

研究レポート

セルオートマトンを用いたコラッツ拡散数理モデル

草加 修宏 (津山高専 3 年)

1. 研究の動機と目的

自然数 c についてコラッツ変換 $T(c)$ は、 c が偶数なら $T(c) = c/2$ 、 c が奇数なら $T(c) = 3c + 1$ と定義される。そして、初期値を c_0 とした $n \geq 1$ に対する漸化式 $c_n = T(c_{n-1})$ を、 c_0 の連続コラッツ変換と呼ぶ。コラッツ予想とは、「どんな初期値 c_0 についても $c_N = 1$ となる番号 N が存在する」([R]参照) というものである。コラッツ予想は $1 \leq c_0 \leq 20 \times 2^{58}$ の範囲で正しいことが示されている([S]参照)。しかし、私はコラッツ予想を解決することではなく、コラッツ予想にはどのような応用があるかに興味を持っている。

コラッツ予想を応用するために、私は時間 t に対する連続コラッツ変換 $T(c_t)$ のグラフが、ある種のエネルギー状態を表していると考えてみた。そして、もしそのようなエネルギーを持つ点があったとし、さらにそのエネルギーが他の点に伝播していったなら、その伝播はどのように変化していきだろうかというテーマを立て、このテーマに取り組むことにした。

上で述べたテーマをもう少し具体的な形にするために、エネルギーの名前を仮に α エネルギーとし、水面の波の伝播、台風などの風の伝播、ウイルスなどの伝播などをイメージして、 α エネルギーが拡散し伝播する数理モデルを構想してみた。

数理モデルの構想

1. α エネルギーを持つ点を考え、その点を α 点と呼ぶ。
2. α 点の α エネルギーは、時間と共に変化し、最大値を持つ。
3. α エネルギーは十分な時間経過後に低レベルに落ち着く。
4. α エネルギーが伝播する点を反応点と呼ぶ。
5. α 点のある種の性質は、反応点に確率的に伝播する。

本研究の目的は、上の抽象的な数理モデルの構想を、コラッツ変換のグラフを利用して、具体化し、その α エネルギーの伝播の特性を研究することである。

2. コラッツ拡散数理モデルの設定

私は、前節で述べた数理モデルの構想を実現するために、数直線上にコラッツ点を設定し、セルオートマトンを使ったコラッツ拡散数理モデルを作ること考えた。

2-1. 数理モデルの構想1から3について

数直線上の点 p に適当な自然数の値 c_0 を振り、 $c_0 \geq 3$ のとき、その点を初期値 c_0 を持つコラッツ点（または単に、コラッツ点）と呼ぶ。そして、その点の初期値の連続コラッツ変換によって変化する数値をその点のコラッツ値と呼ぶ。

c_0 の値が小さいとき、コラッツ予想は正しいので、コラッツ値は最大値をもち、十分な時間の経過後に1,4,2という値をループする。

さて、初期値 c_0 を持つコラッツ点 p の連続コラッツ変換から得られる最大コラッツ値を c_T とする。そして、最初に2となったときを $c_\theta = 2$ とする。このとき θ をコラッツ収束時間と呼ぶ。さらに、

$$F_H = \sum_{t=0}^T c_t, \quad L_H = \sum_{t=T}^{\theta} c_t$$

とし、 F_H をコラッツ前半面積、 L_H をコラッツ後半面積とよぶ。そして、時間 t のコラッツ点 c_0 のコラッツエネルギー $E_p(t)$ を

$$E_p(t) = \begin{cases} \frac{1}{F_H} \sum_{k=0}^t c_k & (t \leq T \text{ のとき}) \\ \frac{1}{L_H} \left(F_H + L_H - \sum_{k=0}^t c_k \right) & (T < t \text{ のとき}) \end{cases}$$

と定義する。このとき、

$$0 \leq E_p(t) \leq 1$$

であり、連続コラッツ変換の性質から、十分な時間の経過後にコラッツ点は2となり、

$$E_p(t) = 0$$

となる。

2-2. 数理モデルの構想4と5について

数直線上のコラッツ点以外の点 a には適当に0と1の反応値 $q(a)$ を振り、特に $q(a) = 1$ である点 a を反応点と呼ぶ。反応点は次節で説明する方法でコラッツエネルギーを受け取るものとし、コラッツエネルギーを受け取った瞬間、反応点はコラッツ点に変化する。

