

領域略称名：材料離散幾何解析
領域番号：2902

令和4年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る研究成果報告書（研究領域）兼
事後評価報告書

「次世代物質探索のための離散幾何学（研究領域名）」

領域設定期間

平成29年度～令和3年度

令和4年6月

領域代表者 東北大学・材料科学高等研究所・教授・小谷 元子

目 次

研究組織

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	3

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額	8
4 研究領域の目的及び概要	9
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	11
6 研究目的の達成度及び主な成果	13
7 研究発表の状況	18
8 研究組織の連携体制	23
9 研究費の使用状況	24
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	26
11 若手研究者の育成に関する取組実績	27
12 総括班評価者による評価	28

研究組織

(令和4年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	17H06460 次世代材料探索のための離散幾何 解析推進	平成29年度 ～ 令和3年度	小谷 元子	東北大学・材料科学高等研 究所・教授	9
A01 計	17H06461 指数定理の展開とトポロジカル表 面状態	平成29年度 ～ 令和3年度	古田 幹雄	東京大学・大学院数理科学 研究科・教授	3
A01 計	17H06462 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	平成29年度 ～ 令和3年度	橋本 幸士	京都大学・理学研究科・教 授	4
A02 計	17H06463 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	平成29年度 ～ 令和3年度	下川 航也	埼玉大学・理工学研究科・ 教授	4
A02 計	17H06464 高分子高次構造の階層的シミュレ ーション	平成29年度 ～ 令和3年度	青柳 岳司	国立研究開発法人産業技術 総合研究所・材料・化学領 域・総括研究主幹	1
A03 計	17H06465 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	平成29年度 ～ 令和3年度	小谷 元子	東北大学・材料科学高等研 究所・教授	2
A03 計	17H06466 ナノ極小曲面論による相分離過程 の大域解析	平成29年度 ～ 令和3年度	内藤 久資	名古屋大学・多元数理科学 研究科・准教授	2
A03 計	17H06467 界面活性剤を用いた多連続多孔質 構造の形成	平成29年度 ～ 令和3年度	高見 誠一	名古屋大学・工学研究科・ 教授	2
B01 計	17H06468 複雑ネットワーク解析に基づく物 質・材料探索	平成29年度 ～ 令和3年度	大西 立顕	立教大学・人工知能科学研 究科・教授	2
B01 計	17H06469 材料観察画像からの機能推定	平成29年度 ～ 令和3年度	一木 輝久	名古屋大学・未来社会創造 機構・特任准教授	2
総括班・総括班以外の計画研究 計 10 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	18H04471 トポロジカル物質の特異な電子・スピン状態と熱電物性との関連の解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	松下 ステファン 悠	東北大学・理学研究科・助教	1
A01 公	18H04472 電子状態解析に基づくトポロジカル物質相の探索	平成 30 年度 ～ 令和元年度	相馬 清吾	東北大学・スピントロニクス学術連携研究教育センター・准教授	1
A01 公	18H04473 光学的な計測法を用いたトポロジカル物質のベリー曲率の観測	平成 30 年度 ～ 令和元年度	Chen Yong	東北大学・材料科学高等研究所・教授	1
A01 公	18H04478 乱れや相互作用のある系のトポロジカル相とその不変量	平成 30 年度 ～ 令和元年度	桂 法称	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授	1
A01 公	18H04481 ナノスケールのスピン構造が誘起するトポロジカル熱電変換物質デザイン	平成 30 年度 ～ 令和元年度	石井 史之	金沢大学・ナノマテリアル研究所・准教授	1
A01 公	18H04482 炭素同素体トポロジーと分子自由度の結合による新規物性の開拓	平成 30 年度 ～ 令和元年度	阿波賀 邦夫	名古屋大学・理学研究科・教授	1
A01 公	18H04484 ドメインウォールフェルミオンで探る格子ゲージ理論のトポロジー	平成 30 年度 ～ 令和元年度	深谷 英則	大阪大学・理学研究科・助教	1
A02 公	18H04469 高速ナノセンシングによる液晶の位相欠陥ネットワーク組換えダイナミクスとレオロジー	平成 30 年度 ～ 令和元年度	藤井 修治	北海道大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04470 数学的アプローチによる新奇超分子系材料創成と解析	平成 30 年度 ～ 令和元年度	山本 拓矢	北海道大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04476 タンパク質や高分子のフラクタル性に起因する普遍的ダイナミクスのテラヘルツ分光研究	平成 30 年度 ～ 令和元年度	森 龍也	筑波大学・数理物質系・助教	1
A02 公	18H04479 光刺激により分子鎖切断・再生を制御可能な均質スターポリマーネットワークの創製	平成 30 年度 ～ 令和元年度	本多 智	東京大学・大学院総合文化研究科・助教	1

A02 公	18H04483 高分子からみあいの階層的記述	平成 30 年度 ～ 令和元年度	増淵 雄一	名古屋大学・工学研究科・教授	1
A02 公	18H04486 ネットワーク状構造物のトポロジーと強靱化	平成 30 年度 ～ 令和元年度	山口 哲生	九州大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	18H04490 外場制御可能な人工原子からなる動的ネットワークの数理構造と機能	平成 30 年度 ～ 令和元年度	斎木 敏治	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授	1
A03 公	18H04475 液体中に分散したカーボンナノチューブの同期現象	平成 30 年度 ～ 令和元年度	佐野 正人	山形大学・大学院有機材料システム研究科・教授	1
A03 公	18H04477 カーボンネットワークの離散曲面論を用いた特性解釈と予測に基づく合成	平成 30 年度 ～ 令和元年度	伊藤 良一	筑波大学・数理物質系・准教授	1
A03 公	18H04487 離散幾何学と滑らかな幾何学をつなぐ幾何解析の創造・展開と物質・材料科学との連携	平成 30 年度 ～ 令和元年度	小磯 深幸	九州大学・マス フォア インダストリ研究所・教授	1
A03 公	18H04489 多角的なアプローチを用いた次数 3 の空間グラフの離散平均曲率一定曲面の研究	平成 30 年度 ～ 令和元年度	安本 真士	日本学術振興会特別研究員 (PD) 受入研究機関: 大阪市立大学	1
A03 公	18H04491 幾何学構造に基づいた多孔性炭素材料の開発	平成 30 年度 ～ 令和元年度	吉川 浩史	関西学院大学・理工学部・准教授	1
B01 公	18H04474 物質構造のスパース推定における信頼性評価法の開発	平成 30 年度 ～ 令和元年度	中島 千尋	東北大学・情報科学研究科・特任助教	1
B01 公	18H04480 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	吉田 靖雄	金沢大学, 数物科学系, 准教授	1
B01 公	18H04488 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	辻 雄太	九州大学・先導物質化学研究所・助教	1
B01 公	18H04492 巨視的物性を支配する微視的不均一状態の解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	森 道康	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 先端基礎研究センター・研究主幹	1

B01 公	18H04494 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	平成 30 年度 ～ 令和元年度	萩田 克美	防衛大学校・応用科学群・講師	1
A01 公	20H04623 ファンデルワールス物質におけるトポロジーの光学的計測法による観測	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	Chen Yong	東北大学, 材料科学高等研究所, 教授	1
A01 公	20H04624 局所トンネル分光によるトポロジカルエッジ状態の検出	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	岡 博文	東北大学, 材料科学高等研究所, 助教	1
A01 公	20H04627 非エルミートバンド構造が織りなす新奇トポロジカル物質	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	吉田 恒也	筑波大学, 数理物質系, 助教	1
A01 公	20H04630 磁性体・冷却原子系におけるトポロジカル相の探求	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	桂 法称	東京大学, 大学院理学系研究科(理学部), 准教授	1
A01 公	20H04631 トポロジカルナノワイヤにおけるスピンメカニクス機能開拓	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	塩見 雄毅	東京大学, 大学院総合文化研究科, 准教授	1
A01 公	20H04633 トポロジカル材料のバルク境界対応における平面・空間充填	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	村上 修一	東京工業大学, 理学院, 教授	1
A01 公	20H04635 表面にマヨラナ粒子をもつ超伝導体物質探索のためのトポロジカル不変量の研究	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	山影 相	名古屋大学, 理学研究科, 助教	1
A02 公	20H04625 3次元拘束空間における階層的相分離構造の自由エネルギーLandscape 探索	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	藪 浩	東北大学, 多元物質科学研究所, 准教授	1
A02 公	20H04636 (廃止) ゆらぐ過渡的ネットワークの構造とレオロジーの解析	令和 2 年度 中途終了	畝山 多加志	名古屋大学, 工学研究科, 准教授	0
A02 公	20H04638 擬臨界ゲルの疎な網目とフラクタル成分が生む特異な非線形レオロジーの多軸変形解析	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	浦山 健治	京都工芸繊維大学, 材料化学系, 教授	1
A02 公	20H04640 異なる二種のネットワーク構造を有するエラストマーの階層構造と力学物性発現機構	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	小椎尾 謙	九州大学, 先導物質化学研究所, 准教授	1

A02 公	20H04645 人工原子ネットワーク構造における物性・機能のトポロジ的解釈と制御	令和2年度 ～ 令和3年度	齋木 敏治	慶應義塾大学, 理工学部(矢上), 教授	1
A02 公	20H04647 材料の内部構造に関する新しい幾何学的解釈とその変形機構の解明への応用	令和2年度 ～ 令和3年度	鯉淵 弘資	仙台高等専門学校, その他, 名誉教授	1
A03 公	20H04622 光異性化分子の「動き」がつくる分子集合体の「動き」を数理モデルから解き明かす	令和2年度 ～ 令和3年度	景山 義之	北海道大学, 理学研究院, 助教	1
A03 公	20H04628 カーボンネットワークの標準化モデルを用いた新規触媒の設計と開発	令和2年度 ～ 令和3年度	伊藤 良一	筑波大学, 数理物質系, 准教授	1
A03 公	20H04629 ジャイロイド構造形成の動的分子論の探究	令和2年度 ～ 令和3年度	齋藤 一弥	筑波大学, 数理物質系, 教授	1
A03 公	20H04634 リオトロピック液晶共連続キュービック相の電子密度情報に基づく構造形成原理の解明	令和2年度 ～ 令和3年度	岡 俊彦	静岡大学, 電子工学研究所, 准教授	1
A03 公	20H04639 第一原理計算と離散曲面論を用いたグラフェンナノ構造体の触媒活性制御	令和2年度 ～ 令和3年度	大戸 達彦	大阪大学, 基礎工学研究科, 助教	1
A03 公	20H04642 離散幾何学と滑らかな幾何学をつなぐ幾何解析の展開と物質・材料科学との連携	令和2年度 ～ 令和3年度	小磯 深幸	九州大学, マス・フォア・インダストリ研究所, 教授	1
A03 公	20H04646 幾何学構造に基づいた多孔性炭素の創製と電極特性開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	吉川 浩史	関西学院大学, 工学部, 教授	1
B01 公	20H04643 化学グラフ理論による物質解析および物質探索	令和2年度 ～ 令和3年度	辻 雄太	九州大学, 先導物質化学研究所, 助教	1
B01 公	20H04644 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	令和2年度 ～ 令和3年度	天本 義史	九州大学, 先導物質化学研究所, 助教	1
B01 公	20H04648 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	令和2年度 ～ 令和3年度	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	1

