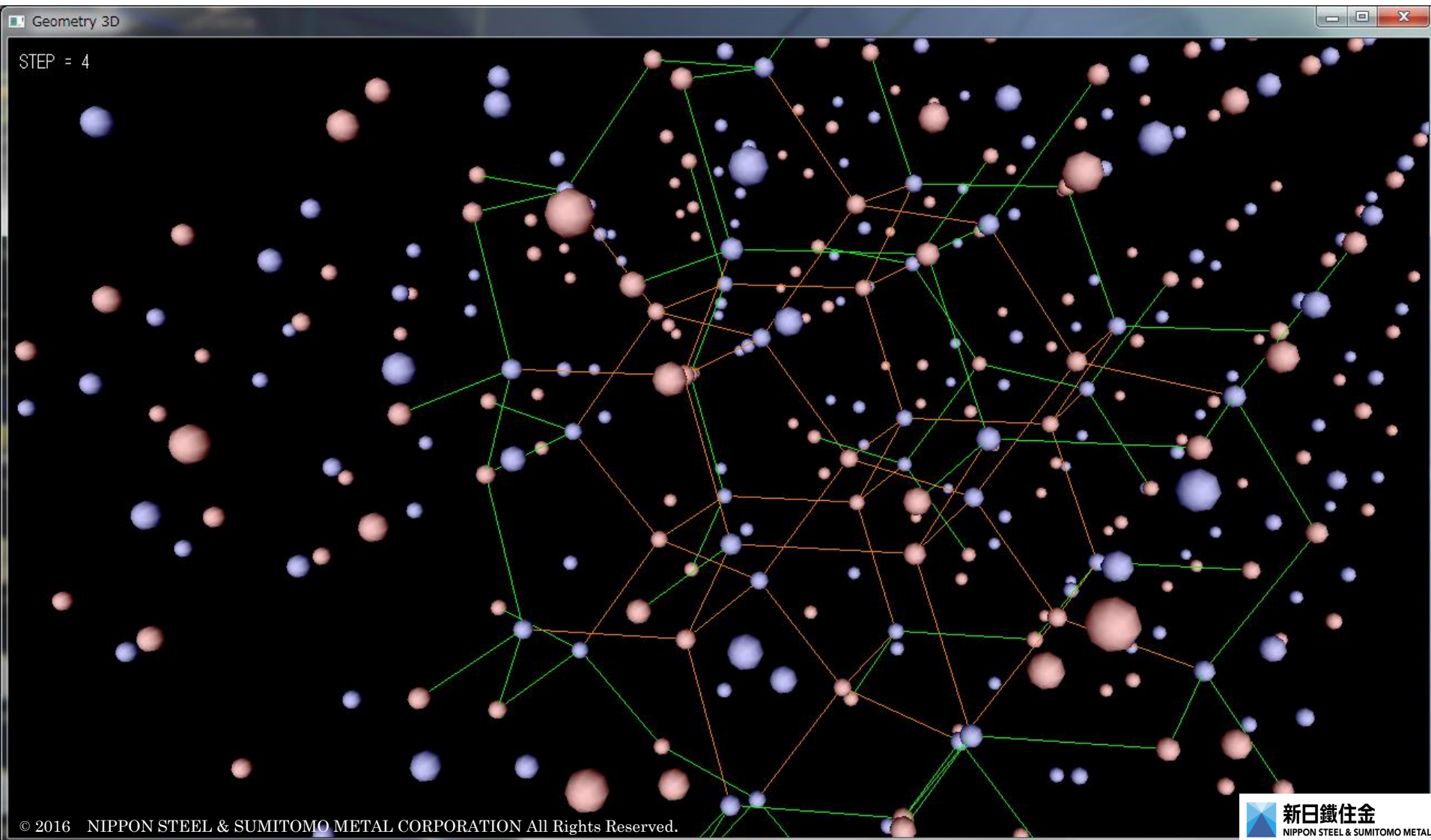
リングの数が多いほど原子間の結合力も大きいのでは？

⇒リングの個数を数えよう！（発想の根源）

原子を共有するリングの数を多重度と定義

ZnO

the 4<sup>th</sup> growth=44

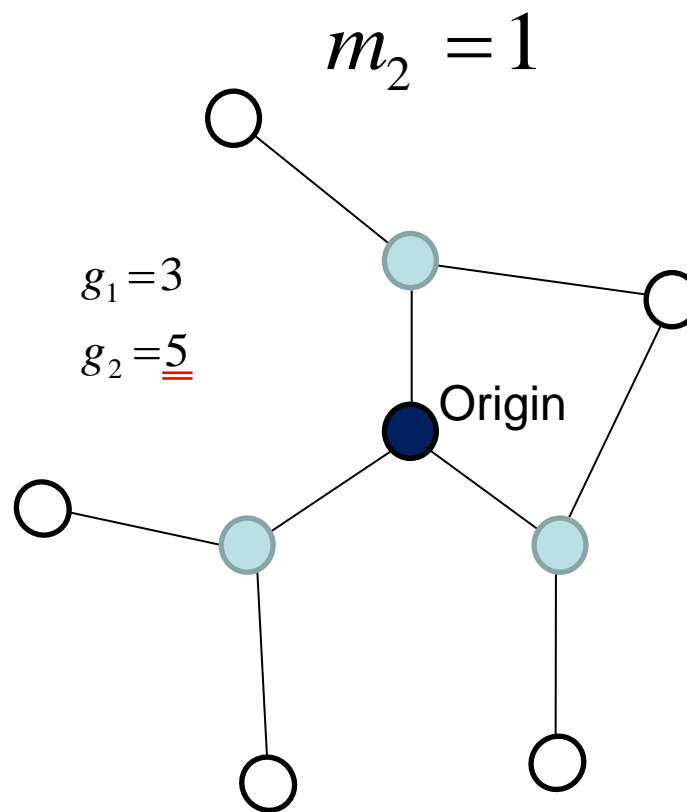
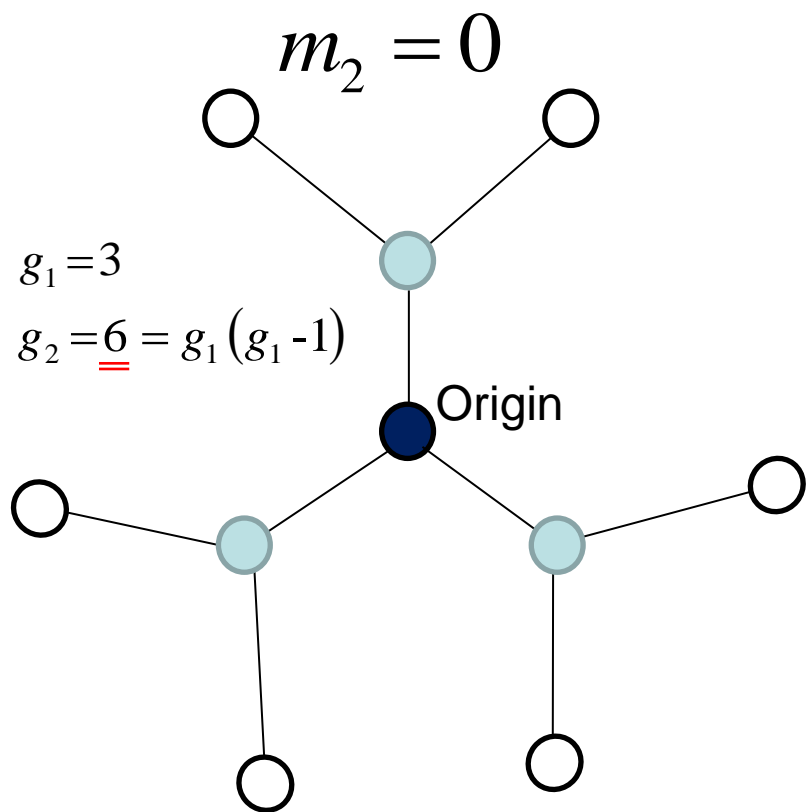


