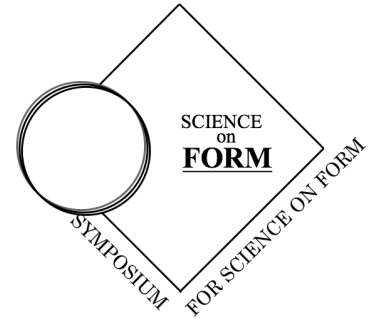




第 81 回形の科学シンポジウム 「量子科学とかたち」 講演予稿集



2016 年 6 月 3 日-2016 年 6 月 5 日

形の科学会

第 81 回形の科学シンポジウム 「量子科学とかたち」

【主催】形の科学会

【共催】大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

【会期】2016 年 6 月 3 日(金)、4 日(土)、5 日(日)

【会場】統計数理研究所(東京都立川市) 3 階セミナー室 1

【代表世話人】西垣功一 〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学大学院理工学研究科 名誉教授 E-mail: koichi@fms.saitama-u.ac.jp

【共同世話人】中村振一郎 〒351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1 理化学研究所中村特別研究室 E-mail: snakamura@riken.jp

【参加費】会員・非会員ともに一般 5000 円、学生 1000 円

【懇親会】2016 年 6 月 4 日(土) 17:30 より 統計数理研究所セミナー室 2

【懇親会費】一般 4000 円、学生 2000 円

【WEB サイト】<http://katachi-jp.com/sympo81> (最新のプログラムはこちらでご確認ください)

プログラム

(変更される可能性があります)

6 月 3 日(金)

13:00-13:30 受付

14:25-14:40 休憩

13:30-13:35 開会の辞

形と知

13:35-14:00

ジグソー学習を取り入れた「理科読」による日本列島の形の探究に関する実践研究..... 1
原口るみ(東京学芸大学大学院)、松浦執(東京学芸大学)

14:00-14:25

陰影のデザイン..... 3
坂口菜紀(同志社大学)、田中 秀一(同)、佐々木康成(金沢星稷大学)、坂東敏博(同志社大学)

形の科学一般

14:40-15:05

顕微鏡(形状情報)に依らずにウイルスの宿主を推定するゲノム解析技術ー“オリゴスティッキネス”..... 5
西垣功一(埼玉大学名誉教授)、Shamim Ahmed (Shahjalal Univ. Science and Technology)、齋藤あゆむ(東京大学医科学研究所)

15:05-15:30

通信, 暗号, そして多面体..... 6
佐藤郁郎(宮城県立がんセンター)、秋山仁(東京理科大学)

15:30-15:55

リソスフェアの変形の微分幾何学..... 8

菊地和平（東北大学大学院）、長濱裕幸（同）

15:55-16:10 休憩

16:10-16:35

クモの網を模擬した構造の変形特性と冗長性に関する基礎的検討..... 10

森山卓郎（阿南工業高等専門学校）

16:35-17:00

弾性円管の内外圧力差による座屈..... 12

高木隆司（東京農工大学名誉教授）

17:00-17:25

文字教育における ICT の活用 14

沓名健一郎（福井大学大学院）、本田容子（盛岡大学）、

高田宗樹（福井大学大学院）

6月4日(土)

8:30-9:00 受付

展示説明（質疑無し、1件5分）

9:00-9:05

キャベツの開度観測..... 16

根岸利一郎（埼玉工業大学）

9:05-9:10

放散虫のカレンダー..... 17

松岡篤（新潟大学）、大河内春香（同）

9:10-9:15

折り紙モデルで結晶物性を考える 18

石原 正三（埼玉県立大学）

9:15-9:20

ダイヤモンド富士におけるミー散乱光..... 19

山口喜博（帝京平成大学）

9:20-9:25

転がる図形（ツースークルローラと数種類のスフェリコン）

山口陸幸

9:25-9:30

数学曲面模型の開発..... 21

手嶋吉法（千葉工業大学）、井 恭平（同）、川口拓未（同）、

蓮沼 晃（同）、小川泰（筑波大学名誉教授）

9:30-9:35

有孔虫骨格の拡大模型の開発..... 22

手嶋吉法（千葉工業大学）、星野捷（同）、渡辺宏（同）、

木元克典（海洋研究開発機構）、松岡篤（新潟大学）

9:35-9:50 休憩

量子科学とかたち

9:50-10:15

SU(2) 代数から対称性と形へ ～方位角の波動関数の形
を代数構造から探る～..... 23
小川直久（北海道科学大学）

量子科学とかたち（公開講演）

【招待講演】

10:20-11:10

分子が認識する分子のかたち ～量子化学情報で深層学
習するために～..... 55
後藤 仁志（豊橋技術科学大学）

【招待講演】

11:10-12:00

オービタルのかたち―節面と規則性..... 25
時田澄男（埼玉大学名誉教授）

12:00-13:30 昼休み

(12:20-13:20 運営委員会 会議室3)

【招待講演】

13:30-14:20

電子励起状態ポテンシャルの形と光化学反応 ～フォト
クロミック分子（ジアリールエテン）の光異性化反応を例
に～..... 26
小林高雄（(株) MCHC R&D シナジーセンター）

【招待講演】

14:20-15:10

化学素反応における分子軌道の“形”の最小変化：量子科
学の新しい観点と福井―Woodward-Hoffmann 理論の統一
..... 28
野平博之（埼玉大学名誉教授）

15:10-15:25 休憩

公開講演（一般テーマ）

【招待講演】

15:25-16:15

ビッグデータ、人工知能、そしてセレンディピティ.....
樋口 知之（統計数理研究所）

16:15-16:30 休憩

16:30-17:20

総 会

17:30-19:30

懇親会 （セミナー室2）

6月5日(日)

8:30-9:00 受付

形の科学一般

9:00-9:25

力学系平衡点の可視化とデザインへの応用..... 30
山岡久俊、竹内琢磨

9:25-9:50

14 面体立体パズル「レインボーキューブ」の解法表示ソ
ルバーの開発..... 32
竹内琢磨、山岡久俊

9:50-10:15

ギーリス曲線の特徴とプロダクトデザインへの応用... 34
松浦真也(愛媛大学)、齋藤邦彦(滋賀大学)

10:15-10:30 休憩

10:30-10:55

背景揺れを伴う立体映像視認時における体平衡系の数理
モデル化..... 36
天野直(福井大学大学院)、木下史也(名古屋大学大学院)、
平田隆幸(福井大学大学院)、高田宗樹(同)

10:55-11:20

科学折り紙の結晶ー折り紙モデルで結晶物性を考えるー
..... 37
石原 正三(埼玉県立大学)

11:20-11:45

放散虫の収斂現象..... 39
松岡 篤(新潟大学)

11:45-13:15 昼休み

(12:00-13:00 FORMA 編集委員会 会議室3)

形と知

13:15-13:40

お笑いフレームと対話の形 41
細川拓朗(東京学芸大学)、松浦執(同)

13:40-14:05

近世日本の立体図法ー三浦梅園「玄語図」と松森胤保「動
物系表」よりー..... 43
出原立子(金沢工業大学)

形の科学一般

14:05-14:30

半正多胞体の4接超球半径を求める(パート1) 45
山口陸幸

14:30-14:55

n次元超球まわりのストークス流れ 47
吉野 隆(東洋大学)

14:55-15:10 休憩

形の科学一般

15:10-15:35

ケプラーの円錐曲線論..... 49
ウェルフェア ジャスティン 飛鳥(神奈川大学大学院)、
山口 幸(同)、杉本 剛(同)

15:35-16:00

合同円柱の重なりからなる立体形状とその実体化..... 51
宮本圭佑(千葉工業大学大学院)、荒川久遠(千葉工業大
学)、手嶋吉法(同)

16:00-16:25

球状テンセグリティ構造の幾何学特性..... 53
浅尾祐樹(千葉工業大学)、手嶋吉法(同)

16:25-16:30

閉会の辞

ジグソー学習を取り入れた「理科読」による日本列島の形の探究に関する実践研究

¹原口るみ, ²松浦 執

¹東京学芸大学大学院連合学校教育学研究科 東京都小金井市貫井北町 4-1-1

²東京学芸大学教育学部 東京都小金井市貫井北町 4-1-1

¹pdandy8105@yahoo.co.jp, ²shumats0@gmail.com

Practice Research on inquiry of the form of the Japanese archipelago by "RIKADOKU(Science Reading)" with jigsaw learning

¹Rumi Haraguchi, ²Shu Matsuura

¹The United Graduate School of Education, Tokyo Gakugei University,

²Department of Education, Tokyo Gakugei University

4-1-1 Nukui-kita-machi, Koganei-shi, Tokyo

Abstract:

In science education, it becomes more and more important for the students to realize the significance of learning science and the relationship between science and real life. However, several contents in science are not easy in performing the experiments or observations within the constraints of time and space of the classrooms. "The origin and the change of the earth" in the junior high school is one of them. In this research, the students conducted the "RIKADOKU (Science Reading)" program using the method of jigsaw learning to inquire the origin of the form of Japanese archipelago. The results showed that the students realized the learned matters related to their real life.

Keywords: understanding with reality, "RIKADOKU(理科読)", jigsaw learning, science education

1. はじめに

理科教育において、児童生徒が理科を学ぶ意義や実生活との関連を実感できることがますます重視される傾向にある¹⁾。しかし現実を見てみると、従来の授業の最後に教師が実生活への応用を紹介しただけで終わってしまったり、生徒が「学んだことと実生活を結び付けられたか」という結果だけを問うような事態が生じたりはしていないだろうか。

教育は「過程(process)」である²⁾というデューイの考えに基づけば、理科の学びにおいてみつめたいことは、子どもがいかに関「学んだことと実生活を結び付けられたか」という結果ではなく、「学んだことと実生活を結びつけるようになっていくか」という過程である。そのために、子どもの「その子」にとっての実生活をみつめることから出発したい。

2. 理科読—理科の学びに本を取り入れる—

理科の学びにおいて、実際の物に触れたり現象を目の当たりにしたりする実験や観察が重要であることは言うまでもない。しかし、実験や観察を行うことが容易ではない内容も含まれる。中学理科における「大地の成り立ちと変化」がその1つである。特に日本列島の形という大きな対象を扱う場合には、どのように子どもたちが実感できるようになるか

という課題がある。そこで、本研究では「理科読」³⁾を取り入れた実践の検討を行った。

3. 対象と方法

[対象となる生徒と彼らの実社会]本研究では、静岡県沼津市の公立小中一貫校の7年生（中学1年生に相当）の授業について検討した。学校の目の前には駿河湾が広がっており、生徒たちにとって駿河湾や伊豆半島といった地形は身近なものである。

【「理科読」に用いた本】『日本列島水をとったら？ 海の底にも山がある！ 海底地形』加藤茂・伊藤等：監修，徳間書店（2015）

【方法】1時限目：予想，3名1班になり，各自のテーマについて本を読む。2時限目：資料の読み込み，クロストーク，考えをまとめてノートに記入

【検討の視点】（1）教師がみとった生徒の学びの過程。（2）ノートに表現された生徒の学びの過程。以上（1），（2）それぞれについて次の3つの視点から検討した。即ち，①既習事項とのつながり，②大地の変化と地表の事物とのつながり，③大地が変化する実感。

4. 結果

（1）教師がみとった生徒の学びの過程

生徒の発言から，教師は生徒らが本から新しい知識を吸収しつつ，学習課題の答えを探究する中で，学んだことを振り返り，内的に再構築していく過程をみとった（視点①，③）。

また，一見つながりの薄い「日本海」「駿河湾と鹿児島湾」「瀬戸内海」という地形が，日本列島形成過程での大地の変化としてつながりを持つと気づく過程をみとった（視点②）。

（2）ノートに表現された生徒の学びの過程

本を読む前に知っていたこと（以下(K)）と読んで分かったこと（以下(LB)）を見比べると，LBはKよりも多いことから知識の量が増えたことが確認された。それだけにとどまらず，既習事項に関連があることがわかったり（視点①），大地の変化が地形を作り上げてきたことがわかったり（視点②），大地は変化するということが実感できたことで将来の日本列島の形はどう変わるのか，という新たな問いが生まれたりした（視点③）。

5. 考察

ジグソー学習を取り入れた「理科読」により，実験や観察が困難な単元でも生徒が実感を伴った理解を得られるものと考えられた。さらに，本を取り入れたことで生徒たちが既習事項を「使う」時間が生まれ，学んだこととのつながりが意識されるようになった。

6. まとめ—今後の展望—

複数の学校で異なる単元での実践を行うことで，異なる「実生活」を生きる子どもたちが，「理科読」を通じて実感を伴った理解を得られることを明らかにしていきたい。

参考文献

- 1) 文部科学省，中学校学習指導要領解説 理科編（1998）
- 2) Dewey, J., “*Democracy and Education*”, The Free Press(1916):10
- 3) 大貫麻美・原口るみ・土井美香子・瀧上豊，「本を通して自然科学を学ぶ「理科読」の歴史と実践的研究への展望」，帝京平成大学児童学科研究論集 No.6（2016）

陰影のデザイン

坂口茉紀[†]・田中秀一^{††}・佐々木康成[‡]・坂東敏博^{†††}

^{†, ††, †††}同志社大学, 京田辺市多々羅都谷 1-3

[‡]金沢星稜大学, 金沢市御所町丑 10-1

[†]m.sakaguchi91a19@gmail.com, ^{††}syu1dssb@gmail.com,

[‡]ysasaki@seiryu-u.ac.jp, ^{†††}tbando@mail.doshisha.ac.jp

A Design of Shade and Shadow

Maki SAKAGUCHI, Yasunari SASAKI, Toshihiro BANDO

^{†, ††, †††}Doshisha University, 1-3 Tatara Miyakodani, Kyotanabe-shi, Kyoto-fu

[‡]Kanazawa Seiryu University, 10-1 Ushi, Goshomachi, Kanazawa-shi, Ishikawa Prefecture

Abstract: We perceive spatial configuration and surface asperity of an object by touching surface, and get the tactile texture. We also perceive tactile texture of the object based on the visual information in two-dimensional images, because the shades and shadows made by asperity and illumination are important elements to perceive surface qualitative information. In this study, we generated variety of 3D texture models by the mathematical design of surface asperity and simulated the shade and shadow patterns on the surface under changing illumination direction.

Keywords: visual perception, shade and shadow, onomatopoeia, automatic texture generation

1. はじめに

人は対象物の表面に触れ、対象物の空間形状や凹凸を知覚し触覚的質感を得ている。しかし、対象物の触覚的な質感は2次元画像の情報から視覚的にも得られる。対象物の質感を視覚的に得る上で重要な要素の1つに陰影が挙げられる。陰影は、対象物に対して照射する光源の方向により様々に変化する。したがって、対象物に対し照明光の当たる方向を変化させた場合に、同じ形状の物体から多様な陰影パターンを生成できる可能性がある。

我々が行ったこれまでの研究では、物体表面と照明により形作られて3次元的に見える陰影パターンに対して人が想起したオノマトペと画像特徴量の関係を明らかにしてきた^[1]。特に、同時生起行列から得られる画像特徴量と実験参加者が想起したオノマトペの各子音の分布には特定の相関があることを明らかにしてきた。

本研究では、3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)による凹凸生成におけるパラメータの設定について、網羅的かつ規則的に変化させられるように乱数系列を用いて凹凸の生成を行った。また、生成した凹凸形状に対し光源を照射し、作られる陰影についてシミュレーションを行い、凹凸形状および光線方向と陰影パターンから感じられる質感の関係を調べた。

2. 陰影テクスチャの生成

本研究で用いた陰影のあるテクスチャ(陰影テクスチャ)は、3DCGソフトウェアとして知られるAutodesk社のMayaで作成した。凹凸モデルの生成と陰影のシミュレーションを行い、得られた陰影パターンを陰影テクスチャとして出力した。シミュレーションでは、凹凸の細かさ、凸の数、高さ(y軸)、高さのばらつき、方向、方向のばらつきをパラメータとして変化させて陰影テクスチャを生成した。はじめに生成された平面を等分割し、等分してできた頂点をy軸方向に吊り上げ、続いてx軸およびz軸方向に平行移動させる。生成モデルとその一例をそれぞれ図1と図2に示す。本研究ではx軸、y軸方向の変位の各成分を合成した値を凸の方向としている。したがって、凸方向およびそのばらつきに関してはx軸、z軸の2成分についてそれぞれ値を決

定した．そのため，合計 8 個のパラメータでシミュレーションを行ったことになる．凹凸に照射する平行光線の方角に関しては，z 軸方向に平行の向きで固定し，凹凸に対して上方から 45°で入射させた．

3. テクスチャの解析

パラメータには乱数を用いて 200 枚の陰影テクスチャを出力した．同時生起行列の特徴量と陰影テクスチャに対して人が視覚的に感じる質感との間には相関が見られること^[1]を考慮し，本研究でもテクスチャ解析に同時生起行列を用いて画像解析を行った．さらに，凹凸を生成する際に用いた 8 個のパラメータと同時生起行列により得られる 16 個の特徴量について重回帰分析を行い，凹凸の形状と質感との間にどのような関係があるかを調べた．その結果，パラメータと画像特徴量の間に強い相関が見られる組み合わせを発見した．

4. 陰影を形作るパラメータと音象徴との関係

先行研究^[1]において画像特徴量との間に強い相関のあったオノマトペの子音との関係について検討した．解析の結果より，陰影テクスチャに対して人が想起するオノマトペの子音に関して，凹凸生成の際に用いたパラメータが影響を及ぼしていると考えられる．例えば，凸の数は画像特徴量の 1 つである Contrast と強い相関があり，また先行研究では，Contrast はオノマトペにおける[z]，[p]，[t]の子音の出現頻度との間に強い相関が見られた．したがって，凸の数は[z]，[p]，[t]の出現頻度に影響を及ぼしていると考えられる．さらに，光源の照射方向に対し垂直方向の軸である x 軸方向の凸成分よりも照射方向に対し平行方向の軸である z 軸方向の凸成分の方が画像特徴量に大きく影響していた．これは，凹凸が照明光を遮ってできる影の影響が考えられた．つまり，照明光に対して垂直方向に凸を変形させても現れる影の形や面積の変化は少ないが，照明光に対して平行方向に凸を変化させた場合は，現れる影の形や面積に大きな変化が生まれるからである．特定のパラメータの値を変化させた結果として現れる影の形や面積の変化により画像特徴量の変動が見られた点から，影の形や面積の大小が視覚的な質感に影響を及ぼしていると考えられる．

5. 今後の課題

本研究で得られる複数の陰影テクスチャから質感が大きく異なるテクスチャを探し，照明方向の変化による質感変化に関わる凹凸形状の要素を明らかにできれば，1 つの凹凸形状から照明方向の切り替えにより質感の変化を提示するといった空間デザインに応用できると考えられる．また，凹凸の変化を照明方向のみによって交替させることができれば，知覚的な質感の違いを容易に作り出せる可能性が出てくる．

本研究の一部は，JSPS 科研費 25350032 の助成を受けた．ここに記して謝意を表する．

参考文献

- [1] 佐々木康成・鈴木孝典・坂東敏博 (2011)．陰影のあるテクスチャ画像のオノマトペを用いた質感評価—音韻と画像特徴の関係の統計的分析—．認知科学, 18, 477-490.

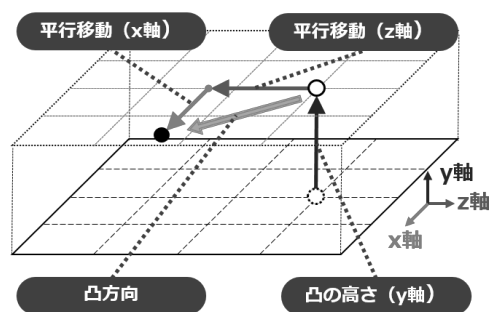


図 1 凹凸生成のモデル図

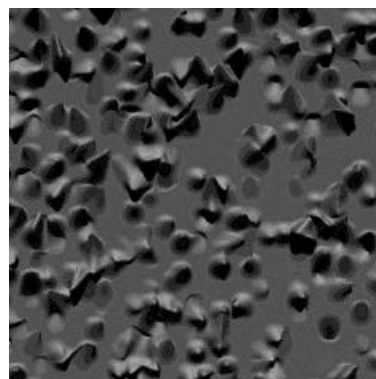


図 2 生成された凹凸モデルの一例

顕微像（形態情報）に依拠せずにウイルス宿主を推定するゲノム解析技術－
“オリゴスティッキネス”

西垣功一^{1,2}、Shamim Ahmed^{1,3}、齋藤あゆむ^{1,4}

¹ 埼玉大学大学院 理工学研究科

現所属：²産総研、³ Shahjalal Univ. Sci. and Tech., Bangladesh、⁴東大医科学研究所

Keywords: Virus, Host/parasite, Genome sequence, Sequence similarity,
Oligostickiness

英文タイトル： *Oligostickiness* : A genome analysis that enables us to reveal the
host-parasite relationship without depending on microscopic image information.

Koichi Nishigaki, Shamim Ahmed, Ayumu Saito,

Saitama University

E-mail: koichi@fms.saitama-u.ac.jp

ABSTRACT

Host-parasite relationship, say, between virus and bacteria has been assigned by employing the electron microscopic method, which consists of tremendously painstaking processes. Owing to the readiness of obtaining genome sequences of various species of organisms and a physicochemical *parameter oligostickiness*, we may be able to find the host-parasite relationship without depending on electron microscopic measures. Here, oligostickiness is defined and applied to probing the closeness between two species (bacteria and bacteriophages), which leads to estimating a host-parasite relationship.

和訳： ウイルスと細菌のような宿主－寄生関係は電子顕微鏡を用いた、大変手間のかかる過程を経て初めて同定されてきた。しかし、様々な生物のゲノム塩基配列の情報を比較的容易に手に入れることができるようになり、本研究で報告するオリゴスティッキネスとよぶ特別な物理化学定数を用いることで、我々は電子顕微鏡に頼らなくても、宿主－寄生関係を容易に発見できるかもしれない。本論文では、オリゴスティッキネスが定義され、2種の生物（細菌とバクテリオファージ）のオリゴスティッキネスの近さから、宿主－寄生関係が推定されるという応用について述べる。

通信, 暗号, そして多面体

佐藤郁郎 (宮城県立がんセンター)、秋山仁 (東京理科大学)

宮城県名取市愛島塩手字野田山 47-1

sato-ik510@miyagi-pho.jp

Signal Transmission, Ciphers and Polytopes

Ikuro Sato, Jin Akiyama

Miyagi Cancer Center, Tokyo University of Science

Abstract: In the n -digits of Wythoff 0/1-code, surprisingly many metric properties of the n -polytopes are concealed. It looks just like a magic or mystery and the secret lies in the double flag architecture of Wythoff code. For this arithmetic, the computer programs have been implemented by Matsuura and Toyoshima. We will introduce on a few idea for applications to communication theory and ciphers.