B01 公	20H04649 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	令和2年度 ～ 令和3年度	萩田 克美	防衛大学校, 応用科学群, 講師	1
公募研究 計 48 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 29 年度	143,130,000 円	110,100,000 円	33,030,000 円
平成 30 年度	292,370,000 円	224,900,000 円	67,470,000 円
令和元年度	288,990,000 円	222,300,000 円	66,690,000 円
令和 2 年度	299,780,000 円	230,600,000 円	69,180,000 円
令和 3 年度	291,070,000 円	223,900,000 円	67,170,000 円
合計	1,315,340,000 円	1,011,800,000 円	303,540,000 円

4 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

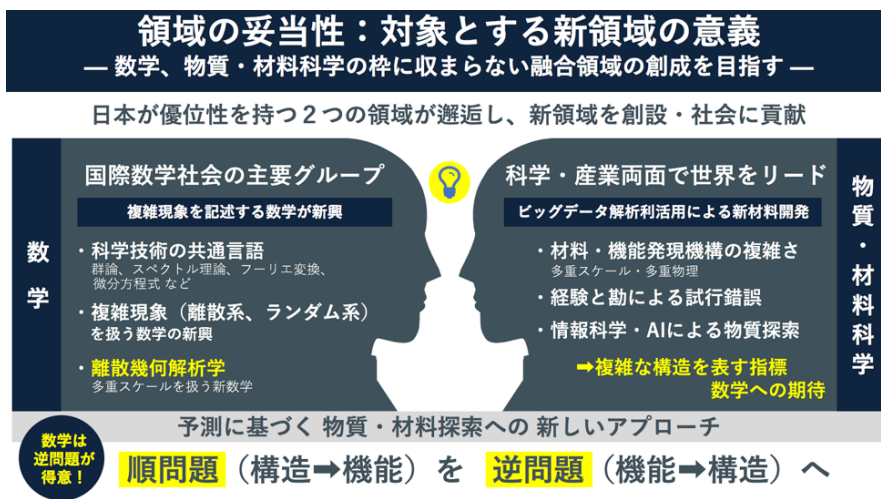
(1) 本研究領域の研究目的

日本が優位性を持つ**数学と材料科学**、2つの分野が協働して既存枠に収まらない**融合領域を創成する**。同時に、**学問の成熟と時代の要請に適った人材を育成し、我が国の学術水準の向上・強化につなげる**。

日本は材料科学の領域で世界をリードしてきたが、物質開発は主に研究者の経験と勘に基づく試行錯誤によるものであり、新物質の創成には20~30年の長時間がかかると言われている。これを効率化すべく、データ科学を駆使した物質探索が世界中で始まっているが、鍵となる「**構造・機能・プロセスの相関原理**」には物質の階層的理解が重要である。

領域代表者の開発してきた「**離散幾何解析学**」は、離散と連続の関係を幾何学的に理解する21世紀に生まれた数学分野である。物質の**マイクロ・メゾ構造**を幾何学の言葉で記述しそれらが**マクロな物性・機能**にどうかかわるかを解析(順問題)、更に求められる物性・機能をもつ**マイクロ・メゾ構造**の特定(逆問題)、そしてその構造を生成するための**初期条件・境界条件設定と動的構造形成の制御(最適化)**に対して、様々な概念や道具を提供することができる。

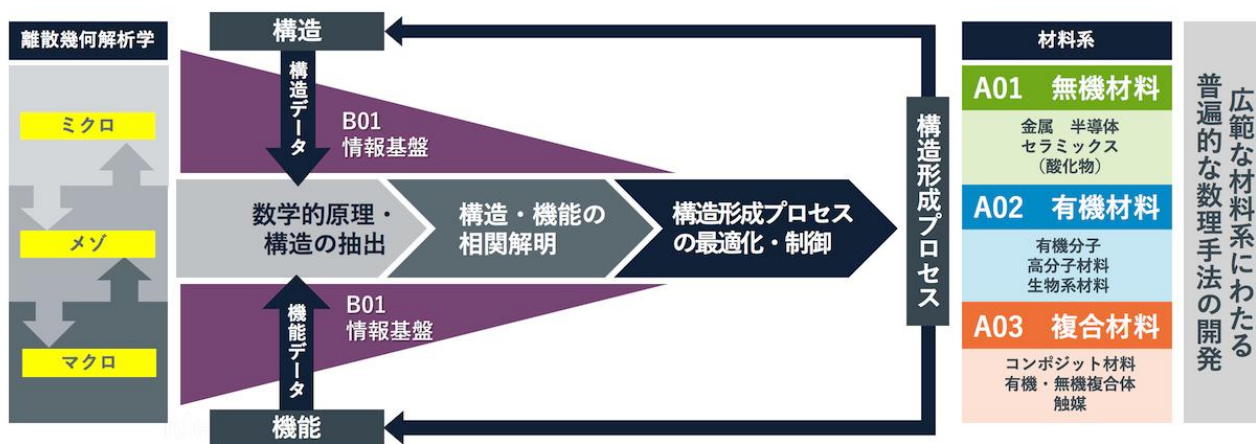
領域代表者はJST CREST(2008-2013年)において研究課題「**離散幾何学による新物質創成・物性発現の解明**」を実施した(A+評価)。さらに2012年からは、文部科学省の世界トップレベル研究拠点形成(WPI)プログラムの支援を受けて東北大学に設置されたWPI-AIMRの所長として**数学-材料科学連携**による材料科学のための新しい基盤を築くことに従事し、WPIプログラム委員会からも「**短期間で予想を超える進展が見られた**」との評価を受けた。本領域は、このような実績の下に国内外の研究者が参画し、これまでに**数学-材料科学連携**の方針が明確となっている研究を深めるとともに、更に多様なアイデアと手法を取り入れることで新領域「**次世代物質・材料科学のための離散幾何解析学**」の確立を目指した。



(2) 本研究領域の全体構想

数学者と物質・材料科学者が協働して「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」の流れを作り、従来の物質開発のありかたを根本から変革する。

本研究は、**数学(特に離散幾何解析学)**と**物質・材料科学**の連携により「**構造・機能・プロセスの相関原理**」を解明し、**次世代物質探索のための新しい学術分野を創成**することを目指した。「**物質を階層的ネットワークとして理解する**」という大目標のもと、計画研究に3つの研究項目「**A01: トポロジカル物質(対象とする物質は無機材料系、特にスピントロニクス材料)**」「**A02: 高分子材料とネットワーク構造(対象とする物質は有機系材料、高分子材料)**」「**A03: 極小曲面とナノ構造の動的構造形成(対象とする物質は複合材料、特に触媒)**」と、共通手法開発のための研究項目「**B01: 情報科学基盤(ネットワーク解析、画像解析、機械学習)**」を置き、公募研究を有効に活用しながら、多様な分野の多様な手法を組み合わせることで普遍的に有効な**離散幾何解析学**の手法と広範な応用課題の開発に取り組んだ。論文、研究会で速やかに成果発表するだけでなく、**ビッグデータ時代の材料開発に資するものとして企業向けのセミナー・コンサルテーションやテキストの出版など**を通じて広く情報発信した。



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・機能の相関原理を説明（順問題から逆問題へ）

① 領域内での研究の有機的な結合により目指す新たな研究の創造

3つの研究項目 A01, A02, A03 はそれぞれにターゲットとする物質系を扱いながら、「物質を階層的ネットワークとして理解する」という大目標を共有した。また B01 は情報科学・データ科学の基盤手法を開発し、項目を超えた連携を促進した。また公募研究を有効に活用し、計画研究の補完にとどまらない有機的連携、多様な分野の多様な手法の組み合わせ、普遍的に有効な離散幾何解析学の手法と広範な応用課題の開発を試みた。特に、数学者と物質・材料科学者が協働し、数学と実験とが直接連携するなど、従来の物質開発のありかたを根本から変革することに挑戦した。

② 若手人材の育成

人材育成も大きなミッションである。後述の「インターフェース研究者」をはじめとして、数学や物質・材料科学の専門性をもつ若手研究者は、本領域の課題に従事する中で情報科学のトレーニングも受けつつ他分野との共同研究を推進し、コミュニケーション能力の豊かな従来の研究者とは異なる人材として育成された。これはビッグデータ社会において必要とされている数理能力と専門領域を併せ持つ人材である。

③ 社会還元とアウトリーチ

本領域研究で得られた知識や手法は、ホームページやテキストブックによる発信はもとより、産業界に向けたセミナー・チュートリアルやコンサルテーション・共同研究へと展開し、**実際のものづくりへの寄与を通じた社会への貢献を目指した活動**を続けている。

(3) どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか

数学者と物質・材料の実験科学者が直接的に連携する領域開拓は世界に先駆けたものである。特に、領域代表者が開発してきた**新しい数学「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することで、機能・構造・プロセスの相関原理を解析し数理モデル化するという研究は独創的である**。これにより従来の物質・材料開発を一段と深いレベルから見直し、手法を根本から変える手応えを得た。更に情報科学的手法を用いた材料の探索や分類を補強・補完し、物質・材料科学者に飛躍的な発想の源を提供することにより、革新的な材料開発につながる土壌を育んだ。

5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

申請段階では研究項目 A01, A02 においても実験の計画研究を配置する予定であったが採択されず、「提案された研究計画の一部には領域の構成として不適切と判断せざるを得ないものも含まれていた。この評価を受けて、領域代表者および総括班でただちに本研究領域の目的の達成のために必要な研究計画について検討を行い、適切なスタートを切れるよう配慮すべきである」との所見が示された。また「ビッグデータや人工知能を物質設計に応用しようとする機運が世界的に高まるなか、『幾何学』という観点からの取組は本研究領域独自のものであり、高く評価できる」としつつ「本研究領域が掲げる提案の有効性を実証するためにも、新材料開発や数学的モデルから逆問題を解いた具体的例などを早期に示すことが求められる」との所見も示された。そこで、実験への展開を公募研究によって強化・補完する方針を立て、一連の対策を講じた。

【対応】

- (1) これまで数学、計算科学、物質・材料科学の出会いの機会はまだであり、言葉や価値観、研究手法などが異なる研究者間でのコミュニケーションは簡単ではない。また、物質・材料は非常に複雑な系であり、その機能発現の機構の理解は容易ではない。この困難を打破するために、総括班がリードして分野間を超えるための様々な仕組みを設けた。
 - ① 定期開催の「物質と情報セミナー」「物質と幾何学セミナー」など、各研究項目が企画し領域全体に提供するチュートリアルや勉強会を通じて、研究者、特に若手研究者に領域内連携を奨励した。
 - ② 領域内で分野融合を進めるための駆動力とすべくインターフェース研究者を総括班に置いた。異分野の言葉を理解して共同研究の種を積極的に探す機会を持つことで、将来この領域を率いるリーダーとなるよう彼らの育成に努めた。
 - ③ 領域内での連携を支援するためのシーズファンドとなる連携奨励グラントを設けた。
- (2) 本領域では、申請時構想では物質系による研究項目 A01 (無機)、A02 (有機)、A03 (複合) のそれぞれに数学、理論・計算、実験のチームを置く3×3構造と、その情報基盤となる B01 に2チーム、合計11の計画研究を置くこととしていた。しかしながら A01、A02 の実験チームは採択に至らないという判断が下された。この事態に対応するために、まず不採択となった計画研究代表を総括班メンバーに加えて研究活動に参画することを可能とし、領域会議、班会議等を通じた情報交換を継続した。一方で、数学、理論・計算科学が実際の物質・材料科学と乖離しないよう、計画研究で欠けた要素を公募研究で補うことを意識して、積極的に実験系を採択するようにした。第1期分として合計24件採択した(約300万円/2年:2件、約500-600万円/2年:18件、約1,800万円/2年:4件)。以下がその内訳である。