# 多重度

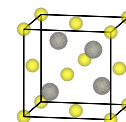
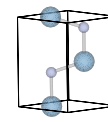
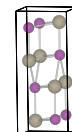
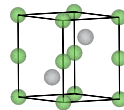
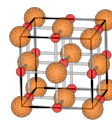
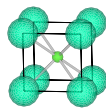
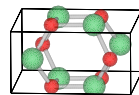
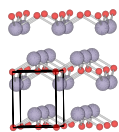
Growthの関数形で表現できる。

2nd multiplicity

$$m_2 = g_1 (g_1 - 1) - g_2$$



# コンピュータシミュレーションによるGrowth数の数え上げ



Growth	Crystals							
	$\alpha$ -PbO	$\beta$ -BeO	CsCl	NaCl	NiAs	TiI	ZnO	ZnS
g1	4	4	8	6	6	7	4	4
g2	8	11	26	18	20	22	12	12
g3	12	24	56	38	42	47	25	24
g4	16	41	98	66	74	82	44	42
g5	20	62	152	102	114	127	67	64
g6	24	90	218	146	164	182	96	92
g7	28	122	296	198	222	247	130	124
g8	32	157	386	258	290	322	170	162
g0	36	200	488	326	366	407	214	204
g10	40	247	602	402	452	502	264	252
g11	44	296	728	486	546	607	319	304
g12	48	354	866	578	650	722	380	362
g13	52	416	1016	678	762	847	445	424
g14	56	479	1178	786	884	982	516	492
g15	60	552	1352	902	1014	1127	592	564
g16	64	629	1538	1026	1154	1282	674	642
g17	68	706	1736	1158	1302	1447	760	724
g18	72	794	1946	1298	1460	1622	852	812
g19	76	886	2168	1446	1626	1807	949	904
g20	80	977	2402	1602	1802	2002	1052	1002



重要なのは、Growth数の極限 $g_{\infty}$ の性質 (コンピュータが出来ないこと<sup>23</sup>)

# Growth数の数列表現

$$G_{\alpha\text{-PbO}}(n) = 4n$$

$$G_{\beta\text{-BeO}}(n) = \begin{cases} \frac{22}{9}n^2 + \frac{1}{9}n + \frac{13}{9} & (n \equiv 1 \pmod{3}) \\ \frac{22}{9}n^2 - \frac{1}{9}n + \frac{13}{9} & (n \equiv 2 \pmod{3}) \\ \frac{22}{9}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \pmod{3}) \end{cases}$$

$$G_{\text{CsCl}}(n) = 6n^2 + 2$$

$$G_{\text{ZnO}}(n) = \begin{cases} \frac{21}{8}n^2 + \frac{11}{8} & (n \equiv 1 \pmod{3}) \\ \frac{21}{8}n^2 + \frac{3}{2} & (n \equiv 2 \pmod{3}) \\ \frac{21}{8}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \pmod{3}) \end{cases}$$

$$G_{\text{NaCl}}(n) = 4n^2 + 2$$

$$G_{\text{Ti}}(n) = 5n^2 + 2$$

$$G_{\text{NiAs}}(n) = \begin{cases} \frac{9}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n \equiv 1 \pmod{2}) \\ \frac{9}{2}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \pmod{2}) \end{cases}$$

$$G_{\text{ZnS}}(n) = \begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n \equiv 1 \pmod{2}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \pmod{2}) \end{cases}$$

# 多重度の数列表現

Growth数 $g_n$  から計算できる。

$$m_{2n} = g_1 \underbrace{(g_{2n-1} - g_{2n-2} + g_{2n-3} - \cdots + g_1 - 1)}_{\text{\# of arms from (2n-1)-th growth}} - \underbrace{g_{2n}}_{\text{Actual \# of (2n)-th growth}},$$

$$m_{2n-1} = g_1 \underbrace{(g_{2n-2} - g_{2n-3} + g_{2n-4} - \cdots - g_1 + 1)}_{\text{\# of arms from (2n-2)-th growth}} - \underbrace{g_{2n-1}}_{\text{Actual \# of (2n-1)-th growth}}$$

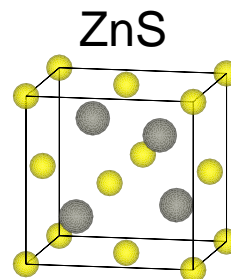
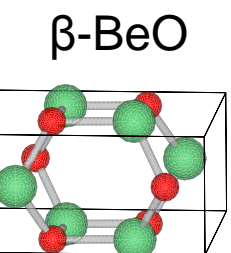
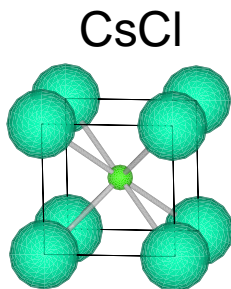
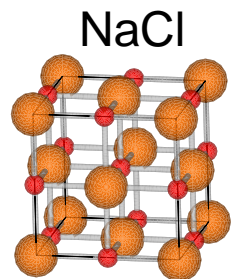
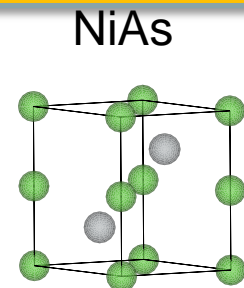
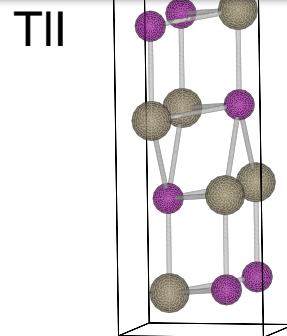
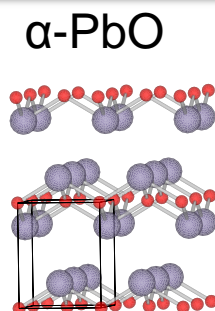
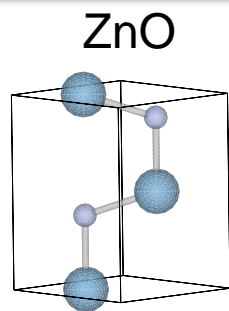
(calculated inductively)

