

第39回 理工学部門研究談話会

日時 : 令和 5年 1月18日(水) 13:30~14:30

方法 : Microsoft Teams によるオンライン配信

話題及び提供者

『チェーンの幾何学
—ロボットアーム, 環状分子, ポップアップカード—』

小松 和志

『水災害予測・リスクマネジメントへの取り組み』

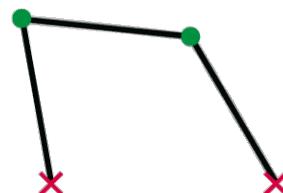
渋尾 欣弘

教職員, 大学院生, 学生, 一般の方々のご参加をお待ちしております
(お問い合わせ: iida@kochi-u.ac.jp)

「チェーンの幾何学 — ロボットアーム, 環状分子, ポップアップカード —」

(第1分野: 数学物理学科数学 小松和志)

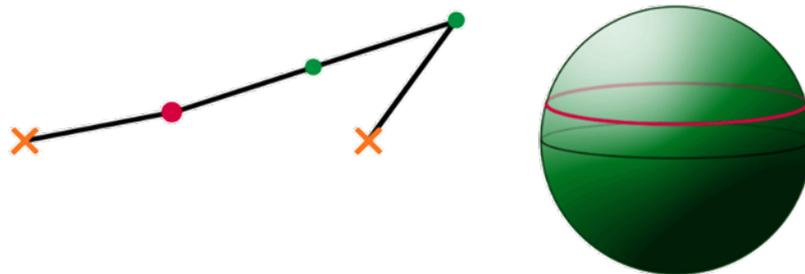
平面的に動くロボットアームを例として, チェインとそれを配置空間がどんなものかを説明しよう. チェインとは, いくつかの硬くて曲がらないバー(線分)をつないだものである. 右図のようなロボットアームでは, 黒い線分を硬くて曲がらないバーとし, このロボットアームの骨組みにあたるものをリンクという. リンク同士をつなぐ部分をジョイントという. ジョイントは関節のような可動箇所とすることもある. ここでは●で表す.



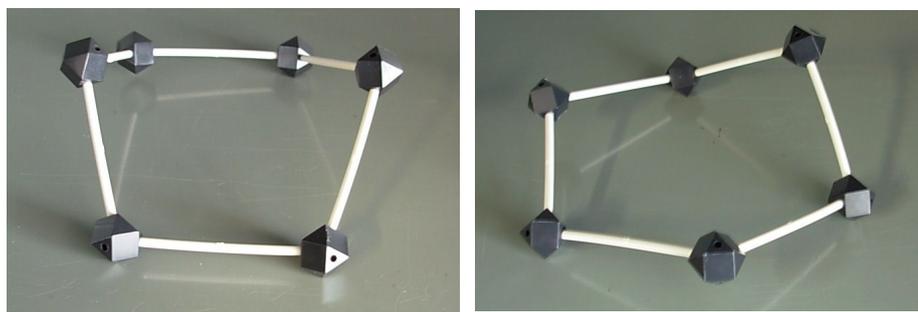
設置して位置を固定するようなときは, その箇所をアンカーと呼ぶ. このアンカーは位置は固定されるが, 回転運動の中心となることもある. ここでは×でロボットアームが取り付けられている部分を表す. 図は3つのリンク, 2つのジョイント, 2つのアンカーを同一平面上にもち, アームがこの平面上を動くようなロボットアームである. アンカーで取り付けられた2つのリンクはアンカーを中心にした平面的な回転をする.

チェーンの動きや取りうる形状を調べる方法のひとつに配置空間というものがある. 配置空間とは, 1つの形を1つの点とみなして, 似ている形は近くにあるとすることでそれらの点全体が成す形(空間)のことである. これは俯瞰的な視点から位置や形の変化を見る地図といえるものである.

アームの状態を点として, 全てのアームの状態からなる空間(配置空間)はどのような図形になるだろうか. 上に挙げたロボットアームの場合は円周と同じ形だと言える. さらに, リンクをもうひとつ増やして4つにすると, その配置空間を球面と同じ形になる. 下の図からそれがイメージできるだろうか.