第1期公募研究の内訳

A01	実験 4	計算 1	理論 2	数学 0	情報 0
A02	実験 5	計算 1	理論 1	数学 0	情報 0
A03	実験 3	計算 0	理論 0	数学 2	情報 0
B01	実験 2	計算 0.5	理論 1.5	数学 0	情報 1
合計	実験 14	計算 2.5	理論 4.5	数学 2	情報 1

これらの対応は、多様な材料への応用提案を持ち込んだ公募研究との連携の可能性を広げ、結果として「新領域」の形成に資することになった。本件については、中間評価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。」と評価された。

(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

中間評価では「A」をいただいた。所見には、

「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。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。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。**」

とあり、特に新学術領域研究(研究領域提案型)として**体系化へのアプローチを明確にすることが留意事項として挙げられた**。これを受け、領域全体として以下の施策を講じた。

- (1) B01(情報基盤)が主体となって領域全体に対する情報科学・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、**領域参加者がデータ科学の素養を身につけることで扱える問題の幅が広がるようにした**。さらに、離散幾何解析を用いて新材料の候補を高速にスクリーニングする方法や位相的データ解析により構造情報を定量化して探索を効率化する手法など、本領域の成果を関連学会のセッション企画、企業向けの講義、経団連セミナーなどでアウトリーチする機会を捉えて、材料開発の現場からの声を拾った。
- (2) 領域アドバイザーや国際アドバイザーの助言に耳を傾けて物質・材料科学の視点からより大きな課題を拾い領域内で共有する、企業内でマテリアルズインフォマティクス(MI)に取り組む講師などを招いて**産業界のニーズ・シーズや現場の課題に触れるためのセミナーを領域メンバーに向けて開催**するなど、「次世代物質探索」を意識した運営を心がけた。これにより、現行のMIを補完して一層の効率化と高度化につながるような数学と材料科学の体系のあり方を見つめ直す機会を増やした。
- (3) 中間評価後の第2期公募研究でも実験系の研究者を拡充して実際の物質材料との接点を確保した。成果を総説/解説記事や書籍として研究者コミュニティや非専門家層に還元し、より広い層からの反響を確かめる機会を増やすよう促した。

第2期公募研究の内訳

A01	実験 3	計算 0	理論 4	数学 0	情報 0
A02	実験 4	計算 2	理論 0	数学 0	情報 0
A03	実験 5	計算 1	理論 0	数学 1	情報 0
B01	実験 0.5	計算 1	理論 0.5	数学 0	情報 2
合計	実験 12.5	計算 4	理論 4.5	数学 1	情報 2

これらの取り組みの結果、本領域で開発した手法や成果に対する問い合わせや産業連携への声のかけは確実に増えた。これを受け、それらの手法やデータを利活用できるポータルサイトの開設を準備するなど、「研究成果取りまとめ」課題も活用した体系的な成果公開に努め、実用的な材料の合成や新材料物性の予想につながる取り組みを続けている。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

研究項目 A01：トポロジカル物質

【目標】

トポロジ相に依存するロバストな状態が物質の表面に観測されており、その原理は指数定理で記述される。対称性の破れによって異なる状態が発現する普遍的原理を解明し、秩序系で構築された理論を非コンパクト系、非線形系、無秩序系へと展開する。

【達成度】

トポロジ相の物理に有限次元近似や局所化という数学的考察を加え、「1次元高い空間を考える」「コーナー状態の非存在に注目する」などの新たな視点を持ち込んだ。また、格子指数定理をヒントにして離散系での電子状態を考察するという新しい融合領域の開拓に至った。高次トポロジカル物質については、A01-1, A02-1の双方から「**高次トポロジカル指標**」の先駆的な概念が提示されるなど、目標に掲げた展開が達成された。

さらに、**強相関物質の問題**を量子重力理論におけるホログラフィー原理にマップし、**離散幾何／離散グラフの考え方と深層学習（ニューラルネットワーク）を使って解く**着想を得てその実証を行った。手法の提供によりコアの裾野を拡大しつつ、セミナーシリーズ「ディープラーニングと物理」を開催して広い分野を巻き込んだ結果、予想外に新たな融合領域が見えてきた。この成果は高く評価され、A01-2・橋本を代表者とする学術変革(A)『「学習物理学」の創成 --- 機械学習と物理学の融合新領域による基礎物理学の変革(2022年度開始)』の採択につながった。

研究項目 A02：ネットワーク解析による高分子材料

【目標】

均質ネットワークポリマーを3次元空間内の静的ネットワークとして記述し、結び目理論などの位相不変量と物性との相関を解明する。密度揺らぎを最適化・制御する動的ネットワーク構造を予見する手法を構築する。高分子高次構造の階層的シミュレーションと静的・動的な3次元ネットワーク構造の記述により、多機能性を持つ高分子材料を合成する指針を示す。

【達成度】

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を完成し、結び目理論を用いて高分子のトポロジや相分離構造を解析する手法を与えた。ネットワークのトポロジの分類と多面体の構造の関連が明らかになるなど重要かつ予想外の成果も得られた。また、計算機シミュレーション／数学的アプローチ／機械学習を組み合わせ、**高分子鎖構造⇔相分離ネットワーク構造⇔弾性挙動の関係を階層的に解析**できるようになった。新規の安定構造を予測するためのデザイン指針などを提唱し、材料合成手法に新展開をもたらした。

研究項目 A03：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

【目標】

離散曲面論により物質系の多連続多孔質構造を分類・最適化するための指針や、大域解析学により狙った構造形成を相分離で実現するための指針を見出す。これを踏まえ、構造のデザインによって機能の制御や高度な界面制御を行う技術の獲得を目指す。

【達成度】

標準実現や離散曲面論といった数学の考え方を発展させ、与えられた**ネットワークを「離散曲面」とみなして幾何学的に計算するアルゴリズム**の開発、ネットワークの細分とその収束列として**背後に隠れた連続構造の特定**、収束の極限に現れる特異点の分類に対する道筋を与えた。また、斥力を考慮した数理モデルSRRIを導入して**ナノグラフェン系物質を離散曲面とみなしたスクリーニング**を行い、**ガウス曲率がヘテロ元素のドーピングエネルギーや系の物性と強い相関を持つ**ことを示した。さらに**実際の物質でも検証**した。一方、複雑な極小曲面を持つ**ナノコンポジット薄膜の開発**にも取り組んだ。計画研究と公募研究の

連携も活発になされ、数学が提唱する物質について検証や合成が行われた。数学による新規物質合成の指針を与えてその有用性を示すという目標に到達できた。

研究項目 B01：物質・材料科学のための情報科学基盤

【目標】

項目 A01, A02, A03 に共通な情報科学的手法として、巨大・複雑ネットワークの解析と統計手法を用いた画像解析を開発し、構造データ・機能データを数理モデルに結びつける。

【達成度】

複雑ネットワーク科学を応用して、材料の特徴的な構造の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、構造と物性を両方向につなぐ手法として提供した。また、マイクロ相分離の**複雑な構造をマルチフラクタルで定量化**する手法を開発して有用性を検証した。材料物性の理論的理解を助けるための機械学習や、計算結果の精度とそれを得るまでにかかるコストの評価にも焦点を当て、**多くの計画研究・公募研究と連携**した。複雑なシミュレーションデータや豊富な実験のデータを生成できる A02 との成果がたくさん生まれ、またデータ科学の手法を用いる物質探索の考え方が領域に参加する研究者全体に浸透した。

(2) 本研究領域により得られた成果

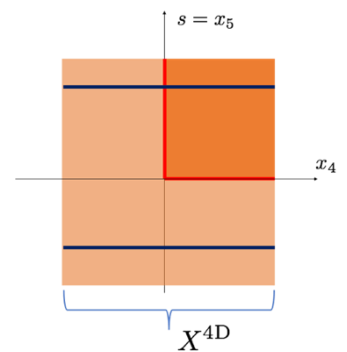
研究項目 A01：トポロジカル物質

数学による格子ゲージ理論の理解と拡張 (A01-1, A01 公募：領域内連携)

「指数」とは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ロバストな情報を抽出する概念である。数学者の古田・松尾(信)・山下は、物理学者の深谷らと共に、偶数次元の境界をもつ多様体に関する **Atiyah-Patodi-Singer 指数とドメインウォールフェルミオンの Dirac 演算子のエータ不変量が、さらに1次元高い演算子の指数の異なる表現と等価であることを証明**した。これは欲しいトポロジカル絶縁体の edge 状態に比べて2次元高い系になっており、高次トポロジカル相不変量の立場では「角における高次不変量がゼロである」こと、つまり「角の角度を連続的に変えても、角にゼロモードが出現しない」ことを示す。

また、深谷らと松尾(信)・山下は、**任意の多様体を格子ゲージ理論によって扱う枠組み**を提案した。基本的なアイデアは、多様体を高次元のトラスに埋め込むことであり、連続理論においては埋め込まれた多様体の近傍への指数は局所化するを使う。さらに、Atiyah-Patodi-Singer 境界条件における mod2 指数のドメインウォールを用いた具体的な記述を与えた。これらは**格子理論において対応する局所化を定式化**するための重要な成果である。

Commun. Math. Phys. (2020), Lett. Math. Phys. (2022)

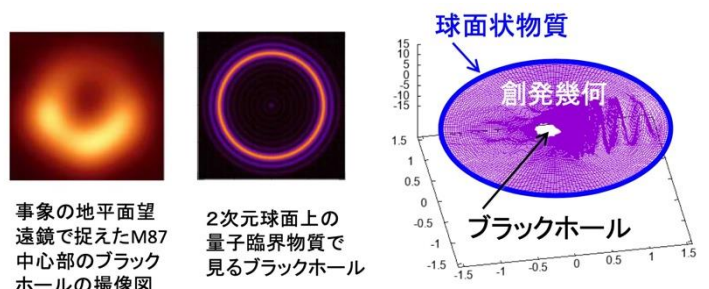


図：APS 指数とドメインウォールによる指数の等価性を示す 5次元時空の例。ドメインウォールは 4次元であり、角は3次元となる。

素粒子論を出発点として物質科学と機械学習を融合する (A01-2)

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ると、**相互作用の入ったトポロジカル物質系**も取り扱うことができる。そこで、**ホログラフィー原理で発生する創発時空を、物質のสปิน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**を探求し、QFT に双対な時空をニューラルネット上で創発させることに成功した。離散幾何学的時空と機械学習、物質科学を融合する研究を進め、QFT におけるカイラル凝縮のデータから離散幾何としてのニューラルネットワークが決定される**アルゴリズムを提唱**し、これを用いることで、物質科学と離散幾何学の架橋の基盤を構築した。特に、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。これらは英文の教科書としても出版した。 *Phys. Rev. D (2018), Springer Nature (2021)*

