

2 概要

9月8日(木)

1. 松谷茂樹（金沢大学） 産業現場での数学モデル化（現実と数学）について

(On mathematical modeling (reality and mathematics) in industrial research and development)

講演者は27年間、製造業の現場での数学活用に従事し、ほぼ同時期に、アーベル関数論に関わる純粋数学の研究に20年間携わり、純粋数学の立場からも現実世界の対象を数学的に記述することに関して探ってきた。現実世界の対象を数学で記述する際に生じる問題は、晩年の哲学者フッサールが取り上げた題目であるが、フッサールが指摘した様々な課題が、産業現場においても、数学の現実への適用の際に現れている。フッサールは青年期に卓越的な光学の知識により、望遠鏡の光学系を通じた現実への数学適用の限界を理解し、ワイエルシュトラスの下でアーベル関数論、変分問題といった数学の最前線を学んだ後に、哲学の研究を行った。それらの経験を基に、現実と数学に対する哲学考察を行ったと思われる。また、数学的にもその本質に関わる結果をいくつも出版した数理論理学の研究者カシミールは、フィリップスで33歳以降技術者として過ごし、数学を含めたアカデミアと産業現場の関係に関して20世紀後半にはその危機を提示していた。欧米に比較して人的交流のない日本においては、フッサールやカシミールが示したような、数学、広くは科学と現実世界の関係性の本質的問題点、数学や科学に関わるアカデミアでとりあげられることはほぼない。しかし、約20年にわたる日本の産業界の低迷の要因の一つは、この関係性やこのような状況にあるのではと講演者は考えている。（「ものづくりの数学のすすめ」現代数学社 2017）産業現場での数学活用における問題は、「言葉としての数学」の問題であり、それはフッサールが呈した問題の一面でもある、と講演者は考えている。「言葉としての数学」を再認識することで、数学と現実の対応関係を上手く取り扱うことが、産業の発展に繋がるとも考える。また、同時に、「数学と現実の対応関係を上手く取り扱う」ということ自体が、それはどういう事を意味するかという意味、根源的な問題であるとも考えている。この問題の本質は、「りんごが4つ、みかんが2つ、ぶどうが2房と1粒ありました。くだものは何個ですか？」という平易な問いに還元する。この問題を一つの例として、本講演では、アカデミアと企業での研究の差異を通じて、産業現場、広くは日常での数学活用における事例と課題を紹介する。

The speaker had been engaged in the application of mathematics in the manufacturing industry for 27 years and at about the same time, has been involved in research on pure mathematics related to the Abelian theory of functions for 20 years, exploring the mathematical description of objects in the real world from the standpoint of pure mathematics as well. The problems that arise when describing real-world objects mathematically are a subject that the late philosopher Husserl addressed in his later years. The various issues that Husserl pointed out also appear in the application of mathematics to reality in industrial research and development. In his youth, Husserl's knowledge of optics, which was outstanding, helped him understand the limitations of applying mathematics to reality through the optics of telescopes, and he studied the frontiers of mathematics in the XIX-th century, such as Abelian function theory and variational problems, under Weierstrass, before pursuing his philosophical studies. Based on these experiences, he seemed to have developed a philosophical consideration of reality and mathematics. Casimir, a researcher in mathematical physics who published a number of deeply fascinating results related to the nature of mathematics, also spent time as an engineer at Phillips after the age of 33 and presented a crisis in the latter half of the 20th century regarding the relationship between academia and industrial research and development, including mathematics. In Japan, where our society does not tolerate changing professions in academia and industry, compared to Europe and the U.S., the essential problems in the relation between mathematics, science, and the real world, as indicated by Husserl and Casimir, are rarely addressed in mathematics and science-related academia. The speaker believes that one of the reasons for the stagnation of Japanese industry over the past 20 years may lie in this relation and this situation. The speaker believes that the problem in the use of mathematics in industrial settings is the problem of "mathematics as a language," which is also an aspect of the problem presented by Husserl. By recognizing "mathematics as a language" properly, the speaker believes that "handling the correspondence between mathematics and reality well" will lead to the development of the industry. At the same time, he also considers that "handling it well" is itself a profound problem; what "handling it well" means.

