

対象点除去法とパーシステントホモロジーを用いた局所構造の抽出

(東北大 AIMR, JST-さきがけ) 中村壮伸

【はじめに】

パーシステントホモロジーとは乱れた構造のなかに埋め込まれている穴の秩序構造を抽出する手法である(1)。この方法では与えられた点データから構成される 0,1,2 次元の穴(クラスター、リング、キャビティ)の大きさを定量化する。パーシステントホモロジーは穴の大きさを2つの変数で定量化し2次元の散布図で表現される。穴は多数の原子により構成されるので、この散布図は2変数の多体分布関数と見なす事ができる(2)。発表者のグループは様々なガラスにあらわれる中距離秩序構造をパーシステントホモロジーを用いることで統一的に扱う事が可能であるという事を発見した(3)。一方、金属ガラスなどのような充填が支配的となるガラス構造ではある原子を中心とした20面体構造やFCC,HCPの局所構造が頻出する構造であり物性との相関が議論されている(4)。オリジナルのパーシステントホモロジーではここで議論されるような中心部に原子がある局所構造は扱う事ができない。これはガラスの構造を記述する上で問題とされていた。

【結果と考察】

我々はパーシステントホモロジーの手法を拡張する事により、このような特定の原子・分子を取り囲む局所構造を記述する新たな手法を開発した。発表では金属ガラスの20面体構造の抽出を例としてこの手法の紹介を行う。また、溶媒中の分子やポリマーなどへの応用について議論をする。

【参考文献】

- (1) H. Edelsbrunner and J. Harer, *Computational Topology: An Introduction* (Providence, RI: American Mathematical Society, 2010)
- (2) T. Nakamura, Y. Hiraoka, A. Hirata, E. G. Escobar and Y. Nishiura, *Nanotechnology* 26, 304001, (2015)
- (3) Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue and Y. Nishiura, *PNAS*, 113, 7035, (2016).
- (4) A. Hirata, et al., *Science*, 341, (6144), 376-379, (2013)