

# On determination of the structure of a periodic point set from its average theta series

富安（大石）亮子

RYOKO OISHI-TOMIYASU [ \* ]

山形大学/JST さきがけ

YAMAGATA UNIVERSITY/JST PRESTO [ † ]

## Abstract

結晶学分野で需要のある、3変数正定値2次形式の $\mathbb{Z}$ 上の表現に関わる問題を2つ紹介する。一つは2次形式の $\mathbb{Z}$ 上の表現からその2次形式の $\mathbb{Z}$ 上同値類が一意に決まるかという問題で、3変数正定値の場合、Kaplanskyによる予想がある。そこでどのような2次形式において一意性が成立しないかに関する調査を行った。Kaplanskyの予想をおおむね示唆するもののregularでない事例も少し得られたのでこれについて紹介する。もう一つは、ユークリッド空間内の格子 $L$ と、 $L$ を周期に持つ離散的点分布 $P$ に対して定まる平均テータ級数が与えられたとき、 $P$ に含まれる任意の2点をつなぐ差ベクトルの集合の候補をどこまで絞ることができるかという問題を紹介する。この問題に関わる結果として、平均テータ級数から $P$ の差ベクトルを推定する方法を提案し、具体的な計算結果も紹介する。

## 1 Introduction

本稿では以下の各節2, 3で以下の問題1, 2を扱う。それぞれの問題を議論する動機は結晶学への応用にあるので、その背景についても紹介する。ここで紹介する結果はすでに結晶学の具体的な解析に適用されているものである。

問題1 (Kaplansky 予想)  $\mathbb{Z}$ 上同値でない $\mathbb{R}$ 係数の正定値3変数2次形式 $f, g$ について、 $\mathbb{Z}$ 上表現の集合が完全に一致するとき、以下のいずれかが成立するか？

- (i) ある $c, d \in \mathbb{R}$ が存在して、 $\{f, g\} \sim \{c(x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2) + dx_3^2, c(x_1^2 + 3x_2^2) + dx_3^2\}$ ,
- (ii) ある $c, d \in \mathbb{R}$ が存在して、 $\{f, g\} \sim \{c(x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2) + d(x_1 + x_2 + 3x_3)^2, c(x_1^2 + 3x_2^2) + d(x_1 + 3x_3)^2\}$ ,
- (iii) ある $c \in \mathbb{R}$ が存在して、 $cf, cg$ は $\mathbb{Q}$ 係数かつregular.

上で使用した記号の意味を説明する。まず、 $R$ を環とする。2次形式 $f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} c_{ij}x_ix_j$ が $R$ 係数とは、全ての $1 \leq i < j \leq n$ について $c_{ij} \in R$ が成立することを指す。このとき、集合 $q_R(f) := \{f(x) : 0 \neq x \in R^n\}$ の元を $f$ の $R$ 上表現と呼ぶ。特に、 $f, g$ の $R$ 上表現が一致するとは、 $q_R(f) = q_R(g)$ が成立することである。以下では、 $f, g$ が $\mathbb{Z}$ 上同値、すなわち、ある $w \in GL_n(\mathbb{Z})$ が存在して $f(x) = g(wx)$ となることを、 $f \sim g$ で表す。 $\{f, g\} \sim \{f_2, g_2\}$ とは、 $f \sim f_2$ かつ $g \sim g_2$ が成立するか、または、 $f \sim g_2$ かつ $g \sim f_2$ が成立することを指す。 $\mathbb{Q}$ 係数の $f$ がregularとは、任意の $m \in \mathbb{Q}$ に対して、 $m \in q_{\mathbb{Z}}(f)$ が成立することと、任意の有理素数 $p$ について $m \in q_{\mathbb{Z}_p}(f)$ および $m \in q_{\mathbb{R}}(f)$ が成立することの間に同値条件が成立することである。

ある定数 $c \in \mathbb{Q}$ に対して $f \sim cf_2$ となる2次形式 $f, f_2$ を同一視したとき、regularな正定値3変数2次形式は高々913個しか存在しないことが知られている [7]。この913個の中にはregularであることが証明されていないものが14個残っている [9]。(この14個について一般化されたリーマン予想の下でregularであることが近年示されている [12].)

\*応用研究に紹介の機会を与えて頂いた本研究集会代表の先生方と金子昌信先生に感謝します。

†ryoko.tomiyasu@sci.kj.yamagata-u.ac.jp

問題2 ランク  $n$  の格子  $L \subset \mathbb{R}^n$  を平行移動したものの合併である周期的点集合  $P := \bigcup_{i=1}^m (x_i + L) \subset \mathbb{R}^n$  に対し,  $P$  の平均テータ級数が以下で定義される (cf. [3]).

$$\Theta_P(z) := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{l \in L} e^{\pi \sqrt{-1} z |l + x_i - x_j|^2}. \quad (1)$$

$\Theta_P$  と  $L$  が与えられたときに, 以下で定義される  $P$  の差ベクトル集合を取り出すことを考える.

$$D(P) := \{x - y : x, y \in P\} \quad (2)$$

より具体的には,  $G$  を格子  $L$  の自己同型群  $G := \{\sigma \in O(n) : L^\sigma = L\}$  としたとき, 以下の集合を一意的に決定することができるか? (応用上の関心は特に  $n = 3$  の場合にある.)

$$D_2(P) = \{(x - y)^\tau : x, y \in P, \tau \in G\}. \quad (3)$$

上記の2つの問題を考える直接の動機は, 結晶学分野で需要のある問題3を解くことである:

問題3 (粉末結晶の未知構造解析)  $n = 3$  とする. ある未知の周期的点集合  $P$  の平均テータ級数  $\Theta_P(z)$  が与えられたとする. もしくは,  $P = \bigcup_{i=1}^m (x_i + L)$  のような離散点集合の代わりに以下の周期的な分布を考える.

$$\rho(x) := \sum_{i=1}^m \sum_{l \in L} \gamma_i(x - x_i - l). \quad (4)$$

ただし  $\gamma_i$  は, 原点を中心とする正規分布またはデルタ関数に定数  $d_i \in \mathbb{C}$  をかけた関数である. 特に  $\int_{-\infty}^{\infty} \gamma_i(x) dx = d_i$  とする. さらに, 異なる  $x_i + l_1 \neq x_j + l_2$  ( $l_1, l_2 \in L$ ) 間の距離の下界  $r > 0$  が存在して,  $\gamma_i(x - x_i - l_1), \gamma_j(x - x_j - l_2)$  は互いによく分離されているとする. 結果として,  $\rho(x)$  の極大点は  $P$  の座標とほぼ一致する. この未知の  $\rho$  に対し, 以下で定義された平均テータ級数  $\Theta_\rho$  が与えられたとする.

$$\Theta_\rho(z) := \sum_{l \in L} \int_{(\mathbb{R}^n/L)^2} \rho(x) \rho(y) e^{\pi \sqrt{-1} z |x - y + l|^2} dx dy. \quad (5)$$

この与えられた  $\Theta_P$  (または  $\Theta_\rho$ ),  $L, m$  から以下を構成せよ.

- (I)  $L$  の2次形式 (つまり  $|\ast|$  をユークリッドノルムとしたときに  $L$  の基底  $v_1, v_2, v_3$  が定める  $f(x) = |x_1 v_1 + x_2 v_2 + x_3 v_3|^2$ ) の  $\mathbb{Z}$  上同値類の全ての候補,
- (II) 座標点集合  $x_1, \dots, x_m \in \mathbb{R}/L$  (さらに  $\Theta_\rho$  が与えられた場合は  $d_1, \dots, d_m$ ) の全ての候補. ただし平行移動によって一致するものは同一視する.

問題の理解のため,  $\Theta_\rho$  の関数等式を与えておく.

$$\Theta_\rho(z) = \frac{1}{\text{vol}(\mathbb{R}^n/L)} \left( \frac{\sqrt{-1}}{z} \right)^{n/2} \sum_{l^* \in L^*} \exp\left(-\frac{\pi \sqrt{-1}}{z} |l^*|^2\right) |c_\rho(l^*)|^2. \quad (6)$$

ただし  $L^*$  は  $L$  の双対格子  $L^* := \{l^* \in \mathbb{R}^n : l \in L \Rightarrow l \cdot l^* \in \mathbb{Z}\}$  で,  $c_\rho(l^*)$  は  $\rho$  のフーリエ係数  $\int_{\mathbb{R}^n/L} \rho(x) e^{2\pi \sqrt{-1} x \cdot l^*} dx$  である. よって,  $\Theta_\rho$  から直ちに以下を抽出できることが分かる.

$$\Lambda_\rho := \{ |l^*|^2 : 0 \neq l^* \in L^*, c_\rho(l^*) \neq 0 \}, \quad (7)$$

$$F_\rho(q) := \sum_{l^* \in L^*, q = |l^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2. \quad (8)$$

テータ級数の場合と異なり, 各表現  $m \in q_\mathbb{Z}(f)$  の多重度, すなわち  $\#\{x \in \mathbb{Z}^3 : f(x) = m\}$  は平均テータ級数から直ちには得られないことが分かる.  $F_\rho(q)$  の形から, 問題3は位相回復と呼ばれる問題をさらに難しくしたものになることが分かる. ただし位相回復とは, 密度分布  $\rho(x)$  を, そのフーリエ変換  $\hat{\rho}$  の絶対値  $|\hat{\rho}(x^*)|$  の情報から構成する解析を指す.

(I), (II) で全ての候補とあるのは解の一意性が成立しないためだが,  $q_\mathbb{Z}(f)$  から4変数以下の2次形式  $f$  の  $\mathbb{Z}$  上同値類を決定する問題の解は必ず有限個になり, (I) においても幅広いケースにおいて, 解となる  $L$  の数が有限であることは示すことができる (以下の問題2の背景の説明の箇所を参照). また, (II) において差ベクトル集合  $D(P)/L$  を含む  $\mathbb{R}^n/L$  の有限集合が与えられたとき  $x_1, \dots, x_m$  を与える解の数が有限個であることも示すことができる.

結晶学において最も標準的な位相回復の問題は, 問題3のところで述べた  $P, \rho$  の制約の下で以下の問題を解くことである.