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。また、物質側を QFT 物質とした場合に、Wilson loop や計算複雑性などを用いることで創発時空を再構築する公式を提案した。これにより、特に創発時空上のブラックホールの内側までも再構築することが可能となった。 *Phys. Rev. Lett. (2019)*



【A01 公募】

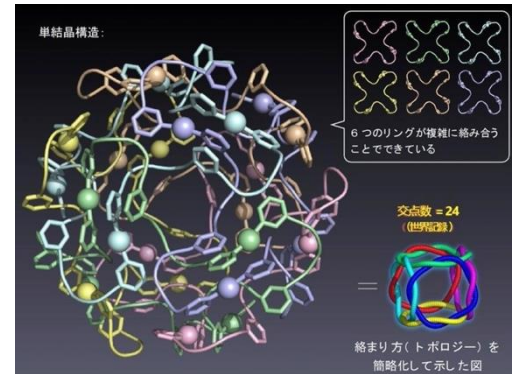
「熱平衡化しない量子多体系」のメカニズム解明に一石を投じる [桂, *Phys. Rev. Lett.* (2020) プレスリリース]、量子多体系の 30 年来の難問を解決: SU(N) ハバード模型の基本的な性質を解明 [桂, *Phys. Rev. Lett.* (2021) プレスリリース]、カゴメ格子状のじゃんけんゲームを解析することでトポロジカル現象の典型例であるカイラルエッジ状態の発現を解明 [吉田, *Scientific Report* (2021)]、さらに例外点の発現や非エルミート表皮効果の発現も指摘 [吉田, *Phys. Rev. B* (2021)]、トポロジカル物質のコーナー電荷などの量子化値を離散幾何学と関連付け [村上, *Phys. Rev. Res.* (2020)] ほか

研究項目 A02 : ネットワーク解析による高分子材料

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 (A02-1 : プレスリリース)

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。

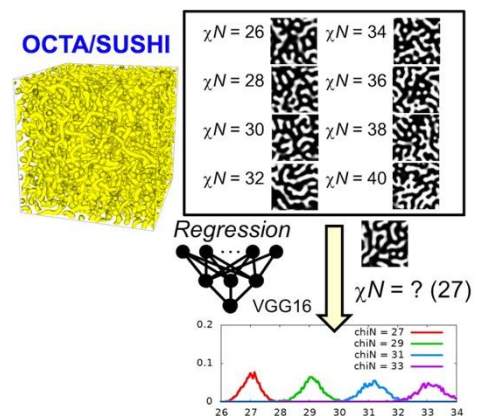
Nature Communications 10 (2019) に 2 報



相分離構造の電子顕微鏡画像情報から相互作用パラメータを推定 (A02-2, B01 公募 : 領域内連携)

3次元相分離構造を持つ**高分子材料の2次元断面画像から**、A-B ジブロックコポリマーの混合エンタルピーの評価に用いられる「**Flory-Huggins の χ パラメータ**」を**深層学習で推定**する手法を開発した。実空間 SCF 計算によりブロックコポリマーの準安定相分離構造を発生させ、 χ パラメータを推定して安定相の構造を予測することで手法の振る舞いを検証した。対称性の低い準安定構造の空間分布の情報に本来取るべき安定相のラベルを与え、深層学習の一種である 3D-Convolutional Neural Network(3D-CNN)を用いて約 15,000 サンプルを学習させたところ、学習に用いていないジブロックや非対称トリブロックコポリマーの準安定構造から安定相を予測することに成功した。

Scientific Reports (2021)



【A02 公募】

光で高分子形状をリセットする「T・レックス」により**流動性が変わるシリコン材料を開発** [本多, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2019) プレスリリース]、破壊実験とシミュレーションによりネットワーク状構造物の**トポロジーと強硬化の関連**を解明 [山口, *Phys. Rev. Lett.* (2020)]、**8の字架橋点**を持つ高分子ゲルの**極端に異方的な力学物性**を解明 [浦山, *ACS Macro Lett.* (2022)] ほか

研究項目 A03 : 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

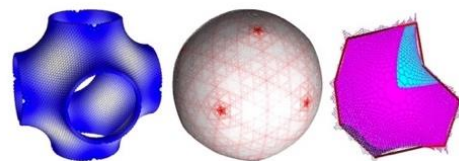
「離散曲面論」「離散極小曲面論」の完成 (A03-1, A03-2 : 領域内連携)

与えられた**ネットワークを「離散曲面」とみなし幾何学的に計算するアルゴリズムを開発**して、ネットワークの細分とその収束列として**背後に隠れた連続構造を特定**し、「**収束の極限に現れる特異点の分類**」に対する道筋を与えた。これにより、要素分解と再構築を経て得られる 3 次元ネットワークのうち例えば拡散を最適化するものを分類し、多層・多孔質材料の最適構造を調べる道具立てを得た。これらの「離散極小曲面論」を踏まえて、ナノ構造の動的形成に関する数理モデルを微分幾何学的手法で具体的に構築する際の鍵となる方策を調査したところ、Pinkall-Lam らが発表した「**サークル・パッキングを用いたネットワークの共形構造(Thurston)**」を活用した離散極小曲面の Weierstrass 表現を我々の理論と組み合わせ、目的のネットワークを「**指定された特異点を許容する周期的極小曲面**」として**構成**すれば良いことが分かった。これにより、対応する三分岐極小曲面による三重連続構造の実現を研究する基盤が完成した。

Comput. Aided. Geom. Des.(2017), *Tohoku Math.J* (2022)

カーボンネットワークをモデルとした離散曲面の細分の定義と細分列の収束 (A03-1, A03-2: 領域内連携)

カーボンネットワークは、数学の視点からは三分岐離散曲面と考えることができ、抽象グラフとしての細分を経由して細分列を定義可能である。さらに、局所エネルギー最小化によりハウスドルフ距離に関する細分列の収束のアルゴリズムを開発した。これは単に数学的な興味だけではなく、3次元グラフェンに代表される**負曲率炭素構造を考**

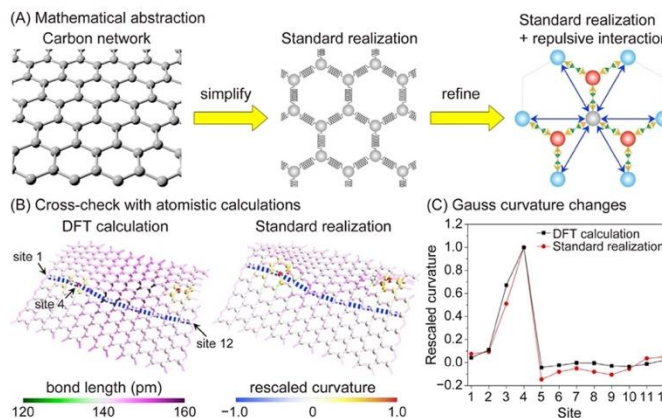


左: Mackay 結晶の細分 (ガウス曲率) (Kotani-Naito-Omori),
 中: C60 の細分 (ガウス曲率) (Kotani-Naito-Tao),
 右: K4 結晶の細分 (一つの leaf) (Kotani-Naito-Tao)

(*Springer Briefs in the Mathematics of Materials*, 2022 予定)

数学を取り入れて触媒を「設計」する (A03-1, A03-2, A03 公募: 領域内連携, プレスリリース)

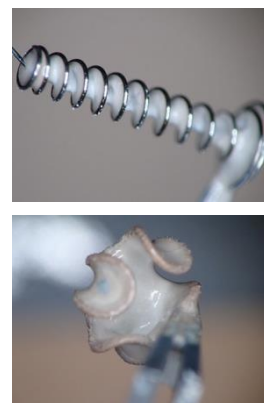
安定な結晶格子の探索を数学的に行うために提案された「標準実現」の考え方を炭素のナノ構造の予測に応用すべく、斥力項を入れた SRRI モデルを構築した。これは π 共役な離散曲面系において第一原理分子動力学計算を代替しうる精度で高速な構造予測を可能にし、**ガウス曲率と窒素ドーピングエネルギーの相関**を捉えることができた。さらにグラフェン様の**炭素材料を実験的に作製し、その触媒能力を検証**することで、数学を用いた材料設計の有用性を実証した。求める触媒機能を発現する異元素のドーピング箇所を決め、対応する離散曲面をデザインする「逆推論」の手法として期待される。 *Carbon* (2021), 科学新聞 (2021年7月16日)



極小曲面の理論の構築と具体系としての実現 (A03-2, A03-3, A03 公募: 領域内連携)

数学側からのアプローチとして、極小曲面や平均曲率一定曲面を相界面とする構造について、様々な理論構築に取り組んだ。内藤は、螺旋状の小さな針金が支える微小液滴の数理モデルを与えて螺旋運動で不変な**CMC 曲面の安定性**を調べ、一つの常螺旋と二つの短い曲線弧で張られる凸で安定な CMC 螺旋面のクラスを得た。小磯は、**液滴の界面の数理モデル**や可展面についての変分問題のエネルギー極小解を決定する研究を行った。

材料側からのアプローチとしては、ミクロな枠構造に無機材料の膜を張ることで目的の極小曲面を持つ触媒を作成する技術の開発に取り組んだ。高見は、セラミックスナノ粒子の分散液を調製し、**マイクロメートルやミリメートルサイズの枠**上で極小曲面を形成した後乾燥して、**極小曲面の形状を有するセラミックス薄膜を形成**するという手法を考案した。形成した薄膜は、イットリウム安定化ジルコニア(YSZ)ナノ粒子を用いた場合で 97.6 wt%という極めて高い濃度のセラミックスナノ粒子を含む。薄膜は極小曲面の形状をとっており、ヘリコイド構造や Enneper 曲面など様々な形状を実現可能である。YSZ ナノ粒子の他に TiO_2 ナノ粒子を用いたセラミックス極小曲面の形成も可能とし、機能性を付与する前の段階まで進むことができた。



【A03 公募】

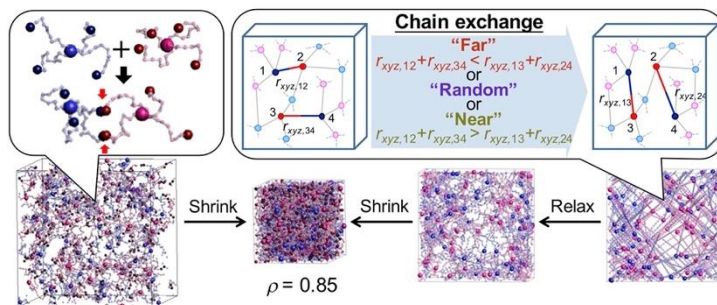
自発曲率の概念を導入して定常光照射下での結晶の巨視的変形の繰り返しを数理モデル化 [影山, *Small* (2022) **プレスリリース**]、電気化学反応により異なるトポロジーを持つ **MOF を選択的に合成** [吉川, *Dalton Trans.* (2021)] ほか

研究項目 B01: 物質・材料科学のための情報科学基盤

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法 (B01-1, A02 公募, B01 公募: 領域内連携)

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の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。
Patterns(2020), J. Comp. Chem. Jpn. (2021)



ブロック共重合体のマイクロ相分離構造の解析法の開発 (B01-1, A02-2 : 領域内連携)

