

領域番号	2902	領域略称名	材料離散幾何解析
研究領域名	次世代物質探索のための離散幾何学		
研究期間	平成29年度～令和3年度		
領域代表者名 (所属等)	小谷 元子（東北大学・材料科学高等研究所・教授）		
領域代表者 からの報告	<p><u>(1) 研究領域の目的及び意義</u></p> <p>日本は物質材料分野で世界の科学と産業をリードしているが、研究者の経験と勘に頼った試行錯誤を超えるアプローチが切に求められている。一方、数学も日本が優位性を持つ領域であり、21世紀に入って複雑現象の記述が可能になってきた。本領域は日本が優位に立つ数学と物質・材料科学の研究者が協働し、「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」の流れを作ることで、従来の物質探索のあり方を変革することを目指す。そこで、材料系によらない普遍的な理解と広範な数理科学的手法の開発を行うべく、4つの研究項目（A01 [無機材料]、A02 [有機材料]、A03 [複合材料]、B01 [情報科学基盤]）を置き、新しい数学分野である「離散幾何解析」により物質・材料の階層ネットワーク構造を記述・理解する。</p> <p>これは、情報科学やデータ科学の力を用いた新たなフェーズの物質・材料科学の進展に寄与するとともに、数学においては複雑な構造を階層的に理解し、離散と連続の相関を調べる離散幾何解析学や離散力学系を大きく進展させる意義深い取り組みである。また、領域研究を推進する中で、数理科学と物質・材料科学の双方の知識と分野を超えたコミュニケーション能力を持つ人材を次世代のリーダーとして育成するものである。</p>		
	<p><u>(2) 研究の進展状況及び成果の概要</u></p> <p>計画研究においてはA01, A02, A03に数学、理論・計算、実験のチームを置いて垂直展開を図った。数学的な定式化や連携の方針が見えている課題を設定し早期に数学と物質・材料科学連携のモデルを生み出すことを目指したところ予想以上の進展が得られ、例えばA01では非コンパクト空間の上の指数定理、APS指数定理とドメインウォールの関係、格子指数定理とドメインウォールの組み合わせの潜在的意義の発見、A02では3つの絡み合うネットワークと共連続構造の分岐曲面の関連についての基礎的研究の完成と力学特性と構造の関係解明、A03ではカーボンネットワークをモデルとした離散曲面基礎理論の完成と細分列の収束および特異点解析、および数学が提案した構造の実現、B01で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など、本領域でなければできない非自明な分野融合成果が得られている。また、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的手法と広範な応用課題を開発することを目的とする公募研究では、数学との連携へ意欲とアイデアを持つ実験研究を多く採択した。計画研究と公募研究、公募研究間の萌芽的連携研究も多数生まれた。今後、水平連携展開を活発化し領域を豊かに成熟していく。戦略的国際連携機関や国際アドバイザーの協力のもと、ネットワーク形成と研究の情報交換を行ってきたが、この基盤を発展させ国際的な活動をより活発化する。</p>		

<p>科学研究費補助金審査部会における所見</p>	<p>A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)</p>
	<p>本研究領域は、「物質を階層的ネットワークとして理解する」という共通認識のもとに、数学者と物質材料科学者、その他多様な専門を持つ研究者が協働して、「数学原理・構造の抽出」、「構造と物性の相関解明」、「構造形成の制御・最適化」の潮流を作り物質探索の在り方を変革することを目指したものである。大きく離れた異分野からなる新学術領域の創出を試みており、分野間で協働して研究を展開していくには、多くの困難が伴うと思われるが、分野の融合が効果的に行われ着実な成果を上げている。研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められ、今後のより一層の進展が期待される。</p> <p>審査結果の所見において、研究計画の一部の見直しと研究領域の構成を検討し早期に具体例を提示することを求められたため、研究領域の構成を公募研究で補完することで、いくつかの萌芽的な例を得るに至っている。数学としては「離散幾何学」をベースにし、従来の数学の主流であった「連続」から「離散」へ着目点のシフトがなされ、数学としても重要な結果が得られている。</p> <p>一方、現状は材料のさまざまな問題を数学の視点からアラカルト的に選択している段階にあるため、今後、実用的な材料の合成や新材料物性の予想にもつながるよう進展することが望まれる。</p>