問題 4 (単結晶未知構造解析)  $L^*$  と  $|c_\rho(l^*)|^2$  ( $l^* \in L^*$ ) が与えられたとき,  $L$  と  $x_1, \dots, x_m$  の候補 (もしくは  $\rho$  の極大点の座標) を全て求めよ.

$L^*$  の双対格子は  $L$  であるため, 問題 4 において  $L$  を求める部分は自明である. また問題 2 のような差ベクトルの抽出も, 以下の  $F(x)$  の極大点の座標が差ベクトルの座標になることから数学の問題として難しくないことが分かる.

$$F(x) = \int_{\mathbb{R}^3/L} \rho(x-z)\overline{\rho(-z)}dz = \text{vol}(\mathbb{R}^n/L)^{-2} \sum_{l^* \in L^*} |c_\rho(l^*)| \exp(2\pi\sqrt{-1}x \cdot l^*) \quad (9)$$

以下では問題 1, 2 に関わる背景と本稿の結果について述べる.

(問題 1 の背景と結果について) Kaplansky 予想は問題 3 の (I) における解の一意性に関わる問いでもあるが, 全く同じ問題が先行して数理結晶学分野でも調べられている [8]. 著者は (I) について実験データに適用可能な解法を提案したことがあり [6, 11], このことが問題 1 を考えたきっかけになる.

問題 1 の仮定を 3 変数から 2 変数に変えた場合,  $\mathbb{Z}$  上同じ表現を持つ 2 次形式を理論的に全て求めることは難しくない. 特に 2 変数で正定値の場合は,  $q_z(f) = q_z(g)$ ,  $f \not\sim g$  となるのは以下の場合に限られる [16], [17] (正定値条件を外した場合の結果は [4], [5]).

$$\{cf, cg\} \sim \{x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2, x_1^2 + 3x_2^2\} \text{ for some } c > 0. \quad (10)$$

したがって 3 変数の場合には, 上記の (i) のような  $q_z(f) = q_z(g)$  を満たす無限系列が存在することはすぐ分かる. にも関わらず 3 変数の場合にも, 何らかの強い制約が存在していることが Kaplansky 予想が述べていることである.

本稿では, まず, 予想の (iii) に関わる部分, すなわち (i), (ii) に含まれる場合を除けば, どのような正定値 2 次形式が同じ  $\mathbb{Z}$  上表現を持つのかに関する計算結果を与える.  $\mathbb{R}$  係数の  $f, g$  が  $q_z(f) = q_z(g)$  を満たすものが存在した場合, そこから,  $\mathbb{Z}$  係数の  $f_2, g_2$  で  $q_z(f_2) = q_z(g_2)$  を満たすものが無限個生成されることから (Lemma 2.1), 探索範囲を  $\mathbb{Z}$  係数とすることができる. 今回探索を行った範囲は, 得られた 2 次形式 (表 2-4) が現れた範囲よりもかなり広いことから, (i), (ii) の形のもと, 表 2-4 で得られた 151 の 2 次形式の  $\mathbb{Z}$  上同値類が, Kaplansky 予想に該当する 2 次形式の全てを尽くしていることが予想される. しかし, この 151 の同値類の中には regular でないものも 15 個入っており, 計算結果から得られる予想は Kaplansky の予想とはわずかながら異なる.

現在, 表 2-4 の中に現れる 2 次形式について, 全ての  $\mathbb{Z}$  上表現が一致するということがきちんと証明されているものは regular であるものに限られる. 上記の非 regular な 15 個と regular であることが証明されていない 1 個については, ある定数  $C$  より小さな表現について一致することが計算によってチェックされたのみになる (現行の方法でも示される可能性は残っている).

結果として, Kaplansky 予想と計算結果に食い違いは見られたものの, 2 次形式が定数倍して  $\mathbb{Q}$  係数となる場合を除けば (i), (ii) に限られることは一致しており, つまり上記の予想は以下を含む.

問題 5 (Kaplansky 予想の系)  $(A_i, B_i)$  ( $i = 1, 2$ ) は  $\mathbb{Q}$  係数 2 次形式  $A_i, B_i$  のペアで以下を満たすとす.

- (a)  $A_i$  と  $B_i$  は  $\mathbb{Q}$  上線形独立,
- (b)  $cA_i + dB_i$  はある  $c, d \in \mathbb{Q}$  に対して正定値 (つまり d-pencil),
- (c)  $q_z(A_1, B_1) = q_z(A_2, B_2)$ .

このとき, ある  $w \in GL_3(\mathbb{Z})$  に対して  $(A_1, B_1) = (w, 1) \cdot (A_2, B_2)$  が成立するか, または, ある  $(w_i, v) \in GL_3(\mathbb{Z}) \times GL_2(\mathbb{Q})$  ( $i = 1, 2$ ) が存在して  $\{(A_1, B_1), (A_2, B_2)\}$  は以下に等しい.

- (i)  $\{(w_1, v) \cdot (x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2, x_3^2), (w_2, v) \cdot (x_1^2 + 3x_2^2, x_3^2)\}$ ,
- (ii)  $\{(w_1, v) \cdot (x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2, (x_1 + x_2 + 3x_3)^2), (w_2, v) \cdot (x_1^2 + 3x_2^2, (x_1 + 3x_3)^2)\}$ .

上記の記号についてだが, まず,  $q_z(A_i, B_i) := \{(A_i(x), B_i(x)) : 0 \neq x \in \mathbb{Z}^3\}$  の元は,  $(A_i, B_i)$  の  $\mathbb{Z}$  上同時表現 (simultaneous representation) と呼ばれるものである. また,  $\mathbb{Q}$  係数の 2 次形式のペアの集合  $(\text{Sym}^2\mathbb{Q}^3)^* \otimes_{\mathbb{Q}} \mathbb{Q}^2$  に対して,  $GL_3(\mathbb{Q}) \times GL_2(\mathbb{Q})$  は以下のように作用する:

$$\left( w, \begin{pmatrix} r & s \\ t & u \end{pmatrix} \right) \cdot (A, B) = (rA(xw) + sB(xw), tA(xw) + uB(xw)). \quad (11)$$

予想に現れた (i), (ii) のいずれれもが  $\det(A_ix - B_iy) = 0$  が重根を持つ場合に該当するが, そのような条件下 (つまり,  $\det(A_ix - B_iy) = 0$  が  $i = 1$  または 2 で重根を持つ) において,  $\mathbb{Z}$  上同時表現が完全に一致する場合は (i), (ii) のいずれかに限られることを示すことは容易である (Theorem 1, [10]). また最近, 著者は以下を示した. これについての議論は [10] を参照して欲しい.

**Theorem 1** (Theorem 2, [10]).  $(A_1, B_1), (A_2, B_2) \in (\text{Sym}^2 \mathbb{Q}^3)^* \otimes \mathbb{Q}^2$  において以下が成立するとする.

(a)  $A_i$  and  $B_i$  are linearly independent over  $\mathbb{Q}$ .

(b')  $(A_i, B_i)$  is non-singular and anisotropic over  $\mathbb{Q}$ .

(c')  $q_{\mathbb{Q}}(A_1, B_1) = q_{\mathbb{Q}}(A_2, B_2)$ .

このとき、互いに素な  $r_1, r_2 \in \mathbb{Z}$  で、 $r_1^{-1} \det(A_1 x - B_1) = r_2^{-1} \det(A_2 x B_2)$ ,  $(r_1 A_1, r_1 B_1), (r_2 A_2, r_2 B_2)$  が  $GL_3(\mathbb{Q}) \times \{1\}$  の作用で互いに写り合うようなものが存在する。□

(問題 2 の背景と結果について) 平均テータ級数は、球によるユークリッド空間の充填問題を考えたとき、その密度の上限を与える議論の中で重要な役割を果たす、ユークリッド空間の周期的な点分布に対して定まる数学的不変量である (cf. [1]).  $\Theta_P$  がテータ級数の場合が等スペクトル多様体の例として用いられてきたこと (cf. [14]) を除けば、 $P$  を解読するという文脈で平均テータ級数が議論されたことはなかったと考えられる。粉末結晶の回折データの解析において扱われる実験データと平均テータ級数の持つ情報の同値性に気づいたことが、著者がこの数理結晶学分野の応用研究を開始した動機になる (cf. [18])。この応用分野における最大の関心事は、3次元の低次元空間の packing を考えるからこそ可能なスベクトルの解読にある。

問題 2 のような差ベクトルを導出する問題は、問題 3 を解くにあたって最も難易度が高く、応用上も重要な部分となる。なぜなら、まず、(I) を解いて  $L$  を有限個の候補に絞ることは可能である。少なくとも、ある正整数  $M$  の値が与えられており、 $\{|l^*| : l^* \in ML^*\} \subset \Lambda_\rho$  が式 (7) の  $\Lambda_\rho$  について成立することがあらかじめ分かっているとき、表 1 のアルゴリズムを少し拡張して有限回のステップ数で  $L$  の候補を全て得ることができる。(この状況は実際の結晶構造の解析を行っているときに確率的な意味で仮定でき、結果として実験データから観測誤差で  $L$  を決める解析も十分な成功率で実施できている。とはいえ、非常に確率の小さい偶然で、多数の  $l^* \in L^*$  で  $c_\rho(l^*) = 0$  が起きる場合を無視しているので数学の議論としては不十分であろう。) また、定数  $d_i$  の算出は、 $x_1, \dots, x_m$  が得られた後であれば、2次以下の多項式の連立方程式を解くことにあたり、グレブナー基底等による方法で厳密解を全て求めることは可能である。(観測値を扱う場合も半正定値計画法と呼ばれる最適化問題に帰着することで、解を求めたり一意性などのチェックを行うことができる。) したがって、式 (2), (3) の  $D(P)$  または  $D_2(P)$  など、 $D(P)$  を含む有限集合が得られれば、 $x_1, \dots, x_m$  および  $d_1, \dots, d_m$  の候補解を全て計算によって求めることは原理的に可能である。結果として、問題 3 の最大の障害となり得る部分は差ベクトル集合  $D(P), D_2(P)$  などを得る部分になる。(問題 4 でも、 $m$  が大きく観測誤差を考慮する必要がある状況では、差ベクトル集合の獲得はボトルネックになり得る。)

