

計算ホモロジーによるガラスの特徴付け

松江 要*, 平田 秋彦†

1 始めに

身の回りには金属や化合物など、様々な物質であふれている。その中でシンプルな構造を持つ物として**結晶**があり、これは高校化学でも習うように体心立方格子、面心立方格子、六方最密充填格子など、高い対称性と周期性構造を持ち、解析も比較的低容易である。対して、このような規則性を持たない物質も数多くある。このような物質は俗に**非晶質構造**を持つと言われ、例えば**ガラス**等がそれにあたる(図1参照)。その不規則性故、実験においてもその構造は長年謎に包まれていたが、近年解析装置の技術も発達し、サブナノスケールで局所構造を直接観察できる所まで来ている([5])。本稿では、観察データやシミュレーションに基づいたモデルに対する非晶質の数理的特徴付けの試みを紹介する。なお、本稿の内容は東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR)における共同研究[6]について、数学的な内容と解析手法を補完するものである。

化合物は構成元素が違えば化学的結合による組成も大きく異なる。その違いは対応する化合物モデルの幾何学的構造の違いにも反映されているので、幾何学的特徴付けを行う事で材料の性質を数理的に分類出来る事が期待される。しかし結晶や膜などと違い、非晶質の場合は対称性・滑らかさや曲がり具合など考察すべき指標が明確でない。そこで最も単純な指標と思われる**繋がり具合**を軸に構造の考察を行う。そのためには、**ホモロジー**が役に立つ。

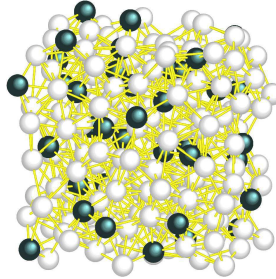


図1: 金属ガラス(ジルコニウム・プラチナ)モデル。一見、規則性があるようには見えない。

2 パーシステントホモロジー

ホモロジーは図形の**繋がり具合**という大域的な情報を与える。詳しくは[2], [7]を参照せよ。2000年頃から**計算ホモロジー**の理論が確立し、CHomP([1])を始めとしたホモロジー計算用ソフトウェア

*文科省委託事業 数学協働プログラム, 統計数理研究所 統計思考院, 190-8562, 立川(東京), kmatsue@ism.ac.jp

†東北大学原子分子材料科学高等研究機構, 980-8577, 仙台(宮城), hirata@wpi-aimr.tohoku.ac.jp

も整備される事によってホモロジーの応用が一気に展開された。材料科学に絞っても、合金の相分離 ([4]), ジブロックコポリマーのマイクロ相分離 ([8]) の解析などに应用され、物質の構造解析に貢献している。

ホモロジーは図形の繋がり具合のみを抽出し、**穴の大きさや位置などの情報は一切含まれない**。これは図形が内包する構造の特徴付けをする際の強みになり、弱みにもなる。今回相手にする化合物はその**原子配置**が構造や物性を決める1つの鍵となる。特に、原子を点あるいは球とみなした時の**点データ**が解析の対象となるが、ホモロジーそのものは“ただの点の集まり”としての情報しか与えない。よって、ホモロジーではデータの配置に隠された情報を抽出することは期待できない。そこで、原子や点配置などの考察する対象にある種のスケールを入れ、そのスケールを変化させる事によるトポロジーの変化を追いかける。この変化を見る事で、原子配置などの位置の情報や隠されたトポロジカルな構造を抽出できる。これが**パーシステントホモロジー**の考え方である ([2])。

金属物質の構造モデルを組み立てるとき、原子をある決められた半径を持つ閉球と見立てるのが一般的である。それを想定し次のような設定を行う。 $S \subset \mathbb{R}^3$ を有限点集合とし、 $S_\alpha := \{B_\xi(r_\xi(\alpha))\}_{\xi \in S}$ を中心 $\xi \in S$ 、半径 $r_\xi(\alpha)$ の閉球からなる集合の $\alpha (\in \mathbb{R}_{\geq 0})$ -パラメータ族とする。ただし $r_\xi(\alpha)$ は α の単調増加関数とする。この時、 α を増加させる事で S_α の位相的構造が変化していく。この変化をたどりやすく、また計算機などで扱いやすくするために以下の概念を導入する。

定義 2.1. 集合族 $U = \{U_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ の**脈体**を以下で定義する。単体複体 K_U であり、次の1対1対応により構成する： $p \in \{0, 1, \dots\}$ に対して、

$$\sigma \in K_U \text{ が } p\text{-単体} \Leftrightarrow \text{相異なる } p+1 \text{ 個の集合族 } \{U_i\}_{i=0}^p \subset U \text{ が空でない共通部分を持つ.}$$

