

---

## 2018 年度夏学期 第 3 回 駒場物性セミナー

---

### トポロジカルデータ解析の統計力学構築に向けて

講師 中村 壮伸氏 (産業技術総合研究所)

日時 2018 年 6 月 12 日 (火) 午後 4 時 50 分 **いつもと曜日が異なります！**

場所 16 号館 827

概要: トポロジカルデータ解析、もしくはパーシステントホモロジーとよばれる数学が今世紀に誕生し、代数・幾何をはじめとして計算アルゴリズム開発・データサイエンスへの適用など基礎応用の両面にわたって学際的研究が活発に行われている [1]。この手法では点データに内在する穴を抽出し、“穴らしさ”の度合いを定量的に評価する事が可能である。我々はこの性質に注目して、分子動力学計算で得られる非晶質構造の特徴付けを試みた [2]。その結果、シリカガラスと金属ガラスという全く異なるタイプの構造に対して従来の構造記述法 [3] を統一的に扱う事が可能である事、またシリカに関しては隠れた秩序構造を記述できる事がわかった。セミナーでは、パーシステントホモロジーの概説と我々の研究成果の紹介を行い、今後トポロジカルデータ解析に基づいた構造物性相関を与える理論を構築するための現在進行中の取り組みについて紹介する。

#### 参考文献

[1] H. Edelsbrunner and J. Harer, Computational Topology: An Introduction, (Amer. Math. Soc., 2010).

[2] T. Nakamura, Y. Hiraoka, A. Hirata, E. G. Escobar, and Y. Nishiura, Nanotechnology, (26), 304001 (2015), Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue, and Y. Nishiura, PNAS, 113(26), 7035-7040 (2016)

[3] S. R. Elliott, Physics of Amorphous Materials (Longman. 1990), 2nd Ed.

○今後の予定：

|          |                         |
|----------|-------------------------|
| 6 月 19 日 | 巻内 崇彦 氏 (慶應義塾大学理工)      |
|          | 原子 12 層のヘリウム薄膜の硬化と量子相転移 |
| 6 月 28 日 | 小宮山進氏                   |
| 7 月 5 日  | 齊藤 志郎氏 (NTT 物性研)        |
| 7 月 25 日 | 新見 康洋氏 (大阪大学大学院理学研究科)   |
| 8 月 8 日  | 和田 浩史 氏 (立命館大学 理工学部)    |

○物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索！

物性セミナー世話人： 加藤雄介 福島孝治 前田京剛 簗口友紀