

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

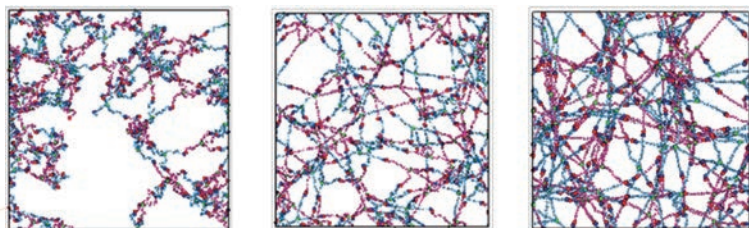
News letter
vol. 05

B01 班代表挨拶

計算機の性能は指数関数的な向上を続けており、計算機が蓄積・処理できるデータ量はこの5年間で10倍、15年間で千倍、30年間で100万倍にも増大しています。物質・材料科学に関する多様で膨大な実験・シミュレーションデータを高精度に観測・処理できる時代に急速になりつつあり、これらのビッグデータを活用した情報科学の視点を入れた新たな研究が強く求められています。このような現状を踏まえ、B01班では「物質・材料科学のための情報科学基盤」の研究を行います。具体的な研究手法の例としては、複雑ネットワーク解析と画像処理・機械学習があります。

複雑ネットワーク科学の分野において、社会・経済・生命などに実在する複雑なネットワークが持つ非自明なトポロジカル構造の理解が進みつつあります。様々な物質・材料が持つ多様で複雑な構造をネットワークとして抽象化し、複雑ネットワーク科学の解析手法を応用・発展させて適用することで、複雑ネットワークの数理に基づいて物質・材料の構造と機能の相関を解明することが期待されます。

機械学習をはじめとした情報科学の分野において、材料科学への情報科学的手法の利用が進みつつあります。物理・化学・幾何学が融合する独特のデータ構造を持った「材料」を舞台に機械学習を展開することで材料科学特有のデータ解析手法を確立し、材料の複雑な構造と機能の相関、その背景にある数理構造を解明することが期待されます。



分子動力学シミュレーションで生成される架橋高分子の様々なネットワーク構造



東京大学大学院
情報理工学系研究科
准教授

大西 立顕

ONISHI Takaaki

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）を実証科学の視点から研究しています。



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。

B01 班研究の概要

B01 班には 2 つの計画研究があります。

■ B01-1 「複雑ネットワークの解析に基づく物質・材料探索」 (研究代表: 大西立顕)

■ B01-2 「材料観察画像からの機能推定」 (研究代表: 一木輝久)

B01-1 では、物質・材料が持つ複雑な階層ネットワーク構造を数値化することで、構造と機能の相関を解明することを目指します。具体的には、複雑ネットワーク指標を用いたネットワークポリマーの力学物性の解析、ネットワーク上のパーコレーションを用いたネットワークポリマーの脆弱性・頑強性解析、架橋点間距離とネットワーク指標がネットワークポリマーの力学物性に及ぼす効果、様々なネットワーク構造を持つ高分子材料の実験データ解析、高分子材料の相分離構造のネットワーク解析に取り組みます。

B01-2 では、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。具体的には、ニューラルネットワークを用いた輸送特性予想、ポリマーネットワークの顕微鏡画像にイジングハミルトニアンを適用した配向解析、データ多様体の持つ構造を利用して異種データを融合した物性予測の高精度化、詳細釣り合いの破れを利用した確率勾配法の高速度、最適化問題としての材料構造予測、応答理論とベイズ推定を利用した計測の最適化に取り組みます。

B01 班ではこれらの計画研究に加えて、次ページ以降に紹介する 5 件の公募研究も実施されています。物質・材料科学のための情報科学に関連するこれらの研究は、A01、A02、A03 班に共通した物質・材料系に依らない普遍的な情報科学的手法を提供することで、各研究を有機的に結びつけることも期待されています。

