Math-for-industry
Education & Research Hub

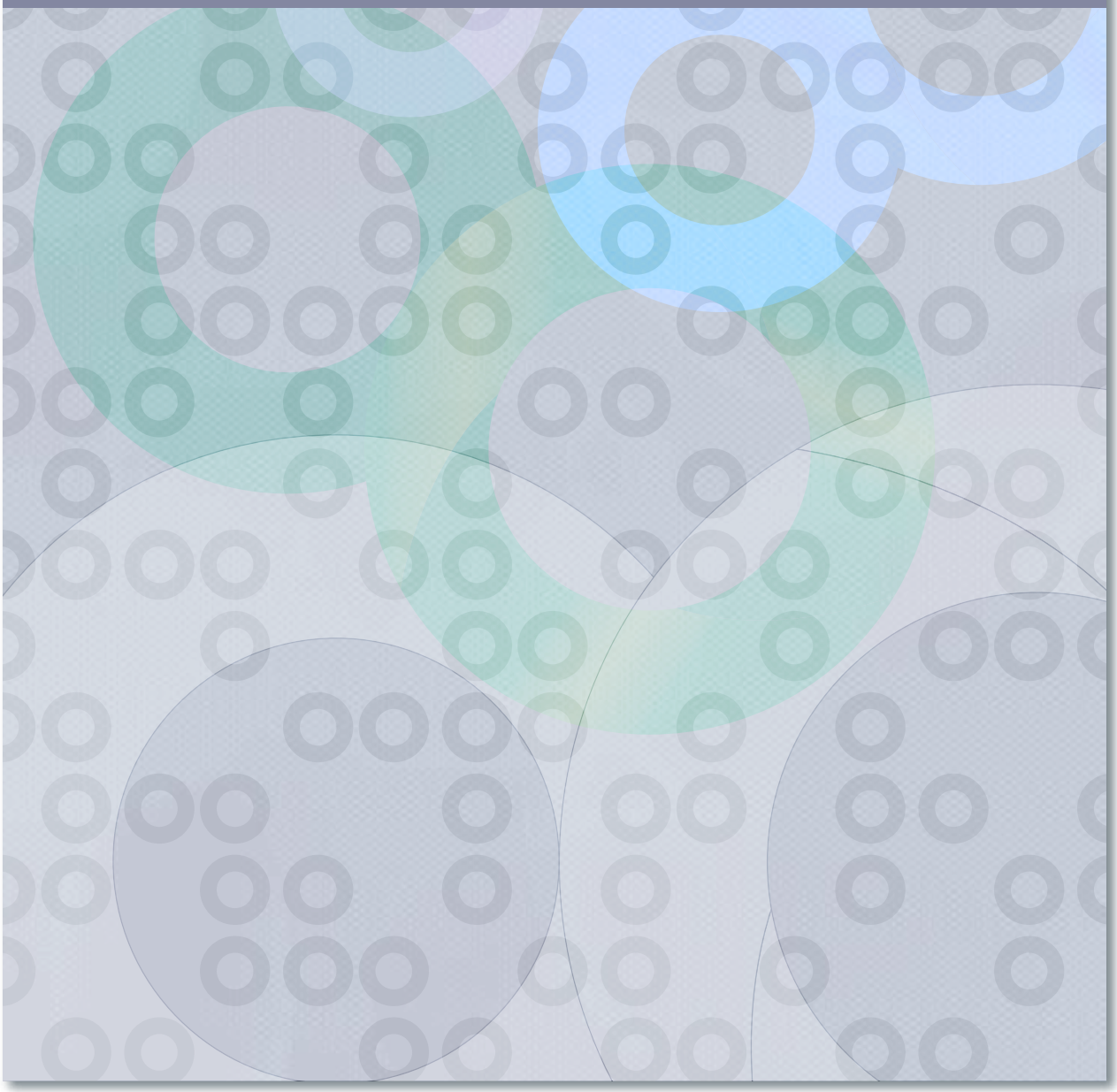
ISSN2188-1200

2020年度採択分　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

材料科学における幾何と代数III

編集：松谷茂樹, 落合啓之, 井上和俊, 小磯深幸, 佐伯修,
白井朋之, 垂水竜一, 内藤久資, 中川淳一,
濵田裕康, 松江要, 加葉田雄太朗

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所



MI Lecture Note Vol.89 : Kyushu University

2020年度採択分 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

材料科学における幾何と代数 III

編集：松谷 茂樹，落合 啓之，井上 和俊，小磯 深幸，佐伯 修，白井 朋之，
垂水 竜一，内藤 久資，中川 淳一，濵田 裕康，松江 要，加葉田 雄太朗

About MI Lecture Note Series

The Math-for-Industry (MI) Lecture Note Series is the successor to the COE Lecture Notes, which were published for the 21st COE Program "Development of Dynamic Mathematics with High Functionality," sponsored by Japan's Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) from 2003 to 2007. The MI Lecture Note Series has published the notes of lectures organized under the following two programs: "Training Program for Ph.D. and New Master's Degree in Mathematics as Required by Industry," adopted as a Support Program for Improving Graduate School Education by MEXT from 2007 to 2009; and "Education-and-Research Hub for Mathematics-for-Industry," adopted as a Global COE Program by MEXT from 2008 to 2012.

In accordance with the establishment of the Institute of Mathematics for Industry (IMI) in April 2011 and the authorization of IMI's Joint Research Center for Advanced and Fundamental Mathematics-for-Industry as a MEXT Joint Usage / Research Center in April 2013, hereafter the MI Lecture Notes Series will publish lecture notes and proceedings by worldwide researchers of MI to contribute to the development of MI.

October 2022
Kenji Kajiwara
Director, Institute of Mathematics for Industry

IMI Workshop of the Joint Usage Research Projects

Geometry and Algebra in Material Science III

MI Lecture Note Vol.89, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
ISSN 2188-1200
Date of issue: December 7, 2022
Editors: Shigeki Matsutani, Hiroyuki Ochiai, Kazutoshi Inoue, Miyuki Koiso, Osamu Saeki, Tomoyuki Shirai, Ryuichi Tarumi, Hisashi Naito, Junichi Nakagawa, Hiroyasu Hamada, Kaname Matsue, Yutaro Kabata
Publisher:
Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
Graduate School of Mathematics, Kyushu University
Motooka 744, Nishi-ku, Fukuoka, 819-0395, JAPAN
Tel +81-(0)92-802-4402, Fax +81-(0)92-802-4405
URL https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/

はじめに

本研究集会 II は，研究集会 II「結晶のらせん転位の数理」(2016 年)，研究集会 I「結晶の界面，転位，構造の数理」(2017 年)，研究集会 II「結晶の転位の先進数理解析」(2018 年)，研究集会 II「結晶の界面，転位，構造の先進数理解析」(2019 年)，研究集会 II「材料科学における幾何と代数 I」(2020 年) の継続と位置付けられる研究会である．

これら研究会の成果を踏まえ，また，特に一昨年，昨年実施の「材料科学における幾何と代数 I」「材料科学における幾何と代数 II」を継続して，本研究会は材料科学と幾何学や代数学との交流を目指した．この背景には，1) 技術の発展により産業界で求められる仕様が大きく変貌したこと，2) 観測装置や作成装置が発展し，例えば原子レベルでの構造の制御や観測等が可能になったこと，3) これらにより，従来材料科学で使われてきた数学だけでは表現できない新たな観測事実や現象が生じていることがある．本研究集会では，幾何学，代数学に関わる材料科学の研究者と，幾何学，代数学の研究者が議論する場を提供し，相互理解のきっかけを得ることを目的とした．昨年までの交流をより一般化し，哲学に関わるものや一般位相幾何の応用，企業研究者からの報告も含め，以下のような 17 講演が行われた．1) 企業の現場で数学モデル化の特徴と課題について　松谷茂樹 (金沢大学)，2) 技術と数学の関係，暗黙知に関して哲学の視点からの考察について　鈴木俊洋氏 (崇城大学)，3) マテリアル・インフォマティックスの研究について　野田祐輔氏 (岡山県立大学)，4) 企業の現場での計算化学，量子計算などの数理的な活用事例と，データサイエンス活用における数学について　増子貴子氏 (京セラ (株)) 高橋卓大氏 (京セラ (株))，5) 水素原子の量子力学的取り扱いの数理学的研究について 伊藤裕斗氏 (電気メーカー)，6) 一般位相幾何を応用することによる材料科学で観測される形状に関する研究について　大森祥輔氏 (早稲田大学)，7) 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の研究について　嶋田隆広氏 (京都大学)，8) ポリアセチレンの物性での位相幾何，代数的構造について　中原幹夫氏 (近畿大学)，9) 曲がった量子系に関する理論研究について　平久夫氏 (北海道教育大学)，10) 曲がった量子系の量子効果に関するカーボン系での実験的実証について　尾上順氏 (名古屋大学)，11) ミルフィーユ構造を持つ系での均質化法に関する数学的研究と，数値計算について Karel Svadlenka 氏 (京都大学)，12) 単純な均一化法がうまく機能しない例があることなども含め，ランダム媒質の電磁場物性の均質化法の研究について　五十嵐一氏 (北海道大学)，13) 電磁場物性の均質化に関わる連分数表示の数学的意味付けとその最近の成果について　比留間真悟氏 (京都大学)，14) 柔軟な線・面形状ロボット関連における曲面の取り扱いに関する研究について　岩本憲泰氏 (信州大学)，15) Lagrangian-Eulerian のハイブリッド連続体力学解析に関して　垂水竜一氏 (大阪大学)，16) 近藤・甘利理論による結晶転位の塑性の数値計算の研究について　小林舜典氏 (大阪大学)，17) 東大数理のＦＭＳＰ社会数理実践研究における材料科学への数学応用ついて　中川淳一氏 (東京大学)．

Twitter による宣伝などにより，企業研究者などの現場の技術者も含め， 111 名という多人数の参加者となった．講演の後の質問時間や現地開催でのフリーディスカッションなどの交流の機会を確保したことにより，昨年よりも，講演，議論を通じて，数学者と数学活用者との交流の礎・足場となり，本研究集会の目標は達成されたと考えている．言葉としての数学に還元すると，異なる科学分野において予想以上の共通点があることも体感できたと考える．

21 世紀に入って幾何・代数の研究が材料科学において急速に必要となっており，更なる加速が期待される．本研究会はその礎・足場として期待に応えるものとなったと考え，ここに報告をする．

組織委員代表　松谷茂樹

2022 年 11 月 2 日

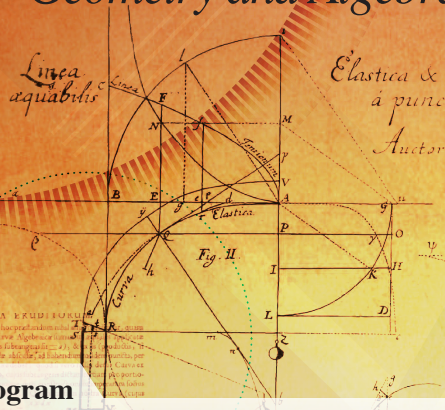
組織委員

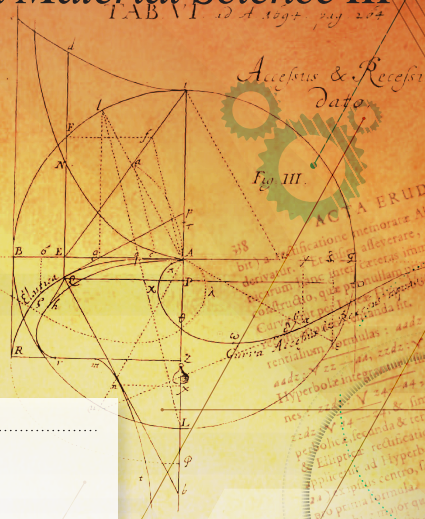
松谷茂樹	金沢大学
井上和俊	東北大学
落合啓之	九州大学
加葉田雄太朗	長崎大学
小磯深幸	九州大学
佐伯修	九州大学
白井朋之	九州大学
垂水竜一	大阪大学
内藤久資	名古屋大学
中川淳一	東京大学
濵田裕康	佐世保高専
松江要	九州大学

2022年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用・共同研究 一般研究 研究集会(I)

材料科学における幾何と代数III

Geometry and Algebra in Material Science III





Program

9月8日(木)

12:50–12:55 オープニング

12:55–13:55 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

14:05–15:05 鈴木 俊洋(崇城大学) 数学の現象学と専門知論

15:05–15:25 休憩

15:25–16:25 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

16:35–17:45 増子 貴子(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
高橋 卓大(京セラ(株))

9月9日(金)

9:40–10:40 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

10:50–11:50 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

12:00–13:00 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

13:00–14:20 昼休憩

14:20–15:20 中原 幹夫(近畿大学) Polyacetylene: Past and Present

15:20–15:35 休憩

15:35–16:35 平 久夫(北海道教育大学) 曲面量子系の多様なナノ物性

16:45–17:45 尾上 順(名古屋大学) 1次元凹凸曲面構造を有するフラーレンポリマーの新奇な物理と化学

9月10日(土)

9:30–10:30 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

10:40–11:40 五十嵐 一(北海道大学) 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

11:50–12:50 比留間真悟(京都大学) 均質化における連分数表示の活用

12:50–14:10 昼休憩

14:10–15:10 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

15:20–15:50 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

16:00–16:30 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

16:40–17:10 中川 淳一(東京大学) FMSP社会数理実践研究(東大数理)：結晶の配位数列は準多項式型

17:10–17:15 クロージング

2022. 9.8(木)–10(土)

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
ハイブリッド開催 Zoom&九州大学IMIオーディトリアム(ウエスト1号館D棟4階413号室)

参加にあたっては、下記の参加申込をお願いします。
URL:https://forms.gle/H3rA1D7EmHMGKQtC6

【申込フォーム】

研究代表者・組織委員

【研究代表者】 松谷 茂樹(金沢大学)

【組織委員】 落合 啓之(九州大学)
井上 和俊(東北大学)
小磯 深幸(九州大学)
佐伯 修(九州大学)
白井 朋之(九州大学)
垂水 竜一(大阪大学)
内藤 久資(名古屋大学)
中川 淳一(東京大学)
濵田 裕康(佐世保工業高等専門学校)
松江 要(九州大学)
加葉田 雄太朗(長崎大学)

主催機関:九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所
E-mail:imikyoten@jimu.kyushu-u.ac.jp
https://joint.imi.kyushu-u.ac.jp/post-6250/

Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

Joint Research Center for Advanced and Fundamental Mathematics-for-Industry
文部科学大臣認定「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」
九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数 III
(Geometry and Algebra in Material Science III)

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
ハイブリッド 研究会 (Zoom ＆九州大学 IMI オーディトリアム (ウエスト 1 号館 D 棟 4 階 413 号室))
(2022 年 9 月 8 日 (木) – 10 日 (土))

1 Program

9 月 8 日 (木)

12:50-12:55	オープニング	
12:55-13:55	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
14:05-15:05	鈴木俊洋（崇城大学）	数学の現象学と専門知論
15:05-15:25	休憩	
15:25-16:25	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
16:35-17:45	増子貴子（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
	高橋卓大（京セラ（株））	

9 月 9 日 (金)

9:40-10:40	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
10:50-11:50	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
12:00-13:00	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
13:00-14:20	昼休憩	
14:20-15:20	中原幹夫（近畿大学）	Polyacetylene: Past and Present
15:20-15:35	休憩	
15:35-16:35	平久夫 （北海道教育大学)	曲面量子系の多様なナノ物性
16:45-17:45	尾上順（名古屋大学）	1 次元凹凸曲面構造を有するフラーレンポリマーの新奇な物理と化学

9 月 10 日 (土)

9:30-10:30	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
10:40-11:40	五十嵐一（北海道大学）	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
11:50-12:50	比留間真悟（京都大学）	均質化における連分数表示の活用
12:50-14:10	昼休憩	
14:10-15:10	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
15:20-15:50	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
16:00-16:30	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
16:40-17:10	中川淳一 (東京大学)	ＦＭＳＰ社会数理実践研究 (東大数理): 結晶の配位数列は準多項式型
17:10-17:15	クロージング	

参加にあたっては，下記の参加申込をお願いします．

URL：https://forms.gle/H3rA1D7EmHMGKQtC6

IMI Workshop I: Geometry and Algebra in Material Science III

Hybrid conference (Zoom & West W1-D-413 room in Kyushu University)
September 8 (Thu) – 10 (Sat), 2022

September 8 (Thu)

12:50-12:55	Opening	
13:05-13:55	Shigeki Matsutani (Kanazawa Univ.)	On mathematical modeling (reality and mathematics) in industrial research and development
14:05-15:05	Toshihiro Suzuki (Sojo Univ.)	Phenomenology of mathematics and the theory of expertise
15:05-15:25	Tea time	
15:25-16:25	Yusuke Noda (Okayama Pref. Univ.)	Case studies of informatics-aided nanoscale materials simulation
16:35-17:45	Takako Mashiko (Kyocera Corp.) Takuhiro Takahashi (Kyocera Corp.)	Applying mathematical analysis to material science in Kyocera

September 9 (Fri)

9:40-10:40	Yuto Ito (Electrical Manufacturer)	Interpretation of the hidden symmetry of hydrogen atoms using Clifford algebra
10:50-11:50	Shousuke Ohmori (Waseda Univ.)	General topological approach to geometric patterns of matters
12:00-13:00	Takahiro Shimada (Kyoto Univ.)	Topological multiferroics induced by local/quantum symmetry breaking via lattice/electron defects
13:00-14:20	Lunch	
14:20-15:20	Mikio Nakahara (Kinki Univ.)	Polyacetylene: past and present
15:20-15:35	Tea time	
15:35-16:35	Hisao Taira, (Hokkaido Univ. Educa.)	Various nanophysical properties of curved quantum systems
16:45-17:45	Jun Onoe (Nagoya Univ.)	Novel physicochemical properties of 1D periodic uneven structured C_{60} polymer

September 10 (Sat)

9:30-10:30	Karel Svadlenka（Kyoto Univ.）	Variational approach to modeling of elastoplastic deformation of structured materials
10:40-11:40	Hajime Igarashi (Hokkaido Univ.)	On homogenization of random media in static and quasi-static electromagnetic fields
11:50-12:50	Shingo Hiruma (Kyoto Univ.)	Application of continued fraction to homogenization method in numerical analysis of the electromagnetic fields
12:50-14:10	Lunch	
14:10-15:10	Noriyasu Iwamoto（Shinshu Univ.）	Controllable surfaces challenging from robotics
15:20-15:50	Ryuichi Tarumi（Osaka Univ.）	Theory of elasticity on Riemannian manifolds and its applications
16:00-16:30	Shunsuke Kobayashi（Osaka Univ.）	Continuum mechanics of crystals with dislocations: differential geometry and numerical analysis based on calculus of variations
16:40-17:10	Junichi Nakagawa (The Univ. of Tokyo)	Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP of the University of Tokyo : Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type
17:10-17:15	Closing	


IMI Workshop I
材料科学における代数と幾何II
２０２２年９月８日（木）－１０日（土）
９月８日 12:50開始







Table of contents

はじめに・・・

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）
Karel Svadlenka（Kyoto University）・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 229

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）
五十嵐 一，Hajime Igarashi（Hokkaido University）・・・・・・・・・・・・・・・ 245

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）
比留間 真悟，Shingo Hiruma（Kyoto University）・・・・・・・・・・・・・・・・ 271

ロボティクスから挑戦する制御できる曲面
（Controllable surfaces challenging from robotics）
岩本 憲泰，Noriyasu Iwamoto（Shinshu University）・・・・・・・・・・・・・・・ 293

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）
垂水 竜一，Ryuichi Tarumi（Osaka University）・・・・・・・・・・・・・・・・・ 319

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）
小林 舜典，Shunsuke Kobayashi（Osaka University）・・・・・・・・・・・・・・・ 335

FMSP 社会数理実践研究（東大数理）：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 of the University of Tokyo: Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type）
中川 淳一，Junichi Nakagawa（The University of Tokyo）・・・・・・・・・・・・ 345

On mathematical modeling in industrial research and development

Shigeki MATSUTANI
Kanazawa University, Japan

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 thirty-three 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.

第1節. イントロダクション

昨年，福井県の生涯学習センターから依頼を受け，「ようこそ数学の世界へ　～日常のなかの数学を眺めてみれば～」という題目で，生活の中での数学についてシニア向けの講演を行いました．



その中で，「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？」という問いを出しました．本日お話をする内容のすべてがここにあると思っています．

つまり，この問題はとても難しいということです．ぶどう1粒といっても，ルビーロマンという1粒 500円もするぶどう1粒の場合と1房数百円のぶどう1粒の場合とでは答えは異なりますし，どのような立場で「くだもの」を認識するのかによっても答えは変わってきます．



日常において「数を数える」対象は，りんごもあれば，みかんもあります．一房のぶどうということも，一粒のぶどうということもあります．日常での対象は個性がありますが，数学の世界には個性がありません．「1は1」であり，その起源は問いません．そのために四則演算ができるようになるのです．

「日常生活における対象を如何に数学の世界の対象に対応させるか？」「数学の世界で考察した結果を如何に日常の世界の現象として解釈するか？」 この2つがこの講演の主題です．この観点で見直せば，日常において「数を数える」ということでさえ，とても困難な状況を生みます．何を同一とみるか，何を整数に対応させるのか，分数と対応させるのか，そういったことは，自明なようでとても難しいのです．福井県での講演の例題は，その典型的なものなのです．



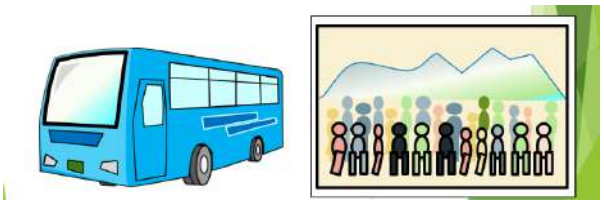
この講演ではその対応を，「数学は言葉である」とする立場に立って，対象と言葉との関係として捉えようと考えています．言語学では，言葉を状況から独立させて考察してはいけないという考え方があります．大野晋は「日本語の文法を考える」[1]の中で，当時，流行した「象は鼻が長い」「象は鼻は長い」といった「が」と「は」の論争で，

> 「これから取り扱いたいと思うハとガの使い方については，最近いろいろな考えが表明されている．しかし，事実の文脈の中で，話し手が事柄をどう扱い，相手に向かって，どう表現しているかに十分の注意を払いながら，その使い方を吟味しないと，適切な理解ができないことが多い．その点がよく理解されていないように思われる．」

と述べています．

言葉としての数学も同じものだと私は理解しています．文脈や使われる用途と共に考えなければ見誤るということです．

例えば，無限大は，加法の不動点として定義されることがあります．∞＋1＝∞です．例えば，999 円のショートケーキと，998 円のチョコレートケーキを購入する際には，1 円の違いを考慮に入れません．大きな数に比較して小さな量は些末なものとして無視するという事象です．これは∞＋1＝∞の日常的な対応物です．物理学で検討されているマルチスケール解析などの考え方は正にこれに立脚して構築されています．しかし，この「大きな数」というものは状況に強く依存します．例えば，30名のバスの団体旅行では，休憩の後に必ず点呼をしますが，4名ならしません．30名くらいの見知らぬ人が集まると，30と29との差は理解しづらいのです．つまり，大きな数（加法の不動点としての無限大の対応物）は日常の生活の中に散在しており，その値自体は，状況によって大きく異なるのです．



もちろん，現代数学における無限大には，ヒルベルトの無限ホテルに象徴されるように，無限大のパラドックススが存在します．この事実は古来から知られていました．少なくともガリレイは，n と n^2 の個数を考えた際に，無限を許すと不可思議なことが起きることに気づいていました[2]．つまり，∞＋1＝∞の類似物は日常に存在するものの，厳密な無限大は日常には存在しないということを示しています．

この立場で考えると，デデキントが述べたような実数すら「現実の世界に存在すること」は極めて疑わしいことに気づきます．「位相幾何が教える厳密な意味の連続性は，人間の思考の中以外の日常の中にも実際に存在するのか」という問いは，極めて非自明な問となるのです．上述のくだものの数え方の問題での「数の対比」や，「数学の無限大と日常の中の無限大の類似物の対比」と，「実数，実ユークリッド空間，実リーマン多様体などと，物理学者が考えるそれぞれの対象物との対比」とには，本質的な違いはない事にも気づきます．

それらを分かつものは，「用途」にすぎません．それぞれは，対象とする現象を数学の言葉に変換し，変換した数学的推論により得られたものを現実に戻す過程の事例と認識できます．しかし，常に伝わらないのが，言語の生来の本質です．伝わらないことを前提にして，厳密科学であるという数学の特性を上手く活用することで，「言葉としての数学」の役割がより効果的に果たせる方法をこの講演で論じたいと思っています．

この研究会でこのような話題に取り上げようと考えたのは，21世紀は数学の時代と言われながら，数学の効果的な活用方法や活用の可能性に関する議論が，数学者のコミュニティでも社会全体でも十分なされていないからです．企業（製造業）の現場において言葉としての数学を活用してきた

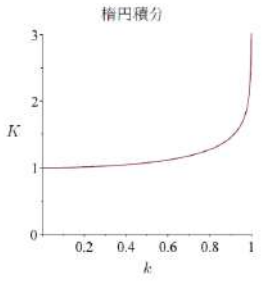
経験を基に，「言葉としての数学」の視点から，活用方法や活用の可能性について幾つかの事実と提案を提示したいと思います．また，これらは極めて哲学的な課題を含むので，哲学の専門家の現在の知見を傾聴することが数学者や数学活用者にとってとても重要であると考えました．それがこの企画を考えた主たる理由でもあります．

第2節．言葉としての数学の歴史

ガリレイは「偽金鑑識官」[3] で「哲学（自然） は，〈中略〉巨大な書（すなわち，宇宙）のなかに，書かれているのです．〈中略〉その書は数学の言語で書かれており」と述べました．これは，神の書である聖書は預言者を通して人間の言葉で書かれているが，同じ神が創った宇宙という書は「数学で書かれている」と理解すべきです．

この節では，議論の前提・準備として，科学の歴史の概略を振り返ってみたいと思います[4,5]．中世以降の西洋において数学や科学はキリスト教と共に発展してきたことが，近年知られるようになりました． ガリレイの研究の動機には「神が創った聖書は人間の言葉で書かれており，それを教会で研究するがごとく，神が創った自然が『どのようになっているのか？』を知ることが，自分の役目である」という強い宗教心があったようです．ガリレイと教会とが対立したというのは，ガリレイの研究のある側面に過ぎなかったのです．

例えば，ガリレイの単振り子の等時律の発見は，少なくとも逸話では，自分の脈と教会のランプの振り子の周期との比較によってなされたと言われています．ランプの揺れを非線形振り子と考えると，等時律は周期である第一種楕円積分 K のそのモデュライパラメータ k の依存性が k=0 の近傍でほぼ無視できるという数理的な事実に相当します．揺れが大きければ（より厳密には微小の揺れでも揺れが有限であれば），等時律は物理的に間違った法則です．それを発見したのです．

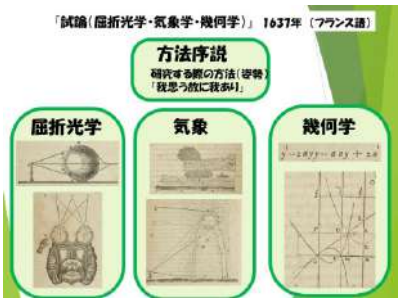


横軸 k に対する K の振る舞いの図

哲学者，エトムント・フッサールは「ヨーロッパ諸学の危機と超越論的現象学」[9]において「ガリレオは，発見する天才であると同時に隠蔽する天才であるのだ」と述べました．その一例がこの等時律の発見と解釈することができます．神の存在抜きにして（つまり神が創った自然は美しくあるという思い込みなくして），楕円積分の立場では間違いである周期の一定性は発見できません．ガリレイが，誤りを真実として位置付けたことは，正に真実の隠蔽です．もちろん，この等時律が振り子時計という技術を生んだわけですから，真実の隠蔽の全てが非難されるべきことと思いませんが，フッサールの指摘を言い当てているよい例であると考えています．

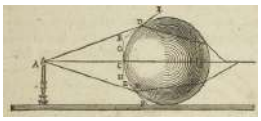
フッサールの科学者としての経歴はライプツィヒ大学で天文を学んだことから始まります．その際に，手に入れた光学メーカーのツァイス社の望遠鏡を丹念に分析し，望遠鏡の欠陥（収差）を発見

し，ツァイス社にその欠陥について手紙で指摘しました．アッベ収差で知られる光学研究者アッベがその手紙を見てフッサールにツァイス社への就職を勧める程，その分析は秀逸なものでありました．それがフッサールの技術と数学の原体験であったと考えられます．「技術の背景に数学がある」という事実を，その時心に刻んだと思われます．光学は，解像度という微小単位を常に意識する学問であり，ガウス光学に象徴される数学応用が成功した学問です．現代においても 19 世紀中盤においても，現実と数学の対比を明示的に理解するには，光学という学問は最適の装置です．その後，1878年にベルリン大学に移り，ワイエルシュトラスの指導の下アーベル関数論や変分原理を研究をしました．光学における最小原理の根源的理解もその目的の一つと推察されます．ベルリン大学ではクロネッカーの素朴な数の理解とワイエルシュトラスの厳密性への指向とを学びました．その後に数学から哲学へ研究題材を移しました[10]．アーベル関数を学びワェイルシュトラスの下で楕円関数の応用を学んだであろうフッサールにとっては，例えば，ガリレイの等時律の発見など，非常に乱暴な「数学化」に見えたのではないかと想像されます．



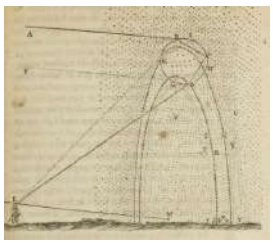
この数学（理念の世界）と現実の対応を精緻に考察したのはデカルトでした．フッサールもデカルトを様々な観点から研究しました．ここでは，数学を活用したことで現実の理解を明示的に行った最初の数学者，自然科学者としてデカルトを取り上げます．

1637 年に，デカルトは『みずからの理性を正しく導き，もろもろの学問において真理を探究するための方法についての序説およびこの方法の試論（屈折光学・気象学・幾何学）』[11]を著しました．この書は以下のように4部構成です．





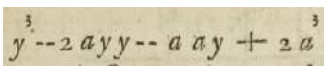
1. 方法序説：「我思う故に我あり」が書かれた，新たな研究をする際の方法（姿勢）はどのようにあるべきかを問う章
2. 屈折光学：光の屈折の様子を幾何学的に考察し，人間の眼球も，光の屈折によって像を認識していることなどを示した章
   （デカルトが目指していたものは，「人」と「獣」との違いの解明であったとも言われています．アムステルダムでデカルトは多数の動物の解剖を行ったようです．そして，少なくとも物理的な機能に関しては，それらに大きな差異がないことを，幾何と代数（算術）によって解き明かしました．つまり，人間の機能が物理法則に従っていることを示したのです[12]．これにより機械論的な自然観と，「人間の人間たる由縁としての霊魂と機械」との二元論に落ちついて行きました．）

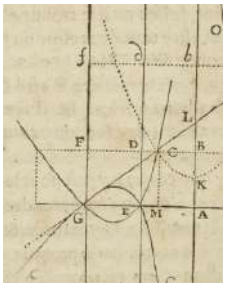


3. 気象学：雲のでき方などの考察の後，「空中の雨粒」と「屈折光学」とにより，「虹がどのよう

にできるのか」の原理を数学的に示した章
（天空の事象が，地上や人体の物理法則と同じ法則に従っていることを示し，これがニュートンに引き継がれ，万有引力の発見の発端となったといわれています．焦線という特異点の原典でもあります．）

4. 幾何学：$y^3-2ay^2-a^2y+2a^3$ とする代数式による代数の考察（そのことにより体積＋面積＋長さの和を許容）とグラフによる形状の表現を示した章





（先の3章分の印刷の期間に，この幾何学部が書かれたと言われています．デカルトは 1628 年には「人々に知られている学問のうちで，算術と幾何学だけがすべての虚偽と不確実さから免れている」として，この代数（算術）と幾何学による解析手法を活用することを生涯の方針としました．そして，先の屈折光学や虹の焦線などを考察したのです[12]．）



このように数学により屈折光学（単色）を記述し，人間の眼球の光学系が物体の光学系と同一であること，天空の現象（虹の生成）が焦線という数学的事象を含みながらも地上の現象と同一であることを解き明かしました．つまり，現実の世界を数学（幾何と代数）の言葉で表現し，数学の世界で考察し，その知見を現実の世界に還元すると従来判らなかったこと（神の姿）が判るのです [1]．デカルトは「このような考えが私を算術と幾何学の個別研究から数学一般への探究へと導いたので，私はまず，**数学という語**の正確な意味と，なぜすでに述べたふたつの学問だけでなく，音楽，光学，機械学なども数学の一部門とみなされているかを追求した……」と述べています．

ガリレイもそうでしたが，デカルトの考察も神の存在を示すためのものでした．近年の研究によると，ニュートンも原理的な聖書主義者であり，聖書に書かれた年代を「科学的」に推定するために様々な自然科学の研究を行ったと言われています[6]．また，オイラーやベルヌーイが活躍したバーゼルはカルヴァン主義のカルヴァンが逃れた地でした．オイラーの父親はカルヴァン主義の牧師でした．



彼らにあるものは，「自然がどうなっているのか？」という視点でした．これは「なぜモノが落ちるのか？」に答えようとしたアリストテレスの視点とは質的

[1] キリスト教の下での自然の研究の目的は，自然の中に刻まれた「神の姿を知ること」が最大の目的でした．これは画期的な方法でした．

に異なります.

今日，科学の起源をギリシャ哲学に求める傾向がありますし，科学とは「なぜ」が重要であるというような記述も多く流布されています．しかし，現代物理が記述しているものは，「なぜ」ではなく常に「どうなっているか」であり，それを利用して構築されたのが18世紀以降，特に産業革命以降の西洋の技術です．

そして，その「どうなっているか？」を記述するのが「数学」です．神が創った自然をなぞることが神を知ることであり，その言葉は数学でした．その事を明示的かつ直接的述べたのはデカルトでした[12]．ダ・ヴィンチくらいまでは遡れる考え方のように思われます．デカルトもダ・ヴィンチも解剖に明け暮れ，どうなっているかを追求しました．これはデカルトの姿勢を批判したニュートンなどにも見受けられる傾向です．

彼らは，神が創った自然をなぞることが神を知ることであり，自然を学ぶ使命と考えました．自然現象を数学で記す研究方法が「神と同じようにすれば何かを生み出せる」という近代の科学技術の考え方と極めてマッチしました．特にプロテスタンティズムやピューリタニズムとマッチし，これらのアプローチは技術の発展に寄与しました[7]．産業革命から始まる科学技術の発展にはこのような背景があったということが最近知られるようになっています [4-7,12]．

しかし，ヤーウエを一神教とする宗教が，ユダヤ教，キリスト教，イスラム教を生み，更に細かい宗派を生み，ときにいがみ合ったように，これらの科学の流れも分化，細分化されました．ガリレイ，ニュートンらの流れは自然科学として受け継がれ，アカデミアの研究に繋がりました．企業での研究スタイルを述べるために，まずはそうしたアカデミックの研究スタイルについて言及したいと思います．

第3節．アカデミックでの研究スタイル

トーマス・クーンが「科学革命の構造」[13]で示したパラダイムの考え方をここで紹介します．パラダイムとは，アカデミックに存在する多数の専門家集団の慣習や用語，暗黙の知識や常識などを指すものです[2]．

クーンは，科学の研究において個々の研究は専門分野に細かく分割され，それぞれ異なるパラダイムを築くことを示しました．野家啓一は「パラダイムとは何か」[14]において次のような文章でパラダイムとは何かということを示しました．

> 「現実の科学者は基本用語の抽象的な定義から出発するのではなく，典型的な問題の解法を学ぶことによって具体的に仕事を進める．「力」や「化合物」といった用語の意味は明示的

[2] 私は，異なる複数の分野の研究テーマを渡り歩き，複数の分野の研究会に出席し，複数の異なる分野の雑誌で論文を出版する等の経験をしました．この経験から見ると，クーンのパラダイム論は，非常に的を射たものであると感じますし，実質的です．このような経験は，企業研究者と素人研究者として長らく同時に行ったことによって得られました．アカデミックから遠いところに居たのでアカデミックを俯瞰できたと思っています．特に，無名のまま分野の査読付き論文誌に論文を出すと，各分野の常識（パラダイム）の違いは身に沁みました．

に定義されるわけではなく，そうした「標準例(standard examples)」を通じて文脈的に理解されるのである．この標準例は「教科書」を通じていわば天下り式に与えられるのであり，科学者たちはそれを手本に具体的問題に取り組む．そこにあるのは「合意」や「一致」ではなく，むしろ「訓練」である」

専門家集団が伝承により形成されて行く姿が見て取れます．各専門家集団の言葉や慣習がパラダイムになりますが，そのパラダイムが各専門家集団で伝承され，専門家集団の構成員を増やし，集団を形成するのです．

このような伝承の効果は，定義や定理によって議論が進む数学においても真であると考えます．

例えば，各パラダイムにおいて「小さい」とする量は全く異なります．宇宙物理では光年単位で長さを測りますが，天気予報などの気象学では数 100m から数 km が最小単位だったりします．多くの化学プラントの流体力学では数 10 μ m から数 mm は無視すべき長さとなることもあるでしょうし，量子化学では数サブ nm が重要かもしれません．

つまり，同じ数学の微分方程式を取り扱う場合でも，分野によって対応する距離の単位などが全く異なるわけです．それぞれの分野において微小な距離などを含む常識が定まっています．各分野の研究者は，研究者になった後，実数直線の連続性に関わる「デデキントの切断」などということは気にしません．暗黙の了解の下で，各専門に適した「連続」という概念をそれぞれ定め，各自の専門分野の発展に邁進します．

パラダイム論の観点では，「各専門家集団は，お互いに交わらず，個々の慣習に沿って，専門家集団内の固有の重要課題を探求するもの」であり，大学の専門分野は住み分けながら個々の科学の発展のために寄与するとするのがクーンが示した科学の姿です．

・各分野での「重要課題(puzzle)」の解決を目指す．
・すべての課題が解決した際，パラダイムシフトが起きる
・パラダイム間の交流は不可能である(通約不可能性)

ことが示されます．

第4節．企業での研究スタイル

アカデミックでの研究スタイルを記したので，次に企業の研究スタイルについて触れることにします[15]．



企業とアカデミックの研究の関係については，技術の上流であるアカデミックで開発・構成されたものが技術の下流である企業に渡って社会に還元されるという描像(イメージ)が，社会，特にアカデミックで今もまだ強く根付いているように思います．確かに，19世紀の化学材料，20世紀中盤の半導体デバイスなどはそうでしたし，現在でも，重工産業や製薬などでは，このビジョンが有効であるものがあります．重工産業に関わる分野では，企業のある部署が大学の研究室と密に連携し，アカデミックから生産への流れを，関連学会を企業と大学で共同で運営しながら決定

しているというものが存在していたのも確かです.

しかし, 技術が複合化しシステム化されてきた2000年以降に, このビジョンで技術全体を捉え語ることはほとんど意味がありません. 例えば, GAFA と呼ばれる一大勢力がこのビジョンに従って構築されたかと言えば答えは No です.

カシミール演算子, カシミール効果で有名な理論物理学者(数理物理学者)ヘンドリック・カシミール(1909-2000)は, 第二次大戦前後からフィリップス研究所に勤務し所長, 取締役まで務めた人物です. カシミールは, アカデミックと企業の在り方に関して, このような上流と下流という捉え方をして政策的に産業を育成しようとしてもうまく行かないだろうと述べています;

> 「技術や科学の進歩は資本主義企業によって決定されるべきというモデルについて: このやり方では, 大学教授の人事に影響を与え, ある種の仕事に補助金を出し, 産業界が規定する方向に特化しなければ, 科学者は仕事を見つけるのが難しいことを明らかにすることによって, 資本主義は科学プログラムをしっかり管理します. 一見, ある程度の「自由」な研究を認めているように見えても, それは「抑圧的寛容」政策の一部となります. その擬似的な自由は, 精神的な自由を強化するどころか, むしろ弱める働きをします.
>
> このモデルは, いわゆる進歩的な学生たちがほとんどパラノイア的な熱意をもって提唱した時期もありましたが, (中略)現実には近くありません. (中略)量子力学が半導体の理論につながり, エレクトロニクスとデータ処理のまったく新しい時代を切り開くことになるとは, 物理学者も技術者も, ましてや産業界のリーダーたちも, 誰も予見していなかったのです. 」[16]

これらの言及は, どちらかと言えば科学者向けに述べられたものですが, 文中の「現実に近くない」という指摘が重要であると考えています.



企業での研究スタイルを端的に表しているのは, NIKKEI BP 総研 2018 年に掲載されたノーベル賞受賞者の田中耕一氏の記事[17]の言葉です. キーワードは「異分野融合」です. そこから引用します.

> 「(機器の開発では)化学, 物理, 電気・電子, ソフトウエア, 数学など様々な学問の知見を集めて作ります. つまり, こうした機器を開発する現場では, 日常的に異分野融合が行われています. 」
>
> 「異分野融合の素地となる場は, 大学より企業に, 企業の中でもものづくりの現場でより生まれやすいと考えています. そして, それぞれの専門性を持つ人たちによる, チームワークが大切になります. チームワークという面では, 日本は欧米よりも本来ずっと得意なのだと思っています. 」
>
> 「日本の現場が独創性の発揮を阻害している. そんな先入観を抱いて, 闇雲に欧米の手法をまねようとしている動きがあるように感じます. 私は, 欧米とは違う日本独自の独創性を生み出す手法があってよいと考えています. 」
>
> 「異分野連携の場は, 忖度し合う仲良しクラブではありません. 異なる観点を持つ人同士が

真剣に向き合うことで，一人ひとりの知恵や常識の限界を突破できる場だと思います．」



何らかの達成目標があって，異分野の技術者が集まり協力してそれを達成するという企業活動の特徴は，大学にはないものです．私もまたキヤノンにおいて異分野融合によって製品開発を支えてきました．

このよう異分野融合の「成功例」として象徴的に挙げられるのがマンハッタン計画です．とても皮肉なことです．微分方程式を解くアナログコンピュータである微分解析機の研究をした数理工学者でもあったヴァニーヴァー・ブッシュはMITの工学部の部長を務めた後，戦時下，戦後の科学・技術政策の主導的な役割を果たしました．異分野の研究者を集めてプロジェクトを成功させるというようなビジョンは彼の考えの下で示されたのです．米国はこのようなプロジェクトの成功例をプロトタイプとして保持しているのです．

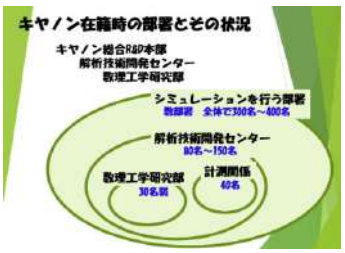
ここで，企業の研究スタイルとアカデミックでの研究スタイルを対比しておきたいと思います[15]．

	アカデミック	企業（製造業）
目的	各専門分野の発展のため（パラダイムのため）	プロジェクトのため（製品・サービス開発）
指向	シーズ指向	ターゲット指向
機密性	成果はオープン	成果は機密
メンバ	自由意志で加入可	限定メンバ
評価	内部（ピアレヴュウ）	外部（経営層／市場）
評価基準	分野の発展に価値があるか（論文引用件数・論文インパクトファクター）	経済価値
分野間の融合	・論文になりにくい ⇔ピアレヴィウできない ⇔評価されない	・自由 ・多くの分野に跨る（評価軸が異なる）
研究の時間スケール	・近年：1～2年で結果を出す（プロジェクトは続かない）	・数ヶ月で何かを提示（実は長期的取組可）

	大学での研究	企業のR&D
専門性	尖がった専門知識	鈍だが多様
深耕性	深い（ただし，論文で評価されないものを長期に研究できない）	多くは浅い（論文にはならないが根源的で深いものがある）
テーマ	自由選択（但し，実際は，諸々の偶然に支配されている）	業務としてgiven（但し，どのように仕立てるかには（実力に依存して）自由度あり）
論文	執筆が仕事（論文として評価されないと評価されない・外部資金が得られない）	多くは機密・「論文としては面白くない」
人材育成	短期間で教育	終身雇用を前提とした長期にわたる教育が可能かつ必須

第5節．企業での数学活用の在り方

私がキヤノン（株）に在籍した当時の組織は図のようなものでした． 私の属していたのは数理工学研究部という部署で，最後はその部長を務めました．





この部署の役割は，

「最先端のデバイスや材料開発において，市販の汎用シミュレーションツールで計算するだけでは判らないことがあるので，デバイス・材料の物理現象を数学を使って表現することで，物理現象を予測し機能の発現を制御できるようにする．」

というものでした．

私の部のメンバーは，各自が1～3つ程度のプロジェクトに属し，そこで数理の専門家として，プロジェクトの推進の役割を果たしていました．

ここで大事なことは，数学はプロジェクトの推進に非常に寄与するが，「数学が単独で成果を出すことは有り得ない」ということです．これが技術の言葉としての数学ということでもあります[18]．

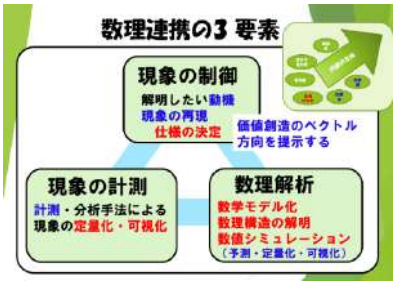


5.1 数理連携の3要素

このような数学と現実を結びつける数学モデル化というプロセスを未知の対象に対して実施する際には，「数学」だけでは何もできないことを認識することが肝要です．「数学は役に立つ」として，数学のみで何かを成すことを目指す動きも見受けられますが，ITにおいても，情報工学や情報科学と結びついて初めて価値と言われるものが具現化されるのです．数学と他分野との連携を意識することが肝要です．

ITも含め，現実世界への数学活用において注意すべき点は，数学の枠内には微小量という基準すら存在しないことです．現実との対応を考えるためには，その数学の中に何等かの基準を取り込んでいく仕組みが必要となります．

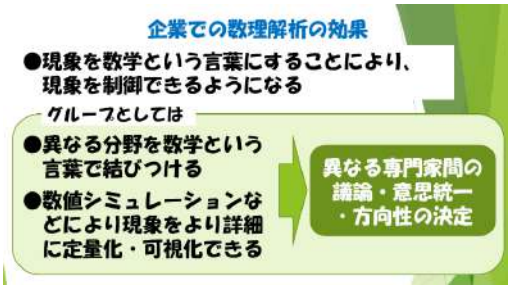
キヤノンに私が在籍していた当時，数学活用の場，すなわち数理科学の専門家が参加するプロジェクトでは，必ず，3つの「部門（研究者）」が異分野融合の一部として関わっていました．



1つめの部門（研究者）は，動機や目的（数学活用の用途）を持った部門（研究者）です．「知りたいこと」「したいこと」などの動機と，現象の制御など「どこまでのことをどう行いたいか」の基準を持っています．また，多くの場合，実施された際の現象を実際に再現する能力も持っています．

2つめの部門（研究者）は，数理解析を行う部門（研究者）です．必要となる数学的知識と，数学的知識により現象をモデル化する能力と，モデル化したものを，数値シミュレーションなどにより数値化する能力とを持っています．モデル化だけをするだけではなく，それにより「どのようになるか？」を可視化，グラフ化，数値化する能力が必須です．

3つめの部門(研究者)は，数学と現実を比較できる技能，つまり，現象の計測を行う技能を持った部門(あるいは研究者)です．数学化されたものが現実に起きるか等，モデル化した現象を検討する能力を持っています．数学モデル化したものの模擬的な実験をしたり，様々な境界条件や物性値のパラメーターの取得等もできる必要もあります．



これら3つの部門が協力した数理連携によって，はじめて「言葉としての数学」が意味を持ちます．3つの部門は，異分野融合の一部を構成します．1つめの部門も異分野融合のプロジェクトの専門家の一つですが，プロジェクトのベクトル方向の方向を提示するという中心的な役割を示します．

こうした数理連携を行うことにより，現象を数学という言葉を通して制御できるようになることが期待されます．つまり，

1. 異なる分野を数学という言葉で結びつけることが可能となります．
2. 数値シミュレーションなどにより現象をより詳細に定量化・可視化し，グループ内で共有できることが可能となります．(共通言語である数学の言葉で記述することで，数学的考察ができ，その結果を現実に反映させることができるようになります．)
3. これらにより異なる専門家間の議論，意思統一，方向性の決定が可能となり，目的とした現象が制御できるようになります．

このような異分野融合が成功していることは驚くべきことです．クーンが不可能であるとしたパラダイム間の通約不可能性が，企業の異分野融合の中ではこのように解消されているのです．通約不可能性が解消される理由は，科学論では議論されない価値判断のためです．この価値判断は，アカデミックとは異なるもので，企業の研究スタイルでの特徴の一つです．プロジェクトが成功されることで評価されますから，プロジェクトの成功はメンバーにとっての内的な動機付けになります．彼らは率先して通訳不可能性を克服しようと努力をします．

これは，ギボンズの提唱したモード論[20]とも異なる理由です．このような企業の異分野融合の現場では，大学での専門性は否定されません．専門を持ちながら，異分野との融合を許容する研究者が望まれます．2つ以上の専門を持つ研究者は望まれますが，アカデミックの持つピア・レヴュウによる先鋭化のフルイの洗礼を避けた研究者が望まれているわけではありません．専門性があいまいな研究者は，異分野融合では専門が生かせないがために戦力とならないのです[3]．

---

[3] ドイツでは2つ以上の専門を持つことが推奨されていますが，日本では専門性を否定した大学教育が推奨されていたりしているように思えます．それは，技術が高度化し高度な専門性が要求されている現状を打開するものとは思えません．

そして，このような異分野融合の場で異分野融合の場の共通言語と成り得るものが「技術の言葉としての数学」ということです．

異分野融合のプロジェクトにおける数理技術者の研究の動機付けの一つは，様々な分野の数学や理論を学ぶ機会があるということです．多くの課題は課題ごとに求められる数学や理論が異なりますので，それを何とかして学び，理解し，ツールとして使ってアウトプットを出さなければならないのです．その過程は非常に刺激的です．2つ目としては，アカデミック等のメインストリームでは誰も扱ってこなかったような課題を数学化できることです．既によく知られた問題で解決できるものもあれば，そうでないものもあります．そうでないものの多くは，誰も扱っていなかった問題であったりします．この新たな現象の数学化では，深い自然観と直結することが多いため，数理技術者の内的な強い動機付けとなります．誰も言葉にしていなかった現象を数学で記述することの喜びです．小ぶりであれ，自分の理論体系を構築できるのです[4]．恐らくは数学でも一分野に留まることは稀であろうと思っています．これらの多くは機密の問題もありますし，審査できる審査員が不在のために，論文になることはまずありません．しかしながら，アカデミックでは決して得られない深みです．論文による評価がないために，企業で行われる数学は低級なものであるという誤解が，アカデミック，特に後で述べるように人的流動性が少ない日本のアカデミックに強くあるのはとても残念なことだと思っています．

5.2 産業現場で，対象を数学で表現するとは？

技術の言葉としての数学の特徴は，ターゲット指向であることです．

まず，行いたいことがあり，それを上手く機能させるために数学があります．「表現したいものに対応して手段を選択する」ことが最大の特徴であると言えます．





例えば，乾いた空を背景とするボストンの街並みを表現したいときに，それはペン画や水彩画がよいのか，油絵のようなペインティング系がよいのかという検討が必要です．

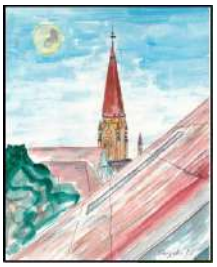
近代的な建物と，古いドイツの建物との場合で表現方法は変更してよいものだと考えます．表現したいもの，対象から受ける印象，どの部分を強調したいか等によって，その表現方法を選択するべきものと考えます．





[4] そのような問題は数年に一度程度出会うかどうという非日常的な問題かもしれませんが，数学的な課題を企業の現場で取り扱っていると，必ず出会うように私は思っています．

何を表現したいのか，また，何の目的のために，それを表現するのか？用途や文脈の中でそれらの手法は選択されるべきなのです．



富士山を表現するなら，ましてやそれを海外の研究者に共有するのなら，日本画的なものである方がよいかもしれません．

洋画家は洋画しか書きませんし，日本画家は日本画しか書きませんが，そのように，手法やスタイルが先天的に定まった洋画家や日本画家が描くものとは，上記の状況は大きく異なっているのです．

手法を選ぶ前に，表現したい対象に着目して，それに応じて手法を定めるのです．手法やスタイルに拘っていては，対象の本質を抉ることはできません．このような考え方は，広告などの企業の現場にあるもので伝統的画壇や古典的な美術教育にはない考え方です． 広告の例であれば，日本画風に仕上げたい場合は，日本画家に発注すればよいのです[5]．表現したい手法を持った専門家を選択する力があり，そのような専門性を持ったプロが存在すれば，この問題は解決します．

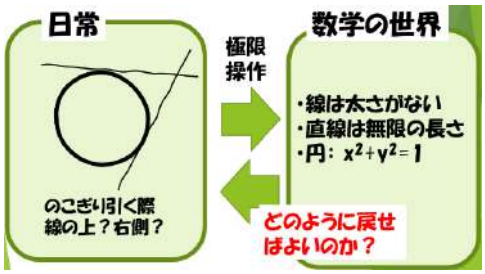
技術においても同じですし，技術に関わる数学でも同じです．大学の尖った専門知識を持った専門家を適切に選択し発注する力があれば，企業ですべてを自前でやる必要はありません．他方，例えば，「応用数学」というある時点で応用に寄与したと認定された数学分野を行っていても，それが常に現場の問題に適用するかどうかも判りません．

日本画画壇の中では日本画を， 洋画画壇の中では洋画を研究・表現することが求められるように，アカデミックの中では数学の各分野の分科会の中で認知され評価されるよう各分野の研究を行うことが求められます．それはクーンのパラダイムの構造由縁のことです．しかし，技術が発展した近年，数学のある分野のみで，技術の課題を表現できるわけではありません．解析学も重要ですが，代数や幾何が重要になることもあります．逆に幾何的な課題に対しても解析手法が適切な方法であったりもします．何が最も適切な手法であるかは，課題を持った者，つまり企業の研究者のみが理解できるのです．そのことは第7節で説明をします．

[5] 美術大学などでは既にこのような考え方に対応しているように思われます．

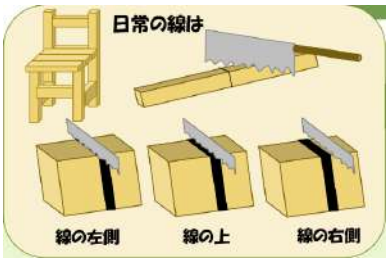
第 6 節. 技術の言葉としての数学の特徴(フラクタルの例)

晩年, フッサールは先に述べた「ヨーロッパ諸学の危機と超越論的現象学」[9]の補遺として「幾何学の起源」を記しました. この「幾何学の起源」において, 幾何学が測量技術者の言葉の極限操作として得られたことを示しました. 鈴木俊洋は「数学の現象学」[19]においてワィエルシュトラスやカントール, デデキントとの関係を論じながらフッサールの数学的思考を検討し, その中で,「技術からの数学」に関して詳細に考察しています.



ここでは, 産業現場での言葉としての数学の立場で「技術からの数学」について考えてみます. フッサールが述べるように「幾何学が測量技術者の言葉の極限操作として得られた」とすると, それを再度日常生活の理解に援用するためには極限操作というものをどのように考えればよいのか？という問いについての考察です.

例えば, 日常における線には太さがあり, 線の右側にノコギリの刃を入れるか, 中央か, 左側かで椅子がうまくできたりできなかったりします. 太さがないものに太さの概念を付随させることには困難があります.

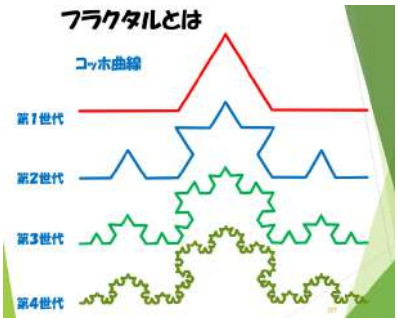


これは一つの専門領域(一つのパラダイム)で研究者人生を終えるアカデミックでは出会わない困難さかもしれません. 例えば, 1nm が小さいと考える分野では, 1nm 以下は無視する事を暗黙の前提としますし, 1km が小さいという学問分野では, 常に, その事実は暗黙に定まっています. 従って, 何かの領域を区別する際の境界線はその微小量の太さを前提とします.

他方, 異分野融合の場では, 異なる常識(パラダイム)を持つ者が集まり, あるベクトル方向のプロジェクトを実施するために, 明示的に差異を理解しなければなりません. これは所謂 $\varepsilon-\delta$ 法の ε (あるいは δ)を用途に応じて定め, 共有することに対応します. 実際, 田口玄一が提唱し, 海外ではタグチ・メソッドと知られている品質工学[21]においては, この $\varepsilon-\delta$ 法が工学的な言葉で述べられ, 生産の現場で活用されています.

この数学の世界の結果を現実に反映する際の考え方を, フラクタルと海岸線, 加えてそこを通る道路を例に考察します[22].

数学においては微小という概念がありません．どこから以下が小さいという視点がないのです．フッサールがは「幾何学は測量技術者の極限操作」と述べましたが，極限操作をした言葉を現実の対象に適用するためには，この逆の操作をしなければなりません．そのことをフラクタル図形を例に考察します．



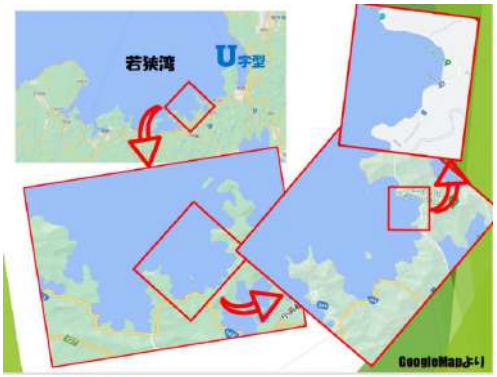
フラクタル図形の典型的な例として，コッホ曲線というものがあります．第一世代という基本系を縮小して第一世代の各辺に埋め込ませる（置き換える）ことで，第二世代を構成し，その第二世代の各辺を基本系を更に縮小したものと置き換える，という操作を無限回繰り返して得られる図形（∞世代のもの）です．その長さは，各世代，1世代を増すごとに，4/3 倍となるために，∞世代では∞の長さを持つことが知られています．

このフラクタルを発見したのはマンデルブローですが，彼は海岸線の弧長の研究によりこの幾何学的な概念に到達しました[23]．従って，リアス式海岸はこのフラクタル図形の典型例として挙げられます．フラクタル図形の一般の定義は容易ではありませんが，無限大の性質を活用して，ある部分が全体と相似であるということで定義されます．所謂入れ子状の幾何です．

現代数学の特徴ですが，数学には微小という概念が内在しません．正確にいうと「何か」をもって微小と評価すると際の，その「何か」という概念がないのです．そのため，入れ子状の幾何を定義する際にも，どのスケールでも（どんなに拡大しても）同じ形状のパターンの繰り返しとして定義されます．フラクタル図形であるコッホ曲線も極限操作により構成されるのです．

ところで，福井県の若狭湾は入れ子状の図形の特徴を持っています．その海岸線はフラクタル図形によく似ています．

フラクタル図形はコッホ曲線のように，その弧長は無限になることが知られています．ならば，この海岸線に道路を通すと「その長さは無限になるのか？」という素朴な疑問がわきます．



答えは当然 No です．ところがその様子は，フラクタル図形から現実の海岸線がズレるものより遥かに恣意的に有限であることが判ります．つまり，高速道路と，国道，県道，一般道で，その道路の長さが異なるのです．

Google マップで眺めてみると，高速道路は，その曲率半径が細かくならないように，海岸線から随分離れたところを通っていることが判ります．他方国道は，それよりも海岸線側を通りながらも，やはり海岸線から距離がある凸凹に入り込まないように建造されています．県道はそれより海岸線側を細かく通るのです．遊歩道は更に細かい

ところを通るということも調査することなく推測できます.

これは，丁度，コッホ曲線の世代に相当するものです．第1世代を高速道路に割り当てみると，国道は第二世代くらいに，県道はもう少し細かい第三世代に相当するように建造されていることが判ります.



自明なことですが，高速道路を通ると目的地に早く着くのは，高速で移動できるからだけではなく，距離が国道より短いからです．高速道路で渋滞にあっても，無暗に高速道路に降りてはいけないという理由は，このコッホ曲線の考察から判ります.

ここから学ぶべきは，極限操作された数学を現実の建造物に適用する際には，用途に応じて，経験的にそこに微小量を導入しているということです．高速道路の速度と操作性により高速道路の平均曲率半径は自然と定まり，その半径は国道のものより長いことも自明に判ります．そして，この平均曲率半径を微小量として，それを基に，フラクタル的なリアス式海岸の形状を緩やかなものに置き換え，道路の形状は定まっているのです．それぞれの用途に応じて，微小量を定め解像度を決めその形状が定まるということです．（もちろん，地形の凹凸も考慮しなければなりませんが，ここでは省略しました．）

この道路に関する検討は，フッサールが考えた「極限操作」の逆の操作を，適当な微小量を導入することで，我々は日常においてすでに行っているということを意味しています．更に，その微小量はそれぞれの用途（仕様）により，恣意的に定まっており，それは数学の枠組みの中には存在していません．微小量が数学の枠外から定まるのです．このことはとても重要です.

前述した数学連携の三部門において仕様を決める部門が必須であったのは，この事実に対応します．小さければ小さい程よいとか，厳密であれば厳密である程よいという発想は，日本人にあり勝ちですが，詳細はここでは省きますが，オーバースペックは様々な意味で弊害を生みます.

同様に，極限操作によって得られた数学を現実の問題に適用するには，常に逆の操作を意識する必要があります．その際，用意される基準は，日常側（技術の適用の際の要望や仕様を提示する側）にある「用途」や状況の中で定まります．そういうことを認識すべきなのです.

「数学と技術」を論じる際に，数学が言葉であるという事を加味する必要があります．大野晋が「しかし，事実の文脈の中で，話し手が事柄をどう扱い，相手に向かって，どう表現しているかに十分の注意を払いながら，その使い方を吟味しないと，適切な理解ができないことが多い．」と述べたように，数学も文脈の中で考えなければなりません．つまり，数学内の無矛盾性など言葉の内部での厳密性は重要ではありますが，「生活世界」（あるいは技術）の言葉として数学を使う段になった場合には，その用途で何が適切なのかを「数学外」の基準で吟味しなければなりません．何が微小量

なのか，何を無視するのか（同一視するのか）を，用途・目的に応じて判断し，数学的に得られたことを解釈し，現実に適用するのです．

第 7 節．企業における技術の言葉としての数学の特徴 （事例紹介）

企業の研究はターゲット指向であるという話をしました．そのために，どのような数学を使うべきかは先天的に定まっていないことは先に強調した通りです．幾何的な対象だからと言って，幾何学がよいとは限りません．解析的な対象だからと言って，解析学のみでよいとも限りません．

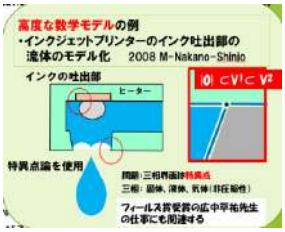
デカルトが虹の研究で精密な焦線を議論できたのは，代数的な取り扱いを幾何学に導入したからです．フッサールは「代数的計算においては，幾何学的意味はおのずから斥けられる」と述べていますが，代数計算により，より抽象的に幾何学が取り扱えるようになったのです．幾何を幾何のまま取り扱っていては，焦線を数学的に取り扱うことは困難でした．デカルトは幾何と代数（算術）を融合しその課題に取り組むことで，困難を乗り越えられたのです．

対象と用途に適した言葉を導入し記述するという行為は，デカルト，オイラー，ガウスらに共通する秀でた特徴であり，当然，これらは見習うべきです．以下，それに関する例を挙げます．

7．1 インクジェットプリンターと特異点論

インクジェットプリンターのヘッドの物理的なシミュレーションを行う際の数学モデル化に関する例です[24, 25]．これは，特異点論を使いました[26]．液体・気体・固体の三相界面を如何にモデル化するという話題です． 実質的には，2000 年頃に検討した話です．幾何学的な話題ですが，フェーズ場モデルという解析幾何を活用してモデル化をしました．更に別の物理モデル（物理的な機構や性質）も付与するため，幾何学的にはロバストなモデルであるフェーズ場モデルを活用しました．その際，特異点論の考え方を導入してエネルギーの評価を行ったのです．このような分野を跨ぐ研究は大学ではできないものかもしれません．特異点論は，幾何学でも少し手の込んだ研究者が手掛けるものですし，他方，フェーズ場理論などは，数値計算屋が主に研究しています．





[25]の特許を執筆した 2002 年の時点では特異点論に関して言及していません．当時はまだ特異点論の言葉を数学的に明確に操れるようにはなっていませんでした．しかし，基本的な部分はつかめていました．既に，電子放出素子の研究において特異点論の現象に出会っていました．電子放出素子のような連続的なパラメーター付きの光線の

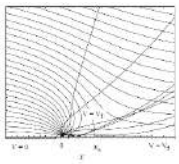


Figure 2: Electric field in the xz-plane and electron trajectories calculated by Monte-Carlo ray tracing method

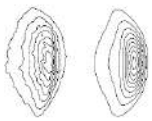
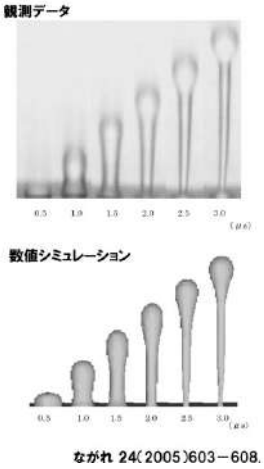


Figure 3: Beam spot pattern : calculation(right) and experiment(left) when $V_0=6$(kV), $V_1=15$(V) and $H=1$(mm)

軌道においては焦線という現象が必ず起きます. そうした焦線という特異点論で議論される現象に, その軌道解析を通して出会っていたのです[27]. そのトポロジカルな性質などの特異点論を数理物理枠内で勉強していたので, 数理物理の枠内では特異な幾何学は十二分に理解していました. しかし, 三相界面の数学モデル化を, 数学的にきっちりと言及するためには, 数学の言葉を探し出し修得をするための時間が必要でした.



その後, 私の個人的研究テーマであるワィエルシュトラスが手掛けたアーベル関数論を通し, ヤコビ多様体内の特異部分代数多様体のフィルトレーションを取り扱うために, 特異点論の手法を純粋数学の枠組みで勉強し, 論文を出版できるレベルになりました[28]. それらの知見を活用することで, 数学的表現[26]ができました. つまり, 2000年に行っていたことを[26]で数学的に認識できるようになるのに10年を要しました. ここで使った手法は特異点論でも極めて初等的なものでした. が, それなしではこの手法の正当性は完全に表現することはできなかったと考えています. 数学的に記述できるようになると, 理論の適用限界なども自ずから評価できるようにできますし, 専門家と議論することも可能となりました.

また, このモデル化により素子が設計できるようになりました. 実際, キヤノンではこの手法を活用して, インクジェットプリンターが開発されていました[29]. 現在も同様の手法を使っているものと思われます.

7.3 ナノ材料とパーコレーション



次に, レーザービームプリンターや複写機に関わる例について紹介します. ある機能性材料の物性を, ナノ微粒子を活用して制御しようとするものです. その設計指針を数学を活用して提示し, より高性能なものを構成しようとしました[30].

ここでも, 擬等角写像, フラクタル, パーコレーション, 数値計算など, 様々な手法を活用しました. 実は2005年頃に, 取り組んでいた電子放出素子の素子形成の解析において, この課題に出会っていました. 一部数値計算をベースとしていますが, 2015年の時点でのベストアンサーを提出するまで, 10年という期間を要しました. この10年の間, ほぼ3ヵ月に一度, それぞれ時期に微妙に異なる課題(テーマ)を解決するための指針を提示し続けていました. つまり, 主に数値計算とその結果の理論解析によって, 小さな結果は常に出し続けていたのです. 対象を数学の問題としてモデル化し, それを数学の世界で考察し, どのようにすれば目指している機能を実現するかという指針を出し, 個々の課題の解決に貢献しました. 幾つかは極めて大きな効



果を上がました.

しかし, この問題の核心に挑むには時間が掛かりました. 所謂統計物理でのパーコレーション理論の理解だけでは, 目的とする課題解決に辿り着けないことを, ある時点(早い時期)に見抜きました. 1970年から1990年代に, 極めて性能の悪い計算機での数値計算といわゆる理論解析で得られた結果は, 対象とする課題には何の役にもたちませんでした. 伝統的な数値計算の数学モデル(素直に微粒子サイズより小さなメッシュサイズに分割するモデル)と, 2000年代の計算機で基礎から計算し直した大規模数値計算の結果は, 実験グループが行った実験データとつじつまのあうものでした. 他方, 数多ある材料系の関連する論文の幾つかは, 対象とする課題に関しては, 数値計算結果や実験データ結果と矛盾するものもありました. 性能の悪い計算機で計算できるようモデル化をした古い計算結果やそれに基づいた理論の多くは何の役にも立ちませんでした.

そこで厳密に示せることのみを示すことができる現代数学を活用した定式化が必要と考えました. 特に, 測度論に立脚した厳密な確率論が必須と考え, 確率論から学ぶことを選択しました. 数年間かけて確率論を勉強し, 点過程の初歩も理解できるようになりました.



重要なことは, 素子が微細化していく中で, いわゆる熱力学的極限のような微粒子数Nの無限大の極限は, 現場の問題としては幾分重要でなくなっているということです. 統計物理でも, 確率論でも, 通常は微粒子数の無限大の極限を取り, そのユニバーサリティや均質化を議論してきました. しかし, 技術の現場では, そのような概念自体が破綻していることに気づいたのです. このような現象を明確に記述する概念や言葉がありませんでした.

そのような背景の下で, 目の前にある数理的対象を如何に言葉にするかというのがその当時の課題でした. その課題を解決するためには, 厳密性のある数学の言葉(数学での確率論や点過程, 擬等角写像など)で何が言えて, 何が言えないかを明らかにすることが必要でした. そのために, 現代数学の枠組みでの確率論を研究室の若い同僚と勉強し始めたのでした. 使えそうな言葉として, 点過程(広くは確率論), Γ収束なども勉強しました.

そのようにしてできた論文が[30]です. 論文化できたとは言え, まだ, その本質を概念として明確に提示できたわけではありません.

何を示せば現象の本質を表現できたと言えるのか？ この問題は, 確率論的に与えられた事象を境界とする境界値問題です. 確率論と解析の両方に関わるものです. 結果はある種の幾何学的な特徴を示しているので, 広い意味の幾何学とも関わります.

確率論では確率的現象を取り扱いますが, その上の解析学に言及することは極めて稀です. 他方, 解析学でも, 確率的な事象を境界値とする問題を取り扱うことはほぼありません. 解析学と確率論に跨った問題は取り残されています. 所謂, 数学の中のパラダイムの通約不可能性です. しかし数学を厳密には使わずに構成された統計物理の枠内では, どこまでが真でどこからが微妙な事実であるかさえ判りにくくなるのです. そこで, 厳密性のある数学で表現することにしました.

このような問題の背景には，現実の技術において，従来中心的課題とされた均質化やユニバーサリティという概念が，素子の微小化などの変化により，ある状況では中心的役割を果たさない場合が生じていることがあります．このように，時代の変化とは無関係に推進される数学的興味として提出される数学的考察は，数学としての重要性は失いませんが，技術の方向とはマッチしなくなるのは仕方ありません．構造上の問題です．

フォン・ノイマンは「The Mathematician」[31]の中で

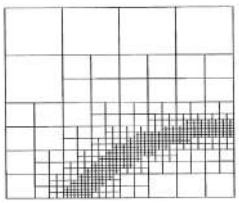
> 「数学の学問が経験的な源から遠く離れると，あるいはさらに，「現実」から来るアイデアに間接的に触発されただけの第二世代，第三世代であれば，非常に重大な危険に悩まされることになる．ますます純粋に美学的になり，ますます純粋に「芸術のための芸術」になってしまうのである．このことは，その分野が，より経験的なつながりの深い，相関する主題に囲まれていたり，その学問が，特別に発達した趣味を持つ人々の影響下にある場合には，悪いことではありません．しかし，対象が最も抵抗の少ない線に沿って発展し，源流から遠く離れた流れが多数の取るに足らない枝に分離し，学問が細部と複雑さの無秩序な塊になってしまうという重大な危険があるのだ．つまり，経験的な源流から大きく離れたところ，あるいは「抽象的」な近親交配が行われた後では，数学のテーマは退化の危機に瀕しているのである．最初のうちは古典的なスタイルが多いが，バロック的なスタイルになる兆しが見えたら，危険信号である．例を挙げて，バロックや超高度バロックへの具体的な進化をたどるのは簡単だが，これもまた専門的になりすぎてしまう．」

と警告をしていました．深刻か軽微かの判断は分かれると思いますが，その兆候の一つであることは疑う余地はありません．[30]のような現象を数学的にとらえ，表現する言葉（概念）を構築するということは今後の課題であると考えます．

7.4 様々な情報科学的な発明

数値計算を実施するために，ホモロジー代数を活用したメッシュの生成アルゴリズム[32]や，圏論を活用したクラス設計手法[33]など，様々な発見を行いました．





第 8 節. 企業における技術の言葉としての数学の特徴と今後の課題

「企業における技術の言葉としての数学」の特徴を少しまとめておきます．

1. 対象や用途によって，手法は選択される（手法ありきでは NG）
2. 数学の中でも様々な数学を融合して活用するのが基本である
3. 数学の論文誌に掲載されにくい研究テーマが多い（レフリーできる人がいない）

4. 数学はそれだけで何か役に立つものではない（プロジェクトの一つの要素にすぎない）
5. 用途や仕様に応じて，微小量などの数学での基準を，数学外の判断で決定して，数学を適用してゆく．（数学と現実の乖離を認識する）
6. 数学と現実との乖離を認識しながら，対象を数学化し，数学的な枠組みで考察を行った後に，その結果により現実を解釈・制御する操作により，技術の進歩に効果的に貢献できる．（雛形はデカルトの幾何の代数化による幾何光学の研究）

この特徴を考えると，数学活用は，低迷していると言われている日本の製造業の救世主となり得ると考えています．そこで，「如何に現場で数学を活用できるようにするか？」について考察をしたいと思います．

数学活用を現場で実現するためには，

・現場の課題をよく理解し
・言葉としての数学を，用途に応じて，操れることができ，
・必要に応じて数学を学び適用できる

人材を育成することに尽きると考えています．

数学を言葉として捉えると，言葉を使って扱う内容を持っていなければなりません．例えば，外国語を学習しても，話す機会や話したい内容がなければ習った語学を使うことはありません．まず，表したい対象や話したい対象を持つことが重要です．その上で，語学と同様に言葉を，数学を操る能力を磨くべきなのです．

それは，「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？」という問いに対して，状況に応じて現実的に対応ができる人材でもあります．

欧米に比較して，人的交流が少ない日本では，企業とアカデミックの両方を知る人材が極めて少ないのが現状です．社会的リーダーや企業の管理職の中にもあまり居ません．そのため，上記の要請に対応した人材育成は困難を抱えていると考えています．その事を，数学と企業の対比より，もう少し広い，高等教育と企業の対比として考察します．

8.1 アカデミックと企業との人的交流の現状 （欧米との比較）

日本と欧米との比較を行い，今，何をしなければならないかを述べたいと思います．

ここまでの考察に従えば，パラダイムやスタイルに縛られたアカデミックは必ずしも万能ではありません．だからと言って，専門性やパラダイムを否定したモノをアカデミックに求めることも正解でないことも指摘しました．

ここで言う専門性とは，異分野融合の場での専門性です．分科会レベルの違いは抜きにして，物理学会，化学学会，数学会というような学会に属していれば，それぞれを物理，化学，数学の専門家であるという程度の専門性です．異分野融合においては，各分野の専門教育を通しそれぞれ

の専門性を伝授された研究者が集うのです.

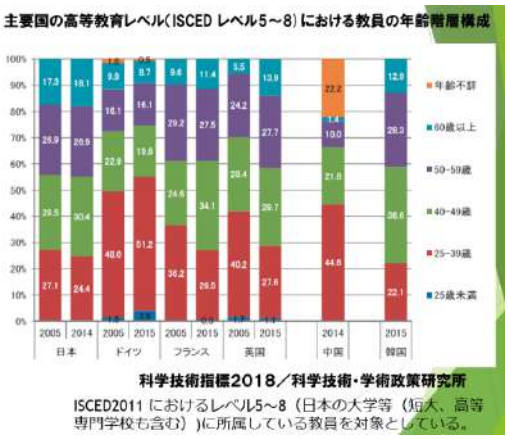
その上で, 各研究者は各分野の最小分科会程度の細かく尖った専門的知識を持ち合わせているということも大切です. そういう少し広いレベルの専門性の代表者と, 自分の尖った専門知識を取り扱う専門家, 二つの顔を持ち合わせる研究者が必要なのです. そのような異なる分野の研究者が寄り集まり, 忖度せずに, 課題を解決するのが, 異分野融合というものです.

数学者も, 数学全般のぼんやりとした知見と, 解析分野や幾何分野の中のより狭い尖った専門性に基づく知見の両者を持つことは必須です.

後者の尖った専門性の知見は重要ですが, それが異分野融合の場での課題とマッチするとは必ずしも限りません. それでも尖った専門的知見を持った経験は必要なのです. 尖った研究の経験を通して, 解析方法やデータのハンドリング, 論文・書籍などの過去のデータや知見の取り扱い方, 式の評価の仕方などの手法を会得できるのです. それらの手法は, 多くの類似の専門研究と共通点を持ちます. 逆に言えば, 各専門でのピア・レヴュウによる論文審査の洗礼も受けていない研究者は高度な専門性を持った専門家と言えないと考えています.

尖った研究方法を獲得した研究者の能力が社会へ還元することが必要ですが, 人的流動性が低い日本では欧米に比較して大きな困難を抱えています. ここでは, そのことをまず俯瞰します[34].

科学技術指標2018／科学技術・学術政策研究所発行の「主要国の高等教育レベル(ISCEDレベル 5〜8)における教員の年齢階層構成」[35]を眺めましょう. ここからは, 2005 年と 2015 年の高等教育レベル教育機関に属する教員の各年齢層がどのように変化しているかを読み取ることができます. 重要なことは, 25〜39 歳の年齢層が, 10 年後 40〜49 歳の枠にシフトしているか否かです. 年齢区間の違いを考慮に入れてですが, シフトしていれば, 彼らは高等教育レベルの教育機関にそのまま残っていることを意味します. もちろん, 多少のメンバーの入れ替わりはあるとは思いますが, 日本はその通りになっています. ほとんど 2015 年の年齢構成は 10 年前に決まっているのです.



他方, ドイツ, 英国では日本と異なり, そうはなっていません[6]. つまり, 外に出て行っているということです. 外とは海外と見ることもできますが, ある程度は民間企業を含む社会と考えるのが妥当です. これは, これらの国において, 25〜39 歳の年齢層の大学教員がその後, 民間企業など社会に出て行け

[6] フランスも日本と異なる傾向を持っています.

るシステムや文化があることを物語っています.

高等教育レベルの教育機関の価値を理解した者が，民間に出て行ける社会であるということは，民間から高等教育レベルの教育機関に戻ってくる割合もある程度期待できます．戻ることができれば，企業の研究スタイルを知った者が，アカデミックにも少数であってもある程度存在することを意味します．そのうちの幾割かは社会的なリーダーとして，社会をリードできるということです．

8.2 アカデミックと企業との人的交流の日本の現状と解決の糸口

ここで，日本の現状に目を向けると更に，日本の危機が鮮明となります．日本では，現在でも，産官学のプロジェクトの場で，企業経験が全くない研究者（企業との共同研究をやったことがある，とか，インターンシップに参加したことがある程度）が，企業側の代弁者を自任して，発言する場面が往々に見られます．企業経験者が皆無の会議においては，「アカデミックは上流で企業は下流」という合意を前提に議論が進みます．[17]に述べられたような異分野融合の発想を見ることはまずありません．企業研究の内情は想像の域を越えませんので，その背景に企業課題などはアカデミックの手にかかれば片手間に解決できるだろうとする偏見がないとはいえません．

科学技術について政策的議論をする見識者の中に，論文にならない研究の社会的価値を認識したリーダーが不在なことは最大の問題です．国別の科学技術を問う場面で，論文のサイテーション力の差異を持ち出した議論などは，「論文にならない技術＝低級」という誤った理解です．官民の高低や企業の技術者は大学より低級とする意識の露呈にすぎません．人的交流が少ない中で，ミスリードをしているとしか思えない状況を自ら認識できる人材すら欠如しているのです．

実際に現在，技術に関わっている研究者の意見を傾聴するという姿を，大学ではあまり見かけません．企業の意見の傾聴といえば，アカデミックに近い企業研究所の若手の意見など，企業の現場を知っているとは思えない人材の意見や，経営層の意見を聞くことに留まっており，企業の本当の現場をアカデミック側は知ろうとはしているようには思われません．

また，「大学は企業の問題を解決してあげる」という立場で，産官学連携がなされていたりします．上記の考察から判るように，余程，企業側の技術者が課題の本質と対応する大学の専門性を認識し，大学の専門分野にマッチした問題として切り取りでもしないと，十分な成果は得られません．が，多くの場合，課題を解決した研究者がより称賛され勝ちです．共同研究をすることで「大学の研究レベルの方が上位である」という誤解が生まれるのもこのためです．上記の考察，特に絵画の高校に関する例において，よい表現方法の作品を得るためには，企業側が課題を認識し，専門家に発注することになります．その作品がよい表現方法になるか否かは，発注時点でどの専門家を選ぶかによって方向性が定まっているということです．技術の場合も同様です．企業側の技術者が大学の専門性をよく認識し，大学の専門分野にマッチした問題を上手く切り取ることが必須です．つまり，大学との共同研究の結果は大きな歯車の中の一つのピースにすぎません．つまり，問題を解くことは称賛されるべきことですが，切り取った側の能力の方をより称賛すべきなのです．問題として切り取る方が遥かに困難です．共同研究は，共同作業ですが，大学側からは本の一部のことしか見えてきません．それにも関わらず，共同研究をたくさん行ったから「企業の研究スタイルをよく判って

いる」というような言動がアカデミックでは平然と流布されています．この言動の不正確さを理解できる研究者がアカデミックに極めて少ないということも残念なことではあり，ミスリードを誘っています．

もちろん，「優秀な学生は大学に残り，そうでないものは企業に行けばよい」というような雰囲気が，



大学だけではなく，企業にも社会にも多く残っていることも事実です．そのため，社会，特に，企業の経営層は，「大学が優秀な人材の宝庫である」という過剰な思い込みを持ちがちです．個別の技術課題よりも，一般論を問われる際に，大学を万能な特効薬だと考え，その社会利用として大学にとって不得意な事を求めていたりするように思われます．これが，更に悪循環を生んでいるように見受けられます．

また，企業側も，高度な教育を受けた研究者の受け入れをためらっていたりするようにも思われます．企業の研究の価値や企業の研究スタイル（文化）のアカデミックとの差異を，長らくアカデミックでのみ研究を受けた研究者に，平たく説くことのできる管理者（管理職，サブリーダーレベルの者）が存在しなければ，高度な教育を受けた研究者の受け入れは難しいのです．労働寿命より，技術革新による技術プロジェクトの寿命が短い時代に，細かい専門性に拘泥されては困るというのが本音だったりします．ある分野の専門家として採用された研究者が5年後に異なる専門分野の業務を行うということが企業ではよくあることです．特に人的流動性の低い日本では，業務内容の変更に寛容であるか否かは，人材登用の際の重要な項目となります．

異分野融合を前提として，求められている専門性はもう少し領域の広いものであるので，微妙な専門性の違いは重要ではありません．また，個々の細かい専門性というよりも，企業では（異分野融合の場では），課題解決能力に長けた者が求められていることの方が多いのです．これは，パラダイムの考え方とは相容れません．ましてそこで長く過ごした研究者にとっては「専門性よりも課題解決能力が重要と言われる」と屈辱的な要請のように思えるかもしれません．

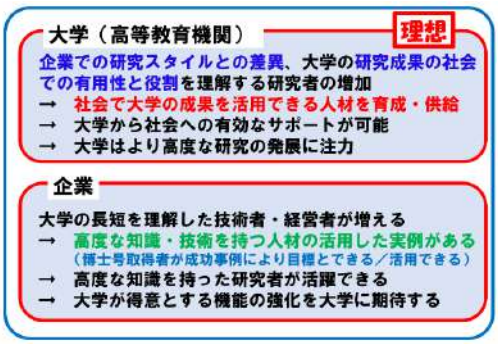
その事実を，高度な教育を受けた研究者に，平たく粘り強く説くことは必須と思われます．その上で，異分野融合の場で得られる科学や技術の知見は，決してアカデミックで得られるものに見劣りしないばかりか，遥かに凌駕するものであることを説くことです．（複合的ではありますが，少なくとも，平均的な博士1年程度が書く論文などより遥かに高度なものです．[7]） 欧米のように，すでに，高度

[7] もう少し明確に言えば，企業のキーテクノロジーに関しては，アカデミックと企業の技術力の差は歴然

な教育を受けた研究者の成功例が企業内に存在するならばそれを一つのモデルとして，どう対処するかが判ります．日本の社会ではそのような文化が醸成さているとは言えません．日本では企業研究者に対する尊厳がなく，「大学に残れなかった者」というネガティブな考え方もある状況です．その中で，管理者（管理職，サブリーダーレベルの者）が説明し，研究者が違和感を持つならば，納得するまでその問題をケース・バイ・ケースで解決するしかないのです．管理者の力量が試されている状況です．この認識を社会全体が持つべきと考えています．

間違っても，博士の数を倍増すれば，なんとかなるというような主張は，私は誤りだと考えています．

しかし，何はともあれ，理想状態として，アカデミックが，企業との研究スタイルの差異や大学の役割をもう少し適切に理解できるようになり，また，企業が，高度な教育を受けた技術者を受け入れられるようになると，好循環が生まれることも明らかだと思います．



2000年以降の日本の低成長の原因の一つが，そうした人材の活用がうまくいっていないことにあることは明白です．技術が高度化している中で，高度な研究手法を学んでいない研究者や専門性の低い研究者だけでは，既にそうなっている欧米や韓国と比較して，新たな技術が生まれる確率は低くなることは自明なことだからです．また，**異分野融合のやり方を知らない人達が集まっても**，欧米の真似や**新規を主張できる論文**等は生み出せても，**進歩性のある技術**が生まれる確率は低いことも事実と思われます．少なくとも，企業での異なる分野の専門家が集まって異分野融合を経て技術を作り上げて行く姿を知る者にとっては，当然なことのように感じます．

従って，広くは高等教育を受けた研究者が企業で活躍できるようにすること，本話題に関してみれば，数学をできる研究者が企業で活躍できるようにすることが必須です．

そのためには，企業は，高等教育を受けた研究者や数学を操れる研究者を採用し，各現場で活躍できるようにするべきです．しかし，その状況に移行するためには，文化の違いを理解し，彼ら／彼女達をマネージメントできる管理者（管理職，サブリーダーなどの）人材が必須なのです．

としています．論文になっているものと，あまりに重要なので論文にしない技術（それは他社の製品などを通しても推測される技術ですが）との差は比較になりません．このような事実は公になることは稀なので公知されることはありませんが，日本の社会，特に日本のアカデミアでは，各企業にはそのような技術が存在し，技術が成立していることを認知できていないように思われます．例えば，米国の HP(旧 Hewlett-Packard)社などのプリンティングの技術は非常に高く，緻密で学術的にも深い知見や理論に裏付けられていると思われますが，論文になったものは見たことがありません．

高度な技術を理解し，マネージメントできる管理者人材は，少なくとも若いときに技術者・研究者であったはずです．そのことを考えると，まずは，大学と企業の違いや，数学と現場の課題の両方を理解した人材を，企業側にまず育成するのが第一のステップです．（企業研究者は，少なくとも学生として大学文化に触れた者ですので，幾分かは大学の文化も理解しているはずです．）人的交流がない中では，言葉によってその違いを理解し，乗り越えるしかないと考えています[8]．オブラートに包んだようなものではなく，企業とアカデミックの優劣ではなく，その特徴やシステムの差異・長短を俯瞰的に理解し，うまく利用することが求められています．そのような事実を理解した技術者，研究者の幾割かは10年後，両者を知る管理者・経営者となるのです．急いでいるからこそ，遠回りが必要です．

8.3 産業での数学活用人材の育成に向けて

再度，話題を数学活用に戻しますが，数学活用が企業においてうまく機能するためには，企業の課題を理解している（特に中堅に以上の）研究者の数学の学びのサポートすることが重要です．

・現場の課題を既によく理解した人材で，

・言葉としての数学を，用途に応じて，操れるポテンシャルを持ち，数学を学びたいと考えている人材に対して

数学を学ぶ機会を提供するのです．そのために私は[15, 21]を書きました．



コロナ禍のオンラインコミニュケーションの普及のお陰もあり，現在，SNS を通して，企業の研究者が独自にコミュニティを形成し，数学の学びを行っています．アカデミックに過度に頼らない自学の体制を自ら構築しています．これは 10～11 世紀の大学の成立に類似した状況です．これらの動きを社会がサポートすること事はとても大事だと思っています．個々の課題は現場の研究者しか判らないのですから，最前線の彼ら／彼女達の知識の向上を通して貢献することが最良であろうと考えます．（私もそのような会で話をさせて頂くことができました[36]．）

パラダイムや企業の壁を乗り越える社会的ムーブメントを後押しして行く時期に来ていると考えます．数学が万能の技術の言葉であることは普遍的な事実です．数学はこのようなムーブメントの中心的役割を果たすことが可能です．業種や分野に異存しない共通課題として取り上げることが可

[8] 高等教育を受けた研究者（本論では数学者）で既に，企業の現場に送り出された第一世代はよいプロトタイプがいないがために苦悩をしていることも予想されます．その場合も行っている業務の社会的価値や学術的深さを外部から何度も伝えることが重要と考えます．状況によっては，例えば，フォン・ノイマンが指摘した些末な新規な研究などよりも遥かに社会的価値があることなどを早期に自覚できるような状況を社会が作ることはとても大事だと考えています．

能だからです．そうして，数学的思考が，企業の現場で根付くようになると，進歩性も伴った新たな技術が生まれる確率が大きく向上するように考えます．

また，数学を通して，企業の技術者や研究者が，アカデミックの長短やアカデミックのシステムの企業のものとの違いを理解できれば，アカデミックを適切に利用できるようになると考えます．将来または現時点でも，両者を理解し適切に活用できる管理者・経営者にもなり得ます．尖った解析手法や数学的思考の有用性と，企業の現場の問題の両方を扱うことができるのであれば，若い数学者あるいは高度な教育を受けた研究者を管理・育成できる管理者になる可能性もあります．

そういう状況が実現して初めとなるかもしれませんが，現状でも，数学を活用し，現場の課題に対峙している技術者は多数，各企業に存在していると考えています．そこでは，前半に論じた数学の世界と日常の関係についての困難を常に感じていると予想されます．

その際，第6節で述べたように，技術と数学の両者を理解したフッサールの様々な考察は，現代においても有効であり，再評価されるべきものと認識しています．「数学と現実（生活世界）」との対応を基として，「数学と現実との乖離を認識しながら，数学化することにより数学的な枠組みで考察を行った後に，現実を理解すると，極めて有効な技術の進歩をもたらすことがある．」という事実は，哲学的な内容を含みます．

本講演では，限定的なところのみを記載しましたが，「数学を如何に社会で活用するのか」あるいは「数学と如何に人類は対峙するのか」は21世紀の大きなテーマであると考えています．例えば，ワィエルシュトラスが考察した解析接続をベースとしたと思われるフッサールの「多様体」による日常と数学の対応など，学ぶべきことは，まだまだたくさんあると考えます．これらは，単に「数学の産業応用」ということだけではなく，21世紀の科学観，自然観，技術観に変質を伴うかもしれないものでもあると考えています．

第9節　まとめ

企業における技術の言葉としての数学の特徴は以下の通り：

1　対象や用途によって，手法は選択される（手法ありきではNG）
2　数学の中でも様々な数学を融合して活用するのが基本である
3　数学の論文誌に掲載されにくい研究テーマが多い　（レフリーできる人がいない）
4　数学が独立で何か役に立つものではない　（プロジェクトの一つの要素にすぎない）
5　数学と現実との乖離を認識しながら，対象を数学化し，数学的な枠組みで考察を行った後に，その結果により現実を解釈・制御する操作により，技術の進歩に効果的に貢献する．

数学を言葉として操ることの（哲学的，人材的）困難さを，理解・認識し，それを克服することが緊急の課題として社会的に求められていると考えています．

【参考文献】

[1] 大野晋 日本語の文法を考える 岩波新書 1978
[2] A. D. アクゼル (青木薫訳)「無限」に魅入られた天才数学者たち ハヤカワ文庫 2015
[3] G. ガリレイ 偽金鑑識官 1624 年(「ガリレオ」責任編集豊田利幸) 世界の名著 21 中央公論新社 1973 年
[4] 岡崎勝世 科学 vs. キリスト教世界史の転換 講談社現代新書 2013 年
[5] 岡崎勝世 聖書 VS. 世界史 講談社現代新書 1996 年
[6] F・E マニュエル(竹本健訳)ニュートンの宗教 法政大学出版局 2007 年
[7] R. ホーイカース, D. グッドマン, G. ロバーツ,C. ロウレス, N. コーリ, 藤井清久訳 理性と信仰―科学革命とキリスト教 すぐ書房(2007)
[8] J. H. ブルック(田中靖夫訳) 科学と宗教 工作舎 2005
[9] E. フッサール(細谷恒夫, 木田元訳)ヨーロッパ諸学の危機と超越論的現象学 中央公論社 1995 年
[10] 田島 節夫 フッサール 講談社学術文庫 1996
[11] R. デカルト (三宅徳嘉, 原亨吉, 小池健男, 青木靖三, 水野和久, 赤木昭三訳)「デカルト著作集〈1〉」 白水社 2001『みずからの理性を正しく導き, もろもろの学問において真理を探究するための方法についての序説およびこの方法の試論(屈折光学・気象学・幾何学)』
[12] D. C. Goodman (大谷隆昶訳)デカルト哲学における神と自然 C.A.ラッセル編「OU 科学史 I-宇宙の秩序」創元社 1983
[13] T. クーン(中山茂訳) 科学革命の構造 みすず書房
1971 年
[14] 野家啓一 パラダイムとは何か クーンの科学史革命 (講談社学術文庫) 2008
[15] 松谷茂樹 ものづくりの数学のすすめ 技術革新をリードする現代数学活用法 現代数学社 2017
[16] H. Casimir, Haphazard Reality: Half a Century of Science, Harpercollins 1984
[17] 田中耕一「イノベーションに天才は不要, 異分野融合の場こそが重要」 NIKKEI BP 総研 2018 2018.08.30／2018.09.10
[18] 松谷茂樹 「数学 Libre: 産業数理の発展に向けて Ⅰ-Ⅴ」 現代数学 2019 年 5 月-9 月
[19] 鈴木俊洋 数学の現象学: 数学的直観を扱うために 生まれたフッサール現象学 法政大学出版局 2013 年
[20] M. ギボンズ(小林信一監訳) 現代社会と知の創造 ―モード論とは何か 丸善ライブラリー 1997
[21] 田口玄一 品質工学の数理 日本規格協会 1999
[22] 松谷茂樹 線型代数学周遊 現代数学社 2013
[23] B. Mandelbrot, How Long Is the Coast of Britain? Science 156,(1967), 636-638 .大野晋 日本語の文法を考える 岩波新書 1978
[24] 堤 大地, 新庄 克彦, 浅井 朗 界面形状解析方法, 界面形状解析装置, 制御プログラム, 及び媒体 特開 2003-287487
[25] 松谷茂樹 表面張力計算方法 特開 2006-30060
[26] S. Matsutani, K. Nakano, K. Shinjo, Surface tension of multi-phase flow with multiple junctions governed by the variational principle, Math. Phys. Analy. Geom. **14** (3) (2011)
237-278
[27] M. Okuda, S. Matsutani, A. Asai, A. Yamano, K. Hatanaka, T. Hara and T. Nakagiri, Electron trajectory analysis of surface conduction electron emitter displays(SEDs) (invited talk), SID 98 Digest, (1998) 185-188 (The Society for Information Display), Apr 1, 1998.
[28] S. Matsutani and E. Previato, Jacobi inversion on strata of the Jacobian of the Crs curve
yr = f(x) I, II, J. Math. Soc. Jpn. **60** (4) (2008) 1009-1044, **66** (2014) 647-691
[29] 浅井朗 バブルジェットプリンタの開発 ながれ 24(2005)603－608.
[30] Matsutani, Y. Shimosako, On homogenized conductivity and fractal structure in a high contrast continuum percolation model, Appl. Math. Modelling 39(2015) 7227 -7243.
[31] J. von Neumann wrote The Mathematician, Works of the Mind Vol. I no. 1 (University of Chicago Press, Chicago, 1947), 180-196
[32] S. Matsutani, Hierarchical lattice generating method, apparatus, and storage device storing a program thereof, US 6,995,766 B2, 2006.
[33] S. Matsutani and A. Asai, Finite element method library, finite element method program and storage medium, US 7,197,440 B2, 2007
[34] 松谷茂樹 「数学 Libre: 産業数理の発展に向けて Ⅰ-Ⅵ」 現代数学 2019 年 5 月号-10 月号
[35] 科学技術指標 2018 文部科学省 科学技術・学術政策研究所 科学技術・学術基盤調査研究室, 2018 年
[36] 平鍋健児 https://learning-data-science-from-youtube.connpass.com/event/240989/

Phenomenology of mathematics and the theory of expertise

Toshihiro SUZUKI

Sojo University, Japan

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.

数学の現象学と専門知論

Phenomenology of Mathematics and the Theory of Expertise

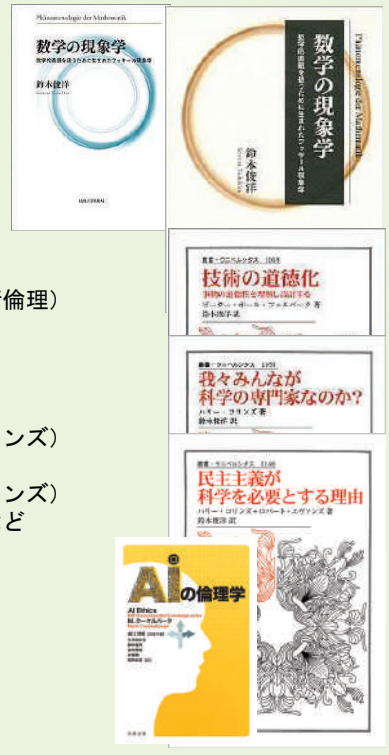
鈴木俊洋（崇城大学・熊本）
Toshihiro Suzuki（Sojo University）

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数III

2022.09.08.

