

News letter

離散幾何と材料

その共通項を探究する



Discrete Geometric
Analysis for
Materials Design

次世代物質探索のための離散幾何学

科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」
平成 29 年～ 33 年度

News letter **01**
Vol. **01**

代表挨拶



領域代表
東北大学材料科学高等研究所
大学院理学研究科数学専攻

小谷 元子

このたび「次世代物質探索のための離散幾何学」の代表を務めることになりました。本領域では、これまで邂逅の機会があまりなかった『数学』と『物質・材料科学』という日本が優位を誇る2つの分野が協働で新しい地平を切り拓き、社会に貢献することを目指しています。

優れた機能をもつ物質・材料を創製することは我々の生活を便利にするだけでなく、時には生活のスタイルや価値観を変える力を持っています。日本は物質・材料科学領域では科学・産業両面で世界をリードしてきましたが、近年、米国を皮切りにドイツ、中国などが情報科学を適用したデータ駆動型物質探索の大型プロジェクト（Materials Genome Initiative など）を足がかりとして激しく追いつけています。これは「求める物性や機能を持つような物質・材料を設計する」という長年の夢を実現する可能性を秘めた動きで、従来の『順問題』的アプローチから次世代の『逆問題』的アプローチへと、材料開発のありかたが大きく変わろうとしています。

そこではこれまでに蓄積された経験や知見、特に個人の内に蓄えられた感覚や勘と行った抽象的なものを、いかにして科学の言葉にしていくかが成功の鍵となります。ここに、科学の共通言語を提供してきた数学、特に複雑さや階層性を記述することを得意とし21世紀に入って急速に進展している離散幾何解析学を適用して、物質・材料の構造・機能・プロセス関係を深く理解できるのではないかと考えています。

本領域は、日本ならではの次世代物質探索を旗印にしつつ、数学、物理（理論・実験）、化学、材料工学、情報科学など様々な分野をそれぞれ深化させることも目指します。たくさんの方と情報を共有し議論の機会をもてるようオープンな領域としてまいりますので、どうぞよろしくお願いいたします。

論文・書籍紹介

本新学術領域が目指す幾何学と物質・材料科学の連携については下記のような文献が参考になります。

- [1] 小谷元子, 現代化学 (東京化学同人) 連載シリーズ「数学, 化学と出会う」 (1) 怠け者の勧め . vol. 535, pp. 19-22 (2015年10月号); (2) カーボンネットワークの対称性と曲がり方 . vol. 537, pp. 18-21 (2015年12月号); (3) 柔らかい幾何学 トポロジー . vol. 539, pp. 15-17 (2016年2月号); (4) アモルファス材料のトポロジー解析 . vol. 541, pp. 60-61 (2016年4月号); (5) トポロジカル材料 . vol. 543, pp. 58-59 (2016年6月号); (6) 柔らかさを数える . vol. 545, pp. 22-24 (2016年8月号).
- [2] 小谷元子「材料科学と離散幾何解析学の連携による挑戦」, 表面科学, vol. 34, No. 1, pp. 3-8 (2013).
- [3] Susumu Ikeda and Motoko Kotani, A New Direction in Mathematics for Materials Science. SpringerBriefs in the Mathematics of Materials, vol. 1, Springer (2015).
- [4] Motoko Kotani and Susumu Ikeda, Materials inspired by mathematics. Science and Technology of Advanced Materials, vol. 17, pp. 253-259 (2016).

