

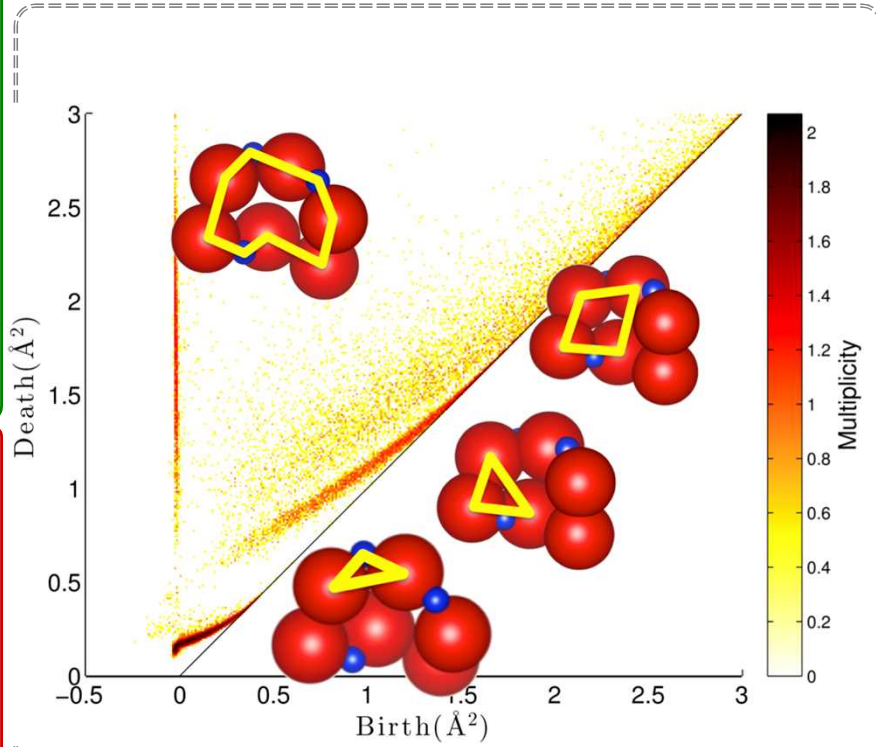
研究の概要

- 1. トポロジカルデータ解析(TDA)を用いた物質の微視的構造、とくに従来の物質科学が苦手とする乱れた構造を記述する枠組みの構築
 - 2. 微分幾何学と確率過程を用いた変数の選択に依存しない自由エネルギーの構成法の理論と計算手法開発
 - 3. パーシステントホモロジーにより表現された構造から自由エネルギー計算を通じた構造物性相関の汎用的表現方法の構築
- の3つを行いました。

研究の成果

- 1. TDAに基づいて、乱れた構造に隠された秩序構造を反映させた表現方法を構築しました。特に乱れたネットワークを形成するシリカガラスと乱れた充填構造を形成する金属ガラスの2点に注目し、従来異なる方法で記述されてきたガラスの構造を統一的に扱う方法を提案しました。
- 2. TDAに代表されるようなデータ駆動の表現方法は物理的洞察や解釈が難しい変数により構造を記述することが多いですが、そのような表現方法の任意性に依存しない自由エネルギーの定義方法を構築しました。
- 3. 1と2の成果を合わせることでTDAに統計物理学の手法を導入することができるようになりました。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



PHによるシリカの微視的構造の記述

参考文献・リンク

- 1 <https://doi.org/10.1073/pnas.1520877113>
- 2 <https://arxiv.org/abs/1803.09034>

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。