

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 7 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2013

課題番号：22540075

研究課題名(和文)幾何学的変分問題とその幾何学的視覚化の研究

研究課題名(英文)Geometric variational problems and its visualization

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) 2,000,000円、(間接経費) 600,000円

研究成果の概要(和文)：リーマン多様体と実直線の直積上のリーマン計量に共形変形を行い、調和写像から2調和写像を誘導できるか否かを考察し、リーマン多様体の次元が3または4の場合には、そのような共形変形が存在することを証明した。

平面の有界領域において、二値の熱伝導率をもつ媒体が存在するときに、その熱伝導性を最適化する問題を考察し、種々の境界条件において、領域形状とラプラシアン第一固有値の最適化との関係を調べた。  
有限長カーボンナノチューブの"length Index"の定義に関する研究を行い、その指標となるべき「長さ方向にいくつのベンゼン環が存在するか」を数値化した。

研究成果の概要(英文)：I consider the existence of biharmonic map on  $M$  times  $R$ , which is reduced from a harmonic map on  $M$  by conformal change of metric on  $M$ . I prove that if dimension of  $M$  is 3 or 4, there exists a metric and such biharmonic map, but if dimension of  $M$  is greater than 5, there are no such biharmonic maps.

I also consider optimization problem of heat diffusion. I calculate the optimize shape of materials with  $n$  values of heat conductivity under the minimization/maximization of the first eigenvalue of Laplacian. I also consider the LENGTH INDEX of single wall carbon nanotube.

研究分野：幾何学

科研費の分科・細目：幾何学

キーワード：幾何学 解析学

## 1. 研究当初の背景

数学において、視覚化を利用した研究は、数値計算などに代表されるように幅広く行われてきた。また、幾何学においても、古くは Meeks などによる極小曲面の研究に端を発した、コンピュータグラフィックスによる極小曲面の研究や、それを拡張した平均曲率一定曲面の研究が知られている。

今日では、高速な数値計算および高精細かつインタラクティブなコンピュータグラフィックスが発達し、数値計算結果を視覚化することにより、数理現象をよりわかりやすく理解することが可能となった。さらに、その視覚化の結果から、より新しい現象の発見および解析も可能となった。

また、離散幾何学では、Kotani-Sunada (2000) による結晶格子の標準実現の定義、Sunada (2008) による3次元強等方的結晶格子の分類、Itoh et. al (2009) による K4 炭素結晶の準安定性解析などの結果により、結晶材料科学への離散幾何学の応用が可能となった。

## 2. 研究の目的

このような背景の下、本研究は、幾何学的変分問題に関する幾何学的視覚化の研究であり、種々の幾何学的変分問題に関連する問題を、視覚化の手法を援用して、解析を行うことを目的としている。

特に、古典的な幾何学的変分問題の解析に数値解析を援用して、解析を容易に進めること。および、離散幾何学と変分構造に関連するオブジェクトを、視覚化を通じて形を理解すること、形の形成過程を解析する研究を行う。

## 3. 研究の方法

古典的な幾何学的変分問題は、そのオイラー・ラグランジュ方程式が非線形偏微分方程式で記述される。特に、対称性を仮定することにより、重要な問題が非線形常微分方程式で記述される場合も少なくない。従来は、一部の状況を除いて、これらの問題に対して数値計算を援用して研究を行う手法は、必ずしも多くなかった。本研究では、単に数値計算を援用するだけでなく、数値計算結果を視覚化することで得ることができる情報を、厳密な解析の手助けとして研究を行うことを考えた。

また、研究背景に述べたとおり、Kotani-Sunada, Sunada, Itoh et al. などの研究に端を発する離散幾何学の結晶材料科学への応用についても、結晶格子の標準実現によって、どのような形状が形成されるかを、コンピュータグラフィックスを通じて研究を行う計画であった。

