

トポロジカルデータ解析と  
機械学習の物質科学への応用

Application of topological data analysis and machine-learning for materials science

研究分野  
Departmentナノ機能予測  
Theoretical Nanotechnology研究者  
Researcher南谷英美  
E. Minamitaniキーワード  
Keywordトポロジカルデータ解析、機械学習、アモルファス、熱伝導率、構造物性相関  
topological data analysis, machine learning, amorphous, thermal conductivity, structure-property relationship応用分野  
Application複雑な構造を持つ物質の物性予測  
Theoretical prediction of physical properties of materials with complex structures

研究開発段階

基礎

実用化準備

応用化

## 背景

数理学やデータサイエンスの手法を組み合わせることによって、望ましい機能をもつ新物質開発の効率化が求められています。

## 概要・特徴

構造の特徴を取り出す新しい数学的手法であるパーシステントホモロジーや、機械学習を応用することで、乱れのある複雑な構造での物性を理解し、望ましい機能を発現させるための指針を見出すことを目指しています。

## 技術内容

## ■ パーシステントホモロジーによる

## アモルファスでの物性予測：

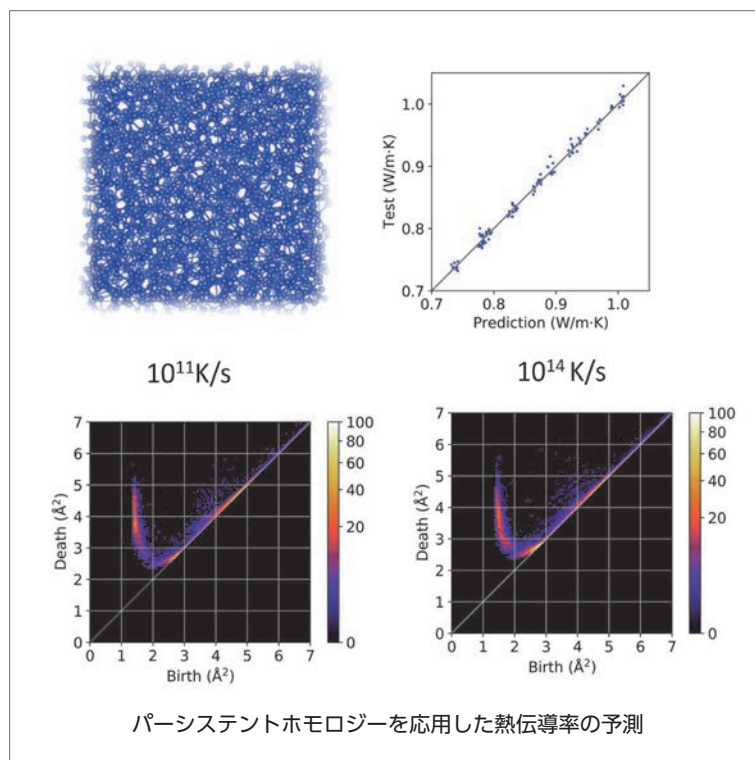
アモルファスでは結晶とは異なり決まった構造が繰り返される長距離秩序はありません。しかし完全にランダムな構造とも異なり、5から20Å程度のスケールでの中距離秩序があると考えられています。アモルファスの規則性とランダム

の中間に位置する構造が、熱伝導率などの物理的性質とどのように関係しているのかをパーシステントホモロジーという数学的手法と機械学習を組み合わせる研究をしています。

## ■ 機械学習ポテンシャル：精度と計算コストのトレードオフを解決するシミュレーション手法として、第一原理計算結果を再現できる機械学習モデルの構築を進めています。

## 社会への影響・期待される効果

新材料設計のためのデータサイエンス手法の開発・公開を進めています。とくに、複雑な構造における物性を理論予測する研究を行っています。デバイス材料を始めとする産業応用上重要な物質への応用展開が期待されます。



パーシステントホモロジーを応用した熱伝導率の予測

[論文 Paper] [1] Appl. Phys. Express 12, 095001 (2019). [2] J. Chem. Phys. 156, 244502 (2022). [3] J. Vac. Soc. Technol. A 40, 033408 (2022).