# 原子格子の図形構造の表現方法の新概念

結晶格子と対称性の異なる二種原子からなる八種類の分子

分子種	結晶格子	対称性 (点群の位数)	Growth 数 / 多重度			
			1st	2nd	3rd	4th
NaCl	立方晶	48	6 / 12	18 / 40	38 / 84	66 / 144
CsCl	立方晶	48	8 / 30	26 / 96	56 / 198	98 / 336
$\beta$ -BeO	正方晶	16	4 / 1	11 / 8	18 / 23	41 / 38
ZnS	立方晶	24	4 / 0	12 / 12	24 / 18	42 / 44
ZnO	六方晶	12	4 / 0	12 / 11	25 / 20	44 / 45
$\alpha$ -PbO	正方晶	16	4 / 8	8 / 8	12 / 12	16 / 16
TlI	直方晶	8	7 / 20	22 / 65	47 / 135	82 / 230
NiAs	六方晶	24	6 / 10	20 / 48	42 / 88	74 / 168

空間群(点群, 平行移動) +  $\alpha$   $\Rightarrow$  結晶図形の対称性の数値指標化を継続推進中





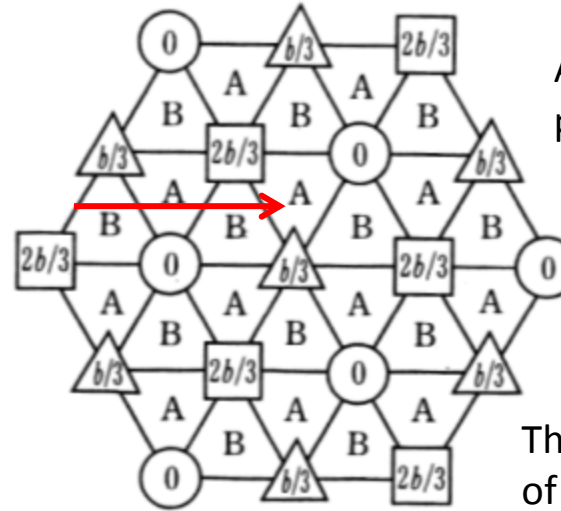
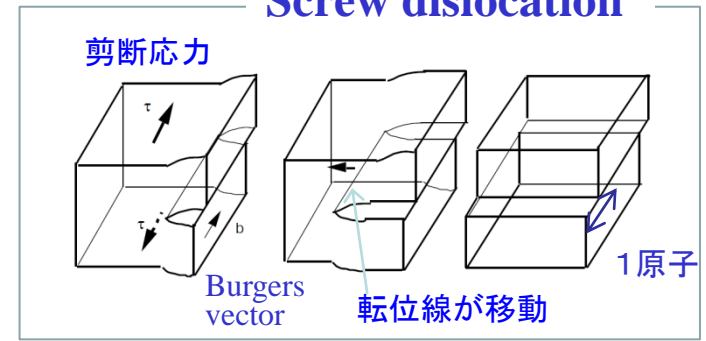
# 結晶格子の乱れの数学表現

## 【BCC格子の螺旋転位の観察事実】

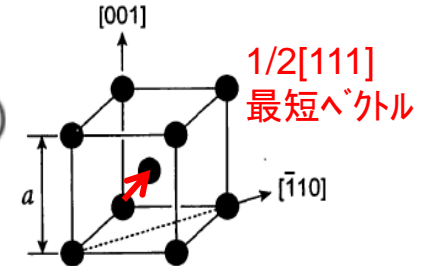
1. The Burgers vector is  $\frac{1}{2}[111]$ .
2. A dislocation starts at a boundary.
3. The dislocation is more likely to occur at a circuit around a triangle B rather than a triangle A.
4. When the dislocation line is in the triangle B, the arrangement of atoms of the circuit B changes A.
5. After the dislocation line passes B, the arrangement of atoms becomes B.

加藤雅治, 入門転位論(1998), 裳華房

### Screw dislocation



Atomic configuration projected on a (111) plane.



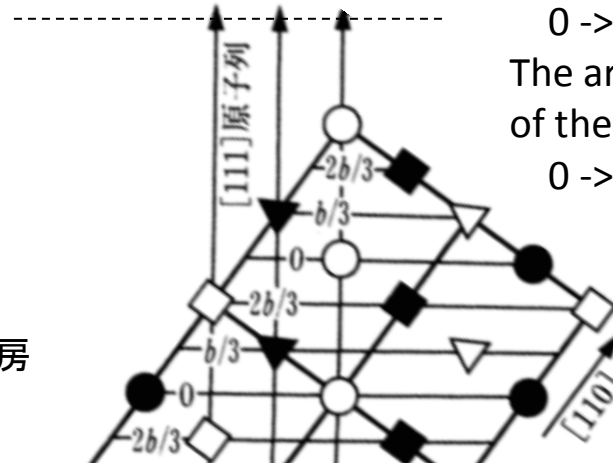
The arrangement of atoms of the circuit B in CCW:

$0 \rightarrow b/3 \rightarrow 2b/3$

The arrangement of atoms of the circuit A in CCW:

$0 \rightarrow 2b/3 \rightarrow 1b/3$

projected on a (110) plane.



# 螺旋転位の動きを記述する公式の導出

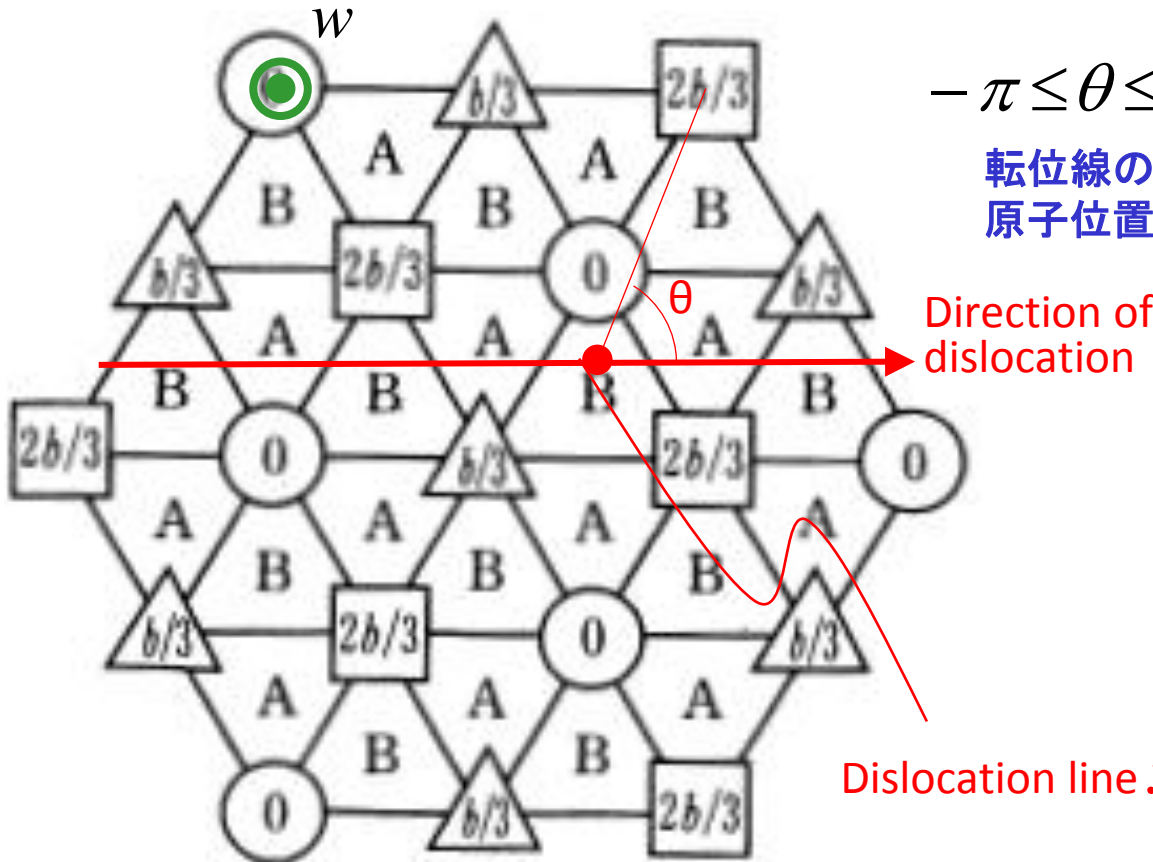
前述のすべての観察事実を満足させる[111]方向の原子配置を決定する公式

転位で原子が動く  
方向 [111]