領域の概要

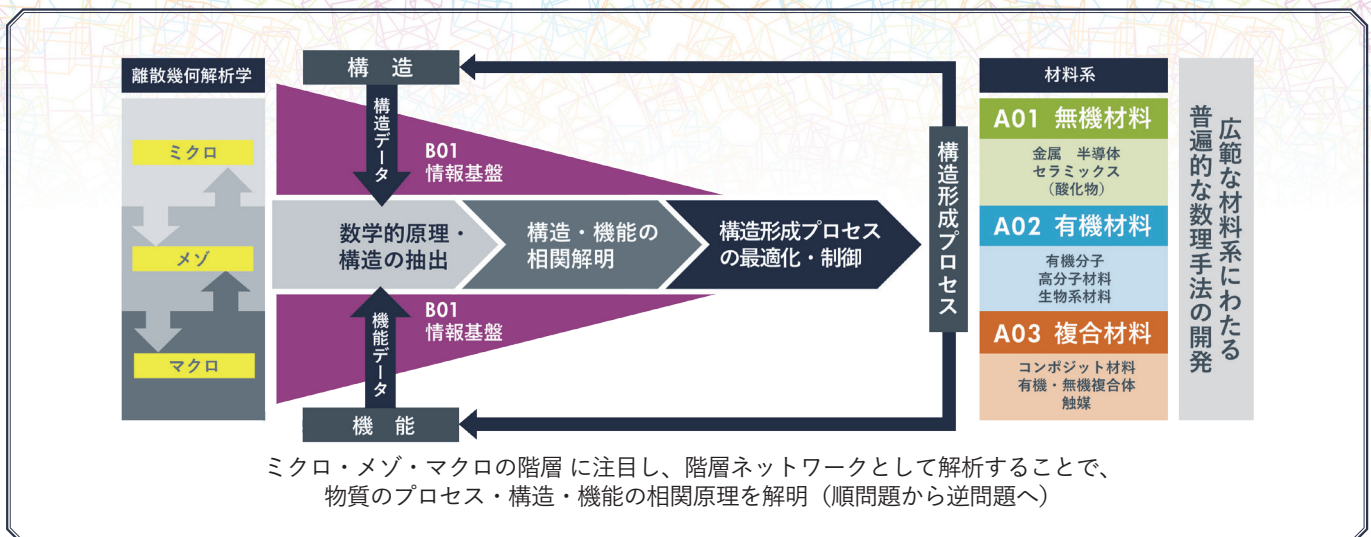
領域代表者の専門である離散幾何解析学とは、原子・分子のようなマイクロ構造やナノ粒子などのメゾ構造（これらを階層的ネットワークと理解します）と物質・材料のマクロな性質、つまり物性・機能の関係を幾何学的に記述し、解析するものです。ここでは、(1) 物質のマイクロ・メゾ構造とマクロな物性・機能の関係を解明し（順問題）、(2) 求められる物性・機能を持つマイクロ・メゾ構造を予測すること（逆問題）、(3) 更に構造を生成する動的構造形成の制御（最適化・制御）が求められています。本研究は、数学と物質・材料科学の連携により、「構造・機能・プロセスの相関原理」を解明することで、「次世代物質探索のための離散幾何解析学」を創成することを目指すものです。

「物質を階層的ネットワークとして理解する」という大目標のもと、以下のA01～A03の研究項目、および共通手法開発のためのB01の研究項目を設置します。

- **A01 「トポロジカル物質」** ————— <対象とする物質> 無機材料系 特にスピントロニクス材料
- **A02 「ネットワーク解析による高分子材料」** ————— <対象とする物質> 有機系材料、高分子材料
- **A03 「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」** ————— <対象とする物質> 複合材料、特に触媒
- **B01 「物質・材料科学のための情報科学基盤」** ————— ネットワーク解析、画像解析、機械学習

計画研究と公募研究とが連携しながら多様な分野の多様な手法を組み合わせ、普遍的に有効な離散幾何解析学の手法と広範な応用課題を開発します。

特に、数学者と物質・材料科学者が協働して「数学的原理・構造の抽出」「構造と物性・機能の相関解明」「構造形成の制御・最適化」の流れを作り、従来の物質開発のありかたを根本から変革することを目指します。これを通じて若手を育成するとともに、ビッグデータ時代の材料開発に資するべく企業とのセミナーやコンサルテーション、サイエンスカフェを通じて、成果を広く社会に発信していきます。



A01 「トポロジカル物質」

<対象材料> トポロジカル材料 (省散逸デバイス、熱電変換材料)

<数学的手法> 指数定理、超弦理論

<達成目標> 物質表面に観測されるトポロジ相に依存するロバストな状態が対称性の破れにより発現する普遍的原理を解明し、新たなトポロジカル物質創成によるスピントロニクスデバイスを開発、特に秩序系で構築された理論を非コンパクト、非線形、無秩序系へ展開していきます。

研究内容

研究代表者 (総括班メンバー)

計画研究 A01-1

A01-1 指数定理の展開とトポロジカル表面状態

研究代表者: 古田 幹雄 (東京大学・教授・総括、TQFT)

分担研究者: 加藤 毅 (京都大学・教授・K理論)、五味 清紀 (信州大学・准教授・TQFT)

連携研究者: 緒方 芳子 (東京大学・教授・相互作用系数理)、松尾 信一郎 (名古屋大学・准教授・指数定理)、佐藤 浩司 (東北大・助教・物性物理)、林 晋 (産総研MathAM-OIL(東北大内)・博士研究員)、窪田 陽介 (理化学研究所・研究員)

■ 研究目的

相互作用系のトポロジカル表面状態の探求から創発される指数定理の展開と深化。

■ 達成目標

線形理論: K理論の背景にあるBott周期性とバルクエッジ対応との内在的関係の解明。

線形理論から非線形理論とTFTへ: K理論を越えたもっとも普遍的トポロジカル不変量。

閉多様体から開多様体へ: TFTの枠組みの、高次元の広がりをもつ開多様体の上へ拡張。

TFTから相互作用系へ: 相互作用のあるトポロジカル物質の性質との対応関係。

■ 将来のビジョン

物質科学で本質的な相互作用系の解析のため、近年顕著に発達した3・4次元トポロジと物質科学とのリンクを開拓しTFT的理論を構築する。

■ 準備状況

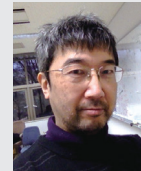
東大、京大、東北大における準定期的な2セミナーによる連携関係、共同研究およびセミナーによる物理学者たちとの交流経験がすでにある。