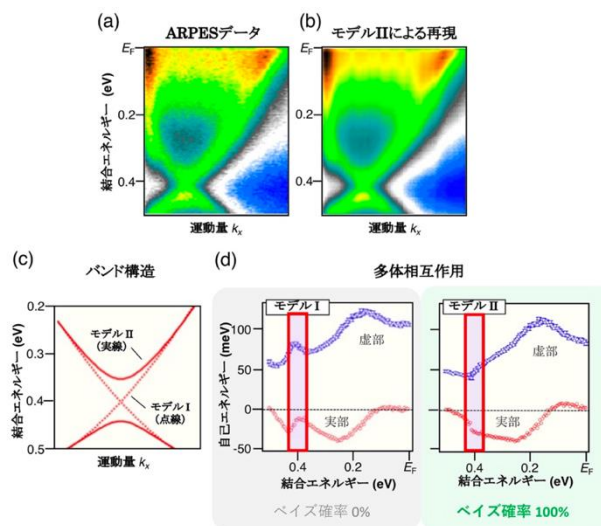
ブロック共重合体は、モノマー間の相互作用の大きさや平均体積分率によって様々なマイクロ相分離構造をとる。また、ほぼ同じような条件で生成したとしても初期値のゆらぎに依存して異なる準安定構造をとる。これらの構造の違いが物性に影響を与えていると考えられるが、マイクロ相分離の複雑な構造を単純な方法で定量化するのは困難なため、どのような構造の特徴がどのように物性に寄与しているかについては分かっていなかった。そこで多様なマイクロ相分離の複雑な構造をマルチフラクタルで特徴づける方法を開発し、特異性指数や一般化次元などの**マルチフラクタル指標が力学物性や自由エネルギーに関係**していることを見出すことができた。
J. Comp. Chem. Jpn. (2020)

ベイズ推定を用いた新たな電子構造の解析法を開発 :

トポロジカル絶縁体などを巡る数々の論争の決着へ (B01-2, A01 公募 : 領域内連携, プレスリリース)

角度分解光電子分光 (ARPES) によって得られたトポロジカル絶縁体 TlBi(S,Se)_2 のバンド構造に対してベイズ推定を用いた電子状態の解析を行い、モデルが持つ **559 個のパラメータの値を全て決定**することで、ARPES データを極めてよく再現する解析結果を得た。さらに、2 種類のバンド構造のモデルのどちらが妥当かを統計的に評価して**ディラック電子に質量があることを明確に示し、10 年越しの議論に決着**をつけた。従来の解析方法では有限解像度のバンド構造データに対してパラメータ推定を行ってもモデル選択の自由度が残されていたが、本手法では選択されたモデルの良し悪しを**統計力学的な手法で定量的評価**することによって物理の異なる複数のモデルから**妥当なモデルを選択**することができた。このモデル選択の方法は従来、情報量基準として知られていたモデル選択の指針を統計力学の視点から自然に導入したものであり、**ARPES イメージに限らず広範な実験データの解析に応用**できる。

Communications Physics (2021)



【B01 公募】

4つまでの環状鎖で作る**カテナンの MD 計算**を行い**絡み方とレオロジー特性の関係**を解明した [萩田, *Macromolecules (2021)*, A02-1 との連携]、X線散乱乱折データを使って**生分解性高分子のプロセス-構造-物性相関を調べる手法**を提案した [天本, *Polym. J (2021)*, A02 公募との連携] (ほか)

7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和4年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

全体の論文数は472件

○ 主な雑誌論文

研究項目 A01 トポロジカル物質

(計画研究 A01-1) 指数定理の展開とトポロジカル表面状態 計50件 (査読有50件)

1. *K. Gomi, Homological bulk-edge correspondence for Weyl semimetals. Progress of Theoretical and Experimental Physics 2022, 04A106 (2022).
2. *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). (連携)
3. T. Kato, *H. Konno, N. Nakamura, Rigidity of the mod 2 families Seiberg-Witten invariants and topology of families of spin 4-manifolds. Compos. Math. 157, 770-808 (2021).
4. K. Gomi, *Y. Kubota, G. C. Thiang, Twisted crystallographic T-duality via the Baum-Connes isomorphism. Int. J. Math. 32, 65 (2021).
5. 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). (連携)
6. *R. Okugawa, T. Yokoyama, Topological exceptional surfaces in non-Hermitian systems with parity-time and parity-particle-hole symmetries. Physical Review B 99, 6 (2019).
7. *R. Okugawa, S. Hayashi, T. Nakanishi, Second-order topological phases protected by chiral symmetry. Physical Review B 100, 9 (2019).
8. *S. Hayashi, Topological Invariants and Corner States for Hamiltonians on a Three-Dimensional Lattice. Communications in Mathematical Physics 364, 343-356 (2018).

(計画研究 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 計21件 (査読有21件)

9. K. Hashimoto, *Y. Matsuo, Escape from black hole analogs in materials: Type-II Weyl semimetals and generic edge states. Physical Review B 102, 9 (2020).
10. *K. Hashimoto, *Y. Matsuo, Universal higher-order topology from a five-dimensional Weyl semimetal: Edge topology, edge Hamiltonian, and a nested Wilson loop. Physical Review B 101, 10 (2020).
11. K. Hashimoto, S. Kinoshita, *K. Murata, Einstein Rings in Holography. Phys. Rev. Lett. 123, 5 (2019).
12. *S. Kinoshita, K. Murata, T. Oka, Holographic Floquet states II: Floquet condensation of vector mesons in nonequilibrium phase diagram. Journal of High Energy Physics 2018 (2018).
13. *Y. Yao, *C. T. Hsieh, M. Oshikawa, Anomaly Matching and Symmetry-Protected Critical Phases in SU(N) Spin Systems in 1+1 Dimensions. Phys. Rev. Lett. 123, 6 (2019).
14. *K. Hashimoto, S. Sugishita, A. Tanaka, A. Tomiya, Deep learning and the AdS/CFT correspondence. Physical Review D 98 (2018).
15. K. Hashimoto, *X. Wu, T. Kimura, Edge states at an intersection of edges of a topological material. Physical Review B 95, 10 (2017).

A01 公募研究 計111件 (査読有108件)

16. *T. Yoshida, T. Mizoguchi, Y. Hatsugai, Non-Hermitian topology in rock-paper-scissors games. Scientific Reports 12, 7 (2022).
17. *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).
18. *H. Yoshida, H. Katsura, Rigorous Results on the Ground State of the Attractive SU(N) Hubbard Model. Phys. Rev. Lett. 126, 100201 (2021).
19. *T. Yokouchi, Y. Shiomi, Enhancement of Current-Induced Out-of-Plane Spin Polarization by Heavy-Metal-Impurity Doping in Fe Thin Films. Phys. Rev. Appl. 16, 6 (2021).
20. *N. Shibata, N. Yoshioka, H. Katsura, Onsager's Scars in Disordered Spin Chains. Phys. Rev. Lett. 124, 6 (2020).
21. *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). (連携)
22. *M. Hirayama, R. Takahashi, S. Matsui, H. Hosono, *S. Murakami, Higher-order topological crystalline insulating phase and quantized hinge charge in topological electrified apatite. Phys. Rev. Res. 2, 14 (2020).
23. H. Sawahata, *N. Yamaguchi, *F. Ishii, Electric-field-induced Z(2) topological phase transition in strained single bilayer Bi (111). Appl. Phys. Express 12, 3 (2019).
24. A. Mizuno, *Y. Shuku, *K. Awaga, Recent Developments in Research of Molecular Spin Gyroids. Bulletin

of the Chemical Society of Japan in press (2019).

25. *[S. Y. Matsushita](#), K. K. Huynh, *K. Tanigaki, Ultrathin film of 3D topological insulators by vapor-phase epitaxy: Surface dominant transport in wide temperature revealed by Seebeck measurement. *Physical Review B* 99 (2019).
26. *H. Idzuchi, *A. E. L. Alleca, X. C. Pan, K. Tanigaki, [Y. P. Chen](#), Increased Curie temperature and enhanced perpendicular magneto anisotropy of Cr₂Ge₂Te₆/NiO heterostructures. *Applied Physics Letters* 115, 5 (2019).
27. K. Yamada, [S. Souma](#), K. Yamauchi, N. Shimamura, K. Sugawara, C. X. Trang, T. Oguchi, K. Ueno, T. Takahashi, *T. Sato, Ultrathin Bismuth Film on 1T-TaS₂ : Structural Transition and Charge-Density-Wave Proximity Effect. *Nano Letters* 18, 3235-3240 (2018).

研究項目 A02 ネットワーク解析による高分子材料

(計画研究 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 計 23 件 (査読有 21 件)

28. N. Sakata, R. Mishina, M. Ogawa, K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa, *[K. Shimokawa](#), Handlebody decompositions of 3-manifolds and polycontinuous patterns. *Proc. Royal Soc. A* 478, Issue 2260 (2022).
29. *[K. Hagita](#), T. Murashima, M. Ogino, M. Omiya, K. Ono, [T. Deguchi](#), H. Jinnai, T. Kawakatsu, Efficient compressed database of equilibrated configurations of ring-linear polymer blends for MD simulations. *Sci. Data* 9, 9 (2022). (連携)
30. *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).
31. *T. Sawada, Y. Inomata, *[K. Shimokawa](#), *M. Fujita, A metal-peptide capsule by multiple ring threading. *Nature Communications* 10 (2019).
32. K. Kyoda, T. Yamamoto, *[Y. Tezuka](#), Programmed Polymer Folding with Periodically Positioned Tetrafunctional Telechelic Precursors by Cyclic Ammonium Salt Units as Nodal Points. *Journal of the American Chemical Society* 141, 7526-7536 (2019).
33. K. Ishihara, Y. Koda, M. Ozawa, *[K. Shimokawa](#), Neighborhood equivalence for multibranching surfaces in 3-manifolds. *Topology and its Applications* 257, 11-21 (2019).
34. E. Uehara, *[T. Deguchi](#), Mean-square radius of gyration and the hydrodynamic radius for topological polymers expressed with graphs evaluated by the method of quaternions revisited. *Reactive & Functional Polymers* 133, 93-102 (2018).

(計画研究 A02-2) 高分子高次構造の階層的シミュレーション 計 15 件 (査読有 14 件)

35. *[T. Aoyagi](#), Coarse-grained molecular dynamics study of elasticity of block copolymers with cubic symmetrical morphology. *Polymer* 243, 8 (2022).
36. *[T. Aoyagi](#), Optimization of the elastic properties of block copolymers using coarse-grained simulation and an artificial neural network. *Computational Materials Science* 207, 9 (2022).
37. *H. Kawaguchi, M. I. Ito, S. Yamanaka, [T. Aoyagi](#), Largest Connected Component and Free Energy of Microphase Separated Structures. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 19, 136-138 (2021). (連携)
38. *H. Kawaguchi, M. I. Ito, [T. Aoyagi](#), [T. Ohnishi](#), Prediction of Stress-Strain Curve of Block Copolymers Using Transfer Learning of 3D Convolutional Neural Network. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 20, 100-102 (2021). (連携)
39. *[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). (連携)

A02 公募研究 計 65 件 (査読有 63 件)

40. B. H. Chen, T. Wada, *[H. Yabu](#), Amphiphilic Perforated Honeycomb Films for Gravimetric Liquid Separation. *Adv. Mater. Interfaces* 9, 7 (2022).
41. 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).
42. *[T. Yamaguchi](#), Y. Onoue, Y. Sawae, Topology and Toughening of Sparse Elastic Networks. *Phys. Rev. Lett.* 124, 5 (2020).
43. R. Soma, B. Nakayama, *M. Kuwahara, *E. Yamamoto, *[T. Saiki](#), Phase-change Janus particles with switchable dual properties. *Applied Physics Letters* 117, 7 (2020).
44. *[T. Mori](#), Y. Jiang, Y. Fujii, S. Kitani, H. Mizuno, A. Koreeda, L. Motoji, H. Tokoro, K. Shiraki, Y. Yamamoto, S. Kojima, Detection of boson peak and fractal dynamics of disordered systems using terahertz spectroscopy. *Physical Review E* 102, 12 (2020).
45. *[Y. Masubuchi](#), [T. Uneyama](#), Retardation of the reaction kinetics of polymers due to entanglement in the post-gel stage in multi-chain slip-spring simulations. *Soft Matter* 15, 5109-5115 (2019).
46. *[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).
47. *K. Esashika, R. Ishii, S. Tokihiro, [T. Saiki](#), Simple and rapid method for homogeneous dimer formation of gold nanoparticles in a bulk suspension based on van der Waals interactions between alkyl chains. *Optical Materials Express* 9 (2019).