2. 鈴木俊洋（崇城大学） 数学の現象学と専門知論

(Phenomenology of mathematics and the theory of expertise)

数学は形式的な学問である。しかし、数学を遂行するということが、形式的規則に従うことのみではなく、そこに直観と呼ぶものが働いていることは、数学を遂行したことのあるものならば、誰しもが知っていることである。それでは、我々が数学を遂行しているときに働いている数学的直観とは何だろうか。近現代の数学の哲学は、この問いを正面から問うてこなかった。フッサールが創始した現象学という枠組みは、数学的直観を哲学的に考察することを可能にするものである。

フッサールが創始した現象学という枠組みにおいて、我々は、数学的対象の把握を外知的知覚との類比の中で語るができるようになる。

さらに、現象学的枠組みによって、我々は、数学的対象の「発生」を論じることができるようになる。フッサールの晩年の幾何学についての考察は、幾何学的概念が測地術という技術から発生するさまを記述している。

最後に、数学的対象を考察するための枠組みは、様々な領域の専門家が持つとされる専門知の考察に適用することができる。それは、科学技術の専門知を考察する場面において重要な道具立てとなる。

Mathematics is a formal science. However, those who have performed mathematics know that performing mathematics not only means following formal rules, but it also involves something that can be called intuition. Then, what is mathematical intuition involved when one performs mathematics? The modern philosophy of mathematics has not addressed this kind of question seriously. Husserl's phenomenology makes it possible to consider mathematical intuition philosophically.

Within the framework of phenomenology, founded by Husserl, we are able to talk about grasping mathematical objects in an analogy with external perception.

Moreover, the phenomenological framework allows us to discuss the “origins” of mathematical objects. Husserl's thoughts on geometry in his later years describe how geometrical concepts arise from the technique of geodesy.

Finally, the framework for analyzing mathematical objects can be applied to an analysis of the expertise that experts are supposed to have in various fields. We can use this as an important tool for considering the expertise of science and technology.

3. 野田祐輔（岡山県立大学） インフォマティクス支援ナノスケール材料計算の活用事例

(Case studies of informatics-aided nanoscale materials simulation)

近年、学术界や産業界の様々な場面において情報科学（インフォマティクス）技術が広く活用されている。特に材料科学の分野では、第1の科学「実験科学」、第2の科学「理論科学」、第3の科学「計算科学」に続き、統計学や機械学習技術を活用して新たな知見・情報を抽出する、未知の材料や構造を探索するなど、データ駆動的なアプローチを展開する第4の科学「データ科学」が注目されている。本発表では、「結晶構造データベース活用」、「最適化」、「予測モデル」をキーワードとして、異なる目的で活用するインフォマティクスとナノスケール材料計算を連携させた研究例を紹介する。

Recently, techniques of information science (informatics) are widely used in various situations in academia and industry. Especially in the field of materials science, following “empirical science” as the first paradigm, “theoretical science” as the second paradigm, and “computational science” as the third paradigm, “data-driven science” as the fourth paradigm is drawing much attention, which develops data-driven approaches such as extracting new findings and information, and searching for unknown materials and structures with utilizing statistical and machine-learning techniques. In this presentation, I will introduce research examples that combined informatics and nanoscale materials simulation, which are used for different purposes, with the keywords “utilization of crystal structure database”, “optimization”, and “prediction model”.

4. 増子貴子, 高橋卓大 (京セラ (株)) 京セラにおける材料科学への数理解析技術の適用事例

(Applying mathematical analysis to material science in Kyocera)

弊社で取り組んできた材料開発のためのシミュレーションに関し、6つのトピックスについて紹介する。

線形代数の座標変換手法の一つである主成分解析を用いた熱による相転移現象の分子論的説明を実施した。実際に α -silica と β -silica の相転移現象についての例をお見せする。次に、量子アニーリングマシン D-Wave を孤立多体系の物理マシンと捉え、可積分系と非可積分系の熱化現象を計算した例をお見せする。また、一般の溶液は無向グラフとして記述できるが、水素結合を主体とする溶液は有向グラフとして表現できる。その観点から、溶媒中分子の水素結合ネットワークの制御による反応効率化の例と、水クラスター分割問題に関してご紹介する。

また、京セラにおけるデータ解析の適用例として、機械学習と多目的最適化を用いた社内製品の最適化結果と、製品特性を両立させるための重要パラメータ探索法を検討した結果について報告する。最後に、京セラ社内における数学普及活動について触れる。

We introduce six topics related to simulations for material science that our company has been working on.

A molecular explanation of thermal phase transition phenomena using principal component analysis, which is one of the coordinate transformation methods of linear algebra, is presented. We show an example of the phase transition phenomena between α -silica and β -silica. Next, we introduce an example in which we regarded the D-Wave quantum annealing machine as an isolated many-body physical machine to calculate the thermalization phenomena of integrable and non-integrable systems.