集合族に対して単体複体を対応させているが、ホモロジーのレベルでの解析において、脈体を調べることが必要充分である事は以下の定理が保証している：

定理 2.2 (脈体定理). 集合族 $U = \{U_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ に対し、各 U_α が閉凸集合であると仮定する。このとき、 $\bigcup_{\lambda \in \Lambda} U_\lambda$ のホモロジーと U の脈体 K_U のホモロジーは同型。

原子に対応する閉球は明らかに閉凸集合なので脈体定理が適用でき、よって単体複体のレベルで考察すれば充分である事がわかる。

α を変化させると S_α 内の閉球の共通部分が増えていく。脈体のレベルでは、単体が加わっていく。そこで次を導入する。

定義 2.3. 単体複体のフィルトレーションを、増大列

$$\mathcal{K} = \{K^0 \subset K^1 \subset \dots \subset K^n\}$$

で、各 K^i ($i = 0, \dots, n-1$) が K^{i+1} の部分複体になっているものと定義する (図 2-(a))。

単体複体 K に対してその代数的対応、(p 次) **チェイン群** $C_p(K)$ を考える事で K の幾何学的構造を代数的に考察できる。この上にはバウンダリ写像 $\partial_* : C_p(K) \rightarrow C_{p-1}(K)$ 、 $\partial_{p-1} \circ \partial_p \equiv 0$ 、が定義でき、それにより次数加群 (C_*, ∂_*) は**チェイン複体**と呼ばれる物になる。これに対し、(p 次) **サイクル群** $Z_p(K) := \ker \partial_p$ と (p 次) **バウンダリ群** $B_p(K) := \text{Im} \partial_{p+1}$ 、それらに対する商加群 $H_p(K) = Z_p(K)/B_p(K)$ により K の p 次ホモロジー群が定義できる事を思い出そう。今、単体複体のフィルトレーション $\mathcal{K} = \{K^j\}_{j=0}^n$ が与えられた時、各 p に対して自然にチェイン群、サイクル群、バウンダリ群の増大列

$$\begin{aligned} C_p(K^0) &\subset C_p(K^1) \subset \dots \subset C_p(K^n), \\ Z_p(K^0) &\subset Z_p(K^1) \subset \dots \subset Z_p(K^n), \\ B_p(K^0) &\subset B_p(K^1) \subset \dots \subset B_p(K^n) \end{aligned}$$

が構成できる. これにより, 以下の商加群が定義できる: $p = 0, 1, 2, \dots$ に対し,

$$H_p^{i,j}(\mathcal{K}) := Z_p(K^i) / (Z_p(K^i) \cap B_p(K^{i+j})).$$

これはスケール i にある穴でスケール $i+j$ においても穴として生き残っているものを測っている. この加群を \mathcal{K} の p 次 (i, j) -パーシステントホモロジー群と呼ぶ. $j = 0$ の時は, K^i の p 次ホモロジー群と一致する.

パーシステントホモロジーにより穴がどのスケールで生成され, どのスケールで潰れるかを見る事で, 点配置 S , その中に隠された位相的構造を調べる事が可能になる. ここで重要なのは i, j の情報である. 特に各 (p) 次ホモロジー類 z に対して, 次のようなスケールが一意に存在する:

$$b_z := \inf\{i \mid z \in H_p^{i,j}(\mathcal{K}) \setminus \{0\}\},$$

$$d_z := \sup\{i+j \mid z \in H_p^{i,j}(\mathcal{K}) \setminus \{0\}\}.$$

定義 2.4. 各 (p) 次ホモロジー類 z に対して, b_z を z の**誕生時刻** (誕生スケール), d_z を z の**死亡時刻** (死亡スケール), $r_z := d_z - b_z$ を z の**寿命**と呼ぶ.

上記の特徴的スケールを可視化する事で, 穴の大きさ, 点配置の疎密さなどを読み取り, S_α の位相的構造をそのスケール変化を込めて測る事が出来る. 単体複体のフィルトレーション \mathcal{K} が与えられた時, 生成される全ての p 次ホモロジー類 z に対して b_z, d_z を求め, スケール変数 α を横軸として, 始点 $\alpha = b_z$, 終点 $\alpha = d_z$ の線分を各 z に対して上から順に並べる (この並べ方には任意性があるが, 死亡時刻が早いものから順に, 上から並べるのがわかりやすい). この線分の集まりを p 次**バーコード**という (図 2-(b)).

