

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 年度～令和 3 年度

News letter
Vol. 10

領域代表挨拶



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

平成 29 年度の科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」に採択されました「次世代物質探索のための離散幾何学」も 5 年の研究期間を終えようとしています。この期間に形成された新学術領域は今後も確固たる学術領域として成長し続けるよう活動を継続してまいります。助成を受けての活動は終了となります。本領域では過去に 9 編のニュースレターを発行してまいりましたが、今回、5 年間の総まとめ号として Vol. 10 をお届けいたします。

従来、邂逅の機会が限られていた『数学』と『物質・材料科学』という 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、多くの仲間と共に 5 年間活動をしてまいりました。東北大学 WPI-AIMR の副拠点長、拠点長として 2011 年より推進した「数学－材料科学連携」における離散幾何学の活用、そしてこれらの活動を通して蓄積した成果と経験値を基に、新たな学術領域への飛翔を誓って立ち上げたのが本新学術領域研究です。

人々の暮らしを豊かにする物質・材料創製のための研究は基礎から応用にわたる広大な領域を包含した学際的フィールドです。物理学、化学、生物学のような理学的な基礎学問が土台となっておりますし、一方で、材料を社会で役立てるためにはデバイス工学も必要です。あらゆる自然科学の共通言語である数学は、普遍性をあぶり出すことで、異分野を融合させ新たなものを創造する源となり得ます。私たちは、特に今回は離散幾何学を中心に置きましたが、数学の力を信じ、物質・材料科学をその融合の舞台として研究を進めました。9 つの計画研究を軸としてスタートし、前期 24 件、後期 23 件、計 47 件の公募研究に参画いただき、学術領域の裾野を拡げてまいりました。

近年、世界中でデータ駆動型物質探索の大型プロジェクトが展開されており、データサイエンスが注目されていますが、それを高度に活用するためには、物質・材料科学者との連携によって原子レベルまで立ち入って理解したメカニズムに立脚した数理モデルを整備し、それをデータサイエンスに活かしていく必要があります。本新学術領域研究ではその信念を大切にして、数学者と物質・材料科学者の真の融合を第一としてきました。

「求める物性や機能を持つような物質・材料を設計する」という物質・材料創製の長年の夢を実現するため 5 年間努力を積み重ねました。挑戦は始まったばかりで、本当の実りを得るためには今後の地道な継続が必要であり、この試みにご賛同いただける読者の皆様には、ぜひ、私たちの仲間となっただき、この新学術の輪（和）を共に拡げてまいればと考えています。今後ご指導、ご鞭撻のほど、何卒よろしくお願い申し上げます。

領域の概要

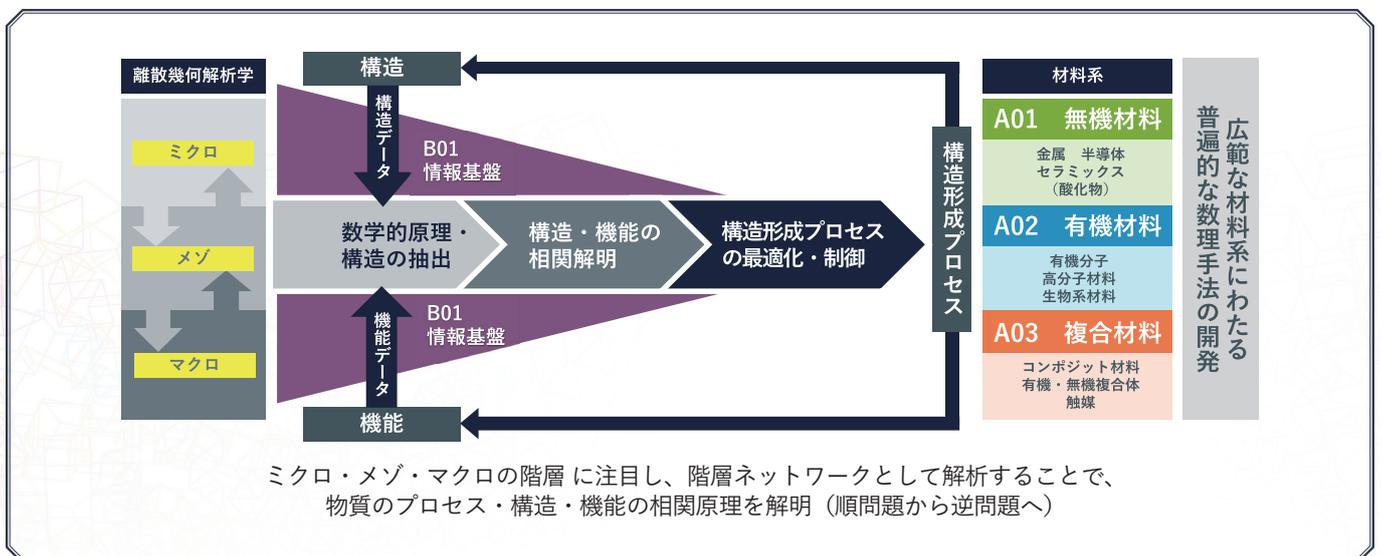
本領域のねらいは、数学、とりわけ**離散幾何解析学**を物質・材料の研究に適用し、物質・材料科学において常に課題となる**構造・機能・プロセス**3者間の関係の理解を深化させ、ひいては、社会に有益な物質・材料を設計するための新たな指針を提案することにあります。それを実現していくために様々な分野の研究者に参画いただき、裾野を拡げながら5年間活動を行いました。具体的には、原子・分子のようなマイクロ構造やナノ粒子などのメゾ構造と物質・材料のマクロな性質、すなわち物性・機能の関係を幾何学的に記述することを最初の突破口とするため、下記のような3種類の物質をそれぞれ集中的に研究する計画班（A01～03）を設置、また、これらの班の研究を情報科学的にサポートしていく B01 班を設けて研究を進めました。

- **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

物質・材料科学に**数学**を適用していく大きなメリットは、物質・材料科学における従来型の研究スタイルである**順問題**的な手法、すなわち、原料を調合し、ある温度・圧力条件で化学的变化を生じさせ、最終的にどのような機能をもった化合物、構造ができるかを確認する（自然が導く方向を実験で理解する）手法から、得たい機能を発現するような物質・材料を創製するための原料や作製方法の条件を数学的に解いていく、**逆問題**的な研究スタイルへと移行できる可能性があることです。もちろん、逆問題を解くためにはそれを可能とする十分な順問題的な知見の蓄積が必要となり、実験研究者との連携が必須となります。そして、下図にも示すように、本新学術領域研究では

- (1) 物質のマイクロ・メゾ構造とマクロな物性・機能の関係を解明する（順問題）
- (2) 求められる物性・機能を持つマイクロ・メゾ構造を予見する（逆問題）
- (3) 更に構造を生成する動的構造形成の制御を可能にする（最適化・制御）

の3つのステップを、数学者と物質・材料科学者が協働して進め「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しました。各班の研究成果は次頁以降で紹介いたしますが、参画メンバーの情熱により、順問題、逆問題、最適化・制御のそれぞれにおいて有益な知見が得られ、私たちの提案を**新学術領域**として拡げていく確かな足掛かりを得ることができました。



A01「トポロジカル物質」

研究内容

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、幾何学）
 研究分担者：加藤 毅（京都大学・教授・K理論）、五味 清紀（東京工業大学・教授・TQFT）
 研究協力者：緒方 芳子（東京大学・教授）、松尾信一郎（名古屋大学・准教授）、佐藤 浩司（東北大学・助教）、林 晋（東北大学・助教）、窪田 陽介（信州大学・講師）、今野 北斗（東京大学・助教）、チャンジュンリー（ミネソタ大学・教授）