節 3.1 で、平均テータきゆうすうから式 (3) の  $D_2(P)$  を含む差ベクトルの情報を抽出するための具体的な方法を紹介する。上記の  $P$  が式 (4) の  $\rho(x)$  に対応するのと同様に、以下の  $f_0(x)$  は  $D_2(P)$  に対応している。この  $f_0(x)$  が  $\Theta_\rho$  から構成できれば問題 2 は解決する。他方、平均テータ級数から算出可能な分布  $H_3(x)$  においては、以下のフーリエ級数展開からも分かるように、 $f_0(x)$  よりわずかに各  $|c_\rho(l_2^*)|^2$  に関する情報が劣化している。

$$f_0(x) = \sum_{l^* \in L^*} \exp(2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \frac{1}{\#\{\tau(l^*) : \tau \in G\}} \sum_{l_2^* \in \{\tau(l^*) : \tau \in G\}} |c_\rho(l_2^*)|^2,$$

$$H_3(x) = \sum_{l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \frac{1}{\#\{l_2^* \in L^* : |l^*|^2 = |l_2^*|^2\}} \sum_{l_2^* \in L^*, |l^*|^2 = |l_2^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2.$$

いくつかの具体的な結晶構造が定める分布  $\rho(x)$  の平均テータ級数  $\Theta_\rho$  から、上記の  $f_0$  と  $H_3(x)$  等を算出し、情報の劣化がどの程度、得られる  $D_2(P)$  の情報 ( $f_0(x), H_3(x)$  の極大点座標) に影響するかという調査を行ったので結果を紹介する。

## 2 $\mathbb{Z}$ 上同じ表現を持つ $\mathbb{Q}$ 上の 3 変数正定値 2 次形式の探索

問題 1 に提示した Kaplansky 予想は  $\mathbb{R}$  係数の正定値 2 次形式の場合も含むが、 $\mathbb{Q}$  係数の場合を探索すれば、 $\mathbb{R}$  上の場合がどの程度存在するかの情報も得ることができる。実際、 $q_{\mathbb{Z}}(S_1) = q_{\mathbb{Z}}(S_2)$  となる  $\mathbb{R}$  係数の  $S_1, S_2$  に対して、以下の補題のように分解  $S_i = \sum_{j=1}^s \lambda_j T_{ij}$  を取れば、各  $j$  について  $T_{ij}$  は  $\mathbb{Q}$  係数かつ  $q_{\mathbb{Z}}(T_{1j}) = q_{\mathbb{Z}}(T_{2j})$  を満たしている。(さらに定数倍して、 $T_{ij}$  が  $\mathbb{Z}$  係数であることも仮定できる。)

**Lemma 2.1.** [Lemma 2.1, [10]] 各  $S_i$  ( $1 \leq i \leq m$ ) を、 $\mathbb{R}$  係数の  $N_i$  変数正定値 2 次形式とする。このとき、ある正数  $\lambda_1, \dots, \lambda_s \in \mathbb{R}_{>0}$  で  $\mathbb{Q}$  上 1 次独立なものと、 $\mathbb{Q}$  係数の  $N_i$  変数正定値 2 次形式  $T_{ij}$  ( $1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq s$ ) で  $S_i = \sum_{j=1}^s \lambda_j T_{ij}$  を各  $i$  に対してそれぞれ満たすものが存在する。

一般に、変数の数が 4 以下で  $\mathbb{R}$  係数の正定値 2 次形式  $f$  が与えられたとき、それと全く同じ  $\mathbb{Z}$  上表現を持つ 2 次形式を全て与えるアルゴリズムを与えることは可能である。(実数型で丸め誤差が存在する場合、それを考慮する必要はある。) [10] で与えたアルゴリズムを表 1 に示す。

表 1:  $\Lambda = \langle q_1, \dots, q_t \rangle$  が  $q_{\mathbb{Z}}(f) \cap (0, q_t]$  と一致する 2 次形式  $f$  の類を全て求める再帰関数

---

<b>void func</b> ( $\Lambda, N, S, m, n, q_{min}, q_{max}, Ans$ )	
(Input)	$\Lambda$ : a sorted sequence $\langle q_1, \dots, q_t \rangle$ of positive numbers $1 \leq N \leq 4$ : number of variables, $S$ : a quadratic form $(s_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ $m, n$ : integers $1 \leq m \leq n \leq N$ indicating that the algorithm is determining the $(m, n)$ -entry of $S$ $q_{min}, q_{max}$ : numbers satisfying $\begin{cases} q_{min} \leq s_{nn} \leq q_{max} & \text{if } m = n, \\ q_{min} \leq s_{mm} + s_{nn} + 2s_{mn} \leq q_{max} & \text{otherwise.} \end{cases}$
(Output)	$Ans$ : an array of $N \times N$ Minkowski-reduced symmetric matrices $\tilde{S} := (\tilde{s}_{ij})$ that satisfy $\begin{cases} \tilde{s}_{NN} \leq q_t, \Lambda \cap [0, \tilde{s}_{NN}] \subset q_{\mathbb{Z}}(\tilde{S}), \\ \tilde{s}_{nn}, \tilde{s}_{mm} + \tilde{s}_{nn} + 2\tilde{s}_{mn} \in \Lambda. \end{cases}$
(Start)	
1:	Take integers $I$ and $J$ such that $\Lambda \cap [q_{min}, q_{max}] = \langle q_I, \dots, q_J \rangle$ .
2:	for $l = I$ to $J$ do
3:	if $m = n$ then
4:	$s_{nn} := q_l$ .
5:	else
6:	$s_{mn} := s_{nm} := \frac{1}{2}(q_l - s_{mm} - s_{nn})$ .
7:	end if
8:	if $m = 1$ then
9:	if $n \geq N$ then
10:	Insert $S$ in $Ans$ .
11:	else
12:	$T := (s_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ . /* an $n$ -by- $n$ submatrix of $S$ */.
13:	$t_2 := \max \{1 \leq i \leq t : q_1, \dots, q_{i-1} \in q_{\mathbb{Z}}(T)\}$ .
14:	func( $\Lambda, N, S, n+1, n+1, s_{nn}, q_{t_2}, Ans$ ).
15:	end if
16:	else
17:	Take $p_{min}, p_{max}$ such that $s_{m-1, n}$ and the determined entries $s_{m-1, m-1}, s_{nn}$ of $S$ fulfill the conditions to be Minkowski-reduced iff $p_{min} \leq s_{m-1, m-1} + s_{nn} + 2s_{m-1, n} \leq p_{max}$ .
18:	func( $\Lambda, N, S, m-1, n, S, p_{min}, p_{max}, Ans$ ).
19:	end if
20:	end for

---

表 1 の方法が有限個のステップ数で終了することは、正定値 2 次形式の満たす以下の性質から示すことができる。

- $S, S_2$  はそれぞれ  $N, N_2$  変数の 2 次形式として、 $1 \leq N_2 < N \leq 4$  とすると、 $q_{\mathbb{Q}}(S_2) \not\supset q_{\mathbb{Q}}(S)$ .
- $N = 4$  変数以下の Minkowski 簡約な 2 次形式  $S = (s_{ij})$  について、 $s_{ii}$  は  $i$  番目の逐次最小に等しくすることが可能、すなわち以下が成立する (cf. [15]).

$$s_{nn} = \min \left\{ \max \{S(v_i) : 1 \leq i \leq n\} : \begin{array}{l} v_1, \dots, v_n \in \mathbb{Z}^N \\ \text{are linearly independent over } \mathbb{Q} \end{array} \right\}. \quad (12)$$

このことは、4 変数以下の正定値 2 次形式に対して、同じ  $\mathbb{Z}$  上表現を持つ 2 次形式の類は有限個しかないことの証明も与える。5 変数以上の場合、同じ表現を持つ 2 次形式の類は無数個ある場合があるので理論的限界にも一致している。

表1では、入力パラメータの  $\Lambda$  は、実数を小さい順に並べた有限長さの配列としたが、2次形式  $S_0$  を固定して、 $\Lambda := (0, q] \cap q_{\mathbb{Z}}(S_0)$  とし、必要が生じたときには区間  $(0, q]$  を拡大して、計算上必要な範囲まで大きな  $q_{\mathbb{Z}}(S_0)$  の元が取得できるよう、プログラムを実装することは可能である。

アルゴリズム実行後には、出力される配列  $Ans$  に含まれる各2次形式  $S$  に対して以下を行う必要がある。

- (a) あらかじめ準備しておいた定数  $C$  に対し、 $\Lambda(S) \cap [0, C]$  が成立してないものを取り除く、
- (b) 同じ  $\mathbb{Z}$  上同値類に属す2次形式が  $Ans$  に含まれていたら、どちらかを取り除く。

表1のアルゴリズムを以下の範囲にある2次形式  $S_0 = \sum_{1 \leq i < j \leq 3} s_{ij} x_i x_j$  に適用した。

- (P1)  $\mathbb{Z}$  係数かつ  $s_{11}, s_{22}, s_{33}, s_{12}, s_{13}, s_{23}$  は1より大きな共通因子を持たない。
- (P2) Minkowski 簡約である (すなわち対角成分  $s_{11}, s_{22}, s_{33}$  が1, 2, 3番目の逐次最小に等しい) ことに加えて、以下の制約条件を満たす (これにより3変数正定値2次形式は一意的に表される):
  - (1)  $s_{12}, s_{13}, s_{23} > 0$  OR  $s_{12}, s_{13}, s_{23} \leq 0$ ,
  - (2)  $s_{11} = s_{22} \implies |s_{23}| \leq |s_{13}|$ ,
  - (3)  $s_{22} = s_{33} \implies |s_{13}| \leq |s_{12}|$ .
- (P3)  $s_{33} \leq 115$  (探索範囲の拡大はこの上限を増やすことで行われる)。

加えて、[7]に記載されている913個の2次形式 (regular, またはその可能性があるもの) も入力して、同様の探索を行ったが、これにより新しいケースが得られることはなかった。

