

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13432

研究課題名(和文) 離散曲面論の構築による物質の機能—構造関連の幾何学的記述

研究課題名(英文) Geometry for Materials based on discrete surface theory

研究代表者

小谷 元子 (Kotani, Motoko)

東北大学・理学研究科・教授

研究者番号：50230024

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：与えられた滑らかな曲面を離散化し、離散的なデータを用いて幾何学的量を計算する研究が最近活発に行われている。本研究では、前提となる滑らかな曲面がない場合、すなわち2次元・3次元空間のなかにグラフが与えられたときに、直接に「曲面」の幾何学量を取りだすための、曲面論の離散版にあたる「離散曲面論」を構築し研究した。特にガウス写像に注目することで面積の変分公式を求めた。これにより、「離散極小曲面」「離散平均曲率一定曲面」を定義した。これらの幾何学量と実際の物質の内的歪みや外的歪みとの相関、スペクトル量と電子状態の相関などを、比較する手法を開発しこれらを論文にまとめた。

研究成果の概要(英文)：We call a trivalent graph in the 3-dimensional Euclidean space a discrete surface because it has a tangent space at each vertex determined by its neighbor vertices. We develop a discrete surface theory on trivalent graphs, and define several geometric notions such as area, area variation formula, curvature, mean curvature. To abstract a continuum object hidden in the discrete surface, we introduce a subdivision method by applying the Goldberg-Coxeter subdivision, and discuss the convergence of a sequence of discrete surfaces defined inductively by the subdivision. We also study the limit set as the continuum geometric objects associated with the given discrete surface.

研究分野：幾何学、離散幾何解析学

キーワード：離散幾何学 スペクトル幾何 物性物理

1. 研究開始当初の背景

画像処理、図形の数値解析・設計などを目的に与えられた滑らかな曲面を離散化し、離散的なデータを用いて幾何学的量を計算する研究が最近活発に行われている。一方、様々な離散的なデータが得られるなか、そのデータの背後にある連続体およびその幾何学的性質を抽出する手法が重要になっている。

2. 研究の目的

離散的な対象であるグラフに対する「曲面論」を展開する。2次元・3次元空間のなかにグラフが与えられたときに、直接に「曲面」の幾何学量を取りだすため、曲面論の離散版にあたる「離散曲面論」を構築する。さらに、これを物質科学に応用する。具体的には1. カーボンネットワークの幾何学的指標と安定性の相関、2. 離散極小曲面によるナノシヤボン玉を研究素材とし、物質のミクロな幾何構造(原子のネットワーク)とマクロな物性の相関を表す幾何学的な記述言語を提供することで、物質設計の数理的足がかりを作ることを目指す。

3. 研究の方法

グラフを対象に離散曲面論、特に曲面論の基本定理、を構築することを目指す。ガウス写像が定義できるグラフのクラスを特定し、ガウス写像に注目することで面積の変分公式を求める。これにより、「離散極小曲面」「離散平均曲率一定曲面」を定義する。これらの幾何学量と実際の物質の内的歪みや外的歪みとの相関、スペクトル量と電子状態の相関などを、比較する手法を開発する。更に物質のミクロ構造とマクロな物性との相関を解析する手法を開発する。国際集会等を通じて情報を収集し、萌芽的アイデアを実質的な研究へと絞り込む。

4. 研究成果

カーボンネットワークをモデルにした離散曲面論を構築した。また、その細分列を作る手法を確立し、収束と極限集合について成果を得、発表した。また、これを利用し、有機化学者や材料科学者と共同研究し、大きな分子や界面などに現れる欠陥やエネルギー集中を数学的に予見する提案を行った。これらは国内外の研究集会や国際雑誌において発表した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 15 件)

Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshiaki Omori, A discrete surface theory, Computer Aided Geometric Design, 査読あり, Vol.58, 24-54, 2017, <http://doi.org/10.1016/j.cagd.2017.09.002>