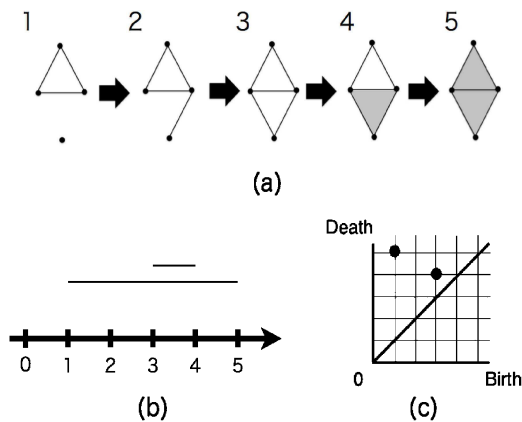


図 2: (a) : 単体複体のフィルトレーション \mathcal{K} . (b) : \mathcal{K} の 1 次バーコード. (c) : \mathcal{K} の 1 次パーシステンス・ダイアグラム $PD_1(\mathcal{K})$.

注意 2.5. 特徴的スケールの可視化の方法は以下のものも一般的である. 単体複体のフィルトレーション \mathcal{K} が与えられた時, 生成される全ての p 次ホモロジー類 z に対して b_z, d_z を求め, 横軸を誕生時刻, 縦軸を死亡時刻とした 2 次元平面に全ての (b_z, d_z) をプロットする (図 2-(c)). これに対角線 $\{y = x\}$ を加えた物を \mathcal{K} の p 次**パーシステンス・ダイアグラム** ($PD_p(\mathcal{K})$) と呼ぶ.

バーコード、 PD_p には集合族の摂動に対する**安定性**がある。この性質により、例えば原子の熱振動に依らない構造を抽出したり、データの摂動による PD_p の誤差を評価する事が可能となり、原子配置に隠された位相的性質を抽出するのに長けている ([2])。

近年では計算機により、与えられた点配置に対応する複体のフィルトレーションのパーシステントホモロジーを高速計算する事が可能になっている ([9])。その応用の1つとして、**たんぱく質の圧縮率**の考察がある ([3])。

注意 2.6. 以下、**金属ガラス**に焦点を当て、その構造解析にパーシステントホモロジーを応用する事を試みるが、本研究では単体を基本単位とした複体ではなく**方体**（点、線分、正方形、立方体、…）と呼ばれる基本単位で構成される方体複体を取り扱う。これは金属を含む化合物の構造を反映する数学的対象物を扱うことを意識している（注意 3.1 を参照）。なお、方体複体も単体複体と同様のホモロジー論を展開できる。詳しくは [7] を参照せよ。

3 金属ガラス vs. パーシステンス

パーシステントホモロジーを導入する事で、繋がり具合の観点から様々な材料の幾何学的構造、そこに隠された物性を原子配置などの点・観測データから直接評価できる事が期待される。本節では金属ガラスへの適用例を紹介する。

3.1 金属ガラス – その解析の難しさ

金属ガラスはゴルフクラブや腕時計のバンド、半導体のワイヤーなどに広く使われている。金属ガラスの研究は1960年代にアメリカのグループによる超急冷法を用いた金とシリコンの合金でガラス形成が発見された事に端を発し、1990年代に東北大学のグループによって3つ以上の金属を組み合わせて極めて安定性の高い金属ガラスが作成され、今日に至るまで多くの金属ガラスが開発されている。その特徴として、（これが結晶との決定的な違いであり、非晶質と呼ばれる所以だが）**試料全体にわたって原子が一見でたために並んでいるように見える事が挙げられる**。図1を見てもその様子が想像できるだろう。さらに金属ガラスは**原子がぎっしり詰まっているのが特徴だが、実際にその構造を知るのは難しい**。ぎっしり詰まった安定な構造を取る形として、結晶以外に**正20面体構造**が知られており、多くのモデルが提唱されているが、**正20面体構造のみで3次元空間を埋め尽くす事が不可能である矛盾**が解消しきれないでいた。

では、実際にどのような原子配置になっているのか？これまでにX線、中性子線回折を用いた数多くの実験がなされているが、結晶と違いガラスの原子配置には周期性が無く、**少数の非常にぼやけた散乱しか観察できない**。そのため構造の議論は、試料全体（ $\approx 10^{23}$ 個の原子）からの平均構造情報に基づくものしか成されてこなかった。