2-3. コラッツ値の伝播の設定

コラッツ点 p がもつコラッツエネルギー $E_p(t)$ を、反応点にいかにして伝播させるか。この問いに対して、**囲み抵抗** R_{close} と**空間抵抗** R_{space} というものを、それぞれ、囲み抵抗 R_{close} は $0 \leq R_{close} \leq 1$ の範囲の定数、空間抵抗 R_{space} は $0 \leq R_{space}$ の定数と定義した。

さて、 p を数直線上のコラッツ点、 $E_p(t)$ をコラッツ点 p の時間 t でのコラッツエネルギー、そして、 a を反応点とする。さらに、 $d(p, a)$ を p と a の距離とする。このような設定のもと、 p の a に対する**伝播エネルギー** $E(p, a)$ を、

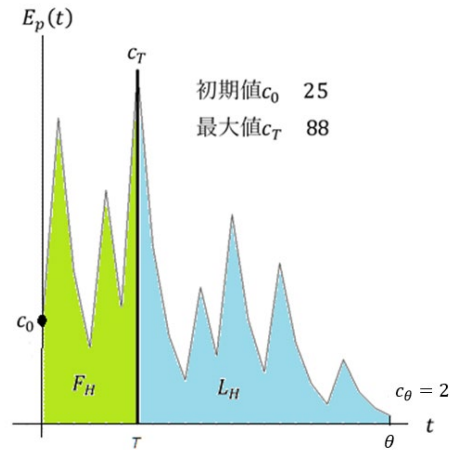


図1 ($C_0 = 25$ の連続コラッツ変換)

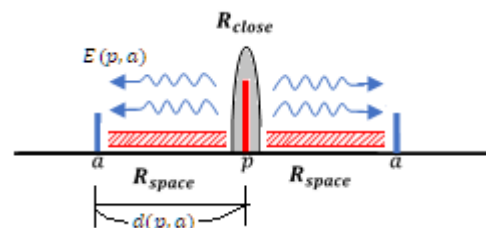


図2 (R_{close} , R_{space} のイメージ)

$$E(p, a) = q(a) \cdot \frac{1 - R_{close}}{d(p, a)^{R_{space}}} \cdot E_p(t)$$

と定義した。

明らかに、 $0 \leq E(p, a) \leq 1$ であり、特に $q(a) = 0$ なら $E(p, a) = 0$ である。 $q(a) = 1$ の場合、特に $R_{close} = 1$ ならば、 $E(p, a) = 0$ なので、 p のコラッツエネルギー $E_p(t)$ はどの点にも全く伝播しない設定となっている。また、 $R_{space} = 0$ ならば、 $E(p, a) = q(a) \cdot (1 - R_{close}) \cdot E_p(t)$ となり、この場合は $E_p(t)$ の伝播に p と a の間の距離は関係しない設定となっている。

さて、反応点 a の受け入れ状態を $D(a)$ とし、 $D(a)$ は $0 \leq D(a) \leq 1$ の乱数で設定する。そこで

$$D(a) \leq E(p, a)$$

であれば、 a は p のコラッツ初期値 c_0 をもつコラッツ点に変化することで、セルオートマトンが実行できると考えた。

3. セルオートマトンによるアルゴリズム

セルオートマトンによるコラッツ拡散数理モデルのアルゴリズムを、以下に述べる。今回は単純モデルとしたため、初期のコラッツ点は1個のみとし、反応点は等間隔に置くことにした。

1. 最上段（0段目）セルの左端に1個のコラッツ点 p_0 の初期値(c_0)、反応点の個数(n)、反応点の間隔(l)を設定し、数直線上にコラッツ点と反応点を等間隔に配置する。
2. 囲み抵抗(R_{close})、空間抵抗(R_{space})を設定する。ただし、 $0 \leq R_{close} \leq 1, 0 \leq R_{space}$ とする。
3. 初期値 c_0 の連続コラッツ変換から、最大コラッツ値 c_T とそのときの番号 T 、 $c_\theta = 2$ であるコラッツ収束時間 θ を求める。
4. c_0 の連続コラッツ変換のグラフ $T(c_t)$ から、コラッツ前半面積 F_H とコラッツ後半面積 L_H を計算する。
5. コラッツ点 p_0 の初期値 c_0 のコラッツエネルギーを $E_p(0)$ を計算する。以上の準備のもとで、段数を経過時間と考え、1段目以降（1単位時間以降）のセルの状態を帰納的にシミュレーションしていく。
6. M 段目のセルの状態は、 k 個のコラッツ点 p_t ($0 \leq t \leq k-1$)をもち、 l 個の反応点 a_j ($1 \leq j \leq l$)をもったとする。ここで、コラッツ点 p_t のコラッツ値は、反応点からコラッツ点に変化した時点を初期値とし、そこから経過した時間に対する連続コラッツ変換の値となっている。
7. $M+1$ 段目の各反応点 a_j の変化は、 M 段目の全てのコラッツ点 p_t の a_j に対する伝播エネルギー $E(p_t, a_j)$ を計算し、さらに、 a_j の受け入れ状態 $D(a_j)$ を乱数で求め、 $D(a_j) \leq E(p_t, a_j)$ となる場合が1つでも起これば、 a_j は初期値 c_0 を持つコラッツ点に変化し、そうでなければ反応点のままとする。
8. 7の計算結果後、 $M+1$ 段目の全てのセルの値が0,1,2となったとき、または全セルの値が2以上になったとき終了し、そうでないなら7を繰り返す。