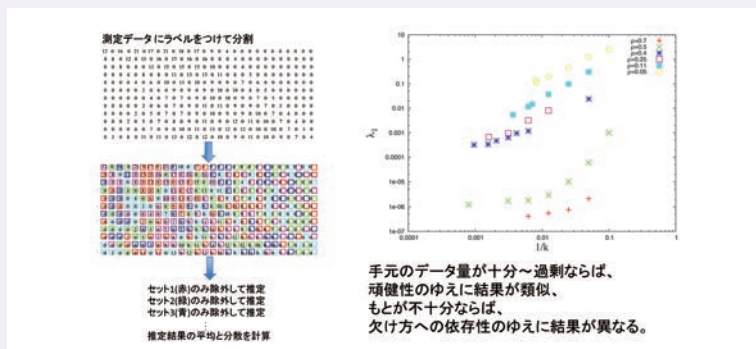
論文・書籍紹介

B01 班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文献が参考になります。

- [1] Masayuki Ohzeki, Akihisa Ichiki, "Langevin dynamics neglecting detailed balance condition", Physical Review E vol.92 no.1, 012105/1-4, 2015.
- [2] Akihisa Ichiki, Masayuki Ohzeki, "Violation of detailed balance accelerates relaxation", Physical Review E vol.88, no.2, 020101(R)/1-4, 2013.
- [3] Akihisa Ichiki, Yukihiro Tadokoro, "Relation between optimal nonlinearity and non-Gaussian noise: Enhancing a weak signal in a nonlinear system", Physical Review E vol.87, no.1, 012124/1-4, 2013.
- [4] Chikara Mizokami, Takaaki Ohnishi, "Revealing Persistent Structure of International Trade by Nonnegative Matrix Factorization", In: Cherifi C., Cherifi H., Karsai M., Musolesi M. (eds) Complex Networks & Their Applications VI. COMPLEX NETWORKS 2017. Studies in Computational Intelligence (Springer, Cham), vol.689, pp.1088-1099, 2017.
- [5] Takaaki Ohnishi, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Network Motifs in Inter-firm Network", Journal of Economic Interaction and Coordination, vol.5, no.2, pp.171-180, 2010.
- [6] Takaaki Ohnishi, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Hubs and Authorities on Japanese inter-firm network: Characterization of nodes in very large directed networks", Progress of Theoretical Physics Supplement, vol.179, pp.157-166, 2009.
- [7] Takayuki Mizuno, Takaaki Ohnishi, Tsutomu Watanabe, "Structure of global buyer-supplier networks and its implications for conflict minerals regulations", EPJ Data Science vol.5, no.2, 15pages, 2016.

研究内容

- 研究 題目** ▶ 物質構造のスパース推定における信頼性評価法の開発
- 研究 計画** ▶ 材料の微細構造（電子顕微鏡画像、X線・電子線CT画像等）を機械学習やスパース推定を用いて解析し、材料物性との相関を定量的に議論できる枠組みを作る。



研究代表者

東北大学大学院
情報科学研究科 特任助教

中島 千尋

NAKAJIMA Chihiro



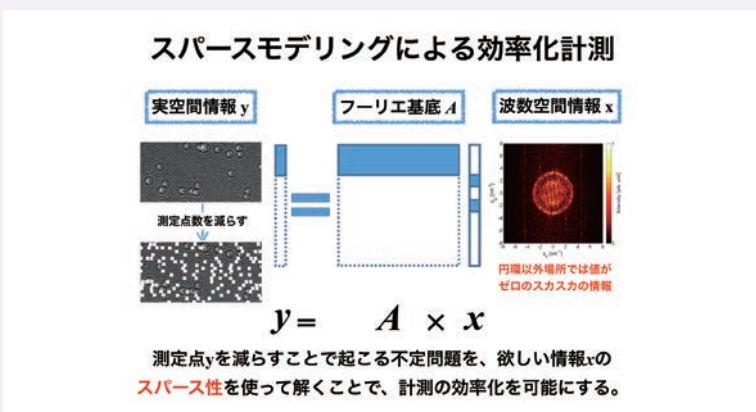
研究 分野：情報統計力学

研究テーマ：材料測定技術へのインフォマティクス導入

研究概要：少数の観測データから物質の空間構造を再構成する手法、圧縮センシングを用いたCT（コンピュータトモグラフィ）などにおいて、再構成結果の信頼性を評価する手法、あるいは手元にあるデータからの再構成の可否を判別する手法を開発する。そしてそれを多様な実験データに対して適用し成功例を重ねることにより、材料科学における圧縮センシング導入を下支えする基盤的技術の核を形成する。