■ 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。

■ 特筆すべき成果

物理学の格子ゲージ理論のアイデアを手がかりに角のあるドメインウォール（物理）と APS 指数定理（数学）の等価性を解明し、edge 状態に比べて 2 次元高い新規トポロジ相の発見につながった。これにより実空間の有次元近似による複雑な現象の解析が可能となった。トポロジカル物質のコーナー電荷やヒンジ電荷の量子化値が離散幾何学と関連付けられることを見出し、第一原理計算と組み合わせた候補物質探索への道筋を与えつつある。

■ 領域に参加して

本学術領域では、実験材料科学の専門家も含め、これまでほとんど関わることのなかった分野の研究者と出会い、話をする事ができました。数学の知見をすぐに物質・材料科学に適用するというのは大変難しい試みですが、多くの議論を通じて、いくつかの可能性は見出せたと感じています。最初は空想の域を出ないアイデアと思われていたものも、議論を重ねることで徐々に具体的な描像が得られていく過程は、こういった異分野交流の場があって初めて生まれたものであり、貴重な経験にもなりました。

計画研究 A01-2

A01-2 ブ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）
 研究分担者：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・離散幾何学）

■ 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。

■ 特筆すべき成果

量子異常に基づく Lieb-Schultz-Mattis 型定理の理論を SU(N) 対称性に拡張し新規の制約を導き、場の理論におけるトーフット量子異常によって系統的に記述する定式化を開発した。ソリトンによるブレーンワールドの構成の課題であったゲージ場の局在を物性系エッジモードと同様にトポロジカルに説明できることを示した。素粒子論と物性論の境界を切り拓く Weyl 半金属とブラックホールの関係を示し、また QCD 物性などを表す量子重力理論から離散幾何学と深層学習をつなげることに成功した。本領域の研究初期に見出した表面状態である高次トポロジカル物質の概念を世界の研究コミュニティに周知しその研究展開に貢献した。

■ 領域に参加して

離散幾何学と物理学、特に物性物理学の類似性を起点に、多くの数学者と物理学者が集まり多様な議論ができる環境が構築されたことに、心から感謝したい。

研究代表者



東京大学
 大学院数理学研究科
 教授

古田 幹雄

FURUTA Mikio

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。



大阪大学
 大学院理学研究科
 物理学専攻 教授

橋本 幸士

HASHIMOTO Koji

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に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。

2018年-2020年までの活動記録と研究報告



新学術領域キックオフワークショップ
 2018年2月18日(日)



物質と情報科学セミナー(第1回)
 2018年7月24日(火)



領域会議
 2018年11月17日(土) 18日(日)

A02 「ネットワーク解析による高分子材料」

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）
 研究分担者：石原 海（山口大学・准教授・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・名誉教授・高分子化学）
 研究協力者：小沢 誠（駒澤大学・教授）、古宇田悠哉（広島大学・教授）、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。

■ 特筆すべき成果

高分子共重合体のミクロ相分離構造への適用を想定して、3相連続構造の分類を可能にする数学的手法を確立した。これは、今回の研究において構築した3次元多様体のハンドル体分解の新理論に基づくものである。この成果を応用することにより、静的・動的ネットワークの特徴付けの基礎理論を築いた。グラフ理論と結び目理論を応用し、多環状高分子のトポロジーの分類を行い、その命名法の導入とその分類を行った。高分子のガウス型ファントムネットワークにおける架橋点の位置揺らぎの厳密な解析を行った。

■ 領域に参加して

これらの研究に加え、この新学術領域で生じた新たな研究として金属有機構造体合成の第一人者との共同研究が挙げられる。結び目理論を用いた研究が、成分数や交点数が同じであるが異なる自己集合系（超分子）の本質的な相違（多面体絡み目のトポロジー）を調べる上で有用であることが実証されるという予想外の成果を得ることが出来た。

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）
 研究協力者：義永那津人（東北大学・准教授・数理科学・相分離構造解析）、
 山中 真人（京都産業大学・研究員・計算科学・相分離構造解析）

■ 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。

■ 特筆すべき成果

階層的シミュレーションにより、ブロックコポリマーのミクロ相分離により形成されるネットワーク構造の解析を行った。熱可塑性エラストマー、軟質樹脂のモデルとなる ABA トリブロックコポリマーの BCC 球状構造、ダブルジャイロイド構造の弾性挙動をシミュレーションにより予測し、実験的に解析が困難な、ブリッジ分率や伸長方向の効果明らかにした。さらに、階層的シミュレーションと機械学習とを連携させて、準安定なミクロ相分離構造からの相図、相互作用 (χ) パラメータの予測や、応力-ひずみ (S-S) カーブの高速予測、ターゲットとする S-S カーブを与える高分子構造の逆予測などに成功した。

■ 領域に参加して

今回、この領域研究に参加させていただき、これまであまり交流の無かった離散幾何、情報科学分野の研究者の方々と共に共同研究を進めることにより、高分子高次構造解析、材料設計に対する新たなアプローチを開拓することができました。今後も、本領域研究で得られた知見を活かして、新規材料設計に貢献していきたいと思っております。

研究代表者



埼玉大学
 大学院理工学研究科
 教授

下川 航也

SHIMOKAWA Koya

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。



産業技術総合研究所
 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

AOYAGI Takeshi

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。



A01-2 班研究会「ブレーンとソリトンの量子異常が導くトポジカル物質」
 2019年1月28日(月) 29日(火)



国際ワークショップ
 「Polymers meet Topology」
 2019年1月30日(水)31日(木)2月1日(金)



物質と幾何セミナー (第6回)
 2019年5月14日(火)

A03 「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」

研究内容

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）
研究分担者：橋 辰哉（東北大学・教授・大学院理学研究科・スペクトル理論）
研究協力者：赤木 和人（東北大学・准教授）、鈴木 康平（Bielefeld 大学・ポスドク）、
正井 秀俊（東京工業大学・助教）、小澤龍ノ介（防衛大学校・講師）、新川恵理子（東北大学・助教）

■ 研究目的

「3次元トポロジ的手法」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値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。

■ 特筆すべき成果

斥力項を入れた標準実現（SRRI モデル）で π 共役な離散曲面系での第一原理計算を代替し、約 10 億倍高速な構造予測が可能となった（科学新聞で報道）。
標準実現や離散曲面論といった数学を使って発見された 3次元キラル構造（K4 構造）やグラフェン様構造を分子の集合体として実際に合成し、電子・スピン構造解析を実施して新奇な電子状態が得られることを確認した。

■ 領域に参加して

離散幾何学を物質・材料科学に応用する試みは、個人的にはライフワークともいえるチャレンジでしたが、今回、多くの仲間とこの課題を推進する機会に恵まれ、幸せな 5 年間で過ごすことができました。
離散幾何学だけでなく数学という学問は、諸科学の発展に貢献できるだけでなく、諸科学間の融合のインターフェースの役割を果たすことができ、また数学自体もそれによって新たな発展が得られることを再確認できました。

研究代表者



東北大学
材料科学高等研究所
大学院理学研究科 教授

小谷 元子

KOTANI Mataka

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）
研究分担者：納谷 信（名古屋大学・教授・極小曲面論、平均曲率一定曲面論）
研究協力者：松江 要（九州大学・准教授・離散曲面の数値計算）、阿波賀邦夫（名古屋大学・教授・物性科学）、
赤嶺新太郎（日本大学・助教・曲面論）、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。

