

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. 09

B01 班代表挨拶

2011年の米国 Materials Genome Initiative を皮切りに材料科学へのアプローチは大きく様変わりしました。これまで研究者の経験と勘に基づいて進められてきた材料開発の世界に、数理統計に根ざしたデータ駆動科学の手法が急速に取り入れられました。世界中で材料分野の大規模データベース構築が推進されるとともに、材料データを大量生成するための実験環境の自動化やシミュレーション環境の高度化も進みつつあります。このような世界的動向を背景に、B01 班では「物質・材料科学のための情報科学基盤」の研究を推進します。

近年ではプログラミングに必要なライブラリが整備され、誰もが機械学習をはじめとした統計処理・情報処理技術を容易に利用することができます。材料科学研究の現場でも、従来のデータ解析ツールと併用して高度な機械学習アルゴリズムなどが用いられることが少なくなってきました。しかし、材料の機能は物理、化学、幾何的構造の条件が複雑に関係しあって発現しており、その理解には出来合いの情報技術をツールとして利用するだけでは不十分です。B01 班が目指すのは、物理、化学、幾何学といった複数の分野の知識を取り入れながら、材料科学を深化させるための情報科学そのものを構築することです。このような融合領域は新材料の探索や材料データの高度な解析といった従来のマテリアルズ・インフォマティクスへ貢献するだけでなく、材料という複雑な対象を舞台にして情報科学自体をより深化させることが期待されます。

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 Teruhisa



研究分野: 統計物理

研究テーマ: 非平衡統計力学とその情報科学への応用

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。

立教大学大学院
人工知能科学研究科 教授

大西 立顕

OHNISHI Tateaki



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。

論文・書籍紹介

A03 班のこれまでの成果については下記の文献が参考になります。

- [1] R. Okugawa, H. Oshiyama, M. Ohzeki, "Mirror-symmetry-protected dynamical quantum phase transitions in topological crystalline insulators", Phys. Rev. Res. 3, 043064 (2021) 9.
- [2] S. Tokuda, S. Souma, K. Segawa, T. Takahashi, Y. Ando, T. Nakanishi, T. Sato, "Unveiling quasiparticle dynamics of topological insulators through Bayesian modelling", Communications Physics 4 170 (2021).
- [3] T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, "Viscosity Overshoot in Biaxial Elongational Flow: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ring-Linear Polymer Mixtures", Macromolecules (2021).
- [4] K. Hagita, T. Aoyagi, Y. Abe, S. Genda, T. Honda, "Deep learning-based estimation of Flory-Huggins parameter of A-B block

3 ページへ続く

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、材料が持つ複雑なネットワーク構造を数値化して構造と機能の関係を明らかにします。具体的には、架橋高分子ネットワークを複雑ネットワーク指標を用いて解析することで構造と力学物性の相関を説明できる可能性を示しました。また、化学反応データベースを利用して逆合成経路を予測するために、分子の構造を表現したフィンガープリントの類似度を効率的に計算するアルゴリズムを開発し、クラスタリングの手法を用いて化合物空間の幾何学的特徴を明らかにしました。

B01-2 では、材料の観察によって得られた2次元あるいは3次元的な構造データを解析することによって、物質の構造と機能の関係を明らかにします。具体的には、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化を担うキャリアの有効ポテンシャルを推定して電気伝導性を予測しました。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想しました。

B01 班ではこれらの研究に加え、それぞれユニークな視点から4つの公募研究も実施されています。B01 班は情報科学的視点から物質・材料へアプローチすることで、対象に依存しない普遍的な方法論を材料科学に提供することを目指しています。この研究は対象を絞り込むことで深い理解を目指すA01、A02、A03 班の研究を有機的に結びつけることが期待されます。

2 ページの続き

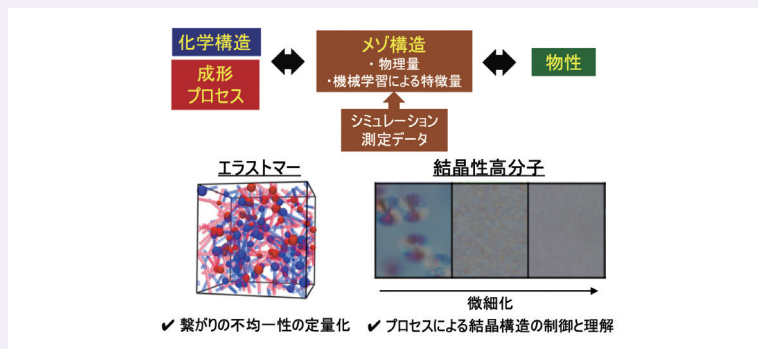
copolymers from cross-sectional images of phase-separated structures", Sci Rep 11 (1) (2021) 12322.

