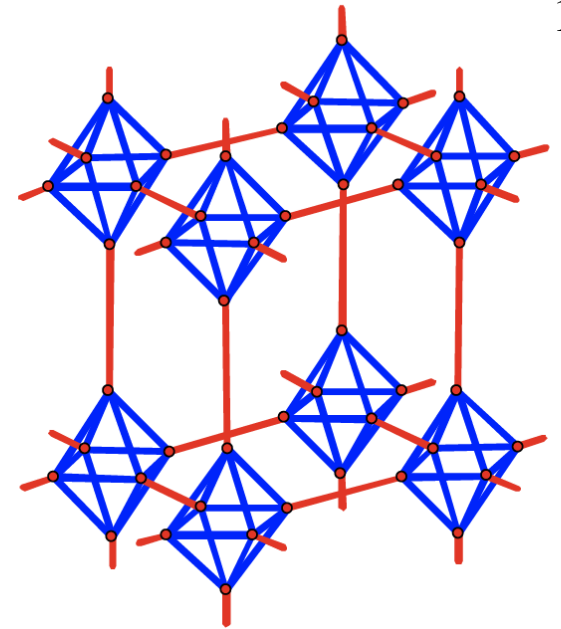


第4部 最近の進展

- Molecularフレームワーク(Katoh&T11)
- 特殊構造モデルの剛性
- 非一般的なジョイント配置への拡張
 - 対称性を有する有限フレームワーク
 - 2次元Maxwell-Laman型の特徴付け (Schulze10)
 - 周期フレームワーク, 結晶フレームワーク
 - 2次元剛性のMaxwell-Laman型特徴付け (Malestein&Theran10)
 - d-dimensional body-bar frameworks (Borcea, Streinu & T)
- 大域剛性
 - (G, p) が大域剛堅 $\Leftrightarrow \forall (G, q), (G, q) \sim (G, p) \Rightarrow (G, q) \equiv (G, p)$
 - (Connelly 04, Jackson & Jordan 04) 2次元一般大域剛性の組合せ的特徴付け



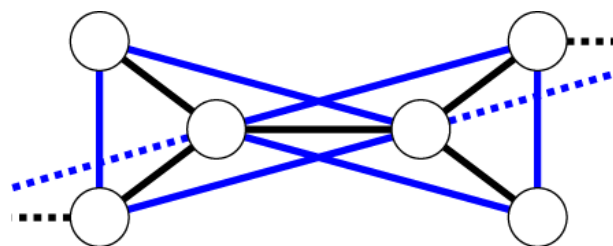
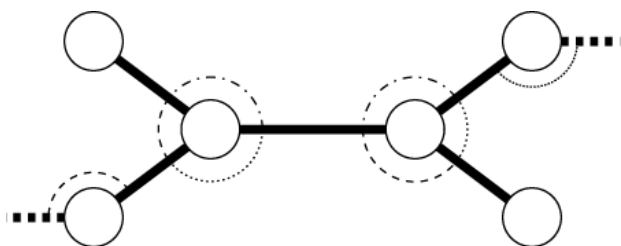
Molecular Frameworks

■ 分子構造のモデル化

□ 共有結合 \Rightarrow 距離制約+角度制約

□ $\Rightarrow G^2$ の3次元bar-joint framework

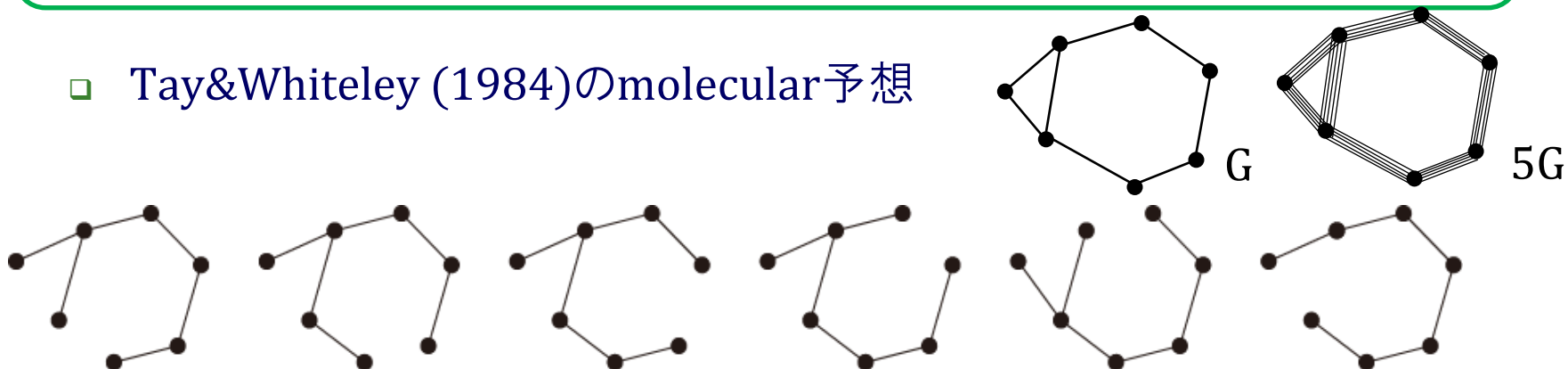
□ $G^2 = (V, E^2), E^2 = E \cup \{uv \mid uw, wv \in E: w \in V\}$