■ 研究環境

参画研究者間での議論を十分に行い、東京大学を核に研究推進の環境が整っている。

■ 方法

指数定理の専門家が研究代表者として指揮をとり、研究分担者の五味がK理論とTFT、加藤がヒルベルト空間上のゲージ理論、連携研究者の松尾が無次元力学系、緒方が量子統計力学、佐藤がトポロジカル物質の数理物理の立場で参画し、上記のテーマに取り組み。



東京大学
大学院数理科学研究科
数理構造論大講座 教授

古田 幹雄

Mikio FURUTA

研究分野: 幾何学

研究テーマ: ゲージ理論・4次元トポロジ

研究概要: 多様体上の線形および非線形の偏微分方程式系の解空間を利用してその多様体の性質を研究しています。線形方程式では指数の局所化、非線形方程式では4次元空間上のゲージ理論由来のYang-Mills方程式、Seiberg-Witten方程式を主な対象とし、方程式系の無限次元幾何学として展開を目指しています。

計画研究 A01-2

A01-2 プレーンとソリトンの量子異常が導くトポロジカル物質

研究代表者: 橋本 幸士 (大阪大学・教授・大学院理学研究科・総括)

分担研究者: 押川 正毅 (東京大学・教授・物性研究所・物性理論)、衛藤 稔 (山形大学・准教授・理学部・ソリトン)、

日高 義将 (理化学研究所・専任研究員・仁科センター・高次形式)、木村 太郎 (慶応義塾大学・助教・経済・離散模型)

■ 研究目的

対称性を尊重した連続極限の場の理論を、多様な数理的手法で解析し、離散原子模型にユニバーサルに現れる可能な表面状態を分類、応用する。

■ 達成目標

トポロジカル物質の表面状態の分類、境界トポロジとの融合数理、これらの組み合わせによる新規状態の予言。

■ 将来のビジョン

超弦理論/プレーンと物質科学の統合を、数理を基盤に実現する。

■ 準備状況

A01-1班との共同研究が進行中。基礎段階として橋本と木村の出版論文(ワイル半金属の一般境界状態の分散関係、PTEP)などが存在。

■ 研究環境

橋本が拠点長の大阪大学理論科学研究拠点が主軸、多彩な研究所が共同で人材ネットワークを駆使して研究交流を行える環境が整備されている。

■ 方法

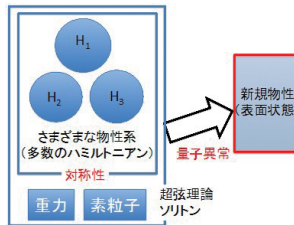
物質境界をパラメータ付けした際のパラメータ空間のトポロジの分類を行う。

境界のトポロジと境界パラメータ空間のホモトピー解析。

超弦理論や重力を用いた対称性の拡大。

量子異常の概念の拡大と応用。

新規物性の予言と境界状態の完全分類。



大阪大学
大学院理学研究科
物理学専攻 教授

橋本 幸士

Koji HASHIMOTO

研究分野: 理論物理学

研究テーマ: 素粒子物理・超弦理論

研究概要: 超弦理論と場の理論の数理を用いて、素粒子論を中心にさまざまな物理学の現象と数理構造を対象とした研究を行っています。主に、ホログラフィー原理の機構の解明と応用、そして空間がどのように創発するか、について、素粒子論から原子核理論、物性理論、量子情報理論、学習理論にも興味を広げながら、研究を進めています。

HARMONICS
Column for math-mate collaboration

第1話 歴史に見る材料と数学のかかわり

ギターを演奏される方であればよくご存じの特殊奏法にハーモニクスがあります。弦長の1/n (nは正の整数)の位置に指が軽く触れた状態で弾弦すると倍音が出るのですが、弦を強く押さえて出す通常の音よりも柔らかく澄んだ音が出るため、曲の雰囲気を一時的に変える効果音としてしばしば使われます。他の楽器でも同様のテクニックがありますが、フラジオレットと呼ばれることが多いようです。ちょっと面白いのは、この奏法が1/nという数学的なルールにあること。私たちは、意外と、こういった数学が密接にかかわる現象を生活の中に取り入れています。本コラムシリーズ HARMONICS では、どちらかといえば数学の専門家ではない研究者の視点(本コラムの著者は実験材料科学者)で、身の回りにある数学に関係しているようなモノやコトを見つけては寄り道をし、数学と材料、あるいは社会との接点について考えていきます。

さて、その第一話では、数学、特に幾何学と材料科学との間に起こった歴史上の相互作用を概観します。ただ、「材料科学」と言われても馴染みのない方もいらっしゃるでしょうから、最初に材料科学のごく一般的な姿を紹介し、古くからおこなわれてきた材料科学の典型的な手法は、いくつかの種類(原料(SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃などの化合物試薬、Si, Al, Feなどの純物質試薬、また工業的には珪石、石灰石など天然原料)をさまざまな比率で混ぜて加熱し、新たな化合物(時に、不純物を少しだけ含む純物質)を作り、その物理的、化学的性質を調べ、役に立ちそうな機能を発現する材料を見つけるというものです。よい材料が偶然にもすぐに見つかることもありますが、多くの場合は、試行錯誤を繰り返すこととなります。その試行錯誤から、経験値が上がり、よい材料を見出す確率も上がっていくわけですが、完璧には至りません。相当熟練しても勘が外れることはよくあります。材料科学は概して経験的な要素が強く、膨大な経験の積み重ね、データの蓄積から法則性を見出し、予見力を高めていきます。熱力学、速度論、結晶成長論など、さまざまな基礎学問の力も借りながら知識体系が構築され、理論的側面と経験的側面がほどよくブレンドされた科学分野とも言えるでしょう。

