

平成 25 年度 共同利用研究報告書

平成 26 年 3 月 31 日

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名 東北大学原子分子材料科学高等研究機構 助教

提案者 (ふりがな) 氏名 中村壮伸

下記の通り共同研究の報告をいたします。 記

※整理番号	20130011
-------	----------

1.研究計画題目	ホモロジー解析を用いた非結晶性固体に関する構造の特徴付けと物性の記述			
2.種別 (○で囲む)	a. 研究集会 I		b. 研究集会 II	
			c. 短期共同研究	
3.研究代表者	<small>(ふりがな)</small> 氏名	中村壮伸		
	所 属 部局名	東北大学原子分子材料科学高等研究機構	職 名	助教
	連絡先			
	e-mail		TEL	
4.研究実施期間	平成 26 年 1 月 20 日 (月曜日) ~平成 26 年 1 月 23 日 (木曜日)			

5.参加者数・参加者リスト (*別紙「共同利用研究報告書作成上の注意」参照)

(a.の場合、参加者数のみ記入し、集会参加者リストを添付。b.の場合は下記欄に記入。)

参加者数 : 23 人

<small>(ふりがな)</small> 氏名	所属	職名	<small>(ふりがな)</small> 氏名	所属	職名

6.本研究で得られた成果の概要

1. 研究会の報告

1月20日(月)

講演《MDと統計力学のショートコース》

講演者：中村 壮伸（東北大学）

中村により本研究会の趣旨の説明がなされた後、分子動力学シミュレーション (molecular dynamics(MD) simulation)法と統計力学の解説がなされた。統計力学や物性物理におけるミクロとマクロの定義について粒子系を例に説明がなされた。ミクロとマクロがそれぞれ構造と物性に対応するものであるという点が繰り返し強調された。MDシミュレーションのデータに対して統計力学のアンサンブル理論を用いることを正当化する物理的な仮定を統計力学の原理とMDシミュレーションの基礎に基づいて解説がなされた。その際、統計力学が対象とする系がもつべきエルゴード性について時折なされる誤解と比較して解説が行われた。その上で1つの配置データが持つ統計性について空間的エルゴード性(巨視的な系であることの定義)に基づいた説明がなされた。最後に十分巨視的な系のMDシミュレーションで得られる配置データに基づいた動径分布関数は1サンプルであっても揺らぎについても十分な情報を持つこと、さらにそれを用いると圧縮率という応答に関する情報も取り出すことが可能であることが紹介された。この例は本研究会が目指す”構造から物性を抽出する”ための典型的な既存の手法であることが述べられた。

講演 《パーシステントホモロジー入門 I》

講演者：平岡 裕章（九州大学）

前講演のミクロとマクロの対応に対する説明をふまえて、幾何学的な対象のミクロな表現方法とマクロな表現方法がそれぞれ単体複体とホモロジーであるということ解説がなされた。また、ホモロジーとは穴を記述する数学であるという説明がなされた。はじめにパーシステントホモロジーの歴史的発展についての解説がなされ、パーシステントホモロジーのための準備段階として単体複体とホモロジーの数学的な定義についての具体的な例を多くもちいて解説がなされた。 \mathbb{R}^n 内の点に対してある大きさを持つ球を対応させ、球の集まりを用いてチェック複体と脈体定理を解説した。続いて、穴が数学的には”それ自身が境界を持たず、何かの境界になっていないもの”として定義されることが説明された。分野外の聴講者が多くいることを考慮にいれ、具体例を数多く用いることによって発見法的に定義の導入が行われた。その際 boundary map と呼ばれる写像を導入した。この boundary map の核(kernel)と像(image)を用いることにより L次元ホモロジーを導入した。最後に以上の数学的な定義から L=0, 1, 2次元のホモロジーの次元がそれぞれ連結成分の数、ループの数、キャビティーの数であるということが説明された。

1月21日(火)

講演《電子線回折法を用いた非晶質物質の構造解析》

講演者：平田 秋彦（東北大学）

ガラス化に関するレビューが行われた後、それを記述する方法としての電子線回折法の解説がなされた。まず結晶とガラスの違いについての簡単な説明がなされ、実験ではかることができる散乱因子と呼ばれる量が両者の違いをどのように表すかについて紹介された。またシミュレーションで得られる構造因子と異なり、散乱因子は原子種に依存するということや原子間の相関がいかに表示されるかなどという散乱に関する基礎的な事項の解説が行われた。その後、異分野でなじみのない人への直感的な理解の助けとしていくつかの典型的な粒子配置に対して散乱パターンの例を示した。その後、散乱因子から粒子配置を求めるという逆問題についての標準的な手法である逆モンテカルロ法についての解説がなされた。逆モンテカルロ法では同一の散乱因子を再現する多くの異なる3次元原子配置がありえ、非等方的スケールの原子配置の局所的な情報に関する記述を不得意であるということが強調された。本研究会で議論されるパーシステントホモロジーにより、この問題を改善するのではないかという予想がなされ、平田氏本人による「歪んだ局所正二十面体」の研究に関する解説への動機づけとして位置づけられた。最後にナノビーム電子回折による局所構造の推定に基づく金属ガラスの局所構造の解析に関する自身の最新の研究の紹介が行われた。

