研　究　報　告　書

「トポロジカルデータ解析に基づくアモルファス構造の包括的記述と特徴抽出」

研究タイプ：通常型
研究期間：　2015 年 12 月～2019 年 5 月
研　究　者：　中村壮伸

1．　研究のねらい

アモルファス構造においては、結晶や液体などのような解析的な表現に適した適切な参照系が存在しない。それゆえシミュレーションによる計算結果を理論的に説明・統合する方法論がない。データ科学が質的に新しいものの見方を提供するとすれば、アモルファス構造のような理論が不得手とする対象においてこそ期待できるものであり、本研究はそのための基盤となる新技術創出に資するものである。

アモルファス構造の汎用的な記述子としては動径分布関数などがすでに存在する。この量は理論・実験研究との親和性が高く構造記述の中心的物理量であった。しかしながら、多くのアモルファス材料では中距離秩序構造と呼称される多体構造が構造の特徴づけに中心的役割を果たすことが示唆され、動径分布関数では不十分であるとされている。近年発明されたパーシステントホモロジーという計算幾何学的手法は点データに対して数学的に定義された「穴」を検出し特徴付ける理論である。そこで、本研究において多体構造を記述しうるパーシステントホモロジーがアモルファス構造の汎用的な記述子となりうるかどうかを問うため、典型的な系に対して適用研究を行う。

2．　研究成果

（1）概要

研究テーマ A「パーシステントホモロジーによる多様なガラス構造の統一的記述」

代表的なアモルファス構造としてシリカのようなランダムネットワーク構造と金属ガラスのようなランダム充填構造がある。従来はこれらの構造は別々の特徴づけがなされ統一的な取り扱いがなされていなかったためデータ科学の適用が困難であった。我々はパーシステントホモロジーを用いることでこれらの構造を統一的に取り扱うことが可能であることを発見した。

研究テーマ B「パーシステントホモロジーによるアモルファス構造の降伏転移の記述」

アモルファス固体に対する降伏転移を支配する新たな秩序変数の提案を行った。アモルファス固体の降伏転移は近年レプリカ解析を用いて定義される秩序変数で転移を議論されてきたが、我々はこの転移を配置データに対してパーシステントホモロジーを適用し、そこで得られるノイズに対する頑健な構造の頻度の変化として捉えることが可能であることを見出した。

研究テーマ C「データ駆動で得られた変数に対する自由エネルギー地形の新しい定義」

パーシステンスダイヤグラムに代表されるデータ駆動で得られる変数と物性を繋ぐための枠組みを統計力学と微分幾何学に基づいて構築した。構造物性相関を議論する際に物性値が記述子の選択の任意性に依存しない条件を微分同相変換に対する不変性として定式化できることを発見し、そのような記述子を反応座標とした自由エネルギー地形の新しい定義を与えた。

（2）詳細

研究テーマ A「パーシステントホモロジーによる多様なガラス構造の統一的記述」

ランダムな構造を持つ固体であるガラスの代表的な構造は2種類ある。一つは金属ガラスや分子性液体からなるガラスである。これらの物質は方向性のない相互作用を持ち、また最近接原子の配位数が可変であるという特徴を持ち、この性質からランダム充填構造と呼ばれる構造を取る。もう一つはシリカガラスなどのような方向性の強い共有結合で相互作用をする物質からなるガラスで、ランダムネットワーク構造と呼ばれる構造を取る。これらの材料はともにガラス転移を経て運動が凍結するという特徴をもつものの、構造としては全く異なるため異なる特徴づけが伝統的になされてきた。具体的にはランダム充填構造に対しては動径分布関数を考え、対応する液体構造における第二ピークの分裂を特徴づけに使い、ランダムネットワーク構造に対しては構造因子の最小の波数のピークの発達を特徴づけに使っていた。我々は今世紀に発明されたパーシステントホモロジーという数学的手法を用いることによりこれらを統一的に扱うことが可能であることを見出した。パーシステントホモロジーを用いることにより、ランダム充填構造の特徴は空隙として、ランダムネットワーク構造の特徴はリングとして、それぞれ2次元、1次元の穴として統一的に扱うことができることがわかった。また、それらの特徴として現れる穴はパーシステンスダイヤグラムの対角線から離れた領域に現れる、ノイズに対して頑健な穴であることも明らかになった。これにより物理的な固さに現れる安定性を、パーシステンスダイヤグラムのもつ擾乱に対する安定な穴の性質として解釈することが示唆された。

研究テーマ B「パーシステントホモロジーによるアモルファス構造の降伏転移の記述」

研究テーマ A で示唆された材料構造の安定性とパーシステンスダイヤグラムが表現する擾乱に対する頑健性の関係に関する仮説の検証を推し進めた。パーシステントホモロジーでは擾乱に対する穴の頑健性はパーシステンスダイヤグラムに現れる対応する点の対角線からの距離のよって評価することができることが知られている。我々はガラス転移の研究で標準的に用いられている模型である Kob-Andersen-Lennard-Jones binary-mixture 模型を用いて剪断変形に対する降伏現象の冷却速度依存性を調査した。この系の降伏現象に対して、スピングラスなどで用いられるオーバーラップと呼ばれる量を用いてある種の相転移として扱う方法が近年提案されている。我々はオーバーラップを用いず配置データだけから相転移を検出する方法が好ましいと考え、降伏前後における構造の変化を頑健な穴の変化として定量化し、両者の関連性を問うた。その結果、パーシステンスダイヤグラムに現れるロバストな穴の数が降伏点を境に急激に減少していることを見出した。したがって、パーシステンスダイヤグラムに現れる対角線から距離の離れた点の数が降伏現象を相転移として記述する際のある種の秩序変数とみなせる可能性が示唆された。この結果は研究テーマＡと合わせてパーシステンスダイヤグラムで抽出される構造やその頻度が熱統計力学的に意味のある量になっている例であると考えることができる。