結果を表2-4に示す。以下のいずれかに完全に一致するケースはこの表から除かれている。

- (i)  $\{c(x^2 - xy + y^2) + dz^2, c(x^2 + 3y^2) + dz^2\}$ ,
- (ii)  $\{c(x^2 - xy + y^2) + d(x + y + 3z)^2, c(x^2 + 3y^2) + d(x + 3z)^2\}$ ,

No.1-53の各グループのうち regular でないグループは15個あった。各グループに属す2次形式について、genus representation (すなわち同じ種に属す2次形式のうち少なくとも一つによって表現される整数) が完全に一致すること、および  $\max\{30000, 50d\}$  より小さい  $\mathbb{Z}$  上表現が完全に一致することを確認している。ただし、 $d$  は各グループに属す2次形式 (つまり以下の対称行列) の行列式のうち最大のものとした。

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12}/2 & s_{13}/2 \\ s_{12}/2 & s_{22} & s_{23}/2 \\ s_{13}/2 & s_{23}/2 & s_{33} \end{pmatrix} \quad (13)$$

このことから、regular であることが示されている2次形式については  $(0, \infty)$  の範囲にある  $\mathbb{Z}$  上表現が全て一致することが分かる。

表2-4に出てくる2次形式では  $s_{33}$  は最大で68、非 regular なものに限れば最大で41である。これは探索範囲の115と比較すれば小さい値であり、これらと上記の(i), (ii)によって、 $\mathbb{Z}$  上表現が一致する3変数正定値2次形式の組が全て尽くされていることが予想される。結果として、regular でない組もいくつか見つかったものの、Kaplansky 予想の具体的な形が得られたことになる。

### 3 平均テータ級数からの差ベクトル情報の導出

位相回復とは、求めたい密度分布  $\rho(x)$  を、そのフーリエ変換の絶対値  $|\hat{\rho}(x^*)|$  の情報から得る解析を指す。この条件のみから問題を解こうとすると、通常、実験データからの位相回復は underdetermined, すなわち  $|\hat{\rho}(x^*)|$  の値が与えられている  $x^*$  の数が、 $\rho(x)$  の概要を与えるために必要な  $x$  の数より少ないことが多い。それを解消するために、個々の観測の状況に応じてどのような制約条件を設定すべきかといった問題が、具体的に  $\rho(x)$  をどのように構成すればよいかという方法論の議論において生じる。

問題2, 3を解くにあたって、 $\rho(x)$  にかかる制約は、問題3の式(4)について記述したものになる。つまり、 $\rho(x)$  はある  $P = \bigcup_{i=1}^m (x_i + L)$  に、Gaussian 関数に似た鋭い立ち上がりを持つピークの極大点が現れる関数で、 $m$  の値は既知と仮定できる。

また定義より、 $\Theta_P$  は各  $\gamma_i$  をデルタ関数  $\delta$  とし、 $\rho(x) := \sum_{z \in P} \delta(x - z)$  とおいたときの  $\Theta_P$  に等しい。以下では、問題2の仮定において与えられたのは  $\Theta_P$  で、 $\rho$  を構成する各  $\gamma_i$  はデルタ関数ではなく正規分布の定数倍であること (特に  $\rho$  の取る値は有限値であること) を仮定することにする。ただし、式(14)の各  $|c_\rho(l^*)|^2$  における正規分布の  $l^*$  における値をそれぞれかけることによって、デルタ関数を正規分布に置き換えて、 $\Theta_P$  から  $\Theta_\rho$  を作ることはできるので、基本的に  $\Theta_\rho$  が与えられたときにできることは、 $\Theta_P$  が与えられたときにできることになる。

表 2:  $\mathbb{Z}$  上同じ表現を持つ 3 変数正定値 2 次形式 (1/3)

No. Determinant (Ratio)	$s_{11}$	$s_{22}$	$s_{33}$	$s_{12}$	$s_{13}$	$s_{23}$	Integers not represented by the genus	Braivais Type
1 $^{**}2^9 \cdot 3^3 (8)$	11	32	44	-8	-4	-16	$4n+1, 4n+2, 8n+7, 2^2(4n+1), 2^2(4n+2),$	Triclinic
$^{**}2^6 \cdot 3^3 \cdot 11 (11)$	11	32	59	8	10	8	$3n+1, 3^{2k+1}(3n+1)$	Triclinic
2 $^{**}2^9 \cdot 3^2 (8)$	5	20	48	-4	0	0	$4n+2, 4n+3, 8n+1, 2^2(4n+2), 2^2(4n+3),$	Monoclinic(P)
$^{*}2^6 \cdot 3^2 \cdot 11 (11)$	5	20	68	-4	-4	-8	$3^{2k}(3n+1)$	Triclinic
3 $^{**}2^9 \cdot 3^2 (8)$	17	17	20	-14	-4	-4	$4n+2, 4n+3, 8n+5, 2^2(4n+2), 2^2(4n+3),$	Monoclinic(C)
$^{**}2^6 \cdot 3^2 \cdot 11 (11)$	17	20	20	-4	-4	-8	$3^{2k}(3n+1)$	Monoclinic(C)
4 $^{**}2^9 \cdot 3 (8)$	7	15	16	-6	0	0	$4n+1, 4n+2, 8n+3, 2^2(4n+1), 2^2(4n+2),$	Monoclinic(P)
$^{*}2^6 \cdot 3 \cdot 11 (11)$	7	15	23	-6	-2	-6	$3^{2k+1}(3n+1)$	Triclinic
5 $^{**}2^9 \cdot 3 (8)$	11	11	16	6	8	8	$4n+1, 4n+2, 8n+7, 2^2(4n+1), 2^2(4n+2),$	Monoclinic(C)
$^{**}2^6 \cdot 3 \cdot 11 (11)$	11	11	19	6	2	2	$3^{2k+1}(3n+1)$	Monoclinic(C)
6 $^{**}2^9 \cdot 3^3 (8)$	8	11	11	-4	-4	-2		Monoclinic(C)
$^{**}2^2 \cdot 3^3 \cdot 11 (11)$	8	11	15	-4	0	-6	$4n+1, 4n+2, 3n+1, 3^{2k+1}(3n+1)$	Triclinic
7 $^{**}2^5 3^2 (8)$	5	5	12	-2	0	0	$4n+2, 4n+3, 3^{2k}(3n+1)$	Orthorhombic(C)
$^{**}2^2 3^2 11 (11)$	5	5	17	-2	-2	-2		Monoclinic(C)
8 $^{**}2^5 3 (8)$	4	4	7	0	-4	0	$4n+1, 4n+2, 3^{2k+1}(3n+1)$	Orthorhombic(C)
$^{**}2^2 3 11 (11)$	4	7	7	-4	0	-6		Monoclinic(C)
9 $^{**}2^2 3^3 5 (5)$	5	8	17	4	2	8	$4n+2, 4n+3, 3n+1, 3^{2k+1}(3n+1)$	Monoclinic(C)
$^{**}2^5 3^3 (8)$	5	8	24	-4	0	0		Monoclinic(P)
10 $^{**}2^2 3^2 5 (5)$	3	8	8	0	0	-4	$4n+1, 4n+2, 3^{2n}(3n+1)$	Orthorhombic(C)
$^{**}2^5 3^2 (8)$	3	8	12	0	0	0		Orthorhombic(P)
11 $^{**}2^2 3 5 (5)$	1	4	16	0	0	-4	$4n+3, 4n+2, 3^{2k+1}(3n+1)$	Orthorhombic(C)
$^{**}2^5 3 (8)$	1	4	24	0	0	0		Orthorhombic(P)
12 $2^{-2} 3^3 5^2 (25)$	5	5	8	-2	-4	-1	$3n+1, 3^{2k+1}(3n-1)$	Triclinic
$2^{-2} 3^3 37 (37)$	5	8	8	-4	-1	-5		Triclinic
13 $2^{-2} 3^2 5^2 (25)$	3	4	7	-3	0	-4	$3^{2k}(3n-1)$	Monoclinic(C)
$2^{-2} 3^2 37 (37)$	3	4	7	0	0	-1		Monoclinic(P)
14 $2^{-2} 3 5^2 (25)$	1	4	5	0	-1	-1	$3^{2k+1}(3n-1)$	Monoclinic(C)
$2^{-2} 3 37 (37)$	1	4	7	0	0	-1		Monoclinic(P)
15 $2 \cdot 3^4 (1)$	4	7	7	2	2	5	$4n+2, 3n-1, 3(3n \pm 1), 2^{2k+1}(8n+7)$	Monoclinic(C)
$2^3 \cdot 3^4 (4)$	4	7	25	-2	-2	-4		Triclinic
16 $2^{-1} \cdot 3^5 (1)$	2	2	41	-2	-1	-1	$3n+1, 3^2(3n+1), 3^{2k+1}(3n+1)$	Orthorhombic(F)
$2 \cdot 3^5 (4)$	2	6	41	0	-1	-3		Triclinic
17 $2^{-1} 3^4 (1)$	2	2	14	-2	-1	-1	$3(3n+1), 3^{2k}(3n+1)$	Orthorhombic(F)
$2 \cdot 3^4 (4)$	2	6	14	0	-1	-3		Triclinic
18 $2^{-1} 3^3 (1)$	2	2	4	0	-2	-1	$3(3n-1), 3^{2k+1}(3n+1)$	Monoclinic(C)
$2 \cdot 3^3 (4)$	2	4	8	-1	0	-4		Triclinic
19 $2 \cdot 3^4 (1)$	5	7	7	-5	-1	-5	$4n+2, 3(3n \pm 1), 3^3(3n \pm 1), 2^{2k+1}(8n+7)$	Triclinic
$2 \cdot 3^4 (1)$	5	5	8	-3	-4	0		Triclinic
20 $2 \cdot 29 (1)$	3	5	5	-3	-1	-2	$4n+2, 2^{2k+1}(8n+3)$	Triclinic
$2 \cdot 29 (1)$	3	3	7	1	2	1		Triclinic
21 $^{*}3^3 (1)$	1	4	7	0	-1	0		Orthorhombic(C)
$^{*}3^3 (1)$	1	5	7	-1	0	-5	$4n+2, 3(3n+1), 3^{2k+1}(3n-1)$	Monoclinic(C)
22 $^{*}2^{-2} 3^3 (1)$	1	1	7	0	-1	0	$3(3n+1), 3^{2k+1}(3n-1)$	Orthorhombic(C)
$^{*}2^{-2} 3^3 (1)$	1	2	4	-1	0	-1		Monoclinic(C)
23 $2^{-2} 3^2 \cdot 59 (59)$	5	5	6	-2	-3	0	$3^{2k}(3n+1)$	Triclinic
$2^{-2} 3^2 \cdot 71 (71)$	5	5	8	-4	-2	-1		Triclinic
24 $2^{-2} 3 \cdot 59 (59)$	2	4	7	-1	-1	-4	$3^{2k+1}(3n+1)$	Triclinic
$2^{-2} 3 \cdot 71 (71)$	2	4	7	-1	-1	0		Triclinic
25 $3^4 (4)$	4	4	6	-2	-3	0	$3(3n+1), 3^{2k}(3n-1)$	Triclinic
$2^{-2} 3^4 7 (7)$	4	6	7	3	2	3		Triclinic