A02 「ネットワーク解析による高分子材料」

<対象材料> 高分子材料（多機能ポリマー）

<数学的手法> 3次元トポロジー

<達成目標> 均質ネットワークポリマーを3次元空間内の静的ネットワークとして記述し、結び目理論などの位相不変量と物性との相関を解明します。また更に、密度揺らぎを最適化・制御する動的ネットワーク構造を予見し、多機能性を持つ高分子材料の合成を目指します。

研究内容

計画研究 A02-1

A02-1 3次元トポロジーに基づく静的・動的ネットワークの提案

研究代表者：下川 航也（埼玉大学・教授・総括）

分担研究者：石原 海（山口大学・講師・3次元トポロジー）、出口 哲生（お茶の水女子大学・教授・統計物理）、手塚 育志（東京工業大学・教授・高分子化学）
連携研究者：小沢 誠（駒澤大学・教授・3次元トポロジー）、古宇田 悠哉（広島大学・准教授・3次元トポロジー） 博士研究員1名

■ 研究目的

3次元トポロジーの手法を応用し、3次元ネットワークの分類を行い、高分子材料の数理モデルを構築し、革新的な材料を創成。

■ 達成目標

3次元多重ネットワークと多相共連続構造の完全分類。それに基づく、新奇高分子材料のモデルの提案。

■ 将来のビジョン

3次元トポロジーを用いた設計による、全く新しい高分子材料の開発。

■ 準備状況

2重チャンネルの数理モデル化、静的・動的ネットワークの研究を行っている。A02-2,3グループと打ち合わせを開始している。

■ 研究環境

埼玉大学をはじめ、各研究者の研究環境は整っている。

■ 方法

- ・多重チャンネルの絡み合うネットワークと多相共連続構造を、3次元トポロジーを用いてモデル化。3次元トラスのハンドル体分解の特徴付けを応用し、静的ネットワークとその共連続構造を分類。
- ・さらに、ハンドル体による分解のアイソトピーを研究し、動的ネットワークと共連続構造の変形を分類。



研究代表者（総括班メンバー）



埼玉大学
大学院理工学研究科 教授
下川 航也

Koya SHIMOKAWA

研究分野：トポロジー

研究テーマ：3次元トポロジー

研究概要：トポロジーの一分野である、結び目理論、3次元多様体論と、それらの応用。特に、結び目理論のDNA、高分子化学研究への応用、3次元多様体論の材料科学への応用を進めています。具体的には、DNAの部位特異的組み換え酵素のタンゲル解析、高分子トポロジー、3次元ネットワークと材料の数理モデルの研究を行っています。

計画研究 A02-2

A02-2 高分子高次構造の階層的シミュレーション

研究代表者：青柳 岳司（産総研・総括研究主幹・計算科学・実施および総括）

連携研究者： 義永 那津人（東北大・准教授・数理科学・相分離構造解析）

分担研究者：

博士研究員1名

■ 研究目的

高分子材料のネットワーク構造に着目し、相分離によるネットワーク構造の制御、ネットワーク構造の持つ機能発現機構の解明を目指す。

■ 達成目標

数理科学的手法により提案された静的・動的ネットワーク構造を実際に作成するための高分子構造、組成、プロセス等を計算科学により提案する。

■ 将来のビジョン

数理科学-実験科学を計算科学により橋渡しすることにより、高機能材料設計のブレークスルーにつなげる。

■ 準備状況

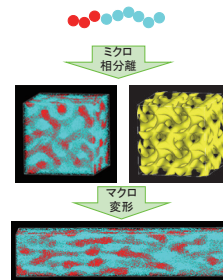
課題に対して議論を重ねた結果、相分離界面構造の階層的シミュレーションに對して予備的な結果を得ている。

■ 研究環境

基本的に産総研の施設を使用。計算機ハードウェア/ソフトウェアの一部は新規に導入する。

■ 方法

- ・高速化されたシミュレータを用い、散逸粒子動力学(DPD)、自己無撞着場(SCF)理論などの計算手法を用いて、ブロックポリマーのマイクロ相分離構造を予測し、最適化されたネットワーク構造を再現する高分子構造、組成、プロセスを見出していく。
- ・階層的シミュレーションをネットワーク構造に適用し、分岐や曲率などの静的な構造、および流動、伸長などのマクロな変形に応じた高分子鎖のマイクロな状態を解析する。そしてマクロな特性を支配するマイクロ因子を明らかにし、さらなる機能の向上に對して示唆を与えていく。