Keywords: Wythoff code, Wythoffian polytope, flag, signal transmission, cipher

【1】はじめに (ワイソフ・トリック)

n 次元準正多面体は n 桁の0/1コードを使って表すことができる. のみならずこの n 桁から多面体の図形情報 (k 次元面数とその形, 体積など) を引き出すことができる. この位相幾何学的組み合わせ論を用いた計算手順は, 松浦・豊島 (東京電機大学) によってすでにコンピュータに実装されている. とはいえ, たった n 桁の0/1のなかにかくも詳細な情報が圧縮された形で格納されていることは驚くべきことである. このトリックの核心は二重旗構造; (1110)の場合で説明すると $(1) \subseteq (11) \subseteq (111) \subseteq (1110) \supseteq (110) \supseteq (10) \supseteq (0)$;にある. 端的に言えば, 球ではなく多面体のなせる業といえるだろう.

一方, 現行の通信システムでは最密球充填を基盤とした0/1コードが用いられている. 高次元多面体に比べて, 高次元球は理解もしやすいことから通信理論に応用されているのだが, 球を多面体に変えるワイソフ・トリックを用いることで, よりエンリッチな情報通信 (たとえば暗号にみえない暗号など) を実現させることはできないだろうか.

【2】現行の通信コードシステムでは

とくに8次元と24次元の最密球充填は, 通信理論を介して現代生活を担保するほどの重要な応用を担っている. しかし, その様子を思い浮かべるのは容易ではないから, 3次元の最密球充填で代用することにしたい.

3次元の最密球充填は中心に置いた球に対して, 同じ層に6球, 上の層に3球, 下の層にも3球で合計12球に接することになる. この配置が面心立方格子状配置で, 3次元の最密球充填配置となる. 中心 $(0, 0, 0)$ から $\sqrt{2}$ 離れた12個の格子点 $(\pm 1, \pm 1, 0)$, $(\pm 1, 0, \pm 1)$, $(0, \pm 1, \pm 1)$ に半径 $1/\sqrt{2}$ の球を配置すると3次元の最密球充填が実現される (図1).

8次元の場合には E_8 格子と呼ばれる240個のベクトルの集まりを構成することができる. $(1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0)$ や $(1/2, 1/2, -1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, -1/2)$ はその例で, 原点からの距離が $\sqrt{2}$ になっている. これらの配置を応用した通信システムでは検出力が最大となる.

これらの次元のコードシステムがうまく機能する幾何学的な理由は, 立方体の8頂点か

ら4頂点をうまく選ぶと正四面体を(図2), 8次元立方体の256頂点から16頂点をうまく選ぶと8次元正軸体を内接させることができることに依拠している. 一般に, n 次元立方体の頂点をうまく結んで正軸体を作ることができるための必要条件是 n が4の倍数であること, 正単体を作ることができるのは n が4の倍数-1であることである. さらに偶ユニモジュラー格子は次元が8の倍数のときにしか存在しないことも知られている. いずれにせよ, 通信に活用されているのはある特殊な次元の球の座標情報だけなのである(例外型).

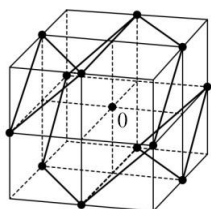


図 1

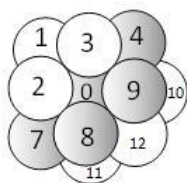


図 2

【3】多面体の通信への応用を考える

特殊な次元でなく一般次元の多面体の, かつ座標にこだわらず頂点や辺などの連結情報をうまく利用できないだろうか考えるのは自然な発想であろう. すぐに思いつくのは[1]球の格子状配置において, 球を膨らませるとやがて押し合いへし合いを生じて, 最終的にはボロノイ多面体に落ち着く(図3). 任意の n 次元空間に4種類の無限系列空間充填多面体を構成することができる. 図4はそれぞれ4,5,6次元のボロノイ多面体の例である.

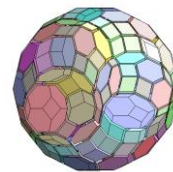
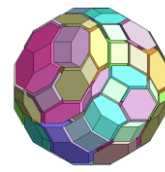
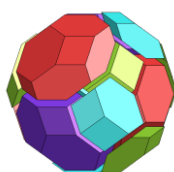
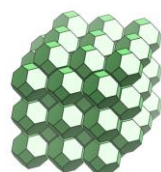
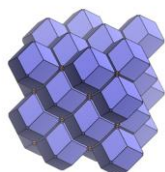
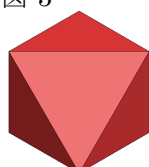


図 3

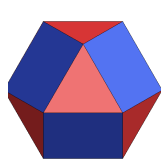
図 4

[2]空間充填にこだわらなければ, 任意の次元の多面体と n ビットコードを1対1対応させることができる. 図5に3次元多面体と3ビットコードとの対応を掲げる.

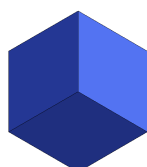
図 5



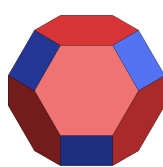
(100)



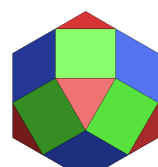
(010)



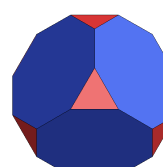
(001)



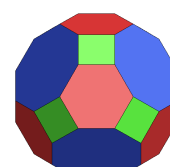
(110)



(101)



(011)



(111)

【4】まとめ

故・乙部融朗老師の針金模型は small world network を具現化したもので, 老師はその先に通信への応用を見据えていた. 多面体の理論を通信に役立てようとはいっても, 複雑になりすぎて, 球模型のもつ単純さ・エレガントさを損なってはならない. 本当に有用なものになるのか, 役立つとしたらどの次元のどの多面体になるのか, その具体的な方法については直ちに解答を与えられそうにない. 先駆的な発想となればよいが, それとも妄想?

【5】参考文献

- 1) 石井源久「多次元半正多胞体のソリッドモデリングに関する研究」京都大学(1999)
- 2) 宮崎興二・石井源久・山口哲「高次元図形サイエンス」京都大学出版会(2005)
- 3) 乙部融朗「準正多体胞」私家版(2015)

リソスフェアの変形の微分幾何学

菊地和平*、長濱裕幸

東北大学大学院理学研究科地学専攻、宮城県仙台市

* kazuhei.kikuchi.s6@dc.tohoku.ac.jp

Differential Geometry for the Lithosphere Deformation

Kazuhei KIKUCHI* and Hiroyuki NAGAHAMA

Department of Earth Science, Graduate School of Science, Tohoku University, Sendai, Japan. * kazuhei.kikuchi.s6@dc.tohoku.ac.jp

Abstract: Previous research shows buckling phenomenon in flat or spherical shells lithosphere. However, previous research cannot give us to related curvature effect in buckling phenomenon. On the other hands, material science is presented by using curvature effect of buckling phenomenon in differential geometry. In this paper, we derive the buckling phenomenon with curvature effect for spherical shells lithosphere.

Keywords: Buckling phenomenon, Euler-Schouten curvature tensor

Introduction

The mechanism of flat or spherical shells lithosphere deformation is presented by using the buckling theory (e.g., Tanimoto 1997, 1998; Turcotte and Schubert 2014). Buckling phenomenon in spherical shells of the lithosphere along subduction zone is studied by spherical shell tectonics (e.g., Fukao et al., 1987). We found out a new linear relationship between Batdorf parameter and the normalized hydrostatic pressure along the bottom circumferential edge of a hemispherical in spherical shell tectonics (Kikuchi and Nagahama 2015). Batdorf parameter for subducting lithosphere is equivalent to the length of the slab, and is also related to the wavelength (length of the island arc) of buckling. However, previous research cannot give us buckling equation with high order strain for the curvature of the lithosphere. On the other hand, buckling equation with the high order strain effect has been studied by engineering science (Kondo 1955), which study applied the concept of Riemannian geometry to yielding and buckling of the curved material. From the Euler-Schouten curvature tensor of shell as Riemannian manifold and force balance equation on the shell, we derived a unified theory on buckling of spherical shells.

Application of Kondo theory to the lithosphere deformation

When the Riemannian manifold of V_n dimension with non-zero Euler-Schouten curvature tensor exists in the enveloping manifold (Euclid space) of V_m dimension, the including Riemannian manifold of V_n protrudes into the enveloping manifold of V_m dimension. From the Euler-Schouten curvature tensor of shell as Riemannian manifold and force-balance equation on the shell, we derived a unified theory on buckling of flat plates or spherical shells;

$$B\Delta y + \sum^{ij} \frac{\partial^2 y}{\partial x^i \partial x^j} = L - P, \quad (1)$$

where B is contravariant tensor in the n -space, y is deflection, x is coordinates of system, L is the normal force per unit m -volume, Σ^{ij} is stress components in the shell space, P is the difference of the tangential frictions at the upper and lower boundaries, and subscripts i, j are coordinates in V_n .

In the case of 2 dimensional flat plate buckling, equation (1) is buckling equation of plates. Moreover, equation (1) becomes a buckling equation of the spherical lithosphere as 3-dimensional Riemannian manifold (V_n).

Summary

We can apply the Euler-Schouten tensor to buckling equation with high order strain for the lithosphere deformation. Using the deformation theory based on Riemannian space for the buckling system of flat plate and spherical shells, the equation for the lithosphere deformation and buckling can be derived from the Euler-Schouten curvature tensor. Therefore, this curvature tensor is an important tensor for the lithosphere deformation.

Reference

- Fukao, Y., Yamaoka, K. and Sakurai, T. (1987) Spherical shell tectonics: buckling of subducting lithosphere, *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 45, 59-67, Doi: 10.1016/0031-9201(87)90197-X.
- Kikuchi, K. and Nagahama, H. (2015) Batdorf parameter for the spherical shell tectonics, *Geophysical Research Abstracts* Vol. 17, European Geosciences Union General Assembly Conference, EGU2015-10638.
- Kondo, K. (1955) Theory of Metaphorical Plates and Shells, in *RAAG Memoirs* Vol. 1, ed. K. Kondo, p.47-60, Gakujutsu Bunken Fukyu-kai, Tokyo.
- Tanimoto, T. (1997) Bending of spherical lithosphere–axisymmetric case, *Geophysical Journal International*, 129, 305-310, Doi:10.1111/j.1365-246X.1997.tb01583.x.
- Tanimoto, T. (1998) State of stress within a bending spherical shell and its implications for subducting lithosphere, *Geophysical Journal International*, 134, 199-206, doi:10.1046/j.1365-246x.1998.00554.x.
- Turcotte, D.L. and Schubert, G. (2014) *Geodynamics*, 3rd ed., Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 623p.

クモの網を模擬した構造の変形特性と冗長性に関する基礎的検討

森山卓郎

阿南工業高等専門学校、徳島県阿南市見能林町青木 265

takuro@anan-nct.ac.jp

Fundamental consideration on deformation characteristic and redundancy of simulated structure of spider web

Takuro MORIYAMA

National Institute of Technology, Anan College、265 Aoki, Minobayashi-cho,
Anan, Tokushima, 774-0017 JAPAN

Abstract: Reasonable shape and excellent structure on mechanical properties can be seen in nature. In this study, spider web was focused on. The simulated structure of concentric circles and spiral on weft of the spider web was modeled by two-dimensional frame. Concentration load was applied to the center of analysis models on both plane and out-of plane. The effects of the difference of shape, spiral and elastic modulus of weft, and loss of weft on the deformation and redundancy of simulated structure of the spider web were considered.

Keywords: spider web, weft, spiral, deformation, redundancy

1. 目的

筆者は、クモの網の構造の変形特性に着目し、網を模擬した構造を2次元の骨組み構造で作成した簡易モデルによる解析的な検討を行ってきた^{1)、2)}。本検討では、クモの網を模擬した構造において、形状および螺旋の有無や種類を変化させて静的荷重を作用させた骨組構造解析を行い、その変形特性と冗長性について検討を行った。

2. 解析方法

クモの網を模擬した解析モデルを2次元の骨組み構造により作成した。まず、解析モデルの外形形状は正方形とし、その中に正方形に内接しているもの、正8角形状に内接しているもの、正12角形状に内接しているものをそれぞれ均質な材料および同じ断面積の部材で作成した(図1(a)~(c))。さらに、横糸を想定した部材が同心円状の正12角形状のもの、アルキメデスの螺旋状に内接しているもの、対数螺旋状に内接しているものについても、同様に作成した(図1(d)~(f))。このとき、解析モデルの部材の全長は、比較する解析モデルでほぼ同じになるように、横糸を想定した部材の間隔などを調整した。

解析モデルの四隅を固定し、中心に0.01Nの集中荷重を面外方向または面内方向に作用させた場合についてそれぞれ解析を行い、各節点の変位や各部材の軸力などを算出した。また、クモの網は、縦糸と横糸の特性が違っていることから、横糸の弾性係数を小さくしていった場合についての解析も同様に行い、横糸の弾性係数の違いが変形に及ぼす影響についての検討も行った。さらに、クモの網を模擬した構造の部材の欠損による影響に着目し、解析モデルの中心部より横糸の部材を1本ずつ欠損させていった場合についても同様に解析を行い、その冗長性について検討した。

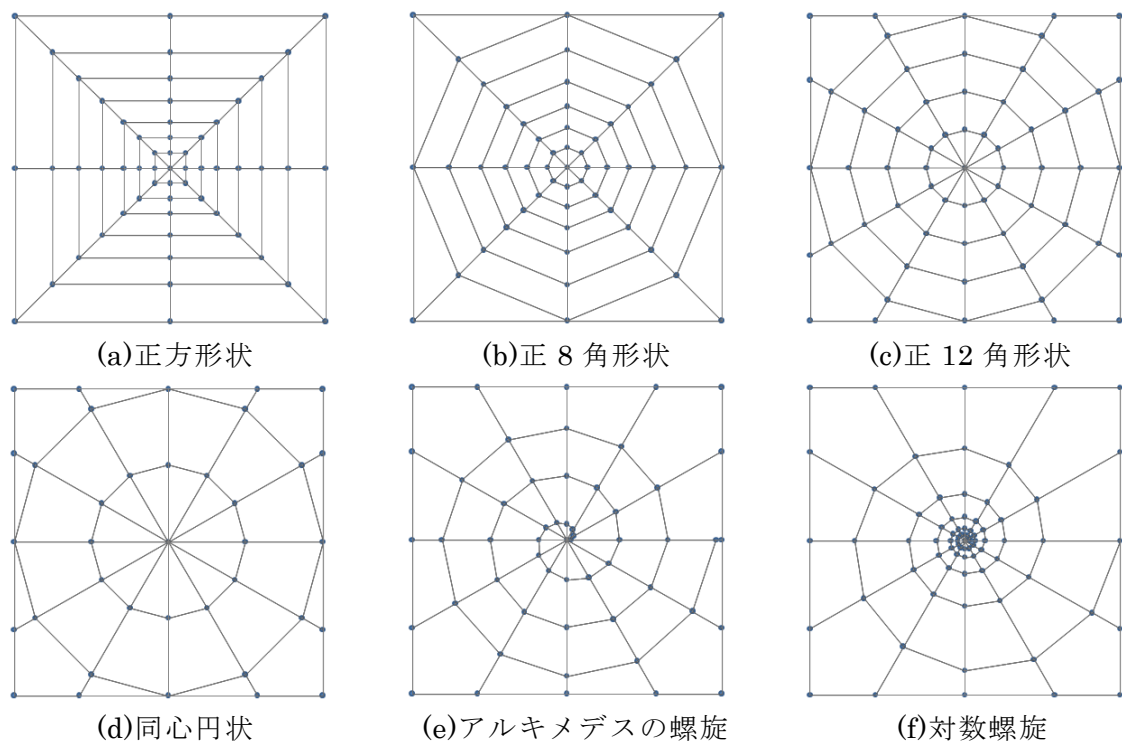


図 1 解析モデルの形状

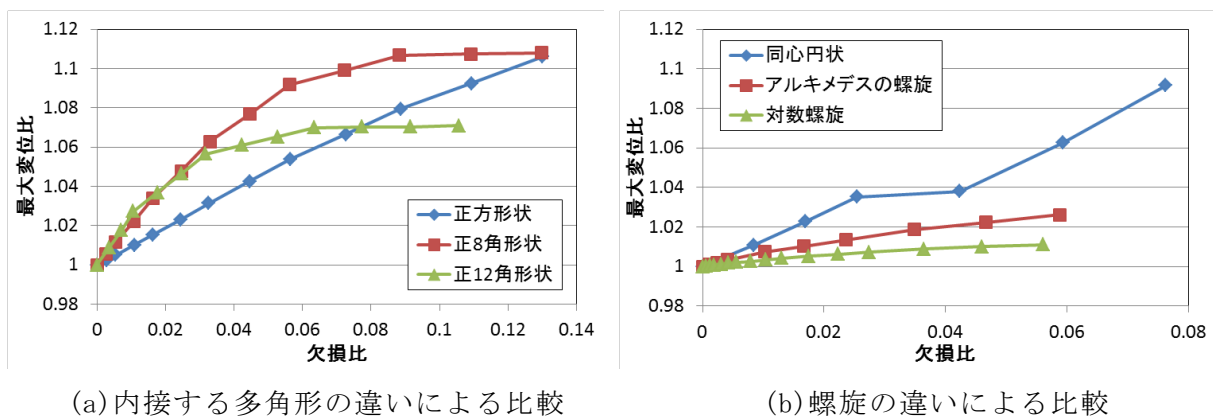


図 2 面外荷重を作用させたときの最大変位比と欠損比の関係

3. 解析結果

図 2 は、面外方向に荷重を作用させたときの冗長性についての検討結果である。縦軸の最大変位比は、欠損させた場合の最大変位を欠損のない場合の最大変位で割ったものであり、横軸の欠損比は、欠損させた長さを解析モデルの全長で割ったものである。この図から、欠損比を大きくすると内接する多角形が正 12 角形状の場合に最大変位比が最も小さくなり、欠損比が約 0.06 で一定値に収束していくことがわかる。また、欠損比を大きくすると、横糸が螺旋の場合では、螺旋のない場合よりも最大変位比が小さくなることわかる。

参考文献

- 1) 森山卓郎：クモの網を模擬した構造の変形に及ぼす横糸の弾性係数の影響，形の科学会誌 第 30 巻第 1 号，pp. 93-94，2015.
- 2) 森山卓郎：クモの網を模擬した構造の変形特性に関する基礎的検討，形の科学会誌 第 29 巻第 1 号，pp. 28-29，2014.

弾性円管の内外圧力差による座屈

高木隆司

東京農工大学 (名誉教授), 〒248-0014 鎌倉市由比ヶ浜 2-23-12, jr.takaki@iris.ocn.ne.jp

Buckling of Elastic Circular Tube Owing to Pressure Difference

Ryuji Takaki

Abstract: Nonlinear analysis is made on the strength of buckling of an elastic circular in the case where the inner pressure is higher than the outer one. The motivation of this analysis is to give a theoretical support to an investigation of deformation of blood vessels in the case of the pressure difference. The tube is assumed to make a deformation to a nearly elliptical shape without elongation of the sheet of pipe. The ratio of the longer diameter of the pipe to the shorter one is estimated by assuming a weak deformation of the pipe. The method of analysis is to minimize the sum of two energies; one is an elastic energy associated with bending of the tube wall, and the other is the work done by the pressure difference when the pipe deforms. The result of analysis seems to describe observed deformation of blood vessels quantitatively.

Keywords: Buckling, Elastic tube, Pressure difference, Blood vessel

1. 導入

弾性円管の内外圧力差による座屈の問題は、主として真空を伴う装置に付随する円管の破損防止という観点から、機械工学の分野で研究されてきた。そこでは、座屈が起きないための臨界圧力差が、無限小の変形を仮定した線形近似を用いて理論的に求められている{1}。一方、座屈が起きたあとの変形を求める試みは、現在もないようである。このような有限振幅の座屈の現象は、主として医学分野で注目され始め、内外圧力差による静脈の変形の程度を理論的に予測することが期待されている。

ここでは、円管は均質で等方的な物質とし、管の半径に比べて厚さは小さいと仮定する。また、管は軸の方向の伸縮をせず、変形によって厚さは変化しないと仮定する。このような円管の変形では、その断面形が円形からずれるが、周囲長は変化しないと仮定してよい(全体的な伸縮はない)。

2. 管の変形をどのように表現するか

図1に示すように、管の周囲方向に沿って計った長さ s を独立変数とし、管の形を $R(s)$ で表す。管は変形後も上下左右の対称性を保つと仮定し、管の $1/4$ ($0 < s < \pi R_0/2$) を解析の対象とする。

図2に、管壁の微小部分について変形前後の形を示す。厚さ方向の中心線(点線)の長さ ds は変化しないが、その上下(微小な厚さの斜線部分)は、中心線からの距離 z に比例して伸びる、あるいは縮む。変形後の形は、正確には扇形でないが、 $d\phi$ が微小なので扇形と見なしてよい。斜線部分の長さの変化は次式で与えられる。

$$dl = (R_c + z)d\phi - (R_0 + z)d\phi_0 = z(d\phi - d\phi_0) = z\left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R_0}\right)ds \quad (1)$$

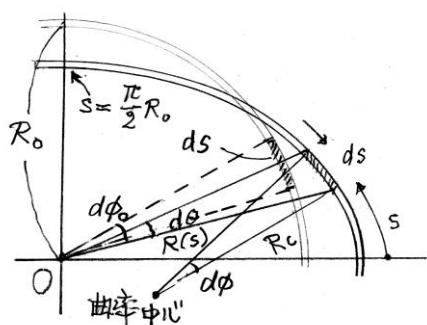


図1 変形した円管に関する定数や変数

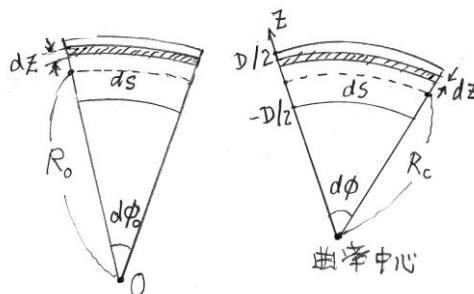


図2 微小部分の変形前(左)と変形後(右)

この dl を変形後の $R(s)$ で表す必要がある。途中を省略して、その結果は次式で与えられる。

$$dl = z \left(\frac{\sqrt{1 - (dR/ds)^2}}{R} - \frac{d^2 R}{ds^2} \sqrt{1 - (dR/ds)^2} - \frac{1}{R_0} \right) ds \quad (2)$$

3. 管の変形を求める方法

図2斜線部分の相対的な伸びから、弾性変形のエネルギーが次のように求められる (E はヤング率)。

$$U_e = \frac{ED^3}{24} \int_0^{\pi R_0/2} \left(\frac{\sqrt{1 - (dR/ds)^2}}{R} - \frac{d^2 R}{ds^2} \sqrt{1 - (dR/ds)^2} - \frac{1}{R_0} \right)^2 \cdot ds \quad (3)$$