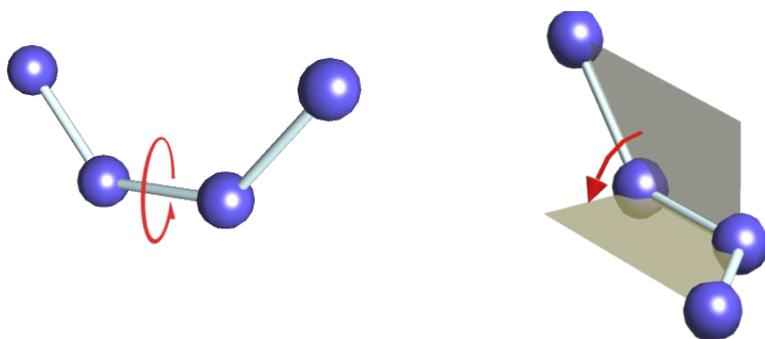
次はチェーンとして、環状分子の立体構造の数理モデルを考える。



上の写真は丸善の分子模型を用いて6個の炭素原子による環状分子(6員環)の特徴的な2つ立体構造を表したものである。それらは形の特徴から、舟型といす型と呼ばれている。黒のパーツ(炭素原子)を頂点として、白のパーツ(炭素の結合の腕)をリンクとしてもつチェーンであるもつチェーンである。ここではリンクをボンドと呼ぶ。ボンドの成す角(ボンド角)は炭素の結合の腕の間の角(結合角)に定まる。5員環のボンド角の平均は $\frac{7}{12}\pi$, $n \geq 6$

の n 員環の標準的なボンド角は正四面体角 $\cos^{-1}(-\frac{1}{3})$ である。

ボンド角が固定されている場合、ひとつの立体構造から別の立体構造へはどのように変位して移るのだろうか。ボンド角が固定されていても、ボンドの回りの回転という変位ができる(下図)。自分に腕を使って、ひじのところの曲がり具合(ボンド角)を固定して、二の腕を軸にしてひねることをしてみるとイメージがし易い。このひねりを表すには、図4の3点で作る平面の間の角度(二面角(dihedral angle))を用いると良い。配置空間は二面角でパラメータ付けできるのではあるが、そこから図形としてどんな姿をしているのかを想像することは難しい。



実際の分子の立体構造について、次のことが知られている。

- 1947年から1972年までに得られた、シクロペンタンなどの飽和5員環の全ての立体構造の構造データに対して、その結果である二面角データを座標変換しプロットすることでコンピュータの画面上に「円周」が現れる。
- 1975年前後に得られた、シクロヘキサンなどの飽和6員環の立体構造の構造データでは、「球面」が現れる。
- 7員環以上では、よく分かってはいない。

コンピュータ上にプロットされた形は、配置空間の形を表している。

私たちは、環状分子の立体構造の数理モデルとして、指定した連続する2か所のボンド角以外のボンド角が固定されているチェーンを採用して、それらの成す配置空間を考えた。

θ を固定されるボンド角の角度とする。そのときの配置空間を $C_n(\theta)$ で表す。

次の結果が得られる

定理([S.Goto, K.Komatsu, 2012])

$$n=5 \text{ かつ } \theta = \frac{7}{12}\pi, \text{ 及び } n=6,7 \text{ かつ } \theta = \cos^{-1}\left(-\frac{1}{3}\right) \text{ のとき,}$$

配置空間 $C_n(\theta)$ は $(n-4)$ -次元球面に同相である。

ここで、 $\frac{7}{12}\pi$ は5員環のボンド角の平均であり、 $\cos^{-1}\left(-\frac{1}{3}\right)$ は6,7員環の標準的なボンド角であることを注意しておく。

