

令和 2 年 6 月 9 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2019

課題番号：26400067

研究課題名(和文)幾何学的変分問題と離散幾何学の数値解析を援用した研究

研究課題名(英文)Geometric variational problems and discrete geometry with numerical analysis

研究代表者

内藤 久資(Naito, Hisashi)

名古屋大学・多元数理科学研究科・准教授

研究者番号：40211411

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：三分岐離散曲面に関する幾何学の研究を行った。特に、3次元ユークリッド空間内の三分岐離散曲面に対して、その頂点ごとの曲率を定義した。その中では、カーボン・ナノチューブ、フラーレン、マッカーイ結晶などを例としてあげ、材料科学及び有機化学で「負曲率炭素構造」と呼ばれているマッカーイ結晶が、実際に負曲率を持つことを示した。さらに、三分岐離散曲面に対して、複数の種類の細分を定義し、極小エネルギーによる細分列の場合には、標準実現三分岐離散曲面が連続曲面にハウスドルフ収束することを証明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来の離散曲面論は、連続曲面の離散化として離散曲面を定義していた。この研究では、分子構造・結晶構造をモデルとした、本質的に離散な曲面を対象とし、その幾何学を展開したことに重要な意義がある。しかも、単に曲率を定義するだけでなく、離散曲面の細分を定義することにより、収束理論への道を開いた。一般に、分子構造・決s高構造のミクロな解析では離散的なオブジェクトとしてそれらを扱うが、収束理論を通じて、マクロな連続的なオブジェクトを扱うことができる可能性を示した。

研究成果の概要(英文)：We study geometry of trivalent discrete surfaces. In particular, we define vertex-wise Gauss and mean curvatures for trivalent discrete surfaces in 3-dimensional Euclidean spaces. In our study, we take Carbon nanotubes, Fullerenes, and Mackay structures, and we show that the Mackay structure of type P is vertex-wise negatively curved, which is called "a negatively graphene" in material sciences and organic chemistry. Moreover, we study subdivision of trivalent discrete surfaces. In particular, we show the Hausdorff convergence of the sequence of minimum energies of Mackay structures.

研究分野：離散幾何解析

キーワード：discrete surfaces

**1. 研究開始当初の背景.** Kotani-Sunada (Trans. Amer. Math. Soc, 2000) は、「結晶格子の標準実現」の概念を用いて、物理学・化学（結晶学）における自然界に存在する分子の構造としての結晶格子との関連を明確に定義した。さらに、2009 年には、内藤は、砂田および小谷らとともに、4 点からなる完全グラフの極大アーベル被覆として  $K_4$  格子の標準実現の炭素結晶の存在の可能性を指摘した。 $K_4$  格子は, trivalent graph (各頂点に隣接する頂点数がすべて 3 であるグラフ) であり, 炭素結晶で実現する場合には,  $sp^2$  軌道で結合するため, その結晶は金属 (伝導体) または半導体となることが期待できる。また, trivalent graph として実現される炭素分子の例としては,  $C_{60}$ , カーボンナノチューブなどが広く知られており, 炭素  $K_4$  結晶も, これら「フラーレン分子」と, 数学的には同一のカテゴリに分類すべき炭素分子である。

近年, 材料科学の研究では, そのような trivalent graph によって作られる炭素分子として, Mackay-Terrones による Mackay 結晶が注目されている。Mackay 結晶は, 3 重周期極小曲面であるシュワルツの P 曲面の上に分子が配置された結晶であり, 現在, 応募者は小谷および田上真 (ともに研究協力者) とともに, シュワルツの P 曲面上に配置される trivalent graph の標準実現を, 分子数が少ない場合に分類を行い, それらの結晶による炭素分子の安定性に関する研究を行っている (Carbon, 2014)。