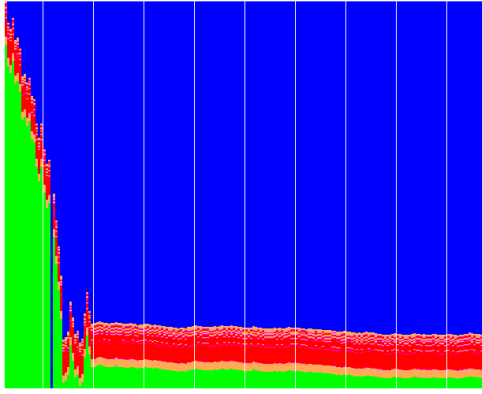


図3 (拡散するモデル)

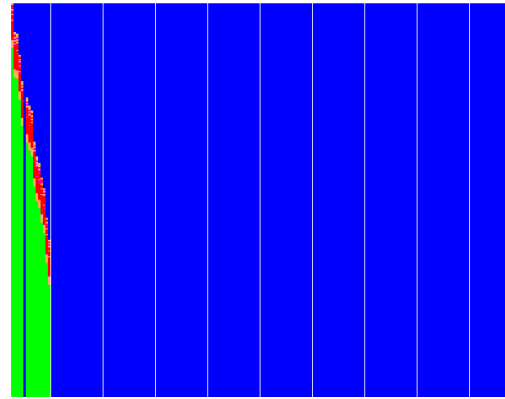


図4 (収束するモデル)

拡散の様子を可視化するために、コラッツ値が3以上となれば段階的に黄色、ピンク、赤とし、2のときは緑、反応点1は青色とした。そして右端が赤色になったとき、拡散する可能性があると考えたことにした。したがって、図3が拡散するモデルであり、設定範囲全体が赤くなり下方は緑に変わっている。図4が収束するモデルで、赤色は右端に届かない。

4. 研究方法

今回の研究では、上で設定したコラッツ拡散数理モデルに対し、以下の研究課題を設定した。

研究課題：コラッツ発散数理モデルが収束するための囲み抵抗と空間抵抗の境界条件を探せ。

上の研究課題を解決するために、コンピュータの性能と研究時間を考慮し、以下を設定した。

コラッツ点 p_0 の初期値と最大値： $(c_0, c_T) = (25, 88), (87, 592), (31, 9232)$
反応点の個数： $n = 200$
反応点の間隔： $I = 1, 2, 3$
囲み抵抗： $0 \leq R_{close} \leq 0.99$
空間抵抗： $0 \leq R_{space} \leq 40$

収束の判定：20回のシミュレーションを行い、全て収束となったときを**収束**とする。

また、どの回でも反応点へ全て拡散した場合は**発散**とする。収束でもない発散でもない場合は、**判定不能**とする。

5. 研究結果

シミュレーションの回数を20回、反応点の個数 $n = 200$ とし、 (C_0, C_T) と I を定め、

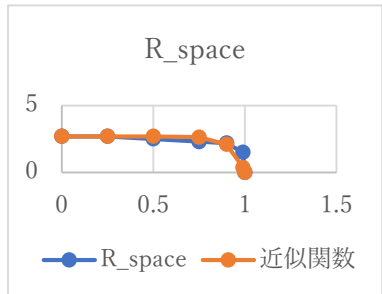
$R_{close} = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.99$ でデータを整理し、 R_{close} と R_{space} の関係式を予想した。関係式の予想は次節で説明する。