- [5] R. Okugawa, R. Takahashi, K. Yokomizo, "Non-Hermitian band topology with generalized inversion symmetry", Physical Review B 103, 205205 (2021).
- [6] Yoh-ichi Mototake, "Interpretable conservation law estimation by deriving the symmetries of dynamics from trained deep neural networks", Physical Review E 103, 033303 (2021).
- [7] K. Hagita, T. Murashima, "Effect of chain-penetration on ring shape for mixtures of rings and linear polymers", Polymer 218 (2021), 123493.
- [8] Y. Tsuji, K. Okazawa, Y. Kobayashi, H. Kageyama, K. Yoshizawa, "Electronic Origin of Catalytic Activity of TiH₂ for Ammonia Synthesis", J. Phys. Chem. C 125(7) (2021) 3948-3960.
- [9] Y. Tsuji, K. Yoshizawa, "From Infection Clusters to Metal Clusters: Significance of the Lowest Occupied Molecular Orbital (LOMO)", ACS Omega 6(2) (2021) 1339-1351.

B01班 公募研究紹介

研究内容

- 研究 題目** ▶ 高分子材料の階層構造を記述する情報科学的手法の確立
- 研究 計画** ▶ エラストマーや結晶性高分子のシミュレーション・実験データから、情報科学的手法に基づきメゾ構造の特徴量・物理量を抽出し、物性への構造物性相関を構築する。



研究代表者

九州大学
先導物質化学研究所 助教

天本 義史

AMAMOTO Yoshitumi



研究分野：高分子科学と情報科学の学際領域

研究概要：高分子科学と情報科学の融合研究を推進しています。数理・データサイエンスの手法を用いて、高分子材料の高次構造を反映した本質的な情報を抜き出し、物性との関連性を明らかにします。また、複数の物性に対する高分子の成形プロセスやモノマー配列の多目的最適化などに取り組んでいます。

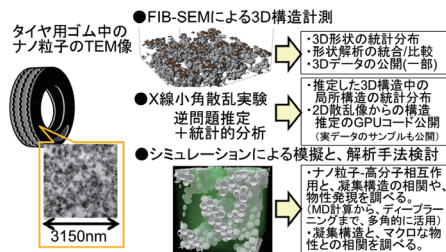
研究内容

- 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

ゴム中ナノ粒子やその周辺のポリマーネットワークについて、それらの構造と物性／機能の相関を解明していく。(1) 製造条件を変えたゴム中のナノ粒子構造をFIB-SEMで観察し、詳しく解析する。そのための解析手法も検討する。(2) ナノ粒子とポリマーの界面の相互作用によるナノ粒子凝集構造や界面構造の影響を調べる。(3) ナノ粒子とバウンダーラーが作るフィラーネットワークについて、構造－機能相関を明らかにする。

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

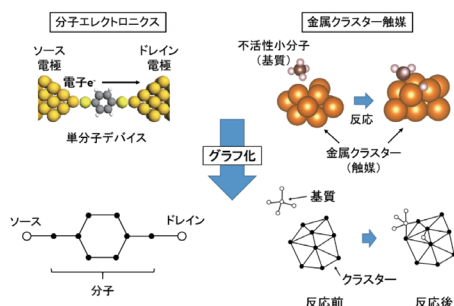
研究テーマ：高分子材料中ナノ粒子の凝集構造やその物性に関する計算科学研究

研究概要：架橋高分子ネットワーク中にナノ粒子が充填されたゴム材料に関して、ナノ粒子やその周辺にあるバウンダーラーのネットワーク構造が、物性・機能に与える影響を解明するために、SPRING-8の小角散乱データやFIB-SEMなどの電子顕微鏡データについて、分子シミュレーションを含む応用数学的な手法で解析する研究を進めている。

研究内容

研究 題目 ▶ 化学グラフ理論による物質解析および物質探索

研究 計画 ▶ 本研究では、グラフ理論における隣接行列と固体物理における強結合近似のハミルトニアンとの類似性を利用して、新規な物質の開拓や解析を行う。



研究代表者

九州大学
先導物質化学研究所 助教

辻 雄太



TSUJI Yuta

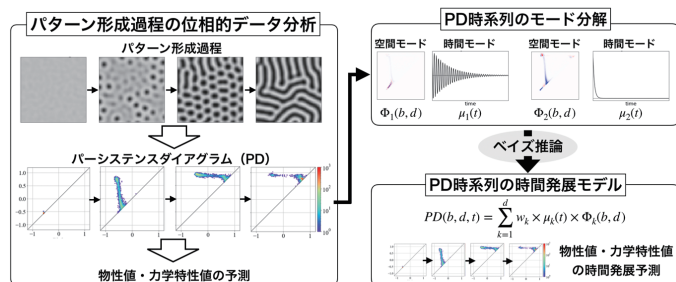
研究 分野：理論化学・数理化学

研究概要：原子を点、結合を辺とすれば物質はグラフとして表すことができる。このような化学グラフに基づき、物質のトポロジカルな性質を解析することで、物質の諸物性の理解と予測が可能である。本研究では、化学グラフ理論の知見を分子エレクトロニクスやクラスター触媒の分野に適用することで高機能デバイスや触媒のための物質の解析と探索を行っている。