Ishiwata Satoshi, Kawabi Hiroshi, Kotani Motoko, Asymptotic expansion of the transition probability for non-symmetric random walks on crystal lattices (スペクトル・散乱理論とその周辺), 数理解析研究所講義録, 査読あり, 2023, 15-28, 2017, <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/2023-02.pdf>

Satoshi Ishiwata, Hiroshi Kawabi, Motoko Kotani, Long time asymptotics of non-symmetric random walks on crystal lattices, Journal of Functional Analysis, 査読あり, 272, 1553-1624, 2017, <https://doi.org/10.1016/j.jfa.2016.11.011>

井上 和俊、齋藤 光浩、小谷 元子、幾原 雄一, 整数論的手法による粒界原子構造予測, まてりあ, 査読あり, 56, 589-596, 2017, <https://doi.org/10.2320/materia.56.589>

Kazutoshi Inoue, Bin Feng, Naoya Shibata, Motoko Kotani, and Yuichi Ikuhara, Structure of < 110 > tilt boundaries in cubic zirconia, J. Mater. Sci., 査読あり, Vol52, 8, 4278-4287, 2017, 10.1007/s10853-016-0682-1

P. Sarkar, Z. Sun, T. Tokuhira, M. Kotani, S. Sato, and H. Isobe, Stereoisomerism in Nanohoops with Heterogeneous Biaryl Linkages of E/Z- and R/S-Geometries, ACS Cent. Sci, 査

読あり, 2, 740-747, 2016, 10.1021/a
cscentsci.6b00240

Z. Sun, T. Suenaga, P. Sarkar, S. S
ato, M. Kotani, and H. Isobe, Stereo
isomerism, Crystal Structures, and
Dynamics of Belt-shaped Cyclonaphth
ylenes, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.
A, 査読あり, 113, 8109-8114, 2016,
[https://doi.org/10.1073/pnas.160653
0113](https://doi.org/10.1073/pnas.1606530113)

Motoko Kotani & Susumu Ikeda, Mater
ials inspired by mathematics, Scien
ce and Technology of Advanced Mater
ials(STAM), 査読あり, 17(1), 253-25
9, 2016, [https://doi.org/10.1080/14
686996.2016.1180233](https://doi.org/10.1080/14686996.2016.1180233)

M. Toda, S. Kajimoto, S. Toyouchi,
T. Kawakatsu, Y. Akama, M. Kotani,
H. Fukumura, Phase behavior of a bi
nary fluid mixture of quadrupolar m
olecules, Phys. Rev. E, 査読あり, 9
4, 052601-052601, 2016, [https://doi.
org/10.1103/PhysRevE.94.052601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.052601)

Hisashi Naito, Construction of Nega
tively Curved Cubic Carbon Crystals
via Standard Realizations, Springe
r Proc. Math. Stat., 査読あり, vol
166, 83-100, 2016, [https://doi.org/
10.1007/978-4-431-56104-0_5](https://doi.org/10.1007/978-4-431-56104-0_5)

Kaname Matsue and Hisashi Naito, Nu
merical studies of the optimization
of the first eigenvalue of the hea
t diffusion in inhomogeneous media,
Japan Journal of Industrial and Ap
plied Mathematics, 査読あり, 32, 48
9-512, 2015, 10.1007/s13160-015-017
7-5

内藤 久資, 化学と幾何学 : 離散幾何
学と炭素構造, 数理科学, 624, 42-47,
2015

K. Inoue, M. Saito, Z. C. Wang, M.
Kotani, Y. Ikuhara, The Decompositi
on Formula of $\langle 001 \rangle$ Symmetrical T
ilt Grain Boundaries, Materials Tra
nsactions, 査読あり, 56, 1945-1952,
2015, [https://doi.org/10.2320/mate
rtrans.M2015277](https://doi.org/10.2320/matertrans.M2015277)