同様に、圧力差 Δp による仕事が、 Δp と体積減少の積により次のように求められる。

$$U_p = \Delta p \cdot \left[\int_0^{\pi R_0/2} \frac{1}{2} R(s) \sqrt{1 - (dR/ds)^2} ds - \frac{1}{4} \pi R_0^2 \right] \leq 0 \quad (4)$$

全エネルギー U (U_e と U_p の和) を極小にする $R(s)$ が変形後の管の形である。

ここで、長さを R_0 で、エネルギーを $ED^3/24R_0$ で無次元化し、 $R(s)$ として次式を仮定する。

$$R(s) = 1 + a \cos 2s, \quad a \ll 1 \quad (5)$$

これを式(3), (4)に代入し、 $O(a^4)$ まで考慮し、 U の極小値から管の変形の強さが求められる。

$$a^2 = x = -A/B = \frac{2(\Delta p C - 9)}{53 - 3\Delta p C}, \quad C = \frac{24R_0^3}{ED^3} \quad (6)$$

C は、管壁の変形しやすさを表すパラメーターである。

4. 結果と考察

図3は、 U の a^2 依存性であり、圧力差が(2)の範囲にあるときだけ、有限の安定した変形が保たれる。(2)の場合について、変形の強さと $\Delta p C$ の関係を図4に示す。

今回の結果では、変形が0のとき $\Delta p C$ の値が9である。なお、文献[1]に記述してある臨界値は、9でなく8である(図中の点線参照)。この値は、座屈の臨界条件 ($a=0$) で求めたものであり、管壁がわずかに縮む(円周長が減少)ことを考慮している。

一方、有限振幅の場合をみつかった本研究では、縮みの効果は無視してあるので、このような違いが生じたと思われる。したがって、この曲線の下部を点線で示すように修正すると、より正しい結果になると期待される。

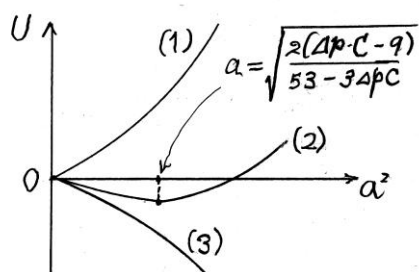


図3 U の a^2 依存性。(1), (2), (3) は、それぞれ

$0 < \Delta p C < 9$, $9 < \Delta p C < 53/3$, $53/3 \leq \Delta p C$ に対応。

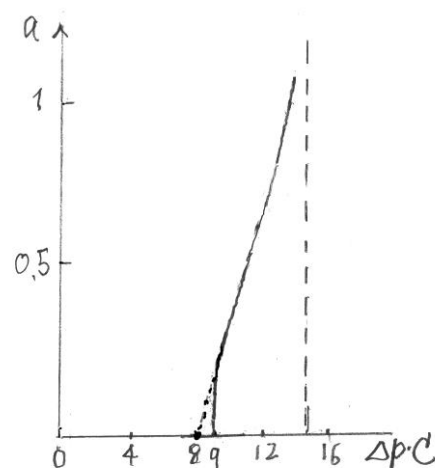


図4 a の $\Delta p C$ 依存性

文字教育における ICT の活用

沓名健一郎¹, 本田容子², 高田宗樹¹

¹福井大学大学院工学研究科 〒910-8507 福井県福井市文京 3-9-1

²盛岡大学文学部 〒020-0694 岩手県滝沢市砂込 808

kutsuna@u-fukui.ac.jp

Practical Use of ICT System for SHOSHA-SHODO Education

Kenichiro KUTSUNA*, Yoko HONDA**, Hiroki TAKADA*

*University of Fukui, Bunkyo3-9-1, Fukui 910-8507

**University of Morioka, Sunakomi808, Takizawa, Iwate 020-0694

Keywords: ICT, Information and Communications Technology, SHOSHA-SHODO, Education

1, 教育現場と ICT

ICT (Information and Communication Technology) は、以前の情報機器を使いこなす IT 教育をさらに高度化・汎用化し、児童生徒の「生きる力」の獲得と学習の効率化・高度化等を目指して既に教育の場では広く行われ日々研究が進められている。しかし、文字教育においては知識よりも技術の獲得が求められているため、書字するという用としての生きる力を育てる ICT の応用は困難であると言ってよい。本論では、文字教育の現状と ICT の必要性及び ICT の活用による展望について述べていく。

2, 文字教育における許容と ICT 活用

文字教育における日本の文字指導は、就学前から始まるとされており、首藤^{*1}は、「育ちの歩みは間違いの歩み」とし、就学前の長い成長過程の中で書き間違いというものはしばしば起こり得るが、これを寛大に許容しながら文字は学ばれていくべきで、通じる喜びが文字学習の原動力であると述べている。こうした寛大な指導の中で児童生徒の意欲や興味・関心を深めることは、文字教育の中から強く根付くべきものである。例えば、漢字は一般的な情報交換、不特定多数に向けた情報発信の場において、いわゆる標準的字体である「通用字体」の活字を主に使用することを勧めながら、手書きの場合には教科書に上げた一つの形だけに縛られることなく、許容を守りながら行われるべきであると文化庁は指針^{*2}を示している。その結果、漢字テストの書き取りの採点基準を「とめ、はね、はらい」としてきたこれまでの漢字テストに類するものが大きく意識の変化を求められることになった。一方、漢字学習の平準化を考えた場合、従来から教育の場で行われている「とめ、はね、はらい」に対する要求は高い。他方、文部科学省は教科指導において ICT の活用を推進しているが^{*3}、これは平準化された教材を汎用することが前提となって構想されたものと言えるため、ICT に関する研究が待たれる。

3, 文字教育とそれを取りまく ICT 環境の現状

ICT 機器の中でも、特に、デジタル教科書を提示する際に用いられる電子黒板の使用状況や現状を調査するため、静岡県と岩手県の 2 県 200 校の小・中学校の教員に対しアンケート調査を実施した。その結果、小学校の電子黒板の設置率は小学校で 96.0%、中学校で 12.5%であった。アンケート結果から示された理由として、最近導入された英語活動の授業を行うために用いられる教材が電子黒板をベースに進められるため学校教育における普及が進められてお

り、対して中学校では新規に電子黒板が必要となる教科がないため電子黒板の設置率が非常に低いということが分かった。こうした理由から、小学校の国語教育において電子黒板等の ICT の活用は機器の充足率と比例して高い傾向にあり、中学校は ICT 機器の充足率は低く国語教育での使用率も低いことが明らかとなった。

今後、デジタル教科書は次期学習指導要領が改訂される 4 年後を目処に導入される。文部科学省の非公開有識者会議ではその導入に意見が一致しており*⁴、電子黒板、タブレット型 PC、ビデオプロジェクタなどの ICT 機器は、教室への設置が義務化されることが見込まれる。

4. 文字教育と ICT 教材

文字教育における重要な課題は、必要な知識の集積をしながら形を正しく整える技能を効率的に習得することにある。技能としての手書きをいかに個々の児童生徒自身のものとするかが重要となる。文字教育は現行の国語科の学習指導要領において「書くこと」の領域ではなく「伝統的な言語文化と国語の特質に関する事項」の中に位置付けられており、ICT 教材を用いることはその伝統文化から逆行すると捉えられる可能性がある。しかし、文字教育における学習の効率を考えた場合、筆や鉛筆、ペンなどの道具の使い方や取り扱いに囚われることなく、本質的な部分だけを純粋に捉えて練習することができる意味で、ICT 教材の利用は効果的であると言える。

ICT 教材については、正しく整った文字の形状をどのように記憶に刻み付けるかということが問われる。そこで、一つデモンストレーションとして文字教育におけるアプリケーションを制作した(図 1)。文字を書く際は、「トン・スー・トン」というリズムで書くという指導を行うが、これは筆の入り方(始筆)と止め方(終筆)という過程でしっかりと押さえることにより、文字の線画が整い字形を正しくすることができる。デモンストレーションでは、トン・スー・トンに当たる部分をクリック音に置き換え、タブレット型 PC に表示された線に合わせて指書きする。通常、筆で書くと紙に何度もなぞって書くことは不可能なので、こうした反復練習はタブレット型 PC ならではの方法と言える。また、この方法のメリットとして、遊び感覚の没入感により、新出漢字を脳内イメージに取り込むことも可能となる。書いて覚える方法に代わる一つの方法となる可能性もあり、文字教育の教材としては学習効果の望める方法として提案できる。

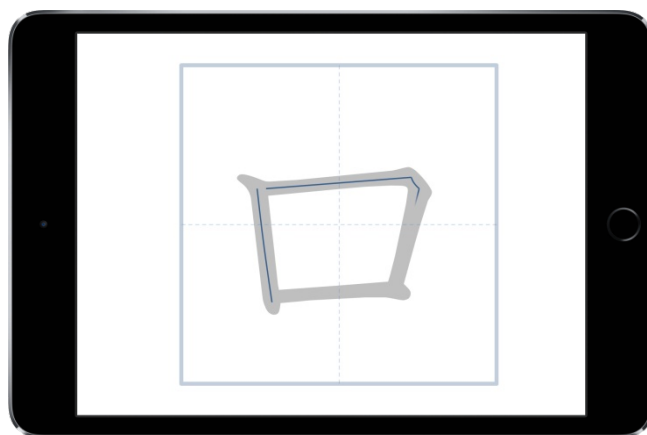


図 1, タブレット型 PC 用の教材例

クリック音とともに文字をリズムよく書く教材

*1 首藤義久「就学前読み書き指導の基本原則」千葉大学教育学部研究紀要第 61 巻、平成 25 年

*2 「常用漢字の字体・字形に関する指針(報告)」文化審議会国語分科会、平成 28 年 2 月

*3 「教育の情報化に関する手引」検討案、文部科学省、平成 21 年 1 月 29 日

*4 「デジタル教科書導入 有識者が 4 年後めどで意見一致」教育新聞、平成 28 年 3 月 4 日

※本研究は JSPS 科研費 15K13238 の助成を受けたものです。

「言語力の育成に効果をもたらす教材開発ーICT の活用ー」(本田容子)

キャベツの開度観測

根岸利一郎

埼玉工業大学, 〒369-0293 深谷市普斉寺 1690

negishi@sit.ac.jp

Observation of the dispersion angle in Cabbages

Riichirou Negishi

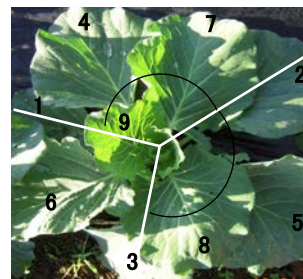
Saitama Institute of Technology, 1690 Fusaiji, Fukaya, Saitama, 369-0293, Japan

Abstract: We observed the cut surfaces of a cabbage stem during sprouting between the first and the third leaves and also externally observed other cabbage stems until sprouting the tenth leaves to investigate their dispersion angles. The result indicates the dispersion angles are determined during the period of time between the third and the tenth leaves.

Keywords: cabbage stem, dispersion angle, golden angle

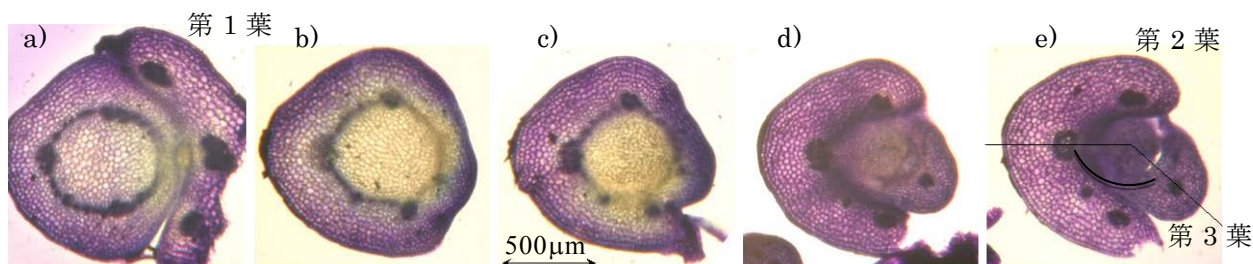
らせん葉序の開度

らせん葉序を形成する身近な野菜にキャベツ、ハクサイなどがあり、野草にはセイタカアワダチソウなどがある。これらのらせん葉序の開度は黄金角に収れんしていることが観測されている。開度が黄金角の場合、開度の角度差の分散は最も小さくなり、葉の付き方のばらつきが最も多くなる。ではそのような開度はいつ決まるだろうか。



開度観測

第3葉が決まるころ、茎を切断してその切断面を観測する。図は手製簡易スライサーで先端部から茎に垂直にカミソリで切断した画像であり、a)～e)は茎の下部からの位置順になっている。a)は第1葉の見える画像であり中央に太い維管束があつて茎中央を挟んだ反対側にも太い維管束がある。b)では茎内の環状部分にa)と同様の維管束が並び、右斜め下の維管束がやや太くなり、その茎の外側には盛り上がりが見える。c)では盛り上がりが大きくなると同時に、第3葉になる維管束が離れ始める。d)になると茎中央の環状部から第2葉と第3葉が維管束とともに離れる。そしてe)では明瞭になった第3葉が第2葉と一定の開度を形成する。この画像から測定される開度はほぼ 138° となる。第4葉以後の開度観測によれば、第10葉くらいまでに開度が安定する。



キャベツの茎のスライス画像、第1葉から第3葉までの位置による葉序方向と開度

根岸利一郎：「ひまわりの黄金比」（日本評論社，2016）。

放散虫のカレンダー

松岡 篤・大河内 春香

新潟大学理学部/形の科学研究センター、新潟市西区五十嵐 2 の町 8050

amatsuoka@geo.sc.niigata-u.ac.jp

Calendar of Radiolaria

Atsushi MATSUOKA and Haruka OHKOUCHI

Faculty of Science, Niigata University, Niigata 950-2181 Japan

Abstract: Several kinds of calendar using images of radiolarian skeletons and living forms were prepared for enhancing a degree of social recognition of radiolarians. These calendars will be utilized to advertise the 15th meeting of the international association of radiolarists (InterRad 15) held in October 2017 in Niigata, Japan.

Keywords: radiolaria, calendar, InterRad 15, social recognition

はじめに

放散虫は“形の科学”研究者には、比較的なじみのある生物であるが、一般社会ではほとんど知られていない。放散虫の社会認知度を高めるために、放散虫の形をモチーフにしたカレンダーを作成した。

放散虫カレンダー

これまでに、放散虫をモチーフにしたぬいぐるみ、クッキー、トランプを作成してきた。これらは、放散虫の社会認知度を高めるために一定の役割を果たしたが、爆発的なブームを形成するには至っていない。この原因は、一般社会での放散虫の露出度が低いためであると考えられる。目立つところに掲示される日常用品にカレンダーがある。このカレンダーの特長に着目して、放散虫をモチーフとして使用したカレンダーを作成した。図1に中生代放散虫の殻の電子顕微鏡写真を利用したカレンダーを例示する。放散虫は、地質時代ごとに異なる殻形態をもつグループがみられることから、多様なカレンダーをつくることが可能である。現生の放散虫はカラフルな色彩をもつことから、カラーの図柄を作成することもできる。

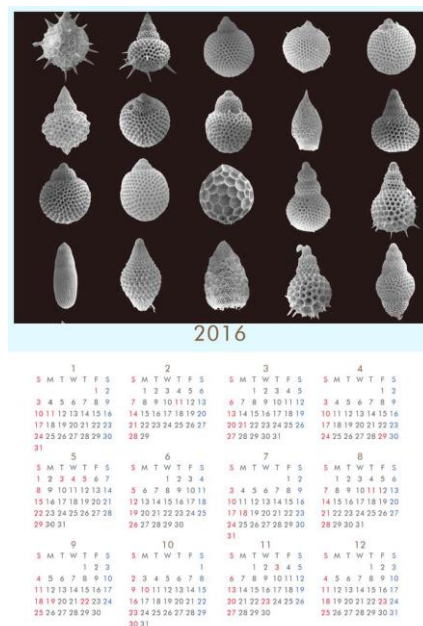


図1 中生代放散虫をモチーフにしたカレンダー

おわりに

2017年10月には、新潟で第15回国際放散虫研究集会(InterRad 15)が開催される。このような国際会議の機会を、学術の発展だけでなく、放散虫の社会認知度を高めるためにも利用しようと考えている。放散虫カレンダーを普及用アイテムとして活用する。

作品展示：折り紙モデルで結晶物性を考える

石原 正三

埼玉県立大学 保健医療福祉学部、
〒343-8540 埼玉県越谷市三野宮 820 番地

shozo@spu.ac.jp

Exhibition: Exploration into physical properties of crystals by means of the Origami-model

Shozo ISHIHARA,

Saitama Prefectural University, School of Health and Social Services,

820 Sannomiya, Koshigaya, Saitama 343-8540, JAPAN

Abstract: With a view to exploring into physical properties of crystals, Origami-models of some crystal structures are demonstrated. While it is remarkable that periodicity, regular repetition of atoms, can be exhibited by the Origami-model made of polyhedral skeletons, it is suggested that by making use of the Origami-model, some physical properties of a crystal may be deduced from the structure itself without referring to chemical composition..

Keywords: the Origami-model, polyhedral skeletons, physical properties of crystal.

1. はじめに

結晶の折り紙モデルは、多面体の骨格構造（スケルトン）を基本構造とする、結晶構造の立体モデルである。折り紙の色彩と造形美を生かして、結晶構造と物性の視覚化を試みた作品と、「科学折り紙の結晶学」と題する口頭発表の中で取り上げた作品を展示する。

2. ダイヤモンド構造、ルチル構造、および、スピネル構造の折り紙モデル

ダイヤモンドは最も知られた宝石だが、その結晶構造はあまり理解されていない。炭素原子の周りを4つの炭素原子が正四面体的に取り囲み、各正四面体は角を共有してダイヤモンド構造を形成している。ダイヤモンド構造の折り紙モデルを制作するとダイヤモンドの固さを実感できる。

ルチル構造は磁性結晶として知られ、八面体の中心の位置にある金属原子間の磁気相互作用により、磁氣的性質が多様に変化する。ルチル構造の折り紙モデルは、角を共有して接続された八面体の中心にある原子間に反強磁性的な相互作用が、稜を共有して接続された原子間に強磁性的な相互作用がはたらく仮定して作られている。

スピネル構造は、鉄の混合原子価化合物である磁鉄鉱（マグネタイト）の結晶構造である。マグネタイトの折り紙モデルは、八面体の中心位置にある鉄の2価(Fe^{2+})と3価(Fe^{3+})の違いを色で区別し、低温相における、電荷の秩序状態（Verwey order）を示している。

3. タングステン・ブロンズ構造の折り紙モデル

「科学折り紙の結晶学」と題する口頭発表において、立方晶、六方晶、および、正方晶の3種類のタングステン・ブロンズ構造の折り紙モデルを取り上げ、それぞれの結晶構造の特徴を折り紙モデルに基づいて説明した。特に、正方晶タングステン・ブロンズ構造を特徴づける八面体の歪について、折り紙モデルから一つの仮説が提案されている。

4. おわりに

実在する数種類の結晶の構造と物性を視覚的に表現する折り紙モデルの作品を展示した。結晶物性を立体構造モデルとして表現することは、結晶の折り紙モデルの特徴であり、更なる発展の可能性を示唆している。今後、結晶の力学的、電氣的、および磁氣的な物性を、結晶の折り紙モデルで表現することを試みることによって、科学折り紙結晶学の発展を期待している。

ダイヤモンド富士におけるミー散乱光

山口喜博 (帝京平成大学:290-0193 千葉県市原市うるいど南 4-1)

chaosfractal@iCloud.com

Spotlights by Mie scattering at the situation of “Diamond Fuji”.

Yoshihiro Yamaguchi (Teikyo Heisei University, Ichihara, Chiba 290-0193, Japan)

Abstract: At the situation called “Diamond Fuji”, we observe numerous spotlights by Mie scattering.

Key words: Mie scattering, “Diamond Fuji”.