研究テーマ C 「データ駆動で得られた変数に対する自由エネルギー地形の新しい定義」

パーシステンスダイヤグラムや主成分分析で得られた変数のようにデータ駆動で抽出され

る記述子はデータ科学による構造物性相関を議論する際に確かに良い記述を与えうる変数であることが多い。しかしながら変数の出自が物理的に担保されているわけではなく手続きとして定義が与えられているだけであるため熱統計力学的な現象論的な理解とは相性が悪い。実際、それらの変数を用いる場合には形式的定義のみから自由エネルギー地形を導入する必要がある。先行研究によれば、自由エネルギー地形には変数の計量の選択に依存した任意性があることが指摘されていた。パーシステンスダイヤグラムや主成分分析のような物理的な出自が明らかでない勝手に選んだ変数の場合には変数の計量が物理的に妥当であるかどうかを検証する必要がある。従来の定式化ではそのような検証は理論の中に含まれておらず、そのため任意性の問題については未解決のままであった。我々は、自由エネルギー地形が軽量の選択に依存しないように定義しなければならないこと物理的要請として認めること(一般共変性原理)によって、一意な定義を与えることに成功した。この定義によれば自由エネルギー地形は従来用いられていた頻度分布の計算だけではなく、拡散行列の計算も必要であることを示した。これにより、データ駆動で得られた変数から物理的な要請をみたすう自由エネルギー地形を計算することが可能になり、理論的な保証に基づいて構造物性相関を問うことが可能になった。特にパーシステンスダイヤグラムから操作的に自由エネルギー地形を計算する手続きも明らかになった。

３.　今後の展開

パーシステントホモロジーを用いることにより多様なアモルファス構造の特徴を統一的に扱うことが可能になり、データ科学との融合が可能になった。実際、我々の研究以降にパーシステントホモロジーと機械学習と組み合わせることによりガラス転移点の推定に関する研究などが行われている。

アモルファス構造のレオロジーにおいて示されたノイズに対する頑健な穴が物性を記述する構造の担い手になるというシナリオは他の物理系においても成り立つことが予想される。今後多様な例題で同様のシナリオの成立を確認する必要があり、おそらく肯定的な結果が得られると考えられる。

パーシステンスダイヤグラムを反応座標とする自由エネルギー計算の手法開発が可能になる。これは本研究計画の目的であるトポロジカルデータ解析による構造物性相関の汎用的手法の提案のゴールであるため是非とも完成させたい。

４.　自己評価

1.研究目的の達成状況

汎用性の高い構造物性相関の評価枠組みを作るという目的に関しては自由エネルギー地形の理論を作ることで達成できたが、トポロジカルデータ解析に限らない用途の手法開発を含んだためやや当初の目的からそれてしまった。また典型例の網羅的な解析を行う計画に関しては先行研究の情報収集に思ったよりも時間がかかってしまい十分に達成ができなかった。

2. 研究の進め方

研究体制に関しては異動に伴い研究補助者の雇用が途切れてしまったことなどで不安定な体制で行わざるを得なかった。そのため補助者への給与を目的とした研究費執行に支障

をきたしかなりの残額が生じてしまった。研究開始時に代替手段も考慮に入れた計画を寝るべきであった。

3.研究成果の波及効果

トポロジカルデータ解析の研究者人口はこの数年で圧倒的に増え、我々の研究をきっかけに材料科学への適用を考えている企業などの研究の相談を受けたことも多数あった。このようにニーズがあることを認識し、さらに発展させ社会に還元させる必要があることがわかった。

4.研究者自身の評価

データ科学の中でもトポロジカルデータ解析は予測のツールではなく記述のツールであったため、定量的な予言に関わる部分は理論物理をベースに行った。したがって、機械学習などのような予測のツールとしてのデータ科学との連携は不十分であった。これは研究計画には含まれていなかったが領域会議等を通じて、やるべき問題と認識しつつも期間内に行うことができなかった問題である。今後、本さきがけで知り得た技術や研究者と連携をとり、予測ツールとの連動も行っていきたい。

5.　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Hiraoka, Y., Nakamura, T., Hirata, A., Escolar, E. G., Matsue, K., & Nishiura, Y. (2016). Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology. Proceedings of the National Academy of Sciences, 113(26), 7035-7040.
2. Shirai, T., & Nakamura, T. (2019). Microscopic Description of Yielding in Glass Based on Persistent Homology. Journal of the Physical Society of Japan, 88(7), 074801.
3. Nakamura T. (2019) The Unique and Physical Definition of the Free-Energy Landscape arXiv:1803.09034

（2）特許出願

研究期間累積件数：0 件

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

ガラスの「形」を数学的に解明

https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2016/20160614_000643.html