$^{**}$  は、その種の中に同値類がただ一つしかない 2 次形式であることを示す (したがって regular である)。

$^{*}$  は、2 次形式が regular であることを示す。

$^{*}$ ! は 2 次形式が, regular であることが証明されていない 14 個の同値類のうちの一つに属していることを示す。

表 3:  $Z$  上同じ表現を持つ 3 変数正定値 2 次形式 (2/3)

No. Determinant (Ratio)	$s_{11}$	$s_{22}$	$s_{33}$	$s_{12}$	$s_{13}$	$s_{23}$	Integers not represented by genus	Bravais Type
26 $**3^35$ (5)	5	5	8	-5	-2	-2	$4n + 2, 3n + 1, 3^{2k+1}(3n + 1)$	Monoclinic(C)
$**2^33^3$ (8)	5	8	8	-2	-2	-8		Monoclinic(C)
$**3^311$ (11)	5	8	9	2	3	6		Triclinic
27 $**3^25$ (5)	3	5	5	-3	0	-5	$4n + 2, 3^{2k}(3n + 1)$	Orthorhombic(I)
$**2^33^2$ (8)	3	5	5	0	0	-2		Orthorhombic(C)
$**3^211$ (11)	3	5	8	-3	0	-2		Monoclinic(C)
28 $**3 \cdot 5$ (5)	1	4	5	0	-1	-4	$4n + 2, 3^{2k+1}(3n + 1)$	Orthorhombic(I)
$**2^33$ (8)	1	4	7	0	0	-4		Orthorhombic(C)
$**3 \cdot 11$ (11)	1	5	7	-1	0	-1		Monoclinic(C)
29 $**2^43$ (3)	1	8	8	0	0	-8	$4n + 2, 4n + 3, 2^{2k}(8n + 5)$	Hexagonal
$**2^411$ (11)	1	8	24	0	0	-8		Orthorhombic(C)
$**2^33$ (12)	1	8	24	0	0	0		Orthorhombic(P)
30 $**3$ (3)	1	2	2	0	0	-2	$2^{2k}(8n + 5)$	Hexagonal
$**11$ (11)	1	2	6	0	0	-2		Orthorhombic(C)
$**2^23$ (12)	1	2	6	0	0	0		Orthorhombic(P)
31 $**2^{-1}3$ (3)	1	1	2	-1	0	0	$2^{2k+1}(8n + 5)$	Hexagonal
$**2^{-1}11$ (11)	1	2	3	0	-1	0		Orthorhombic(C)
$**2 \cdot 3$ (12)	1	2	3	0	0	0		Orthorhombic(P)
32 $**2^4$ (1)	3	3	3	-2	-2	-2	$4n + 1, 4n + 2, 2^{2k}(8n + 7)$	Cubic(I)
$**2^6$ (4)	3	3	8	-2	0	0		Orthorhombic(C)
$**2^43^2$ (9)	3	3	19	-2	-2	-2		Orthorhombic(F)
33 $**2$ (1)	1	1	3	-1	-1	0	$4n + 2, 2^{2k+1}(8n + 7)$	Rhombohedral
$**2^3$ (4)	1	3	3	0	0	-2		Orthorhombic(C)
$*2 \cdot 3^2$ (9)	1	3	7	-1	-1	-1		Monoclinic(C)
34 $**1$ (1)	1	1	1	0	0	0	$2^{2k}(8n + 7)$	Cubic(P)
$**2^2$ (4)	1	2	2	0	0	0		Tetragonal(P)
$**3^2$ (9)	1	2	5	0	0	-2		Orthorhombic(C)
35 $**2^{-1}3^3$ (2)	1	4	4	-1	-1	-1	$3n - 1, 3^{2k+1}(3n + 1)$	Orthorhombic(I)
$**2 \cdot 3^3$ (8)	1	6	9	0	0	0		Orthorhombic(P)
$*12^{-2}3^311$ (11)	1	6	13	0	-1	-3		Monoclinic(C)
36 $**2^{-1}5^2$ (2)	1	4	4	-1	-1	-2	$5^{2k}(5n \pm 2)$	Orthorhombic(I)
$*2^{-2}3 \cdot 5^2$ (3)	1	4	5	-1	0	0		Orthorhombic(C)
$**2 \cdot 5^2$ (8)	1	5	10	0	0	0		Orthorhombic(P)
37 $**2^{-1}5$ (2)	1	2	2	-1	0	-2	$5^{2k+1}(5n \pm 2)$	Orthorhombic(I)
$*2^{-2}3 \cdot 5$ (3)	1	2	2	0	0	-1		Orthorhombic(C)
$**2 \cdot 5$ (8)	1	2	5	0	0	0		Orthorhombic(P)
38 $**2^{-2}5^2$ (1)	2	2	2	-1	-1	-1	$5^{2k}(5n \pm 1)$	Rhombohedral
$**5^2$ (4)	2	3	5	-2	0	0		Orthorhombic(C)
$**5^2$ (4)	2	2	7	-1	-1	-1		Monoclinic(C)
39 $**2^{-2}5$ (1)	1	1	2	-1	-1	0	$5^{2k+1}(5n \pm 1)$	Rhombohedral
$**5$ (4)	1	2	3	0	0	-2		Orthorhombic(C)
$**5$ (4)	1	2	3	-1	0	-1		Monoclinic(C)
40 $2^43 \cdot 13$ (39)	5	12	12	-4	-4	0	$4n + 2, 4n + 3, 2^{2k}(8n + 1)$	Monoclinic(C)
$2^471$ (71)	5	12	21	-4	-2	-4		Triclinic
$2^479$ (79)	5	12	24	-4	0	-8		Triclinic
$2^45 \cdot 19$ (95)	5	12	28	-4	-4	0		Triclinic
41 $3 \cdot 13$ (39)	3	3	5	0	-2	-2	$2^{2k}(8n + 1)$	Monoclinic(C)
71 (71)	3	5	6	2	2	4		Triclinic
79 (79)	3	5	6	-2	-2	0		Triclinic
$5 \cdot 19$ (95)	3	5	7	-2	0	-2		Triclinic
42 $2^{-1}3 \cdot 13$ (39)	3	3	3	-3	-1	0	$2^{2k+1}(8n + 1)$	Monoclinic(C)
$2^{-1}71$ (71)	3	3	5	-1	-3	-1		Triclinic
$2^{-1}79$ (79)	3	3	5	-1	-2	-1		Triclinic
$2^{-1}5 \cdot 19$ (95)	3	5	5	-3	-1	-4		Triclinic

表 4:  $\mathbb{Z}$  上同じ表現を持つ 3 変数正定値 2 次形式 (3/3)