研究内容

研究 題目 ▶ トポロジカルデータ分析によるパターン形成過程の縮約モデル構築

研究 計画 ▶ 位相的データ分析を用いて抽出された特徴量空間で、パターン形成過程の時間発展モデルを構築します。



研究代表者

統計数理研究所
統計的機械学習研究センター
特任助教

本武 陽一



MOTOTAKE Youichi

研究 分野：データ駆動科学、計算物理、機械学習

研究概要：高分子材料や磁性材料をはじめとする多様な材料において、原子・分子や磁気モーメント等の集合が形成する複雑な空間パターンとそのダイナミクスは、材料特性の発現と密接に関係しています。私は、位相幾何学に基づいて材料構造から大胆な粗視の特徴量を抽出できる位相的データ分析法と、機械学習による解釈可能なダイナミクスモデルの構築法を融合することで、パターンダイナミクスに基づく材料特性発現機構の解明を目指しています。

The 21st International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design

日時：2021年9月26日（日）27日（月）28日（火）29日（水） 会場：Zoomによるオンライン開催

今年度で満了する本プロジェクトの成果報告、総括及び今後の課題をまとめるために新学術領域全体のこの国際会議が開かれました。B01班からは公募班の天本義文氏にPlenary talkとしてご講演をしていただきました。また研究代表者である大西立顕氏の他に、公募班の辻雄太氏、本武陽一氏、萩田克美氏の3名にInvite talkとしてご講演いただきました。

全4日間という長い国際会議となりましたが本プロジェクト全体で得られた結果は非常に多く、これまでの研究で全ての班の関わり合いができていたこともあり、活発な議論・意見交換が行われました。

第2回 A02 班会議

日時：2021年7月18日（日） 会場：Zoomによるオンライン開催

B01班はA01班、A02班、A03班それぞれの研究成果や研究データを基に計算機シミュレーションなどを行うため、A02班の研究代表者である下川航也氏のご推薦でB01班の萩田克美氏にご講演いただきました。

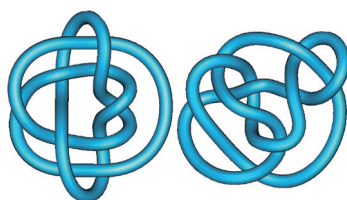
ネットワーク構造に関してどのようなアプローチで計算シミュレーションを行うか丁寧に解説していただいたこともあり、A02班内で生じていた課題に対するシミュレーション的解決案や、B01班内で生じていた課題に対する数学・物理的理論の解決案など、どちらの班も今後の研究方針を決定するための議論が活発に行われました。

HARMONICS
Column for math-mate collaboration

第9話 トポロジーと高分子

私の専門はトポロジーで、特に結び目理論と3次元多様体論と言われるものです。普段は、結び目理論はひもの結び方に関する研究で、3次元多様体論は宇宙などの3次元の世界の形の分類を行います、という感じで説明しています。ひもの結び方は幾何学に詳しくない方でもイメージは伝わる気しますが、宇宙の形の分類の方の説明はどれくらい伝わっているのか分かりません。

結び目理論において、結び目の一覧表が120年位前に作られています。その当時の表には、10交点の結び目のところに同じものが二つ載っているというミスがあります。この二つの図はPerko pairと呼ばれています。（図参照。ソフトウェアKnot Plotによる描画です。）これは違う結び目に見えますが、動かしていくと同じ形にすることが出来るので、同じ結び目です。面白いことに結び目理論の研究者は70年ほどその間違いに気づかず（または興味を持たず）過ごしていました。結び目は親しみやすい対象であるので、小学生、中学生、高校生向けの模擬講義を担当することがあります。小中学生向けの模擬講義の時に、その辺りの背景を話して、問題として出すことがあります。何人かの小学生は、実際にひもを動かすことで同じであることを確認出来ていました。



7 ページへ続く

高分子もひも状の構造が絡むことがあり、その解析に結び目理論などトポロジーの議論が応用出来ます。最近色々なところでトポロジーの応用に関する記事を見ることが出来、嬉しく思っています。「高分子のトポロジー」と言った場合には、主に2つの意味で使われる場合が多いようです。一つ目は、高分子内部の繋がり方の構造を表すトポロジーであり、例えばグラフ理論的議論を用いることが出来ます。二つ目は高分子の空間の中での形状を表すトポロジーであり、結び目理論などが用いられます。高分子の二つのトポロジーについては、“Topology of Polymers” (Springer Briefs) でも議論していますので、参照頂ければと思います。