研究項目 A03 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

(計画研究 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 計 23 件 (査読有 22 件)

48. *K. Inoue, K. Kawahara, M. Saito, M. Kotani, *Y. Ikuhara, 3D arrangement of atomic polyhedra in tilt grain boundaries. *Acta Mater.* 202, 266-276 (2021).
49. 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). (連携)
50. R. Ozawa, *Y. Sakurai, T. Yamada, Geometric and spectral properties of directed graphs under a lower Ricci curvature bound. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 59, 39 (2020). (連携)
51. A. Dechant, *S. Sasa, Fluctuation-response inequality out of equilibrium. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 117, 6430-6436 (2020).
52. *H. Morita, A. Miyamoto, M. Kotani, Recoverably and destructively deformed domain structures in elongation process of thermoplastic elastomer analyzed by graph theory. *Polymer* 188, 8 (2020).
53. *T. Tate, Eigenvalues, absolute continuity and localizations for periodic unitary transition operators. *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* 22, 21 (2019).
54. *K. Suzuki, Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 57 (2018).
55. *M. Kotani, *H. Naito, *T. Omori, A discrete surface theory. *Computer Aided Geometric Design* 58, 24-54 (2017). (連携)

(計画研究 A03-2) ナノ極小曲面論による相分離過程の大域解析 計 18 件 (査読有 18 件)

56. M. Kotani, *H. Naito, C. Tao, Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions. *Tohoku Mathematical Journal* 74 (2022). (連携)
57. *S. Akamine, *M. Umehara, *K. Yamada, Improvement of the Bernstein-type theorem for space-like zero mean curvature graphs in Lorentz-Minkowski space using fluid mechanical duality. *Proceedings of the American Mathematical Society, Series B* 7, 17-27 (2020).
58. *T. Omori, *H. Naito, *T. Tate, Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valent graphs. *Electron. J. Comb.* 26, 31 (2019). (連携)
59. *S. Nayatani, *T. Shoda, Metrics on a closed surface of genus two which maximize the first eigenvalue of the Laplacian. *C. R. Math.* 357, 84-98 (2019).

(計画研究 A03-3) 界面活性剤を用いた多連続多孔質構造の形成 計 4 件 (査読有 4 件)

60. K. Takezawa, J. F. Lu, *C. Numako, *S. Takami, One-step solvothermal synthesis and growth mechanism of well-crystallized beta-Ga₂O₃ nanoparticles in isopropanol. *Crystengcomm* 23, 6567-6573 (2021).
61. *T. Taira, T. Yanagimoto, *K. Sakai, H. Sakai, T. Imura, Au(i)-, Ag(i)-, and Pd(ii)-coordination-driven diverse self-assembly of an N-heterocyclic carbene-based amphiphile. *RSC Adv.* 11, 17865-17870 (2021).
62. *A. A. Litwinowicz, *S. Takami, S. Asahina, X. D. Hao, A. Yoko, G. Seong, T. Tomai, *T. Adschiri, Formation dynamics of mesocrystals composed of organically modified CeO₂ nanoparticles: analogy to a particle formation model. *Crystengcomm* 21, 3836-3843 (2019).

A03 公募研究 計 65 件 (査読有 62 件)

63. K. Obara, *Y. Kageyama, *S. Takeda, Self-Propulsion of a Light-Powered Microscopic Crystalline Flapper in Water. *Small* 18, 10 (2022).
64. *K. Saito, *M. Hishida, *Y. Yamamura, Two-Dimensional Spin Model Possibly Undergoing a Phase Transition: Heisenberg Model of Headless Spins Preferring Twist on Triangular Lattice. *Journal of the Physical Society of Japan* 90, 11 (2021).
65. 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).
66. *Y. Ito, S. Kukururi, S. Jeong, G. Elumalai, A. A. H. Tajuddin, Z. Y. Xi, K. L. Hu, T. Ohto, Phase-Dependent Electrochemical CO₂ Reduction Ability of NiSn Alloys for Formate Generation. *ACS Appl. Energ. Mater.* 4, 7122-7128 (2021). (連携)
67. K. L. Hu, *T. Ohto, Y. Nagata, M. Wakisaka, Y. Aoki, J. Fujita, *Y. Ito, Catalytic activity of graphene-covered non-noble metals governed by proton penetration in electrochemical hydrogen evolution reaction. *Nature Communications* 12, 9 (2021). (連携)
68. *Y. Hatakeyama, M. Koiso, Stability of helicoidal surfaces with constant mean curvature. *Int. J. Math. Study* 12, 23 (2020).
69. *A. Kumatani, C. Miura, H. Kuramochi, *T. Ohto, M. Wakisaka, Y. Nagata, H. Ida, Y. Takahashi, K. L. Hu, S. Jeong, J. Fujita, T. Matsue, *Y. Ito, Chemical Dopants on Edge of Holey Graphene Accelerate Electrochemical Hydrogen Evolution Reaction. *Advanced Science* 6, 8 (2019). (連携)

研究項目 B01 物質・材料科学のための情報科学基盤

(計画研究 B01-1) 複雑ネットワーク解析に基づく物質・材料探索 計 4 件 (査読有 4 件)

70. *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). (連携)
71. H. Kawaguchi, *M. I. Ito, T. Aoyagi, T. Ohnishi, Prediction of Stress-Strain Curve of Block Copolymers Using Transfer Learning of 3D Convolutional Neural Network. *J. Comput. Chem.-Jpn.* 20, 100-102 (2021).

(連携)

72. *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). (連携)
73. *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). (連携)

(計画研究 B01-2) 材料観察画像からの機能推定 計 7 件 (査読有 6 件)

74. *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).
75. *R. Okugawa, H. Oshiyama, M. Ohzeki, Mirror-symmetry-protected dynamical quantum phase transitions in topological crystalline insulators. *Phys. Rev. Res.* 3, 9 (2021). (連携)
76. *A. Ichiki, K. Okumura, Diversity of dynamical behaviors due to initial conditions: Extension of the Ott-Antonsen ansatz for identical Kuramoto-Sakaguchi phase oscillators. *Physical Review E* 101, 8 (2020).
77. U. Yamamoto, H. Imai, K. Sano, *M. Ohzeki, T. Matsuda, T. Tanaka, Improving Time Resolution in the Imaging of Metabolic Dynamics using Compressed Sensing from 3D Heteronuclear Multiple Quantum Coherence. *Proceedings of The International Society for Magnetic Resonance in Medicine* 26, 1289 (2019).

B01 公募研究 計 66 件 (査読有 64 件)

78. *Y. Mototake, Interpretable conservation law estimation by deriving the symmetries of dynamics from trained deep neural networks. *Physical Review E* 103 (2021).
79. *K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, Mathematical Classification and Rheological Properties of Ring Catenane Structures. *Macromolecules* 10.1021/acs.macromol.1c01705, 12 (2021). (連携)
80. Y. Tsuji, Y. Kitamura, M. Someya, T. Takano, M. Yaginuma, K. Nakanishi, *K. Yoshizawa, Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite. *Acs Omega* 4, 4491-4504 (2019).
81. *K. Hagita, Y. Shudo, M. Shibayama, Two-dimensional scattering patterns and stress-strain relation of elongated clay nano composite gels: Molecular dynamics simulation analysis. *Polymer* 154, 62-79 (2018).

○ 学会発表 (招待講演)

1. (A01-1) M. Furuta, "The Atiyah-Patodi-Singer index theorem and domain walls" MATERIALS RESEARCH MEETING 2019 (Yokohama) 2019.
2. (A01-2) K. Hashimoto, "Holography, matter and deep learning", Microsoft workshop "Physics Meets ML"(Seattle) 2019.
3. (A02-1) K. Shimokawa, "3-dimensional topology and poly-continuous pattern", Special Session on Applied Knot Theory, AMS Sectional Meeting AMS Special Session (Tennessee) 2020.
4. (A02-2) T. Aoyagi, "High-throughput prediction and optimization of stress-strain curve of thermoplastic elastomer", International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (online) 2021.
5. (A03-1) M. Kotani, "Discrete geometric analysis for materials research" International Congress of Chinese Mathematicians (Beijing) 2019.
6. (A03-2) 内藤久資, 「3 分岐離散曲面と炭素構造」日本数学会 2021 年度年会 (オンライン) 2021.
7. (A03-3) S. Takami, "Fabrication of micrometer-size complicated nanocomposite film structures designed by mathematics" *Polymers and networks via topology and entanglement* (Tokyo) 2019.
8. (B01-1) 大西立顕, 「複雑ネットワークとデータサイエンスを活用した高分子計算機科学の可能性」高分子計算機科学研究会 (東京) 2019.
9. (B01-2) A. Ichiki, "Laplacian eigenvalue problem: macroscopic and microscopic energetics for soft matter" *Polymers and networks via topology and entanglement* (Tokyo) 2019.