九州大学 & zoom

自己紹介



鈴木俊洋（すずきとしひろ）

現職：崇城大学　総合教育センター　教授
出身：東京大学大学院総合文化研究科
専門：哲学（現象学）、科学技術論（技術哲学、技術倫理）
研究の焦点：　専門知、熟練知

著作：『数学の現象学』など
翻訳：『技術の道徳化』（フェルベーク）
　　『我々みんなが科学の専門家なのか？』（コリンズ）
　　『民主主義が科学を必要とする理由』
　　（コリンズ、エヴァンズ）
　　『AIの倫理学』（共訳、クーケルバーグ著）など

現在進行中のプロジェクト：
・日本の技術哲学：熟練工の認識論
・農業技術の哲学：スマート農業技術と熟練知
　キーワード：**解釈学的技術哲学**
　　技術の解釈学

目次

０　導入（現象学と数学）

１　数学的直観とは？

２　技術から発生した数学

３　専門知論の構想

４　科学論の「第三の波」
　　４．１　専門知の類型学
　　４．２　次の問題



3

０　導入（現象学と数学）

4

『数学の現象学』





数学　⇔　現象学

【明示的テーマ】
・現象学の発生を数学史の中で位置づける
・数学の哲学の問題を
　　現象学的枠組みで考察すると？

【隠れたテーマ】
・数学的直観とは何か？

5

フッサールと数学者たち

Weierstrass（1815-1897）
Dedekind（1831-1916）
Cantor（1845-1918）
Frege（1848-1925）
Husserl（1859-1938）
Hilbert（1862-1943）
Brouwer（1881-1966）
Gödel（1906-1978）

6

1　数学的直観とは？

7

数学的直観とは？

数学的直観：　数学的対象を把握すること

〔数学的対象：　数1, 2, 3,…, 直線, 平面, …〕

⇒「対象」とは何か？　⇒　「志向性」という意識の構造

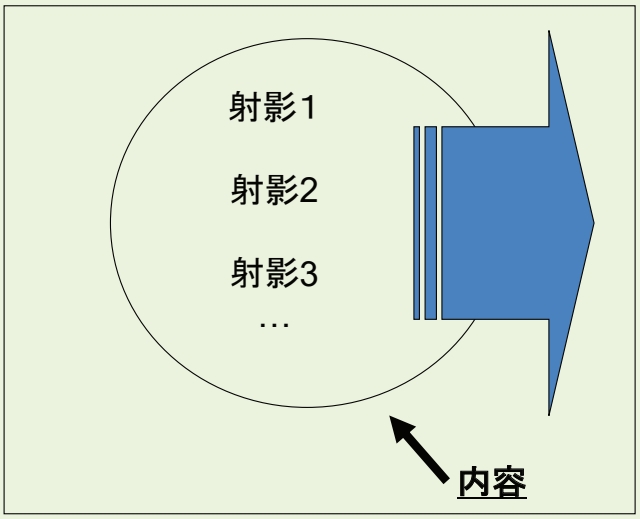
⇒「数学的対象の把握」と「知覚（視知覚）」を
類比的に考える
（共通する構造：「志向性」
≒　「対象」を「対象として」捉える意識の構造）

8

志向性（視覚）

作用： 視知覚（外的知覚）

主観



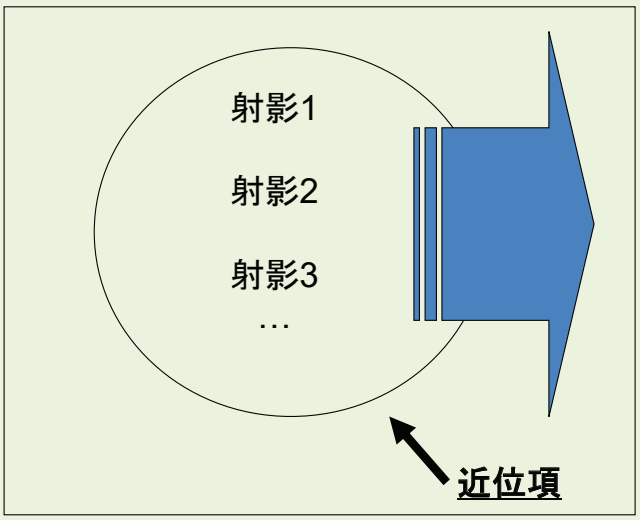
〔対象:
このリンゴ〕

9

志向性（視覚）

関係（視知覚）

主観

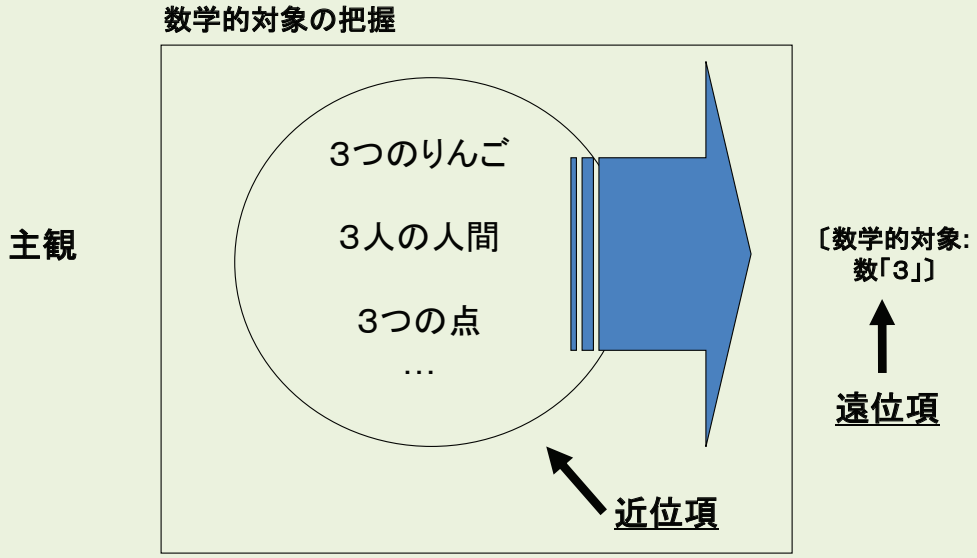


〔客観（対象）:
このりんご〕

遠位項

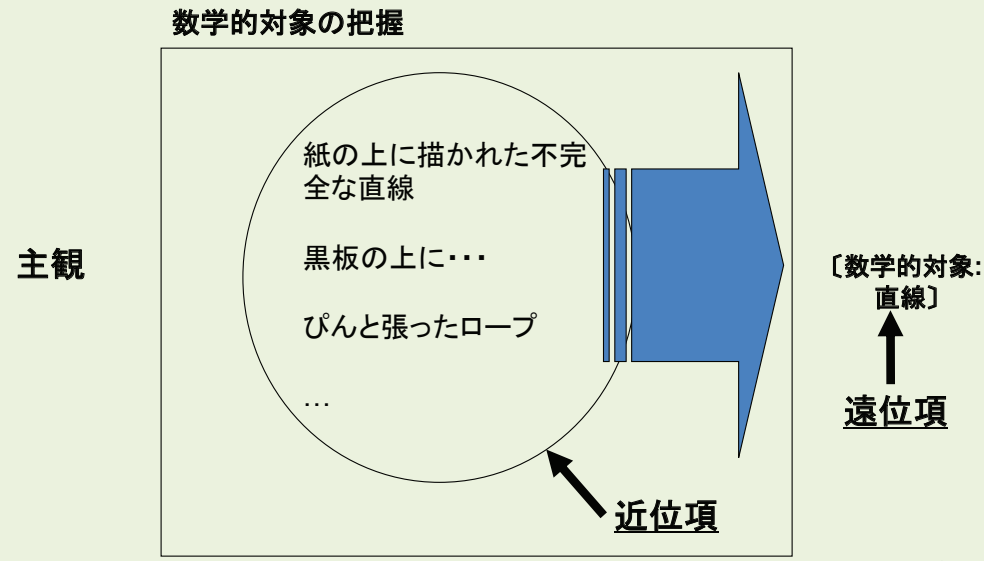
10

志向性（数3）



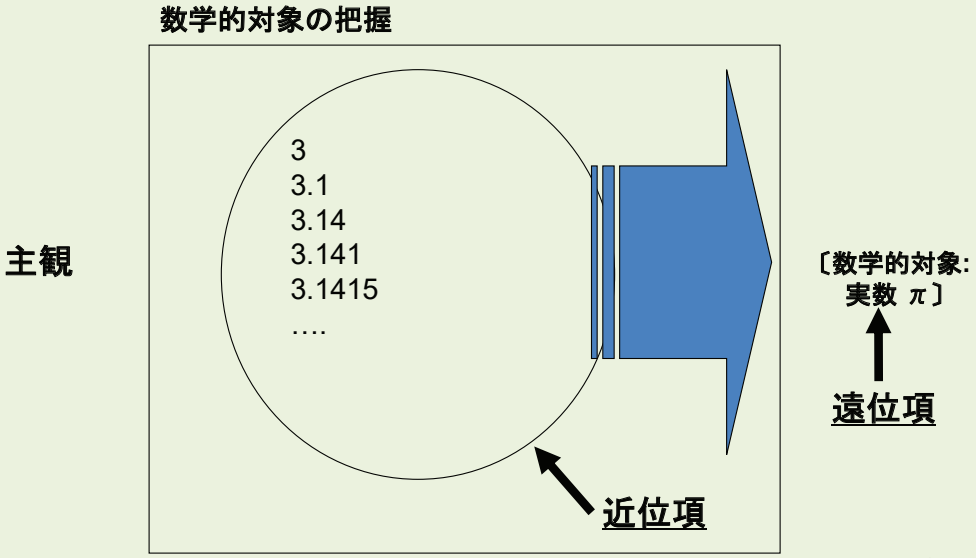
11

志向性（直線）



12

志向性(実数)



13

「数学的対象の把握」と「知覚」

Kurt Gödel:

"The question of the objective existence of the objects of mathematical intuition is an extra replica of the question of the objective existence of the outer world."

「数学的直観の対象の客観的実在の問題は、外的世界の客観的実在の問題のレプリカである。」

"What is Cantor's continuum problem?"(1964)
In Gödel, *Collected Workes, Vol.II*, 1990, 254-270.

14

小平邦彦：

「数学を理解するということは数学的現象を『見る』ことであろう。ここで『見る』といったのは、目で見るのとは違うけれども、ある種の感覚によって知覚することである。この感覚は、・・・私には視覚に近いもののように思われる。これを直観とよんでもよいのであろうが、純粋な感覚であることを強調するために、以下この感覚を『数覚』とよぶことにしよう。」

（『怠け数学者の記』より）

15

このように考えると・・・

「視覚対象を直観（視知覚）的に把握できない人」（先天盲開眼者）

⇒ 「できる人」（多くが体験済）

「数3を直観的に把握できない人」

⇒ 「できる人」（多くが体験済）

「高次の数学的対象を直観的に把握できない人」

⇒ 「できる人」（考察可能に）

16

『数学の現象学』第13章より

２　技術から発生した数学

―幾何学の起源の考察

17

新しい数学的対象の発生

「最初の幾何学者の誕生」

(Husserl “Krisis” § 9)

技芸としての測量術から

幾何学的対象が発生する

※『数学の現象学』（第13章）参照

18

ユークリッド『原論』の定義

〔傍証として…〕

直線：その点どもの間に等しく横たわるもの

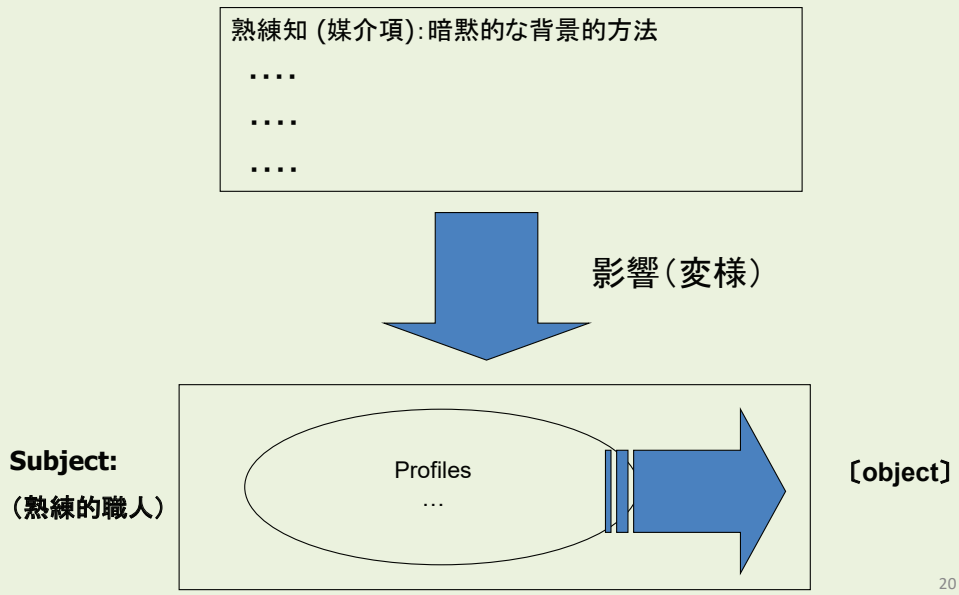
円：一つの線に囲まれた平面図形で、その図形の内部にある一点からそれへ引かれたすべての直線が互いに等しいもの

球：半円の直径が固定され、半円が回転して、その動きはじめたところに再び戻るときに囲まれてできる図形

測量術のマニュアルでは？

19

熟練的職人の対象把握



20

測地の職人の綱の把握

熟練知 (媒介項):暗黙的な背景的方法

・〇〇は使える(いい), △△は使えない(悪い)

・□□ は 〇〇 より使える(いい)

…

・"極限理念"(行為の目標)

…

影響(変様)

Subject:
測量士

Profiles
…

〔object:綱〕

21

反省

熟練知 (媒介項)

・〇〇は使える, △△は使えない

・□□は〇〇よりいい

…

・"極限形態":行為の理念的目標

…

理念的目標

Subject:
測量士

Profiles
…

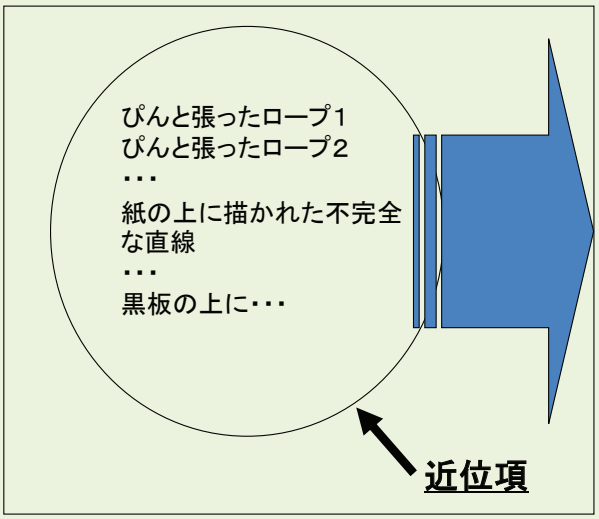
〔object:綱〕

22

新しい対象（直線）

Subject:

幾何学者



〔object: 直線〕

遠位項

23

重要なこと

数学的対象は自然的世界の中で
「発生」するが、

自然的事物からの抽象（理念化）によって
生まれるのではなく

技術（技芸）の中の理念的目標から生まれる

24

つまり・・・

自然界にある、直線もどきや平面もどきを
理念化することによって、直線や平面が
生まれるのではなく

測地術という技芸の中の
「よりまっすぐにしよう」、「より平らにしよう」
という意志の向かう先（目的理念）を取り出す
ことによって
直線や平面という数学的対象が生まれる

25

3　専門知論

26

暗黙知を伴った専門知（熟練知）の考察枠組み（現象学的・社会学的理論）

1. 専門知の本質的部分は、暗黙知である

2. 専門知の獲得によって専門家の対象把握の仕方が変化する
   （「専門家には素人に見えないものが見える」「専門家の見ている世界」）

3. 専門知はコミュニティーに帰属する

27

4　科学論の「第三の波」

28

科学論の三つの波

「第一の波」: ～1950s
　科学の「称賛」
　反証主義など

「第二の波」: 1960s～
　科学の「批判」
　パラダイム論　SSK（科学的知識の社会学）など

「第三の波」: 1990s～現在（21c）
　科学の「擁護（復権）」
　専門知論など

29

「第一の波」

科学の「称賛」　　Karl Popper (1902-1994)

～1950s　反証主義的科学観

科学的知識は実験（経験）に基づいている

理論の真偽は実験によって決定される

→ 科学は特別な知識
　〔真偽の基準としての科学〕

30

「第二の波」

科学の「批判」

1960s　パラダイム論
　　クーン『科学革命の構造』
1970s　科学的知識の社会学（SSK）

→ 科学は特別な知識ではない
〔科学という知の相対化〕

Thomas Kuhn(1922-1996)

31

「第三の波」

科学の「擁護（復権）」
1990s～21c

⇒ 科学的知識の相対化〔第二の波〕
〔科学を他の知識と横並びに捉える〕

⇒ 科学を選択する
〔選択的モダニズム elective modernism〕

専門家論（専門知論）:
科学者という専門家の持つ専門知はどのようなものなのか？
我々はそれをどのように活用したらいいのか？

Harry Collins (1943-)

32



4．1　専門知の類型学

33

専門知の類型学

1. ユビキタス専門知		
2. スペシャリスト専門知	ユビキタス暗黙知	スペシャリスト暗黙知
	ビールマット知　大衆的理解　一次資料知	対話的専門知　貢献的専門知
3. メタ専門知	外的（変成的専門知）	内的（非変成的専門知）
	ユビキタスな差別化　**ローカルな差別化**	技術的鑑識眼　下向きの差別化　参照的専門知

表 2–1：専門知の表（簡略版）(26)

『我々みんなが科学の専門家なのか？』(コリンズ)より

34

事例「南アフリカのAZT配布」

AZT（抗レトロウイルス薬）を妊婦に配布すべきか？

タボ・ムベキ大統領（南アフリカ）の判断

一次資料（論文）を読むと使用の是非について論争あり
（ノーベル賞科学者も含む反対論者あり）
⇒ 「AZTを妊婦に配布しない」と判断
⇒ 母子感染により、防げたはずの数万人のエイズ患者が生まれる

実は、その当時、既に論争は終わっていた。
（専門家のコンセンサスは、「AZTは使うべき。」）
大統領が見た一次資料は、
主流派からは無視されている異端派的論文だった
↓
「一次資料知」と「対話的・貢献的専門知」の区別の重要性

『我々みんなが科学の専門家なのか？』より

35

どう考えるべきか・・・

気候変動
データや論文を自分で確認する？〔一次資料知〕⇒×
気候学者コミュニティーでは・・・
論争状態か、コンセンサスがあるか？
どのようなコンセンサスか？

タバコの健康被害
データや論文を自分で確認する？〔一次資料知〕⇒×
科学者コミュニティーでは・・・
論争状態か、コンセンサスがあるか？
論争状態を作り出している科学者たちが
タバコ産業からお金をもらっていないか？

『我々みんなが科学の専門家なのか？』より

36

4．2　次の問題：
科学という専門知をどう使うべきか？

『民主主義が科学を必要とする理由』
（コリンズ・エヴァンズ）



・民主主義と科学の関係
・政策立案における科学的助言
・防ぐべきこと：
　「テクノクラシー」「エリート主義」
・キーワード：
　「フクロウ委員会」

ありがとうございました



鈴木俊洋（SUZUKI　Toshihiro）
崇城大学（熊本）
t-suzuki@ed.sojo-u.ac.jp

※本研究は、科研費（基盤C 課題番号20K00022）
「暗黙知を伴う職人的熟練知についての技術哲学的考察」（代表：鈴木俊洋）
及び
科研費（基盤C 課題番号19K00047）
「身体の変容をめぐる技術哲学的考察」（代表：金光秀和）
の助成を受けたものです

Case studies of informatics-aided nanoscale materials simulation

Yusuke NODA

Okayama Prefectural University, Japan

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".

九州大学IMI Workshop II「材料科学における幾何と代数III」
九州大学IMIオーディトリアム & Zoom
2022年9月8日(木) ~ 9月10日(土)

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

野田 祐輔

岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科

Yusuke Noda (Okayama Prefectural University)

自己紹介



野田 祐輔（博士（工学）2015年3月取得）
岡山県立大学
情報工学部 情報通信工学科
応用物理学研究室 准教授

専門分野, 関連キーワード

- 物性物理学・材料科学
- 計算材料科学／第一原理計算
- マテリアルズ・インフォマティクス
- 機械学習
- 多変量回帰分析
- 数理最適化／組み合わせ最適化

2

略歴

- 2006.04−2010.03
  - 横浜国立大学 工学部 知能物理工学科
- 2010.04−2015.03
  - 横浜国立大学 大学院工学府 物理情報工学専攻
    物理工学コース 博士課程前期／博士課程後期
- 2014.04−2016.03
  - 日本学術振興会 特別研究員（DC2）：横浜国立大学
  - 日本学術振興会 特別研究員（PD）：理化学研究所
- 2016.04−2018.03
  - 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 蓄電池材料グループ
    ポスドク研究員
- 2018.04−2020.03
  - 名古屋大学 大学院工学研究科 物質科学専攻 特任助教（CREST研究員）
- 2020.04−2021.03
  - 金沢学院大学 経済情報学部 経済情報学科 講師
- 2021.04−現在
  - 岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科 准教授

3

“科学”のパラダイム

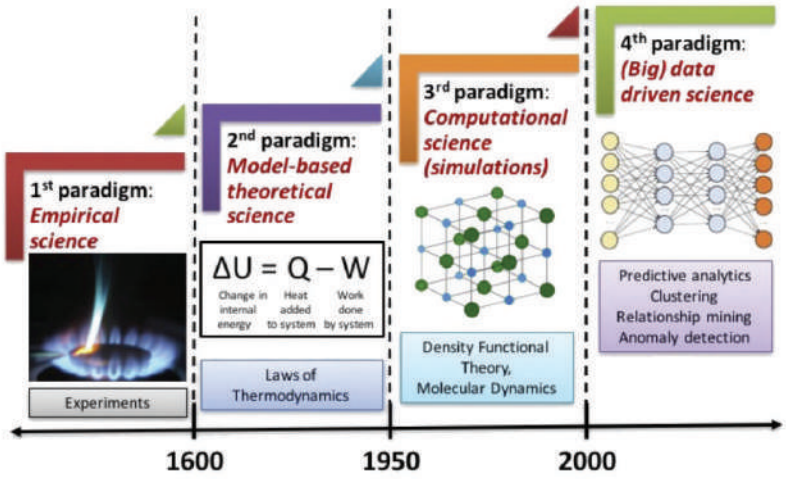


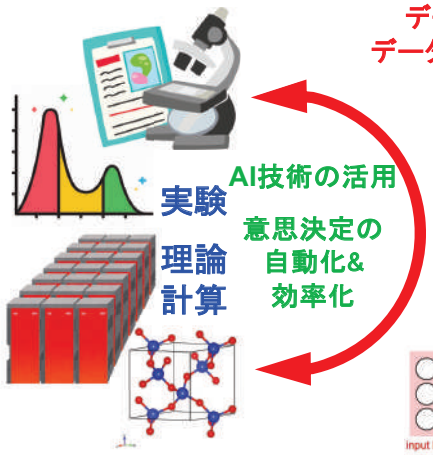
FIG. 1. The four paradigms of science: empirical, theoretical, computational, and data-driven.

A. Agrawala and A. Choudhary, *APL Mat.* **4**, 053208 (2016).

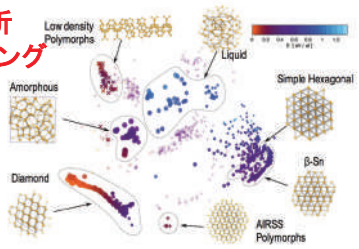
4

マテリアルズ・インフォマティクス

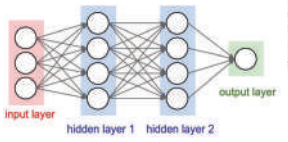
マテリアルズ・インフォマティクス（材料科学＋情報科学）

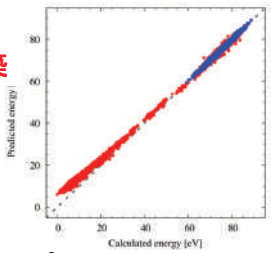


データ解析
データマイニング



予測モデルの構築





【キーワード】
機械学習, 最適化, 逆問題解析, ハイスループット,
仮想スクリーニング, クラスタリング, etc.

5

目次

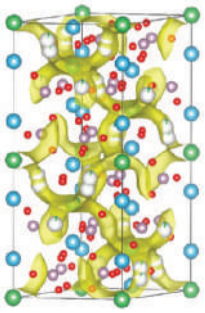
- 固体電解質$LiZr_2(PO_4)_3$の電気化学的安定性の評価
- 遺伝的アルゴリズムによるGe−Sn合金の安定構造の探索
- 機械学習型原子間ポテンシャルによるSi結晶中の大規模欠陥のシミュレーション

目次

- 固体電解質$LiZr_2(PO_4)_3$の電気化学的安定性の評価
- 遺伝的アルゴリズムによるGe–Sn合金の安定構造の探索
- 機械学習型原子間ポテンシャルによるSi結晶中の大規模欠陥のシミュレーション

固体電解質

- **NASICON** (**NA S**uper **I**onic **CON**ductor)型
  - 1976年に、超Naイオン伝導体$Na_{1+x}Zr_2Si_xP_{3-x}O_{12}$が発見される[1]
  - $Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO_4)_3$ (LATP)[2]など、NASICON型Liイオン伝導体が報告される
  - $LiTi_2(PO_4)_3$ (LTP)系材料は、Li金属負極の接触に対して不安定である[3]



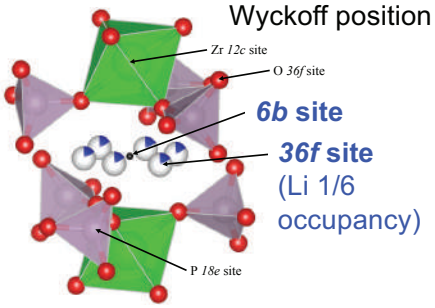
Ti^{4+}/Ti^{3+}レドックス反応

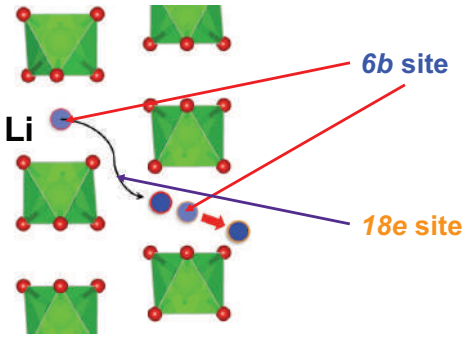
Rhombohedral相のNASICON構造

[1] J. B. Goodenough, *et al.*, Mat. Res. Bull. **11**, 203 (1976).
[2] T. Hupfer, *et al.*, Solid State Ionics **288**, 235 (2016).
[3] S. Patoux, *et al.*, Chem. Mat. **14**, 5057 (2002).

$LiZr_2(PO_4)_3$ (LZP)

- 電気化学的に安定なZr^{4+}イオンを含む
- Li金属負極の接触に対して、5.5 Vまでの耐性があることが実験で明らかになった[4]
- CaドープによってLiイオン伝導性が向上した[5,6]





[4] Y. Li, *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. **113**, 13313 (2016).
[5] H. Xie, *et al.*, J. Power Sources **196**, 7760 (2011).
[6] Y. Li, *et al.*, J. Power Sources **240**, 50 (2013).

熱力学的安定性の評価

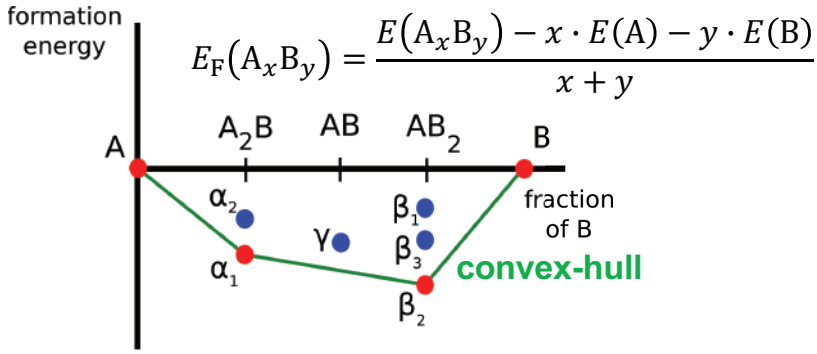
- LZP固体電解質の分解反応
  - 正極との酸化分解反応、負極との還元分解反応を起こさない固体電解質が望まれる
  - Li, Zr, P, Oを含む全ての化合物が、分解生成物の候補となる
  - 全ての分解反応式を調べることは非常に難しい

$$x\,Li + LiZr_2(PO_4)_3 \rightarrow Zr + P + O_2$$
$$+ \text{Li-Zr compounds} + \text{Li-P compounds}$$
$$+ \text{Li-O compounds} + \text{Zr-P compounds}$$
$$+ \text{Zr-O compounds} + \text{P-O compounds}$$
$$+ \text{Li-Zr-P compounds} + \text{Li-Zr-O compounds}$$
$$+ \text{Li-P-O compounds} + \text{Zr-P-O compounds}$$
$$+ \text{Li-Zr-P-O compounds}$$

10

熱力学的安定性の評価

- **凸包解析**（convex-hull analysis）
  - 凸包（データ点を繋いで構成される凸多面体）を基に、物質の相安定性を調べる手法
  - 凸包直上の点は、安定物質である
  - 凸包外の点は、不安定物質である

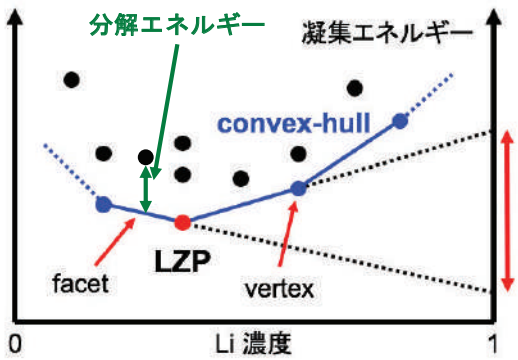


https://materialsproject.org/docs/structurepredictor

11

電位窓の算出

- 結晶構造データーベース・凸包による解析
  - Materials Projectから抽出した110構造（Li, Zr, P, Oを含む）のデータについてDFT計算を実行し、全エネルギーを求める
  - 凝集エネルギーを算出し、凸包を作成する
  - facetの形状から、電位窓を算出する

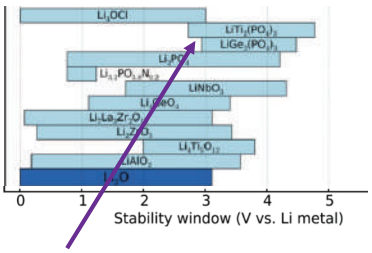


実際のconvex-hullは4次元で構成される

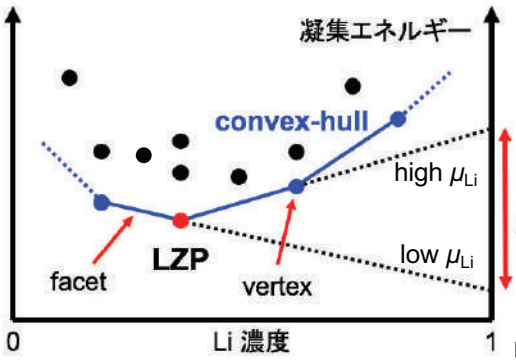
電位窓

電位窓の算出

- LZP固体電解質の熱力学的安定性
  - LZPはconvex-hullのvertexの一つで的に安定であることが分かる
  - LZPは以下のような分解反応を示すと
    - アノード反応（low μ_{Li}）: 4 $LiZr_2(PO_4)_3$ →
    - カソード反応（high μ_{Li}）: 4 $LiZr_2(PO_4)_3$ →



$LiTi_2(PO_4)_3$: 2.6 – 4.7 V
$LiGe_2(PO_4)_3$: 2.9 – 4.5 V
理論計算による電位窓評価[7]



電位窓
2.20 – 4.14 V (電位差 1.94 V)

[7] W. D. Richards, *et al.*, Chem. Mater. **28**, 266 (2016).

固体電解質の還元分解反応

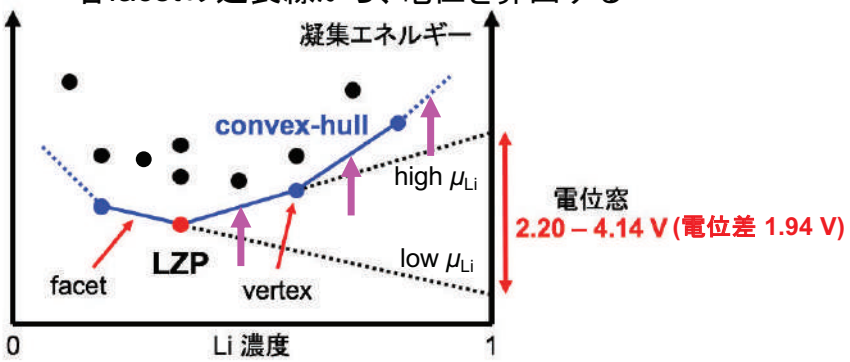
- 実験と理論計算の比較
  - Liら[4]が実験的に報告した酸化分解と還元分解の電位差: **5.5 V**
  - $LiZr_2(PO_4)_3 + 24\ Li \rightarrow 3\ Li_3P + 2\ Li_8ZrO_6$
  - 凸包解析（理論計算）から得られた電位差: **1.94 V**
  - $4\ LiZr_2(PO_4)_3 + 5\ Li \rightarrow 4\ Zr_2P_2O_9 + 3\ Li_3PO_4 + P$
  - 実験で大きな電位窓が得られた原因は、分解反応が常温付近では起こり難いという速度論的効果に加えて、反応初期に界面に形成する分解生成物が反応を阻害する効果などが考えられる
    → 過剰Liにおける還元分解反応式を予測する

[4] Y. Li, *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. **113**, 13313 (2016).

14

固体電解質の還元分解反応

- 過剰Liにおける還元分解反応式の予測
  - 得られた凸包について、還元分解反応側（Li高濃度側）のfacetを調べる
  - 各facetに共有される点が、更なる還元分解反応式の生成物であると推定される
  - 各facetの延長線から、電位を算出する



15

固体電解質の還元分解反応

凸包解析から予測されたLZPの還元分解反応式と電位[8]

decomposition reaction	voltage [V]
$4\ LiZr_2(PO_4)_3 + 5\ Li \rightarrow P + 3\ Li_3PO_4 + 4\ Zr_2P_2O_9$ ←	2.15–2.20
$LiZr_2(PO_4)_3 + 5\ Li \rightarrow P + 2\ Li_3PO_4 + 2\ ZrO_2$	2.10–2.15
$5\ LiZr_2(PO_4)_3 + 28\ Li \rightarrow 2\ ZrP_2 + 11\ Li_3PO_4 + 8\ ZrO_2$	1.83–2.10
$11\ LiZr_2(PO_4)_3 + 84\ Li \rightarrow 6\ ZrP_2 + 21\ Li_3PO_4 + 16\ Li_2ZrO_3$	1.73–1.83
$23\ LiZr_2(PO_4)_3 + 196\ Li \rightarrow 14\ ZrP_2 + 41\ Li_3PO_4 + 16\ Li_6Zr_2O_7$	1.37–1.73
$4\ LiZr_2(PO_4)_3 + 56\ Li \rightarrow 7\ Li_3P + 5\ Li_3PO_4 + 4\ Li_6Zr_2O_7$	1.10–1.37
$LiZr_2(PO_4)_3 + 24\ Li \rightarrow 3\ Li_3P + 2\ Li_8ZrO_6$ ←	1.02–1.10
$7\ LiZr_2(PO_4)_3 + 197\ Li \rightarrow 12\ Li_3P + 84\ Li_2O + Zr_{14}P_9$	0.95–1.02
$7\ LiZr_2(PO_4)_3 + 200\ Li \rightarrow 13\ Li_3P + 84\ Li_2O + 2\ Zr_7P_4$ ←	0.00–0.95

Li金属に対して安定な物質

[8] **Y. Noda** *et al.*, Chem. Mater. **29**, 8983 (2017).

分解生成物Li_8ZrO_6の**分解エネルギーが非常に小さい**ため、
実際のLZP | Li負極界面では、先の還元分解反応が起こらなかった

16

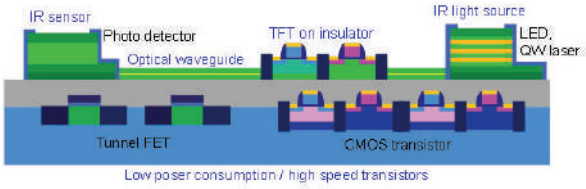
目次

- 固体電解質$LiZr_2(PO_4)_3$の電気化学的安定性の評価
- 遺伝的アルゴリズムによるGe–Sn合金の安定構造の探索
- 機械学習型原子間ポテンシャルによるSi結晶中の大規模欠陥のシミュレーション

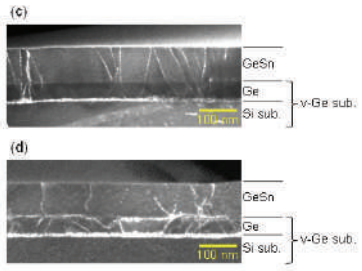
17

Ge–Sn合金

- IV族（C, Si, Ge, Sn）混晶半導体
  - Si系半導体集積回路の更なる多機能化、省電力化、高速化に向けて、IV族混晶半導体が注目されている
  - 低Sn組成のGe–Sn合金薄膜は、高速あるいは省電力トランジスタなどへの応用が期待されている



電子・光電子デバイス集積のイメージ
（出典：中塚（名古屋大学））



$Ge_{1-x}Sn_x$/仮想Ge基板試料の断面TEM像
（出典：中塚（名古屋大学））

Ge–Sn合金の理論研究

- 低濃度SnのGe–Sn合金
  - 理論計算の先行研究は多く，知見が豊富である
- 高濃度SnのGe–Sn合金
  - 先行研究がほとんど無く，知見が少ない

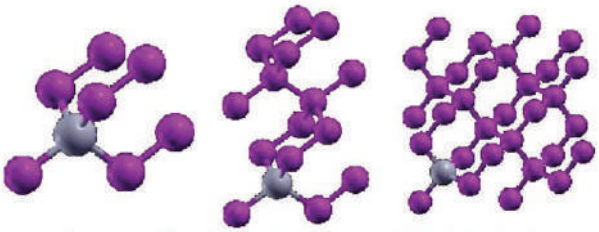
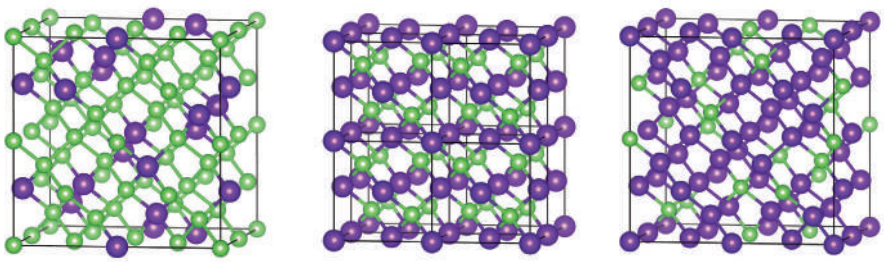


Fig. 1. Atomic supercells of $Ge_{1-x}Sn_x$ (12.5%, 6.25%, 3.125%) constructed using repeated 8 atom cubic unit cells.

C. Darmody et al., SISPAD (2015).

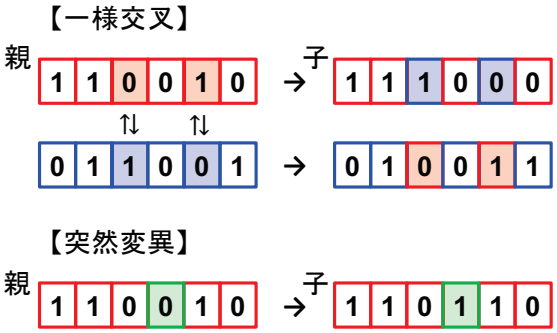
研究目的

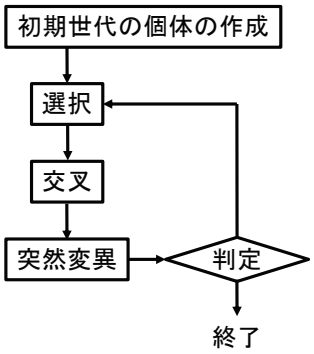
- 第一原理計算を用いて、Ge–Sn合金（$Ge_{1-x}Sn_x$: $0.00 < x < 1.00$）の安定構造を探索し、相安定性、結晶構造の特徴を理論的に明らかにする



結晶構造の探索

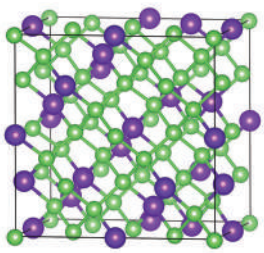
- 遺伝的アルゴリズム（Genetic Algorithm：GA）
  - 制御する特徴量を遺伝子（0, 1ビット）で表した複数の個体（染色体、ビット列）から、優秀な個体の遺伝子を優先的に組み替える作業を繰り返し、最適解を探す
  - 交叉・突然変異を行って、新しい染色体（ビット列）を生成する





結晶構造の探索

- 最適な原子配列の探索
  - 第一原理計算の全エネルギーが低くなるような最適なGe–Sn構造を探索
  - Ge/Sn濃度（$0.00 < x < 1.00$, x：Sn濃度）毎に最適な構造を探索
  - ダイヤモンド型構造64原子モデル（2×2×2）を使用



ダイヤモンド型構造（64原子モデル）の例

22

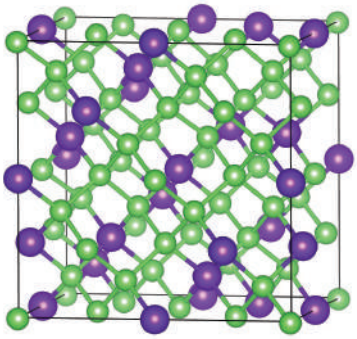
結晶構造の探索

- データ変換（デコード）
  - 染色体（ビット列）のデータを結晶構造のデータへ変換する

染色体（遺伝子64個）

0001001010010001000001010010000110000000001100000001000000011001

結晶構造（64原子）



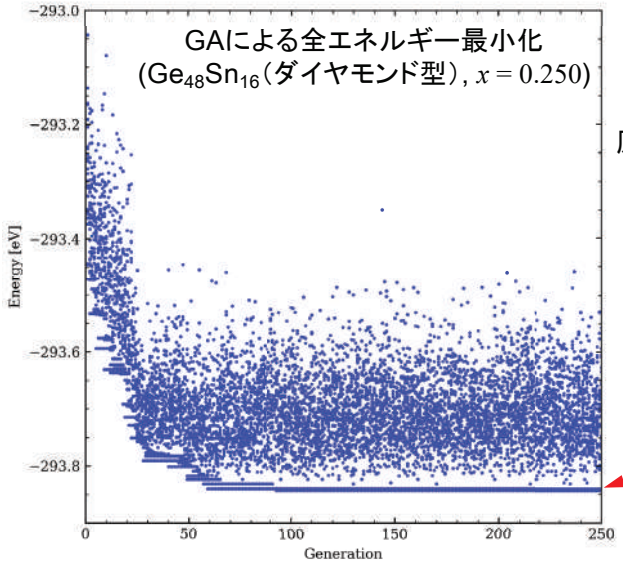
23

結晶構造の探索

- 第一原理計算の計算条件（GAとの連携）
  - Vienna Ab-initio Simulation Package（VASP）
  - 密度汎関数理論（DFT）
  - 平面波基底関数
  - PBEsol交換相関汎関数
  - PAW擬ポテンシャル
  - カットオフエネルギー：350 eV
  - k点：2×2×2 Monkhorst−Pack grid

24

結晶構造の探索



原子配列の組み合わせ総数

$_{64}C_{16} = 4.885 \times 10^{14}$

計算した結晶構造の総数

7,500

GAが導いた
全エネルギー最小の
結晶構造

25

結晶構造の安定性の評価

- 第一原理計算の計算条件(安定構造の再検証)
  - 各Ge/Sn濃度でGAから得られた上位50構造を対象に、第一原理計算を再実行(全エネルギーの高精度評価)
  - Vienna Ab-initio Simulation Package(VASP)
  - 密度汎関数理論(DFT)
  - 平面波基底関数
  - PBEsol交換相関汎関数
  - PAW擬ポテンシャル
  - カットオフエネルギー:**500** eV
  - k点:**4×4×4** Monkhorst−Pack grid

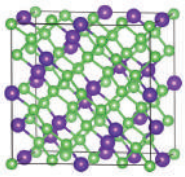
26

結晶構造の安定性の評価

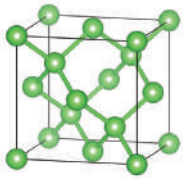
- 結晶構造のエネルギーの評価
  - 全エネルギー(E)の評価
  - 形成エネルギー(E_f)の算出

$$E_f[\mathrm{Ge}_{1-x}\mathrm{Sn}_x] \quad (0.00 < x < 1.00)$$

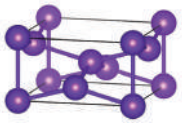
$$= E[\mathrm{Ge}_{1-x}\mathrm{Sn}_x] - \{(1-x)E[\mathrm{Ge}] + xE[\mathrm{Sn}]\}$$



Ge-Sn合金



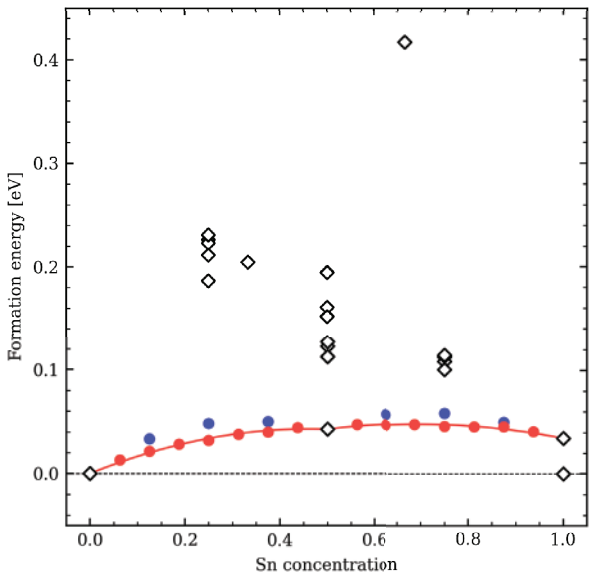
α-Ge



β-Sn

27

Ge-Sn合金の形成エネルギー



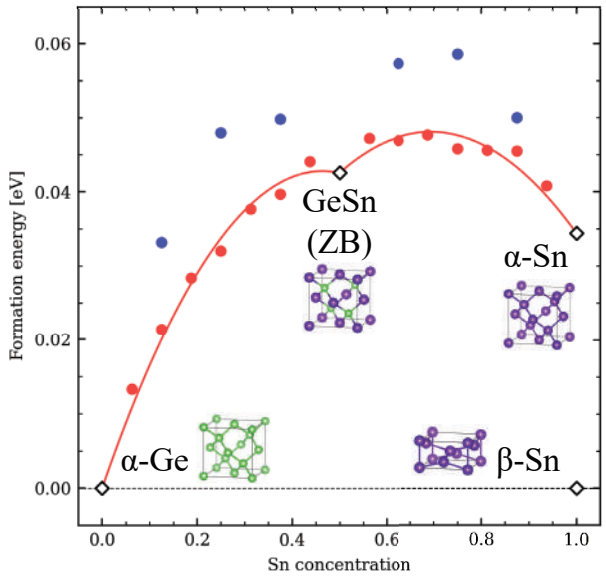
◇:既知物質
(結晶構造DB(OQMD)から抽出)

●:安定構造
(64原子(2×2×2)モデル)

●:安定構造
(8原子(1×1×1)モデル)

28

Ge–Sn合金の形成エネルギー



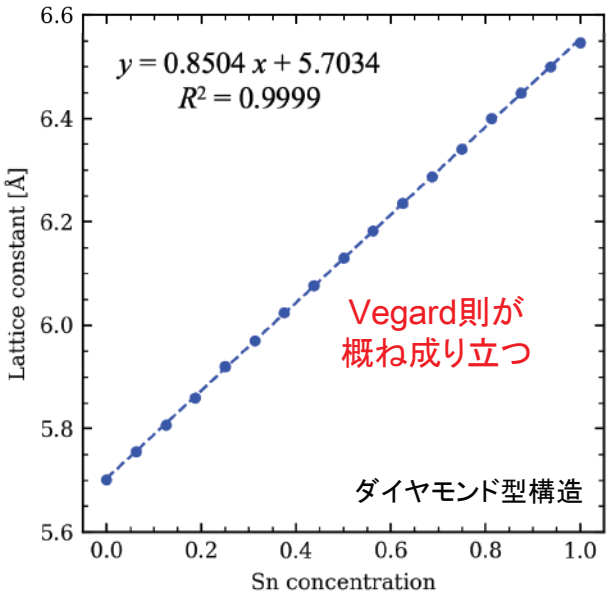
◇：既知物質
（結晶構造DB（OQMD）
から抽出）

●：安定構造
（64原子（2×2×2）モデル）

●：安定構造
（8原子（1×1×1）モデル）

29

Ge–Sn合金の格子定数



目次

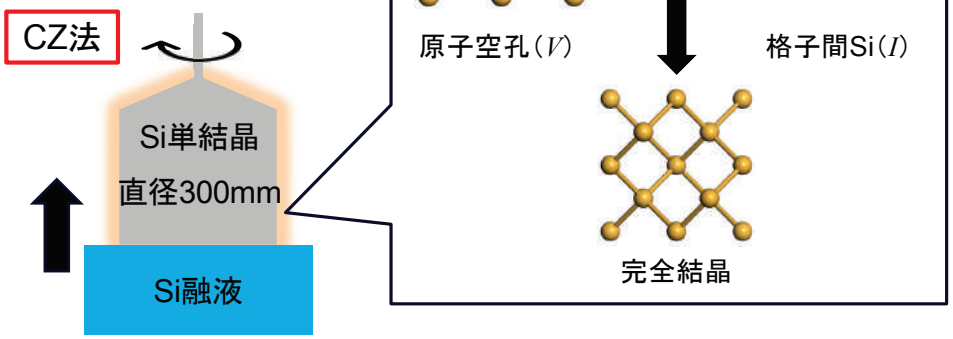
- 固体電解質$LiZr_2(PO_4)_3$の電気化学的安定性の評価
- 遺伝的アルゴリズムによるGe–Sn合金の安定構造の探索
- 機械学習型原子間ポテンシャルによるSi結晶中の大規模欠陥のシミュレーション

研究背景

大規模集積回路（LSI）の基板となるSi単結晶では，
無欠陥性が求められている．



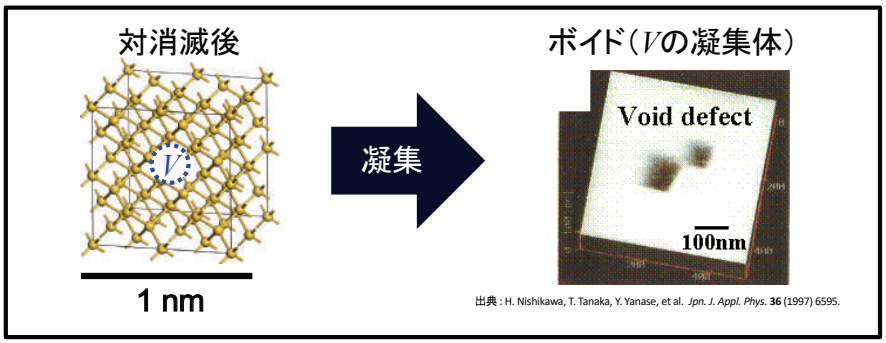
出典：https://www.sumcosi.com/products/process/step_01.html



32

研究背景

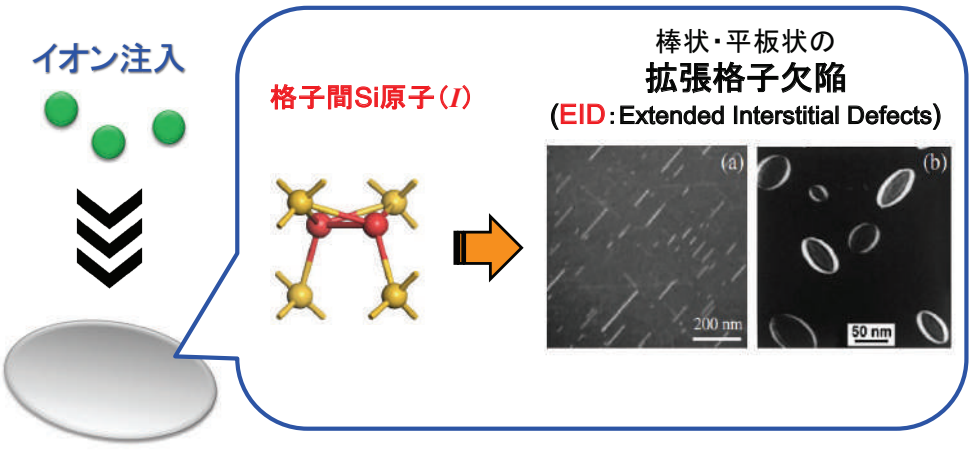
固液界面から取り込まれる点欠陥は，原子空孔Vの方が多い．
通常の育成速度（0.7 mm/min）では対消滅後にVが残る．



Siウェーハ表面近傍に存在するボイドは，
酸化膜耐圧の劣化など，LSIに悪影響を与える．

33

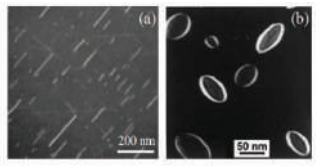
研究背景



イオン注入によって生成された点欠陥（I）が，
熱処理等によって凝集しEIDを形成する．

研究背景

EID



[1] H. Park, and J. W. Wilkins, *Phys. Rev. B* **79**, 241203 (2009).

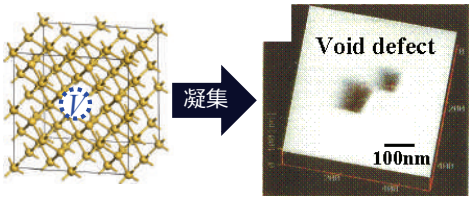
- リーク電流を増加させ，デバイスの性能を低下させる
- ドーパントの増速拡散や電気的不活性化を引き起こす要因となる
- Si結晶内部に存在すると，金属のゲッタリングサイトとなる

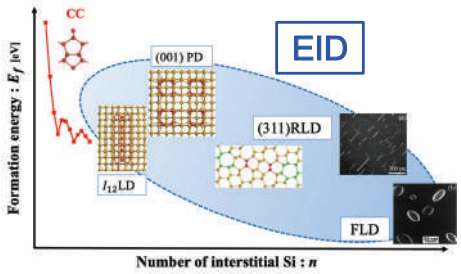
デバイスの微細化・高性能化に伴い，
実験で観測が難しい微小な欠陥の制御が必要となっている

研究目的

- Si結晶中の大規模な*V*クラスター（ボイド）および*I*クラスター（EID）のエネルギー的安定性を理論的に評価し，成長過程における安定構造を解明する
  - 人工ニューラルネットワーク（ANN）原子間ポテンシャル[1,2]

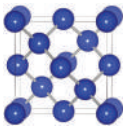
[1] J. Behler, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 1032 (2015).
[2] T. Yokoi, Y. Noda, A. Nakamura, and K. Matsunaga, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 014605 (2020).





ANN原子間ポテンシャル

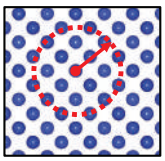
原子座標

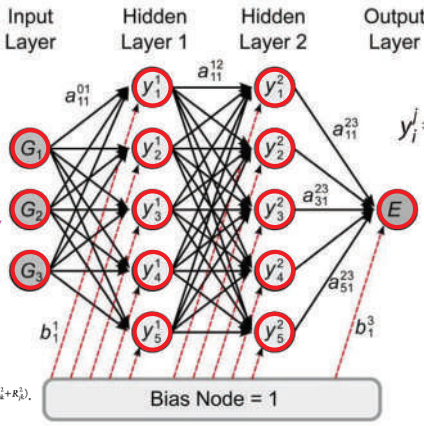


対称関数

$$G_i^2 = \sum_{j=1} e^{-\eta_2 (R_{ij} - R_s)^2} \cdot f_c(R_{ij})$$

$$G_i^3 = 2^{1-\zeta} \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i,j} [\{1 + \cos(\theta_{ijk} - \theta)\}^{\zeta} \cdot e^{-\eta_3 (R_{ij}^2 + R_{ik}^2 + R_{jk}^2)} \cdot f_c(R_{ij}) \cdot f_c(R_{ik}) \cdot f_c(R_{jk})]$$





ANNの構造

○：ノード

a：weight パラメータ

b：bias パラメータ

活性化関数

$$y_i^j = f_i^j \left(b_i^j + \sum_{k=1}^{N_{j-1}} a_{k,i}^{j-1,j} \cdot y_k^{j-1} \right)$$

1原子のエネルギー，
原子間にはたらく力

誤差関数

$$E = \sum_{p=1}^{k} \left\{ \sum_{i=1}^{N_{str}} (E_{ANN}^i - E_{DFT}^i)^2 + \sum_{i=1}^{N_{str}} \sum_{j=1}^{N_{atom}^i} (F_{ANN}^{i,j} - F_{DFT}^{i,j})^2 \right\} \lambda^{k-p}$$

Forward propagation
（順伝播）

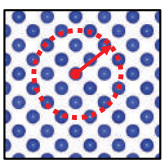
ANN原子間ポテンシャル

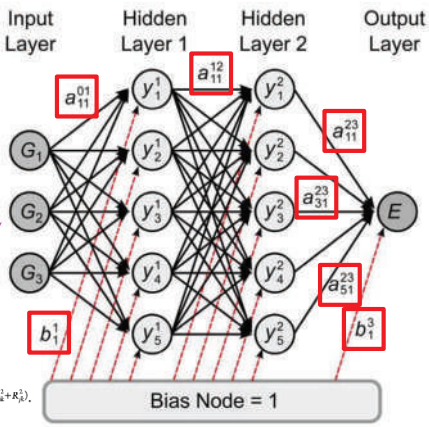
原子座標

対称関数

$$G_i^2 = \sum_{j=1} e^{-\eta_2 (R_{ij} - R_s)^2} \cdot f_c(R_{ij})$$

$$G_i^3 = 2^{1-\zeta} \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i,j} [\{1 + \cos(\theta_{ijk} - \theta)\}^{\zeta} \cdot e^{-\eta_3 (R_{ij}^2 + R_{ik}^2 + R_{jk}^2)} \cdot f_c(R_{ij}) \cdot f_c(R_{ik}) \cdot f_c(R_{jk})]$$





ANNの構造

○：ノード

a：weight パラメータ

b：bias パラメータ

1原子のエネルギー，
原子間にはたらく力

誤差関数

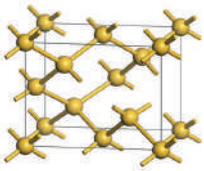
$$E = \sum_{p=1}^{k} \left\{ \sum_{i=1}^{N_{str}} (E_{ANN}^i - E_{DFT}^i)^2 + \sum_{i=1}^{N_{str}} \sum_{j=1}^{N_{atom}^i} (F_{ANN}^{i,j} - F_{DFT}^{i,j})^2 \right\} \lambda^{k-p}$$

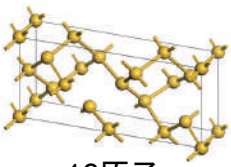
Backpropagation
（逆伝播）

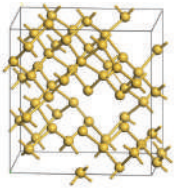
学習データ

第一原理計算(CASTEP)を基に収集した学習データ
Si 8～128原子モデル (バルク・表面)

- 各原子位置 : 各方向最大0.2Å変位
- 格子定数, セルの角度変化 : 80%～120%
- 原子空孔V : 0～17 個


8原子


16原子


64原子


表面構造

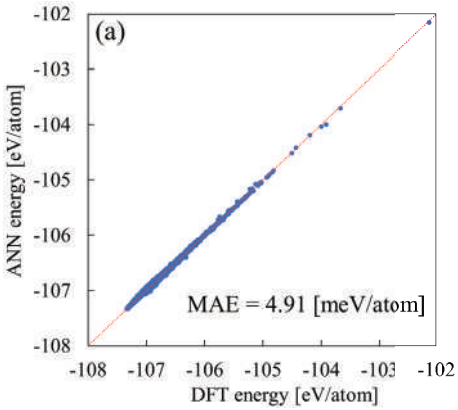
上記のモデルに対して
構造緩和計算・MD計算

学習データ
エネルギー: 31,015 件
原子間にはたらく力: 1,678,278 件

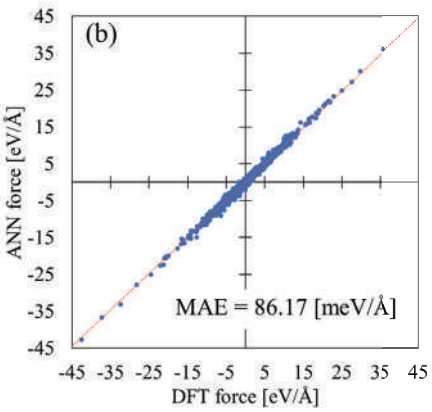
ANNの構成: 32(入力層)−54(隠れ層1)−54(隠れ層2)−1(出力層)

ANNポテンシャルの精度検証

学習データの診断プロット
(理論値:DFTと予測値:ANNの比較)



結晶構造のエネルギー



原子間にはたらく力

Ushiro et al. *J. Phys. Chem. C* **125**, 26869–26882 (2021).

40

*V*クラスターの安定形態

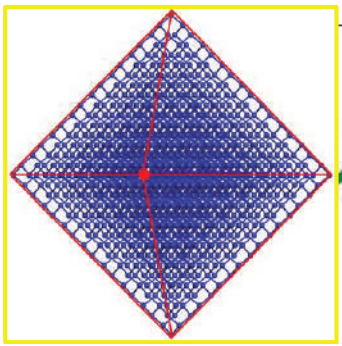
SF ([111]-oriented Stacking Fault)	HRC (Hexagonal Ring Clusters)	SPC (SPherically shaped Clusters)
	$n = 6$	$n = 5$
$n = 13$	$n = 10$	$n = 17$
$n = 24$		$n = 35$

3つの形態（SF，HRC，SPC）の
エネルギー的安定性のサイズ依存性を評価する

Ushiro et al. *J. Phys. Chem. C* **125**, 26869–26882 (2021).

41

*V*クラスターの形成エネルギー評価

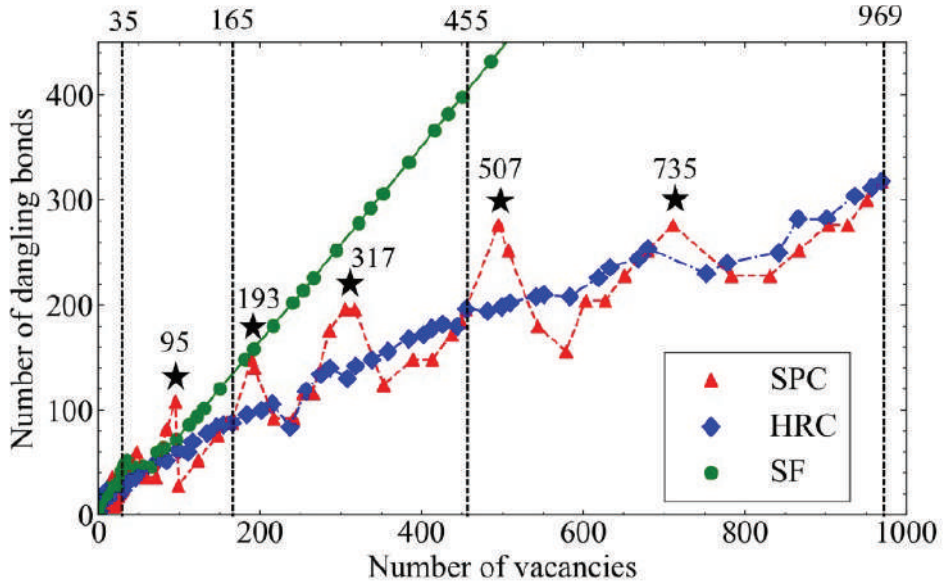


高対称性の*V*クラスター

Ushiro et al. *J. Phys. Chem. C* **125**, 26869–26882 (2021).

42

*V*クラスターのダングリングボンドの数

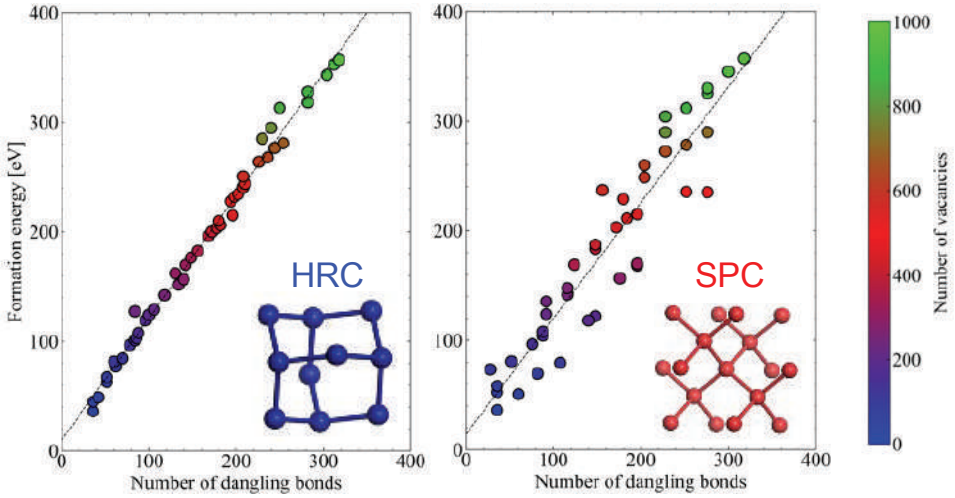


Ushiro et al. *J. Phys. Chem. C* **125**, 26869–26882 (2021).

43

エネルギーとダングリングボンドの関係

大規模*V*クラスター（$36 \leq n \leq 969$）



Ushiro et al. *J. Phys. Chem. C* **125**, 26869–26882 (2021).

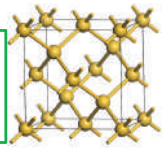
44

学習データ

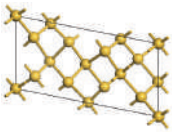
第一原理計算(CASTEP)を使用

学習データ
エネルギー:24,883件
力:1,312,188件

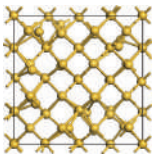
- Si 8, 16, 64 原子などの計算セルを使用
- 複数個の I を加えたものも含む
  1. 原子位置を最大 0.2 Å の範囲でランダムに変位
  2. セルの長さや角度を 最大±20 %の範囲でランダムに変化
- EID の計算精度向上のため，各種 EID 構造モデルも含む



Si_8



Si_{16}



$Si_{64}\ I_8$

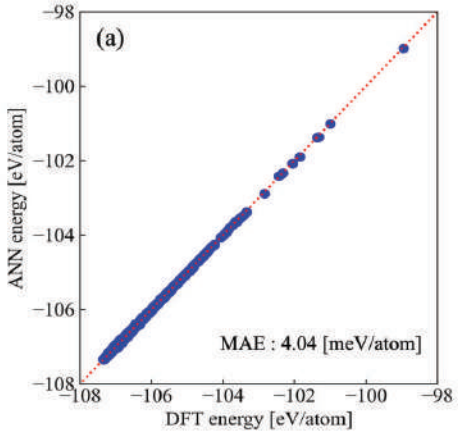
各構造に対して10ステップ分の構造最適化を行い，
各ステップでの計算結果を学習データとした
第一原理分子動力学(MD)計算から得られるデータも，
学習データに含めた
1回目のANNポテンシャル構築後，ANNポテンシャルのMD計算
から得られるデータも新規学習データとして追加し，2回目のANN
ポテンシャルを構築した

ANNの構成:32(入力層)−54(隠れ層1)−54(隠れ層2)−1(出力層)

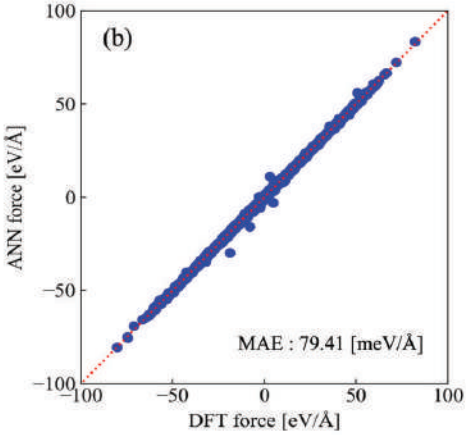
45

ANNポテンシャルの精度検証

学習データの診断プロット
(理論値:DFTと予測値:ANNの比較)



結晶構造のエネルギー

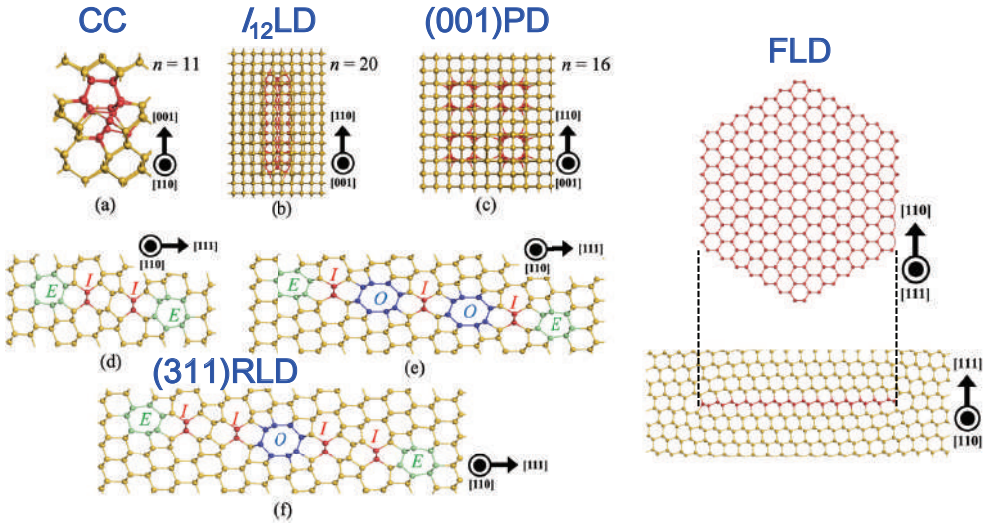


原子間にはたらく力

Ohbitsu et al. *Scr. Mater.* **214**, 114650 (2022).

46

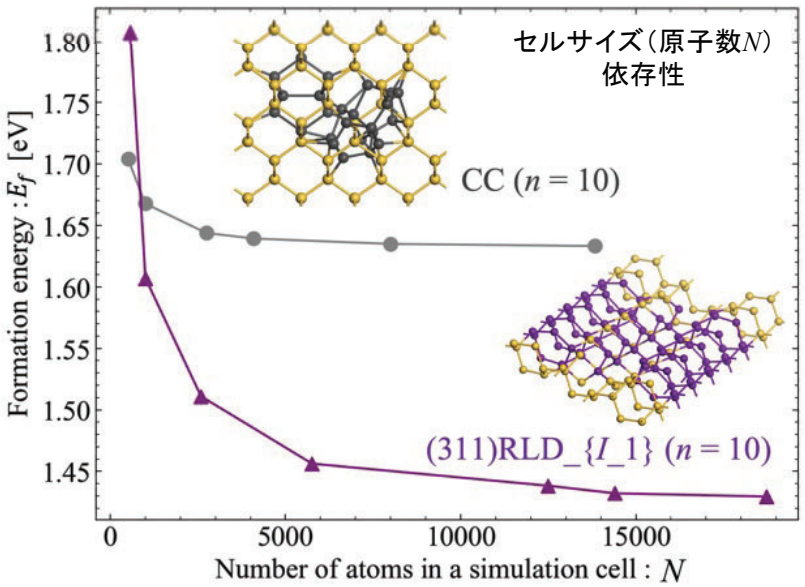
EID構造



Ohbitsu et al. *Scr. Mater.* **214**, 114650 (2022).

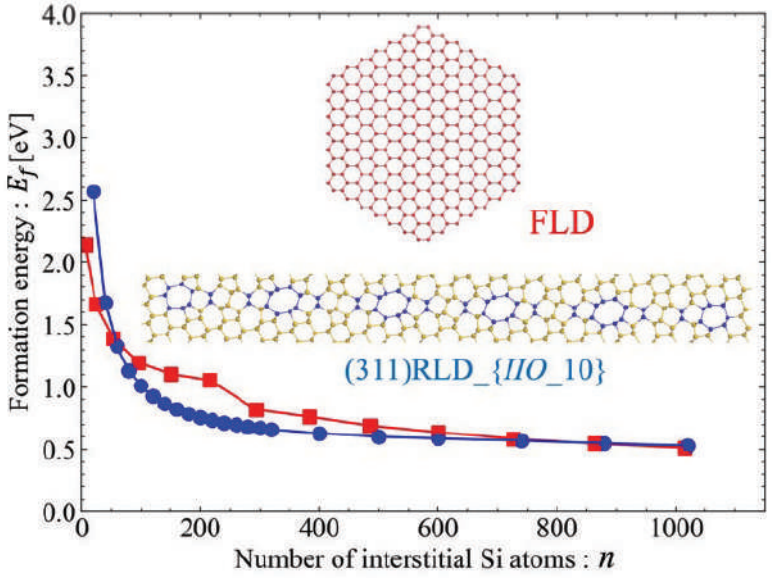
47

EIDの形成エネルギー評価



Ohbitsu et al. *Scr. Mater.* **214**, 114650 (2022).

EIDの形成エネルギー評価



Ohbitsu et al. *Scr. Mater.* **214**, 114650 (2022).

本講演のまとめ

- 固体電解質$LiZr_2(PO_4)_3$の電気化学的安定性の評価（結晶構造データベース活用）

共同研究者：名古屋工業大学（中山将伸 教授（MI²I GL兼務）、研究室メンバー）
謝辞：物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）

- 遺伝的アルゴリズムによるGe–Sn合金の安定構造の探索（最適化）

共同研究者：岡山県立大学（末岡浩治 教授）
謝辞：JST-CREST研究課題「狭ギャップIV族混晶による赤外多帯域受発光集積デバイス」（代表研究者：中塚理（名古屋大学 教授））

- 機械学習型原子間ポテンシャルによるSi結晶中の大規模欠陥のシミュレーション（予測モデル）

共同研究者：岡山県立大学（末岡浩治 教授、研究室メンバー）、名古屋大学（松永克志 教授、横井達矢 講師）、グローバルウェーハズ・ジャパン（神山栄治 氏）
謝辞：JST-CREST研究課題「多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立とスマートシリコンインゴットの創製」（代表研究者：宇佐美徳隆（名古屋大学 教授））

Applying mathematical analysis to material science in Kyocera

Takako MASHIKO, Takuhiro TAKAHASHI
Kyocera Corp., Japan

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[1]. 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[2]. 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.

References

[1] T. Mashiko, Journal of Computer Chemistry, Japan, 2018, 17, 5, 196-198

[2] Japan patent JP2021-112283A



京セラにおける材料科学への数理解析技術の適用事例

2022年9月8日

先進マテリアルデバイス研究所基盤技術研究部
増子貴子・高橋卓大

京セラ株式会社

© 2022 KYOCERA Corporation

全体の流れ

自己紹介（増子）
1. 線形代数の座標変換
   ・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
2. 非可積分系の熱化現象に関して
   ・D-Waveを使った物理現象のシミュレーション
3. 溶媒のネットワークに関して
   ・D-Waveの水クラスター分割問題
   ・分子動力学法による溶液中の分子の挙動の予測

自己紹介（高橋）
1. データ解析
   ・京セラでのデータ解析事例
   ・京セラ社内での数学普及活動

© 2022 KYOCERA Corporation

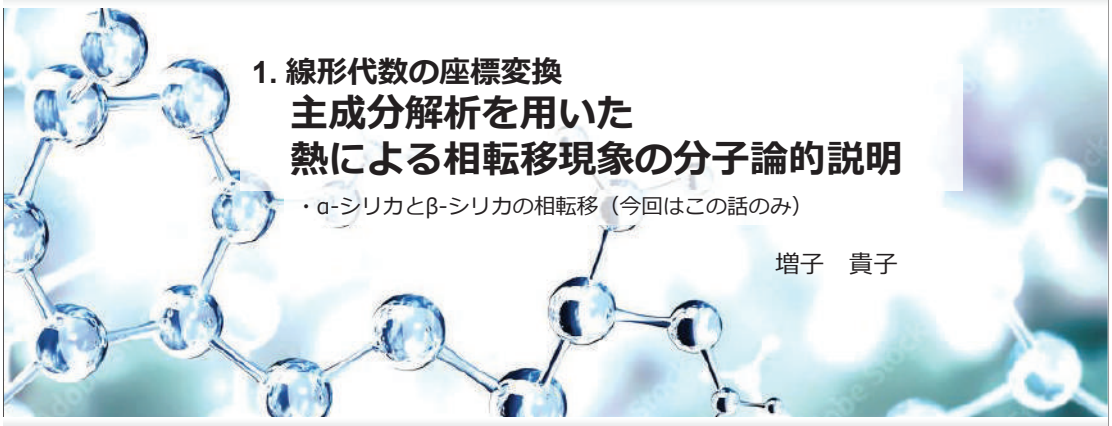
自己紹介

KYOCERA

増子 貴子
博士（理学）
横浜市立大学客員助教、東北大学客員准教授
横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科
博士論文「歯車状両親媒性分子の自己集合における
置換基効果と溶媒効果に関する理論研究」
京セラ株式会社 総合研究所@鹿児島県霧島市
京セラ株式会社 けいはんなリサーチセンター@京都府相楽郡
京セラ株式会社 みなとみらいリサーチセンター@神奈川県横浜市

© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA



1. 線形代数の座標変換

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

・α-シリカとβ-シリカの相転移（今回はこの話のみ）

増子　貴子

京セラ株式会社

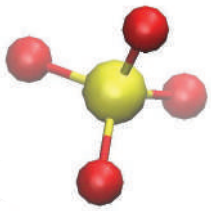
T. Mashiko, Journal of Computer Chemistry, Japan, 2018, 17, 5, 196-198

1. 序論：α-β Silicaの相転移に関する既存研究

KYOCERA

非弾性中性子散乱法によるβ-Silicaの弾性定数測定[1]

Silica: SiO_2



黄色：Si, 赤：O

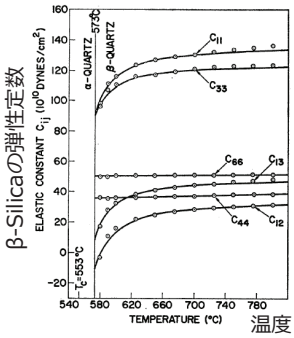


FIG. 10. The temperature dependence of the elastic constants of β quartz. Open circles are measured values (Ref. 19). The solid lines are given by $c_{ij}=c_{ij}^0-\Delta c_{ij}/(T-T_c')$, with $\Delta c_{11}=\Delta c_{12}$; $(\Delta c_{11}\Delta c_{33})=(\Delta c_{13})^2$; $\Delta c_{44}=c_{66}=0$; and $T_c'=553$°C (Ref. 20).

ガラス転位温度は573℃（873K）

[1] Axe J.C., Shirane G., Phys Rev (B), 1, 342-348 (1970)

© 2022 KYOCERA Corporation

1. 序論：α-β Silicaの相転移に関する既存研究

KYOCERA

体積膨張と相転移現象には関係がある[1]

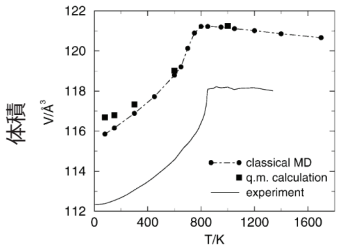


Fig. 1 Volume V per unit cell of quartz as a function of temperature T. Classical molecular dynamics simulation, path integral molecular dynamics (quantum-mechanical calculations) and experimental data (Carpenter et al. 1998) are shown

量子化学計算／分子動力学計算
で相転移付近で体積変化

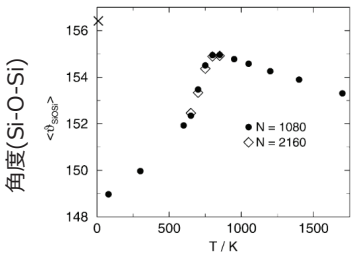


Fig. 12 Average Si–O–Si bond angle $\langle\vartheta_{SOS}\rangle$ as a function of temperature T. The *cross* indicates a simulation where an equilibrated $T = 775$ K system was quenched down to $T = 10$ K

角度(O-Si-O)は変わらず温度上昇と
ともに角度(Si-O-Si)が広がる

SiO_4ユニットは変わらず、ユニット間が変化することで相転移が起こる

[1] Muĕser M. H., Binder K., Phys. Chem. Minerals, 28, 746-755 (2001)

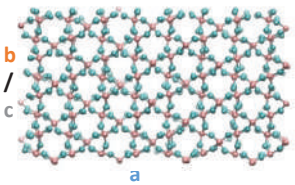
© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA

目的：
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

α-silicaからβ-Silicaへの相転移を例に重要な動きを主成分解析を用いて解析

計算モデル



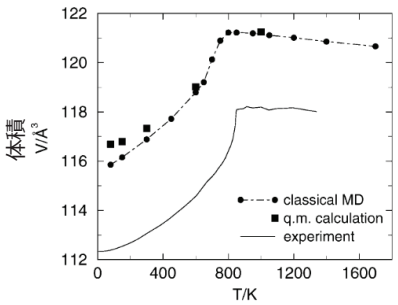
計算詳細

プログラム：lammps
力場：Buckingham potential
温度(K)：300, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1500, 1700, 1900, 2000
速度：600K(Lammpsにより生成)
原子数：1152（4×4×6）
NPT→NVT（サンプリング, PBC

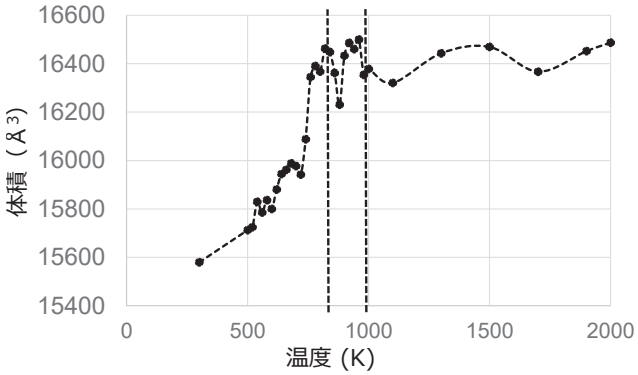
© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA

既存研究[1]



分子動力学（ＭＤ）計算の結果



900K 付近で体積変化が小さくなり、既存研究とおおよそ一致
この結果を主成分解析で解析

[1] MuĚser M. H., Binder K., Phys. Chem. Minerals, 28, 746-755 (2001)

© 2022 KYOCERA Corporation

4. 解析：主成分解析

主成分解析：特徴を損わずに多変量データを低次元空間に縮約する方法

1. 分子の原子座標を質量加重座標に変換

2. 主成分解析を実施

- ✓ 座標の共分散行列を求め、固有値問題を解いて固有値と固有ベクトルを算出
- ✓ 固有値が大きい順にソート
- ✓ 指定した個数の固有ベクトルが並んだ新たな行列を作る
- ✓ さっきつくった新たな行列で元の座標から平均ベクトルを引いた座標を変換

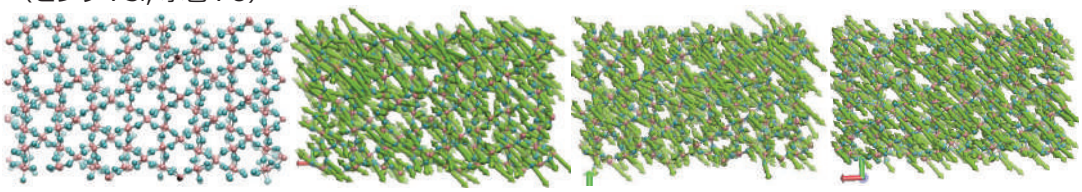
3. 可視化

© 2022 KYOCERA Corporation

5. 結果：第一主成分

700 K
（ピンク：Si, 水色：O）

300 K　700 K　900 K



- ✓ Si-O-Siの角度が大きくなる振動が第一主成分
- ✓ 温度が上昇するほど、ベクトルが揃う

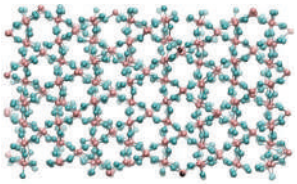
相転移付近でSi-O-Siの角度が大きくなる熱振動が一番主要となる
特に斜め方向へのユニット間の結合が伸張、a軸伸張し、β-Silica構造へ相転移する

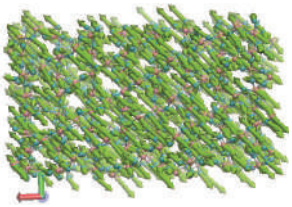
© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA

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

α-silicaからβ-Silicaへの相転移を例に重要な動きを主成分解析を用いて解析





主成分解析：

- ✓ Si-O-Siが大きくなる振動が第一主成分
- ✓ 温度が上昇するほど、各ベクトルの向きが揃う

相転移付近でSi-O-Siの角度が大きくなる熱振動が一番主要となる
特に斜め方向へのユニット間の結合が伸張、a軸伸張し、β-Silica構造へ相転移する

© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA



2. 非可積分系の熱化現象に関して D-Waveを使った物理現象のシミュレーション

増子貴子　石川慧

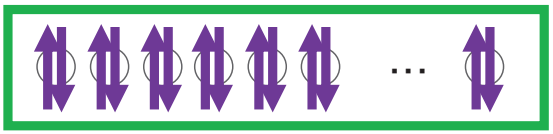
京セラ株式会社

© 2022 KYOCERA Corporation



D-Wave

孤立量子多体系を実現した実験機



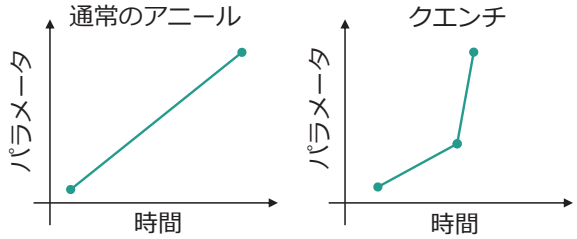
組合せ最適化問題

自然現象のシミュレータ

自然現象のシミュレータとして使ってみよう

© 2022 KYOCERA Corporation

量子クエンチ：系のパラメータを突然変えて状態を時間発展させる



量子アニーリングを用いて量子クエンチ後の孤立量子多体系の緩和現象を観測

数値計算では100量子以下しか計算不可、
量子アニーリングだと1000量子以上のふるまいを計算可

© 2022 KYOCERA Corporation

1. 序論：磁化率の緩和現象の横磁場依存性に関する既存研究

横磁場を持つイジング模型における量子クエンチの非平衡動力学を調査した例[1]

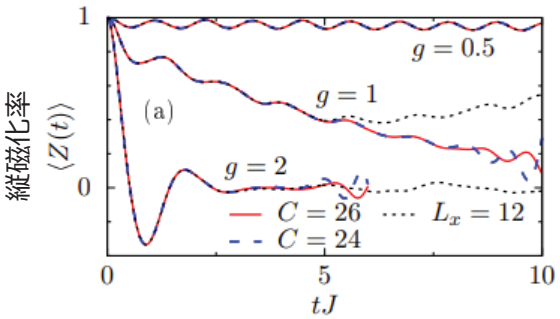
イジングハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -J\left(\sum_{\langle l,m\rangle}\sigma_l^z\sigma_m^z + g\sum_{l=1}^{L}\sigma_l^x\right)$$

初期状態　$|\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$

鎖状モデルなら可積分
二脚梯子モデルなら非可積分 (12 × 2, 13 × 2)





緩和時間

他の非可積分系で実施した場合、同様の熱化が起きるか

[1] Jonas Richter, *et al.*, SciPost Phys. 9, 031 (2020)

15

© 2022 KYOCERA Corporation

2. 目的

孤立量子多体系における量子クエンチ後の緩和メカニズムを解明

孤立量子系を仮定したD-Waveでの緩和現象の観測



D-Wave advantageを使って磁化率の緩和現象を観測

16

© 2022 KYOCERA Corporation

緩和過程の検証に必要な条件を満たすハミルトニアンの設定

$$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H}_1 + s\hat{H}_2 \qquad s = [0,1]$$

$\hat{H}_1$：最適化したいハミルトニアン　$\hat{H}_2$: 量子効果

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{1+\lambda}\left[\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+2}^z\right] - \sum_{i=1}^{L} \omega_i \hat{\sigma}_i^z$$

$$\hat{H}_2 = -\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^x$$

ハミルトニアンの非可積分性を保証するため

- $\lambda \neq 0$
- ω_i=[-0.5, 0.5]の一様分布

© 2022 KYOCERA Corporation

3．計算詳細：ハミルトニアンの設定

D-Waveで解くための設定

$$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H}_1 + s\hat{H}_2 \qquad s = [0,1]$$

$\hat{H}_1$：最適化したいハミルトニアン　$\hat{H}_2$: 量子効果

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{1+\lambda}\left[\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+2}^z\right] - \sum_{i=1}^{L} \omega_i \hat{\sigma}_i^z, \quad \hat{H}_2 = -\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^x$$

D-Waveの最適化の制限

- $\hat{H}_{\text{total}}$はイジング型ハミルトニアンのみ
- 最適化したいハミルトニアン $\hat{H}_1$はz軸方向のみしか扱えない
- 量子効果 $\hat{H}_2$はx軸のみで、強さの制御はs値で行う（計算開始・測定はs=1のみの制限も）
- 得られる結果は$\sum \sigma_i^z$ 値のみ

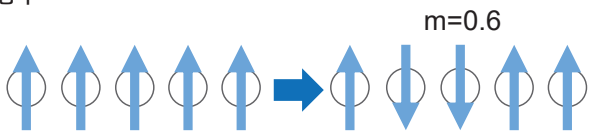
数値計算との比較する物性値を考える必要がある

© 2022 KYOCERA Corporation

4．解析詳細：縦磁化率の計算

縦磁化率：縦方向の磁化率

$m = \|\langle\psi_{\text{init.}}|\psi_{\text{result}}\rangle\|$



最初の状態$\langle\psi_{\text{ini.}}|$を**古典的に準備**し、そこからどれだけ状態が変化したかを確認
リバースアニーリングでの計算が必要

© 2022 KYOCERA Corporation

5．数値計算・D-Wave計算詳細

計算詳細
ターゲットハミルトニアン
：$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H}_1 + s\hat{H}_2$
初期状態：$\psi_{\text{init.}} = |0\rangle^{\otimes L},\ L = 15$

数値計算詳細
ソフト　：Qspin

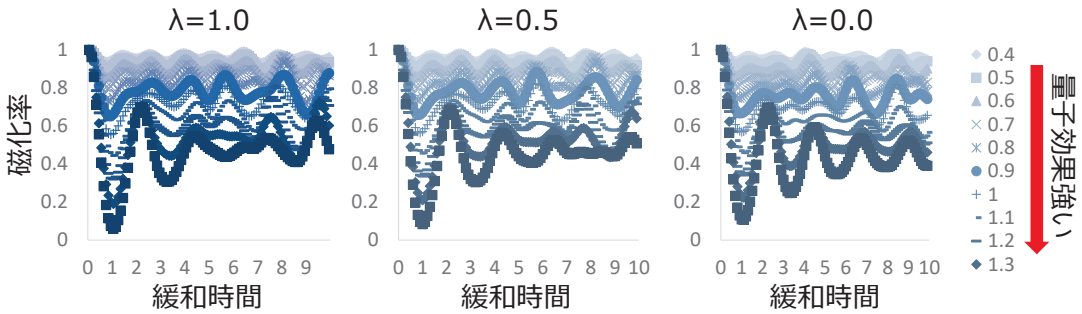
D-Wave計算詳細
実験機器：D-Wave advantage
ソフト　：D-Wave ocean
サンプリング回数
：5,000回
手法　　：リバースアニーリング
埋め込み：全計算で同じ埋め込みを指定

© 2022 KYOCERA Corporation

6 -1. 結果：磁化率のハミルトニアンのλ依存性（数値計算）

KYOCERA

$$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H}_1 + s\hat{H}_2$$
$$\psi_{\text{init.}} = |0\rangle^{\otimes L}, \qquad L = 15$$
$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{1+\lambda}\left[\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \cdot \hat{\sigma}_{i+2}^z\right] - \sum_{i=1}^{L} \omega_i \hat{\sigma}_i^z$$

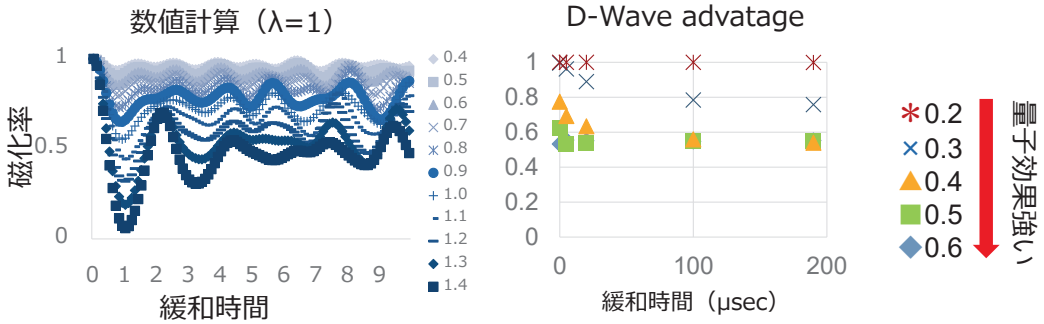


磁化率の量子効果依存性の振る舞いはλの値によって大きく変化しない

© 2022 KYOCERA Corporation

6-2. 結果：量子効果を変えたときの磁化率の計算（15量子ビット）

KYOCERA



D-Waveでは量子効果が大きくなると緩和時間０の時点で既に別の状態になっている

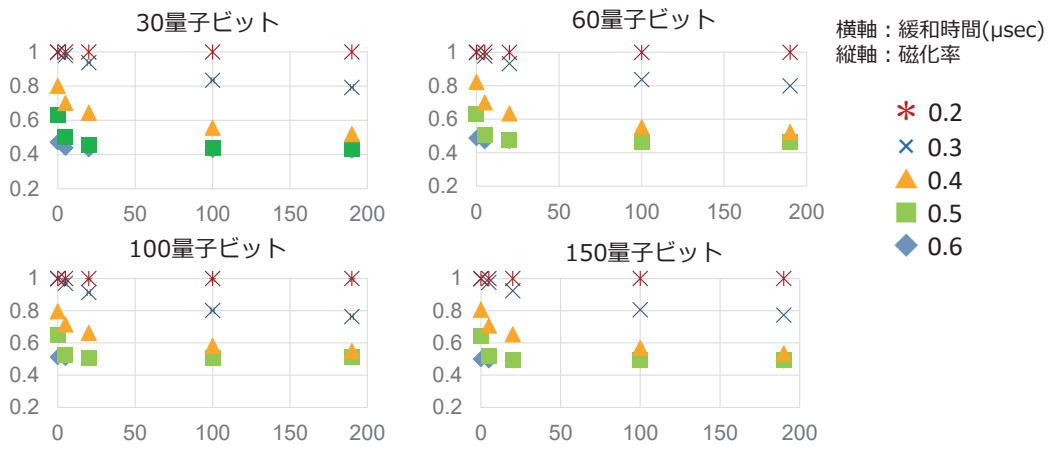
緩和時間０にて磁化率が１ならば数値計算と緩和の傾向が一致

D-Wave自体の問題のため、改良を待つ

© 2022 KYOCERA Corporation

6-3. 結果：30量子ビット以上の緩和状態の観察

KYOCERA



量子ビットが増えても緩和する過程はほとんど変わらない

© 2022 KYOCERA Corporation

7. 結論

KYOCERA

孤立量子多体系における量子クエンチ後の緩和メカニズムを解明

孤立量子系を仮定したD-Waveでの緩和現象の観測

15量子で数値計算を実施し、量子アニーリングの妥当性を検証



緩和時間 0 にて初期構造が保てれば数値計算と緩和の様子が一致

今後の実機の性能向上に期待

© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA



3. 溶媒のネットワークに関して
D-Waveの水クラスター分割問題

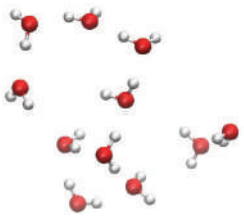
増子貴子
けいはんなリサーチセンター
先進マテリアルデバイス研究所
基盤技術研究部　量子技術課

京セラ株式会社

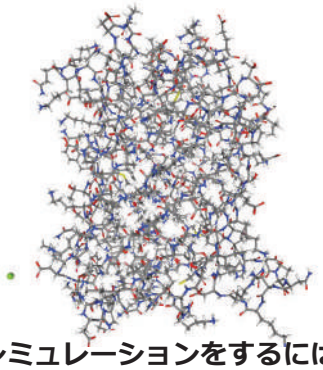
KYOCERA

多電子-多原子核系のシミュレーション

比較的小さな電子系
（およそ100電子）
なら**「高精度」**に解ける



しかし、本当に知りたいのは
「大規模系」！



精度を保ったまま大規模系のシミュレーションをするには？

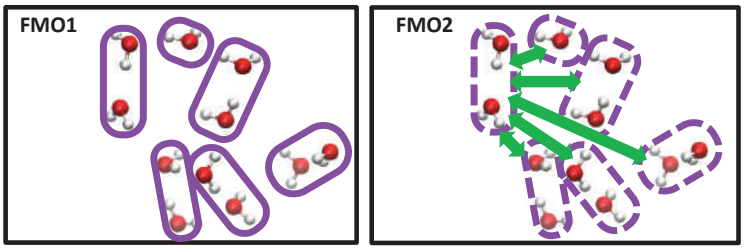
Fragment Molecular Orbital (FMO)法

© 2022 KYOCERA Corporation

1. 序論：FMO法とは？

KYOCERA

Fragment Molecular Orbital (FMO) 法[1]



$$E^{\mathrm{FMO1}} = \sum_I E_I$$

フラグメント

$$E^{\mathrm{FMO2}} = \sum_I E_I + \sum_{I>J} \Delta E_{IJ}$$

フラグメント　フラグメントペア

✓ 小規模なフラグメントの計算だけでいい
✓ 各計算は独立しているため並列化効率が高い
計算コストが低減し、大規模系の計算が可能に！

fragment： I, J
fragment pair： IJ
$\Delta E_{IJ} = E_{IJ} - E_I - E_J$

フラグメント分割の仕方が重要だが、経験的に決めることも多い。

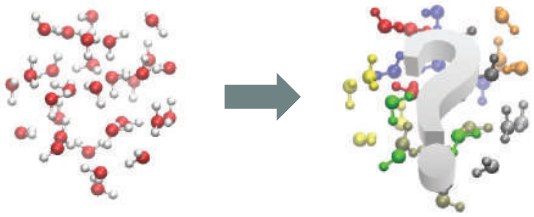
[1] K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayashi, *Chem. Phys. Lett.*, 1999, 313, 701

© 2022 KYOCERA Corporation

2. 目的

KYOCERA

FMO法で用いるフラグメント分割をグラフ分割問題に置き換え、フラグメント分割の自動化を実現



水の分子集団のフラグメント化をD-Waveで実行

© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

KYOCERA

Flow chart

1. 分子構造／分子集団のモデル構造を準備
2. 水1分子を1フラグメントとしたときのFMO2計算を実行
3. 二体間相互作用エネルギーを算出
4. 二体間相互作用エネルギーを辺の重みとしたグラフ構造を構築
5. グラフ分割をD-Waveにて実行
6. 評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）

青: 古典コンピュータで計算
赤 : 量子アニーリングで計算

© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

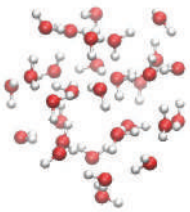
KYOCERA

Flow chart

1. **分子構造／分子集団のモデル構造を準備**
2. **水1分子を1フラグメントとしたときのFMO2計算を実行**
3. 二体間相互作用エネルギーを算出
4. 二体間相互作用エネルギーを辺の重みとしたグラフ構造を構築
5. グラフ分割をD-Waveにて実行
6. 評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）

古典コンピュータで計算

Step 1
31 個の水の分子集団



Step 2

ソフトウェア :GAMESS 2018
計算手法 :HF
基底関数 :6-31G*
溶媒効果 :PCM (誘電率は水を使用)

© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

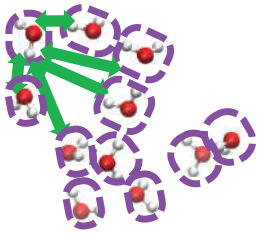
KYOCERA

Flow chart

1. 分子構造／分子集団のモデル構造を準備
2. 水1分子を1フラグメントとしたときのFMO2計算を実行
3. **二体間相互作用エネルギーを算出**
4. 二体間相互作用エネルギーを辺の重みとしたグラフ構造を構築
5. グラフ分割をD-Waveにて実行
6. 評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）

古典コンピュータで計算

Step 3: 二体間相互作用エネルギーを算出



（二体間相互作用エネルギー）＝

フラグメントペア

$$E_{IJ} - E_I - E_J$$

フラグメント

フラグメント：I, J

フラグメントペア：IJ

© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

KYOCERA

Flow chart

1. 分子構造／分子集団のモデル構造を準備
2. 水1分子を1フラグメントとしたときのFMO2計算を実行
3. 二体間相互作用エネルギーを算出
4. **二体間相互作用エネルギーを辺の重みとしたグラフ構造を構築**
5. グラフ分割をD-Waveにて実行
6. 評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）

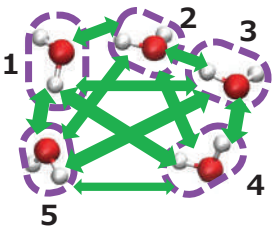
古典コンピュータで計算

Step 4

二体間相互作用エネルギーを辺の重みとした**グラフ構造**を構築

I	J	$\Delta E_{IJ}^{\mathrm{TOT}}$
1	2	-30.4
1	3	-11.3
1	4	-1.2
2	3	-14.5
2	4	-9.9

↑Step3で得た値を使う



© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

KYOCERA

量子アニーリングで計算

Step 5
グラフ分割をD-Waveにて実行

D-Waveで解くためには
イジングハミルトニアンを作成する必要がある

それぞれの頂点が
つながっているか否か

$$H = \sum_{i}^{N} h_i \sigma_i + \sum_{I<j}^{N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \qquad \{\sigma_i\} = \{-1, 1\}$$

二体間相互作用エネルギー
の情報

磁場を弱めながらσ_iの値の組合せ最適化を実現

© 2022 KYOCERA Corporation

3. 計算詳細：解析のフローチャート

KYOCERA

Flow chart

1. 分子構造／分子集団のモデル構造を準備
2. 水1分子を1フラグメントとしたときのFMO2計算を実行
3. 二体間相互作用エネルギー（PIE）を算出
4. 二体間相互作用エネルギーを算出
5. 二体間相互作用エネルギーを辺の重みとしたグラフ構造を構築
6. **評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）**

古典コンピュータで計算

Step 6.