しかし近年、平田-陳（東北大WPI-AIMR）らの透過型電子顕微鏡（TEM）を用いた**オングストロームビーム電子回折（ABED）法**によりガラスの中の原子配置を直接観察できるようになり、それに基づいたガラスの原子配置モデルを議論できるようになった ([5], 図3も参照)。この手法を用いる事で金属ガラスの局所構造を議論する土壌が整ったわけだが、原子配置のみから熱揺らぎ等のいわゆる“小さなノイズ”に依らない本質的な情報をどのように抽出すれば良いだろうか？ここで、パーシステントホモロジーの出番である。

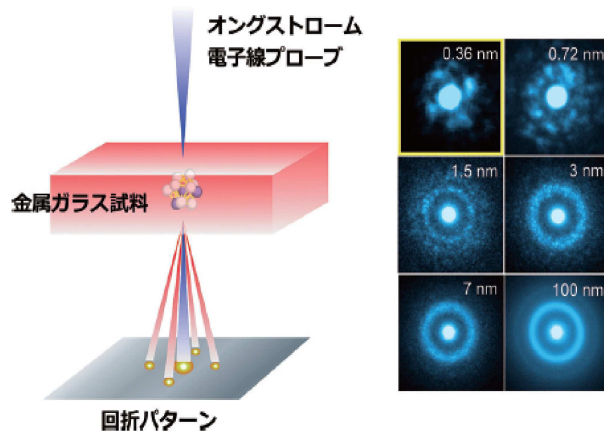


図 3: オングストロームビーム電子回折法. 細い電子線を針 (プローブ) のように用いて電子回折パターンを観察する (透過型電子顕微鏡 (TEM)). さらにプローブを約 4\AA まで絞る事で回折に寄与する原子の数を劇的に減らし, リング状のぼやけた散乱でなく離散的な回折パターンを抽出できる. 10^{23} 個程度の原子をまとめて観察していた状況から, 数十個単位での原子の観察が実現した ([5]).

3.2 解析手法

パーシステントホモロジーを応用した解析手法の詳細を解説する. 基本的には次のステップで成される:

1. 金属ガラスのモデルを形成する. ここでいう “モデル” とは第一原理 MD シミュレーションに基づき, 金属ガラスを構成する原子達の配置のある時刻におけるスナップショットを表し, 3次元空間における m 個の原子の位置座標と金属原子に対応する金属結合半径をデータとして有しているものとする. 第一原理 MD シミュレーションで得られるモデルは, 実際の金属ガラス試料に対して ABED 法を適用し, 観測された原子配置と比較が可能である ([6]). 今回は 2 種系化合物のみを扱う. モデル内の元素を A, B , 対応する金属結合半径を R_A, R_B とする. 多種系においても同様のアイデアを適用できる事に注意する.
2. 得られた金属ガラスのモデルに対し, 次の手順に従い複体のフィルトレーションを構成する.
 - (a) 3次元空間の有界領域で, 金属ガラスモデルを構成する m 個の原子を全て含むものを適当に取り, それらのあるサイズの立方体でグリッド分割する.
 - (b) 各原子の座標 $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$ を中心とした半径 R の球を作り, それを含む最小の方体の和集合を中心 \mathbf{x}_i , 半径 R の球の方体表現とし, $C_{\mathbf{x}_i}(R)$ とする. 図 4 参照.
 - (c) 各原子 \mathbf{x}_i には, モデル生成の際に定義された金属結合半径 $R(\mathbf{x}_i)$ が割り当てられている. 元素 A, B に対応させて, 各 i に対して $R(\mathbf{x}_i) = R_A$ または R_B として定義されている. $R_A < R_B$ としても一般性を失わない. ここで, $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$ をある $j \in (1, n)$ に対して $\alpha_j = 1$ となる数列とし, $\mathcal{K} := \{K_j\}_{j=1}^n$ を $K_j := \{\bigcup_{i=1}^m C_{\mathbf{x}_i}(\alpha_j R(\mathbf{x}_i))\}$ が生成する脈体のフィルトレーションとする. 図 5 参照.
3. 上記のフィルトレーション \mathcal{K} のパーシステントホモロジーを計算する.

