

超基礎からのトポロジカルデータ解析

典型例を通じたデータの読み方と材料科学への展開

中村 壮伸

東北大学 原子分子材料科学高等研究機構

〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1

E-mail: takenobu.nakamura.d3@tohoku.ac.jp

キーワード：トポロジカルデータ解析、パーシステントホモロジー、特徴抽出、アモルファス構造、ガラス

トポロジカルデータ解析、とくにパーシステントホモロジー[1,2]は近年様々な分野で適用が活発になされている新たなデータ解析手法である。我々のグループでは材料の微視的構造の特徴付けを目的としてパーシステントホモロジーを用いた手法の開発を行っている。パーシステントホモロジーではパーシステンダイアグラム(PD)とよばれる2次元の散布図で特徴を表現する。本講演では(1)いくつかの典型的な構造に対して PD を計算した例を紹介し、PD から構造に関する情報を読み取る際の基本的な考え方を紹介する。(2)その後、分子動力学計算から得られる熱力学的な系の原子配置データに対して PD を計算した例を用いて、様々な相における PD の特徴を読み取る方法を紹介する。(3)最後に我々が行ったアモルファス系に対する PD の紹介と、それによって表現される構造物性相関についての研究結果について紹介する[3,4]。

[1] H. Edelsbrunner and J. Harer Computational Topology: An Introduction (Providence, RI: American Mathematical Society) (2010)

[2] 平岡裕章、タンパク質構造とトポロジー —パーシステントホモロジー群入門— (2013)

[3] T. Nakamura, Y. Hiraoka, A. Hirata, E. G. Escobar and Y. Nishiura, Nanotechnology, 26, 304001 (2015)

[4] Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue and Y. Nishiura, PNAS, 113, 7035, (2016)