

パーシステントホモロジーによる形のデータサイエンス

学術研究院異分野融合教育研究領域(AI・数理)

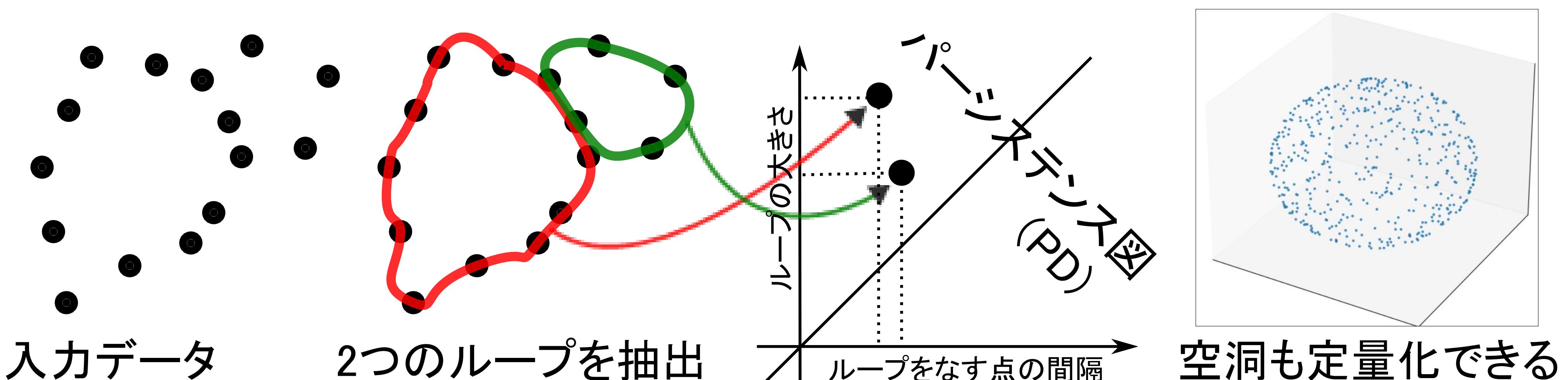
大林一平

【研究のポイント】

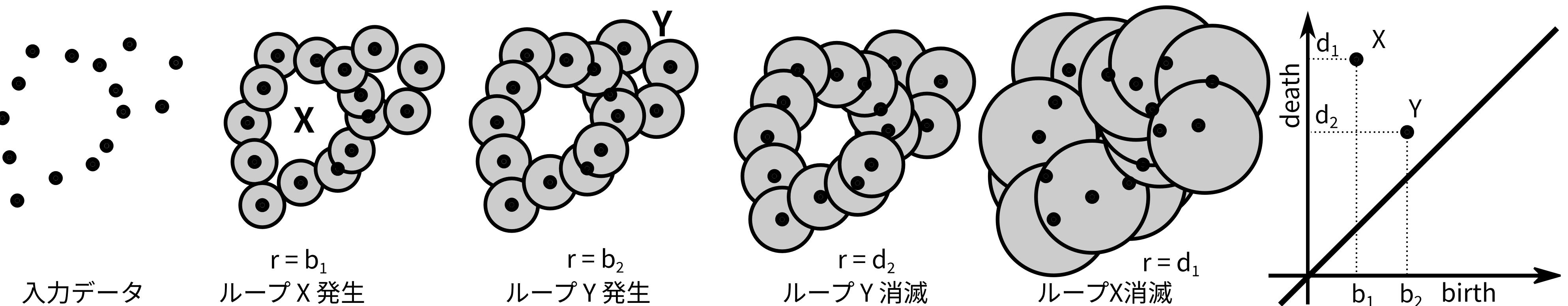
- 数学のトポロジーの概念を利用し、データの形を定量化するための手法パーシステントホモロジー(PH)によって形のデータサイエンスを実現
- 乱雑な、乱れた構造の定量化に威力を発揮、アモルファス材料のナノスケールデータなどへの応用例
- パーシステントホモロジーによるデータ解析ソフトウェアHomCloudを開発、原子位置のデータや2次元、3次元画像データの解析が可能