■ 特筆すべき成果

離散幾何解析に基づいて、反発力を考慮した標準実現モデル（SRRI）を考察して、欠陥を持った 2次元炭素構造である「5-7 グラフェン」の最適構造を高速に求めた。
さらに、この最適構造に関して、3分岐離散曲面としての曲率と単一窒素原子のドーピングエネルギーとの相関を調べた。その結果、離散曲面としてのガウス曲率とドーピングエネルギーに強い相関があること、一方、平均曲率に関しては明確な相関はないことを確認した。
これらの結果は A03-1 班および A03 公募班との共同研究である。

■ 領域に参加して

数学の立場からの離散幾何解析の手法および 3分岐離散曲面論の研究が炭素構造の物性を記述する言葉として使えることが大きな研究成果であった。
具体的な研究として発表できた成果のみならず、物理学者・化学者との議論によって数多くの研究の種を得たことは大きな収穫であり、領域としての研究期間が終了した後も共同研究が進展することを期待している。



名古屋大学
大学院多元数理科学研究科
准教授

内藤 久資

NAITO Hisashi

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へ、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・研究の統括及び材料合成）
研究分担者：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）
研究協力者：平 敏彰（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

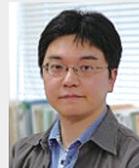
A03-1、A03-2 と連携しつつ、離散幾何解析学から発想される材料構造をマイクロ・ナノスケールで実現する。

■ 特筆すべき成果

石けん水など表面張力を調整した溶液を用いて極小曲面の形状を有する石けん膜を張るプロセスより着想を得て、セラミックスである酸化ジルコニウムのナノ粒子と界面活性剤から構成され、セラミックスの重量が 90% を超える薄膜を極小曲面の形状として形成する手法の開発に成功した。さらに、平衡に近い条件で水熱合成されたナノ粒子の形状が表面エネルギーにより決定されることから、合成で得られたナノ粒子の形状を解析して表面エネルギーを評価する試みに進展が得られた。

■ 領域に参加して

この新学術領域研究に参加することで、通常では議論を行う機会がない数学の研究分野の方と接点を持てたことが最も有意義であったと感じています。議論の過程で、実験研究者が持つ「これは難しい」という先入観を一旦忘れ、数学で決まる境界条件のみを考え白紙の状態から研究に取り組むことは良い経験になりました。さらに、新学術領域研究で扱った研究以外にも、他の実験研究者のアプローチに接することで、様々なアイデアの創出につながりました。



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 Seichi

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なっています。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」

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（立教大学・教授・大学院人工知能科学研究科・研究全般の実施および総括）
 研究協力者：天本 義史（九州大学・助教・先導物質化学研究所・ネットワーク解析）、
 伊藤真利子（立教大学・助教・大学院人工知能科学研究科・ネットワーク解析）、
 高橋 数牙（東京大学・助教・医科学研究所・データ解析）

■ 研究目的

複雑な物質・材料を階層ネットワークとみなし、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。

■ 特筆すべき成果

エラストマーについて、ネットワーク科学の手法を応用して架橋点の空間上の位置とネットワーク上の位置の両方を考慮できる新たな中心性指標を開発し、応力の統一的な記述、各架橋点の応力への寄与や応力集中の推定を可能にした。ブロック共重合体のマイクロ相分離構造をマルチフラクタルで特徴づける手法を開発し、特異性指数や一般化次元などが力学物性や自由エネルギーに関係していることを発見したことで計算コスト削減やパラメータ探索の効率化につながる成果が得られた。結晶性高分子について、ランダムフォレスト回帰を用いて物性、生成条件、X線散乱回折データの間の関係を解析し、トレードオフの関係にある生分解性と降伏応力にはそれぞれ異なる階層の結晶構造が影響を与えていることを示した。

■ 領域に参加して

分野を越えて適用できる数理手法の普遍性を改めて体感した。幅広い分野の方と交流できたことで新たな知識を吸収し、分野横断的視点で研究の議論を深められただけでなく、今後の共同研究につながる人脈も得られた。異分野の研究にも触れることができ、研究姿勢や考え方についての新たな気付きも得られた。

研究代表者



立教大学
 大学院人工知能科学研究科
 教授

大西 立頭

OHNISHI Takahiko

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、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・経済や物質・生命現象
 で観測されるビッグデータ（人・店舗・
 施設の地理空間情報、ID-POS、金融市場、
 経済ネットワーク、TVやニュースの
 テキストデータ、マウスの脳活動、エ
 ラストマーのネットワーク構造、高分子
 ブロック共重合体のマイクロ相分離構造）
 を実証科学の視点から研究しています。

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）
 研究分担者：大関 真之（東北大学・教授・大学院情報科学研究科・情報統計）
 研究協力者：山本 詩子（京都大学・特別研究員・大学院情報科学研究科・画像処理）、
 徳田 悟（九州大学・助教・情報基盤研究開発センター附属汎オミクス計測・計算科学センター・統計的推定）、
 奥川 亮（東北大学・特任助教・大学院情報科学研究科・量子コンピューティング）

■ 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。

■ 特筆すべき成果

領域全体に対して情報科学・機械学習・画像処理などに関するチュートリアルを定期的に行い、領域内での連携が進んだ。ポリマー中に分散したカーボンナノチューブの2次元顕微鏡画像から電荷を担うキャリアの有効ポテンシャルを推定することで電気伝導性を予測した。また、準安定な高分子ネットワークの3次元構造データから自由エネルギーを決定するパラメータを推定し、材料の機械物性を予測した。さらに最適化問題の汎用解法の観点から、アクティブマターが示す確率過程の有用性を議論した。

■ 領域に参加して

材料、物理、数学、情報の垣根を越えて定期的開催していた勉強会が印象的でした。普段とは異なる視点から問題に取り組み指針が見出せ、研究の幅が広がりました。連携研究者として活躍いただいた若手の方々も、研究開始当初から職場、ポストが移動し、益々活躍の場を広げようとしています。科学、工学のさまざまな分野において情報科学の研究力を持った人材が必要とされていることを強く実感しています。



名古屋大学
 未来社会創造機構
 マテリアルイノベーション研究所
 特任准教授

一木 輝久

ICHIKI Akihisa

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：統計力学は方法論の科学
 とも呼ばれる研究分野で、そこで開
 発された手法は物理現象の理解にと
 どまらず情報科学へ多くの応用が見
 出されています。物理学のアイデア
 を活かして新たな情報処理技術を提
 案するとともに、情報科学の視点か
 ら物理の理解を深めるべく研究をし
 ています。

5 ページの続き



新学術領域研究成果発表会・領域会議
 2019年8月2日(金)3日(土)



Materials Research Meeting 2019
 2019年12月10日(火)11日(水)12日(木)
 13日(金)14日(土)



研究会「トポロジカル表面状態、ブレン
 とソリトン、指数定理」(A01 班会議)
 2020年2月17日(月)18日(火)

研究者紹介

総括班 Coordinators



研究代表者
代表 / 計画班 A03-1 代表
小谷 元子
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
教授



研究分担者
計画班 A01-1 代表
古田 幹雄
東京大学
大学院数理学研究科
教授



研究分担者
計画班 A01-2 代表
橋本 幸士
京都大学
大学院理学研究科
教授



研究分担者
計画班 A02-1 代表
下川 航也
埼玉大学
大学院工学研究科
教授



研究分担者
計画班 A02-2 代表
青柳 岳司
産業技術総合研究所
機能材料コンピュータショナル
デザイン研究センター 総括研究主幹



研究分担者
計画班 A03-2 代表
内藤 久資
名古屋大学
大学院多元数理科学研究科
准教授



研究分担者
計画班 A03-3 代表
高見 誠一
名古屋大学
大学院工学研究科
教授



研究分担者
計画班 B01-1 代表
大西 立顕
立教大学
大学院人工知能科学研究科
教授



研究分担者
計画班 B01-2 代表
一木 輝久
名古屋大学
未来社会創造機構
特任准教授



研究協力者
公募班 A01 研究代表者 (Ⅱ期)
塩見 雄毅
東京大学
大学院総合文化研究科
准教授



研究協力者
公募班 A02 研究代表者 (Ⅱ期)
小椎尾 謙
九州大学
先端物質化学研究所
准教授

計画班 Teams promoting originally planned research



研究協力者
A03-1 研究協力者
赤木 和人
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
准教授