A chemical solution can generally be described as an undirected graph, but a solution mainly composed of hydrogen bonds can be described as a directed graph. From this point of view, we introduce an example of improving the reaction efficiency by controlling the hydrogen-bonding network of molecules in the solvent, and discuss the water cluster splitting problem. We also report two application examples of data analysis in Kyocera: the optimization of our products using machine learning and multi-objective optimization, and the search method for important parameters to improve product characteristics. Finally, we touch on how we are promoting mathematics in Kyocera.

9月9日(金)

1. 伊藤祐斗 (電気メーカー) Clifford 代数を用いた水素原子の隠れた対称性の解釈)

(Interpretation of the hidden symmetry of hydrogen atoms using Clifford algebra) 水素原子を対象とした研究は理論物理の発展に重要な役割を果たしてきた。量子力学や場の量子論の発展がその好例である。理論物理の大きな発展とは別に、様々な数学分野の知見を取り入れることで水素原子の中に興味深い数理解構が見出されてきた。そうした数理解構の一つが「隠れた対称性」である。水素原子は非相対論的近似の下で高度な縮退を持つことが知られている。この高度な縮退は水素原子のポテンシャル形状から容易に想定される三次元回転対称性を用いて説明することができず、より大きな対称性である四次元回転対称性を用いることで初めて説明できる。このような高度な対称性はしばしば隠れた対称性あるいは力学的対称性と呼ばれる。本講演では水素原子の隠れた対称性の Clifford 代数を用いた解釈について議論する。一般に、このような対称性を記述する道具としては、リー群やリー代数が有名であり、それと比較すると Clifford 代数を用いた解釈はマイナーである。しかしながら、この解釈には有用な点があることを見出したので今回紹介する。

Researches on hydrogen atoms have played an important role in the development of theoretical physics. The development of quantum mechanics and quantum field theory are good examples. Apart from the major developments in theoretical physics, interesting mathematical structures have been found in hydrogen atoms by incorporating findings from various mathematical fields. One such mathematical structure is “hidden symmetry”. Hydrogen atoms are known to be highly degenerate under the non-relativistic approximation. This high degree of degeneracy cannot be explained by the three-dimensional rotational symmetry, which is easily assumed from the potential shape of hydrogen atoms, but can only be explained using a larger symmetry, four-dimensional rotational symmetry. Such a high degree of symmetry is often referred to as a hidden symmetry or a dynamical symmetry. In this talk, the interpretation of the hidden symmetry of hydrogen atoms using Clifford algebra will be discussed. In general, Lie groups and Lie algebras are the most famous tools to describe such symmetries and in comparison, interpretations using Clifford algebras are minor. However, I found some useful points in this interpretation, therefore I will present it.

2. 大森祥輔 (早稲田大学) 一般位相空間論を用いた物質の幾何学的構造の表現について

(General topological approach to geometric patterns of matters)

Characteristic geometrical patterns of matters in solid and liquid states, such as the graphic structure of polymers, the clusterized structure of molecular liquids, or the dendritic structure in solidifications, have been hugely studied from the viewpoint of disordered physics [1,2]. To investigate geometric patterns, several mathematical methods using topological concept, e.g., persistent homology theory [3], have been also developed. In my talk, the studies about characterizing geometric patterns based on general topology (point-set topology) are reviewed and the recent results of this topological approach are introduced [4,5].

The geometric patterns can be discussed in the context of continuum theory, which is one of the field of general topology [6]. A topological space is called a continuum if it is a connected compact Hausdorff-space, and a geometric pattern is specified by a continuum or a direct sum of continua.

For instance, a geometric pattern with dendritic structure is described as a topological dendrite that is a locally-connected continuum (a Peano-continuum) without simple closed curve. These continua corresponding to the geometric patterns can be represented universally based on a set of equivalence classes for a specific topological space X . In the present talk, adapting a Cantor cube $(\{0, 1\}^A, \tau_0^A)$ as X , the universally representations of continua are shown and their geometrical relations are discussed.

[1] J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, Cambridge, 1979).

[2] N. E. Cusack, *The Physics of Structurally Disordered Matter: An Introduction* (University Sussex Press, Brighton, 1987).

[3] Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue, and Y. Nishiura, PNAS. **113**, 7035 (2016).

[4] A. Kitada, S. Ohmori, and T. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 045001 (2016).

[5] S. Ohmori, Y. Yamazaki, T. Yamamoto, and A. Kitada, Phys. Scr. **94**, 105213 (2019).

[6] S. B. Nadler Jr., *Continuum Theory* (Marcel Dekker, New York, 1992).