【パーシステントホモロジーとは】

トポロジーという孔、ループや空洞を定式化するための数学をつかって、データの形を定量化する。ループの大きさやループ作る点の分布の密度を特徴量として利用。



数学的定式化の方法

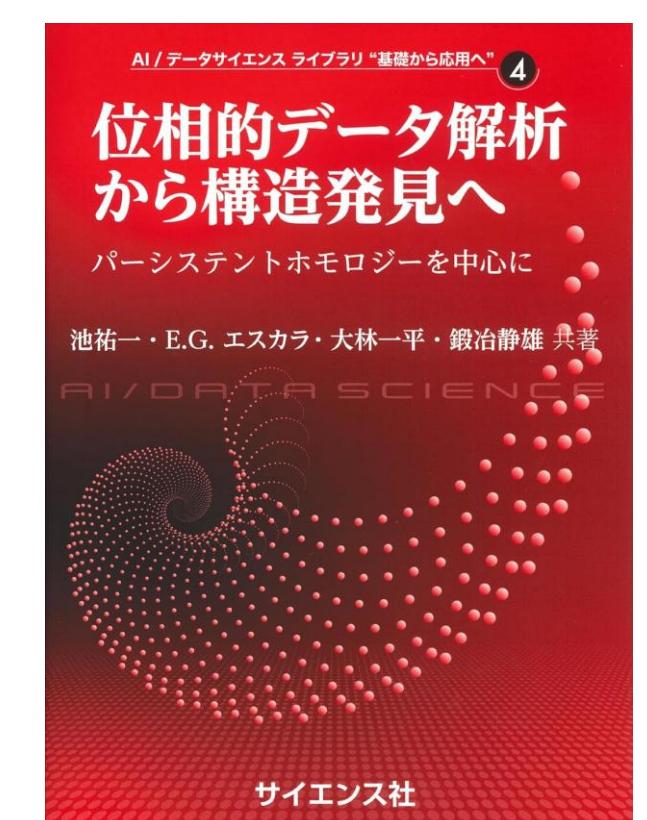


【向いているデータ】

- 3次元データ