研究協力者
池田 進
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
准教授



A01-1 研究分担者
加藤 毅
京都大学
大学院理学研究科
教授



A01-1 研究分担者
五味 清紀
東京工業大学
理学院 教授



A01-1 研究協力者
松尾 信一郎
名古屋大学
大学院多元数理科学研究科
准教授



A01-1 研究協力者
林 晋
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



A01-1 研究協力者
窪田 陽介
信州大学
学術大学院理学系
講師



A01-1 研究協力者
今野 北斗
東京大学
大学院数理学研究科
助教



A01-2 研究分担者
衛藤 稔
山形大学
理学部 教授



A01-2 研究分担者
日高 義将
高エネルギー加速器研究機構
素粒子原子核研究所
教授



A01-2 研究協力者
松尾 善典
京都大学
大学院理学研究科
特定研究員



A02-1 研究分担者
石原 海
山口大学
教育学部 准教授



A02-1 研究協力者
古宇田 悠哉
広島大学
大学院先進理工科学研究科
教授



A03-1 研究分担者
橋 辰哉
東北大学
大学院理学研究科
教授



A03-1 研究協力者
鈴木 康平
Bielefeld 大学
ポスドク



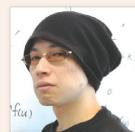
A03-1 研究協力者
小澤 龍ノ介
防衛大学校
総合教育学群
数学教育室 講師



A03-1 研究協力者
新川 恵理子
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



A03-2 研究分担者
納谷 信
名古屋大学
多元数理科学研究科
教授



A03-2 研究協力者
松江 要
九州大学マスコア・インダストリ
研究所 / カーボンニュートラル・
エネルギー国際研究所 准教授



A03-2 研究協力者
公募班 A03 研究代表者 (Ⅰ期・Ⅱ期)
小磯 深幸
九州大学
マスコア・インダストリ研究所
教授



A03-2 研究協力者
赤嶺 新太郎
日本大学
生物資源科学部
助教



A03-2 研究協力者
五明 工
名古屋大学
大学院多元数理科学研究科
特任助教



A03-2 研究協力者
公募班 A01 研究代表者 (Ⅰ期)
阿波賀 邦夫
名古屋大学
大学院理学研究科
物質理学専攻化学系 教授



A03-3 研究分担者
遠藤 明
産業技術総合研究所
化学プロセス研究部門
研究部門長



A03-3 研究協力者
平 敏彰
産業技術総合研究所
化学プロセス研究部門
主任研究員



B01-1 研究協力者
公募班 B01 研究代表者 (Ⅰ期)
天本 義史
九州大学
先端物質化学研究所
助教



B01-1 研究協力者
伊藤 真利子
立教大学
大学院人工知能科学研究科
助教



B01-1 研究協力者
高橋 数牙
東京大学
医科学研究所
助教

インターフェース Interface researchers



B01-2
研究協力者
山本 詩子
京都大学
大学院情報科学研究科
日本学術振興会特別研究員 RPD



A03-1
研究協力者
正井 秀俊
東京工業大学
理学院数学系
助教



B01-2
研究協力者
奥川 亮
東北大学
大学院情報科学研究科
特任助教



インターフェース
Andreas Dechant
京都大学
大学院理学研究科
講師



インターフェース
櫻井 陽平
埼玉大学
大学院理工学研究科
准教授



インターフェース
西口 純矢
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



インターフェース
福田 瑞季
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教

公募班 < I期 > Teams promoting proposed research < 1st term >



インターフェース
渡部 淳
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



A01
研究代表者
松下 ステファン 悠
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



A01
研究代表者
相馬 清吾
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
准教授



A01
研究代表者
石井 史之
金沢大学
ナノマテリアル研究所
准教授



A01
研究代表者
深谷 英則
大阪大学
大学院理学研究科
助教



A02
研究代表者
藤井 修治
東洋大学 教授



A02
研究代表者
山本 拓矢
北海道大学
大学院工学研究院
准教授



A02
研究代表者
森 龍也
筑波大学
数理工学系物質工学域
助教



A02
研究代表者
本多 智
東京大学
大学院総合文化研究科
助教



A02
研究代表者
増淵 雄一
名古屋大学
大学院工学研究科
教授



A02
研究代表者
山口 哲生
東京大学
大学院農学生命科学研究科
准教授



A03
研究代表者
佐野 正人
山形大学
大学院有機材料システム研究科
教授



A03
研究代表者
安本 真士
大阪市立大学
特任准教授



B01
研究代表者
中島 千尋
東北文化学園大学
講師

公募班 < II期 > Teams promoting proposed research < 2nd term >



B01
研究代表者
吉田 靖雄
金沢大学
理工研究域数物科学系
准教授



B01
研究代表者
森 道康
日本原子力研究開発機構
研究主幹



A01
研究代表者 (I期・II期)
Yong P. CHEN
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
教授



A01
研究代表者
岡 博文
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
助教



A01
研究代表者
吉田 恒也
筑波大学
数理工学系 助教



A01
研究代表者 (I期・II期)
桂 法称
東京大学
大学院理学系研究科
准教授



A01
研究代表者
村上 修一
東京工業大学
理学院物理学系
教授



A01
研究代表者
山影 相
名古屋大学
大学院理学研究科
助教



A02
研究代表者
藪 浩
東北大学
材料科学高等研究所 (AIMR)
准教授



A02
研究代表者
浦山 健治
京都工芸繊維大学
材料化学系
教授



A02
研究代表者 (I期・II期)
齋木 敏治
慶應義塾大学
理工学部電気情報工学科
教授



A02
研究代表者
鯉淵 弘資
仙台高等専門学校
特命教授



A03
研究代表者
影山 義之
北海道大学
大学院理学研究院化学部門
助教



A03
研究代表者 (I期・II期)
伊藤 良一
筑波大学
数理工学系 准教授



A03
研究代表者
齋藤 一弥
筑波大学
数理工学系 教授



A03
研究代表者
岡 俊彦
静岡大学
理学部 電子工学研究科
准教授



A03
研究代表者
大戸 達彦
大阪大学
大学院基礎工学研究科
助教



A03
研究代表者 (I期・II期)
吉川 浩史
関西学院大学
工学部 教授



B01
研究代表者 (I期・II期)
辻 雄太
九州大学
先導物質化学研究所
助教



B01
研究代表者
本武 陽一
統計数理研究所
統計的機械学習研究センター
特任助教



B01
研究代表者 (I期・II期)
萩田 克美
防衛大学校
応用物理学科 講師

※公募班 I期の所属・職は一部、参加時のものです

4人の執筆者（総括班メンバー）によってリレーしてきましたコラムシリーズも最終第10話となりました。これまでこのコーナーにお立ち寄りいただきましたこと御礼を申し上げます。今回は数学（離散幾何学）と物質・材料科学の融合研究によって得られた代表的成果の中から、異分野融合の形がわかりやすい1編の論文を紹介します。背景も研究方法も異なる研究者間の会話から何気なく浮き出てくる着想が、既存学術領域に浸透した固定観念を打破し、新学術領域の創成へと導くブレークスルーをもたらす、それが異分野融合の魅力であり究極の目的です。論文の中に、そういった融合の経緯や試行錯誤に関する記述はありませんが、材料科学者が初めて耳にする数学的概念（後に説明する「標準実現」）を理解しようとした努力、数学者がリアルな物質・材料に向き合おうとした努力、そして両者の思いが融合して論文完成に至ったその過程を行間に垣間見ることができます。