毎年2月26日前後、丹沢鍋割山でダイヤモンド富士が見られる。本年(2016年)も26日に丹沢鍋割山に登り、ダイヤモンド富士を撮影した。写真にミー散乱スポット光が写っていたので紹介する。ミー散乱スポット光が見られた主な理由を挙げておく。

- [1] 富士山頂付近を北から南へと流れた霧状の雲に、日没の光が当たりミー散乱が生じた。
- [2] 富士山から丹沢鍋割山までの距離が約38kmで、スポット光が写真に写るぐらい広がった。
- [3] ダイヤモンド富士の状況で、富士山が暗幕の役割を果たした。
- [4] 前日(2016年2月25日)、丹沢一帯には5-10cmの降雪があった。この結果、空気が澄んでいた。



H28.02.26

図 1: 富士山と丹沢鍋割山との位置関係。

ミー散乱

我々が空を見上げると空が青く見える。これは太陽光が空気分子でレイリー散乱された光を見ているためである。一方で雲を見ると白っぽく見える。これは太陽光が雲粒でミー散乱された光を見ているためである。日常の生活でミー散乱光は目に入っている。しかし、ミー散乱光としては認識していない。

雲粒のサイズとほぼ同じ波長の光がミー散乱される。雲粒の大きさは $0.3\text{-}10\mu\text{m}$ 程度で、これは可視光線の波長とほぼ一致する。ミー散乱は意味をとって回折散乱とも呼ばれる。回折のために大きな粒子では前方に光が集まり指向性の強い散乱光となる。言い換えるとスポット光が粒子から出ているように見える。ランダムな方向に出たスポット光が目に入り、また雲粒も小さいのでスポット光として認識できない。

スポット光も距離をとれば広がる。広がったスポット光を自然現象で見ることができないだろうかという疑問を以前から持っていた。太陽光が霧を透過する状況を撮影すれば良いのだが、今までスポット光を撮影できなかった。今回、初めてダイヤモンド富士の状況でスポット光を撮影できた。富士山から丹沢鍋割山までの距離が約 38km であったことが写真に撮れた第一原因であろうと考えている。広角レンズで撮影したダイヤモンド富士の写真でも、頂上付近を拡大するとスポット光による斑点を確認できた。ダイヤモンド富士の写真を撮影している人は多いが、ミー散乱光に気がついている人はいるのだろうか。今回の撮影で、単に見ることと観察することの違いを自分自身で体験した。



図 2: 夕日のダイヤモンド富士。写真の右が北。霧状の雲が北から南へ流れている。雲の中の雲粒に日没の太陽光が当たり、ミー散乱が生じた。大小さまざまな斑点がミー散乱されたスポット光。非常に大きな斑点は、太陽光がレンズに入り起こしたゴースト現象。2016 年 2 月 26 日 17 時 13 分。300mm の望遠レンズで撮影。

参考文献. Mie, Gustav. Annalen der Physik 25 (3) (1908). pp.377-445.
英訳版は下記のホームページにある。

<http://diogenes.iwt.uni-bremen.de/vt/laser/papers/RAE-LT1873-1976-Mie-1908-translation.pdf>

数学曲面模型の開発

手嶋吉法 (千葉工業大学)、井 恭平 (同)、川口拓未 (同)、蓮沼 晃 (同)、小川泰 (筑波大学名誉教授)

Development of Models of Mathematically Defined Curved Surfaces

Y. Teshima* (Chiba Institute of Technology), K. I., T. Kawaguchi,

H. Hasunuma, and T. Ogawa (Prof. Emer., Univ. of Tsukuba)

* yoshinori.teshima@it-chiba.ac.jp

概要： デジタルものづくり技術を活用して数学曲面の模型を製作し、教育や研究に役立てている。パラメトリック曲面の数式を数学ソフト Mathematica に入力し、3次元形状データを表示させ、さらに3Dプリンタ用の造形データ(STL形式)として出力する。ただし、数学曲面には厚みがない為、そのままの造形データでは造形出来ない。STL編集ソフトを用いて厚み付けをする必要があるが、数学曲面の形状によっては、厚み付けが失敗する(しばしば特異点を含む場合)。筆者らは、失敗事例に対して個々に対処し、多くの数学曲面の厚み付けに成功した。その一部を実体化したので展示する。

1. 触って鑑賞する為の数学曲面模型

ヒルベルト、コーン・フォッセンの著書『直観幾何学』に数学曲面模型の写真が沢山掲載されている[1]。ドイツで石膏製の幾何学模型が盛んに製作されたのは1880年頃からで、1932年までMartin Schilling社で生産が続けられたそうである[2]。F. Kleinら当時の第一線の数学者達が中心となってこの模型製作プロジェクトを進めたことが判っている。ただ、当時の技術でどのようにして、このような精確な模型を造り得たのか、具体的な手法は判っていない。当時のプロジェクトが、世界一線級の数学者とドイツが誇る一流職人によって成し遂げられた素晴らしい協働作業であったことを現存する模型が物語っている。

他方筆者らは、触って鑑賞する立体模型を開発するプロジェクトを2006年にスタートさせた。このプロジェクトの主な目的は視覚障害者の触覚鑑賞の世界を豊かにするべく、様々な立体模型を開発するというものであった。数学曲面に関しても、トーラス各種(リングトーラス、ホーントーラス、スピンドルトーラス)、ボヘミアンドーム、フラフープ曲面、サイクライド曲面、双曲放物面、クラインの壺などを作製した[3][4]。

2. 今こそ、直観幾何学模型プロジェクト

上述の模型作製を経験し、デジタルものづくり技術の活用により、100年前のドイツの模型プロジェクトと比べ、現代は数学曲面模型の作製をする上で、圧倒的なアドバンテージがあることが判った。そこで、既知のパラメトリック曲面[5]の模型を網羅的に作成することとした。数学曲面には厚さが無い。それゆえ、造形データ(STL形式)に厚み付けを施すことが、要諦となる。これは、STL編集ソフト

Magics を駆使しておこなった。以下に、実体化した数学曲面の一部を示す。



(上) spherical harmonics

(右) Jeener-Klein 分割模型



参考文献

- [1] ヒルベルト (著)、コーン＝フォッセン (著)、芹沢 (訳)『直観幾何学』(1966)
- [2] 河野俊丈、数理模型レファレンス標本について (http://www.um.u-tokyo.ac.jp/publish_db/1997Archaeology/04/40800.html)
- [3] Y. Teshima, T. Ogawa, M. Fujiyoshi, Y. Ikegami, T. Kaneko, S. Oouchi, Y. Watanabe, K. Yamazawa, Models of Mathematically Defined Curved Surfaces for Tactile Learning, Lect. Notes. Comput. Sci., (2010) 6180, pp.515-522
- [4] 手嶋吉法、空間を味わい、形を造る, 数学文化 (Journal of Mathematical Culture), (2010) 14-1, pp.51-62
- [5] 数学曲面の数式と図が掲載されている WEB サイト (www.atlantis23.com/ei_parmsurf/parametricsurfaces_catalog.html)

有孔虫骨格の拡大模型の開発

手嶋吉法 (千葉工業大学)、星野捷 (同)、渡辺宏 (同)、木元克典 (海洋研究開発機構)、松岡篤 (新潟大学)

Development of Enlarged Skeleton Models of Foraminifera

Y. Teshima* (Chiba Institute of Technology), S. Hoshino, H. Watanabe,

K. Kimoto (JAMSTEC), and A. Matsuoka (Niigata Univ.)

* yoshinori.teshima@it-chiba.ac.jp

概要: 有孔虫の微化石 26 種類を X 線 CT 撮影し、26 種類の造形データ (STL 形式) を生成し、STL 編集ソフトを用いて自明なノイズの除去を行った。それら造形データを実体化し、有孔虫の専門家による非自明なノイズの指摘を経て、更なるノイズ除去を造形データに対しておこなった。熱溶解積層法および粉末焼結法の 3D プリンタで有孔虫の拡大模型 20 種類を造形した。

1. はじめに デジタルものづくり技術を用いて、精確な形状データに基づく立体模型を開発し、それらを教育や研究に活用する取り組みが行われている[1]。本研究では、研究支援用の有孔虫の拡大模型を開発することを目的とする。

2. X 線 CT 撮影とデータ編集 サンプルである有孔虫の微化石(新潟大学 松岡篤教授 ご提供)を、X 線 CT 装置を用いて CT 撮影を行った。本研究で使用した X 線 CT 装置は、海洋研究開発機構所有の ScanXmate-DF160TSS105 である(図 1)。図 2 に、X 線 CT 撮影により得た微化石の二次元断層画像を示す。画像処理ソフト ImageJ を用いて、微化石の二次元断層画像(tiff 形式)を三次元形状データ(OBJ 形式)に変換した。また、変換した三次元形状データ(OBJ 形式)をデータ変換ソフト Netfabb Basic を用いて、造形データ(STL 形式)に変換した。微化石の造形データ(STL 形式)には、砂や金属(黄鉄鉱)などの不純物によってノイズが含まれている。精確な立体模型を開発するために、STL 編集ソフト Magics 9.51 を用いて、造形データ(STL 形式)のノイズ除去を行った。ノイズ部分のメッシュを削除し、メッシュを削除したことで穴が開いてしまった箇所に穴埋めを行う。また、カットのコマンド(メッシュ指定ではなく空間の範囲を指定する)によるノイズ除去も行った。

3. 模型の造形と評価 自明なノイズ除去が完了した造形データ(STL 形式)をもとに、3D プリンタで拡大模型の造形を行った。本研究では、熱溶解積層法と粉末焼結法の 2 種類の 3D プリンタを用いて造形を行った。熱溶解積層法の 3D プリンタは本研究室所有の Replicator2X を使用し、粉末焼結法の 3D プリンタはアスペクト社の RaFaE1300C を使用した。造形した模型一式を、有孔虫の専門家である海洋研究開発機構の木元克典博士に評価して頂いた。図 3 に、評価して頂いた有孔虫の拡大模型を示す。ノイズ除去が不十分な箇所にペンで色付けをして頂き、それを参考に更なるノイズ除去を行った。



図 1 X 線 CT 装置
ScanXmate-DF160TSS105
(海洋研究開発機構所有)

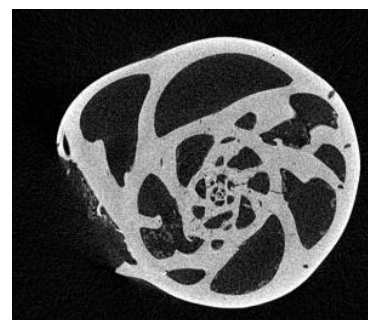


図 2 微化石の断層画像
(学名 : Cassidulina)

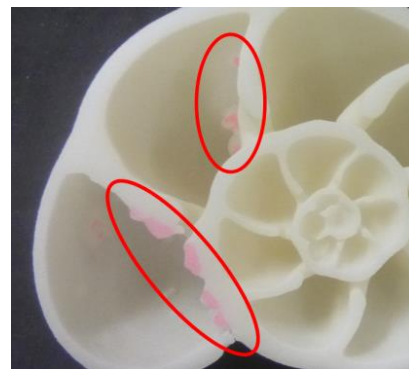


図 3 有孔虫の拡大模型(学名 : Pullenia)

参考文献 [1] Y. Teshima, A. Matsuoka, M. Fujiyoshi, Y. Ikegami, T. Kaneko, S. Oouchi, Y. Watanabe, K. Yamazawa, Enlarged Skeleton Models of Plankton for Tactile Teaching, *Lect. Notes. Comput. Sci.*, (2010) 6180, pp.523-526

～方位角の波動関数の形を代数構造から探る～

北海道科学大学 高等教育支援センター 小川直久

Abstract

大学生が最初に量子力学を教わると、全ては Schrodinger 方程式を解けば解決するように錯覚する。初等関数だけでいける場合なら簡単だが、調和振動子となるとエルミート関数が、水素原子になるとラゲール関数、ルジャンドル関数が表れて、これは大変だということになる¹⁾。大変ながらもそれを勉強し終えて、何が残ったかという「大変だった」という印象しか残らない。さすがにこれでは詰まらない。調和振動子の場合も、球面調和関数の場合も代数を使えばびっくりするほど簡単に事が済むのだが、この面白さを知らないで量子力学とオサラバしてしまう輩が多いのは勿体ない。ちなみに前者は場の量子化の問題と密接に関係しているし、後者は角運動量の代数 (SU(2)代数) の表現論である。さて、分子の構造を規定しているのは、各々の原子の電子密度分布である。基本的な考え方は水素原子の波動関数であり、その広がりの方は球面調和関数が決めている。本論では球面調和関数の各量子数での波動関数の形を代数のみで表現して、異なる磁気量子数を持つ状態 (形) の間の関係が SU(2)群²⁾ (空間回転群) で結びつけられることを示す。

SU(2)Algebra

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k,$$

の代数を SU(2)代数という。ここで ϵ は 3 次元の完全反対称単位テンソル、ラテン文字 i, j, k はいずれも、 $1=x, 2=y, 3=z$ の値を取る。これは通常角運動量演算子の満たすべき代数関係である。演算子を指数の肩に上げて、 $i\theta$ をつけたものは回転群の要素となり、以下それぞれ、 x 軸周りの角度 θ 回転、 y 軸周りの角度 θ 回転、 z 軸周りの角度 θ 回転を表す。

$$U_x(\theta) = \exp\{-i(\hat{L}_x/\hbar)\theta\}, \quad U_y(\theta) = \exp\{-i(\hat{L}_y/\hbar)\theta\}, \quad U_z(\theta) = \exp\{-i(\hat{L}_z/\hbar)\theta\}.$$

SU(2)の表現論

以下、簡単のため $\hbar = 1$ の単位を用いる。 z 軸方向の角運動量演算子の固有値を m として、その固有状態を $|m\rangle$ で表し、

$$\hat{L}_z|m\rangle = m|m\rangle$$

と置くと、

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$$

の定義を用いて、

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hat{L}_{\pm}.$$

が得られるので、これから

$$\hat{L}_z(\hat{L}_{\pm}|m\rangle) = (m \pm 1)(\hat{L}_{\pm}|m\rangle)$$

のように、 m の値は 1 ずつ変化することがわかる。 $m_{max} = l$ と置くと、これよりも大きな固有値の状態は存在しないので、最大ウェイト状態に対して

$$\hat{L}_+|l\rangle = 0,$$

が得られ、最大ウェイト状態から下降演算子を演算して得られる一般の状態に対して、

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$$

が得られる。また、状態のノルムが0にならないための条件を調べると以下の条件を得る。

$$-l \leq m \leq +l$$

Form of $l=1$ State (p 軌道)

角運動量の $l=1$ (p)State での表現行列を求めると

$$(L_j)_{mn} \equiv \langle 1, m | \hat{L}_j | 1, n \rangle, \quad j = 1, 2, 3$$

得られた行列を用いて回転行列を作り、状態

$$|1, x\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, -1\rangle - |1, 1\rangle), \quad |1, y\rangle \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle), \quad |1, z\rangle \equiv |1, 0\rangle.$$

に回転の演算子を作用させると、

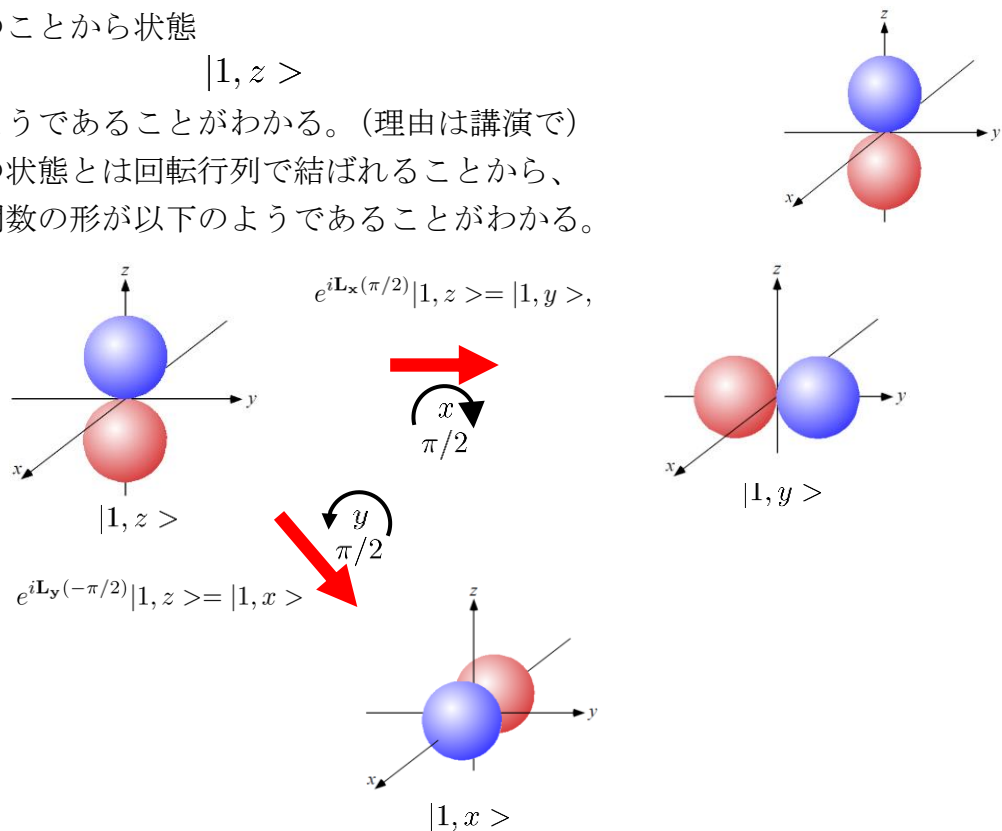
$$e^{i\mathbf{L}_z\phi} |1, z\rangle = |1, z\rangle \quad e^{i\mathbf{L}_x\pi} |1, z\rangle = -|1, z\rangle \quad e^{i\mathbf{L}_y\pi} |1, z\rangle = -|1, z\rangle$$

が得られて、このことから状態

$$|1, z\rangle$$

の形が、右図のようであることがわかる。(理由は講演で)

さらにそのほかの状態とは回転行列で結ばれることから、他の状態の波動関数の形が以下のものであることがわかる。



同様な対応関係は、 d 軌道に関しても存在し、代数構造のみから状態の形を判定可能である。

講演では、 d 軌道についての状態の判定までを行う。最後に軌道角運動量ではないがスピン $1/2$ の場合の例を述べる³⁾。

参考文献

- 1) L. I. Schiff: Quantum Mechanics ; P. A. M. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics
- 2) 例えば、「連続群論入門」山内恭彦、杉浦光夫 著
- 3) R.P. Feynman: Elementary Particles and the Laws of Physics

オービタルのかたち—節面と規則性

時田 澄男 (埼玉大学 名誉教授)

〒330-8750 埼玉県さいたま市桜区下大久保255

e-mail: tokita@apc.saitama-u.ac.jp

Visualization of Orbitals Classification According to the Node Type

Sumio Tokita, Saitama University (Emeritus)

255 Shimo-Ohkubo, Sakura-ku, Saitama, Saitama, 338-8570, Japan

Probability density distribution in the 3-dimensional representation of hydrogen atomic orbitals was developed. It was compared with 3-D isosurface model. Isosurface models can hardly show the entire region where an electron can be found. On the other hand, in the diagram of probability density distribution models, an electron is found everywhere around the nucleus. The density of the dots sculptured in the glass block shows the probability density of finding an electron, so the nodal plane is well described as spherical shell(s) or planar and conical node(s) symmetrical about z axis where the dots cannot be found. In the diagram of probability density distribution model, we can compare the size of the orbitals from their distribution regions. Number of these nodes together with planar nodes including z axis in hydrogen atomic orbitals is summarized in Table 2 in terms of n : principal quantum number, l : azimuthal quantum number, and m : magnetic quantum number.

Keywords: electron, visualization, hydrogen atom, carbon atom, radial distribution function, spherical harmonics, p orbital, d orbital, f orbital, spherical node, planar and conical node symmetrical about z axis, isosurface, real 3-dimentional representation of electron cloud

和訳：水素原子オービタル（軌道）の 3 次元表記における確率密度関数が開発された。それは 3 次元等値面モデルと較べられた。等値面モデルでは電子が見出される全領域を示すことはほとんど不可能である。一方、確率密度分布モデルでは、核の周りのあちらこちらに電子を見出すことができる。ガラスブロックに刻まれたドットの密度は電子を見出す確率密度を示しており、節面は、ドットの見いだされない z 軸の周りに、球状の殻や平面とコーン状の節（ノード）としてうまく表される。確率密度分布図においては、軌道の大きさをそれらの分布領域と較べることができる。水素原子オービタルにおけるこれらの節の数は、 z 軸を含む平面節とともに、表 2 に、主量子数 n 、方位量子数 l 、磁気量子数 m の術語を用い、まとめられている。

電子励起状態ポテンシャルの形と光化学反応 ～フォトクロミック分子（ジアリールエテン）の光異性化反応を例に～

小林高雄

(株) MCHC R&D シナジーセンター、横浜市青葉区鴨志田町 1 0 0 0

e-mail: kobayashi.takao@ms.mchc-rdsc.co.jp

The shape of electronic excited state potential energy surfaces and photochemical reactions: A case of photoisomerization reactions of photochromic diarylethene molecules

Takao Kobayashi

MCHC R&D Synergy Center, Inc., 1000 Kamoshida-cho, Aoba-ku, Yokohama

Abstract: The relationship between the shape of electronic excited state potential energy surfaces and photochemical reactions is shown as a case of photoisomerization (photochemical ring-opening and closure) reactions of photochromic diarylethene molecules.

Keywords: photochemistry, photochromism, diarylethene, excited state, quantum chemistry

【序】「光化学」とは光が物質に照射されると何が起きるのかを調べる学問領域である。量子力学からの要請により光の性質には二重性があり、波動としての性質の他に、粒子としての性質も有し、光の粒子は光子 (photon) と呼ばれる。光子が物質 (あるいは生体) に照射・吸収されると、それはエネルギー源として作用し、「発色」「発光」「反応」「分解」「発電」などの物理・化学現象を引き起こす。それら光によって引き起こされる物質あるいは生体の現象は光合成を初めとして自然界でも多く見られる一方、写真・印刷・記録用色素、発光材料、フォトクロミック材料、センサー、太陽電池、人工光合成、光治療など産業面・医療面で広く応用されている。物質は分子の集合体であるため、物質に光が照射された後、物質がどのように、何故、変化していくのかを、物質の基本構成単位である分子のスケールで原理的に解明することは科学面だけでなく、応用面でも非常に重要である。

【分子に光が照射されると何が起きるか?】分子は原子核と電子から構成されている。原子・分子スケール (オングストローム ($\text{\AA}$) $=10^{-10}$ m のオーダー) では、分子内の電子の振る舞いは量子力学に従っており、分子内に束縛された電子の状態は、連続的ではなく離散的なエネルギーを持っている。図 1 には光化学反応する反応物分子から生成物分子までの電子状態 (が原子核に対して形成する) ポテンシャルエネルギー面の下から 1 番目 (基底状態)、2 番目 (励起状態) を模式的に示した。反応物として基底状態にいる分子は 2 つのレベルのエネルギー差に相当する波長の光

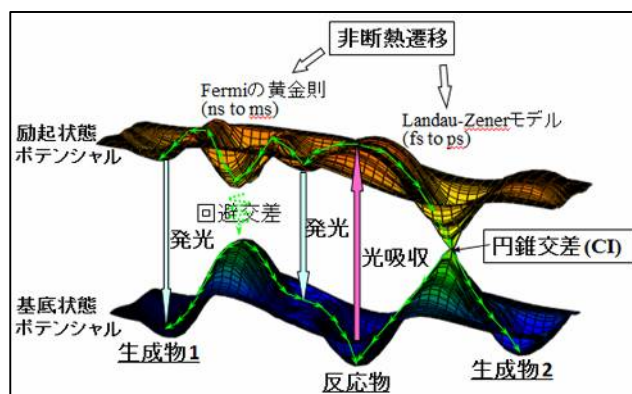


図 1 光吸収後に分子が辿る過程

(光子)を選択的に吸収して、励起状態に上がり(励起され)、その後、反応物に戻る過程と、構造変化(あるいは電荷変化)して生成物に至る過程がある。後者は「光化学過程」と呼ばれ、前者の反応物に戻る(光物理)過程には光を放出して戻る過程と光を放出せず熱(分子振動)を放出して戻る2つの過程が存在する。前者は「発光(輻射失活)」、後者は「無輻射失活」過程と呼ばれる。分子の光物理・光化学過程を追跡することは、イメージとして、光吸収により上のポテンシャル面に上がった球がどのように下のポテンシャル面に落ちてくるかを追跡することに対応する。理論化学の教科書[1]には“Chemistry is knowing the energy as a function of nuclear coordinates”(化学とは原子核座標の関数として(電子状態ポテンシャル)エネルギーを知ることである)とある。まさに「化学とは原子核座標の関数としてポテンシャル面の形(=分子構造が変化するとポテンシャルがどのように変化するか)を知ること」であると意味している。但し、光ではなく熱による反応では一般に、1つのポテンシャル面の形のみ知ればよいのに対して、「光化学」の場合は「反応に関与する複数のポテンシャル面の形と異なるポテンシャル面間の相互作用を知る」必要がある。光化学を考える際に重要なことは、複数のポテンシャル面の形だけではなく、異なるポテンシャル面間の相互作用を考慮した上で、異なるポテンシャル面間のどこ(どの構造)で、どのように乗り移り(無輻射遷移)、その後、どのような分子構造変化を辿るのかということである。電子状態ポテンシャル間の無輻射遷移は非断熱結合と呼ばれる(断熱)電子状態間の相互作用によって引き起こされるため「非断熱遷移」と呼ばれるが、「円錐交差(conical intersection(CI))」と呼ばれる2つのポテンシャル面間の交点の近傍で効率的に生じることが知られている。詳細は本講演の中で説明する。

【ジアリールエテンの光異性化反応(フォトクロミズム)】フォトクロミズムとは光照射により物質の光吸収・発光などの光物性が可逆的に変化する現象である。ジアリールエテンはフォトクロミズムを示す代表的な分子である[2]。図2にジアリールエテン主骨格のフォトクロミズムを示した。ジアリールエテンには閉環体、開環体の2種類の構造異性体が存在し、一般に閉環体は着色体、開環体は無色体である。これら2種類の構造異性体は互いに光(閉環体には可視光、開環体には紫外光)照射により相互変換(光異性化)が可逆的に可能である。

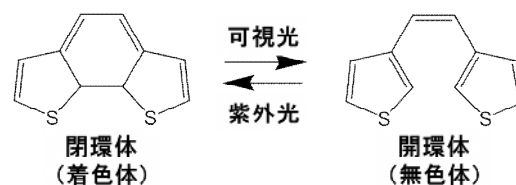


図2 ジアリールエテンのフォトクロミズム

本講演ではジアリールエテンのフォトクロミック(光開環・閉環)反応を例に、その電子基底・励起状態ポテンシャル面の形と円錐交差(CI)の特徴といった「静的」な特性を *ab initio* (=非経験的)量子化学計算から明らかにするだけでなく[3]、ジアリールエテン閉環体のモデル分子であるシクロヘキサジエン(CHD)の光開環反応を対象に、その光励起後の複数ポテンシャル面に跨る分子の「動的」な運動を *ab initio* 非断熱分子動力学と呼ばれる計算手法で直接シミュレートすることにより、ジアリールエテンの光化学反応性を議論する。

【参考文献】[1] Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*; Wiley, 2007. [2] Irie, M., *Chem. Rev.*, **2000**, 100, 1685. [3] (a)Guillaumont, D.; Kobayashi, T., *et.al.*, *J. Phys. Chem. A*, **2002**, 106, 7222. (b)Asano, Y.; Murakami, A.; Kobayashi, T., *et.al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2004**, 126, 12112. (c)Kudernac, T.; Kobayashi, T., *et.al.*, *J. Phys. Chem. A*, **2013**, 117, 8222.