No. Determinant (Ratio)	$s_{11}$	$s_{22}$	$s_{33}$	$s_{12}$	$s_{13}$	$s_{23}$	Integers not represented by the genus	Bravais Type
43	**2 <sup>4</sup> 7 (7)	5	5	5	2	2	2	Rhombohedral
	**2 <sup>4</sup> 3 · 5 (15)	5	5	12	-2	-4	-4	Orthorhombic(F)
	**2 <sup>4</sup> 23 (23)	5	8	12	0	-4	-8	Monoclinic(C)
	*2 <sup>6</sup> 7 (28)	5	8	12	0	-4	0	Monoclinic(P)
44	**7 (7)	2	2	3	-2	-2	0	Rhombohedral
	**3 · 5 (15)	2	3	3	-2	0	0	Orthorhombic(C)
	**23 (23)	2	3	5	-2	0	-2	Monoclinic(C)
	**2 <sup>2</sup> 7 (28)	2	3	5	0	0	-2	Monoclinic(P)
45	**2 <sup>-1</sup> 7 (7)	1	1	5	-1	-1	0	Rhombohedral
	**2 <sup>-1</sup> 3 · 5 (15)	1	3	3	-1	-1	0	Orthorhombic(I)
	**2 <sup>-1</sup> 23 (23)	1	3	5	-1	0	-3	Monoclinic(C)
	**2 · 7 (28)	1	3	5	0	0	-2	Monoclinic(P)
46	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> (1)	2	2	2	1	1	1	Rhombohedral
	**3 <sup>3</sup> (4)	2	3	5	0	-2	0	Orthorhombic(C)
	**3 <sup>3</sup> (4)	2	2	8	-1	-2	-1	Monoclinic(C)
	*2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> 7 (7)	2	3	8	0	-1	0	Monoclinic(P)
47	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>2</sup> (1)	1	1	3	-1	0	0	Hexagonal
	**3 <sup>2</sup> (4)	1	3	3	0	0	0	Tetragonal(P)
	**3 <sup>2</sup> (4)	1	3	4	0	-1	-3	Orthorhombic(I)
	*2 <sup>-2</sup> 3 <sup>2</sup> 7 (7)	1	3	6	0	0	-3	Orthorhombic(C)
48	**2 <sup>-2</sup> 3 (1)	1	1	1	-1	0	0	Hexagonal
	**3 (4)	1	1	3	0	0	0	Tetragonal(P)
	**3 (4)	1	2	2	-1	-1	0	Orthorhombic(I)
	*2 <sup>-2</sup> 3 · 7 (7)	1	2	3	-1	0	0	Orthorhombic(C)
49	*2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> (1)	1	1	9	-1	0	0	Hexagonal
	*2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> (1)	1	3	3	0	0	-3	Hexagonal
	**3 <sup>3</sup> (4)	1	3	10	0	-1	-3	Orthorhombic(I)
	**3 <sup>3</sup> (4)	1	3	9	0	0	0	Orthorhombic(P)
50	**2 <sup>-1</sup> (1)	1	1	1	-1	-1	0	Cubic(F)
	**2 (4)	1	1	2	0	0	0	Tetragonal(P)
	**2 <sup>-1</sup> 3 <sup>2</sup> (9)	1	2	3	0	-1	-2	Orthorhombic(I)
	**2 <sup>3</sup> (16)	1	2	4	0	0	0	Orthorhombic(P)
51	**2 <sup>-1</sup> 3 <sup>3</sup> (2)	2	2	5	-2	-1	-1	Orthorhombic(F)
	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> 5 (5)	2	5	5	-2	-1	-4	Monoclinic(C)
	**2 · 3 <sup>3</sup> (8)	2	5	6	-2	0	0	Orthorhombic(C)
	**2 · 3 <sup>3</sup> (8)	2	5	6	-1	0	-3	Triclinic
	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>3</sup> 11 (11)	2	5	8	-1	-1	-2	Triclinic
52	**2 <sup>-1</sup> 3 <sup>2</sup> (2)	2	2	2	-2	-1	-1	Tetragonal(I)
	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>2</sup> 5 (5)	2	2	3	-1	0	0	Orthorhombic(C)
	**2 · 3 <sup>2</sup> (8)	2	3	3	0	0	0	Tetragonal(P)
	**2 · 3 <sup>2</sup> (8)	2	2	5	1	1	1	Monoclinic(C)
	**2 <sup>-2</sup> 3 <sup>2</sup> 11 (11)	2	3	5	0	-1	-3	Monoclinic(C)
53	**2 <sup>-1</sup> 3 (2)	1	1	2	0	-1	-1	Tetragonal(I)
	**2 <sup>-2</sup> 3 · 5 (5)	1	1	4	0	-1	0	Orthorhombic(C)
	**2 · 3 (8)	1	1	6	0	0	0	Tetragonal(P)
	**2 · 3 (8)	1	2	4	-1	0	-2	Monoclinic(C)
	**2 <sup>-2</sup> 3 · 11 (11)	1	2	5	-1	-1	0	Monoclinic(C)

平均テータ級数  $\Theta_\rho$  が与えられるということは、式 (7), (8) の  $\Lambda_\rho$  と  $F_\rho(q)$  の値が情報として与えられることである。式 (6) より、このときまず右辺が計算できる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\text{vol}(\mathbb{R}^N/L)} \left( \frac{\sqrt{-1}}{2z} \right)^{N/2} \Theta_\rho \left( -\frac{1}{2z} \right) &= \sum_{l^* \in L^*} \exp(2\pi\sqrt{-1}|l^*|^2 z) |c_\rho(l^*)|^2 \\ &= \sum_{q \in \Lambda(L^*)} \exp(2\pi\sqrt{-1}qz) \sum_{q=|l^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2. \end{aligned}$$

ただし、 $\Lambda(L^*) := \{|l^*|^2 : l^* \in L^*\}$  とおいた。上式をフーリエ変換すると  $\Lambda(L^*)$  の座標点にデルタ関数が現れる  $\mathbb{R}$  上の分布が得られる：

$$\sum_{q \in \Lambda(L^*)} \delta(\xi - q) \sum_{q=|l^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2. \quad (14)$$

上記は、以下 (すなわち式 (9) のフーリエ変換) の  $\mathbb{R}$  上の分布を、半径  $\sqrt{\xi}$  の超球上で積分してさらに  $(2\sqrt{\xi})^{-1}$  倍したものに等しい。

$$\sum_{l^* \in L^*} \delta(x^* - |l^*|^2) |c_\rho(l^*)|^2.$$

粉末結晶回折データは、式 (14) の分布を、物理的な制限の下、ある有限な区間  $I \subset \mathbb{R}_{>0}$  において観測したものである (図 3)。

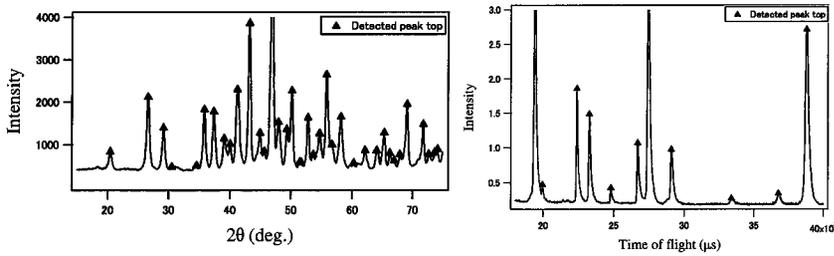


図 1: 粉末結晶の回折パターン (三角 ▲ は自動抽出されたピークを示す。細かい補正項を除けば、ピークの横軸の座標からある格子ベクトル  $l \in L^*$  の長さを求める式は、それぞれ  $2 \sin \theta / (\text{X 線の波長})$ , (定数) / (Time of flight) である)

節 3.1 の方法は上記のような観測値への応用も念頭に置かれているが、問題 2 を考えるとき、観測誤差や観測範囲の問題は無視してよい。問題 2 の本質には大きく影響しないように思われる。

### 3.1 差ベクトル導出法の概要

以下では、 $\mathbb{R}^n$  の元  $x$  とその双対空間  $\text{Hom}_{\mathbb{R}}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$  の元  $x^*$  に対して、 $\langle x, x^* \rangle = x^*(x)$  とする。関数  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  に対し、フーリエ変換は以下で定義される。

$$\hat{f}(x^*) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \exp(2\pi\sqrt{-1}\langle x, x^* \rangle) dx.$$

[2] と同様、関数  $f(x)$  が  $s$  admissible であることを以下によって定義する。

**Definition 3.1.** 連続な可積分関数  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  が  $s$  admissible とは、ある  $\delta, C > 0$  が存在して、 $|f(x)| < C(1 + |x|)^{-n-\delta}$ ,  $|\hat{f}(x^*)| < C(1 + |x^*|)^{-n-\delta}$  が成立することである。

関数  $f(x)$  が  $s$  admissible であることは以下の Poisson 和公式が成立することの十分条件となる。

$$\sum_{l \in L} f(x+l) = \frac{1}{\text{vol}(\mathbb{R}/L)} \sum_{l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) \hat{f}(l^*).$$

一般に、Hankel 変換の持つ性質から以下が成立している。

**Lemma 3.1.**  $h(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  を *admissible* な関数とし,  $(0, \infty)$  で定義された関数  $ht(r)$ ,  $hd(r^*)$  を以下のように定義する.

$$ht(r) := r^{-n/2} \int_{|x|^2=r^2} h(x) dx, \quad (15)$$

$$hd(r^*) := (r^*)^{-n/2} \int_{|x^*|^2=(r^*)^2} \hat{h}(x^*) dx^*. \quad (16)$$

このとき,  $ht(r)$ ,  $hd(r^*)$  は互いに *Hankel* 変換によって写り合う. 具体的には以下が成立する.

$$\begin{aligned} ht(r) &= 2\pi \int_0^\infty hd(r^*) J_{n/2-1}(2\pi r r^*) r^* dr^*, \\ hd(r^*) &= 2\pi \int_0^\infty ht(r) J_{n/2-1}(2\pi r r^*) r dr. \end{aligned}$$

ただし,  $J_n$  は次数  $n$  のベッセル関数である.

*Proof.* 定義より,

$$\begin{aligned} ht(r) &= r^{-n/2} \int_{|x|^2=r^2} \left( \int_{\mathbb{R}^n} \hat{h}(x^*) \exp(-2\pi\sqrt{-1}x \cdot x^*) dx^* \right) dx \\ &= r^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{h}(x^*) \left( \int_{|x|^2=r^2} \exp(2\pi\sqrt{-1}x \cdot x^*) dx \right) dx^* \\ &= 2\pi \int_{\mathbb{R}^n} \hat{h}(x^*) (|x^*|^{-n/2+1} J_{n/2-1}(2\pi r |x^*|)) dx^* \\ &= 2\pi \int_0^\infty hd(r^*) J_{n/2-1}(2\pi r r^*) r^* dr^*. \end{aligned}$$

ただし,  $\int_{|x|^2 \leq 1} e^{2\pi\sqrt{-1}x \cdot x^*} dx = |x^*|^{-n/2} J_{n/2}(2\pi|x^*|)$ ,  $\frac{d}{dx}(x^m J_m(x)) = (x^m J_{m-1}(x))$  より得られる以下を用いた.

$$\begin{aligned} \int_{|x|^2=r^2} \exp(2\pi\sqrt{-1}x \cdot x^*) dx &= \frac{\partial}{\partial r} \int_{|x|^2 \leq r^2} \exp(2\pi\sqrt{-1}x \cdot x^*) dx \\ &= \frac{\partial}{\partial r} \left( r^n \int_{|x|^2 \leq 1} \exp(2\pi\sqrt{-1}r x \cdot x^*) dx \right) \\ &= (2\pi|x^*|^2)^{-n/2} \frac{\partial}{\partial r} \left( (2\pi r |x^*|)^{n/2} J_{n/2}(2\pi r |x^*|) \right) \\ &= 2\pi r^{n/2} |x^*|^{-n/2+1} J_{n/2-1}(2\pi r |x^*|). \end{aligned}$$

対称性より, 残りの等式も同様に得られる. □

特に  $n=3$  のとき,  $J_{1/2}(2\pi r r^*) = (\pi^2 r r^*)^{-1/2} \sin(2\pi r r^*)$  より以下のようになる.

$$\begin{aligned} ht(r) &= \frac{2}{\sqrt{r}} \int_0^\infty hd(r^*) \sqrt{r^*} \sin(2\pi r r^*) dr^*, \\ hd(r^*) &= \frac{2}{\sqrt{r^*}} \int_0^\infty ht(r) \sqrt{r} \sin(2\pi r r^*) dr. \end{aligned}$$

また,  $h(x)$  が原点について等方的, すなわち任意の  $x \in \mathbb{R}^n$  に対し  $h(x) = h(|x|)$  のとき,  $\hat{h}(x^*)$  も原点について等方的となり, 以下が成立する.

$$\begin{aligned} |x|^{n/2-1} h(|x|) &= 2\pi \int_0^\infty \hat{h}(r^*) J_{n/2-1}(2\pi|x|r^*) (r^*)^{n/2} dr^*, \\ |x^*|^{n/2-1} \hat{h}(|x^*|) &= 2\pi \int_0^\infty h(r) J_{n/2-1}(2\pi r |x^*|) r^{n/2} dr. \end{aligned}$$

このことから逆に, 上で定めた  $ht(r)$ ,  $hd(r^*)$  について,  $|x|^{1-n/2} ht(|x|)$ ,  $(|x^*|)^{1-n/2} hd(|x^*|)$  は互いにフーリエ変換で写り合うことも分かる.

