

機関番号：11301

領域設定期間：平成29年度～令和3年度

領域番号：2902

研究領域名（和文）次世代物質探索のための離散幾何学

研究領域名（英文）Discrete Geometric Analysis for Materials Design

領域代表者

小谷 元子 (KOTANI Motoko)

東北大学・材料科学高等研究所・教授

研究者番号：50230024

交付決定額（領域設定期間全体）：（直接経費）1,011,800,000円

研究成果の概要

離散と連続の関係を幾何学的に理解する「離散幾何解析学」を材料科学の諸課題と連携させ、ミクロ・メゾ構造とマクロな機能物性を双方向に行き来できる新しい融合分野の開拓を目指した。「物質を階層的ネットワークとして理解すること」を共通の大目標として「トポロジカル材料」「高分子材料」「連続多孔質材料／曲面材料」をそれぞれ対象とする3つの研究項目に取り組み、物質材料の多様な課題に対して、数学を用いて高次元で複雑な構造に含まれた本質的な情報を取り出し、ミクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための新しい概念や理論、手法や道筋を示せた。参画した若手研究者は様々に数理・データを用いた物質探索を体験してデジタル時代の物質科学に資する人材に育つなど、物質・材料科学の研究・開発のありかたを大きく変える新しい融合領域を創成した。

研究分野：数学（離散幾何解析学）、理論物理学、材料科学、情報科学

キーワード：離散幾何解析、トポロジカル物質、高分子材料、多連続多孔質材料、指数定理、深層学習、結び目理論、極小曲面、離散曲面、複雑ネットワーク、機械学習

1. 研究開始当初の背景

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はなく、時には生活のスタイルや価値観を変える力を持っている。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る。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あり、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る。

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る。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することで、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た。

2. 研究の目的

前述の背景を踏まえ、本領域では、日本が優位性を持つ数学と材料科学が協働して、従来の枠に収まらない融合領域を創成する。また、学問の成熟と時代の要請に適った人材を育成して我が国の学術水準の向上・強化につなげることを目的とする。

そのために、離散と連続の関係を幾何学的に理解する「離散幾何解析学」を材料科学の諸課題と連携させて、物質のミクロ・メゾ構造を幾何学の言葉で記述し、マクロな物性・機能にどう関わるかの解析（順問題）や、求められる機能物性を実現するミクロ・メゾ構造の特定（逆問題）を可能とする融合分野の開拓を目指す。

3. 研究の方法

本領域では、数学と物質科学の連携により「物質を階層的ネットワークとして理解すること」

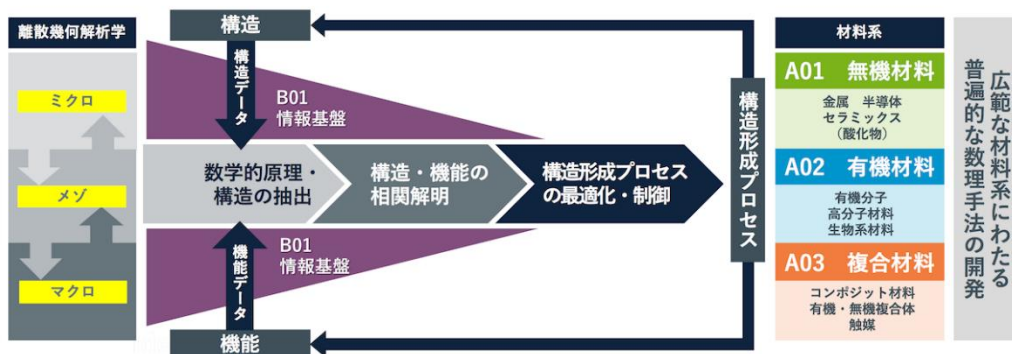
を共通の大目標として3つの研究項目 A01, A02, A03 を置く。

A01 では、トポロジーという数学の概念を導入することで初めて理解できる、従来の固体物理学の体系では説明できない伝導メカニズムをもつ「トポロジカル物質」を対象に、無限次元の系を有限次元の系で近似したモデルを経由して本質的な情報を抽出する「指数」という概念を用いて、物理学の格子ゲージ理論の理解と拡張を行う。また、物質を重力で取り扱う超弦理論のホログラフィー原理を用いて、相互作用の入ったトポロジカル物質系の理解を目指す。