さて、その論文は、

著者： Andreas Dechant, Tatsuhiko Ohto, Yoshikazu Ito, Marina V. Makarova, Yusuke Kawabe, Tatsufumi Agari, Hikaru Kumai, Yasufumi Takahashi, Hisashi Naito, Motoko Kotani

論文題名： Geometric model of 3D curved graphene with chemical dopants

掲載雑誌： Carbon

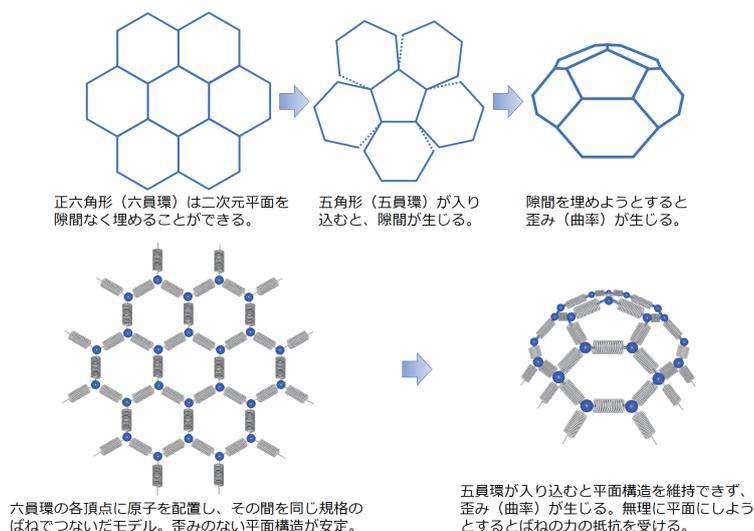
号・頁・出版年： Vol. 182, pp. 223-232 (2021年)

<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.06.004>

です。現在のところ、数学と物質・材料科学の融合にフォーカスした科学ジャーナルは出版されておらず、“Carbon”という名の炭素材料に関するジャーナルに投稿、掲載されました。数学の雑誌ではありませんので、数学的取り扱いはいやえいですが、科学としての厳密性は割愛できませんので、数式は用いないながらも、試みの本質が材料研究者にも伝わるよう工夫されています。

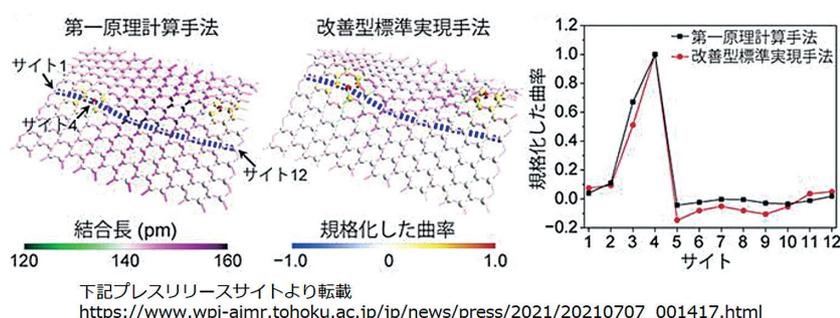
研究対象は炭素の sp^2 結合によって形成される二次元シート物質、2010年ノーベル物理学賞の対象となった研究でも注目された**グラフェン**です。無欠陥であれば炭素六員環からなる単原子層の平面構造をもつシート状物質ですが、五員環や七員環が入り込むなどの欠陥生成によりそのシートが歪むことは、球状構造をもつフラーレンからの類推もありこれまでも議論されていました。本研究の新規性は、その歪んだ炭素単原子層ネットワークをどのようにして数理解析するか、そして数理解析の結果が、物質・材料科学の分野で標準言語的に用いられている密度汎関数理論（DFT）を用いた第一原理計算の結果とどういう関係にあり、更には触媒活性との相関があるかを数理、実験の両面から探究したことにあります。

単原子層の平面シートが歪むと言われてもイメージがわかりませんので、最初に歪みに関する直感的な説明を行います。右図上段の絵に示すように、同じ大きさの正六角形は二次元平面を埋め尽くすことができますが、五角形が1つ入り込むと隙間が生じ、隙間を埋めるためには立体的に歪ませる必要があります。図下段では、原子と原子の結合をばねで表していますが、上段の幾何学に基づく考察と同様、五員環が入り込むことによって歪みが生じます。無理に平面に戻そうとすれば、ばねの抵抗に遭いますので、歪んだ構造の方が安定と言えます。ばねの長さや強さは異種原子による置換や環境によっても変わるため、事はそう単純ではないのですが、ここでは五員環（あるいは七員環）などの欠陥が入り込むと確かに歪みそうだ、という雰囲気のみお伝えできればと思います。



さて、このような原子ネットワークに欠陥が入ることで歪みが発生する現象を数理モデル化し数学的に解いていくために、本研究では**標準実現 (Standard realization)** が適用されました。標準実現は本領域の小谷代表と砂田利一教授が安定な結晶格子の探索を数学的に行うために提案した概念、理論であり、炭素がグラファイト構造、ダイヤモンド構造以外に、K4 という構造もとりうることを見出しています。この理論では、原子間をつなぐばねの引っ張り力が結晶格子全体で釣り合うところを平衡構造と考えます。そういった意味では前出のばねのモデル図に似ていますが、数学的取り扱いはそのような直感的理解とはだいぶ異なっており、ここでは原著論文の所在 (M. Kotani and T. Sunada, Trans. Am. Math. Soc. 353, 1-20 (2001)) のみ記して細部には立ち入らずに先へと進めさせていただきます。ばねの引っ張り力と書きましたが、本論文では、欠陥が入った時に曲率が生じる効果を適切に表現するため、引力だけでなく斥力も考慮した改善型標準実現を用いています。

六員環を主とする炭素原子ネットワークのモデル中に導入された五員環の周囲は凸状に膨らみ正の曲率を持つのにに対し、七員環の周囲は馬の鞍のような形となり負の曲率を持ちます (ここで曲率と書いているのは、2つの主曲率の積で表される**ガウス曲率**と呼ばれるものです)。その曲率に着目し、改善型標準実現、およびDFTに基づく第一原理計算によって得られた結果を比較したところ、下図のように高い一致度が認められました。



下記プレスリリースサイトより転載
https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2021/20210707_001417.html

本研究では更に、欠陥を含んだグラフェンを実験的に合成し、走査型電気化学セル顕微鏡を用いて表面形状と触媒特性を同時測定することで、幾何学的特徴と触媒活性の間に標準実現で予測されたものと同様の相関があることを実証しました。幾何学に基づいた原子配列構造の解釈は材料科学者の直感にも合うものであり、更にそれと機能 (触媒活性) との相関までを数学的に扱えるようになれば、求める機能ありきで合成すべき材料の構造を予測する、いわゆる逆問題に基づく材料科学への道が拓けてくるでしょう。

DFTに基づく第一原理計算は量子力学の知識に立脚した、現時点において最も科学的に信頼できる理論的枠組みであり、標準実現がDFTの役割を完全に担えるかと言えば、それは難しいでしょう。しかし、計算時間が10億分の1で済む標準実現の数理モデル計算で予めスクリーニングを行い、それによって絞られた有力な候補物質のみをDFTによって精密に計算するという物質探索スキームは有益であると考えられます。

