

実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー

2020年6月16日

[http://www.tfc.tohoku.ac.jp/online\\_event/2020dsw/02/](http://www.tfc.tohoku.ac.jp/online_event/2020dsw/02/)



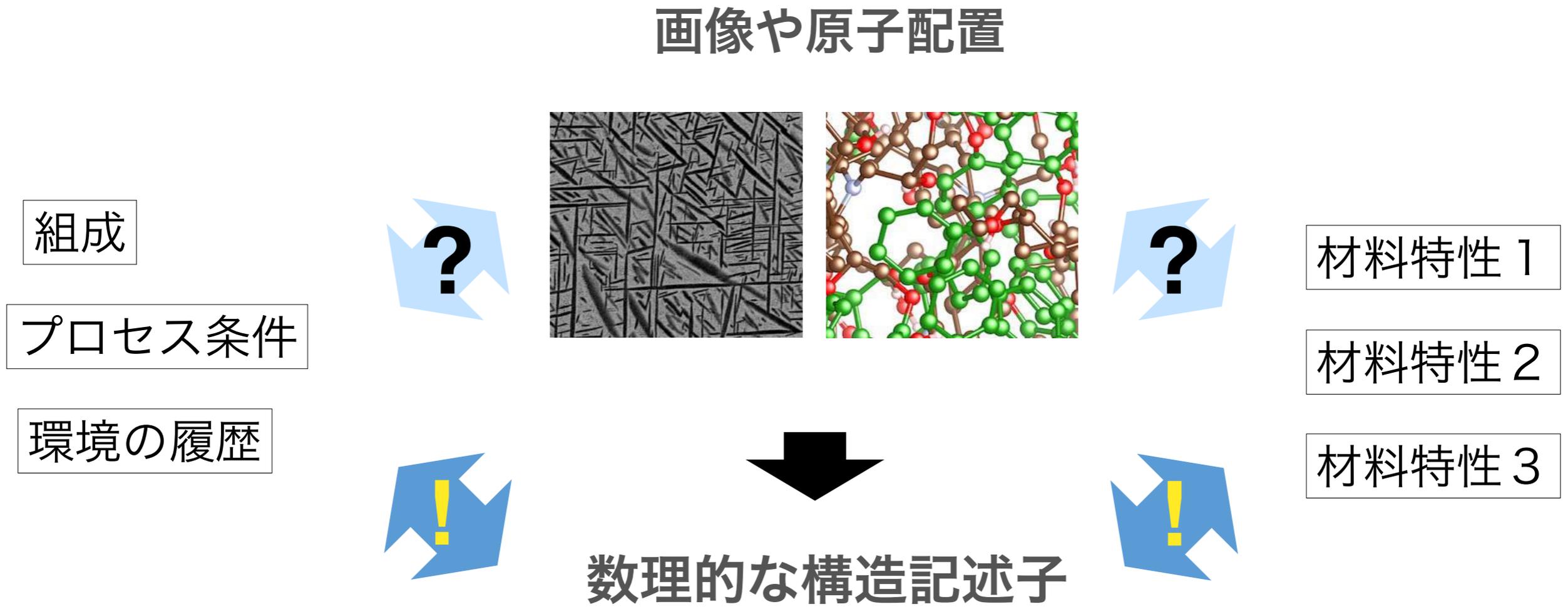
## 第2回 材料科学へのデータ科学的なアプローチ

# データの『かたち』を捉える、気づく、理解する

## –トポロジカルデータ解析の活用例–

東北大学 WPI-AIMR 赤木 和人

# 構造データを定量化は Materials Informatics の重要課題



定量的で検索性が良い構造記述子を用いた  