$$w = w_0 + f(x - x_0) \frac{\theta}{2\pi} e_{[111]},$$

$$-\pi \leq \theta \leq \pi, x \in \{dislocation\ line\}$$

転位線の位置 $x_0$ から測った角度 $\theta$ のみで  
原子位置を決めることができる。



$$f(t) = f(-t), \quad t \in R$$

$$f(t) \geq 0,$$

$e_{[111]}$ : unit vector

of the [111] direction

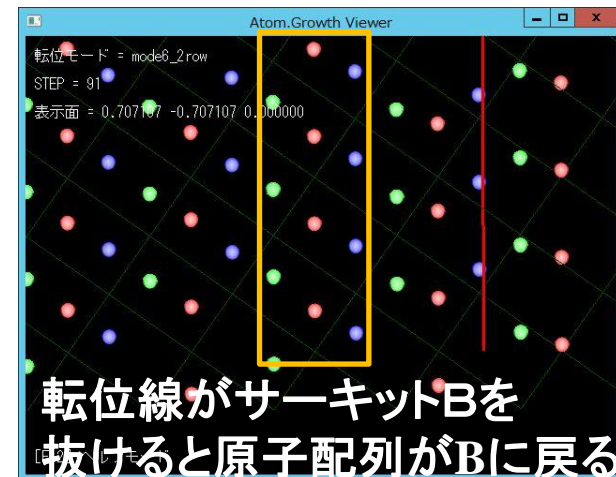
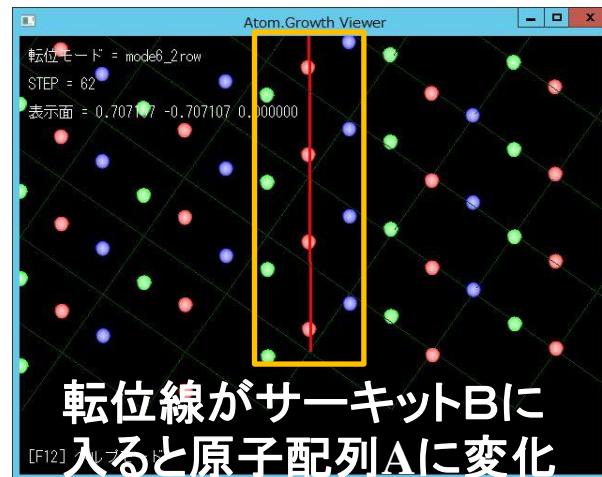
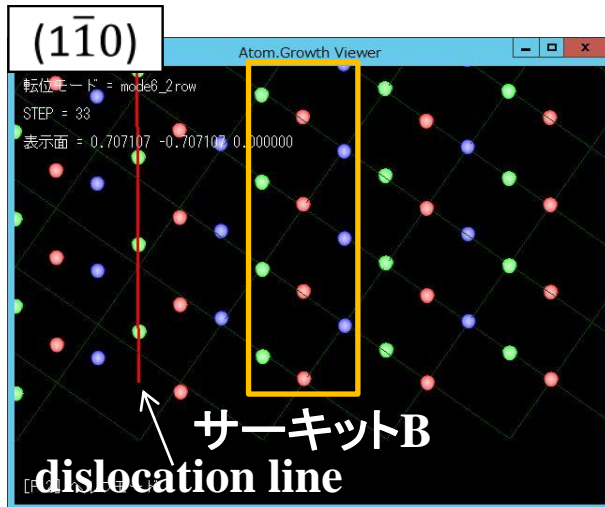
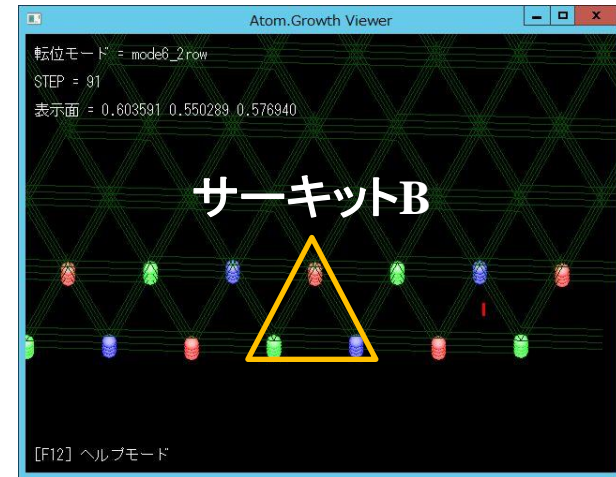
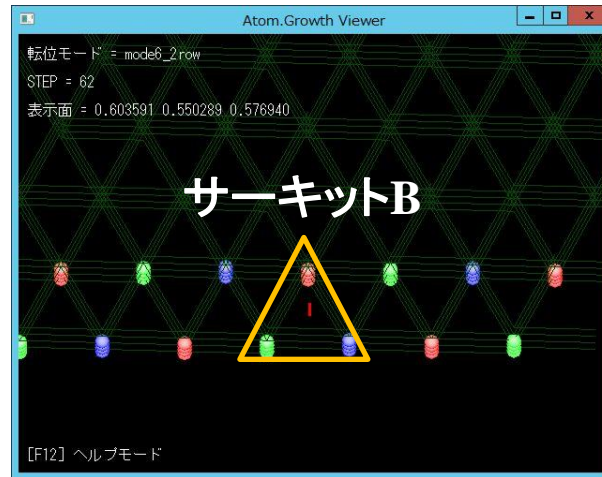
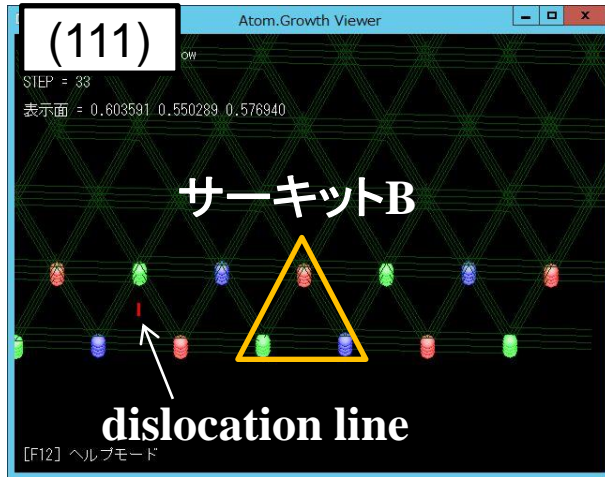
# コンピュータシミュレーションによる公式の妥当性の確認