ソフトウェア :GAMESS 2018
計算手法 :HF-D3, MP2, B3LYP-D3, wB97XD
基底関数 :6-31G*
溶媒効果 :gas phase, PCM (water)

分割結果を反映させたFMO2と
全原子計算のエネルギー差を比較し、精度を評価

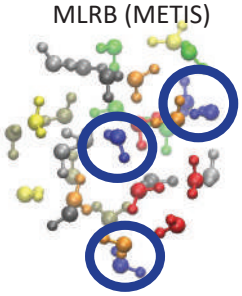
© 2022 KYOCERA Corporation

4. 結果：グラフ分割の様子（8分割の結果）

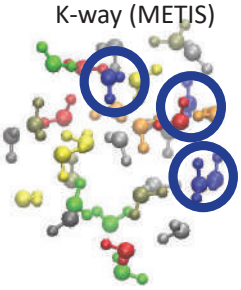
KYOCERA

水の分子集団の分割結果 (緑, 青, 赤, 黄, 橙, 黒, 灰, 深緑).

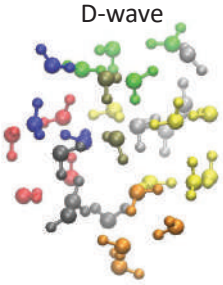
古典計算
MLRB (METIS)



古典計算
K-way (METIS)



量子アニーリング
D-wave



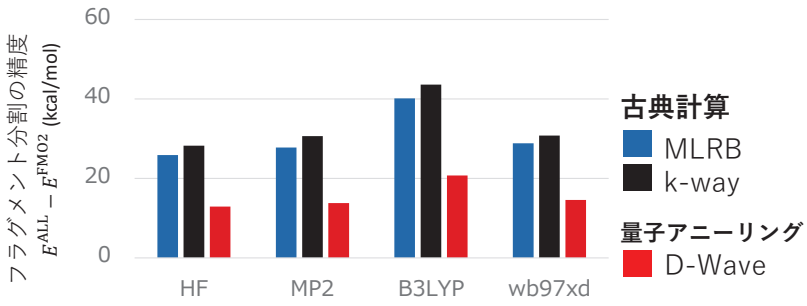
D-Waveの方がきれいに分割しているようにみえる

© 2022 KYOCERA Corporation

4. 結果：エネルギー差の比較(8 分割の結果)

KYOCERA

Step 6. 評価 （FMO2と全原子計算のエネルギー差を比較）



✓D-waveによる分割の精度が一番いい
✓他の分割の結果よりもおよそ半分のエネルギー差となる

D-wave においてフラグメント分割の自動化に適応できる可能性を示唆

© 2022 KYOCERA Corporation

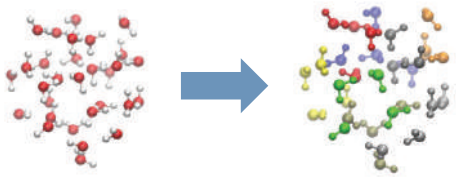
5. 結論

KYOCERA

7

FMO法で用いるフラグメント分割をグラフ分割問題に置き換え、フラグメント分割の自動化を実現

水の分子集団のフラグメント化をD-Waveで実行

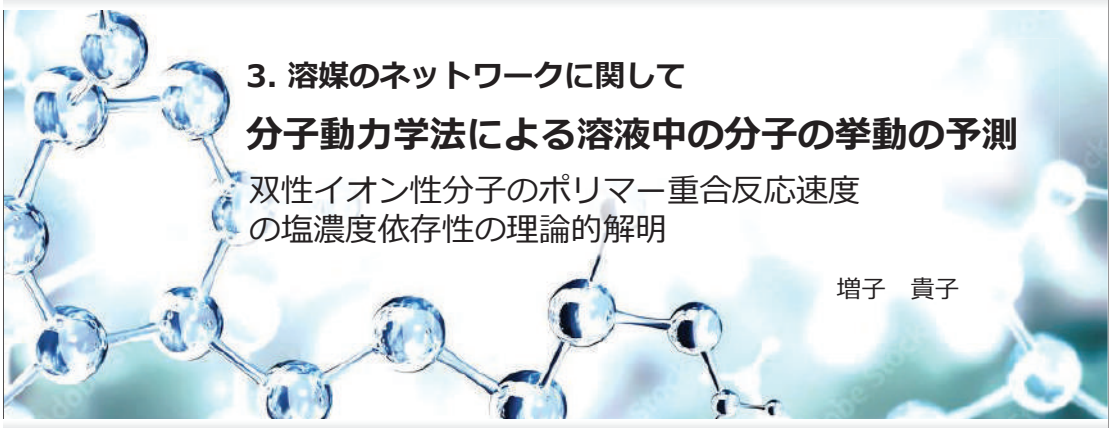


D-wave においてフラグメント分割の自動化に適応できる可能性を示唆

37

© 2022 KYOCERA Corporation

KYOCERA



3. 溶媒のネットワークに関して

分子動力学法による溶液中の分子の挙動の予測

双性イオン性分子のポリマー重合反応速度
の塩濃度依存性の理論的解明

増子　貴子

京セラ株式会社

特開2021-112283(P2021-112283A), 2021.8.5

1. 序論：長寿命型人工股関節

メディカル事業部では長寿命型人工股関節Aqualaを開発
京セラの人工股関節ライナーの約90%に搭載されている主力技術



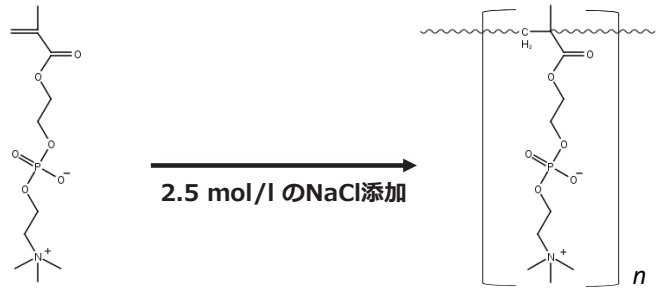
細胞膜と同じ構造をもつMPC分子を、関節面で重合する技術を確立

人工股関節の潤滑性が向上
長寿命化を実現！！

現在、メディカル開発センターでは重合反応系を見直し、処理コスト低減を計画
MPC分子重合反応に最適な条件は計算科学的に予測可能か？

© 2022 KYOCERA Corporation

1. 序論：MPC分子重合反応の既存実験



2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine (MPC)

- ✓ 双性イオン性分子の重合反応速度には塩添加が重要[1-4]
- ✓ 塩添加によりMPC重合反応の活性化自由エネルギーが減少[4]

ΔG ; 12.8 kcal/mol → 4.7 kcal/mol

重合の反応速度上昇において塩添加が与える機構は未解明

[1] Liaw D-J, Huang C-C, Sang H-C, Wu P-L. Polymer, 2000; 41, 6123. [2] Liaw D-J, Lee W-F, Whung Y-C. J Appl. Polym. Sci., 1987; 34, 999. [3] Biegle A, Mathias A, Galin J-C. Macromol Chem. Phys., 2000; 201, 113. [4] Wang H, et al. Eur. Polym. J. 40, 2004, 2287-2290.

© 2022 KYOCERA Corporation

2. 目的

KYOCERA

重合の反応速度上昇において
塩・溶質のモル濃度が与える機構を解明

MPC分子重合反応に最適な条件を計算科学で予測

	塩	[M]	MPC [M]
A	NaCl	0.0	0.50
B		2.5	0.50
C		0.0	0.25
D		2.5	0.25

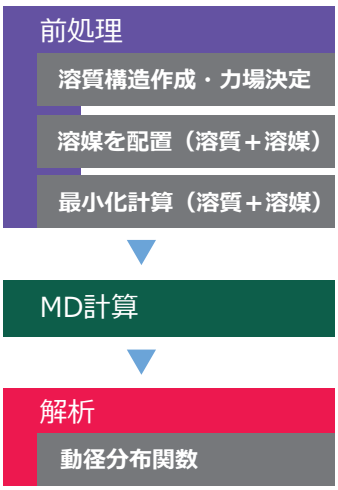
水溶媒中にMPC分子を配置し、
塩モル濃度とMPCモル濃度の異なる条件で、
分子動力学(MD)計算を実行、動径分布関数(RDF)で解析

41

© 2022 KYOCERA Corporation

3-1. 計算詳細：解析手順

KYOCERA



42

© 2022 KYOCERA Corporation

3-2. 計算詳細：解析手順

KYOCERA

前処理

溶質構造作成・力場決定

溶媒を配置（溶質＋溶媒）

最小化計算（溶質＋溶媒）

MD計算

解析

動径分布関数

力場：分子に作用する力のポテンシャル関数

例えば原子間の結合



$$k_r\left(r - r_{\mathrm{eq}}\right)^2$$

$$V(r) = \sum_{\text{bonds}} k_r\left(r - r_{\mathrm{eq}}\right)^2 + \sum_{\text{angles}} k_\theta\left(\theta - \theta_{\mathrm{eq}}\right)^2 + \sum_{\text{dihedrals}} \frac{V_n}{2}\left[1 - \cos(n\phi - \gamma)\right] + \sum_{i<j}\left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^{6}}\right] + \sum_{i<j}\frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}}$$

力場の出来で、MDの精度が決定

© 2022 KYOCERA Corporation

3-2. 計算詳細：解析手順

KYOCERA

前処理

溶質構造作成・力場決定

溶媒を配置（溶質＋溶媒）

最小化計算（溶質＋溶媒）

MD計算

解析

動径分布関数

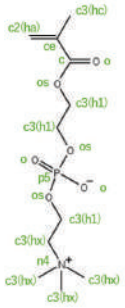
量子化学計算に合うよう、原子一つ一つの力場パラメータと電荷の値を決定

【溶質力場】

Generalized Amber Force Field

【電荷】

Restrained Electrostatic Potential (RESP) charge calculated by B3LYP/6-31G(d)



© 2022 KYOCERA Corporation

3-2. 計算詳細：解析手順

KYOCERA

前処理
- 溶質構造作成・力場決定
- 溶媒を配置（溶質＋溶媒）
- 最小化計算（溶質＋溶媒）

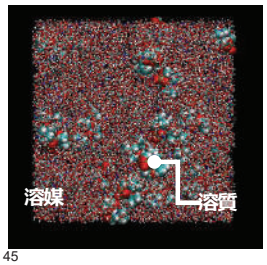
MD計算

解析
- 動径分布関数

体積を実験の密度から決定し、初期構造作成

条件	密度 (g/cm^3) [1]
A	1.023
B	1.137
C	1.022
D	1.123

水分子も全原子あらわに取り扱ってモデル作成



【溶媒力場】
TIP3P model

[1] private discussion

© 2022 KYOCERA Corporation

3-2. 計算詳細：解析手順

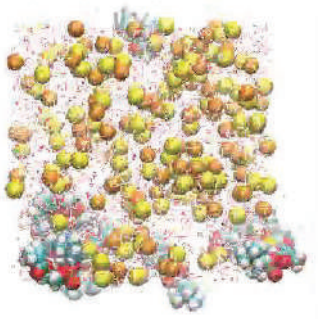
KYOCERA

前処理
- 溶質構造作成・力場決定
- 溶媒を配置（溶質＋溶媒）
- 最小化計算（溶質＋溶媒）

MD計算

解析
- 動径分布関数

温度一定(*NVT*アンサンブル)のMD計算



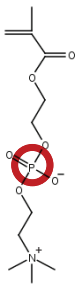
周期境界条件, 300 K
2 nsec (= 1,000,000 step × 2 fsec)
(1本あたり8 hour/8 core)

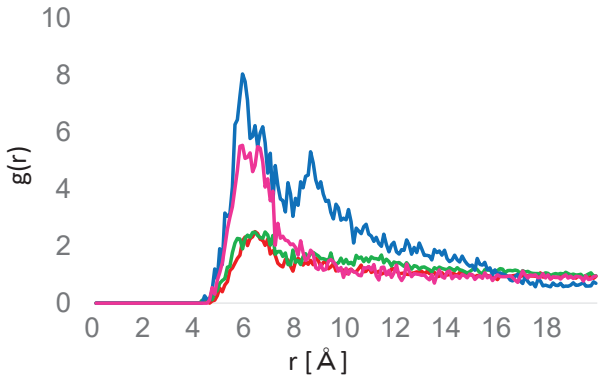
© 2022 KYOCERA Corporation

4-1. 結果：塩・溶質モル濃度の重合への影響

KYOCERA

MPC重心間の動径分布関数





	塩 [M]	MPC [M]
A	0.0	0.50
B	2.5	0.50
C	0.0	0.25
D	2.5	0.25

溶質モル濃度が0.25 Mの**条件 C**と**条件 D**では凝集

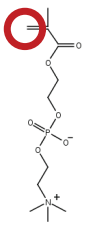
疎水効果の影響

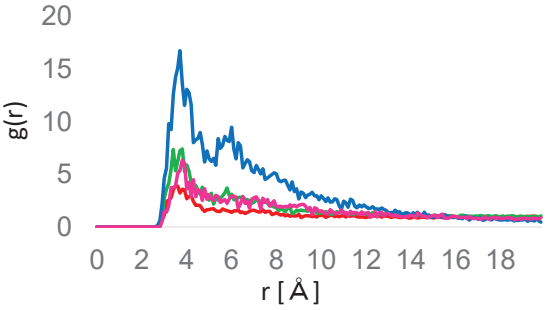
© 2022 KYOCERA Corporation

4-1. 結果：塩・溶質モル濃度の重合への影響

KYOCERA

重合反応部間の動径分布関数





	塩 [M]	MPC [M]
A	0.0	0.50
B	2.5	0.50
C	0.0	0.25
D	2.5	0.25

条件 Dでのみ重合反応部間距離が近い構造をとりやすい

→塩添加によりMPC分子内の電荷を弱め、分子配向を制御

MPC溶質モル濃度は凝集に、塩のモル濃度は重合反応部同士の配向に影響

MPC重合速度と重合反応部間の動径分布関数に相関

そこから溶質モル濃度と塩モル濃度の最適値を予測できる可能性？

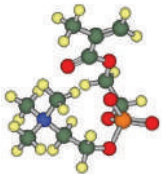
© 2022 KYOCERA Corporation

5. 結論

KYOCERA

重合の反応速度上昇において
塩・溶質のモル濃度が与える機構を解明

	NaCl [M]	MPC [M]
A	0.0	0.50
B	2.5	0.50
C	0.0	0.25
D	2.5	0.25



- ✓ 0.25 MではMPC分子が凝集
  → 疎水効果の影響
- ✓ 更に塩添加で重合反応部間距離が近接するMPC分子が増加
  → 塩添加によりMPC分子内の電荷を弱め、分子配向を制御

MPC重合速度と重合反応部間の動径分布関数に相関
そこから溶質モル濃度と塩モル濃度の最適値を予測できる可能性を示唆

© 2022 KYOCERA Corporation

◆京セラ株式会社
先進マテリアルデバイス研究所
基盤技術研究部　材料数理課
高橋　卓大

【経歴】
2018年3月　東北大学大学院 理学研究科 数学専攻 博士課程修了
石川昌治研究室, 専門:幾何学(トロピカル幾何, 特異複素平面曲線)
2018年4月　京セラ株式会社入社 総合研究所 基盤技術研究部に配属
2019年4月　同社 先進マテリアルデバイス研究所へ異動
業務内容: データ駆動型材料・製品開発のためのデータ解析技術の構築

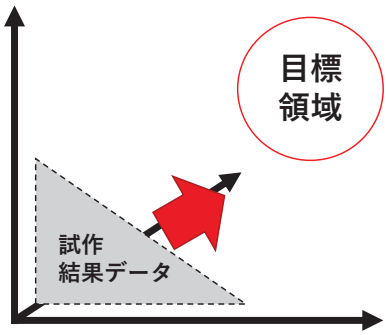
© 2022 KYOCERA Corporation

報告内容

- 弊社社内におけるデータ解析事例
  (ML＋多目的最適化、トレードオフ解析)
- 弊社社内における、「数学」活用に必要なこと、
  数学普及活動

© 2022 KYOCERA Corporation

開発現場：複数の製品／材料特性を最適化したい



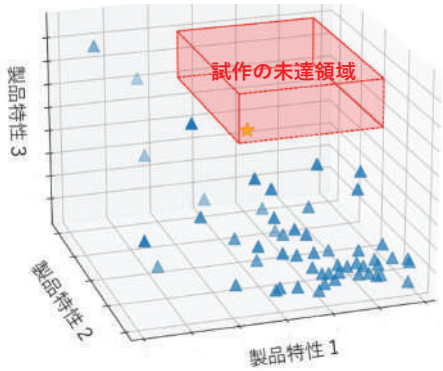
➡「多目的最適化」が適用可能

(機械学習によるモデリングなども併用)

© 2022 KYOCERA Corporation

「多目的最適化」では特性が両立した解を求めることができる
➡弊社製品においても、機械学習との合わせ技で、良好な結果を確認

弊社製品データの試作データ(▲)と進化計算による多目的最適化の結果(★)



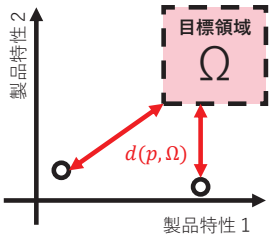
- PLS回帰(非線形項追加)でフィッティング
- SPEA2アルゴリズムで最適化

© 2022 KYOCERA Corporation

多目的最適化では「なぜその解が良いか」に答えられない？
➡もっと単純に「**データ点の目標領域からの距離を統計的に解析**」

Ω：目標領域(半開区間を想定)
p：データ点(標準化済み)

$$s(p) := (-1) \times d(p, \Omega)$$



この値を目的変数として回帰学習＋特徴量重要度を計算

➡抽出された重要パラメータを重点的に試作することで、
製品の試作回数が**以前の1/3**に低減

© 2022 KYOCERA Corporation

京セラ社内での数学活用に必要だと思われること

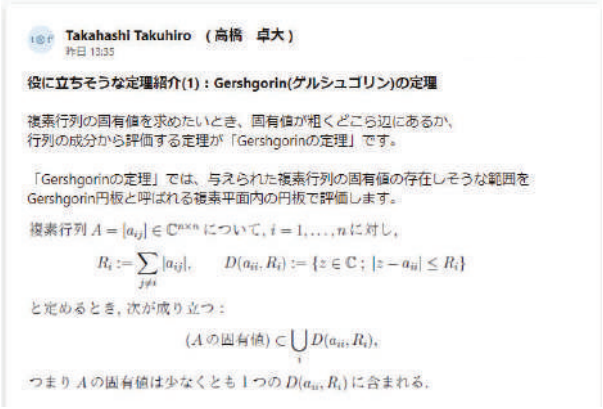
- 数学から離れてしまった人が多い
- 数学を「分かった気にさせる」ことが必要
- 「数学」という言葉に垣根の高さ

➡多くの人が興味を持てば、「使える」場が広がるはず
垣根を低くする取り組みが必要

➡「数学」普及活動を推進中

© 2022 KYOCERA Corporation

「数学」普及活動の例：社内SNSを使った数学相談、コラムなどの投稿



Takahashi Takuhiro （高橋 卓大）
昨日 13:35

役に立ちそうな定理紹介(1)：Gershgorin(ゲルシュゴリン)の定理

複素行列の固有値を求めたいとき、固有値が粗くどこら辺にあるか、
行列の成分から評価する定理が「Gershgorinの定理」です。

「Gershgorinの定理」では、与えられた複素行列の固有値の存在しそうな範囲を
Gershgorin円板と呼ばれる複素平面内の円板で評価します。

複素行列 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$ について，$i=1,\dots,n$ に対し，

$$R_i:=\sum_{j\neq i}|a_{ij}|,\qquad D(a_{ii},R_i):=\{z\in\mathbb{C}\,;\,|z-a_{ii}|\le R_i\}$$

と定めるとき，次が成り立つ：

$$(A\text{の固有値})\subset\bigcup_i D(a_{ii},R_i),$$

つまり A の固有値は少なくとも1つの $D(a_{ii},R_i)$ に含まれる．

© 2022 KYOCERA Corporation



ビュワー数も多く、評判は良さそう

※本SNSコミュニティにて松谷先生のご講演「ものづくりの数学」も紹介させて頂きました

© 2022 KYOCERA Corporation

報告内容(まとめ)

- 弊社社内におけるデータ解析事例
  (ML＋多目的最適化、トレードオフ解析)
- 弊社社内における、「数学」活用に必要なこと、数学普及活動

© 2022 KYOCERA Corporation

Interpretation of the hidden symmetry of hydrogen atoms using Clifford algebra

Yuto ITO

Tokyo, Japan

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 [1]. 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.

References

[1] M. Bander and C. Itzykson, Group theory and the hydrogen atom (I). Rev. Mod. Phys. **38**, 330 (1966). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.38.330.

Clifford 代数を用いた
水素原子の隠れた対称性の解釈

2022年9月9日 9:40-10:40

伊藤祐斗

@材料科学における幾何と代数III

本講演のキーワード

材料科学における幾何と代数

水素原子
元素周期表

コンパクト化
立体射影
Hopf fibration

Lie代数・Lie群
Clifford 代数

対称性

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

※非相対論的水素原子の束縛状態に限定します

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

球対称な系のエネルギー

5

球対称性を持つポテンシャルに対する Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}-V(r)\right]\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r})$$

球極座標において変数分離することが可能であり解は

$$E_{n,l}=n,\ l\ \text{の関数}$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$n,l\geq 0,\ m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$$

と書かれる．Y_{lm} は球面調和関数，R_{nl} は動径方向関数（V に依存する），

同じエネルギーを持つ状態は複数ある（＝縮退）．

縮退数は $2l+1$.

水素原子のエネルギー

6

非相対論的水素原子の Schrödinger 方程式は以下である.

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}-\frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r}),\ \kappa=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

束縛状態のエネルギー（<0）は次のようになる.

$$E_{n,l}=-\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n,l\geq 0$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

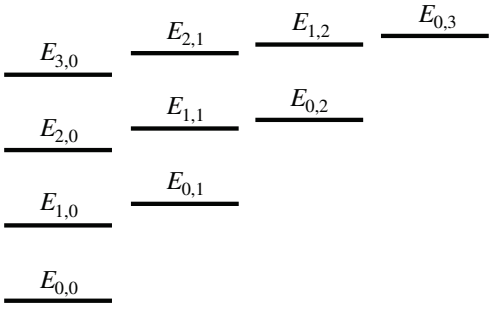
$$m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$$

と書かれる．R_{nl} は Laguerre 陪多項式を用いて書かれる.

水素原子における偶然縮退

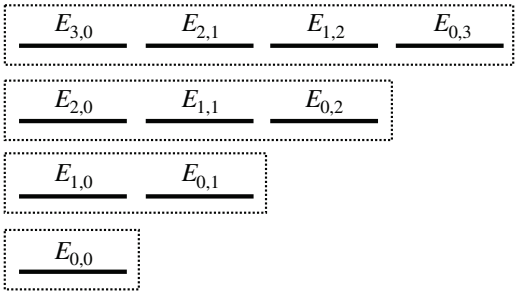
一般の球対称ポテンシャルの場合

$E_{n,l} = n,\ l$ の関数



水素原子の場合

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n,l \geq 0$$



水素原子の場合，$n+l$ が同じならば同じエネルギー（= 縮退）．

球対称性では説明できない高度な縮退＝**偶然縮退**がある．

どれくらい縮退するか？

水素原子のエネルギーは $N = n+l+1$ に依存する．

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n,l \geq 0,\ m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

	l=0 S軌道	l=1 P軌道	l=2 D軌道	l=3 F軌道	l=4 G軌道	縮重度 N^2	スピン軌道数 $2N^2$
N=1	1					1	2
N=2	1	3				4	8
N=3	1	3	5			9	18
N=4	1	3	5	7		16	32
N =5	1	3	5	7	9	25	50

偶然縮退と周期表の関係

周期表の構造に水素原子における縮重度が反映されている！

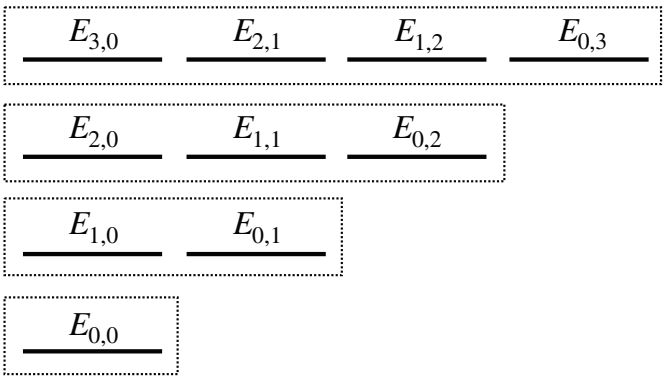
	L=0 S軌道	L=1 P軌道	L=2 D軌道	L=3 F軌道	L=4 G軌道	縮重度 N^2	スピン軌道数 $2N^2$
N=1	1					1	2
N=2	1	3				4	8
N=3	1	3	5			9	18
N=4	1	3	5	7		16	32
N=5	1	3	5	7	9	25	50

2	H																												He
8	Li	Be															B	C	N	O	F	Ne							
8	Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar							
18	K	Ca											Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
18	Rb	Sr											Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
32	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
32	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

※実際には原子は多体系なので水素原子の結果以上のことが必要.
1s → 2s → 2p → 3s → 3p → 4s → 3d → 4p → 5s → 4d → 5p → 6s
の順で大まかには収容されていく.

隠れた対称性

偶然縮退が生じる理屈は何だろうか？
一般には対称性があると縮重度が大きくなる.
球対称性より大きい**隠れた対称性**が示唆される.



目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

角運動量保存則とSO(3)対称性

球対称性を持つポテンシャルに対する Schrödinger 方程式

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - V(r) \right] \Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

角運動量ベクトル

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

$$L_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

角運動量保存則

$$\left[H, L_i \right] = HL_i - L_i H = 0$$

so(3) Lie 代数の生成元となる.

$$\left[L_i, L_j \right] = L_i L_j - L_j L_i = \mathrm{i}\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

LRL ベクトル保存則と?対称性

水素原子に対する Schrödinger 方程式

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

LRL ベクトル

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) - \frac{\kappa\boldsymbol{r}}{r}$$

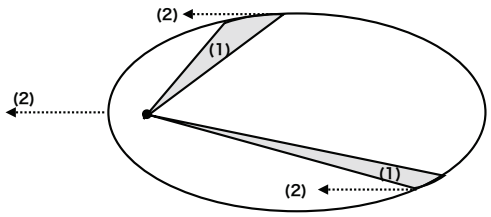
LRLベクトル保存則

$$\left[H, M_i\right] = HM_i - M_iH = 0$$

これらは有限次元 Lie 代数とはならない.

$$\left[L_i, L_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k,\ \left[M_i, L_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_k,\ \left[M_i, M_j\right] = -\mathrm{i}\hbar\frac{2H}{m_e}\epsilon_{ijk}L_k$$

保存則の古典力学的解釈



(1) 角運動量保存則の意味

・方向：運動する平面の法線方向，大きさ：面積速度に比例

→運動する平面が不変，面積速度が一定.

・三成分の保存はエネルギー保存と独立な情報

(2) LRLベクトル保存則の意味

・方向：原点から近日点を指す向き，大きさ：離心率と比例（$M = e\kappa$）

→近日点が不変，離心率が一定.

・特に「近日点が不変」は角運動量及びエネルギー保存と独立な情報

トータルで５つの独立な保存量→最大超可積分系の代表例

水素原子に潜むso(4)対称性

エネルギー $E<0$ の部分空間に制限→演算子 H をスカラー E と見なせる.

添字に対して反対称となる形式的な記号

$$L_{23}=\frac{L_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{31}=\frac{L_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{12}=\frac{L_3}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{14}=\frac{\tilde{M}_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{24}=\frac{\tilde{M}_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{34}=\frac{\tilde{M}_3}{\mathrm{i}\hbar}$$

$$\text{但し,}\quad \tilde{\boldsymbol{M}}=\boldsymbol{M}\sqrt{\frac{m_e}{-2E}}$$

を導入すると,

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}$$

となるが, これは **Lie 代数** so(4) を成すことを表す.

力学的対称性, **隠れた対称性**, 等と呼ばれることがある.

立体射影とコンパクト化

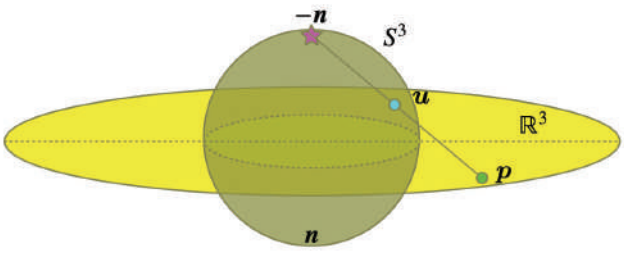
水素原子の Schrödinger 方程式を運動量空間で書くと積分方程式になる.

$$\frac{1}{\left(\boldsymbol{p}^2+p_0^2\right)}\frac{m_e\kappa}{\pi^2\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^3}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\psi}\left(\boldsymbol{p}'\right)}{\left|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'\right|^2}=\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}),\ p_0^2=-2m_eE<0$$

立体射影変換で**コンパクト多様体である超球面 S^3 上の積分方程式**となる.

$$\boldsymbol{u}=\frac{p_0^2-\boldsymbol{p}^2}{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}\boldsymbol{n}+\frac{2p_0}{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}\boldsymbol{p},\ \tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})=\sqrt{\frac{2\pi^2}{p_0}}\left(\frac{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}{2p_0}\right)^2\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}),\ G\left(\boldsymbol{x}\right)=\frac{1}{4\pi^2\left|\boldsymbol{x}\right|^2}$$

$$\tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})=\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar}\int_{S^3}d\Omega\left(\boldsymbol{u}'\right)\tilde{\Psi}\left(\boldsymbol{u}'\right)G\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'\right)$$



超球面 S^3 上自由粒子との等価性

積分核 $G(\boldsymbol{x}) = \left(4\pi^2 |\boldsymbol{x}|^2\right)^{-1}$ の正体は S^3 上自由粒子の Green 関数.

$$\Delta_{S^3} G(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}') = -\delta(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}')|_{S^3}$$

ここで Δ_{S^3} は S^3 上の Laplace-Beltrami 作用素.

$$\Delta_{\mathbb{R}^4} = \frac{1}{u^3}\frac{\partial}{\partial u}\left(u^3 \frac{\partial}{\partial u}\right) + \frac{\Delta_{S^3}}{u^2}$$

Stokesの定理等より, **S^3 上の自由粒子の Schrödinger 方程式**に帰着.

$$\Delta_{S^3}\tilde{\Psi}(\boldsymbol{u}) = \Lambda\tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})$$

Laplace-Beltrami 作用素 Δ_{S^3} と前述の $L_{\mu\nu}$ の関係

$$\Delta_{S^3} = \sum_{1\le\mu<\nu\le 4} \tilde{L}_{\mu\nu}^2, \quad (p_0^2 + p^2)^{-2}\tilde{L}_{\mu\nu}(p_0^2 + p^2)^2 = L_{\mu\nu}$$

$\tilde{L}_{\mu\nu}$ は変換後の空間 $\mathbb{R}^4$ あるいは S^3 の回転生成子である.

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化 立体射影

3. 線形化 Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

線形化の歴史

■ 天体力学が起源
- 古くは Euler が１次元上の３体問題の解析に使った. （18C）
- 時間・空間の変数変換により力の発散を取り除く. （正則化）
- 調和振動子の運動方程式に変換される. （線形化）

■ ２次元バージョンの発見（19C~20C前半）
- Goursat, Bohlin, Levi-Civita らによる
- 共形変換の一種を用いることで2D Kepler → 2D 調和振動子

■ 高次元化の取り組み（20C中盤まで）
- 長らく３次元バージョンは見つからず.
- 3D Kepler → 3D 調和振動子 は可能？

Kustaanheimo-Stiefel 変換

1960s に発明された３次元バージョン.
Kustaanheimo-Stiefel（KS）変換は三次元を四次元に埋め込む変換.

$$\Phi_{KS} : \mathbb{R}^3 \times S^1 \to \mathbb{R}^4 : (x_1, x_2, x_3, \sigma) \mapsto (q_1, q_2, q_3, q_4)$$

$$\begin{aligned} x_1 &= r\cos\theta \\ x_2 &= r\sin\theta\cos\phi \\ x_3 &= r\sin\theta\sin\phi \end{aligned}$$

$r > 0,\ 0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi < 2\pi,\ 0 \le \sigma < 4\pi$

球極座標

$$\begin{aligned} q_1 &= \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\sigma+\phi}{2}\right) \\ q_2 &= \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\sigma+\phi}{2}\right) \\ q_3 &= \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\sigma-\phi}{2}\right) \\ q_4 &= \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\sigma-\phi}{2}\right) \end{aligned}$$

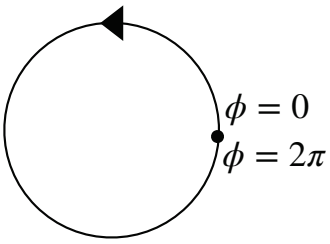
Cylindrical 座標
Euler の四次元座標

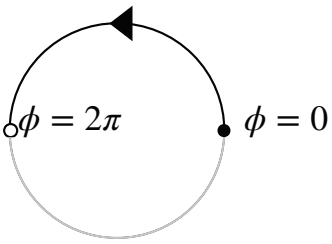
どんな変換か？

$r = 1, \theta = 0, \ \sigma = 0$ で固定して考える

$$x_1 = 0$$
$$\boxed{\begin{aligned} x_2 &= \cos\phi \\ x_3 &= \sin\phi \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} q_1 &= \cos\left(\frac{+\phi}{2}\right) \\ q_2 &= \sin\left(\frac{+\phi}{2}\right) \end{aligned}} \quad \begin{aligned} q_3 &= \cos\left(\frac{-\phi}{2}\right) \\ q_4 &= \sin\left(\frac{-\phi}{2}\right) \end{aligned}$$





一周しても戻れない，戻るには二周する必要.

Hopf fibration

KS変換（の $r = 1$ への制限）$\Phi_{KS}|_{r=1} : S^2 \times S^1 \to S^3$は**ねじれ**がある

$S^2 \times S^1$ と S^3 は局所的には似ているが全体としては異なることを示唆.
→ こういった状況を記述するのが**ファイバー束**

Hopf fibration: $S^1 \hookrightarrow S^3 \to S^2$

ファイバー, ファイバー束, 底空間

球面 S^2 の各点に円周 S^1 があるが，それらがねじれて繋がっている

※ Hopf fibrationにはファミリーがある.

$S^0 \hookrightarrow S^1 \to S^1$ ← Levi-Civita 変換に相当

$S^3 \hookrightarrow S^7 \to S^4$ ← 5次元水素原子-8次元調和振動子対応

$S^7 \hookrightarrow S^{15} \to S^8$ ← 9次元水素原子-16次元調和振動子対応

$\mathbb{R}^4$ 上調和振動子との等価性

水素原子 Schrödinger 方程式

$$H\Psi(\boldsymbol{r}) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

に対して変数 $k = -\dfrac{8m_eE}{\hbar^2}$, $\lambda = \dfrac{8m_e\kappa}{\hbar^2}$ を導入して KS 変換を行うと,

４次元調和振動子の Schrödinger 方程式に帰着する.

$$\left[-\nabla_{\boldsymbol{q}}^2 + kq^2\right]\Psi(\boldsymbol{q}) = \lambda\Psi(\boldsymbol{q})$$

波動関数が σ に陽によらないという拘束条件から以下の式も成立する.

$$\left(q_1\frac{\partial}{\partial q_2} - q_2\frac{\partial}{\partial q_1} + q_3\frac{\partial}{\partial q_4} - q_4\frac{\partial}{\partial q_3}\right)\Psi(\boldsymbol{q}) = 0$$

SO(4) 対称性は何処にあるか？

四次元調和振動子のSchrödinger方程式

$$\left[-\nabla_{\boldsymbol{q}}^2 + kq^2\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = \lambda\Psi(\boldsymbol{q})$$

の対称性は $\mathrm{su}(4) \simeq \mathrm{so}(6)$ である（n次元調和振動子は $\mathrm{su}(n)$）.

$\boxed{\mathrm{so}(2)} \oplus \boxed{\mathrm{so}(4)} \subset \boxed{\mathrm{so}(6)}$ → 4D調和振動子の対称性

拘束条件の生成元

$$q_1\frac{\partial}{\partial q_2} - q_2\frac{\partial}{\partial q_1} + q_3\frac{\partial}{\partial q_4} - q_4\frac{\partial}{\partial q_3}$$

からなる部分 Lie 代数

拘束条件の生成元と可換な演算子（中心元）からなる部分 Lie 代数

↓

水素原子の対称性に相当する

二つの手法の比較

手法	コンパクト化	線形化
舞台	運動量空間	位置空間
幾何学	立体射影変換	**Hopf fibration**
行先	S^3	$\mathbb{R}^4$
帰着するモデル	自由粒子	調和振動子

両手法ともに低次元空間から高次元を発想する手法である.
そもそもなぜ高次元発想の仕組みを解釈したい

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

Clifford代数とは

■ 内積空間 $\mathbb{R}^n$

（反対称テンソル代数）

$e_1, e_2, \cdots, e_n,\ \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ （正規直交基底）

■ 外積代数 $\bigwedge(\mathbb{R}^n)$

（量子化）

$\{e_{i_1} e_{i_2} \cdots e_{i_k} \mid 0 \le k \le n,\ 1 \le i_1 \le i_2 \le \cdots \le i_k \le n\}$ を基底とする線形空間

$e_i e_j = -e_j e_i\ (i \neq j)$ （反対称性）

■ Clifford 代数 Cl_n

線形空間としては外積代数と同型（$\mathbb{R}$ 上代数としては異なる）

$e_i^2 = -\langle e_i, e_i \rangle = -1$ を課す（量子化）

内積・外積が代数の内部演算に組み込まれている（cf. $\langle e_i, e_j \rangle \in Cl_n$ ）

→ 面積・体積・回転，といった幾何学的な量・操作を統一的に扱える

Clifford代数の例

■ 例1 $Cl_1 \simeq \mathbb{C}$ （複素数体との $\mathbb{R}$ 上代数同型）

基底：0重ベクトル 1, 1重ベクトル e_1 に対して，

$e_1^2 = -1$（量子化の式）

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

$e_1 = \mathrm{i}$（ i は $\mathbb{C}$ の虚数単位元）

■ 例2 $Cl_2 \simeq \mathbb{H}$（四元数体との $\mathbb{R}$ 上代数同型）

基底：0重ベクトル 1, 1重ベクトル e_1, e_2, 2重ベクトル $e_1 e_2$ に対して，

$e_1^2 = e_2^2 = -1,\ (e_1 e_2)^2 = e_1 e_2 e_1 e_2 = -e_1^2 e_2^2 = -1$ （量子化の式）

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

$e_1 = \mathrm{i}, e_2 = \mathrm{j}, e_1 e_2 = \mathrm{k}$（ i, j, k は $\mathbb{H}$ の虚数単位元）

$\mathbb{R}$ 上代数同型のまとめ

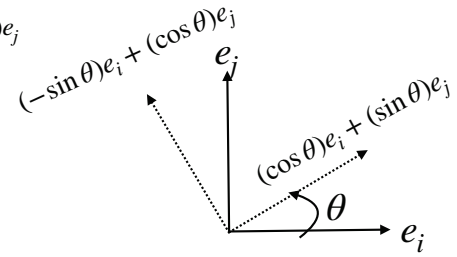
Clifford 代数	同型な代数
Cl_0	$\mathbb{R}$
Cl_1	$\mathbb{C}$
Cl_2	$\mathbb{H}$
Cl_3	$\mathbb{H} \oplus \mathbb{H}$
Cl_4	$\mathbb{H}(2)$
Cl_5	$\mathbb{C}(4)$
Cl_6	$\mathbb{R}(8)$
Cl_7	$\mathbb{R}(8) \oplus \mathbb{R}(8)$
Cl_8	$\mathbb{R}(16)$

代表的な応用：回転の表現

Euler の式の拡張 $\exp\left(\theta\frac{e_ie_j}{2}\right) = \cos\frac{\theta}{2} + e_ie_j\sin\frac{\theta}{2}$ を用いて回転を表現できる.

$$\begin{aligned}\exp\left(\theta\frac{e_ie_j}{2}\right)e_i\exp\left(-\theta\frac{e_ie_j}{2}\right) &= \left(\cos\frac{\theta}{2} + e_ie_j\sin\frac{\theta}{2}\right)e_i\left(\cos\frac{\theta}{2} - e_ie_j\sin\frac{\theta}{2}\right)\\ &= \left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right)e_i + \left(2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)e_j\\ &= (\cos\theta)e_i + (\sin\theta)e_j\end{aligned}$$

$$\exp\left(\theta\frac{e_ie_j}{2}\right)e_j\exp\left(-\theta\frac{e_ie_j}{2}\right) = (-\sin\theta)e_i + (\cos\theta)e_j$$



1重ベクトル e_i は n 次元ベクトル

2重ベクトル e_ie_j は n 次元空間の回転生成子（ $\mathrm{so}(n)$ を構成）

$\exp(e_ie_j/2)$ の随伴表現は n 次元空間の回転表現（ $\mathrm{SO}(n)$ を構成）

Clifford 代数における高次元化

Cl_3 を考える.

2重ベクトルたち：$L_{23}=\frac{1}{2}e_2e_3,\ L_{31}=\frac{1}{2}e_3e_1,\ L_{12}=\frac{1}{2}e_1e_2$

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1\le\mu,\nu,\sigma,\rho\le 3$$

so(3) を構成する.

1重ベクトルたち：$L_{14}=\frac{1}{2}e_1,\ L_{24}=\frac{1}{2}e_2,\ L_{34}=\frac{1}{2}e_3$

を加えると,

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1\le\mu,\nu,\sigma,\rho\le 4$$

so(4) を構成する.

一段高い回転を表現可能.

水素原子 so(4) のおさらい

角運動量：$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},\ L_{23}=\frac{L_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{31}=\frac{L_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{12}=\frac{L_3}{\mathrm{i}\hbar}$

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1\le\mu,\nu,\sigma,\rho\le 3$$

so(3)を構成する.

LRLベクトル：$\tilde{\boldsymbol{M}}=\sqrt{\frac{m_e}{-2E}}\left[\frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-\frac{\kappa\boldsymbol{r}}{r}\right]$

$$L_{14}=\frac{\tilde{M}_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{24}=\frac{\tilde{M}_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{34}=\frac{\tilde{M}_3}{\mathrm{i}\hbar}$$

を導入すると,

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}$$

となるが，これは **Lie 代数** so(4) を成すことを表す.

一段高い次元に持ち上がるのが立体射影と関係.

水素原子 so(4) とClifford代数 Cl_3 の対応

■ 水素原子におけるso(4)

空間反転に対する振る舞いの異なる三次元空間の物理量,

$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ は**「極性ベクトル」**（空間反転で奇）

$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) - \frac{\kappa \boldsymbol{r}}{r}$ は**「軸性ベクトル」**（空間反転で偶）

これらを混合することで高次元の代数 so(4) の構造が見えてきた.

■ Clifford 代数 Cl_3

空間反転に対する振る舞いの異なる元

1重ベクトル e_1, e_2, e_3 は**「極性ベクトル」**（空間反転で奇）

2重ベクトル e_1e_2, e_2e_3, e_3e_1 は**「軸性ベクトル」**（空間反転で偶）

を混合した演算が可能である.

これらを混合することで高次元の代数 so(4) の構造が見えてきた.

Clifford 代数を用いたHopf fibration

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ のノルム1の要素の集合は S^3 と見做せる.

この要素は,

$$Q = \exp(-\psi \mathrm{k})\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi\,\mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi\,\mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$

$$= \sin\psi\cos\frac{\theta}{2} + \cos(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{i} + \sin(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{j} + \cos\psi\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}$$

$$0 \le \psi \le 2\pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

Euler の四次元座標

と書ける.

Clifford 代数を用いたHopf fibration

41

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ のノルム1の要素の集合は S^3 と見做せる.

この要素は,

$$Q = \exp(-\psi \mathrm{k})\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi\,\mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi\,\mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$

Euler の四次元座標

$$= \sin\psi\cos\frac{\theta}{2} + \cos(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{i} + \sin(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{j} + \cos\psi\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}$$

$$0 \le \psi \le 2\pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

と書ける.

$$\bar{Q}\mathrm{k}Q = -\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi\,\mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi\,\mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)\mathrm{k}\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi\,\mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi\,\mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$

$$= \sin\theta\cos\phi\,\mathrm{i} + \sin\theta\sin\phi\,\mathrm{j} + \cos\theta\,\mathrm{k} \longrightarrow \text{三次元極座標}$$

$$0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

を考えると, これの全体は S^2 と見做せる.

写像 $f(Q) = \bar{Q}\mathrm{k}Q$ は S^3 から S^2 への写像と見做せる.

さらに $\mathrm{Ker}(f) = S^1$ より, Hopf fibration と見做せる.

スピン群による Hopf fibration の解釈

42

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ では 1~3次元のスピン群を考えることができる.

$$G = \mathrm{Spin}(3) = \left\{h \in \mathbb{H} \,|\, |h| = 1\right\} \simeq \mathrm{SU}(2) \simeq S^3$$

$$H = \mathrm{Spin}(2) = \{e^{\mathrm{k}t} \,|\, 0 \le t < 2\pi\} \simeq \mathrm{U}(1) \simeq S^1$$

$$K = \mathrm{Spin}(1) = \{1, -1\} \simeq \mathrm{O}(1) \simeq \mathbb{Z}_2$$

G は e_1, e_2, e_1e_2 より生成, H は e_1e_2 より生成.

スピン群による Hopf fibration の解釈

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ では 1~3次元のスピン群を考えることができる.

$$G = \mathrm{Spin}(3) = \left\{h \in \mathbb{H} \,|\, |h| = 1\right\} \simeq \mathrm{SU}(2) \simeq S^3$$
$$H = \mathrm{Spin}(2) = \{e^{kt} \,|\, 0 \le t < 2\pi\} \simeq \mathrm{U}(1) \simeq S^1$$
$$K = \mathrm{Spin}(1) = \{1, -1\} \simeq \mathrm{O}(1) \simeq \mathbb{Z}_2$$

G は e_1, e_2, e_1e_2 より生成, H は e_1e_2 より生成.

ここで,

$$G \ge H \ge K, G \triangleright K, H \triangleright K \Rightarrow G/K \simeq (G/H)/(K/H)$$

微分同相

あることを用いると, （群同型定理に似ているが違う）

$$\mathrm{SU}(2)/U(1) \simeq (\mathrm{SU}(2)/\mathbb{Z}_2)/(\mathrm{U}(1)/\mathbb{Z}_2) \simeq \mathrm{SO}(3)/\mathrm{SO}(2)$$

したがって,

$$S^3/S^1 \simeq \mathrm{SU}(2)/\mathrm{U}(1) \simeq \mathrm{SO}(3)/\mathrm{SO}(2) \simeq S^2$$

- 1,2重ベクトルが生成するスピン群（高次元化）
- 2重ベクトルが生成するスピン群
- 1,2重ベクトルによる回転表現（高次元化）
- 2重ベクトルによる回転表現

まとめ

■ 水素原子は高度な準位縮退があり，背後に隠れた対称性がある.

■ 隠れた対称性は四次元回転対称性 SO(4) である.

■ 隠れた対称性を見出す手法として,
1）コンパクト化（立体射影），2）線形化（Hopf fibration）
を紹介したが，いずれも高次元を経由する手法である.

■ Clifford 代数は高次元を発想する機能を持つ.

■ 立体射影の方は Cl_3 の構造から説明できる.

■ Hopf fibrationの方は Cl_2 の構造から説明できる.

General topological approach to geometric patterns of matters

Shousuke OHMORI

Waseda University, Japan

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 solidification, 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 $(\{0,1\}^\Lambda, \tau_0^\Lambda)$ as X, the universally representations of continua are shown and their geometrical relations are discussed.

References

[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. Escolar, 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).

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

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数III

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 ハイブリッド研究会(Zoom & IMI)
(9/8-10 2022)

早稲田大学大学院先進理工学研究科　物理及応用物理学専攻

大森祥輔

本日の流れ

- ✓ 一般位相空間論(General Topology)の紹介
  - 一般位相空間論研究の問題意識
  - いくつかの例
- ✓ フラクタル科学と一般位相空間論（連続体理論）との関わり
  - 連続体理論を用いたフラクタル構造の存在・特徴づけ
  - 位相的自己相似構造の階層性
- ✓ 物質の幾何学的構造の表現（最近の話題）
  - 連続体理論を用いた幾何学的構造(パターン)の特徴づけ
  - Cantor cube modelを用いたパターンの位相表現

一般位相空間論

- 解析学や幾何学など数学の基礎としての役割？
- 集合と一緒になっているイメージ？「集合と位相」

✓ 位相空間

X：集合、τ：位相　(X, τ)：位相空間

Def. $\tau \subset 2^X$

$(i)\ X, \emptyset \in \tau,\ (ii)\ U, V \in \tau \to U \cap V \in \tau,$

$(iii) U_\lambda \in \tau \to \cup_\lambda U_\lambda \in \tau$

Note：基本的に位相構造のみ

✓ 一般位相空間論の基本的研究テーマ：問題意識

- 距離化可能問題　← Urysohnの距離化定理 etc.
- 次元論　← フラクタルで使うHausdorff次元など
- 連続体理論　← G.T.での幾何学、本発表のメイン

例：Sorgenfrey 直線

✓ 実数直線の位相空間(Sorgenfrey 直線)

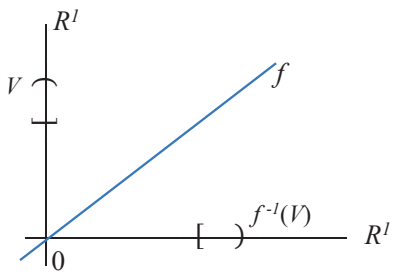
Sorgenfrey 直線 (R^1, τ_S)

R^1：実数全体の集合（実数直線）

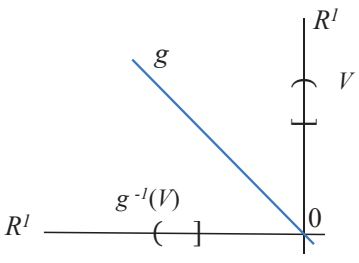
τ_S：$\mathfrak{U} = \{\mathfrak{U}(a); a \in R^1\}$が近傍系を成す位相, where $\mathfrak{U}(a) = \{[a, b); a < b\}$

Note：ユークリッド位相$\tau_{|.|}$は$\mathfrak{U} = \{\mathfrak{U}(a); a \in R^1\},\ \mathfrak{U}(a) = \{(a-\varepsilon, a+\varepsilon); 0 < \varepsilon\}$ が近傍系を成す
（絶対値距離を生成）

例：



fは連続

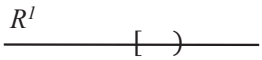


gは不連続（任意の点で）

Note: $f: (X, \tau) \to (Y, \tau')$が連続(continuous) $\Leftrightarrow {}^\forall V \in \tau', f^{-1}(V) \in \tau$

例：Sorgenfrey 直線

✓ (R^1, τ_S)の性質

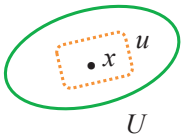


$(\tau_S \neq \tau_{|\cdot|})$

- 0-dimensional (0次元空間)
- perfect (完全) i.e., 一点からなる集合が開集合ではない
- T_1+T_4分離公理を満たす(i.e., normal space)
- 距離化不可能空間

定義: 位相空間(X,τ)が0-dim (0次元空間)である

$\Leftrightarrow x \in X, x \in {}^{\forall}U \in \tau, {}^{\exists}u \in \tau \cap \mathcal{F}$, s.t., $x \in u \subset U$



$\mathcal{F}$: 閉集合の全体

0-dim の例: 距離空間上の点列 (1点も含む)

(X,τ_d) : 距離空間, $X=\{x_n\}$ は 0-dimである

・・・・　・　　・

[説明] $p \in X, {}^{\forall}U(p) \in \tau_d$

${}^{\exists}S_d(p,\varepsilon) := \{y \in X; d(p,y) < \varepsilon\}, s.t.\ S_d(p,\varepsilon) \subset U(p)$

$D = \{d(p,x_n); n \in N\} \subset R^1$とすると,

${}^{\exists}\delta \in R^1 s.t., 0 < \delta < \varepsilon, \delta \notin D$

このとき, $S_d(p,\delta) \in \tau \cap \mathcal{F}$が示されるので,

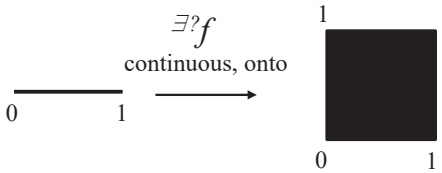
$p \in S_d(p,\delta) \subset S_d(p,\varepsilon) \subset U(p)$

連続体理論

✓ Question :

閉区間[0,1]から[0,1]×[0,1]の正方形へ
連続全射は存在する？

i.e., [0,1]で[0,1]×[0,1]は埋めつくせる？



Yes

Hahn-Mazurkiewicz Theorem

locally-connectedな連続体は閉区間[0,1]の連続像である

i.e., X : locally-connected, continuum $\Rightarrow {}^{\exists}f$: [0,1]→$X$, continuous, onto

定義: 位相空間(X, τ)が連続体(continuum)

$\Leftrightarrow (X, \tau)$ はconnected, compact, Hausdorff (または距離)-空間

また, locally-connected, continuumをPeano-continuumという



locally-connectedでない
continuum

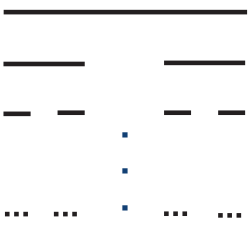
自己相似フラクタル

✓ 自己相似フラクタルの次元

$$N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-D}$$

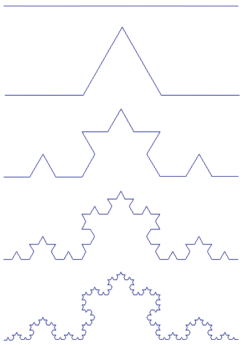
ε : スケール変換度合, $N(\varepsilon)$: 空間を覆う測りの個数, D : フラクタル次元

Cantor 中央1/3集合(CMTS)



$$D = -\frac{\ln 2}{\ln\left(\frac{1}{3}\right)} = 0.63 \ldots$$

Koch曲線



$$D = -\frac{\ln 4}{\ln\left(\frac{1}{3}\right)} = 1.26 \ldots$$

松下貢、「フラクタルの物理(I)」、裳華房 (2002)

フラクタル構造の特徴づけ

✓ 一般位相空間論を用いた自己相似フラクタル

定義 (Hata (1985)) : 距離空間(X,τ_d)からそれ自身の写像$f: X \to X$が

$$d\big(f(x), f(y)\big) \le \alpha(t) d(x,y), (x, y \in X)$$

を満たすときfを(縮小係数$\alpha(t)$の)弱い縮小写像(weak contraction)という

where $\alpha(t)$ は定義域$t \ge 0$の実数値関数で$0 \le \alpha(t) < 1$を満たす

Note : $\alpha(t)$が定値関数のとき通常の縮小写像

Hutchinson (1981), Hata (1985), Nakamura, et.al.,(1995)

(X,τ_d) : 完備距離空間に対して縮小写像系$\{f_j: X \to X; j = 1, 2, \ldots, m\ (2 \le m < \infty)\}$が与えられる $\Rightarrow {}^{\exists 1}S \subset X$ s.t. 集合力学系関係式 $S = \cup_{j=1}^{m} f_j(S)$が成立する.

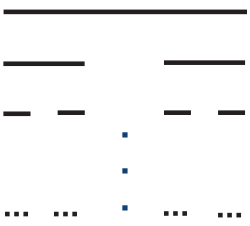
このとき, S を自己相似集合という.

フラクタル構造の特徴づけ

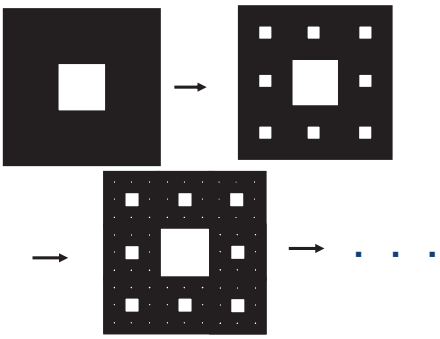
定義: コンパクトな位相空間(X, τ)が位相的自己相似(topological self-similar, TSS)とは
以下の二つを満たすものをいう;

1. 距離化可能 i.e., $^{\exists}d$: metric s.t., $\tau = \tau_d$
2. 1.で定めた距離 d に対して弱い縮小写像系$\{f_j : X \to X; j = 1, 2, \dots, m\ (2 \le m < \infty)\}$が存在して集合力学系関係式 $X = \bigcup_{j=1}^{m} f_j(X)$ が成立する ($\{f_j\}$-TSS)

Cantor 中央1/3集合(CMTS)



Sierpinski カーペット



Note: CMTSやSCはuniversalityをもつ
(ex. 0-dim, compact距離空間はCTMSに埋め込まれる)

フラクタル構造の特徴づけ

Questions
- TSSはどのくらいの大きさか？ ←測度論的議論
- TSSはどのような形をしているのか？ ←位相空間論的議論

Hutchinson (1981), Hata (1985)

(X,τ_d):コンパクト距離空間の縮小写像系$\{f_j : X \to X\}$ が(i)各f_jはone to one,
(ii) $\sum_{j=1}^{m} inf_{t>0}\alpha_j(t) > 1$を満たす⇒以下の何れかの連結な$\{f_j\}$-TSSが存在

a) ジョルダン弧 (コッホ曲線 etc.)　b) 無限個のend pointを持つ (dendrite etc.)
c) TSSは単純閉曲線と同相な部分空間を含む (Sierpinski カーペット etc.)



シダ-構造
(dendrite)

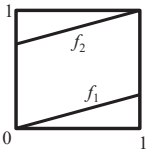
Hutchinson (1981), Kitada (2002)

(X,τ_d):コンパクト距離空間の縮小写像系$\{f_j : X \to X; j = 1, 2, \dots, m\ (2 \le m < \infty)\}$
が以下の条件を満たすとき, 0-dim, perfectな $\{f_j\}$-TSSが存在

(i)　各f_jはone to one　　(ii) Card $\left(\bigcup_{j=1}^{m}\{x \in X; f_j(x) = x\}\right) \ge 2$

(iii) $\sum_{j=1}^{m} inf_{t>0}\alpha_j(t) < 1$

(各$\alpha_j(t)$はf_jの縮小写像係数)



$f_1(x)=1/3x$, $f_2(x)=1/3x+2/3$

IMI 研究会「材料科学における幾何と代数III」9/9/2022 「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」

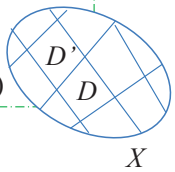
自己相似と階層性

定義: $(\mathcal{D},\tau(D))$が位相空間(X,τ)の分解空間(又は粗視化)(decomposition space)

$\Leftrightarrow \mathcal{D}$: partition of X, i.e., $X=\cup \mathcal{D}$, $D\cap D' \neq \emptyset$ $(D, D'\in\mathcal{D})$

$\tau(\mathcal{D}) = \{\cup \mathcal{U}\subset\mathcal{D}; \cup \mathcal{U}\in\tau\}$: decomposition topology

$(\pi : X \to \mathcal{D}, x \mapsto D \in \mathcal{D}$ where $^{\exists 1}D$ s.t., $x\in D$ を natural mapという)



Kitada (2012)

(X,τ) : 0-dim, perfect, T_0-space, or Peano-continuum

$\Rightarrow {}^{\exists}$non-trivial sequence $\{X, \mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2,\ldots\}$ of decomposition spaces s.t.,

each $\mathcal{D}_i$ is a 0-dim, perfect, T_0-space, or Peano-continuum, respectively

Corollary

(X,τ) : 0-dim, perfect, TSS は, 互いに同相なTSSの分解空間列$\{X, \mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2, \ldots\}$をもつ

i.e., $X \simeq \mathcal{D}_1 \simeq \mathcal{D}_2 \simeq \ldots$

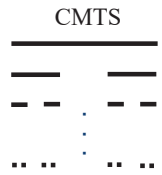
Note・TSSに同相な空間もまたTSS

・connected, T.S.S $\Rightarrow$ Peano-continuum

自己相似と階層性

✓ (X,τ) : 0-dim, perfect, T_0-space, or Peano-continuum

空間の無限分割が可能



- X : 0-dim, perfect, T_0-space

$^{\forall}n \geq 2, \exists X_1, \ldots, {}^{\exists}X_n \in (\tau\cap\mathcal{F}) - \{\emptyset\}$ $s.t., X = \cup_i X_i$, $X_i \cap X_j = \emptyset$ $(i\neq j)$

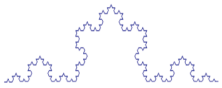
$^{\forall}n \geq 2, \exists X_{i_1}, \ldots, {}^{\exists}X_{i_n} \in (\tau\cap\mathcal{F}) - \{\emptyset\}$ $s.t., X_i = \cup_j X_{i_j}$, $X_{i_j} \cap X_{i_l} = \emptyset$ $(j\neq l)$

. . .

各 $X_{i_{j_{k\ldots}}}$: 0-dim, perfect, T_0

- X : Peano-continuum

Koch曲線



$^{\forall}\varepsilon > 0, {}^{\exists}X_1, \ldots, {}^{\exists}X_n \in \mathcal{F} - \{\emptyset\}$ $s.t., X = \cup_i X_i$, $dia\, X_i < \varepsilon$

$^{\forall}\varepsilon > 0, {}^{\exists}X_{i_1}, \ldots, {}^{\exists}X_{i_n} \in \mathcal{F} - \{\emptyset\}$ $s.t., X_i = \cup_j X_{i_j}$, $dia\, X_{i_j} < \varepsilon$

. . .

各 $X_{i_{j_{k\ldots}}}$: Peano-continuum

IMI 研究会「材料科学における幾何と代数III」9/9/2022 「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」

自己相似と階層性

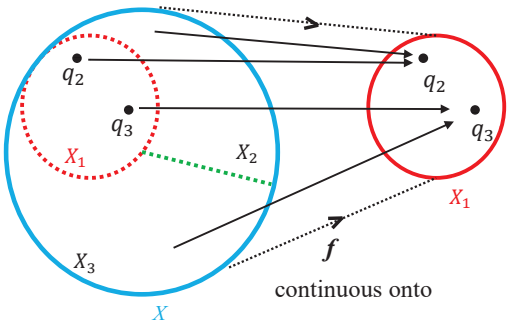
- X : 0-dim, perfect, T_0-space

$^{\forall}n \geq 2, \exists X_1, \ldots, {}^{\exists}X_n \in (\tau \cap \mathcal{F}) - \{\emptyset\}$

$s.t., X = \cup_i X_i$, $X_i \cap X_j = \emptyset$ $(i \neq j)$

Fix $q_2, \ldots, q_n \in X_1$

$$\begin{cases} f(x) = x & \text{for } x \in X_1 \\ f(x) = q_2 & \text{for } x \in X_2 \\ \vdots & \\ f(x) = q_n & \text{for } x \in X_n \end{cases}$$



X_1の部分を拡大 (粗視化)したい

➡ $f: X \to X_1$, continuous, quotient, onto (not one to one)

（Peano-continuumの場合も同様）

Def. 全射 $f: (X,\tau) \to (Y,\tau')$, quotient (商写像) $\Leftrightarrow \tau' = \tau_f \equiv \{U \subset Y, f^{-1}(U) \in \tau\}$

自己相似と階層性

✓ 分解空間(粗視化)を作るための定理

Theorem

$^{\exists}f: (X,\tau) \to (Y,\tau')$: quotient, onto $\Rightarrow h: (Y,\tau') \simeq (\mathcal{D}, \tau(\mathcal{D}))$, $y \mapsto f^{-1}(y)$: 同相

where, $(\mathcal{D}, \tau(\mathcal{D}))$: decomposition space of X, (the space of fibers)

$\mathcal{D} = \{ f^{-1}(y) \subset X ; y \in Y \}$, $\tau(\mathcal{D}) = \{U \subset \mathcal{D}; \cup U \in \tau\}$

- $f: X \to X_1$, quotient, onto (not one to one) $\Rightarrow h: X_1 \simeq \mathcal{D}$

$(\mathcal{D}, \tau(\mathcal{D}))$: 0-dim, perfect, T_0-space or Peano-continuum

➡ $X \to \mathcal{D}_1 \to \mathcal{D}_2 \to \ldots$:粗視化列（各$\mathcal{D}_i$は同じ位相構造）

- X : 0-dim, perfect, TSS ⇒ すべての$\mathcal{D}_i$はCMTSに同相

➡ $X \simeq \mathcal{D}_1 \simeq \mathcal{D}_2 \simeq \ldots$:同相粗視化列

自己相似と階層性

✓ 位相的自己相似の階層構造

X : 0-dim, perfect TSS or connected TSS

$$X = \bigcup_{j=1}^{m} f_j(X) \qquad (\{f_j\}\text{-TSS})$$

$\mathcal{D}_1$: decomposition TSS of X

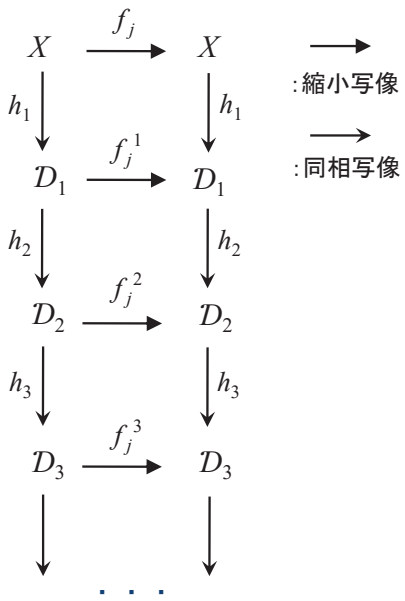
$$h_1 : X \simeq \mathcal{D}_1 \qquad f_j^1 = h_1 \circ f_j \circ h_1^{-1}$$

$$\mathcal{D}_1 = \bigcup_{j=1}^{m} f_j^1(\mathcal{D}_1) \qquad (\{f_j^1\}\text{-TSS})$$

$\mathcal{D}_2$: decomposition TSS of $\mathcal{D}_1$

$$h_2 : \mathcal{D}_1 \simeq \mathcal{D}_2 \qquad f_j^2 = h_2 \circ f_j^1 \circ h_2^{-1}$$

$$\mathcal{D}_2 = \bigcup_{j=1}^{m} f_j^2(\mathcal{D}_2) \qquad (\{f_j^2\}\text{-TSS})$$



物質の幾何学的構造

凝縮系物質
- 液体
- 固体
  - 結晶（並進対称性）
  - 非結晶固体（非晶質, アモルファス, 準結晶）

米沢富美子「不規則系の物理」岩波書店(2015)

(a) 置換型の乱れ (不規則合金など)　(b) 位置の乱れ (液体など)

(c) つながりの乱れ (分子性液体、高分子)　(d) 連続的な乱れ (凝固、結晶成長)

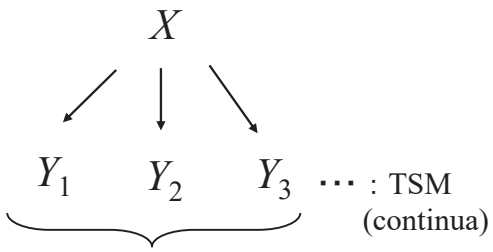
不規則系の凝縮系物質に見られる原子、分子および、それらの凝集体が作る様々な幾何学構造((b)-(d))に着目

幾何学的構造の表現

✓ 一般位相空間論(連続体理論)によるアプローチ

不規則系物質が作る幾何学的構造（Topology Structure of Matters(TSM)）
に対する(結晶学における群論のような)統一的な数理描像・分類は可能か？

- continuum または direct sum of continua なる位相空間として特徴づけ
- ベースとなる位相空間 X を用いて物質の詳細に依らないTSMの表現を探る



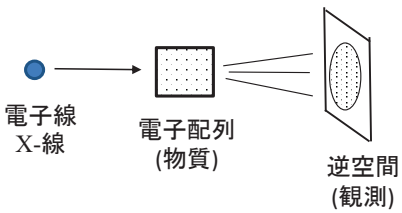
Xを介したTSMの統一的議論

S. Ohmori, et.al., Phys. Scr., **94** 105213 (2019)

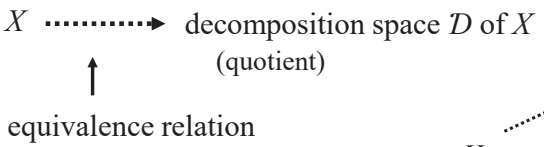
幾何学的構造の表現

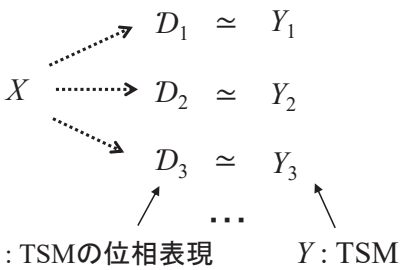
- 着想： 逆空間による物質の特徴づけ

→構造解析：物質そのものを見るのではなく
逆空間を通してみる(逆空間が実体となる)



- Xによる表現方法：分解空間での物の見方





幾何学的構造の表現

Hausdorff-Alexander theorem

(X,τ) : 0-dim, perfect, compact, Hausdorff-space, (Y,τ_d) : compact metric space

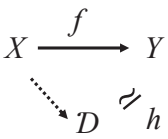
$\Rightarrow \quad {}^{\exists} f : (X,\tau) \to (Y,\tau_d)$, continuous onto

$$h : (Y,\tau_d) \simeq (\mathcal{D},\tau(\mathcal{D})),\ y \mapsto f^{-1}(y)$$

$(\mathcal{D},\tau(\mathcal{D}))$: decomposition space of X,

where, $\mathcal{D} = \{ f^{-1}(y) \subset X ; y \in Y \}$, $\tau(\mathcal{D}) = \{ U \subset \mathcal{D}; \cup U \in \tau \}$

(the space of fibers)



→ TSMは, 0-dim, perfect, compact, Hausdorff-spaceなるXの
decomposition space $\mathcal{D}$として位相表現できる

幾何学的構造の表現

Cantor cube model

$$(X,\tau) = (\{0,1\}^{\Lambda}, \tau_0{}^{\Lambda}) \qquad (\mathrm{Card}\,\Lambda \geqq \aleph_0)$$

$(\{0,1\}^{\Lambda}, \tau_0{}^{\Lambda})$: Λ-product space of the discrete space $(\{0,1\}, \tau_0)$

$\{0,1\}^{\Lambda} = \{ s : \Lambda \to \{0,1\} \}$, τ_0 : discrete topology for $\{0,1\}$,

Λ = N, R, etc.,

- ✓ 0-dim, perfect, compact, Hausdorff-space
- ✓ Card $\Lambda = \aleph_0$ (ex. Λ = N);
  (X,τ) is a Cantor set ($\tau = \tau_d$, $d(x,y) = \Sigma_{i=1}^{\infty} |x_i - y_i|/2^i$)

TSMのcontinuumによる分類

分子性液体のネットワーク構造

T. Morishita,
Phys. Rev. Lett.
87 105701 (2001)

1. finite graph : a continuum that is the union of finitely many arcs two of which are either disjoint or intersect only one or both their end points

- arc : a topological space homeomorphic to [0,1]

(ネットワーク構造全般：分子性液体, 高分子など)

高分子ネットワーク
(高分子トポロジー)

Y. Tezuka, et.al., J. Am. Chem. Soc. 123 11570 (2001)

2. tree : a graph which contains no simple closed curve

(デンドライト, DLAなど)



TSMのcontinuumによる分類

3. dendrite : a Peano-continuum (locally connected, continuum) that contains no simple closed curve

(フラクタル, シダ-構造など)

Note : a tree implies a dendrite



シダ

4. direct sum of continua :

$(\oplus_{i=1}^{s} C_i\ ,\ \oplus_{i=1}^{s} \tau_i)$

$\oplus_{i=1}^{s} \tau_i = \{U \subset \oplus_{i=1}^{s} C_i,\ U \cap C_i \in \tau_i,\ i=1,..,s\}$

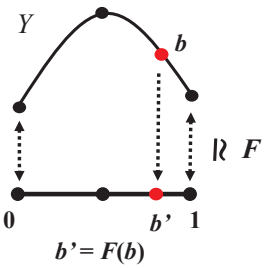
where, each C_i is a continuum

(クラスター構造, 多結晶体, 有限点列など)

IMI 研究会「材料科学における幾何と代数III」9/9/2022 「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」

位相表現

TSM = Y : arc　　$\exists F : Y \simeq [0,1]$



$b' \in [0,1]$の二進小数表示: $b' = \Sigma_{i=1}^{\infty} k_i/2^i,\ k_i \in \{0,1\},\ i = 1,2,\ldots$

$M = \{l/2^n \in [0,1]\ ;\ n = 1,2,\ldots,\ l = 1,2,\ldots,2n\text{-}1\}$

- $b' \in [0,1] - M$

$b \in Y \Leftrightarrow h(b) = \{s \in \{0,1\}^{\Lambda};\ s_{\lambda 1} = k_1,\ s_{\lambda 2} = k_2,\ \ldots\} \in \mathcal{D}$　　-(1)

$(\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots,\} \subset \Lambda)$

- $b' \in M$

$b \in Y \Leftrightarrow h(b) = \{s \in \{0,1\}^{\Lambda};\ s_{\lambda i} = k_i,\ i=1,\ \ldots,\ n,\ s_{\lambda n+1} = 0, s_{\lambda n+2} = 1,\ s_{\lambda n+3} = 1,\ \ldots\}$
$\cup\ \{s \in \{0,1\}^{\Lambda};\ s_{\lambda i} = k_i,\ i=1,\ \ldots,\ n,,\ s_{\lambda n+1} = 1,\ s_{\lambda n+2} = 0,\ s_{\lambda n+3} = 0,\ \ldots\} \in \mathcal{D}_1$　　-(2)

✓ arc Y のCantor cube $(\{0,1\}^{\Lambda}, \tau_0^{\Lambda})$による位相表現 :$(\mathcal{D}, \tau(\mathcal{D}))$

$\mathcal{D} = \{S_b : b \in Y_1\}\quad (\tau(\mathcal{D}) = \{U \subset \mathcal{D};\ \cup U \in \tau_0^{\Lambda}\})$

$Y \overset{h}{\simeq} \mathcal{D}$

$$b \doteq S_b = \begin{cases} (1), & F(b) \in [0,1] - M \\ (2), & F(b) \in M \end{cases}$$

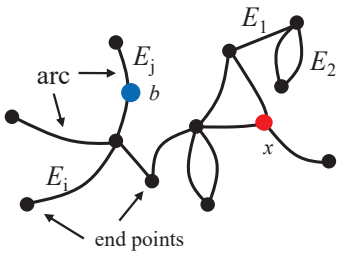
“ $\doteq$ ” : bと$h(b)$を同一視

位相表現

TSM = Y_g : graph

$Y_g = E_1 \cup E_2 \cup \cdots \cup E_n$

E_i : arc ($\simeq [0,1]$), $E_i \cap E_j$ = end point or Φ(空)



$\{0,1\}^{\Lambda} = A_1 \cup \cdots \cup A_n$: 直和分割 (A_i : topological cone)

$A_1 = \{0\}_{\xi 1} \times \{0,1\}^{\Lambda - \{\xi 1\}}$

$A_i = \{1\}_{\xi 1} \times \{1\}_{\xi 2} \times \ldots \times \{0\}_{\xi i} \times \{0,1\}^{\Lambda - \{\xi 1, \ldots, \xi i\}}$ $(i=2,\ldots,i\text{-}1)$

$A_n = \{1\}_{\xi 1} \times \ldots \times \{1\}_{\xi n} \times \{0,1\}^{\Lambda - \{\xi 1, \ldots, \xi n\}}$

$Y_g \overset{h}{\simeq} \mathcal{D}_g$

$X = \{0,1\}^{\Lambda}$

✓ graph Y_gの位相表現 $\mathcal{D}_g$

$x \doteq \cup_{j=1}^{q} [A_{tj} \cap S^{tj}{}_x],\ b \doteq A_i \cap S^i{}_b$

- A_{tj} : Y_g内のarc E_{tj}の点であることを示す項
- $S^i{}_b$: E_j内の位置を示す項

位相表現

TSM = Y_c : direct sum of continua

$Y_c = (\oplus_{i=1}^{s} C_i, \oplus_{i=1}^{s} \tau_i)$

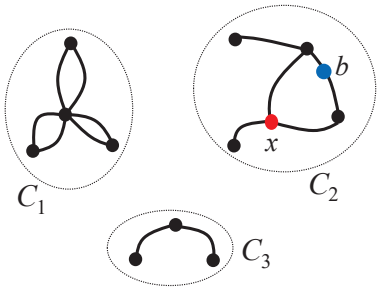
C_i : finite graph, i=1,…,s (s :クラスターの数)

$\{0,1\}^{\wedge} = J_1 \cup \cdots \cup J_s$: 直和分割(J_i : cone)

$J_i \Leftrightarrow C_i \quad (i=1,\ldots,s)$

↓

各C_i内のgraphに対する直和分割



✓ direct sum Y_cの位相表現 $\mathcal{D}_c$

$$x \doteq J_{i0} \cap \bigcup_{j=1}^{q} [A_{tj} \cap S^{tj}{}_x], \; b \doteq J_{i0} \cap [A_j \cap S^j{}_b]$$

- J_{i0} : bが クラスターC_{i0}に含まれていることを示す項
- […] : bがC_{i0}のgraph中の点を表現する項

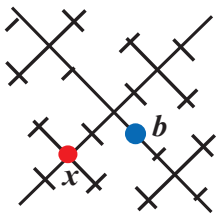
位相表現

その他の表現

TSM = Y_t : tree

✓ tree Y_tの位相表現 $\mathcal{D}_D$

$$x \doteq \bigcup_{j=1}^{q} [A_{tj} \cap S^{tj}{}_x], \; b \doteq A_i \cap S^i{}_b$$

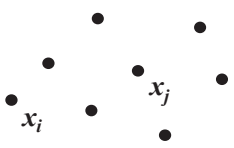


TSM = Y_f : 一点のみから成るクラスター(有限点列)

$$Y_f = \oplus_{i=1}^{s} C_i = \oplus_{i=1}^{s} \{x_i\} = \{x_1, \ldots, x_s\}$$

✓ Y_fの位相表現 $\mathcal{D}_f$

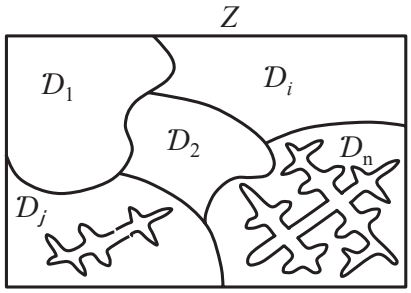
$$\mathcal{D}_f = \{J_1, \ldots, J_s\}, \quad x_i \doteq J_i$$

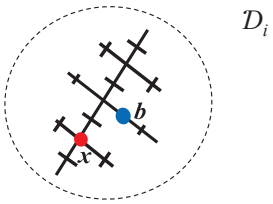


位相表現

✓ dendrite結晶によって作られる多結晶体

Q. dendrite構造や自己相似構造をもつ結晶によって、それらの集合体である多結晶を埋めつくすことができるか？(tiling 問題)





Z : 異なるdendrite(tree)のdirect sumとしてみなす ➡ Cantor cube modelを適用 :

✓ dendrite結晶及び多結晶の位相表現

$$\mathcal{D}_Z = \oplus_{i=1}^{n} \mathcal{D}_i$$

$$\mathcal{D}_i = \{x \doteq J_i \cap [\cup_{i=1,\ldots,q}(A_{ti} \cap S^{ti}{}_x)];\ x \in Y^i{}_d\} \cup \{b \doteq J_i \cap A_j \cap S^j{}_x;\ b \in Y^i{}_d\}$$

($\mathcal{D}_i$: dendriteを示す位相表現)

位相表現

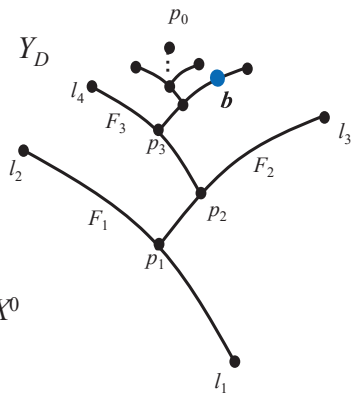
TSM = Y_D : fern-structure

$\{0,1\}^{\Lambda}$:

$X^1 = \{0\}_{\lambda 1} \times \{0,1\}^{\Lambda-\{\lambda 1\}}$

$X^i = \{1\}_{\lambda 1} \times \{1\}_{\lambda 2} \times \ldots \times \{0\}_{\lambda i} \times \{0,1\}^{\Lambda-\{\lambda 1,..,\lambda i\}}, (i=1,2,\ldots)$

$X^0 = \{1\}_{\lambda 1} \times \{1\}_{\lambda 2} \times \ldots \times \{0,1\}^{\Lambda-\{\lambda 1,..\}}$



✓ Y_Dの位相表現 $p_i \doteq (X^i \cap S_{pi}) \cup (X^{i+1} \cap S^0{}_{pi})$, $p_0 \doteq X^0$

$b \doteq X^i \cap S^i{}_b$

・R^2 : Euclid metric space

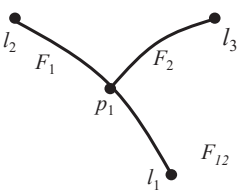
F_1 : arc with end points l_1, l_2, $h_1 : F_1 \simeq [0,1]$

F_2 : arc with end points l_3, p', $h_2 : F_2 \simeq [0,1]$ $(dia\ F_2 < dia\ F_1)$

$F_1 \ni p_1, h_1(p_1) = 1/2$

$f_1 : \{p_1\} \to F_2, f_1(p_1) = p'$を用いて, $F_{12} = F_1 \cup_f F_2$なる接着空間

→ これを続ける ($\{p_0\} = \mathrm{Lim}\ F_i$)



分解空間の順序

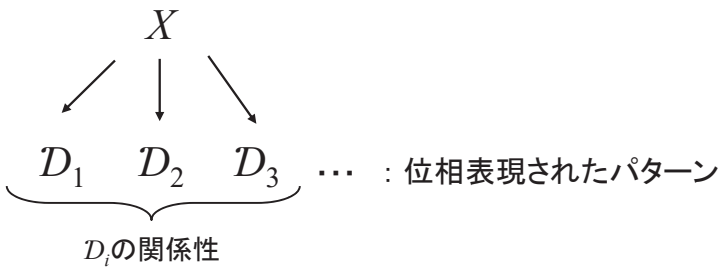
✓ Cantor cube $X=\{0,1\}^{\wedge}$ の分解空間として様々な幾何学的パターンを統一的に表現

✓ X を変えたときの表現の変化

- $X=\{0,1\}^{\aleph_0}$: Cantor set(自己相似)とその縮小写像を用いた場合
- X =Peano continuum の場合

✓ 位相表現されたcontinuumやdirect sum of continuaの関係性（現在の興味）

→ 各位相表現(分解空間)の間に順序を導入

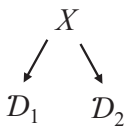


分解空間の順序

定義: $\mathcal{D}$ を X の分解空間として, その特徴量 $S(\mathcal{D})$ の順序を以下で定義する:

$$S(\mathcal{D}_2) \le S(\mathcal{D}_1) \Leftrightarrow {}^{\forall}D_1 \in \mathcal{D}_1,\ {}^{\exists}D_2 \in \mathcal{D}_2,\ \text{s.t. } D_1 \subset D_2$$

where $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2 \in 2^{\mathcal{D}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathcal{D} \subset 2^X\text{-}\{\phi\};\ \mathcal{D}$ は X の分解空間$\}$

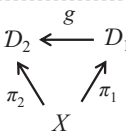


Note • $\max_{\le} 2^{\mathcal{D}} = \{\{x\}; x \in X\}$, $\min_{\le} 2^{\mathcal{D}} = \{X\}$

• 全順序ではない

いくつかの一般的性質

- $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2 \in 2^{\mathcal{D}}$に対して, $\pi_1 : X \to \mathcal{D}_1$, $\pi_2 : X \to \mathcal{D}_2$: natural mapとする
  ${}^{\exists}g$: $\mathcal{D}_1 \to \mathcal{D}_2$, continuous, onto, s.t., $\pi_2 = g \circ \pi_1 \Leftrightarrow S(\mathcal{D}_2) \le S(\mathcal{D}_1)$
- $\mathcal{D}_1$: continuum, $\mathcal{D}_2$: usc decomposition space of (X, τ) s.t. $S(\mathcal{D}_2) \le S(\mathcal{D}_1)$
  $\Rightarrow \mathcal{D}_2$ is a continuum



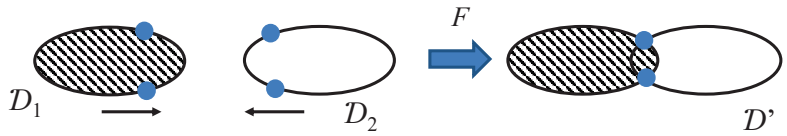
Def. : a decomposition $\mathcal{D}$ of (S, T) is said to be *upper semi-continuous* (*usc*) provided that whenever $D \in \mathcal{D}$, $U \in T$, and $D \subset U$, there exists $V \in T$ with $D \subset V$ such that if $A \in \mathcal{D}$ and $A \cap V \neq \phi$, then $A \subset U$

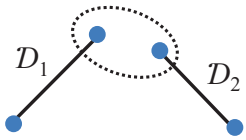
Note : Cantor cube model の位相表現として得られている分解空間は必ずuscである

分解空間の順序

✓ 幾何学的イメージ

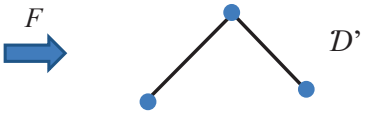
くっつく(attaching)と $S(\mathcal{D})$は小さくなる





$\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 \oplus \mathcal{D}_2$

: direct sum of continua



$\mathcal{D}' = \mathcal{D}_1 \bigcup_F \mathcal{D}_2$

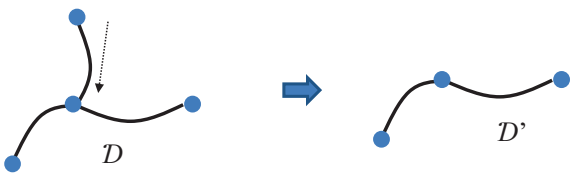
: $\mathcal{D}_1$-$\mathcal{D}_2$のFによるattaching space

$$S(\mathcal{D}) \geq S(\mathcal{D}')$$

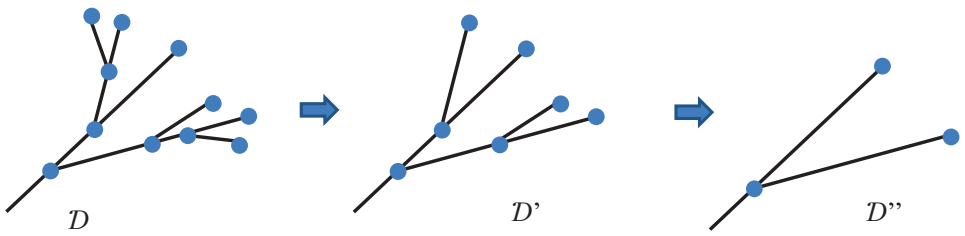
分解空間の順序

✓ 幾何学的イメージ

枝が減ると $S(\mathcal{D})$は小さくなる



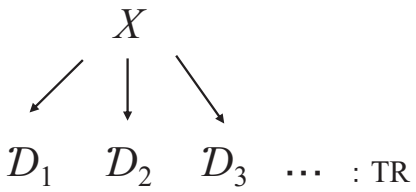
$$S(\mathcal{D}) \geq S(\mathcal{D}')$$



$$S(\mathcal{D}) \geq S(\mathcal{D}') \geq S(\mathcal{D}'')$$

まとめ

- ✓ 一般位相空間論(General Topology)の紹介
- ✓ フラクタル科学と一般位相空間論（連続体理論）との関わり
- ✓ 物質の幾何学的構造の表現
  - 連続体理論を用いた幾何学的構造(パターン)の特徴づけ
  - Cantor cube modelを用いたパターンの位相表現
  - 特徴量を用いて位相表現を分類



(物質の幾何学的パターン)

ご清聴ありがとうございました

IMI 研究会「材料科学における幾何と代数III」9/9/2022 「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」

Topological multiferroics induced by local/quantum symmetry breaking via lattice/electron defects

Takahiro SHIMADA

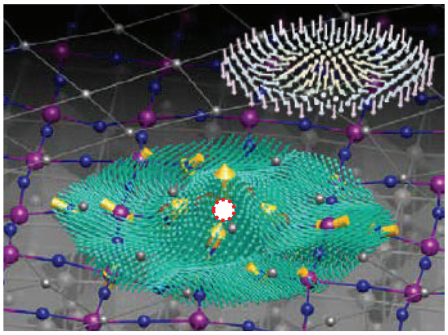
Kyoto University, Japan

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".

IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数III
（2022年9月9日）

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



嶋田　隆広

京都大学　大学院工学研究科　機械理工学専攻

✉ shimada@me.kyoto-u.ac.jp

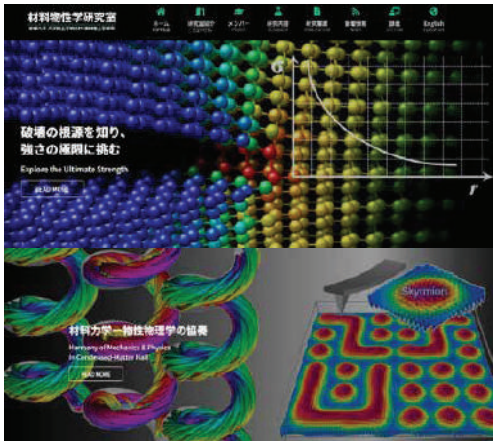
京都大学 KYOTO UNIVERSITY

略歴



嶋田 隆広

京都大学 大学院工学研究科 機械理工学専攻



第一原理解析、分子動力学、Phase-field シミュレーションなど

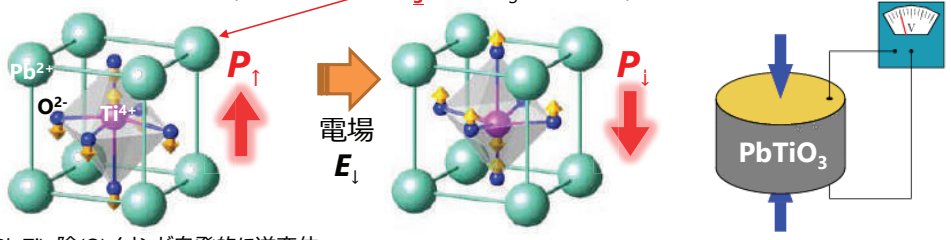
- ナノスケール材料の強度特性
- ナノ物質の電子物性（強誘電性・磁性）と変形とのカップリング効果
- 原子・電子系での力学理論と解析技術開発
- 量子機械実現に向けた取り組み

材料物性学研究室HP: https://material.me.kyoto-u.ac.jp/

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

強誘電体(圧電体)とマルチフィジックス

強誘電体(圧電体) (代表例: **$PbTiO_3$**, $BaTiO_3$, PZT, etc)



陽(Pb,Ti)・陰(O)イオンが自発的に逆変位

→ **P : 自発分極**

強誘電性

圧電性

産業応用：アクチュエータ，センサー，圧電素子，不揮発性メモリ，etc.

外力 → 機械(力学的)エネルギー ⇔ 応力・ひずみ / 強誘電体 / 分極 ⇔ 電気的エネルギー ← 電場

機械(力学的)エネルギーと**電気的エネルギー**の相互変換が**単一要素で可能**

機械工学の観点から，
複雑な機械・運動機構を構造的に組み込むことが困難な
ナノレベルで電気機械駆動を可能にするナノ機械材料として重要

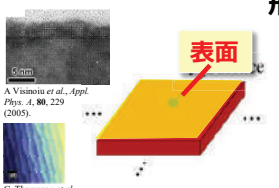
低次元ナノ強誘電体のマルチフィジックス特性

形状効果
(表面効果)

小

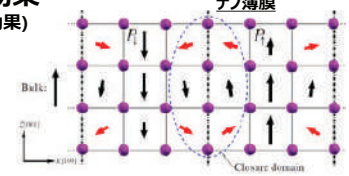
大

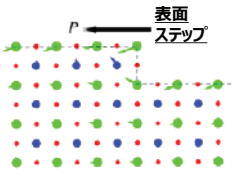
2次元
(面状)



A Visinoiu *et al.*, *Appl. Phys. A*, **80**, 229 (2005).
C. Thompson *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **93**, 182901 (2008)

ナノ薄膜

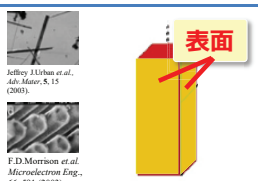




T.Shimada, et al., PRB, 81, 144116 (2010)
T.Shimada, et al., ActaMech, 224, 1261 (2013)

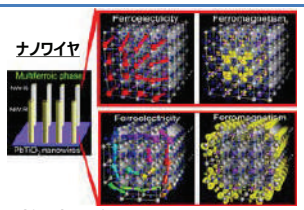
T.Shimada, et al., JPCM, 24, 045903 (2012)
T.Shimada, et al., PhysicaB, 410, 22 (2013)

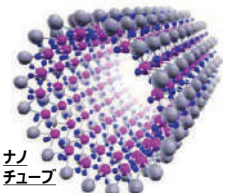
1次元
(線状)



Jeffrey J.Urban *et al.*, *Adv.Mater.*, **5**, 15 (2003).
F.D.Morrison *et al.* *Microelectron Eng.*, **66**, 591 (2003).

ナノワイヤ・チューブ

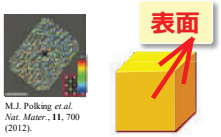




T.Shimada, et al., PRB, 79, 024102 (2009)
T.Shimada, et al., Nano Lett., 16, 6774 (2016)

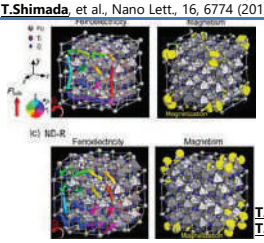
T.Shimada, et al., PRL, 108, 067601 (2012)
T.Shimada, et al., PRB, 89, 144102 (2014)

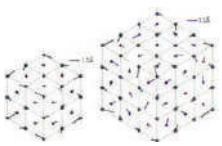
0次元
(点状)



M.J. Polking *et al.* *Nat. Mater.*, **11**, 700 (2012).

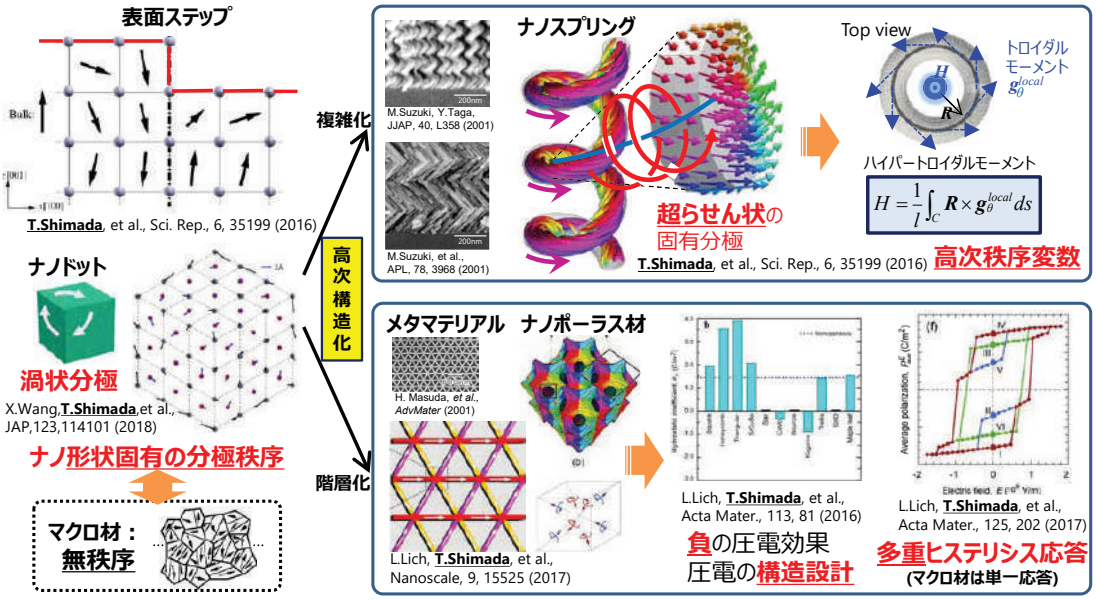
ナノドット・粒子





T.Shimada, et al., J.Appl.Phys., 123, 114101 (2018)
T.Shimada, et al., Sci.Rep., 7, 45373 (2017), etc.