- 乱れた、複雑な、非一様な構造をもつデータ
(結晶よりアモルファス)
- ループや空洞の意味づけに関して仮説があるデータ

【教科書】

サイエンス社
より刊行

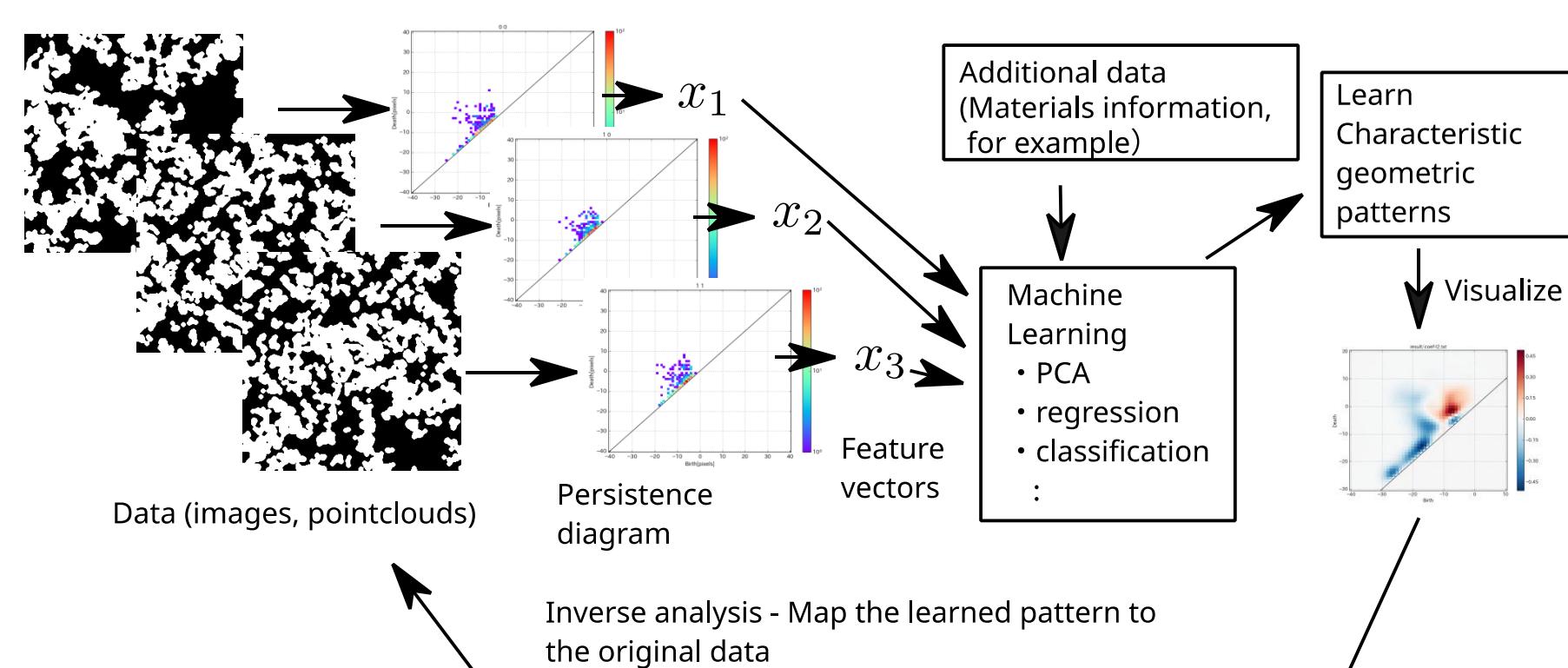
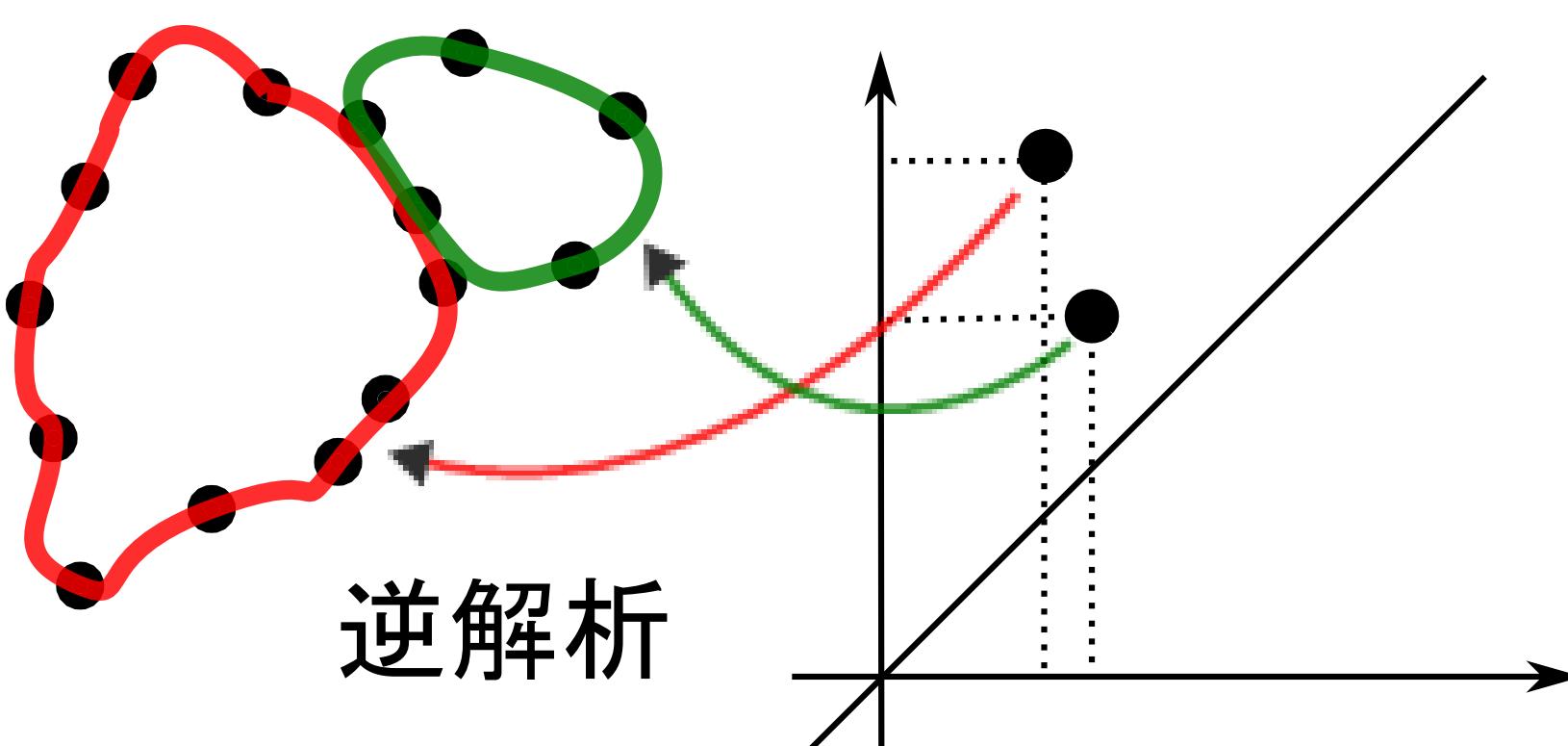