誌面も残り少なくなりましたので、最後にもう一度、少し気になっているジャーナルの問題に触れます。今回は物質・材料科学系のジャーナルに投稿しましたが、これですと、数学者の目に触れる可能性は低く、数学者と物質・材料科学者が相乗りして議論する場を提供する、融合領域にフォーカスした国際ジャーナルが欲しいところです。今のところ、私たちは、SpringerBriefs in the Mathematics of Materials というモノグラフシリーズの出版を通じて数学と物質・材料科学の連携を世界に情報発信していますが、必ずしも十分ではありません。今後、更にコミュニティーが拡大し、融合領域の国際ジャーナルが出版されるようになった時こそ、真の新学術領域として国際的認識を得たことになるのだと思います。そこに至るまで、私たちは地道な努力を続けていく所存です。

池田 進

1990年東北大学理学部地学科卒業。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手・助教等を経て、2008年より東北大学AIMR助教、2010年より同准教授。2011年より副事務部門長(研究担当)を、また2018年より研究支援部門長を併任(2019年9月まで)。現在は客員研究員として東京大学にて勤務。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・材料分野の研究経験を踏まえ、異分野融合や組織間連携を推進する役割を担っている。

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
会場：東北大学
- 8月8-10日 国際ワークショップ “Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers”
会場：お茶の水女子大学
- 11月8日 公募研究募集締切り
- 11月13-14日 A01 理論班キックオフミーティング
会場：理化学研究所 日本橋オフィス
- 11月24-26日 研究会集「4次元トポロジー」
会場：大阪市立大学
- 11月29日 (A01-1) 古田幹雄：研究紹介「トポロジーにおける『定性的な主張』と『定量的な主張』」
会場：沖縄科学技術大学院大学(OIST)カンファレンスセンター
- 12月1-2日 研究会集「離散幾何解析とその周辺 2017」
会場：CIC 東京
- 12月23日 (A01-2) 橋本幸士：「日本物理学会2017年度公開シンポジウム」にて招待講演、量子力学90年『超ひも理論と量子力学の宿題』

2018年

- 2月16-21日 国際研究会集 “Gauge Theory in Fukuoka”
会場：九州大学/かんぼの宿 柳川、会議室
- 2月18日 新学術領域「次世代物質探索のための離散幾何」キックオフワークショップ
会場：東北大学 AIMR 本館 2階セミナールーム
- 3月1-2日 Mini-Workshop on Topological Phase and K-theory
会場：東北大学 AIMR 本館 4C
- 3月13-15日 連続講演 (Jean Bellissard 教授)
会場：東北大学 AIMR 本館 4C
- 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)
会場：東北大学
- 5月16日 (A01-2) 橋本幸士：「大阪大学サイエンスナイト2018」にて講演『宇宙を支配する数式、素粒子と重力の統一理論を求めて』
- 6月2日 A03 班会議
会場：日本橋ライフサイエンスビルディング会議室 302
- 6月7日 B01 班会議
会場：東京大学本郷キャンパス工学部2号館33B2号室
- 6月9日 A02 班会議
会場：お茶の水女子大学理学部1号館201室
- 6月15日 物質と幾何セミナー (第1回)
会場：名古屋大学理学部A館A207室
- 7月11日 (総括班・インターフェース) 正井秀俊：第154回サイエンスカフェにて講演「数学小断〜日常に数学を〜」
会場：せんだいメディアテーク
- 7月20日 物質と幾何セミナー (第2回)
会場：名古屋大学理学部A館A207室
- 7月24日 物質と情報科学セミナー (第1回)
会場：東京大学 (本郷キャンパス) 工学部6号階368号室
- 7月28-30日 Mini-Workshop on Geometry and Mathematical Science
会場：大阪市立大学理学部E棟E408講義室
- 8月11日 (A01-2) 橋本幸士：「2018年度日本物理学会科学セミナー」にて招待講演 (公開講座「AI (人工知能) と物理学」、タイトル『深層学習と時空』)
- 8月13-17日 PROGRESS IN THE MATHEMATICS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER
会場：東北大学 AIMR
- 10月22日 物質と幾何セミナー (第3回)
会場：名古屋大学理学部A館A428室
- 11月10日 (総括班) 小谷元子：高校の数学の教員に対して数学の先端研究、特に『AIMRにおける数学-材料科学連携』を紹介
- 11月13日 物質と幾何セミナー (第4回)
会場：名古屋大学理学部A館A207室
- 11月17-18日 領域会議・総括班会議
会場：宮城県仙台市太白区秋保町
- 11月29日 物質と情報科学セミナー (第2回)
会場：東京大学 (本郷キャンパス) 工学部6号階3階セミナー室B (368号室)
- 12月2日 研究会「高分子のからみあい」
会場：東京工業大学 (大岡山キャンパス) 南8号館8階会議室
- 12月5日 (総括班) 赤木和人：MathAM-OIL 第3回企業連携ワークショップにて招待講演「ソフトマテリアルのトポロジカル解析：顕微画像の分類とキャラクターゼーション」
会場：東京コンベンションホール

2019年

- 1月7-8日 国際ワークショップ “AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics”
会場：Seminar Room 2B, AIMR Main Building 2F, Katahira Campus, Tohoku University
- 1月15-16日 離散幾何解析とその周辺
会場：CIC 東京 5F 501
- 1月17日 物質と情報科学セミナー (第3回)
会場：東京大学 (本郷キャンパス) 工学部6号階3階セミナー室B (368号室)
- 1月18日 物質と幾何セミナー (第5回)
会場：名古屋大学理学部A館A207室
- 1月28-29日 A01-2 班研究会「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」
会場：大阪大学豊中キャンパス理学研究科H棟7階H711号室
- 1月30日-2月1日 国際ワークショップ「Polymers meet Topology」
会場：東京工業大学 Tokyo Tech Front, Royal Blue Hall
- 3月1日 物質と情報科学セミナー (第4回)
会場：日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター3階302号室
- 3月10日 (A01-1) 古田幹雄：女子中高生講座「数学の魅力8」
会場：東京大学駒場キャンパス数理学部棟大講義室
- 5月14日 物質と幾何セミナー (第6回)
会場：名古屋大学多元数理学部棟452-453室
- 6月17-8月9日 g-RIPS (Graduate-Level Research in Industrial Projects for Students)-Sendai
会場：AIMR, Tohoku University, Katahira Campus, Sendai
- 7月4日 物質と幾何セミナー (第7回)
会場：名古屋大学多元数理学部棟552室
- 7月29日-8月2日 PROGRESS IN THE MATHEMATICS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER
会場：AIMR, Tohoku University, Katahira Campus, Sendai
- 8月2-3日 研究成果発表会・領域会議
会場：名古屋大学東山キャンパス
- 8月7-9日 国際シンポジウム “Polymers and networks via topology and entanglement”
会場：お茶の水大学 Inter-Faculty Building 2-201
- 10月28-29日 「物理学者のためのK理論」勉強会
会場：大阪大学理学部H棟701号室
- 10月31日-11月2日 国際研究会「ディーブラーニングと物理学2019」組織委員長：橋本幸士 (A01-2)
“Deep Learning and Physics 2019”, DLAP 2019
会場：Yukawa Institute for theoretical physics, Kyoto Univ.
- 11月11日 CREST-さきかけ連携公開型ワークショップ：「高分子弾性のトポロジーと革新的理論の構築に向けて」
会場：お茶の水女子大学理学部3号館2階会議室 (207, 208, 209室)
- 11月27-28日 第13回物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会)
会場：東京大学本郷キャンパス小柴ホール (理学部1号館中央棟)
- 12月7-8日 研究会集「離散幾何解析とその周辺 2019」
会場：CIC 東京
- 12月10-14日 Materials Research Meeting 2019
会場：Yokohama Symposia