3. 嶋田隆広 (京都大学) 格子・電子欠陥による局所対称性の破れとトポロジカル・マルチフェロイクスの創出
(Topological multiferroics induced by local/quantum symmetry breaking via lattice/electron defects)

渦・スキルミオン・メロンなど非自明なトポロジカル秩序を有し、かつ、究極的に小さな寸法を有する強誘電体/強磁性体を実現することは、スピントロニクスデバイスなどの次世代技術の基幹として注目を集めている。しかしながら、こうした機能はある臨界寸法に達すると消失することが知られている。例えば、強誘電体では寸法が3-10 nm程度に達すると表面電荷による反電場の影響が支配的となり、強誘電性が消失する。また、電気双極子間には、磁性体中のスピン間に働くDzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用のようなトルク作用がないため、強誘電体中でスキルミオンやメロンといったトポロジカル秩序を形成することは物理的に不可能であるとされてきた。本研究では、第一原理解析を用いて、ペロブスカイト型酸化物中の格子欠陥（原子空孔、転位、粒界など）を工学利用することで、究極的に小さい（原子寸法の）磁性強誘電体を創出できることを示した。さらに、原子よりも微小な材料構成要素である「電子」の局在欠陥（ポーラロン）に着目し、表面や粒界等のヘテロ構造部に自己凝集したポーラロンを工学利用することで、強誘電体では不可能とされてきたスキルミオンやメロンといったトポロジカルな分極秩序が実現できることを示した。また、材料に外力を負荷することで、ポーラロンが誘起する秩序のトポロジカル数（スキルミオン数）を力学的に制御できることを示した。これらの成果はいずれも、格子欠陥または電子欠陥（ポーラロン）が自発的に形成する局所的（量子的）力学場によって結晶格子の対称性が局所的に破れることに起因する。これは、格子欠陥やポーラロンの力学場を制御することでより高次のトポロジカル秩序を実現できることを示唆しており、今後、結晶学的・量子力学的な欠陥力場と対称性の破れに起因した新たな機能発現に関する力学・数理を目指すものである。

Realization of ultrasmall ferroics with nontrivial topological field textures such as vortices, skyrmions, and merons holds promise in novel technological paradigms. Such nontrivial ferroelectric orders and their functionalities, however, inevitably disappear below a critical size of several nanometers. In addition, very few topological structures can exist in ferroelectrics due to the lack of non-collinear interaction among electric dipoles, unlike the Dzyaloshinskii-Moriya interaction among spins in ferromagnetics. Here, we demonstrate from first-principles that “Atomic-scale Multiferroics” and “Polar Skyrmions and Merons” can be formed by engineering lattice defects and electron defects (i.e., polarons) in heterostructures of perovskite oxides. Doped (excess) electrons are localized and form a polaronic state in the heterostructures (surfaces and grain boundaries), and give rise to skyrmionic and meronic dipole moments around the polaron formation sites due to the cooperative symmetry breaking of polarons and heterostructures. We further show that the topological number of polaronic state can be tailored by applied mechanical strain, i.e., strain engineering for polar topologies. Our discovery overcomes physical limitations of the critical size of 3-10 nm where ferroelectricity disappears and the inability to form topological field (skyrmions, merons) of polarization due to absence of chiral interaction among electric dipoles, and realizes unique polar topological orders at ultimately electron(polaron)-scale. The clarified mechanism that local symmetry breaking via polaron formation coupled with heterostructures provides a novel approach to realize ultimate miniaturization of ferroic materials and opens up new fields to create the polar topological objects. Our result therefore adds a new class of functional polaron families as “Topological Polarons”.

4. 中原幹夫 (近畿大学) Polyacetylene: past and present

Polyacetylene $(C_2H_2)_n$ has attracted attention of chemists, physicists and mathematicians since its synthesis in 1970s due to its characteristic behaviors. It was eventually awarded the Nobel Prize in Chemistry in 2000.

In my talk, I will start with a short review of the Su-Schrieffer-Heeger model of polyacetylene [1,2]. Then show that the SSH model has two phases characterized by different topological indices [3].

[1] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Solitons in polyacetylene, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979), doi:10.1103/PhysRevLett.42.1698.

[2] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Soliton excitations in polyacetylene, Phys. Rev. B **22**, 2099 (1980), doi:10.1103/PhysRevB.22.2099.

[3] R. Shankar, Topological Insulators – A review, arXiv:1804.06471, <https://doi.org/10.48550/arXiv.1804.06471>.

