定積分とホップ代数
-自励系から Rooted Tree へ-

南 範彦 （名古屋工業大学）

岡山理科大学　**20** 号館 **6** 階　基礎理共同大ゼミ室

2016-12-20 15:00-15:50

参考文献

- **A. Cayley On the theory of the analytical forms called trees, Phil.Mag.XIII (1857) 172-176.**
- **John C Butcher, Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, Second Edition, 2008 John Wiley & Sons, Chichester.**
- **hep-th9808042 Hopf Algebras, Renormalization and Noncommutative Geometry, Alain Connes, Dirk Kreimer, CMP 199 (1998) 203-242**
- **hep-th9904014 Runge-Kutta methods and renormalization, Christian Brouder, EurPhysJC12, 521-534,2000**
- **hep-th9904044 Lessons from Quantum Field Theory - Hopf Algebras and Spacetime Geometries, A Connes, D Kreimer, LettMathPhys 48 (1999) 85-96**
- **Christian Brouder, Trees, renormalization and differential equations, Numerical Mathematics 44 (2004), 425-438**

§1. 自励系常微分方程式

問題設定

- $\vec{F}:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}^N$, N次元ベクトル場
- $\vec{x}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}^N$, $\vec{F}$の積分曲線

すると$\vec{x}$の満たすべき方程式は，一般の自励系常微分方程式：

$$\boxed{\frac{d\vec{x}(s)}{ds}=\vec{F}\left(\vec{x}(s)\right)}$$

このとき，$\vec{x}(s)$の初期 $(s = s_0)$ 値問題としての (形式) 級数展開を具体的に与えよ.

勿論大学1年生でもここまで出来て...

$$\vec{x}(s) = \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \boxed{\frac{d\vec{x}(s')}{ds'}} = \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \boxed{\vec{F}\left(\vec{x}(s')\right)}$$

$$= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s' - s_0)^n}{n!} \left(\frac{d}{ds''}\right)^n \vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$$

$$= \vec{x}(s_0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s - s_0)^{n+1}}{(n+1)!} \left(\frac{d}{ds''}\right)^n \vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$$

ここで，　合成関数のn回微分

$$\left(\frac{d}{ds''}\right)^n \vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$$

をどうしたら上手く処理できるか？

取り敢えず計算..

$$\vec{x} = \left(x^1, \ldots, x^N\right), \quad \vec{F}(\vec{x}(s)) = \left(f^1[\vec{x}(s)], \ldots, f^N[\vec{x}(s)]\right)$$

と置いて，計算して行こう：

$$\frac{d}{ds} f^i[\vec{x}(s)] = \sum_j \frac{\partial f^i}{\partial x_j}[\vec{x}(s)] \frac{dx^j}{ds} = \sum_j \frac{\partial f^i}{\partial x_j}[\vec{x}(s)] f^j[\vec{x}(s)]$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{ds}\right)^2 f^i[\vec{x}(s)] &= \frac{d}{ds}\left(\sum_j \frac{\partial f^i}{\partial x_j}[\vec{x}(s)] f^j[\vec{x}(s)]\right) \\
&= \sum_{jk} \frac{\partial^2 f^i}{\partial x_j \partial x_k}[\vec{x}(s)] f^j[\vec{x}(s)] f^k[\vec{x}(s)] \\
&\quad + \sum_{jk} \frac{\partial f^i}{\partial x_j}[\vec{x}(s)] \frac{\partial f^j}{\partial x_k}[\vec{x}(s)] f^k[\vec{x}(s)].
\end{aligned}$$

更に計算を進めるには，記号の略記が必要...

しばしば目にする記号の略記

$$
\begin{aligned}
f^i &:= f^i[\vec{x}(s)] \\
f^i_{j_1 j_2 \cdots j_k} &:= \frac{\partial^k f^i}{\partial x_{j_1} \cdots \partial x_{j_k}}[\vec{x}(s)],
\end{aligned}
$$

と置けば，**Einstein** の記法を用い，前スライドの計算は次のように書ける：

$$
\left(\frac{d}{ds}\right) f^i[\vec{x}(s)] = f^i_j f^j \qquad \left(\frac{d}{ds}\right)^2 f^i[\vec{x}(s)] = f^i_{jk} f^j f^k + f^i_j f^j_k f^k,
$$

続いて $\left(\frac{d}{ds}\right)^3 f^i[\vec{x}(s)]$ を計算し，それを賢く鑑賞すれば，一般の場合の状況が見えてくるかも...