産業技術総合研究所 (AIST)
機能材料コンピューショナル
デザイン研究センター
総括研究主幹

青柳 岳司

Takeshi AOYAGI

研究分野：計算科学

研究テーマ：ソフトマテリアルの粗視化シミュレーション

研究概要：高分子などのソフトマテリアルを対象として、粗視化分子動力学、自己無撞着場(SCF)理論などの粗視化手法を用いた計算機シミュレーションを専門としています。加えて、マテリアルインフォマティクスのアプローチ、数学的手法を駆使したデータ解析技術なども取り入れた高分子材料設計のための先導的研究を行っています。

東北大学金属材料研究所の研究者が発見し、80年以上を経た今でも磁気ヘッド等の優良材料として世の中で使われ続けているセンダストという材料は、鉄(Fe)に9.5%のシリコン(Si)、5.5%のアルミニウム(Al)が含まれる合金材料で、高い飽和磁束密度・透磁率を誇り、かつ耐摩耗性に優れていますが、少しでも調合比率がずれると、優れた磁気的性質は急激に減衰してしまいます。材料開発において、原料をどのような比率で混ぜ合わせるか、それは研究計画で最も重要な要素になります。2%刻みで粗く全体像を把握しようという方針、0.5%刻みで最初から細かく見ていこう、という方針、いろいろあります。刻み値が小さくなると、実験の数は、その二乗（2成分の場合）、三乗（3成分の場合）、・・・に反比例して多くなります。センダストの発見者は、0.4%刻みで実験を進め、極めて狭い化学組成領域に、極めて高い透磁率のピークを発見したと記録されています。大海原で地図には載っていない小さな無人島を発見するような実験であったと思います。広大な条件範囲のごく微小な1点でのみデルタ関数的に出現するようなものは、周辺情報のみからその存在を予測することが困難です。このような、予測を立てにくい隠された優良材料を見出す努力はまさに宝探しであり、だからこそ材料科学は面白くやめられない、とも言えます。

どんどん話が数学から遠くなってきました。果たして、このコラムの趣旨である、材料科学と数学の接点は見出せるのでしょうか。実際のところ、多くの研究者が、材料科学と数学の間には大きな隔りがあると考えてきました。

7ページの図をご覧ください。約400年にわたる材料科学と数学の発展史です。この歴史的な流れをご覧くださいと、材料科学の基盤形成に、数学が大きく寄与してきたことがおわかりいただけるのではないかと思います。材料の多くを構成する「結晶」は同じ形、同じ大きさの微小ブロックが積み重なってできている、という考え方が17～18世紀に確立しましたが、これはまさに幾何学の問題です。また、図の中央に示した「空間群」は、結晶の構造を理解するうえで不可欠なもので、

7ページへ続く

A03 「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」

<対象材料> 多孔質材料（革新的触媒・次世代電池）

<数学的手法> 離散極小曲面論

<達成目標> 多連続多孔質構造を離散曲面論により分類・最適化し、それを相分離により実現するために、大域解析を用いて狙った動的構造形成を実現する指針を見出し、高度な界面制御技術により狙った構造の形成を目指します。

研究内容

研究代表者（総括班メンバー）

計画研究A03-1

A03-1 物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論

研究代表者：小谷 元子（東北大学・教授・AIMR・総括）
 分担研究者：橋 辰哉（東北大学・教授・大学院理学研究科・スペクトル理論）
 連携研究者：赤木 和人（東北大学・准教授・AIMR・第一原理計算） 博士研究員1名

■ 研究目的

「3次元トポロジー的手法」と「微分幾何学的手法」により多孔質構造の分類と形成のための数理モデルを構築し革新的な触媒物質を創成することを目指す。

■ 達成目標

3次元多重ネットワークの完全分類、対応する特異点付き極小曲面の特定・安定性評価による最適構造の提案。

■ 将来のビジョン

数値に基づく系統だった構造設計により従来の触媒技術を大きく変える。

■ 準備状況

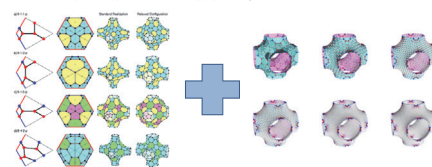
定期的な議論を行ってきた結果、実現のための予備的な成果を得ている。

■ 研究環境

WPI-AIMRの施設を使用するため、研究環境は整っている。

■ 方法

・多層・多孔質材料の最適構造を3次元トポロジー手法とネットワーク解析を用いて行う。
 ・最適構造を相分離によって実現するためのナノ構造の動的形成の数理モデルを微分幾何学的手法で構築する。



Reprinted from the article <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2014.04.077>. Copyright (2014), with permission from Elsevier.