5. 平久夫（北海道教育大学）曲面量子系の多様なナノ物性

曲率を有するナノ構造体における量子輸送現象を理論的・数値的に解析する。曲率を有するナノスケールの薄膜では、幾何学的曲率に起因する有効スカラーポテンシャルが生じる。また、ねじれた原子構造を有するナノスケール物質には、幾何学的ねじれに起因する有効ベクトルポテンシャルが生じる。これらの有効ポテンシャルは、幾何学的曲率やねじれを有する物質では電子などの輸送特性が平面系から大きく変化することを示唆している。本研究では、これらの幾何学的効果によりどのような物性が発現するかを明らかにした。具体的には変形したナノシリンダーとねじれた量子リングに注目し、波動関数の空間プロファイルの変化と、ねじれによる量子位相シフトが生じることを明らかにした。今回は、特にねじれによる量子位相シフトが引き起こす特異な量子輸送現象を報告する。

The present study shows theoretical and numerical analysis of quantum transport phenomena in nanostructures with curvature. In nanoscale thin films with curvature, effective scalar potentials arise due to geometric curvature. Nanoscale materials with twisted atomic structures also give rise to effective vector potentials due to geometric torsion. These effective potentials indicate that the transport properties of electrons and other materials with geometric curvature and torsion change significantly from flat systems. In this study, we clarify what kind of properties are manifested by these geometric effects. Specifically, we focus on deformed nanocylinders and twisted quantum rings, and show that the spatial profile of the wavefunction changes and that a quantum phase shift due to torsion occurs. We report in particular the peculiar quantum transport phenomena induced by the quantum phase shift due to torsion.

6. 尾上順（名古屋大学）1次元凹凸曲面構造を有するフラレンポリマーの新奇な物理と化学

(Novel physicochemical properties of 1D periodic uneven structured C₆₀ Polymer)

これまで、C₆₀ 薄膜に電子線（3-7 keV）を照射することで、凹凸周期曲面構造を有する1次元（1D）C₆₀ ポリマーが生成することを見出し [1], 1D 金属に特徴的な物性を示すことを報告してきた [2]。この1D 凹凸曲面上を自由電子が動く挙動（部分多様体の量子力学）は、次式のハミルトン演算子で与えられる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} \right) + (h^2 - k) \right]$$

ここで、 $g = \det[g_{ij}]$ は計量テンソルを表す。第1項は電子の運動エネルギーの演算子であるが、第2項に平均曲率 h とガウス曲率 k があたかもスカラーポテンシャルのように加わる（1D 平面では第2項は現れない）ことが知られていたが、実際に電子に影響を与えるかは謎であった。我々は、上記1D C₆₀ ポリマーの電子挙動における幾何曲率項の影響を理論的に予測 [3] した上で、実験的に実証することに成功した [4]。本講演では、部分多様体の量子力学が生み出す新奇な物理的 [5]・化学的 [6] 性質を紹介する。

We have reported that electron-beam-irradiation (3-7 keV) of a C₆₀ film results in formation of a 1D C₆₀ polymer with a concavo-convex periodic curved structure [1], and the polymer exhibits physical properties arising from 1D metal [2]. The behavior of the free electrons on the curved surface is given by the Hamilton operator of the following equation (quantum mechanics of submanifold).

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} \right) + (h^2 - k) \right]$$

Here, $g = \det[g_{ij}]$ represents the metric tensor. The first term is an operator of the kinetic energy of electrons, and the second term consisting of the mean curvature h and the Gaussian curvature k appears like a scalar potential (the second term does not appear in the 1D plane surface). So far, it has been a mystery whether or not this curvature term affects the behavior of electrons since 1950s. We theoretically predict the effect of the geometric curvature term on the electronic behavior of the above 1D C₆₀ polymer [3] and then experimentally demonstrate it [4]. In this symposium, I will introduce novel physicochemical properties [5, 6] emerged by the quantum mechanics of submanifold of the 1D C₆₀ polymer.