## 4. 研究成果

これらの研究計画の下、主に3つのテーマについて研究成果を得た。また、雑誌論文として掲載が未定の研究テーマについての暫定的な成果も簡単に述べる。

### 1) Proper biharmonic map の存在と非存在

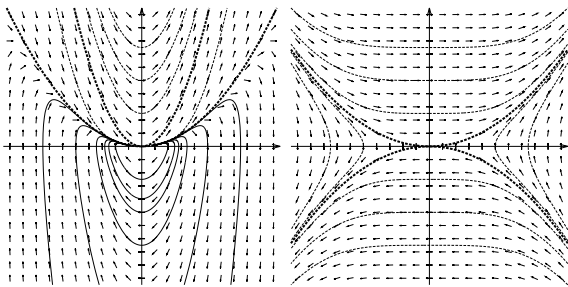
調和写像 (harmonic map) は、幾何学的変分問題の代表的な広く知られている。調和写像は、リーマン多様体  $M, N$  の間のなめらかな写像  $f: M \rightarrow N$  に対して、 $|\nabla f|^2$  の積分を汎関数とする変分問題の臨界点として定義され、そのオイラー・ラグランジュ方程式は、非線形楕円型方程式  $\tau(f) = 0$  で与えられる。調和写像の研究は Eells-Sampson (1964) 以来、数多くの研究が行われ、幾何学の中心的な研究テーマの一つであった。

近年  $|\tau(f)|^2$  の積分を汎関数とする biharmonic map (2-調和写像) の研究が盛んに行われている。この汎関数の定義から、調和写像自身は 2-調和写像であることは明らかである。よって、自然に「調和写像でない 2-調和写像 (proper biharmonic map) がいつ存在するか」という問題が提起されたが、その例は、対称空間など、非常に対称性の高い場合の解析が中心で会った。

本研究では、「調和写像  $f: M \rightarrow N$  が与えられたとき、 $M$  の計量を共形変形することにより、 $\tilde{f}: M \times \mathbb{R} \rightarrow N \times \mathbb{R}$  を proper biharmonic map にすることができるか？」という問題を考察した。この問題は、Baird-kamissoko (2003) によって提示された、biharmonic map の存在に関する重要な未解決問題である。この問題は、最終的には、ある3階非線形常微分方程式の時間大域的な正值解の存在問題に帰着される。そのため、数値解析を援用することが可能となり、実際、数値解析によって、以下の図に示す計算結果を得た。この計算結果から、解の大域的な存在に関する定理、および解の爆発に関する定理を証明することにより、 $\dim M \leq 4$  の場合には、問題とした proper biharmonic map が存在す

るように、 $M$  の計量を共形変形可能なこと、 $\dim M \geq 5$  の場合には、いかなる共形変形によっても、それが不可能なことを証明した。

以下の図は、 $\dim M = 3$  および  $8$  の場合の reduction equation の phase space description である。我々は、この解曲線の状況を観察することにより、詳細な解析を実行し、 $\dim M = 8$  の場合には、有限時間での解の爆発を証明し、一方  $\dim M = 3$  の場合には、大域解の存在を証明した。



論文 (1) より転載

## 2) 熱伝導性に関する形状最適化問題

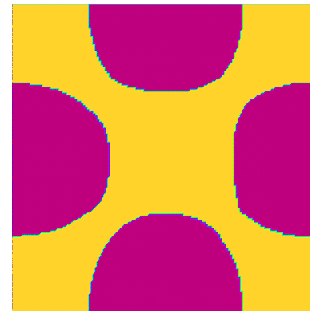
物体が2種類の物質によって構成されているときに、その物体の熱伝導性を最適化するための物質の形状配置について考察を行った。

平面内の有界領域  $\Omega$  を考え、その可測部分集合  $S \subset \Omega$  が与えられたとき、 $S$  では熱伝導率  $c > 1$ 、 $\Omega \setminus S$  では熱伝導率  $1$  を持つという状況を考える。ただし、 $|S|/|\Omega|$  は一定であると仮定する。この時に、全体の「熱伝導性」を最小または最大とする  $S$  の配置の特徴付けを考察した。この問題は、高い熱伝導性を持つ物質を、例えばゴムのように柔軟性は高いが、熱伝導性は低い物質の中に配置し、全体として熱効率のよい材料を作ることを想定している。

今回は、「熱伝導性」として、 $\Omega$  の Laplacian の第一固有値を考え、それを最小化または最大化する問題を考察した。この問題を解析する上では、数値解析を行い、その形状を観察することを考えた。実際、その形状の例として、下図の結果を得ることができた。さらに、その結果から「最適形状には、領域形状の対称性を伝搬する」ことが予想できた。

なお、この問題への従来のアプローチとしては、 $\int |\nabla \phi|^2 dx / \int \rho |\phi|^2 dx$  の形の問題を考察することが多かったが、我々は、 $\int \rho |\nabla \phi|^2 dx / \int |\phi|^2 dx$  を考察することにより、より実問題に近い問題を考察した。

その一つの計算結果として、論文 (2) から転載した図が以下のものである。この図は一つの例に過ぎないが、最適形状を与える形状は、領域の形状とほぼ同じ対称性を持つことがわかる。