**2. 研究の目的.** 「結晶格子の標準実現に関連する trivalent graph の幾何学」としては, Mackay-like 結晶を一つのモデルとして, trivalent graph から構成される「離散曲面」の幾何学を構築することを目的とした研究を行う。Mackay-like 結晶は, 頂点が負曲率曲面上に配置されているように見える。そこで, trivalent graph の実現 ( $\mathbb{R}^3$  内での頂点の実際の座標と頂点の隣接関係) を「離散曲面」と考え, その曲率 (ガウス曲率・平均曲率)などを定義することを, 本研究の最初の目的とする。(四角) 格子状の離散曲面および三角形分割された曲面に対する曲率の定義は, これまでにも多くの研究があるが, それらの研究を, 我々の研究対象である trivalent graph の実現に適用することは難しい。なぜなら, Mackay-like 結晶は, 結晶格子の標準実現であるため, 各頂点のまわりでは力学的な釣り合いが成り立ち, その結果として, 各頂点と隣接する 3 頂点は, 同一平面上に存在するため, 従来の離散曲面の曲率の定義では, それらの曲率は 0 となってしまう。本研究では, trivalent graph の実現からなる離散曲面に対して適用可能な曲率の定義を行い, Mackay-like 結晶,  $C_{60}$  などのフラーレン分子等の  $sp^2$  炭素分子に対する幾何学的考察を行う。また, これらの炭素分子の材料科学的性質と, 離散曲面としての幾何学的性質の比較などの考察も行う。

また, 上記の「二値のラプラシアン固有値に関する最適化問題」に関しては, 単にユークリッド空間内の有界領域のみを考察するだけでなく,  $\mathbb{R}^3$  に埋め込まれた曲面上で同じ問題を考えることにより, 曲率が熱の分布 (または第一固有関数) に対してどのような影響を及ぼすかを調べることにより, 曲率がラプラス方程式および熱方程式の解に与える影響を具体的に解析を行う。

さらに, 「曲面上の調和写像の熱流」の詳細な特異点の数値解析を行い, その特異点がどのように生じるのかを視覚的に捉え, 従来の特異点解析を越える情報を, 数値解析から得ることを目的とする。

**3. 研究の方法.** 「trivalent graph からなる離散曲面」に関して, trivalent であることから生じる「曲率を定義するための困難」を検証し, 適切な曲率の定義を考察する。その際にモ

デルとなるのは,  $C_{60}$ , カーボンナノチューブ (CNT), (オリジナルの) Mackay 結晶であり, それぞれ, ガウス曲率が positive な定数, 0, negative となるような定義を構築することが必要である.

離散曲面に関しては, モデルとして考察した炭素分子の物性と, 離散曲面としての幾何学を比較し, どのような幾何学的情報が分子の物性と関連しているのかを考察する. また, trivalent graph からなる離散曲面に対して定義した曲率などを, 必ずしも trivalent とは限らない離散曲面に対しても適用可能かを考察する. 一方, trivalent graph の標準実現から得られる, 埋め込まれたグラフとして,  $K_4$  結晶格子があり, それは「離散曲面」とは考えることが困難なグラフ (の実現) である. このように, 単に trivalent graph という条件だけでは, その埋め込みが「離散曲面」と考えることはできない. そのため, 「離散曲面」であるための条件を, グラフまたは幾何学の言葉であらわす必要がある.

「ラプラシアン固有値」の問題に関しては,  $\mathbb{R}^3$  に埋め込まれた曲面上での問題の数値解析を行うと同時に,  $\mathbb{R}^2$  の有界領域での問題を, Dirichlet 境界条件だけでなく, 他の境界条件 (特に, 矩形領域で, 片側の境界で Neumann, 他の境界で Periodic などの条件) の下での数値計算を行い, 最適形状とそれに対する第一固有関数の性質の解析的な予想を立てる. この研究の中で, これまでに計算した結果は, Level set method による計算に基づいている.

#### 4. 研究成果.

##### 三分岐離散曲面の幾何学

この研究は, 小谷元子氏 (東北大学)・大森俊明氏 (東京理科大学)・楯辰哉氏 (東北大学) などとの共同研究である. 従来の離散曲面は連続曲面の離散化として得られ, 通常は「4分岐メッシュ」によって構成されている. この場合には, 数多くの曲率の定義が知られ, それぞれは離散曲面の特性をよくあらわしている. 我々が考えた三分岐離散曲面は, 分子構造・結晶構造をモデルとしているため, 本質的に離散的な対象であり, その曲率の定義は明らかではない. 内藤は小谷・大森とともに,  $\mathbb{R}^3$  内の三分岐離散曲面に対して, 適切なガウス曲率と平均曲率の定義を行った. この定義にしたがって Mackay 結晶のガウス曲率を計算したところ, 各頂点ごとに負曲率となることが確認できた. さらに, 同じ研究の中で, 三分岐離散曲面の細分を定義し, 適切に与えた細分列はハウスドルフ位相で連続曲面に収束することが分かった.