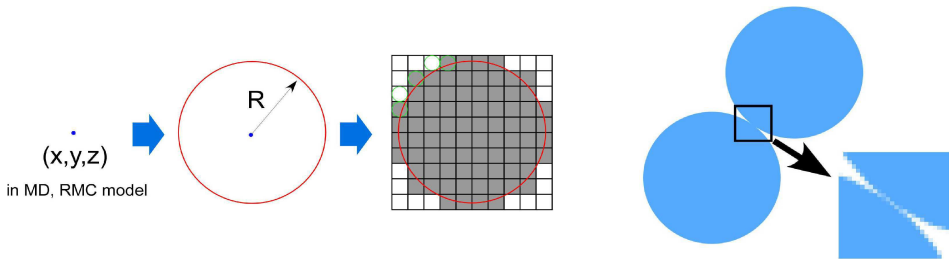


図 4: 左図: 原子の立方表現. 中心 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ と半径 R を決め, 半径 R の球を含む立方体の集まり (灰色で表現) により原子球の立方表現 $C_{\mathbf{x}}(R)$ を実現する. 右図: 立方表現による非常に小さな穴. 立方体を用いたモデルの場合, “球同士の接触” は非常に小さな穴の生成を誘発する. 非常に小さくても, 通常ホモロジーのレベルでは立派な穴である. しかし, パーシステントホモロジーを考えるとスケール変化によりすぐ潰れる事がわかる.

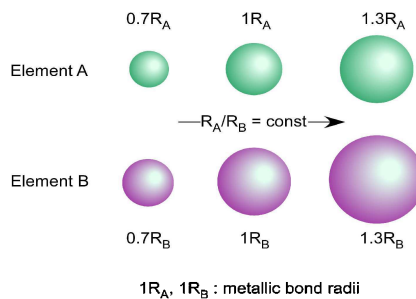


図 5: 金属ガラスモデルにおける半径の変化. 異なる元素 A, B に対してその半径比 R_A/R_B が常に一定になるように変化させる.

注意 3.1. (2-c) で述べたフィルトレーション K_j の取り方は、各 j において異種原子に対して半径比 $\alpha_j R(x_i)/\alpha_j R(x_k)$ ($R(x_i) \neq R(x_k)$) が常に一定になるように設定している。これは化合物の**配位数を変えない事**を意識しており、[3] で使用されているアルファ複体 (ポロノイ図に基づく複体) とは異なるものである。アルファ複体で用いているポロノイ図とは、**加法的重み付きべき乗ポロノイ図**を指す。このポロノイ図はそのポロノイ辺を直線にし、この事が単体複体のフィルトレーションの整合性を実現する。(2-c) のような乗法的重みだとポロノイ辺が曲線になってしまい、初期スケールの取り方に依存して全く別のポロノイ図が出来てしまう可能性がある (少なくとも乗法的重み付きポロノイ図を使ったフィルトレーションが構成できるのかを筆者は知らない)。

なお、方体によるモデルの構成は計算機上での実現の意味でも簡単であるが、このやり方では厳密な意味で**脈体定理が成立しない**。実際、図 4 が示すように、球の方体表現 $C_x(R)$ は凸集合ではなく、異なる $C_x(R)$ 同士が繋がる瞬間に非常に小さな隙間が出来る。通常のホモロジーのレベルでは 1 つの穴と認識してしまい、中心 x 、半径 R の閉球 $B_x(R)$ たちの和集合として作られる集合のトポロジーと大きく異なる。また、容易に想像できるようにほとんどのトポロジカルな情報はこのような非常に小さな穴の情報に埋もれてしまう。しかしパーシステントホモロジーを考えると、このような穴は非常に小さいものと認識される。バーコードでは非常に短い線分、パーシステンス・ダイアグラムでは対角線に近い点として観察できる事に注意せよ。さらに 2 節の最後に言及したダイアグラムの**安定性**を使うと、方体によるこれらのフィルトレーションのパーシステンスと、対応する閉球 $B_x(R)$ たちで構成されるフィルトレーションのパーシステンスが“近い”事を示せる。これにより、我々の解析方法で得られる結果は (グリッド分割が充分細かいとき) 閉球 $B_x(R)$ 達によるパーシステンスの結果を良く再現しているときとみなせる。

前節の終わりに述べたように、複体のフィルトレーションに対するパーシステントホモロジーの高速計算を実現するフリーのソフトウェアが Vidit Nanda 氏により開発された ([9])。今回のホモロジー計算ではこのソフトウェアを用い、得られたデータを適当な方法で可視化する。今回はバーコードのアイデアに基づいた可視化手法を採用する。

3.3 具体的な設定

先の解析手法を金属ガラス $Zr_{80}Pt_{20}$ -200 原子モデルに適用する。今回は局所構造に焦点を当て、モデル内の各原子に対して最近接原子からなるクラスターユニット (実験結果と第一原理 MD により照合されているもの) を抽出し、各々のトポロジカルな構造、特に繋がり具合を支配する 0 次パーシステンスを観察する。