OKAYAMA UNIVERSITY

【データ解析ソフトウェアHomCloud】 <https://homcloud.dev>

大林が開発しているパーシステントホモロジーに基づくデータ解析ソフトウェア

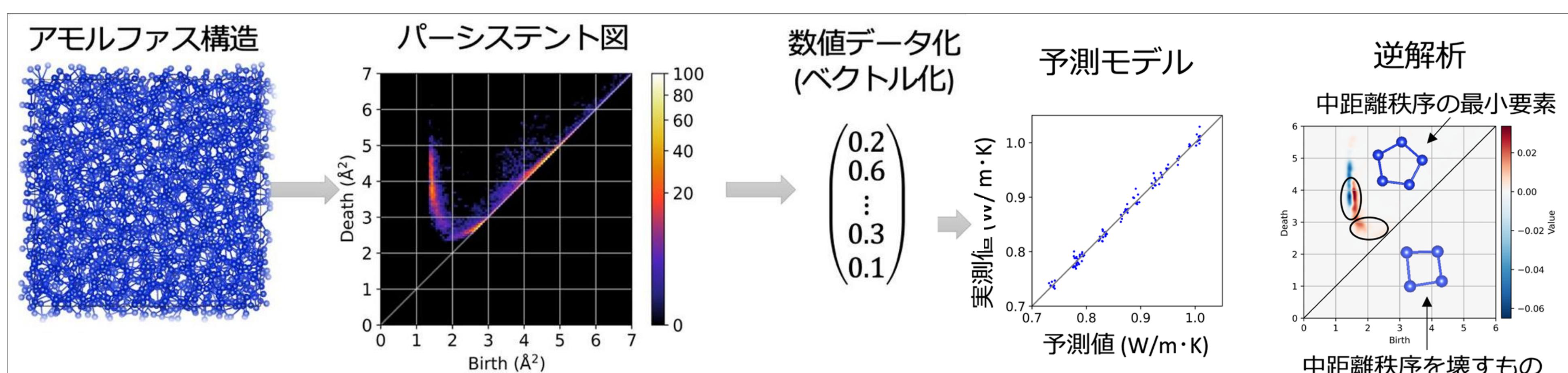
- PythonによるPH解析、Pythonの豊かなエコシステム(データ解析基盤、画像処理、機械学習など)が利用可能
- チュートリアル、リファレンスマニュアルなどドキュメントが充実
- PDの計算、可視化などの基本機能に加え、PDの点に対応する形を特定する形を特定する「逆解析」機能(下図左)、機械学習のためのPDをベクトル化機能(下図右)など
- Windows、Mac、Linuxで動作、Google Collaboratoryを使うと ブラウザでも動作



【材料科学への応用：アモルファスSiの構造と熱伝導率の相関の解明】

E. Minamitani, T. Shiga, M. Kashiwagi, and I. Obayashi. Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous Si. J. Chem. Phys. 156, 244502 (2022)

- アモルファス：結晶でない、乱れた構造を持つ物質
- 热伝導率：热の移動のしやすさ – 物質によって異なる
- 同じ原子からなるアモルファスでも構造が違うと热伝導率が変化 → 原因は？
- 仮説：アモルファスSiの中距離秩序と热伝導率が関連
- 手法：アモルファスSiの構造をPHで定量化し機械学習の手法で热伝導率と相關する重要な構造をPD上で特定、逆解析によりその具体的な形を抽出
- 結果：アモルファスSiの5角形構造の乱れ → 热伝導率の低下。特定したローカル構造を解析し物理的機序を明らかに



【その他の応用】 https://homcloud.dev/use_cases.html

- 焼結鉱の3次元X線CT画像の還元過程における構造変化の特徴づけ
- アモルファスSiの構造と機械的特性の相関の解明
- リチウムイオン電池の負極材料の有力候補、 $TiNb_2O_7$ の結晶の構造の乱れと負極特性の関連をPHで解析