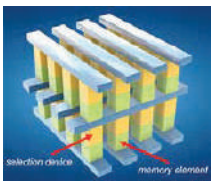
形状効果 と 分極の幾何学的秩序



形状・寸法・表面構造がナノ材料の物性・機能を支配

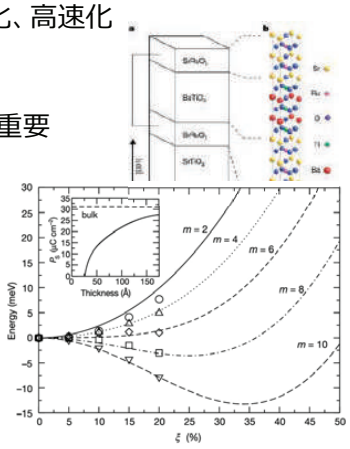
↔ マクロ材：形状・寸法に依存せず一定値

マルチフェロイクス小型化の物理的限界



集積デバイス → 構成要素を高密度に集積
→ 大容量化、高速化

構成要素の小型化が重要



マルチフェロイクスの強誘電性や磁性
→ **寸法が数ナノメートル程度になると消失**[*1,2]

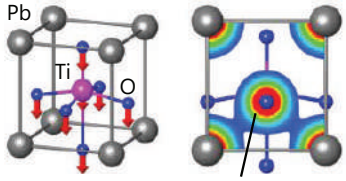
材料を加工 → ~~**臨界サイズ以下のマルチフェロイクスを作製**~~

物理的に不可能

*1 Y.zhang, *et. al.*, *Phys. Rev.* B, **90**, 184107 (2014). *2 N.J.Polking, *et. al.*, *Nat. Mater.*, **11**, 700 (2012).

マルチフェロイクス（磁性強誘電体）

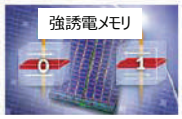
強誘電体（代表例：PZT, $PbTiO_3$）



原子の相対変位 → 電荷の偏り　***P***：自発分極

強誘電性・圧電性

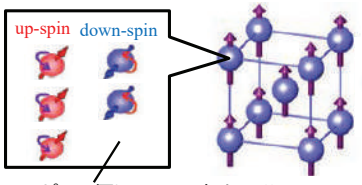
応用例：





MEMSのアクチュエータ

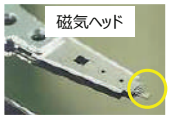
磁性体（代表例：Fe, Ni, Co)



スピンの偏り → 一方向に揃う　***M***：自発磁化

磁性

応用例：





強誘電性と磁性を同時に示す材料 → **マルチフェロイクス**

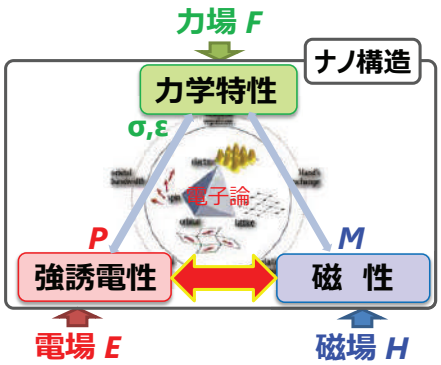
相互作用 → 応用例：スピントロニクスデバイス，電気磁気デバイス

究極の機械-電気-磁気機能材料を目指して

（単一要素で**力場-電場-磁場すべてと作用**）

目的：超微小な機械-電気-磁気機能材料の創出

→ **最も小さく多機能な「機械」を創る**



問題１：強誘電性と磁性は共存し得ない

強誘電性：d^0電子配置（例：Ti^{4+} in $PbTiO_3$）

相反する電子的起源

磁性：部分的に占有された *d* 軌道状態（例：Fe）

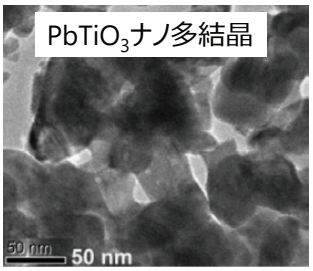
問題２：機能限界寸法の存在

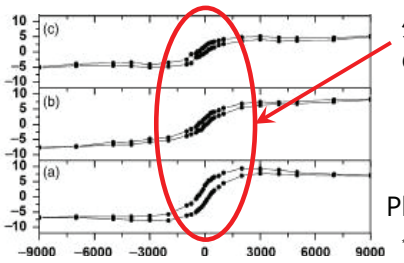
ある**臨界ナノサイズで材料機能が失われる**
構造的な安定性も損なわれる
（例：材料寸法が **3-10 nm** 程度で強誘電性が消失*）

* Y.zhang, *et. al., Phys. Rev.* B, **90**, 184107 (2014).
N.J.Polking, *et. al., Nat. Mater.*, **11**, 700 (2012).
T.Shimada, *et. al. Phys. Rev.* B, **79**, 024102 (2009).

強誘電体における磁性発現とその要因

$PbTiO_3$: 非磁性材料



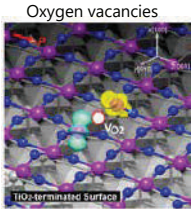


外部磁場-磁気モーメントのヒステリシス

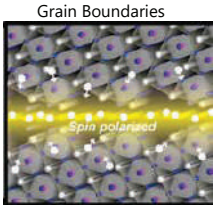
$PbTiO_3$に**磁性が発現**[*1]

[*1] M.Wang, *et. al., J. Am. Ceram. Soc.*, **93**, 2151 (2010).

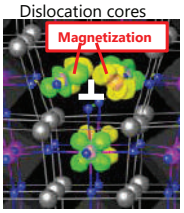
Oxygen vacancies



Grain Boundaries



Dislocation cores



結晶粒界や表面に偏析した原子空孔や転位などのが格子欠陥が磁性を担うことを解明[*2]

格子欠陥を工学利用することで原子スケールのマルチフェロイクスを創出できる可能性

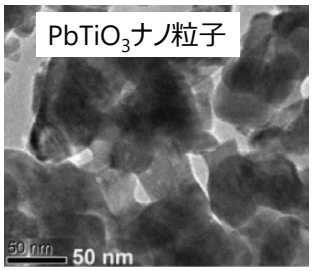
[*2] T.Shimada, ***Nano Lett.***, **15**, 27 (2015).
T.Shimada, ***Phys.Rev.Lett.***, 115, 107202 (2015).
T. Shimada, ***Nano Lett.***, 16, 454 (2016).
T.Shimada, ***Adv.Elect.Mater.***, 2, 1600113 (2016).
T.Shimada, ***Nano Lett.***, 17, 2674 (2017).

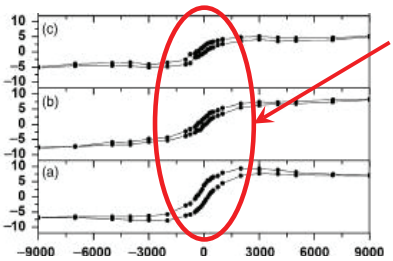
京都大学 KYOTO UNIVERSITY

格子欠陥を利用した「原子」スケール機能性材料

強誘電体における磁性発現とその背景

強誘電体$PbTiO_3$ → **非磁性**





外部磁場-磁気モーメントのヒステリシス

⇩

非磁性のはずの$PbTiO_3$に**磁性が発現**[*1]

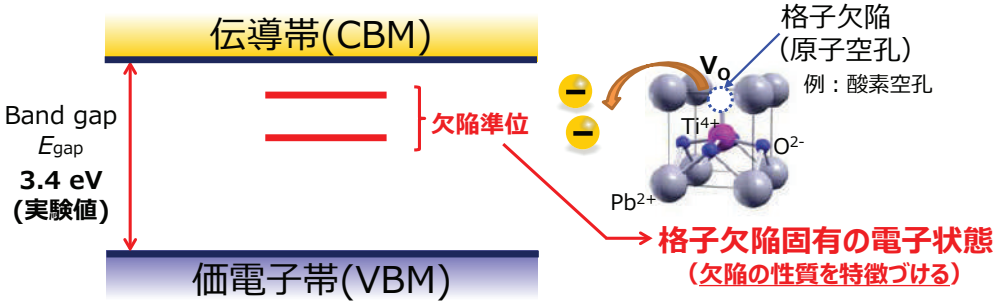
[*1] M.Wang, *et. al., J. Am. Ceram. Soc.*, **93**, 2151 (2010).

予期せず現れた磁性の起源は？メカニズムは？

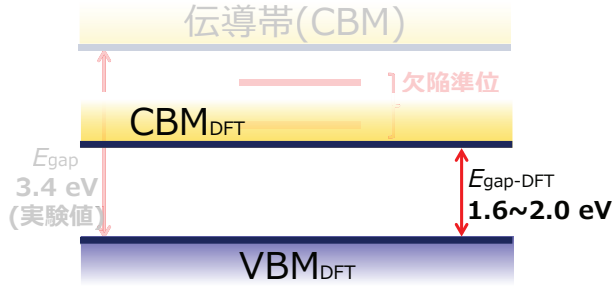
表面構造か？原子空孔や欠陥か？他の因子…？

第一原理解析による理論研究はいずれも実験結果と整合せず（後述），
磁性の起源を特定できず，メカニズムも不明のまま…

格子欠陥の電子状態と従来解析の欠点



従来の第一原理解析



バンドギャップを過小評価

⇩

格子欠陥の電子状態が再現できない

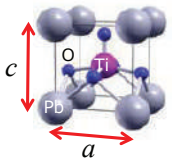
ハイブリッド汎関数を用いた高精度解析

表：従来の第一原理解析と本ハイブリッド汎関数法による$PbTiO_3$物性の理論値と実験値

	LDA	GGA	GGAsol	GGA+U	本解析*1	実験値
	従来法（一般的な交換相関近似）					
a	3.86	3.85	3.88	3.90	**3.86**	**3.88**
c	4.04	4.84	4.15	4.01	**4.14**	**4.15**
c/a	1.043	1.257	1.070	1.028	**1.072**	**1.071**
E_{gap}	1.6	1.8	2.0	2.5	**3.4**	**3.4**

密度汎関数法における一般化密度勾配近似とハートリー・フォック交換エネルギーによるハイブリッド汎関数法により，
$PbTiO_3$の結晶構造・強誘電性・電子状態を厳密に再現
→欠陥準位の記述が可能に

*1.T.Shimada, et al. Phys.Rev.B, 87, 174111 (2013).

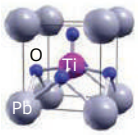


デメリット：従来の第一原理解析の**約５～１０倍に及ぶ計算負荷の増加**

磁性発現因子の理論的特定

本解析結果：$PbTiO_3$表面/内部の各原子空孔の磁気モーメントMと欠陥形成エネルギーE_{vf}

	表面上			結晶内部		
空孔の種類	O	Ti	Pb	O	Ti	Pb
M (μ_B)	**2.0**	0	0	**0**	4.0	0
E_{vf} (eV)	**2.04**	6.16	4.98	2.94	11.16	5.81



欠陥形成エネルギー

$$E_{vf} = \left[\left(E_{tot}(\text{vacancy}) + n_i \mu_i \right) - E_{tot}(\text{perfect}) \right] / n_i$$

$E_{tot}(\text{vacancy})$: Total energy of the system with vacancy; $n_i \mu_i$: Chemical potential; $E_{tot}(\text{perfect})$: Total energy of the perfect system; n_i: No. of vacancies

表面上の酸素空孔が磁性を発現し，
最も安定に存在する

本解析：表面上の酸素空孔が
磁性発現の主要因

実験事実と整合

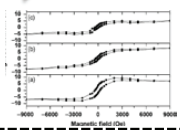
本解析により，初めて磁性発現の現象を捉え，起源の特定に成功*

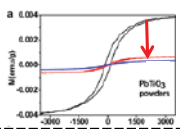
*T.Shimada et al., *Phys. Rev. Lett.*, 115, 107202 (2015).

既往実験

1. ナノ粒子の平均粒径が小さくなるにつれて，単位体積あたりの磁気モーメント値も増加する*1
*1 M.Wang et al., J.Am.Ceram.Soc., 93, 2151 (2010)
⇨ **"表面積"** の関与を示唆

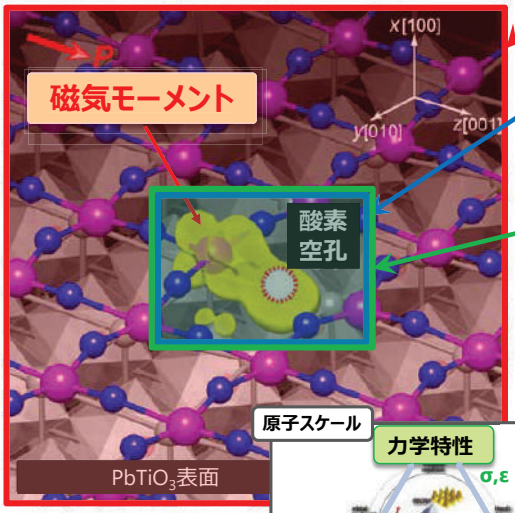
2. 大気中でアニールしたサンプルは，真空中で行ったサンプルよりも大幅に磁気モーメントが低下する*2
*2 Z.Zhang et al., Solid State Sci., 13, 1391 (2011)
⇨ **"酸素空孔"** の関与を示唆





表面空孔＝「原子スケールのマルチフェロイクス」

表面の酸素空孔の磁気モーメント分布



*T.Shimada et al., *Phys. Rev. Lett.*, 115, 107202 (2015).

材料全体が**強誘電性**を有する

＋

磁性は**酸素空孔部の原子スケール領域のみ**に発現

⇩

空孔の原子スケールの領域が

磁性強誘電体

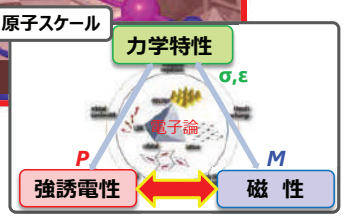
（マルチフェロイクス）

問題１：強誘電性と磁性は共存し得ない

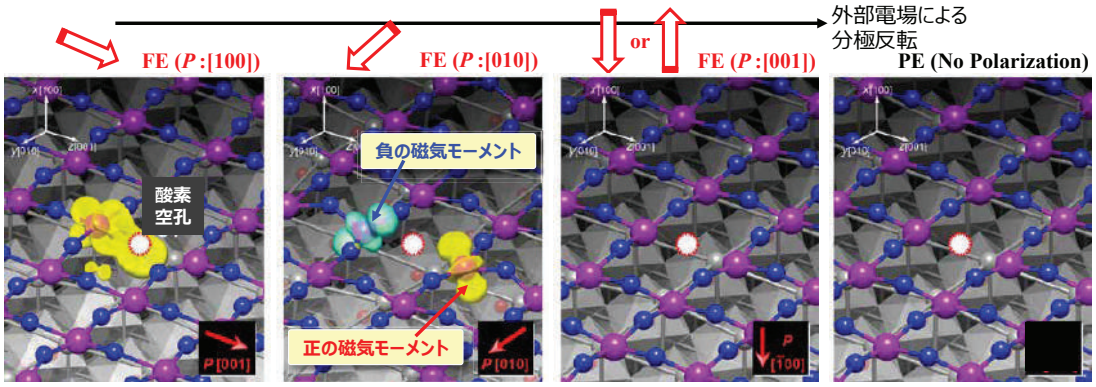
問題２：機能限界寸法の存在

突破

原子スケールの磁性強誘電体



空孔機能の外場応答の存在



常磁性(強磁性)　**反強磁性**　**非磁性**　**非磁性**

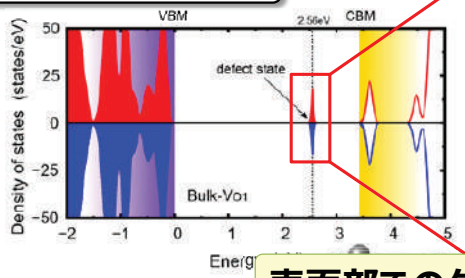
自発分極方向の電場反転に伴い，空孔に磁気相転移が生じる

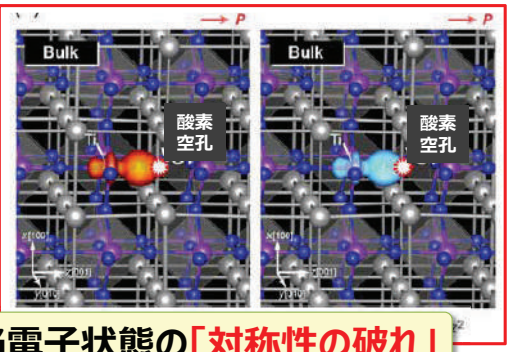
=> **原子空孔にも関わらず電気磁気効果(外場応答)が存在***

*T.Shimada et al., *Phys. Rev. Lett.*, 115, 107202 (2015).

磁性発現の電子的起源の解明

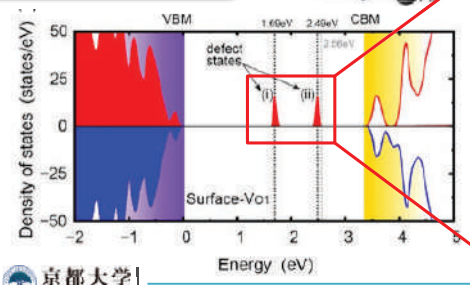
結晶内部の酸素空孔

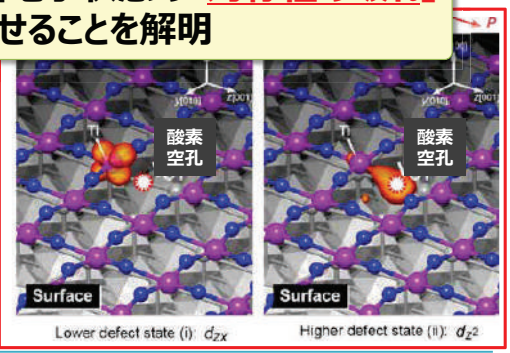




表面部での欠陥電子状態の「対称性の破れ」が磁性を発現させることを解明

表面の酸素空孔





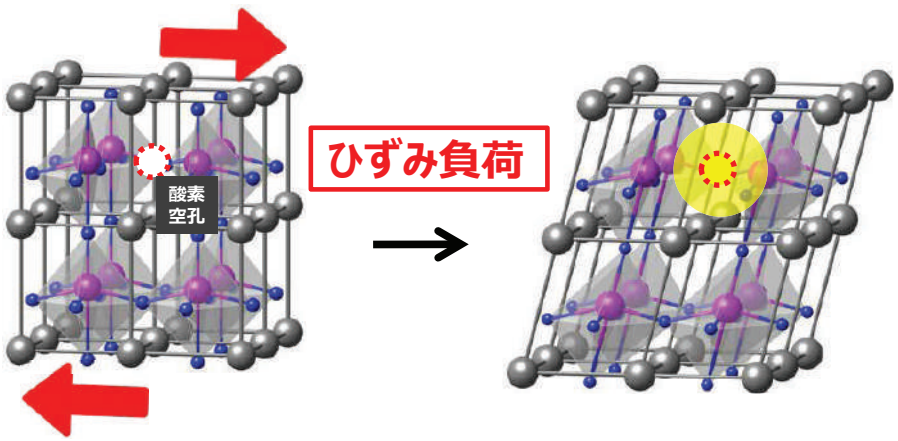
京都大学 KYOTO UNIVERSITY

*T.Shimada et al., *Phys. Rev. Lett.*, 115, 107202 (2015).

17

磁性機能の力学的制御のアイディア

結晶内部の原子空孔 → 「対称性の破れ」が無いため，磁性は現れない



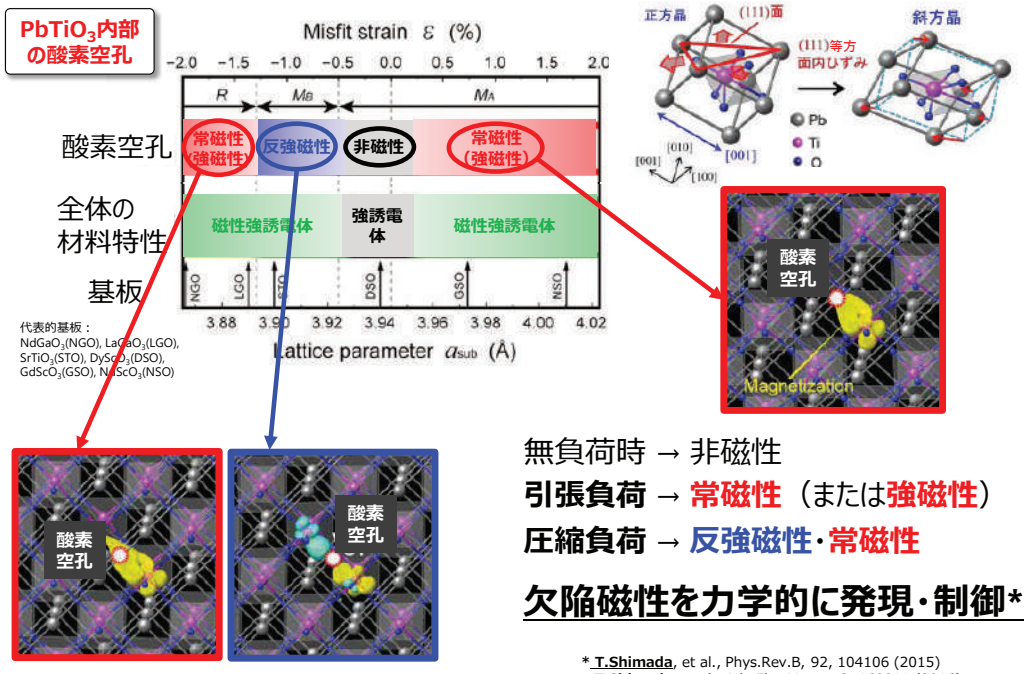
ひずみ負荷によって**結晶対称性を力学的に破る**

→ 結晶内部の原子空孔にも**磁性発現**の可能性

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

18

磁性機能の力学的創出



無負荷時 → 非磁性

引張負荷 → 常磁性（または**強磁性**）

圧縮負荷 → 反強磁性・常磁性

欠陥磁性を力学的に発現・制御*

* **T.Shimada**, et al., Phys.Rev.B, 92, 104106 (2015)
T.Shimada, et al., Adv.Elec.Mater., 2, 160011 (2016)

格子欠陥の電機磁気的機械機能

本成果をもとに，2020年には海外研究グループにより実験的観察もなされた

NANO LETTERS

Nano Lett (I.F.: 12.3), 20, 881 (2020)

pubs.acs.org/NanoLett Letter

Controllable Ferromagnetism in Super-tetragonal $PbTiO_3$ through Strain Engineering

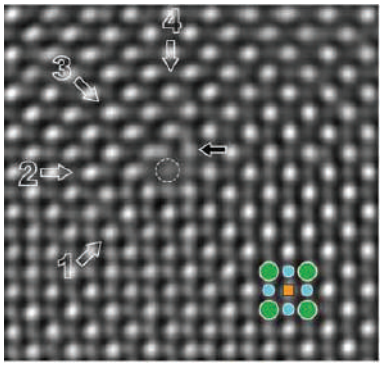
Linxing Zhang,* Dongxing Zheng, Longlong Fan, Jinguo Wang, Moon Kim, Jiaou Wang, Huanhua Wang, Xianran Xing, Jianjun Tian,* and Jun Chen*

Cite This: Nano Lett. 2020, 20, 881−886 Read Online

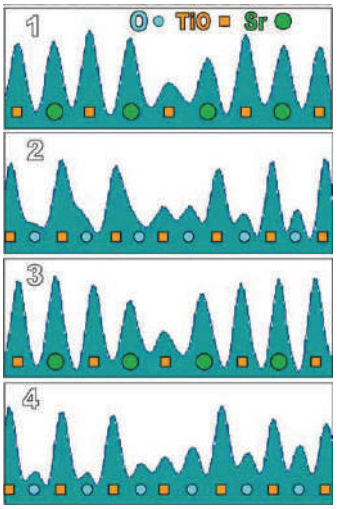
of theoretical calculations indicate that ferroelectric PTO can produce ferromagnetism. Shimada et al. demonstrated the possible origin-driven factors for generating ferromagnetism in PTO, such as the Ti and O vacancies,[22] nanometer-scale non-stoichiometric effects,[23] Ti-rich dislocations,[24] and doping electrons.[25] In the TiO_2/PTO interface, the interfacial multiferroics also can be driven by charge transfer.[26] However, very few experimental examples of magnetic PTO have been reported.

らせん転位(HRTEM像)

HRTEM像*



各原子の密度*

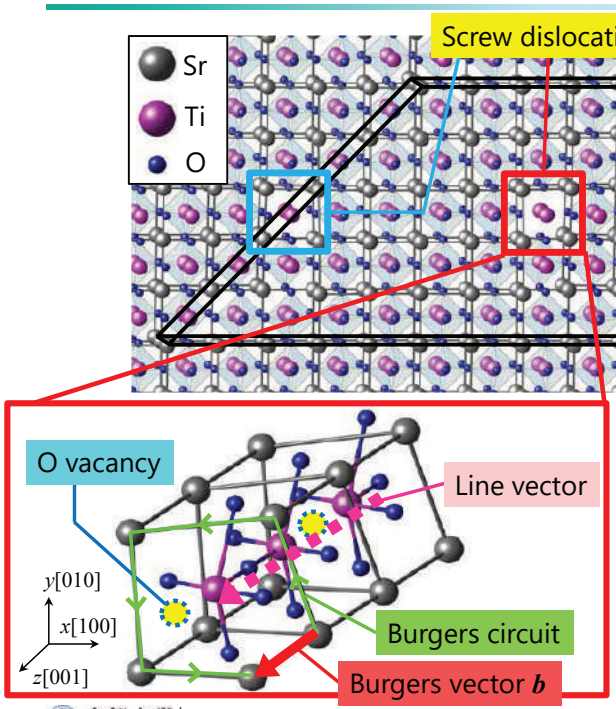


・***b***[001], すべり面(010)のらせん転位

・らせん転位芯のTi-O列に空孔が存在

*C L. Jia, *et al.*, *Phil. Mag. Lett.*, **86**, **11**, 683 (2006)

解析モデル（らせん転位）



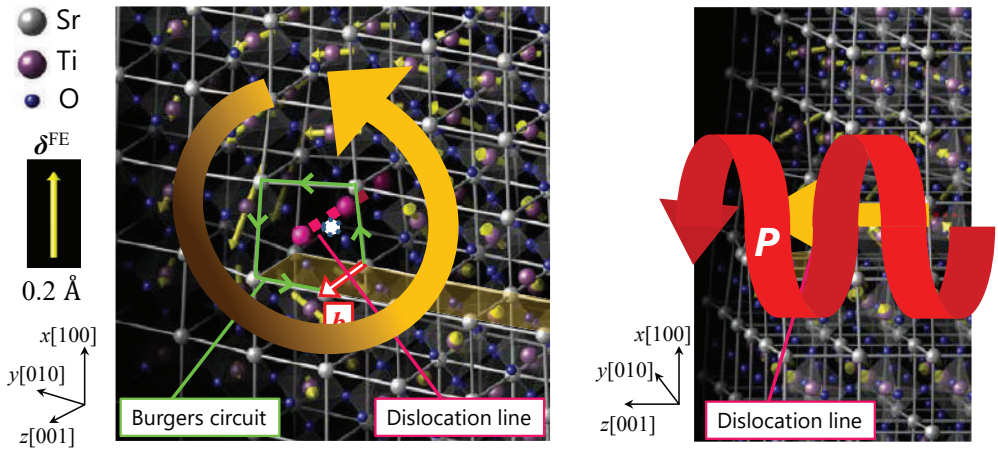
・***b***[001], すべり面(010)のらせん転位

・Dipoleモデル（原子数～500個）

・3次元周期境界条件

・酸素空孔を導入

らせん転位の強誘電特性

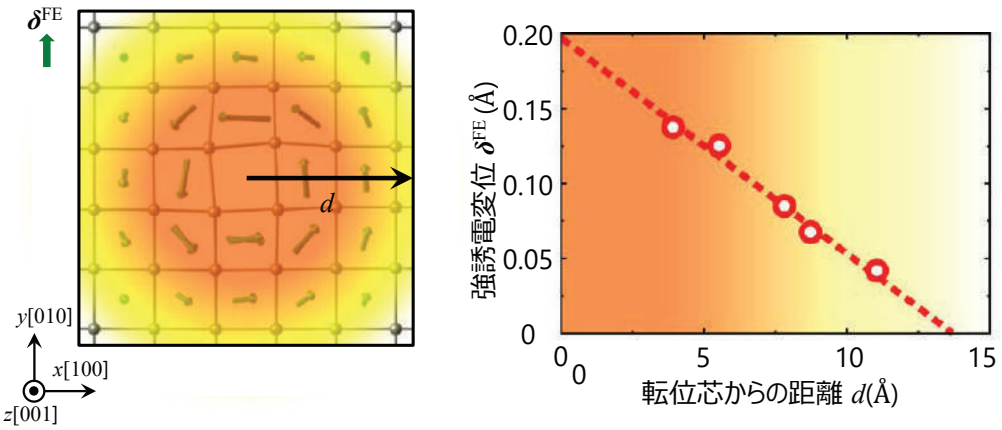


渦 ― 一方向

$SrTiO_3$らせん転位　**らせん**
バーガース回路に沿った**らせん状分極の発現**

強誘電性の発現領域

強誘電変位分布

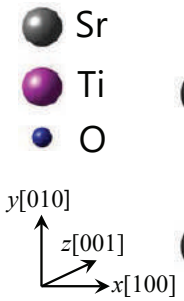


転位芯からの距離の増大 → 強誘電変位減少

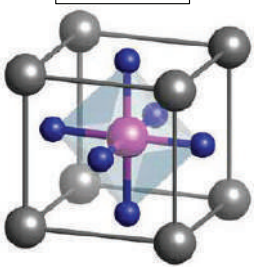
強誘電性は転位芯近傍の局所のみに発現

$SrTiO_3$のひずみによる強誘電相転移

ペロブスカイト型酸化物$SrTiO_3$ (STO)



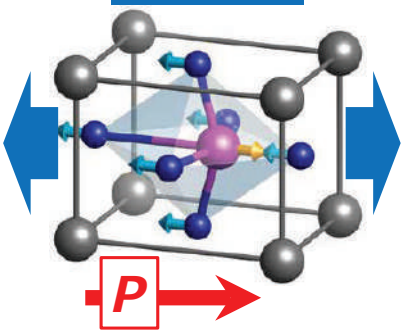
無負荷



分極を示さない

常誘電相

ひずみ負荷



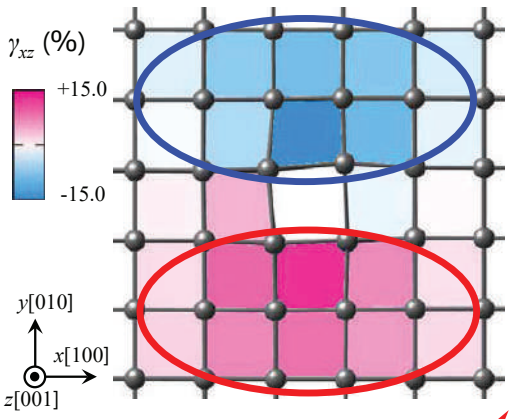
負荷方向に**自発分極**を発現*1

強誘電相

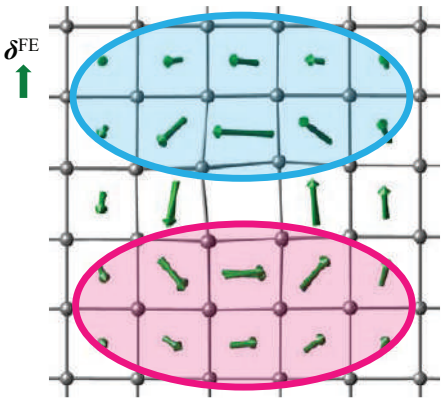
*1 A..Antons, *et. Al., Phys. Rev.* B, **71**, 024102 (2005).

せん断ひずみ場と強誘電性の対応

せん断ひずみ γ_{xz} 分布



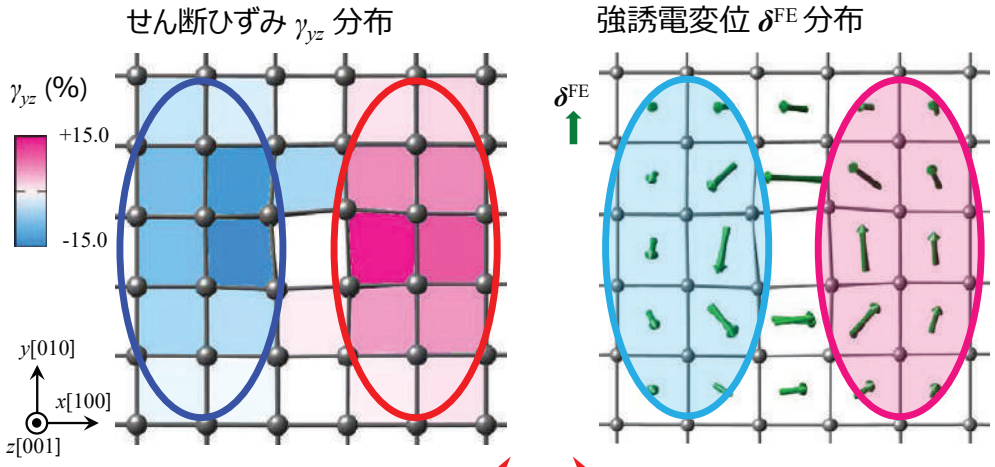
強誘電変位 δ^{FE} 分布



せん断ひずみγ_{xz} ⟷ x方向強誘電変位

対応

せん断ひずみ場と強誘電性の対応

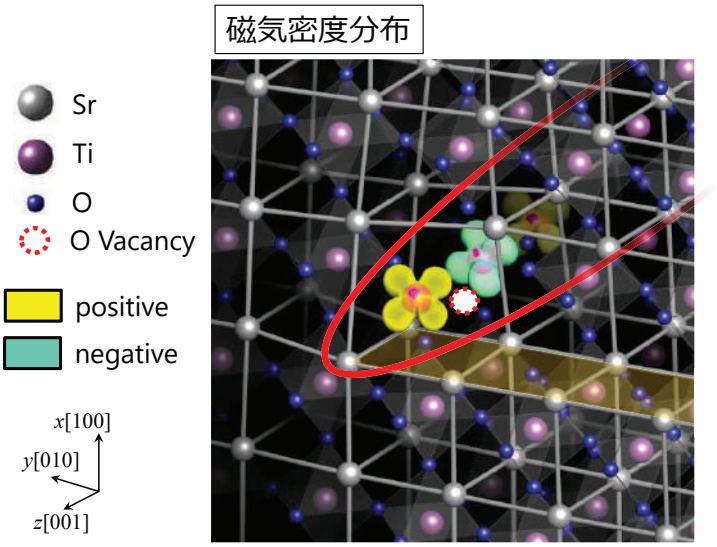


せん断ひずみγ_{yz} ⟷ y方向強誘電変位

対応

らせん転位のせん断ひずみ集中場→強誘電性発現

らせん転位の**磁気特性**



磁気モーメント
転位芯のTi原子に
局在化

異符号・同密度
ラインベクトル方向に
交互に整列

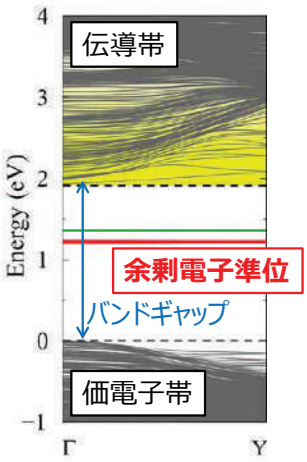
⬇

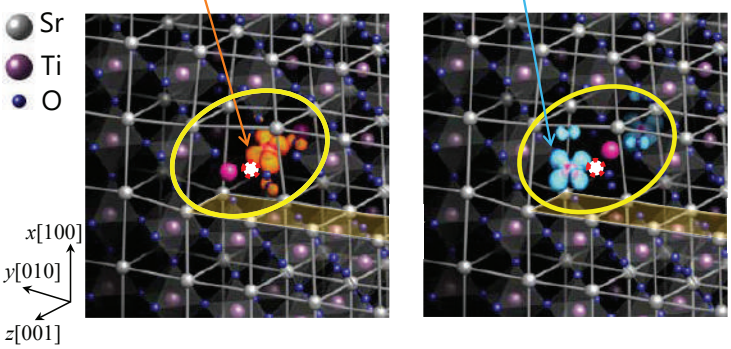
反強磁性(AFM)

$SrTiO_3$らせん転位　**磁性**発現

磁性発現のメカニズム

$SrTiO_3$らせん転位
不定比性による**余剰電子**存在

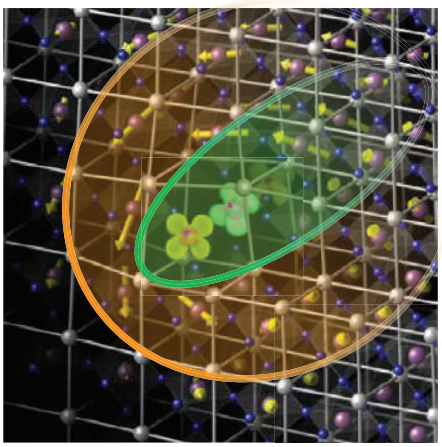




Up-spin, **Down-spin**
それぞれ異なるTi原子に局在化

スピン分極 ➡ **磁性発現**

$SrTiO_3$のらせん転位におけるマルチフェロイクス特性創出



強誘電性　磁性

$SrTiO_3$らせん転位
強誘電性 / **磁性** を同時に示す

マルチフェロイック転位

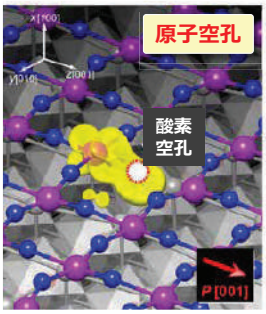
1次元原子スケール マルチフェロイクス

外部負荷によりすべり面上を可動
➡ 可動なマルチフェロイクス

傾角粒界やねじり粒界の作製
➡ マルチフェロイクスの周期構造化

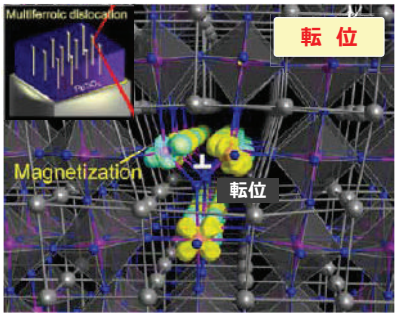
格子欠陥力学による「原子」磁性強誘電体

点欠陥 (0次元構造)



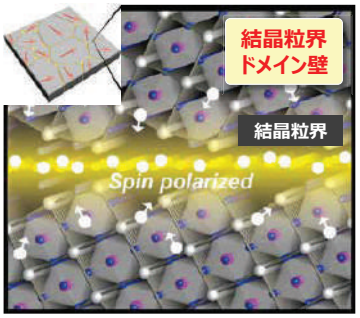
T.Shimada, et al., Phys.Rev.Lett., 115, 107202 (2015)
T.Shimada, et al., Phys.Rev.B, 92, 104106 (2015)
T.Shimada, et al., Adv.Elec.Mater., 2, 160011 (2016)

線欠陥 (1次元構造)



T.Shimada, et al., Nano Lett., 17, 2674 (2017)
T.Shimada, et al., Phys.Chem.Chem.Phys., 21, 22756 (2019)

面欠陥 (2次元構造)



T.Shimada, et al., Nano Lett., 15, 27 (2015)
T.Shimada, et al., Nano Lett., 16, 454 (2016)

欠陥構造　**力学的負荷**　**機能限界寸法を超えた原子スケール機能創出**

幾何学・力学的観点（幾何と力学）によって，材料そのものでは実現し得ないナノ機能を実現

電子欠陥を利用したトポロジカル強誘電体

研究背景｜トポロジカルな秩序の考え方

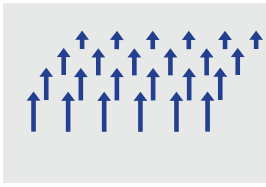
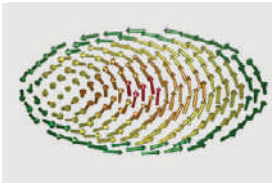
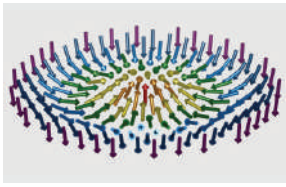
トポロジー **連続的な変形**で遷移できる 2 つの図形は同じと考える

連続的な変形で遷移できる秩序をグループ化（ホモトピー）

ホモトピーの違いで連続変形によって遷移可能かどうかを表現

||

トポロジカルチャージ（不変量）：**Skyrmion number n_{sk}** で特徴づけられる

強磁性 $n_{sk} = 0$	Meron $n_{sk} = 1/2$	Skyrmion $n_{sk} = 1$
		

非零な n_{sk} を持つ秩序は**連続的に $n_{sk} = 0$ の秩序に戻ることができない**

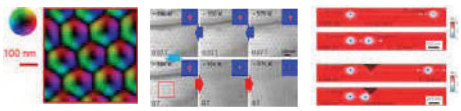
n_{sk} によってトポロジカル秩序を特徴づけられる

致命的問題①｜強誘電体のトポロジカルな秩序

磁性体中のスピン

- 強磁性相互作用
  平行なスピン配置を好む
  強磁性の駆動力
- **Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用** $E_{\mathrm{DM}} = d_{\mathrm{DM}} \sum_{i,j} u_{ij} \cdot (\boldsymbol{m}_i \times \boldsymbol{m}_j)$
  スピンを**ねじる**（トルク）

競合



トポロジカルな秩序の駆動力 **有**

強誘電体中の分極

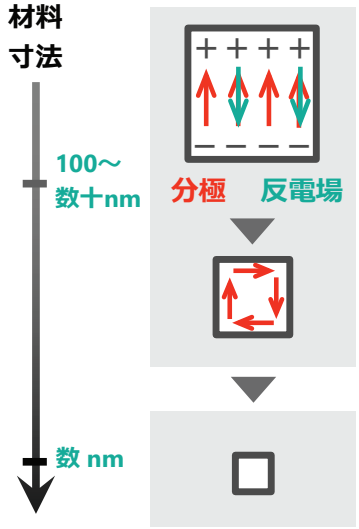
- 長距離相互作用
  クーロン力によって
  イオンの相対変位を引き起こす
  強誘電性の駆動力
- 電気双極子モーメントを
  ねじる相互作用は**存在しない**



トポロジカルな秩序の駆動力 **無**

①**強誘電分極**で**トポロジカルな秩序**を創出するのは**不可能**

致命的問題②｜強誘電体の臨界サイズ



表面の影響が材料全体に及ぶ
表面電荷による反電場が分極を抑制

反電場の影響を最小化するため，
分極は表面に平行（渦状分極）

原子間長距離相互作用
（強誘電性の駆動力）弱まる

強誘電分極 **消失**

ナノドットの**臨界サイズ**：**3～5 nm**[*1, 2]

②強誘電体の超微細化は物理的に**不可能**

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

*1 I. I. Namov, *et. al.*, *Nature*, **432**, 737 (2004). *2 N. J. Polking, *et. al.*, *Nat. Mater.*, **11**, 700 (2012).

研究目的

本研究の目的

問題①：トポロジカル秩序の不可能性

問題②：臨界サイズの存在

という強誘電体の物理的限界を克服した

原子スケール・トポロジカル強誘電体の創出

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

手法の提案｜材料中の余剰電子

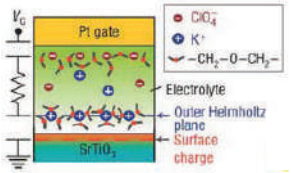
余剰電子｜空孔，転位，粒界（格子欠陥）などにより材料中に**存在**

余剰電子の注入

一部の絶縁体に対し，電子の濃度・分布を**制御**した電荷注入方法が開発されている

- 高電圧の印加[*1]
- EDLT[*2]（Electric-Double-Layer-Transistors）など

EDLTによる$SrTiO_3$への電荷注入[*2]



[*1] A. Q. Jiang, *et.l al., J. Appl. Phys*, **102**, 074109 (2007). [*2] A. Z. Bisri, *et. al., Adv. Mater.*, **29**, 1607054 (2017).

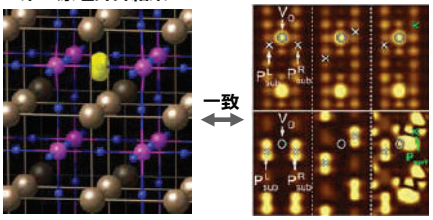
余剰電子 Polaron

局所格子ひずみを伴って
材料中の１点（特定の原子サイト）
に**局在化**

例｜**TiO_2**[*3]，**$SrTiO_3$**[*4]，…

$$E_{\mathrm{pol}} = E_{\mathrm{el}} - E_{\mathrm{st}}$$

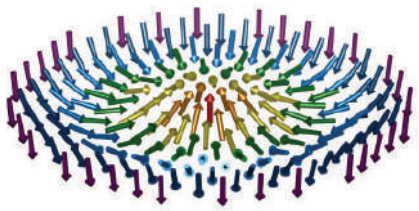
第一原理計算結果　　**走査型トンネル顕微鏡像[*3]**



[*3] M.Setvin, *et. al., Phys. Rev. Lett.*, **113**, 086402 (2014). [*4] X.Hao, *et.al., Phys. Rev. B*, **91**, 085204 (2015).

手法の提案｜対称性から見る Skyrmion の特徴

Skyrmion



面内方向｜**放射状**の構造

面外方向｜中心部で**上**向き
周縁部で**下**方向

分極｜単位体積あたりの電気双極子モーメント（定義）
陽イオンと陰イオンの相対**変位**に起因

面内方向の
放射状変位

面外方向の
変位

強誘電
Skyrmion ?

$SrTiO_3$ (001) 表面の対称性によって実現可能？

手法の提案｜対称性の破れの掛け合わせ

Polaron（局在化した電子）

Polaron 近傍の原子スケール領域で
陽イオンと陰イオンが相対変位

局所的な力場による対称性の破れ

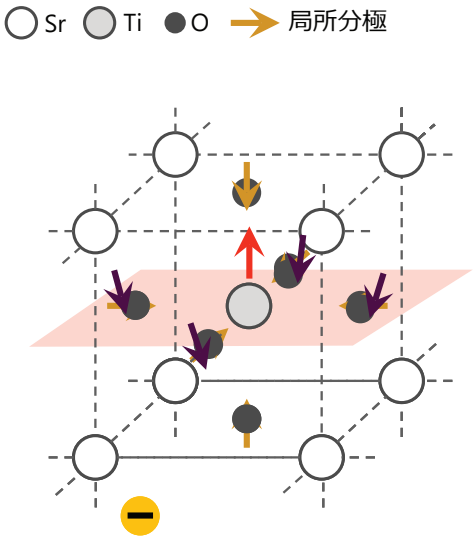
▼

放射状の原子スケール局所分極発現

TiO_2 終端 $SrTiO_3$ (001) 表面

面外方向に陽イオンと陰イオンが
相対変位（Rumpling）

母材の結晶対称性の破れ



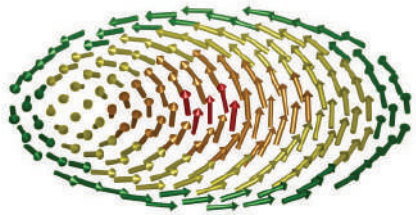
Polaron
局所力場

表面
結晶対称性

強誘電
Skyrmion

手法の提案｜対称性から見る Meron の特徴

Meron



面内方向｜**渦状**の構造

面外方向｜中心部で**上**向き
周縁部で**面内**方向

分極｜単位体積あたりの電気双極子モーメント（定義）
陽イオンと陰イオンの相対**変位**に起因

面内方向の
渦状変位

×

面外方向の
変位

=

強誘電
Meron ?

▼

$SrTiO_3$ Σ5 (001) ねじり粒界の対称性によって実現可能？

手法の提案｜対称性の破れの掛け合わせ

Polaron（局在化した電子）

Polaron 近傍の原子スケール領域で
陽イオンと陰イオンが相対変位

局所力場による対称性の破れ

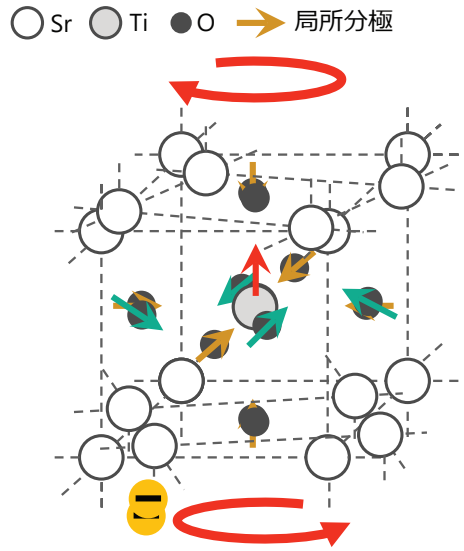
▼

放射状の原子スケール局所分極発現

$SrTiO_3$ Σ5 (001) ねじり粒界

- 面内に渦状の変位
- 鏡面対称性の破れによる
  面外方向の変位

母材の結晶対称性の破れ

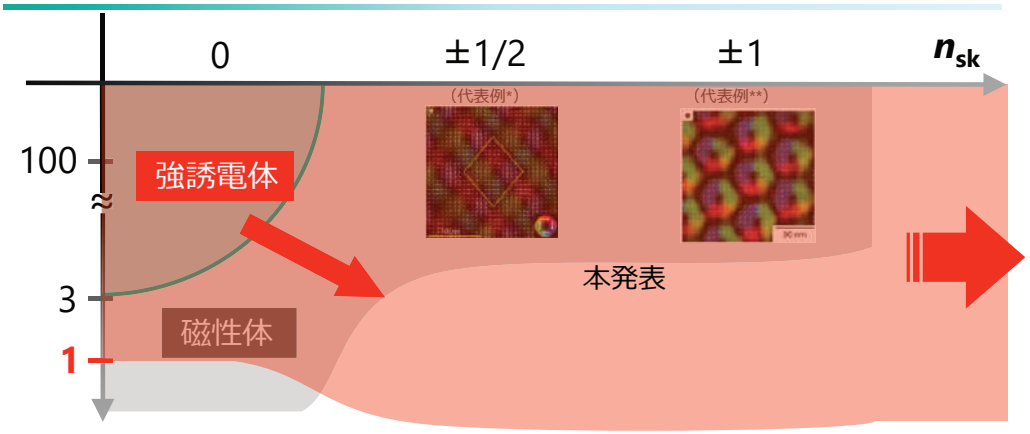


Polaron
局所力場

ねじり粒界
結晶対称性

強誘電
Meron

本研究のまとめ



臨界サイズと**トポロジカルな秩序**という物理的限界を**克服**

▼

さらに**多様なトポロジカル秩序**の創出へ

*X. Z. Yu, *et. al.*, *Nature*, **564**, 95-98 (2018). **X. Z. Yu, *et. al.*, *Nature*, **465**, 901-902 (2010).

Polyacetylene: past and present

Mikio NAKAHARA

Kinki University, Japan

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].

References

[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.

Polyacetylene: Past and Present

中原 幹夫

近畿大学　理工学総合研究所

2022 年 9 月 9 日@IMI

1. 中原幹夫の自己紹介

1. 1971-1976 京都大学理学部 (物理，数学，化学，天文学，生物物理) (中性子星/パルサー)
2. 1976-1978 京都大学理学研究科修士課程 (超流動 ^{3}He)
3. 1980-1981 南カリフォルニア大学物理学科 Research Fellow
4. 1981 京都大学理学研究科博士課程修了
5. 1981-1982 南カリフォルニア大学物理学科 Postdoc
6. 1982 京都大学博士号授与 “Quantum Correction to Solitons in Polyacetylene”
7. 1982-1983 ロンドン大学キングス校数学科留学（古典・量子重力）
8. 1983-1985 アルバータ大学物理学科 Postdoc (超対称性)
9. 1985-1986 サセックス大学数物学科 Postdoc （場の理論）
10. 1986-1993 静岡大学教養部助教授

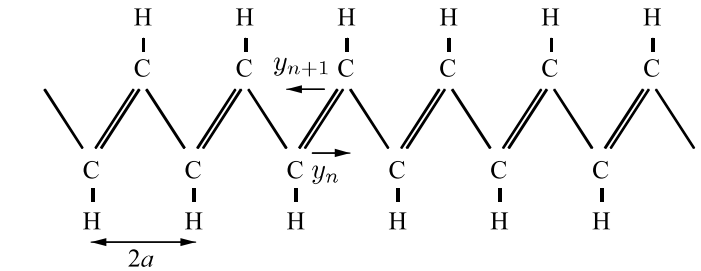
1. 中原幹夫の自己紹介

1. 1993-2017 近畿大学理工学部数学物理学科 → 理学科物理学コース
   助教授 → 教授 (冷却原子，量子計算，量子情報，量子制御)
2. 2001-2008 (?) ヘルシンキ工科大学客員教授
3. 2017-2020 上海大学数学科教授（量子制御，代数的組み合わせ論）
4. 2017- 近畿大学理工学総合研究所研究員
5. 2022- IQM Finland Oy (予定)



2. ポリアセチレンの SSH モデル

trans-$(\mathrm{CH})_n$;



$= -\mathrm{C}=\mathrm{C}-\mathrm{C}=\mathrm{C}-\mathrm{C}=\mathrm{C}-\mathrm{C}=\mathrm{C}-\mathrm{C}=\mathrm{C}-$

Su-Schrieffer-Heeger Hamiltonian

SSH, Phys. Rev. Lett. **44**, 1698 (1979), Phys. Rev. B **22**, 2099 (1980).

$$H = -\sum_{n,s} t_{n+1,n}(C^\dagger_{n+1,s} C_{n,s} + h.c.) + \frac{1}{2}K\sum_n (y_{n+1} - y_n)^2 + \frac{1}{2M}\sum_n P_n^2.$$

$t_{n+1,n} = t_0 - \alpha(y_{n+1} - y_n)$, $a \sim 1.22$A, $|y_n| \sim 0.04$A.

2. ポリアセチレンの SSH モデル

$\{C^\dagger_{n,s}, C_{n',s'}\} = \delta_{n,n'}\delta_{s,s'}, [P_n, y_{n'}] = \delta_{n,n'}\hbar/i$. $L = Na$ fixed.

Dimerization

- Born-Oppenheimer 近似; 電子は固定した格子の上を運動.
- 格子は static, $E_k = (1/2M)\sum_n P_n^2$ を無視.
- 一様な dimerization $y_n = (-1)^n y$.
- $H^d(y) = -\sum_{n,s}[t_0 + (-1)^n 2\alpha y](C^\dagger_{n+1,s}C_{n,s} + h.c) + 2NKy^2$.
- 周期 $a \to 2a$, 電子のゾーン境界 $\pm k_F = \pm\pi/2a$.

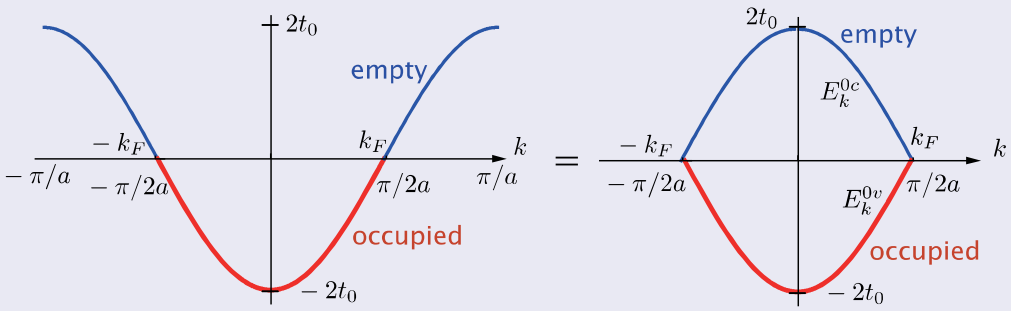
Undimerized Chain ($y = 0$)

- $H^0 = -\sum_{n,s} t_0(C^\dagger_{n+1,s}C_{n,s} + h.c)$.
- $C_{k,s} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{ikan}C_{n,s}$, $C_{n,s} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-ikan}C_{k,s}$, $|k| \le \pi/a$.

2. ポリアセチレンの SSH モデル

Undimerized Chain ($y = 0$)

- $H^0 = -2t_0\sum_{k,s}\cos ka C^\dagger_{k,s}C_{k,s}$.



ポリアセチレンは 1/2-filled バンドをもつ. k_F はバンドの中央にある. (= 金属) 周期を $2a$ とおもうと, 下のバンド (valence band) は完全に満たされ, 上のバンド (conduction band) は完全に空. バンド間のギャップは 0.

2. ポリアセチレンの SSH モデル

Undimerized Chain ($y = 0$)

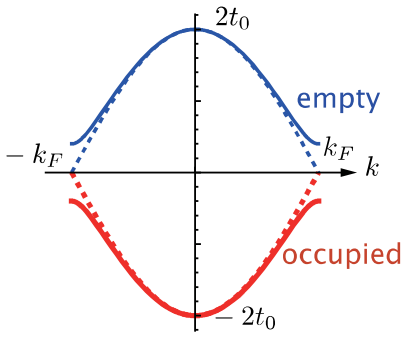
- $C^c_{k,s} = \sum_n e^{ikan}(-1)^n C_{n,s}$, $C^v_{k,s} = \sum_n e^{ikan} C_{n,s}$. $(e^{2ik_F na} = (-1)^n)$
- $C^c_{n,s} = \sum_n e^{-ikan}[C^v_{k,s} + i(-1)^n C^c_{k,s}]$.
- Then $H^0 = \sum_{k,s}(E^{0v}_k C^{v\dagger}_{k,s} C^v_{k,s} + E^{0c}_k C^{c\dagger}_{k,s} C^c_{k,s})$, where
  $E^{0v}_k = -2t_0 \cos ka$, $E^{0c}_k = 2t_0 \cos ka$, 以下 $\epsilon_k = 2t_0 \cos ka$ とおく.

2. ポリアセチレンの SSH モデル

Dimerized Chain ($y \neq 0$)

- $C^c_{k,s} = \sum_n e^{ikan}(-1)^n C_{n,s}$, $C^v_{k,s} = \sum_n e^{ikan} C_{n,s}$.
- $H^d(y) = \sum_{k,s}[\epsilon_k(C^{c\dagger}_{k,s} C^c_{k,s} - C^{v\dagger}_{k,s} C^v_{k,s}) + \Delta_k(C^{c\dagger}_{k,s} C^v_{k,s} + C^{v\dagger}_{k,s} C^c_{k,s})]$
  $+2NKy^2$. ここに $\epsilon_k = 2t_0 \cos ka$, $\Delta_k = 4\alpha y \sin ka$.
- Bogoliubov 変換 $a^v_{k,s} = \alpha_k C^v_{k,s} + \beta_k C^c_{k,s}$, $a^c_{k,s} = \alpha^*_k C^c_{k,s} + \beta^*_k C^v_{k,s}$ で $H^d(y)$ を対角化. $|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2 = 1$. $\alpha_k \to 0, \beta_k \to 0$ as $y \to 0$.
- 非対角要素 $= 0 \to 2\alpha_k\beta_k\epsilon_k + (\alpha_k^2 - \beta_k^2)\Delta_k = 0$. 答えは
  $\alpha_k = \sqrt{(1 + \epsilon_k/E_k)/2}$, $\beta_k = \sqrt{(1 - \epsilon_k/E_k)/2}\,\mathrm{sgn}k$, where
  $E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}$.
- $H^d(y) = \sum_{k,s} E_k(n^c_{k,s} - n^v_{k,s}) + 2NKy^2$, $E^v_k = -E_k, E^c_k = E_k$. $n = a^\dagger a$.
  $H^d(y)$ の第 2 項は $y = 0$ を好むが第 1 項は $y \neq 0$ を好む.

2. ポリアセチレンの SSH モデル



Dimerized Chain ($y \neq 0$)

- スペクトルはバンドの境界で $2\Delta = 2\Delta_{k=\pi/2a} = 8\alpha y$ のギャップを持つ．$|y|$ が大きいほどエネルギーは下がる．
- 基底状態 $|0, y\rangle$ は $n^v_{k,x}|0,y\rangle = |0,y\rangle, n^c_{k,s}|0,y\rangle = 0$ を満たす．
- 基底エネルギー $E_0(y) = -2 \sum_{k\in 1\mathrm{stBZ}} E_k + 2NKy^2$.

2. ポリアセチレンの SSH モデル

$$
\begin{aligned}
E_0(y) &= -\frac{2L}{\pi}\int_0^{\pi/2a}\sqrt{(2t_0\cos ka)^2 + (4\alpha y \sin ka)^2}dk + 2NKy^2 \\
&= -\frac{4Nt_0}{\pi}\int_0^{\pi/2}\sqrt{1-(1-z^2)\sin^2(ka)}d(ka) + 2NKy^2 \\
&= -\frac{4Nt_0}{\pi}E(1-z^2) + \frac{NKt_0^2z^2}{2\alpha^2},
\end{aligned}
$$

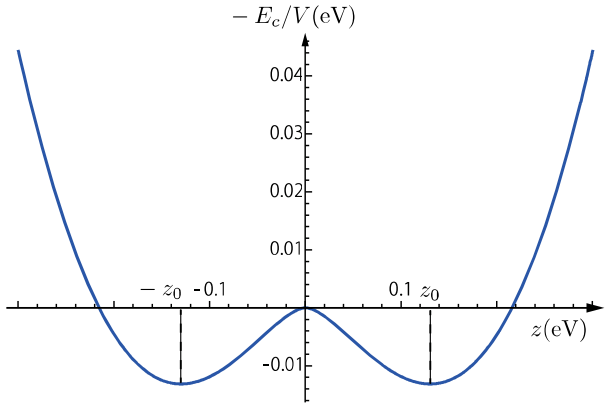
$z = 2\alpha y/t_0$. $E(m) = \int_0^{\pi/2}\sqrt{1-m^2\sin^2 x}dx$ は第 2 種完全楕円積分．

Dimerized Chain ($y \neq 0$)

- $y = 0 \to E(1) = 1$ より $E_0(0) = -4Nt_0/\pi$.
- サイト当たりの凝縮エネルギーは $-\frac{E_c}{N} = \frac{1}{N}[E_0(y) - E_0(0)]$.

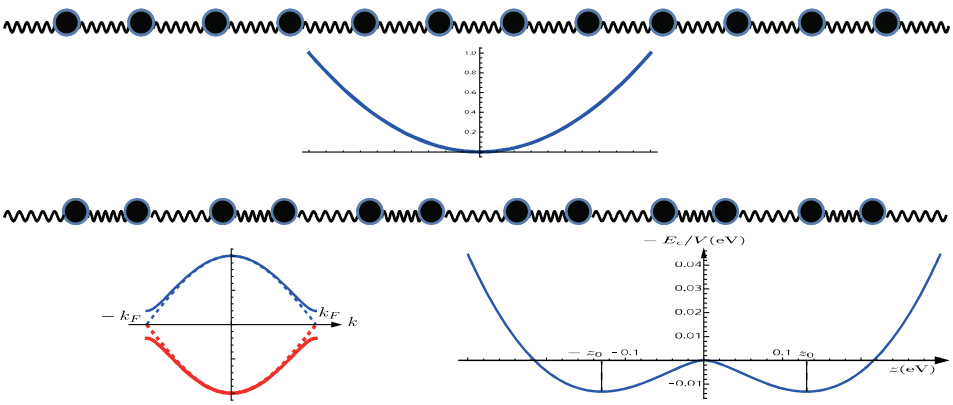
2. ポリアセチレンの SSH モデル

$K = 21\text{eV/A}^2$, $W = 4t_0 = 10\text{eV}$, $\alpha = 4.1\text{eV/A}$,
$E_G = 2\Delta = 8\alpha y = 1.40\text{eV}$.



maximum @ $z = y = 0$, minima @ $z = \pm z_0 \sim \pm 0.13$ eV $\leftrightarrow y_0 = 0.04$ A.
$y_0/a \sim 0.03 \ll 1$. Peierls instability.

2. ポリアセチレンの SSH モデル まとめ



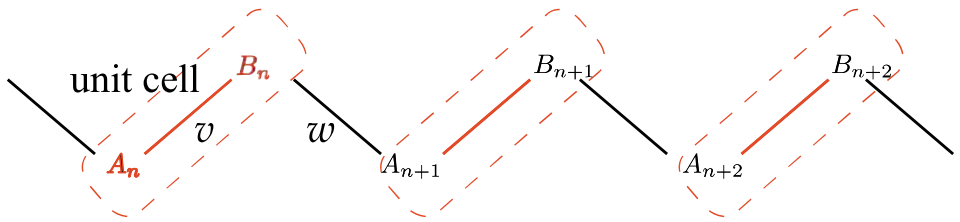
古典的なエネルギー $\propto y^2$ では相転移は起こらない．電子の量子効果で
$y = \pm y_0$ への相転移が起こる．Dynamical Symmetry Breaking.

3. トポロジカル絶縁体

- 絶縁体のうち，トポロジカル不変量で特徴づけられるもの．
- 境界（表面）にはバンドギャップの中に固有値を持つ電子が局在して，金属状態になっている．
- トポロジカル不変量を守る対称性があり，ハミルトニアンの微小変化ではトポロジカル不変量は変化しない．
- バルクのトポロジカル不変量は境界の局在した電子の数に等しい．(Bulk-Edge 対応)
- 以下ではこれをポリアセチレンに対して具体的に示す．

R. Shakar, arXiv:1804.06471.
J.K. Asbóth, L. Oroszlány, András Pályi, A Short Course on Topological Insulators, Springer 2016.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン



- 格子の単位胞を $(A_n - B_n)$ と表す．単位胞内 $A_n - B_n$ 間の結合を v，単位胞間 $B_n - A_{n+1}$ の結合を w とする．
- $H = v\sum_n (A_n^\dagger B_n + B_n^\dagger A_n) + w\sum_n (A_{n+1}^\dagger B_n + B_n^\dagger A_{n+1})$.
- 一般性を失うことなく $v, w > 0$ ととれる．
- A_m に粒子がある状態を $|m, A\rangle$, B_m に粒子がある状態を $|m, B\rangle$ で表す．m は空間自由度，A, B は内部自由度とみなす．

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

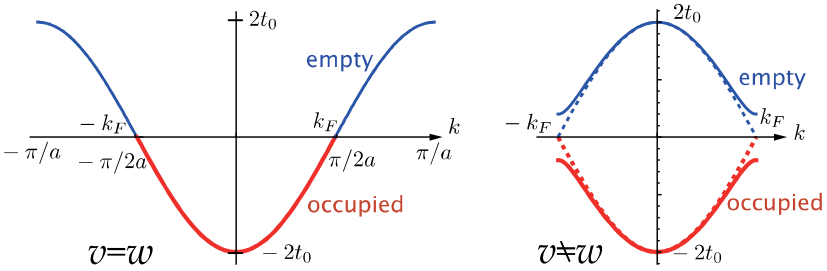
1. 諸定義

- N 単位胞, $M = 2N$ 原子.

$$H = v\sum_{m=1}^{N}(|m,B\rangle\langle m,A| + h.c.) + w\sum_{m=1}^{N-1}(|m+1,A\rangle\langle m,B| + h.c.)$$

各原子が 1 個づつ電子を供給 $\rightarrow$ $v = w$ なら half-filed band で導体.

- $v \neq w$ ならば格子の周期が倍になり，1st BZ は半分になる．バンドの境界にギャップができ絶縁体となる.



4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$N = 8, M = 16$, 基底ベクトル $\{|1,A\rangle, |1,B\rangle, \ldots |8,A\rangle, |8,B\rangle\}$.

$$H = v\sum_{m=1}^{N}(|m,B\rangle\langle m,A| + h.c) + w\sum_{m=1}^{N-1}(|m+1,A\rangle\langle m,B| + h.c.).$$

$$= \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc|cc|cc|cc|cc}
0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0
\end{array}\right).$$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

- $|m, X\rangle \to |m\rangle \otimes |X\rangle \in \mathcal{H}_{\mathrm{ext}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{int}}$.
- $H = v \sum_m |m\rangle\langle m| \otimes \sigma_x + w \sum_m (|m+1\rangle\langle m| \otimes \sigma_+ + |m\rangle\langle m+1| \otimes \sigma_-)$.
  ここに $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$.

2. バルクハミルトニアン

- Edge −− Bulk −− Edge.
- Bulk な性質は $N \to \infty$ で境界条件によらない．周期的境界条件を取ろう．
  $H_{\mathrm{bulk}} = \sum_{m=1}^{N} (v|m, B\rangle\langle m, A| + w|m \pmod N + 1, A\rangle\langle m, B|) + h.c.$
- Eigenstate $H_{\mathrm{bulk}}|\Psi_n(k)\rangle = E_n(k)|\Psi_n(k)\rangle, n \in \{1, \ldots, 2N\}$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

- $H_{\mathrm{bulk}} =$

$$\begin{pmatrix}
0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w \\
v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\
w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0
\end{pmatrix}.$$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

- 並進対称性より Bloch の定理が成立.

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} e^{imk} |m\rangle.$$

ただし単位胞の長さを 1 にとった. $k = 2\pi n/N, n \in \{1, 2, \ldots, N\}$.
k は第 1 BZ の中にある. $k \in [0, 2\pi]$ or $k \in [-\pi, \pi]$.

- $|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle, |u_n(k)\rangle = a_n(k)|A\rangle + b_n(k)|B\rangle$.
- $\hat{H}(k) := \langle k|H_{\text{bulk}}|k\rangle = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle k, \alpha|H_{\text{bulk}}|k, \beta\rangle\langle\beta|$.
- $\hat{H}(k)|u_n(k)\rangle = E_n(k)|u_n(k)\rangle$.
- $\hat{H}(k + 2\pi) = \hat{H}(k), |u_n(k + 2\pi)\rangle = |u_n(k)\rangle$.
- 逆変換 $|m, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in 1BZ} e^{-imk} |k\rangle \otimes |A\rangle$.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$$\begin{aligned}
\hat{H}(k) &= \frac{1}{N} \sum_{m,n} e^{-imk} \langle m|H_{\text{bulk}}|n\rangle e^{ink} \\
&= [v\sigma_x + w(\sigma_+ e^{-ikx} + \sigma_- e^{ikx})] = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ikx} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} \\
&= (v + w\cos kx)\sigma_x + \sin kx \sigma_y.
\end{aligned}$$

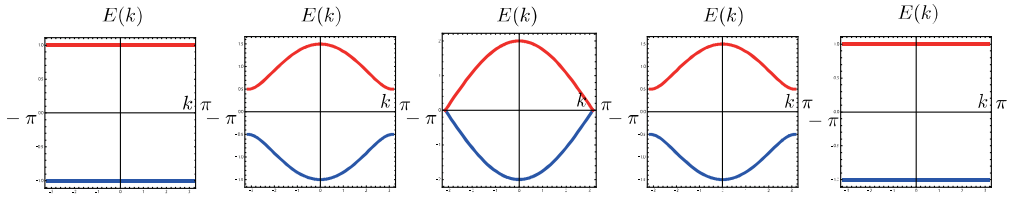
$$\hat{H}(k) \begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix}.$$

固有値

$$E(k) = \pm|v + we^{-ik}|^2 = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos k}.$$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Dispersion relation $E(k) = \pm|v + we^{-ik}|^2 = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos k}$.



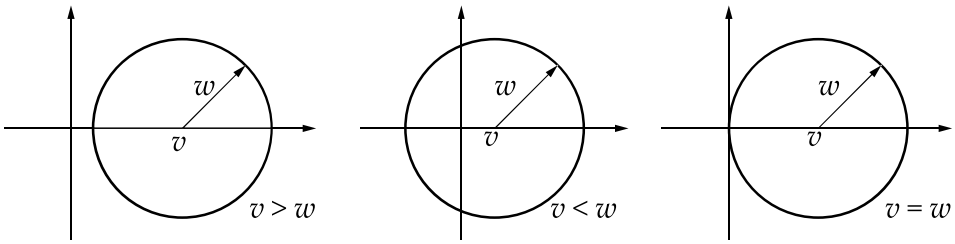
$v = 1, w = 0$ flat band　$v = 1, w = 0.5$　$v = w = 1$ undimerized　$v = 0.5, w = 1$　$v = 0, w = 1$ flat band

- $\Delta = \min_k E(k) = |v - w|$.
- $v = w \to$ 金属．$v \neq w \to$dimerize, Pierls instability, 絶縁体

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

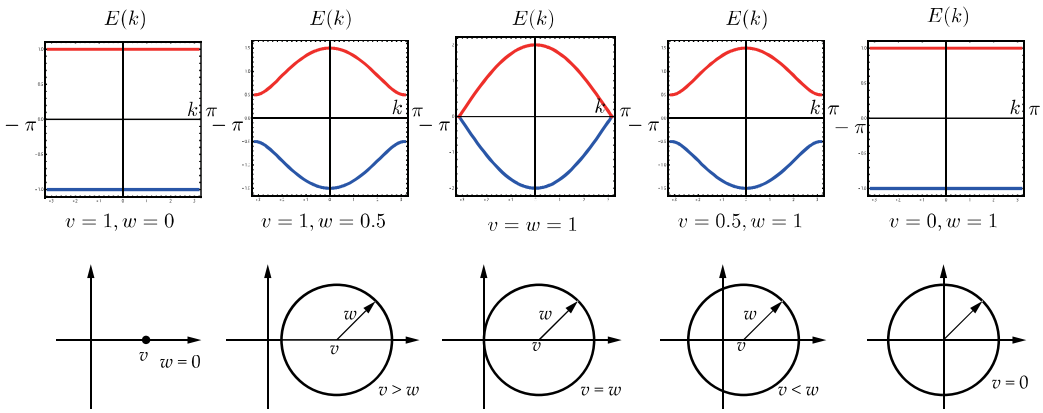
内部状態とトポロジー

- $|u_n(k)\rangle \in \mathcal{H}_{\text{int}} = \mathbb{C}^2$.
- $H = d_0\sigma_0 + \sum_{i=x,y,z} d_i(k)\sigma_j = d_0\sigma_0 + \boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}$,
  $d_0 = d_z = 0, d_x = v + w\cos k, d_y = w\sin k$．" 磁場中のスピン"．
- $k = -\pi \to \pi$ で $\boldsymbol{d}$ は中心 $(v, 0)$ 半径 w の円を 1 周する．
- 重要! $v > w$ ならば円は原点の周りを回らない，$v < w$ ならば円は原点の周りを 1 周する．$S^1(1\text{ BZ}) \to S^1(\boldsymbol{d})$ は基本群 $\pi_1(S^1)$ で分類される．$v = w$ でギャップが消える@$k = \pm\pi$.



4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Dispersion relation $E(k) = \pm|v + we^{-ik}|^2 = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos k}$.



Bulk Winding Number $\nu = \begin{cases} 0 & v > w \\ 1 & v < w \end{cases}$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$v = 1, w = 0$

$$\begin{pmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \pm v \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

$H(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle) = \pm v(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle)$.

$v = 0, w = 1$

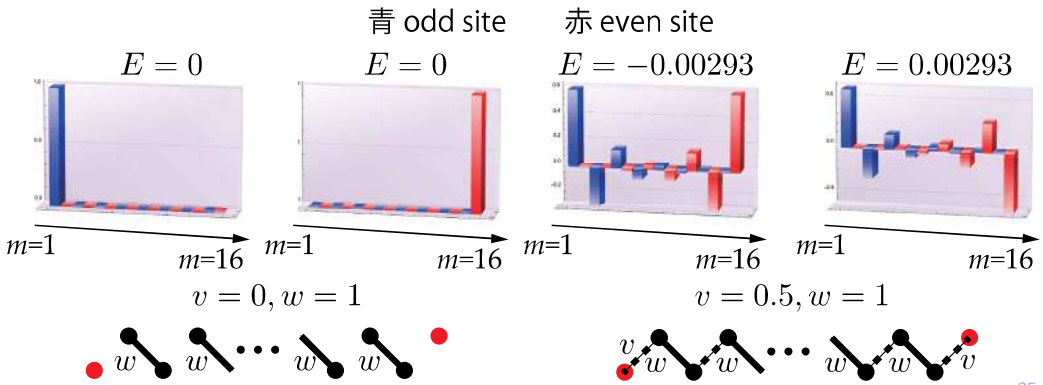
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \pm w \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$H(|m, B\rangle \pm |m_1, A\rangle) = \pm v(|m, B\rangle \pm |m + 1, A\rangle)$.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

有限系における Edge States

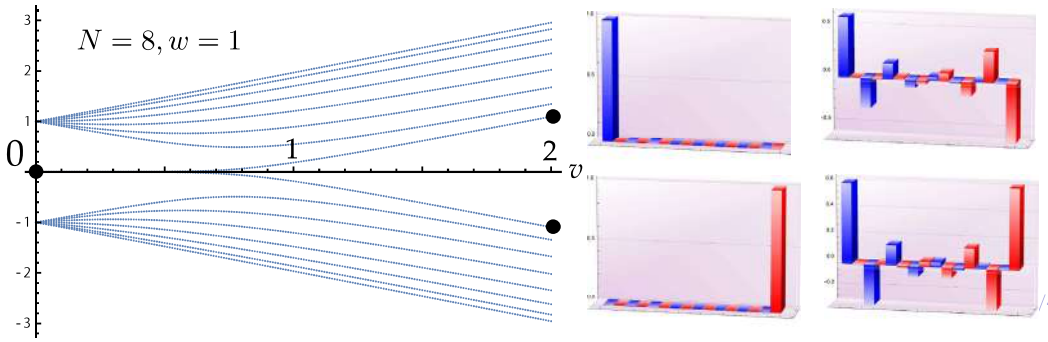
- 境界状態は $N \to \infty$ で非局在 ($v > w$, $\nu = 0$, 自明) または局在 ($v < w$, $\nu = 1$, トポロジカル).
- $N = 8, M = 16$ の例. $E = 0$ から bonging-antibonding pair. トポロジカル相 $v = 0, w = 1$ と $v = 0.5, w = 1$.



4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

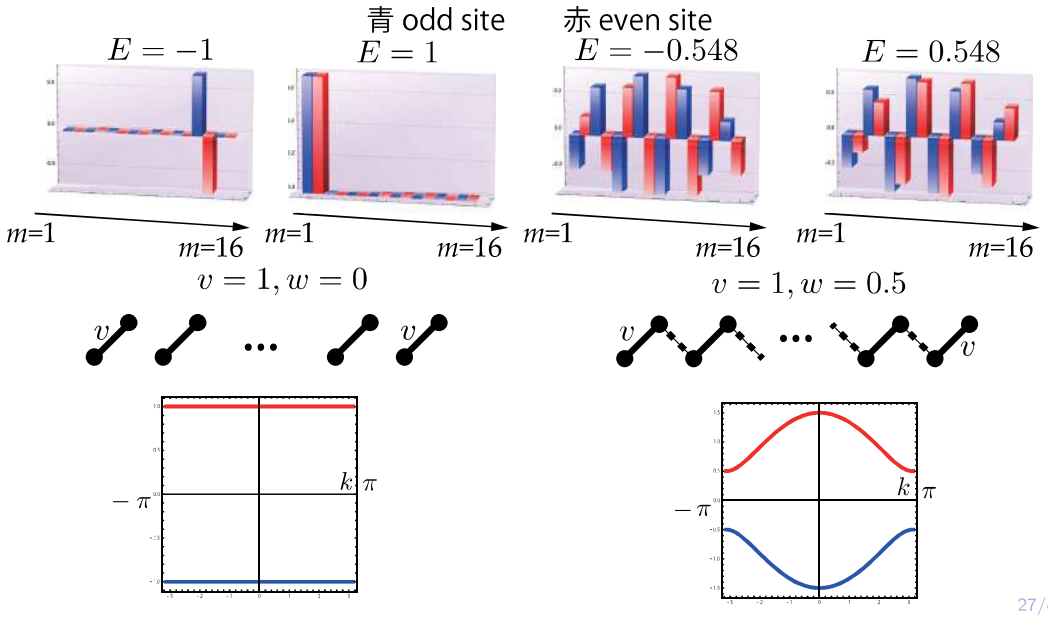
- $v = 0, w = 1$. Eigenvalues:
  $\{-1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0\}$
- Edge states $H|1, A\rangle = H|N, B\rangle = 0$.

$$N = 2 \to \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$



4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

- 自明な相，$v = 1, w = 0$ と $v = 1, w = 0.5$.



4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Chiral Symmetry

- H は Chiral 対称性を持つ $\leftrightarrow \Gamma H \Gamma^\dagger = -H$. ただし
  $\Gamma^\dagger = \Gamma = \Gamma^{-1} \rightarrow \Gamma^2 = I$.
- Sublattice A と Sublattice B への射影演算子
  $P_A = \sum_{m=1}^{N} |m, A\rangle\langle m, A|, P_B = \sum_{m=1}^{N} |m, B\rangle\langle m, B|$.
  $H = \sum_{m,m'} |m, A\rangle\langle m', B| + h.c.$ より $H = P_A H P_B + P_B H P_A$.
- $\Gamma = P_A - P_B = \oplus_m \sigma_z$ は Chiral; $\Gamma H \Gamma = -P_A H P_B - P_B H P_A = -H$.
- $H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \rightarrow H\Gamma|\Psi_n\rangle = -\Gamma H|\Psi_n\rangle = -E_n\Gamma|\Psi_n\rangle$.
- $E_n \neq 0 \rightarrow |\Psi_n\rangle \neq \Gamma|\Psi_n\rangle$.
- $E_n = 0 \rightarrow |\Psi_n\rangle$ は A または B にのみ support をもつようにできる.
  $H|\Psi_n\rangle = 0 \rightarrow HP_A|\Psi_n\rangle = H(I + \Gamma)|\Psi_n\rangle = (I - \Gamma)H|\Psi_n\rangle = 0$.
  P_B も同様. $P_A|\Psi\rangle$ は Γ の固有ベクトル ;
  $\Gamma P_A|\Psi_n\rangle = \Gamma(I + \Gamma)|\Psi_n\rangle = (\Gamma + I)|\Psi_n\rangle = P_A|\Psi_n\rangle$.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Chiral Symmetry of SSH Model

- $\Gamma : |m, A\rangle \mapsto |m, A\rangle$, $|m, B\rangle \mapsto -|m, B\rangle$ は σ_z で表現される.
- $H(k) = d \cdot \sigma$. $\Gamma H(k) \Gamma = -H(k)$ より $d_z = 0$.
- $d \in \mathbb{R}^2$ より $\pi_1(S^1)$ は意味を持つ.

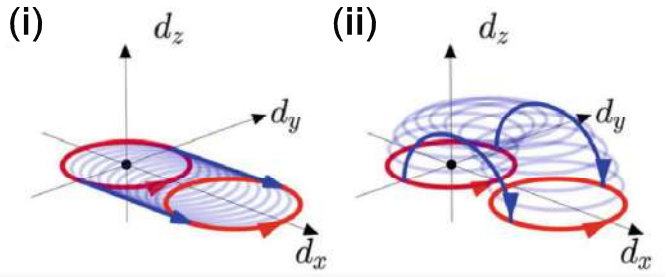
Winding Number

- $\tilde{d}(k) = d(k)/|d(k)|$ は単位円上のベクトル.
- $\nu = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\pi}^{\pi} \left(\tilde{d}(k) \times \frac{d\tilde{d}(k)}{dk} \right)_z dk.$
- $H(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h(k)^* & 0 \end{pmatrix}, \quad h(k) = d_x(k) - i d_y(k).$
- $\ln h(k) = \ln |h| + i \arg h$. $\arg h = e^{i\theta(k)}, \tan \theta(k) = -d_y/d_x$.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Chiral Symmetry of SSH Model

- $\nu = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\oint (d_x \partial_k d_y - d_y \partial_k d_x)\, dk = \frac{1}{2\pi} \oint \partial_k \arg h \, dk$
  $= \dfrac{1}{2\pi i} \displaystyle\oint \partial_k \ln h(k) \, dk.$
- ν を変えるには (i) $v > w \leftrightarrow v < w$ とするか, (ii) d_z を導入する.
  (i) はバルクのギャップを閉じる ($v = w$) 必要があり, (ii) は Chiral 対称性を破る必要がある.

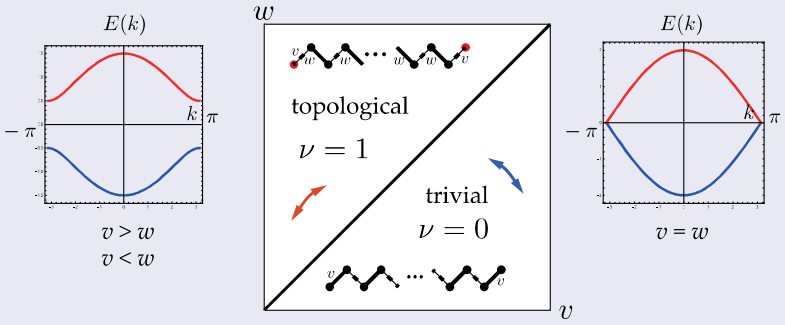


From "A Short Course on Topological Insulators" by János K. Asbóth、 László Oroszlány、 András Pályi Pályi

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Edge States

- H の断熱変化を考えよう．(i) パラメタはゆっくり変化 (ii) 対称性は保つ (iii) $E = 0$ 付近のバルクギャップは閉じない．このとき多体基底状態は多体基底状態に移る．



- 赤 (青) の矢印で結ばれるハミルトニアンは断熱同値．赤と青のハミルトニアンは非同値．途中でギャップがゼロとなる線を横切る．

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

トポロジカル不変量

- トポロジカル不変量は断熱不変量，整数．
- 熱力学極限 $N \to \infty$ でのみ well defined．対称性でプロテクトされる．
- 一つの端における edge state の数＝トポロジカル不変量．
  $-\epsilon < -E_1 < E_0 = 0 < +E_1 < \epsilon$; 端に局在化したモード．
  $H_A = P_A H P_A$, $H_B = P_B H P_B$, $N_A = \dim\ker H_A$, $N_B = \dim\ker H_B$ とすると，$\pm E_1$ 状態はペアで生じてペアで消えるので $N_A - N_B$ は断熱変化で不変量．
- E_0 状態はバルクギャップの中には存在しないので，バルクには指数関数的に減衰する．

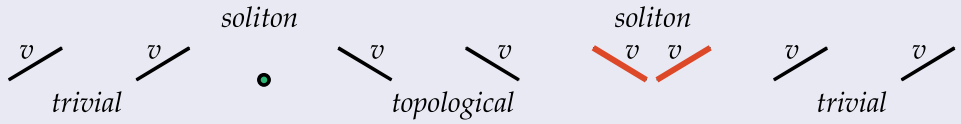
4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

Bulk-Edge 対応

- 巻数 ν (bulk) vs $N_A - N_B$ (low energy edge states).
- SSH の trivial 相 ($v > w$) では $\nu = N_A - N_B = 0$. トポロジカル相 ($v < w$) では $\nu = N_A - N_B = 1$.
- bulk トポロジカル不変量から端における低エネルギー物理が分かる; Bulk-Edge Correspondence. (APS index theorem?)

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

SSH におけるソリトン



- trivial-topological-trivial 構造. $m = 3$ には monomer, $m = 5, 6$ には trimer. これらをソリトンとよぶ.
- ソリトンに局在化したゼロモードが存在する.
- これらは半整数粒子数 (Fermion number) を持つ. 分数電荷.

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$$H = \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc|cc|cc|cc|cc} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} 1A \\ 1B \\ 2A \\ 2B \\ 3A \\ 3B \\ 4A \\ 4B \\ 5A \\ 5B \\ 6A \\ 6B \\ 7A \\ 7B \\ 8A \\ 8B \end{array}$$

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$m =$ 3-solition

$$H = \left(\begin{array}{cc|cc|cc} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} 2A \\ 2B \\ 3A \\ 3B \\ 4A \\ 4B \end{array}$$

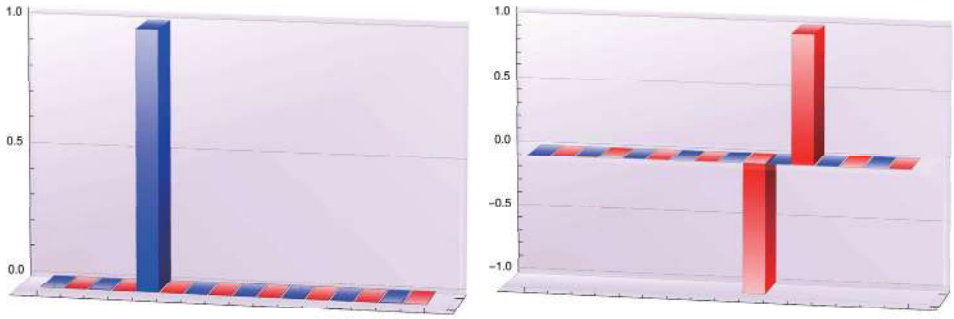
A に support. $H|3, A\rangle = 0$.

$m = 5, 6$-solition

$$H = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 \\ \hline 0 & v & 0 & v \\ 0 & 0 & v & 0 \end{array}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} 5A \\ 5B \\ 6A \\ 6B \end{array}$$

B に support. $H(|5, B\rangle - |6, B\rangle) = 0$.

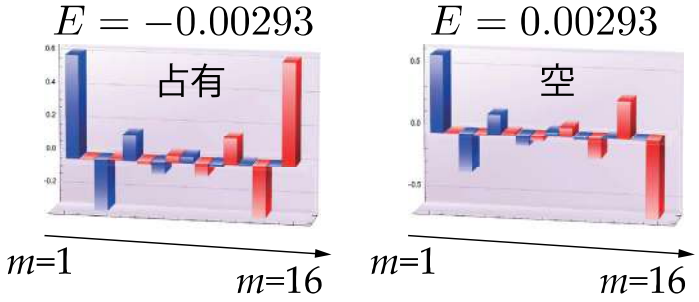
4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン



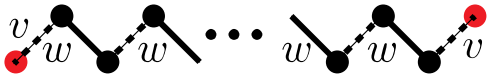
- 一様な trivial 相に topological 相の島ができると，偶数のソリトンが発生する．A sublattice ソリトン+B sublattice ソリトン．
- $v \neq 0, w \neq 0$ の時は，ソリトン間の距離が短いとエネルギーは 0 から $\pm E_1$ に分裂 (bonding-antibonding pair).

4. トポロジカル絶縁体としてのポリアセチレン

$E = -0.00293$ 占有 $E = 0.00293$ 空



$v = 0.5, w = 1$



- 基底状態では $-E_1$ 状態が占有される．これが 2 つのソリトンに共有され，各ソリトンには半分の粒子が存在する．
- 実際はスピンの自由度があるので，観測するとどちらかのスピンをもつ粒子が 1 個観測され，分数粒子数は観測されない．

まとめと展望

- ポリアセチレンは物理的，工学的，化学的，数学的に面白い．
- ポリアセチレンの相はトポロジカル不変量で記述される．トポロジカル絶縁体の toy model．ある程度は初等的な線形代数で説明できる．
- Bulk-Edge 対応をもつ．指数定理で説明できるか？Fermi 面付近でハミルトニアンを線形化すると Dirac 方程式で表される (Takayama-Lin-Liu-Maki の連続モデル).
- 分数粒子数をもつが，実際はスピンで隠れてしまう．TTF-TCNQ はほぼ trimer 構造をもち，スピンで隠れない．観測できるか？
- Geometry, Topology and Physics, 3rd edition ではちゃんと説明する予定です．ご期待．
- 連続モデルではソリトン格子解が求められており，Jacobi の Elliptic 函数 (sn) で表される．MN and K Maki, Phys. Rev. B 24, 1045 (1981).

Various nanophysical properties of curved quantum systems

Hisao TAIRA

Hokkaido University of Education, Japan

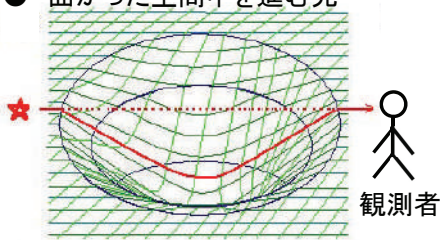
The present study shows theoretical and numerical analysis of quantum transport phenomena in nanostructures with curvature. In nanoscale thin films with curvature, effective scalar potentials arise due to geometric curvature. Nanoscale materials with twisted atomic structures also give rise to effective 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.

曲面量子系における多様なナノ物性

北海道教育大学札幌校　平　久夫

曲がった空間における興味深い現象(光)

- 曲がった空間中を進む光



光の進む経路

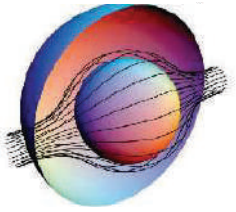
観測者：光は直進

空間の曲がりを認識できない

- 透明マントへの応用



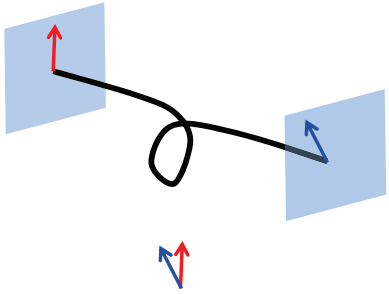
元東大：S. Tachi



光の経路を制御

曲がった空間における興味深い現象(光)

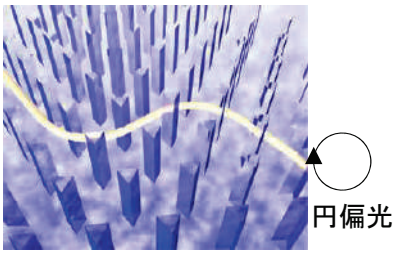
● ねじれ光ファイバー



偏光の向きが異なる
→ Berry位相に起因

R. Y. Chiao *et al.*,
Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 937.

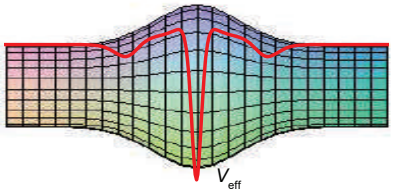
● 光学結晶中の光のホール効果



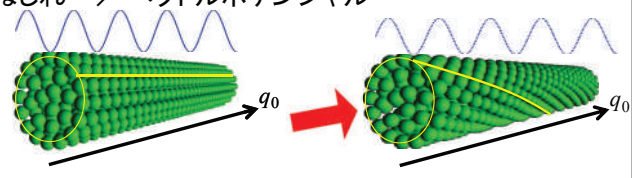
Berry位相に起因
M. Onoda *et al.*,
Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 083901.

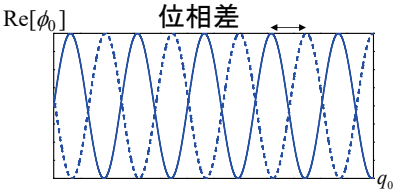
曲がった空間における興味深い現象(電子)

曲がり → スカラーポテンシャル



ねじれ → ベクトルポテンシャル



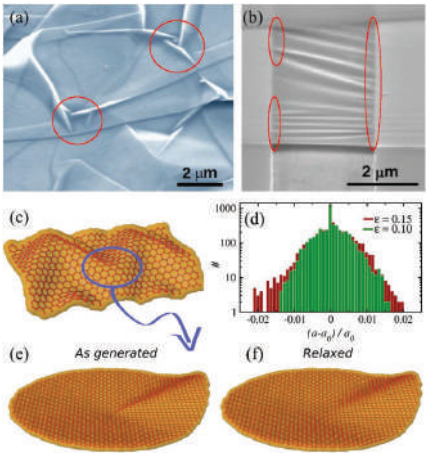


幾何構造が電磁場を生む

曲面系の例

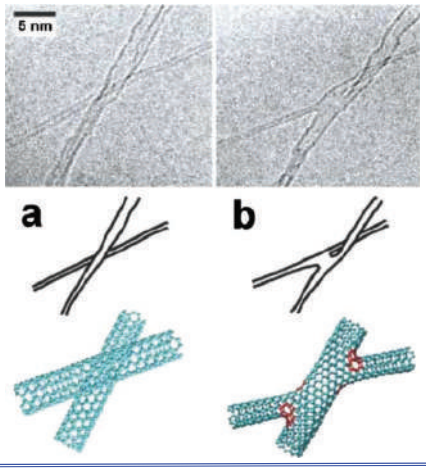
● グラフェン

V. M. Pereira *et al.* Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 156603.



● 単層カーボンナノチューブ

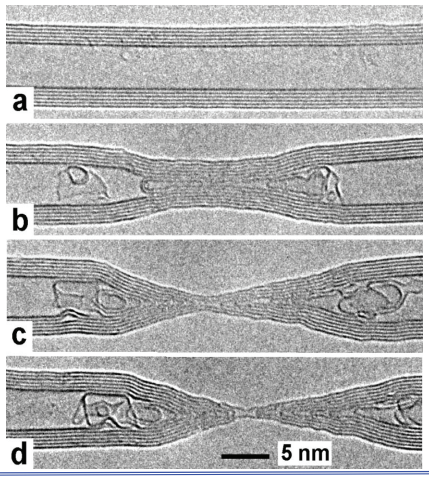
A. V. Krasheninnikov *et al.*, J. Appl. Phys. **107**, (2010) 071301.