一方, 楯・大森とともに, 抽象的な三分岐グラフの細分列に関して, その固有値の分布を証明した. これは, 最終的な目標とした結果ではないが, 小さな (または大きな) 固有値の漸近挙動を示すことができた [3].

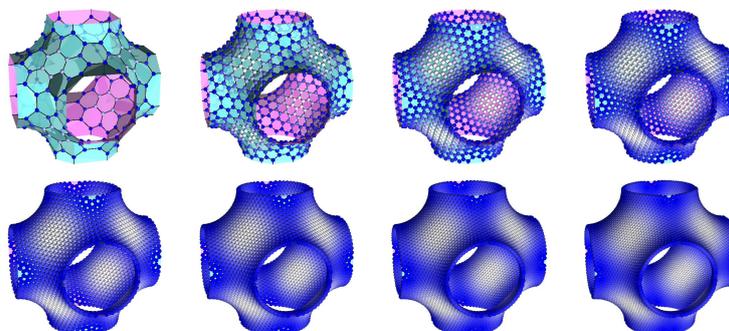


図 1: Mackay 結晶構造とその細分の Gauss 曲率 [1]

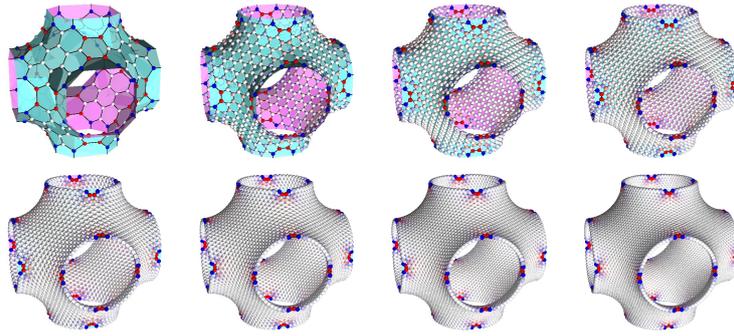


図 2: Mackay 結晶構造とその細分の平均曲率 [1]

### ラプラシアン固有値

この研究は松江要氏（九州大学）との共同研究である。平面内の有界領域に2種類の熱伝導度を持つ物質が与えられたと見え、ラプラシアン固有値が最小となる物質配置を考察した。一般に熱伝導はラプラシアン固有値が主要な減衰項であるため、これによって、熱伝導が最良となる物質配置のモデルと考えることができる。



図 3: 円盤から2つの小さな円盤を抜いた領域の最小固有値に関する固有関数 [2]

[1] M. Kotani, H. Naito, and T. Omori, *Computer Aided Geometric Design* **58**, (2017), 24-54.

[2] K. Matsue and H. Naito *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* **32**, (2016), 489-512.