化学素反応における分子軌道の“形”の最小変化

量子科学の新しい観点と福井—Woodward-Hoffmann 理論の統一

野平 博之

埼玉大学名誉教授

〒338-0826 さいたま市桜区大久保領家51-1

h.nohira@jcom.home.ne.jp

Minimum change of “shapes” of molecular orbitals in the elementary chemical reactions

A new aspect on quantum science and unification of FWH theories

Hiroyuki Nohira

Okuboryoke 51-5, Sakura-ku, Saitama-shi, 338-0826, Japan

Abstract: Changes of chemical substances (molecules) are quantized, and cannot be described continuously. When a certain molecule changes to another one in an adjacent quantized state, the “shapes” of its electronic states are conserved in the adjacent states with the minimum changes of them. The Fukui and Woodward-Hoffmann theories can be unified consistently by this concept.

Keywords: elementary reaction, conservation of orbital phase, dynamic correlation diagram

1. 1981 年のノーベル化学賞は福井と Hoffmann に与えられた。福井の業績は “フロンティア軌道理論” [1] であり、Hoffmann のそれは Woodward (1979 年、没) と共に提唱した “軌道対称性保存の理論、通称 Woodward-Hoffmann (W-H) 則” [2] である。

私は Harvard 大学の Woodward 研究室でのビタミン B₁₂ の合成研究に参加し、1972 年の秋に帰国した。その直後に W-H 理論の骨子である軌道相関図の描き方に疑問を抱き、これを克服する新しい提案[3,4]をして、今日に至っている。私の提案は、残念ながら、まだ受け入れられているとは言い難いが、その概要と問題点を明らかにする。

2. W-H 理論の問題点

Fig. 1 はブタジエンとエチレンの付加によりシクロブテンを生成する Diels-Alder 反応軌道相関図である。ここで実線が私が提案した相関図であり、破線が W-H が提示したものである。両者の違いは私の図では相関線 $\chi_1 - \pi$ と $\pi - \sigma_1$ が交差しているのに対して W-H のそれは Neumann-Wigner の非交差則[5]に従って交差を避けている点にある。

なお、福井の理論から導かれる相関図は論理的に我々のものと同じである。

3. 通常、化学反応の中間過程の解析は

Born-Oppenheimer (定常状態) 近似と呼ばれる枠組みの中で行われている。そこでは、波動方程式における位置の変数($\mathbf{r}$)を時間の変数(t)から分離したうえで、分子の電子状態は原子核がつくるポテンシャルに電子がただちに追従すると仮定している(下式)。しかしながら、化学

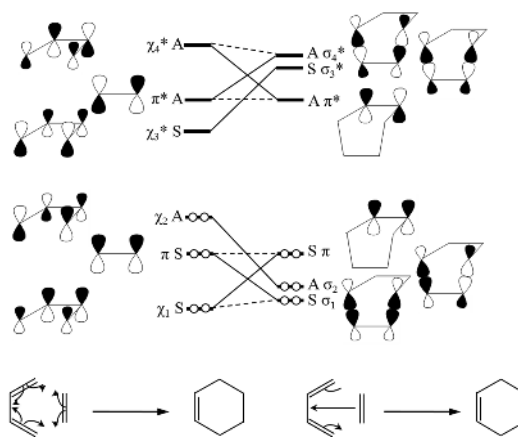


Fig. 1 Correlation diagrams for the Diels-Alder reaction by the author (solid lines) and by Woodward-Hoffmann (dashed line).

反応は時間の経過に伴って化学構造が変化する現象であるから、Fig.2 に示すように、位置座標(r)は時間(t)の関数であり、本来、分離は不可能であって、化学反応の中間状態にこの近似を適用することには限界があり、系のエネルギー(E)と時間(t)は同時には確定出来ないという不確定性原理に照らし合わせ、非交差則はその根拠が失われるものと考えられる[4]。

The time independent equation

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi(r) = E \Psi(r)$$

4. 提案している基本概念の骨子[4,6]

安定な分子：少なくとも1回の固有振動を行うことができるだけの寿命をもつ原子集団(最小寿命： $10^{-14} \sim 10^{-13}$ s)；**素反応**：途中に定常状態として近似できるような中間体を経ることなく1段階で進行する反応；**軌道相最小変化の原理**：素反応過程において、反応系の分子軌道の形(軌道相)は最小の変化を受けるのみで生成系に受け継がれる；**動的相関図**：軌道相の最小変化の考えに基づいた相関図

5. 例として、Fig.3にDewar benzeneの熱分解でbenzene の励起状態が生じる反応を示す[7]。

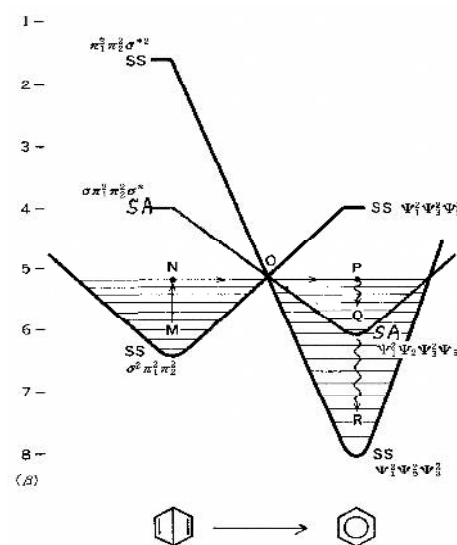
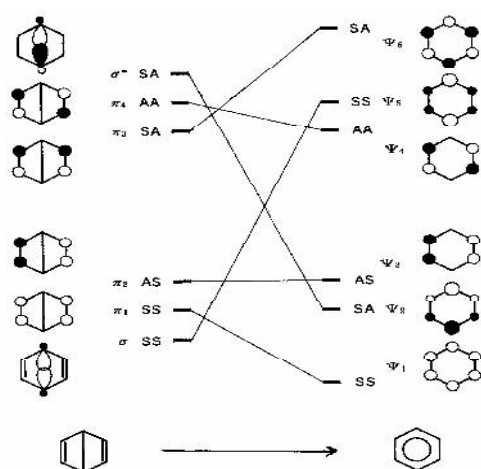


Fig.3 (a) The dynamic correlation diagram and (b) the corresponding state diagram for the conversion of Dewar benzene to benzene.

参考文献

- [1] K. Fukui, *Acc. Chem. Res.* **4**, 57(1971).
- [2] R. B. Woodward, R. Hoffmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **8**, 781(1969).
- [3] Nohira, H. *Tetrahedron Lett.*, 2573 (1974), および 野平、現代化学、**149**, 16 (1983).
- [4] H. Nohira, T. Nohira, *J. Theor. Comput. Chem.* **11**, 379(2012).
- [5] J. von Neumann, E. Wigner, *Z. Physik.* **30**, 467(1929).
- [6] 野平、日化53秋年会、1V01 (1986, 名古屋).
- [7] H. Nohira, T. Nohira, Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2A4 (2013, Sendai).

力学系平衡点の可視化とデザインへの応用

山岡久俊^{*}, 竹内琢磨

^{*} 川崎市麻生区上麻生 3-3-11,302 (akoamay@gmail.com)

Visualization of Equilibrium of Dynamical Systems and Its Application to Design

Hisatoshi Yamaoka^{*}, Takuma Takeuchi

Abstract: How to visualize and recognize the 4-dimensional trajectory of dynamical systems? The phase portraits of dynamical systems can be categorized by the signs of system's eigenvalues. Though it is hard to visualize in case of more than three dimensional system. Our trial is to create the method of visualization for any dimensional dynamical system's equilibrium.

Keywords: dynamical system, visualization, saddle point

1 はじめに

力学系の平衡点近傍における解軌道の位相的性質は、平衡点の周りで線形化した系の固有値の符号のとり方により幾つかの種類に分類し、その定性的な形状を描いて理解することが可能である [1]。しかし力学系の次元数が4以上の場合、それを図示することが困難となる。今回、次元数にかかわらず統一的な方法で平衡点近傍の性質を把握できる画像を生成する方法を検討した。具体的には平衡点に関する安定多様体と不安定多様体に注目し、多様体上の軌道を直交基底軸にとった2次元平面上にその平衡点近傍の軌道の特徴量をプロットする方法を考案した。

2 4次元力学系の平衡点

原点を平衡点に持つ4次元力学系を平衡点付近で線形化すると

$$\dot{x} = Ax, x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in R^4 \quad (1)$$

と記述できる。ここで A は

$$A = \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad (2)$$

であり4次の正方行列となる。また $f(x)$ は線形化する前の系の方程式である。

式(1)は線形であり、その一般解は基底関数 $e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t}, e^{\lambda_3 t}, e^{\lambda_4 t}$ の重ね合わせで表現することができる。 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ は A の固有値であるため、式(1)の定性的な性質はこれらの固有値の実部の符号によって決まる。図[1]に固有値の分布の例を示す。

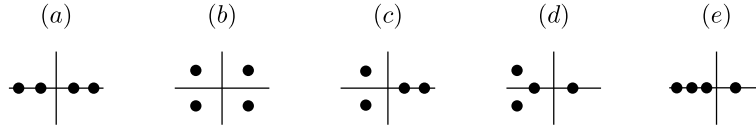


図 1 固有値の分布．実軸，虚軸上に配置．(鞍点のみ．安定性による左右配置の違いは無視)

3 平衡点の多様体と特徴量画像

図 [1] で示した固有値の分布は，その平衡点に関する安定，不安定多様体の次元数に対応している．平衡点 x_0 について，その点の安定多様体 $W^s(x_0)$ と不安定多様体 $W^u(x_0)$ は次のように定義できる．

$$W^s(x_0) = \{x : \psi^t x \rightarrow x_0, t \rightarrow +\infty\}, W^u(x_0) = \{x : \psi^t x \rightarrow x_0, t \rightarrow -\infty\} \quad (3)$$

平衡点付近の解の軌道は安定多様体と不安定多様体上の直積によって定まることが知られており [1]，これらを描画すればその平衡点の性質が理解可能である．しかし多次元多様体同士の直積をそのまま図示するのは難しい．そこで今回，安定多様体上の解軌道 $\phi^s(t)$ を x 軸にとり，不安定多様体上の解軌道 $\phi^u(t)$ を y 軸にとった座標平面を作り，座標平面上の各点 $(\phi^s(t), \phi^u(t))$ に対応する元の力学系の軌道ベクトルを求め，それらの特徴量画像を生成することで平衡点の特徴を可視化する方法を検討した．作成した特徴量画像の例を図 [2] に示す．

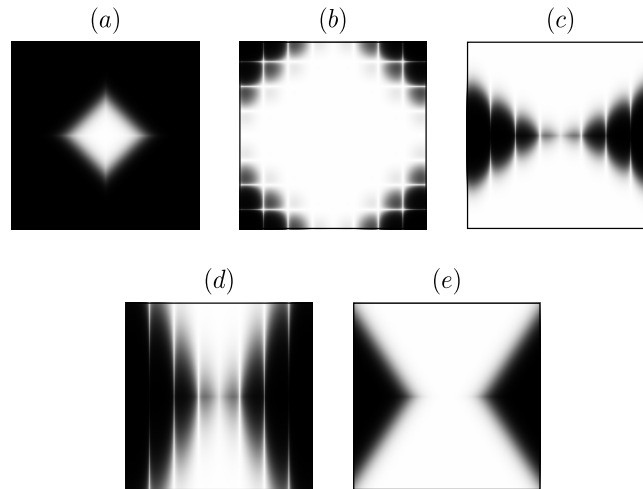


図 2 平衡点の特徴量画像．図 [1] の固有値分布に対応．いずれも中心 (原点) が平衡点． x, y 軸としてそれぞれ安定，不安定多様体上の解軌道 $\phi^s(t), \phi^u(t)$ を置いている．このため直積の元が 1 次元となり，さらに高次元の系であっても同様の画像を生成することができる．

講演では特徴量画像の生成方法の詳細の他，デザイン・アートへの応用等についての検討結果も提示する．

参考文献

- [1] Yuri A. Kuznetsov, Elements of Applied Bifurcation Theory Third Edition (Springer, 2004), P.45.

14 面体立体パズル「レインボーキューブ」の 解法表示ソルバーの開発

竹内 琢磨*, 山岡 久俊

*takumatakeuchi@gmail.com

Implementation of Rainbow Cube Solver

Takuma TAKEUCHI *, Hisatoshi YAMAOKA

Abstract: Rainbow Cube is a color matching puzzle which has fourteen faces and seven facet colors. In this presentation, we propose a new implementation of Rainbow Cube solver with the computer algebra system GAP and demonstrate our solver software.

Keywords: Rainbow Cube, solver software, computer algebra, GAP

1 はじめに

ルービックキューブに代表されるように、現代では数々の色合わせ立体パズルが創作されている。その中の1つが、2006年にWatanabeらによって、結晶の面心立方最密充填構造をモデルとして提唱された立体パズルのレインボーキューブ(図1)である[5]。レインボーキューブの特色としては、8個の正三角形と6個の正方形の面を持つ14面体であり、それらが7色に塗り分けられていることにある。ところで、色合わせ立体パズルの代表格であるルービックキューブにおいては、色がバラバラの状態から自動で解法を導くアルゴリズムが広く考案されている。アルゴリズムの1つとしては、GAPなどの計算機代数システムを用いて解く方法がある[1, 2, 3]。ルービックキューブが、6面を回転する操作を生成元とする置換群として表すことができるため、計算機代数の問題として表現できるからである。こうしたアルゴリズムを用いて、ルービックキューブの解法を表示するソフトウェアの開発も行われている[4]。しかし、ルービックキューブ以外の色合わせ立体パズルの多くにおいては解法導出アルゴリズムが知られておらず、解法を表示するソフトウェアなども殆ど無い。そこで我々は、レインボーキューブをGAPを用いて解く方法を考案し、かつ、その方法を利用したレインボーキューブ解法表示ソルバーを開発した。

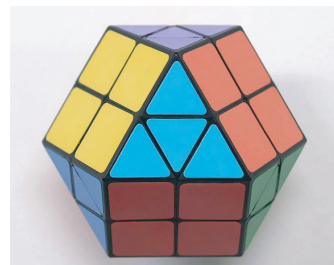


図1 レインボーキューブ外観
(写真は[5]より引用)

2 計算機代数システム GAP

計算機代数システム GAP (Groups, Algorithms, and Programming) とは、整数論や群論などにおける代数計算を支援するためのオープンソースの数式処理システムである [1]. 15 パズルやルービックキューブなどの群構造を利用できる分野で幅広く応用されている [2, 3]. たとえばルービックキューブにおいては、6 面を時計回りに 90 度回転する操作を定義して GAP に入力するだけで、与えられた模様が実現可能か調べる、あるいはバラバラの状態から揃える解法を求めるといった操作が可能となる. バラバラの状態から元に戻す解法は、以下の 2 つの手順で行う. まずバラバラの状態をルービックキューブ群の 1 つの元とみなし、それを生成元の積として表現する. 次に、その積の逆元を計算して出力する. この逆元こそがバラバラの状態から揃える解法となっている.

3 レインボーキューブソルバー

今回、我々はレインボーキューブを自動で解く手法およびそれを搭載した解法表示ソルバーを開発した. 具体的にいえば、まずレインボーキューブの 8 つの三角形の面を時計回りに 120 度回す操作を生成元として置換群を構成した. 次に、レインボーキューブ群の構造を GAP に入力し、GAP を用いてレインボーキューブの色を揃える操作を構成した. さらに、GAP を解法エンジンとして、レインボーキューブの状態入力と解法出力を GUI で行うソフトウェア「レインボーキューブソルバー」を開発した. 本ソルバーのスクリーンショットは図 2 の通り

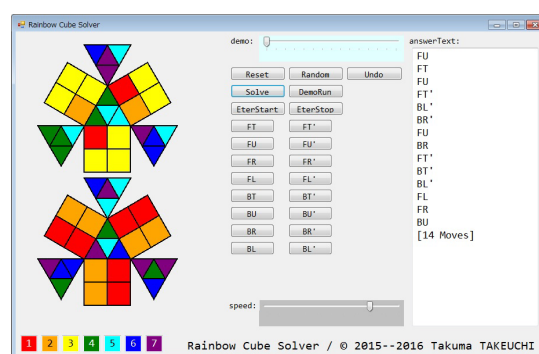


図 2 レインボーキューブソルバー

である. 講演では上記の説明とソルバーのデモに加え、GAP での実装を通じて得られたレインボーキューブの数理的性質などについても言及する予定である.

参考文献

- [1] GAP – Groups, Algorithms, Programming – a System for Computational Discrete Algebra, <http://www.gap-system.org>
- [2] Joyner, D. (2008). Adventures in group theory: Rubik's Cube, Merlin's machine, and other mathematical toys. JHU Press.
- [3] Radu, S. (2005). A New Upper Bound on Rubik's Cube Group. arXiv preprint math/0512485.
- [4] Tasaki, T., Fujimoto, M. (2009). On the Rubik's Cube solution software using GAP. Suri Kaiseki Kenkyujo Kokyuroku, 1652, 125-131. (in Japanese)
- [5] Watanabe, Y., Ikegami, Y., Yamazawa, K., Murakami, Y. (2006). World of Scientific Puzzle Art Using Layer Manufacturing. Forma, 21(1), 37-48.

ギーリス曲線の特徴とプロダクトデザインへの応用

松浦真也*, 齋藤邦彦**

* 愛媛大学, 〒790-8577 愛媛県松山市文京町 2-5

matsuura.masaya.mx@ehime-u.ac.jp

** 滋賀大学, 〒522-8522 滋賀県彦根市馬場 1 丁目 1-1

kuni.saito@gmail.com

Characteristics of Gielis curves and their application to product design

Masaya Matsuura*, Kunihiko Saito**

* Ehime University, 2-5, Bunkyo-cho, Matsuyama, Ehime 790-8577

** Shiga University, 1-1-1 Bamba, Hikone, Shiga 522-8522

Abstract: Circles, ellipses, squares, rectangles, rhombuses and cross shapes are all special cases of Lamé curves. As a further generalization of Lamé curves, the Belgian botanist Johan Gielis introduced the so-called Gielis curves which can describe a wide range of various shapes. In this talk, we closely examine the mathematical structure of Gielis curves with a view to the application to product design.

Keywords: Gielis curves, Mathematical curves, Product design, Design Engineering

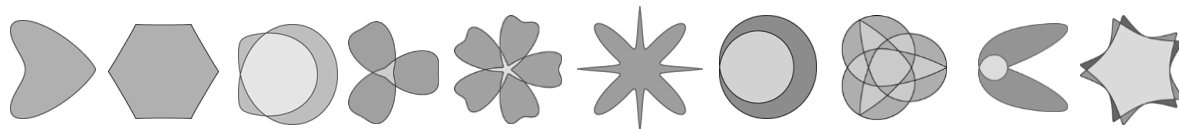
1. ラメ曲線とギーリス曲線

20 世紀半ばより, 北欧ではラメ曲線(別名: スーパー楕円)がデザインに用いられてきた. ラメ曲線に対する数学的な解析は Lamé が初めて行い, その後, Allard, Gridgeman, Matsuura とも考察を加えている([1], [4], [5], [7]). ラメ曲線と北欧デザインの関係については, Gardner による解説がある([2]).

20 世紀末になり, ベルギーの植物学者 Johan Gielis は, ラメ曲線を拡張したギーリス曲線を提案した([3]). ギーリス曲線は 6 個のパラメータを持つ平面曲線で, 極方程式

$$r(\theta) = \left\{ \left| \frac{1}{a} \cos \frac{n\theta}{4} \right|^{p_1} + \left| \frac{1}{b} \sin \frac{n\theta}{4} \right|^{p_2} \right\}^{-\frac{1}{q}}$$

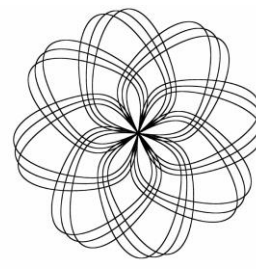
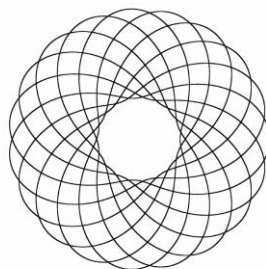
で表される. パラメータ値を変化させると, 多様な形が表現できる. いくつか例示する.



ただし, ギーリス曲線は正方形を除き, 厳密な正多角形を表現することはできない. 上の図の「正 6 角形」も, 厳密な正 6 角形ではない. 一方で, 特に 11 角形以上では, 正多角形をかなりの精度で近似できることも分かっている([8]). また, ギーリス曲線に類似の形を与え, しかも厳密な正多角形も表現できる閉曲線も考案されている([6]).