高等研究機構
 材料科学高等研究所 所長
 大学院理学研究科
 数学専攻教授

小谷 元子

Mataka KOTANI

研究分野：幾何学

研究テーマ：離散幾何解析学とその材料科学への応用

研究概要：離散幾何解析学は、スケール間をつなぐ幾何学です。原子配列をネットワークと見たときに、その幾何構造がマクロな物性にどう反映するのかが研究する道具であるといえます。原子や分子などの離散データの背後にある連続構造を抽出し、数学的立場から求められる物性を持つ未知の構造を提案していきます。

計画研究A03-2

A03-2 ナノ極小曲面論による相分離過程の大域解析

研究代表者：内藤 久資（名古屋大学・准教授・総括 離散曲面の数値計算）
 分担研究者：納谷 信（名古屋大学・教授・極小曲面論、平均曲率一定曲面論）
 連携研究者：大森 俊明（東京理科大学・助教・離散曲面の安定性理論）、松江 要（九州大学・助教・離散曲面の数値計算） 博士研究員1名

■ 研究目的

狙った極小曲面構造の形成過程の最適化、安定性、特異点の制御。

■ 達成目標

相分離過程にあらわれるナノ極小曲面が形作る多重連続構造の動的構造を解析し、最適な数理モデルを決定する。

■ 将来のビジョン

与えられた反応系に対する最適な「反応器」の数理モデルを構築し、相分離構造を基本とした多層多孔質を用いた革新的触媒を実現する。

■ 準備状況・研究環境

準備的な共同研究や議論を行い予備的な成果を得ている。研究環境については数学的側面では整っており、計算環境については本研究で整備の予定である。

■ 方法

3次元ネットワーク枠に対するプラトール問題の解の枠の動的変形、多重連続構造の枠の動的変形に対応した動的変化を解析し、得られた曲面のトポロジーの変化と変形問題の安定性の関係、反応物の拡散速度を解明する。



図1: 枠の動的変形に対する曲面の相転移

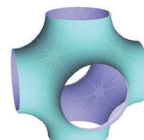


図2: Schwarz surface



名古屋大学大学院
 多元数理科学研究科
 准教授

内藤 久資

Hisashi NAITO

研究分野：大域解析・数値解析

研究テーマ：幾何学的変分問題、非線型微分方程式、離散幾何解析

研究概要：幾何学的変分問題に由来する非線型微分方程式や離散幾何解析などを中心的なテーマにして研究を行っています。非線形偏微分方程式で記述された幾何学的対象を、その幾何学的性質を利用して解析的に研究しています。一方、物質科学で現れる結晶格子を高い対称性を持ったグラフと考え、さらには変分問題の解として理解することもできます。この立場から、対象の幾何学的性質を利用して、その性質を調べる研究を行っています。

計画研究A03-3

A03-3 界面活性剤を用いた多連続・多孔質構造の形成

研究代表者：高見 誠一（名古屋大学・教授・工学研究科・多孔質の合成）
 分担研究者：遠藤 明（産総研・研究グループ長・化学プロセス研究部門・観察）
 連携研究者：平 敬彰（産総研・研究員・化学プロセス研究部門・分子合成） 博士研究員2名

■ 研究目的

A03-1, A03-2と連携しつつ、離散幾何解析学から発想される材料構造をマイクロ・ナノスケールで実現する。

■ 達成目標

極小曲面をテンプレートとして、有機修飾ナノ粒子を集積・配列した構造を作成するとともに、その構造を動的に制御する手法を確立する。

■ 将来のビジョン

材料構造に対する既存の発想、ナノ構造の合成に対する制限を打ち破る。

■ 準備状況

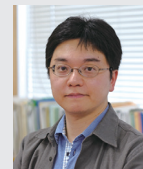
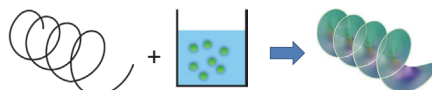
本研究課題内での連携、A03班内での議論などを積み重ねている。

■ 研究環境

極小曲面を貼る枠の作成装置、ナノ粒子集積構造の観察手法、極小曲面の形成に用いる界面活性剤の合成などの環境は整っている。

■ 方法

・数学研究者と連携して極小曲面の枠となる構造を設計し、これをマイクロメートルサイズで形成する。この枠に界面活性剤と共にポリマー、ナノ粒子を含む溶液で極小曲面を形成し、ナノ粒子を集積・配列する。
 ・電子顕微鏡を用いた真空中での観察を実現するため、界面活性性を有する金属イオン液体を合成し、これを用いた極小曲面を形成する。



名古屋大学
 大学院工学研究科
 物質プロセス工学専攻
 教授

高見 誠一

TAKAMI Seiichi

研究分野：ナノ材料化学

研究テーマ：速度論に基づくナノ材料の合成と表面制御

研究概要：化学反応の速度論に基づき、多彩な機能を持つ金属酸化物のナノ粒子を合成するプロセスの開発、その表面化学特性の制御、ナノ粒子の集積構造の形成を行っています。本新学術領域研究では数学研究者と連携しつつ、極小曲面をテンプレートとしてナノ粒子を配列したマイクロ構造の形成と、その動的な形態制御を目指しています。