元素 A をプラチナ (Pt)、 B をジルコニウム (Zr) とし、金属結合半径を $R_A = R_{Pt} = 1.387 \text{ \AA}$ (オングストローム)、 $R_B = R_{Zr} = 1.6025 \text{ \AA}$ で固定する。なお、 $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ である。200 原子を含む \mathbb{R}^3 内の有界 (立方体) 領域を適切に取り、それを一辺 $0.05 (\text{ \AA})$ の立方体グリッドに分割する。そして $\Delta\alpha = 0.05$ 、 $\alpha_j := 0.7 + j\Delta\alpha$ ($j = 0, \dots, 8$) とする。グリッドの大きさや $\Delta\alpha$ および α の定義は本質ではない。次に、各原子 x_i ($i = 1, \dots, 200$) に対する最近接原子を取り、クラスターユニット (図 6-(b)) を構成する。これは非晶質のポロノイ多面体解析で採用されるユニットであり、図 6-(a) のようにラベル付けされている。原子 x_i を中心とするクラスターユニットに m_i 個の原子が含まれているとし、方体集合 $K_j^i := \bigcup_{k=1}^{m_i} C_{x_k}(\alpha_j R(x_k))$ を定義し、200 個の方体複体 (と対応する脈体) のフィルトレーション $K^i = \{K_j^i\}_{j=0}^8$ ($i = 1, \dots, 200$) を構成する。

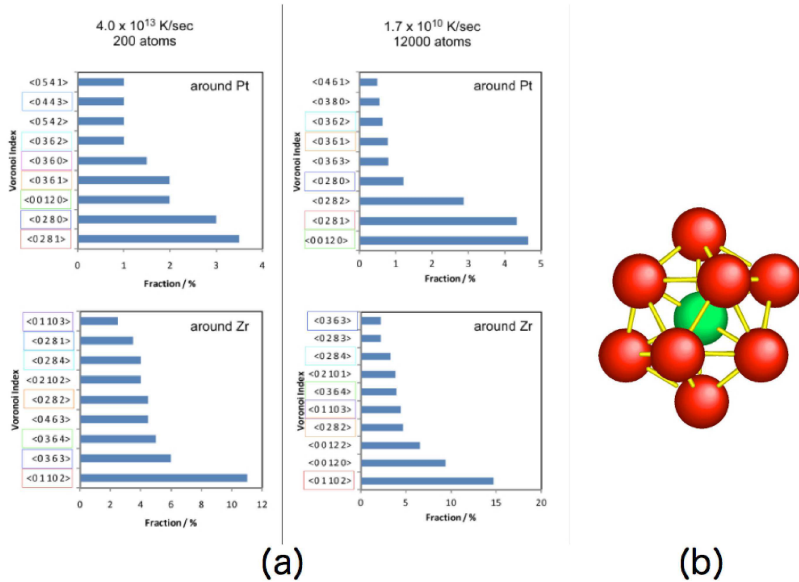


図 6: ボロノイクラスタの分布と模式図. 第一原理 MD シミュレーションにより定まった原子配置は, TEM を用いた ABED 法で直接観察された原子配置と比較できる ([5], [6]). それにより金属ガラスの局所構造は表 (a) にあるようなラベル付けされたボロノイ多面体の集まりを基準として議論できる. なお, (a) の左は $Zr_{80}Pt_{20}$ -200 原子, 右は $Zr_{80}Pt_{20}$ -12,000 原子のモデルから抽出されたクラスタのラベルごとの分布を表し, $\langle a b c d \rangle$ は, 三角形が a 個, 四角形が b 個, 五角形が c 個, 六角形が d 個を面を持つ多面体を意味する. 一見ランダムに見える原子配置でも, 高々有限個の多面体構造で局所構造が支配されている事が予想される. (b) は中心原子に対する最近接原子を抽出して構成したボロノイクラスタの模式図である. “最近接”なのは ABED 法での観察および第一原理 MD シミュレーションの結果に基づいて抽出する.

3.4 解析結果

まず、比較対象として結晶のパーシステンスを見る。とくに体心立方格子、面心立方格子の構造を考えると簡単にわかるように、その対称性の高さにより球を増大させる過程で一箇所どこかの球が繋がればあらゆる方向にある球が同時に繋がる。よって、0次ベッチ数は急激に1に変化する。その様子は図7に記されている。簡単なこれらの格子構造を持つ結晶で試されたい。なお、ここで動径分布関数を測った時との違いが出ている事に注意せよ。すなわち、動径分布関数は純粋に中心原子からの距離で原子配置の分布を測るため、体心立方、面心立方格子を明確に区別する。しかし、繋がり具合を測る0次パーシステンスでは、どちらも一気に b_0 が1に落ちるという意味で両者を区別しない。ここに大まかに物事を見るトポロジーの精神が垣間見える。