The arrangement of atoms of the circuit B in CCW:  $0 \rightarrow b/3 \rightarrow 2b/3$

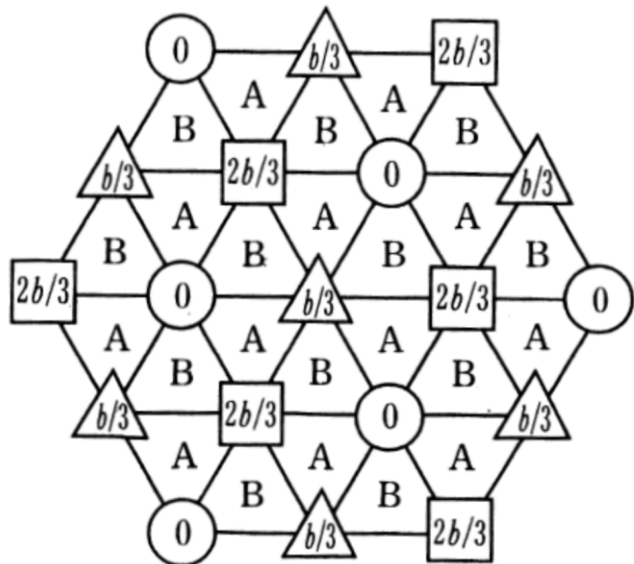
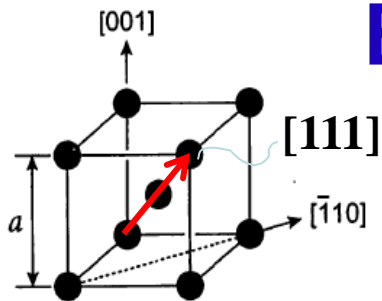
The arrangement of B

The arrangement of A

The arrangement of B



# BCC格子の螺旋転位の代数表現



**P:** Atomic configuration projected on a (111) plane.

**P:** (111) 面への射影による原子配列 := 底空間

**L:** 底空間の原子上のファイバー

(直線上に原子が並んでいる)

**モドロミー:** 転位(特異点)の周りで原子がどのように振る舞うのかを記述する。

底空間でのループがなす基本群 $\pi_1$ がファイバーに作用しファイバーの原子配列を $\{+1, -1, 0\}$ のなかで置き換える。

$$\{\pi_1(P) \rightarrow \text{Aut}(L)\} = \text{Hom}(\pi_1(P), \mathbb{Z}) \cong H^1(P; \mathbb{Z}) \supset S$$

図形Pを入力にして整数の集合Sを出力する1次元コホモロジー

$$S = \{\varphi \in H^1(P; \mathbb{Z}) \mid \varphi(\Delta) \in \{+1, -1, 0\}\}$$

An element of S expresses an arrangement of dislocations.

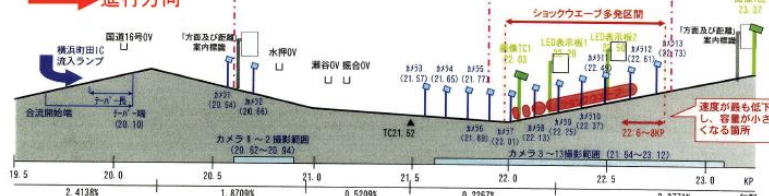
**バーガーズベクトルの数学表現**

我々は、物質・材料のマクロな性質の重要な決定因子である結晶格子の乱れ(disorder)を記述する数学の道具の進化を継続推進中



# 事例3:ミクロ(離散)からマクロ(連続)への橋渡しの数学 交通流の数理モデルの理論体系再構築と高精度予測技術

- 観測対象区間
    - 東名・下り・大和BS付近
    - ITV設置・ビデオ映像収録
      - 1.2km区間に11台
      - 上流1km地点付近に2台
    - 13台の映像はGPS同期で時刻情報と共に記録
- 進行方向

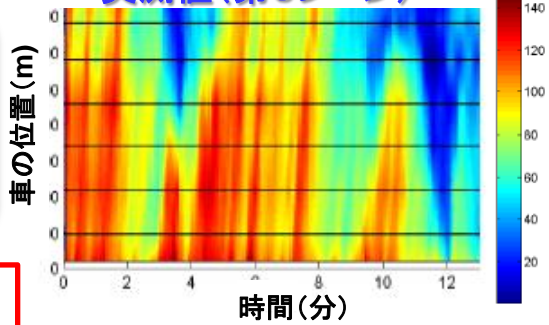


画像から各レーンを走る車の速度、位置を同定

種々のデータ融合による交通流現象の可視化技術の進化(断面計測+プローブ)

実測値(第3レーン)

速度 (km/時)



## 数学的視点に基づく既存数理モデルの理論体系化

**PDEモデル(Conservation law)**

LWRモデル (1956)

$$\frac{\partial \rho(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial \psi(\rho)}{\partial x} = 0$$

車両密度  $\rho$  の保存則

ラベル関数の導入

$$M(t,x) := \int_x \rho(t,x) dx$$

$$\frac{\partial M(t,x)}{\partial t} - \psi \left( -\frac{\partial M(t,x)}{\partial x} \right) = 0$$

H-J 方程式

H-J方程式の解の公式(Hopf-Lax解)の離散化

$$M(t,x) = \inf_{y \in R} \left\{ t(-\psi) \left( \frac{-x+y}{t} \right) + M(0,y) \right\}$$

**PDEシステムのモデル**

Aw & Rascle (2000)

車両密度  $\rho$  の保存則 & 運動量  $\rho v$  の方程式

$$\frac{\partial \rho(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho(t,x)v)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho(t,x)v}{\partial t} + \frac{\partial \rho(t,x)v^2}{\partial x} = \frac{\rho(t,x)}{\tau} (v_{op}(\rho) - v)$$

Lagrangian mass座標(M,T)と Eulerian座標(t,x)間の変換

$$\frac{\partial M}{\partial x} = -\rho, \quad \frac{\partial M}{\partial t} = \rho v, \quad T=t$$

代数演算公式(Demad-Supply解, トロピカル幾何)

$$M_j^{n+1} = M_j^n$$

大規模道路ネットワークの計算が可能!

$$+\Delta t \min \left( \Psi_D \left( \frac{M_j^n - M_{j-1}^n}{\Delta x} \right), \Psi_S \left( \frac{M_{j+1}^n - M_j^n}{\Delta x} \right) \right)$$

**① 離散モデル(Optimal velocity modelの一般化)**

Bando et al (1995)

$$\frac{d}{dt} x(M) = v(M)$$

$$\frac{d}{dt} v(M) = \frac{1}{\tau} \left( V_{op} \left( \frac{\Delta x}{x(M-1) - x(M)} \right) - v(M) \right)$$

超離散極限 に関するべき級数の1次近似

車の速度は前車の車間  $\Delta x$  と時間遅れ  $\tau$  で決まる。

第1原理(前提条件)