有限曲率を持つ擬一次元系

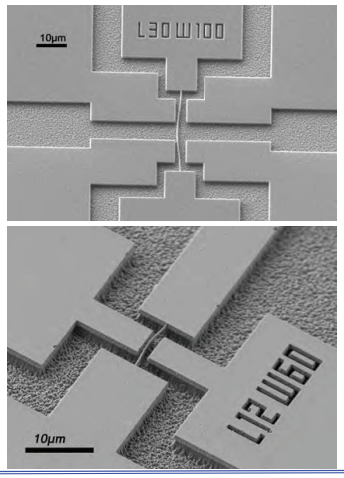
● 多層カーボンナノチューブ

F. Banhart *et al*., Phys. Rev. B **71** (2005) 241408(R).

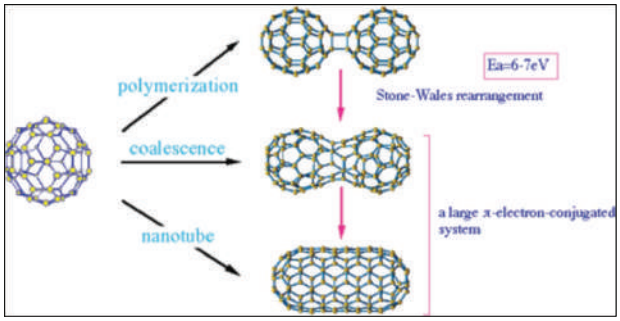


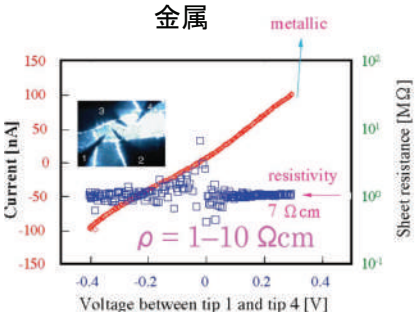
● SiO2ナノワイア

B. Charlot *et al.* Proc. of DTIP (2008) 254.



ピーナッツ型フラーレンポリマーC60



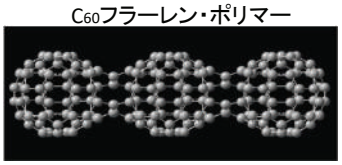


J. Onoe *et al.*, Appl. Phys. Lett. **82**, 595 (2003)

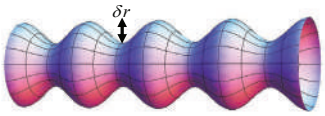
ピーナッツ型フラーレンポリマーC60のTLL指数

H. Shima *et al.*, Phys. Rev. B, **79** (2009) 201401(R).

C60フラーレン・ポリマー



連続体

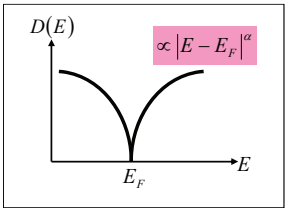


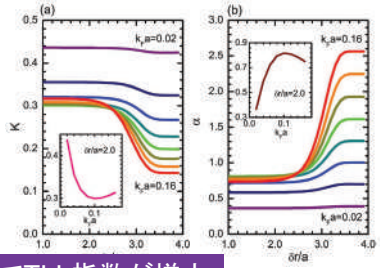
一次元系 → 電子相関あり

1粒子状態密度

$$n(E) \propto |E - E_F|^{\alpha}$$

α：朝永ーLuttinger指数

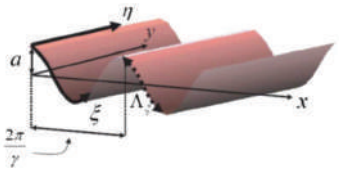


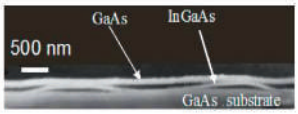


変形部の振幅を変調することでTLL指数が増大

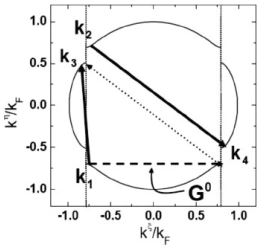
表面変調による電気抵抗率の飛び

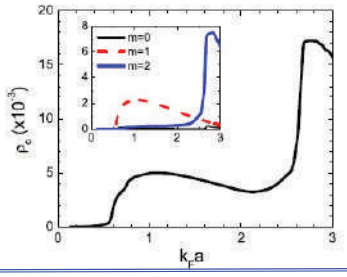
S. Ono & H. Shima, PRB **79** (2009) 235407.　Prinz, pss(b) **243** (2006) 3333.





電気抵抗率ρに特定の振幅で飛びが生じる　$\rho = \rho_C \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \frac{h}{e^2}$

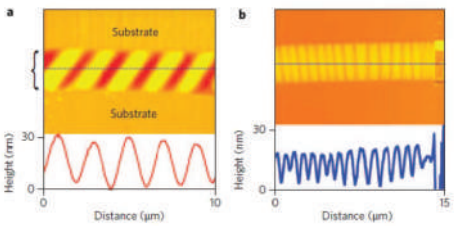


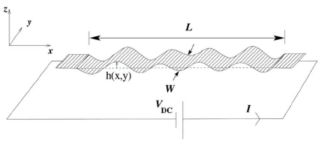


表面変調による電気抵抗率の飛び

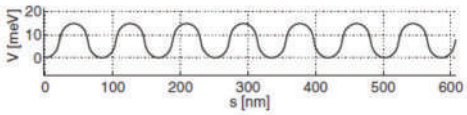
曲面に拘束されたDiracフェルミオン

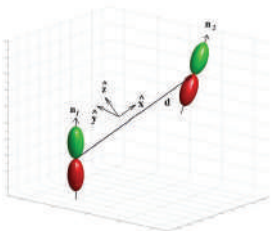
Bao *et al*., Nature Nanotech. (2009)





Isacsson *et al,* PRB **77** (2008) 035423.





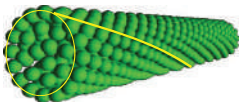
ねじれ率誘起磁場

S. Takagi and T. Tanzawa, Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 561 .
K. A. Mitchell, Phys. Rev. A **63** (2001) 042112.
L. I. Magarill and M. V. Éntin, J. Exp. Theor. Phys. **96** (2003) 766.

もう一つの興味深い幾何効果＝ねじれ

曲率　　：有効電場

ねじれ率：有効磁場



ねじれ量子細線中の電子に位相が付加

$$\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\frac{d}{dq_0}+\tau\langle L\rangle\right)^2\psi-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\kappa^2}{4}-\frac{\tau^2}{\hbar^2}\left(\langle L^2\rangle-\langle L\rangle^2\right)\right]\psi=E\psi$$

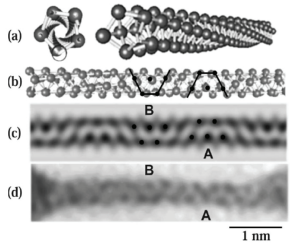
有効ベクトルポテンシャル

- τ ：ねじれ率
- $L(q_0)$：角運動量演算子
- κ ：中心軸の曲率

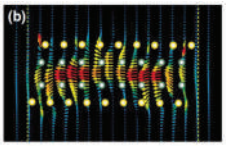
ねじれ系の例

金

Oshima *et al.*, PRL **91** (2003) 205503.



Ono & Hirose, PRL **94** (2005) 206806.



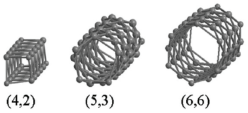
ナノソレノイド

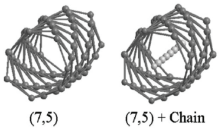
$B \approx 0.01\,\mathrm{T}$

by $V \approx 1\,\mathrm{mV}$

銀

Elizondo *et al.*, PRB **73** (2006) 045431.

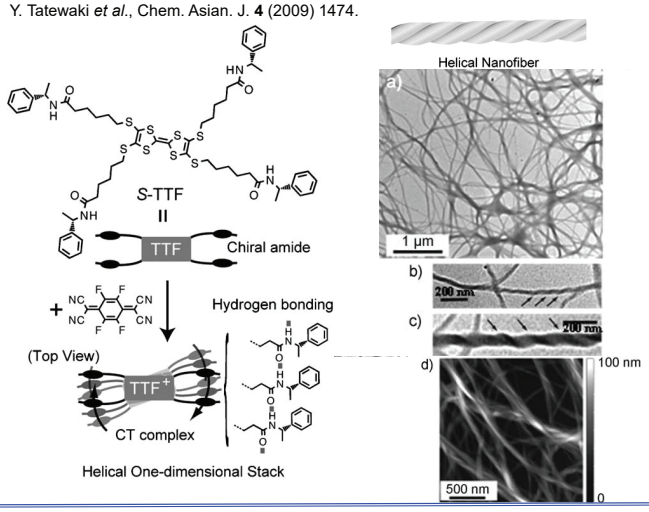




ねじれ系の例

- 平面状分子がねじれながら積層

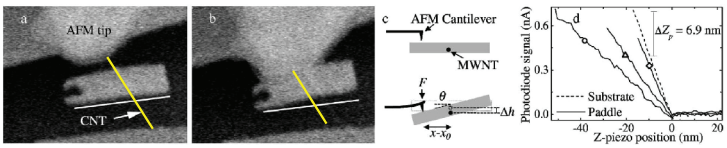
Y. Tatewaki *et al.*, Chem. Asian. J. **4** (2009) 1474.



ねじれ構造の動的制御

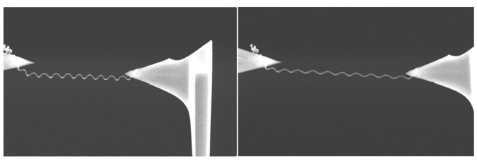
- パドルを回転

Williams *et al.*, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 255502.



- カーボンナノコイルを伸長

X. Chen *et al.*, Nano. Lett. **3** (2003) 1299.



動機と目的

動機

電子状態の幾何誘起電磁場に基づく議論が十分なされていない。

目的

電子状態が幾何誘起電磁場によりどう変化するかを定量的に明らかにする。

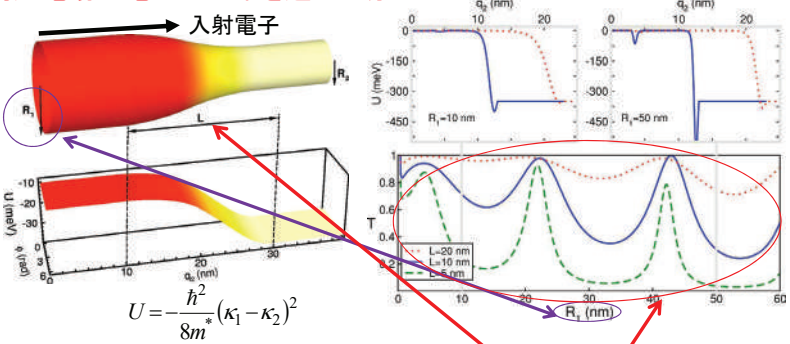
曲面系 ： 幾何学的曲率効果が電子束縛状態にどの程度働くかを調べる。

ねじれ系： ねじれ変形に起因する余分な量子位相による物性変化を定量的に解析する。

曲率を有する円筒の電子透過率

A. Marchi *et al.*, Phys. Rev. B **72** (2005) 035403.

幾何誘起電場は電子透過率を通して効く



$$U = -\frac{\hbar^2}{8m^*}(\kappa_1 - \kappa_2)^2$$

パラメータ：(10,0)半導体カーボンナノチューブ

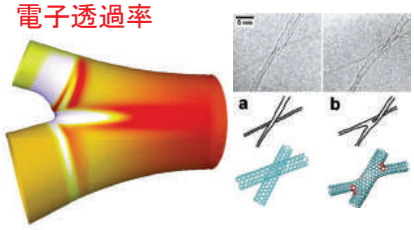
$m^* = 0.173 m_0 \quad R_2 = 0.397\text{nm}$

L小で透過率小

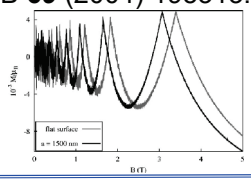
電子束縛状態と曲率の関係を議論できない

曲面量子系の輸送問題の研究

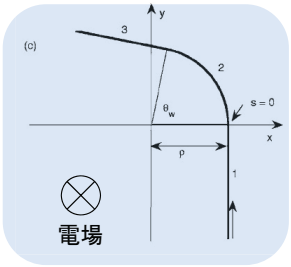
- G. Cuoghi *et al.*,
  Phys. Rev. B **79** (2009) 073410.
  電子透過率



- D. V. Bulaev *et al.*,
  Phys. Rev. B **69** (2004) 195313.
  磁気抵抗率



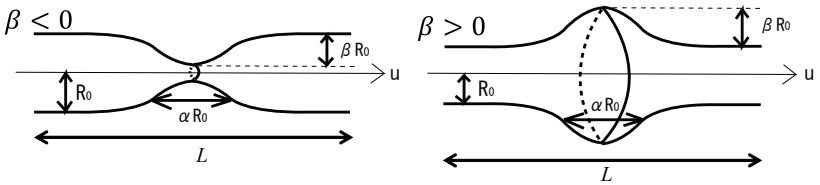
- E. Zhang *et al.*,
  Phys. Rev. B **75** (2007) 085308.
  スピン偏極率



電子束縛状態と曲率の関係を議論していない

Gauss変形された円筒面

Gauss変形 $R(u) = R_0\left[1+\beta\exp\left(-\frac{2u^2}{R_0^2\alpha^2}\right)\right]$

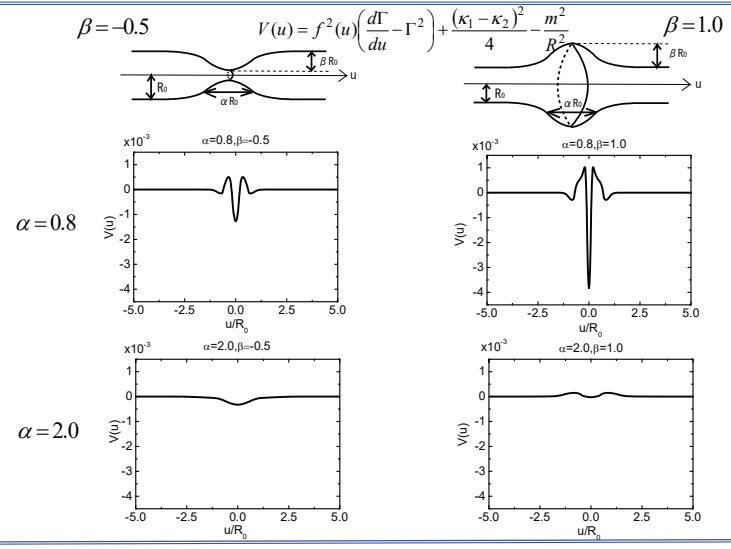


$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\sum_{a,b=1}^{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q_a}\left(\sqrt{g}g^{ab}\frac{\partial}{\partial q_b}\right)\psi(q_1,q_2)-\frac{\hbar^2}{8m^*}(\kappa_1-\kappa_2)^2=E\psi(q_1,q_2)$$

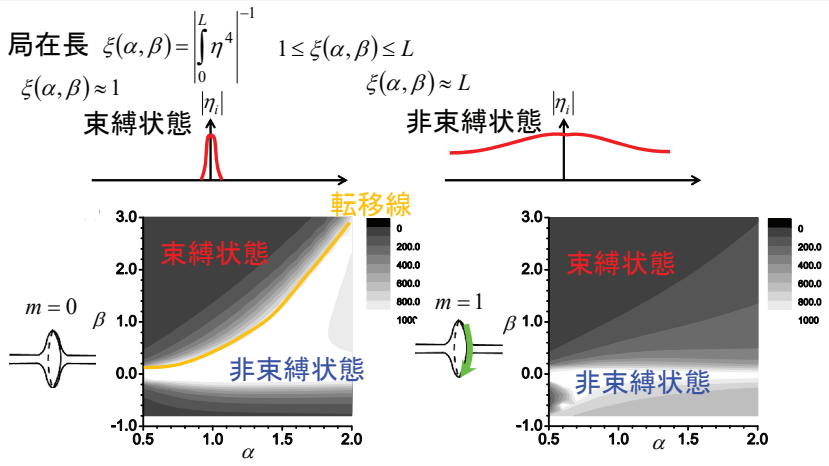
軸方向の方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[f^2(z)\frac{d^2\eta(u)}{du^2}+V(u)\eta(u)\right]=\varepsilon\eta(u)$ 解くべき方程式

$V(u)=f^2(u)\left(\frac{d\Gamma}{du}-\Gamma^2\right)+\frac{(\kappa_1-\kappa_2)^2}{4}-\frac{m^2}{R^2}$ 有効スカラーポテンシャル

Gauss変形された円筒面におけるポテンシャルの空間分布

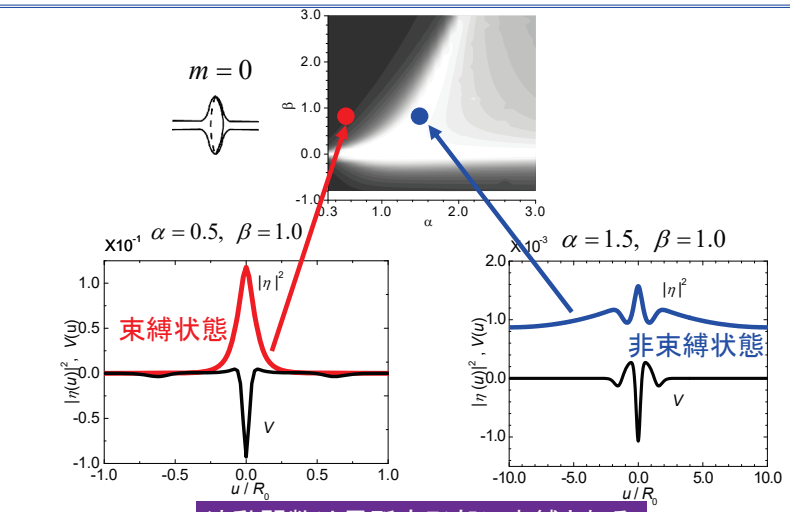


波動関数の束縛状態



曲率誘起電場により電子の束縛・非束縛状態が変化

波動関数の空間プロファイル



波動関数は局所変形部に束縛される

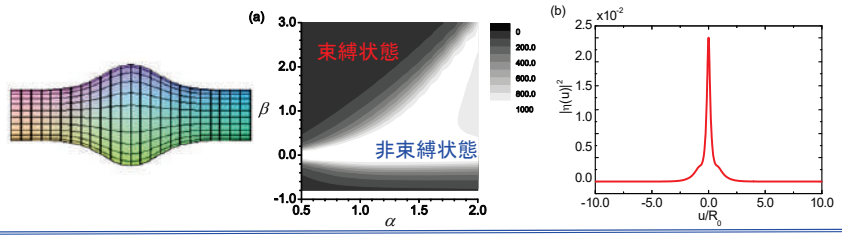
曲面系の結論

曲面系： 幾何学的曲率効果が電子の束縛にどのように影響するか？

Gauss変形を施した円筒面における電子固有状態の、
幾何学的パラメータ依存性を調べた。

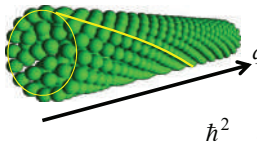
得られた結果：

電子の束縛・非束縛状態は曲率誘起電場により大きく変化する。



ねじれ量子系に生じる有効ベクトルポテンシャル

S. Takagi and T. Tanzawa, Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 561.



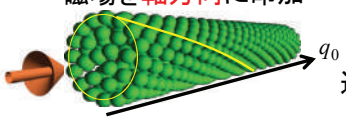
連続体近似



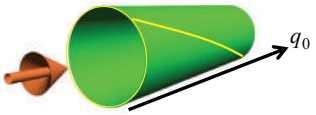
$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dq_0{}^2}\psi-\frac{\hbar^2\kappa^2}{8m^*}\psi=E\psi$$

断面方向の電子は
基底状態にある

・磁場を軸方向に印加



連続体近似



$$\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\frac{d}{dq_0}+\tau\langle L\rangle\right)^2\psi-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{\kappa^2}{4}-\frac{\tau^2}{\hbar^2}\left(\langle L^2\rangle-\langle L\rangle^2\right)\right]\psi=E\psi$$

有効ベクトルポテンシャル

τ：ねじれ率

軸方向の磁場により軸方向の有効ベクトルポテンシャルが生じる

ねじれ量子系の過去の研究に対する本研究の位置づけ

・過去の研究・・・Schrödinger方程式の定式化に視点

有効ベクトルポテンシャルによる物性変化の観測可能性は議論されていない

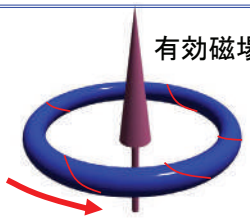
目的

①ねじれ系：　ねじれ変形に起因する余分な量子位相による
物性変化を定量的に解析する

②ねじれ系：　量子位相が物性に現れる測定系を提案する

ねじれ細線系におけるリング面内磁場

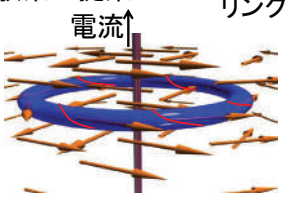
J. Phys.: Condens. Matt., **22** (2010) 245302.
J. Phys.: Condens. Matt., **22** (2010) 075301.



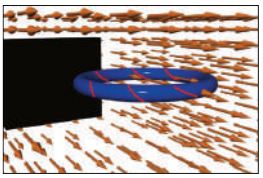
➡ 捩れ量子リングでは
電子の位相干渉効果が生じる！！

有効ベクトルポテンシャル

● 実験系の提案



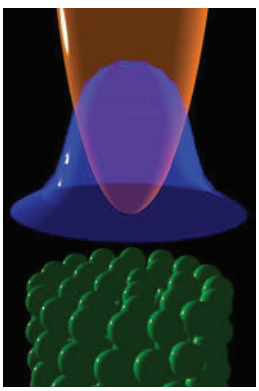
リング面内磁場

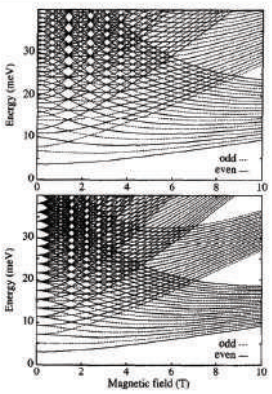


ねじれに起因する量子干渉効果はリング面内磁場により生じる

放物型の閉じ込めポテンシャル

● 仮定:放物型の閉じ込めポテンシャル　固有エネルギーの磁場依存性

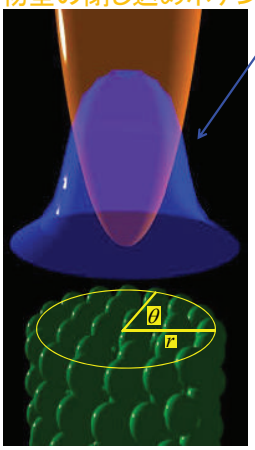




P. A. Maksym, Physica B, **249-251** (1998) 233.

角運動量期待値

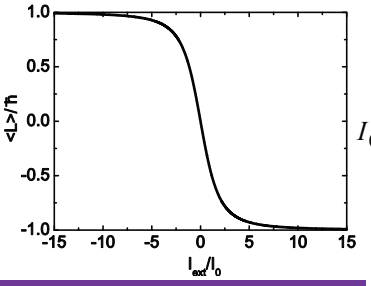
放物型の閉じ込めポテンシャル



$u = \sqrt{a}\exp(-ar^2) \quad a = \text{const.}$

波動関数は基底状態にある

$$\langle L \rangle = \int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\theta u^* L u = -\hbar \frac{I_{\text{ext}}}{I_0} \frac{1}{\sqrt{4 + \left(\frac{I_{\text{ext}}}{I_0}\right)^2}}$$



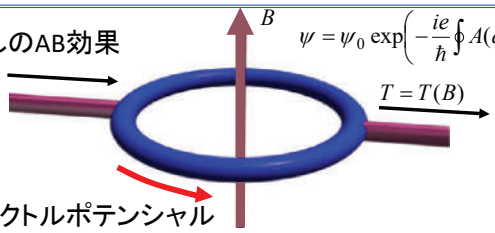
$$I_0 = \frac{m^* \omega_p l}{e\mu_0}$$

$\sim 4.3 \times 10^3$ A

角運動量期待値の関数形はI_{ext}/I_0に対して不変

ねじれリングにおける電子干渉計

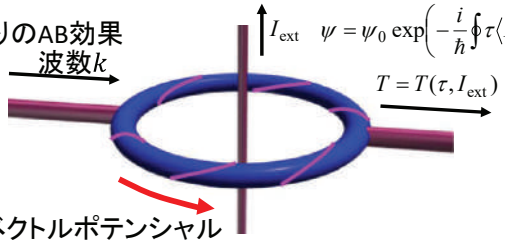
✓ ねじれなしのAB効果



$$\psi = \psi_0 \exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\oint A(q_0)dq_0\right)$$

ベクトルポテンシャル

✓ ねじれありのAB効果



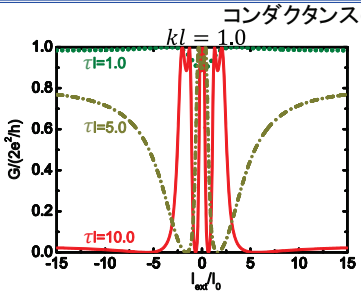
$$\psi = \psi_0 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\oint \tau\langle L\rangle(q_0)dq_0\right)$$

有効ベクトルポテンシャル

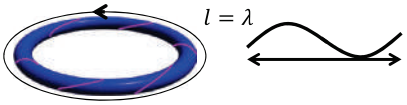
コンダクタンス：Landauer公式 $G = \frac{2e^2}{h}T$ $T = T(\tau, I_{\text{ext}})$: 透過率

ねじれ量子リングにおけるAB効果

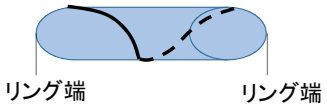
コンダクタンスの外部電流依存性



✓ $kl = 1.0$:リングの周長～1波長



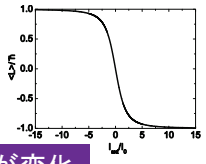
✓$\tau l = 1.0$:リング一周で1ひねり



✓ $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| < 5$で激しく振動

✓ $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| > 5$で振動なし

理由： $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| < 5$で$\langle L\rangle(q_0)$が$I_{\mathrm{ext}}/I_0$に対して鋭く応答
or $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| > 5$で$\langle L\rangle(q_0)$が$I_{\mathrm{ext}}/I_0$に対して緩やかに応答

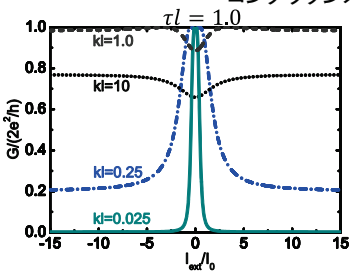


$$\psi \propto \exp\left(-ikq_0 - \frac{i}{\hbar}\int_C \tau\langle L\rangle(q_0)dq_0\right)$$

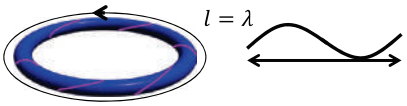
磁場と電子の運動方向が平行でも電子の運動が変化

ねじれ量子リングにおけるAB効果

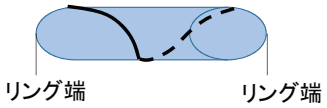
コンダクタンスの外部電流依存性



✓ $kl = 1.0$:リングの周長～1波長



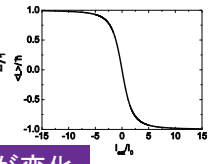
✓$\tau l = 1.0$:リング一周で1ひねり



✓ I_{ext}~0で凸or凹

✓ $I_{\mathrm{ext}} \gg 0$でほぼ一定

理由： $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| < 5$で$\langle L\rangle(q_0)$が$I_{\mathrm{ext}}/I_0$に対して鋭く応答
or $|I_{\mathrm{ext}}/I_0| > 5$で$\langle L\rangle(q_0)$が$I_{\mathrm{ext}}/I_0$に対して緩やかに応答

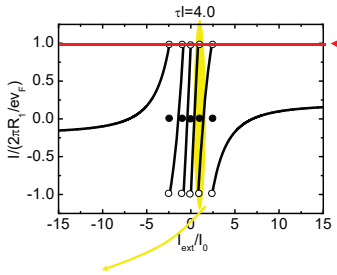


$$\psi \propto \exp\left(-ikq_0 - \frac{i}{\hbar}\int_C \tau\langle L\rangle(q_0)dq_0\right)$$

磁場と電子の運動方向が平行でも電子の運動が変化

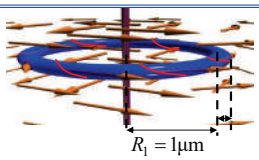
永久電流の大きさ

- 永久電流の大きさを見積もる
- リング一周で4回程度ねじれる場合



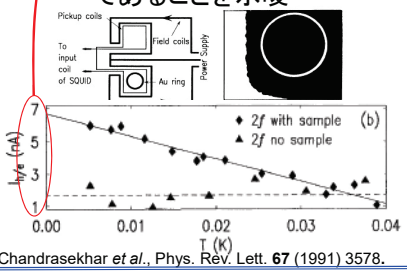
✓ 最初の飛びに必要な電流：

$I_{\mathrm{ext}} \sim 7.63\times10^{3}\,\mathrm{A}$



✓$I_{\max} = \dfrac{ev_F}{2\pi R_1} \sim 35\mathrm{nA}$（銀の場合）

・永久電流は実験的に観測可能であることを示唆



V. Chandrasekhar *et al.*, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 3578.

ねじれ系の結論

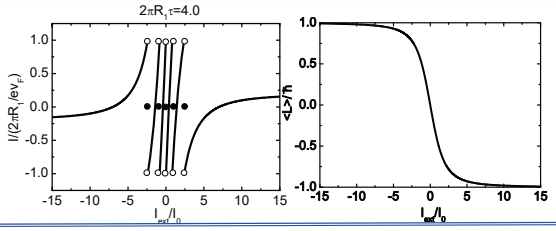
有効ベクトルポテンシャルによる物性変化は観測可能か？

面内磁場印加時のねじれ量子リングにおける、電子輸送現象を調べた。

得られた結果：

1. ねじれに起因する有効ベクトルポテンシャルを測定可能な系が存在する。
2. ねじれ量子リングには外部電流によりAB効果と永久電流が生じる。
3. 永久電流の実験的観測可能性を示した。





ここまでの結論

■研究目的
電子状態が幾何誘起電磁場によりどう変化するかを定量的に明らかにする。

- 曲面系
  - ✓ 電子状態の空間プロファイルは曲率によりどの程度変化するか？
    電子固有状態が束縛状態から非束縛状態へ転移する。
- ねじれ系
  - ✓ 有効ベクトルポテンシャルによる物性変化は観測可能か？
    ねじれ量子リングにおけるAB効果及び永久電流として観測可能である。

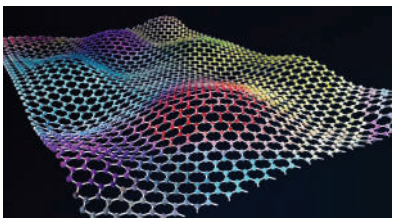
動的変形するグラフェンの電子ーフォノン相互作用

背景

- グラフェンにおけるフォノン
  面内モードと面外モード



面内モード

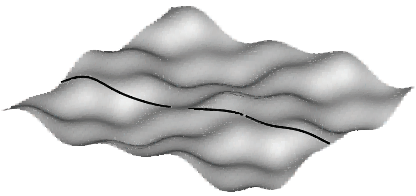


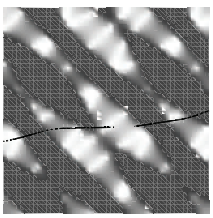
面外モード

- 電子ーフォノン相互作用
  - 原子間距離の変化により生じる
  - 変形ポテンシャルがバンド構造に影響を与える

- フォノンの面外モードは新たなメカニズムで電子と相互作用するか？

曲面に拘束された1粒子の軌跡





古典粒子の軌跡は直線ではなく測地線

測地線方程式 $$\frac{d^2x^k}{ds^2}+\Gamma^k_{ij}\frac{dx^i}{ds}\frac{dx^j}{ds}=0$$

x^k 位置ベクトルの反変成分
s 距離
Γ^k_{ij} アフィンパラメータ

・量子系でも同様と考える
・電子散乱を引き起こすフォノンの面外モードは表面曲率により動的に変化する

目的：電子とフォノンの面外モードの相互作用を定式化する

グラフェンの電子状態

グラフェンのSchrödinger方程式＝質量のないDirac方程式

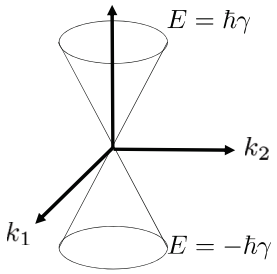
$$H\psi = E\psi$$

$$H = -i\hbar\gamma\left(\sigma^1\frac{\partial}{\partial x^1} + \sigma^2\frac{\partial}{\partial x^2}\right)$$

$$\psi = \frac{e^{i(k_1x^1+k_2x^2)}}{\sqrt{2A}}\begin{pmatrix} e^{-i\theta_k} \\ s \end{pmatrix}$$

$$\theta_k = \tan^{-1}\frac{k_2}{k_1}$$

$$E = s\hbar\gamma \quad (s = \pm 1)$$



σ^i: Pauli行列 γ: パラメータ

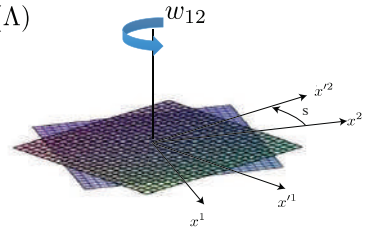
k_i: 波数ベクトルの共変成分 A: 面積

- Schrödinger方程式は平らなグラフェンで導出される
- 曲率を有するグラフェンでは方程式はどうなるか？

グラフェンの直交変換

Schrödinger方程式は直交変換に対して不変; $S(\Lambda)$

変換前 $-i\hbar\gamma\sigma^i\partial_i\Psi(x) = E\psi(x)$



•直交変換

$$x'^\alpha = \Lambda^\alpha{}_\beta x^\beta$$

$$S(\Lambda)\left[-i\hbar\gamma\sigma^i\partial_i\Psi(x)\right] = -i\hbar\gamma\sigma^j\partial'_j\Psi'(x')$$

$$\Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x) \quad \text{(スピノルの変換)}$$

$$S\sigma^\alpha S^{-1}\Lambda^\beta{}_\alpha = \sigma^\beta$$

↓

$$S = 1 - \frac{i}{4}\sigma^{\alpha\beta}w_{\alpha\beta}$$

$$\sigma^{\alpha\beta} \equiv \frac{i}{2}[\sigma^\alpha, \sigma^\beta]$$

変換後 $-i\hbar\gamma\sigma^i\partial'_i\Psi'(x') = E\Psi'(x')$

曲がったグラフェンの直交変換

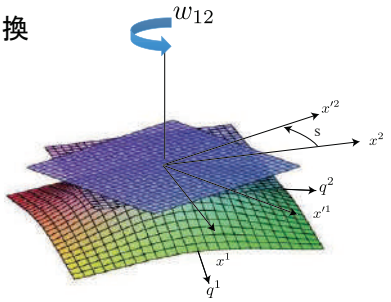
曲がったグラフェンの接平面における直交変換

$$\mathbf{r} = (q^1, q^2)$$

$$dx^i = e^i{}_\mu dq^\mu$$

接平面　　曲面

$$-i\hbar\gamma\sigma^i\partial_i = -i\hbar\gamma\sigma^i e_i{}^\mu \partial_\mu$$



$$S[-i\hbar\gamma\sigma^i\partial_i\Psi] = -i\hbar\gamma\sigma^j\partial'_j\Psi' - i\hbar\gamma\sigma^j e_j{}^\mu S(\partial_\mu S^{-1})\Psi'$$
$$\neq -i\hbar\gamma\sigma^j\partial'_j\Psi'$$

Dirac方程式は曲面上の接平面に対する直交変換に対して不変ではない

➡ Dirac方程式はより一般的な定式化が必要

曲がったグラフェンにおけるハミルトニアン

曲面上の接平面において直交変換に対して不変であることを要請；

$$S\left[-i\hbar\gamma\sigma^i\partial_i\Psi\right] = -i\hbar\gamma\sigma^j\partial'_j\Psi'$$

⬇

$$H = -i\hbar\gamma\sigma^i e_i{}^\mu\left(\partial_\mu - i\frac{1}{4}\Gamma_{j\mu k}\sigma^{jk}\right)$$

$$\Gamma_{j\mu k} = \Gamma^j_{\mu k} = e^j_\nu(\partial_\mu e^\nu_k + \Gamma^\nu_{\mu\lambda}e^\lambda_k)$$

i, j, k ；曲面上の接平面の座標

μ, ν, λ；曲面の座標

$\Gamma_{j\mu k}$ ；曲面と接平面を接続する接続係数

測地線方程式の導出

測地線方程式はハミルトニアンから導出できる

速度演算子

$$i\hbar\dot{q}^\nu = [q^\nu, H] \longrightarrow u^\nu = \gamma\sigma^\alpha e_\alpha{}^\nu$$

Heisenberg方程式

速度の変化

$$\langle u^\nu \rangle = \gamma\langle\Phi|\sigma^\alpha e_\alpha{}^\nu|\Phi\rangle$$

$$\delta u^\nu = \gamma\left(\delta\langle\Phi|\right)\sigma^\alpha e_\alpha{}^\nu|\Phi\rangle + \gamma\langle\Phi|\sigma^\alpha e_\alpha{}^\nu\left(\delta|\Phi\rangle\right)$$

$$\delta|\Phi\rangle = \partial_\mu|\Phi\rangle dq^\mu = \left(\frac{i}{4}\Gamma_{\alpha\mu\beta}\sigma^{\alpha\beta} + ik_\mu\right)dq^\mu|\Phi\rangle$$

$$\delta u^\nu = -\Gamma^\gamma{}_{\mu\beta}e_\gamma{}^\nu dq^\mu\gamma\langle\sigma^\beta\rangle$$

測地線方程式

$$\frac{d\langle u^\nu\rangle}{dt} + \Gamma^\nu{}_{\mu\lambda}\langle u^\mu\rangle\langle u^\lambda\rangle = 0$$

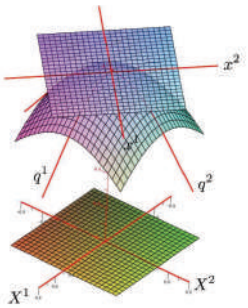
c.f. 古典的な測地線方程式

$$\frac{d^2x^k}{ds^2} + \Gamma^k_{ij}\frac{dx^i}{ds}\frac{dx^j}{ds} = 0$$

フォノンと曲面

グラフェンを厚さhの薄い層だと想定

$$\mathbf{r} = (q^1, q^2) \to (X^1, X^2, \sqrt{\lambda}u)$$



面外モードの運動方程式

$$\rho h\ddot{u} = -\frac{h^3 E}{12(1-\nu)^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^{1\,2}} + \frac{\partial^2}{\partial X^{2\,2}}\right)^2 u$$

ρ: 質量密度 E: Young率 ν: Poisson比

$$u = \sum_{\mathbf{q}}\left(u_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{X}-i\omega_{\mathbf{q}}t}a_{\mathbf{q}} + u^*_{\mathbf{q}}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{X}+i\omega_{\mathbf{q}}t}a^\dagger_{\mathbf{q}}\right)$$

ハミルトニアンと電子ーフォノン相互作用

- 曲がったグラフェンのハミルトニアンから平らなグラフェンのハミルトニアンを引くことで電子ーフォノン相互作用を定式化できる
- 変位uをλの項までで展開することで摂動エネルギー H_{e-ph}が得られる

$$H = H_0 + H_{e-ph}$$

$$H_0 = -i\hbar\gamma\sigma^I\partial_I$$

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{e-ph}} &= i\frac{\hbar\gamma}{2}\left(\sigma^1 u_{,1}^2 + \sigma^2 u_{,1}u_{,2}\right)\partial_{I=1} \\ &+ i\frac{\hbar\gamma}{2}\left(\sigma^2 u_{,1}^2 + \sigma^1 u_{,1}u_{,2}\right)\partial_{I=2} \\ &+ i\frac{\hbar\gamma}{4}\sigma^2\partial_1(u_{,1}u_{,2}) + i\frac{\hbar\gamma}{4}\sigma^1\partial_2(u_{,1}u_{,2}) \end{aligned}$$

$$\partial_I \equiv \frac{\partial}{\partial X^I}$$

$$u_{,I} = \partial_I u$$

電子とフォノンの面外モードの相互作用ハミルトニアン

H_{e-ph}は $u_{,I}$ の二次のオーダーを含む；2フォノン吸収・放出過程

結論

1. 電子とフォノンの面外モードの相互作用を定式化した
2. 得られた相互作用項は2フォノンの吸収・放出過程がある
   →変形ポテンシャルとは異なる
3. 変形ポテンシャルに比べると相互作用の効果は温度の上昇とともに顕著になる

Novel physicochemical properties of 1D periodic uneven structured C_{60} polymer

Jun ONOE

Nagoya University, Japan

We have reported that electron-beam-irradiation (3-7 keV) of a C_{60} film results in formation of a 1D C_{60} 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 submanihold).

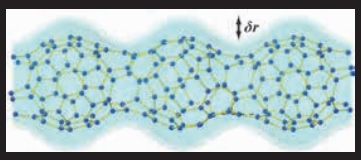
$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + (h^2 - k)\right]$$

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 C_{60} 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 submanihold of the 1D C_{60} polymer.

References

[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]

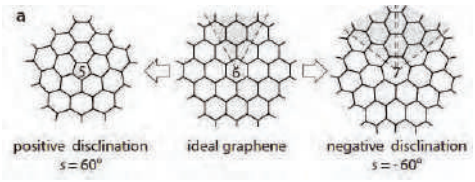
1次元凹凸曲面構造を有するフラーレンポリマーの新奇な物理と化学



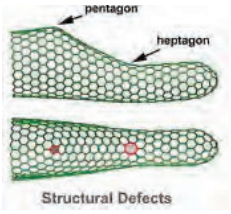
One dimensional peanut-shaped C_{60} polymer

尾上　順
名古屋大学 工学研究科 エネルギー理工学専攻
ホームページ　https://www2.nucl.nagoya-u.ac.jp

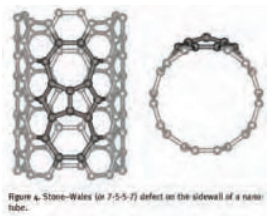
Topology-induced geometry in graphitic carbon network



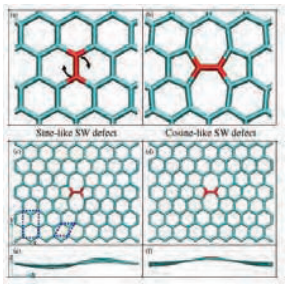
O.V. Yazyev and S.G. Louie: *PRB* **81**, 195420 (2010)



M. Terrones: *ACS Nano* **4**, 1775 (2010)



K. Balasubramanian et al.: *Small* **1**, 180 (2005)



The structure of two buckled Stone-Wales defects in graphene.

J. Ma et al.: *PRB* **80**, 033407 (2009)

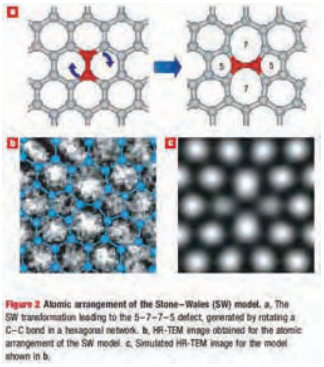
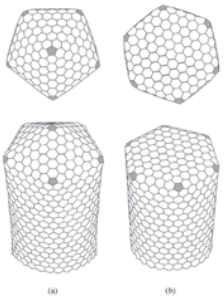


Figure 2 Atomic arrangement of the Stone–Wales (SW) model. a, The SW transformation leading to the 5–7–7–5 defect, generated by rotating a C–C bond in a hexagonal network. b, HR-TEM image obtained for the atomic arrangement of the SW model. c, Simulated HR-TEM image for the model shown in b.

K. Suenaga et al.: *Nat. Nanotech.* **2**, 358 (2007)

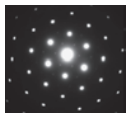


Only six pentagon insertion is allowed for capping a CNT regardless of its tube radius and chirality (Gauss-Bonnet theorem).

Y. Saito et al.: *JJAP* **39**, L271 (2000)

How do we produce 1D uneven (凹凸) C_{60} polymer ?

Carbon **81**, 842 (2015).



5-1000 nm

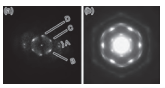
Electron beam (3-10 kV)

10^{15}–10^{17} $cm^{-2}s^{-1}$

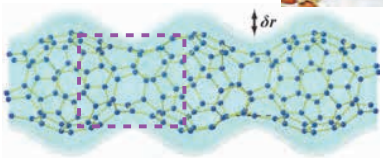


CsI/Si/Cu/Mica/SiO_2 substrates

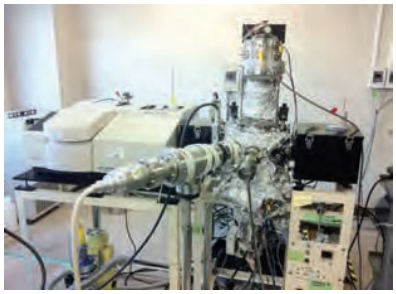
C_{60} film
: insulator (10^{8}–10^{14} Ωcm)/soluble



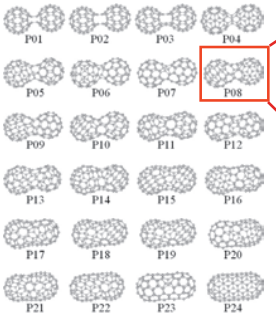




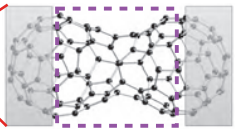
1D peanut-shaped C_{60} polymer
: metal (<10^{-2} Ωcm)/insoluble



***In situ* UHV FT-IR apparatus**



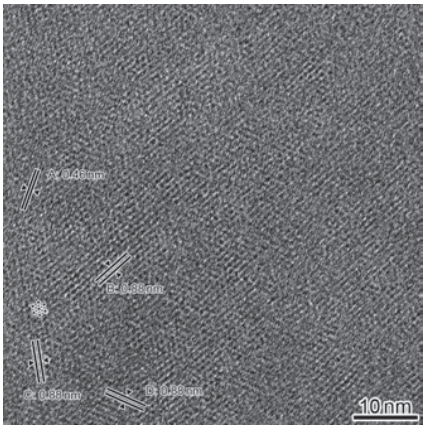
Optimized structure of GSW C_{120} isomers obtained using Gaussian09



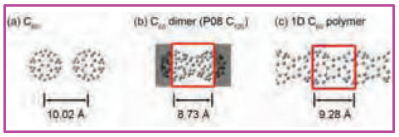
The cross-linked structure of P08 C_{120} isomer

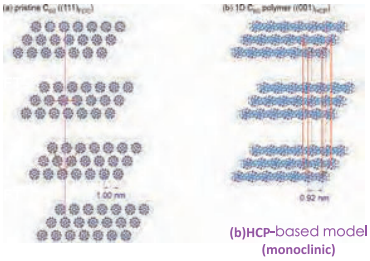
APL **82**, 595 (2003); *APL* **85**, 2741 (2004); *PRB* **72**, 155416 (2005); *PRB* **74**, 195426 (2006); *JPCB* **110**, 22374 (2006); *PRB* **75**, 233410 (2007); *APL* **92**, 094102 (2008); *JAP* **104**, 103706 (2008); *PRB* **79**, 201401 (R) (2009); *JAP* **108**, 033514 (2010); *APL* **97**, 241911 (2010); *EPL* **98**, 27001 (2012); *JPCM* **24**, 175405 (2012); *APL* **104**, 113301 (2014); *PRB* **90**, 155435 (2014); *Carbon* **81**, 842 (2015); *Carbon* **96**, 316 (2016); *Carbon* **152**, 882 (2019); *Adv. Sustain. Sys.* **5**, 2000156 (2021)

1D structure evidenced using cryo-HRTEM



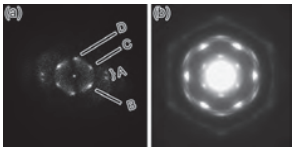
FFT image







three equivalent directions for 1D polymerization





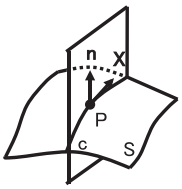
cryo-TEM (Osaka Univ.)

Carbon **81**, 842 (2015). *Carbon* **96**, 316 (2016).

Nanocarbons classified using Gaussian curvature



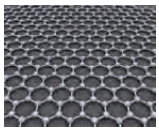
Johann Carl Friedrich Gauss
(1777-1855)

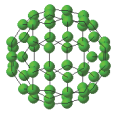


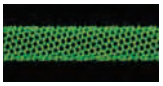
The curvature of curve "C" passing through point "P"
convex 凸: κ < 0
concave 凹: κ > 0
Maximum curvature: κ_1
Minimum curvature: κ_2

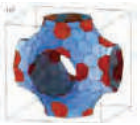
Gaussian curvature $k = \kappa_1\kappa_2$
Average curvature $h = (\kappa_1+\kappa_2)/2$

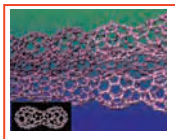
Nanocarbon family	Gaussian curvature
(1) graphene	**0**
(2) fullerenes	**+**
(3) nanotubes	**0, +**
(4) Mackay crystal (hypothetical)	**–**
(5) 1D exotic-nanocarbons	**+,–**


(1)


(2)

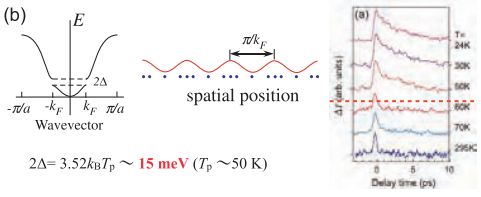

(3)


(4)


(5)

Physical properties arising from 1D metal

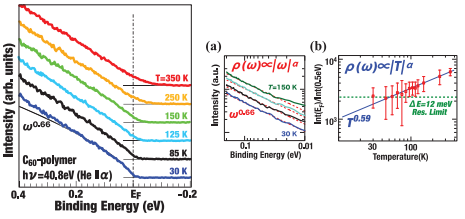
Peierls transition



$2\Delta = 3.52 k_B T_p \sim$ **15 meV** ($T_p \sim$50 K)

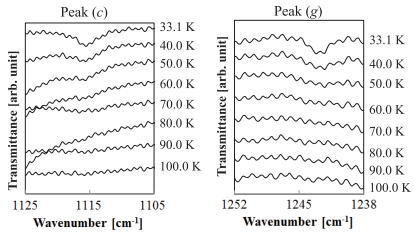
Appl. Phys. Lett. **92**, 094102 (2008).

Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).
Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Charge-Density-Wave (CDW) phonon mode



Appl. Phys. Lett. **97**, 241911 (2010).

1D van Hove Singularity

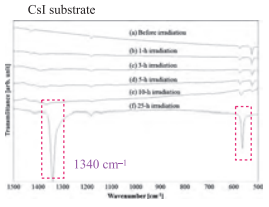


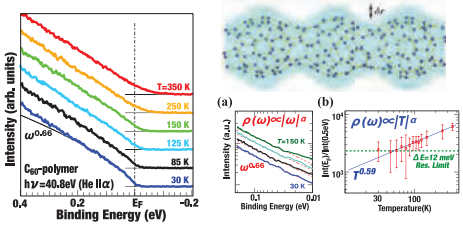
FIG. 3. Irradiation-time evolution of *in situ* IR spectra of an EB irradiated C_{60} film.

J. Appl. Phys. **108**, 033514 (2010)
J. Phys.: Condens. Matter **24**, 175405 (2012).

名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

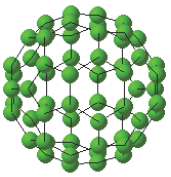
Novel properties different from those of the other nanocarbons

Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).
Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

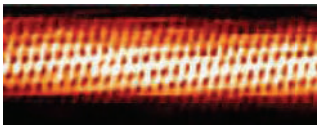
Fullerenes



H.W. Kroto *et al.*, *Nature* **318**, 162 (1985)

1996 Nobel prize in chemistry

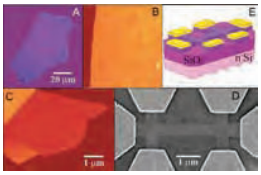
Nanotubes



HR-STM image of SWCNT (Dekker's group, Delft)

S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991)

Graphenes



K.S. Novoselov et al., *Science* **306**, 666 (2004).

2010 Nobel prize in Physics

名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

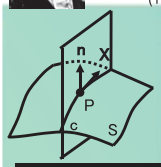
What happens to free electrons when they propagate in 1D uneven (凹凸) curved space?

Are they affected by the geometric curvatures?



Johann Carl Friedrich Gauss
(1777-1855)

A big puzzle since 1950s



The curvature of curve "C" passing through point "P"
convex 凸: κ < 0
concave 凹: κ > 0

Maximum curvature: κ_1
Minimum curvature: κ_2

Gaussian curvature $k = \kappa_1\kappa_2$
Average curvature $h = (\kappa_1+\kappa_2)/2$

electron

Jensen-Koppe-Costa (JKC) potential

h: average curvature
k: Gaussian curvature

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

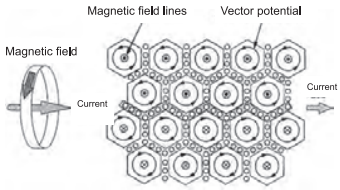
$g = \det[g_{ij}]$ metric tensor

geometric curvature term

H. Jensen and H. Koppe, *Ann. Phys.* **63**, 586 (1971).
R.C.T. da Costa, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981).

Vector potential（AB effect)

$$B = \mathrm{rot}A$$
$$E = -\frac{\partial A}{\partial t}$$



Vector potential ***A*** was thought to be introduced mathematically, but its physical meaning was given by Aharonov and Bohm.



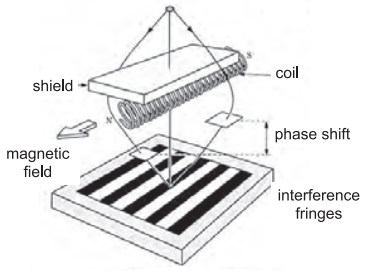
David Joseph Bohm



YAKIR AHARONOV

Y. Aharonov and D. Bohm: *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959)

Aharonov-Bohm effect



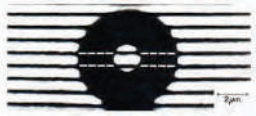
$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar}\oint A ds = \frac{e}{\hbar}\int B dS$$



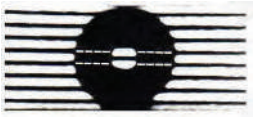
superconductive coil



Electron-beam holography



phase difference = 0



phase difference = 1/2 λ



Dr. A. Tonomura
1942–2012

A. Tonomura *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **56**, 792 (1986)

名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY
山梨大学

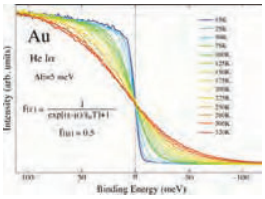
Prediction of the geometric curvature effects on Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states

2-3 D metal

Fermi Liquids (FL)

$$f(E) = \left[1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)\right]^{-1}$$



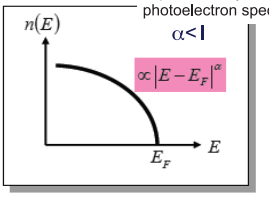


ID metal

Tomonaga-Luttinger Liquids (TLL)

experimentally determined using photoelectron spectroscopy







$$n(\omega) \propto |\hbar\omega - E_F|^{\alpha}, \quad \alpha = \frac{K+K^{-1}}{2} - 1.$$

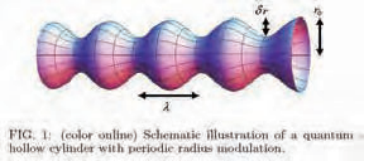
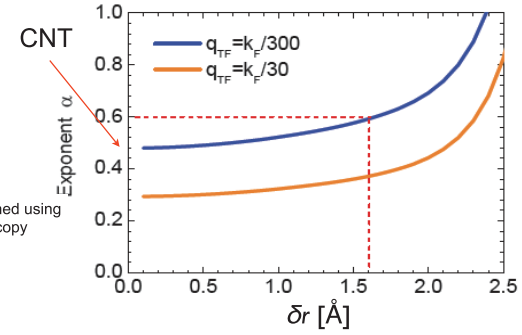


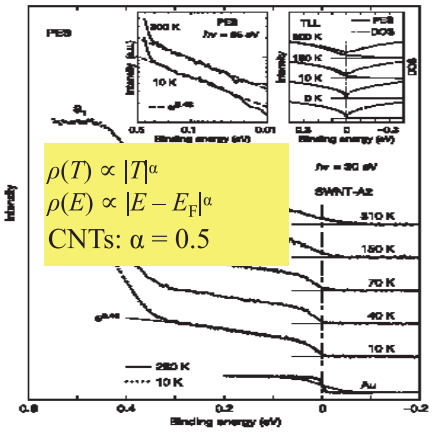
FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.



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

Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

Prediction of the geometric curvature effects on Tomonaga-Luttinger liquid (TLL) states



H. Ishii, H. Yoshioka *et al.*, *Nature* **426**, 540 (2003).

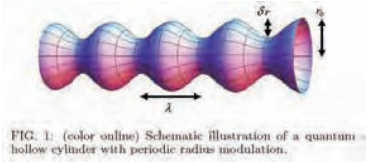
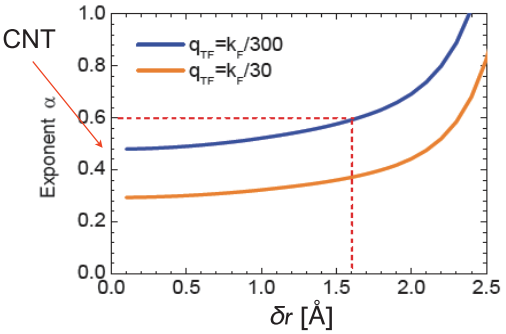


FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.



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

Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).

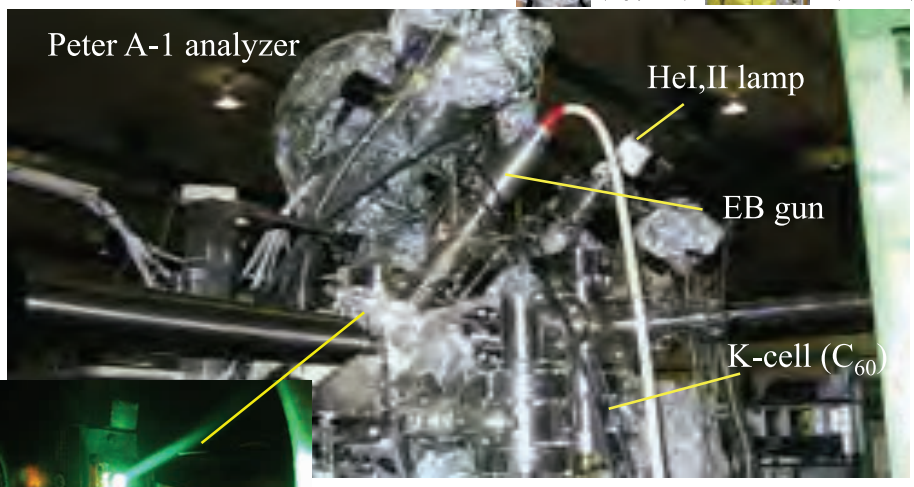
In situ high-resolution photoemission spectroscopy

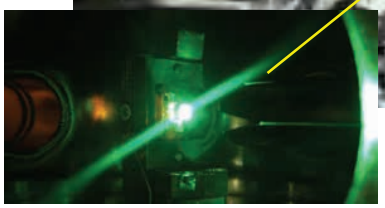


Prof. T. Ito (Nagoya Univ.)



Prof. S. Kimura (Osaka Univ.)

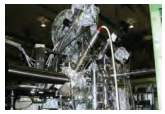




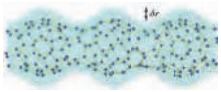
C_{60} film (50 nm) on a Cu substrate
24 h EB irradiation

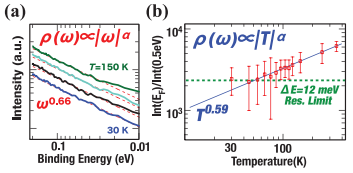
Evidence for the geometric curvature effects on electronic properties

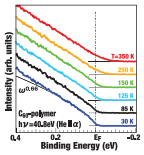
In situ high-resolution PES



$\delta r = 1.4$ Å







$\rho(T) \propto |T|^{\alpha}$

$\rho(E) \propto |E - E_F|^{\alpha}$

凹凸periodic: $\alpha \sim 0.6$

CNT: $\alpha \sim 0.5$

good agreement

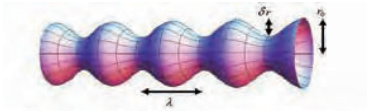
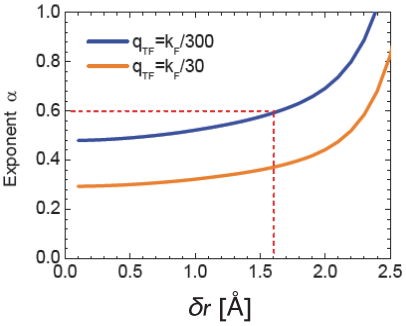


FIG. 1: (color online) Schematic illustration of a quantum hollow cylinder with periodic radius modulation.



Europhys. Lett. **98**, 27001 (2012).

Phys. Rev. B **79**, 201401 (R) (2009).



Prof. T. Ito
(Nagoya Univ.)



Prof. S. Kimura
(Osaka Univ.)



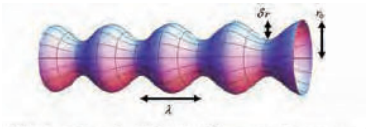
Prof. H. Shima
(Yamanashi Univ.)



Prof. H. Yoshioka
(Nara W-Univ.)

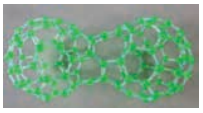
Perspectives

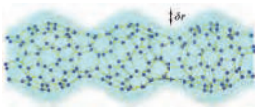
A potential driven by a periodic uneven (凹凸) geometry has been curious to affect electronic properties of materials since 1950s.



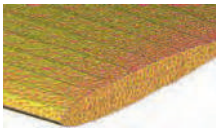
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\,g^{ij}\frac{\partial}{\partial q^j}\right) + \boxed{(h^2 - k)}\right]$$

First observation of geometric curvature effects on electron behaviors





Discrete Geometry Analysis



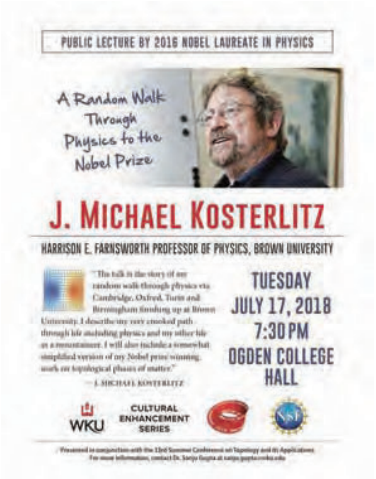
Physical quantities ⟷ Geometric quantities

quantitative or qualitative correlation ?

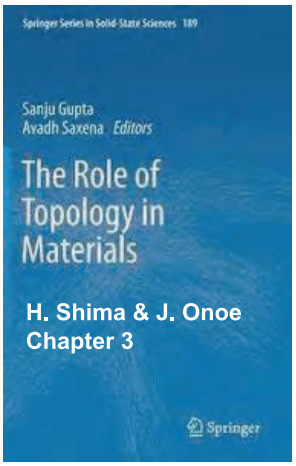


Summer Conference on Topology and its Applications
Bowling Green, KY, USA
July 17-20, 2018

Keynote address: “Interplay between topology-induced geometry and properties of nanocarbon materials”



Keynote talk: “Topological Defects and Phase Transitions”



20 k download as of August, 2022

Interdisciplinary between Materials Science and Modern Mathematics

Quantum Mechanics of Sub-manifolds

数学 Libre：2020 年 9 月

64. 部分多様体の量子力学 IV

松谷茂樹

前回，Jensen-Koppe, da Costa (JKdC) が示した部分多様体の量子力学が数理物理的にとても自然な対象であることを示しました．とはいえ，その正当性は実験的に検証されるべきです．それが物理学の王道です．それを行ったのが尾上・伊藤・島・吉岡・木村です [1,2]．これは画期的なことです．私自身はその内容を完全に把握する力を持ちあわせていませんが，[1–4] に従いその実験の内容を概観したいと思います．

尾上らは数珠状に C_{60} を連ねた擬一次元鎖を構成し，その電子状態と構造について観察，考察しました．C_{60} は直径 0.71 nm 程度のサッカーボール型の分子です．

超高真空下で作製した C_{60} 薄膜（膜厚 20〜30 nm）に 3 keV, 0.5 mA の電子線を 16 時間，照射すると C_{60} が連なった 1 次元的な C_{60} ポリマーが生成されます．その長さは cryo-TEM（低温透過型電子顕微鏡）の観察によると数百 nm 程度であり [5]，形状は下図のようになっています．

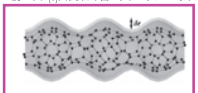


図 1: 1D エキゾチックナノカーボンと δr [1]

この 1 次元的のナノカーボンを 1D エキゾチックナノカーボンと尾上らは呼んでいます[1]．ここでは 1DEC と略します．δr がその歪み具合の指標となっています．

[1] ミルナーのエキゾチック球面にインスパアーされて，命名されたとのことです．

エキゾティックでなくとも，円筒型のカーボンナノチューブの電子は一次元量子力学系として振る舞うことが知られています．1 次元系の特徴はその量子的揺らぎが極めて大きいということです．そのため，電子状態は，3 次元空間でのフェルミ流体とは異なる朝永・ラッティンジャー流体となります．

この 1DEC でも自由電子が大域的に存在し，その絶対温度零においてもフェルミエネルギー E_F における電子状態密度 $n(\omega)$ が不連続ではなく，連続的な

$$n(\omega) \propto |\hbar\omega - E_F|^{\alpha}$$

となります．

島・吉岡・尾上は連続した凹凸曲面モデルの構造を用いて，1DEC の α が幾何学形状 δr と関連することを解明しました [3]．JKdC に沿って，δr を持つ図 1 の幾何学的な形状により定まる負のポテンシャルの効果を加味した結果です．ラッティンジャー流体とこの幾何効果を結びつけたことで，JKdC の理論は大きく飛躍したのです [4]．その依存性 $\alpha(\delta r)$ は対象とする区間では連続で単調増加となります．



朝永振一郎
（1906-1979）

他方，高分解能紫外光電子分光計測によって光吸収スペクトルの強度の依存性を観察すると，α を直接，評価することができます．尾上らはそれらの観察により 1DEC の場合，$\alpha = 0.6$ であることを実験的に示しました．関数 $\alpha(\delta r)$ の単調増加性により実験結果の $\alpha = 0.6$ は $\delta r = 0.16$ nm に対応することが判りました．

これに対して，赤外の分光された光を照射し，その吸収スペクトルを見ることで，構造が判ることが知られています．尾上らは更に，カーボンネットワークを考慮して，2 つの C_{60} に対する結合した分子に対する第一原理計算による構造計算[2]と，赤外分光スペクトルの吸収スペクトルによる比較により，対象とした 1DEC の構造を評価し，$\delta r = 0.14$ nm となることを同定しました [2]．更に，電子の波動関数の分布により分極による電子状態への影響が無視できることも示し，そのことにより，朝永・ラッティンジャー流体のパラメータ α の変位は純粋に幾何学的効果であることを示しました．

この電子に関わる実験と理論計算による評価値 $\delta r = 0.16$ nm と，赤外分光スペクトルによる構造の評価値である $\delta r = 0.14$ nm の両者がほぼ一致することで，電子が幾何学から受けた効果，それは JKdC の効果ですが，それが実証されたのです [1–4]．



フォン・ノイマン
（1903-1957）

JKdC [11,12] 池田・長岡 [1111] の考察からそれぞれ 40 年，30 年，20 年を経て，ナノカーボンの材料科学の発展と，朝永・ラッティンジャー流体との融合という理論の飛躍によって，ついにそれが実証されました．鋭い着眼点と深い洞察の賜物と考えます．

フォン・ノイマンは「数学は経験に即したその発生の原点から遠く離れ，『現実』から乖離した第二，第三世代になると，致命的な危機に陥ります．……危機とは摩擦を避けた安直な発展であり，原点を忘れることによる学問の無意味な分岐であり，瑣末な精密化や複雑化を意味します．」[6]（著者訳）と書きました．

炭素系からなる化合物は，幾何学形状と直接つながり豊かな物理的現象を提供することが知られています．[7] で尾上，島は，物質科学は数学・幾何との新たな連携のステージに移行したとして，数学と物理の更なる協力により新たな物理学を構築することを提案しています．

一時期研究に関わった者として，部分多様体の量子力学が新たなパラダイムを提示する学問分野として成長することを願ってやみません[3]．

参考文献
[1] 尾上順，電子物性におけるリーマン幾何学効果 表面科学 **34** (2013) 38–43.
[2] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka and S. Kimura, Observation of Riemannian geometric effects on electronic states EPL (Europhys. Lett.) **98** (2012) 27001.
[3] H. Shima, H. Yoshioka and J. Onoe, Geometry-driven shift in the Tomonaga-Luttinger exponent of deformed cylinders, Phys. Rev. B **79** (2009) 201401(R).
[4] 島弘幸，小野雄太，平久夫　曲面量子系の基礎と物質科学への適用　表面科学　**30** (2009) 652–658.
[5] H. Masuda, H. Yasuda, J. Onoe, Two-dimensional arrangement of one-dimensional polymerized C_{60} evidenced by high-resolution cryo-transmission electron microscopy, Carbon **96** (2016) 316-319.
[6] J. von Neumann, The Mathematician, The Works of the Mind edited by R. B. Heywood, Univ. Chicago Press 1947.
[7] H. Shima and J. Onoe, Chapter 3 : Topology-Induced Geometry and Properties of Carbon Nanomaterials, in *The Role of Topology in Materials* Springer 2018, S. Gupta, A. Saxena 編．

（まつたにしげき
／金沢大学 電子情報通信学系）

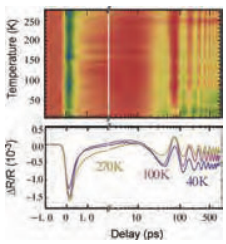
[2] 幾つかの仮定はありますが，量子力学に従って，経験的なパラメータを利用することなく，化合物の構造（形状，構造の固有振動など）や電子状態（波動関数の位置的，エネルギー的分布）を決定する計算方法です．

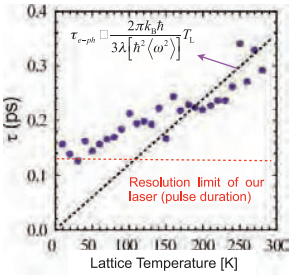
[3] 謝辞：この記事を書くに当たって，尾上順教授から様々なことをご教授頂きました．

Geometric shape effects on electron-phonon coupling strength

Unified understanding of the electron-phonon coupling strength for nanocarbon allotropes

Shota Ono,[1,*] Yasunori Toda,[2] and Jun Onoe[3]
[1]*Department of Physics, Graduate School of Engineering, Yokohama National University, Yokohama 240-8501, Japan*
[2]*Division of Applied Physics, Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo 060-8628, Japan*
[3]*Department of Physical Science and Engineering, Nagoya University, Nagoya 464-8603, Japan*
(Received 8 April 2014; revised manuscript received 3 September 2014; published 21 October 2014)





π-electron conjugated system

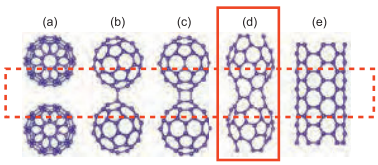


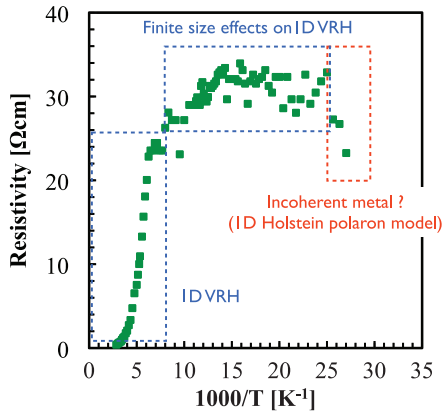
FIG. 4. (Color online) Schematic illustration of nanocarbon allotropes: two C_{60} between which are connected via (a) van der Waals interaction, (b) single C-C σ-bond, (c) $2+2$ cycloadditional bond, (d) 1D C_{60} polymer having coalesced GSW bond, and (e) single-walled CNT.

TABLE I. Electron-phonon coupling constant λ of nanocarbon allotropes. The kind of chemical bonding between C_{60} is also shown.

C_{60} compound	λ	Bonding (C_{60}-C_{60})
(a) A_3C_{60} (A = K, Rb)	0.6 (0.5)	van der Waals
(b) Na_4C_{60}	0.3	Single C-C σ bond
(c) AC_{60} (A = K, Rb)	~0.1	$2+2$ cycloadditional bond
(d) 1D C_{60} polymer	0.02	Coalesced GSW bond
(e) Single-walled CNT	0.006	–
Multiwalled CNT	5.4×10^{-4}	–

Anomaly in the resistivity at temperatures below 50 K

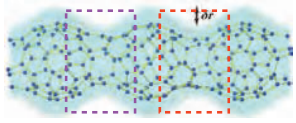
Appl. Phys. Lett. **104**, 113301 (2014)



$$\rho \propto \exp\left(\frac{2L}{\xi}\right)$$

L: the length of the 1D disordered system
ξ: electron localization length

[E. N. Economou, *PRB* **31**, 6172 (1985)]



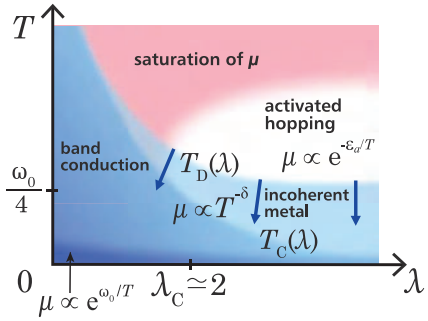


FIG. 1 (color online). Transport regimes of polaron. Schematic phase diagram showing the four different regimes of polaron mobility μ in the plane of λ-T (λ: EPC strength, T: temperature). Here, the unit of energy is $t = 1$, and ω_0 is the phonon frequency. Arrows show the direction of shift of the borderlines between different regimes when the phonon frequency decreases.

A. S. Mishchenko et al., *PRL* **114**, 146401 (2015)

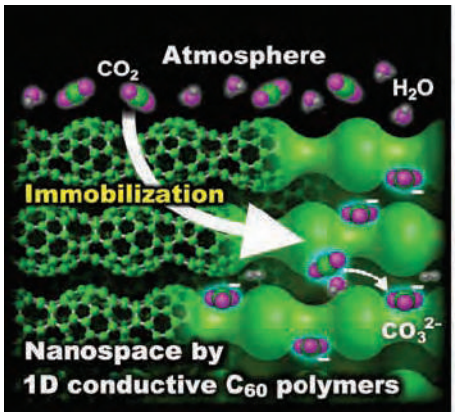
Application to environmental issues: CO_2 immobilization

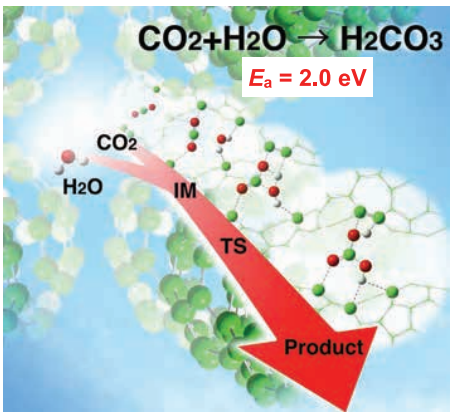
COMMUNICATION

ADVANCED SUSTAINABLE SYSTEMS
www.advsustainsys.com

Immobilization of CO_2 at Room Temperature Using the Specific Sub-NM Space of 1D Uneven-Structured C_{60} Polymer Film

Masato Nakaya, Yasutaka Kitagawa, Shinta Watanabe, Rena Teramoto, Iori Era, Masayoshi Nakano, and Jun Onoe**

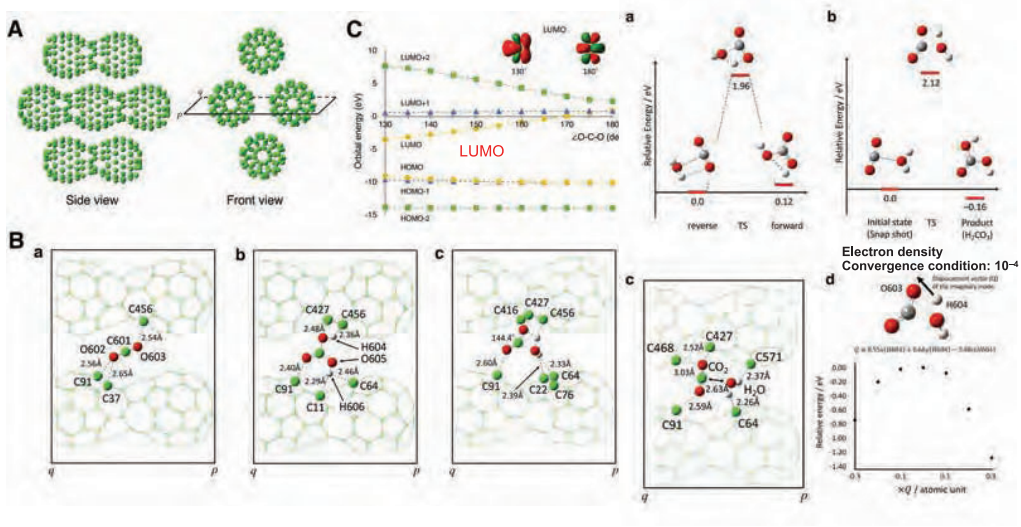




科研費 KAKENHI

Adv. Sustain. Sys. **5**, 2000156 (2021) [**Press release**]

Reaction Mechanisms



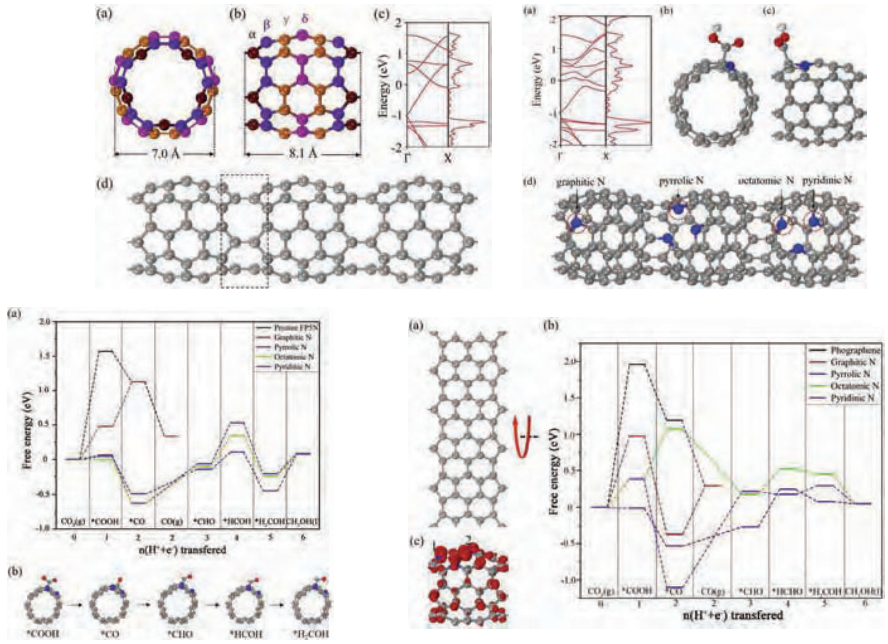
(1) **Locally induced Coulomb interactions due to mirror image effects** increase positive and negative charges on the C (1D polymer) and O (CO_2) atoms, respectively, which play roles not only in **weakening the CO_2 double-bond slightly** but also in **stabilizing the TS of the CO_2 + H_2O reaction**.
(2) In addition, the O atom of H_2O easily approaches the C atom of **CO_2 when activated by the bending motion**.

Adv. Sustain. Sys. **5**, 2000156 (2021) [**Press release**]

CO_2 activation methods

Conventional	1D凹凸C_{60} Polymer
・ Radiochemical ・ Thermochemical ・ Biochemical ・ Photochemical ・ Electrochemical ・ Catalysts B. Khezri *et al.*, *J. Mater. Chem. A* **5**, 8230 (2017)	**CO_2 pinning** **Angular vibration: LUMO energy decreases**
Reduction To add electrons to LUMO (antibonding orbital) Weakening O=C=O bonds	**Not reduction** **LUMO electron affinity up↑** **Increasing electron withdrawing**

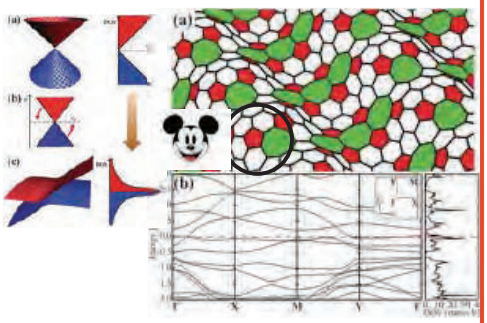
N-doped 1D 凹凸 C_{60} polymer exhibiting CO_2 reduction efficiently



W. Zhou, H. Shen, Q. Wang, J. Onoe, Y. Kawazoe, and P. Jena, *Carbon* **152**, 241 (2019)

Curvature-driven new functional nanocarbons
(theoretical prediction)

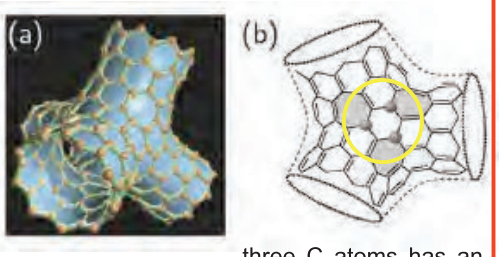
2D exotic-nanocarbons



Uneven curved surface makes the Dirac-cone inclined to form an intense flat band at the Fermi level (like Pt)

Y. Noda et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 7102 (2014)

3D exotic-nanocarbons



three C atoms has an unpaired electron

Concave surface induces magnetic properties

N. Park et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 237204 (2003)



Penta-graphene: A new carbon allotrope

Shunhong Zhang[a,b,c], Jian Zhou[c], Qian Wang[a,b,c,1], Xiaoshuang Chen[d,e], Yoshiyuki Kawazoe[f], and Puru Jena[c]

PNAS **112**, 2372 (2015)

Negative Poisson's Ratio

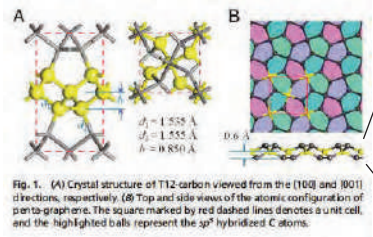
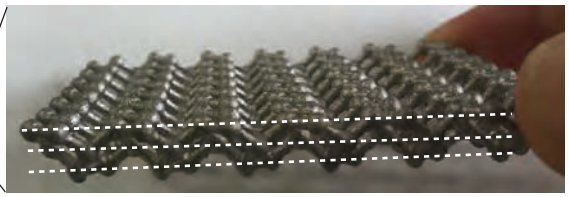
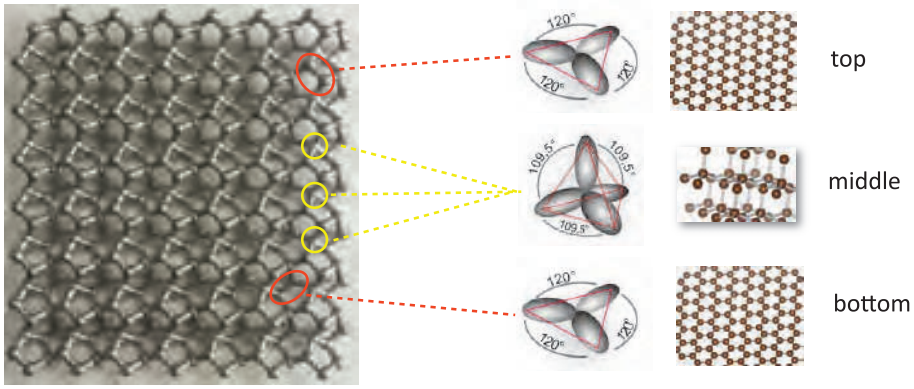


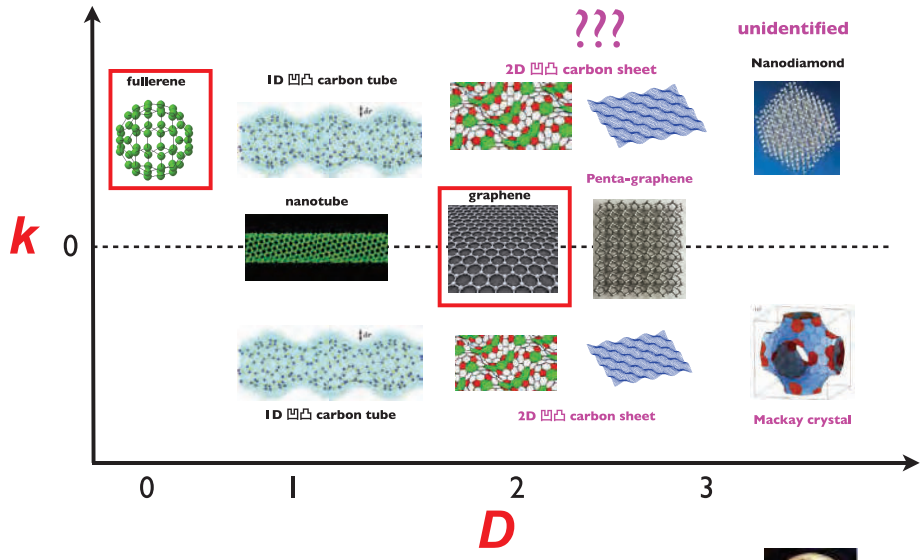
Fig. 1. (A) Crystal structure of T12-carbon viewed from the [100] and [001] directions, respectively. (B) Top and side views of the atomic configuration of penta-graphene. The square marked by red dashed lines denotes a unit cell, and the highlighted balls represent the sp^3 hybridized C atoms.



Structural model made using a 3D printer (given by Prof. Kawazoe)



Mapping of nanocarbons using Gaussian curvature (k) and dimension (D)

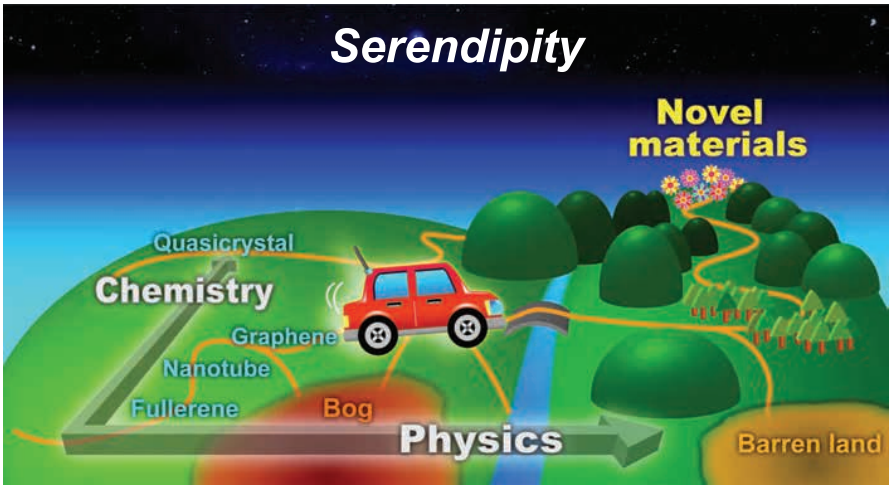


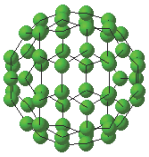
Two times mean Three Times !?

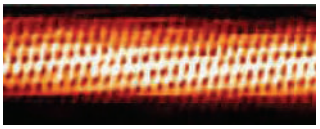


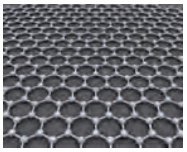
Discovery of new novel materials

based on (1) knowledge (literature), (2) experience, and (3) intuition/inspiration



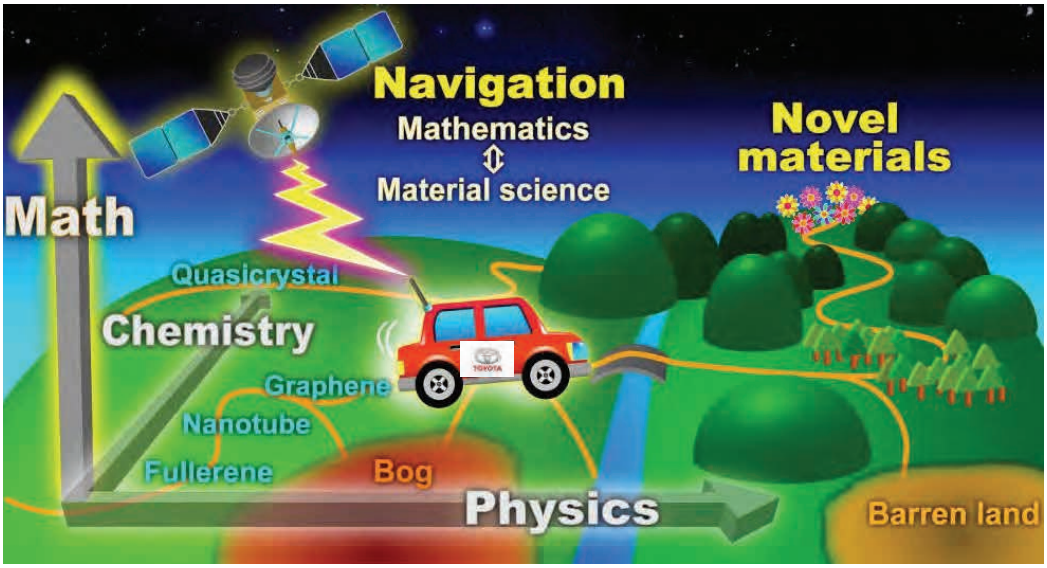






名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

Is it possible to discover new functional materials "beyond serendipity" ?



名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

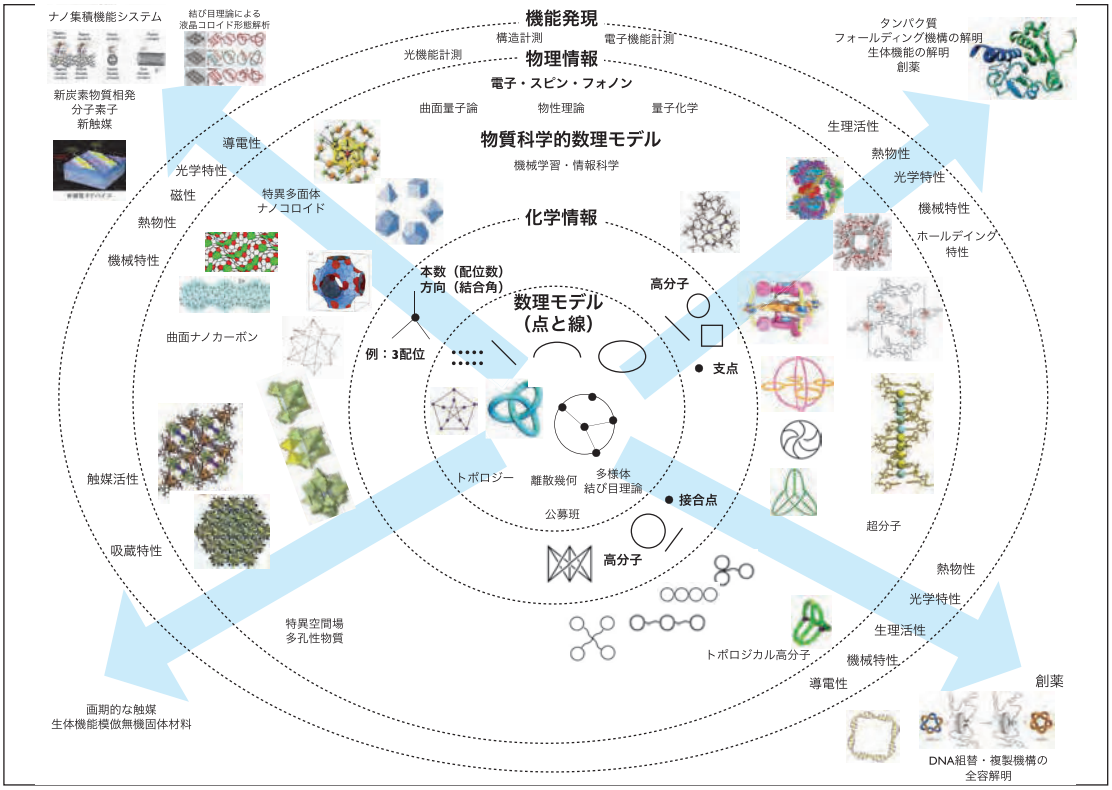
To realize "Beyond Serendipity"

Real materials (atoms, interactions)



Mathematical model (points & lines)

A large gap



Acknowledgments

Onoe Lab.

Masato Nakaya, associate professor
Shinta Watanabe, research associate (Tokyo Inst. Technol.)
Takuya Kawai (Former master student)
Shintaro Umeda (Former master student)
Shu Hosono (Former master student)
Kentaro Yashiro (Former master student)

Collaborators

Prof. Yasutaka Kitagawa (Osaka Univ.)
Prof. Kaoru Ohno (Yokohama National Univ.)
Prof. Yusuke Noda (Okayama Prefect. Univ.)
Dr. Tomonobu Nakayama (NIMS, WPI-MANA)
Prof. Hiroyuki Shima (Yamanashi Univ.)
Prof. Hideo Yoshioka (Nara Women's Univ.)
Prof. Shin-ichi Kimura (Osaka Univ.)
Prof. Takahiro Ito (Nagoya Univ.)
Prof. Shigeki Matsutani (Kanazawa Univ.)
Prof. Yutaro Kabata (Nagasaki Univ.)
Prof. Yuta Ogata (Kyoto Sangyo Univ.)

Research grants

科研費 KAKENHI　NEDO　さきがけ PRESTO　CREST

Variational approach to modeling of elastoplastic deformation of structured materials

Karel SVADLENKA

Kyoto University, Japan

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 [3]. Besides mentioning connections to homogenization via Gamma-convergence [1], we present the underlying mathematical theory and show numerical simulations in comparison to experimental measurements [2].

References

[1] Fabian Christowiak and Carolin Kreisbeck, *Homogenization of layered materials with rigid components in single-slip finite crystal plasticity*, Calculus of Variations 56:75 (2017).

[2] Daria Drozdenko, Michal Knapek, Martin Kružík, Kristián Máthis, Karel Svadlenka and Jan Valdman, *Elastoplastic deformations of layered structure*, accepted for publication to Milan Journal of Mathematics (2022). `https://arxiv.org/abs/2207.01986`

[3] Alexander Mielke and Tomáš Roubíček, Rate-Independent Systems: Theory and Application, Springer, New York (2015).

京都大学 理学研究科・理学部
GRADUATE SCHOOL OF FACULTY OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

Variational approach to modeling of elastoplastic deformation of structured materials

Karel Svadlenka (Kyoto University)

joint work with M. Kružík (Czech Academy of Sciences)
and K. Máthis (Charles University in Prague)

IMI Workshop II: Geometry and Algebra in Material Science III

September 8–10, 2022, Kyushu University, Japan

Outline



1 Motivation: Composite structured materials

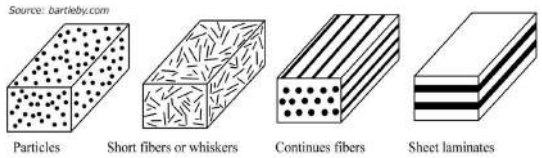
2 Homogenization of layered structures

3 Evolution problem and its homogenization

4 Simulation and comparison with experiment

5 Conclusion

Composite structured materials

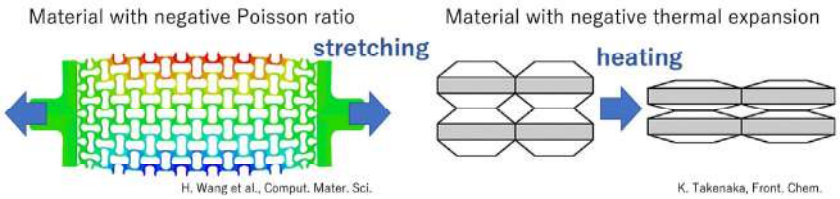


- Two or more material components.
- Arranged in geometrical structure.

What happens when the scale of the structure gets finer and finer?

Resulting material may have excellent properties $\rightarrow$ a lot of research done to try to design new materials in this way.

Example: Interesting things can happen.

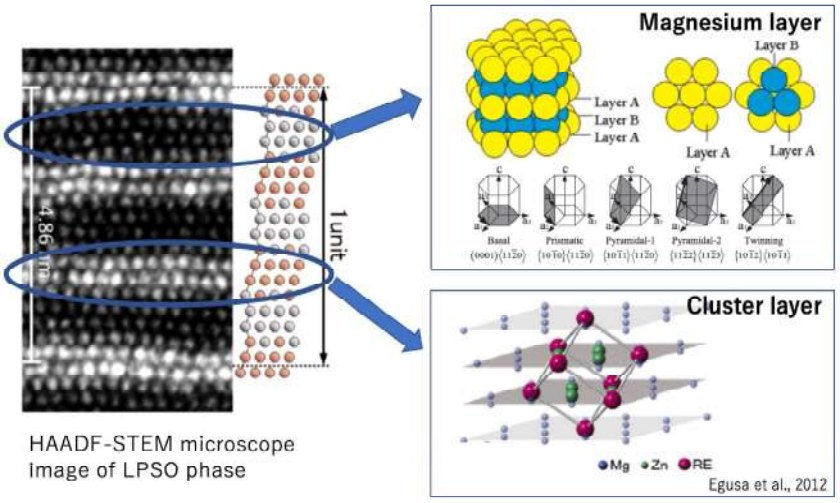


Magnesium alloy with layered structure

Special Mg alloy, developed at Kumamoto university contains two additive elements (one from each group below):

- Co, Ni, Cu, Zn, Al (transition metals)
- Y, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (rare earth metals)

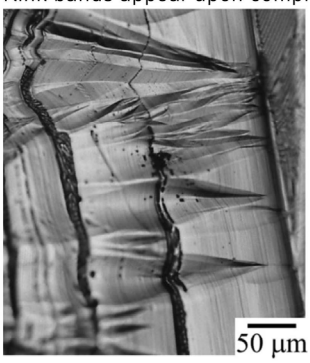
This results in LPSO (long period stacking ordered) structure.



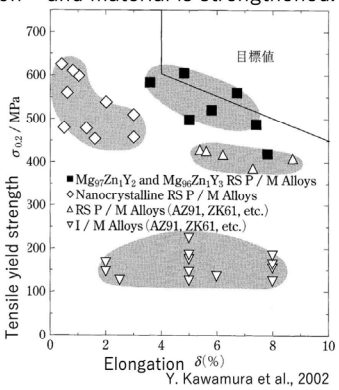
Magnesium alloy with layered structure

Key property: after compression of the alloy, kink band structure appears, which significantly strengthens the material.
Why important? Magnesium has many good properties except mechanical strength.

Kink bands appear upon compression and material is strengthened.



K. Hagihara et al., 2019



Y. Kawamura et al., 2002

The strengthening mechanism is **not yet understood.**
Conjecture: disclinations at kink tips form an energy barrier.

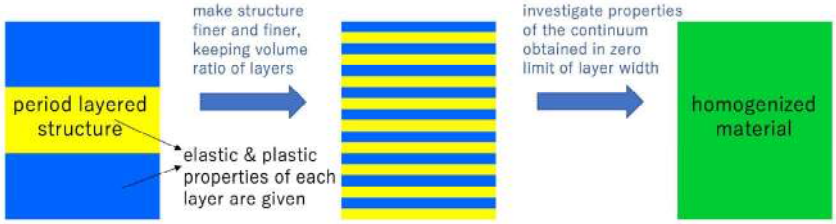
Research plan and goal

- Derive an “averaged” elasto-plastic evolution model for the layered material by taking the width of LPSO layers to zero.
  Keywords: *homogenization, (evolutionary)* Γ*-convergence*
- Analyze the averaged model with the purpose of elucidating the strengthening mechanism from mathematical perspective.
  Keywords: Γ*-convergence, energy concentration*
- Perform numerical simulations and compare with experiments.
  Keywords: *FEM, minimization algorithm, parameter fitting*

I would like to report on partial results.