「中身が見える」逆問題アプローチを実現したい

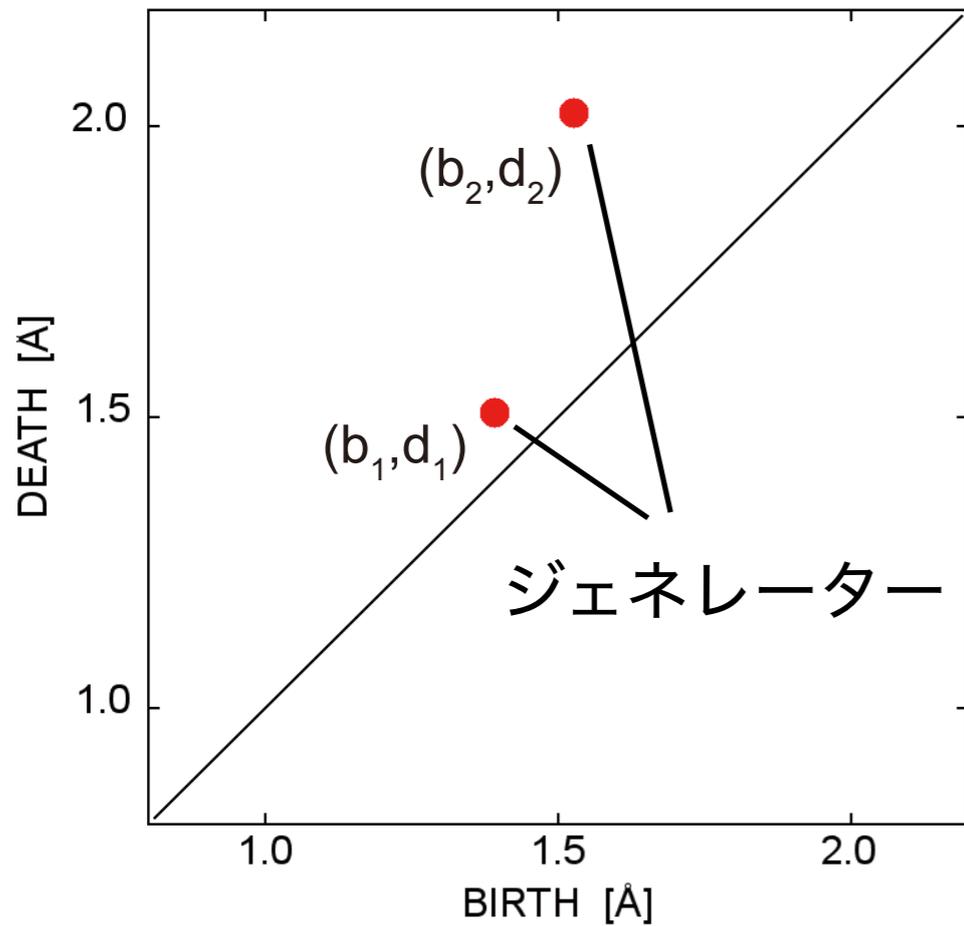
# パーシステント・ホモロジーによるアプローチ



- データの「かたち」を扱う新しい数学的枠組み
- 「かたち」とは  $\ell$ 次元の穴 ( $\ell=0$  つながり方,  $\ell=1$  リング,  $\ell=2$  空洞)
- 対象とするデータは原子配置やデジタル画像
- 複雑な入力データを2次元のヒストグラムとして定量的に翻訳
- 隠れた秩序を抽出してその起源を解明
- 機械学習と組み合わせてmaterials informaticsと相性の良い記述子を生成

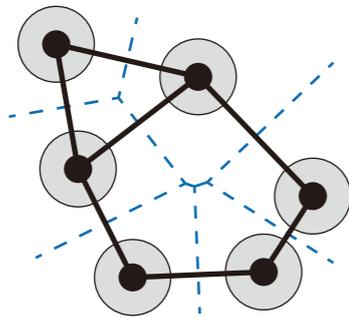
# パーシステント図の直観的な説明

1次のパーシステント図 (PD<sub>1</sub>)