■ Theorem (Katoh & T. 11)

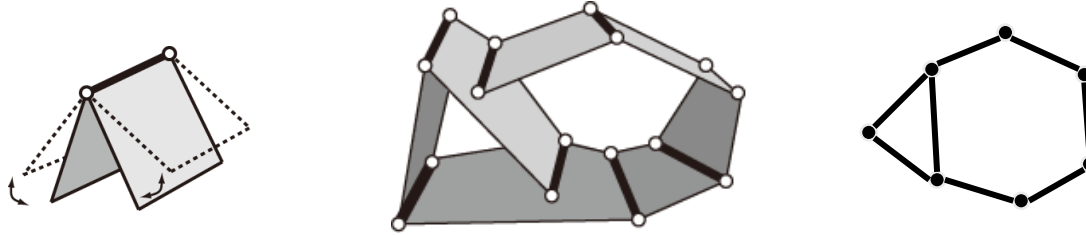
□ G^2 が3次元剛堅 $\Leftrightarrow 5G$ が6つの辺素な全域木を含む

□ Tay&Whiteley (1984)のmolecular予想



Panel-hinge Frameworks

- 剛板(panel)がヒンジ(hinge)接合された構造物



- Panel-hinge framework: (G, h)

- $G = (V, E)$: グラフ, h : “hinge-coplanarity”を満たすヒンジ配置

- 頂点 \Leftrightarrow パネル = \mathbf{R}^d 内の平面

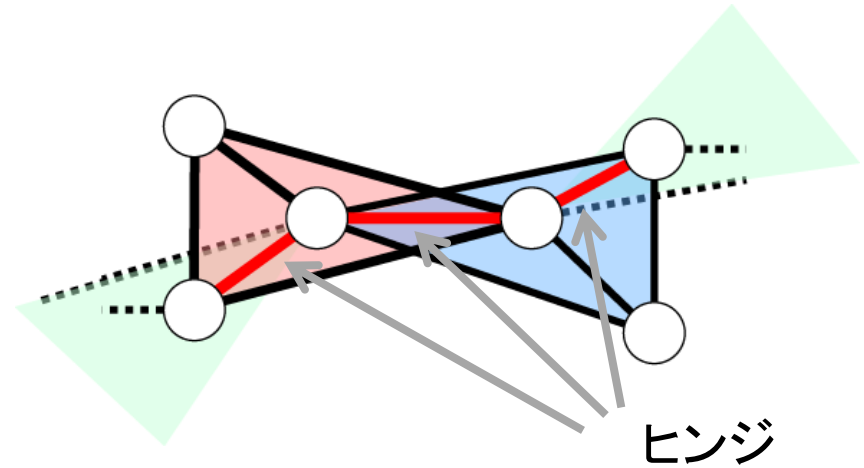
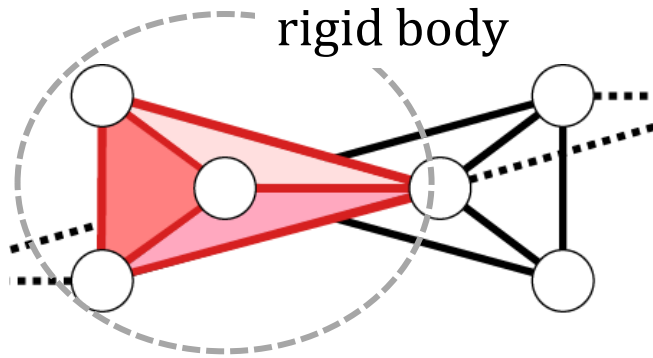
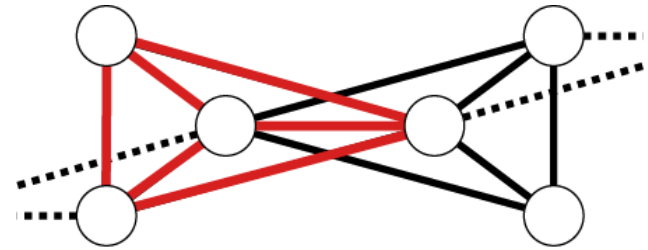
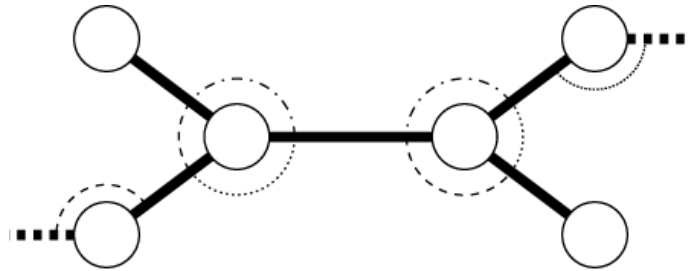
- 辺 \Leftrightarrow ヒンジ = \mathbf{R}^d 内の $(d-2)$ 次元線形部分空間で“hinge-coplanarity”を満たすもの

- “hinge-coplanarity”条件は特殊な幾何学的条件. Tay-Whiteleyのbody-bar定理は適用できない!!

