



数学と化学

～デジタル化社会における新しい連携を探る～

Motoko KOTANI

小谷元子

東北大学大学院理学研究科 教授 兼 材料科学高等研究所 所長
理化学研究所 理事



世界は数学を求めている

U. S. Bureau of Labor Statistics (BLS) が労働環境・収入・将来性などを基に解析する The best Job 2014 (ベスト職業) に1位数学者が、3位統計学者、4位アクチュアリー (数理保険士)、7位ソフトウェアエンジニア、8位コンピューター・システムアナリストが挙げられている。2017年は1位データサイエンティスト、2位統計学者、3位情報セキュリティアナリスト、6位数学者、7位ソフトウェアエンジニア、8位コンピューター・システムアナリスト、10位アクチュアリーである。

1998年のNSF報告書(オドム・レポート)において「数学と諸分野との融合研究の重要性」が唱われたのを契機に世界中で数学と諸分野・産業界の連携への大きな動きが始まった。複雑化する社会課題、変化への加速、高性能コンピュータや情報技術の高度化のなかでイノベーションの基盤となる数学への期待が高まっている。ビッグデータ、AIという言葉が聞かない日がない今日、数学者はそれに応えられているだろうか。社会課題や産業ニーズに応えるデータ解析技術の開発や国民のデータ・リテラシーの向上も重要であるが、データ駆動社会においてデータから情報を、情報から意味を取り出し、人類の知恵とするためには、結局は「複雑現象の数理モデル化」が必要なのである。

自然現象を記述する

自然のなかには対称性が満ち溢れている。自然は「最小作用の原理」に基づいてもっとも効率のよい形や運動を選んでいっているのだが、その原理に従って選ばれた形や運動は何故か我々がもっとも美しいと感じる対称性の高いものとなる。ニュートンやライプニッツによって創始された「微積分学」を道具として、18世紀に確立された「変分法」は、「宇宙を記述する言語」を提供するという数学の役割を明確にした。

一方で、方程式の解の公式を得ようという素朴な問題から19世紀にアーベルやガロアによって発明され、数学の重要な研究対象として発展した「群」により、様々な対称性をシステムティックに扱える。例えば、結晶や分子の対称性は群論によって記述できる。周期性がないにも関わらず繰り返し模様が現れる準結晶の記述には群の子分のような「亜群」が使われる。

微分方程式で記述された自然現象の多くは対称性を持っている。このことに注目し、変分法に群論・群の表現を持ち込み解析する手法は、物理や化学における標準的手法として確立している。周期性のある場合の「フーリエ解析」が典型例である。

最近では生物現象のような複雑な現象ですら数理モデルにより記述しようとする研究が活性化している。特に、ダイナミックに変動しながら発展していく複雑な系の背後にある単純な機構を見いだすことは数学にとっても魅力的な挑戦である。

トポロジーと幾何

化学や物質科学は構造と機能の関係を明らかにしようとする学問である。構造を記述する用語をどれだけ持っているかが勝負の鍵となろう。複雑な形状を画像としてそのまま取り扱うこともできる時代になったが、「わかった」という気持ちになるには、幾何学的な記述子により構造を捉え、機能データとの相関をみる、そしてそこから「相関を超えて因果を見いだす」のが良いやり方である。様々な現象をできる限り抽象的・普遍的に記述することが、発達著しいデータ科学や計算科学を活用するためには必要なのである。

幾何学は形を扱う学問分野であり、ギリシア時代に遡る長い歴史があるが、現代盛んに研究されているのが、「リーマン幾何学・幾何解析学」と「トポロジー(位相幾何学)」である。前者は「ものさしと分度器の幾何学」とも呼ばれ、もともとは測量技術として発展した。オイラー、ガウスによって18～19世紀に曲線や

曲面などの「曲がった形を記述する」ことを目的にはじまり、非ユークリッド幾何の発見を経て、19世紀中ごろにリーマンによって「リーマン幾何学」として統合された。アインシュタインの相対性理論においてこの枠組みが重要な役割を果たしたことは良く知られている。特に、微分方程式を用いる幾何学を「幾何解析学」という。