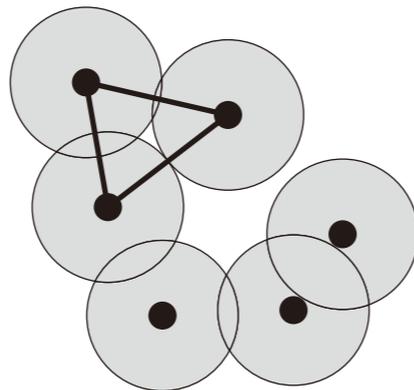


- 入力データの各点を半径 $r$ の球として膨張させる
- $r=b$ で生成した「穴」が $r=d$ で消滅する
- PDの各点 $(b,d)$ はデータ内の1つの「穴」に対応
- 対角線から離れた点は丈夫な「穴」
- 対角線近傍の「穴」はノイズ的

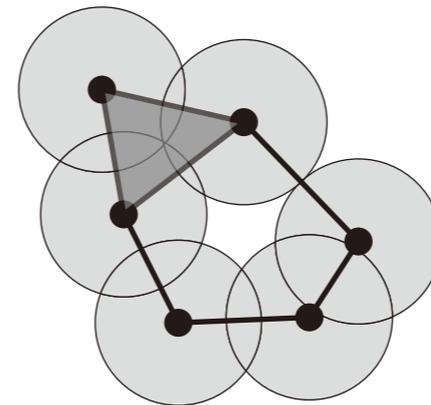
「恣意性なし」に入力データの幾何学的構造を記述できる



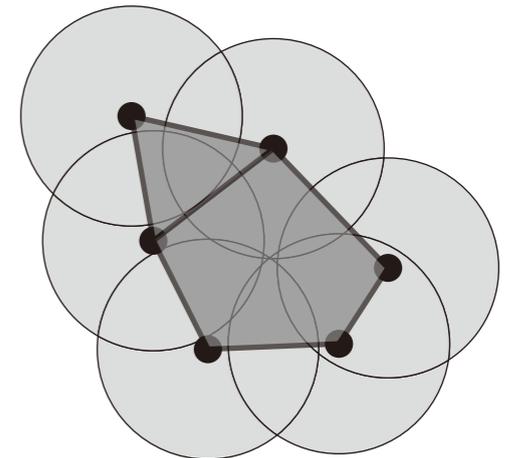
$\ell=1$  (リング) の例



$$b_1 = 1.39 \text{ \AA}$$



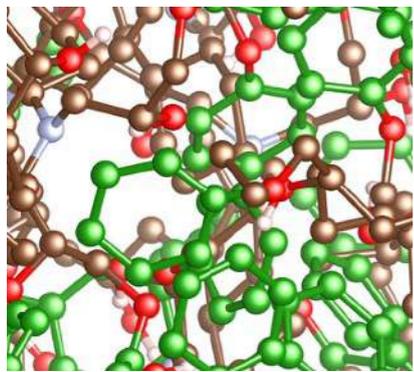
$$d_1 = 1.51 \text{ \AA}$$
$$b_2 = 1.52 \text{ \AA}$$



$$d_2 = 2.02 \text{ \AA}$$

# 順方向と逆方向の解析の統合

## 入力データ



Atomic Configuration

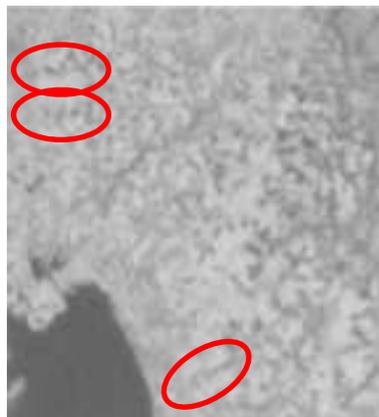
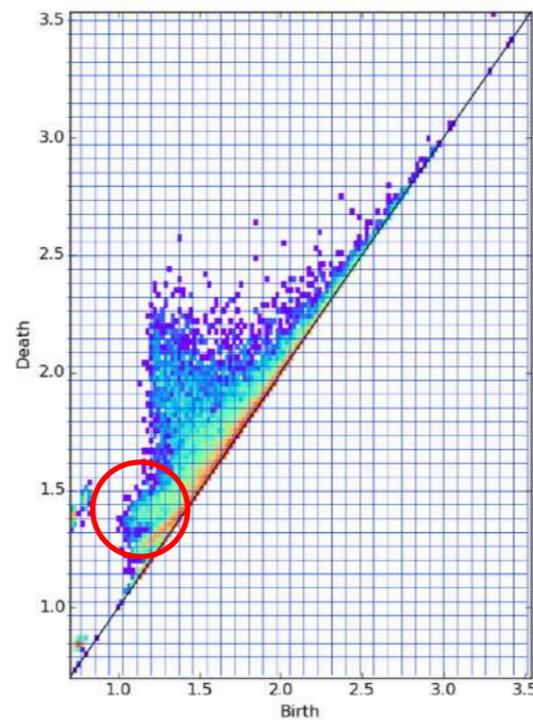