A02 では、有機系材料や高分子材料の構造をネットワークとしてとらえ、3次元空間内の結び目理論などの位相不変量を調べる手法と高度な階層的シミュレーションを組み合わせ、構造と物性の相関の解明を目指す。

A03 では、石けん膜が作る構造として知られる極小曲面の概念を原子分子が作るナノ構造の世界に持ち込むことで、材料物質の構造形成の研究を行う。特に、複雑につながった構造を分類・最適化する「離散曲面論」を構築して、目的の機能物性を持つ界面構造の作成を目指す。

これら、A01, A02, A03 の研究項目の推進や連携を後押しするために、情報科学的手法の開発や導入を担当する研究項目 B01 を置く。



マイクロ・メゾ・マクロの階層に注目し、階層ネットワークとして解析することで、物質のプロセス・構造・機能の相関原理を解明（順問題から逆問題へ）

4. 研究の成果

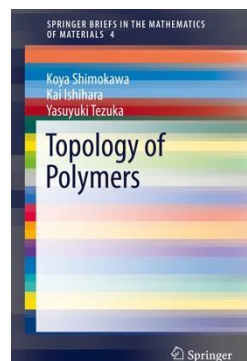
日本が強い分野でありながら、これまでほとんど出会いのなかった数学と物質・材料科学という両分野間をブリッジし、互いに刺激を与え合うことで新しい概念や手法が開発された。

【数学とトポロジカル材料】

幾何学における微分方程式の局所化・有限次元近似・離散化の概念を融合し、トポロジカル相の研究において「指数」の概念の一般化に成功した。これにより物性物理側には「高次元トポロジカル指標」に代表される先駆的な概念が、数学側には相互作用がある系に触発された指数定理の展開・深化がもたらされた。また、離散幾何解析からヒントを得て素粒子論の手法で創発した時空を物質のspin配列から生まれた深層ニューラルネットワークと捉えて解く枠組みが生み出され、ディープラーニングと物理学が融合した革新的な学術領域の開拓が始まった。

【数学と高分子材料】

高分子のトポロジーや相分離構造を解析する数学的手法を確立したことで、分子やその集合体を作る「形」が階層を超えてどのようにマクロな物性・機能に繋がるかを調べられるようになり、Springer Briefsとしてテキストも出版された。分子シミュレーションとネットワーク科学・機械学習を組み合わせたデータ科学的アプローチにも顕著な発展があった。これらは外挿領域に及ぶ高度な材料設計やプロセス設計につながる基盤として、学術・産業の両面で大きな波及効果を与えつつある。



【数学と連続多孔質材料／曲面材料】

多孔質構造の分類と形成のために3次元トポロジー的手法や極小曲面論などの微分幾何学的手法を構築して、原子・分子が作るミクロな構造とマクロな機能物性との関係の解析に取り組み、離散幾何解析と材料科学の融合を切り拓いた。炭素ナノ材料や有機金属構造体 (MOF) のような実材料系で有用性を示せたことで産業界から関心が寄せられる一方、物質科学の課題から刺激を受けて離散幾何学自体も豊かに発展した。

物質材料の多様な課題に対して、数学を用いて高次元で複雑な構造に含まれた本質的な情報を取り出し、ミクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための道筋を示せたことは、国内外を見ても先進的な成果である。また、領域に参加した研究者は、様々に数理・データを用いる物質探索・開発を体験し、デジタル時代の物質科学に資する人材として育った。これらにより、物質・材料科学の研究・開発のありかたを大きく変える融合領域の創成を達成した。

以下に成果の例をいくつか挙げる。

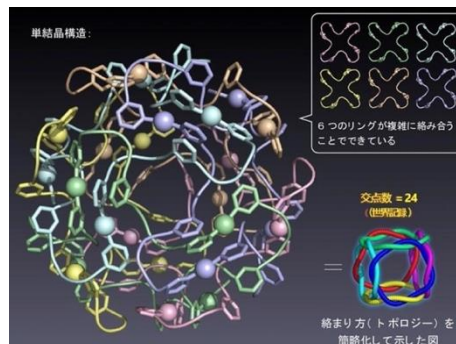
(1) 機械学習と物質科学の融合

物質を重力で取り扱う超弦理論のホログラフィー原理で発生する創発時空を、物質のスピンの配列から生まれた深層ニューラルネットワークと考える方法を探索した。離散幾何学的な時空と機械学習・物質科学を融合する研究を進め、深層ボルツマンマシンと呼ばれるニューラルネットワークがホログラフィック原理の重力側の物質場の経路積分とみなせる形式を提案した。さらに、物質に双対な重力時空を再構築するため、離散幾何学的手法を応用した機械学習のニューラル常微分方程式を用い、創発時空を発見するプロトコルを開発した。一連の成果により、革新的な学術領域の開拓が始まった。[文献 24]