研究内容

- 研究 題目** ▶ 機械学習を用いた高効率走査トンネル分光測定による物質探索



研究代表者

金沢大学
理工学域数物科学系 准教授

吉田 靖雄

YOSHIDA yasuo

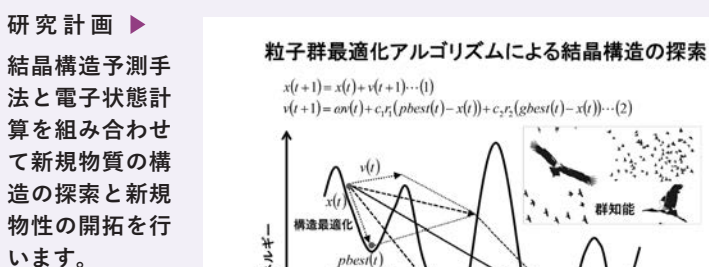


研究 分野：強相関電子物性、ナノ・表面物理

研究概要：極低温・強磁場・超高真空といった極限環境において、電子相関が強い物質が示す様々な物理現象の解明や、新たな現象の探索を目指して研究を行っています。特に、電荷だけでなく、スピンや電子軌道にも感度を持つ、走査トンネル顕微鏡（STM）を開発・利用し、電子が織りなす物理現象を原子レベルまでの実空間観察を通して理解したいと考えています。最近ではこれに加え、機械学習等を用いた、計測の効率化にも取り組んでいます。

研究内容

- 研究 題目** ▶ 粒子群最適化および進化論的アルゴリズムを利用した結晶構造予測による物質探索



研究代表者

九州大学
九州大学先端物質化学研究所 助教

辻 雄太

TSUJII Yuta



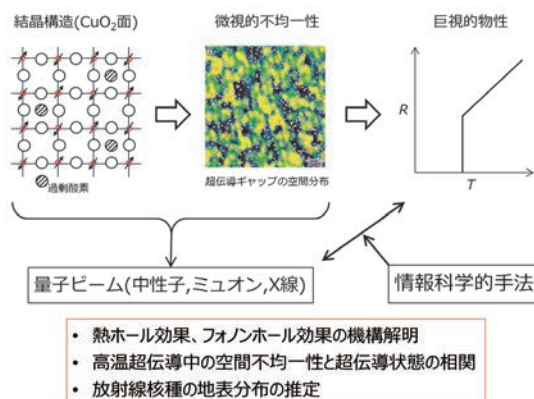
研究 分野：理論化学

研究テーマ：数理論化学、量子化学、計算化学

研究概要：理論化学はあらゆる物質の形態を対象としていますが、私はとくに固体の研究をしています。近年、計算機の進歩により、様々な結晶構造の情報に基づいて未知の物質の結晶構造を予測することが可能になってきています。私はそのような最先端の手法を駆使して、新規物質の探索を行っています。また、得られた新規物質に対する電子状態計算を行ってその物質の物性の解析も行っています。

研究内容

研究題目 ▶ 巨視的物性を支配する微視的不均一状態の解明



研究代表者

日本原子力研究開発機構
研究主幹

森 道康

MORI Michiyasu



研究分野：物性理論

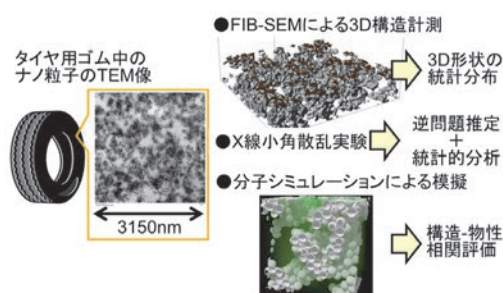
研究テーマ：熱ホール効果、高温超伝導、中性子散乱、
圧縮センシング

研究概要：結晶中の乱れなどで誘起されるメソスケールの構造と巨視的物性との相関に着目して研究を進めている。中性子やミュオンあるいはX線などの量子ビームを用いた実験データに対し、圧縮センシングなど情報科学的解析手法を用いて、乱れなどにより埋もれた重要な信号を引き出すことで、物質材料の巨視的性質を解明することを目指している。