Image Data

## パーシステント図 (PD)

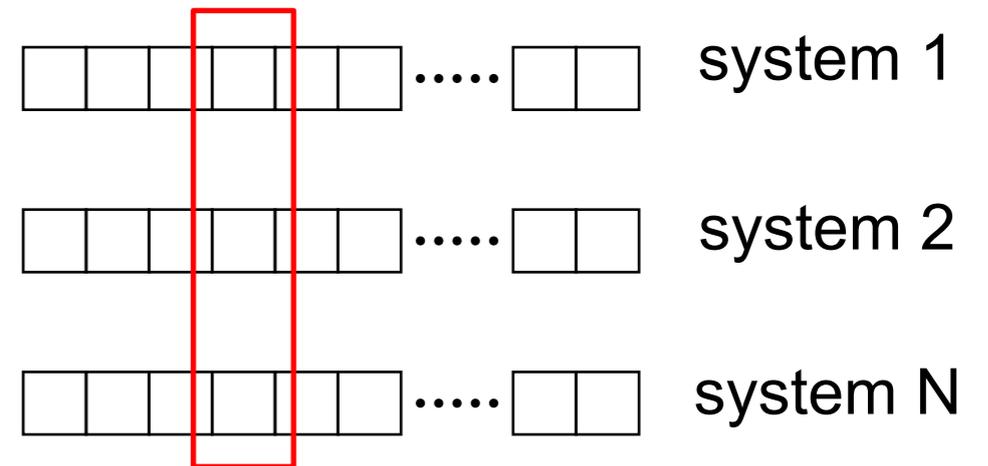
隠れた秩序の発見



粗視化モデルへの変換  
物理的な意味への気づき

## 記述子

適切にベクトル化されたPD

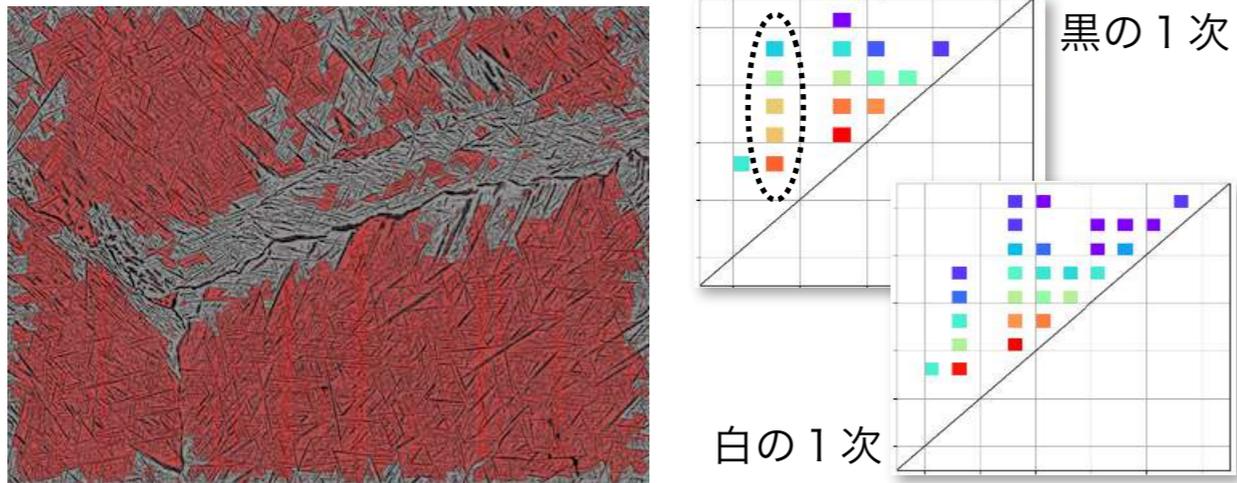