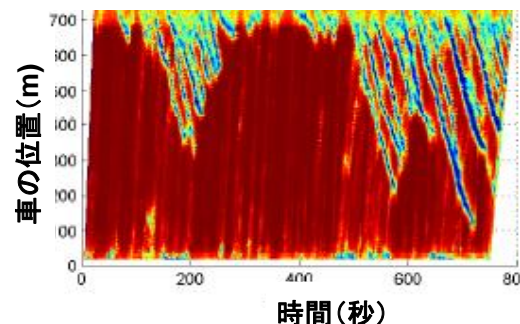
$$\frac{d}{dt} x(t+\tau) = V_{op}(\Delta x)$$

交通工学者の問題意識  
新しいタイプの計測データの出現により半世紀以上の歴史を有する既存の理論体系見直しの必要性を感じている。

1) 提案は、既存の理論体系の上位概念であることが必要条件(既存理論を包含)  
⇒ 数学的視点から既存の数理モデル体系をサーベイ

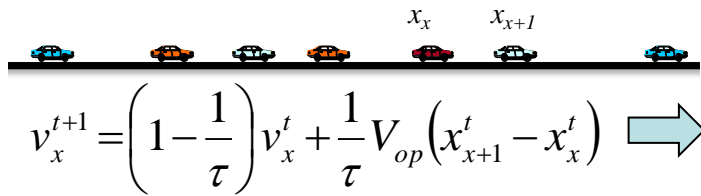
2) ①個々の車に着目した離散モデル(OVモデル)と②車両流れに着目した連続モデル(LWRモデル)を繋ぎ、その第1原理を明確化  
⇒ 第1原理に焦点をあて、数学で理論を再構築

## 数理モデルによる減速域の予測



# 新しい数学モデルの発想とインパクト

## OV model (既存離散モデル)



$$v_x^{t+1} = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right)v_x^t + \frac{1}{\tau}V_{op}(x_{x+1}^t - x_x^t)$$

## SOV model (既存モデル改良版)

$v_x^t$  : probability to proceed on the cell automaton.  
 $V_{op}$  returns a value of  $[0,1]$ .  
 $0 < \frac{1}{\tau} < 1$

ミクロ(ランダム)とマクロ(決定論的)を繋ぐ数学理論

・[必要最小限の前提条件]  
 粒子(車)の個数が唯一の保存量  
 ⇒時間と空間(粒子数)を無限大にした場合の時間発展則(偏微分方程式)を導出

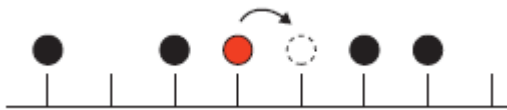
既存モデルの極限状態を粒子(車)でモデル表現

### ★ミクロ&離散の確率法則(車の挙動の新しい第1原理)

$$\frac{1}{\tau} = 0: v_x^{t+1} = v_x^t$$

**TASEP** (Totally Asymmetric Simple Exclusion Process)

・Each site allows to exist only one particle at most.

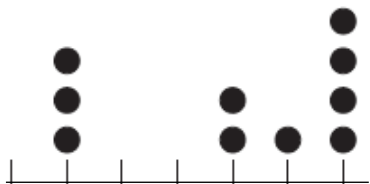


・A particle can move to the next right if the site is empty.

$$\frac{1}{\tau} = 1: v_x^{t+1} = V_{op}(x_{x+1}^t - x_x^t)$$

**ZRP** (Zero Range Process)

・the number of particles on a site  $\eta_x$   
 =vehicular distance  
 ・particles move to the next right at the rate of  $g(\eta_x)$ .



- $g(k) = 1$  の時,  $\Phi(\rho) = \frac{\rho}{1+\rho}$
- $g(k) = \frac{k}{q+k-1}, (q > 0)$  のとき  $\Phi(\rho) = \frac{\rho}{\rho+q}$
- 形式的には  $g(k) = k$  のとき  $\Phi(\rho) = \rho$

### ★流体力学極限

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \{(1-\rho(t,x))\rho(t,x)\} = 0$$

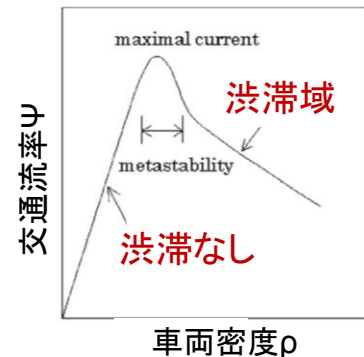
既存のLWR型偏微分方程式(マクロ&連続)

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Psi(\rho(t,x)) = 0$$

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Phi(\rho(t,x)) = 0$$

$\Phi(\rho)$  is determined only by a function  $g$ .

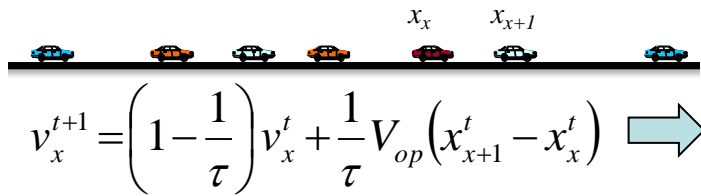
交通流率の関数形  $\Psi$  が新しい第1原理から明示的に導出可能になった。←従来は計測やコンピュータシミュレーションでのみ求まるものとされていた。





# 新しい数学モデルの発想とインパクト

## OV model (既存離散モデル)



## SOV model (既存モデル改良版)

$v_x^t$  : probability to proceed on the cell automaton.  
 $V_{op}$  returns a value of  $[0,1]$ .  
 $0 < \frac{1}{\tau} < 1$

## ミクロ(ランダム)とマクロ(決定論的)を繋ぐ数学理論

・[必要最小限の前提条件]  
 粒子(車)の個数が唯一の保存量  
 ⇒時間と空間(粒子数)を無限大にした場合の時間発展則(偏微分方程式)を導出

既存モデルの極限状態を粒子(車)でモデル表現

### ★ミクロ&離散の確率法則(車の挙動の新しい第1原理)

### ★流体力学極限

マクロな系の偏微分方程式の構成関数や係数のなかに、ミクロな系の情報が明示的に組み込まれる。

ミクロとマクロを繋ぐ強力な数学の道具!

熱伝導率、電気伝導率等、物質・材料への展開が可能

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \{(1-\rho(t,x))\rho(t,x)\} = 0$$

既存のLWR型偏微分方程式(マクロ&連続)

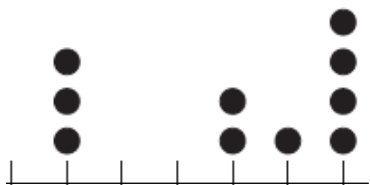
$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Psi(\rho(t,x)) = 0$$

$$\partial_t \rho(t,x) + \partial_x \Phi(\rho(t,x)) = 0$$

$\Phi(\rho)$  is determined only by a function  $g$ .

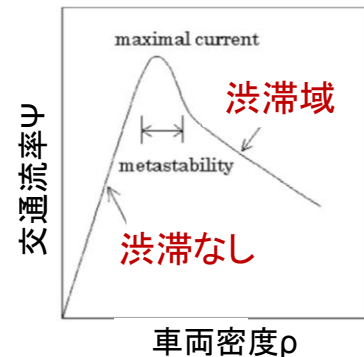
$\frac{1}{\tau} = 1$ :  $v_x^{t+1} = V_{op}(x_{x+1}^t - x_x^t)$  **ZRP (Zero Range Process)**

- the number of particles on a site  $\eta_x$   
=vehicular distance
- particles move to the next right at the rate of  $g(\eta_x)$ .