一つ目のトポロジーの例として、A02-1 班の分担者をご担当頂いた東工大名誉教授の手塚先生の合成された様々なグラフの形状をもつ多環状ポリマーが挙げられます。特に、 $K_{3,3}$ グラフの構造を持つポリマーは、アメリカ数学会のホームページに論文の紹介記事が掲載されるなど、数学的な観点から大変興味深いものです。多環状ポリマーは、パーツとなるポリマーをいくつか用意し、それを繋げることにより作られます。説明すると簡単に聞こえますが、それらが作り上げるグラフを分類し、分子量や慣性半径を考慮した上で求める分子の分離が必要になるなど、技術的には大変難しいものです。

$K_{3,3}$ グラフなどのグラフが作る結び目は、結び目理論において空間グラフと呼ばれます。私の研究室ではそのリストの作成を行いました。これは二つ目のトポロジーの観点です。結び目の一覧表作りよりも空間グラフの表作りは何倍も大変ですので、それほど多くのリストは作れませんが、その中には図にあるような三葉結び目から自然に作れるような興味深い形が見つかったりもします。この構造はトポロジカルキラリティを与えます。多環状ポリマーの作る空間グラフの構造はこれからの研究課題であると思いますが、その構造はポリマーの特性に影響を与えることが期待されます。数学の観点から、興味深い構造を提案出来ればと思います。



もう一つの研究分野の3次元多様体論については、以前は高分子の研究との関連を意識していなかったのですが、今回の新学術領域研究ではそのような研究を行うことが出来ました。それは3重周期的な相分離構造の分類研究への応用で、ブロックコポリマーメルトのマイクロ相分離構造などの数学モデルに対応します。

3重周期的な構造の基本領域として立方体を考えます。立方体の上下、左右、前後の面では相分離構造から得られる模様が見えますが、周期的なものを考えているのでそれぞれの対で同じ絵が見えています。そこで、それぞれの面を貼り付けて同一視することを考えます。そうすると立方体から、3次元トーラスという3次元の閉じた世界を作ることが出来ます。これは、正方形の上下、左右の辺をそれぞれ同一視すると、ドーナツの表面である2次元トーラスが出来るという例の次元が一つ上がったバージョンです。3次元トーラスも宇宙のモデルの一つと言えます。実際、宇宙の形の候補は他にもあって、十二面体の面を六つの対に分け、それぞれを貼り合わせて出来るモデルを考えている人もいます。

相分離構造があると、3次元の空間がいくつかの領域に分かれます。周期的な場合には、3次元トーラスがいくつかの領域に分かれる構造が得られます。その3次元トーラスの分解の分類を与えると、相分離構造の分類を与えることが出来るというのがこの研究のアイデアです。また、超分子などの構造で、絡み合うネットワーク構造が最近注目されていますが、こちらも周期的な場合には、この手法を用いて研究出来ることも分かりました。

このように、純粋数学の研究が応用研究に繋がる方法は予想しない形で現れる場合があります。大学院生時代から、結び目を使って3次元多様体を作る方法である結び目のデーン手術の研究を行っていました。あえて言うと、宇宙の形を知りたいという動機でこの分野を研究していましたが、私のこの分野の結果が応用されたのはDNA組換え酵素の研究でした。さらにその研究は、流体の渦構造の研究に応用されています。

色々なものの形が詳細に観測出来るようになり、これまで想像が出来なかった応用が議論されるのは大変興味深いものです。今後も、色々なトポロジーの応用の可能性を探っていきたいと思っています。

下川 航也

1993年東京大学理学部数学科卒業、1995年東京大学大学院数理科学研究科数理科学専攻修士課程修了し、同博士課程へ進学。1998年東京大学大学院数理科学研究科数理科学専攻博士課程修了。翌年東北大学大学院情報科学研究科助手として3年間、そのうち1年間はカリフォルニア大学の訪問研究員として活動。その後埼玉大理学研究科数学科専攻助教授として5年、同大学准教授として6年を経て、同大学教授に就任。現在は3次元多様体論、結び目理論、および、それらの生物学、化学、物理学、材料科学などへの応用に関する研究を行っている。

活動記録

2021 年

- 定期開催 オンラインセミナー「ディープラーニングと物理学 オンライン」
(<https://cometscome.github.io/DLAP2020/>)
- 7 月 18 日 第 2 回 A02 班会議
- 9 月 26 日 - 29 日 International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design
(https://www.math.nagoya-u.ac.jp/~naito/DGA_2021_09.html)

※会場の記載がない場合はオンライン開催です。



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. 09 編集担当：福田 瑞季、渡部 淳、池田 進（東北大学 AIMR）