他、計画研究・公募研究を問わず多数

○ 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、部分執筆した書籍や学術誌における総説記事 多数

○ ホームページ

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

この事後評価報告書に記載しきれない情報を参照いただけます

○ 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. 新学術領域「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、各班主催の研究集会 多数

○ アウトリーチ活動

一般向け講演・セミナー：36 件、記者プレスリリース：29 件、
メディア報道：国内 55 件 海外：22 件、小・中・高向けの講演等：15 件

【主だった活動】

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、上記の領域ホームページにて公開

レクチャー

- 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 (長野県須坂東高校、2018.11.10)
- 古田幹雄：女子中高生講座「数学の魅力 8」(東京大学駒場キャンパス大講義室、2019.3.10)
- 古田幹雄：Summer School 数理物理 2020 (オンライン、2020.8.28)

他

一般向けの情報発信

- 小谷元子：第 8 回 WPI サイエンスシンポジウム『数学の驚くべき力 数学が繋ぐ多様な世界』「数学でミクロとマクロをつなぐ」(東京 2020.1.12.)
- 橋本幸士：2018 年度日本物理学会科学セミナー 公開講座「AI (人工知能) と物理学」(2018.8.1)
- 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/>)
- 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
- 正井秀俊：第 154 回サイエンスカフェ「数学小喃～日常に数学を～」(せんだいメディアテーク、2018.7.11.)
- 赤木和人：MathAM-OIL 第 3 回企業連携ワークショップ「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化」(東京、2018.12.5)
- 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

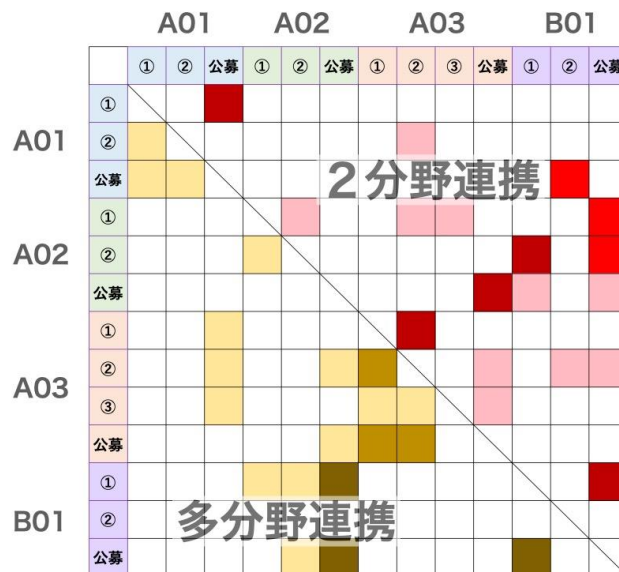
8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

右図は本領域内の連携状況の可視化を試みたものである。見出しの①②などは計画研究を示す。対角線より上（赤色系のセル）は2つの分野間での連携を示す。対角線より下（黄色系のセル）は3つ以上の分野にまたがる連携を黄色系で表す（1つの連携に対して3つ以上のセルが塗られる）。濃色のセルは論文に至ったものを示し（色が濃いほど論文数が多い）、淡色のセルは進行中のものを示す。

A02 が B01 と連携して成果を出している様子や、A03 内での計画班・公募班の連携が非常に活発である様子、さらに A01, A02, A03 の垣根を超えた異分野連携も試みられている様子が分かる。

本領域が始まった時はコミュニケーションすら困難だったものが、インターフェース研究者が企画する勉強会やワークショップ、「物質と情報科学セミナー」といった研究項目 B01 によるチュートリアルを通して領域内の交流を促したことで、コロナ禍という困難な状況にもかかわらず連携を推進することができた。



以下にいくつかの重要な連携例を挙げる：

「トポロジカル物質における数学と理論の接点」

古田 (A01-1) [数学]、橋本 (A01-2) [理論]、深谷 (A01 公募) [理論]

A01-1, A01-2 が互いに触発され、それぞれの視点から高次トポロジカル物質についての2つの新しい概念の提示につながった。

「離散曲面の数学理論と物質系としての実現」

小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]、高見 (A03-3) [実験]、阿波賀 (A01 公募) [実験]

「離散極小曲面論」の数学理論の構築、離散曲面の細分の考察による物質系としての負曲率構造の提示、 μm レベルの多重多連続構造の作成、分子レベルでの多重多連続構造の作成が連携することで、本領域における数学側・材料科学側の課題を擦り合わせた。

「3次元ネットワークに付随する相分離に関わる三重周期極小曲面とネットワークとの対応」

下川 (A02-1) [数学]、小谷 (A03-1) [数学]、内藤 (A03-2) [理論]

離散幾何解析の手法を用いてコアネットワークの適切な配置を与えるエネルギーに関する研究を実施した。後に「改良型標準実現」の手法開発とグラフ系での実証につながった。

「複雑ネットワーク解析に基づく高分子構造-物性の記述」

大西 (B01-1) [情報]、天本 (B01 公募) [情報、実験]、青柳 (A02-2) [計算]、小椎尾 (A02 公募) [実験]

複雑ネットワークの概念と手法を持ち込むことで、高分子の構造-物性相関解析に関する領域内の方向づけに大きく寄与した。

「トポロジカル物質の電子状態の精密測定とデータ解析」

一木、徳田 (B01-1) [情報]、相馬 (A01 公募) [実験]

画像処理法の適用検討から始まり、電子状態の精密測定と統計的手法を組み合わせる物理モデルを同定できる、非常に汎用的な手法の提案につながった。

9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

○ 計画研究における状況

平均して約4割の予算を若手人材の人件費に充てた。また、約2割を研究打ち合わせ、研究者招聘、成果発表旅費、成果発表等に支出した。新型コロナの感染拡大前の打ち合わせへの支出は特に活発であった。一方、設備備品費への支出は約2割に抑えられており、計算機を多用する研究においてもハードウェアの購入と外部の計算機センターを併用するなどの工夫が見られた。数学や理論のウェイトが大きいこともあるが、**若手の育成と班の内外の人的交流の促進を目的とした支出を重点的に工夫**するなど、領域運営の方向性に沿った執行がなされている様子が分かる。

○ 公募研究における状況

実験の要素を補う必要が生じたこともあり、公募研究への予算の配分を手厚くした。実験系の採用件数は半数を超えており、公募研究全体の予算の5割弱が設備備品費に支出された。試薬や消耗品への支出と人件費がそれぞれ約2割であり、妥当な割合で執行が進められたものと判断できる。

○ 総括班における状況

領域全体の予算の約2割を総括班の活動に充てた。総括班の予算の約5割を使って複数のインターフェース研究者を雇用し、領域内の連携を促進しつつ若手人材の育成を進めた。約2割は後述する計算サーバやレーザー顕微鏡/3Dプリンタといった共用の設備備品の整備に充てた。約1割を分担者への配分と連携奨励費に用いて、分野を越えた連携研究に対する打ち合わせ旅費や成果発表費用の支援を行なった。同じく約1割を、総括班主催の会議（シンポジウムや領域会議等）にかかる旅費や会場代として支出した。コロナ禍の影響で思うような執行ができなかった部分はあるが、**数学と材料科学を掲げて大きく異なる分野間の連携を促す目的で、できるだけ工夫を凝らした執行ができた**と考える。

総括班における支出の工夫を以下に具体的に述べる。

(1) インターフェース研究者の雇用

学位を取って日の浅い若手研究者を研究項目A01, A02, A03, B01にそれぞれに割り当て、次世代のリーダーとして育成した。彼らには、①研究項目内での会議や勉強会を企画&実施、②領域のニュースレターの編集と発行、③内外の集会で学際的研究の流れを情報収集、④プレーヤーとして自身の研究と連携研究を推進する役割を課し、人材の輩出と領域全体の活性化に大いに寄与した。

(2) 連携推進奨励費の導入

計画研究・公募研究を問わず、複数の研究項目に跨る活動を対象として打ち合わせ旅費や成果発表費用をサポートした（期間を通じて10件、平均40万円/件）。若手にとって論文掲載費の支援は大きかったようである。

(3) 共有インフラの整備

若手研究者が貴重な予算・時間・機会を有効利用できるように、また領域内での連携研究の母体となる「バーチャルラボ」の形成が進むことを期待して、総括班として計算機システムや共通機器の導入・運用を行なった。

① 共用計算機

近年は商用・フリーを問わず研究に役立つソフトウェアが数多く入手でき、ちょっとしたアイデアを試すためにシミュレーションや数理解析を行うことが容易になっている。インターネット経由でアクセス可能な高性能サーバ6台からなる**計算機クラスタを導入・管理し、有用なソフトウェアのインストール・更新を行う手間を総括班で担う**ことで、領域全体の予算と研究者の時間を有効に利用できるように

した。コンパイラを核とする開発環境、ポピュラーな分子動力学ソフト、電子状態計算ソフト、数式処理ソフト、画像処理ソフト、さらに東北大学 AIMR で開発した材料科学用パーシステント・ホモロジー計算ソフト「HomCloud」などを用意した。機械学習を気軽に試せるライブラリ群や GPU 型アクセラレータも用意した。バッチ型ではなく対話型の環境を提供して利便性を高くしたこともあり、**常時 10 名程度のアクティブユーザ**の利用があった。

今後、この計算機システムの一部は国立情報学研究所 NII のデータリポジトリ基盤に結合し、領域内で開発した手法（A02-1 で開発された結び目理論に基づく構造の分類法など）を**外部から利用できる形で成果公開に役立てる**予定である（成果とりまとめ課題）。

② 共用装置

レーザー顕微鏡（キーエンス社製）と 3D プリンタ（Ultimaker S3）を東北大学 AIMR に設置した。

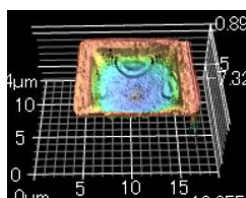
レーザー顕微鏡の空間分解能は表面形状解析に一般的に用いられている原子間顕微鏡に次ぐレベルのものであるが、カンチレバーを用いる原子間力顕微鏡に比べて操作が各段に簡便であり、より広い領域を短時間で測定できる。微細加工した立方体状の枠にマイクロメートルスケールの極小曲面が形成された様子を直接観察できるなど本新学術領域における物質の 3 次元形状測定・解析に適しており、理論研究者が測定の際に立ち会うことで、実験研究者、数学・理論研究者、インターフェース研究者間で議論を深めることができると期待した。

3D プリンタは数式で記述された複雑な立体造形物を出力することに適している。特に、A02 班や A03 班では「結び目」や「絡み」「多連続多孔質構造」といった研究対象を扱っているため 3D プリンタが有用な場面が少なくない。計算機の画面の中での可視化だけでは得られない気づきをもたらすことで、レーザー顕微鏡の場合とは逆に、実験の研究者が数学・理論研究者との議論に加わりやすくなる場面も期待した。

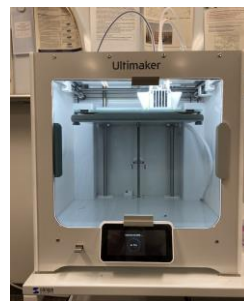
これらの機材の運用はコロナ禍による制限のため想定どおりには至らなかったが、今後も共用設備として領域 OB・OG などに公開したい。



レーザー顕微鏡



μm レベルの枠を用いた極小曲面材料の観察例



3Dプリンタ



数式に基づいて生成した網目の出力例

なお、領域設定期間最終年度の繰越しは行わなかった。

10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

本提案は、数学（特に離散幾何解析学）と物質・材料科学の協働により、「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」であった。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。世界に先駆けた試みを多数行なった結果、いくつかの成功例が生み出され、今後につながる多くの重要な課題も特定できた。

【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สปิน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。

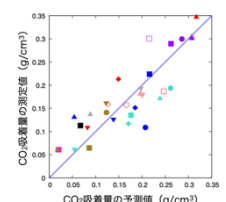
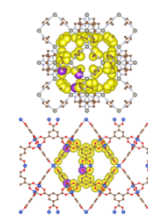
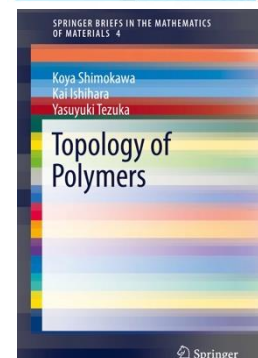
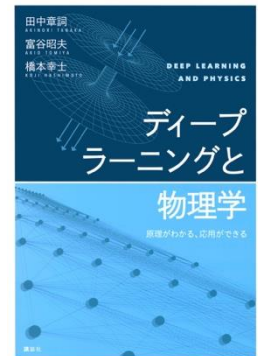
【数学と高分子材料】