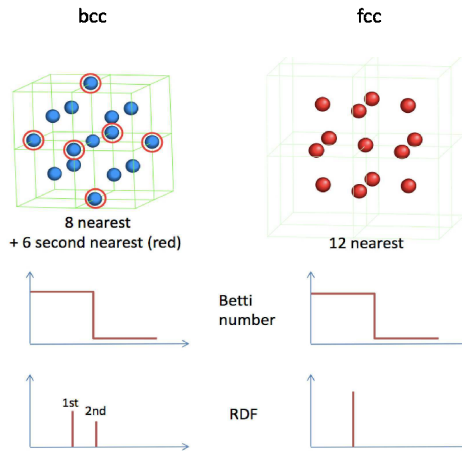


図7: 体心立方格子、面心立方格子(単種系)の b_0 の変化と動径分布関数の比較。0次パーシステンスの場合は、1箇所が繋がれば内在する対称性によりあらゆる球が繋がりに、あるスケールで b_0 が急激に1に減少する。これはどちらの格子構造でも同じである。ところで、中心原子からの距離を測ると体心立方格子をなす格子上的原子は8つの第1近接原子、6つの第2近接原子を持つ事がわかる。対して面心立方格子はどの原子も12個の最近接原子を持つ。よって各原子から他の原子までの距離の分布を測る動径分布関数(RDF)は、体心立方格子の場合2つのピーク、面心立方格子の場合は1つのピークを持つ事がわかる。

次に、あるラベル付けがされたボロノイクラスタの0次パーシステンスを計算すると図8-(a)のような結果を得る。これはスケール変化とともに球が少しずつ繋がっていく事を意味し、とくに結晶のような対称性を持たず、**クラスタが歪んでおり、第一近接の範囲内で原子配置の不均一性がある**事を意味する。最後に、この解析を考える全てのクラスタに適用する。それにより図8-(b)のような結果を得た。図8-(b)は各クラスタの0次パーシステンスのヒストグラムをとったものである。比較対象として正20面体構造の0次パーシステンスも載せている。先に述べたように、結晶や正20面体など対称性の高いものは0次パーシステンスがあるスケール値で急激に変化する。しかし、各クラスタから得る0次パーシステンスのヒストグラムにこれらの曲線が含まれていない事に注目されたい。さらに、考察しているクラスタについてのラベルは様々な種類がある(図6-(a))にもかかわらず、0次パーシステンスのヒストグラムは分散が小さく、**局在化**している事が観察できる。

注意 3.2. 図8は金属ガラスのクラスタユニットモデルに対する0次パーコード(死亡時刻が早い

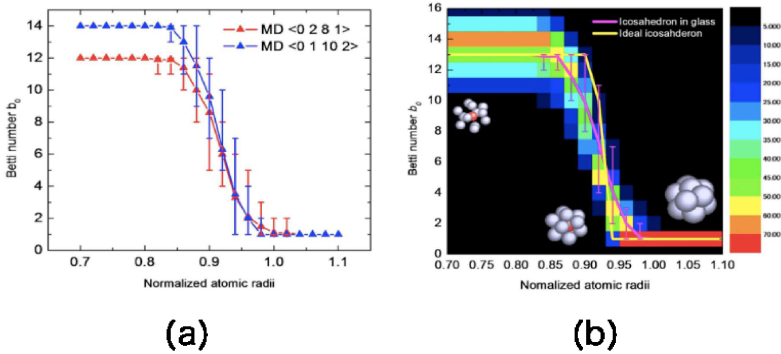


図 8: 金属ガラス $Zr_{80}Pt_{20}$ モデル内のクラスタの 0 次パーシステンス. (a): ラベル $\langle 0\ 2\ 8\ 1 \rangle$, $\langle 0\ 1\ 10\ 2 \rangle$ がついたあるクラスタの 0 次パーシステンス. 結晶の時と違い, b_0 はスケール変化に伴い緩やかに変化し, 対称性の低さを伺わせる. (b): $Zr_{80}Pt_{20}$ モデル内の全てのクラスタ (200 個) の 0 次パーシステンスのヒストグラム. b_0 の変化は局在しており, 結晶や正 20 面体構造を一切含んでおらず, ラベルが違うものも全て類似の歪み方をしている事が示唆される.

図は [6] にも掲載されているのでこちらも参照せよ.

順に上から並べたもの) の包絡線を描き, そのヒストグラムをとったものに他ならない.

ここまでの考察により, 以下が帰結される.