[3] T. Omori, H. Naito, and T. Tate, *Electron. J. Combin.*, **26**, (2019), #P3.7.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Hisashi Naito	4. 巻 2
2. 論文標題 A short lecture on topological crystallography and a discrete surface theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Anam Lecture Notes in Mathematics	6. 最初と最後の頁 83-147
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Toshiaki Omori, Hisashi Naito, Tatsuya Tate	4. 巻 26
2. 論文標題 Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valent graphs	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Electronic Journal of Combinatorics	6. 最初と最後の頁 3.7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshiaki Omori	4. 巻 58
2. 論文標題 A discrete surface theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computer Aided Geometric Design	6. 最初と最後の頁 24-54
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cagd.2017.09.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Hisashi Naito	4. 巻 166
2. 論文標題 Construction of negatively curved cubic carbon crystals via standard realizations	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Springer Proceedings in Mathematics and Statistics	6. 最初と最後の頁 83-100
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-4-431-56104-0_5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kagame Matsue and Hisashi Naito	4. 巻 32
2. 論文標題 Numerical studies of the optimization of the first eigenvalue of the heat diffusion in inhomogeneous media	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 489-512
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1007/s13160-015-0177-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 内藤久資	4. 巻 624
2. 論文標題 化学と幾何学～離散幾何学と炭素構造	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 数理科学	6. 最初と最後の頁 42-47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hisashi Naito	4. 巻 未定
2. 論文標題 Construction of negatively curved cubic carbon crystals via standard realizations	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Springer Lecture Notes in Mathematics and Statistics	6. 最初と最後の頁 未定
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Makoto Tagami, Yunye Liang, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe, Motoko Kotani	4. 巻 76
2. 論文標題 Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry	5. 発行年 2014年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 266-274
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1016/j.carbon.2014.04.077	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hisashi Naito, Hajime Urakawa	4. 巻 63
2. 論文標題 Conformal change of Riemannian metrics and biharmonic maps	5. 発行年 2014年
3. 雑誌名 Indiana Univ. Math. J.	6. 最初と最後の頁 1631-1657
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1512/iumj.2014.63.5424	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計21件 (うち招待講演 18件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Tatsuya Tate, Toshiaki Omori, Hisashi Naito
2. 発表標題 Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valente graphs
3. 学会等名 Mathematical Materials Sciences, MRM 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hisashi Naito, Toshiaki Omori, Chen Tao, Motoko Kotani
2. 発表標題 Carbon structures and a discrete surface theory
3. 学会等名 Mathematical Materials Sciences, MRM 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 内藤 久資
2. 発表標題 結晶格子の標準実現とその物質科学への応用
3. 学会等名 結晶の界面, 転位, 構造の先進数理解析 (九州大学 IMI 研究集会) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hisashi Naito.
2. 発表標題 Crystal Structure and a Discrete Surface Theory
3. 学会等名 International symposium of Polymers and networks via topology and entanglement (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Crystal Structure and a Discrete Surface Theory
3. 学会等名 Geometric shape generation: integrability, variational analysis and applications ICIAM 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Discrete geometric analysis -- crystal structure, a discrete surface theory and its applications to physics and chemistry -
3. 学会等名 Introductory workshop on discrete differential geometry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 炭素構造・結晶格子・離散曲面
3. 学会等名 名古屋大学, 物質と幾何セミナー
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Analysis of phase transitions using minimal surfaces
3. 学会等名 Discrete Geometric Analysis for Materials Design (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 三分岐離散調和曲面の収束
3. 学会等名 多様体上の微分方程式 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 炭素構造と離散幾何解析
3. 学会等名 幾何学を指標とする化学構造と機能物性 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Carbon structures and trivalent discrete surfaces
3. 学会等名 A3 Foresight Program Modeling and Simulation of Hierarchical and Heterogeneous Flow System with Applications to Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Carbon structures and trivalent discrete surfaces
3. 学会等名 Geometry and Materials Sciences 2016 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 内藤 久資
2. 発表標題 三分岐離散曲面の曲率と細分
3. 学会等名 東京工業大学幾何学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 内藤 久資
2. 発表標題 離散幾何解析と結晶構造
3. 学会等名 熊本大学幾何学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Discrete geometric analysis and fullerene structures
3. 学会等名 The A3 mini-workshop on soft matter (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 幾何学の応用を考える－離散幾何学から結晶構造へ－
3. 学会等名 名古屋大学数学教育セミナー（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Negatively curved carbon networks
3. 学会等名 Pattern formation: mathematics and materials
4. 発表年 2014年

1. 発表者名 Hisashi Naito
2. 発表標題 Negatively curved carbon crystal
3. 学会等名 RIMS International Conference: Mathematical Challenge to a New Phase of Material Science（招待講演）
4. 発表年 2014年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 結晶格子の標準実現と炭素結晶
3. 学会等名 日本応用数理学会2014年年会（招待講演）
4. 発表年 2014年

1. 発表者名 Kaname Matsue, Hisashi Naito
2. 発表標題 Numerical studies of the optimization of the first eigenvalue for the heat diffusion in inhomogeneous media
3. 学会等名 AIMR International Symposium 2015
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 内藤久資
2. 発表標題 幾何学者は化学の夢を見るか
3. 学会等名 Intersection of Pure Mathematics and Applied Mathematics VIII (招待講演)
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考