講演者：平岡 裕章（九州大学）

講演《パーシステントホモロジー入門Ⅱ》

初日の単体複体やホモロジーの概念をおさらいした上で、パーシステントホモロジーについての解説が行われた。まず巨視的スケールの物性を記述する上で自然に動機付けられるロバストネスについての解説がなされた。そしてロバストネスを数学的に記述する手段としてパーシステントホモロジーにとって本質的なフィルトレーションの概念が紹介された。初学者にわかりやすいように初日に解説された単体複体からホモロジー群を誘導する手続きを振り返りながらパーシステントホモロジー群についての定義の解説がなされた。その後、簡単な図形を例にパーシステントホモロジー群とその可視化方法であるパーシステント図についての解説がなされた。例題を非常に多く用いて解説されていたため非専門の参加者にとってもわかりやすく構成された講義であった。

講演《遷移的モルフォロジー探索のためのトポロジー的手法について》

講演者：西浦 廉政（東北大学）

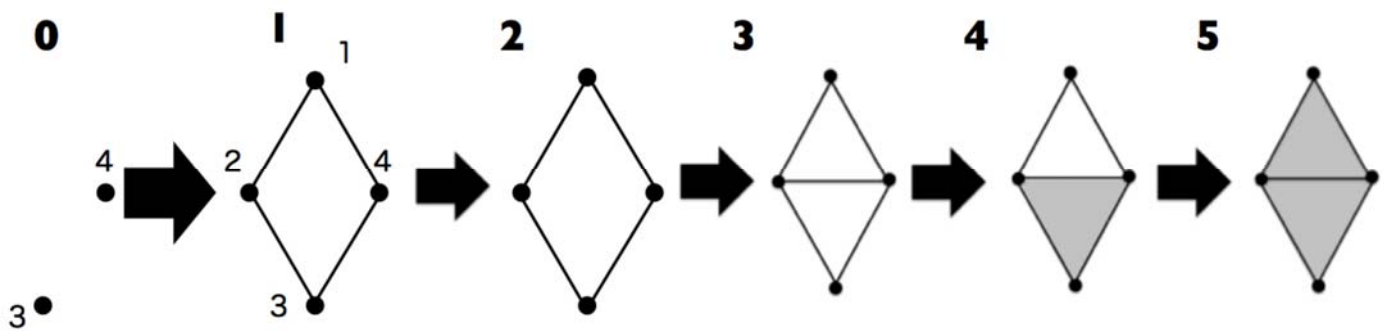
ブロッコポリマーの多様な相分離構造の静的、および動的な形状の変化をトポロジーに注目して記述する過去の研究についての紹介が行われた。これは連続体モデルで記述される物理系の幾何学的データに対するトポロジカルな特徴付けの例であり本研究集会が目指すパーシステントホモロジーによる材料記述の直接の先行研究である。まずブロッコポリマーの物理化学的な性質とそこからただちにわかる単純液体と異なるマイクロ構造の多様性についての概説が行われた。対応する連続体モデルの現象論的に導出と数学的に扱いやすいモデルへの変更についての解説が行われ、そのモデルの数値計算に基づいたベッチ数、オイラー数による相の記述、また相変化の遷移過程の記述についての研究が紹介された。最後にそれらのトポロジカルな量が示すスケーリング則が紹介され、トポロジーによる材料記述の可能性について議論が行われた。

1月22日(水)

講演《パーシステントホモロジー入門Ⅲ》

講演者：松江 要（統計数理研究所）

副題を「直感」を磨くとしてパーシステントホモロジーの典型的な設定で手計算を行う演習形式の講義が行われた。まず前日まで行われたパーシステントホモロジーについて大まかなレビューが行われた。次に、下図のようなフィルトレーションに対応する