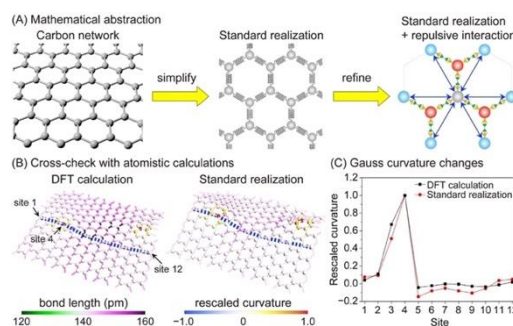
(2) ペプチド鎖が精密に編み込まれたナノカプセルの合成に初成功

自己組織化の原理を利用して、ペプチド鎖 24 本と銀イオン 24 個の計 48 成分が精密に集合して複雑に編み込まれた球殻構造を世界で初めて合成することに成功した。分子構造解析と数学的な結び目理論に基づくトポロジー解析を実施することにより、この構造はペプチド鎖 4 本と銀イオン 4 個が交互に連なってできたリングが 6 つ、立方体状に絡まったトポロジーであることを示した。ナノ物質合成において、分子鎖を精密に編み込むことで中空の球殻構造(カプセル)を人工合成して幾何学的構造まで同定した例はなく、画期的な成果といえる。[文献 21, 22]



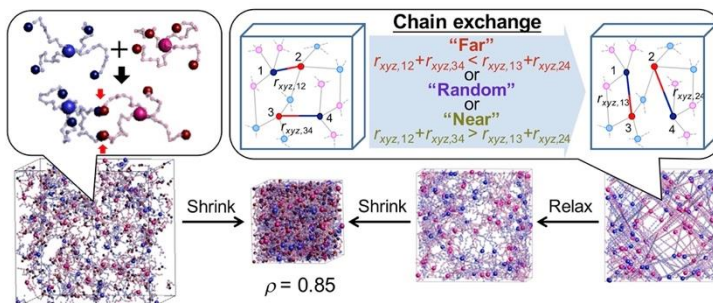
(3) 数学を取り入れて触媒を「設計」

安定な結晶格子の探索を数学的に行うために提案された「標準実現」の考え方を炭素のナノ構造の予測に応用すべく、斥力項を入れた SRR1 モデルを構築した。これは π 共役な離散曲面系において第一原理分子動力学計算を代替しうる精度で高速な構造予測を可能にし、ガウス曲率と窒素ドーブエネルギーの相関を捉えることができた。さらにグラフェン様の炭素材料を実験的に作製し、その触媒能力を検証することで、数学を用いた材料設計の有用性を実証した。求める触媒機能を発現する異元素のドーブ箇所を決め、対応する離散曲面をデザインする「逆推論」の手法として期待される。[文献 14]



(4) 複雑ネットワーク指標を用いたポリマーの力学物性の解析

弾性を持った高分子であるエラストマーは、既存のモデルでは分岐数と架橋密度のみで応力が決まるとされており、ポリマー鎖の繋がりや影響を加味してゴム弾性を記述することはできていなかった。そこで、複雑ネットワーク科学の手法を応用して、架橋点の実空間上の位置とネットワーク上の位置の両方を考慮した新たな



中心性指標を開発した。重み付きネットワーク表現を用いてエラストマーの力学物性を解析した結果、ネットワークの中心にいる架橋点、かつ、初期の架橋点間距離が大きい架橋点ほど応力に対して寄与すること、距離を考慮した新たな近接中心性の指標を導入したことで架橋点間距離と架橋点のゆらぎの両方を統一的に記述できることを明らかにした。これにより、伸びきり鎖による応力集中の記述も可能になった。[文献 20]