§2. Rooted Tree の導入 (Cayley, 1848)

$\left(\frac{d}{ds}\right)^3 f^i[\vec{x}(s)]$ の計算

$$\left(\frac{d}{ds}\right)^3 f^i[\vec{x}(s)] =$$
$$f^i_j f^j_k f^k_l f^l + f^i_j f^j_{kl} f^k f^l + 3 f^i_{jk} f^j_l f^k f^l + f^i_{jkl} f^j f^k f^l$$

各項は　rooted tree　(定義 $:=$ 基点付き1次元可縮単体的複体としての同値類)　としての解釈が出来る：

逆に，各　rooted tree t　に，$\vec{F}(\vec{x})$ の成分の偏微分たちから定まる量を対応させることを考えよう．

ベクトル場 $\vec{F}$ と rooted tree 離散和 t が定める $\delta_t^i[\vec{F}]$ と $\delta_t[\vec{F}]$

- スカラー場 $\delta_t^i[\vec{F}]$ $(1 \leqq i \leqq N)$ を帰納的に定義する：
  - $\delta_{\bullet}^i[\vec{F}] = f^i$ $(1 \leqq i \leqq N)$
  - $\delta^i_{B+(t_1,t_2,\cdots,t_k)} = f^i_{j_1 j_2 \cdots j_k} \delta^{j_1}_{t_1}[\vec{F}] \delta^{j_2}_{t_2}[\vec{F}] \cdots \delta^{j_k}_{t_k}[\vec{F}]$
  - $\delta_{t_1 \coprod t_2 \coprod \cdots \coprod t_l} = \delta_{t_1} + \delta_{t_2} + \cdots + \delta_{t_l}$
- 故に定まるベクトル場 $\delta_t[\vec{F}] := \left(\delta_t^1[\vec{F}], \delta_t^2[\vec{F}], \ldots, \delta_t^N[\vec{F}]\right)$

故に，δ_t^i $(1 \leq i \leq N)$，δ_t は皆，作用素となっている．

特に，最初の出発点が以下のようになっていることに注意する：

$$\boxed{\delta_{\bullet}[\vec{F}] = \vec{F}}$$

何故こんな自明な記法に注意すべきなのか...

形式厳密解のテーラー展開公式と N

実は以下の公式が成立する：

形式厳密解のテーラー展開公式

$$
\begin{aligned}
\vec{x}(s) &= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \left(\mathrm{exp}[(s'-s_0)N] \left(\delta_{\bullet}[\vec{F}](\vec{x}(s''))\right)\right)\Big|_{s''=s_0} \\
&= \vec{x}(s_0) + \sum_{t,\textbf{rooted tree}} \frac{(s-s_0)^{|t|}}{|t|!}\alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0)),
\end{aligned}
$$

以下，この公式と公式に現れる記号を説明して行こう... 最初に，N は一変数ベクトル値関数 $\vec{V}(s'')$ の成分毎による微分を与える線形作用素である：

$$
N\left(\vec{V}(s'')\right) := \left(\frac{d}{ds''}\right)\vec{V}(s'')
$$

何故こんな簡単な線形作用素に新しい記号 N を用いるのか？

$N = \frac{d}{ds}$ は Connes-Kreimer natural growth operator

実は，$N = \frac{d}{ds}$ は本質的に，rooted tree の離散和 t に対して定義される，Connes-Kreimer natural growth operator N なのである：

$$\boxed{N\left(\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s''))\right) \equiv \frac{d\left(\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s''))\right)}{ds''} = \delta_{N(t)}[\vec{F}](\vec{x}(s'')),}$$

Connes-Kreimer natural growth operator N は，

- rooted tree の離散和 t に対して，その節の総数の rooted tree たちからなる離散和 Nt を対応させる．
- Nt に現れる各 rooted tree は，対応する節に一つ節を接ぎ木して(というよりは**natural growth**の心からは対応する節から新しい節が育って生えて来て)出来た rooted tree .

懸案の $\left(\frac{d}{ds''}\right)^n \vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$

これさえ認めれば，当初懸案だった計算も...

$$\left(\frac{d}{ds''}\right)^n \vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0} = \left(\frac{d}{ds''}\right)^n \delta_{\bullet}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$$

$$= \delta_{N^n(\bullet)}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}$$

また，形式厳密解のテーラー展開公式前半も**cool**に導出される：

形式厳密解のテーラー展開公式前半導出

$$
\begin{aligned}
\vec{x}(s) &= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \boxed{\frac{d\vec{x}(s')}{ds'}} = \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \boxed{\vec{F}\left(\vec{x}(s')\right)} \\
&= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \ \vec{F}\left(\vec{x}(s'' + (s' - s_0))\right)\Big|_{s''=s_0} \\
&= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \ \left(\exp[(s' - s_0)N]\left(\vec{F}\left(\vec{x}(s'')\right)\right)\right)\Big|_{s''=s_0} \\
&= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \left(\exp[(s' - s_0)N]\left(\delta_{\bullet}[\vec{F}](\vec{x}(s''))\right)\right)\Big|_{s''=s_0} \\
&= \vec{x}(s_0) + \int_{s_0}^{s} ds' \ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s' - s_0)^n}{n!} \ \delta_{N^n(\bullet)}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0} \\
&= \vec{x}(s_0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s - s_0)^{n+1}}{(n+1)!} \ \delta_{N^n(\bullet)}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}
\end{aligned}
$$