2. ギーリス曲線のプロダクトデザインへの応用

本講演の発表者である松浦と齋藤は、ギーリス曲線などの数理曲線で表現できる多種多様な形を大量に自動生成し、プロダクトデザインへ応用するためのコンピュータソフトウェアを開発中である([9])。現在までに、試作版が完成している。また、共同研究者でありプロダクトデザイン(特に北欧デザイン)の専門家である多田羅景太氏(京都工芸繊維大学)に依頼し、数理曲線を用いてデザインしたインテリアの制作も行っている。例えば、左下の写真は右下の数式で表現されるギーリス曲線でデザインされたテーブルとスツールのセットで、「東京デザイナーズウィーク 2014」で展示された。



$$r(\theta) = \left\{ \left| \cos \frac{19}{40}\theta \right|^3 + \left| \sin \frac{19}{40}\theta \right|^3 \right\}^{\frac{10}{3}} \quad r(\theta) = \left\{ \left| \frac{10}{3} \cos \frac{53}{40}\theta \right|^{-\frac{6}{5}} + \left| \frac{5}{6} \sin \frac{53}{40}\theta \right|^2 \right\}^{-\frac{1}{2}}$$

$$0 \leq \theta \leq 20\pi \quad -\frac{20}{53}\pi \leq \theta \leq \frac{940}{53}\pi$$

3. 今後の展望

モノづくりの世界では、いわゆるデジタルファブリケーションが注目を集めているが、その普及には、ハード面の技術だけでなく、デザイン開発等、ソフト面の技術も鍵を握る。その意味で、数理曲線を用いたデザインは、デジタルファブリケーションと相性が良い。

参考文献

- [1] Jacques Allard, Note on Squares and Cubes, Mathematics Magazine, Vol. 37, 210-214, 1964
- [2] Martin Gardner, Mathematical Carnival, Vintage Books, New York, 1977.
- [3] Johan Gielis, A generic geometric transformation that unifies a wide range of natural and abstract shapes, American Journal of Botany, Vol. 90, 333-338, 2003
- [4] Norman T. Gridgeman, Lamé ovals, The Mathematical Gazette, Vol. 54, 31-37, 1970
- [5] Gabriel Lamé, Examen des différentes méthodes employées pour résoudre les problèmes de géométrie, Mme Ve Courcier, Paris, 1818
- [6] 松浦真也, Gielis' Superformula と擬似多角形に関する諸定理, 日本応用数学会環瀬戸内応用数理研究部会第 15 回シンポジウム予稿集, 27-32, 2011
- [7] Masaya Matsuura, Asymptotic behaviour of the maximum curvature of Lamé curves, Journal for Geometry and Graphics, Vol. 18, 45-59, 2014
- [8] Masaya Matsuura, Gielis' superformula and regular polygons, Journal of Geometry, Vol. 106, 383-403, 2015
- [9] 松浦真也, 数学の社会的貢献 -プロダクトデザインから社会システムのデザインまで- (大学発産業界行 シーズ探訪 vol. 175), 月刊愛媛ジャーナル 2015 年 12 月号, 76-79

背景揺れを伴う立体映像視認時における体平衡系の数理モデル化

天野直¹ 木下史也² 平田隆幸¹ 高田宗樹¹

¹ 福井大学大学院工学研究科知能システム工学専攻 〒910-8507 福井市文京 3-9-1

² 名古屋大学大学院情報科学研究科 〒464-8601 名古屋市千種区不老町

takada@u-fukui.ac.jp

Mathematical Model of Equilibrium Function While Viewing a 3D Object in a Moving Background

Nao Amano¹, Fumiya Kinoshita², Hirata Takayuki¹, Takada Hiroki^{1,2}

¹ Department of Human and Artificial Intelligent Systems, Graduate School of Engineering, University of Fukui, 3-9-1 Bunkyo, Fukui, Fukui 910-8507, Japan

² Graduate School of Information Science, Nagoya University, Nagoya 464-8601, Japan

Abstract: Recently, developments in graphical technology have led to an increase in 3D video clips. As a result, visually induced motion sickness (VIMS) has been widely reported as a negative result that leads to dizziness and/or nauseous feelings. In previous research, peripheral viewing was reported to cause VIMS. However, a quantitative evaluation of VIMS while viewing a 3D object in a moving background has not been discussed. This research considers how the effect on equilibrium functions are changed based on watching 3D video clips, with or without a fixed display target, by recording body sway and analyzing the data.

Keywords: 3D video clips, VIMS.

1. はじめに

近年、3D 対応テレビや 3D 機能の付いた携帯ゲーム機などの登場により、立体映像の視聴の機会は増加し、立体映像技術はより身近なものとなった。それに伴って、頭痛、眩暈、吐き気等の不快な症状の発生も報告されている^[1]。しかし、映像酔いの原因は未だ解明には至っていない。一方、映像酔いを定量的に評価する方法の一つとして重心動揺検査が挙げられる。この方法は、負荷時およびその後における体平衡系への影響の度合いを計測できる。そこで、本研究では、立体映像視標の視認時において自然視時との差異が大きい周辺視野に着目し、視標と背景揺れとの関係が体平衡系に与える影響について検討を行った。また、体平衡系を記述する数理モデルを導出して、その数値解析を行った。

2. 実験方法

被験者は 21-24 歳の健常な男性 9 名を対象とし、被験者には実験開始 2 時間前からの飲酒、喫煙、カフェインの摂取を禁止し、実験前に実験の内容を十分に説明した上で書面にて了承を得た。視認映像は、Sky Crystal(オリンパス)をもとに同社の許可を得て再構成したものを使用した。重心動揺計測には、グラビコーダ GS3000 (アニマ社、東京)を用い、サンプリング周波数は 20 Hz とした。

参考文献

- [1] 鈴木淳一, 松本喬, 徳増厚二, 他, ” 重心動揺検査の Q&A, 手引き(1995) ” , Equilibrium Res Vol.55(1), pp.64-77,1996.

科学折り紙の結晶学

ー折り紙モデルで結晶物性を考えるー

石原 正三

埼玉県立大学 保健医療福祉学部、
〒343-8540 埼玉県越谷市三野宮 820 番地
shozo@spu.ac.jp

Science Origami crystallography, Exploration into physical properties of crystals by means of the Origami-model

Shozo ISHIHARA,

Saitama Prefectural University, School of Health and Social Services,
820 Sannomiya, Koshigaya, Saitama 343-8540, JAPAN

Abstract: A new type of three-dimensional model, named Origami-model, has been used for representing structures of crystals and molecules since 1990. It is remarkable that periodicity, regular repetition of atoms, which is one of the most important properties of a crystal structure, can be exhibited by the Origami-model made of polyhedral skeletons. Introducing science Origami crystallography, Origami-models of cubic (Perovskite), hexagonal, and tetragonal tungsten bronze structures, which are characterized by octahedra sharing vertices with each other, are presented in the oral session, as well as in the poster one, at this symposium. It is suggested that by making use of the Origami-model, some physical properties of a crystal may be deduced from the structure itself without referring to chemical composition.

Keywords: science Origami crystallography, Origami-model, octahedral skeleton, physical properties, tungsten bronze structures.

1. はじめに

ユニット折り紙の手法[1]を活用して、正多面体の骨格構造（スケルトン）を基本構造とする結晶構造の折り紙モデル（結晶の折り紙モデル）が考案され、鏡像体やフラーレンの複雑な分子構造の折り紙モデルへと拡張された。その後、二等辺三角形を基本とするユニット折り紙の手法に工夫を加え、任意の三角形のユニット（“かけらっち”と呼ぶ）を制作する方法が開発され、多様な形状の立体構造モデルを制作する手法が確立された。かけらっちを設計して折り紙で立体構造モデルを制作する手法を“科学折り紙（Science Origami）”、科学折り紙を用いて表現された結晶の立体構造に基づいて結晶物性を議論することを“科学折り紙結晶学”と呼ぶことにする。

1990年に、磁鉄鉱（マグネタイト）の結晶構造であるスピネル構造の折り紙モデルが制作され、結晶構造の重要な特徴である周期性を視覚的に表現する立体構造モデルとして、結晶の折り紙モデルが数多く制作されてきた。特に、マグネタイトの低温相における鉄の混合原子価 Fe^{2+} - Fe^{3+} の秩序構造や、代表的磁気結晶であるルチルの磁気構造を表現する折り紙モデルは、折り紙の色彩を活用して結晶物性を視覚的に表現する、これませにはない新しい立体構造モデルとして注目される。[2]

結晶物性が結晶の折り紙モデルによってどのように表現できるかを、タンゲステン・ブロンズ（TB）構造を例に、以下に示す。

2. タングステン・ブロンズ構造の折り紙モデル

タングステン・ブロンズ構造は、八面体が頂点を共有してできる板状構造 (Slab) を板面に垂直な方向に積み重ねる (Stacking) ことによって形成され、立方晶タングステン・ブロンズ (CTB; ペロブスカイト)、六方晶タングステン・ブロンズ (HTB)、正方晶タングステン・ブロンズ (TTB) の3種類の構造が知られている。(図1(a)・(c) 参照)

CTB、HTB、および、TTB には、それぞれ、四角形、三角形と六角形、三角形と四角形と五角形のトンネルが存在し、トンネル内の正イオン (図1中では省略されている) が出入りすることによって、結晶内の電荷のバランスが保たれている。

CTB はペロブスカイト構造とも呼ばれ、強誘電体の結晶構造として知られており、八面体の微小な回転 (Tilting) と電氣的物性との関連が注目されている。また、四角形のトンネル内の Li^+ イオンを電荷担体とするリチウムイオン電池は、工業的にも注目されている。

HTB と TTB の構造は、5つの八面体を作るクラスター (図2(a)と(b)) を基本構造として組み立てられている。HTB の折り紙モデルは、一辺を R とする同一の正八面体のみで構築できるのに対し、TTB の折り紙モデルは、 $\ell_1=2R$ 、 $\ell_2=\sqrt{3}\cdot R$ であることから、同一の正八面体では構築できないことが分かる。TTB の折り紙モデルを構築するには、 $\ell_3=\ell_4$ とする必要があり、このため、TTB 構造は常に歪んだ八面体を含むことが示唆される。中央の八面体が歪む場合 (図2(b)) を考えると、 $\ell_3=2r$ 、 $\ell_4=\sqrt{4R^2-r^2}$ であり、TTB の折り紙モデルを制作するには、 $\ell_3=\ell_4$ として、 $r=(2/\sqrt{5})\cdot R$ とすれば良いことが分かる。

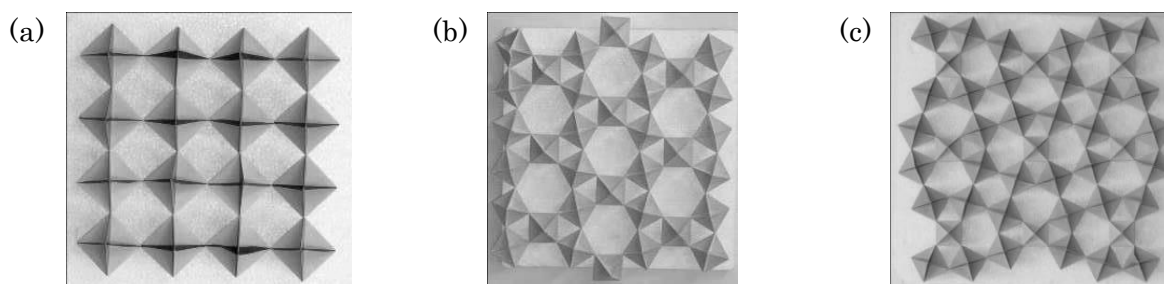


図1 タングステン・ブロンズ構造の折り紙モデル：(a) 立方晶タングステン・ブロンズ (CTB; ペロブスカイト)，(b) 六方晶タングステン・ブロンズ (HTB)，(c) 正方晶タングステン・ブロンズ (TTB)

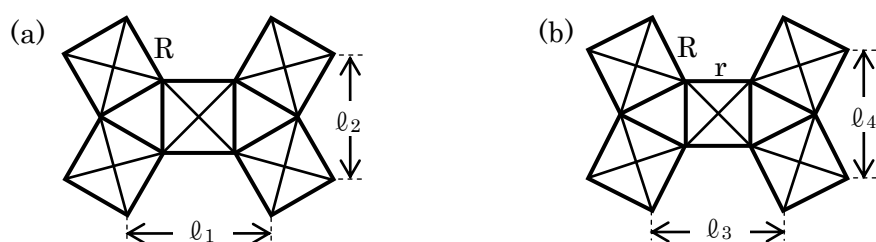


図2 5つの八面体のクラスター：(a) HTB の基本構造，(b) TTB の可能な1つの基本構造

3. おわりに

結晶の折り紙モデルは、折り紙の色彩と造形美を生かし、結晶構造の特徴である周期性を明確に表現するとともに、結晶物性を表現することもできることが示唆された。

参考文献

- [1] 例えば、笠原 邦彦，「折り紙 夢織り幾何学のすべて」，日貿出版，(1988)
- [2] Ishihara, S., "SYNTHESIS, STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF SINGLE CRYSTALLINE $\text{K}_3\text{Fe}_5\text{F}_{15}$, A TETRAGONAL TUNGSTEN BRONZE TYPE AND MIXED VALENCY FLUORIDE", thesis presented at University of Geneva, (1995) .

放散虫の収斂現象

松岡 篤

新潟大学理学部/形の科学研究センター、新潟市西区五十嵐 2 の町 8050

amatsuoka@geo.sc.niigata-u.ac.jp

Homeomorphy in Radiolaria

Atsushi MATSUOKA

Faculty of Science, Niigata University, Niigata 950-2181 Japan

Abstract: Homeomorphy refers phenomena that similar external forms appeared from phylogenetically distant ancestors in an evolutionary context. Three major forms, spherical, discoidal, and rod-shaped, in radiolarian shell morphology have repeatedly appeared in fossil records from the Cambrian to Quaternary. This is a typical example of homeomorphy. Homeomorphy gives us good hints for elucidating morphogenesis of radiolarian skeletons. As examples of homeomorphy at genus and species levels, Mesozoic closed Nassellarian *Protunuma*, *Striatojaponocapsa*, and *Turbocapsula* are introduced.

Keywords: homeomorphy, radiolaria, Mesozoic closed Nassellaria, skeletogenesis

はじめに

生物に見られる収斂現象とは、系統的に離れた生物間で外見上似た形態をもつことをいう。魚類のサメ、絶滅爬虫類のイクチオザウルス（魚竜）、哺乳類のイルカの外形がよく似ていることが、しばしば例としてあげられる。水中での高速遊泳を追求した結果として、似た体型になったと説明されている。放散虫は古生代カンブリア紀に出現し、現在の海域にも多様な殻をもつ生物として生息している。進化史の中で多様な殻形態をもつものが栄枯盛衰を繰り返しながら発展しているが、異なる地質時代に反復して出現する殻形態がある。放散虫に見られる収斂現象とそれにまつわる話題を提供する。

放散虫の収斂現象

放散虫骨格の形態を通覧すると、3つの主要なタイプに区分される。それらは、球状、平板状、および円柱状である。これら3つのタイプがどのように時代変遷を示すのかは興味深い問題であるが、この検討はこれからの課題である。収斂現象には、このような高次分類のレベルではなく、属・種の階層で認められるものもある。具体的な例として、中生代の closed Nassellaria を紹介する。

Protunuma 属は、ジュラ紀中世から新世に発展した放散虫で、殻表面に縦肋をもつことで特徴づけられる。*Protunuma fusiformis* Ichikawa and Yao は5殻室からなるが、部屋数を減少させて3殻室の子孫種 *Protunuma turbo* Matsuoka となる。なお、両種の間にあたる4殻室の個体も知られているが種名は与えられていない。

Striatojaponocapsa 属も、ジュラ紀中世から新世に多産する closed Nassellaria の1属である。祖先の *S. tegiminis* Yao は4殻室からなるが、その子孫にあたる *S. plicarum*

Yao は 3 殻室からなる。 *Striatojaponocapsa plicarum* からは、 *S. synconexa* O' Dogherty, Gorican and Dumitrica, *S. conexa* Matsuoka, *S. riri* O' Dogherty, Gorican and Dumitrica などの多様な子孫種を生み出している。

Turbocapsula 属は、白亜紀中頃に発展した closed Nassellaria の 1 属である。本属の最初期の種は 4 殻室からなるが、その直接の子孫は 3 殻室の *Turbocapsula fugitiva* O' Dogherty である。本種からは、殻表面に強い縦肋をもつ *Turbocapsula costata* (Wu) が進化的に発展する。

以上に示したジュラ紀および白亜紀の closed Nassellaria の属 *Protunuma*, *Striatojaponocapsa*, *Turbocapsula* は、お互いによく似た殻形態をもつ。このこと自体が収斂現象として捉えることができる。 *Protunuma* と *Striatojaponocapsa* については、同じ地質時代の中での収斂現象である。これに対して、 *Turbocapsula* 属は前 2 者とは違った時代に似た形態の種が出現しているといえる。興味深いことに、いずれの属の中でも時代が下るにしたがって、殻室の減少という共通する変化がみられることが指摘される。

おわりに

収斂現象は、示準化石として古生物の形態を利用する際に、やっかいな問題をもたらすことになる。示準化石は、ある形態をもつ生物がある特定に時期のみに地球上に存在することを要請するが、収斂現象が生じればある特定の時期のみという前提が成立しない。このことは、形態→年代という関係が一義的でなくなることを意味している。過去 40 年あまりの間に、放散虫研究が蓄積されてきた結果、時代を超えた形態の類似性・差異が検討できるようになった。2017 年 10 月には 23 年ぶりに日本で国際放散虫研究集会 (InterRad 15) が開催されるので、放散虫の収斂現象についても、議論する場を設けたいと考えている。

お笑いフレームと対話の形

細川拓朗、松浦執
東京学芸大学基礎自然科学講座
東京都小金井市貫井北町 4-1-1
shumats0@gmail.com

Comic Frame and Shapes of Dialogue.

Natsuki Takabe, Takumi Shigihara, Shu Matsuura
Tokyo Gakugei University, Faculty of Education
4-1-1 Nukuikita, Koganei, Tokyo 184-8501

Abstract: The comic frame was derived from the Manzai talk art and defined as the series of *Furi*, *Boke* and *Tsukkomi*. The frame was applied to the presentation of dialogue between humanoid and human in the school classrooms.

Keywords: Humanoid robot, Dialogue, Comic frame.

1. はじめに

近年、人間と言葉で対話できるヒューマノイドが、一般家庭の生活の場にも用いられるようになった。インターネットで情報検索できるヒューマノイドの場合では、コンピューターに代わる情報空間へのインタフェースになり得る。このインタフェースは、身振りや発色などを媒介として人間に対して表現し、人間の顔認識や音声パターン認識により人間の感情を推定することができるようになっている。そうした表現およびセンシングを通じて人間の感情とも関わることが可能である。さらに、外部 web サイトからのテキストの取得にとどまらず、言葉による対話を組み合わせて、情報を対話の中に埋め込むことで、人間にあらたなインスピレーションを誘引する可能性はないだろうか。

本研究では、Aldebaran 社のヒューマノイド・ロボット NAO を、トピックマップを用いて情報を構造化したオンライン学習システム“Everyday Physics on Web (EPW)”のインタフェースとして用いることを試みる。EPW から文字列情報を取得するときに、人間との相互作用として対話の構造を導入したい。本報告では特に、ヒューマノイド 1 体と教師および学習者で構成される教室での一斉授業のような状況を想定する。このもとで、教師とヒューマノイドの対話をデモンストレーションする場合に共通的に用いることのできる、対話の基本的な形態を検討する。

2. 原型的なお笑いフレーム

Hayashi ら[2005]はロボット同士の漫才を構築する上で、人がロボットの話を一方向的に聴く場合を“passive”、ロボットと人の双方向対話を“interactive”、ロボット同士の対話を人が見る形態を“passive-social”と分類した。教師がロボットと対話する状況を学習者が一方向的に鑑賞する場合もこの“passive-social”の関係に分類できる。Interactive および passive-social の場合には、質問-解答、提案-反応の反復が可能であり、これらの組み合わせはロボットにプログラミングすることも容易である。

教師がロボットとの対話と学習者との対話を共に担うことによって、学習者とロボッ

トとの間接的対話も可能になる。シャーマニズムも同様に神と人の対話を実現する。この形式は“interactive-social”と表現しよう。Interactive-social では対話が1対1の当事者に閉じない。そして興味を引き起こし、問題を提起して共有する要素が、学習者の対話への関わりを媒介する部分として必要になる。この際に、教育の場での構成としては、体系的に定義づけられた科学概念の言葉を基軸にすることが望まれる。

一方、演示実験などのデモンストレーションを行なう場合も、同様な形態が成立している。教師が学習者の代表としてある問題設定のもとに演示実験やシミュレーション、計算などを試みる。結果として現れる事象が代表者である教師への現象側からの反応である。事物についての行動の結果予測と確認という形で行われる対話といえよう。

ここで、興味をひく対話を多数者で鑑賞する、漫才の形式を検討する。漫才の起源は、歌舞・音曲を神に奉納したり、それらにより貴人を楽しませたりするものであった。その後、猿楽のように物真似を取り込み能に発展するなど、様々な発展があったとみられる。しかし、現在の漫才のように複数人の対話と身振りだけの形態になったのは大正期であり、米国で行われていたダブル・アクトという性格の異なる2人のパートナーによる掛け合い方式を取り入れたことがもとになっていると言われる。漫才には共通の構造としてフリ・ボケ・ツッコミがある。フリは話題や雰囲気、おもしろさの提案や示唆である。ボケはおもしろさの核心部分であり、ツッコミはこれに対して反応し印象的にする部分である。われわれはこの対話の展開の形を「お笑いフレーム」と呼ぶ。

桂[1993]はこのフリ・ボケ・ツッコミの構造に、「緊張の緩和」を中心とし、他に「変」「他人のちょっとした困り」「他人の忌み嫌うこと」を加えた4種類に大別される笑いの要素を導入することにより、お笑い芸が生まれると論じた。矢島[2013]は笑いの両義性を指摘し、学校教育における笑いの活用において、教育者はこの両義性を理解した上で有効活用することを提案している。お笑いフレームの上にどのような内容に乗せるかにより、コミュニケーションのあり方に影響を及ぼす可能性があることを示唆する。

ここではお笑いフレームを文字通りお笑いに適用するのではなく、ヒューマノイド・ロボットを導入した interactive-social 型対話の基盤として用いた。フリとツッコミの部分を教師が行い、同時に対話を聴いている学習者と教師のインタラクションもこの部分で行なう。その上でロボットに対して、対話の核となるキーワードまたはキーフレーズを発話する。キーワードまたはフレーズを音声認識したロボットは、それについての返答を、EPW を検索して取得し、発生する。このロボットのパートがボケに相当する。このボケの部分でもたらされる情報が、フリとツッコミで扱う内容の核となり、またそれを最終的解答とするのではなく、さらに意味の掘り下げや他の概念との関連、意外性の検討などをツッコミのパートで行なう。それがまた次のフリの元とする。

3. 結論

お笑いフレームの形を明確化することにより、ヒューマノイドとの interactive-social な状況での対話をプログラミングする設計が得られた。

参考文献

- [1] Hayashi, K. et al, IEEE-RAS Int' l. Conf. on Humanoid Robots, pp. 456-462 (2005).
- [2] 桂枝雀, らくご DE 枝雀, 筑摩書房 (1993).
- [3] 矢島伸男, 笑い学研究, 20, pp. 83-95 (2013).