論文 (2) より転載

## 3) 有限長単層ナノチューブの長さの評価

単層カーボンナノチューブの重要な指標として、カイラル・インデックスが広く知られていた。カイラル・インデックスは、カーボンナノチューブの円周方向の「ねじれかた」を示す値であり、電気伝導性を判定する重要な指標であった。近年、有限の長さ（短い）カーボンナノチューブの合成が行われ、その「長さの尺度」を与えることが必要となった。

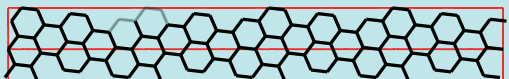
本研究では、カーボンナノチューブの「長さの尺度」としての “length index” を、「長さ方向に何個のベンゼン環があるか」によって定義し、その表式を極めて単純な形で与えることができた。さらに、カーボンナノチューブの構造を対話的に入力することにより、length index および原子充填度などを計算するための WEB アプリケーションを開発することに成功した。以下は開発した WEB アプリケーションの一部のスナップショットである。

**Geometric measurement of finite SWNT molecules**

**Step 3: Remove or add the chemical bonds by clicking lines to complete the structure of your finite SWNT molecule**

chiral vector  $(n, m) = (12, 8)$   
translation vector  $(t_1, t_2) = (7, -8)$   
axial lattice numbers = 1  
edge atom coordinate  $(\alpha_1, \alpha_2) = (5/3, -4/3)$   
edge atom coordinate  $(\beta_1, \beta_2) = (-1/3, 5/3)$   
length index  $(l_j) = 2.58$   
filling chemical bonds = 135 / 140

[get result](#)  
[back to step 2](#)



See an original paper in *Pure and Applied Chemistry* for the detail ([doi:10.1515/pac-2014-5006](https://doi.org/10.1515/pac-2014-5006)).  
Version: 1.0.0, Sept, 2013

<http://www.orgchem2.tohoku.ac.jp/finite>

## 5. 主な発表論文等

### 雑誌論文 (計 3 件)

(1) [Hisashi Naito](#) and Hajime Urakawa, Conformal change of Riemannian metrics and biharmonic maps, *Indiana Univ. Math. J.* に掲載決定, 査読あり.

<http://www.iuj.indiana.edu>

(2) 松江要, [内藤久資](#), 二値の熱伝導率を持つ領域の第一固有値に対する最適配置, *応用数理*, **23**, 10-15, (2013), 査読あり.

<http://www.jsiam.org/modules/JsiamMagazine/index.php?page=articlestoryid=96>

(3) Taisuke Matsuno, [Hisashi Naito](#), Sunpei Hitotsugi, Sota Sato, Motoko Kotani and Hiroyuki Isobe, Geometric measures of finite carbon nanotube molecules: A proposal for length index and filling indexes, *Pure and Applied Chemistry*, **86**, 489-495 (2014), 査読あり. doi:10.1515/pac-2014-5006,

### 学会発表 (計 4 件)

(1) Kaname Matsue, [Hisashi Naito](#) and Motoko Kotani, Optimal Shape of Inhomogeneous Media for the First Eigenvalue of Heat Diffusion, 2013/03, 計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索, 東北大学.

(2) [Hisashi Naito](#), 非等質媒質に対するラプラシアン の第一固有値に関する形状最適化, 2013/04, スペクトル幾何学とその周辺, 東北大学.

(3) Makoto Tagami, Yunye Liang, [Hisashi Naito](#), Yoshiyuki Kawazoe, Motoko Kotani, Mackay like crystals with 8-fold symmetry – a joint building block of CNT jungle gym –, 2013/11, The 8th general meeting of ACCMS-VO, Tohoku Univ.

(4) [Hisashi Naito](#), Negatively curved crystals with 8-fold symmetry, 2013/11, CREST 成果報告会, 東北大学.

図書：なし

産業財産権：なし

その他：

(1) 論文 (3) に関する報道機関向け配布資料：

[http://www.tohoku.ac.jp/japanese/news/pressing/tohokuuniv-press\\_20140122\\_01.pdf](http://www.tohoku.ac.jp/japanese/news/pressing/tohokuuniv-press_20140122_01.pdf)

(2) 論文 (3) で開発したアプリケーション：

<http://www.orgchem2.tohoku.ac.jp/finite>

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

内藤 久資 (NAITO, Hisashi)

名古屋大学・大学院多元数理科学研究科・准教授

研究者番号：40211411

(2) 研究分担者：なし

(3) 連携分担者：なし