



研究領域名 次世代物質探索のための離散幾何学

東北大学・大学院理学研究科・教授

小谷 もとこ 元子

研究課題番号： 17H06460

研究者番号： 50230024

【本領域の目的】

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なく、時には生活のスタイルや価値観を変える力を持つ。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、それは主に研究開発者の経験と勘に基づく試行錯誤によるものであり、新物質の創製には20~30年の長時間がかかると言われている。

このようななかで、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)を開始している。蓄積された知見を計算機により探索・分類し、求める機能を持つ物質の構造をスクリーニングしようとするものである。しかしながら、物質・材料の構造・機能の相関は多重スケール・多重物理が同時にかかわる複雑なものであり、単なる情報科学的アプローチで成果をあげることは難しいという指摘も多い。

大量のデータから「意味」を取り出すには、物質・材料科学者が理解して想像力を刺激される「よい記述子」によって情報が整理される必要がある。物質の階層構造を人間の直観に沿う形で記述し、物質・材料創製の鍵といわれている「構造・機能・プロセスの相関原理」を解き明かせるように物質探索を実質化・有効化する基盤が求められている。

本提案では、まさにこのような気運の高まりの時期に、日本が優位性を持つ数学と物質・材料科学が協働し双方向に刺激を受け深化し、普遍的かつ数理的な物質・材料科学という新領域を創成しようというものである。

【本領域の内容】

物質・材料開発の鍵である構造・機能・プロセスの相関原理の解明とそれを可能とする幾何学的手法の開発を目指す。特に、**無秩序系**や**多重階層系**に対して離散幾何解析学の最先端知見を適用し、ミクロ・メゾの構造とマクロな物性の関係を明らかにすることで、材料開発の方向を**順問題**から**逆問題**へと転換する基盤を築くことである。本提案では離散と連続をつなぐ離散幾何解析により、多様性の後ろに隠れている構造をあぶりだし、複雑な物質・材料の統一的理解の基盤を作ろうとするものである。

数学と物質材料科学の協働により下記の研究項目に取り組む。

- A01 (無機系) : トポロジカル物質
- A02 (有機系) : ネットワーク解析による高分子材料
- A03 (複合系) : 極小曲面とナノ構造の動的構造形成

特に、離散幾何解析学を用いることで**秩序系から無秩序系(ランダム系・複雑系)への統一理論、静的制御から動的制御への拡張**を目指す。

【期待される成果と意義】

学術面では、構造・機能・プロセスの相関原理が深まり、情報科学やデータサイエンスの力を用いた新たなフェーズの物質・材料探索が進展する。また、数学においては複雑で多重スケール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が大きく進展する。これらを通じて、ビッグデータ社会に応える材料開発と人材育成に貢献する。

【キーワード】

離散幾何解析学：マクロな幾何構造を解析する幾何解析学の離散版が離散幾何解析学である。離散データの背後にある連続構造を見出す手法を開発することで、離散と連続の関係を理解する。

データ駆動型物質探索：従来の材料開発が構造から機能を見出す順問題とすれば、求められる機能を持つ構造を探索する逆問題をデータ解析的手法で解くことを目指すのが、データ駆動型物質探索である。マテリアルズ・インフォマティクスともいう。

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度 - 33 年度

1,002,900 千円



ミクロ・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)



Title of Project : Discrete Geometric Analysis for Materials Design

Motoko Kotani
(Tohoku University, Graduate School of Science, Professor)

Research Project Number: 17H06460 Researcher Number: 50230024

【Purpose of the Research Project】

Creating materials with outstanding functions supports our affluent life and can change our lifestyles and values. Japan is a world leader in materials science and industry, but creation of new materials is due to trial and error based on the experience and intuition of researchers and developers, and takes 20-30 years.

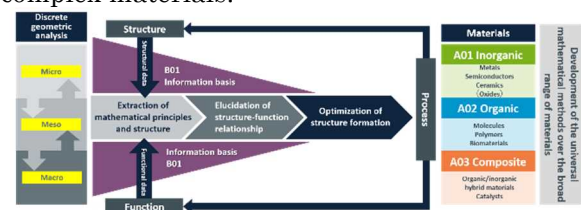
So major data-driven materials design projects applying information science have started in the US, Germany, China, etc. (e.g. Materials Genome Initiative). Computers use findings for search and classifying and material structures are screened for functional materials. But material structure and function correlations are complex, multiscale and involve multiphysics, so getting results with just information science is difficult.

To get meaning from masses of data, scientists must organize information with “good descriptors” that stimulate the imagination. A foundation for realizing and validating materials design is needed to describe layered structures intuitively and reveal the “structure, functions, processes correlation principle” that is key to material creation.

In this context we propose a universal and mathematical materials science through collaboration between mathematics and materials science in which Japan is strong.

【Content of the Research Project】

The aim is to understand the key structure, functions, processes correlation principle and develop geometric methods for that. We apply the latest findings of discrete geometric analysis to **disordered systems** and **multilayered hierarchical systems**, to clarify micro/mesoscopic structure and macroscopic property relationships, to change materials development from a **forward problem** to an **inverse problem**. We use discrete geometric analysis connecting discrete and continuous to find structures hidden behind diversity, and build a foundation for a unified understanding of complex materials.



Elucidating Process-Structure-Function relationship through network analysis of hierarchical structure of materials, especially by focusing on micro, meso, and macro structures (change from forward problem to inverse problem)

We work on the following research based on collaboration between mathematics and materials science.

- A01 (inorganic): topological materials
- A02 (organic): polymeric materials using network analysis
- A03 (composite): dynamic structure formation of minimal surfaces and nano-structures

In particular, we use discrete geometric analysis to expand the unified theory from ordered to disordered systems (random and complex) and from static control to dynamic control.

【Expected Research Achievements and Scientific Significance】

In academia the structure-function-process correlation principle is deepening, and new phase materials are being created using the power of information science and data science. In mathematics discrete geometric analysis and discrete dynamical systems that understand complex and multiscale structures hierarchically and study the correlation of discrete and continuous are making great progress. These contribute to materials development and human resources development for the big data society.

【Key Words】

Discrete geometric analysis: The discrete form of geometric analysis analyzing macroscopic geometric structure is discrete geometric analysis. The relationship of discrete and continuous is understood by developing a technique to find the continuous structure behind the discrete data.

Data-driven materials design: If conventional materials development is the forward problem of finding functions from structure, aiming to use data analysis techniques to solve the inverse problem of finding structures that have the required functions is data-driven materials design. It is also called materials informatics.

【Term of Project】 FY2017-2021

【Budget Allocation】 1,002,900 Thousand Yen