- [1] H. Masuda, H. Yasuda, and J. Onoe, *Carbon* **96**, 316 (2016).
- [2] H. Shima and J. Onoe, “ The Role of Topology in Materials ” (S. Gupta and A. Saxena eds.), Springer, Chap. 3, pp. 53-84 (2018) and references therein.
- [3] H. Shima, H. Yoshioka, and J. Onoe, *Phys. Rev. B* **79**, 201401 (R) (2009).
- [4] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka, and S. Kimura, *Europhys. Lett.* **98**, 27001 (2012)
- [5] S. Ryuzaki and J. Onoe, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 113301 (2014).
- [6] M. Nakaya et al., *Adv. Sustain. Sys.* **5**, 2000156 (2021). [Press release]

9月10日(土)

1. Karel Svadlenka (京都大学) 構造材料の弾塑性変形の変分的アプローチによるモデリング

(Variational approach to modeling of elastoplastic deformation of structured materials)

原子スケールの層状構造をもつ合金のような構造材料は奇妙な変形パターンを示すことがあるが、この事実を利用して特定の性質を備えた新材料が開発できると期待される。本講演では、このようなパターン形成を理解するための道具となる数理モデルを一つ提案する。このモデルは有限ひずみ弾塑性による rate-independent 系の変分問題として定式化される。ガンマ収束による均質化にも言及しつつ、背景にある数学理論について述べ、実験データを意識した数値シミュレーション結果を紹介する。

Structured materials, such as metallic alloys with atomic-scale layers, show peculiar deformation patterns, which may have significant implications on material properties. In this talk, we discuss one possible approach to modeling and understanding of this kind of pattern formation through the so-called rate-independent evolution in the variational setting of finite-strain elastoplasticity. Besides mentioning connections to homogenization via Gamma-convergence, we present the underlying mathematical theory and show numerical simulations in comparison to experimental measurements.

2. 五十嵐一 (北大) 静的および準静電磁界におけるランダム媒質の均質化について

(On homogenization of random media in static and quasi-static electromagnetic fields)

In this talk, we consider the homogenization of materials with fine structure such as soft magnetic composite (SMC), multi-turn coil and Litz wire. It is shown that the classical Ollendorff formula for static fields, which is equivalent to Clausius-Mossotti relation and Maxwell-Garnett formula, can be extended for magneto-quasi-static fields by introducing complex permeability. We show experimental validations for this method. We also show that this method does not work well for a dense medium. In the latter half of this talk, we present a homogenization method for SMC that is a random-dense medium by using discrete element method for dynamical simulation of iron particles and finite element method for evaluation of electromagnetic properties. From experimental results, we conjecture that the homogenized permeability of random media is higher than that of periodic media.

3. 比留間真悟 (京都大学) 均質化における連分数表示の活用

(Application of continued fraction to homogenization method in numerical analysis of the electromagnetic fields)

In the numerical analysis of the electromagnetic fields, the materials such as magnetic steel sheets, coils, and soft magnetic composites are sometimes modeled as bulk materials to reduce the number of unknowns and computational costs. Since this kind of modeling loses information about the field distribution in the materials, it is difficult to compute the losses in the material. The homogenization method aims at obtaining the macroscopic property of such materials to calculate the losses. In some cases, the analytical expression of the macroscopic property is obtained from the analytical solution of Maxwell's equations, which is the frequency-dependent complex function. The continued fraction expansion of the macroscopic property leads to the Caue equivalent circuit. The continued fraction expansion can be formulated more generally through orthogonal basis generation of the solution space. The error of the equivalent circuit is obtained by considering the geometrical relationship between the dual formulation of Maxwell's equations.

4. 岩本憲泰（信州大学）ロボティクスから挑戦する制御できる曲面

(Controllable surfaces challenging from robotics)

曲面は、建物、衣服、生物の表皮、ベシクルといった多様なスケールの物体の表層をモデリングできる。これらの各分野にて、その形を制御できることが今後の研究対象の一つとなると予想され、制御可能な曲面の技術は有用と考えられる。この技術として例えば温度や磁場で制御可能なアクティブマテリアルが挙げられ、ロボティクスでも着実に研究の数が増えている。しかし、Computer Graphicsのように、曲面上の点の空間内位置を直接操作する状況は限定されており、ロボティクスの観点では、ロボットの状態変数もしくは制御変数からロボットの形状やロボット上の点の位置を算出できなければならない。これは、曲面の第1基本量と第2基本量から、もしくは曲面に沿った線群の伸びから、その形状を復元することに相当するが、容易な計算ではない。これを解決するには、ロボットの単なる機構の開発のみならず、数理的な概念に基づくのが好ましい。特に、ロボット上の局所座標系に等角性を持たせることで、曲面形状ロボットの理論が簡易となる点に我々は着目する。

本講演では、作動可微分多様体研究室で研究を行っている S-isothermic 曲面形状ロボット、Plateau 問題を機構的に解く境界制御型曲面形状ロボット、区分的に平均曲率一定な曲面モデルについて紹介する。また、曲面形状ロボットのフィードバック制御理論として活用できると予想される平均曲率半密度で記述された Willmore 流についても触れる。