- 金属ガラス $Zr_{80}Pt_{20}$ モデル内には結晶のような対称性の高い構造が最近接原子のレベルでも含まれておらず, 原子達はあらゆる所で歪みを持つ配置を取り, 結果として金属ガラスは対称性が極めて低い局所構造のみによって構成されている.
- 最近接原子からなる各ポロノイクラスタは, 0 次バーコードの包絡線の局在の意味で類似の歪み方をしており, それが全体に拡がる事により金属ガラスの準安定的な構造を実現している.

1 つめの結果により, 3.1 節で述べたような安定な構造の取り方に関する矛盾は解決すると期待される. 局所的に結晶などの対称性の高い構造を取っている箇所がどこにも無いのは興味深い. 2 つめの結果は, クラスタの歪み具合をポロノイ多面体のラベルよりシンプルな指標で特徴付けが出来る事を示唆する. 今後非晶質を分類する際の 1 つの指標となり得るだろう.

本考察では 0 次パーシステンス, 原子配置の歪みだけに注目して非晶質の構造解析を行った. 動径分布函数と異なり, 距離などの詳細な情報とは別の観点から構造の特徴付けが出来る事, よりグローバルな指標を定義しうる事が示唆される. 言うまでもなく, パーシステントホモロジーは各次数に対して定義されており, 現段階で 1 次 (トンネル), 2 次 (空洞) パーシステンスの情報を一切用いていない事を考慮すると, 動径分布函数より遥かに詳細な情報を抽出できることが期待できる (高次パーシステンスと金属ガラスの構造の対応関係は現在考察中である). さらに, 原子達が形成する幾何学的な構造を予め知る必要がなく, 原子の種類と配置のみから種々の情報を抽出できるのもパーシステントホモロジーの強みである. 数学以外の分野への応用という観点からも, パーシステントホモロジーの可能性は計り知れない.

4 結 — “数理材料科学”の萌芽 —

本稿では金属ガラスを例に、これまで明確化されていなかった非晶質の局所構造の特徴付けに、トポロジカルな手法が単純かつ明快な特徴付けを与える事を紹介した。それは繋がり具合というごく簡単な指標で、構造の不必要に細かい分類には立ち入らず、しかし明確な特徴付けの指標を与え得る。

現在、金属ガラス以外にも力学応答とホモロジーの関係、粉体の force chain network など、材料科学へのパーシステントホモロジーの応用が広く展開されている。しかしこれらは全て萌芽段階に過ぎず、今後の研究次第ではガラスを含めた材料の解析が予想だにできなかった方向へ展開されるかもしれない。例えば結晶構造が群で記述する対称性を用いて説明されてきたように、一見ランダムに見える非晶質の中に隠された秩序を、パーシステントホモロジーのような新しい数学理論との結びつきによって説明でき、新たな基礎科学として発展する時代が来るかもしれない。それらがさらに新しい数学を生み出し、材料科学とより深く結びつく事で、螺旋の如くこの相異なる分野の融合・発展が促されていく事を信じて止まない。

冒頭で述べた通り、本稿は東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (WPI-AIMR) における共同研究 [6] に基づくものである。この共同研究の実施にあたり、著者の一人 (松江) は JST-CREST “離散幾何学から提案する新物質創成と物性発現の解明” のの支援を受けている。これらの支援無くして本研究は成立しなかった。この場を借りて厚く御礼申し上げたい。

参考文献

- [1] CHomP software in Computational Homology Project, <http://chomp.rutgers.edu>
- [2] H. Edelsbrunner and J.L. Harer, *Computational Topology : An Introduction*, Amer. Math. Soc., 2010.
- [3] M. Gameiro, Y. Hiraoka, S. Izumi, M. Kramar, K. Mischaikow and V. Nanda, Topological Measurement of Protein Compressibility via Persistence Diagrams, *Kyushu Univ. Inst. Rep.*, 2012.
- [4] M. Gameiro, K. Mischaikow and T. Wanner, Evolution of pattern complexity in the Cahn-Hilliard theory of phase separation, *Acta Materialia*, **53**(2005), 693–704.
- [5] A. Hirata, P. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A.R. Yavari, Y. Sakurai and M.W. Chen, Direct observation of local atomic order in a metallic glass, *Nature Mater.*, **10**(2011), 28–33.
- [6] A. Hirata, L.J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A.R. Yavari and M.W. Chen, Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses, *Science*, **341**(2013), 376–379.
- [7] T. Kaczynski, K. Mischaikow and M. Mrozek, *Computational Homology*, Springer (2004).
- [8] T. Teramoto and Y. Nishiura, Morphological characterization of the diblock copolymer problem with topological computation, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **27**(2010), 175–190.
- [9] Perseus, <http://www.math.rutgers.edu/~vidit/perseus.html>