K. Inoue, M. Saito, Z. C. Wang, M.
Kotani, Y. Ikuhara, On the Periodic
ity of $\langle 001 \rangle$ Symmetrical Tilt Gra
in Boundaries, Materials Transactio
ns, 査読あり, 56, 281-287, 2015, ht
tps://doi.org/10.2320/matertrans.M2
014394

Takeshi Fujita, Koji Ohara, Keiji M
iura, Akihiko Hirata, Motoko Kotani,
Yasumasa Nishiura, Mingwei Chen, V
isualization of topological landsca
pe in shear-flow dynamics of amorph
ous solids, EPL(Europhysics Lettes),
査読あり, 110, 38002-38002, 2015,
[https://doi.org/10.1209/0295-5075/1
10/38002](https://doi.org/10.1209/0295-5075/110/38002)

[学会発表](計 23 件)

Motoko Kotani, Mathematical challen
ges for materials design, Total Ene
rgy and Force Methods 2018 Workshop,
2018

Hisashi Naito, Analysis of phase tr
ansitions using minimal surfaces, S
cientific Research on Innovative Ar
eas, Discrete Geometric Analysis fo
r Materials Design, The Internation
al Kick-Off Workshop, 2018

内藤久資, 三分岐離散調和曲面の収束,
多様体上の微分方程式, 2017

内藤久資, 炭素構造と離散幾何解析,
幾何学を指標とする化学構造と機能物
性, 2017

小谷 元子, 数学による構造・機能相関の解明, 17-1 ポリマーフロンティア 21, 2017

Kotani, Motoko, Structure understanding of materials by discrete geometric analysis, International Workshop on Industrial Mathematics, 2017

Motoko Kotani, Mathematical Challenge to Understanding of Material, International Conference on Research and Education in Mathematics 2017 (ICREM8), 2017

Motoko Kotani, Discrete surface theory for trivalent graphs and its application to materials science, Geometry Workshop in Obergurgl 2017, 2017

小谷 元子, 次世代物質探索のための離散幾何学 領域紹介, 第11回 物性科学領域横断研究会(領域合同研究), 2017

小谷 元子, 数学から材料科学へのアプローチ, シンポジウム「高分子未来サミット」, 2017

Motoko Kotani, Mathematical challenge for materials science, 2017 Dasean Conference Mathematical Challenges and Industrial Problem Solving, 2017

Motoko Kotani, Mathematical challenges for materials design, Total Energy and Force Methods 2018 Workshop, 2018

Motoko Kotani, Structure understanding of materials by discrete geometric analysis, Novel Optical Materials, 2017

Hisashi Naito, Carbon structures and trivalent discrete surfaces, A3Fo

resight Program Modeling and Simulation of Hierarchical and Heterogeneous Flow System with Applications to Materials Science, 2016

Hisashi Naito, Carbon structures and trivalent discrete surfaces, GEMS 2016 Geometry and Materials Sciences, 2016

Motoko Kotani, Topology in Materials, IGA/AMSI Workshop Topological Matter, Strings, K-theory and related areas, 2016

Motoko Kotani, Figure Materials, 16th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, 2016

小谷 元子, Mathematical Challenge to a New Phase of Materials Science, Workshop on nonlinear partial differential equations and related topics - In honor of Professor Atsushi Tachikawa on his 60th birthday, 2016

Hisashi Naito, Discrete geometric analysis and fullerene structures, The A3 mini-workshop on soft matter, 2016

Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding of materials, 2nd International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS), 2015

⑲ Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding of Materials, Geometric analysis in geometry and topology 2015, 2015

⑳ Motoko Kotani, Mathematical challenge to structural understanding and structure of materials, 15th International Conference Computational a

nd Mathematical Methods in Science
and Engineering, 2015

- ⑳ Motoko Kotani, Mathematical Challenge to Structural Understanding of Materials, Mathematics of Novel Materials, 2015

〔図書〕(計 0 件)

6 . 研究組織

(1)研究代表者

小谷 元子 (Kotani Motoko)
東北大学・理学研究科・教授
研究者番号 : 50230024

(2)連携研究者

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