研究内容

研究題目 ▶ ゴム中ナノ粒子のネットワーク構造の離散幾何解析と構造機能相関解明

研究計画 ▶ 散乱実験や顕微鏡のデータを逆問題や機械学習などの応用数学的な手法で解析し、物性や機能との関わりを研究する。



研究代表者

防衛大学校 講師

萩田 克美

HAGITA Katsumi



研究分野：高分子物理学、計算物理学

研究テーマ：高分子材料中ナノ粒子の凝集構造やその物性に関する計算科学研究

研究概要：ナノ粒子が充填された架橋高分子ネットワークであるゴム材料において、ナノ粒子やその周辺にあるバウンダリーのネットワーク構造が、物性・機能に与える影響について、SPRING-8の小角散乱データやFIB-SEMなどの電子顕微鏡データを、分子シミュレーションなどの計算科学的手法で解析することで研究している。

HARMONICS
Column for math-mate collaboration

第5話

数学と物理学

物理学では数学を使って自然現象を記述しようと試みますので、数学と物理学の交わりが大きいことは明らかでしょう。現代においては、数学と物理学は別分野として異なる研究者コミュニティを持ち、互いに独立して研究を深めているように見えますが、例えば、古代ギリシャの時代にさかのぼれば、数学者は同時に物理学者でも、哲学者でもあり、諸学問は不可分なもので、哲人たちは、物事をあらゆる側面から眺め、数学も物理学も切り分けることなく、科学的思考を発展させていたものと思われます。

数学者でも物理学者でもない筆者がこの2つの学問分野の関係を考えるときに、ふっと頭に蘇ってくるある書物の一節があります。筆者は、歴史上の偉大な発見にまつわるお話を聞いたり読んだりするのが好きなのですが、量子力学の建設に多大な貢献を果たしたウェルナー・ハイゼンベルクが生涯において出会った人々と交わした対話を回想し記した『部分と全体 - 私の生涯の偉大な出会いと会話 - (山崎和夫博士訳・みずす書房)』という書物を読んだとき、量子力学発見の主人公の一人として活躍したまさにその人が執筆した文章に潜むリアリティに引き込まれました。

高校生であったハイゼンベルク青年は数学者ヘルマン・ワイルの著書「空間、時間、物質」を読み、ミュンヘン大学で数学を専攻することを決意します。そして、御父上の紹介でかの有名な数学者リンドマン教授室を訪問し、これまでに勉強してきた数学について話しました。しかし

6 ページへ続く

第13回 物性科学領域横断研究会（領域合同研究会）

日時：2019 年 11 月 27 日（水）28 日（木）

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）

本新学術領域を含めて 8 つの新学術領域からなる領域横断研究会が開かれました。本新学術領域のセッションは、下川航也氏（埼玉大学）、林晋氏（産総研 MathAM-OIL）、Andreas Dechant 氏（東北大学 AIMR）の 3 名によって講演が行われました。導入として A02 班代表である下川氏による本新学術領域の活動説明からセッションは始まりました。

研究成果としては、まず下川氏から 3 次元トポロジーの高分子への応用が紹介されました。次に、林氏によって K 理論と指数理論を用いた新奇な高次トポロジカル相の理論的予言がなされました。最後に、Dechant 氏が 2 次元系および 3 次元系の炭素系のネットワークの数学的特徴付けについて説明を行いました。様々な分野との相互作用によって、数学が材料科学においても存在感を示せるような研究会となりました。