2020年

- 1月28日 A03 班会議 (非公開)
会場：名古屋大学理学部B館B114
- 2月17-18日 研究会「トポロジカル表面状態、プレーンとソリトン、指数定理」(A01 班会議) (公開)
会場：大阪大学理学部 南部陽一郎ホール
- 2月24-28日 Workshop “Topological phenomena in non-Hermitian and non-equilibrium systems” (公開)
会場：東北大学片平キャンパス AIMR
- 3月4-5日 SPring-8 ユーザー協同体 顕微ナノ材料科学研究会・日本表面真空学会 放射光表面科学研究部会・日本表面真空学会 プローブ 顕微鏡研究会合同シンポジウム データ駆動化学チュートリアル講演 (公開)
会場：金沢大学サテライトプラザ
- 3月13日 【延期】 マテリアルズインフォマティクス講演会〜材料科学と情報科学のクロスオーバー〜 (公開)
会場：九州大学伊都キャンパス
- 3月14-15日 数学と諸分野の連携に向けた「若手数学者交流会 第2回2020」(公開) SESSION “Young Mathematicians' Challenge”
会場：科学技術振興機構 (JST) 東京本部 B1大会議室
- 3月16-18日 ミニワークショップ「場の理論、代数トポロジー、量子化」
会場：ルノアール四谷店会議室
- 3月17日 【Web 会議】 総括班会議 (非公開)
- 4月以降 拡大領域会議・成果報告会
【延期】
会場：東北大学片平キャンパス AIMR
- 4月下旬〜 (3週間に1回程度) 新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」チュートリアル離散幾何解析のためのプログラミング入門

- 5月14日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第1回「精度保証された機械学習分子動力学法：自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」
- 5月28日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第2回「深層学習と時空」
- 5月30日 A03班セミナー (ONLINE) 第1回 MOFとトポロジー (Overview of MOF topology)
- 6月6日 A03班セミナー (ONLINE) 第2回 MOFとトポロジー (Overview of MOF topology)
- 6月11日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第3回ライトニングトーク
- 6月13、20日 2020年度 第1回オンライン領域会議
- 6月18日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第4回「深層学習の数理：統計力学的アプローチ」
- 6月25日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第5回「物理学における観測と機械学習：中性子星の事例」
- 6月30日 オンライン MI サーベイレクチャー 第1回「データ駆動型材料開発の現状と今後の展開 - データ自動生成とデータ共有への潮流」
- 7月9日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第6回「ニューラルネットワークで探る量子多体系の表現」
- 7月11日 2020年度 A03班会議 (Zoomによるオンライン会議)
- 7月28日 オンライン MI サーベイレクチャー 第2回「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料設計と技術動向」
- 7月30日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第7回「物理学者と学習機械の効果的な協業に向けて：学習済み深層ニューラルネットワークからの解釈可能な物理法則抽出」
- 8月6日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第8回「ボルツマンマシンを用いた量子多体波動関数表現：深層ボルツマンマシンによる厳密な表現と制限ボルツマンマシンによる数値的近似表現」
- 8月20日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第9回「表現学習の熱力学：深層生成モデルの物理法則を求めて」
- 9月3日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第10回「強化学習を用いたボース・アインシュタイン凝縮体の制御」
- 9月17日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第11回「NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum technology) マシンを用いた量子機械学習」
- 9月24日 化学工学会第51回秋季大会 (オンライン) 内 SY-80「材料・界面部会シンポジウム」次世代物質・材料探索のための新たなアプローチ
- 10月1日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第12回「スパース線形回帰に対する半解析的ブートストラップ法」
- 10月15日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第13回「End-to-End, Machine Learning-based Data Reconstruction for Particle Imaging Neutrino Detectors」
- 10月23日 オンラインセミナー「数学と材料科学」講演者：鈴木康平 (A03-1) (Scuola Normale Superiore)
- 10月29日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第14回「ミンコフスキー汎関数を用いた機械学習の提案」
- 11月12日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第15回「深層学習の汎化の謎をめぐって」
- 11月20日 オンラインセミナー「数学と材料科学」講演者：渡邊聡氏 (MathAM-OIL)
- 11月26日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第16回入門講義「機械学習と物理」
- 12月10日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第17回「EHTによるブラックホールの撮像とスパースモデリング」

2021年

- 1月9-10日 2020年度 第2回オンライン領域会議
- 1月14日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第18回「無限次元勾配ランジュバン動力学による深層学習の最適化理論と汎化誤差解析」

- 1月27日 九大先導研・新学術「材料離散幾何解析」合同シンポジウム
マテリアルズインフォマティクス講演会～材料科学と情報科学のクロスオーバー～ (オンライン配信 Webex)
- 1月28日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第19回「Neural Networks and Quantum Field Theory」
- 2月8、19日 第1回新学術基礎講義「非エルミート系におけるトポロジカル物性」講演者：(A01) 吉田恒也 (筑波大)
Zoomによるオンライン開催
- 2月12日 オンラインセミナー「Geometric modelling of tangled structures」講演者：Prof. Dr. Myfanwy Evans (The Institute of Mathematics, University of Potsdam)
- 2月18日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第20回「Neural Mechanics: Symmetry and Broken Conservation Laws in Deep Learning Dynamics」
- 2月25日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第21回「ニューラルネットワークによる結び目の標準化」
- 3月5日 オンラインセミナー「数学と材料科学」講演者：吉村幸徳氏 (MathAM-OIL)
- 3月10-11日 第18回SPRING-8ユーザー協同体顕微ナノ材料科学研究会・第15回日本表面真空学会放射光表面科学研究部会・第4回日本表面真空学会ブローフ顕微鏡研究部会 合同シンポジウム
会場：金沢大学サテライトプラザ
- 3月11日 オンラインセミナーシリーズ「ディープラーニングと物理学 2020 オンライン」
第22回「エネルギー保存則など望ましい性質を持つ深層学習の設計について」
- 3月14日 日本物理学会第76回年次大会 共催シンポジウム「次世代物質探索のための離散幾何学」(オンライン)
- 4月8日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第23回「ゲージ共変なニューラルネットワークと4次元非可換ゲージ理論への応用 (Gauge covariant neural network for 4 dimensional non-abelian gauge theory)」
- 4月22日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第24回「物理シミュレーションのための同変グラフニューラルネットワーク」
- 5月6日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第25回「識別器による最適輸送」
- 5月20日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第26回パネルディスカッション「物理×深層学習の未来」
- 5月20-21日 GTF2021 The Geometry & Topology Behind Fabrics at Multiple Scales (オンライン)
- 5月29日 A02班会議 (Zoomによるオンライン会議)
- 6月3日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第27回「深層学習の汎化誤差解析：損失面由来の暗黙的正則化と深層モデルの二重降下」
- 6月17日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第28回「差分進化を用いた最適なナノ熱機関の探索」
- 7月1日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第29回「Fermi Flow: Ab-initio study of fermions at finite temperature」
- 7月15日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第30回「Quantum field-theoretic machine learning」
- 7月18日 第2回A02班会議 (Zoomによるオンライン会議)
- 9月26-29日 International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (オンライン)
- 10月4日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第31回「FPF：材料探索のための汎用 Neural Network Potential」
(Quantum Computational Materials Science Roundtable との共催)
- 10月28日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第32回「Real-time dynamics of lattice field theories via machine learning」
- 11月11日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第33回「深層ニューラルネットワークにおけるレプリカ対称性の破れとその空間構造」
- 11月25日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第34回「深層学習による量子指紋の解説」
- 12月9日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第35回「Gauge Equivariant Mesh Convolutional Neural Networks」