- $g(k) = 1$  の時,  $\Phi(\rho) = \frac{\rho}{1+\rho}$
- $g(k) = \frac{k}{q+k-1}, (q > 0)$  のとき  $\Phi(\rho) = \frac{\rho}{\rho+q}$
- 形式的には  $g(k) = k$  のとき  $\Phi(\rho) = \rho$

交通流率の関数形  $\Psi$  が新しい第1原理から明示的に導出可能になった。←従来は計測やコンピュータシミュレーションでのみ求まるものとされていた。



## 数学イノベーション構想

異分野融合を目指す数学連携チームが  
現場・社会を動かし変える！



# 数学世界

シュレディンガー方程式

原子配列の幾何&代数表現

非線形発展方程式 (決定論的力学系)

マイクロな系

入力

## 通常のアプローチ(2)

現実世界のマイクロで離散な現象を、マイクロな系のなかだけで数理モデル化する。

我々が目指すものは、メゾな系を設定し、その思考過程を数学により明示化すること！

## 通常のアプローチ(3)

現実世界のマクロで連続な現象に該当する偏微分方程式を経験的に付与し数値計算する。

マクロな系

偏微分方程式

方程式1

方程式2

・・・

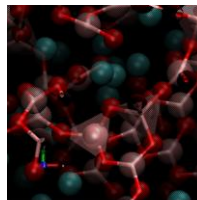
方程式N

統計学的検証

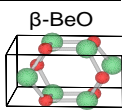
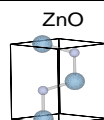
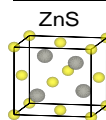
出力

# 現実世界

ガラス分子の原子配置



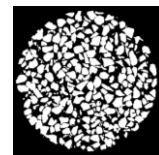
同一配位数の様々な結晶格子



車の挙動データ



土壌粒子配置データ



## 通常のアプローチ(1)

入力

局所則を個々の粒子に与え、コンピュータに多体問題の計算を任せる。

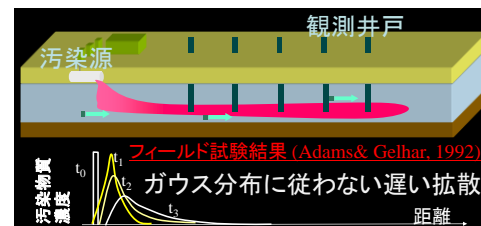
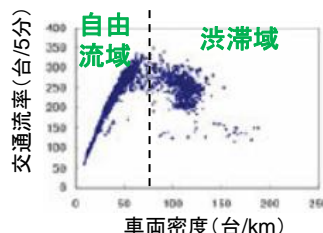
出力