Molecular 剛性予想

- **Molecular 剛性予想** [Tay and Whiteley, 1984]
 - $G = (V, E)$ に対し以下が同値:
 - (i) G が無限小剛堅なbody-hinge framework (G, h) として実現可能
 - (ii) $\left(\binom{d+1}{2} - 1\right) G$ が $\binom{d+1}{2}$ 個の辺素な全域木を含む
 - (iii) G が無限小剛堅なpanel-hinge framework (G, h) として実現可能
 - $d = 2$: Jackson and Jordán (2006)
 - 一般の d : Katoh&T(2011)

分子構造のモデル化



- 3次元剛体ヒンジ構造!!
- **Nongeneric** (ヒンジ配置が一般的でない) !!
 - “hinge-concurrent”な剛体ヒンジ構造
 - Tay-Whiteleyの定理を適用することはできない。

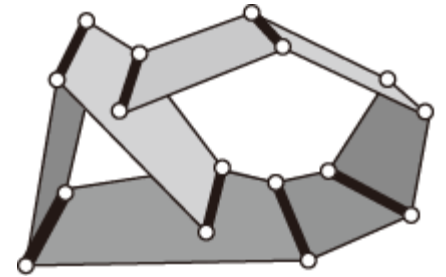
“Hinge-concurrent” vs “Hinge-planar”

■ \mathbb{P}^3 の射影双対変換

□ 点 \Leftrightarrow 平面 \Rightarrow bodyの中心点 \Leftrightarrow panel

□ 直線 \Leftrightarrow 直線 \Rightarrow ヒンジ \Leftrightarrow ヒンジ

□ \Rightarrow “hinge-concurrent” な剛体ヒンジ構造 \Leftrightarrow 剛板ヒンジ構造



■ Prop.(Crapo and Whiteley, 82).

□ (G, h) が無限小剛堅 $\Leftrightarrow (G, h^*)$ が無限小剛堅

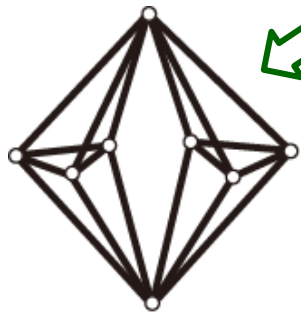
■ **Molecular定理** ⇒

- 分子中の各原子を頂点, 共有結合を辺として表現して得られるグラフをGとする. このとき、

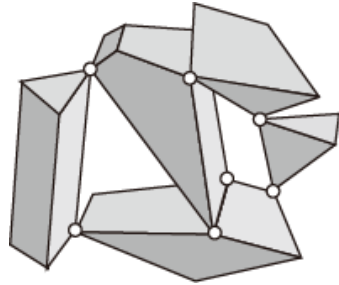
$$\text{分子の自由度} = 6|V| - 6 - r_{6,6}(5G)$$



- 分子の剛性, 自由度だけでなく, ヒンジ可動箇所, rigid clusterや冗長な結合の箇所等の情報が(6,6)-疎性マトロイドに対するアルゴリズムによって**組合せ的に高速に**求まる. ($O(n^2)$ 時間)
 - 定数時間近似も可能
- Implemented in ...
 - FIRST, FRODA, KINARI, The Protein Folding Server