2022年

- 1月7-9日 Workshop "Discrete Geometric Analysis and its Applications" オンライン
- 1月13日 ディープラーニングと物理学 オンライン
第36回「Computer VisionにおけるTransformerとMLP-Mixerの現状」

受賞

2018年

3月

- 一木輝久 (B01-2) が、第 33 回 (2017 年度) 電気通信普及財団賞 (テレコムシステム技術賞) 「Design Framework of Imaging Sensor System Based on Dynamic Range Extension by Adding Noise for Saturated Conditions」を受賞
- 山本詩子 (B01-2) が、2017 年度日本磁気共鳴医学会 “ISMRM Travel Award” (基礎・技師部門 1 位) を受賞

5月29日

伊藤良一 (公募 A03) が、第 39 回本多記念研究奨励賞を受賞

6月20日

山本詩子 (B01-2) が、平成 29 年度日本生体医工学会 研究奨励賞・阿部賞「カーネル法を用いた弾性体の部分観測情報に基づく変形推定」を受賞

7月9-13日

Tatsuya Mori (公募 A02), Koki Nakano, Yasuhiro Fujii, Suguru Kitani, Shinji Kohara, Norimasa Nishiyama らが、「PNCS-ESG 2018 (15th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids & 14th European Society of Glass Conference, Saint Malo, France)」にて “Best Poster award”, ‘Investigation of boson peak of densified silica glass by terahertz time-domain spectroscopy’ を受賞

8月

- 清水剛志 (公募 A03) が「The 43rd International Conference on Coordination Chemistry, ICC2018, Sendai, Japan」にて “Best Poster Award” を受賞
- 清水剛志 (公募 A03) が、2018 年度関西学院大学工学部 仁田記念賞を受賞

10月

森 龍也 (公募 A02) が、第 13 回日本物理学会若手奨励賞を受賞

11月

- 安本真士 (公募 A03) が「Symmetries and Integrability in Difference Equations (SIDE 13), Fukuoka, Japan」にて “Poster Presentation Award” (47 名のうち 5 名) を受賞
- 山口哲生 (公募 A02) の、講演「ネットワーク状弾性体のトポロジカルメカニクスと強靱化」が日本機械学会計算力学講演会にて優秀講演として表彰

11月6日

伊藤良一 (公募 A03) が、平成 30 年度筑波大学若手教員奨励賞を受賞

11月20日

吉田靖雄 (公募 B01) が、平成 30 年度日本表面真空学会 会誌賞を受賞

12月

森 龍也 (公募 A02) が、2018 年度日本セラミックス協会国際交流奨励賞 21 世紀記念個人冠賞 倉田元治賞を受賞

2019年

2月

安本真士 (公募 A03) が、2018 年度大阪市立大学数学研究会 特別賞「離散化された線形ワインガルテン曲面とその変形族の研究」を受賞

2月19日

伊藤良一 (公募 A03) が、平成 30 年度筑波大学「Best Faculty Member」に選出

4月

- Yong p. Chen (公募 A01) が、Villum Investigator Award, “The Velux Foundations (DK)” を受賞
- 大関雅之 (B01-2) が、平成 30 年度船井学術賞「量子力学を駆使した計算技術の基盤作りと機械学習への展開」を受賞

5月

- 手塚育志 (A02-1) が、2018 年度高分子科学功績賞 (高分子学会) を受賞
- 森下和哉 (公募 B01) が、2019 年度日本ゴム協会年次大会、ポスター優秀発表賞を受賞

6月6日

伊藤良一 (公募 A03) が、第 8 回新化学技術研究奨励賞を受賞

9月26日

押川正毅 (A01-2) が、物性物理学部門 (Division of Condensed Matter Physics) からの推薦により、米国物理学会 (American Physical Society, APS) フェローに選出

9月

辻 雄太 (公募 B01) が、第 13 回分子科学討論会 (名古屋) 2019 にて分子科学会優秀講演賞「リチウムテトラライドの電子状態に関する理論的研究」を受賞

11月

塩見雄毅 (総括班)、(2020 年) 日本物理学会若手奨励賞 (領域 3: 磁性) 「エキゾチック物質における新奇スピン流現象の開拓」を受賞

12月9日 - 10日

山本亮太 (公募 B01/JSR 株式会社) が、日本ゴム協会 第 30 回エラストマー討論会にてポスター優秀発表賞を受賞

2020年

7月22日

藪 浩 (公募 A02・東北大学・准教授) が、東北大学ディスティングイッシュトリサーチャーの称号が付与

8月19日

Andreas Dechant (総括班・京都大学・研究員) が、Journal of Physics A (Mathematical and Theoretical) より Best Paper Prize 2020 を受賞

9月4日

- 窪田陽介 (A01-1・信州大学・講師) が、2020 年度日本数学会賞 建部賢弘奨励賞を受賞
- 櫻井陽平 (インターフェース・東北大学・助教) が、2020 年度日本数学会賞 建部賢弘奨励賞を受賞

9月7日

葛西誠也氏、一木輝久 (B01-2・名古屋大学・特任准教授)、田所幸浩氏が、第 42 回応用物理学会論文賞 (応用物理学会優秀論文賞) を受賞

10月6日

伊藤良一 (公募 A03・筑波大学・准教授) が、東北大学金属材料研究所附属新素材共同研究開発センター 第 14 回共同利用研究課題最優秀賞を受賞

2021年

4月7日

正井秀俊 (A03-1・東京工業大学・助教) が、令和元年度東工大教育賞を受賞

5月20日

- 萩田克美 (公募 B01・防衛大学校・講師) が、日本ゴム協会誌 第 68 回優秀論文賞を受賞
- 藪 浩 (公募 A02・東北大学・准教授) が、一般社団法人日本ゴム協会 第 12 回ブリヂストンソフトマテリアルフロンティア賞 奨励賞を受賞

10月21日

吉田恒也 (公募 A01・筑波大学・助教) が第 16 回 (2022 年) 日本物理学会若手奨励賞 (領域 4: 半導体、メソスコピック系、量子輸送)、「非エルミート性が誘起する強相関トポロジカル現象に関する先駆的研究」を受賞

ご案内

本ニュースレターでは Vol. 1 より各号一話ずつ下記のようなコラムを掲載してまいりました。
<https://www.math-materials.jp/> から全 Volume をダウンロードできこれらコラムもご覧いただけますので、
コーヒープレイクにぜひお立ち寄りください。

HARMONICS

Column for math-mate collaboration

第1話 歴史に見る材料と数学のかかわり

第2話 逆問題を解く

第3話 結晶と幾何学

第4話 準結晶と高温超伝導体

第5話 数学と物理学

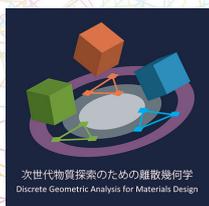
第6話 情報量と単純さのはざまに

第7話 物理学者のインディ・ジョーンズ

第8話 引き算は難しい？

第9話 トポロジーと高分子

第10話 融合の成果（論文紹介）



問い合わせ先

小谷 元子（領域代表）
東北大学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/>

News letter Vol. 10 編集担当：池田 進
歴代編集担当：正井 秀俊、奥川 亮、福田 瑞季、渡部 淳、池田 進
出版事務 / 編集補佐：波岡 祥子、佐藤 美香