近世日本の立体図法

—三浦梅園「玄語図」と松森胤保「動物系表」より—

出原 立子

金沢工業大学、石川県白山市八束穂 3-1

izuhara@neptune.kanazawa-it.ac.jp

Projection Method in the Edo era for Representing 3D Structure

Ritsuko Izuahra

Kanazawa Institute of Technology

Abstract: Baien Miura (1723-1789) drew the diagrams called “Gengo-zu” to represent three-dimensional structural concepts in two dimensions by Baien's own projection method^{*1}. In this study, the author investigated other diagrams in the same period representing three dimensional structures. As a result, it is formulated a hypothesis that the diagrams drawn by Taneyasu Matumori (1825-1892) called as "Doubutsu-Keihyo" in "Ryou Hakubutsu Zufu" represent three dimensional structure. Then the new projection method was drawn from his diagrams. These projection methods and the each properties are compared.

Keywords: diagram, projection method, stereogram, the edo period, Japanese diagram

1. 背景・目的

近世（江戸時代）の日本では様々な図的表現が用いられていたが、中でも興味深いのは思想家が独自の思想を表すために描いた図的表現である。発表者はこれまでに三浦梅園(1723-1789)という思想家が表した「玄語図」と称する図(図1)を取り上げ、その図法について調査した。その結果、「玄語図」は立体的な概念構造を梅園独自の立体図法で描いたものであることを明らかにした。そこで本研究では、同時代の他の思想家らの図的表現において立体構造を表現しているものがあるか調査を行った。本論では、松森胤保(1825-1892)の『両羽博物図譜』に描かれた「動物系表」が立体構造を表していると仮説を立て、この図から抽出した立体図法について三浦梅園の立体図法、そして我々に馴染みのある透視投影図法と比較し考察する。

2. 思想家の図

「玄語図」の図形は、地球を取り巻く天地の立体的な運動現象がモデルとなっていることから、「玄語図」は立体的な概念構造を梅園独自の立体図法で表していると考えられる^{*1}。すなわち、図3に示すように立方体モデルを平面図で表し、これを「立体図法A」と称する。「玄語図」の中の一つである「宇宙転持図」を立体図法Aに基づいて立体イメージにシミュレーションした結果を図1に示す。

「動物系表」は主要な動植物類の関連を「鳥→人→獣・魚→虫→植物・貝→石→土」と上から下へ階層に分け、これらを中心として個々の種を関連付け、独自の動植物の系譜をまとめている。松森胤保の「動物系表」が立体構造を表しているかは仮説の域を出ないが、平面図に示された各種の配置関係を調査し立体配置に再構成を試みた。その結果、図2に示すような「立体図法B」が考えられ、3Dイメージにシミュレーションを試みた。

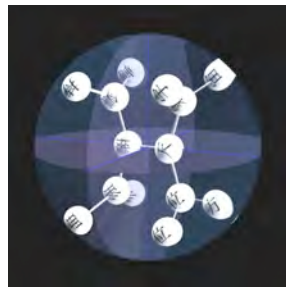


図1「玄語図」と3Dimage

表1「玄語図」と「動物系表」が表す関係性の比較

図の名称	図形が表す関係性
三浦梅園 「玄語図」	対称性(上下・左右・前後) 放射性 分岐性
松森胤保 「動物系表」	対称性(左右) 階層性(上下) 連鎖(類似)性

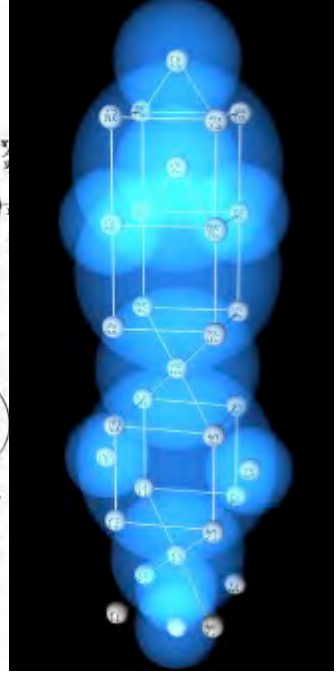
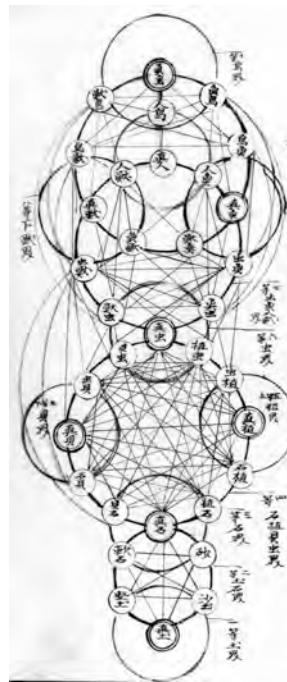


図2「動物系表」と3Dimage

3. 立体図法の比較

梅園や松森らの図を分析することから、これまで我々が馴染みのある透視図法や斜投影などとは異なる立体図法A,Bが考えられた(図3)。そこで、立体図法A、立体図法B、透視図法を比較し、各図法の特性を考察する。透視図法の場合、人間が目で見たままの形と同じであるから、平面図から立体構造がイメージしやすい図法である。しかし、立体の前後の形の大きさが大小異なり歪みを生じてしまう。また、立体構造の側面から見た情報が図で表しにくい。立体図法Aの場合、立体物の前後の形が縦長、横長に変形するという歪みが生じるが、立体構造における上下・左右・前後の対称性の関係を表現しやすく、さらに、中心から四方八方に向けて放射状に広がる形も表現しやすい。立体図法Bの場合、立体構造の前後の形は左右対称に歪みを生ずるが、前後の形の特徴や大きさは均等に表すことができる。従って、左右・上下の対称性が表現しやすい。さらに、図の円環状に結ぶ線は立方体モデルの8頂点を一筆書きで結ぶ均整のとれたルートを表すことになる。以上のように、近世日本の思想家らの図から抽出した立体図法は、透視図法のように人間が見たままの形を正確に描く図法ではなく、思想の基軸となる概念構造や概念同士の関係性を表しやすい形へ変換することを重視した図法といえる。

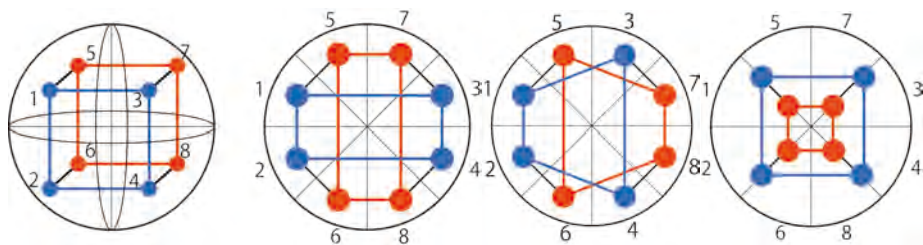


図3 立方体モデルと立体図法A, 立体図法B, 透視図法

参考文献

*1 Ritsuko Izuohara: A Study on Baien's Diagram, "Gengo-zu", in Terms of Symmetry, Forma, 15, pp.163-172, 2000

※本研究は、JSPS科研費25350031の助成を受けたものです。

半正多胞体の4接超球半径を求める(パート1)

発表者氏名 : 山口 陸幸

住所 : 熊本市西区上代1丁目3-28

e-mail アドレス : polyhedral@osu.bbq.jp

The calculation of 4 radii of semi-regular polytopes (part1)

発表者氏名 : Mutsuyuki Yamaguchi

所属機関名、Nishi-ku 1-3-28 Kumamoto, Kumamoto, Japan

Abstract: 四次元である41種類の半正多胞体について4接超球半径についてそれを記載した文献や資料が見つからない。そこで、六種類の正多胞体の4接超球半径を利用し、三次元図形である半正多面体の3接球半径を求めた手順に習い、求めてみた。

Keywords: Regular polytopes, Semi-regular polytopes, Regular polyhedra, Semi-regular polyhedra, radii of polyhedra, radii of polytopes,

1. 半正多胞体の図形における区分け

計算の便宜上、図形における区分けは次の三種類とした。

A. 正五胞体系

三次元図形では正四面体、及び、正四面体をベースに加工した図形

四次元図形では正五胞体、及び、正五胞体をベースに加工した図形

B. 白銀比系

三次元図形では正六面体と正八面体、及び、両者をベースに加工した図形

四次元図形では正八胞体、正十六胞体と正二十四胞体、及び、三者のいずれかをベースに加工した図形

C. 黄金比系

三次元図形では正十二面体と正二十面体、及び、両者をベースに加工した図形

四次元図形では正百二十胞体と正六百胞体、及び、両者のいずれかをベースに加工した図形

2. 加工の方法による5分類とした。

I. 切欠き加工 II. 中央きり加工 III. 面取り加工

IV. 二重切り加工 V. 掘り切り加工

3. 双対多面体の構成面の頂角

4接超球半径及び3接球半径の相互関係

4. 正多胞体の稜線長さと加工後の半正多胞体の稜線長さ

正多胞体を加工すると、半正多胞体の構成胞は半正多面体となる。

そして、稜線長さの変化は正多面体を加工して導いた半正多面体の稜線長さと一致する。

従って、稜線長さ比（正多面体の稜線長さ／加工後の稜線長さ）が計算できる。

このことによって、半正多胞体の内接超球半径を求めることが出来る。

5. 関係式より、4 接超球半径を求める。

< 参考文献 >

『正多面体を解く』一松信著/東海大学出版会発行

『Regular Polytopes』 H.S.M Coxeter 著/ Dover Publication, Inc.

『CG で知る相貫体』山口陸幸著/ 熊本日新聞情報文化センター

n 次元超球まわりのストークス流れ

吉野 隆

東洋大学理工学部, 〒350-8585 埼玉県川越市鯨井 2100

tyoshino@toyo.jp

The Stokes Flow around a Hypersphere in n -Dimensional Space

Takashi Yoshino

Toyo University, Kujirai 2100, Kawagoe 350-8585

Abstract: We formulated the Stokes flow around a hypersphere in n -dimensional space. The extension of the formulae from the 3-dimensional system to the n -dimensional one is straightforward. The results show that the effect of the hyperspherical obstacle to the uniform flow tends to be localized in higher dimensional spaces.

Keywords: Stokes flow, fluid flow in hyperspace

1. はじめに

n 次元空間の中にある一様流のもとで超球の障害物がある場合の流れ場について検討した. 高次元空間における流れのコンピュータ・シミュレーションを行おうとしたときに, 何かしらの解析解があったほうが良いだろうと考えたためである. 導出された結果は3次元のストークス流れからある程度予想できるものであったが, 予想どおりであることを確認する作業にも意義があると考えている.

2. 拡張の手順と得られた式

本研究で導出するのは n 次元超球障害物まわりのストークス流れにおける流れ関数である. 導出方法は3次元の場合[1]と同様であるが, 式変形は複雑になっている. その手順は, 次のようになる. 1) 一様流の速度ポテンシャルを求める. 2) わき出しの速度ポテンシャルを求める. 3) 二重わき出しの速度ポテンシャルの和を求める (ここまでは, 超球周りのポテンシャル流れがわかる). 4) ポテンシャル流れの流れ関数を求める. 5) ストークス極の流れ関数を 4) の流れ関数に加えて超球表面上での流速がゼロになるようにパラメータを調整する.

ここでは導出の過程は省略し, 主な結果のみを記す. 以下では, n 次元空間において速さ U の一様流が x 軸正の方向に流れており, 原点に半径 a の超球が置かれているものとする. 対称性から, 動径方向には位置による速度の違いがあり, $(n-2)$ 種類の方位角方向については速度に違いはない. 動径方向を y 軸とする xy 平面上で流れを記述する.

n 次元空間における超球まわりのポテンシャル流れの流れ関数は,

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{n-1} U y^{n-1} \left(1 - \left(\frac{a}{r} \right)^n \right)$$

であり, ストークス流れの流れ関数は,

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{2(n-1)} U \left(2r^{n-1} + (n-2) \frac{a^n}{r} - na^{n-2}r \right) \sin^{n-1} \theta$$

である. ただし, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\theta = \sin^{-1}(y/r)$ である. これらの式から 流速の x 成分 u

と y 成分 v を求めるための関係式は,

$$u = \frac{1}{y^{n-2}} \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{1}{y^{n-2}} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

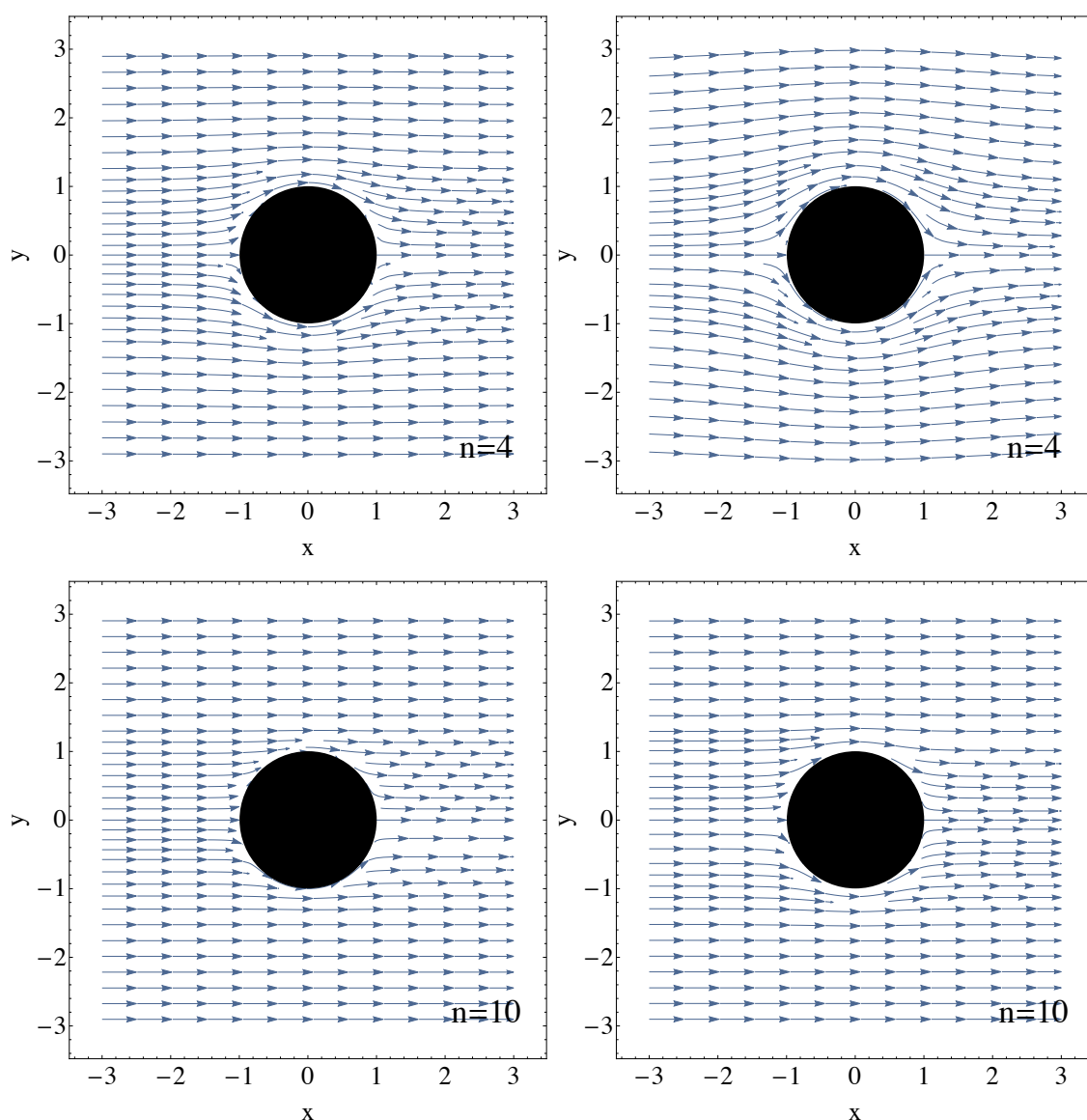
である．3次元空間では $1/y$ だった係数が拡張されていることに注意する．これは円柱座標系における連続の式に由来する．

3. 結果と考察

得られた流れ関数をもとに描いた流線図を図に示す．4次元空間においても，ストークス流れは流速場の広い範囲にわたって影響を与えることが確かめられた．しかし，次元が上がれば上がるほどこの影響は小さくなることが確認された．この傾向はポテンシャル流れにおいても確認されることから，高次元空間における障害物周りの流れは高次元になるほど周囲への影響を少なくすると結論付けられる．

参考文献

[1] 巽友正, 流体力学, 培風館, 1982.



図：ポテンシャル流れ（左）とストークス流れ（右）の比較．上段は $n = 4$, 下段は $n = 10$.

ケプラーの円錐曲線論

ウェルフェア ジャスティン 飛鳥、山口 幸、杉本 剛

神奈川大学大学院工学研究科経営工学専攻 横浜市神奈川区六角橋 3-27-1

e-mail: r201570122xk@jindai.jp

Conics by Kepler

Justin Aska WELFARE, Sachi YAMAGUCHI, and Takeshi SUGIMOTO

Graduate School, Kanagawa University, 3-27-1 Rokkakubashi, Kanagawa Ward, Yokohama

Abstract: Johannes Kepler is a father of the modern astronomy. He is the first to introduce “focus” to conics. He utilizes the focus-vertex relation to define conics. He uses the technique of the eccentric to show that an ellipse is a circle squeezed vertically. Using this idea he obtains the Kepler equation, and Kepler’s three laws. Three mean distances of a planet are derived with respect to the true, eccentric and mean anomalies. Geometry of the three distances is discussed.

Keywords: focus, Kepler’s equation, Kepler’s laws, the true anomaly, the eccentric anomaly, the mean anomaly

1. はじめに

ヨハネス・ケプラーは近代天文学の祖のひとりであり、天体観測結果をデータ整理することによってケプラーの法則を見出した。1604年に「光学」⁽¹⁾で史上はじめて焦点 (focus) を導入して円錐曲線論を展開した。ケプラーは1609年の「新天文学」⁽²⁾で、ケプラーの第一法則（楕円軌道の法則）およびケプラーの第二法則（面積速度の法則）について発表した。「宇宙の調和」⁽³⁾でさらにケプラーの第三法則（調和の法則）について発表した。これらの法則をケプラーは楕円を離心円として扱うことで導いた。

2. ふたつの円錐曲線論とその応用

2. 1 第1の円錐曲線論

ケプラーは「光学」で焦点を使った円錐曲線論を展開したが、そこには準線は出てこない。円錐曲線では二つの焦点と任意の頂点までの距離の和が一定という認識である（図1）。たとえば楕円のばあい「 $AP+BP=一定$ 」である。放物線、双曲線については、無限遠点を介して距離の和が一定であると考ええる。少し書き直すと、放物線のばあい「 $CG+GI=一定$ 」となり、双曲線のばあい「 $FQ-DQ=一定$ 」となる。

2. 2 ケプラーの法則

ケプラーは、チコ・ブラーエの残した膨大な天体観測の結果をデータ整理して、はじめは火星の運動について、

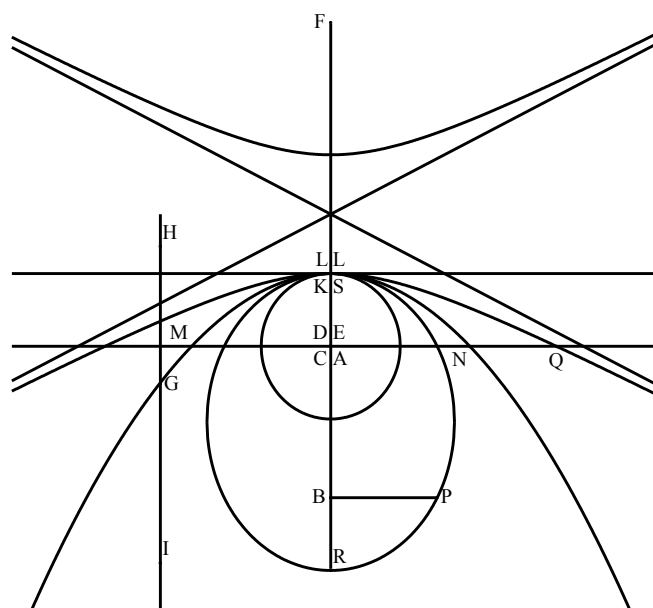


図1：ケプラーの円錐曲線の遷移図⁽¹⁾

やがてはほかの惑星でも三法則が成り立つことを導いた。

ケプラーの第一法則（楕円軌道の法則）：惑星の軌道は太陽をひとつの焦点に置く楕円である。

ケプラーの第二法則（面積速度の法則）：惑星の面積速度は一定である。面積速度は、時間の尺度になる。

ケプラーの第三法則（調和の法則）： T を周期、 a を長径とすると「 $T/a^{3/2}=\text{一定}$ 」が成り立つ。

2.3 第2の円錐曲線論

ケプラーは、楕円は長径と同じ半径をもつ「同心円」を短径(b)方向に b/a 倍にした図形だと認識する。楕円軌道にかかわる尺度として、近日点角が三種類ある。図2に示すように太陽（焦点）を S 、近日点を Q 、惑星の現在位置を P とする。真近日点角とは、角 $\theta = \angle QSP$ をいう。離心近日点角とは、角 $\varepsilon = \angle QCP$ をいう。平均近日点角とは、扇形 QSP の無次元化された面積 M をいう。

面積 M は扇形 QCP から $\triangle ICJ$ の面積を差し引いたのち b/a 倍し、さらに $\triangle SIP$ の面積を差し引くことで求められる。すなわち

$$M = \varepsilon - e \sin \varepsilon,$$

ここで e は離心率である。この式をケプラー方程式という。史上初めて導かれた超越方程式である。

それぞれの尺度で距離 SP の平均値 $\langle SP \rangle_i$ を求める (i は t, e, m)。 $SP = \langle SP \rangle_i$ となる点を軌道上にプロットしたものが図3である。真近日点角 θ を用いると $\langle SP \rangle_t = b$ となり、そこから下ろした垂線は SC を $b:a$ に分ける。離心近日点角 ε を用いると $\langle SP \rangle_e = a$ となり、 C の真上にくる。平均近日点角 M を用いると $\langle SP \rangle_m = a(1+e^2/2)$ となり、そこから下ろした垂線は CF (F は焦点) を二等分する。

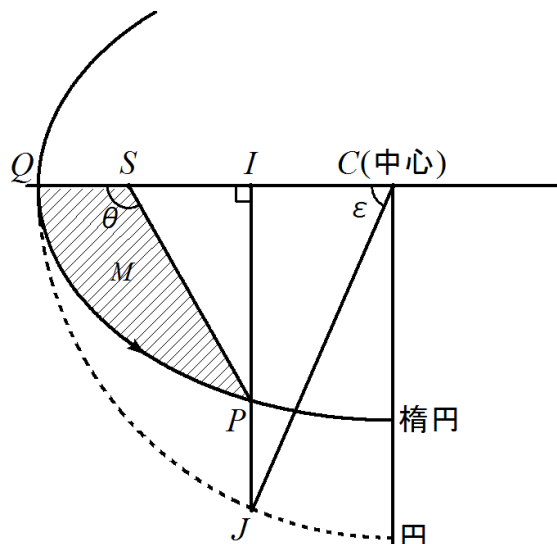


図2：3種類の近日点角

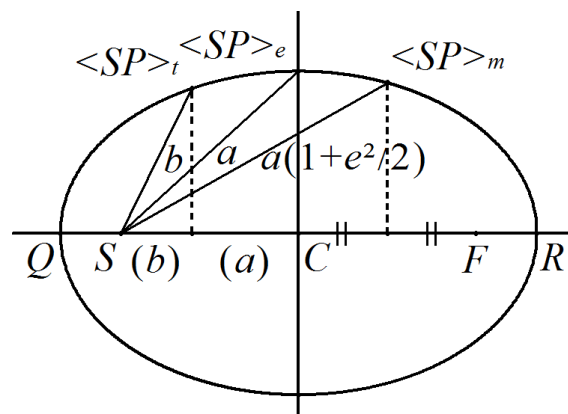


図3：3種類の近日点角による距離 SP の平均値

3. むすび

ケプラーは2とおりの円錐曲線論をたて、光学や天文学に応用した。そして、ケプラーの方程式およびケプラーの法則を導いた。また著者らは、3つの近日点角による距離 SP の平均値 $\langle SP \rangle_i$ の幾何学的意味を考察した。

文献

- (1) William H. Donahue (2000) Johannes Kepler: Optics, Paralipomena to Witelo & Optical Part of Astronomy, Green Lion Press, 459pp.
- (2) 岸本良彦 (2013) ヨハネス・ケプラー：新天文学, 工作舎, 688pp.
- (3) 岸本良彦 (2009) ヨハネス・ケプラー：宇宙の調和, 工作舎, 624pp.