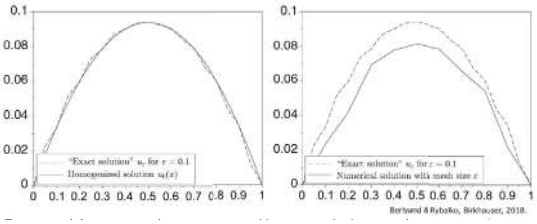
Stationary homogenization

What are the properties of the material obtained in the zero limit of period?



Importance of this limit:

- simpler to analyze
- cheaper to solve numerically
- is a reasonable approximation



Solutions of $-(\sigma(x/\varepsilon)u')' = 1$ with zero bdry condition.

Main tool: Γ-convergence

Definition

Let X be a complete metric space and let $\mathscr{F}_k : X \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, $k \in \mathbb{N}$ be functionals. The functional $\mathscr{F}_\infty : X \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ is called the **Γ-limit** of $\{\mathscr{F}_k\}$ if the following two conditions are satisfied:

(H1) **liminf-inequality**: For all sequences $\{u_k\} \subset X$ with $u_k \to u$ in X,

$$\mathscr{F}_\infty(u) \leq \liminf_{k\to\infty} \mathscr{F}_k(u_k).$$

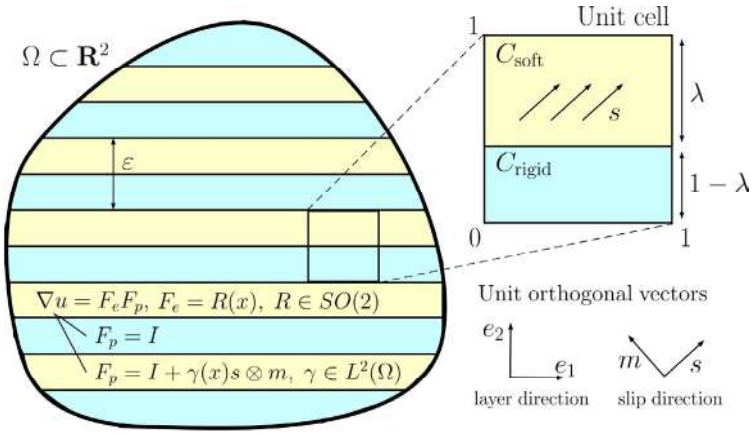
(H2) For all $u \in X$ there **exists a recovery sequence** $\{u_k\} \subset X$:

$$u_k \to u \text{ in } X \quad \text{and} \quad \mathscr{F}_\infty(u) = \lim_{k\to\infty} \mathscr{F}_k(u_k).$$

Important properties:

- If $\mathscr{F}_k$ are equicoercive, then $\min_X \mathscr{F}_\infty = \lim_{k\to\infty} \inf_X \mathscr{F}_k$.
- Γ-limit $\mathscr{F}_\infty$ is always lower semicontinuous.

Model of layered structure

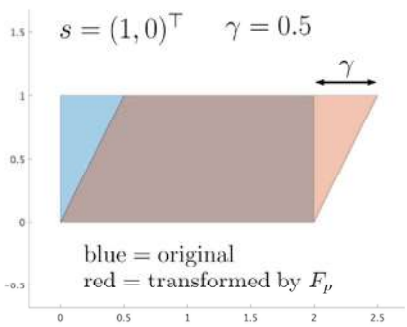


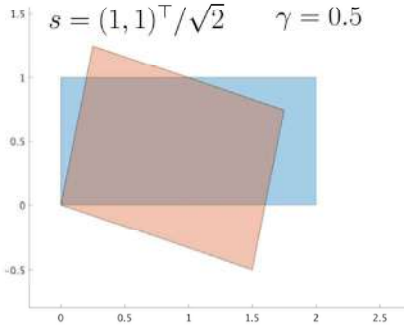
Energy functional:

$$E_\varepsilon(u) = \begin{cases} \int_\Omega \gamma^2 \, dx & \text{if } u \in W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2), \nabla u = R(\mathbb{I} + \gamma s \otimes m), \\ & R \in L^\infty(\Omega; SO(2)), \gamma \in L^2(\Omega), \gamma = 0 \text{ a.e. in } \varepsilon C_{\text{rigid}} \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

Reference slide

$$F_p = I + \gamma s \otimes m \qquad m = s^\top$$





Two rigidity results



Theorem 1 (Rigidity for Sobolev functions) Reshetnyak, 1967

If $u \in W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ satisfies $\nabla u(x) \in SO(2)$ for a.e. $x \in \Omega$, then there is a constant rotation $R \in SO(2)$ such that $\nabla u(x) = R$ for all $x \in \Omega$.

$\Rightarrow$ Rigid layers can take only rigid motions.

Theorem 2 (Asymptotic layered rigidity) Kreisbeck et al., 2017

Let a sequence $\{u_\varepsilon\}_\varepsilon \subset W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ satisfy $u_\varepsilon \rightharpoonup u$ in $W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ as $\varepsilon \to 0$ for some $u \in W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ with $\det \nabla u = 1$ a.e. in Ω, and

$$\nabla u_\varepsilon \in SO(2) \quad \text{a.e. in } \Omega \cap \varepsilon C_{\text{rigid}} \qquad \text{for all } \varepsilon > 0.$$

Then there exists a matrix $R \in SO(2)$ and $\gamma \in L^2(\Omega)$ such that

$$\nabla u = R\left(\mathbb{I} + \gamma e_1 \otimes e_2\right). \tag{1}$$

$\Rightarrow$ In the homogenized material only horizontal shear is allowed (up to a global rotation).

Stationary homogenization result



Theorem 3 (Homogenization via Γ-convergence) Kreisbeck et al., 2017

The family $\{E_\varepsilon\}_\varepsilon$ Γ-converges in the weak $W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$-topology to the functional $E : L^2_0(\Omega;\mathbb{R}^2) \to [0,\infty]$ defined by

$$E(u) = \begin{cases} \frac{s_1^2}{\lambda}\int_\Omega \gamma^2 \,\mathrm{d}x \\ \quad -2s_1s_2\int_\Omega \gamma \,\mathrm{d}x & \text{if } u \in W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2), \\ & \quad \nabla u = R\left(\mathbb{I} + \gamma e_1 \otimes e_2\right) \text{ with} \\ & \quad R \in SO(2), \gamma \in L^2(\Omega), \\ & \quad \gamma \in K_{s,\lambda} \text{ a.e. in } \Omega, \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The pointwise restriction $K_{s,\lambda}$ for $s = (s_1, s_2)$ and $\lambda \in (0,1)$ reads

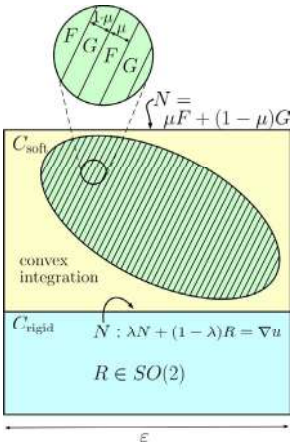
$$K_{s,\lambda} = \begin{cases} \{0\} & \text{if } s = e_2, \\ \left[-2\frac{s_1}{s_2}\lambda, 0\right] & \text{if } s_1 s_2 > 0, \\ \left[0, -2\frac{s_1}{s_2}\lambda\right] & \text{if } s_1 s_2 < 0, \\ \mathbb{R} & \text{if } s = e_1. \end{cases}$$

Outline of proof

- **Liminf inequality**: We want to show that $u_k \rightharpoonup u$ in $W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ implies $E(u) \le \liminf_{k\to\infty} E_{\varepsilon_k}(u_k)$. For u piecewise affine, we obtain from Theorem 2 the lower bound

$$\liminf_{k\to\infty} E_{\varepsilon_k}(u_k) \ge \int_\Omega \frac{1}{\lambda} |(\nabla u)m - (1-\lambda)Rm|^2 - \lambda \, dx = E(u).$$

  For general u, we approximate $\gamma \in L^2(\Omega)$ by simple functions.



- **Recovery sequence**: For $u \in W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ with $\nabla u = R(I + \gamma e_1 \otimes e_2)$, $R \in SO(2)$, $\gamma \in L^2(\Omega)$, we want to find a sequence $\{u_k\}$ such that $u_k \rightharpoonup u$ in $W^{1,2}(\Omega;\mathbb{R}^2)$ and $E(u) = \lim_{k\to\infty} E_{\varepsilon_k}(u_k)$.
  Prove first for constant γ and then approximate by simple functions.
  Recalling averaging lemma we find $N \in \mathcal{N}_s := \{F \in \mathbb{R}^{2\times 2} : \det F = 1, |Fs| \le 1\}$ such that

$$Ne_1 = Re_1, \quad \lambda N + (1-\lambda)R = R(I + \gamma e_1 \otimes e_2).$$

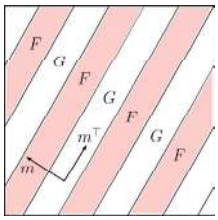
  However, such N need not belong to the set $\mathcal{M}_s := \{F \in \mathbb{R}^{2\times 2} : \det F = 1, |Fs| = 1\}$ of gradients with finite energy. We apply the averaging lemma again to approximate N by fine laminates between two gradients $F, G \in \mathcal{M}_s$ with finite energy. The small region "between" this laminate and boundary is handled by convex integration techniques. The sequence thus constructed has the desired properties.

Two basic auxiliary lemmas

Averaging lemma

Let Ω be a bounded open set in $\mathbb{R}^n$, and let $g \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ be a Π-periodic function. Then

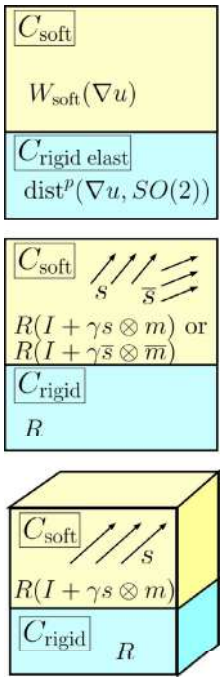
$$g\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \rightharpoonup \frac{1}{|\Pi|}\int_\Pi g(x)\,dx \quad \text{weakly in } L^2(\Omega) \quad \text{as } \varepsilon \to 0.$$



Laminates

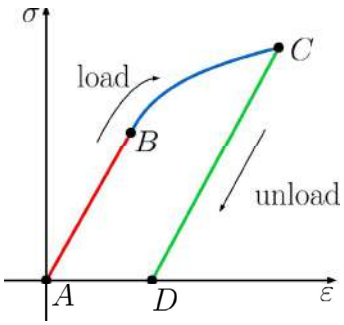
Given two matrices $F, G \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, there exists a laminate function $u \in W^{1,2}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2;\mathbb{R}^2)$ whose gradient alternates between F and G if and only if F and G are rank-one connected, i.e., there is a unit vector m and a vector $v \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ such that $F - G = v \otimes m$.

Extensions



- **Elastic rigid layers** (Kreisbeck et al., 2020)
  Similar result is obtained if rigid layers are allowed to deform elastically with coefficients diverging with a certain speed with respect to layer width.
- **Several slip systems** (KS, A. Ishikawa, 2022)
  Analogous result but with no restriction on slip magnitude γ is obtained for soft layers having two or more slip systems.
- **Higher dimensions** (KS, A. Ishikawa, 2022)
  Analogous result is obtained for layered structures in higher dimensions but the rotation in the limit can vary in the direction perpendicular to the layers.

Irreversibility of plastic deformation



Plasticity is a history-dependent behavior $\rightarrow$ we need to consider evolution problem.

Physical model derived by time-incremental approach:

- in every time interval lattice distortion along one of available slip systems is allowed at each point
- the system is assumed to deform so that it minimizes the sum of its final energy and dissipated energy

$\rightarrow$ Energy density depends also on internal variables, e.g., the plastic tensor.

Rate-independent system and energetic solution



Rate-independent system $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}, \mathcal{D})$:

- State space $\mathcal{Q} = \mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$ (reflexive, separable Banach spaces with weak topology)
- Energy functional: $\mathcal{E} : [0, T] \times \mathcal{Q} \to \mathbb{R} \cup \{\infty\}$
- Dissipation distance $\mathcal{D} : \mathcal{Q} \times \mathcal{Q} \to [0, \infty]$

Energetic solution $q : [0, T] \to \mathcal{Q}$ satisfies

(S) $\mathcal{E}(t, q(t)) \leq \mathcal{E}(t, \widetilde{q}) + \mathcal{D}(q(t), \widetilde{q}) \quad \forall \widetilde{q} \in \mathcal{Q}$

(E) $\mathcal{E}(t, q(t)) + \mathrm{Diss}_{\mathcal{D}}(q; [0, t]) = \mathcal{E}(0, q(0)) + \int_0^t \partial_s \mathcal{E}(s, q(s))\, ds,$

where dissipation is defined as total variation wrt to $\mathcal{D}$:

$$\mathrm{Diss}_{\mathcal{D}}(q; [r, s]) = \sup_{r \leq t_0 < t_1 \cdots < t_N \leq s} \sum_{j=1}^{N} \mathcal{D}\left(q\left(t_{j-1}\right), q\left(t_j\right)\right).$$

Time discretization leads to the minimization problem

$$q^{k+1} \in \operatorname{Arg\,min}_{\widetilde{q}} \left(\mathcal{E}(t_{k+1}, \widetilde{q}) + \mathcal{D}(q^k, \widetilde{q}) \right).$$

Evolutionary Γ-convergence



Definition of $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}_\varepsilon, \mathcal{D}_\varepsilon) \overset{ev-\Gamma}{\longrightarrow} (\mathcal{Q}, \mathcal{E}_0, \mathcal{D}_0)$

$(\mathcal{Q}, \mathcal{E}_\varepsilon, \mathcal{D}_\varepsilon)_\varepsilon$ evolutionary Γ-converges to $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}_0, \mathcal{D}_0)$ as $\varepsilon \to 0$, provided that for any sequence $q_\varepsilon : [0, T] \to \mathcal{Q}$ of energetic solutions to $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}_\varepsilon, \mathcal{D}_\varepsilon)$ (which exist) such that $q_\varepsilon(t) \to q(t)$ in $\mathcal{Q}$ for all $t \in [0, T]$ and $\mathcal{E}_\varepsilon(0, q_\varepsilon(0)) \to \mathcal{E}_0(0, q(0))$ for $\varepsilon \to 0$, then $q : [0, T] \to \mathcal{Q}$ is an energetic solution for $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}_0, \mathcal{D}_0)$, and the corresponding energies, dissipations and loadings converge to their counterparts.

Sufficient conditions for evolutionary Γ-convergence:

(1) $\mathcal{D}_\varepsilon = \mathcal{D}\ \forall \varepsilon > 0$, where $\mathcal{D} : \mathcal{Z} \times \mathcal{Z} \to [0, +\infty]$ is l.s.c.

(2) $\mathcal{E}_\varepsilon : \mathcal{Q} \to \mathbb{R}_\infty$ are lower semicontinuous for all $\varepsilon > 0$;

(3) $E_\varepsilon(q) \geq C\|q\|_{\mathcal{Q}}^\alpha - c$ for all $q \in \mathcal{Q}, \varepsilon > 0$ with $C, c > 0$ and $\alpha > 1$;

(4) $\{\mathcal{E}_\varepsilon\}_\varepsilon$ Γ-converges to $\mathcal{E}_0$ with respect to the topology of $\mathcal{Q}$;

(5) if $(t_\varepsilon, q_\varepsilon)_\varepsilon$ is stable for all $\varepsilon > 0$ and $\sup_{\varepsilon > 0} \mathcal{E}_\varepsilon(t_\varepsilon, q_\varepsilon) < +\infty$, such that $(t_\varepsilon, q_\varepsilon) \to (t, q)$ in $[0, T] \times \mathcal{Q}$, then q is stable.

Mutual recovery sequence



A sufficient condition for the property (5) :

Existence of mutual recovery sequence

For any sequence $(t_\varepsilon, q_\varepsilon)_\varepsilon \subset [0,T] \times \mathcal{Q}$ with $\sup_{\varepsilon>0} \mathcal{E}_\varepsilon(t_\varepsilon, q_\varepsilon) < +\infty$ that converges to $(t,q) \in [0,T] \times \mathcal{Q}$ and any $\tilde{q} \in \mathcal{Q}$, there exists a sequence $\{\widetilde{q}_\varepsilon\}_\varepsilon \subset \mathcal{Q}$ such that $\widetilde{q}_\varepsilon \to \tilde{q}$ in $\mathcal{Q}$ and

$$\limsup_{\varepsilon\to 0} \mathcal{E}_\varepsilon(t_\varepsilon, \widetilde{q}_\varepsilon) + \mathcal{D}_\varepsilon(q_\varepsilon, \widetilde{q}_\varepsilon) - \mathcal{E}_\varepsilon(t_\varepsilon, q_\varepsilon) \le \mathcal{E}_0(t, \tilde{q}) + \mathcal{D}_0(q, \tilde{q}) - \mathcal{E}_0(t, q)$$

For layered structure, almost no evolutionary homogenization results (only very special cases).
Problem is limit of product of weakly convergent sequences:

$$R_\varepsilon(I + \gamma_\varepsilon e_1 \otimes e_2)$$

$\to$ compensated compactness?

Rate-independent elasto-plastic model



Rate-independent system $(\mathcal{Q}, \mathcal{E}, \mathcal{D})$

$$\mathcal{Q} = \left\{ u \in W^{1,p'}(\Omega;\mathbb{R}^d) : u = u_0 \text{ on } \Gamma_0 \right\} \times \left\{ \gamma \in L^r(\Omega) \cap W^{1,\alpha}(\Omega) \right\}$$

$$\mathcal{E}(t,u,\gamma) = \int_\Omega W(x, \overbrace{\nabla u(x)(I - \gamma(x) s \otimes m)}^{F_e = (\nabla u) F_p^{-1}}) \,\mathrm{d}x + \int_\Omega w(x,\gamma(x)) \,\mathrm{d}x + \varepsilon \int_\Omega |s \otimes m \otimes \nabla\gamma(x)|^\alpha \,\mathrm{d}x - L(t,u)$$

$$\mathcal{D}(\gamma_1,\gamma_2) = \int_\Omega \sigma(x) \,|\gamma_1(x) - \gamma_2(x)| \,\mathrm{d}x$$

- $W : \Omega \times \mathbb{R}^{d\times d} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ polyconvex, frame-indifferent, coercive
- (s, m): glide direction and slip plane normal
- $w(x,\gamma) \ge C|\gamma|^r - c_0$ for some $C, c_0 > 0$, $r > 1$, and all $x \in \Omega$ and all $\gamma \in \mathbb{R}$
- $L(t,u) := \int_\Omega f(t) \cdot u \,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_1} g(t) \cdot u \,\mathrm{d}S$
- $\sigma : \Omega \to [\sigma_0, +\infty)$, $\sigma_0 > 0$

Existence of energetic solution



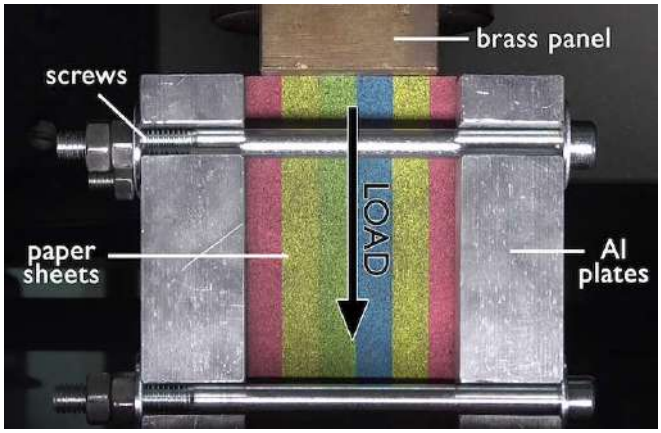
Existence theorem [using Mielke et al.]

Let $\Gamma_0 \subset \partial\Omega \backslash \Gamma_1$ be of positive $(d-1)$-dimensional Lebesgue measure. Let $p' > d$ and let u_0 be such that $\int_\Omega W(x, \nabla u_0(x))\ \mathrm{d}x < +\infty$. Assume that $\mathcal{E}$ and $\mathcal{D}$ are as above, L belongs to $C^1([0,T]; W^{1,p'}(\Omega;\mathbb{R}^d)^*)$, the functions W, w satisfy the mentioned properties, $1/p + 1/r = 1/p' < 1/d$, and $\alpha > 1$. Let the initial condition $(u^0, \gamma^0) \in \mathcal{Q}$ be stable. Then an **energetic solution exists.**

Remark: It is shown by [Mainik & Mielke] that time-dependent Dirichlet boundary conditions can be considered in the above proposition if $u_0 \in C^1\left([0,T]\times\Omega;\mathbb{R}^d\right)$, $\nabla u_0 \in BC^1\left([0,T]\times\Omega;\mathbb{R}^{d\times d}\right)$ and $|\,(\nabla u_0)^{-1}\,| \in L^\infty(\Omega)$. Here BC^1 stands for bounded and continuously differentiable maps.

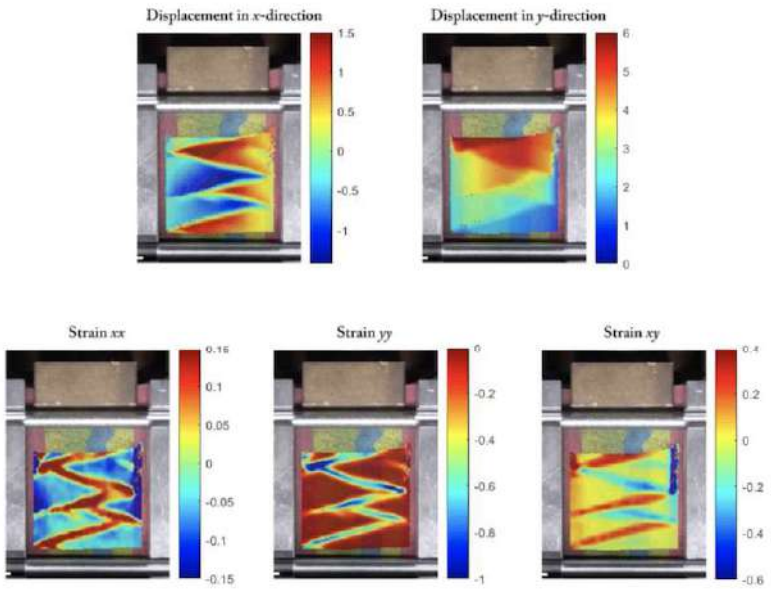
Experiment



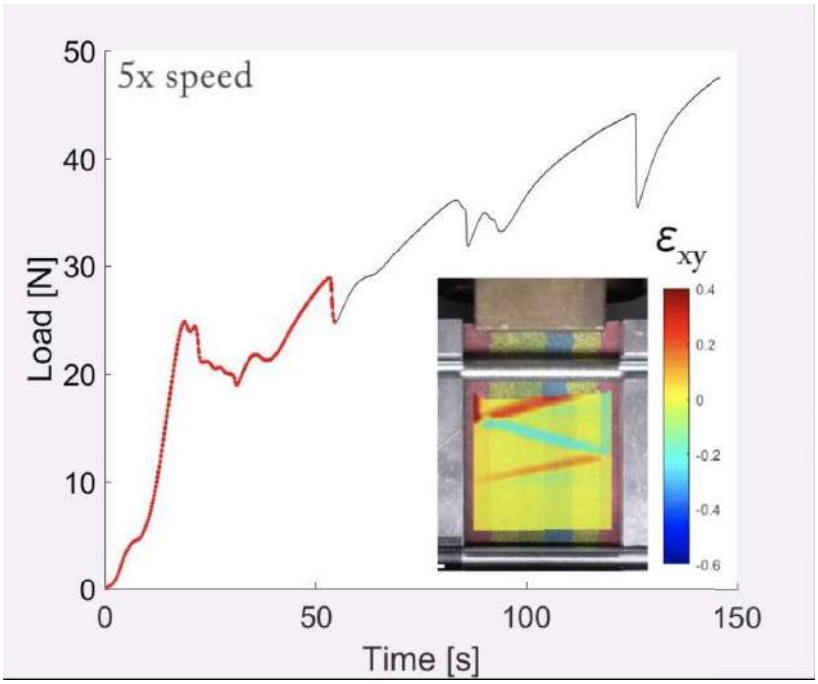


- Compression of stack of paper sheets (normal to sheets is x-direction).
- Sheets confined from the sides and from bottom.
- Instron 5582 testing machine with a constant cross-head speed of 0.075 mm·s^{-1} (initial strain rate of 10^{-3}s^{-1}).
- Video recorded by Panasonic HC-V180EP-K camera with full HD resolution 1920×1080 px^2.
- The front side of the paper block facing the camera sprayed with black acrylic paint in order to create a speckle pattern for digital image correlation (DIC) analysis.

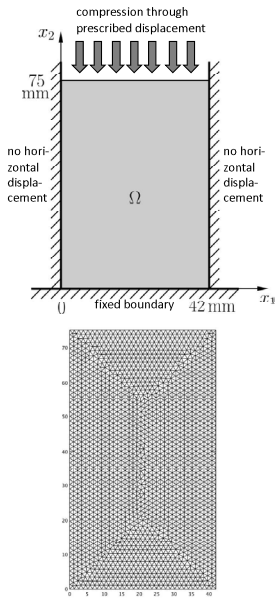
Results of the experiment (1)



Results of the experiment (2)



Numerical implementation by FEM



$$\mathcal{E}(t,u,\gamma) = \int_\Omega \left\{ C\left(|F_e|^p - d^{\frac{p}{2}} - 2\log(\det F_e)\right) + D\left(\det F_e - 1\right)^2 + \alpha \operatorname{tr}\left((F_e)^T F_e M\right) + \beta |F_p|^r + \epsilon |\nabla F_p|^\alpha \right\} \mathrm{d}x$$

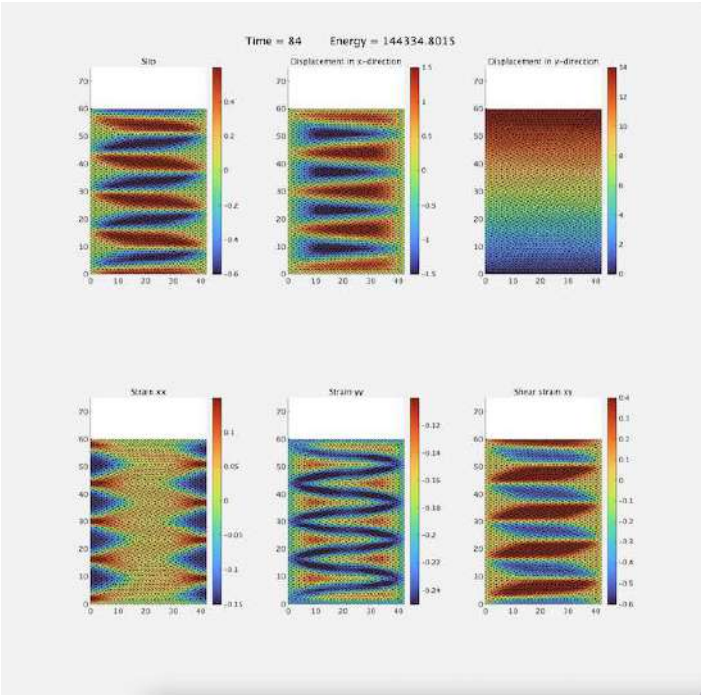
if $\det F_e > 0$ and $+\infty$ otherwise. We take $p > 2$, $\alpha = r = 2$.

$$\mathcal{D}(\gamma_1,\gamma_2) \approx \mathcal{D}^\delta(\gamma_1,\gamma_2) := \sigma \int_\Omega \sqrt{\delta^2 + |\gamma_1(x) - \gamma_2(x)|^2}\,\mathrm{d}x$$

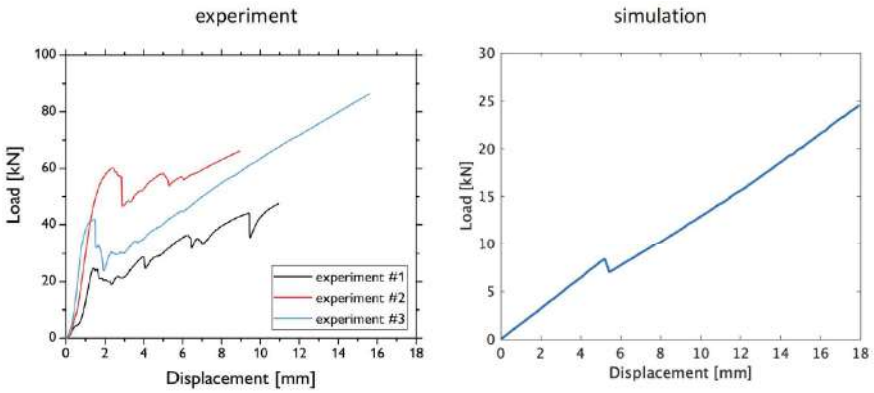
$$q^{k+1} \in \operatorname{Arg}\min_{\widetilde{q}=(\widetilde{u},\widetilde{\gamma})} \left(\mathcal{D}\left(\gamma^k,\widetilde{\gamma}\right) + \mathcal{E}\left(t^{k+1},\widetilde{u},\widetilde{\gamma}\right)\right)$$

Parameters: domain $\Omega = (0,42) \times (0,75)$ [mm] divided into 4184 elements, time interval $t \in [0,100]$ [s] discretized into 76 steps, compression speed 0.18 [mm/s], $s = (0,1)^\top$, material constants $C = 0.6$ GPa, $D = 0.2$ GPa, $\alpha = 0.1$ GPa, $\beta = 20$ kPa, $\epsilon = 500$ N, $\sigma = 1$ kPa, regularization $\delta = 10^{-5}$, perturbation for gradient 10^{-8}, penalty for $\det F^e \leq 0$ is 10^6 on triangle, 2nd order quadrature rule, stopping criteria TolX $= 10^{-10}$, TolFun $= 10^{-4}$.

Results of simulation (1)

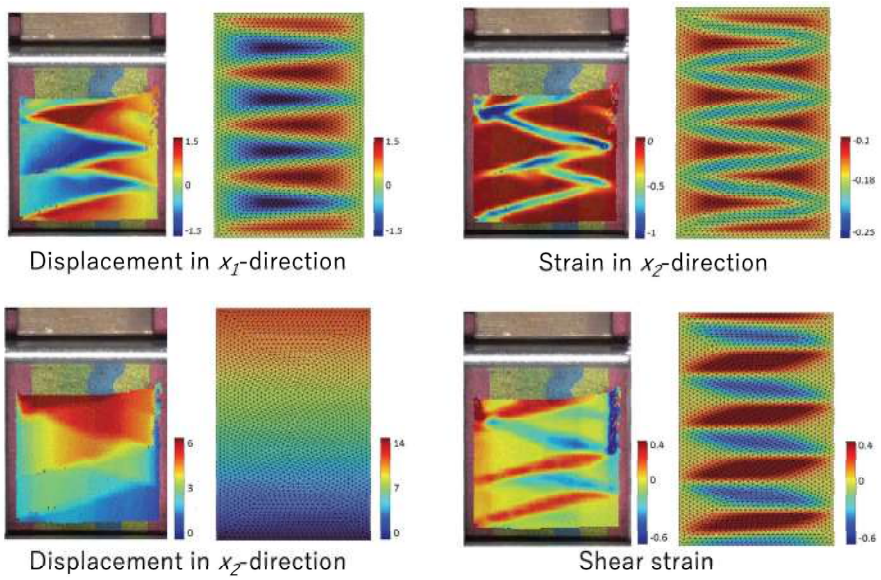


Results of simulation (2)



Results of simulation (3)

Left: experiment, right: simulation.



Conclusion and future tasks



The model has a good perspective! It is capable of capturing the important features of the deformation mechanism.

Future tasks

- Derive the model as evolutionary Γ-limit of rate-independent system for layered material, in order to see the connection between material properties of the layers and the homogenized material.
- Perform experiments with different material and compare with 3D simulations (this month with aluminum plates and LPSO). What works for paper sheets, will work for LPSO?
- Understand the dynamics of gradual kink appearance: influence of acceleration or boundary conditions?

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

Hajime IGARASHI
Hokkaido University, Japan

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.

HOKKAIDO UNIVERSITY

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 magnetostatic and magneto-quasi-static fields

2022年, 9月10日, 九州大学
マス・フォア・インダストリ研究所

五十嵐　一

北海道大学　情報科学研究院

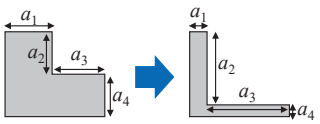
発表の流れ

(1)トポロジー最適化：自己紹介に代えて
(2)均質化とは
(3)多重巻き線の均質化
(4)圧粉磁芯(軟磁性複合材料SMC)の均質化

形状最適化

パラメータ形状最適化

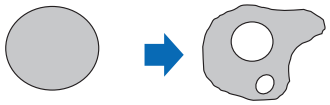
・設計パラメータを調整して最適化



・設計者がパラメータを設定.
・機器の設計に活用されている.

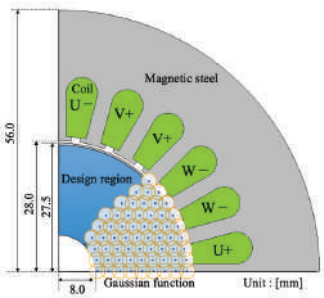
トポロジー形状最適化

・対象の形状を自由に変化させることで最適化(種数(genus)も変化可能)



・斬新な形状が得られる.
・実用化はこれからである.

永久磁石モータのトポロジー最適化



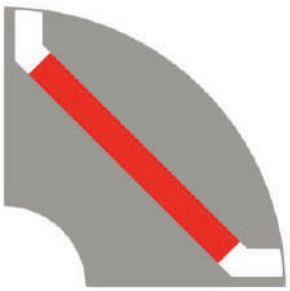
最適化対象のモータとガウス基底の配置.

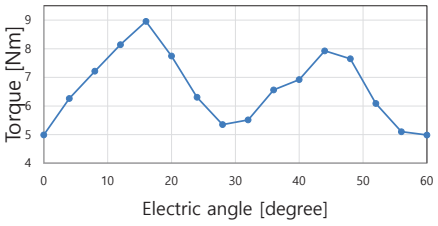
Current phase angle [degree]	40.0
Current amplitude [A]	10.0
Phases	3 phases
poles	4 poles
Coil Turns	35



参照モデル

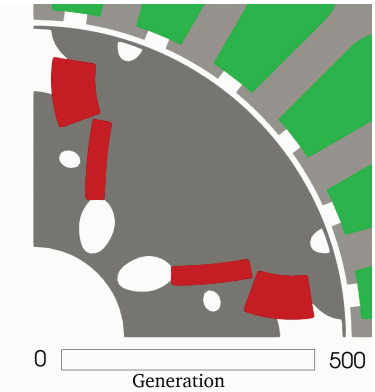
参照モデル



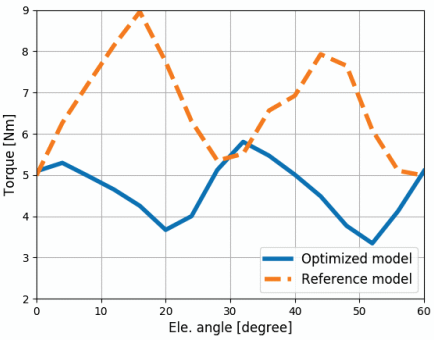


参照モデルのトルク曲線

最適化過程



Proposed method



S. Hayashi, H. Igarashi, Parameter-Topology Hybrid Optimization of Electric Motor with Multiple Permanent Magnets, Presented at ISEM2022

円柱導体の表皮効果

アンペアの法則　$\mathrm{rot}\boldsymbol{B} = \mu\sigma\boldsymbol{E}$　(1a)

ファラデーの法則　$\mathrm{rot}\boldsymbol{E} = -j\omega\boldsymbol{B}$　(1b)

(1)をFig.1の円筒座標で表示すると

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rB_\theta) = \mu\sigma E_z \qquad \frac{\partial E_z}{\partial r} = j\omega B_\theta \quad (2)$$

(2)からつぎのようにベッセルの微分方程式を導ける

$$\frac{d^2E_z}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dE_z}{dr} + a^2E_z = 0 \quad (3)$$

ただし　$a^2 \equiv -j\omega\mu\sigma$　(4)

よって電流密度は0次のベッセル関数で表現できる.

$$J_z = \sigma E_z(r) = \frac{aI}{2\pi R}J_0(ar) \quad (5)$$

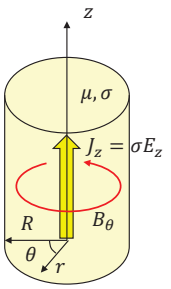
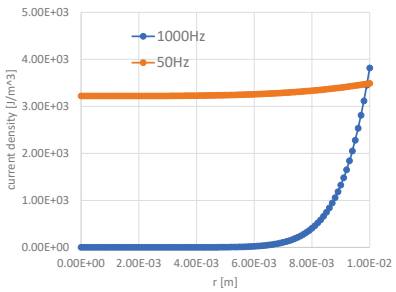


Fig.1 半径 R の導体円柱を流れる交流電流と誘導された磁界

円柱導体の表皮効果

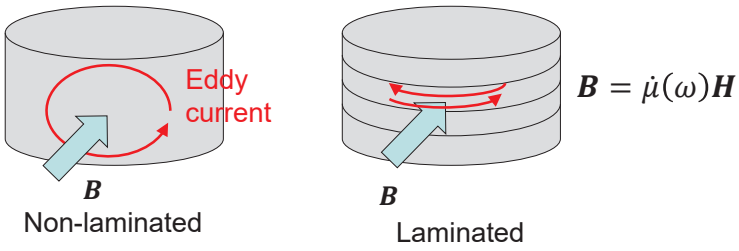


表面から表皮厚 δ の範囲に電流が集中する.

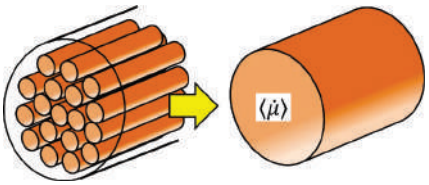
$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu\omega\sigma}}\ [\mathrm{m}]$$

$R = 1\mathrm{cm}$
$\sigma = 6 \times 10^7\ [\mathrm{S/m}], \mu = \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\ [\mathrm{H/m}]$

Frequency [Hz]	δ
50	1 cm
1000	2 mm



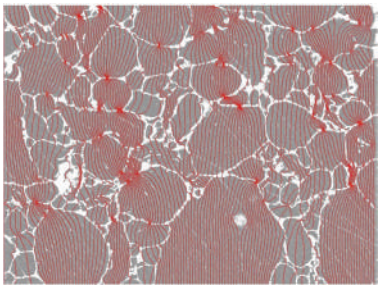
均質化(homogenization)



方法	特徴	近似
セル法	周期セルに境界条件を与える	周期性
漸近展開法 Two-scale convergence	周期性を仮定し，2つのスケールの比で展開	周期性
Ollendorff Clausius-Mosotti Maxwell-Garnett	外場と自己場が無矛盾になるように決定	外場の一様性
粒子法	系の部分モデルを解析 (brute force)	部分が全体の性質を有する

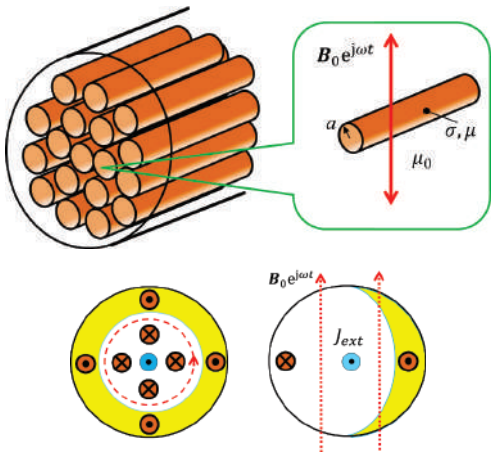


Litz-wire coil



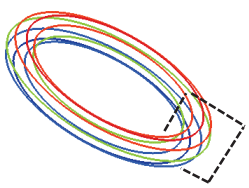
Soft magnetic composite (SMC)

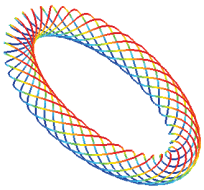
Materials composed of fine elements

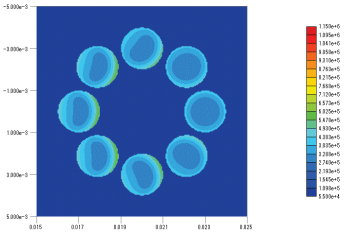


Skin Effect Proximity Effect

近接効果



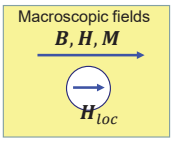




電流密度の分布

マクロ透磁率：Ollendorffの式

$$\boldsymbol{H}_{loc} = \boldsymbol{H} + N\boldsymbol{M}$$



$$\boldsymbol{H}_{in} = \boldsymbol{H}_{loc} - N\boldsymbol{M}_{in}$$



$$\boldsymbol{M}_{in} = (\mu_r - 1)\boldsymbol{H}_{in}$$



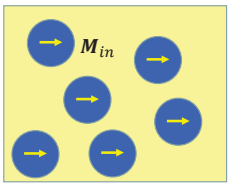
$$\boldsymbol{M}_{in} = \frac{\mu_r - 1}{1 + N(\mu_r - 1)}\boldsymbol{H}_{loc}$$

F. Ollendorff, “Magnetostatik der Massekerne,” *Arch. f. Electrotechnik.*, 25, pp. 436-447, 1931

マクロ透磁率：Ollendorffの式

マクロ磁化

$$\boldsymbol{M} = \eta \boldsymbol{M}_{in} = \frac{\eta(\mu_r - 1)}{1 + N(\mu_r - 1)} \boldsymbol{H}_{loc}$$



Volume fraction η

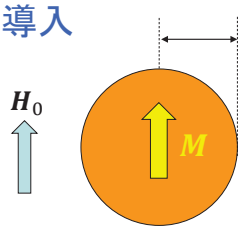
構成関係式

$$\boldsymbol{B} = \mu_0(\boldsymbol{H} + \boldsymbol{M})$$

マクロ透磁率：Ollendorffの式

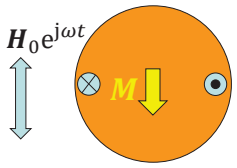
$$\langle \mu_r \rangle = 1 + \frac{\eta(\mu_r - 1)}{1 + N(1 - \eta)(\mu_r - 1)}$$

複素透磁率の導入



Cylinder in static field

$$\boldsymbol{M} = 2\frac{\mu_r - 1}{\mu_r + 1}\boldsymbol{H}_0$$



Cylinder in time-harmonic field

$$\boldsymbol{M} = 2\frac{\mu_r \dfrac{J_1(z)}{zJ_1'(z)} - 1}{\mu_r \dfrac{J_1(z)}{zJ_1'(z)} + 1}\boldsymbol{H}_0 \qquad \dot{\mu}_r$$

$$z = a\sqrt{-j\omega\mu\sigma} = (1 - j)\frac{a}{\delta}$$

種々の形状の複素透磁率

$$z = a\sqrt{-j\omega\mu\sigma} = (1-j)\frac{a}{\delta}$$

$\boldsymbol{B}_0$ Cylinder*	$\dot{\mu}_r(\omega) = \mu_r \dfrac{J_1(z)}{zJ_1'(z)}$
Sphere**	$\dot{\mu}_r(\omega) = \dfrac{2\mu_r(z-\tan z)}{(1-z^2)\tan z - z}$
Plate***	$\dot{\mu}_r(\omega) = \mu_r \dfrac{\tan z}{z}$

* H. Igarashi, *IEEE Trans. Magn*, *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 53, no. 1, Art. 7400107, 2017.
** A. Berthault, D. Rousselle, G. Zerah, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 112, pp. 477-480, 1992.
*** e.g. Y. Shindo, O. Noro, *IEEJ Trans. Fundamentals and Materials*, vol. 134, no. 4, pp. 173-181, 2014.

複素透磁率の連分数展開

(a) d, μ, σ, $\boldsymbol{H}_0$, $z = \dfrac{d}{2}k$

$$\frac{\dot{\mu}_r}{\mu_r} = \frac{\tan z}{z} = \cfrac{1}{1-\cfrac{z^2}{3-\cfrac{z^2}{5-\cfrac{z^2}{7-\cdots}}}}$$

(b) $2a$, μ, σ, $\boldsymbol{H}_0$, $z = ak$

$$\frac{\dot{\mu}_r}{\mu_r} = \frac{J_1(z)}{zJ_1'(z)} = \cfrac{1}{1-\cfrac{z^2}{4-\cfrac{z^2}{6-\cfrac{z^2}{8-\cdots}}}}$$

$$= \cfrac{1}{\left(\dfrac{J_1(z)}{zJ_0(z)}\right)^{-1} - 1}$$

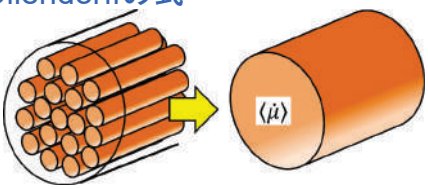
(c) $2a$, μ, σ, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{J}_0$, $z = ak$, $R_{dc} = \dfrac{1}{\pi a^2 \sigma}$

$$\frac{R_{dc}}{R_{ac}} = \frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \frac{2J_1(z)}{zJ_0(z)} = \cfrac{2}{2-\cfrac{z^2}{4-\cfrac{z^2}{6-\cfrac{z^2}{8-\cdots}}}}$$

(d) $2a$, μ, σ, $\boldsymbol{H}_0$, $z = ak$

$$\frac{\dot{\mu}_r}{\mu_r} = \frac{2\left(1-\dfrac{\tan z}{z}\right)}{(1-z^2)\dfrac{\tan z}{z} - 1} = \cfrac{2}{2-\cfrac{z^2}{5-\cfrac{z^2}{7-\cfrac{z^2}{9-\cdots}}}}$$

拡張されたOllendorffの式



η: filling factor
N: demagnetization constant

Ollandorff formula* for static magnetic field

$$\langle \mu_r \rangle = 1 + \frac{\eta(\mu_r - 1)}{1 + N(1-\eta)(\mu_r - 1)}$$

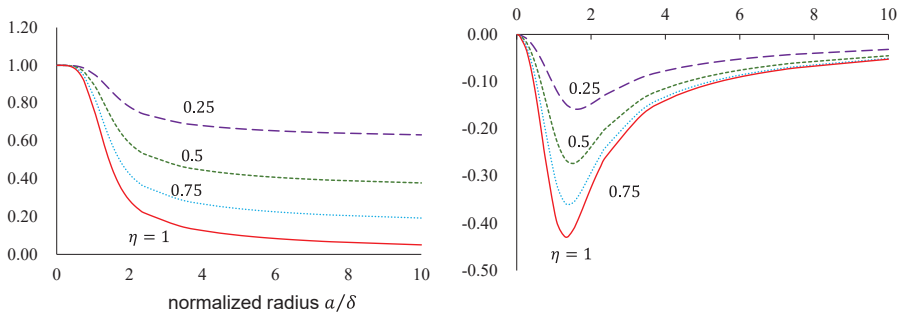
*F. Ollendorff, *Arch. f. Eledtrotechnik.*, 25, pp. 436-447, 1931.

Extended Ollandorff formula** for eddy current field

$$\langle \dot{\mu}_r(\omega) \rangle = 1 + \frac{2\eta(\dot{\mu}_r(\omega) - 1)}{2 + (1-\eta)(\dot{\mu}_r(\omega) - 1)} \qquad \dot{\mu}_r(\omega) = \mu_r \frac{J_1(z)}{zJ_1'(z)}$$

** H. Igarashi, *IEEE Trans. Magn*, vol. 53, no. 1, Art. 7400107, 2017.

複素透磁率の周波数特性

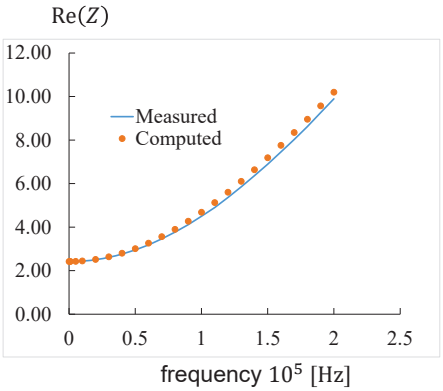


実部　　虚部

実験結果



50-turn enameled copper coil, with conductor radius 0.15 mm, cover thickness 0.03 mm.

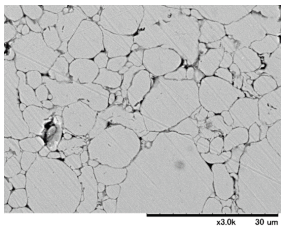


H. Igarashi, *IEEE Trans. Magn*, *IEEE Trans. Magnetics*, vol. 53, no. 1, Art. 7400107, 2017.

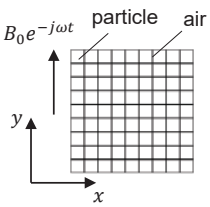
Soft Magnetic Composite (SMC)

Measured macroscopic permeability of SMC is larger than those computed from the Ollendorff formula and cell method assuming rectangular particles.

We consider the inhomogeneity in particle size and possible magnetic and electric contact.



Cross section of SMC*



FEM model of SMC

Macroscopic permeability (filling rate: 0.87)

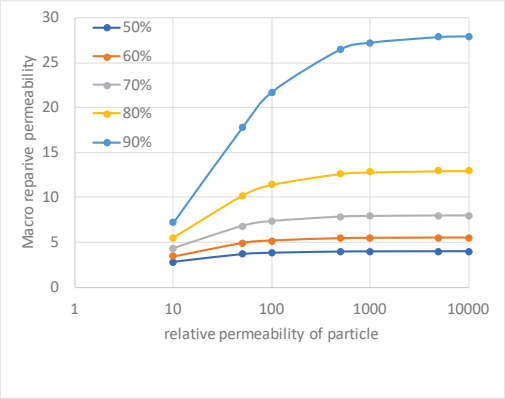
measured*	45
FEM (rectangular)	13.99
Ollendorff (N=1/2)	13.80

Ollendorff formula

$$\langle \mu_r \rangle = 1 + \frac{\eta(\mu_r - 1)}{1 + N(1-\eta)(\mu_r - 1)}$$

* Y.Ito, H.Igarashi, M.Suzuki, Y.Iwasaki, K.Kawano, "Effect of Magnetic Contact on Macroscopic Permeability of Soft Magnetic Composite", *IEEE Trans. Magn*, vol. 52, no. 3, pp. 1-4, March 2016.

Ollendorffの式の限界



Filling factor and macroscopic permeability

Brute Force: Discrete Element Method (DEM)

DEM analyzes particle motion considering collision and slipping:

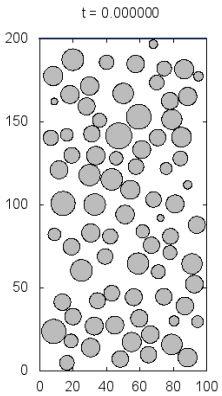
Equation of motion

$$m\ddot{\boldsymbol{u}} + \eta\dot{\boldsymbol{u}} + K\boldsymbol{u} + m\boldsymbol{g} = 0$$

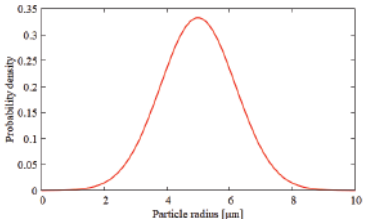
$$I\ddot{\boldsymbol{\phi}} + \eta r^2\dot{\boldsymbol{\phi}} + Kr^2\boldsymbol{\phi} = 0$$

m : mass
$\boldsymbol{u}$: displacement
η : viscosity const.
K : spring const.
$\boldsymbol{g}$: gravitational acceleration
I : moment of inertia
r : particle radius
$\boldsymbol{\phi}$: angular displacement

We analyze free-falling particles which have random initial position and obey the Gaussian distribution in size. A mass wall (blue) presses the particles.

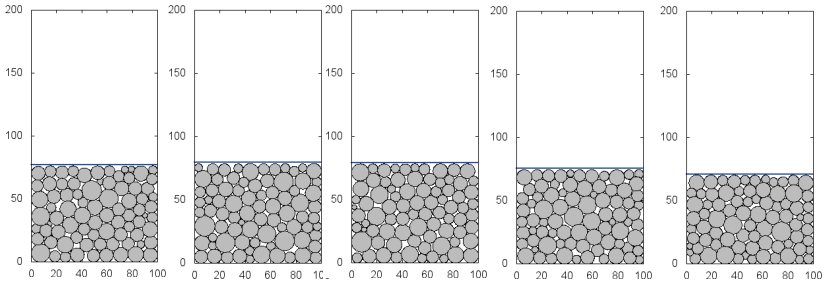


Particle motion



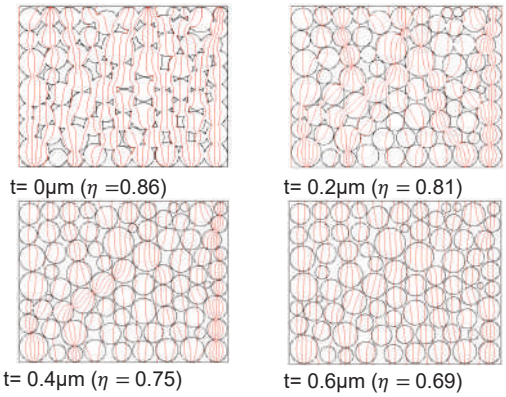
Gaussian distribution
(μ = 5μm, σ =1.2 μm)

A. Maruo, H. Igarashi, IEEE Transactions on Magnetics,
B. 2002205, vol. 55, no.6, 2019



1st 2nd 3rd 4th 5th

We performed five DEM simulations to consider dependence of the result on random number.



Conditions

Applied field	1 T
Particle μ_r	100

Equivalence in Energy

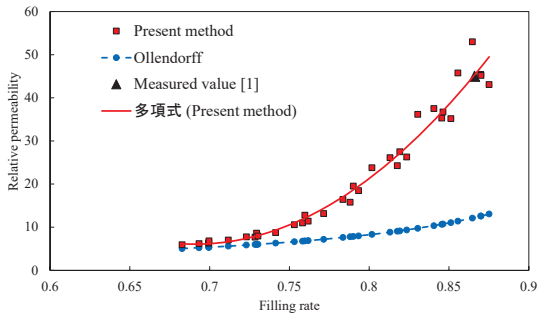
$$\int_\Omega \frac{B^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})} dS = \frac{B_0^2\,|\Omega|}{\langle\mu\rangle}$$

macroscopic permeability

$$\langle\mu\rangle = \frac{B_0^2\,|\Omega|}{\int_\Omega \frac{B^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})} dS}$$

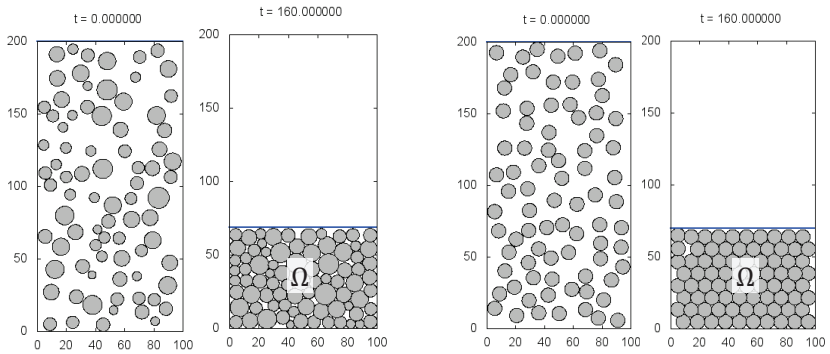
The filling rate η is controlled by changing thickness of insulation layer t.

Ollendorff vs DEM



Macroscopic permeability v.s. filling rate

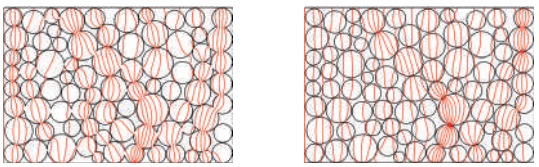
[1] Y.Ito, H.Igarashi, M.Suzuki, Y.Iwasaki, K.Kawano, "Effect of Magnetic Contact on Macroscopic Permeability of Soft Magnetic Composite", *IEEE Trans. Magn*, vol. 52, no. 3, pp. 1-4, March 2016.



Non-uniform SMC　　Uniform SMC

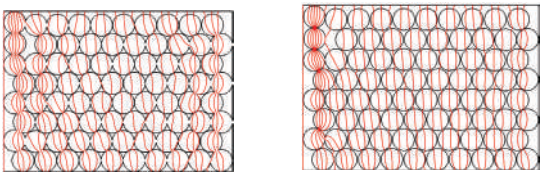
To study the effect of inhomogeneity, another SMC model composed of uniform particles is generated using DEM.

不均質性の効果



t =0.2 μm　　t = 0.4 μm

Non-uniform SMC

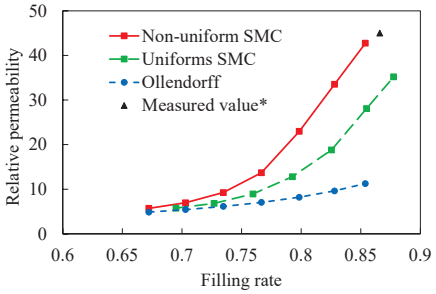


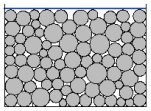
t = 0.2 μm　　t = 0.4 μm

Uniform SMC

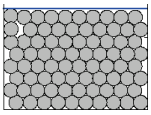
The magnetic fluxes of uniform SMC are rather uniform in comparison with those of non-uniform SMC.

不均質性によりマクロ透磁率は増加する





Non-uniform SMC

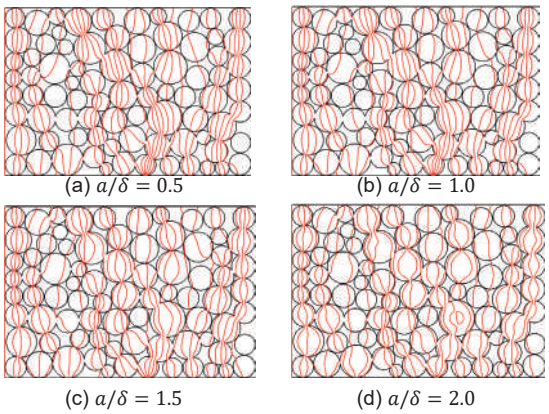


Uniform SMC

Dependence of macroscopic permeability of SMC on filling rate

* Y.Ito, H.Igarashi, M.Suzuki, Y.Iwasaki, K.Kawano, "Effect of Magnetic Contact on Macroscopic Permeability of Soft Magnetic Composite", *IEEE Trans. Magn*, vol. 52, no. 3, pp. 1-4, March 2016.

Eddy current effect



(a) $a/\delta = 0.5$ (b) $a/\delta = 1.0$

(c) $a/\delta = 1.5$ (d) $a/\delta = 2.0$

Equivalence in Power

$$\int_\Omega \left(j\omega \frac{|\boldsymbol{B}|^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})} + \sigma |\boldsymbol{E}|^2 \right) dS = j\omega \frac{B_0^2 \, |\Omega|}{\langle \dot{\mu} \rangle^*}$$

complex macroscopic permeability

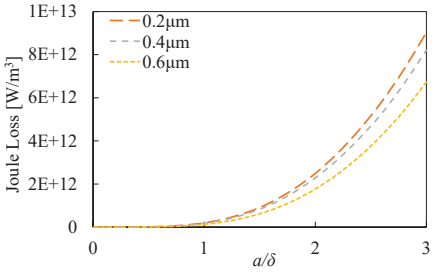
$$\langle \dot{\mu} \rangle = \frac{j\omega B_0^2 \, |\Omega|}{\int_\Omega \left(j\omega \frac{|\boldsymbol{B}|^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})} - \sigma |\boldsymbol{E}|^2 \right) dS}$$

The magnetic flux concentrates near the surface of the particle due to the skin effect.

The eddy current loss computed from

$$p_e = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(j\omega \boldsymbol{H}^* \cdot \boldsymbol{B}) = \mathrm{Re}\left(j\omega \frac{B^2}{2\langle\dot{\mu}\rangle^*}\right)$$

- The eddy current loss increases quadratically with respect to the normalized particle radius.



Joule loss

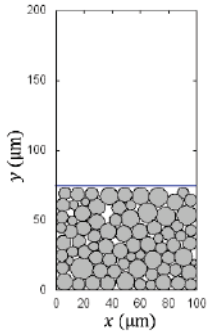
3次元DEM



Domain:
70μm × 70μm × 180μm

Parameters for DEM	
Time per step (s)	1×10^{-3}
Steps (-)	1.6×10^{5}
Average of radii (μm)	5.0
Standard deviation of radii (μm)	1.8
Number of particles (-)	200

H. Sato, A. Maruo, H. Igarashi, "Analysis of Nonlinear Magnetic Properties of Soft Magnetic Composite Using Discrete Element Method," ISEM2019, 98, Nanjing, China, Sep., 2019.



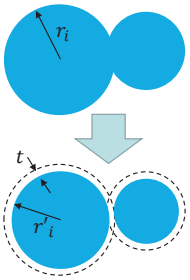
2-D model
(80 particles)



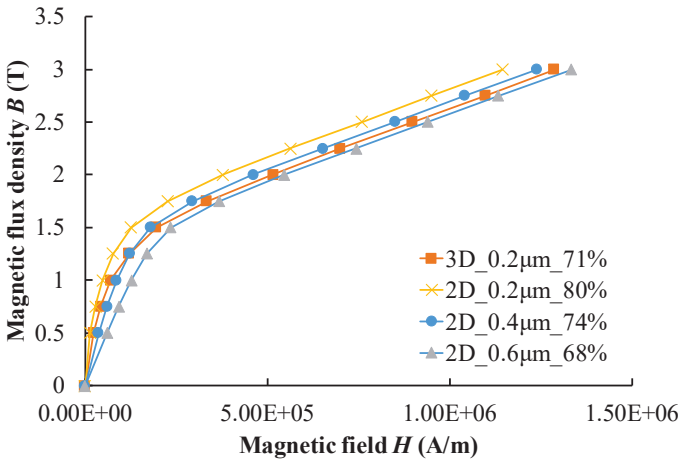
3-D model
(200 particles)

Treatment of insulating layer

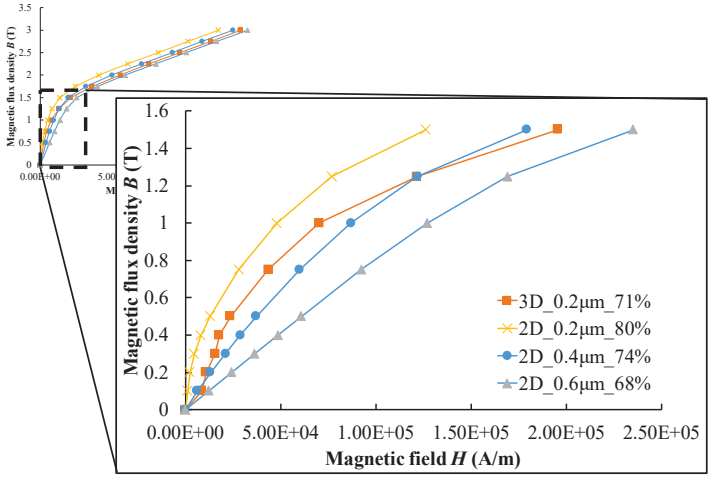
$r_i' = r_i - t$ t : thickness of insulating layer



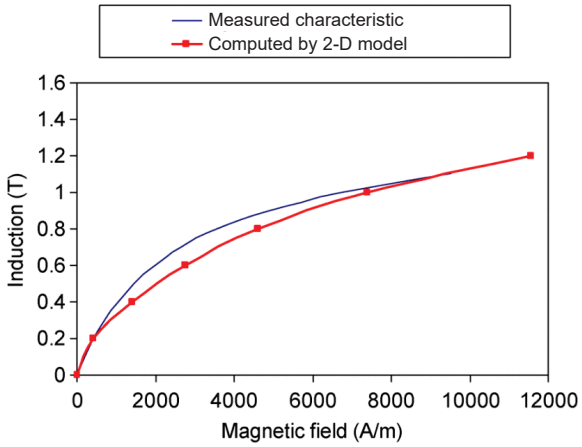
3次元モデル vs 2次元モデル



3次元モデル　vs 2次元モデル



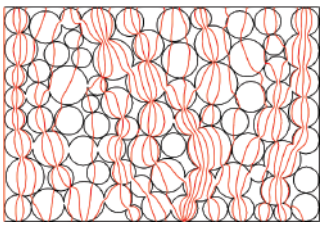
0.2T-1T: High Permeability in 3-D model

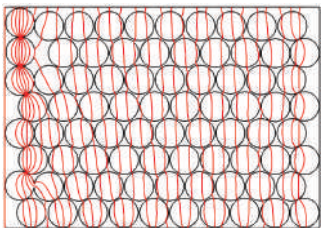


2-D by FEM vs. 3-D Measured*

*C. Cyr, P. Viarouge, S. Cienet and J. Cros, "Methodology to Study the Influence of the Microscopic Structure of Soft Magnetic Composites on Their Global Magnetization Curve," in *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 45, no. 3, pp. 1178-1181, 2009.

SMCモデルの回路モデル





・磁気抵抗は，粒子間の絶縁層(ギャップ)が支配的
・格子状の磁気抵抗を考え，磁気抵抗をランダムに微小変化させたときの効果を見る
・充填率を一定にして考えるため，ギャップの磁気抵抗の総和を一定にする

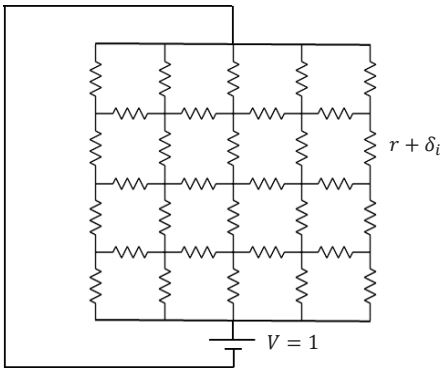
ランダム格子回路の抵抗

$n \times n$ nodes

$r_i = r + \delta_i$

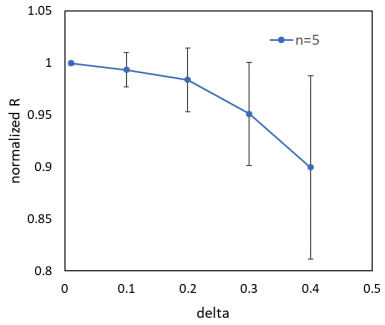
$\delta_i \sim \mathcal{N}(0, \delta^2)$

$\sum_{i=1}^{n} \delta_i = 0$

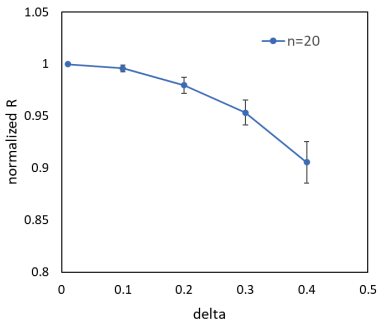


When resistance r is uniform,
the toral resistance R equals the parallel resistance: $R = \frac{n-1}{n} r \to r$ as $n \to \infty$

ランダム格子回路の全体抵抗の分散依存性



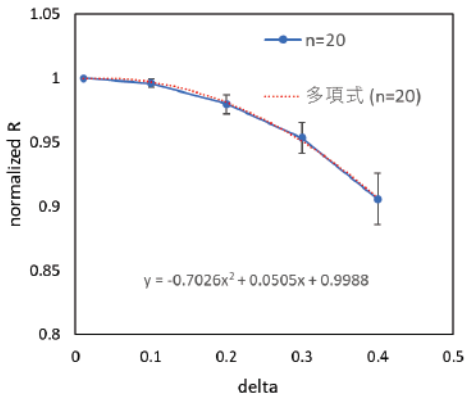
2D lattice circuit ($n = 5$)



2D lattice circuit ($n = 20$)

$R(\delta)$ is independent of the circuit size n.
The deviation in $R(\delta)$ decreases as n increases.

曲線近似



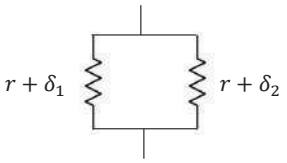
Resistance R reduces with δ^2.

ランダム並列回路の全体抵抗

When $\delta_1, \delta_2 \sim \mathcal{N}(0, \delta^2)$, $\delta \ll r$

$$R = \frac{1}{\frac{1}{r+\delta_1} + \frac{1}{r+\delta_2}} \approx \frac{1}{2}\left\{r + \frac{\delta_1 + \delta_2}{2}\right\}$$

$$E[R] \approx \frac{r}{2}$$



When $\delta_1 + \delta_2 = 0$ is imposed in such a way that

$$\delta_1 = \epsilon, \delta_2 = -\epsilon, \qquad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \delta^2), \qquad \delta \ll r$$

$$R = \frac{1}{\frac{1}{r+\delta_1} + \frac{1}{r+\delta_2}} \approx \frac{r^2 - \epsilon^2}{2r}$$

$$E[R] \approx \frac{r}{2} - \frac{1}{2r}E[\epsilon^2] = \frac{r}{2} - \frac{\delta^2}{2r}$$

Topology Optimization Problem 1

Find a permeability distribution $\mu(x)$ such that the macroscopic permeability in a two-dimensional domain Ω is maximized that is,

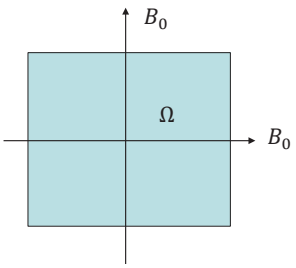
$$\langle \mu \rangle = \frac{B_0^2\,|\Omega|}{\int_\Omega \frac{B^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})} dS} \to \max.$$

subjected to

$$\frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega \rho(\boldsymbol{x}) dS \le \rho_0$$

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \mu\rho(\boldsymbol{x})^p + \mu_0\{1 - \rho(\boldsymbol{x})\}^p$$

$$p \ge 2$$



Topology Optimization Problem 2

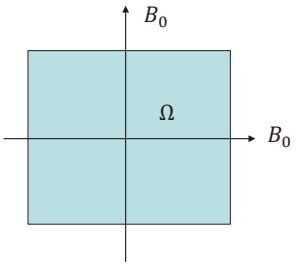
Find a permeability distribution $\mu(x)$ such that the macroscopic permeability in a two-dimensional domain Ω is maximized and loss is eddy current loss is minimized that is,

$$\langle\mu\rangle = \frac{B_0^2\,|\Omega|}{\int_\Omega \frac{B^2(\boldsymbol{x})}{\mu(\boldsymbol{x})}dS} \to \max. \qquad \text{at } \omega = 0$$

$$p_e = \mathrm{Re}\left(j\omega \frac{B^2}{2\langle\dot{\mu}\rangle^*}\right) \to \min. \qquad \text{at } \omega = \omega_{ac} \neq 0$$

subjected to $\quad \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega \rho(\boldsymbol{x})dS \leq \rho_0$

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \mu\rho(\boldsymbol{x})^p + \mu_0\{1-\rho(\boldsymbol{x})\}^p$$
$$\sigma(\boldsymbol{x}) = \sigma\rho(\boldsymbol{x})^p + \sigma_0\{1-\rho(\boldsymbol{x})\}^p$$
$$p \geq 2$$



検討事項

(1) 3次元回路と2次元回路で，$R(\delta)$は異なるか？
(3次元回路の方が電流経路が多いので，δに対する減少率が大きいだろう)

(2) $R(\delta)$を理論で導出できるか？(n が大きいときの振る舞い)

(3) 無限自由度系(連続系：電流場，静電界，静磁界)の解析
抵抗率，誘電率，透磁率の揺らぎにより，抵抗，マクロ誘電率・透磁率は増加するか．→SMCの場合は増加．

(4) マクロ透磁率が最大となる構造は？
トポロジー最適化により，そのような構造を求める．

(5) マクロ透磁率最大・渦電流最小の構造は？(無限に小さな構造？)

まとめ

多重巻き線・リッツ線の均質化解析:

近接効果を考慮した拡張されたOllendorffの式により，マクロ複素透磁率を求めることができ，実測とも合う結果が得られる.

圧粉磁芯の均質化解析(SMC)

非周期的（不均質）な粒子により，マクロ透磁率を増加できる
DEMによりモデル化することができる. またその結果より，マクロ複素透磁率を得ることができる.

トポロジー最適化

ミクロな構造を最適化するために，トポロジー最適化が使えるのではないか？
また解析的なアプローチにより解を求めることができるか？

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

Shingo HIRUMA

Kyoto University, Japan

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 Cauer 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.

均質化における連分数表示の活用

京都大学　電気工学専攻
比留間真悟

KYOTO UNIVERSITY

京都大学



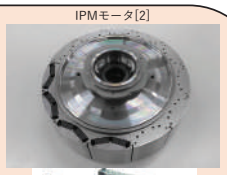
目次

❑はじめに
❑電磁界解析における連分数
❑均質化法への応用
❑誤差推定とHypercircle法
❑まとめ

[1] https://www.bourns.com/ja/news/press-releases/pr/2014/12/09/bourns-announces-new-power-inductor-series-offering-excellent-dc-dc-conversion-performance-for-automotive-applications
[2] https://www.honda.co.jp/news/2016/4160712.html
[3] https://ec.aperza.com/ja/d/i/N3YSB-300E/55b7d91a674b4e10f3fb715c229cb5764efe624c.html

はじめに

IPMモータ[2]





パワーインダクタ[1]



変圧器[3]

- 有限要素法(FEM)による設計が盛ん
- 基本的な設計はすべて計算機上で可能

電磁機器

高品質な電磁機器開発への要求
基本設計段階における損失の簡易計算＆形状決定
詳細設計段階における大規模詳細モデル解析

簡易計算→精度悪
大規模詳細モデル→計算コスト大

スイッチングの高速化＆損失の増大
数kHz~数MHzにおける表皮厚さを考慮した解析
マルチスケールな材料のモデリング

表皮深さ考慮→計算コスト大
マルチスケール材料モデリング→理論段階

連分数を活用した数値電磁界解析

[1] Jusepe de Ribera - Euclid - 2001.26 - J. Paul Getty Museum
[2] Portrait of Gauss by Christian Albrecht Jensen (1840)

はじめに—数の表現としての連分数



Euclid [1]

Euclid (3rd century BC)
ユークリッドの互除法

$a = bq + r$ より，$\frac{a}{b} = q + \frac{1}{\frac{b}{r}}$



Gauss [2]



Minkowski

Gauss (1777-1855), H. Minkowski (1864-1909)

格子点による近似，ディオファントス近似

$$\left|\omega - \frac{P_n}{Q_n}\right| < \frac{1}{Q_n^2}, \qquad \omega \in \mathbb{R} \text{ or } \mathbb{Q}, \qquad P_n, Q_n \in \mathbb{N}$$

$$\sqrt{2} = 1 + \cfrac{1}{2 + \cfrac{1}{2 + \cfrac{1}{2 + \ddots}}}$$



Euler

ペル方程式

$$x^2 - Dy^2 = \pm 1, \qquad D, x, y \in \mathbb{Z}^+$$

代数的整数論　2次体の単数群

はじめに―関数としての連分数



Gauss (1777-1855)

3個の確定特異点をもつ2階線形常微分方程式の解

$$x(1-x)y'' + [\gamma - (\alpha+\beta+1)x]y' - \alpha\beta = 0$$

$x = 0$まわりのべき級数解をガウス超幾何関数と呼ぶ

$$a_n = \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{n!\,(\gamma)_n}, \qquad (\alpha)_n = \alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+n-1) = \frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)},$$

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = {}_2F_1\ (\alpha, \beta; \gamma; x)$$

京都大学

はじめに―関数としての連分数

ベッセル関数の連分数展開

$$\frac{J_{\nu+1}(x)}{J_\nu(x)} = \frac{x}{2\nu+2} \cdot \frac{{}_0F_1\left(;\nu+2;-\frac{x^2}{4}\right)}{{}_0F_1\left(;\nu+1;-\frac{x^2}{4}\right)}$$

$$= \cfrac{x}{2\nu+2-\cfrac{x^2}{2\nu+4-\cfrac{x^2}{2\nu+6+\ddots}}}$$

一つに収束が早い、収束半径が広い、級数が発散しても連分数は収束する場合があるなどの特徴
→関数の計算に使える

京都大学

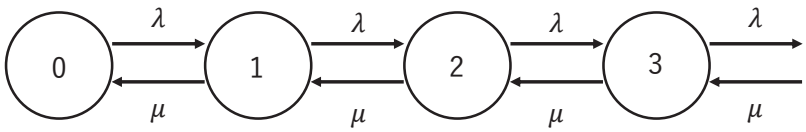
はじめに―物理・工学における連分数

エルゴード理論，Perron-Frobenius作用素，Markov連鎖

ガウス求積，パデ近似，共役勾配法，商差法，可積分系の数値計算アルゴリズム

例）パデ近似は制御工学・数値解析に使われる→今日の内容

例）出生死滅過程（確率過程の一つ）



目次

❑はじめに
❑電磁界解析における連分数
❑均質化法への応用
❑誤差推定とHypercircle法
❑まとめ

電磁界解析における連分数

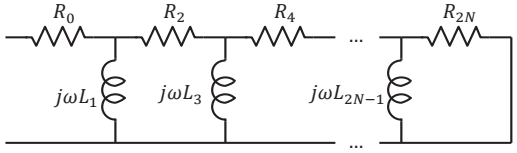


W. Cauer (1900-1945)
ネットワーク合成の創始者
フィルタ設計法の開発（所望の特性を持つLCネットワーク）
はしご型回路が最小実現になることを発見

$$Z = R_0 + \cfrac{1}{\cfrac{1}{j\omega L_1} + \cfrac{1}{\cfrac{1}{R_2} + \cfrac{1}{\cfrac{1}{j\omega L_3} + \cfrac{1}{\ddots}}}}$$

回路表現

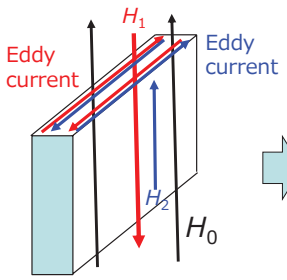
連分数表現



京都大学

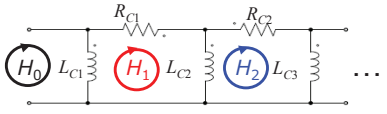
電磁界解析における連分数

電気機器の縮約モデルにはCauer回路が有用であると考えられる



* Y. Shindo, O. Noro, “Simple Circuit Simulation Models for Eddy Current in Magnetic Sheets and Wires,” *IEEJ Trans. Fundamentals and Materials*, vol. 134, no. 4, pp. 173-181, 2014.

- Cauer II型回路



磁気飽和特性やヒステリシス特性表現が可能である**.

**T. Miyazaki, T. Mifune, T. Matsuo, Y. Shindo, Y. Takahashi and K. Fujiwara, “Equivalent Circuit Modeling of Dynamic Hysteretic Property of Silicon Steel under Pulse Width Modulation Excitation,” Journal of Applied Physics, 117, 17D110, 2015.

京都大学

電磁界解析における連分数

関数の連分数展開=パデ近似

関数を近似する「最良」の有理関数

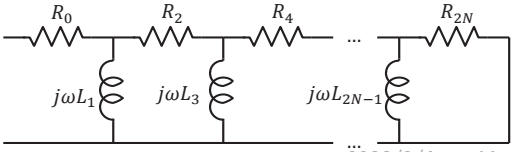
$$F(s) \approx \frac{Q_{n-1}(s)}{P_n(s)} = a_0 + a_1 s + \cdots + a_{2n-1}s^{2n-1} + (s^{2n})$$

先頭の$2n$項が関数のテイラー展開に一致

解析的に求められないような関数もパデ近似を使えば精度が良い

$$\langle \dot{\mu} \rangle = \cfrac{1}{\cfrac{1}{sL_0} + \cfrac{1}{R_1 + \cfrac{1}{\cfrac{1}{sL_1} + \cfrac{1}{R_2 + \cfrac{1}{\ddots}}}}}$$

回路表現



連分数表現

京都大学

解析的に求められる例

- 1次元薄板問題

$$\frac{\mathrm{d}H_y}{\mathrm{d}x} = \sigma E_z$$
$$-\frac{\mathrm{d}E_Z}{\mathrm{d}x} = -j\omega\mu H_y$$
$$H_y(d) = 1$$
$$E_z(0) = 0$$

- 解析解$\left(k = \sqrt{-j\omega\sigma\mu}\right)$

$$H_y(x) = \frac{\cos(kx)}{\cos(kd)},$$
$$E_z(x) = -\frac{k}{\sigma}\frac{\sin(kx)}{\cos(kd)}$$

京都大学

解析的に求められる問題

- インピーダンス＝（出力される磁束）/（入力電流）

$$\dot{\mu} = \frac{2\int_0^d \mu H(x)dx}{2dH_0} = \frac{\mu}{kd}\tan(kd) = \mu \cdot \frac{\tan(kd)}{kd}$$

- ガウスの超幾何級数の公式から連分数展開ができる（1768）

$$\dot{\mu} = \frac{\mu\ {}_0F_1\left(\frac{3}{2};\frac{(jkd)^2}{4}\right)}{{}_0F_1\left(\frac{1}{2};\frac{(jkd)^2}{4}\right)} = \frac{\mu}{1-\dfrac{(kd)^2}{3-\dfrac{(kd)^2}{5-\dfrac{(kd)^2}{7-\ddots}}}} = \cfrac{1}{\dfrac{1}{j\omega L_c}+\cfrac{1}{3R_c+\cfrac{1}{\dfrac{5}{j\omega L_c}+\cfrac{1}{7R_c+\ddots}}}}$$

京都大学

もう一つの導出

- 場を直交関数展開することによっても解が表現できる

$$H_y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\omega) P_{2i-2}\left(\frac{x}{d}\right)$$

$$E_z(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty} V_i(\omega) P_{2i-1}\left(\frac{x}{d}\right)$$

方程式に代入して
直交性を利用すれば係数が求められる

- $P_i(x)$はルジャンドル多項式

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$

京都大学

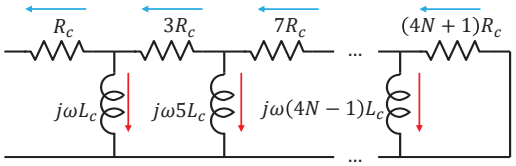
もう一つの導出

- 場を直交関数展開したものと、インピーダンスが関係している

$$H_y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} I_{2i-2}(\omega) P_{2i-2}\left(\frac{x}{d}\right)$$

$$E_z(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\infty} V_{2i-1}(\omega) P_{2i-1}\left(\frac{x}{d}\right)$$

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$



$$\dot{\mu} = \mu \cdot \frac{\tan(kd)}{kd} = \cfrac{1}{\cfrac{1}{j\omega L_c} + \cfrac{1}{3R_c + \cfrac{1}{\cfrac{5}{j\omega L_c} + \cfrac{1}{7R_c + \ddots}}}}$$

京都大学

一般化

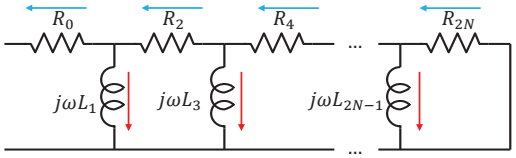
- 準定常な電磁場（放物型）の場合はどうだろうか？

$$\boldsymbol{H}(\omega, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} I_{2i-1}(\omega) \boldsymbol{H}_{2i-1}(\boldsymbol{x})$$

$$\boldsymbol{E}(\omega, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} V_{2i-2}(\omega) \boldsymbol{E}_{2i-2}(\boldsymbol{x})$$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{H}_{2m+1} \cdot \boldsymbol{B}_{2n+1} d\Omega = L_{2n+1}\delta_{mn},$$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{E}_{2m} \cdot \boldsymbol{J}_{2n} d\Omega = \frac{1}{R_{2n}}\delta_{mn}$$



$$Z = \cfrac{1}{\cfrac{1}{j\omega L_1} + \cfrac{1}{R_2 + \cfrac{1}{\cfrac{1}{j\omega L_3} + \cfrac{1}{R_4 + \ddots}}}}$$

京都大学

CLN法

1. Solve $\nabla \times \boldsymbol{E}_0 = 0$ with 1V of power supply.
2. Compute R_0
3. for $n = 1$ to q do:
   4. Solve $\nabla \times \widetilde{\boldsymbol{H}} = R_{2n-2}\sigma \boldsymbol{E}_{2n-2}$
   5. Set $\boldsymbol{H}_{2n-1} = \boldsymbol{H}_{2n-3} + \widetilde{\boldsymbol{H}}$
   6. Compute L_{2n-1}

   磁場の計算

   7. Solve $\nabla \times \widetilde{\boldsymbol{E}}_n = -L_{2n-1}^{-1}\mu \boldsymbol{H}_n$
   8. Set $\boldsymbol{E}_n = \boldsymbol{E}_{n-1} + \widetilde{\boldsymbol{E}}$
   9. Compute R_{2n}

   電場の計算

京都大学

一般化

- 線形システム

$$(K + sD)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}u$$
$$y = \boldsymbol{c}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{x}$$

- 伝達関数

$$H(s) = \boldsymbol{c}^{\mathsf{T}}(K + sD)^{-1}\boldsymbol{b}$$

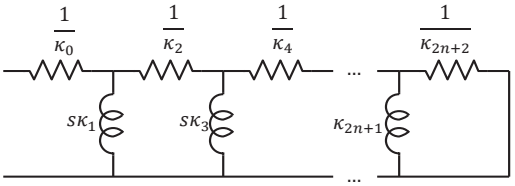
- パデ近似＝PVL法

$$H(s) = \boldsymbol{c}^{\mathsf{T}}(K + sD)^{-1}\boldsymbol{b} \approx \frac{Q_{n-1}(s)}{P_n(s)} + O(s^{2n+1})$$

京都大学

線形システムへの適用

1. Set $\boldsymbol{u}_0 = K^{-1}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{u}_{-1} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{0}$
2. Compute $\kappa_0 = (\boldsymbol{u}_0, \boldsymbol{u}_0)_K$
3. for $n = 1$ to q do :
   4. Set $\boldsymbol{v}_n = \boldsymbol{v}_{n-1} - \kappa_{2n-2}^{-1}\boldsymbol{u}_{n-1}$
   5. Compute $\kappa_{2n-1} = (\boldsymbol{v}_n, \boldsymbol{v}_n)_N$
   6. Set $\boldsymbol{u}_n = \boldsymbol{u}_{n-1} - \kappa_{2n-1}^{-1}(K^{-1}N)\boldsymbol{v}_n$
   7. Compute $\kappa_{2n} = (\boldsymbol{u}_n, \boldsymbol{u}_n)_K$



$$H(s) = \boldsymbol{b}^{\mathsf{T}}(K + sD)^{-1}\boldsymbol{b} = \cfrac{1}{\cfrac{1}{\kappa_0} + \cfrac{1}{s\kappa_1 + \cfrac{1}{\cfrac{1}{\kappa_2} + \cfrac{1}{s\kappa_3 + \ddots}}}}$$

京都大学

微分方程式と連分数

常微分方程式

薄板問題
ルジャンドル多項式
$\frac{\tan z}{z}$の連分数展開，パデ近似

一般化

1次元
特殊ケース

偏微分方程式

Maxwell方程式+CLN法
直交関数系
インピーダンスのパデ近似

空間離散化
一般化

線形代数

線形システム
伝達関数のパデ近似，PVL
$H(s) = \frac{Q_{n-1}(s)}{P_n(s)} + O(s^{2n})$

Krylov部分空間法
等価

線形システム
伝達関数の連分数展開
$H(s) = \boldsymbol{c}^{\mathsf{T}}(K + sN)^{-1}\boldsymbol{b}$
Krylov部分空間の基底ベクトル

京都大学

目次

❑はじめに

❑電磁界解析における連分数

❑均質化法への応用

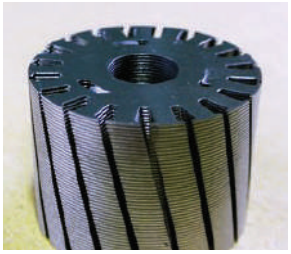
❑誤差推定とHypercircle法

❑まとめ

[1] https://www.it-core.co.jp/products/pressing.html
[2] https://www.ginga-motor.co.jp/en/product/distribution-winding

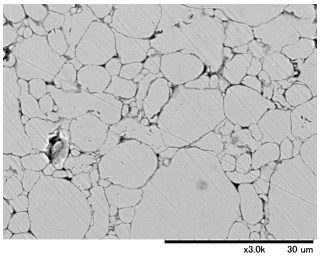
均質化法への適用

電磁鋼板[1]



厚さ0.5 mm

圧粉磁心



粒形
50 μ m

細線[2]

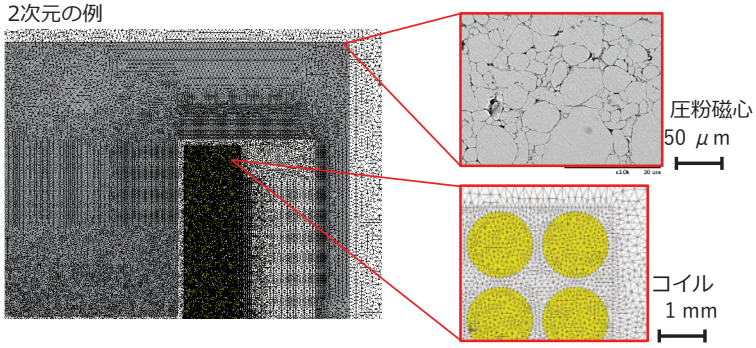


半径0.3mm

電磁機器のスケールが10cm~1mであるのに対して材料のスケールが非常に小さい
→渦電流抑制〇
→微細な有限要素が必要，計算コスト増大×

均質化法への適用

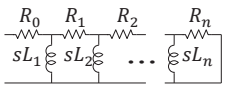
2次元の例



表皮厚さ$\delta = \sqrt{\frac{\sigma\mu\omega}{2}}$を考慮するために導電領域は微細な有限要素が必要

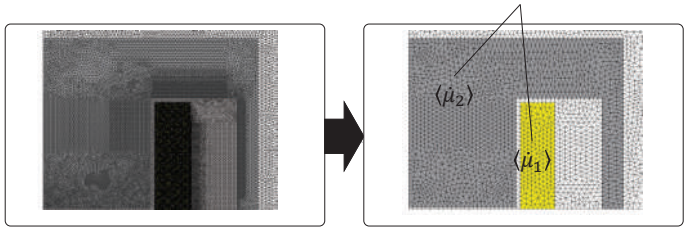
3次元でメッシュ生成を行うことはさらに困難を伴う

等価回路を作るのにも有限要素方程式を解く必要があるため計算コストが大きい



均質化法への適用

複素透磁率により材料をモデル化
→等価な巨視的な特性

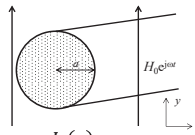


$N \gg N_{hom}$

均質化法の課題
- 一般的な複素透磁率をどのようにのもとめるか
- 複素透磁率をどのように利用するか
- 複素透磁率を利用した系に対してどのように縮約モデルを計算するか
- 非線形性をどのように考慮するか

均質化法への適用

円筒の複素透磁率



$$\dot{\mu}_r = \frac{J_1(z)}{zJ_1'(z)} \quad z = a\sqrt{-\mathrm{j}\omega\mu\sigma}$$

解析的に求まる場合については複素透磁率$\dot{\mu}_r$が得られる．

板，円柱，球

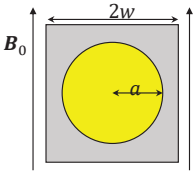


基本構造が充填率ηで充填されていることを仮定
均質化領域は複合材料となる

拡張されたOllendorffの公式

$$\langle\dot{\mu}\rangle = 1 + \frac{\eta(\dot{\mu}_r - 1)}{1 + N(1-\eta)(\dot{\mu}_r - 1)}$$

ユニットセル



ユニットセルの有限要素方程式

$$(K + sN)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}i$$

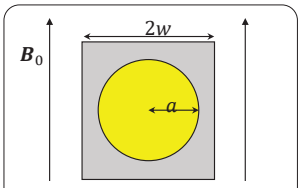
評価式

$$\langle\dot{\mu}\rangle = \frac{\int_{\Omega_u}|\boldsymbol{B}_0|^2 \mathrm{d}\Omega}{\int_{\Omega_u}|\boldsymbol{B}|^2/\mu\, d\Omega - \frac{1}{j\omega}\int_{\Omega_u}\sigma|\boldsymbol{E}|^2 d\Omega}$$

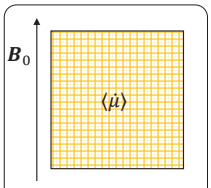
- 任意形状を取り扱える
- 各周波数点での計算必要あり
- 有理関数同定のためにはvector fittingなどの手法が必要

京都大学

均質化法への適用



$$\frac{j\omega}{2}\int_\Omega \frac{|\boldsymbol{B}|^2}{\mu}\mathrm{d}\,\Omega + \frac{1}{2}\int_\Omega \sigma|\boldsymbol{E}|^2\mathrm{d}\,\Omega = \frac{j\omega}{2}\int_\Omega \frac{|\boldsymbol{B}_0|^2}{\langle\dot{\mu}\rangle^*}\mathrm{d}\Omega$$



複素透磁率(エネルギー形式)

$$\langle\dot{\mu}\rangle = \frac{\int_\Omega|\boldsymbol{B}_0|^2\mathrm{d}\Omega}{\int_\Omega\frac{|\boldsymbol{B}|^2}{\mu}\mathrm{d}\,\Omega - \frac{1}{j\omega}\int_\Omega\sigma|\boldsymbol{E}|^2\mathrm{d}\,\Omega}$$

有限要素法で一様磁場B_0を入力することで評価が可能

テーブル化するためには多点評価が必要

エネルギー保存の法則

$$j\omega\int_\Omega\frac{|\boldsymbol{B}|^2}{\mu}\mathrm{d}\,\Omega + \int_\Omega\sigma|\boldsymbol{E}|^2\mathrm{d}\,\Omega = -\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}^*\mathrm{d}\,\Omega = j\omega B_0^*\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^* = j\omega\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\mathrm{K}+s^*\mathrm{N})^{-1}\boldsymbol{b}|\boldsymbol{B}_0|^2$$

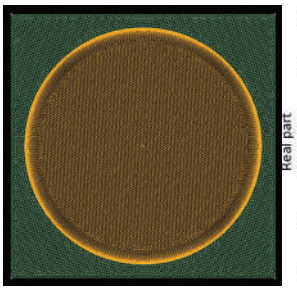
有限要素離散化

$$\langle\dot{\mu}\rangle = \frac{\int_\Omega \mathrm{d}\Omega}{\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(K+sN)^{-1}\boldsymbol{b}} = \cfrac{1}{\frac{1}{\kappa_1} + \cfrac{1}{\frac{1}{s\kappa_2} + \cfrac{1}{\frac{1}{\kappa_3} + \frac{1}{\ddots}}}}$$

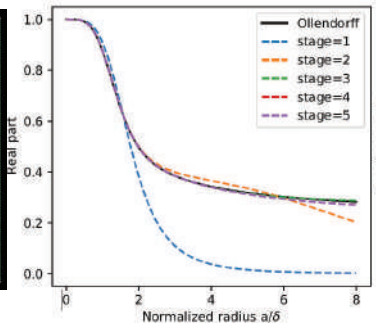
- CVLによって連分数関数にすることが可能
- 1段のCauer回路には2回の有限要素解析が必要
- 反磁界係数などの外部パラメータが必要ない

京都大学

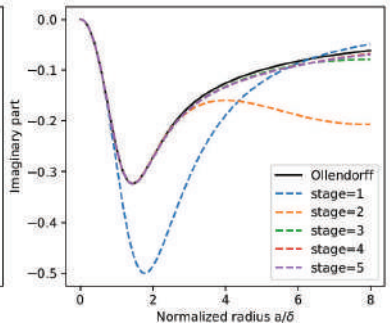
均質化法への適用



メッシュ図



$\mathrm{Re}[\langle\dot{\mu}_r\rangle]$



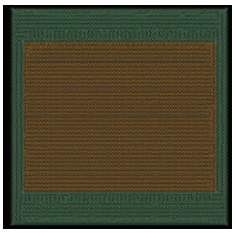
$\mathrm{Im}[\langle\dot{\mu}_r\rangle]$

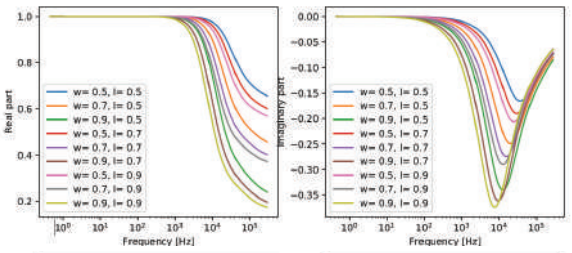
- Stage=3でOllendorffの式と遜色ない複素透磁率が得られている
- Stage=3では6回の有限要素解析でS連分数関数が得られる

京都大学

均質化法への適用

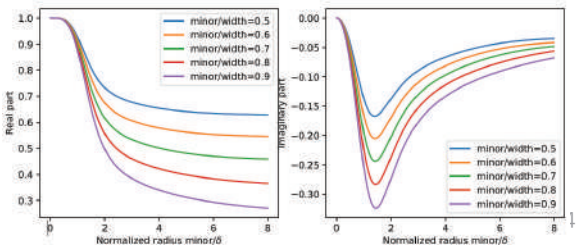
矩形断面





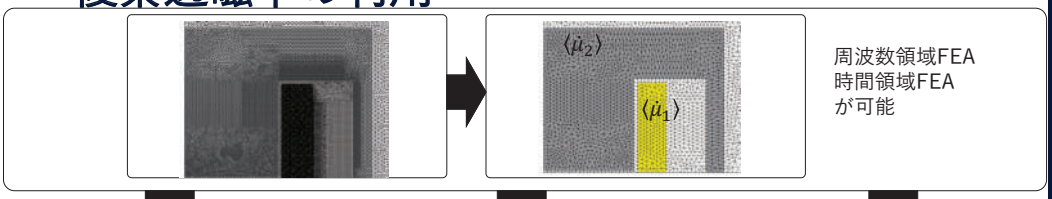
楕円断面





京都大学

複素透磁率の利用

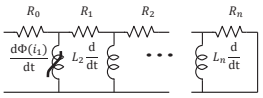


周波数領域FEA
時間領域FEA
が可能

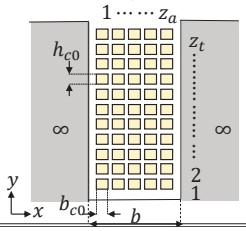
磁性体非線形性の考慮

Ex)電磁鋼板，圧粉磁心

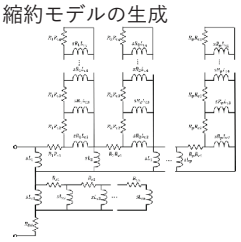
先行研究で報告有



Dowellの式などの簡易損失
計算への応用，高精度化



複素透磁率を適用した系の
縮約モデルの生成



京都大学

目次

- ❑はじめに
- ❑電磁界解析における連分数
- ❑均質化法への応用
- ❑誤差推定とHypercircle法
- ❑まとめ

Hypercircle法

- 有限要素法の誤差推定に使われるよく知られた理論

偏微分方程式の解空間を2つの空間に分けた時，解はその空間の積に存在する。
このとき積はhypercircle（超円）になっている

- ラプラス方程式（2階の偏微分方程式）

$$\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} = -f, \qquad \boldsymbol{\sigma} = \nabla u$$

Hypercircle法

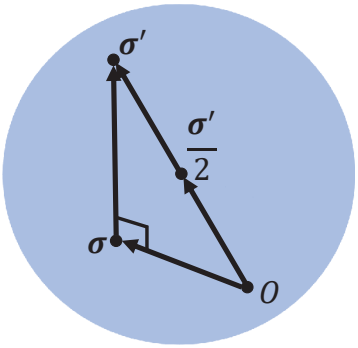
平衡条件(equilibrate condition)：

$$\forall \boldsymbol{\sigma}', \qquad \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma}' = -f$$

- $\boldsymbol{\sigma}'$に対して次の式が成り立つ

$$(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}') = 0$$

- これは球の式になる．厳密解は超球面のどこかに存在する



Hypercircle法

任意の勾配(Gradient condition)：

$$\boldsymbol{\sigma}'' = \nabla v$$

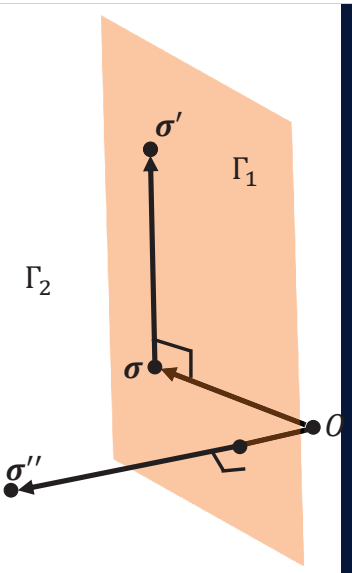
- $\boldsymbol{\sigma}''$に対して次の式が成り立つ

$$(\boldsymbol{\sigma}'', \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}') = 0$$

- Hyperplane（超平面）

$$\boldsymbol{\sigma}'' \perp \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'$$

- $\boldsymbol{\sigma}'' = \nabla v$を法線ベクトルとする超平面上に$\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'$は存在する



Hypercircle法

- Hypercircle Γ_1

  超平面と超球の共通部分

$$(\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}'', \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}') = 0$$

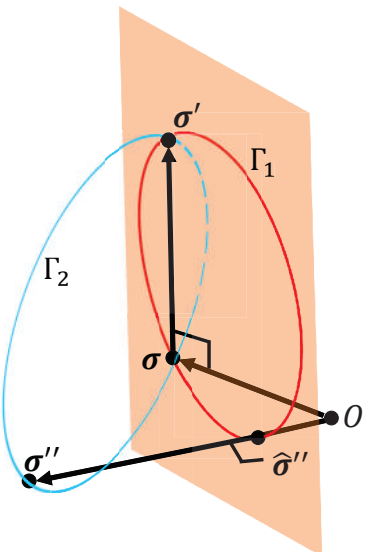
- Hypercircle Γ_2

  Prager-Syngeの定理

$$(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'', \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}') = 0$$

$$\leftrightarrow |\boldsymbol{\sigma}'' - \boldsymbol{\sigma}'|^2 = |\boldsymbol{\sigma}'' - \boldsymbol{\sigma}|^2 + |\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'|^2$$

三平方の定理の類似



Hypercircle法

- 3つの場の組を用いた誤差推定

$$\nabla \times \boldsymbol{E}' = -j\omega\mu\boldsymbol{H}'$$
$$\nabla \times \boldsymbol{H}'' = \sigma\boldsymbol{E}'$$

Hypercircle法

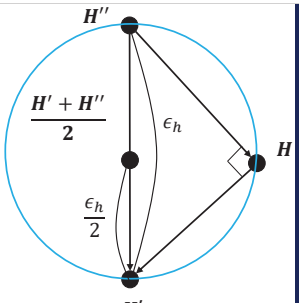
- 3つの場の組を用いた誤差推定

$$\nabla \times \boldsymbol{E}' = -j\omega\mu\boldsymbol{H}'$$
$$\nabla \times \boldsymbol{H}'' = \sigma\boldsymbol{E}'$$

- 誤差推定式（ Prager-Syngeの定理，三平方の定理）

$$\|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H} + \boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}\|_\mu^2 + \|\boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2$$

Hypercircle法



- 3つの場の組を用いた誤差推定

$$\nabla \times \boldsymbol{E}' = -j\omega\mu \boldsymbol{H}'$$
$$\nabla \times \boldsymbol{H}'' = \sigma \boldsymbol{E}'$$

- 誤差推定式（ Prager-Syngeの定理，三平方の定理）

$$\|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H} + \boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}\|_\mu^2 + \|\boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2$$

- ϵ_hを直径とする円を描ける

$$\epsilon_h^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}\|_\mu^2 + \|\boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2$$

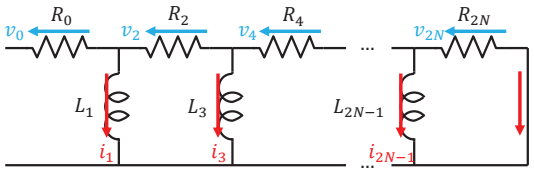
- 三角不等式が成立（図からも明らか）

$$\left| \|\boldsymbol{H}\|_\mu - \left\| \frac{\boldsymbol{H}' + \boldsymbol{H}''}{2} \right\|_\mu \right| \leq \left\| \boldsymbol{H} - \frac{\boldsymbol{H}' + \boldsymbol{H}''}{2} \right\|_\mu = \frac{\epsilon_h}{2}$$

京都大学

Hypercircle法

CLN法により三つの組を見つけられる



$$\boldsymbol{H}'^N = \sum_{n=0}^{N-1} i_{2n+1} \boldsymbol{H}_{2n+1}$$

$$\boldsymbol{H}''^N = \boldsymbol{H}'^N + i_{2N+1} \boldsymbol{H}_{2N+1}$$

最後段の電流からの寄与

$$\nabla \times \boldsymbol{E}'^N = -j\omega\mu \boldsymbol{H}'^N$$

$$\boldsymbol{E}'^N = \sum_{n=0}^{N} v_{2n} \boldsymbol{E}_{2n}$$

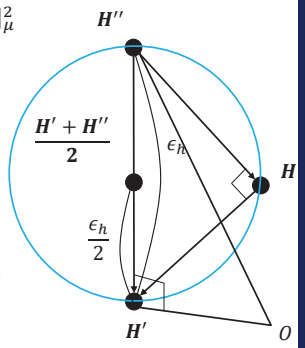
$$\nabla \times \boldsymbol{H}''^N = \sigma \boldsymbol{E}'^N$$

京都大学

Hypercircle法

- 誤差推定式　　最後の段にインダクタがあると仮定して計算した蓄積エネルギーに相当

$$\epsilon_h^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2 = \|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}\|_\mu^2 + \|\boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}'\|_\mu^2$$
$$= \|i_{2N+1}\boldsymbol{H}_{2n+1}\|_\mu^2$$
$$= L_{2n+1}|i_{2N+1}|^2$$



- 幾何学的解釈と三角不等式

$$\left| \|\boldsymbol{H}\|_\mu - \left\| \frac{\boldsymbol{H}' + \boldsymbol{H}''}{2} \right\|_\mu \right| \le \left\| \boldsymbol{H} - \frac{\boldsymbol{H}' + \boldsymbol{H}''}{2} \right\|_\mu$$
$$= \frac{L_{2n+1}|i_{2N+1}|^2}{2}$$

京都大学

連分数の近似式との関係

$$\left| \|\boldsymbol{H}\|_\mu - \frac{\|\boldsymbol{H}' + \boldsymbol{H}''\|_\mu}{2} \right| \le \frac{\|\boldsymbol{H}'' - \boldsymbol{H}'\|_\mu}{2} = \frac{L_{2n+1}|i_{2N+1}|^2}{2}$$

- 誤差評価に関する定理[CBVWB08, p140]
  $K(a_m/1)$はすべてのmに対して$a_m > 0$であるような連分数の収束子であるとする．このとき連続する二つの連分数について次の式が成り立つ

$$\left| f - \frac{f_{n-1} + f_n}{2} \right| \le \frac{|f_n - f_{n-1}|}{2}, \qquad n \ge 2$$

京都大学

1次元銅箔問題

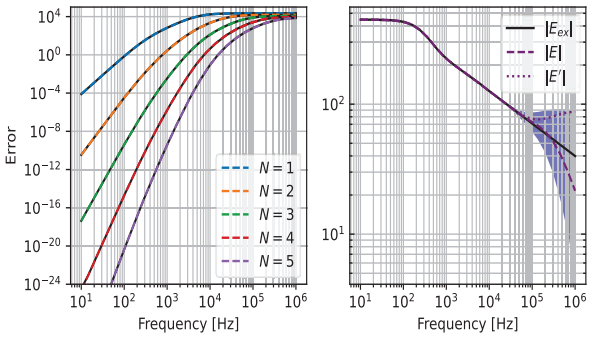
$$E_z(x) = \frac{\cos(kx)}{\cos(kd)}$$

$$H_y(x) = \frac{k}{\mathrm{j}\omega\mu}\frac{\sin(kx)}{\cos(kd)}$$

$$E_n = P_{2n}\left(\frac{x}{d}\right), \qquad \frac{1}{R_n} = \frac{2\sigma d}{(4n+1)}$$

$$H_n = \frac{1}{2}P_{2n-1}\left(\frac{x}{d}\right), \qquad L_n = \frac{\mu d}{2(4n-1)},$$

Prager-Syngeの定理の確認



N=5のときの真の解
との近似解の特性

京都大学

まとめ

今回の発表の概要

1. 連分数の電磁界解析への応用としてCLN法を紹介した
2. 電磁界解析のみならず一般の線形システムにも適用可能で，正則な連分数を直接的に計算可能な手法が導けることを述べた
3. 偏微分方程式の誤差解析の一つであるhypercircle法から導かれる誤差推定式と連分数の性質として知られる誤差推定式が似た表現を持っていることをみた

⇒一般的な数の連分数や関数としての連分数は広く知られているが，視野を広げると意外なところに連分数がいて，様々な手法の基礎となっている．連分数は数学・工学の基本的な道具として重要である．

京都大学

Controllable surfaces challenging from robotics

Noriyasu IWAMOTO
Shinshu University, Japan

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 [1]: a robotic S-isothermic surface [2], a boundary-controlled robotic surface that mechanically solves Plateau's problem, and a piecewise constant mean curvature surface model. We also introduce the Willmore flow described by mean curvature half-density [3], which is expected to be utilized as a feedback control theory for the robotic surface.