Surfaces can model the outer layers of objects at various scales, such as buildings, clothing, epidermis, and vesicles. In each of these fields, the ability to control its shape is expected to be one of the research topics in the future, and the technology of controllable surfaces will be helpful. This technology includes, for example, active materials that are controllable by temperature and magnetic fields, and the number of researches in robotics is steadily increasing. However, as in computer graphics, scenarios in which the spatial position of a surface point can be directly manipulated are limited. From a robotics perspective, the robot's shape and the position of points must be calculated from the robot's state or control variables. This corresponds to recovering the surface shape from its first and second fundamental quantities or from the elongations of lines along the surface, which is not an easy calculation. To solve this problem, we should not only develop the robot's mechanism but also based on mathematical concepts. In particular, we focus on the idea that the theory of robotic surfaces can be simplified by assuming conformality in its local coordinate system. In this talk, we will introduce two types of robots and one model developed in Actuated Differentiable Manifold Laboratory: an S-isothermic surface robot, a boundary-controlled robotic surface that mechanically solves Plateau's problem, and a piecewise constant mean curvature surface model. We also touch on the Willmore flow described by mean curvature half-density, which is expected to be utilized as a feedback control theory for the robotic surface.

5. 垂水竜一（大阪大学）リーマン多様体上の弾性理論とその応用

(Theory of elasticity on Riemannian manifolds and its applications)

材料や構造体が示す力学特性を解析する際の数学的な基盤は弾性理論である。我々の研究グループでは、これまで弾性理論の数学的な枠組みを従来のユークリッド空間からリーマン多様体へ一般化するとともに、得られた理論を数値計算へ実装することによって、残留応力によって形態が変化するソフトマテリアルの力学特性解析を進めてきた。本研究では、リーマン多様体上の弾性理論と Materials Point Method による数値計算法の組み合わせについて概説するとともに、これを用いて行った植物の形態解析例について紹介する。

The theory of elasticity is the mathematical basis for analyzing the mechanical properties of materials and structures. Recently, our research group has generalized the theory from Euclidean spaces to Riemannian manifolds and then implemented it into the numerical analysis. Elasticity on the Riemannian manifold enables us to analyze the mechanical property of soft materials whose morphology is controlled by residual stresses. In this study, we present a brief overview of the elasticity theory, implementation of the material point method, and some examples including plant morphology analyses.

6. 小林舜典（大阪大学）転位を含む結晶の連続体力学：微分幾何学と変分法に基づく数値計算

(Continuum mechanics of crystals with dislocations: differential geometry and numerical analysis based on calculus of variations)

結晶性材料中の転位は曲線状に連なった格子欠陥であり、材料の塑性変形や強度と密接に関わることが知られている。こうした背景から、転位の幾何学的特徴や材料の力学特性への影響などに着目した多様な研究が行われてきた。連続分布転位論はこうした試みの一つであり、転位を滑らかな多様体上のテンソル場として捉えることで連続体力学解析へ欠陥構造を導入するものである。1950年台に Kondo, Bilby ら, Kröner によって独立に提案されたこの理論は結晶の自然状態、すなわち無応力でありながら転位を含むという一見矛盾した状態を記述する目的で、微分幾何学を連続体力学に取り入れた最初の試みであり、これらの取り組みはその後 Amari によって統一する形にまとめられた。自然状態は Riemann 計量とアフィン接続を備えた滑らかな多様体であるが、一般に 3次元 Euclid 空間へ等長的に埋め込むことはできないという特徴を有しており、現実の結晶の力学状態はこの自然状態の 3次元 Euclid 空間への埋め込みによって求められる。こうした試みはその後の研究で大きく進展した一方で、現実の結晶で観察される複雑な転位分布に対してこの自然状態を直接決定することは難しい。本研究では、連続分布転位論と変分法に基づくアプローチにより、任意の転位分布に対して結晶の自然状態を決定する手法を構築した。この手法においては、Cartan の第一構造方程式と Helmholtz 分解を変分問題の構成の際に用いている。結晶の自然状態はこの変分問題の解から直接決定することができる。ここで構築した枠組みの妥当性を検証するため、いくつかの転位分布に対する数値計算を行った。転位を含む結晶の力学状態は、数値計算によって得られた自然状態を 3次元 Euclid 空間へ埋め込むことで計算することができる。