以下では、 $L \subset \mathbb{R}^n$  をフルランクの格子、 $f(x)$  を以下のフーリエ級数で定義された周期  $L$  を持つ関数とし、ある  $M > 0$  が存在して、 $c(l^*)$  は  $\exp(-M|l^*|)$  の定数倍によって上から抑えられると仮定する。

$$f(x) = \sum_{l^* \in L^*} c(l^*) \exp(2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle).$$

このとき、 $f(x)$  は連続な有界関数となる。したがって任意の admissible な  $g(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  に対して、 $h(x) = f(x)g(x)$  も admissible である ( $\hat{h}(x^*) = \sum_{l^* \in L^*} c(l^*) \hat{g}(x^* - l^*)$  が成立している)。したがって、 $g(x)$  が原点について等方的ならば以下が成立する。

**Lemma 3.2.** 上記の条件下で、 $ht(r)$  を式 (15) のように取ると以下が成り立つ。

$$\text{vol}(\mathbb{R}^n/L) + \sum_{l \in L} |x+l|^{1-n/2} ht(|x+l|) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \frac{\exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle)}{|l^*|^{n-1}} \sum_{l_2^* \in L^*} c(l_2^*) \int_{|x^*+l_2^*|^2=|l^*|^2} \hat{g}(x^*) dx^* + C.$$

ただし、 $\hat{h}$  と  $(r^*)^{1-n/2} hd(r^*)$  の連続性を仮定しているので、 $C = \lim_{r^* \rightarrow \infty} (r^*)^{1-n/2} hd(r^*) = \hat{h}(0)$  となる。

*Proof.* 今、 $g(x)$  の有界性より以下が成立している。

$$\begin{aligned} ht(r) &:= r^{-n/2} \int_{|x|=r^2} h(x) dx = r^{-n/2} g(r) \int_{|x|=r^2} f(x) dx, \\ hd(r^*) &:= (r^*)^{-n/2} \int_{|x^*|^2=(r^*)^2} \hat{h}(x^*) dx^* = (r^*)^{-n/2} \sum_{l^* \in L^*} c(l^*) \int_{|x^*+l^*|^2=(r^*)^2} \hat{g}(x^*) dx^*, \end{aligned}$$

さらに、 $h(x)$  が admissible より、 $|x+l|^{1-n/2} ht(|x+l|)$  もまた admissible となるので、Poisson 和公式を適用すれば得られる。

$$\begin{aligned} \text{vol}(\mathbb{R}^n/L) \sum_{l \in L} |x+l|^{1-n/2} ht(|x+l|) &= \sum_{l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) |l^*|^{1-n/2} hd(|l^*|) \\ &= \hat{h}(0) + \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) |l^*|^{1-n/2} hd(|l^*|) \\ &= \hat{h}(0) + \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) |l^*|^{1-n} \sum_{l_2^* \in L^*} c(l_2^*) \int_{|x^*+l_2^*|^2=|l^*|^2} \hat{g}(x^*) dx^* \end{aligned}$$

□

具体的な  $f(x)$  として、式 (9) の関数など、差ベクトル集合  $D(P) := \{x-y : x, y \in P\}$  に極大点を持つ関数に上記の補題を適用する。さらに  $g(r)$  として、関数系  $\{\exp(-2\pi^2\sigma^2 r^2) : \sigma > 0\}$  を代入し、 $\sigma \rightarrow +0$  とすることを考える。このとき、 $r^{1-n/2} ht(r)$  の極大点と、 $\{|x-y| : x, y \in P\}$  の座標点との差異はだんだん小さくなる。結果として、 $\sum_{l \in L} |x+l|^{1-n/2} ht(|x+l|)$  は、 $D(P)/L$  に近い座標に極大点を持つことが期待される。

また、 $\hat{g}$  は分散  $\sigma$  の正規分布であることから、 $\sigma \rightarrow +0$  としたときに汎関数としてデルタ関数に近づく。結果として、 $\mathbb{R}_{>0}$  上の関数  $hd(r^*)$  (または  $ht(r)$ ) から、構成可能な以下の  $\mathbb{R}^n/L$  上の関数に基づき、元の  $f(x)$  の極大点の推定を行うことができる。

$$H(x) := \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) |l^*|^{1-n} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2=|l^*|^2} c(l_2^*).$$

以下では  $n=3$  とし、周期的関数  $\rho$  を問題 3 のところで述べた式 (4) とする。  $D(P)$  に極大点を持つ以下の  $f_i(x)$  ( $i=1, 2, 3$ ) に対して、対応する  $H(x)$  は以下ようになる。

$$\text{Example 1. } f_1(x) = \int_{\mathbb{R}^3/L} \rho(x-z)\overline{\rho(-z)} dz = \sum_{l^* \in L^*} |c_\rho(l^*)|^2 \exp(2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle):$$

$$H_1(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) |l^*|^{-2} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2=|l^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2. \quad (17)$$

$$\text{Example 2. } f_2(x) = -\text{Tr} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f_1(x) \right)_{1 \leq i, j \leq 3} = \sum_{l^* \in L^*} |l^*|^2 |c_\rho(l^*)|^2 \exp(2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle):$$

$$H_2(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2=|l^*|^2} |c_\rho(l^*)|^2. \quad (18)$$

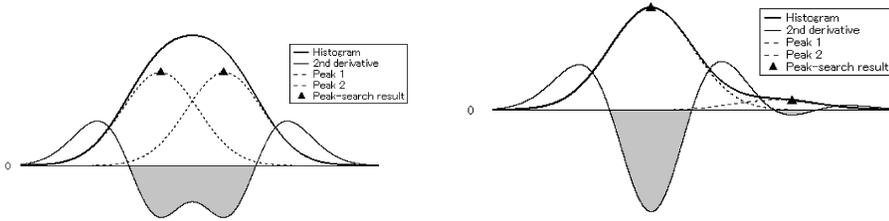


図 2: 重量ピークと 2 次微分 (2 次微分からは 2 つの重なったピークが分離されてより明確に見える)

**Example 3.**  $f_3(x) = \sum_{l^* \in L^*} \frac{|l^*|^2 |c_\rho(l^*)|^2}{\#\{l_2^* \in L^* : |l^*|^2 = |l_2^*|^2\}} \exp(2\pi\sqrt{-1}(x, l^*))$ :

$$H_3(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \frac{1}{\#\{l_2^* \in L^* : |l^*|^2 = |l_2^*|^2\}} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2 = |l^*|^2} |c_\rho(l_2^*)|^2. \quad (19)$$

実際の粉末結晶構造解析においては、式 (14) の観測値が得られたとき、各  $l^* \in L^*$  に対して、 $c_\rho(l^*) = \#\{l_2^* \in L^* : |l^*|^2 = |l_2^*|^2\}^{-1} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2 = |l^*|^2} |c_\rho(l_2^*)|^2$  という仮定をおき、問題 4 の単結晶構造解析の方法を適用するとヒューリスティクスが用いられている (e.g., 2.14.1, [13])。よって理想的な状態では  $H_3(x)$  が用いられることになるが、観測誤差の問題があり、観測範囲の中でも  $|l^*|$  が大きい領域では、 $|l^*|$  の精度が悪くなることから、 $|l^*|^2 = |l_2^*|^2$  ではなく  $|l^*|^2 \approx |l_2^*|^2$  となる  $l_2^* \in L^*$  の個数で割られることが起きる。そのため、実際の解析で使われるのは  $H_3(x)$  と  $H_1(x)$  の中間に位置するものと考えられる。

$H_2(x)$  は、 $H_3(x)$  と  $H_1(x)$  の中間式として与えたと、 $f_1(x)$  の 2 次微分から求められているため、 $f_1(x)$  と  $f_2(x)$  の極大点の座標は基本的に一致するはずである。これは工学分野でもよく用いられる方法である (図 2)。

次に、各  $H_i(x)$  ( $i = 1, 2, 3$ ) が実際にどのような座標点に極大点を持つかが問題になる。 $L$  を  $L$  に写す直行行列  $O(n)$  の有限部分群を  $G$  としたとき、各フーリエ係数が  $|l^*|$  のみに依存することから、明らかに  $H_i(x^\tau) = H_i(x)$  ( $\tau \in G$ ) を満たす。このことから、極大点の集合は  $G$  の作用で不変である。問題 2 に現れた  $D_2(P) := \{(x - y)^\tau : x, y \in P, \tau \in G\}$  も同じ性質を持ち、以下の関数の極大点になる。

$$\begin{aligned} f_0(x) &:= \frac{1}{\#G} \sum_{\tau \in G} (f_1(x^\tau) - |c_\rho(0)|^2) = \frac{1}{\#G} \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \sum_{\tau \in G} |c_\rho(\tau(l^*))|^2 \\ &= \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \frac{1}{\#\{\tau(l^*) : \tau \in G\}} \sum_{l_2^* \in \{\tau(l^*) : \tau \in G\}} |c_\rho(l_2^*)|^2. \end{aligned} \quad (20)$$