References

[1] Actuated Differentiable Manifold Laboratory, Shinshu University Web Page: `http://www.fiber.shinshu-u.ac.jp/iwamoto/index.html`

[2] Noriyasu Iwamoto, Daiki Kusakabe, Takuya Umedachi, Planar Conformal Deformation of Robotic S-Isothermic Surface, IEEE Robotics and Automation Letters, 7(4)(2022) 1153111536

[3] K. Crane, U. Pinkall, and P. Schöder, Robust Fairing via Conformal Curvature Flow ACM Transactions on Graphics, 32(4)(2013)

SHINSHU UNIVERSITY

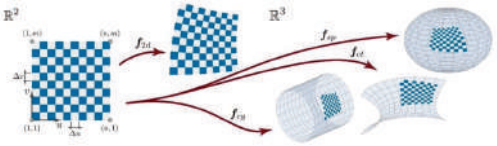
材料科学における幾何と代数III
2022.9.10

ロボティクスから挑戦する制御できる曲面

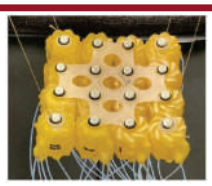
ACTUATED DIFFERENTIABLE MANIFOLD LABORATORY

信州大学　繊維学部
作動可微分多様体研究室

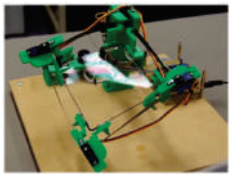
岩本　憲泰



等温曲面の運動学



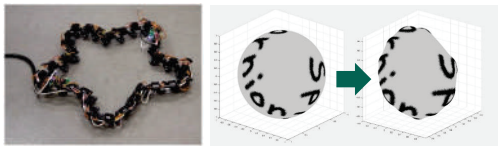
Robotic
S-isothermic Surface



Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット



区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル



Willmore流フィードバック制御

ロボット工学の基礎

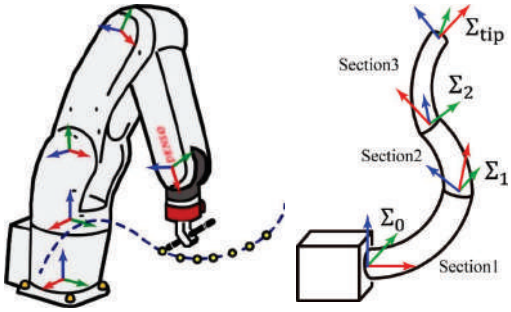
◇ 座標系の設定

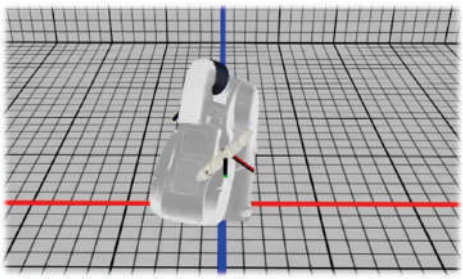
◇ 順運動学

各関節角度 → 手先位置姿勢

◇ 逆運動学

手先位置姿勢 → 各関節角度





☆剛体のロボットの場合

駆動変数 ↔ 形

☆柔らかい曲線状のロボットの場合

駆動変数↔形：

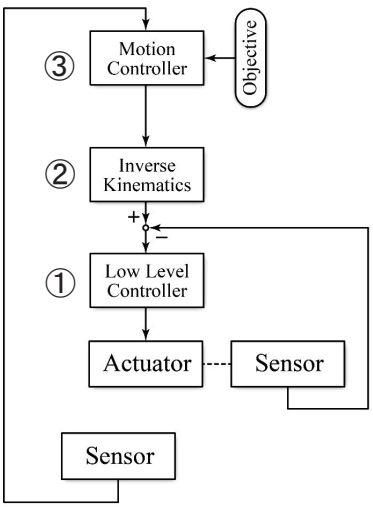
統一的に議論するのは難しい

駆動変数↔曲線の変数↔形：

後半はどのロボットでも同じ

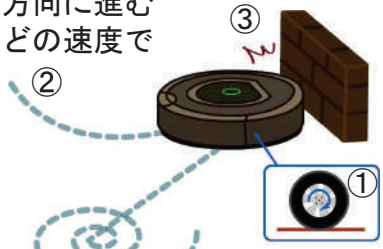
3

制御の基本

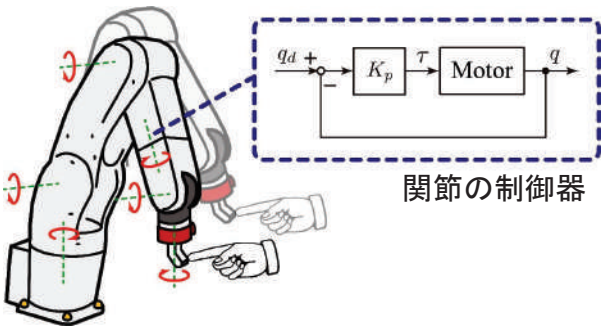


与えられた方向に進むには両輪をどの速度で動かすか ②

どう振舞うか ③



タイヤの回転速度を目標速度に制御

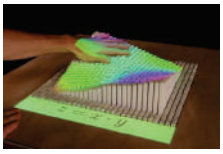


関節の制御器

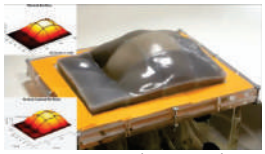
比例制御　制御量 = 係数 × (目標値 − 現在の値)

4

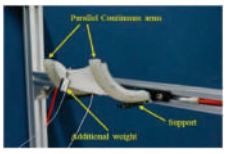
曲面を表現可能なロボット・デバイス・アクチュエータ



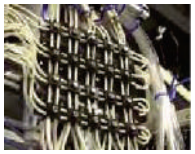
S. Follmer et al., IEEE 2015



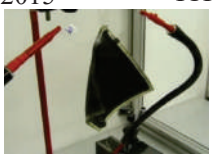
A. A. Stanley et al., ICRA, 2016



H. Habibi et al., IROS, 2018



Y. Funabora, SII, 2017



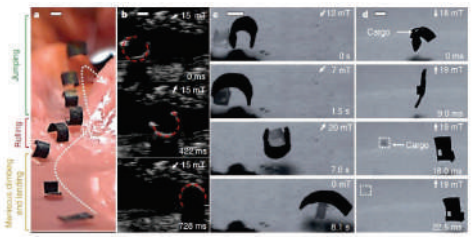
https://www.youtube.com/watch?v=uhRwqCT09KM



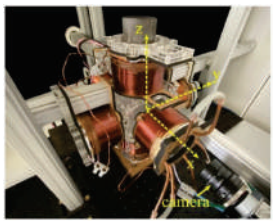
D.-Y. Lee et al., Soft Robotics, 2017



E. Steltz et al., IROS, 2009



W. Hu et al., Nature, 2018



U. Culha et al., Robotics: Science and Systems, 2020

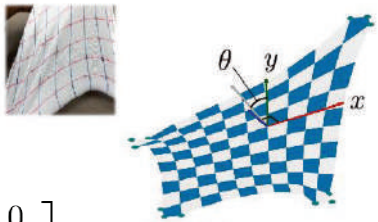
5

問題意識

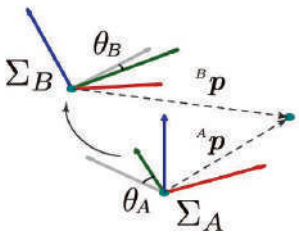
- 曲面の微分幾何が難しい
- 剛体ロボットの運動学がそのまま使えない



Undeformed Shape



Deformed Shape



$$\boldsymbol{\Lambda}(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta & 0 \\ 0 & \sin\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

斜交座標系→直交座標系　$\boldsymbol{p}_o = \boldsymbol{\Lambda}(\theta)\boldsymbol{p}_s$

斜交座標系間の座標変換　${}^B\boldsymbol{p} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1}(\theta_B)\{{}^B\boldsymbol{R}_A\boldsymbol{\Lambda}(\theta_A){}^A\boldsymbol{p} + {}^B\boldsymbol{p}_A\}$

できる限りせん断変形しない曲面形状ロボットの具現化

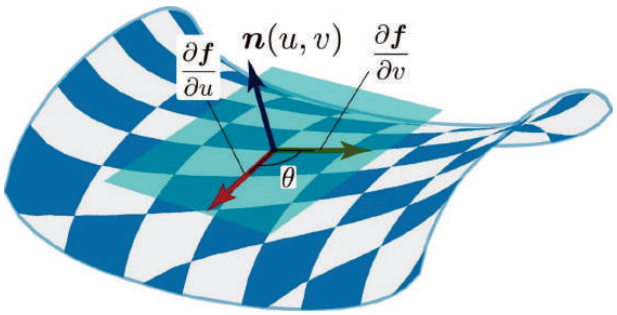
(現実にそんな物体があるの？)

6

曲面の幾何学量

$$\boldsymbol{f}_x = \partial \boldsymbol{f}/\partial x$$
$$\boldsymbol{f}_{xy} = \partial \boldsymbol{f}/\partial x \partial y$$

$$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3 : (u, v) \mapsto (x, y, z)$$



曲面の幾何学量

$$\boldsymbol{f}_x = \partial \boldsymbol{f}/\partial x$$
$$\boldsymbol{f}_{xy} = \partial \boldsymbol{f}/\partial x \partial y$$

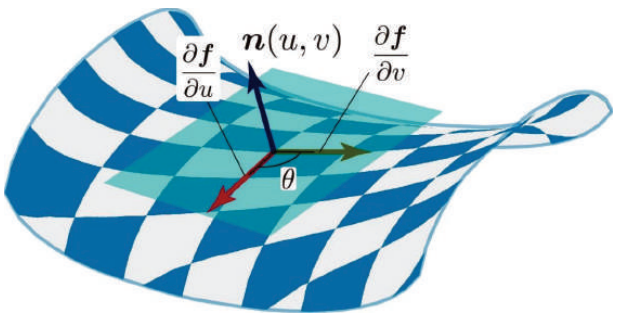
$$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3 : (u, v) \mapsto (x, y, z)$$

第1基本量

$$E = \|\boldsymbol{f}_u\|^2, \qquad F = \boldsymbol{f}_u \cdot \boldsymbol{f}_v, \qquad G = \|\boldsymbol{f}_v\|^2$$

第2基本量

$$L = \boldsymbol{f}_{uu} \cdot \boldsymbol{n}, \quad M = \boldsymbol{f}_{uv} \cdot \boldsymbol{n}, \quad N = \boldsymbol{f}_{vv} \cdot \boldsymbol{n}$$



各点で6つのパラメータ

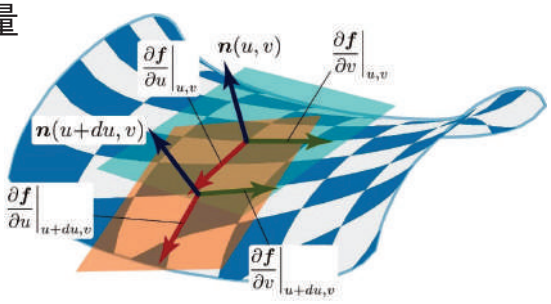
曲面の動標構

Gaussの公式：接ベクトルの変化量

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{f}}{\partial u^2} = \Gamma^1_{11}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial u} + \Gamma^2_{11}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial v} + L\boldsymbol{n}$$

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{f}}{\partial u \partial v} = \Gamma^1_{12}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial u} + \Gamma^2_{12}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial v} + M\boldsymbol{n}$$

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{f}}{\partial v^2} = \Gamma^1_{22}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial u} + \Gamma^2_{22}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial v} + N\boldsymbol{n}$$



Weingartenの公式：法線ベクトルの変化量

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial u} = \frac{FM-GL}{EG-F^2}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial u} + \frac{FL-EM}{EG-F^2}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial v}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial v} = \frac{FN-GM}{EG-F^2}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial u} + \frac{FM-EN}{EG-F^2}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial v}$$

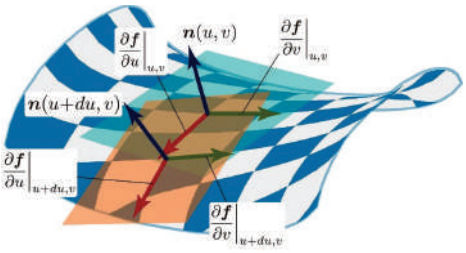
5 Equations

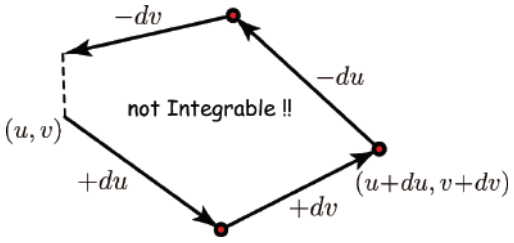


Christoffel記号

$$\begin{bmatrix} \Gamma^1_{11} & \Gamma^1_{12} & \Gamma^1_{22} \\ \Gamma^2_{11} & \Gamma^2_{12} & \Gamma^2_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E & F \\ F & G \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\frac{\partial E}{\partial u} & \frac{1}{2}\frac{\partial E}{\partial v} & \frac{\partial F}{\partial v} - \frac{1}{2}\frac{\partial G}{\partial u} \\ \frac{\partial F}{\partial u} - \frac{1}{2}\frac{\partial E}{\partial v} & \frac{1}{2}\frac{\partial G}{\partial u} & \frac{1}{2}\frac{\partial G}{\partial v} \end{bmatrix}$$

可積分条件





曲面が局所的に
可積分となる条件は

9 Equations

Gauss方程式

$$\frac{\partial \Gamma^i_{jk}}{\partial u_l} - \frac{\partial \Gamma^i_{jl}}{\partial u_k} + \sum_{p=1}^{2}\left(\Gamma^p_{jk}\Gamma^i_{pl} - \Gamma^p_{jl}\Gamma^i_{pk}\right) = \sum_{p=1}^{2}\left(h_{jk}h_{lp} - h_{jl}h_{kp}\right)g^{pi}$$



Codazzi-Mainardi方程式

$$\frac{\partial h_{ij}}{\partial u_k} - \frac{\partial h_{ik}}{\partial u_j} + \sum_{p=1}^{2}\left(\Gamma^p_{ij}h_{pk} - \Gamma^p_{ik}h_{pj}\right) = 0$$

を満たすこと

Isothermic Parameter

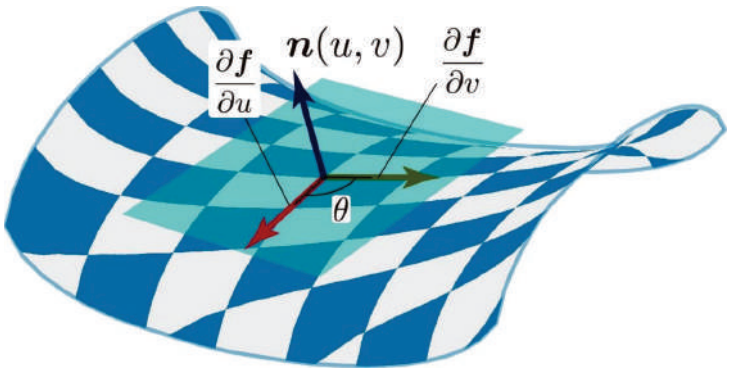
Isothermal Parameter

$$E = G, F = 0$$

+

Curvature Line Parameter

$$M = 0$$



11

Isothermic Parameter

Isothermal Parameter

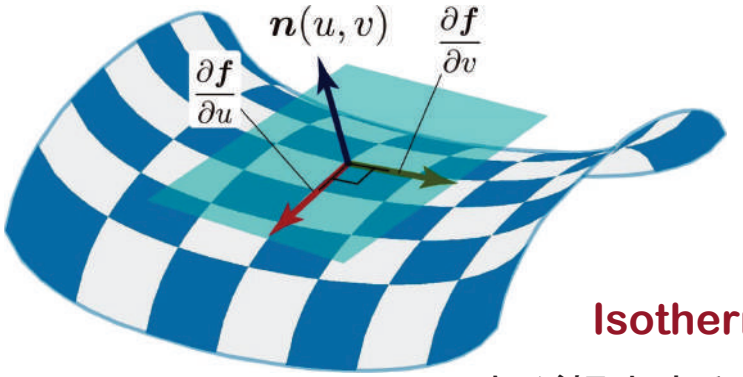
$$E = G, F = 0$$

+

Curvature Line Parameter

$$M = 0$$

各点で3つのパラメータ　&　方程式も簡略化できる



Isothermic Surface

これが提案する座標系設定法

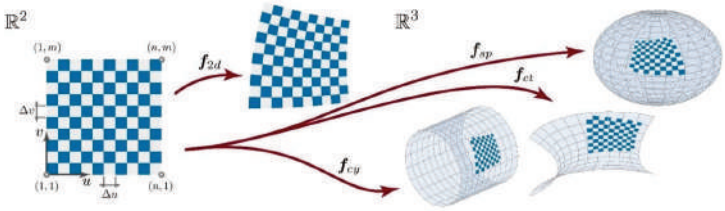
12

ロボットの構造に依存しない順運動学

入力

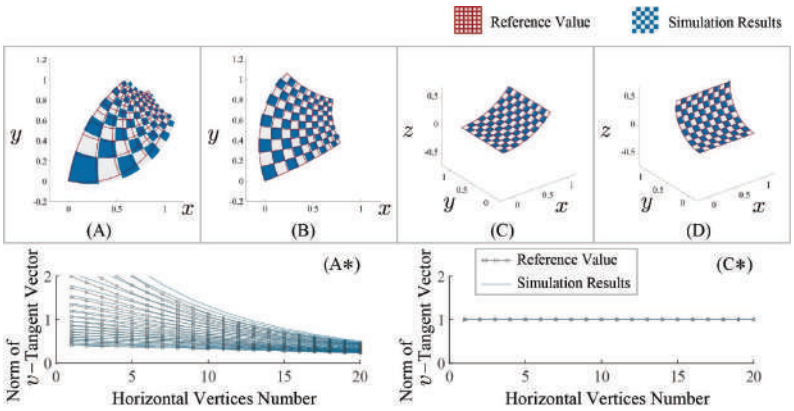
λ : conformal factor

κ_1, κ_2 : 主曲率

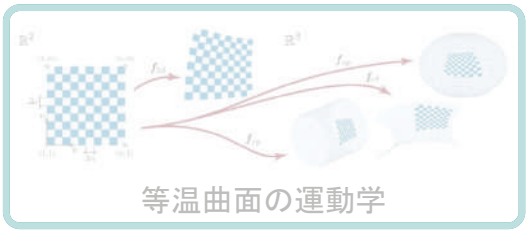


Gaussの公式，Weingartenの公式を数値積分

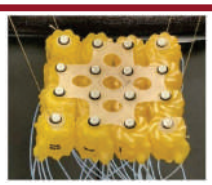
結果



13



等温曲面の運動学



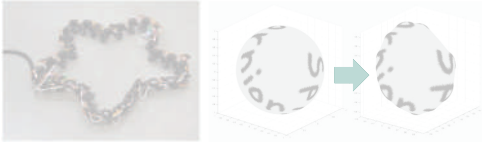
Robotic
S-isothermic Surface



Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット



区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル



Willmore流フィードバック制御

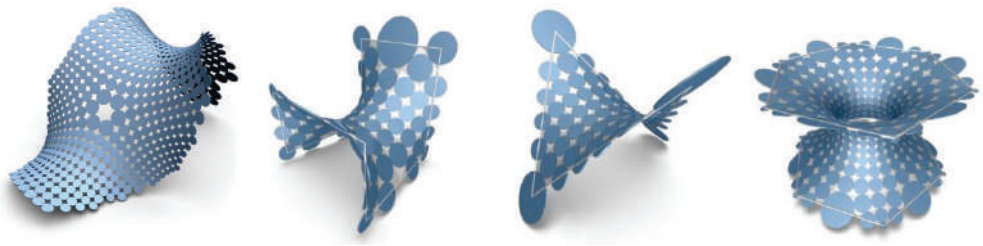
問い

等温曲面をロボットで実現できるか？

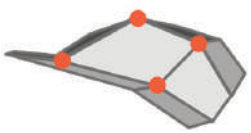
15

S-Isothermic Surface

S. Sechelmann et al. , “Quasiisothermic Mesh Layout”,
Advances in Architectural Geometry, 2012



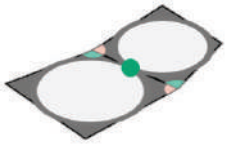
Isothermic Surfaceの「正しい」離散化方法の一つ



四角形の4つの
頂点が同一平面上

四角形が
内接円を持つ

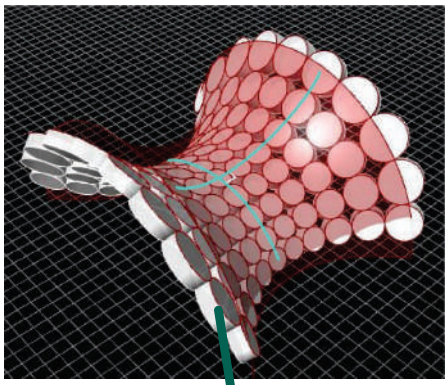


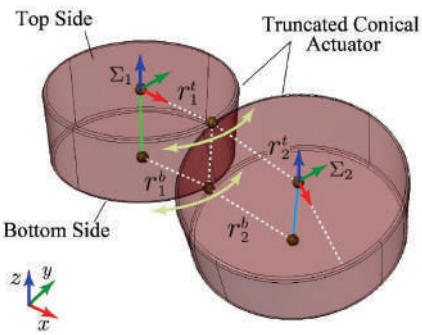


隣接する四角形の
内接円接点が
共通の辺上で一致

16

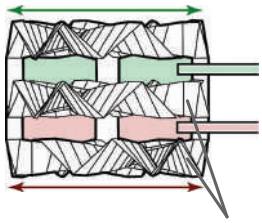
Robotic S-Isothermic Surfaceのコンセプト







Example



Folded Structure

能動的に制御:

表面と裏面の半径

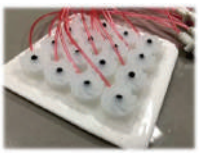
受動的に変化:

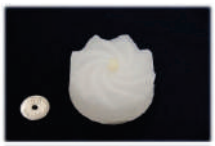
隣接アクチュエータの接触点

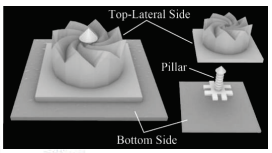
17

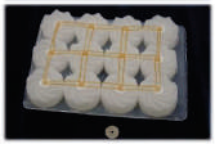
具現化までの道のり(途中)

Robomech2020,
ICRA2021他







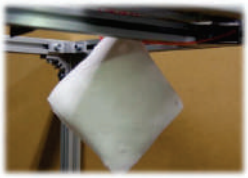




2018 2019

Jiang君

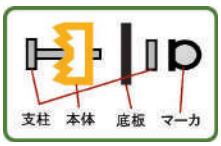
ICARCV2018





新井君

2020 2021







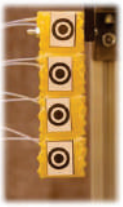


SI2020 田所君









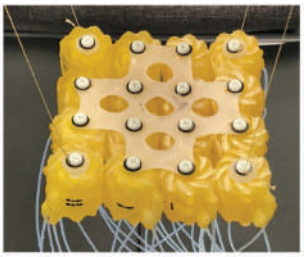


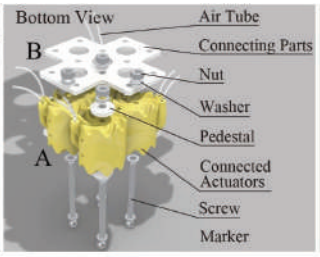
日下部君

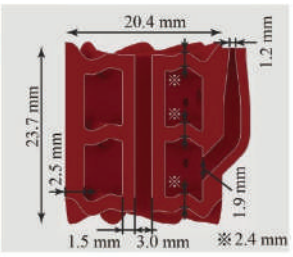
SI2021で発表

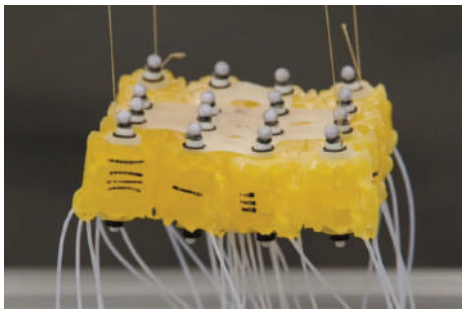
18

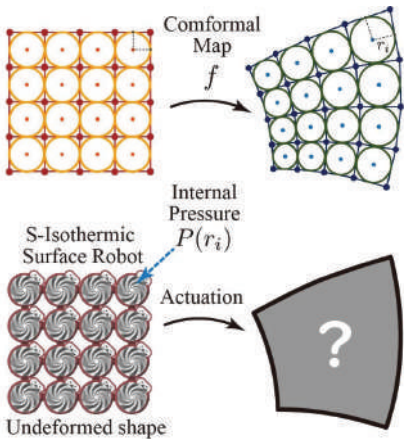
Robotic S-Isothermic Surface（両面駆動版）











19

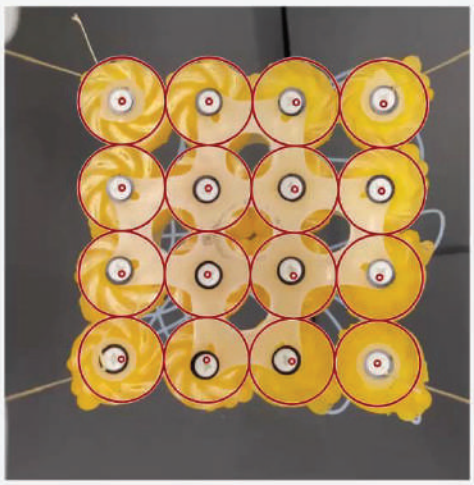
Robotic S-Isothermic Surfaceの平面内等角変形

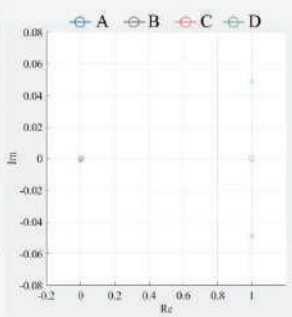
等角変形として一次分数変換を選択

Linear Fractional Transformation

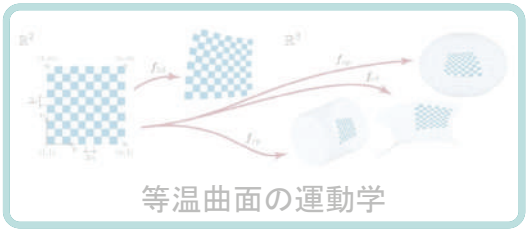
$$w = \frac{Az + B}{Cz + D}$$

$A = 1.0100 - 0.0484\mathbf{i}$
$B = 0.0009 - 0.0018\mathbf{i}$
$C = -0.0014 - 0.0001\mathbf{i}$
$D = 0.9878 + 0.0473\mathbf{i}$





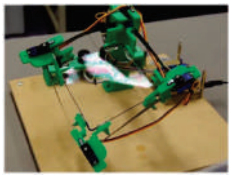
20



等温曲面の運動学



Robotic
S-isothermic Surface



Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット

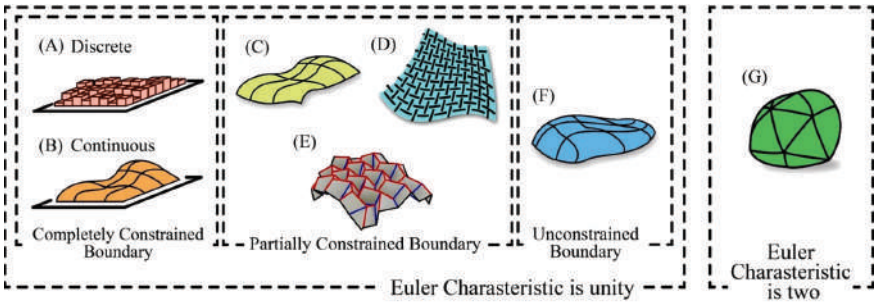


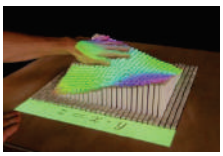
区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル



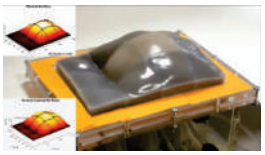
Willmore流フィードバック制御

曲面を表現可能なロボット・デバイス・アクチュエータ

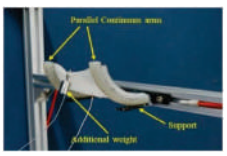




S. Follmer et al.,
IEEE 2015



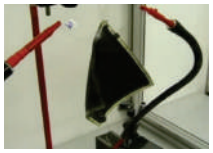
A. A. Stanley et al.,
ICRA, 2016



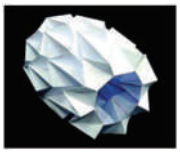
H. Habibi et al.,
IROS, 2018



Y. Funabora,
SII, 2017



https://www.youtube.com/
watch?v=uhRwqCT09KM



D.-Y. Lee et al.,
Soft Robotics, 2017



E. Steltz et al.,
IROS, 2009

22

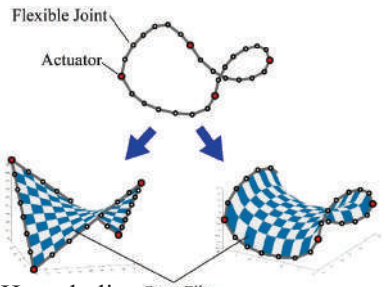
問い

曲面形状ロボットの理論を考える時
ロボットの境界形状は矩形のみ？

境界の角の数が可変だったら？

23

境界を制御し境界の角の数が制御可能なロボット



Hyperbolic Paraboloid　　Scherk曲面

☆境界内部は受動要素で構成
☆境界にアクチュエータを配置
☆境界を制御することで境界内部を制御
（H. Habibi et al.のロボットもこれに該当）

境界内部にシャボン液の液膜を利用

液膜のモデル（極小曲面）

$$\boldsymbol{f}_u = \partial \boldsymbol{f}/\partial u \qquad \boldsymbol{f}_{uv} = \partial^2 \boldsymbol{f}/\partial u \partial v$$

平均曲率 $$H = \frac{1}{2}\frac{GL - 2MF + EN}{EG - F^2} = \frac{(1+\boldsymbol{f}_v^2)\boldsymbol{f}_{uu} + (1+\boldsymbol{f}_u^2)\boldsymbol{f}_{vv} - 2\boldsymbol{f}_u\boldsymbol{f}_v\boldsymbol{f}_{uv}}{2(1+\boldsymbol{f}_u^2+\boldsymbol{f}_v^2)^{3/2}}$$

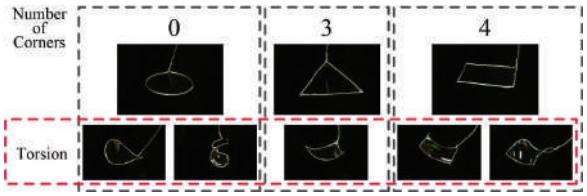
極小曲面はいたるところで平均曲率がゼロ

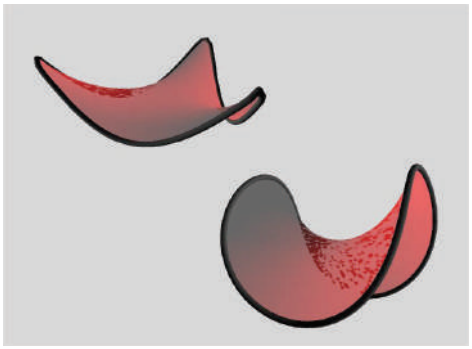
$$(1+\boldsymbol{f}_v^2)\boldsymbol{f}_{uu} - 2\boldsymbol{f}_u\boldsymbol{f}_v\boldsymbol{f}_{uv} + (1+\boldsymbol{f}_u^2)\boldsymbol{f}_{vv} = 0$$

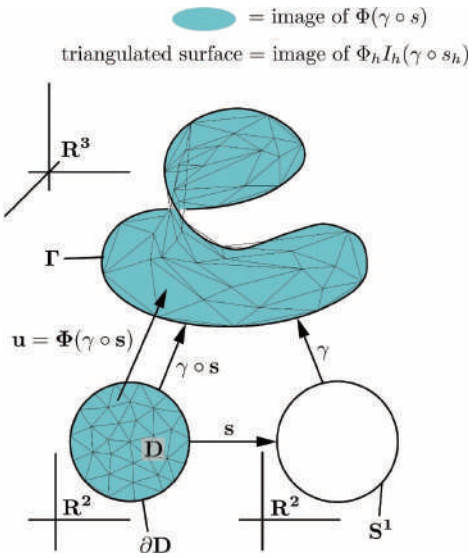
24

Plateau問題

境界が与えられたときに境界に張る面積最小となる曲面を求める問題



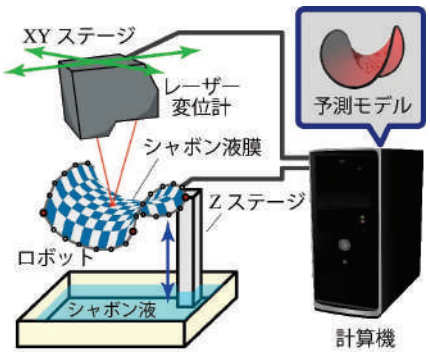


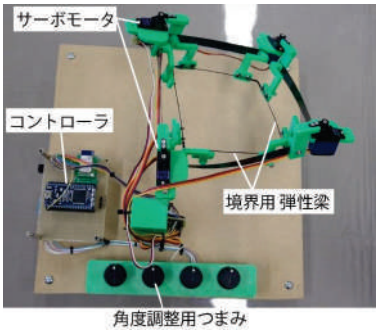


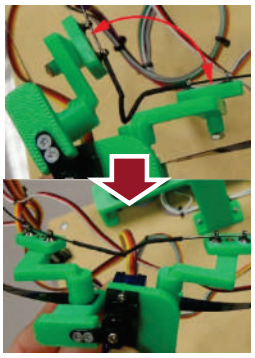
G. Dziuk and J. E. Hutchinson, ``The Discrete Plateau Problem: Algorithm and Numerics'', Mathmatics of Computation,1999.

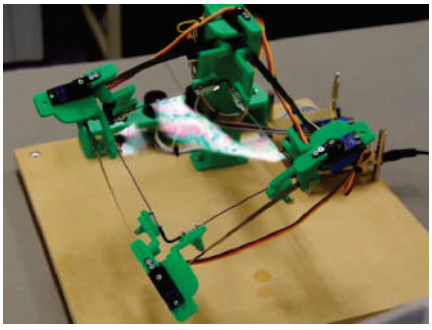
25

Plateau問題を機構的に解く境界制御型曲面形状ロボット

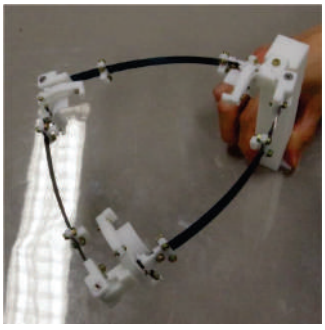


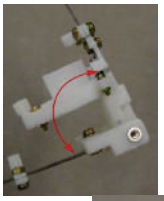






平面の曲面を表現可能

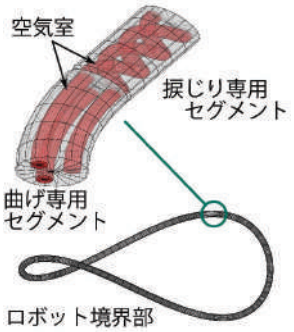


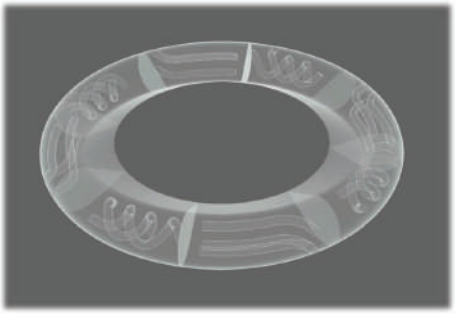


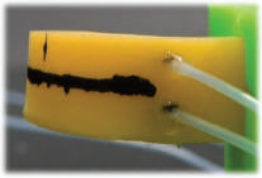


捩じり機能を付けたもの

ゴムライク樹脂材料で構成する境界制御型ロボット

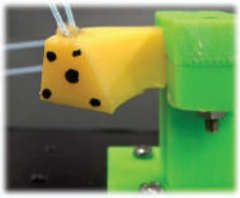






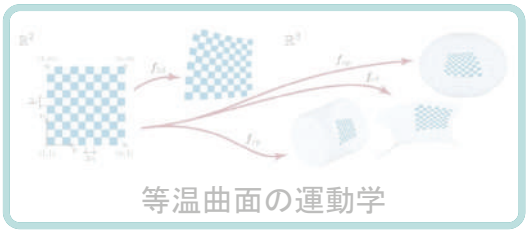
曲げ機能

捩じり機能





27



等温曲面の運動学



Robotic
S-isothermic Surface



Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット



区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル

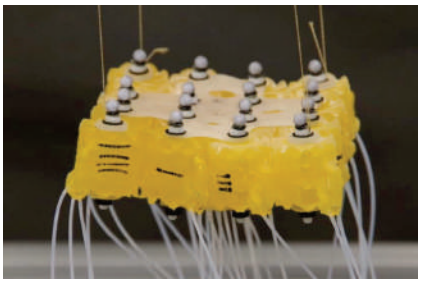


Willmore流フィードバック制御

問い

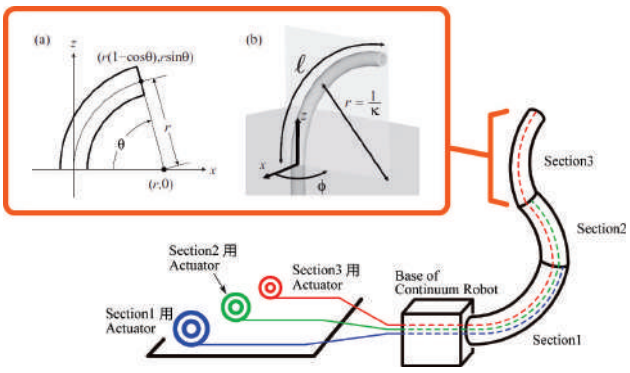
できる限り少ない変数で
複雑な形状を表現できる
曲面モデルとそのロボットの組は何か？

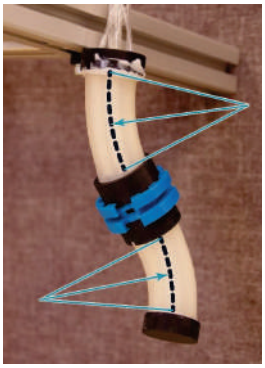
曲面の変数→形

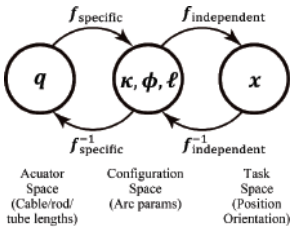


29

区分曲率一定な曲線マニピュレータのモデル





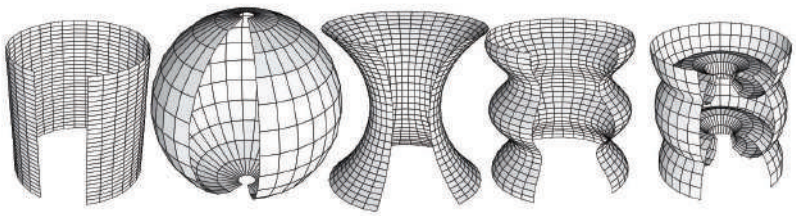


$$f_{\text{independent}} = \begin{bmatrix} \cos\phi\cos\kappa s & -\sin\phi & \cos\phi\sin\kappa s & \frac{\cos\phi(1-\cos\kappa s)}{\kappa} \\ \sin\phi\cos\kappa s & \cos\phi & \sin\phi\sin\kappa s & \frac{\sin\phi(1-\cos\kappa s)}{\kappa} \\ -\sin\kappa s & 0 & \cos\kappa s & \frac{\sin\kappa s}{\kappa} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

◇ ロボットの機構に依存する部分としない部分に分離
◇ 機構に依存しない部分は，同次変換行列で表現

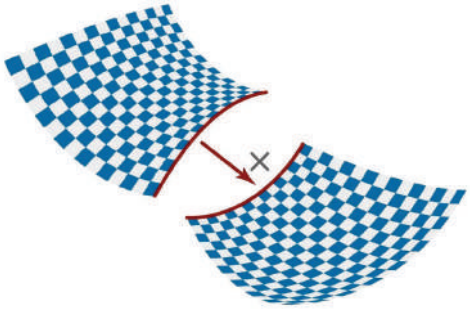
30

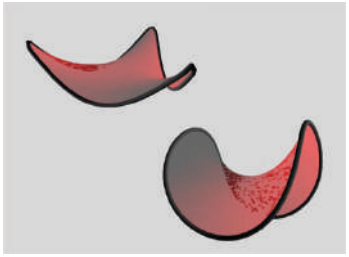
平均曲率一定曲面（CMC曲面）



I. M. Mladenov and M. T. Hadzhilazova, “Geometry of the anisotropic minimal surfaces”, Analele Universitatii Ovidius Constanta - Seria Matematica, vol. 20(2), pp. 79-88, 2012

ただし，上の曲面を直接
貼り合わせることはできない



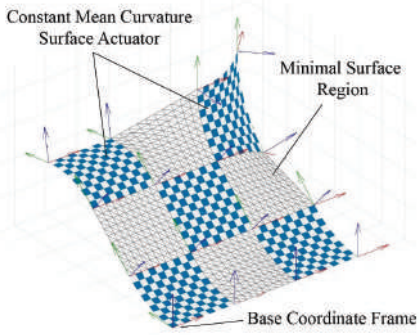


極小曲面（与えられた枠に張る面積が最小の曲面）：
平均曲率はいたるところでゼロ

31

区分的に平均曲率一定な曲面

ROBOMECH2022



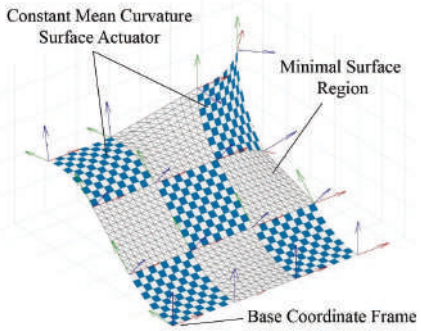
市松模様状に平均曲率一定な回転面と極小曲面を貼り合わせる

回転面部：曲面形状アクチュエータ
極小曲面部：布・シャボン液
or アクチュエータ

32

区分的に平均曲率一定な曲面

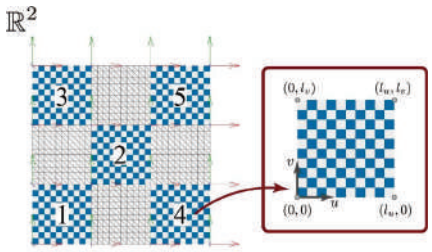
ROBOMECH2022

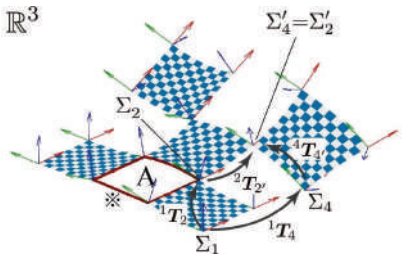


市松模様状に平均曲率一定な回転面と
極小曲面を貼り合わせる

回転面部：曲面形状アクチュエータ

極小曲面部：布・シャボン液
or アクチュエータ



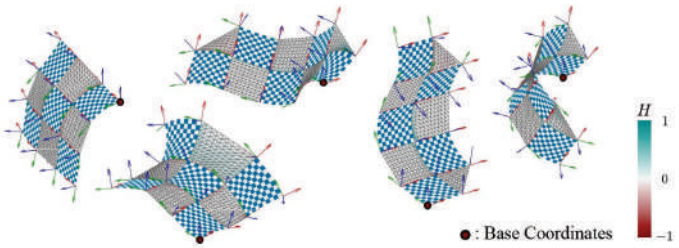


・全ての回転面部を最初に求め，その後極小曲面部を計算

・回転面部の形状は関数表現なので，計算時間はほとんどいらない

順運動学の結果

幾何形状と半径を
ランダムに100パターン生成



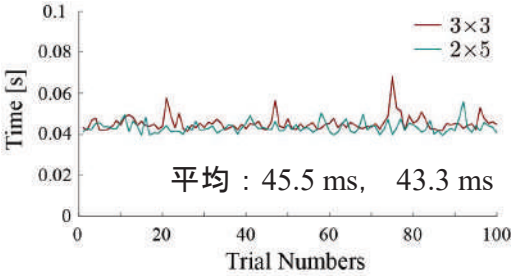
【幾何形状】
u方向，v方向に屈曲する
円柱，球，カテノイド

【半径】
最大：10^6　　最小：1

【回転面部サイズ】
$l_u = l_v = 1$

【極小曲面部の形状の算出】
境界に位置した辺を直線とし，
Poisson問題　$\Delta_S f = 0$　を解く

順運動学にかかる時間

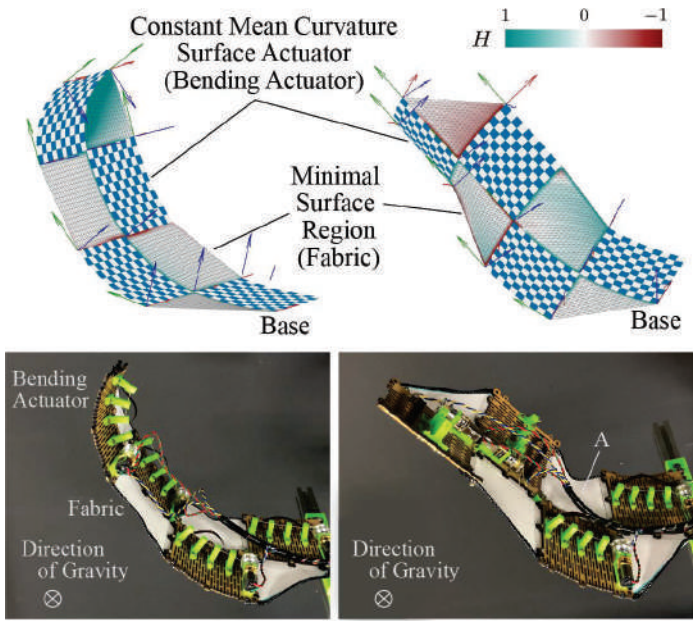


平均：45.5 ms，　43.3 ms

可積分条件を満たす変数で
動標構を積分する場合
（一般的に1秒以上）
よりも短時間で計算可能

円柱型屈曲アクチュエータと布で構成したロボット

RSJ2022

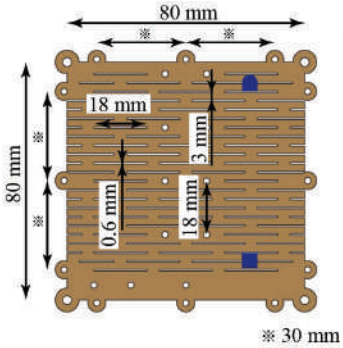


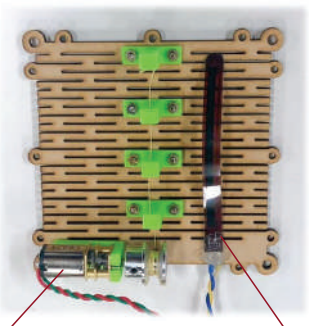
35

回転面部（円柱型屈曲アクチュエータ）

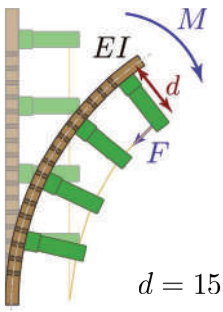
直線状のリビングヒンジ加工を施したMDF（2.5 mm厚）を採用

Ohshima et al., “Analysis and Design of Elastic Materials Formed using 2D Repetitive Slit Pattern”, 2015





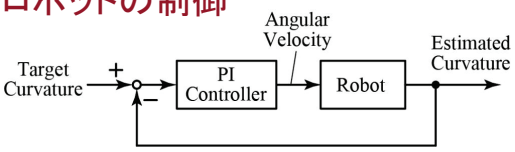
DCギヤードモータ
（ギア比1:250，
12V駆動時停動トルク4.3 kg·cm）



$d = 15\,\mathrm{mm}$

高分子厚膜フィルムの曲げセンサ
（MB060-N-221-A02）

ロボットの制御

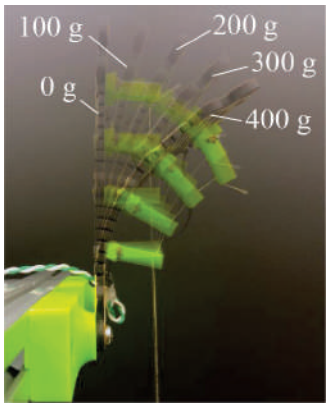


◇1つのArduino Mega2560から
すべての屈曲アクチュエータを制御

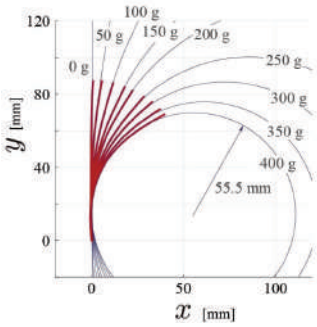
◇目標曲率と推定曲率の差により
モータの回転速度を制御

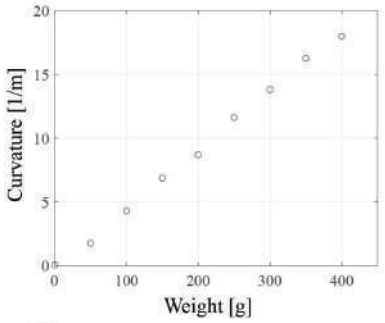
36

アクチュエータ単体の屈曲の確認



錘をつるした変形結果に対して
円をフィッティングした結果



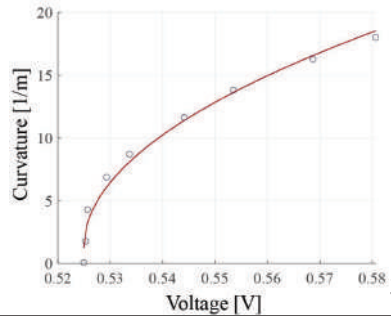


曲げセンサの値（電圧値）と曲率の関係

$$\kappa = \alpha_1 \sqrt{V - \alpha_2} + \alpha_3$$

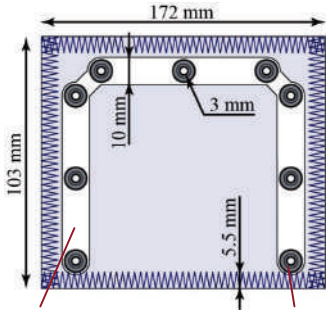
アクチュエータの平均曲率

$$H = \kappa/2$$



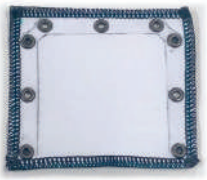
37

極小曲面部（布）



接着芯
（厚さ0.6mm）

ハトメ
（外径3mm）



2Wayトリコット生地
（ポリエステル89%，ポリウレタン11%）





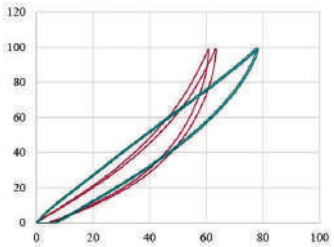
ウーリーロック（ナイロン100%）

4本縁かがり
ロックミシン
（BL66EXS）

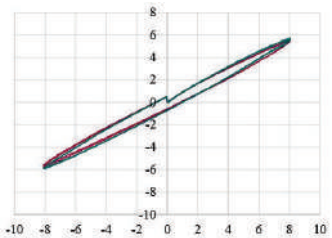




引張・せん断試験機
（KES-FB1-AUTO-A）



50 gf/cm張力時
縦方向43%，横方向35%



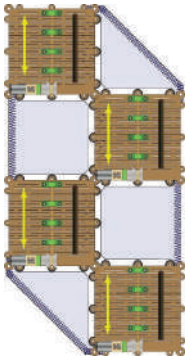
せん断角度8°
約5.6 gf/cm

38

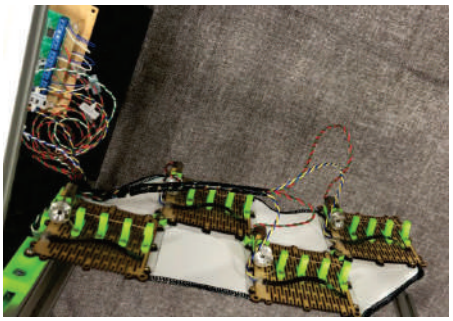
センサ情報からのロボット形状の推定

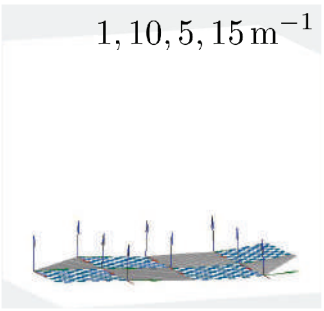


Robot 1

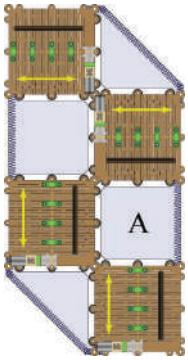


➡横から見れば曲線状の曲率一定なContinuum Manipulator

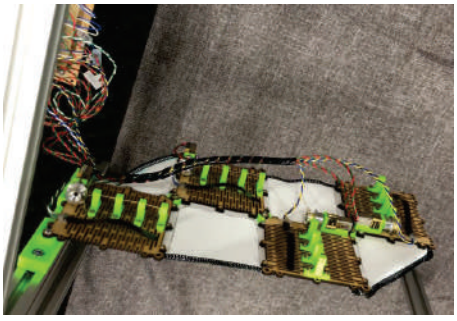


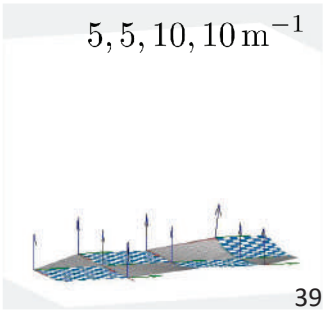


Robot 2

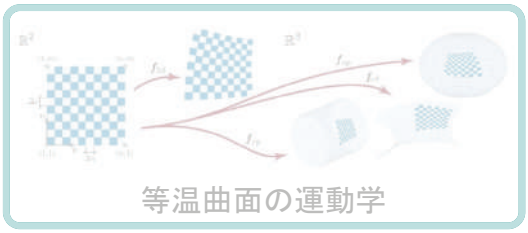


➡先端2つは根本2つと異なる方向に屈曲





39



等温曲面の運動学



Robotic
S-isothermic Surface

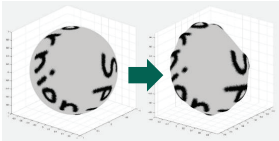


Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット



区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル

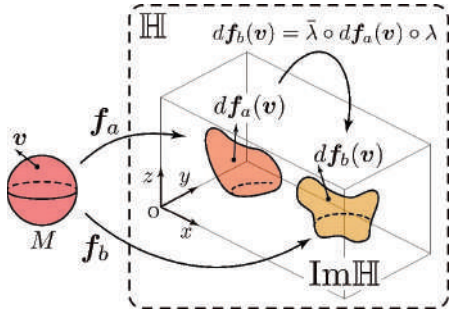




Willmore流フィードバック制御

Dirac作用素と平均曲率半密度

K. Crane et al., “Spin Transformations of Discrete Surfaces”, Transaction on Graphics, 2011



M ：多様体

曲面の関数　$f : M \to \mathrm{Im}\mathbb{H}$

微分 $df : TM \to \mathrm{Im}\mathbb{H}$

与えられた曲面Mの2つのはめ込み

$f_a, f_b : M \to \mathrm{Im}\mathbb{H}$

Spin変換

2つの曲面の微分が相似変換（回転と拡大）で関連付けられている

$$df_b(v) = \bar{\lambda} \circ df_a(v) \circ \lambda$$

Dirac作用素（∇の一般化）

λの1次導関数

$$D\lambda = -\frac{df \wedge d\lambda}{|df|^2}$$

dfと$d\lambda$で張られる面積

微小面積要素

可積分条件　各点で満たす必要あり

$$(D - \rho)\lambda = 0$$

スカラー関数 $\rho : M \to \mathbb{R}$ が存在

平均曲率半密度　$\mu = H|df|$

平均曲率　長さ要素

Spin等価な2つの曲面間では

$$\underset{\mu_b}{H_b|df_b|} = \underset{\mu_a}{H_a|df_a|} + \rho|df_a| \quad \text{が成立}$$

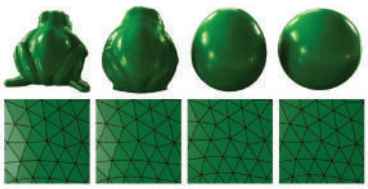
ρは平均曲率半密度の変化量といえる

平均曲率半密度が登場する論文

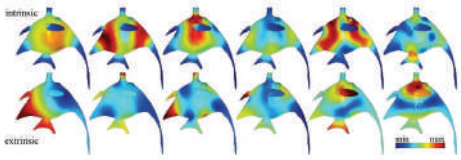
G. Kamberov et al., “Bonnet pairs and isothermic surfaces”, Duke Mathematical Journal, 1998



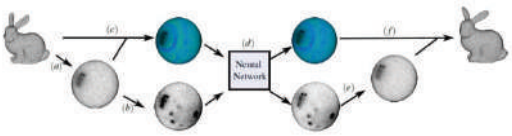
K. Crane et al., “Spin Transformations of Discrete Surfaces”, Transaction on Graphics, 2011



K. Crane et al., “Robust Fairing via Conformal Curvature Flow”, Transaction on Graphics, 2013

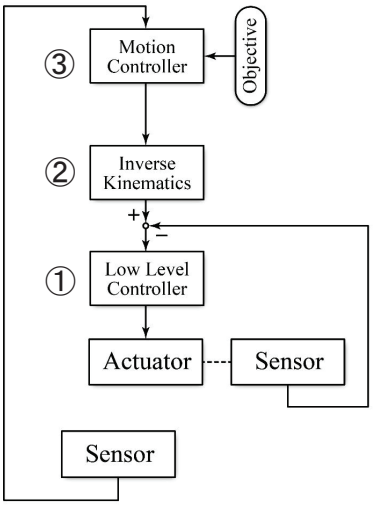


Zi Ye, et al., “A unified discrete framework for intrinsic and extrinsic Dirac operators for geometry processing”, Computer Graphics Forum, 2018



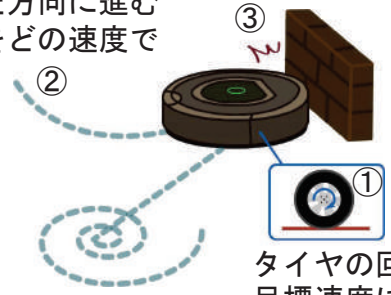
Zi Ye et al., “A curvature and density-based generative representation of shapes”, Computer Graphics Forum, 2020

制御の基本

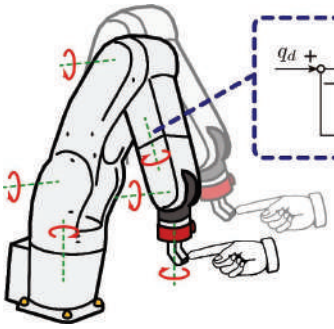


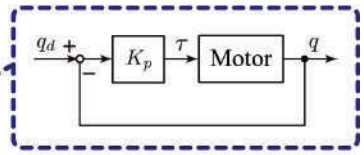
与えられた方向に進むには両輪をどの速度で動かすか ②

どう振舞うか ③



タイヤの回転速度を目標速度に制御





関節の制御器

比例制御　制御量 = 係数 × (目標値 − 現在の値)

問い

曲面形状ロボットにおける
形状フィードバック制御は何か？

曲率流方程式

Robust Fairing via Conformal Curvature Flow
Keenan Crane et al., Transaction on Graphics, 2013



Willmoreエネルギー

$$E = \int_0^L (\hat{\kappa} - \tilde{\kappa})^2 ds = \|\hat{\kappa} - \tilde{\kappa}\|^2$$

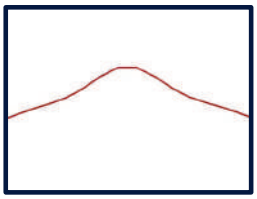
Willmore流方程式

$$\dot{\kappa} = -\nabla E$$
$$= -2(\hat{\kappa} - \tilde{\kappa})$$

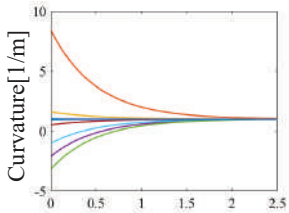
$\tilde{\kappa}$：目標の曲率
$\hat{\kappa}$：現在の曲率
観測値 or 推定値

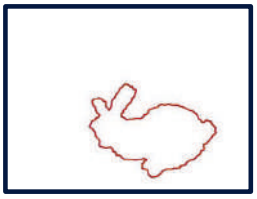
Algorithm

1. 曲率の算出
2. 曲率変化量（流れ）の計算
3. 流れの拘束面への射影
4. オイラー積分
5. 接ベクトル，頂点位置の復元

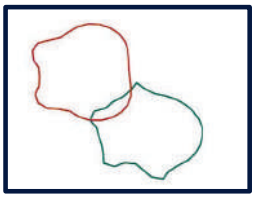


局所的な変化





大域的な変化
（ノイズあり）



目標曲率あり

曲面形状ロボットの形の制御

現在の形状



目標の形状

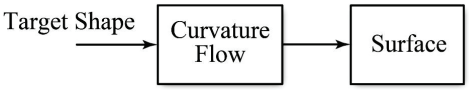
ここを
埋める式

曲率流方程式



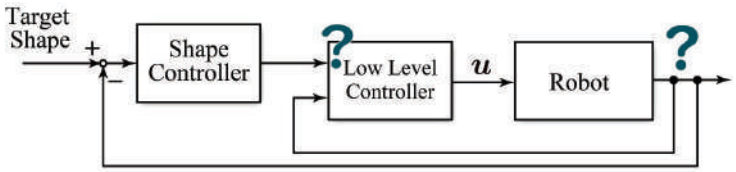
https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_cow

計算機内の曲面



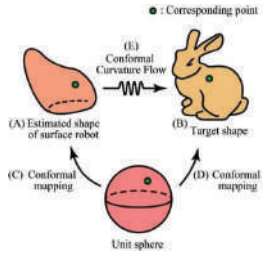
計算機の丸め誤差を除いて，
頂点はいかようにも動かせる

ロボット



CG分野と異なるのは制御器で振る舞いが変わるところ

曲率流方程式を用いた形状フィードバック制御

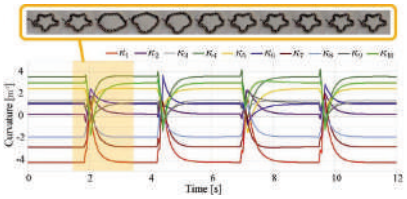


曲率流方程式が比例制御と類似！（RSJ2019）

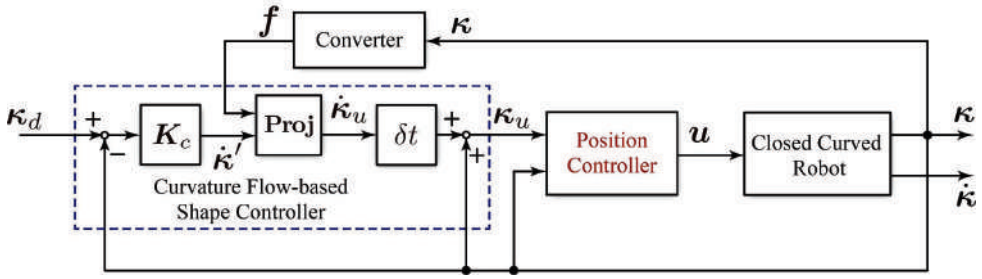


閉曲線形状ロボットへの実装（Robomech2020）

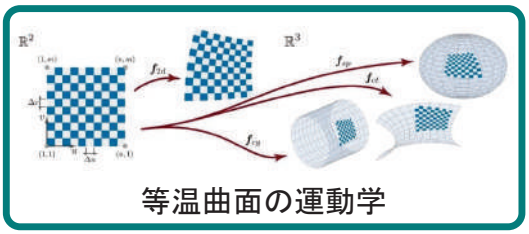




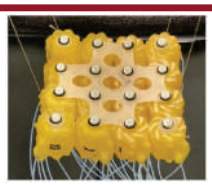
κ_d: 目標の曲率
κ: 現在の曲率
観測値 or 推定値



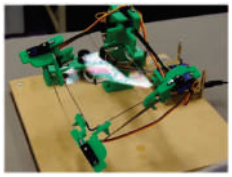
47



等温曲面の運動学



Robotic
S-isothermic Surface

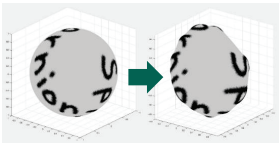


Plateau問題を
機構的に解く
曲面形状ロボット



区分的に
平均曲率一定な
曲面モデル





Willmore流フィードバック制御

まとめ

- 所望の形に変形する曲面形状ロボット
- 制御しやすいという観点からのロボットの開発
  - 曲面の微分幾何に基づいた
    - 理論（座標系設定，順運動学，逆運動学）
    - 構造（S-Isothermic曲面）

Texture Mapping in CG



B. Levy, Transaction on Graphics, 2002

Conformal Transformation

- Coordinate Setting
- Kinematic Theory
- Feedback Control

CGのアルゴリズムもロボットに適用できるものもある

現実の材料でできない変形もロボットでは可能なこともある

49

Theory of elasticity on Riemannian manifolds and its applications

Ryuichi TARUMI

Osaka University, Japan

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.



Cucumis sativus

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

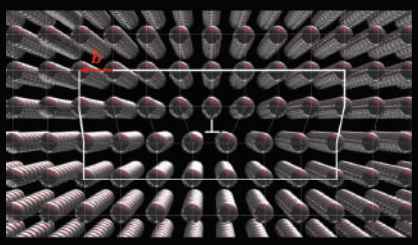
大阪大学 大学院基礎工学研究科 非線形力学領域

垂水竜一

格子欠陥の新しい材料力学理論

21世紀にふさわしい，新しい材料力学理論を創り出す

- 格子欠陥の力学
  - 金属・セラミックス材料中の格子欠陥は，材料の強度を1/1000に低下させる
  - 新しい格子欠陥の力学理論を構築
- 微分幾何学の導入
  - ユークリッド空間 → リーマン・カルタン多様体
  - 格子欠陥の弾塑性力学場を表す新しい支配方程式の導出



規則的な原子配列の乱れ（格子欠陥）の模式図

Cartanの第一構造方程式

弾性体の変分原理（エネルギー最小化）

$$\begin{cases} \tau = d\vartheta \\ W[y,\vartheta] = \displaystyle\int_\Omega \frac{1}{2} C[\vartheta]^{ijkl} E[y,\vartheta]_{ij} E[y,\vartheta]_{kl} v[\vartheta] \end{cases}$$

しなやかな材料・構造体の幾何的設計

材料の「かたち」（幾何学）を最適設計することで，材料に「しなやかさ」（力学）を発現させる

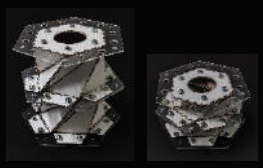
- 幾何構造を設計し柔軟性を発現
  - 3Dプリンター：人工的な柔軟格子
  - 折り紙：不安定力学構造の設計・制作
  - 切り紙：柔軟な曲面構造の
  - 編み紙：紙を編んで曲面構造を作成
- Gauss – Bonnetの定理
  - 幾何学的な拘束を受けた柔軟材料の変形

$$\int_{\Omega} KdA + \oint_{\partial\Omega} k_g ds = 2\pi\chi(\Omega)$$

ガウス曲率　測地的曲率　オイラー標数

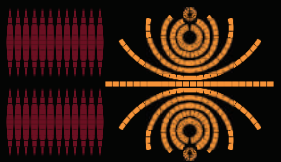


柔軟な人工超格子



Kresling unitの折り畳み展開変形





編み紙を用いて制作された回転楕円曲面（左）とその展開構造（右）

バイオミメティック材料力学

私たちのまわりに広がる自然は，しなやかな材料であふれてる



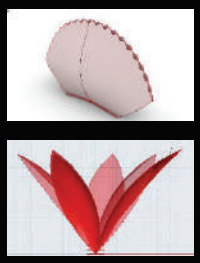
Cucumis sativus



Lilium maculatum



Dionaea muscipula



Mechanical modeling

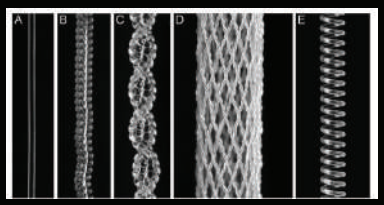
自然のしくみ（植物の運動や機能）を力学的に明らかにし，それを様々な技術開発へ応用することで（ソフトロボット等），持続的な人類社会の発展へ貢献したい

ソフトマテリアルとソフトロボット

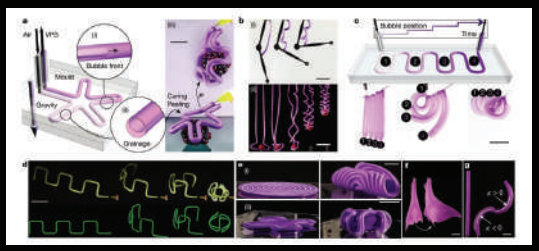
(A)



(B)



(C)

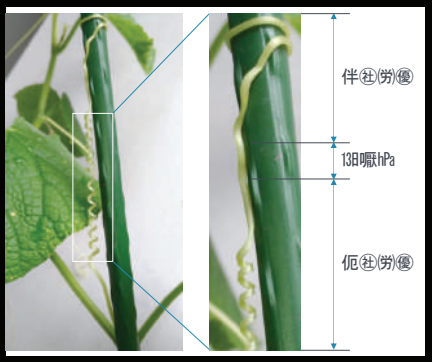


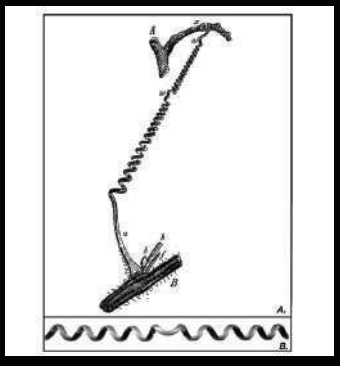
A) M.Wehner et al., An integrated design and fabrication strategy for entirely soft, autonomous robots
Nature 536, pages451–455 (2016).

B) C.S.Haines et al., Artificial Muscles from Fishing Line and Sewing Thread
Science, 343, 6137, pp.868-872 (2014).

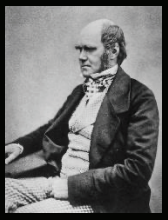
C) Jones, T.J., Jambon-Puillet, E., Marthelot, J. *et al.*
Bubble casting soft robotics. *Nature* 599, 229–233 (2021)

きゅうりの巻きひげの実験観察





J. Sachs, *Text-book of Botany, Morphological and Physiological* (Clarendon Press, Oxford, 1875).



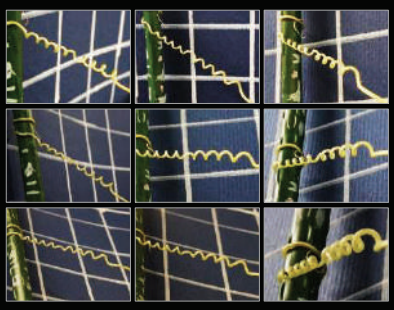
Charles Darwin
The Movements and Habits of Climbing Plants

きゅうりの巻きひげの実験観察

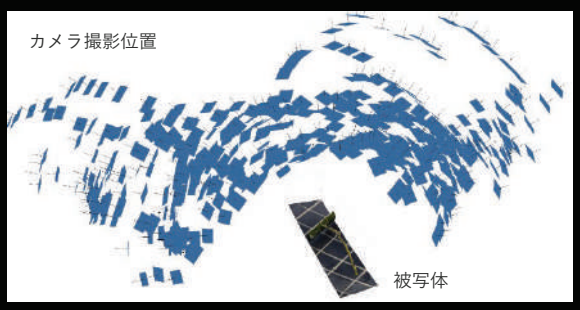




きゅうりの巻きひげの実験観察

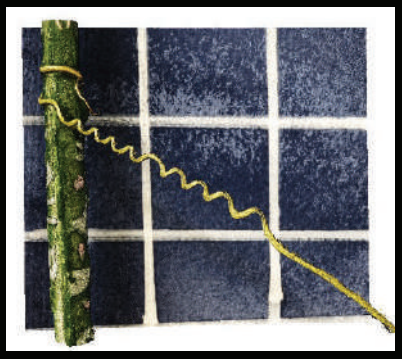


巻きひげを様々なアングルから撮影

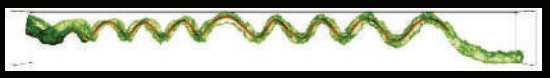


撮影した画像をMetashapeを用いて統合・解析

きゅうりの巻きひげの実験観察



巻きひげの三次元構造モデル

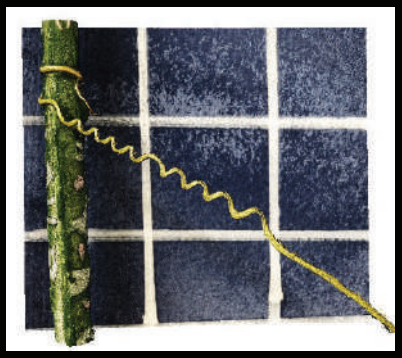


軸方向に沿った巻きひげの曲率と捩率の分布を計算

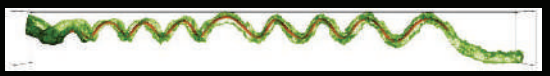
$$\kappa(t) = \frac{\|c'(t)\times c''(t)\|}{\|c'(t)\|^3}$$

$$\tau(t) = \frac{\det|c'(t)c''(t)c'''(t)|}{\|c'(t)\times c''(t)\|^2}$$

きゅうりの巻きひげの実験観察

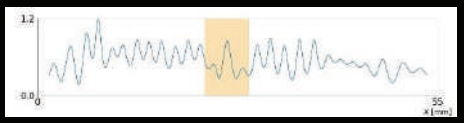


巻きひげの三次元構造モデル

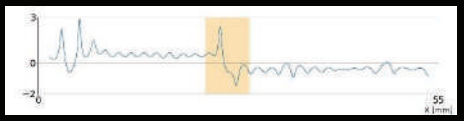


軸方向に沿った巻きひげの曲率と捩率の分布を計算

$\kappa(t)$



$\tau(t)$



きゅうりの巻きひげのモデリングー１



Dirichlet　R=1　Neumann

L=200

α：収縮率

$$g_B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1-\alpha)^2 \end{bmatrix}$$

維管束　G-Fiber　Riemann計量

きゅうりの巻きひげのモデリングー１



$$E = \frac{1}{2}(g_C[y] - g_B)$$

$$\delta W[y] = \int_R C^{ijkl}\delta_{mn}\frac{\partial h^m}{\partial x^i}\frac{\partial y^n}{\partial x^j}E_{kl}\det F_B\, \upsilon_R = 0$$

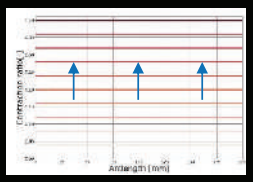
きゅうりの巻きひげのモデリングー１



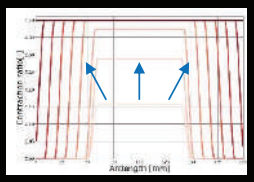
(A)

(B)

(A)



(B)

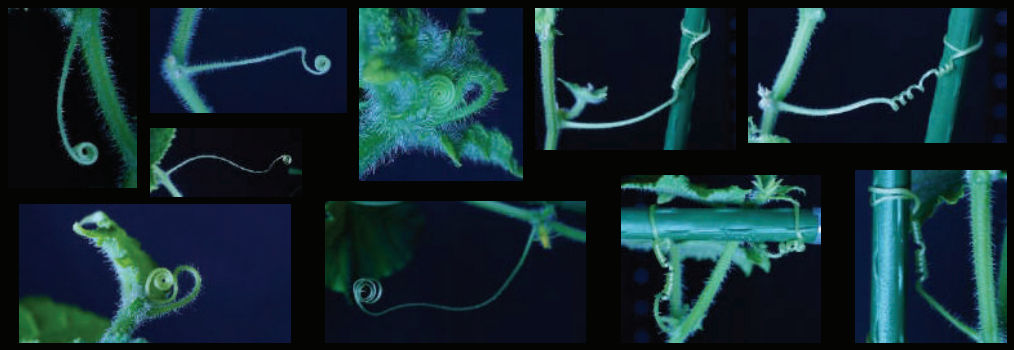


モデリングの問題点





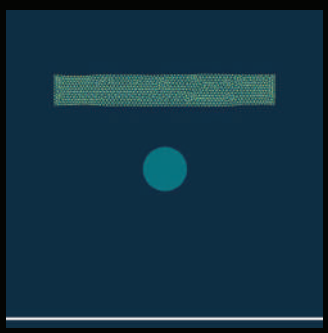
モデリングの問題点



巻きひげの初期形状は渦巻き状構造，反転らせん構造の形成過程で多くの自己接触を伴う

Material Point Method (MPM)

- 粒子法による連続体力学計算の一種で，近年はCG（映画やゲーム等）で用いられている
- 数値計算を行う際に，ラグランジュ系とオイラー系の双方を交互に取り扱うため，接触問題や，トポロジー変化が生じる問題（ボイドやき裂発生など）の解析に適している
- 固体と流体を同時に取り扱うことができる
- エネルギーや運動量といった物理量の保存が苦手であり，数値積分法は現在も研究・開発が進められている
- (i) Particle to Grid，(ii) Grid上で力の計算，(iii) Grid to Particleを繰り返す



Material Point Method (MPM)

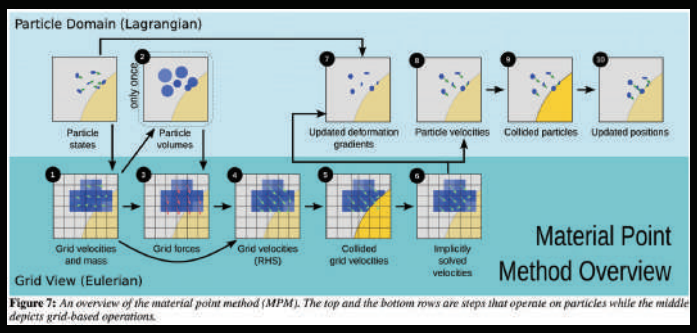


Figure 7: *An overview of the material point method (MPM). The top and the bottom rows are steps that operate on particles while the middle depicts grid-based operations.*

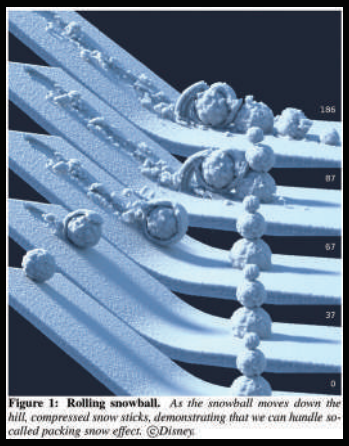


Figure 1: Rolling snowball. *As the snowball moves down the hill, compressed snow sticks, demonstrating that we can handle so-called packing snow effect.* ©Disney.

A material point method for snow simulation
A. Stomakhin, C. Schroeder, L. Chai, J. Teran and A. Selle
ACM Transactions on Graphics, 32, Article No.: 102 pp 1–10 (2013)
https://doi.org/10.1145/2461912.2461948

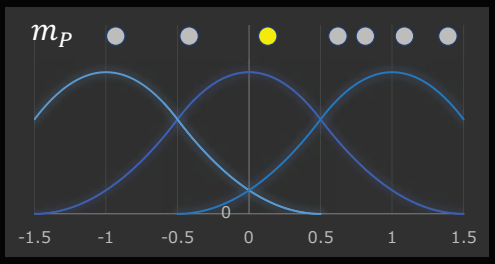
Material Point Method (MPM)

Mapping from particles to grids

$$m_i = \sum_{i=1}^{N_i} w_{ip} m_p$$

$$\chi(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |\boldsymbol{x}|^2 & 0 \le x \le \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2} - |\boldsymbol{x}|^2\right) & \frac{1}{2} \le |\boldsymbol{x}| \le \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} \le |\boldsymbol{x}| \end{cases}$$

$$w_{ip} = \chi\left(\frac{x_p - x_i}{h}\right)\chi\left(\frac{y_p - y_i}{h}\right)\chi\left(\frac{z_p - z_i}{h}\right)$$



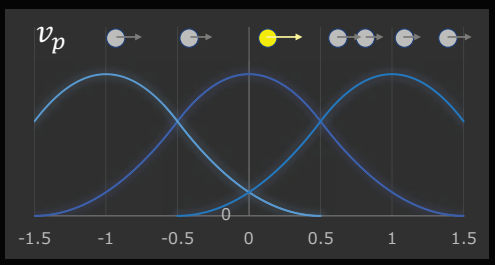
Material Point Method (MPM)

Mapping from particles to grids

$$v_i = \frac{1}{m_i} \sum_{i=1}^{N_i} w_{ip} m_p v_p$$

$$\chi(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |\boldsymbol{x}|^2 & 0 \le x \le \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2} - |\boldsymbol{x}|^2\right) & \frac{1}{3} \le |\boldsymbol{x}| \le \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} \le |\boldsymbol{x}| \end{cases}$$

$$w_{ip} = \chi\left(\frac{x_p - x_i}{h}\right) \chi\left(\frac{y_p - y_i}{h}\right) \chi\left(\frac{z_p - z_i}{h}\right)$$



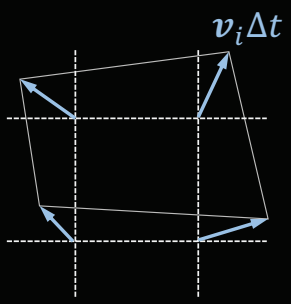
Material Point Method (MPM)

Hybrid Continuum Mechanics

$$\hat{\boldsymbol{x}}_i = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{v}_i \Delta t$$

$$\hat{\boldsymbol{F}}_{E_p} = \left(\boldsymbol{I} + \sum_{i=1}^{N_i} (\hat{\boldsymbol{x}}_i - \boldsymbol{x}_i)(\nabla w_{ip})^T \right) \boldsymbol{F}_{E_p}$$

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}_{E_p}}{\partial \hat{\boldsymbol{x}}_i} = \left[(\nabla w_{ip})^T \boldsymbol{F}_E \right]^T = \boldsymbol{F}_E^T \nabla w_{ip}$$



Deborah Sulsky, Shi-Jian Zhou and Howard L.Schreyer
Application of a particle-in-cell method to solid mechanics
Computer Physics Communications, 87, Pages 236-252 (1995).

Material Point Method (MPM)

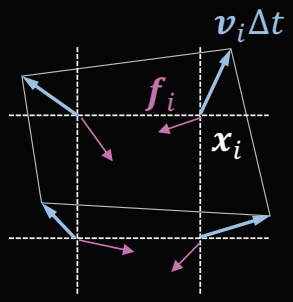
Hybrid Continuum Mechanics

$$\Phi(\hat{\boldsymbol{x}}_i) = \sum_{p=1}^{N_p} V_p^0 \, \phi(\hat{\boldsymbol{F}}_{E_p}),$$

Strain energy density

$$\boldsymbol{f}_i = -\frac{\partial \Phi}{\partial \hat{\boldsymbol{x}}_i} = -\sum_{p=1}^{N_p} V_p^0 \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\boldsymbol{F}}_{E_p}} \frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}_{E_p}}{\partial \hat{\boldsymbol{x}}}$$

$$= -\sum_{p=1}^{N_p} V_p^0 \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{F}_{E_p}} \left(\boldsymbol{F}_{E_p}^T \nabla w_{ip} \right)$$



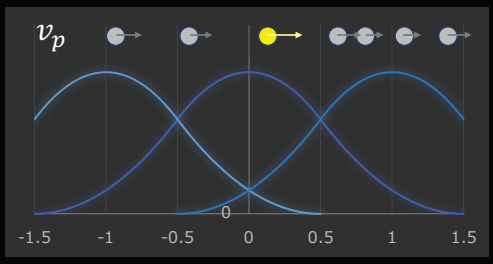
Material Point Method (MPM)

Mapping from grids to particles

$$\boldsymbol{v}_i^{n+1} = \boldsymbol{v}_i^n + \frac{\boldsymbol{f}_i^n}{m_i} \Delta t$$

$$\boldsymbol{v}_p^{n+1} = \sum_{i=1}^{N_i} \boldsymbol{v}_i^{n+1} w_{ip}^n$$

$$\boldsymbol{x}_p^{n+1} = \boldsymbol{x}_p^n + \boldsymbol{v}_p^{n+1} \Delta t$$

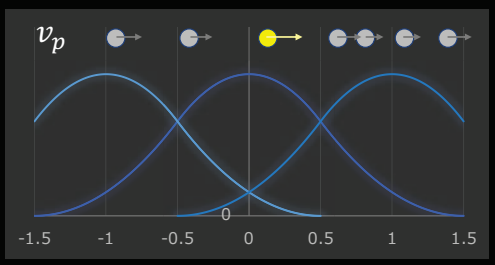


Material Point Method (MPM)

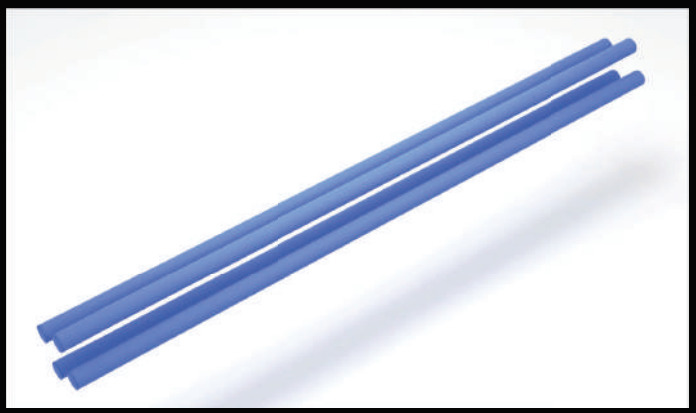
Mapping from grids to particles

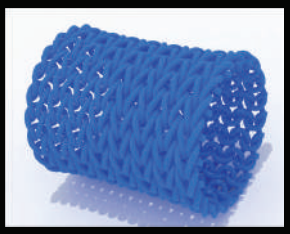
$$\nabla \boldsymbol{v}_p^{n+1} = \sum_{i=1}^{N_i} \boldsymbol{v}_i^{n+1} \left(\nabla w_{ip}^n\right)^T$$

$$\boldsymbol{F}_{E_p}^{n+1} = \left[\boldsymbol{I} + \left(\nabla \boldsymbol{v}_p^{n+1}\right)\Delta t\right] \boldsymbol{F}_{E_p}^n$$



Material Point Method (MPM)





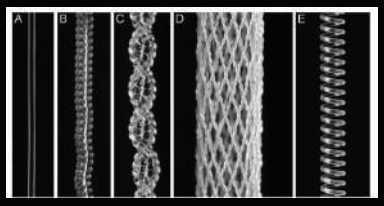


ソフトマテリアルとソフトロボット

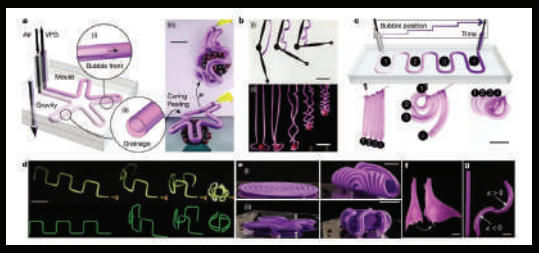
(A)



(B)



(C)

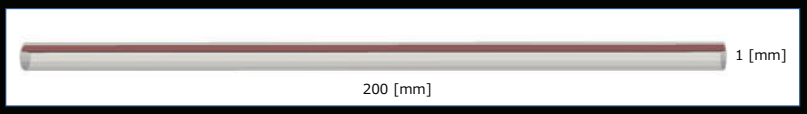


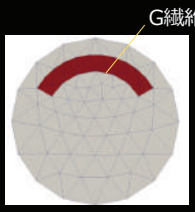
A) M.Wehner et al., An integrated design and fabrication strategy for entirely soft, autonomous robots
Nature 536, pages451–455 (2016).

B) C.S.Haines et al., Artificial Muscles from Fishing Line and Sewing Thread
Science, 343, 6137, pp.868-872 (2014).