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、テキストも出版された。一方、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もたらしつつある。

【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・性質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)のような実際の材料物質でその有用性を示せたことで産業界も関心を示し、経団連数理活用産学連携イニシアチブが立ち上がった。一方、物質科学の課題から刺激を受けて離散幾何解析がより豊かに進展したことも注目し得る。数学・物質・材料科学を問わず、参加研究者の多くが数学・数理科学の研究会やシンポジウムでの招待講演やレクチャーに招かれたことが、数学コミュニティからの関心の高さを示している。

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新興・融合領域の創成を達成した。得られた数々の手法や知見を素材開発へ展開することが期待されている点で、産業的・社会的にも大きなインパクトを与えている。本研究期間の終了はひとつの通過点であり、今後もその潮流は勢いを増すものと確信する。



構造的（位相幾何学的）特徴を活かしたMOFの特性評価

11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和4年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

本領域の構成メンバーに関しては、計画研究代表・公募研究代表を含め全体的に若手研究者を意識的に多く採用した。彼らが課題の発見と解決のために領域内で連携しやすい環境を用意することが、数学、理論・計算、実験、情報にまたがる異分野融合人材としての成長につながる。特に、数学や物質・材料科学の専門性をもつ若手研究者が情報科学のトレーニングを受けつつ、他分野との共同研究を推進することでコミュニケーション能力を育み、従来の研究者とは異なるマインドセットを持つことが重要であるという認識のもとに、育成に注力した。

若手育成プログラム

- (1) A01, A02, A03 毎に企画した領域内チュートリアル型セミナーによる勉強会やワークショップ、B01 による「物質と情報科学セミナー」「物質と幾何学セミナー」を通じた**スキルと素養の向上**
 - (2) 国際アドバイザーによる集中講義、若手発表会を通じたアドバイスなど**国際的な感覚の養成**
- 研究期間の後半では足腰を鍛えた若手を海外に派遣して知見を広めてもらうことを企画していたが、コロナ禍により実現できなかったことが非常に残念である。

インターフェース研究者の配置

学位を取って日の浅い研究者を採用し、研究項目 A01, A02, A03, B01 にそれぞれアサインした。彼らには**異なる分野のメンバー間の意思疎通を助け、自らも連携研究のプレーヤーになる**ことを求めた。具体的には、以下の活動に取り組んでもらった。

- (1) 勉強会や班会議の企画を担当し、領域メンバー間の研究接点をコーディネートする
- (2) ニュースレターの作成を通して多くの領域メンバーと個人的な面識を得つつ異分野の研究を伝える

これらの結果、領域活動に真摯に取り組んだ多くの若手のプロモーションが報告されている。また、デジタル化社会において数理能力と専門領域の知識を兼ね備える人材への期待値は高く、分野を超えて活躍の場を広げる例も少なくない。

12 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

坪井 俊（理化学研究所・数理創造プログラム・副プログラムディレクター、 武蔵野大学・教授、東京大学・名誉教授）

本領域は2017年度後半に開始され本年2022年に終了した。2020年から終了までの期間はCOVID-19蔓延のもとで研究集会・研究アウトリーチが制限された。オンラインでの研究連絡・研究集会等の開催は行われ、研究自体はそれぞれの分野でも分野横断的にも大きな前進を見ることができた。一方、本領域の存在を示すことによる、予見されていなかった分野の研究者や社会にむけてのさらなる広がりを期待もしていたが、COVID-19蔓延のもとで研究期間後半には困難があり、この領域で育まれた最先端研究者の連携交流の継続と育てられた若手研究者の今後の更なる活躍に期するものである。

専門とする数学から見た本新学術領域研究の後半期間の大きな成果は、今後の連携を支える理論的基礎を数理科学からも物質科学からも共有できる基盤として構築し、論文として出版して、さらに広い分野の研究者の参画が得られるようにしたことと思われる。実際、A01研究からのコーナーのあるドメインウォールを設定したアティア・パトーディ・シンガーの指数定理の定式化にかかわるいくつかの出版物は、数理科学の研究者からも物質科学の研究者からも理解される形に書かれており、今後の協働の基礎となるものである。この論文作成に将来を嘱望される若手研究者が数多く参加していることは特筆に値する。21世紀の3次元多様体論に基づく空間グラフ（ネットワーク）絡み目や分岐曲面の研究が、A02研究により実際のペプチド鎖のネットワーク解析に応用できていることも際立った成果である。A03研究においても空間3又グラフの曲率とそれの定める曲面に関する理論も論文にまとめられ、実験への示唆を与え、炭素膜の欠陥やドーピングされた炭素膜を用いる触媒設計の方法に新たな地平をもたらしている。

理論物理、学習理論との関連においても時空を次元が1高い時空の境界とみるホログラフィー原理は、数学におけるサーストンプログラム等との親和性が高いものであるが、A01研究による量子的ブラックホール理論と学習理論の平行性、それと物質科学における量子状態の関連の指摘は前半期間でなされ、それは後半期間に領域内研究者、領域外の研究者の研究を刺激誘発させるものとなった。この研究から新たな学術変革領域研究が生まれたことは今後の更なる発展を期待させる。

B01研究においてもネットワーク解析、機械学習、統計力学手法を駆使して、様々な材料物性を明らかにしている。むしろ実験に近い研究者がニューズレターにおける感想等で数理科学者との連携が有効であったことを述べており、さらなる連携を予感させるものである。領域におけるインターフェース研究者の配置によるものも含め、領域内における共同研究での成果が多数あることも素晴らしいと思う。

本領域に参画した研究者は、各分野で世界を牽引する方々であり、本領域での研究成果、研究姿勢は、数学コミュニティにおいて高く評価されている。多くの若手研究者が参画し、新しいキャリアパスが実現されていることも含め、数学・数理科学の研究者にとって様々な分野への応用とともに発展していく数学が目に見えるものになっており、本領域から派生する研究はより多くの研究者をひきつけるものになっている。さらなる発展を期待している。

常行 真司（東京大学・理学系研究科・教授）

本領域は全国の数学者、数理物理学者、計算科学者、実験研究者を巻き込み、数学と材料科学をつなぐ新しい学術領域の確立という、まさに新学術領域にふさわしいテーマに取り組んできた。

A01では、高次トポロジカル相に関する先駆的な取り組みにより、その理解をすすめた。また深層学習とAdS/CFT対応の関係性に着目し、離散幾何学の手法を応用して、超弦理論のホログラフィー原理で発生する創発時空を決定する方法を開発した。この研究は、量子重力研究と強相関物性研究をつなぐAdS/CFT対応を現代的な数学とデータ科学によりさらに発展させた重要な成果であり、今後、双方に大きなインパクトを与えることが期待される。

A02では高分子のトポロジー構造とトポロジーがもたらす物性を解析する様々な手法が開発された。多数のペプチド鎖が編み込まれてユニークな球殻構造を形成したインターロック化合物の自己組織化構造の発見とその解析に成功したほか、相分離構造を持つ高分子材料の画像データから相互作用パラメー

タの評価を実現するなど、高分子材料研究に数学と情報科学の知見を持ち込むことに成功している。

A03 では、原子の作るネットワークを離散曲面として取り扱い、隠れた特異点の解析・分類を通して、多層・多孔質材料の最適構造を予測する手法を構築した。この数学側からの発展に呼応して、炭素材料の触媒能力と離散局面構造との関係性が実験的に明らかにされたほか、これまでにない極小曲面を有するセラミックス薄膜形成の技術開発も行われている。二次電池など社会的ニーズの高いデバイス用に、様々な多層・多孔質材料の可能性が模索される中、その複雑な構造の設計指針につながる数学的手法ができたことは、今後につながる大きな成果であろう。

B01 では情報科学的視点で高分子材料のネットワーク解析手法や光電子分光実験のデータ解析手法などを開発した。B01 の研究活動は、領域内の連携研究に大きく貢献している。

このほか本領域では多数の公募研究を採択しており、多数の連携研究を通して成果が得られている。また若手人材の育成のためにチュートリアル型セミナーや勉強会、ワークショップなど多数の試みがなされており、実際、多くの若手研究者がプロモーションを果たしているのが印象的である。コロナ禍の中、領域内の研究者が一堂に会することが難しいという状況の中で、領域の努力によってこれだけの成果が得られたことを高く評価したい。

塚田 捷 (東京大学・名誉教授)

本新学術領域研究は、離散幾何解析学と呼ばれる数学の視点と方法を物質・材料科学研究に導入し、数学との融合による新しい学術領域を開拓することを目的にかかげた。これを実現するためには、その初段階として異分野間の協働研究を実現し有効性を実証することが必要だが、本新学術領域研究の5年間に渉る成果から、その条件が十分に達成されたと確認できる。本新学術領域研究では、指数定理とトポロジカル物質、ネットワーク解析と高分子材料、極小曲面とナノ構造、物質科学と情報科学という主項目を設定してスタートしたが、実験系を含め多くのすぐれた若手公募研究者が参加し当初の計画研究を補強することになった。また情報科学の基盤を担当した計画班とインタフェース研究員とは、チュートリアルやセミナーを活発に行い、異分野間の交流に大きく寄与した。

共同研究によって多くの優れた具体的な成果が得られたが、特筆すべき例としては以下の様なものがある。トポロジカル物質の数学と物性物理学との関係では、指数定理の物理的な本質がドメインウォールのモデルによって把握され、また高次トポロジカル物質の概念が明確にされたことは大きな成果と言える。また強相関係のトポロジカル性について、機械学習による研究法の導入に成功したことも特筆に値する。高分子材料のネットワーク解析についても、離散幾何解析学は有効な指針を与えることが示された。その例として、高分子が絡み合ったカプセルの実現が挙げられる。また深層学習法を利用して、ポリマー混合エントロピーの評価法や構造安定性の予測法などが開発されたことも重要な成果と言える。

また多孔質材料を構成する極小曲面や特異点について離散幾何解析学の数理モデルを解析し、材料の性質や機能との関係を予測する手掛かりが得られた。例えばグラフェンの曲率が集中する点という反応場のアイデアを基に、多孔質炭素材料を作成し触媒能力を検証したこと、マイクロ系で実験的に極小曲面を作りその機能探索を行ったことも興味深い試みである。情報科学的な基盤を担当した計画班は、領域内の各グループと緊密に協力して分野連携のための普遍的方法論を開発する上で大きく寄与した。例えば高分子ネットワーク構造の解析や応力集中と架橋点の関係解明で具体的成果をあげ、ベイズ手法を用いた電子構造の解析法などで大きな成果を導いたことは高く評価できる。

純粋数学と物質・材料科学とは、従来、かなり異質なものと考えられており、両者が協力する機会はまれなことであった。しかし、最近における両分野のフロンティアの拡大と急速に発展する情報科学のインパクトは、分野間協働の実現可能性と必要性を増大させている。この点からも、本新学術領域研究における試みの意義は大きい。本領域では幾つかのタイプの問題において、数学と物質・材料科学の連携が極めて有効な果実を結んだことが実証されており、今後の分野融合の発展に強い期待を抱かせるものである。コロナ禍という状況下でもセミナーやチュートリアル活動などを活発に行い、意欲的に異分野交流に取り組んだ若手研究者と領域代表の指導力に敬意を表したい。