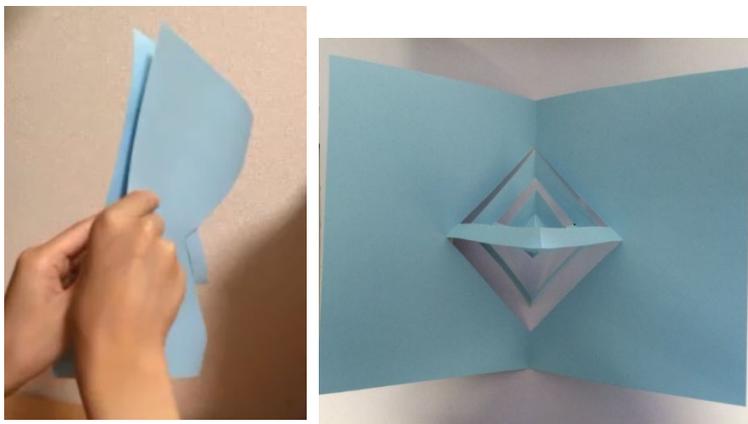
さらに、拡張された次の結果が成立する。

定理([S.Goto, K.Komatsu, J.Yagi, 2020])

整数 $n \geq 5$ に対して、 $\theta_0 < \theta < (n-2)\pi/n$ を満たす θ をボンド角をもつ配置空間 $C_n(\theta)$ が

$(n-4)$ 次元球面に同相であるような角度 θ_0 が存在する。

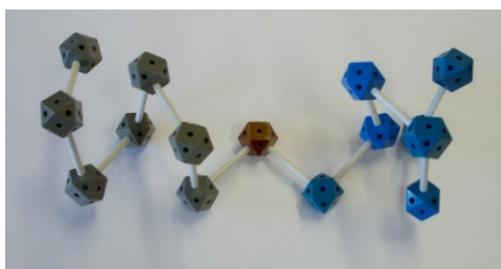
最後に次のようなポップアップスピナーと呼ばれるポップアップカードの中にチェーンの構造が内在している。次の図の左がカードを閉じた状態で右が開いたときの状態である。



国立大学 55 工学系学部ホームページ「おもしろ科学実験室」
ポップアップスピナー(回転するカード)を作ろう！
(高知大学 理工学部)

<https://www.mirai-kougaku.jp/laboratory/pages/200228.php>

内在しているのは、下の図のようなボンド角が固定されている(閉じていない)チェーンである。カードを閉じると、このチェーンはらせん状に丸められ、カードが開かれると、チェーンは、最大スパンと呼ばれるチェーンの端から端までが最大の距離を得る平面的な階段配置に向かう。



水災害予測・リスクマネジメントへの取り組み

渋尾欣弘（地球環境防災学科）shibuo@kochi-u.ac.jp

台風や線状降水帯等に伴う水災害が日本各地で発生しています。昨年夏においても東北・北陸地方において記録的な大雨となり、広範囲において河川の氾濫、都市部の浸水が発生しました。そのような水災害は人的被害、資産の損失、インフラや地域産業への被害をもたらし、我が国における深刻な社会的課題となっています。一般に気象要因に伴う災害は、地震等の突発的な災害と比較すると対策を講じるために必要なリードタイムがある程度存在するため、気象情報からモデルを介して水災害情報へと変換することで、河川管理や都市雨水管理、住民の安全な避難等の対策へ役立てることが期待できます。

この背景において、談話会では私がこれまで取り組んできた水災害予測とリスク管理の研究（特に河川洪水と都市浸水）についてお話します。河川洪水予測を難しくしている主な要因は、洪水初期における土壌水分や地下水などの流域保水状態量の把握、観測される降水量の精度、予測される降水量の不確実性等です。これらに対処するための研究事例として、大気陸面過程と結合した河川洪水予測手法の適用、気象数値予測雨量をレーダー雨量で統計的に評価した降水予測手法、これらを組み合わせたアンサンブル河川洪水予測について紹介します。あわせて、洪水の予測情報を活用した仮想的ダム操作、および流域を俯瞰する統合的流域管理システムについても紹介します。

都市浸水の問題に関しては、短時間で局所的に降るいわゆるゲリラ豪雨に加え、線状降水帯による上流からの洪水が下流都市部での雨水排水を困難にする事例が増えつつあります。このような現象を精度よく評価するためには、洪水時の河川水位と下水道網からの雨水排水が相互に与える影響を考慮する必要があります。そのような都市浸水予測の研究として、外水・内水の一体解析手法について紹介します。さらにはIoTを活用した現地観測と数値モデルを融合した浸水予測の技術開発についてもお話します。

また、これら河川洪水や都市浸水を準リアルタイムで予測するための、地球環境ビッグデータの活用策についても話題提供させていただく予定です。