【1】条件：コラッツ点 p_0 の初期値と最大値： $(c_0, c_T) = (25, 88)$ ，コラッツ収束時間： $\theta = 22$

(1-1) 反応点の間隔： $I = 1$

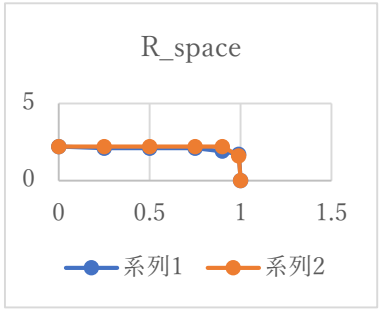
囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】 収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均終了時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0.1	40	判定不能	—	—	$R_{space} \geq -100 \ln(R_{close}^{1-R_{close}})$ 
0.25	40	判定不能	—	—	
0.5	40	判定不能	—	—	
0.75	4.4	判定不能	—	—	
	5.0	収束	26.1 ± 3.4	2.1	
0.9	2.6	判定不能	—	—	
	3.0	収束	23.1 ± 2.3	1.3	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.8	収束	22.3 ± 1.1	11.0	

(1-2) 反応点の間隔： $I = 2$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】 収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均終了時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0	2.5	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 2.7(-e^{15(R_{close}-1)} + 1)$ 
	2.7	収束	29.1 ± 14.6	3.5	
0.25	2.2	判定不能	—	—	
	2.7	収束	24.4 ± 3.9	1.9	
0.5	2.5	判定不能	—	—	
	2.6	収束	26.6 ± 10.9	3.8	
0.75	2.2	判定不能	—	—	
	2.3	収束	22.5 ± 1.4	1.1	
0.9	1.7	判定不能	—	—	
	2.2	収束	22.0 ± 0.0	1.0	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.5	収束	22.0 ± 0.0	1.0	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -6.6342R_{close} + 28.182$ ，相関係数： $r = -0.88582$

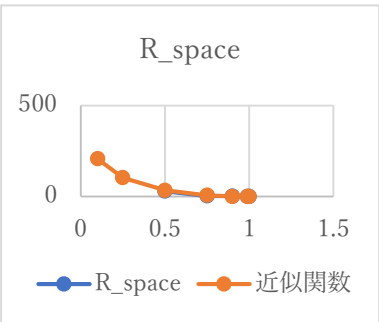
(1-3) 反応点の間隔： $I = 3$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均終了時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0.1	2.0	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 2.2(-e^{130(R_{close}-1)} + 1)$ 
	2.2	収束	28.1 ± 14.4	3.1	
0.25	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	25.7 ± 12.8	2.1	
0.5	1.9	判定不能	—	—	
	2.1	収束	23.0 ± 2.2	1.3	
0.75	1.7	判定不能	—	—	
	2.1	収束	22.1 ± 1.1	1.1	
0.9	1.7	判定不能	—	—	
	1.9	収束	22.0 ± 0.0	1.0	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.7	収束	22.0 ± 0.0	1.0	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -6.2134R_{close} + 27.327$, 相関係数： $r = -0.94947$

【2】条件：コラッツ点 p_0 の初期値と最大値： $(c_0, c_T) = (87, 592)$, コラッツ収束時間： $\theta = 29$

(2-1) 反応点の間隔： $I = 1$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0.1	40	判定不能	—	—	$R_{space} \geq -100 \ln(R_{close}^{1-R_{close}})$ 
0.25	40	判定不能	—	—	
0.5	29	判定不能	—	—	
	30	収束	32.1 ± 4.3	1.8	
0.75	3.0	判定不能	—	—	
	3.5	収束	31.7 ± 4.8	1.8	
0.9	1.7	判定不能	—	—	
	2.4	収束	30.0 ± 1.7	1.3	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.3	収束	29.0 ± 0.0	1.0	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -2.4195R_{close} + 31.3$, 相関係数： $r = -0.7972$

(2-2) 反応点の間隔： $I = 2$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0	2.5	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 2.7(-e^{15(R_{close}-1)} + 1)$
	2.7	収束	31.4 ± 3.1	1.7	
0.25	2.5	判定不能	—	—	
	2.7	収束	32.3 ± 10.8	2.5	
0.5	2.5	判定不能	—	—	
	2.7	収束	29.0 ± 0.0	1.0	
0.75	1.9	判定不能	—	—	
	2.5	収束	29.7 ± 1.7	1.2	
0.9	1.7	判定不能	—	—	
	2.0	収束	29.0 ± 0.0	1.0	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.5	収束	29.0 ± 0.0	1.0	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -2.4195R_{close} + 31.3$, 相関係数： $r = -0.7972$