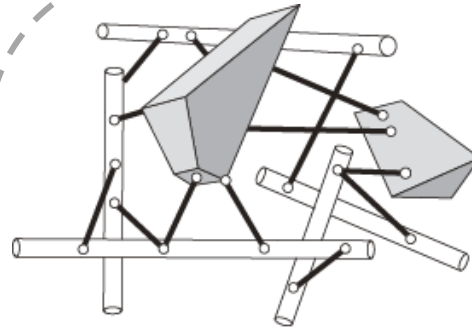


Bar-joint
Unsolved

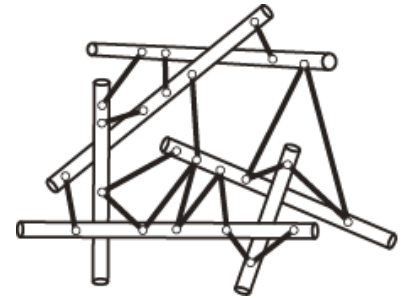


Body-pin
Unsolved

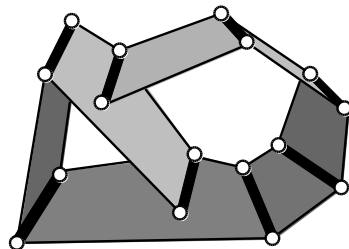
Maxwell/Laman-type Characterizations



Body-rod-bar
T 11

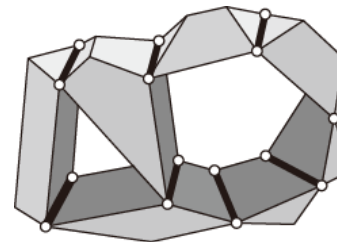


Rod-bar
Tay 89,91

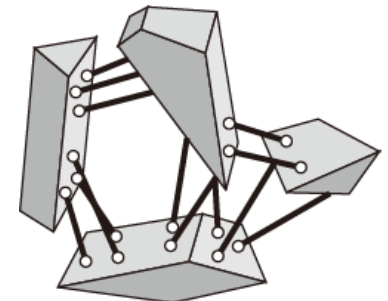


Panel-hinge
Katoh & T 09

Body-bar-hinge
Jackson & Jordán09



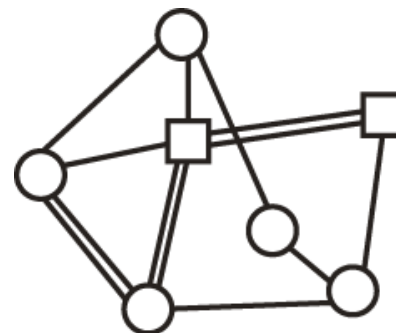
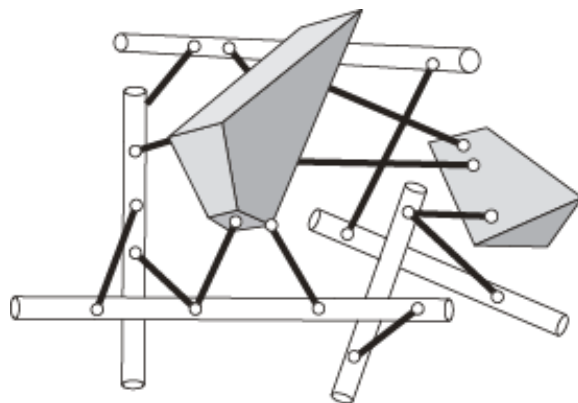
Body-hinge
Tay 89,91, Whiteley 89



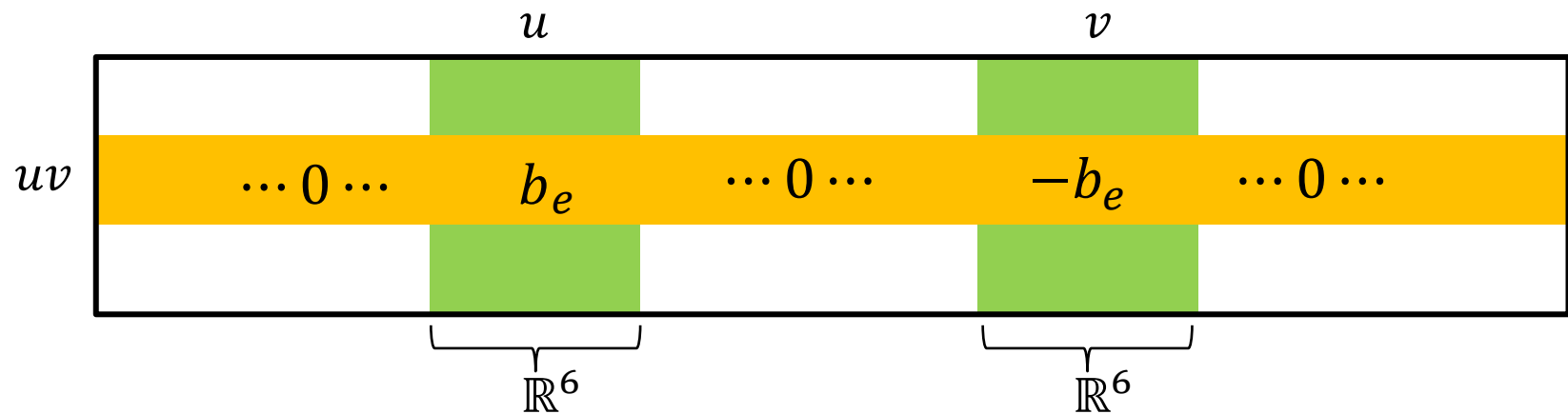
Body-bar
Tay 84

Body-rod-bar Frameworks

- 3-dimensional body-rod-bar framework: (G, b, r)
 - $G = (B \cup R, E)$: graph,
 - b : bar-configuration
 - $e \in E \mapsto$ Plücker coordinate of a bar in \mathbb{R}^3
 - r : rod-configuration
 - $v \in R \mapsto$ Plücker coordinate of a rod in \mathbb{R}^3
 - with incidence conditions
 - $\forall e = uv$ with $u \in R$, $\langle b_e r_u \rangle = 0$