一方、トポロジーもその芽生えはオイラーにあると言われるが、現代のトポロジーの基盤はポアンカレによって19世紀終わりごろに確立された。トポロジーはよく「ゴム膜の幾何学」と呼ばれる。コーヒーカップが徐々に変形してドーナツになる絵を見た方も多いと思う。ゴム膜でできた図形を引っ張って伸ばしたり縮めたりすると形が変形するが、このような変形で移りあう形は「同じ」とみなす。リーマン幾何・幾何解析が図形の詳細な形にこだわるのに対して、形を大雑把に理解しようとするのがトポロジーである。

トポロジーが扱うのは、「関係性」である。例えば交通網は、駅と駅がどの線で結ばれているかを表す。駅間の距離や線路がどのように曲がっているかというような詳細はとりあえず無視して、繋がり方だけを問題にする。特に重要な情報として、分岐、ループ(閉路)、孔などがあり、これらは「トポロジー不変量」として数値化される。より高度には「結び目」や「絡み目」などのように考えている図形の補集合に注目することもある。例えば、多孔質物質などを考えるときには、「孔」の部分が重要であろう。すなわち、考えている物質の外側(物質がない部分:これを補集合という)にどれくらい密で効率の良い輸送経路があるのか、ループや穴はどのようにつながり、絡み合っているのか、そのようなことが機能に係ってくる。トポロジーは抽象的数学として発達したが、最近では応用を意識した「計算トポロジー」という領域が急速に発展している。多量のデータから本質的な構造を取り出すための「トポロジカルデータ解析(TDA)」が注目されている。

物質の構造を記述する際に、リーマン幾何学・幾何解析もトポロジーも有益であるが、どちらも「帯に短し、たすきに長し」の観がないでもない。前者は詳細な幾何構造を捉えるが必要以上に細かい情報まで拾ってしまう。後者は大雑把すぎて必要な情報を落としてしまう。例えば多孔質物質の孔の部分を輸送経路と考えるときに、まず重要な要素はそのつながり方(トポロジー)であるが、経路の長さや曲がり方、孔の広がり具合など詳細な情報(リーマン幾何・幾何解析)も

関係してくる。あまりに詳細を見すぎても良くないが、あまりに大雑把もうまくない。そのような認識のもとに幾何とトポロジーをつなぐ道具がEdelsbrunne, Carlsson等により開発されたパーシステント・ホモロジー¹⁾。トポロジカルデータ解析、画像解析の強力なツールであり、複雑構造の理解が鍵となる物質科学や生命科学で利用されている。

AIMRにおける萌芽的研究

東北大学材料科学高等研究所(Advanced Institute for Materials Research; AIMR)は数学と実験科学が一つ屋根の下で日々議論をする世界でも類を見ないユニークな研究所である。文部科学省「世界トップレベル研究拠点形成」プログラムにより2007年に設立され、2017年より大学の自己財源で運営されている。これまで3つのターゲット「数学的力学系理論による非平衡材料」「トポロジカル機能材料」「離散幾何解析による階層構造材料」をおき、これにより中期的にはデータ駆動時代にふさわしい「予見に基づいた材料開発の基盤」を構築すること、長期的には持続可能社会に貢献するグリーンマテリアルを創製することを目指している。トポロジカルデータ解析を用いたガラス構造、非可換幾何学を用いた無秩序系のトポロジー相、ネットワーク解析に調和解析を併せた多孔質物質、離散曲面論を用いた大きな分子の構造(特に炭素材料)の分類・数え上げなど、萌芽的ではあるが最先端数学を用いた新しい物質研究が始まっている。本当のブレークスルーは物質を知り尽くした専門家の知恵がないと生まれえない。0から1は専門家が、しかしそこから普遍的な仕組みを取り出し1を100にも1000にも展開するお手伝いをするのが数学の役割。21世紀に進展した新しい数学を使ってみよう数理学研究者はそのような化学・物質科学者がとことん議論してくれることを待っている。

数学と材料科学の連携への挑戦についてより詳しくは下記^{2,3)}をご覧ください。

- 1) <http://chomp.rutgers.edu/>
- 2) M. Kotani, S. Ikeda, STAM **2016**, 17, 253.
- 3) M. Kotani, S. Ikeda, Springer Briefs in the Mathematics of Materials, Springer **2015**, 1, 1.

© 2018 The Chemical Society of Japan

ここに載せた論説は、日本化学会の論説委員会の委員の執筆によるもので、文責は基本的には執筆者にあります。日本化学会では、この内容が当会にとって重要な意見として掲載するものです。ご意見、ご感想を下記へお寄せ下さい。
論説委員会 E-mail: ronsetsu@chemistry.or.jp