1次パーシステント図の計算が演習形式で行われた。その後、このような計算を数値的に行うプログラムが2つほど紹介された。これらのソフトを分野外の人であっても容易にパーシステントホモロジーによる解析が行えるようなインフラが整いつつあるという現状が紹介された。最後にこれらのソフトウェアを用いて得られた代表的な図形に対するパーシステント図から元の図形がどのような形状であるのかを推測する手続きが紹介された。

講演《熱測定で見る単純液体における液体液体転移とそれに伴う構造変化》

講演者：辰巳 創一（東京工業大学）

実験の立場から熱測定によるガラス転移の解説とガラス化を記述する様々な量の解説が行われた。具体的には Kauzmann 温度、ガラス転移温度、残留エントロピーなどの量が実験的(操作的)にいかにして導入されるかについての解説が行われた。また厳密にエントロピーが計算できる2つの状態とその状態間遷移で実験的に計算できるエントロピー差を比較することで単純液体の液液転移やガラス化に伴うエントロピーのパラドックスについて解説が行われた。また、水の残留エントロピーを計算する例として ice rule とプロトンオーダーについての解説が行われた。とくに Ice rule の幾何学的な特徴と水分子の化学的な特徴である水素結合についての詳細な解説が行われた。

1月23日(木)

講演《相転移と弾性論のショートコース》

講演者：中村 壮伸（東北大学）

初日の統計力学とMDの関係についてのおさらいと相転移に関する秩序とソフトモードの関係について解説が行われた。相転移でソフトモードが生じるための典型的な例としてMDと同様にHamilton力学系として与えられるモデルである剛体回転子系を例に回転子の位相がソフトモードになることが解説され、本研究会の主題である、秩序化という構造の変化が剛性の発現という物性を記述するという典型例が解説された。その後、これまでの講演中に質疑応答で頻繁に出てきた熱ゆらぎや緩和過程についての基本法則である詳細釣り合い条件とそこから帰結される線形応答理論についてミニマムな説明がなされた。関連して熱活性過程を記述するアレニウスの式についての説明がなされガラスを分類するAngell plotについて解説がなされた。

講演《無機ガラスの幾何学的構造秩序と非平衡性の研究》

講演者：高田 章（旭硝子株式会社中央研究所）

計算材料科学の立場から無機ガラスの原子構造に関する概要と幾何学的構造秩序について最新の成果の紹介がなされた。まずガラスに関して、古典分子動力学シミュレーションと第一原理シミュレーションがはたす役割の説明がなされた。前者が冷却過程など長時間の原子配置の振る舞いを記述するものであり、後者が光学特性や電動特性などを記述するものであることから、本研究会の趣旨は前者の解明であることが紹介された。動径分布関数や構造因子などという通常の構造記述の手法の紹介がなされた後、無機ガラス特有の表現手法として素単位としての多面体構造とその連結の様式に基づく幾何学的な分類方法の研究が紹介された。その他にもガラスで特徴的なリング構造を記述するボンド角分布やリングサイズ分布、bridging oxygen (BO) の統計などの既存の手法が紹介された。これらの既存の手法は本研究会で議論されているパーシステントホモロジーによる記述と相補的になるものであり、今後我々の研究グループ内でも比較検討すべき問題であるという認識を得た。

2. 研究会で得られた成果

本研究会では異分野融合をする上で重要な1. 基礎知識の共有と2. 学際的なホットトピックスの紹介の2点を分担して講演者をアレンジした。中村、平岡、松江は理論物理や数学の基礎知識を他分野にわかるように非常に初頭的な内容から出発した講義を行い、必要に応じて同じ内容を繰り返し説明した。また講義で紹介されている基礎知識と本研究会の趣旨の関連についても詳しく述べた。さらに得られた知識を感覚として身につけるため演習形式の講義も行った。アンケートによればこれらの演習を含む講義は参加者の理解の助けになったようである。その他の講演者は実験(平田、辰巳)、理論およびシミュレーション(西浦、高田)のそれぞれの立場から幾何学と物性の関係についての最近の話題についてレビューを行った。とりわけ企業で研究を行う高田氏の講演については応用の最先端での要請をするよい機会となり、アンケートでも評価が高かった。また、この研究会で数学、材料科学の両分野の研究者の間である程度研究の背景を共有することが達成された。実際研究会の開催中の講演終了後に行われた研究打ち合わせでは講演の内容をふまえた活発な議論が行われた。また、アンケートでは材料科学におけるパーシステントホモロジーの研究を知る場が今後も継続して欲しいという要望がいくつかみられた。本研究会を皮切りに、九州大学と東北大学のグループを核とした数学と材料の新たな分野横断型研究が進められるよう、定期的に研究会を催したいと考えている。

MDと統計力学のショートコース

中村壮伸



研究会の様子