5. 主な発表論文等（受賞等を含む）

原著論文（査読有）

1. T. Yoshida, T. Mizoguchi, Y. Hatsugai, Non-Hermitian topology in rock-paper-scissors games. *Scientific Reports* 12, 7 (2022).
2. K. Obara, Y. Kageyama, S. Takeda, Self-Propulsion of a Light-Powered Microscopic Crystalline Flapper in Water. *Small* 18, 10 (2022).
3. M. Kotani, H. Naito, C. Tao, Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions. *Tohoku Mathematical Journal* 74 (2022).
4. H. Fukaya, M. Furuta, Y. Matsuki, S. Matsuo, T. Onogi, S. Yamaguchi, M. Yamashita, Mod-two APS index and domain-wall fermion. *Letters in Mathematical Physics* 112, 32 (2022).
5. T. Aoyama, K. Kato, K. Urayama, Marked Sensitivity of Ultimate Elongation to Loading Axiality in Polyrotaxane Gels with Largely Slidable Cross Links. *ACS Macro Letters* 11, 362-367 (2022).
6. T. Yoshida, Real-space dynamical mean field theory study of non-Hermitian skin effect for correlated systems: Analysis based on pseudospectrum. *Physical Review B* 103, 9 (2021).
7. H. Yoshida, H. Katsura, Rigorous Results on the Ground State of the Attractive SU(N) Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 126, 100201 (2021).
8. 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, 8 (2021).
9. K. K. Takahashi, Y. Amamoto, H. Kikutake, M. I. Ito, A. Takahara, T. Ohnishi, Random Forest Analysis of X-ray Diffraction and Scattering Data on Crystalline Polymer. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 20, 103-105 (2021).
10. K. Okada, Y. Tanaka, T. Inose, H. Ujii, H. Yoshikawa, D. Tanaka, Electrolytic synthesis of porphyrinic Zr-metal-organic frameworks with selective crystal topologies. *Dalton Transactions* 50, 5411-5415 (2021).
11. M. I. Ito, Y. Amamoto, T. Ohnishi, Change of Weighted Network Structure of Elastomer during Uniaxial Elongation. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 20, 89-91 (2021).
12. K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, Mathematical Classification and Rheological Properties of Ring Catenane Structures. *Macromolecules* 10.1021/acs.macromol.1c01705, 12 (2021).
13. K. Hagita, T. Aoyagi, Y. Abe, S. Genda, T. Honda, Deep learning-based estimation of Flory-Huggins parameter of A-B block copolymers from cross-sectional images of phase-separated structures. *Scientific Reports* 11, 16 (2021).
14. A. Dechant, T. Ohto, Y. Ito, M. V. Makarova, Y. Kawabe, T. Agari, H. Kumai, Y. Takahashi, H. Naito, M. Kotani, Geometric model of 3D curved graphene with chemical dopants. *Carbon* 182, 223-232 (2021).
15. Y. Amamoto, H. Kikutake, K. Kojio, A. Takahara, K. Terayama, Visualization of judgment regions in convolutional neural networks for X-ray diffraction and scattering images of aliphatic polyesters. *Polym. J.* 53, 1269-1279 (2021).
16. T. Yamaguchi, Y. Onoue, Y. Sawae, Topology and Toughening of Sparse Elastic Networks. *Phys. Rev. Lett.* 124, 5 (2020).
17. N. Shibata, N. Yoshioka, H. Katsura, Onsager's Scars in Disordered Spin Chains. *Phys. Rev. Lett.* 124, 6 (2020).
18. H. Fukaya, N. Kawai, Y. Matsuki, M. Mori, K. Nakayama, T. Onogi, S. Yamaguchi, The Atiyah-Patodi-Singer index on a lattice. *Progress of Theoretical and Experimental Physics* 2020, 11 (2020).
19. H. Fukaya, M. Furuta, S. Matsuo, T. Onogi, S. Yamaguchi, M. Yamashita, The Atiyah-Patodi-Singer Index and Domain-Wall Fermion Dirac Operators. *Communications in Mathematical Physics* 380, 1295-1311 (2020).
20. Y. Amamoto, K. Kojio, A. Takahara, Y. Masubuchi, T. Ohnishi, Complex Network Representation of the Structure-Mechanical Property Relationships in Elastomers with Heterogeneous Connectivity. *Patterns* 1, 9 (2020).
21. T. Sawada, A. Saito, K. Tamiya, K. Shimokawa, Y. Hisada, M. Fujita, Metal-peptide rings form highly entangled topologically inequivalent frameworks with the same ring- and crossing-numbers. *Nature Communications* 10, 921 (2019).
22. T. Sawada, Y. Inomata, K. Shimokawa, M. Fujita, A metal-peptide capsule by multiple ring threading. *Nature Communications* 10 (2019).
23. S. Honda, M. Oka, H. Takagi, T. Toyota, Topology-Reset Execution: Repeatable Postcyclization Recyclization of Cyclic Polymers. *Angewandte Chemie-International Edition* 58, 144-148 (2019).
24. K. Hashimoto, S. Kinoshita, K. Murata, Einstein Rings in Holography. *Phys. Rev. Lett.* 123, 5 (2019).
25. K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, Deep learning and the AdS/CFT correspondence. *Physical Review D* 98 (2018).
26. M. Kotani, H. Naito, T. Omori, A discrete surface theory. *Computer Aided Geometric Design* 58, 24-54 (2017).