材料機能の発現

強度、磁気特性、誘電特性、劣化等

異常拡散現象

交通流の基本ダイアグラム



**数学世界**

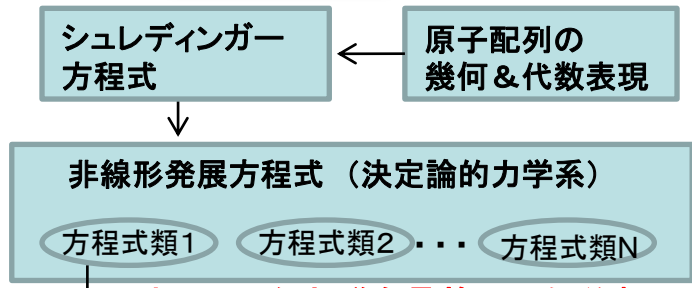
数学世界上での数理モデリングと現実世界への変換

**現実世界**

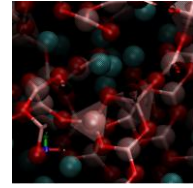
ミクロな系

メゾな系

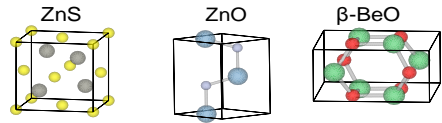
マクロな系



ガラス分子の原子配置



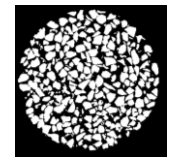
同一配位数の様々な結晶格子



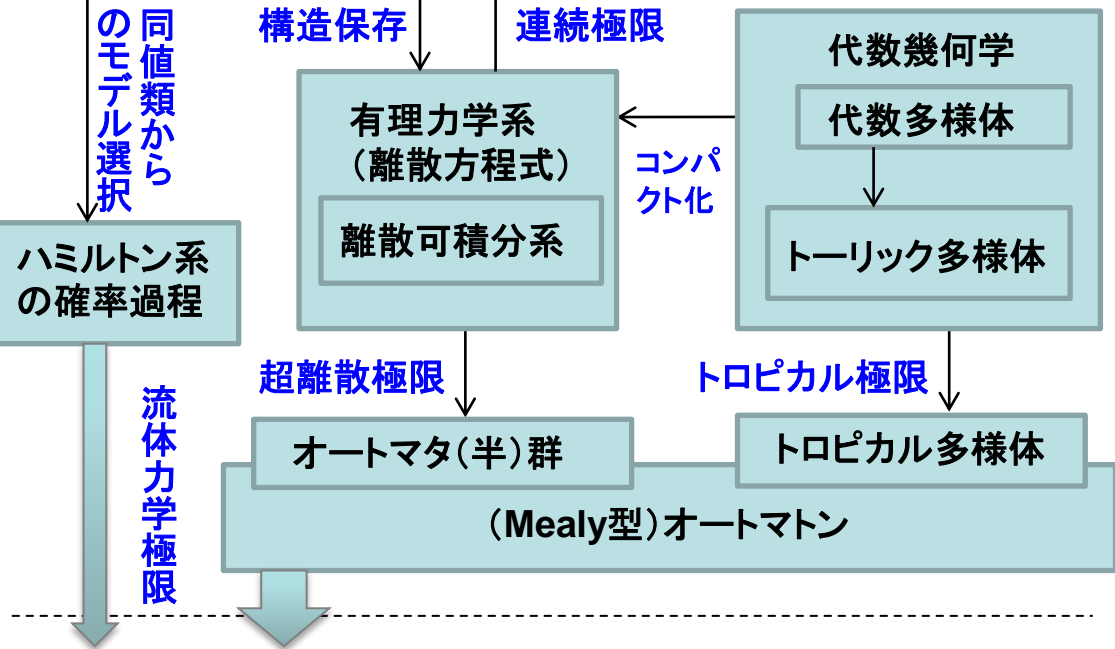
車の挙動データ



土壌粒子配置データ

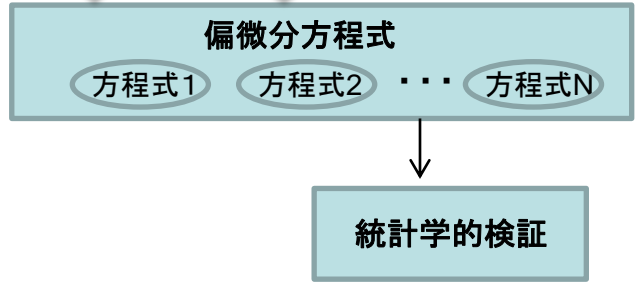


オートマトン半群を骨格にした分類

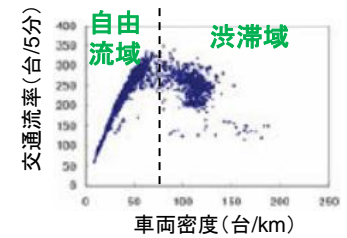


・幾何・代数の枠組みで思考過程を体系化。階層構造間の因果関係を明示化し普遍則として記述する。

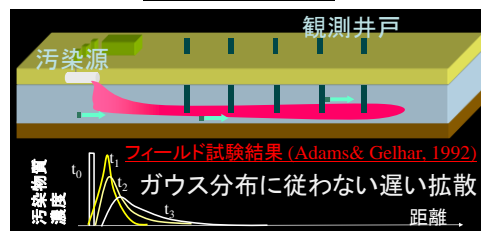
・オートマトンはミクロな系の方程式の骨組み(本質)を与え、余分なものをそぎ落としているゆえ、流体力学極限の実行が容易になる。



交通流の基本ダイアグラム



材料機能の発現  
強度、磁気特性、誘電特性、劣化等  
異常拡散現象



**数学世界**

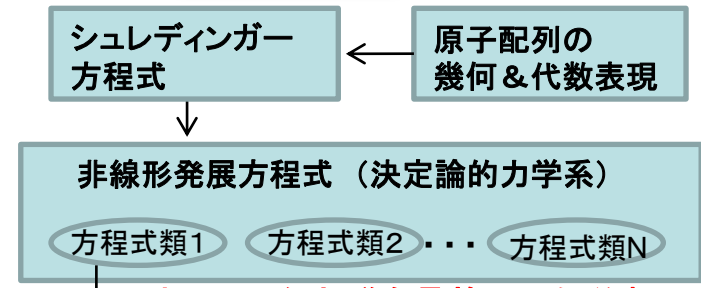
数学世界上での数理モデリングと現実世界への変換

**現実世界**

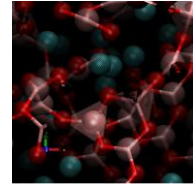
ミクロな系

メゾな系

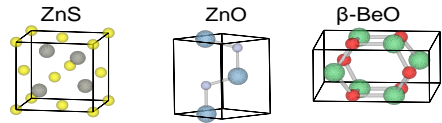
マクロな系



ガラス分子の原子配置



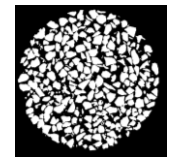
同一配位数の様々な結晶格子



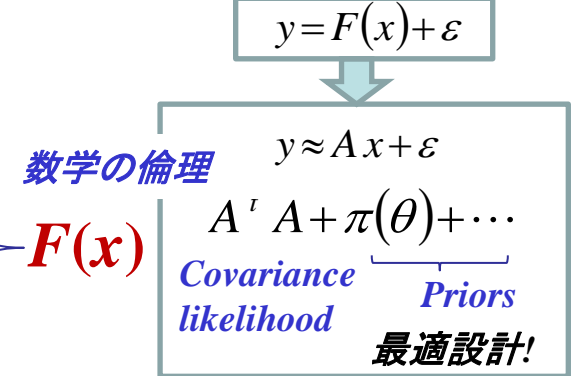
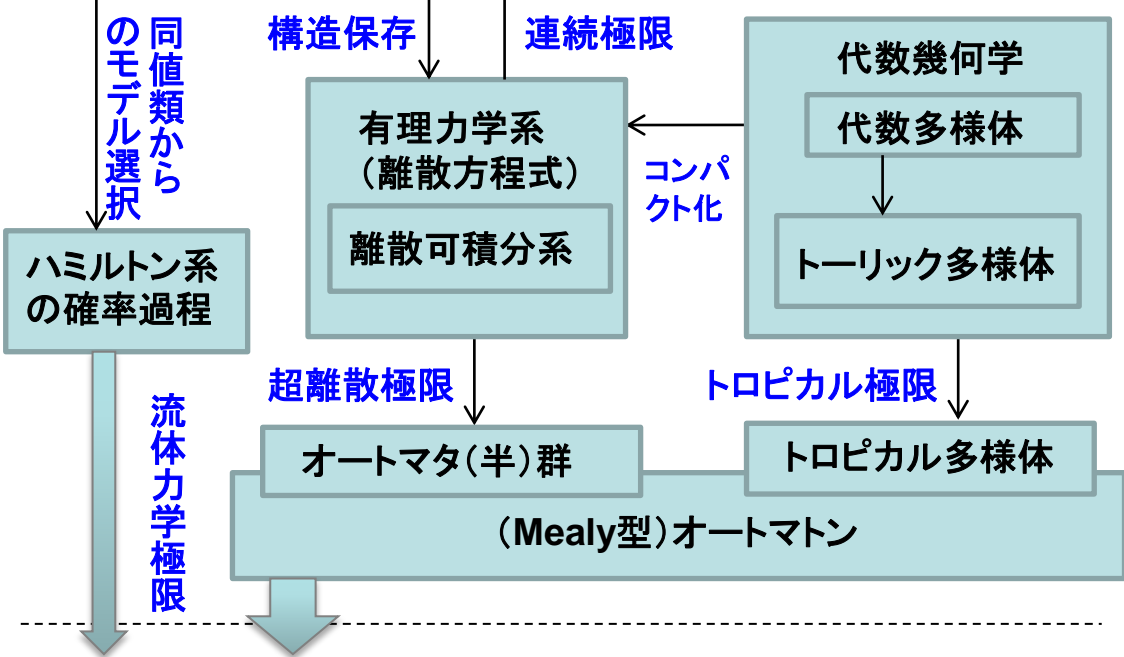
車の挙動データ



土壌粒子配置データ



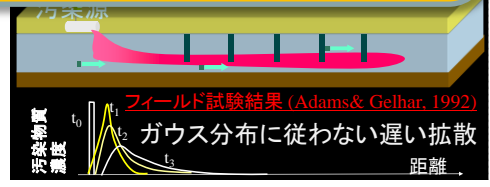
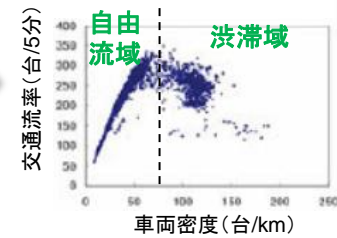
オートマタ半群を骨格にした分類



データ科学に繋ぐ Ultimate AI

マクロな系の機能最適化のため、多様性やバラツキの直接原因であるミクロな系を制御することが目標

交通流の基本ダイアグラム



統計学的検証

# そして、数学イノベーション

- (1) 数学により抽象化した枠組みのなかで現実世界の問題をとらえ問題の根源を明らかにすること、
- (2) 数学により構築した枠組みをもとに既存技術の再構築を図り、ゼロベースから新しい技術概念を創出すること、
- (3) 技術の出口をつくり、技術概念の製造現場や社会への普及を図り、イノベーションに繋げること

**数学が現場・社会を動かし、変える！**

ご清聴ありがとうございました。