B01 「物質・材料科学のための情報科学基盤」

< 数学的手法 > ネットワーク解析、画像処理・機械学習

< 達成目標 > 物質・材料が持つ複雑な階層ネットワーク構造を数値化します。また、材料の実空間観察画像（材料のトポロジー）からその材料の機能を高速かつ正確に推定する手法の確立を目指します。これらを活用した A01-A03 との連携を図ります。

研究内容

計画研究 B01-1

B01-1 複雑ネットワーク解析に基づく物質・材料探索

研究代表者：大西 立頭（東京大学・准教授・大学院情報理工学系研究科・研究全般の実施および総括）
 分担研究者：久野 遼平（東京大学・助教・大学院情報理工学系研究科・複雑ネットワーク解析）
 博士研究員1名

■ 研究目的

複雑な物質・材料を階層ネットワークとみなし、複雑ネットワーク科学とデータ科学の手法を駆使して物質・材料の構造と機能の相関を解明する。

■ 達成目標

複雑ネットワークの数理に基づいて潜在的・普遍的な相関原理を発見・理解し、革新的な物性・機能をもつ物質・材料の予見に役立てる。

■ 将来のビジョン

大量データを活用しきれていない既存手法の限界を打破し、情報科学の視点から物質・材料科学の先端領域を切り開き物質・材料探索を革新する。

■ 準備状況

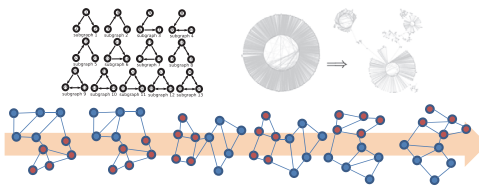
複雑ネットワーク解析を効率的に実装する手法をすでに開発している。

■ 研究環境

東京大学のスーパーコンピュータを使用するため研究環境は整っている。

■ 方法

- ・ 様々な物質・材料が持つ複雑な構造をネットワークとして抽象化し、複雑な構造を記述・分類するネットワーク指標を開発する。
- ・ モチーフ、行列分解、パーコレーション、カスケード破壊を応用して複雑なネットワーク構造を定量化し、構造と機能の相関を分析する。



研究代表者（総括班メンバー）



東京大学
 大学院情報理工学系研究科
 准教授
大西 立頭
 Takasaki OHNISHI

研究分野：データ科学、複雑系科学、社会・経済物理学

研究テーマ：社会・経済現象や物質・生命現象のビッグデータ解析

研究概要：統計科学、複雑系科学、社会・経済物理学、複雑ネットワーク科学、超並列計算などの数理とデータサイエンスの手法を用いて、社会・経済現象や物質・生命現象で観測されるビッグデータ（人・店・施設の地理空間情報、人流、金融市場、国際貿易、経済ネットワーク、マウスの脳活動など）を実証科学的視点から研究しています。



名古屋大学
 未来社会創造機構
 モビリティ領域
 材料・エネルギー分野
 准教授
一木 輝久
 Akihisa ICHIKI

研究分野：統計物理

研究テーマ：非平衡系、雑音の利用

研究概要：統計力学や確率論の手法を用いて、雑音に埋もれた微弱な信号を取り出す新しいセンシング方法を開発しています。また、非平衡系物理の数理的性質を応用することによって、統計的モデリングや分子動力学シミュレーションなど様々な分野で盛んに利用されているモンテカルロ法の高速化につながる基礎研究も行っています。

計画研究 B01-2

B01-2 材料観察画像からの機能推定

研究代表者：一木 輝久（名古屋大学・特任准教授・未来社会創造機構・画像処理・機械学習）
 連携研究者：大岡 真之（東北大学・准教授・大学院情報科学研究所・情報統計）、山本 詩子（京都大学・特定助教・大学院情報学研究所・画像処理）、
 中島 千尋（東北大学・助教・さきがけ専任・統計物理）、徳田 悟（産総研・研究員・東北大MathAM-OIL・統計的推定）、博士研究員1名

■ 研究目的

新規機能性材料の設計開発をアシストする人工知能を構築し革新的かつ効率的な材料開発技術の確立を目指す。

■ 達成目標

物性理論と情報理論の両者に根ざした、材料観察画像から機能に関係する構造的特徴量を抽出する関数の獲得とその獲得過程の数理的理解。

■ 将来のビジョン

材料のトポロジーと機能の非自明な相関をデータ解析とデータ取得のアクティブなやり取りから抽出する「頭脳つき計測」を切り拓く。

■ 準備状況

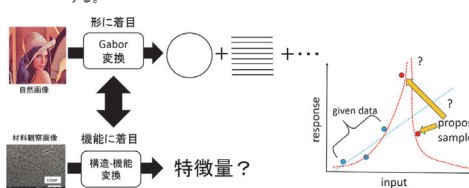
定期的な議論を行い、課題の洗い出し及びその解決手法を選定している。

■ 研究環境

大規模機械学習を行うための計算機・データ取得環境の整備が必要。

■ 方法

- ・ 機械学習・画像処理・物性理論の組み合わせにより、構造・機能相関を自動抽出するシステムを構築する。
- ・ 構造-機能相関を抽出するのに最適なデータ取得法を応答理論によって構築する。