書籍

1. A.Tanaka, A.Tomiya, K.Hashimoto "Deep Learning and Physics" 全 207 頁, Springer Nature (2021).
2. 田中 章詞、富谷 昭夫、橋本 幸士『ディープラーニングと物理学 原理がわかる、応用ができる』全 300 頁、講談社 (2019).
3. K.Shimokawa, K. Ishihara, Y. Tezuka "Topology of Polymers" 全 89 頁、Springer, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials (2019).
4. H. Naito "Trivalent Discrete Surfaces and Carbon Structures" 全 103 頁、Springer、SpringerBriefs in the Mathematics of Materials [掲載決定].
5. 手塚 育士(監修)「環状高分子の合成と機能発現」全 336 頁、シーエムシー出版 (2018).

他

主催シンポジウム等

1. Workshop "Discrete Geometric Analysis and its Applications" 2022.1.7-9 (Online)
2. "International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design" 2021.9.26-29 (Online)
3. "GTF2021 The Geometry & Topology Behind Fabrics at Multiple Scales" 2021.5.20-21 (Online)
4. 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」2021.3.12 (オンライン)
5. 化学工学会第 51 回秋季大会 [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 2020.9.24 (オンライン)
6. Workshop "Topological phenomena in non-Hermitian and non-equilibrium systems" 2020.2.24-28 (Sendai)
7. MRM2019, Symposium B-3, "Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society-" 2019.12.10-14 (Yokohama).
8. "Deep Learning and Physics 2019" 2019.10.31-11.2 (Kyoto)
9. "Polymers and networks via topology and entanglement" 2019.8.7-9 (Tokyo)
10. "Polymers meet Topology" 2019.1.30-2.1 (Tokyo)
11. "The Topology of Nucleic Acids: Research at the Interface of Low-Dimensional Topology, Polymer Physics and Molecular Biology" 2019.3.24-29 (Canada)
12. "AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics" 2019.1.7-8 (Sendai)
13. 「次世代物質探索のための離散幾何学」キックオフワークショップ 2018.2.18 (仙台)
14. "Knots and Polymers: Aspects of topological entanglement in DNA, proteins and graph-shaped polymers" 2017.8.8-10 (Tokyo)

他

パンフレットの作成

News letter 「離散幾何と材料」 vol.1 (2018.4.1) – vol.10 (2022.3.11) まで発行：
紙媒体として関係先に送付するとともに、下記の領域ホームページにて公開

一般向けの情報発信

1. 下川航也：科学雑誌「Newton (ニュートン)」2018 年 6 月号、「ニュートン別冊 数学の世界 図形編」に一般向け解説を掲載
2. 橋本幸士：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」2020.5 から 40 回以上開催 (<https://cometscome.github.io/DLAP2020/>)
3. 赤木和人：「トポロジカルデータ解析コミュニティ」を主催し、2021.5 から主に材料系企業に向けてセミナーシリーズを開催 (<https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/TDA/>)

他

受賞

Andreas Dechant (若手研究者)：Journal of Physics A (Mathematical and Theoretical) より Best Paper Prize 2020 を受賞

他

ホームページ等

[本領域のホームページ](https://www.math-materials.jp/) <https://www.math-materials.jp/>