- **Theorem (T11).** E is independent set of the generic rigidity matroid in the body-rod-bar model \Leftrightarrow
 - $\forall F \subseteq E, |F| \leq 6|B(F)| + 5|R(F)| - 6$



- $b_e \in \mathbb{R}^6$ is restricted to
 - the Grassmanian $\text{Gr}(2, \mathbb{R}^4)$
 - the hyperplane $\{x \in \mathbb{R}^6 \mid \langle x, r_v \rangle = 0\}$ if $v \in R$
 - the hyperplane $\{x \in \mathbb{R}^6 \mid \langle x, r_u \rangle = 0\}$ if $u \in R$

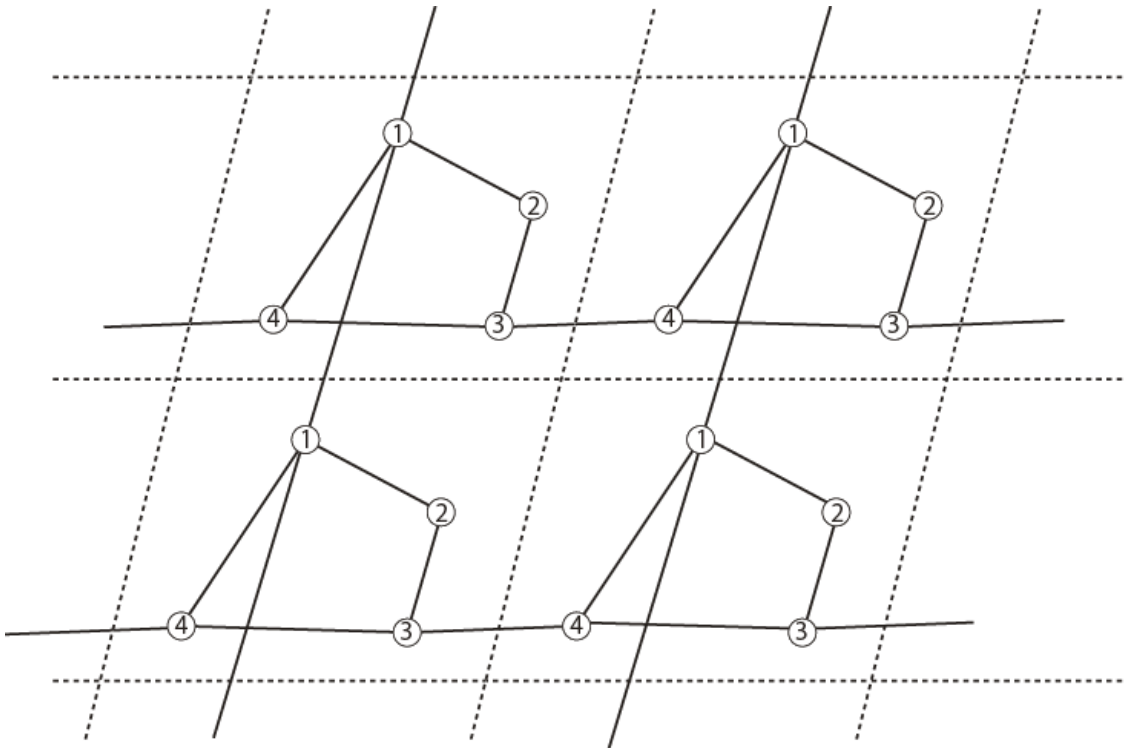
■ 沸石の合成

- 沸石: TO_4 四面体($\text{T}=\text{Si}, \text{Al}$)を基本ユニットとし、各O頂点が2つの TO_4 四面体を共有することで構成される結晶ナノ物質