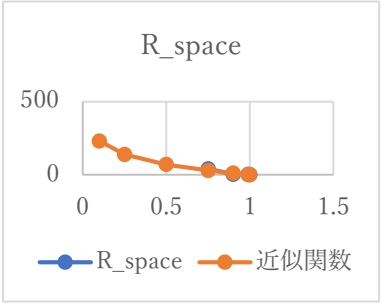
(2-3) 反応点の間隔： $I = 3$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0	1.9	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 2.1(-e^{110(R_{close}-1)} + 1)$
	2.1	収束	31.4 ± 7.3	2.7	
0.25	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	29.5 ± 2.2	1.2	
0.5	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	29.6 ± 1.4	1.2	
0.75	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	29.0 ± 0.0	1.0	
0.9	1.6	判定不能	—	—	
	1.9	収束	29.0 ± 0.0	1.0	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.4	収束	29.0 ± 0.0	1.0	

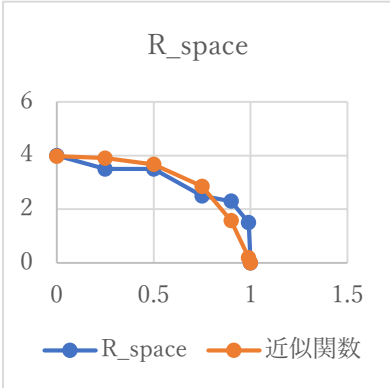
$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -2.0707R_{close} + 30.753$, 相関係数： $r = -0.86181$

【3】条件：コラッツ点 p_0 の初期値と最大値： $(c_0, c_T) = (31, 9232)$ ，コラッツ収束時間： $\theta = 105$

(3-1) 反応点の間隔： $I = 1$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0.1	40	判定不能	—	—	$R_{space} \geq -100 \ln(R_{close})$ 
0.25	40	判定不能	—	—	
0.5	40	判定不能	—	—	
0.75	40	判定不能	—	—	
0.9	2.0	判定不能	—	—	
	3.0	収束	399.0 ± 246.8	4.9	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	2.0	収束	125.9 ± 34.0	1.3	

(3-2) 反応点の間隔： $I = 2$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0	3.5	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 4(-e^{5(R_{close}-1)} + 1)$ 
	4.0	収束	233.4 ± 125.9	2.2	
0.25	3.0	判定不能	—	—	
	3.5	収束	226.7 ± 114.2	2.8	
0.5	3.0	判定不能	—	—	
	3.5	収束	200.7 ± 97.7	2.0	
0.75	2.0	判定不能	—	—	
	2.5	収束	215.3 ± 90.5	2.7	
0.9	2.0	判定不能	—	—	
	2.3	収束	133.3 ± 78.1	1.3	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.5	収束	110.4 ± 16.8	1.2	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -107.46R_{close} + 249.51$ ，相関係数： $r = -0.841$

(3-3) 反応点の間隔： $I = 3$

囲み抵抗 R_{close}	収束する空間抵抗値				【予想】収束範囲
	空間抵抗 R_{space}	状態	平均収束時間 T_{mean}	拡散最大 個数の平均	
0	1.9	判定不能	—	—	$R_{space} \geq 2.8(-e^{8(R_{close}-1)} + 1)$
	2.8	収束	213.0 ± 112.1	2.6	
0.25	2.5	判定不能	—	—	
	2.8	収束	188.4 ± 84.6	2.2	
0.5	2.1	判定不能	—	—	
	2.5	収束	168.8 ± 89.2	2.1	
0.75	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	137.9 ± 59.9	1.6	
0.9	1.9	判定不能	—	—	
	2.0	収束	132.3 ± 44.1	1.5	
0.99	1.0	判定不能	—	—	
	1.4	収束	107.4 ± 10.2	1.1	

$R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線： $T_{mean} = -100.28R_{close} + 214.63$, 相関係数： $r = -0.99014$

6. まとめと考察

(1) R_{close} と R_{space} に関する近似不等式 (予想) について

$I \geq 2$ については、囲み抵抗 R_{close} と空間抵抗 R_{space} のデータと、 $(R_{close}, R_{space}) = (1.0)$ であることから、この条件を満たす関数 (例えば、無理関数、指数関数、対数関数など) をいろいろ検討した。その結果、最も誤差が小さいものが指数関数のグラフであった。すなわち、

$$R_{space} \geq A(-e^{B(R_{close}-1)} + 1)$$

と予想した。ここで、 A は $R_{close} = 0$ のとき R_{space} の収束が始まる下限となる定数であり、 B は指数関数のグラフの曲線の曲がり具合を制御する定数である。