研究集会「離散幾何解析とその周辺 2019」

日時：2019 年 12 月 7 日（土）8 日（日） 会場：CIC 東京 5F

本新学術領域 A03 班のメンバーを中心に、研究集会「離散幾何解析とその周辺 2019」が開催されました。この研究集会は、2017 年からはじまり、3 回目を数えます。今回からは、数学以外の分野から世話人として、松本正和氏（岡山大学）に参加していただき、より広い分野の方々に講演を行っていただくこととなりました。今年度は、A01 班研究代表者である橋本幸司氏（大阪大学）、インターフェースの Andreas Dechant 氏（東北大学）に講演を行っていただきました。さらに、領域外から 6 名の講演者をお招きし、準結晶、パーシステントホモロジー、可積分系、特異点論、複雑性など、一見すると離散幾何学解析とは異なる内容の講演をお願いしました。離散幾何解析はグラフ構造から与えられる幾何構造に関する解析ですので、数学のみならず多くの研究に関わりますが、今回のご講演も種々の側面から離散幾何解析と密接に関係することがわかり、活発な議論が行われました。この研究集会は、2 日間にわたり開催していますが、2 日間で 8 講演という少ない講演数に押さえ、各講演時間終了後に 30 分以上のディスカッションの時間を確保しています。今回も、それぞれのご講演に対して多くの質問やコメントがあり、質疑応答の時間を大幅に超過し、活発な議論が行われ、離散幾何解析を中心にして、数学のみならず、他分野との活発な研究の発展を期待させる研究集会となりました。

5 ページの続き

ながら、ワイルの「空間、時間、物質」を読んだことに言及したところ、「それでは、あなたは数学をやってもどうせだめでしょう。」と、リンデマン教授に門前払いの扱いを受けてしまったとのこと。これによって若きハイゼンベルクは数学者への道を断念して理論物理学へと進み、量子力学という物理学の金字塔を打ちたてていくことになります。

失意の中、ハイゼンベルク青年は再び御父上に相談し、理論物理学のゾンマーフェルト研究室に入ることになりました。そのゾンマーフェルト研で親しくなったヴォルフガング・パウリ先輩にリンデマン教授室での一件を話したところ、パウリ先輩は楽しそうに「それはまさに僕の予期した通りだ。リンデマンは数学的厳密性の狂信者だ。数理物理学もふくめてすべての自然科学は、彼にとってはもはやしたむだ話なのだ。（中略）だからリンデマンにとってはワイルはまともな数学者の列からももちろんのこと除外されるのさ。」（同『部分と全体』より）と語ったとのこと。この書物はこれらの会話がなされてからおよそ 50 年後に書かれたものであり、一言一句まで正確ではないと思われませんが、これらの出来事はハイゼンベルクの一生に大きく関わった事件であり、ハイゼンベルクの記憶に深く刻まれていたでしょうから、恐らくそれに近い会話が実際になされたということなのでしょう。その後、お話（著者による回想）は、ニールス・ボーアとの出会い、量子力学（行列力学）の発見、コペンハーゲンのニールス・ボーア理論物理学研究所での研究生活、アインシュタインやシュレディンガーとの対話、第二次世界大戦による混乱、戦後の復興、原子技術、素粒子論へと進んでいきます。

数学の才能をもった研究者が、物理学に進む、あるいは物理学に関わることによって、大いなる発展が期待できること示す好例であると思います。逆に、物理学→数学でも新たな発展が期待できることでしょう。ハイゼンベルクが量子力学（行列を用いた計算法をとったので行列力学とも呼ばれる）を発見したとき、ハイゼンベルクは行列の存在を知らず、自分で行列の手法を考案したとも伝えられています。行列はその時代、数学の分野では既知でしたので、ハイゼンベル

Materials Research Meeting 2019

日時：2019年12月10日（火）11日（水）12日（木）13日（金）14日（土）

会場：横浜シンポジア

Materials Research Meeting 2019 (MRM2019) が開催され、本新学術領域もそのシンポジウムの一つ「Mathematical Materials Science – Mathematical Approaches for Materials Design in the Data Driven Society –」に参画いたしました。その名の通り、本新学術領域のメンバー含む多くの発表者によって、数学と材料科学の融合をテーマに数多くの研究結果が紹介されました。本シンポジウムは3日間にわたり、9つのオーラルセッションと1つのポスターセッションからなりました。