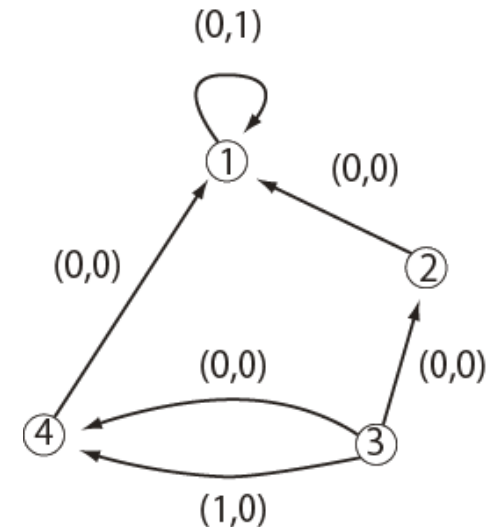
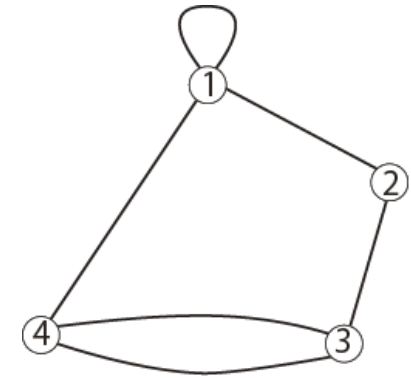
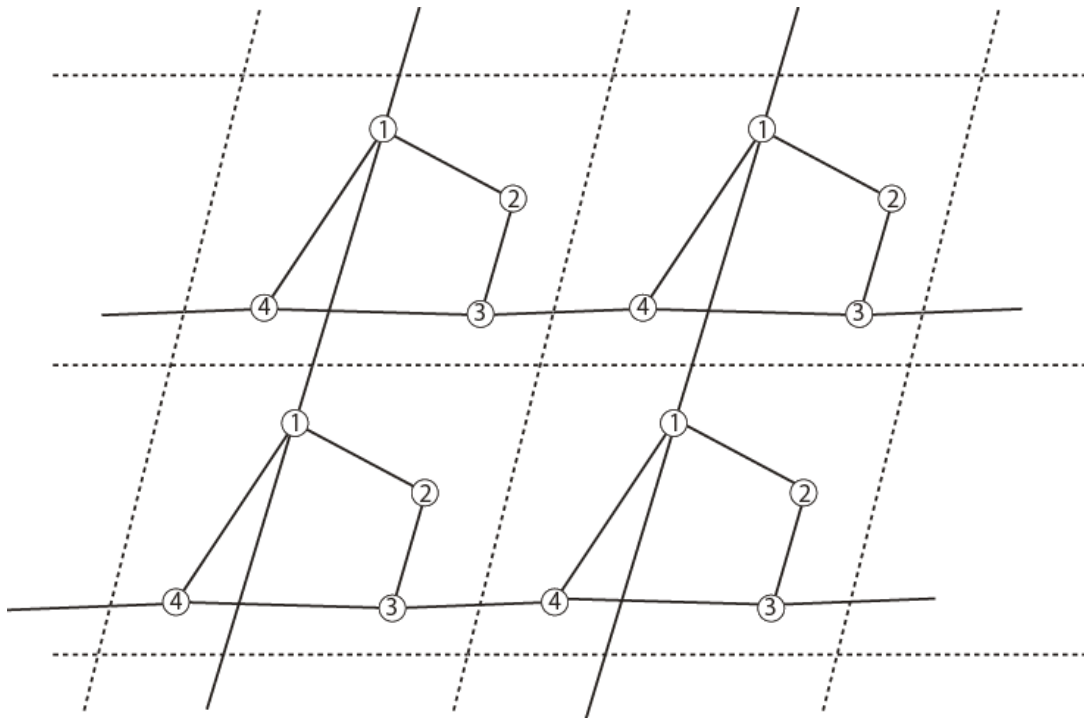
- 既知の殆どの沸石は(理想的なモデルにおいて)柔なトポロジーを有する(Sartvaeva et al.2006)

周期グラフ

- **d次元周期グラフ** $G = (V, E)$: \mathbb{Z}^d が $Aut(G)$ の部分群として(固定点なしで)作用しており, **商グラフ** $G/\mathbb{Z}^d = (V/\mathbb{Z}^d, E/\mathbb{Z}^d)$ が有限なグラフ