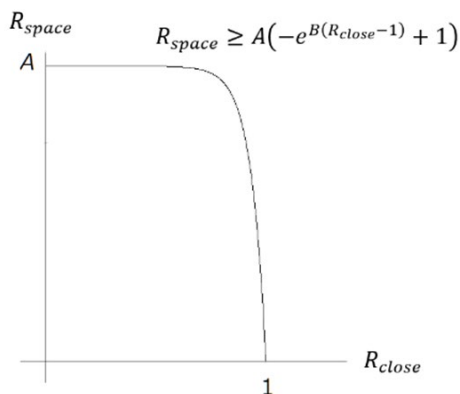


図4 ($R_{space} \geq A(-e^{B(R_{close}-1)} + 1)$)

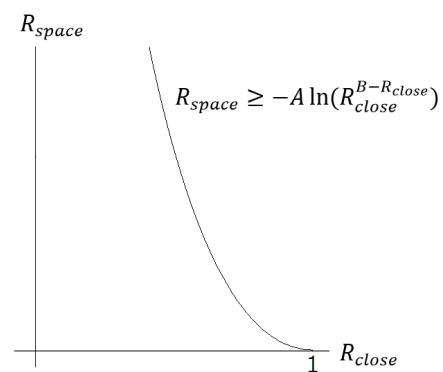


図5 ($R_{space} \geq -A \ln(R_{close}^{B-R_{close}})$)

$I = 1$ については、 $R_{close} \rightarrow 0$ であるとき $R_{space} \rightarrow +\infty$ と考えられた。さらに、 $(R_{close}, R_{space}) = (1.0)$ という条件を考慮して、以下のような対数関数での近似不等式を予想した。

$$R_{space} \geq -A \ln(R_{close}^{B-R_{close}})$$

ここで、 A は対数関数のグラフの曲線の下降する傾きとなる定数であり、 $B - R_{close}$ は対数関数のグラフの曲線の曲がり具合を制御する関数である。

(2) $R_{close} - T_{mean}$ の回帰直線について

R_{close} と T_{mean} は相関が強いことは当然であるが、一応、線形近似を行ってみて、相関係数 r がどれも0.8以上を示す結果を得ており、これからアルゴリズムから作ったプログラムが正しいことがチェックできた。

(3) 考察

今回のシミュレーションは時間の関係で3つのコラッツ初期値 $c_0 = 25,87,31$ に限って行った。また、シミュレーション回数も20回と少ない点も結論を述べるには少ない。しかし、 $c_0 = 25,87$ については、 c_T は88と592と最大値は異なるが、コラッツ収束時間 θ がほぼ同じであることに對し、 R_{close} と R_{space} に関する不等式が同じ関数で近似されたこと、さらに、 $c_0 = 31$ では R_{close} と R_{space} に関する不等式が $c_0 = 25,87$ のものとは異なることから、囲み抵抗 R_{close} と空間抵抗 R_{space} に関する不等式は、コラッツ収束時間 θ の長さの影響が大きいのではないかと思えた。現在、この観点から研究を行っているところである。

また、反応点の間隔 I が2以上のとき、 R_{close} と R_{space} に関する不等式の定数 A が4以上にはならない雰囲気を感じた。これについてもより多くのデータを集めて現在、研究を行っているところである。

7. 今後の研究計画

今回の研究では、数理モデルの構想に時間がかかり、それを用いてシミュレーションする時間が不足した。しかし、6節での考察から、今後の具体的な研究計画が以下のように立っている。

1. 初期値 c_0 を増やして、 R_{close} と R_{space} に関する不等式へのコラッツ収束時間 θ の影響を研究する。
2. R_{close} と R_{space} に関する不等式に、反応点の間隔 I の影響を加える。
3. 今回のセルオートマトンでは一様乱数でシミュレーションしたが、例えば正規分布に従う乱数などを使った研究を行う。

参考文献

- [S] T. Oliveira e Silva, Computational verification of the $3x+1$ conjecture, http://sweet.ua.pt/tos/3x_plus_1.html
- [R] リチャード・ガイ, 数論における未解決問題集, シュプリンガー・フェアラーク東京, 1990 第2刷, pp.174-176