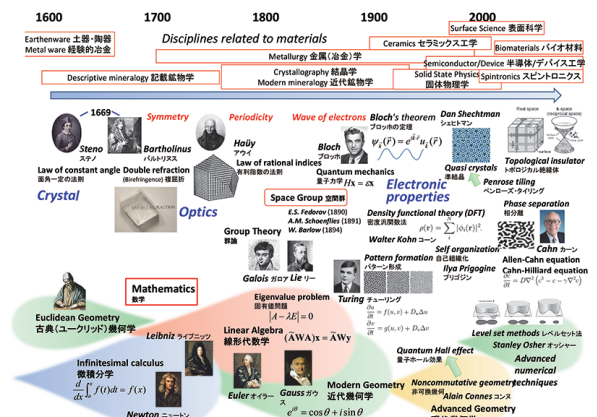
5 ページの続き

群論を基礎としています。準結晶は実験で発見されたものですが、その幾何学的規則はペンローズタイルとして数学では既に知られていました。2016年ノーベル物理学賞の受賞対象となった物質のトポロジカルな性質も、数学的考察から予見され、その後実験で確認されたものです。このように、日常的にはありませんが、50年、あるいは100年に1度くらい、材料科学は数学から、概念の変革すら含む多大な影響を受けてきました。

前置きを含めずいぶん長くなってしまいましたが、今後も数学が材料科学に対して常識を覆すような新しい考え方や手法もたらし、材料科学の発展に貢献するかもしれません。この新学術領域研究でも、そんなわくわくする発見があることを期待したいと思います。

池田 進

1990年東北大学理学部地学卒業。セメント会社勤務後、2000年に東京大学大学院理学系研究科で学位取得。同大学院新領域創成科学研究科の助教を経て、2008年より東北大学 AIMR 助教、2010年より同准教授。2011年からは副事務部門長（研究担当）を併任。岩石・鉱物、セメント、表面、薄膜成長、有機半導体デバイス等の幅広い物質・材料分野の研究経歴を踏まえ、現在、数学と材料科学の連携を推進中。



活動記録

2017年

- 6月30日 採択内定
- 7月30日 第1回総括班会議（東北大学）
- 8月8日 国際ワークショップ“Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers”（お茶の水女子大学）
- 11月8日 公募研究募集締め切り
- 11月13-14日 A01 理論班キックオフミーティング（理化学研究所 日本橋オフィス）
- 11月24日 研究集会「4次元トポロジー」（大阪市立大学）
- 12月1-2日 研究集会「離散幾何解析とその周辺 2017」（CIC 東京）



2018年

- 2月16-21日 国際研究集会 "Gauge Theory in Fukuoka"（福岡市内）
- 2月18日 新学術領域キックオフワークショップ（東北大学）
- 3月1日 Mini-Workshop on Topological Phase and K-theory（東北大学）
- 3月16日 ミニワークショップ「トポロジカル物質」（A01-1班・A01-2班合同 研究連絡ミーティング）（東北大学）

新学術領域キックオフワークショップ

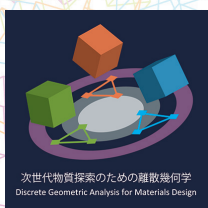
日時：2018年2月18日（日）9:00～17:20 会場：東北大学材料科学高等研究所（AIMR）セミナー室

本新学術領域研究のキックオフワークショップが開催されました。数学、物理学、物質・材料科学ほか、幅広い分野から66名が出席、活発な議論がなされました。午前中には海外からお越しいただいた3名の招待者、Stephen Hyde 教授（オーストラリア国立大）、Hermann Schulz-Baldes 教授（フリードリヒ・アレクサンダー大学エアランゲン＝ニュルンベルク）、Konrad Polthier 教授（ベルリン自由大学）による講演が行われました。三氏はいずれも幾何学を物質科学に応用する先駆的な研究を進めてきた世界のリーダーであり、今回なされた講演は、私たちが目指す新領域開拓について考える上での、多くの示唆を与えてくれるものでした。午後は、小谷元子領域代表より領域全体と各計画研究の概要に関する説明がなされたのち、各計画研究代表者より各研究の目的、達成目標、将来のビジョン等、詳細の説明が行われました。各講演に対して出席者から多くの質問があり、この幾何学と物質・材料科学の連携、融合というチャレンジに対して大きな関心が集まっていることを窺い知ることができました。新学術領域研究を本格始動する上での非常に刺激的なワークショップとなりました。



今後の行事予定 2018年4月1日～ 公募研究の開始

募集 博士研究員、技術支援者（計算機やソフトウェアの管理運用）を募集しております。詳細は <https://math-materials.jp/recruit/> をご覧ください。



問い合わせ先

小谷 元子（領域代表）
東北大学理学研究科・材料科学高等研究所 (AIMR)
E-mail : contact@math-materials.jp 領域ウェブサイト : <https://math-materials.jp/>