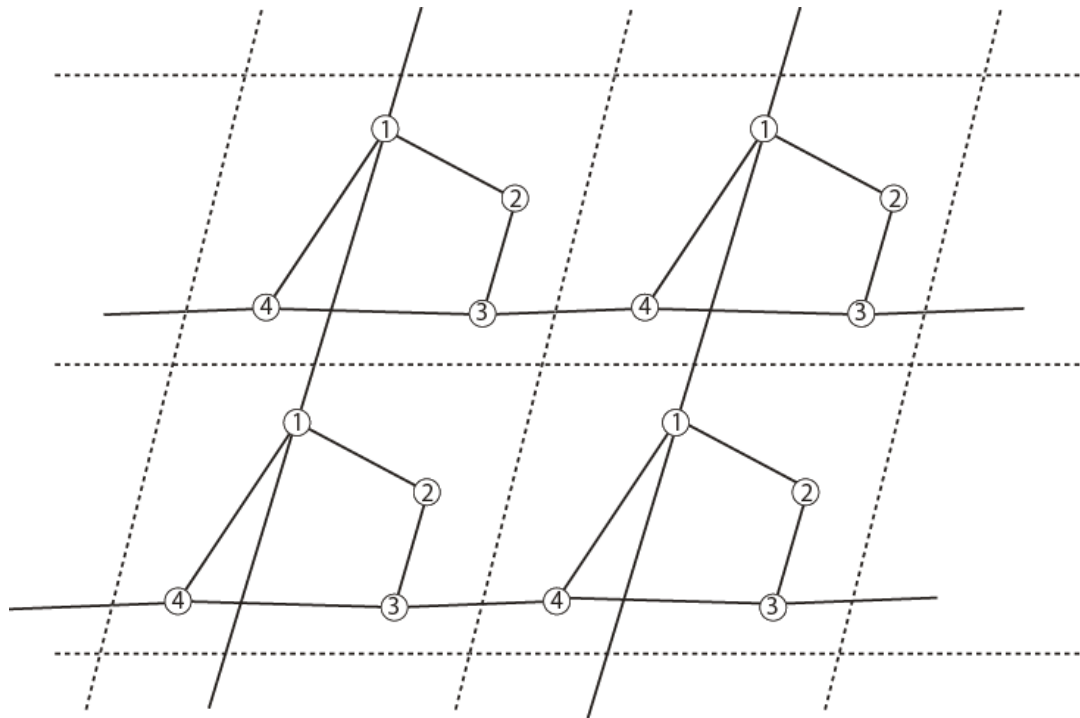


- グラフを位相空間として見たとき, d 次元周期グラフ $G = (V, E)$ とは有限連結グラフ G/\mathbb{Z}^d の被覆空間で, その被覆変換群が \mathbb{Z}^d のもの
 - $\varphi: G \rightarrow G/\mathbb{Z}^d$: 被覆写像
 - $H_1(G/\mathbb{Z}^d)$: 1次元ホモロジー群
 - $\rho: H_1(G/\mathbb{Z}^d) \rightarrow \mathbb{Z}^d$: φ に誘導される準同型写像



■ Theorem (Borcea&Streinu2010)

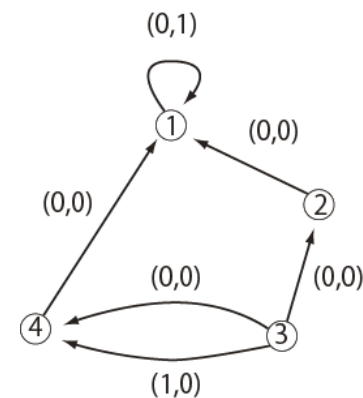
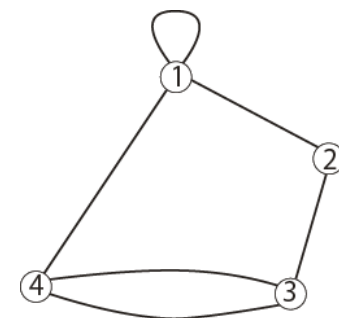
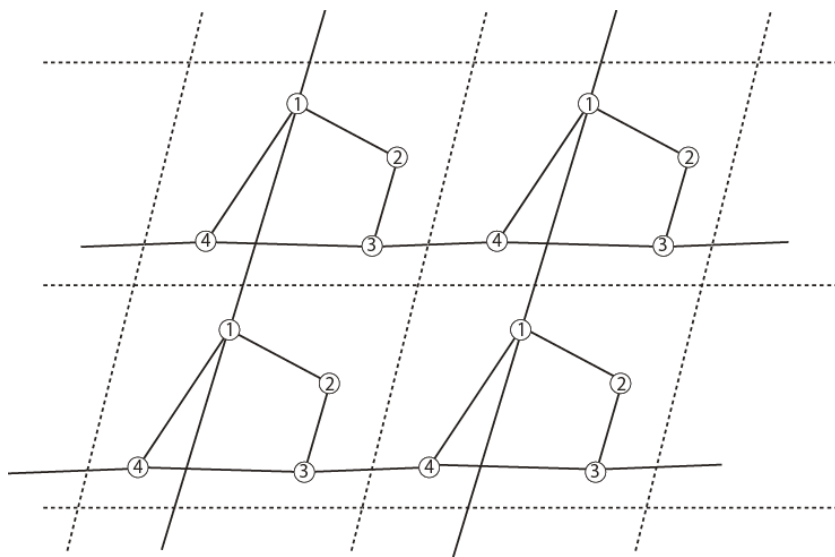
- 周期グラフ G の一般剛性はサイズ $|E/\mathbb{Z}^d| \times (d|V/\mathbb{Z}^d| + d^2)$ の剛性行列の階数で特徴付けされる
- G が一般的に極小剛堅 $\Rightarrow |E/\mathbb{Z}^d| = d|V/\mathbb{Z}^d| + d^2 - \binom{d+1}{2}$