C) Jones, T.J., Jambon-Puillet, E., Marthelot, J. *et al.*
Bubble casting soft robotics. *Nature* 599, 229–233 (2021)

きゅうりの巻きひげのモデリングー２





Riemann計量

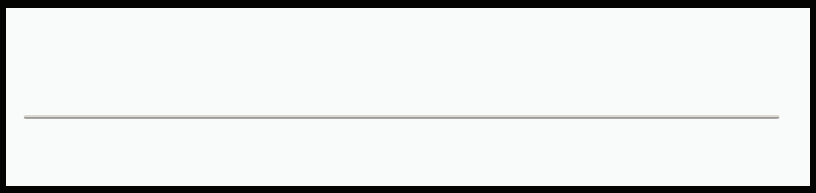
$$g(s,t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \left(1-\alpha(s,t)\right)^2 \end{pmatrix}$$

t：時刻
s：正規化した弧長パラメータ
α：G繊維上での収縮率

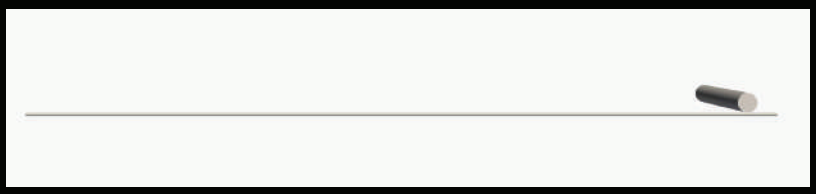
解析条件
軸方向のメッシュ分割数：350
St.Venant-Kirichhoff超弾性体
ヤング率：2.75 [MPa]
ポアソン比：0.375
衝突修正MPM
密度：1.0
時間刻み：5.0×10^{-3}[s]
粘性減衰係数：0.01[N·s/mm]
ばね定数：1[N/mm]

きゅうりの巻きひげのモデリングー２

Case-1
障害物と非接触



Case-2
障害物と接触



まとめ

- 弾性理論（材料力学） のリーマン多様体上への拡張を進めている
- リーマン多様体上の弾性理論（材料力学）は，材料内部で生じるひずみの変化を直接取り扱うことができることから，残留応力問題の解析に適している
- MPMはLagrange系とEuler系のハイブリッド数値解析法であり，接触や破壊など複雑な力学問題の解析に適している
- リーマン多様体上の弾性理論とMPMを組み合わせた力学的な枠組みは，植物を中心としたバイオミメティクス研究を行う上で大変有用であり，将来的にはソフトロボットのCAEへ応用したい



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

Shunsuke KOBAYASHI

Osaka University, Japan

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 [1], Bilby *et al.* [2] and Kröner and Seeger [3] 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 [4]. 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 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 [5,6]. 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 into a three-dimensional Euclidean space.

References

[1] K. Kondo, RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry, **1**, pp. 6-17 (1955).
[2] B. A. Bilby, R. Bullough and E. Smith, Proc. R. Soc. Lond. A: Math. Phys. Sci., **231**, pp. 263-273 (1955).
[3] E. Kröner and A. Seeger, Arch. Ration. Mech. Analysis, **3**, pp. 97-119 (1959).
[4] S. Amari, RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry, **3**, pp. 99-108 (1962).
[5] A. Yavari and A. Goriely, Arch. Ration. Mech. Analysis, **205**, pp. 59-118 (2012).
[6] J. Wenzelburger, J. Geom. Phys., **24**, pp. 334-352 (1998).

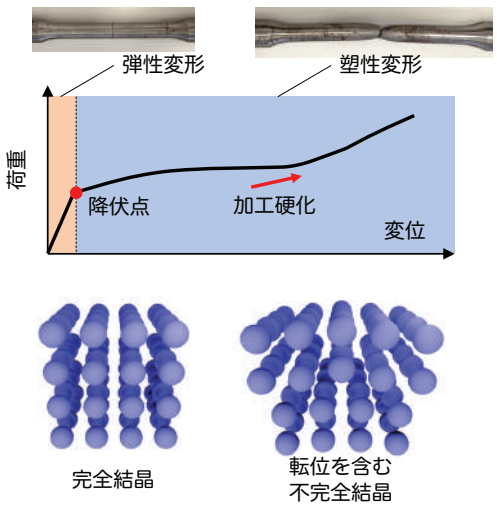
転位を含む結晶の連続体力学
：微分幾何学と変分法に基づく数値計算

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

大阪大学　小林舜典

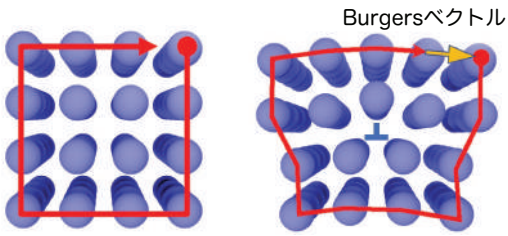
背景

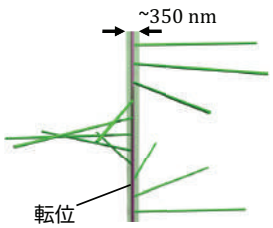
- 金属材料の変形
  - 弾性変形：可逆
  - 塑性変形：不可逆
- 塑性変形の原因
  - 結晶の配列のずれた領域，転位が無数に存在
  - 降伏点に達すると転位が移動し，除荷しても移動後の位置に留まる
- 金属材料の強度
  - 降伏：転位が移動開始
  - 加工硬化：転位同士が相互作用し変形抵抗が増加



背景

- 転位の幾何学的特徴
  - 転位＝結晶格子の不整合が線状に連なった領域で実態はない
  - 転位の普遍的な性質
    転位線：格子不整合を連ねた領域
    Burgersベクトル：不整合の度合い
  - 転位が存在することで結晶の形はBurgersベクトル程度変形
- ねじれたナノワイヤ*
  - 転位による結晶のずれが結晶全体をねじる効果
  - Eshelbyツイスト



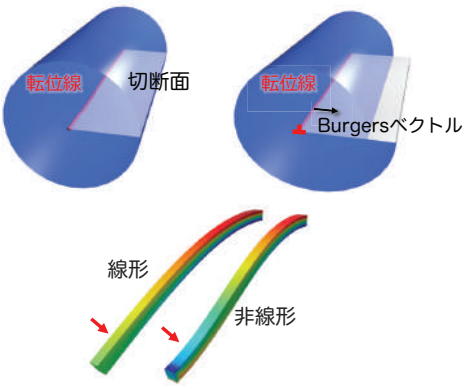


*M.J. Bierman *et al.*, *Science*, **320**, 1060 (2008).

背景

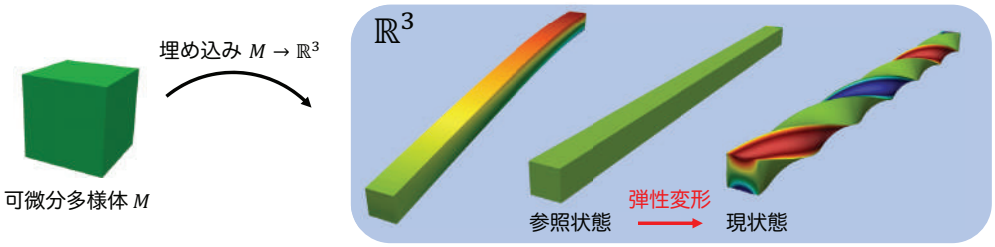
- 連続体力学
  物体を（可微分）多様体として扱う
  - 有理連続体力学：Noll[1-2], Wang[3]
  - 公理論的？
- 連続体力学における転位のモデル化
  - Volterraのモデル[4]
  - 円筒を一部切断してずらし，再び結合させて力のつり合いを見る
  - 線形化による無限小変形の仮定

▶ 転位による結晶の変形を線形化をせずに幾何学的に厳密に取り扱う



1. W. Noll, Arch. Rational Mech. Anal. **2** (1958), pp. 197-226.
2. W. Noll, Arch. Rational Mech. Anal. **27** (1967), pp. 1-32.
3. C.-C. Wang, Arch. Rational Mech. Anal. **27** (1967), pp. 33-94.
4. V. Volterra, *Ann. Sci. de l'Ecole Norm. Superieure*, **24** (1907), pp. 401–517.

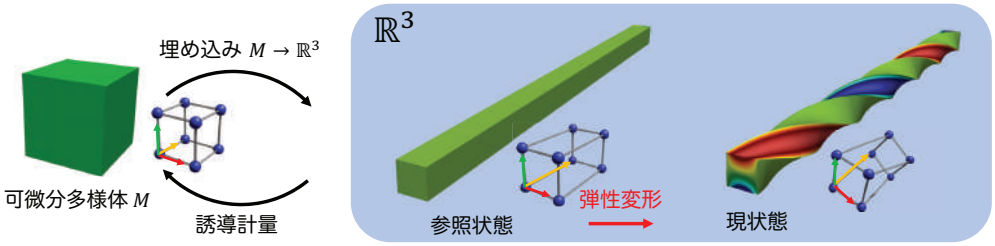
微分幾何学と弾性理論



- 参照状態：変形前の物体の状態（givenなもの）
- 現状態　：加えられた力とつり合うように変形した状態

▷変形量：各状態の“微小領域”に着目して定義する
　各点の接空間の基底≃微小領域の形状≃結晶格子の形

微分幾何学と弾性理論



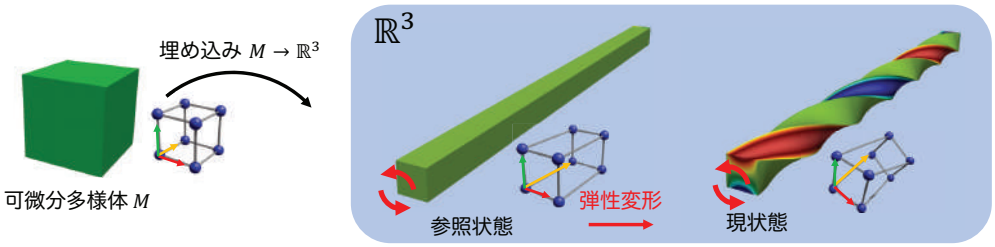
弾性理論における変形量の定義

- 変形の前後で対応する各点周りの接空間の関係に着目する
- $\forall p \in M$ の基底を埋め込みで写すと埋め込み先での基底となる
- 埋め込み先のEuclid計量hにより各基底の大きさや角度がわかる

素朴な見方　（変形後の基底の大きさと角度）ー（変形前の基底の大きさと角度）

微分幾何学　$\varphi^* h - \bar{\varphi}^* h$ ▶ $E = \dfrac{\varphi^* h - \bar{\varphi}^* h}{2}$　Greenひずみテンソル

微分幾何学と弾性理論

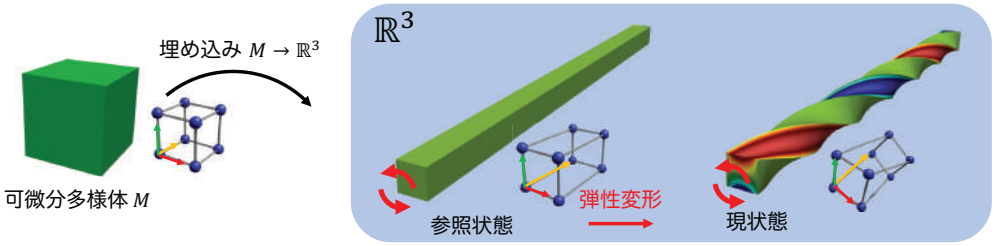


局所的な“力”の定義

- 物体に外から力を加えると力がつり合うように変形：現状態
- 変形した物体に発生する局所的な“力”：応力
- 応力を用いて変形している物体の力のつり合いを記述する

$S = \mathrm{C}^{ijkl} E_{kl} \partial_i \otimes \partial_j$ ▶ 力のつり合いを記述

微分幾何学と弾性理論



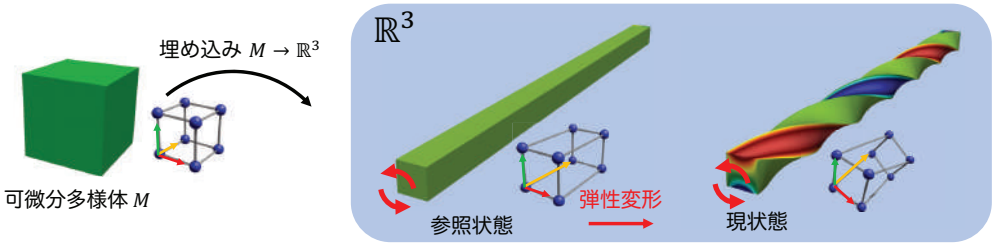
弾性理論における変分原理

- エネルギーを停留させる変形が実現

$$I[\varphi] := \underbrace{\int_M \frac{1}{2} S^{ij} E_{ij} dV}_{\text{ひずみエネルギー}} - \underbrace{T[\varphi]}_{\text{外力のする仕事}}$$ ▶ 停留条件 $\delta I[\varphi] = 0$

物体の弾性変形：Riemann多様体

連続体力学への転位の導入？



- 転位：結晶の格子不整合＋格子不整合を緩和するように結晶格子が変形
  - 転位分布を多様体上でどう表現するか？
  - 転位分布からRiemann計量をどう決定するか？
- 微分幾何学の導入

  1950年頃にKondo(1)，Bilbyら(2)，KrönerとSeeger(3)
  Amariにより統一的にまとめられ，動的問題まで拡張(5-6)

(1) K. Kondo, *RAAG Memoirs*, Division D-I , vol. 1 (1955).
(2) B. A. Bilby et al., *Proc. R. Soc. Lond. A Math. Phys. Sci.*, **231** (1955), pp. 263−273.
(3) E. Kröner & A. Seeger, *Arch. Ration. Mech. Analysis*, **3** (1959), pp. 97−119.
(4) S. Amari, *RAAG Memoirs*, Division D-IX , vol. 3 (1962).
(5) S. Amari, Int. J. Engng. Sci., **19** (1981), pp. 1581-1594.

微分幾何学による転位のモデル化

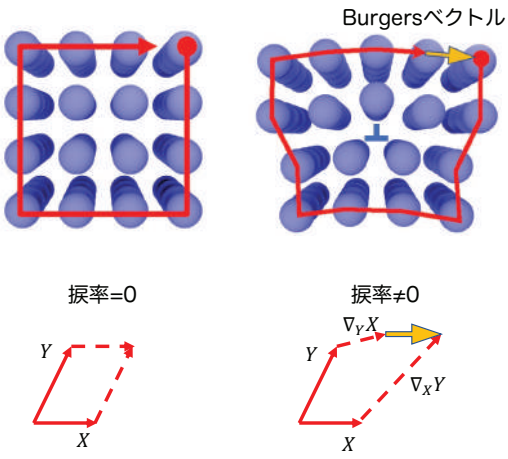
- 転位の幾何学的特徴
  - 転位＝結晶格子の不整合が線状に連なった領域で実態はない
  - 転位の普遍的な性質

    転位線：格子不整合を連ねた領域

    Burgersベクトル：不整合の度合い
- 微分幾何学における捩率
  - Burgersベクトルと同様の幾何構造
  - 多様体上のアフィン接続$\nabla: \mathfrak{x}(M)\times \mathfrak{x}(M) \to \mathfrak{x}(M)$に付随するテンソル場

$$T(X,Y) := \nabla_X Y - \nabla_Y X - [X,Y]$$
$$T(X,Y) = -T(Y,X)$$

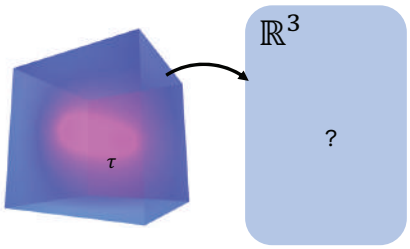
▶ Riemann多様体＋アフィン接続



転位による物体の変形の問題

問題設定

given: 参照状態，捩率（転位の分布）
find ：現状態



Riemann計量の決定

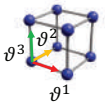
- 物体の弾性：Riemann多様体
- 与えられた捩率→Riemann計量
  ※Riemann計量→Levi-Civita接続と逆の問題
- Cartanの第一構造方程式により決定*

$$\underline{\tau^i} = d\underline{\vartheta^i} \quad \blacktriangleright \quad g = \delta_{ij}\vartheta^i \otimes \vartheta^j$$

捩率2形式　　双対枠（M上の1形式の組）



可微分多様体 M



自然状態

*A. Yavari & A. Goriely, *Arch. Ration. Mech. Analysis*, **205** (2012), pp. 59–118.

Cartanの第一構造方程式の数値計算

- 双対枠のHelmholtz分解*

$$\vartheta = \underline{d\bar{\varphi}} + \underline{\Theta}$$

完全形式成分　　$\in D$

$$\tau = d\vartheta = d\Theta$$

▶ $\Theta \in D$が捩率τに寄与

- 変分問題定式化
  - Cartanの第一構造方程式の残差

$$\mathcal{G}[\Theta] = \int_M \frac{\delta_{ij}}{2}\left(\tau^i - d\Theta^i\right)\left(\tau^j - d\Theta^j\right)dV$$

  - 双対完全形式の条件

$$\mathcal{H}[\Theta,\lambda] = \int_M \delta_{ij}\lambda^i\delta\Theta^j dV$$
$$\Theta(N) = 0 \text{ on } \partial M$$

Helmholtz分解*
M上の$\mathbb{R}^3$値1形式全体の空間Ω^1にRiemann計量gから誘導される内積を用いて次の直和分解が成立

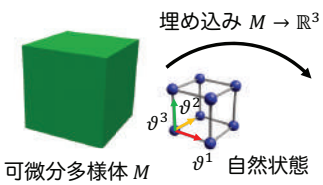
$$\Omega^1 = dC^\infty \oplus D$$

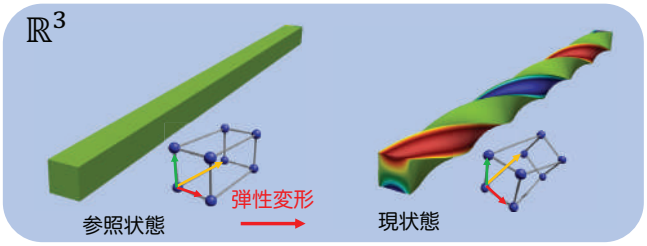
ただし，
$\mathbb{R}^3$値完全形式全体：$dC^\infty \coloneqq \{df \mid f \in C^\infty\}$
$\mathbb{R}^3$値双対完全形式全体：$D \coloneqq \{\theta \mid \delta\Theta = 0, \Theta(N) = 0\}$
- $d: \Omega^k \to \Omega^{k+1}$：外微分
- $\delta: \Omega^k \to \Omega^{k-1}$：$g$に関する余微分
- N: 境界における単位法線ベクトル場

▶ $\Theta(N) = 0$ on ∂Mを満たし，
$\mathcal{G}[\Theta] + \mathcal{H}[\Theta,\lambda]$を停留させる$(\Theta,\lambda)$を探せば良い

*J. Wenzelburger, J. Geom. Phys., **24** (1998), pp. 334--352

転位による物体の変形の問題

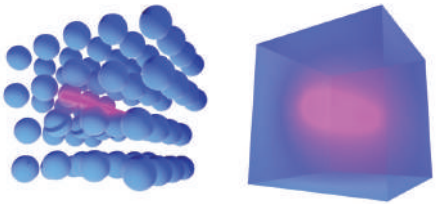




問題設定

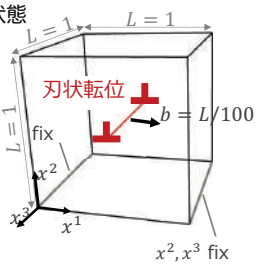
given: 参照状態，振率（転位の分布）
find ：現状態

①：振率から自然状態を決定
②：現状態を決定

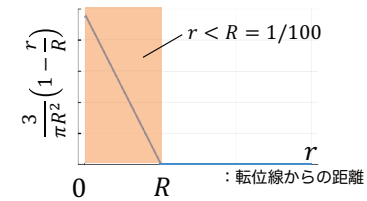


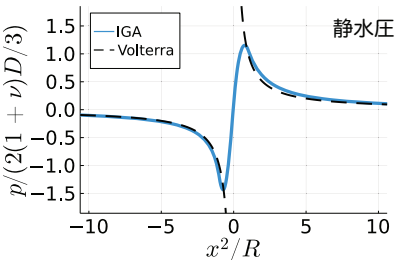
数値計算の例

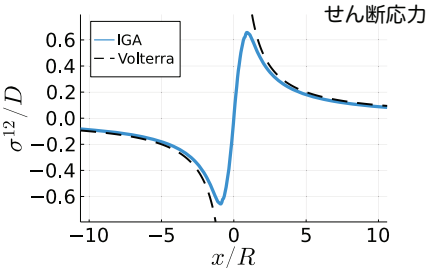
参照状態



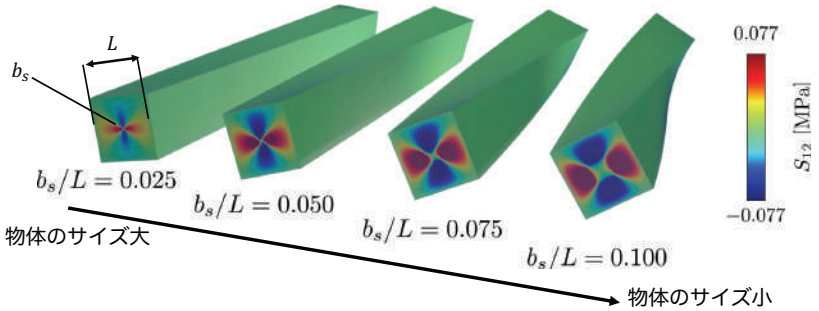
転位の分布関数







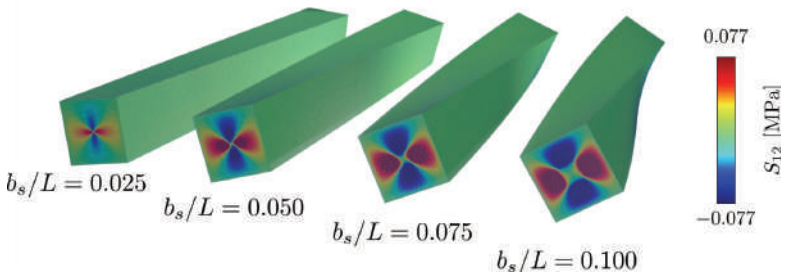
数値計算の例



- 直方体中央部にらせん転位を一本配置
- Burgesベクトルb_sと物体の代表寸法Lの比に応じてねじれ量が変化：Eshelbyツイストを再現

まとめ

- 幾何学的に厳密な定式化の下で，転位が結晶に生じさせる変形を数値計算
- 刃状転位の例：線形化されたモデルの応力場をよく再現
- らせん転位の例：Eshelbyツイストを再現



Mathematical research on real-world problems is an educational program for doctorate course students in FMSP of the University of Tokyo : Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type

Junichi NAKAGAWA

The University of Tokyo, Japan

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.

References

[GKBS96] R. W Grosse-Kunstleve, G. O Brunner, and N. J. A Sloane, Algebraic description of coordination sequences and exact topologicaldensities 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

ＩＭＩ Workshop：材料科学における幾何と代数Ⅲ

東京大学大学院数理科学研究科
FMSP社会数理実践研究
「結晶の配位数列は準多項式型」

2022年9月10日

東京大学　大学院数理科学研究科
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」
特任教授　中川淳一

Graduate School of Mathematical Sciences The University of Tokyo

自己紹介

・化学工学修士（1981年　阪大），数理科学博士（2018年　東大）

・日本製鉄株式会社
　1981年～1996年：九州製鉄所（旧：新日本製鐵　大分製鐵所）
　1998年～2018年：技術開発本部　プロセス研究所,先端技術研究所

・東京大学　大学院数理科学研究科
　2009年～2011年,2013年：非常勤講師
　2014年～2017年：連携併任非常勤講師（客員教授）
　2018年4月～2023年3月： 社会連携講座　特任教授
　「データサイエンスにおける数学イノベーション」
　データは一般的なデ ジタル化された情報だけでなく、
　先人達のものの考え方や知見を包含するよう
　データの概念を再定義　⇒　純粋数学者の参入

現場Firstの数学連携　（2000～現在）
「数学を利活用する側（企業・工学の現場）とアカデミア在籍の数学者のwin-winの関係構築」
産業界から提起された問題から数学 の問題設定が行われ、数学研究と産業技術の双方が発展するという成果を通じ、互いの専門性をリスペクトし対等の立場で議論できる信頼関係を構築

東京大学大学院数理科学研究科　FMSP社会数理実践研究とは

東京大学大学院数理科学研究科のFMSP (Leading Graduate Course Frontiers of Mathematical Science and Physics)のコース教育のひとつ

・ＦＭＳＰコース生の必須科目として2016Fyから開始

・７月に５～６企業が問題を提案

・対象は博士課程。　１班に２～３名

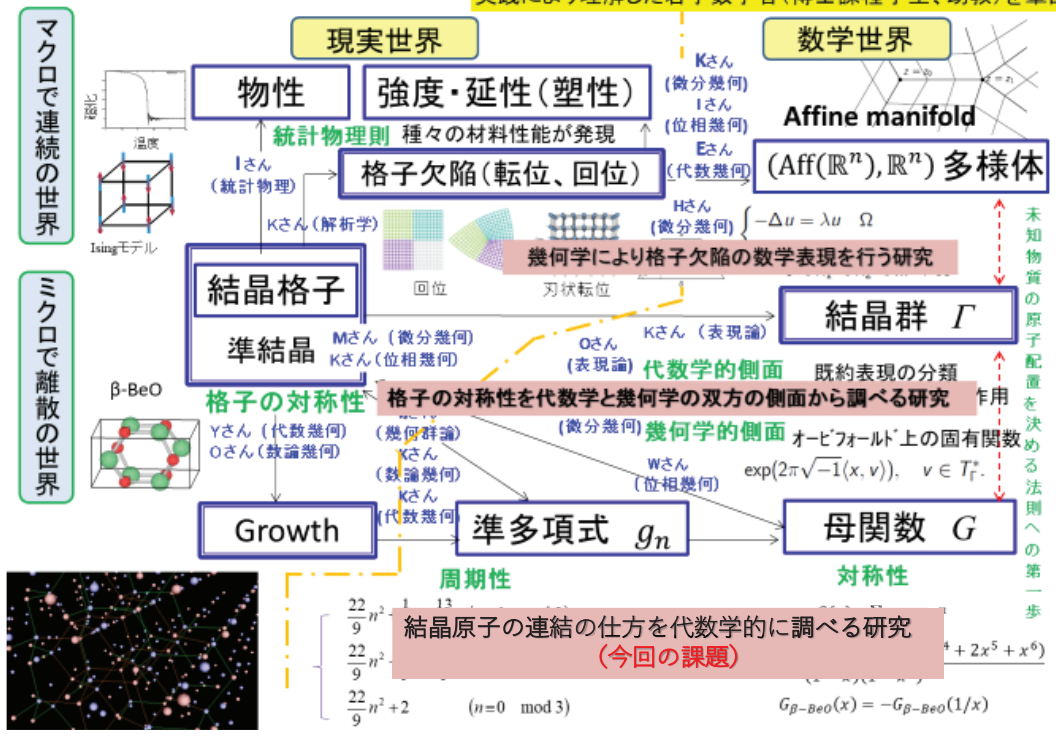
・１０月から１年間かけて活動。研究成果を、６月に中間報告、
１０月に成果報告、３月に数理科学実践レターとして論文化（査読あり）

・各企業の問題に取り組むための支援体制は、
助教２名（テーマ担当主査、 同副主査）、指導教授１～２名からなる。

当班の体制　主：中村助教（代数幾何）、副：間瀬助教（可積分）、志甫教授（数論幾何）
中川（産業数学）

物資・材料科学の根源的問題

数学研究の興味深い題材が「物質・材料分野」にあることを、
実践により理解した若手数学者（博士課程学生、助教）を輩出

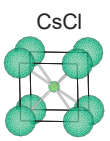


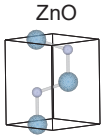
Ⅰ. 本課題の動機付け

東大　Study Group 2013

Materials Informaticsにおける数学応用

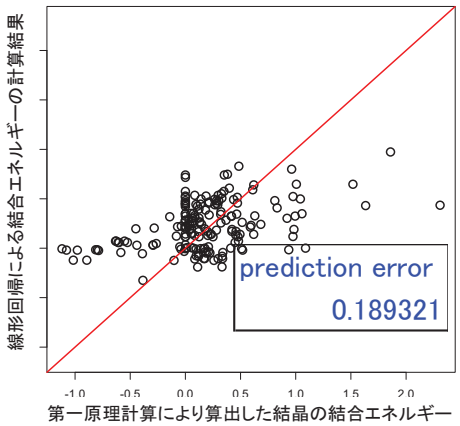
結晶の図形としての構造を如何に数値化するか





・結晶格子が異なる
・原子配置が異なる

etc.



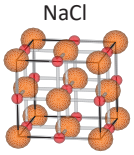
京大 材料工学・田中教授、瀬古准教授からデータご提供

第一原理計算の結果である
「結晶の結合エネルギー」を真値とし
高精度で線形回帰するための
結晶図形の記述子化

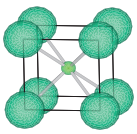
東大SG2013

結晶格子図形の表現方法

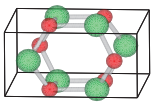
NaCl



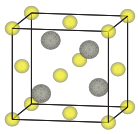
CsCl



β-BeO



ZnS

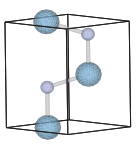


結晶格子と対称性の異なる二種原子からなる八種類の結晶

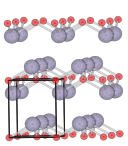
分子種	結晶格子	対称性（点群の位数）	Growth 数（Coordination Sequences）			
			1st	2nd	3rd	4th
NaCl	立方晶	48	6	18	38	66
CsCl	立方晶	48	8	26	56	98
β-BeO	正方晶	16	4	11	18	41
ZnS	立方晶	24	4	12	24	42
ZnO	六方晶	12	4	12	25	44
α-PbO	正方晶	16	4	8	12	16
TlI	直方晶	8	7	22	47	82
NiAs	六方晶	24	6	20	42	74

材料分野で使われていた配位数（1st Growth)を数学で普遍化するGrowthの提案あり

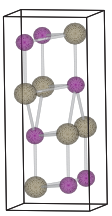
ZnO



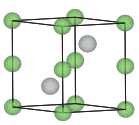
α-PbO



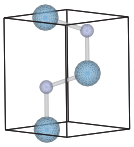
TlI

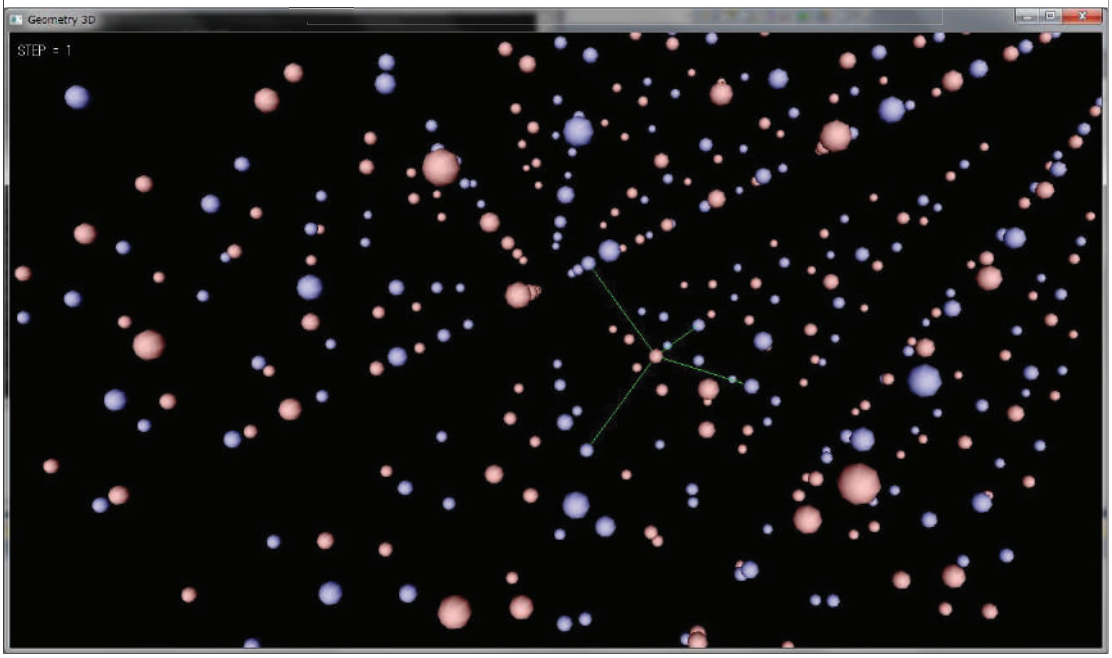


NiAs

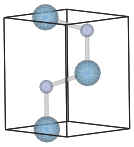


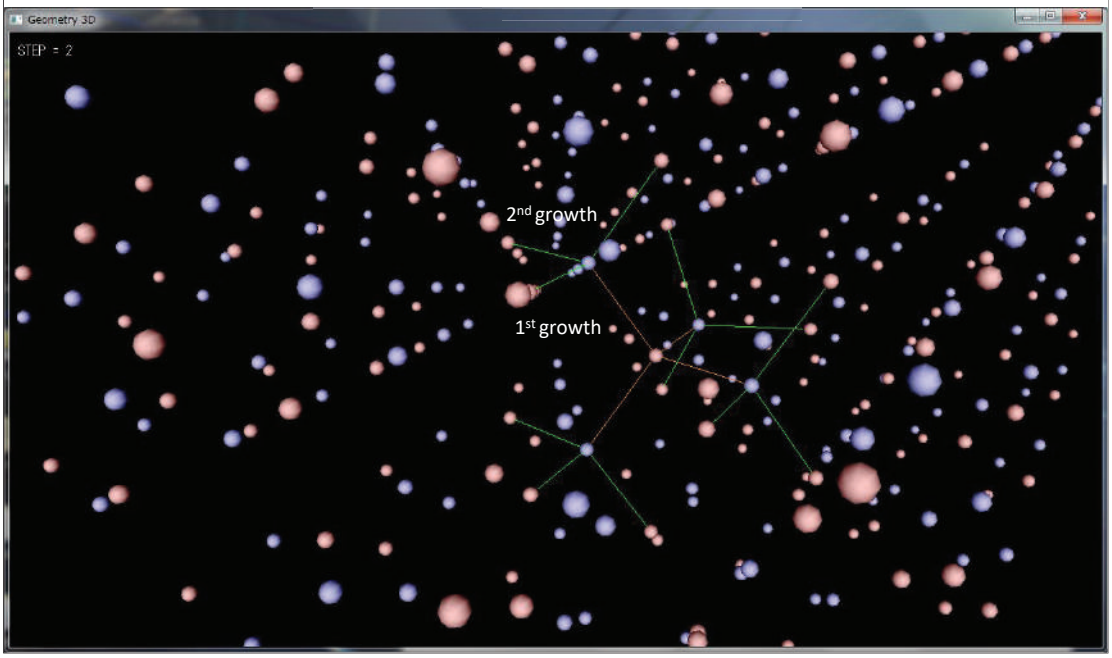
ZnO
the 1st growth=4
(corresponding to coordination number)



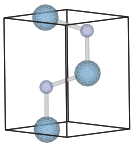


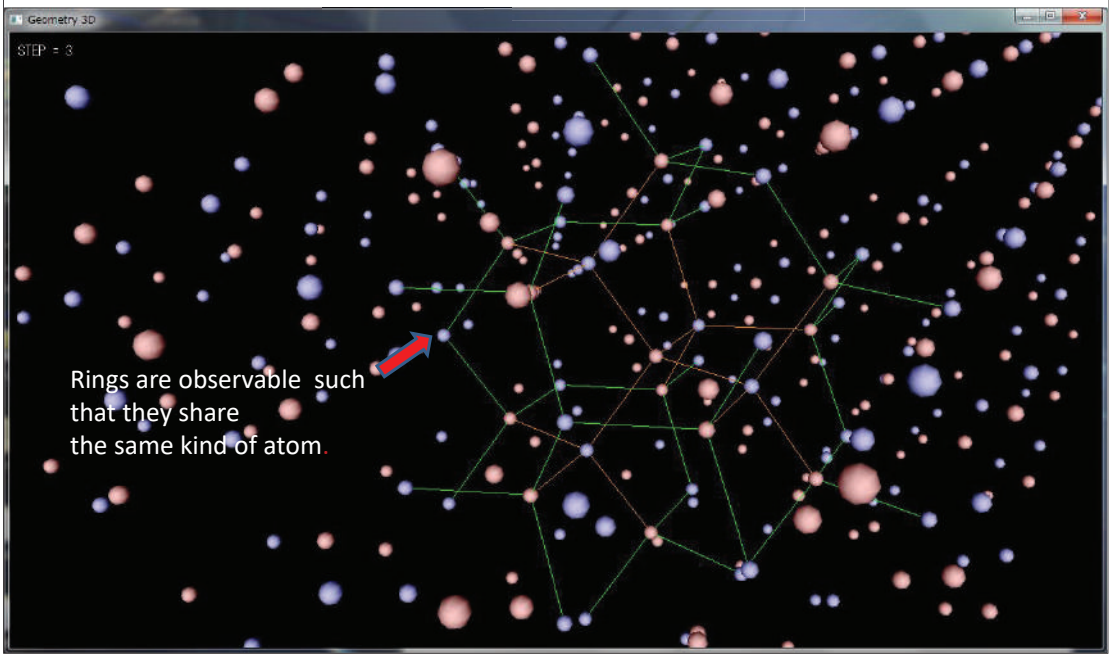
ZnO
the 2nd growth=12



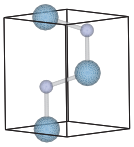


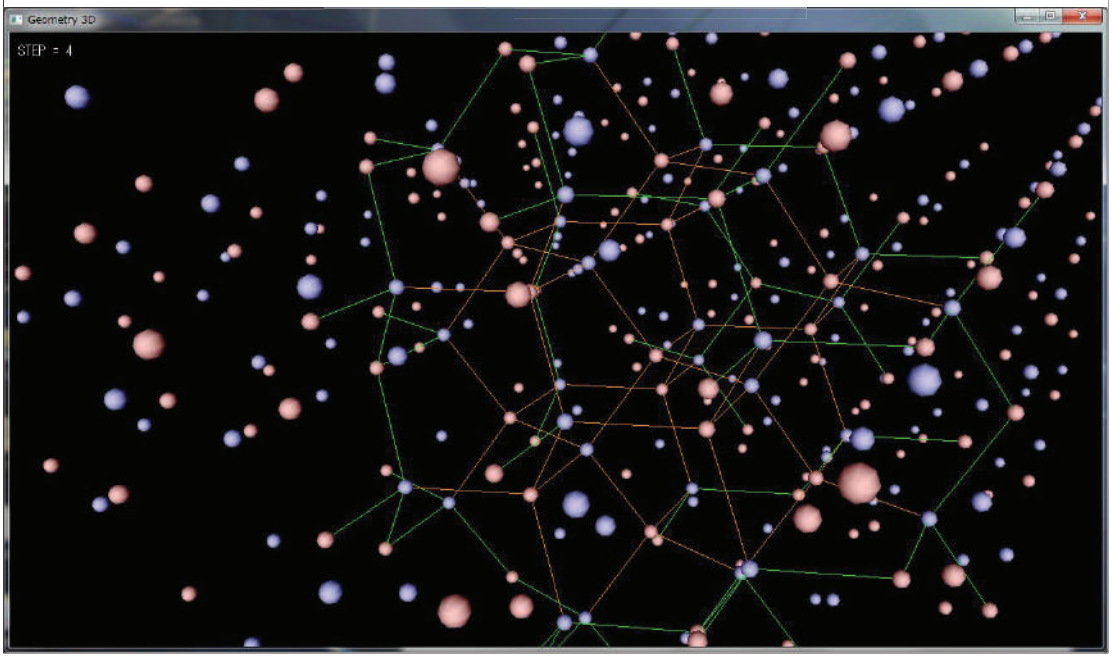
ZnO
the 3rd growth=25





ZnO
the 4th growth=44





線形回帰モデル

- This problem can be viewed as a regression problem
  - Predictors: information of atoms and crystal structure
  - Response variable: energy of compound

通常の重回帰式

regression model: $\boldsymbol{y} = \beta_1 \boldsymbol{x}_1 + \beta_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \beta_p \boldsymbol{x}_p + \varepsilon$

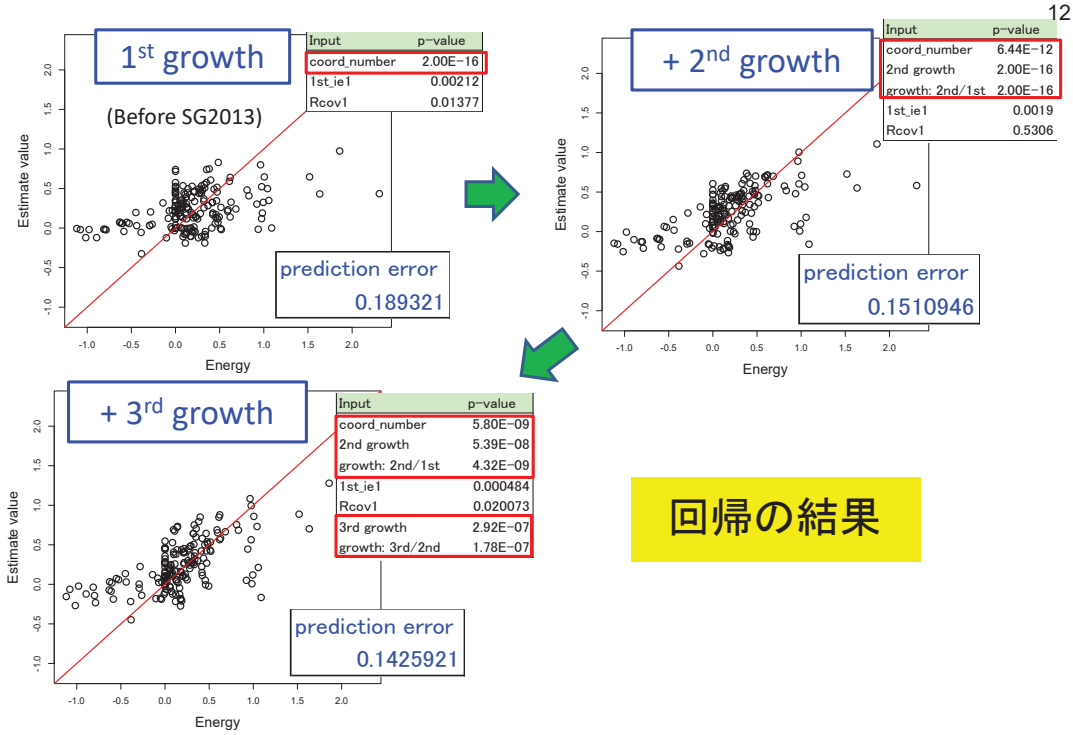
説明変数（記述子） x_i

- Atomic number
- Position of periodic table
- Electron affinity
- Electronegativity
- Ionization Energy
- Number of electrons
- Atomic mass
- Radius
- Growthを新規追加

目的変数 y

結晶の結合エネルギー

結晶図形の構造に関する記述子

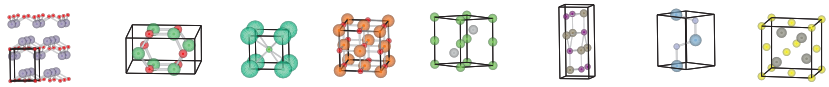


回帰の結果

いずれの場合も、Growthのp値が上位にあり、統計学的に重要な因子であることが判明

SGW2014

Counting Out of # of Growth Using Computer

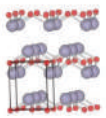


Growth	Crystals							
	α−PbO	β−BeO	CsCl	NaCl	NiAs	TlI	ZnO	ZnS
g1	4	4	8	6	6	7	4	4
g2	8	11	26	18	20	22	12	12
g3	12	24	56	38	42	47	25	24
g4	16	41	98	66	74	82	44	42
g5	20	62	152	102	114	127	67	64
g6	24	90	218	146	164	182	96	92
g7	28	122	296	198	222	247	130	124
g8	32	157	386	258	290	322	170	162
g0	36	200	488	326	366	407	214	204
g10	40	247	602	402	452	502	264	252
g11	44	296	728	486	546	607	319	304
g12	48	354	866	578	650	722	380	362
g13	52	416	1016	678	762	847	445	424
g14	56	479	1178	786	884	982	516	492
g15	60	552	1352	902	1014	1127	592	564
g16	64	629	1538	1026	1154	1282	674	642
g17	68	706	1736	1158	1302	1447	760	724
g18	72	794	1946	1298	1460	1622	852	812
g19	76	886	2168	1446	1626	1807	949	904
g20	80	977	2402	1602	1802	2002	1052	1002

コンピュータでg_{20}まで計算

我々の関心は g_∞

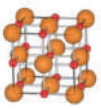
Growth of Crystal



$$g_{\alpha-PbO}(n)=4n$$



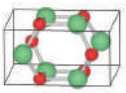
$$g_{CsCl}(n)=6n^2+2$$



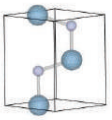
$$g_{NaCl}(n)=4n^2+2$$



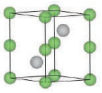
$$g_{TlI}(n)=5n^2+2$$



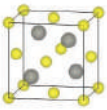
$$g_{\beta-BeO}(n)=\begin{cases}\frac{22}{9}n^2+\frac{1}{9}n+\frac{13}{9} & (n\equiv 1 \mod 3)\\ \frac{22}{9}n^2-\frac{1}{9}n+\frac{13}{9} & (n\equiv 2 \mod 3)\\ \frac{22}{9}n^2+2 & (n\equiv 0 \mod 3)\end{cases}$$



$$g_{ZnO}(n)=\begin{cases}\frac{21}{8}n^2+\frac{11}{8} & (n\equiv 1,3 \mod 4)\\ \frac{21}{8}n^2+\frac{3}{2} & (n\equiv 2 \mod 4)\\ \frac{21}{8}n^2+2 & (n\equiv 0 \mod 4)\end{cases}$$



$$g_{NiAs}(n)=\begin{cases}\frac{9}{2}n^2+\frac{3}{2} & (n\equiv 1 \mod 2)\\ \frac{9}{2}n^2+2 & (n\equiv 0 \mod 2)\end{cases}$$



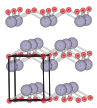
$$g_{ZnS}(n)=\begin{cases}\frac{5}{2}n^2+\frac{3}{2} & (n\equiv 1 \mod 2)\\ \frac{5}{2}n^2+2 & (n\equiv 0 \mod 2)\end{cases}$$

g_∞は（多項式を含む）準多項式

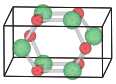
Generating Function of Growth

落合啓之, 2016

$$G(x) := 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_n x^n$$



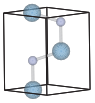
$$G_{\alpha-PbO}(x) = \frac{(1+x)^2}{(1-x)^2}$$



$$G_{\beta-BeO}(n) = \frac{(1+x)(1+2x+5x^2+6x^3+5x^4+2x^5+x^6)}{(1-x)(1-x^3)^2}$$



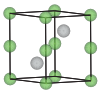
$$G_{CsCl}(x) = \frac{(1+x)(1+4x+x^2)}{(1-x)^3}$$



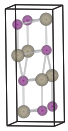
$$G_{ZnO}(x) = \frac{(1-x^3)(1+x+3x^2+x^3+x^4)}{(1-x)^3(1-x^4)}$$



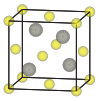
$$G_{NaCl}(n) = \frac{(1+x)^3}{(1-x)^3}$$



$$G_{NiAs}(x) = \frac{1+4x+8x^2+4x^3+x^4}{(1-x)^2(1-x^2)}$$



$$G_{TlI}(x) = \frac{(1+x)(1+3x+x^2)}{(1-x)^3}$$

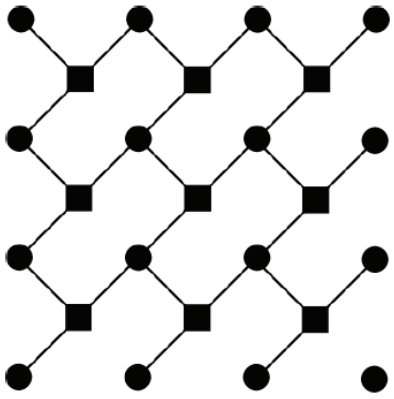


$$G_{ZnS}(x) = \frac{1+2x+4x^2+2x^3+x^4}{(1-x)^2(1-x^2)}$$

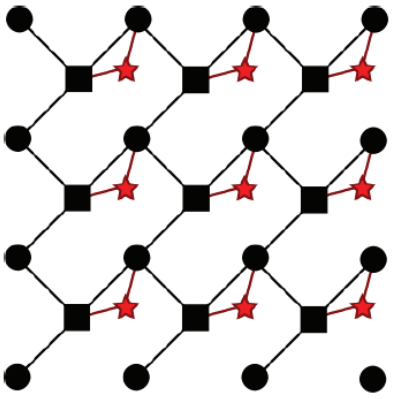
母関数の分子の 「多項式の次数の並び」 に対称性あり

対称性を崩した場合の母関数

若月さん（第1期生）の社会数理実践研究の成果



$$G(x) = 1 + 3G_1^{1,0} = \frac{1+x+x^2}{(1-x)^2}$$



$$G(x) = 1 - G_0^{2,2} - \frac{1}{2}G_0^{2,1} + \frac{9}{2}G_1^{1,0} = \frac{1+3x+3x^2+2x^3}{(1-x)^2(1+x)}$$

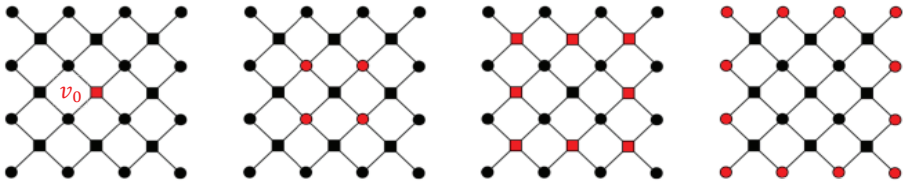
格子の対称性を崩す⇒母関数の分子の多項式の次数の対称性が乱れる。

Ⅱ．物質･材料科学の問題から数学の問題設定へ

社会数理実践研究の課題として数年に亘り取り組んできた「結晶から得られるグラフの配位数列（Growthと呼んでいたもの）が準多項式型になることの数学の証明」が、結晶学者の長年の予想に理論的根拠を与える重要な結果であると高い評価を受け、結晶学の雑誌で採択に至った。

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

ここで、グラフの配位数列とは、 固定された頂点v_0から歩数nにあるグラフの頂点の数として与えられる数列であり、これは、物質・材料分野で使われている配位数の一般化となっている。



[NSMN]

準多項式と準多項式型

定義 関数 $p\colon \mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}$ が準多項式であるとは，整数 $N > 0$ と多項式 $p_0, \ldots, p_{N-1} \in \mathbb{Q}[X]$ が存在して，以下の条件を満たすことである：

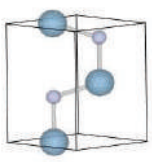
任意の $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対して，n を N で割ったあまりが i のときに $p(n) = p_i(n)$ が成り立つ．

関数 $f\colon \mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}$ が準多項式型であるとは，整数 $M > 0$ と準多項式 $p\colon \mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}$ が存在して，$n \geq M$ ならば $f(n) = p(n)$ となることである．準多項式型の特別な場合として，$N = 1$ と取れる場合に f は多項式型という．

準多項式の例 酸化亜鉛ZnOの結晶

$$s_{\mathrm{ZnO}}(n) = p(n) = \begin{cases} \frac{21}{8}n^2 + \frac{11}{8} & (n \equiv 1,3 \bmod 4) \\ \frac{21}{8}n^2 + \frac{3}{2} & (n \equiv 2 \bmod 4) \\ \frac{21}{8}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \bmod 4) \end{cases}$$

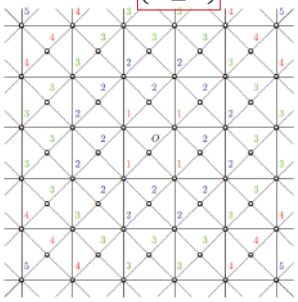
$p_1(n), p_2(n), p_3(n)$ ： i ↓ N ↓



多項式型の例 $n \geq M = 2$ に対し多項式となる。

$$f(n) = s_n = \begin{cases} 1 & (n = 0) \\ 4 & (n = 1) \\ 8n & (n \geq 2) \end{cases}$$

$p\colon \mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}$ 多項式 $p(n)$



[NSMN]

19

結晶から得られるグラフは準多項式型

※1：HのΓへの作用が
不動点になるのはHの単位元のみ

定理（Theorem 2.2）

$\Gamma = (V, E)$ をグラフとし，頂点 $v_0 \in V$ を固定する．Abel 群 H が Γ に自由に作用していて，商 Γ/H は有限グラフであるとする．このとき，関数 ※1

$$\mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}; \quad n \mapsto \#\{y \in V \mid \mathrm{dist}(v_0, y) \leq n\}$$

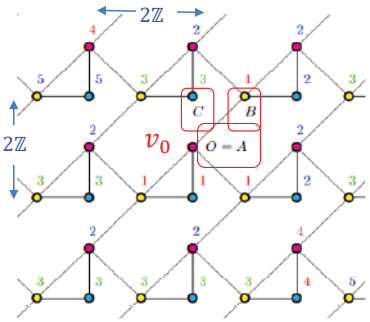
は準多項式型である．特に，その差分として得られる配位数列

$$\mathbb{Z}_{\geq 0} \to \mathbb{Z}; \quad n \mapsto \#\{y \in V \mid \mathrm{dist}(v_0, y) = n\}$$

も準多項式型である．特にこれらの数列の母関数は有理関数になる．さらに，もし商グラフ Γ/H が頂点を 1 つしか持たないならば，これらの関数は多項式型になる．

結晶グラフ
$\Gamma := (V, E)$

アーベル群
$G = \mathbb{R}^2$,
$H = 2\mathbb{Z}^2 \subset G$,



商 $V/H \approx \{A, B, C\}$ は有限グラフ

配位数列は準多項式(型)

$$s_n = \begin{cases} 1 & (n = 0), \\ \frac{9}{2}n - \frac{1}{2} & (n > 0 : \text{odd}), \\ \frac{9}{2}n - 1 & (n > 0 : \text{even}), \end{cases}$$

母関数は有理関数

$$S(x) = \frac{1+3x+3x^2+2x^3}{(1-x)^2(1+x)}$$

[NSMN]

20

予想の証明で中心的な役割を果たしたのはモノイドの理論

従来の結晶学で用いられていた手法とは大きく異なる斬新な方法であり、物質・材料分野の諸問題の根源的解決の理論基盤として発展していくという期待が大きい。

可換かつ結合的な演算「+」を持ち、 この演算に関して単位元0 を持つような代数系

[NSMN]

Definition A.1. (1) A *monoid* is a set M with a binary operation $+$ with the following three conditions:

- $(a + b) + c = a + (b + c)$ holds for $a, b, c \in M$. 加法結合則
- $a + b = b + a$ holds for any $a, b \in M$. 可換性
- There exists an element $0 \in M$ such that $0 + a = a$ holds for any $a \in M$. 単位元としての0元の存在

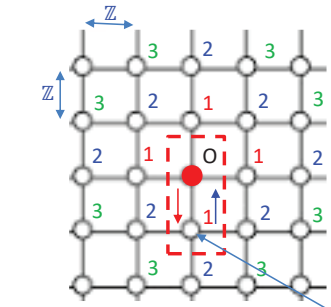
◆ $\mathbb{Z}_{\geq 0}$のみ考慮するため逆元「−」は無し

[NSMN]

21

正方形による平面充填の事例

配位数列は多項式 $s_0=1,\ s_n = 4n\ (n \geq 1)$



ひとつの生成元に着目

$M_S = \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,-(0,1))\}$

$-(0,1)$

アーベル群　$G := \mathbb{R}^2,\quad H := \mathbb{Z}^2 \subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma = (V,E)$

$V := H,\quad E := \{(v, v \pm e_i) | v \in V, i = 1,2\}, e_1 = (1,0), e_2 = (0,1),$

商グラフと代表系　$V/H \approx \{O\} := F$　← 代表系は原点のみ

次数付き有限生成モノイド※1　$M_S = M_F \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times \mathbb{Z}^2$

$M_S = \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)),(1,\pm(1,0)),(1,\pm(0,1))\}$　5個の生成元

原点0から出発し、歩数1で頂点-(0,1)に到達し、再び原点0に戻る。

※1 M_S の定義

Definition 2.8　Let S be a subset of F. We define $M_S \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ as the submonoid of $\mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ generated by the elements in the set

$$\left\{ (d,x) \in \mathbb{Z}_{>0} \times G \;\middle|\; \begin{array}{l} x \in P(\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_m) \text{ for some } \alpha_0, \ldots, \alpha_m \in S \\ \text{with } 0 \leq m \leq d \text{ and } \alpha_0 = \alpha_m. \end{array} \right\}.$$

($(1,-(0,1))$, $\alpha_0 = O$, $\alpha_m = \alpha_0$)

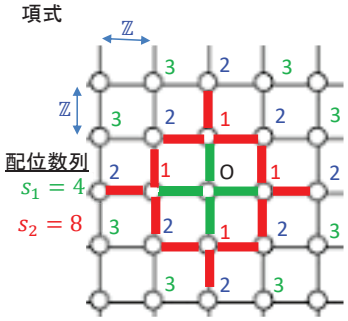
Note that M_S admits a graded monoid structure by the first projection $M_S \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$, i.e., the degree of $(d,x) \in M_S$ is defined to be d .

[NSMN]

22

正方形による平面充填の事例

配位数列は多項式 $s_0=1,\ s_n = 4n\ (n \geq 1)$



配位数列
$s_1 = 4$
$s_2 = 8$

$(M_S)_1 + (M_S)_1 \subset (M_S)_2,$

アーベル群　$G := \mathbb{R}^2,\quad H := \mathbb{Z}^2 \subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma = (V,E)$

$V := H,\quad E := \{(v, v \pm e_i) | v \in V, i = 1,2\}, e_1 = (1,0), e_2 = (0,1),$

商グラフと代表系　$V/H \approx \{O\} := F$

次数付き有限生成モノイド※1　$M_S = M_F \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times \mathbb{Z}^2$

$M_S = \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)),(1,\pm(1.0)),(1,\pm(0,1))\}$　5個の生成元

モノイドの結合的な演算「+」則

$(M_S)_d + (M_S)_{d'} \subset (M_S)_{d+d'},\qquad d, d' \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$

※1 M_S の定義

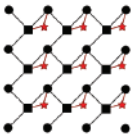
Definition 2.8　Let S be a subset of F. We define $M_S \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ as the submonoid of $\mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ generated by the elements in the set

$$\left\{ (d,x) \in \mathbb{Z}_{>0} \times G \;\middle|\; \begin{array}{l} x \in P(\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_m) \text{ for some } \alpha_0, \ldots, \alpha_m \in S \\ \text{with } 0 \leq m \leq d \text{ and } \alpha_0 = \alpha_m. \end{array} \right\}.$$

Note that M_S admits a graded monoid structure by the first projection $M_S \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$, i.e., the degree of $(d,x) \in M_S$ is defined to be d .

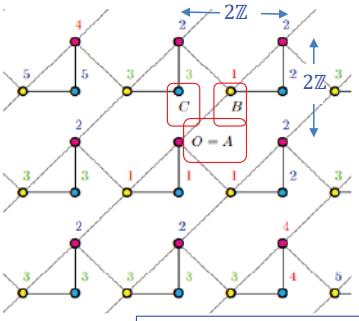
[NSMN]

商グラフの代表系が3種類の場合（p.15右側の若月グラフ）



配位数列は準多項式

$$s_n = \begin{cases} 1 & (n=0), \\ \frac{9}{2}n - \frac{1}{2} & (n>0:\text{odd}), \\ \frac{9}{2}n - 1 & (n>0:\text{even}), \end{cases}$$



アーベル群　$G := \mathbb{R}^2$,　$H := 2\mathbb{Z}^2 \subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma = (V, E)$

$V := H \sqcup (1,1) + H \sqcup (0,1) + H$

$E := \{(v_1 + h, v_2 + h), (v_2 + h, v_1 + h) | (v_1, v_2) \in E_0, h \in H\}$

$E_0 := \{(O, \pm(1,1)), (O, (1,-1)), (O, (0,-1)), (O, (-1,-1)), (O, (1,-1))\}$

商グラフと代表系　　原子の種類は3種類

$$V/H = H \cup ((1,1) + H) \cup ((0,1) + H) \approx \{A, B, C\} := F$$

次数付き有限生成モノイド　$M_S \subset M_F \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times \mathbb{Z}^2$

$M_{\{A\}} = M_{\{A,C\}} = \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0))\}$　S= $\{A\}, \{A,C\}$の生成元

$M_{\{A,B\}} = M_{\{A,B,C\}}$　S= $\{A,B\}, \{A,B,C\}$の生成元

$= \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)), (2,\pm(2,0)), (2,\pm(0,2)), (2,\pm(2,2))\}$

M_S の定義

Definition 2.8　Let S be a subset of F. We define $M_S \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ as the submonoid of $\mathbb{Z}_{\geq 0} \times G$ generated by the elements in the set

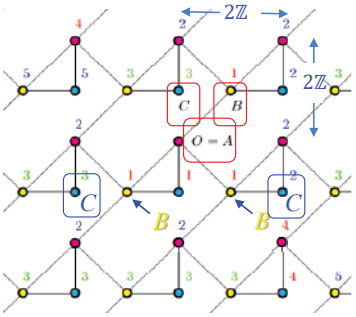
$$\left\{ (d, x) \in \mathbb{Z}_{>0} \times G \;\middle|\; \begin{array}{l} x \in P(\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_m) \text{ for some } \alpha_0, \ldots, \alpha_m \in S \\ \text{with } 0 \leq m \leq d \text{ and } \alpha_0 = \alpha_m. \end{array} \right\}.$$

Note that M_S admits a graded monoid structure by the first projection $M_S \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$, i.e., the degree of $(d, x) \in M_S$ is defined to be d.

商グラフの代表系が3種類の場合

配位数列は準多項式

$$s_n = \begin{cases} 1 & (n=0), \\ \frac{9}{2}n - \frac{1}{2} & (n>0:\text{odd}), \\ \frac{9}{2}n - 1 & (n>0:\text{even}), \end{cases}$$



アーベル群　$G := \mathbb{R}^2$,　$H := 2\mathbb{Z}^2 \subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma = (V, E)$

$V := H \sqcup (1,1) + H \sqcup (0,1) + H$

$E := \{(v_1 + h, v_2 + h), (v_2 + h, v_1 + h) | (v_1, v_2) \in E_0, h \in H\}$

$E_0 := \{(O, \pm(1,1)), (O, (1,-1)), (O, (0,-1)), (O, (-1,-1)), (O, (1,-1))\}$

商グラフと代表系

$$V/H = H \cup ((1,1) + H) \cup ((0,1) + H) \approx \{A, B, C\} := F$$

次数付き有限生成モノイド　$M_S \subset M_F \subset \mathbb{Z}_{\geq 0} \times \mathbb{Z}^2$

$M_{\{A\}} = M_{\{A,C\}} = \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0))\}$　S= $\{A\}, \{A,C\}$の生成元

$M_{\{A,B\}} = M_{\{A,B,C\}}$　S= $\{A,B\}, \{A,B,C\}$の生成元

$= \mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)), (2,\pm(2,0)), (2,\pm(0,2)), (2,\pm(2,2))\}$

$(M_{\{A,C\}})_1 + (M_{\{A,C\}})_1 \not\subset (M_{\{A,C\}})_2$　理由は、$(M_{\{A,C\}})_2$に到達するには点Bを経由する必要があるため

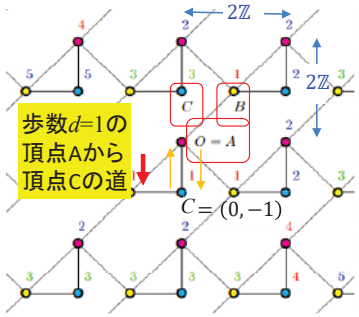
モノイドの結合的な演算「+」則が成立しない

$(M_S)_d + (M_S)_{d'} \not\subset (M_S)_{d+d'}$,　$d, d' \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$

商グラフの代表系が3種類の場合

配位数列は準多項式

$$s_n=\begin{cases}1 & (n=0),\\ \frac{9}{2}n-\frac{1}{2} & (n>0:\text{odd}),\\ \frac{9}{2}n-1 & (n>0:\text{even}),\end{cases}$$



アーベル群　$G:=\mathbb{R}^2,\quad H:=2\mathbb{Z}^2\subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma=(V,E)$

$V:=H\sqcup(1,1)+H\sqcup(0,1)+H$

$E:=\{(v_1+h,v_2+h),(v_2+h,v_1+h)|(v_1,v_2)\in E_0,h\in H\}$

$E_0:=\{(O,\pm(1,1)),(O,(1,-1)),(O,(0,-1)),(O,(-1,-1)),(O,(1,-1))\}$

商グラフと代表系

$$V/H=H\cup\big((1,1)+H\big)\cup\big((0,1)+H\big)\approx\{A,B,C\}:=F$$

次数付き有限生成モノイド　$M_S\subset M_F\subset\mathbb{Z}_{\geq 0}\times\mathbb{Z}^2$

$M_{\{A\}}=M_{\{A,C\}}=\mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0))\}$

$M_{\{A,B\}}=M_{\{A,B,C\}}$

$=\mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)),(2,\pm(2,0)),(2,\pm(0,2)),(2,\pm(2,2))\}$

次数付き有限生成モノイド上の有限生成加群　$X_S^{\alpha,\beta}$

モノイド加群演算「+」則：

$$(M_S)_d+\left(X_S^{\alpha,\beta}\right)_{d'}\subset\left(X_S^{\alpha,\beta}\right)_{d+d'},\quad d,d'\in\mathbb{Z}_{\geq 0}$$

例：$X_{\{A,C\}}^{A,C}=M_{\{A,C\}}+\mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,-1))\}$

モノイド加群

$$X_{S=\{A,C\}}^{\alpha=A,\beta=C}:=\left\{\binom{d,\alpha+x}{\in\mathbb{Z}_{\geq 0}\times V}\middle|\begin{array}{l}x\in P(\alpha_0,\alpha_1,\cdots,\alpha_m)\text{ with }0\leq m\leq d,\\ \alpha_0=\alpha,\alpha_m=\beta,\text{ and }S=\{\alpha_0,\alpha_1\cdots,\alpha_m\}\end{array}\right\}$$

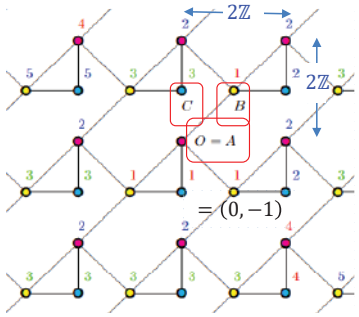
モノイド

$$M_{S=\{A,C\}}:=\left\{(d,x)\in\mathbb{Z}_{\geq 0}\times G\middle|\begin{array}{c}x\in P(\alpha_0,\alpha_1\cdots,\alpha_m)\text{ for some }\alpha_0,\cdots,\alpha_m\in S\\ \text{with }0\leq m\leq d,\,and\;\alpha_0=\alpha_m.\end{array}\right\}=\mathbb{Z}_{\geq 0}\{1,(0,0)\}$$

商グラフの代表系が3種類の場合

配位数列は準多項式

$$s_n=\begin{cases}1 & (n=0),\\ \frac{9}{2}n-\frac{1}{2} & (n>0:\text{odd}),\\ \frac{9}{2}n-1 & (n>0:\text{even}),\end{cases}$$



アーベル群　$G:=\mathbb{R}^2,\quad H:=2\mathbb{Z}^2\subset G$

結晶のグラフ　$\Gamma=(V,E)$

$V:=H\sqcup(1,1)+H\sqcup(0,1)+H$

$E:=\{(v_1+h,v_2+h),(v_2+h,v_1+h)|(v_1,v_2)\in E_0,h\in H\}$

$E_0:=\{(O,\pm(1,1)),(O,(1,-1)),(O,(0,-1)),(O,(-1,-1)),(O,(1,-1))\}$

商グラフと代表系

$$V/H=H\cup\big((1,1)+H\big)\cup\big((0,1)+H\big)\approx\{A,B,C\}:=F$$

次数付き有限生成モノイド　$M_S\subset M_F\subset\mathbb{Z}_{\geq 0}\times\mathbb{Z}^2$

$M_{\{A\}}=M_{\{A,C\}}=\mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0))\}$　モノイドの生成元

$M_{\{A,B\}}=M_{\{A,B,C\}}$

$=\mathbb{Z}_{\geq 0}\{(1,(0,0)),(2,\pm(2,0)),(2,\pm(0,2)),(2,\pm(2,2))\}$

次数付き有限生成モノイド上の有限生成加群　$X_S^{\alpha,\beta}$: $X_{\{A\}}^{A,A}, X_{\{A,B\}}^{A,A}\ X_{\{A,B\}}^{A,B}, X_{\{A,C\}}^{A,A}, X_{\{A,C\},}^{A,C}\ X_{\{A,B,C\},}^{A,A}\ X_{\{A,B,C\}}^{A,B}, X_{\{A,B,C\}}^{A,C}$

$X_{\{A\}}^{A,A}=M_{\{A\}}+\{(0,(0,0))\},\qquad X_{\{A,C\}}^{A,A}=M_{\{A,C\}}+\{(2,(0,0))\},\qquad X_{\{A,C\}}^{A,C}=M_{\{A,C\}}+\{(1,(0,-1))\}$

$X_{\{A,B\}}^{A,B}=M_{\{A,B\}}+\{(1,\pm(1,1)),(1,(1,-1))\}$

$X_{\{A,B,C\}}^{A,B}=M_{\{A,B,C\}}+\{(2,(-1,-1)),(3,(1,\pm 1)),(4,(3,\pm 1)),(4,(3,3))\}$　モノイド加群の生成元

$X_{\{A,B,C\}}^{A,C}=M_{\{A,B,C\}}+\{(2,(0,-1)),(2,(2,\pm 1)),(3,(0,1)),(3,(0,-3)),(3,(-2,-1)),(3,(-2,-3)),\}$　他、総計8個

[NSMN] 証明の骨子

包含排除原理

$$(X)_i = \bigcup_S (X_S)_i \quad \rightsquigarrow \quad \#(X)_i = \sum_{\Lambda \subset P(F)} (-1)^{\#\Lambda+1} \#\left(\bigcap_{S\in\Lambda} (X_S)_i \right) \quad \rightsquigarrow \quad \text{各}\Lambda \subset P(F)\text{について } \#\left(\bigcap_{S\in\Lambda} (X_S)_i \right)$$

P: F のベキ集合　　が準多項式型であることを示せばよい。

Proof of Theorem 2.2. For an element $\alpha \in F$, put $\Lambda_\alpha := \{S \subset F \mid 0, \alpha \in S\}$ and write $\mathcal{P}(\Lambda_\alpha)$ for its power set. Then Lemma 2.8 and the inclusion-exclusion principle imply

$$\begin{aligned} \#\{x \in V \mid \mathrm{dist}(0,x) \le d\} &= \sum_{\alpha\in F} \#(X^{0,\alpha})_d \\ &= \sum_{\alpha\in F} \#\Big(\bigcup_{S\in\Lambda_\alpha} (X_S^{0,\alpha})_d \Big) \\ &= \sum_{\alpha\in F} \sum_{\Lambda\in\mathcal{P}(\Lambda_\alpha)} (-1)^{\#\Lambda+1} \#\Big(\bigcap_{S\in\Lambda} (X_S^{0,\alpha})_d \Big). \end{aligned}$$

結晶グラフの配位数列

次数付き有限生成モノイドの
次数付き有限生成モノイド加群

$\bigcap_{S\in\Lambda} M_S$ から有限生成

Hence it is enough to show that the function

$$\varphi_{\alpha,\Lambda} : \mathbb{Z}_{\ge 0} \longrightarrow \mathbb{Z}; \quad d \mapsto \# \bigcap_{S\in\Lambda} (X_S^{0,\alpha})_d$$

そのヒルベルト関数φは準多項式型

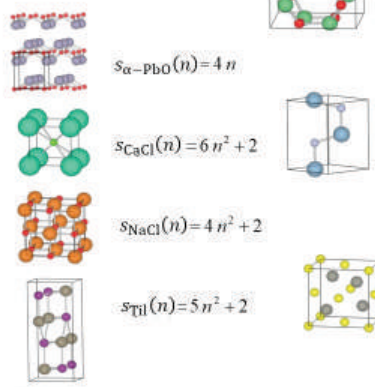
is of quasi-polynomial type.

Bruns & Gubeladze, 2009, Theorems 6.38 and 6.39

Ⅲ. 現実の結晶の満たすべき配位数列の数学的条件とは？

現実の結晶の配位数列の計算例を見ると準多項式型より強い数学的条件である準多項式になっている場合が多い。

現実の結晶達の配位数列

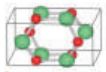


$s_{\alpha\text{-PbO}}(n) = 4n$

$s_{\mathrm{CaCl}}(n) = 6n^2 + 2$

$s_{\mathrm{NaCl}}(n) = 4n^2 + 2$

$s_{\mathrm{TiI}}(n) = 5n^2 + 2$



$s_{\beta\text{-BeO}}(n)$

$$\begin{cases} \frac{22}{9}n^2 + \frac{1}{9}n + \frac{13}{9} & (n=1 \mod 3) \\ \frac{22}{9}n^2 - \frac{1}{9}n + \frac{13}{9} & (n=2 \mod 3) \\ \frac{22}{9}n^2 + 2 & (n=0 \mod 3) \end{cases}$$

$s_{\mathrm{ZnO}}(n)$

$$\begin{cases} \frac{21}{8}n^2 + \frac{11}{8} & (n \equiv 1,3 \bmod 4) \\ \frac{21}{8}n^2 + \frac{3}{2} & (n \equiv 2 \bmod 4) \\ \frac{21}{8}n^2 + 2 & (n \equiv 0 \bmod 4) \end{cases}$$

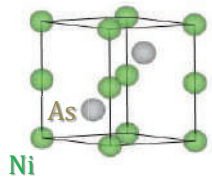
$s_{\mathrm{ZnS}}(n) =$

$$\begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n=1 \mod 2) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n=0 \mod 2) \end{cases}$$

[問題設定]
数学上の結晶の定義「格子の離散部分群Γ+有限部分集合F」に、どのような数学的な条件を加えると、配位数列が準多項式型から準多項式になるだろうか？

スタートする原子で配位数列が異なるケース

NiAs



・Ni原子からスタート

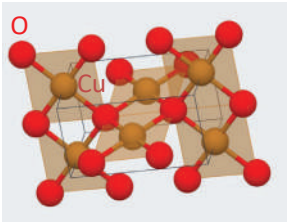
$$s_n = \begin{cases} \frac{9}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n = 1 \mod 2) \\ \frac{9}{2}n^2 + 2 & (n = 0 \mod 2) \end{cases}$$

・As原子からスタート

$$s_n = \begin{cases} \frac{9}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n = \text{odd} \mod 4) \\ \frac{9}{2}n^2 & (n = 2 \mod 4) \\ \frac{9}{2}n^2 + 2 & (n = 0 \mod 4) \end{cases}$$

配位数列が準多項式型になるるケース

CuO（Ⅱ）



・O原子からスタート

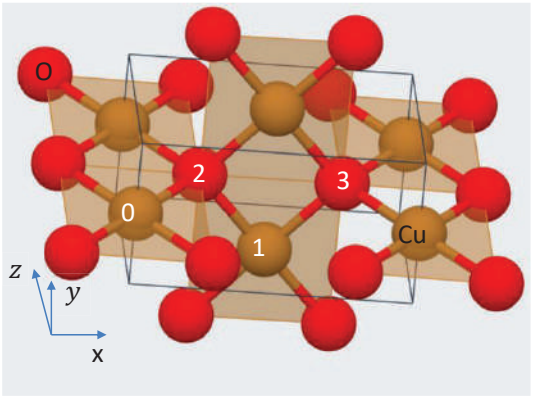
$$s_n = \begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n = \text{odd}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n = 0 \mod 4) \\ \frac{5}{2}n^2 & (n = 2 \mod 4) \end{cases}$$

・Cu原子からスタート

$$s_n = \begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} & (n = \text{odd}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 & (n = \text{even}, n \geq 4) \end{cases}$$

SGW2022

CuO



計算方法

$\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}^3$

基本領域内にある4種類の原子と座標

Cu	(0,(0,0,0))
Cu	(1,(0,0,0))
O	(2,(0,0,0))
O	(3,(0,0,0))

0,1,2,3を平行移動するとcoverできる

「0」のCu原子と繋がっている4個のO原子
(3,(-1,0,-1)),(3,(-1,0,0)),(2,(0,0,0)),(2,(0,0,-1))

「1」のCu原子と繋がっている4個のO原子
(2,(0,0,0)),(2,(0,-1,0)),(3,(0,0,0)),(3,(0,-1,0))

「2」のO原子と繋がっている4個のCu原子
(0,(0,0,0)),(0,(0,0,1)),(1,(0,0,0)),(1,(0,1,0))

「3」のO原子と繋がっている4個のCu原子
(1,(0,0,0)),(1,(0,1,0)),(0,(1,0,0)),(0,(1,0,1))

SGW2022

計算結果

CuO　Oスタート

$$s_n = \begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} \ (n = \text{odd}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 \ (n = 0 \mod 4) \\ \frac{5}{2}n^2 \ (n = 2 \mod 4) \end{cases}$$

準多項式

cs20まで

s0=1	
s1=4	s11=304
s2=10	s12=362
s3=24	s13=424
s4=42	s14=490
s5=64	s15=564
s6=90	s16=642
s7=124	s17=724
s8=162	s18=810
s9=204	s19=904
s10=250	s20=1002

母関数＝ $$\frac{x^6 + 2x^5 + 3x^4 + 8x^3 + 3x^2 + 2x + 1}{(1-x)^3(1+x)(1+x^2)}$$

SGW2022

計算結果

CuO　Cuスタート

$$s_n = \begin{cases} \frac{5}{2}n^2 + \frac{3}{2} \ (n = \text{odd}) \\ \frac{5}{2}n^2 + 2 \ (n = \text{even}, n \geq 4) \end{cases}$$

準多項式型

cs20まで

s0=1	
s1=4	s11=304
s2=10	s12=362
s3=24	s13=424
s4=42	s14=492
s5=64	s15=564
s6=92	s16=642
s7=124	s17=724
s8=162	s18=812
s9=204	s19=904
s10=252	s20=1002

母関数＝ $$\frac{2x^6 - x^5 + x^4 + 6x^3 + 2x^2 + 2x + 1}{(1-x)^3(1+x)}$$

母関数の分子の次数の係数の対称性も乱れる

$$= -2x^2 + \frac{x^4 + 2x^3 + 4x^2 + 2x + 1}{(1-x)^3(1+x)}$$

総括

物質・材料科学の問題 ⇒ 数学の問題 ＋数学者の叡智 ⇒ 現実問題への拡がり

①産業界＆材料工学からの問題提起（東大SG2013)
結晶エネルギーの重要な記述子が配位数列（Growth）であることが判明

②現実結晶の配位数列は準多項式（SGW2014)
現実の結晶の配位数列が準多項式になっていることが判明

③配位数列の数学的性質の研究に着手（東大FMSP社会数理実践研究　2016～)
物質・材料の問題から数学の問題設定へ

④ [NSMN]Coordination sequences of crystals are of quasi-polynomial type, Acta Cryst A. (2021).
結晶グラフの配位数列が準多項式型であることが数学的に証明され、結晶学の雑誌に出版

⑤配位数列の計算方法に焦点をあてた数学研究に着手（東大SG2022.1)
上記論文でFuture Workにしていた研究に着手

⑥現実の結晶で実現されている配位数列の数学的性質のStudy (SGW2022)
[問題設定] 現実の結晶の配位数列は準多項式になっている場合が多い。
どのような数学的な条件を加えると配位数列が準多項式型から準多項式になるだろうか？

成果
Gr.1：結晶グラフの配位数列計算のコンピュータコードを実装し現実の結晶の配位数列の計算が出来るようになった。CuOは準多項式型であり、基本領域の原子数は2はでなく 4
Gr.2：:配位数列の周期性が現れるまでのネットワーク構造の満たすべき条件を数学的に分析。
時間変化するネットワーク構造（非平衡状態に対応？）の数学研究への展開を期待

Future　work　⑦結晶構造（原子の配置）決定に関する指導原理へ
新規物質発見の指導原理、ネットワーク構造表現、他、物質・材料分野や産業への応用展開
を見据えた数学研究の発展・進化を期待！

ご清聴ありがとうございました。

MI レクチャーノートシリーズ刊行にあたり

本レクチャーノートシリーズは、文部科学省 21 世紀 COE プログラム「機能数理学の構築と展開」(H15-19 年度) において作成した COE Lecture Notes の続刊であり、文部科学省大学院教育改革支援プログラム「産業界が求める数学博士と新修士養成」(H19-21 年度) および、同グローバル COE プログラム「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」(H20-24 年度) において行われた講義の講義録として出版されてきた。平成 23 年 4 月のマス・フォア・インダストリ研究所 (IMI) 設立と平成 25 年 4 月の IMI の文部科学省共同利用・共同研究拠点として「産業数学の先進的･基礎的共同研究拠点」の認定を受け、今後、レクチャーノートは、マス・フォア・インダストリに関わる国内外の研究者による講義の講義録、会議録等として出版し、マス・フォア・インダストリの本格的な展開に資するものとする。

2022 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長　梶原 健司

2020年度採択分　九州大学マス･フォア･インダストリ研究所 共同利用研究集会

材料科学における幾何と代数 III

発　行　2022年12月 7 日
編　集　松谷茂樹，落合啓之，井上和俊，小磯深幸，佐伯 修，白井朋之，垂水竜一，
内藤久資，中川淳一，濵田裕康，松江 要，加葉田雄太朗
発　行　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
九州大学大学院数理学府
〒819-0395 福岡市西区元岡744
九州大学数理・IMI 事務室
TEL 092-802-4402　FAX 092-802-4405
URL https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/

印　刷　城島印刷株式会社
〒810-0012 福岡市中央区白金 2 丁目 9 番 6 号
TEL 092-531-7102　FAX 092-524-4411

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
COE Lecture Note	Mitsuhiro T. NAKAO Kazuhiro YOKOYAMA	Computer Assisted Proofs - Numeric and Symbolic Approaches - 199pages	August 22, 2006
COE Lecture Note	M.J.Shai HARAN	Arithmetical Investigations - Representation theory, Orthogonal polynomials and Quantum interpolations- 174pages	August 22, 2006
COE Lecture Note Vol.3	Michal BENES Masato KIMURA Tatsuyuki NAKAKI	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2005 155pages	October 13, 2006
COE Lecture Note Vol.4	宮田　健治	辺要素有限要素法による磁界解析 - 機能数理学特別講義 21pages	May 15, 2007
COE Lecture Note Vol.5	Francois APERY	Univariate Elimination Subresultants - Bezout formula, Laurent series and vanishing conditions - 89pages	September 25, 2007
COE Lecture Note Vol.6	Michal BENES Masato KIMURA Tatsuyuki NAKAKI	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2006 209pages	October 12, 2007
COE Lecture Note Vol.7	若山　正人 中尾　充宏	九州大学産業技術数理研究センター キックオフミーティング 138pages	October 15, 2007
COE Lecture Note Vol.8	Alberto PARMEGGIANI	Introduction to the Spectral Theory of Non-Commutative Harmonic Oscillators 233pages	January 31, 2008
COE Lecture Note Vol.9	Michael I.TRIBELSKY	Introduction to Mathematical modeling 23pages	February 15, 2008
COE Lecture Note Vol.10	Jacques FARAUT	Infinite Dimensional Spherical Analysis 74pages	March 14, 2008
COE Lecture Note Vol.11	Gerrit van DIJK	Gelfand Pairs And Beyond 60pages	August 25, 2008
COE Lecture Note Vol.12	Faculty of Mathematics, Kyushu University	Consortium “MATH for INDUSTRY” First Forum 87pages	September 16, 2008
COE Lecture Note Vol.13	九州大学大学院 数理学研究院	プロシーディング「損保数理に現れる確率モデル」 ― 日新火災・九州大学 共同研究2008年11月 研究会 ― 82pages	February 6, 2009

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.14	Michal Beneš, Tohru Tsujikawa Shigetoshi Yazaki	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2008 77pages	February 12, 2009
COE Lecture Note Vol.15	Faculty of Mathematics, Kyushu University	International Workshop on Verified Computations and Related Topics 129pages	February 23, 2009
COE Lecture Note Vol.16	Alexander Samokhin	Volume Integral Equation Method in Problems of Mathematical Physics 50pages	February 24, 2009
COE Lecture Note Vol.17	矢嶋　　徹 及川　正行 梶原　健司 辻　　英一 福本　康秀	非線形波動の数理と物理 66pages	February 27, 2009
COE Lecture Note Vol.18	Tim Hoffmann	Discrete Differential Geometry of Curves and Surfaces 75pages	April 21, 2009
COE Lecture Note Vol.19	Ichiro Suzuki	The Pattern Formation Problem for Autonomous Mobile Robots —Special Lecture in Functional Mathematics— 23pages	April 30, 2009
COE Lecture Note Vol.20	Yasuhide Fukumoto Yasunori Maekawa	Math-for-Industry Tutorial: Spectral theories of non-Hermitian operators and their application 184pages	June 19, 2009
COE Lecture Note Vol.21	Faculty of Mathematics, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” Casimir Force, Casimir Operators and the Riemann Hypothesis 95pages	November 9, 2009
COE Lecture Note Vol.22	Masakazu Suzuki Hoon Hong Hirokazu Anai Chee Yap Yousuke Sato Hiroshi Yoshida	The Joint Conference of ASCM 2009 and MACIS 2009: Asian Symposium on Computer Mathematics Mathematical Aspects of Computer and Information Sciences 436pages	December 14, 2009
COE Lecture Note Vol.23	荒川　恒男 金子　昌信	多重ゼータ値入門 111pages	February 15, 2010
COE Lecture Note Vol.24	Fulton B.Gonzalez	Notes on Integral Geometry and Harmonic Analysis 125pages	March 12, 2010
COE Lecture Note Vol.25	Wayne Rossman	Discrete Constant Mean Curvature Surfaces via Conserved Quantities 130pages	May 31, 2010
COE Lecture Note Vol.26	Mihai Ciucu	Perfect Matchings and Applications 66pages	July 2, 2010

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.27	九州大学大学院 数理学研究院	Forum “Math-for-Industry” and Study Group Workshop Information security, visualization, and inverse problems, on the basis of optimization techniques　100pages	October 21, 2010
COE Lecture Note Vol.28	ANDREAS LANGER	MODULAR FORMS, ELLIPTIC AND MODULAR CURVES LECTURES AT KYUSHU UNIVERSITY 2010　62pages	November 26, 2010
COE Lecture Note Vol.29	木田　雅成 原田　昌晃 横山　俊一	Magma で広がる数学の世界　157pages	December 27, 2010
COE Lecture Note Vol.30	原　　隆 松井　　卓 廣島　文生	Mathematical Quantum Field Theory and Renormalization Theory 201pages	January 31, 2011
COE Lecture Note Vol.31	若山　正人 福本　康秀 高木　　剛 山本　昌宏	Study Group Workshop 2010 Lecture & Report　128pages	February 8, 2011
COE Lecture Note Vol.32	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2011 “TSUNAMI-Mathematical Modelling” Using Mathematics for Natural Disaster Prediction, Recovery and Provision for the Future　90pages	September 30, 2011
COE Lecture Note Vol.33	若山　正人 福本　康秀 高木　　剛 山本　昌宏	Study Group Workshop 2011 Lecture & Report　140pages	October 27, 2011
COE Lecture Note Vol.34	Adrian Muntean Vladimír Chalupecký	Homogenization Method and Multiscale Modeling　72pages	October 28, 2011
COE Lecture Note Vol.35	横山　俊一 夫　　紀恵 林　　卓也	計算機代数システムの進展　210pages	November 30, 2011
COE Lecture Note Vol.36	Michal Beneš Masato Kimura Shigetoshi Yazaki	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2010 107pages	January 27, 2012
COE Lecture Note Vol.37	若山　正人 高木　　剛 Kirill Morozov 平岡　裕章 木村　正人 白井　朋之 西井　龍映 栄　伸一郎 穴井　宏和 福本　康秀	平成23年度 数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワークショップ　拡がっていく数学　～期待される “見えない力” ～ 154pages	February 20, 2012

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.38	Fumio Hiroshima Itaru Sasaki Herbert Spohn Akito Suzuki	Enhanced Binding in Quantum Field Theory 204pages	March 12, 2012
COE Lecture Note Vol.39	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Multiscale Mathematics: Hierarchy of collective phenomena and interrelations between hierarchical structures 180pages	March 13, 2012
COE Lecture Note Vol.40	井ノ口順一 太田　泰広 筧　三郎 梶原　健司 松浦　望	離散可積分系・離散微分幾何チュートリアル2012 152pages	March 15, 2012
COE Lecture Note Vol.41	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2012 “Information Recovery and Discovery” 91pages	October 22, 2012
COE Lecture Note Vol.42	佐伯　修 若山　正人 山本　昌宏	Study Group Workshop 2012 Abstract, Lecture & Report 178pages	November 19, 2012
COE Lecture Note Vol.43	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Combinatorics and Numerical Analysis Joint Workshop 103pages	December 27, 2012
COE Lecture Note Vol.44	萩原　学	モダン符号理論からポストモダン符号理論への展望 107pages	January 30, 2013
COE Lecture Note Vol.45	金山　寛	Joint Research Workshop of Institute of Mathematics for Industry (IMI), Kyushu University “Propagation of Ultra-large-scale Computation by the Domain-decomposition-method for Industrial Problems (PUCDIP 2012)” 121pages	February 19, 2013
COE Lecture Note Vol.46	西井　龍映 栄　伸一郎 岡田　勘三 落合　啓之 小磯　深幸 斎藤　新悟 白井　朋之	科学・技術の研究課題への数学アプローチ ―数学モデリングの基礎と展開― 325pages	February 28, 2013
COE Lecture Note Vol.47	SOO TECK LEE	BRANCHING RULES AND BRANCHING ALGEBRAS FOR THE COMPLEX CLASSICAL GROUPS 40pages	March 8, 2013
COE Lecture Note Vol.48	溝口　佳寛 脇　隼人 平坂　貢 谷口　哲至 島袋　修	博多ワークショップ「組み合わせとその応用」 124pages	March 28, 2013

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.49	照井　章 小原　功任 濱田　龍義 横山　俊一 穴井　宏和 横田　博史	マス・フォア・インダストリ研究所　共同利用研究集会 II 数式処理研究と産学連携の新たな発展　137pages	August 9, 2013
MI Lecture Note Vol.50	Ken Anjyo Hiroyuki Ochiai Yoshinori Dobashi Yoshihiro Mizoguchi Shizuo Kaji	Symposium MEIS2013: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis　154pages	October 21, 2013
MI Lecture Note Vol.51	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2013 “The Impact of Applications on Mathematics”　97pages	October 30, 2013
MI Lecture Note Vol.52	佐伯　修 岡田　勘三 髙木　剛 若山　正人 山本　昌宏	Study Group Workshop 2013 Abstract, Lecture & Report 142pages	November 15, 2013
MI Lecture Note Vol.53	四方　義啓 櫻井　幸一 安田　貴徳 Xavier Dahan	平成25年度　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会　安全・安心社会基盤構築のための代数構造 ～サイバー社会の信頼性確保のための数理学～　158pages	December 26, 2013
MI Lecture Note Vol.54	Takashi Takiguchi Hiroshi Fujiwara	Inverse problems for practice, the present and the future　93pages	January 30, 2014
MI Lecture Note Vol.55	栄　伸一郎 溝口　佳寛 脇　隼人 渋田　敬史	Study Group Workshop 2013 数学協働プログラム Lecture & Report 98pages	February 10, 2014
MI Lecture Note Vol.56	Yoshihiro Mizoguchi Hayato Waki Takafumi Shibuta Tetsuji Taniguchi Osamu Shimabukuro Makoto Tagami Hirotake Kurihara Shuya Chiba	Hakata Workshop 2014 ~ Discrete Mathematics and its Applications ~　141pages	March 28, 2014
MI Lecture Note Vol.57	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2014: “Applications + Practical Conceptualization + Mathematics = fruitful Innovation”　93pages	October 23, 2014
MI Lecture Note Vol.58	安生健一 落合啓之	Symposium MEIS2014: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis　135pages	November 12, 2014

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.59	西井　龍映 岡田　勘三 梶原　健司 髙木　　剛 若山　正人 脇　　隼人 山本　昌宏	Study Group Workshop 2014 数学協働プログラム Abstract, Lecture & Report　196pages	November 14, 2014
MI Lecture Note Vol.60	西浦　　博	平成26年度九州大学 IMI 共同利用研究・研究集会（I） 感染症数理モデルの実用化と産業及び政策での活用のための新たな展開　120pages	November 28, 2014
MI Lecture Note Vol.61	溝口　佳寛 Jacques Garrigue 萩原　　学 Reynald Affeldt	研究集会 高信頼な理論と実装のための定理証明および定理証明器 Theorem proving and provers for reliable theory and implementations (TPP2014)　138pages	February 26, 2015
MI Lecture Note Vol.62	白井　朋之	Workshop on “β-transformation and related topics”　59pages	March 10, 2015
MI Lecture Note Vol.63	白井　朋之	Workshop on “Probabilistic models with determinantal structure” 107pages	August 20, 2015
MI Lecture Note Vol.64	落合　啓之 土橋　宜典	Symposium MEIS2015: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis　124pages	September 18, 2015
MI Lecture Note Vol.65	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2015 “The Role and Importance of Mathematics in Innovation”　74pages	October 23, 2015
MI Lecture Note Vol.66	岡田　勘三 藤澤　克己 白井　朋之 若山　正人 脇　　隼人 Philip Broadbridge 山本　昌宏	Study Group Workshop 2015 Abstract, Lecture & Report 156pages	November 5, 2015
MI Lecture Note Vol.67	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	IMI-La Trobe Joint Conference “Mathematics for Materials Science and Processing” 66pages	February 5, 2016
MI Lecture Note Vol.68	古庄　英和 小谷　久寿 新甫　洋史	結び目と Grothendieck-Teichmüller 群 116pages	February 22, 2016
MI Lecture Note Vol.69	土橋　宜典 鍛治　静雄	Symposium MEIS2016: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis　82pages	October 24, 2016
MI Lecture Note Vol.70	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2016 “Agriculture as a metaphor for creativity in all human endeavors” 98pages	November 2, 2016
MI Lecture Note Vol.71	小磯　深幸 二宮　嘉行 山本　昌宏	Study Group Workshop 2016 Abstract, Lecture & Report　143pages	November 21, 2016

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.72	新井　朝雄 小嶋　　泉 廣島　文生	Mathematical quantum field theory and related topics　133pages	January 27, 2017
MI Lecture Note Vol.73	穴田　啓晃 Kirill Morozov 須賀　祐治 奥村　伸也 櫻井　幸一	Secret Sharing for Dependability, Usability and Security of Network Storage and Its Mathematical Modeling　211pages	March 15, 2017
MI Lecture Note Vol.74	QUISPEL, G. Reinout W. BADER, Philipp MCLAREN, David I. TAGAMI, Daisuke	IMI-La Trobe Joint Conference Geometric Numerical Integration and its Applications　71pages	March 31, 2017
MI Lecture Note Vol.75	手塚　　集 田上　大助 山本　昌宏	Study Group Workshop 2017 Abstract, Lecture & Report　118pages	October 20, 2017
MI Lecture Note Vol.76	宇田川誠一	Tzitzéica 方程式の有限間隙解に付随した極小曲面の構成理論 ―Tzitzéica 方程式の楕円関数解を出発点として―　68pages	August 4, 2017
MI Lecture Note Vol.77	松谷　茂樹 佐伯　　修 中川　淳一 田上　大助 上坂　正晃 Pierluigi Cesana 濵田　裕康	平成29年度　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会（I） 結晶の界面，転位，構造の数理　148pages	December 20, 2017
MI Lecture Note Vol.78	瀧澤　重志 小林　和博 佐藤憲一郎 斎藤　　努 清水　正明 間瀬　正啓 藤澤　克樹 神山　直之	平成29年度　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 プロジェクト研究　研究集会（I） 防災・避難計画の数理モデルの高度化と社会実装へ向けて 136pages	February 26, 2018
MI Lecture Note Vol.79	神山　直之 畔上　秀幸	平成29年度　AIMaP チュートリアル 最適化理論の基礎と応用　96pages	February 28, 2018
MI Lecture Note Vol.80	Kirill Morozov Hiroaki Anada Yuji Suga	IMI Workshop of the Joint Research Projects Cryptographic Technologies for Securing Network Storage and Their Mathematical Modeling　116pages	March 30, 2018
MI Lecture Note Vol.81	Tsuyoshi Takagi Masato Wakayama Keisuke Tanaka Noboru Kunihiro Kazufumi Kimoto Yasuhiko Ikematsu	IMI Workshop of the Joint Research Projects International Symposium on Mathematics, Quantum Theory, and Cryptography　246pages	September 25, 2019
MI Lecture Note Vol.82	池森　俊文	令和2年度　AIMaP チュートリアル 新型コロナウイルス感染症にかかわる諸問題の数理 145pages	March 22, 2021

シリーズ既刊

Issue	Author／Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.83	早川健太郎 軸丸　芳揮 横須賀洋平 可香谷　隆 林　　和希 堺　　雄亮	シェル理論・膜理論への微分幾何学からのアプローチと その建築曲面設計への応用　49pages	July 28, 2021
MI Lecture Note Vol.84	Taketoshi Kawabe Yoshihiro Mizoguchi Junichi Kako Masakazu Mukai Yuji Yasui	SICE-JSAE-AIMaP Tutorial Advanced Automotive Control and Mathematics　110pages	December 27, 2021
MI Lecture Note Vol.85	Hiroaki Anada Yasuhiko Ikematsu Koji Nuida Satsuya Ohata Yuntao Wang	IMI Workshop of the Joint Usage Research Projects Exploring Mathematical and Practical Principles of Secure Computation and Secret Sharing　114pages	February 9, 2022
MI Lecture Note Vol.86	濱田　直希 穴井　宏和 梅田　裕平 千葉　一永 佐藤　寛之 能島　裕介 加葉田雄太朗 一木　俊助 早野　健太 佐伯　　修	2020年度採択分　九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会 進化計算の数理　135pages	February 22, 2022
MI Lecture Note Vol.87	Osamu Saeki, Ho Tu Bao, Shizuo Kaji, Kenji Kajiwara, Nguyen Ha Nam, Ta Hai Tung, Melanie Roberts, Masato Wakayama, Le Minh Ha, Philip Broadbridge	Proceedings of Forum “Math-for-Industry” 2021 -Mathematics for Digital Economy-　122pages	March 28, 2022
MI Lecture Note Vol.88	Daniel PACKWOOD Pierluigi CESANA, Shigenori FUJIKAWA, Yasuhide FUKUMOTO, Petros SOFRONIS, Alex STAYKOV	Perspectives on Artificial Intelligence and Machine Learning in Materials Science, February 4-6, 2022　74pages	November 8, 2022



九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
九州大学大学院 数理学府
〒819-0395 福岡市西区元岡744　TEL 092-802-4402　FAX 092-802-4405
URL http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/