形式厳密解のテーラー展開公式後半導出-1

後は，次の2番目の等号を示せば十分：

$$\vec{x}(s) = \vec{x}(s_0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s-s_0)^{n+1}}{(n+1)!} \boxed{\delta_{N^n(\bullet)}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}}$$

$$= \vec{x}(s_0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(s-s_0)^{n+1}}{(n+1)!} \boxed{\sum_{\substack{t,\text{rooted tree},\\ |t|=n+1}} \alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0))}$$

$$= \vec{x}(s_0) + \sum_{t,\text{rooted tree}} \frac{(s-s_0)^{|t|}}{|t|!}\alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0)),$$

- $|t|$ は **rooted tree** t の根節も含めた節の総数
- $\alpha(t)$ は **rooted tree** t の 形をした，**heap-ordered treees** **(i.e.** 節全体と $0, 1, \ldots, |t|-1$ との全単射対応番号付けで，任意の根節への部分一方経路に沿って番号が必ず減少するもの)の個数．

形式厳密解のテーラー展開公式後半導出-2

すると,

$$\boxed{\delta_{N^n(\bullet)}[\vec{F}]\left(\vec{x}(s'')\right)\Big|_{s''=s_0}} = \boxed{\sum_{\substack{t,\textbf{rooted tree}\\ |t|=n+1}} \alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0))}$$

は，すべての $|t| = n+1$ なる **rooted tree** t が，必ず $N^n(\bullet)$ に重複度 $\alpha(t)$ で現れることから従う．

斯くして，形式厳密解のテーラー展開公式が得られた：

形式厳密解のテーラー展開公式

$$\vec{x}(s) = \vec{x}(s_0) + \sum_{t,\textbf{rooted tree}} \frac{(s-s_0)^{|t|}}{|t|!}\alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0))$$

しかしながら，これはあくまでも「形式厳密解」で非実用的...

rooted tree の更なる不変量

- **rooted tree t の $\boxed{t!}$** を以下の帰納的定義で与える：
  - $\bullet! = 1$
  - $B^+(t_1, t_2, \ldots, t_k)! = \left|B^+(t_1, t_2, \ldots, t_k)\right| t_1! t_2! \cdots t_k!$
- **rooted tree t の symmetry factor $\boxed{\sigma(t)}$** は以下の帰納的定義で与えられる：
  - $\sigma(\bullet) = 1$
  - $t = B^+(t_1^{n_1}, \ldots, t_k^{n_k})$，ただし t_i $(1 \leqq i \leqq k)$たちは互いに異なっている，と表すと，

$$\sigma(t) = \prod_{1 \leqq i \leqq k} n_i! \cdot \sigma(t_i)^{n_i}$$

重要な組み合わせ論的関係式と，形式厳密解テーラー展開公式の書き換え

すると， 任意の**rooted tree** t に対して，

John Butcher

heap-ordered tree の個数 $\alpha(t)$ は，以下で与えられる：

$$\alpha(t) = \frac{|t|!}{t!\sigma(t)}$$

故に，形式厳密解テーラー展開公式も以下に書き換えられる：

形式厳密解テーラー展開公式書き換え

$$\begin{aligned}\vec{x}(s) &= \vec{x}(s_0) + \sum_{t,\text{rooted tree}} \frac{(s-s_0)^{|t|}}{|t|!}\alpha(t)\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0)) \\ &= \vec{x}(s_0) + \sum_{t,\text{rooted tree}} \frac{(s-s_0)^{|t|}}{\sigma(t)}\boxed{\frac{1}{t!}}\delta_t[\vec{F}](\vec{x}(s_0))\end{aligned}$$

John Butcher は， $\boxed{\frac{1}{t!}}$ に着目した．

John Butcher の着眼点

- **rooted tree** で生成される多項式環 $\mathcal{H}$ は ホップ代数の構造を持つ.
- $\mathcal{H}$のホップ代数構造によって定まる$\mathcal{H}$の指標のなす全体は群をなし，その単位元となるのが

$$t \mapsto \boxed{\frac{1}{t!}} \qquad \text{(厳密解に対応！)}$$

- 指標の群構造は，**Runge-Kutta** 近似計算法の合成適応に対応する.

次回 **1** 月 **6** 日の講演では，これらについての説明から始めます.

□