Dislocations in crystalline materials are linear lattice defects that play a central role in the plastic deformations and the strength of materials. Various studies have been conducted focusing on the geometrical characteristics of dislocations and their influence on the mechanical properties of materials. The theory of continuous distribution of dislocations is one such attempt to introduce defect structures into continuum mechanics analysis by considering dislocations as tensor fields on smooth manifolds. This theory, proposed independently by Kondo, Bilby *et al.* and Kröner in the 1950s, was the first attempt to incorporate differential geometry into continuum mechanics to describe the natural state of a crystal, a seemingly contradictory state that is stress-free but contains dislocations. Amari subsequently brought these independent studies together in a unified manner, focusing on the theory of distant parallelism. The natural state is described as a smooth manifold with a Riemann metric and an affine connection, but it is generally characterized by the fact that it cannot be isometrically embedded in three-dimensional Euclidean space. The state of a real crystal with internal stress is obtained by embedding this natural state in the Euclidean space. While such attempts have been greatly advanced in subsequent studies, it is difficult to directly determine this natural state for the complex dislocation distribution observed in real crystals.

In this study, we developed a method for determining the natural state of crystals for arbitrary dislocation distributions using an approach based on continuous distribution dislocation theory and the calculus of variations. In this method, Cartan's first structure equation and Helmholtz decomposition are used in the construction of the variational problem. The natural state of the crystal can be calculated directly from the solution to this problem. To verify the validity of the framework developed here, we performed numerical analyses for several dislocation distributions. The mechanical state of the crystal including dislocations can be calculated by embedding the natural state obtained from the numerical calculations into a three-dimensional Euclidean space.

7. 中川淳一 (東大数理) 東京大学大学院数理科学研究科 F M S P 社会数理実践研究：結晶の配位数列は準多項式型

(Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics) of the University of Tokyo : Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type)

社会数理実践研究は、東京大学大学院数理科学研究科の数物フロンティア大学院 (FMSP) の博士課程コース生の教育プログラムのひとつとして、産業界や社会における課題に対し、高度の数学的知見や新たな数学の創造により、従来の数学的応用を超える研究を行うことを目的としている。2018年度に開設した日本製鉄の社会連携講座「データサイエンスにおける数学イノベーション」では、教育研究の一環として社会数理実践研究に課題を提供している。

ここでは、結晶の配位数列の準多項式性について研究している。結晶の配位数とは、各原子に隣接する原子の数を表す基本的な不変量である。配位数列とは、材料科学で使われている配位数を拡張した概念であり、 n 個の原子結合によりたどり着ける原子の数を s_n とおいたような数列である。結晶の配位数列に関する重要な問題として「結晶の配位数列は十分大きいところで準多項式になるかどうか? (この数学的性質は準多項式型と定義されている)」という Grosse-Kunstleve と Brunner, Sloane による予想 ([GKBS96]) がある。本研究において、この予想を肯定的に解決することができた ([NSMN21])。証明で重要なカギになるのは、有限生成モノイドの理論を使うことであった。一方、現実の結晶では、準多項式になることが多くの場合で観察される。そこで、どのような数学的条件を付与すれば準多項式型が準多項式になるかについて、代数系の理論とグラフ理論による数値計算の両面から研究しており、その進捗を紹介する。

Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics) of the University of Tokyo. The academic-Industry collaboration Program ‘Mathematical Innovation in Data Science’ has started up in April 2018 provided Nippon Steel Corporation with funds, affiliated with the Graduate School of Mathematical Science, the University of Tokyo has proposed themes for the program, and provided several themes for doctoral students who mainly major in algebra or geometry.

The coordination sequences of periodic graphs are predicted to be of quasi-polynomial type by Grosse-Kunstleve et al. (1996). After that, various mathematical methods to calculate coordination sequences have been developed and they are actually calculated in many specific cases as in the work of Conway & Sloane (1997), Eon (2002, 2012), Goodman-Strauss & Sloane (2019), O’Keeffe (1995, 1998), Shutov & Maleev (2018, 2019, 2020). And, we were able to give the affirmative answer [NSMN21] to the question posed by Grosse-Kunstleve et al. [GKBS96] using monoid theory. On the other hand, Crystals in real world are observed to be quasi-polynomial in many cases. In SGW2022, we hope to study that what mathematical conditions on quasi-polynomial type make it quasi-polynomial, in the view points of mathematics and numerical calculation in graph theory.

[GKBS96] R. W Grosse-Kunstleve, G. O Brunner, and N. J. A Sloane, Algebraic description of coordination sequences and exact topological densities for zeolites, *Acta Cryst. A* 52 (1996), no. 6, 879-889.

[NSMN] Y. Nakamura, R. Sakamoto, T. Mase, J. Nakagawa, Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type, *Acta Cryst.* (2021). A77, 138-148