2次元フレームワークの特徴付け

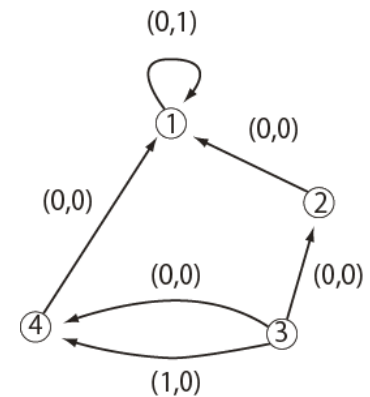
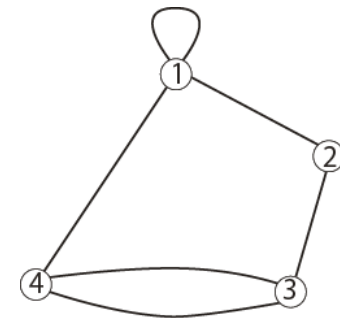
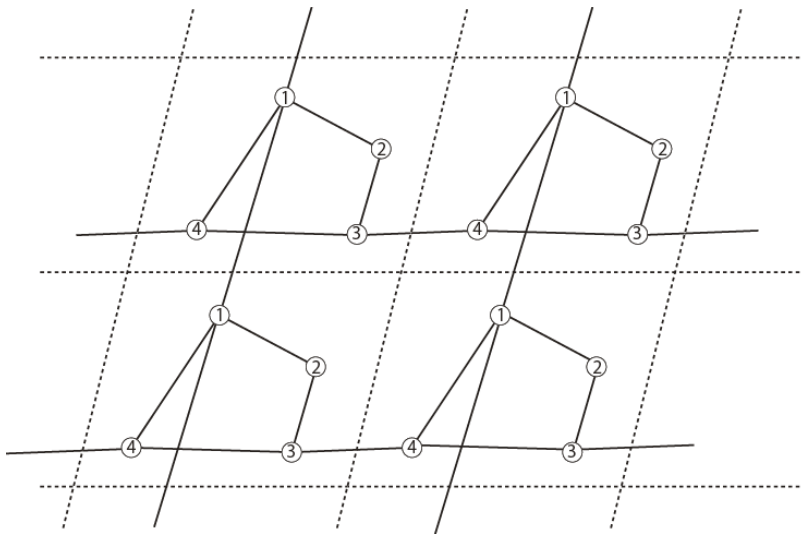
■ 定理 (Malestein&Theran2010) G が2次元極小剛堅 \Leftrightarrow

- $|E/\mathbb{Z}^2| = 2|V/\mathbb{Z}^2| + 1$
- $\forall F \subseteq E/\mathbb{Z}^2, |F| \leq 2(n_F - \omega_F + d_F) - 1$
- n_F : F に誘導される頂点軌道数
- ω_F : F の連結成分数
- d_F : $H_1(F) \rightarrow H_1(G/\mathbb{Z}^d) \rightarrow \mathbb{Z}^d$ の像のランク

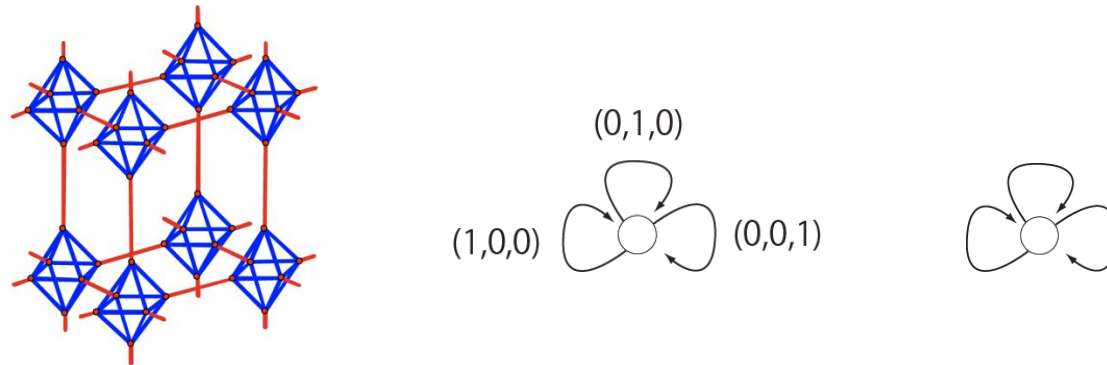


■ 格子が固定されている場合の特徴付けはRoss(2011)

- 定理(Borcea&Streinu2011) $G' = (V', E')$ がd次元極小剛堅な周期グラフの商グラフである \Leftrightarrow
 - $|E'| = d|V'| + \binom{d}{2}$
 - G' がd個の辺素な全域木を有する.



- 定理(Borcea, Streinu & T). d 次元periodic body-barモデルにおいて $G' = (V', E')$ が極小剛堅な周期グラフの商グラフである \Leftrightarrow
 - $|E'| = \binom{d+1}{2}(|V'| - 1) + d^2$
 - G' が辺素な d 個の全域木と $\binom{d}{2}$ 個の全域擬似森((1,0)-疎性マトロイドの基)を含む.



- **予想**(Borcea, Streinu & T) d 次元periodic body-barモデルにおいて周期グラフ $G = (V, E)$ が極小剛堅である \Leftrightarrow
 - $|E/\mathbb{Z}^d| = \binom{d+1}{2}(|V/\mathbb{Z}^d| - 1) + d^2$
 - $\forall F \subseteq E/\mathbb{Z}^d, |F| \leq d(n - \omega_F) + \binom{d}{2}n_F - \sum_{F': \text{連結成分}} \binom{d-d_{F'}}{2} + \binom{d_{F'}+1}{2}$