合同円柱の重なりからなる立体形状とその実体化

宮本圭佑¹、荒川久遠²、手嶋吉法^{1,2}

¹ 千葉工業大学大学院工学研究科機械サイエンス専攻、² 千葉工業大学工学部機械サイエンス学科

〒275-0016 千葉県習志野市津田沼 2-17-1

Symmetrically intersecting cylinders and their models

Keisuke MIYAMOTO, Kuon ARAKAWA and Yoshinori TESHIMA*

Chiba Institute of Technology, 2-17-1 Tsudanuma, Narashino, Chiba 275-0016, Japan

*yoshinori.teshima@it-chiba.ac.jp

概要：二つ以上の立体が重なる部分を「相貫体」と呼び、その中でも円柱同士の重なり部分を「円柱相貫体」という。本研究では、合同な円柱を対称性の高い方向に向け、円柱の中心軸が一点で交わる様に配置した際に生成される円柱相貫体の三次元形状データを生成し、実体模型を作製した。また、各円柱相貫体の表面積と体積を導出した。

Keywords: intersection of solid, intersecting cylinders,

1. はじめに

二つ以上の立体が重なる部分を「相貫体」と呼び、その中でも合同な円柱の重なり部分から生成される形を「円柱相貫体」という。

Moore らは、立方体の対称性を持つ円柱相貫体を調べた[1][2]。

本研究で筆者らは、合同な円柱を対称性の高い方向に向け、円柱の中心軸が一点で交わる様に配置した際に生成される相貫体を調査した。また、円柱相貫体の形状を実体化する方法として、3D プリンタを用いた立体造形ならびに、金属材料の機械加工により模型を作製した。図1～図7に円柱相貫体のCADデータ(各図の左)、ナイロン粉末を使った粉末焼結造形法(SLS 法)による模型(各図の右)を示す。図8に金属材料で作製した円柱相貫体模型を示す。

2. 円柱相貫体形状データ作成方法

以下の手順で作成した。(1)円柱の軸数及び、中心軸の方向ベクトルを決定、(2)3次元CADの集合演算により、それら円柱の共通部分の形状データを生成する。

上記の方法で円柱相貫体の形状データ7種類を作成した。円柱相貫体を対称性の高い方向に配置する際に、正多面体形状を基にした。形状データの作成には3DCAD(Autodesk Inventor)を用いた。

また形状データを作成する際、CADの集合演算による交線計算の失敗により、円柱相貫体の頂点周りに形状誤差が生じないか調査した。図9に15軸円柱相貫体の頂点周りの拡大図を示す。10本の稜が1点で交わっていることから、幾何計算が正確に実行されていると考えた。

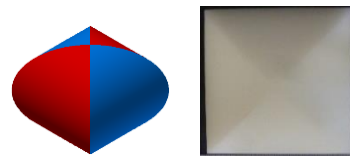


図1 2軸円柱相貫体

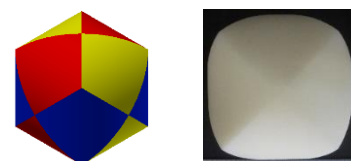


図2 3軸円柱相貫体

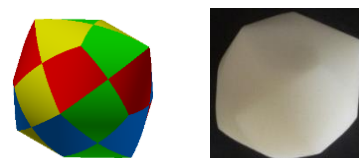


図3 4軸円柱相貫体

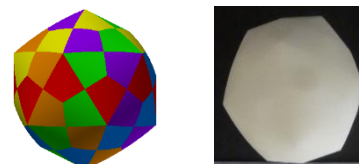


図4 6軸円柱相貫体

(正12面体の面中心)

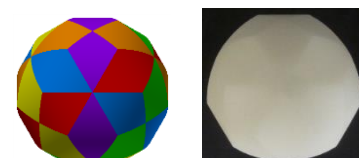


図5 6軸円柱相貫体

(正6面体の稜中心)

3. 表面積・体積の導出

作成した形状データをもとに、円柱相貫体の表面積や体積について計算を行った。導出にあたり基本的な切断円柱の側面である $\sin$ カープ(図 10)から積分を行い表面積、更に積分を行うことで体積を導出することにより、解析解を得ることができた。表 1 に 2 軸から 6 軸までの表面積・体積を示す。

4. 円柱相貫体立体模型の作製

作成した円柱相貫体形状データを 3D プリンタにより実体化する。熱溶解積層法 (FDM 法) の立体模型を 7 種類、ナイロン粉末を使った粉末焼結法の立体模型を 7 種類作製した。

また、3 軸円柱相貫体金属材料を用いた円柱相貫体立体模型の作製を行った。円柱相貫体の形状を機械加工で作製するのは困難であり、本研究では、アルミ材を用いて、ワイヤカット放電加工により、3 軸円柱相貫体模型を半分に分けて作製した。

5. まとめ

円柱相貫体の表面積体積を解析的に導出した。また、それらを CAD 上での数値情報と比較し、確認をおこなった。

3D プリンタを使った立体模型の作製においては、円柱相貫体 7 種類について、FDM 法とナイロン粉末による粉末焼結法により、合計 14 個の立体模型を作製した。それぞれの立体模型を観察したところ、FDM 法と粉末焼結法のいずれにおいても相貫体の軸数が増えたときに稜線が不明瞭になることが問題点として挙げられる。

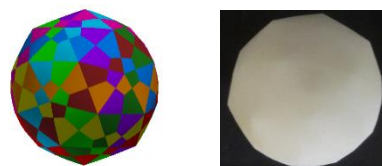


図 6 10 軸円柱相貫体

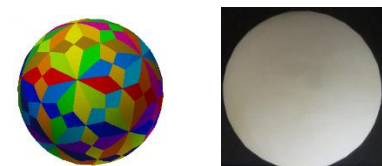


図 7 15 軸円柱相貫体

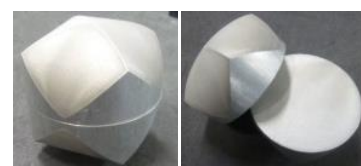


図 8 アルミ材モデル(3 軸円柱相貫体)

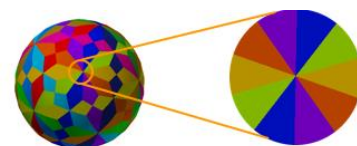


図 9 15 軸円柱相貫体
頂点周りの拡大図



図 10 切断円柱に現れる
 $\sin$ カープ

表 1 表面積および体積

	表面積	体積
2 軸円柱相貫体	$16r^2$ (16.00)	$\frac{16}{3}r^3$ (5.33)
3 軸円柱相貫体	$24(2 - \sqrt{2})r^2$ (14.06)	$8(2 - \sqrt{2})r^3$ (4.69)
4 軸円柱相貫体	$36(2\sqrt{2} - \sqrt{6})r^2$ (13.64)	$12(2\sqrt{2} - \sqrt{6})r^3$ (4.55)
6 軸円柱相貫体(A)	$16(3 + 2\sqrt{3} - 4\sqrt{2})r^2$ (12.92)	$\frac{16}{3}(3 + 2\sqrt{3} - 4\sqrt{2})r^3$ (4.31)
6 軸円柱相貫体(B)	$30\sqrt{5}\left(4 - \sqrt{10 + 2\sqrt{5}}\right)r^2$ (13.13)	$10\sqrt{5}\left(4 - \sqrt{10 + 2\sqrt{5}}\right)r^3$ (4.38)

括弧内の数値は $r = 1$ としたときの値

参考文献

- [1] M. Moore, Symmetrical Intersections of Right Circular Cylinders, *Math. Gazette* (1974) 58, 181-185.
- [2] I. O. Angell and M. Moore, Symmetrical intersections of cylinders, *Acta Cryst.* (1987) A43, 244-250.

球状テンセグリティ構造の幾何学特性

浅尾祐樹、手嶋吉法

千葉工業大学工学部機械サイエンス学科、〒275-0016 千葉県習志野市津田沼 2-17-1

Geometrical properties of spherical tensegrity

Yuki ASAO and Yoshinori TESHIMA*

Chiba Institute of Technology, 2-17-1 Tsudanuma, Narashino, Chiba 275-0016, Japan

*yoshinori.teshima@it-chiba.ac.jp

概要: 多面体と対応付けられる対称性の高いテンセグリティ構造について、幾何学的な観点から調査をおこない、球状テンセグリティ構造が双対関係にある2つの多面体の中間状態として理解できることを明らかにした。また、球状テンセグリティの連続変形の仕方が2通りあることに着目し、これらを正と負の構造として区別した。自己双対である正4面体に基づく球状テンセグリティには正負の区別は生じない。応用に適した球状テンセグリティについても言及した。

Keywords: tensegrity, polyhedral tensegrity, spherical tensegrity, duality

1. はじめに

テンセグリティ (Tensegrity : Tensional Integrity を短縮した造語) 構造は、互いに接触しない圧縮材と引張材で構成される構造である[1]。本研究では、テンセグリティで作られた構造物と多面体との関係性を調べ、幾何学的な観点からテンセグリティの特徴を明らかにする。

2. 球状テンセグリティの幾何学的性質

図1～図3のテンセグリティは多面体と対応づけることが出来、球状テンセグリティと呼ぶ[2]。球状テンセグリティは、双対関係にある2つの多面体の間の中間状態として理解できる。多面体から球状テンセグリティへと連続的に変化させるにあたって、様々な性質が生じる。テンセグリティとして構造が保持されると、その表面には引張材で構成された三角形、四角形、五角形のいずれかの面が表れる。この面は力に回転方向が備わっており左回転、右回転の同じ力が球状テンセグリティに生じる。その力が球状テンセグリティ全体に均一に働くことによって、形状が維持される。図4は図1の球状テンセグリティと同型である。例えば図4の場合、球状テンセグリティの表面には、左回転で三角形が4箇所、右回転で三角形が4箇所あることが確認できる。左・右回転それぞれに使用される引張材は12本あり、力の回転方向は全体としては均一に働いていることが確認できる。

また、このように表面に表れる形はベースとなる多面体の頂点及び面の要素から変化した形として理解できる。例えば正6面体の場合、一つの頂点に集まる稜は3つで、面を構成する稜は4つであるため、正6面体から出来る球状テンセグリティの表面には三角形と四角形の2種が必ず表れる。

多くの場合、球状テンセグリティはそれ自体に正と負の構造が存在する。この正負は、基の多面体から圧縮材を移動させる方向が2種あることに対応する。図5のように正6面体から圧縮材を移動させ正8面体に形状を変化させる場合、

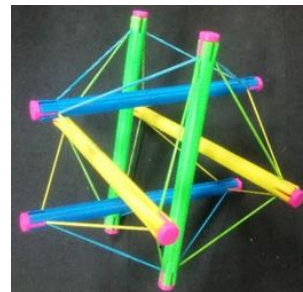


図1 圧縮材6本、引張材24本で構成された球状テンセグリティ
(正4面体ベース)



図2 圧縮材12本、引張材48本で構成された球状テンセグリティ
(正6・8面体ベース)



図3 圧縮材30本、引張材120本で構成された球状テンセグリティ
(正12・20面体ベース)

圧縮材を右回転か左回転のどちらかに移動させることが出来、この場合それぞれで出来る球状テンセグリティは鏡映対称の関係を持つ。ただし、正4面体の場合は、自己双対であるためテンセグリティに正と負の区別が生じない(図6)。

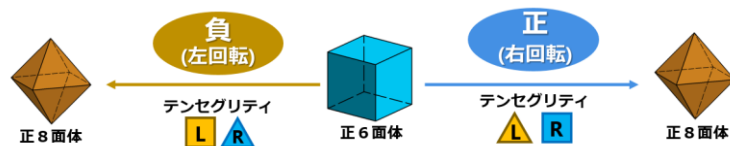


図5 正6面体から正8面体へ変化させる際に

球状テンセグリティの表面に構成される力の回転方向の関係



図6 正4面体から正4面体へ変化させる際に

球状テンセグリティの表面に構成される力の回転方向の関係

3. 球状テンセグリティの応用について

将来、球状テンセグリティをロボット等に応用していく際、正多面体ベースの球状テンセグリティ3種の中でどれが最も有用かを以下考察する。まず、球状テンセグリティを動かすためには、引張材自体のテンションを変化させる、もしくは圧縮材と引張材の接続部を動かし球状テンセグリティのバランスを変化させる方法が考えられる。前者の場合、引張材のテンションを変化させる機構を全体に組み込む必要があるため、引張材が少ないほど単純かつコストの削減が出来るため、圧縮材6本の球状テンセグリティが有用であると考えられる。後者の場合、圧縮材と引張材の関係が変化する間もテンセグリティ構造が安定することが大切であるため、図7のように双対関係にある2つの多面体の中間状態の場所によって安定性が大きく異なってしまうものは不適と考えられる。よって図7のようにどの状態でも安定性が高く、構造が正負の区別を持たず、常に立体トラスの構造を保ち続ける圧縮材6本の球状テンセグリティが有用であると考えられる。これらの事より、テンセグリティをロボットに応用する場合、圧縮材6本の球状テンセグリティが最も適していると考えられる。

4. まとめ

多面体から球状テンセグリティに変化することによって様々な幾何学的性質が表れることを確認した。また、球状テンセグリティの中では正四面体ベースの6本圧縮材の球状テンセグリティが最も安定しており、応用されやすいと考えられる。

参考文献

- [1]バックミンスター・フラー、コズモグラフィ(2007)、pp. 278-291
- [2]バックミンスター・フラー、宇宙エコロジー(2004)、pp. 178-197

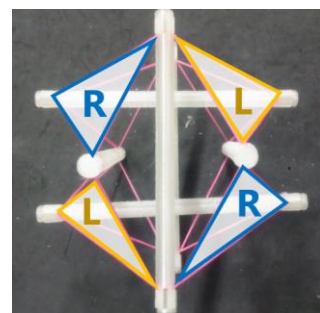


図4 正4面体ベースの球状テンセグリティの表面に引張材により構成される3角形の力の回転方向の関係



図7 正8面体から正6面体へのテンセグリティの安定性の変化

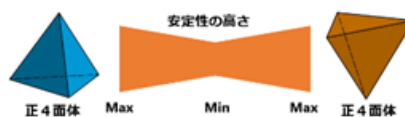


図8 正4面体から正4面体へのテンセグリティの安定性の変化

分子が認識する分子のかたち～量子化学情報で深層学習するために

後藤仁志^{1,2*}, 加藤凱生¹, 濱田信次²

¹豊橋技術科学大学大学院工学研究科 情報・知能工学系

²豊橋技術科学大学次世代シミュレーション技術者教育推進室

豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1

gotoh@tut.jp

Molecular shape recognized by molecule – Approach to deep learning using quantum chemical information

Hitoshi Goto^{1,2*}, Yoshiki Kato¹, Shinji Hamada²

¹Information and Computer Science, Toyohashi University of Technology,

²Promotion Office for Educational Program of Advanced Simulation Engineering,

Toyohashi University of Technology,

1-1 Hibarigaoka, Tempaku-cho, Toyohashi, 441-8580, Japan

Abstract: Molecular shape recognized by a molecule plays an important role on the quantitative structure-activity relationships. It is interesting to note that deep learning methods for QSAR can implicitly recognized molecular shapes. Our recent works on a deep learning approach including 3D molecular structures and electronic states are introduced here.

Keywords: Molecular Recognition, Deep Neural Network, Big Data, 3-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship

1. はじめに

化学，薬学，生物学など分子を扱う科学分野では，ある分子が別の分子を認識するというような表現をすることがある。この「分子が認識する」とは，ある分子のかたちに沿ってもう一方の分子のかたちがつくられ，この二つの分子間に比較的強い引力相互作用が生じることを意味する。カギと鍵穴，鋳物と鋳型の関係でしばしば説明されるが，実際にはもっと柔らかなものであって人の触覚に近い感覚であると個人的には理解している。それを「認識」と表現することは，詠み人知らずではあるが，言い得て妙である。

一方，巷では「人工知能」が流行っている。歴史的には3回目のパンデミックらしいが，汎用 GPU が媒介して「ビッグデータ」と機械学習が組み合わさったことが原因とされている。特に，脳構造を模したニューラルネットワーク（NN: Neural Network）と呼ばれる機械学習の中でも，大規模で多層化されたニューロン網を配した「深層学習（Deep Learning）」が，これからの「人工知能」を牽引していくことは疑いない。

人工知能が分子科学分野において強く意識されるようになった切欠は，おそらく，メルク社が主催した活性予測コンテストにおいて[1,2]，トロント大 Dhal 等が深層学習を用いた手法[2]で最も良い成績を収めたことにあるだろう。以前から定量的構造活性相関（QSAR）の研究分野では，NN やランダムフォレスト（RF: Random Forest）などの機械学習法が採用されてきたが，これまでの技術的な積み上げを深層学習は短期間のうちに超えてしまったことに驚かされた。

2. 簡単に試せる深層学習による活性予測

現在、オープンソースの深層学習エンジンはいろいろあり、誰もが深層学習を使ったチャレンジが可能である。このコンテストでは訓練用と評価用の候補化合物セット（各分子の Finger Print と活性値）が提供されていたことから[1]、その一部（15 種類の標的タンパク質の中の 1 つ）を使って活性予測を試みた。エンジンとして Chainer[3]を利用した。多くの学習パラメータは Dhal 等の設定に従い、ニューロンの活性化関数と誤差逆伝搬法アルゴリズムの組み合わせを最適化したところ、前者は Sigmoid 関数、後者は AdaGrad 法[4]が良い結果を示し、その時の予測精度は平均誤差 0.1662 まで速やかに収束した（Fig. 1）。また、一回の学習にかかった時間は数十分から数時間程度であった。

3. 分子のかたちを暗黙的に認識する深層学習

現在の活性予測の方法は 3 次元 QSAR（3D-QSAR）と呼ばれ、候補化合物と標的タンパク質の複合体構造を推定し、両者の結合親和力（Affinity）を評価する。

この時、高精度な量子化学計算で評価することが理想とされている。つまり、候補化合物が標的タンパク質を認識している（あるいはその逆）時の配置（例えば Fig. 2）を正確かつ適切に再現することが望ましいが難しい。ところが、前述の活性予測では驚くべきことに、入力データに標的タンパク質の立体構造情報は無く、標的に対する候補化合物の活性値しか与えられていない。これが深層学習の最大の特徴である。活性機構の本質は候補化合物と標的タンパク質の三次元的相互認識にあるにもかかわらず、深層学習は候補化合物の化学構造情報だけから、タンパク質の形状を暗に認識できていると言えるだろう。

4. 量子化学情報をどう取り込むか

我々の興味は候補化合物と標的タンパク質の間の親和力をどれだけ精密に評価するかにある。そして、立体構造と電子状態を含む量子化学情報を深層学習に与えれば、予測精度がさらに向上すると考えるのは当然である。どのように取り込めばよいのか。これは大きなブレイクスルーが期待される重大な課題である。最近、機能性材料の物性を人工知能で予測しようという取り組み[5,6]にも注目が集まっており、そのことを含めて考察する。

5. 参考文献

- [1] "Merck Molecular Activity Challenge", 2012. <https://www.kaggle.com/c/MerckActivity>
- [2] J. Ma, et al., "Deep Neural Nets as a Method for Quantitative Structure-Activity Relationships", J. Chem. Inf. Model. 2015, 55, 263–274.
- [3] "Chainer: A flexible framework of neural networks", Preferred Networks, inc., <http://chainer.org/>
- [4] J. Duchi, E. Hazan, Y. Singer, "Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization", J. Machin Learning Res. 2011, 12, 2121-2159.
- [5] "Materials Genome Initiative", 2011. <https://www.mgi.gov/>
- [6] "情報統合型物質・材料開発イニシアティブ", 2015. <http://www.nims.go.jp/MII-I/>

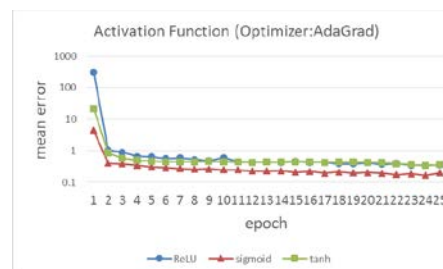


Fig. 1 Changes of activation function during AdmGrad optimization

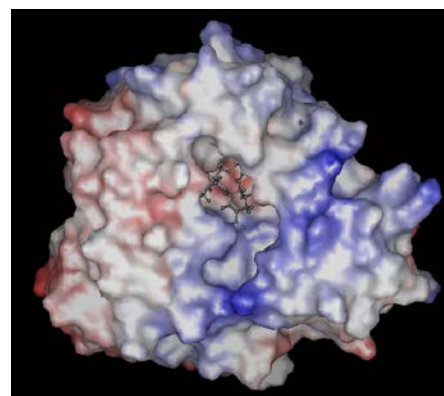


Fig. 2 インフルエンザタンパク質の窪みに収まるタミフル分子