発表トピックは、数学を共通項として集まっていることが特徴的でした。MRM 2019 で発表された成果より、異分野間の協奏による研究の萌芽が感じられました。結果として、本新学術領域が材料科学の発展に強く寄与できることが期待できる形で終幕しました。



A03班 班会議

日時：2020年1月28日（火） 会場：名古屋大学理学部 B 館 B114

本新学術領域 A03 班の班会議が名古屋大学で開催されました。A03 班のメンバー間での問題意識の共有、ならびに新たな研究課題の模索を目的として、活発な議論が交わされました。まず材料科学分野の吉川浩史氏（関西学院大学）、高見誠一氏（名古屋大学）、佐野正人氏（山形大学）により現在進行中の課題ならびに研究遂行における問題点の紹介が行われました。特に、吉川氏により MOF を鋳型とする材料の作製、高見氏により界面活性剤を用いた多連続構造の形成、佐野氏によりカーボンナノチューブの同期現象についての発表が行われました。それらに対して本領域の幾何学分野の専門家から問題意識の確認および極小曲面理論の観点からアプローチの提案が行われました。その結果、A03 班の研究の新展開が期待される内容となりました。



クは行列の発見・発明者として歴史に名を残すことはありませんが、もしも、その時代にまだ行列の考え方が確立されていなかったならば、ハイゼンベルクは物理学だけでなく数学においても歴史的な発見をしたということになります。このような異分野間の交流による両分野の発展は、分野間のシナジー効果によるものとも解釈され、今後も積極的に進めていくべき課題であると考えられます。

超弦理論の発展に大きく貢献し、現在も活躍を続けるエドワード・ウィッテン博士は2014年の京都賞受賞記念講演で、「ここで話しておかなければならないのは、17世紀、18世紀、それに19世紀の大半でさえ、数学者は同時に物理学者でもあるのが普通だったのに、ところが20世紀になると、数学と物理学という2つの学問は別々の道を歩むようになったようです。（公益財団法人稲盛財団発行の資料より抜粋）」と語っています。20世紀以降の数学と物理学の関係は、近づいたり離れたり・・・の波があるようですが、近年は、フィールズ賞受賞のテーマが物理学より派生したものが多くなっていることから、再び数学と物理学が接近する方向にあるのかもしれませんが。私たちの新学術領域研究においても、計画班研究のほかに27の公募研究が加わり、様々なバックグラウンドをもつ研究者が集まりました。既にいくつかの結果が出始めているようですが、異分野間の交流によって目から鱗が落ちるような結果が出てくるのでは・・・と、楽しみにしています。

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）。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

2019年

11月27日-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日-8日 研究集会「離散幾何解析とその周辺 2019」
会場：CIC 東京 5F

12月10日-14日 Materials Research meeting 2019
会場：横浜シンポジウム

2020年

1月28日 A03 班会議
会場：名古屋大学理学部 B 館 B114

今後の行事予定

2020年2月17-18日 研究会「トポロジカル表面状態、ブレイクとソリトン、指数定理」
会場：大阪大学理学部 南部陽一郎ホール

2020年2月24-28日 Workshop "Topological phenomena in non-Hermitian and non-equilibrium systems"
会場：東北大学片平キャンパス AIMR

【延期決定】 データ駆動科学チュートリアル講演（合同シンポジウム）
2020年3月4日 会場：金沢大学サテライトプラザ

【延期決定】 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～
2020年3月13日 会場：九州大学伊都キャンパス

【中止決定】 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」
2020年3月14-15日 SESSION "Young Mathematicians' Challenge"
会場：科学技術振興機構（JST）東京本部 B1 大会議室

【延期決定】 領域会議・成果報告会
2020年3月21-22日 会場：東北大学片平キャンパス AIMR

募集

新学術領域研究推進のための研究者募集に関しては <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. 05 編集担当：奥川 亮、池田 進（東北大学 AIMR）