集合  $\{\tau(l^*) : \tau \in G\}$  と  $\{l_2^* \in L^* : |l_2^*|^2 = |l^*|^2\}$  の違いから、 $f_0(x)$  と  $H_3(x)$  の差は発生している。もし、 $H_3(x)$  が  $f_0(x)$  のよい近似を与えるのであれば、 $D_2(P)$  は  $P$  の平均テータ級数から決定するという問題 2 の間いが肯定的に解決でき、さらに  $D_2(x)$  の具体的な構成法も得られる。

次節で、実際の結晶構造に対応する  $\rho$  に対して、 $f_0(x)$ ,  $H_1(x)$ ,  $H_3(x)$  の値を計算し、比較する。 $(H_2(x))$  は紙面の都合で割愛する。

## 3.2 計算結果

節 3.1 の議論で導出された以下の関数を、複数の結晶構造をモデルにした  $\rho$  から算出した。

$$(i) H_1(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) |l^*|^{-2} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2 = |l^*|^2} |c_\rho(l_2^*)|^2,$$

$$(ii) H_3(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(-2\pi\sqrt{-1}(x, l^*)) \frac{1}{\#\{l_2^* \in L^* : |l^*|^2 = |l_2^*|^2\}} \sum_{l_2^* \in L^*, |l_2^*|^2 = |l^*|^2} |c_\rho(l_2^*)|^2.$$

$$(iii) f_0(x) = \sum_{0 \neq l^* \in L^*} \exp(2\pi\sqrt{-1}\langle x, l^* \rangle) \frac{1}{\#\{\tau(l^*) : \tau \in G\}} \sum_{l_2^* \in \{\tau(l^*) : \tau \in G\}} |c_\rho(l_2^*)|^2,$$

特に、今回の計算では、集合  $\{\tau(l^*) : \tau \in G\}$  と  $\{l_2^* \in L^* : |l_2^*|^2 = |l^*|^2\}$  の間に差が生じやすいよう、 $\rho$  の対称性を与える空間群の位数が大きいものから選んでいる。図 3 に、各関数を Mathematica で 3D 表示したものを示す。

少なくとも今回計算した例では、 $D_\rho(P)$  の情報が  $\Theta(P)$  から抽出できることを示す結果が得られている。ただし、今のところは 20 例程度の  $\rho$  にしか計算を行っておらず、結晶構造として得られる  $\rho$  には一定の傾向があることも知られているため、より広いケースを対象とした調査は必要であろう。

## 参 考 文 献

- [1] H. Cohn. New upper bounds on sphere packings ii. *Geometry and Topology*, 6:329–353, 2002.
- [2] H. Cohn and N. Elkies. New upper bounds on sphere packings i. *Annals of Mathematics*, 157:689–714, 2003.
- [3] J. H. Conway and N. J. A. Sloane. *Sphere Packings, Lattices and Groups (3rd ed.)*, volume 290 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, 1998.
- [4] L. Delang. Indefinite binary forms representing the same numbers. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 92:29–33, 1982.
- [5] L. Delang. Representation of numbers by binary quadratic forms. *Acta Mathematica Sinica*, 3(1):58–65, 1987.
- [6] A. Esmaeili, T. Kamiyama, and R. Oishi-Tomiyasu. New functions and graphical user interface attached to powder indexing software conograph. *J. Appl. Cryst.*, 50:651–659, 2017.
- [7] W. C. Jagy, I. Kaplansky, and A. Schiemann. There are 913 regular ternary forms. *MATHEMATICA*, 44:332–341, 1997.
- [8] A. D. Mighell and A. Santoro. Geometrical ambiguities in the indexing of powder patterns. *J. Appl. Cryst.*, 8:372–374, 1975.
- [9] B.-K. Oh. Regular positive ternary quadratic forms. *Acta Arithmetica*, 147:233–243, 2011.
- [10] R. Oishi-Tomiyasu. On ternary positive-definite quadratic forms with the same representations over  $F$ . *submitted (arxiv: <https://arxiv.org/abs/1703.08854>)*.
- [11] R. Oishi-Tomiyasu. Distribution rules of systematic absences on the conway topograph and their application to powder auto-indexing. *Acta Cryst. A.*, 69:603–610, 2013.
- [12] R. J. L. Oliver. Representation by ternary quadratic forms. *Bull. London Math. Soc.*, 46:1237–1247, 2014.
- [13] V. Pecharsky and P. Zavalij. *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*. Springer (second edition), 2009.
- [14] A. Schiemann. Ein beispiel positiv definiten quadratischer formen der dimension 4 mit gleichen darstellungszahlen. *Archiv der Mathematik*, 54:372–375, 1990.
- [15] B. L. van der Waerden. Die reduktionstheorie der positiven quadratischen formen. *Acta Mathematica*, 96(1):265–309, 1956.
- [16] G. L. Watson. Determination of binary quadratic form by its values at integer points. *MATHEMATIKA*, 26:72–75, 1979.
- [17] G. L. Watson. Determination of binary quadratic form by its values at integer points: Acknowledgement. *MATHEMATIKA*, 27:188, 1980.
- [18] 富安亮子. 数学者の立場からの粉末構造解析 (解の一意性に関わる問題を中心に). 日本中性子科学会学会誌「波紋」サイエンス記事, 20(4):274–280, 2010.

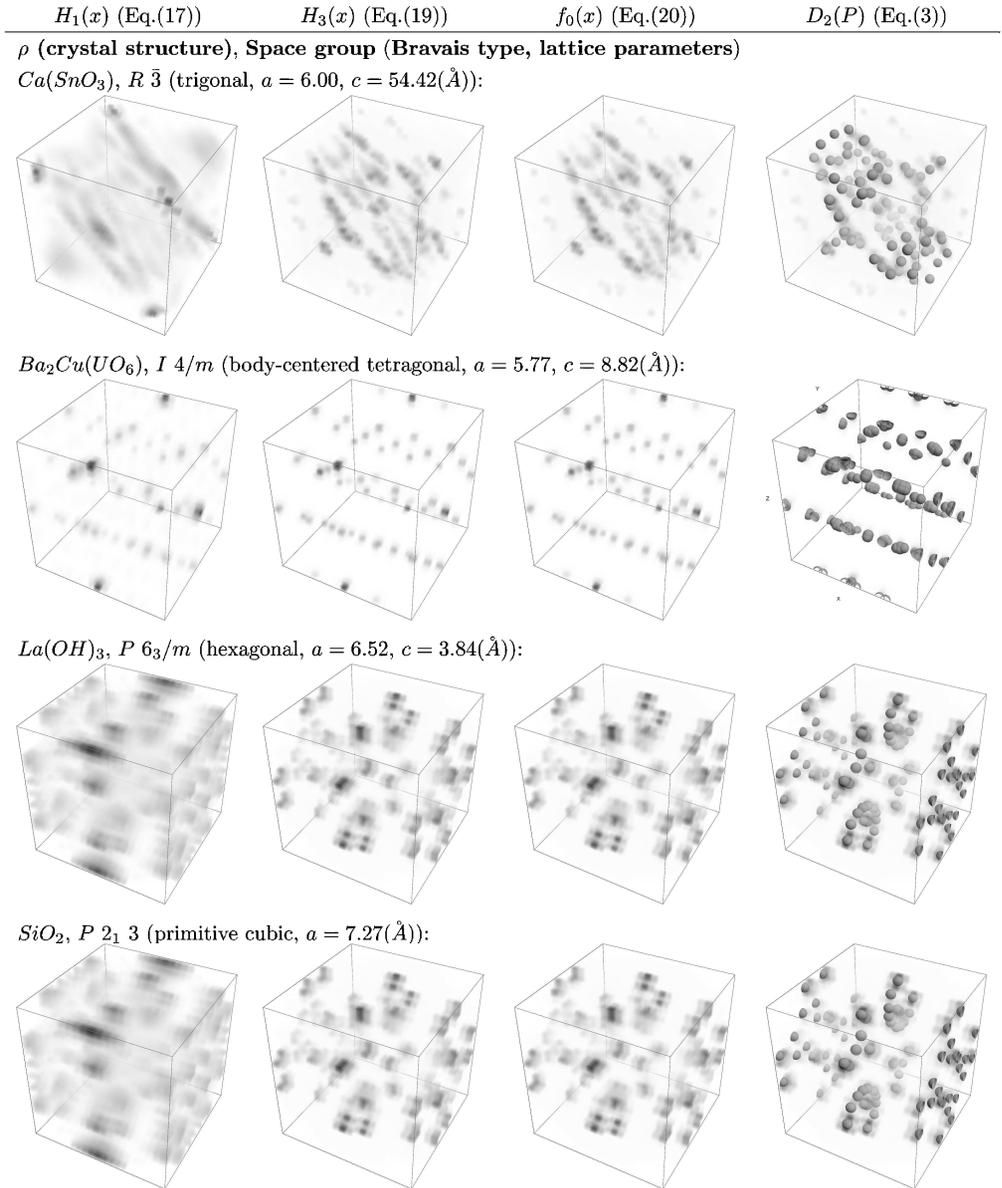


図 3: 平均テータ級数から計算可能な  $\mathbb{R}^n/L$  上の分布関数  $H_1(x)$ ,  $H_3(x)$  と差ベクトル集合  $D_2(P)$  に極大値を持つ  $f_0(x)$  の比較。最右列の画像は  $f_0(x)$  の分布と実際の  $D_2(P)$  の座標点を重ねたもの。これら 4 例も含め、 $H_3(x)$  と  $f_0(x)$  は値がかなり異なることもあるものの、よく似た画像を与えることが 20 例程度の  $\rho$  に対して確認できた。粉末結晶構造解析で利用可能な関数は、理想的な状況で  $H_3(x)$ 、実際は観測誤差の影響で  $H_1(x)$  と  $H_3(x)$  の中間に位置すると考えることができる。この状況で  $D_2(P)$  など差ベクトル情報を求める方法は上記の解析で最もボトルネックになりやすいとともに需要がある。