- 機械学習と良い相性
- データベース化も可能

# 具体例の紹介

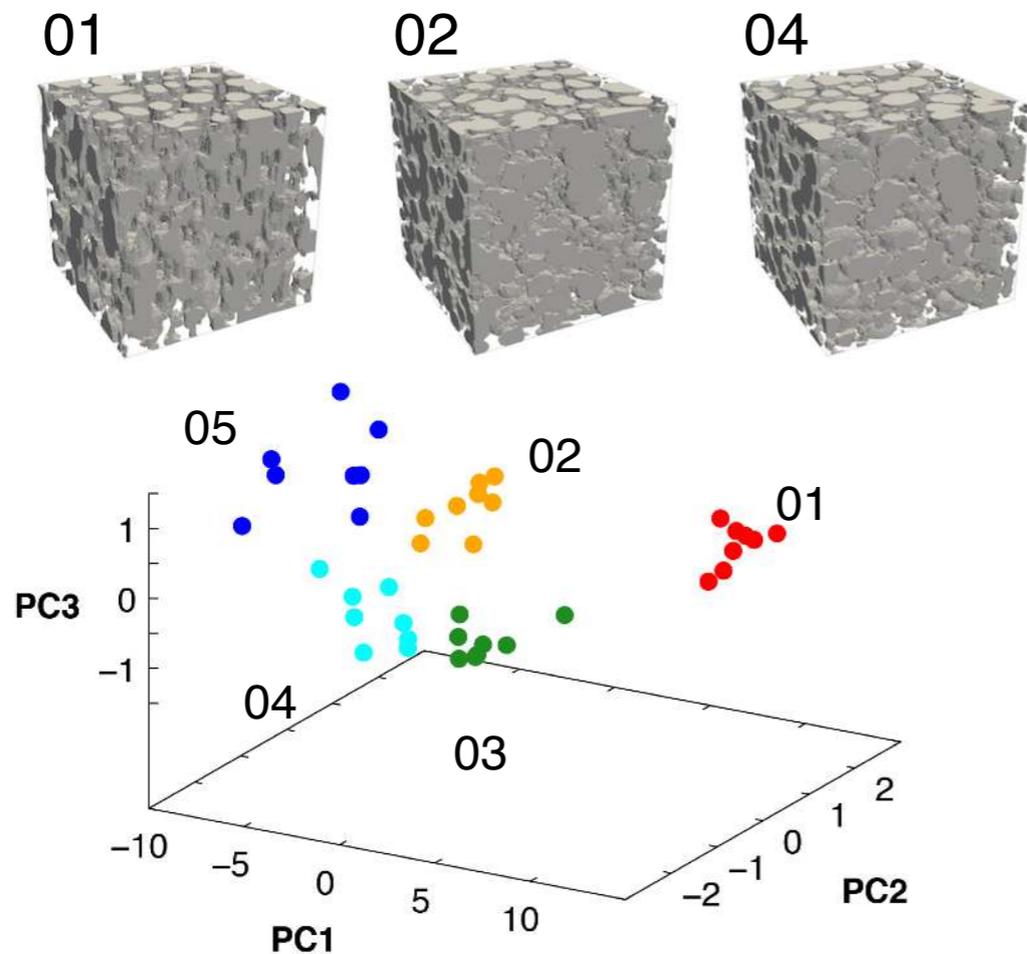
## 顕微画像の定量的な記録と解析

複雑な組織構造をコンパクトなベクトルデータに変換  
同じ幾何学的特徴を持つ領域を可視化



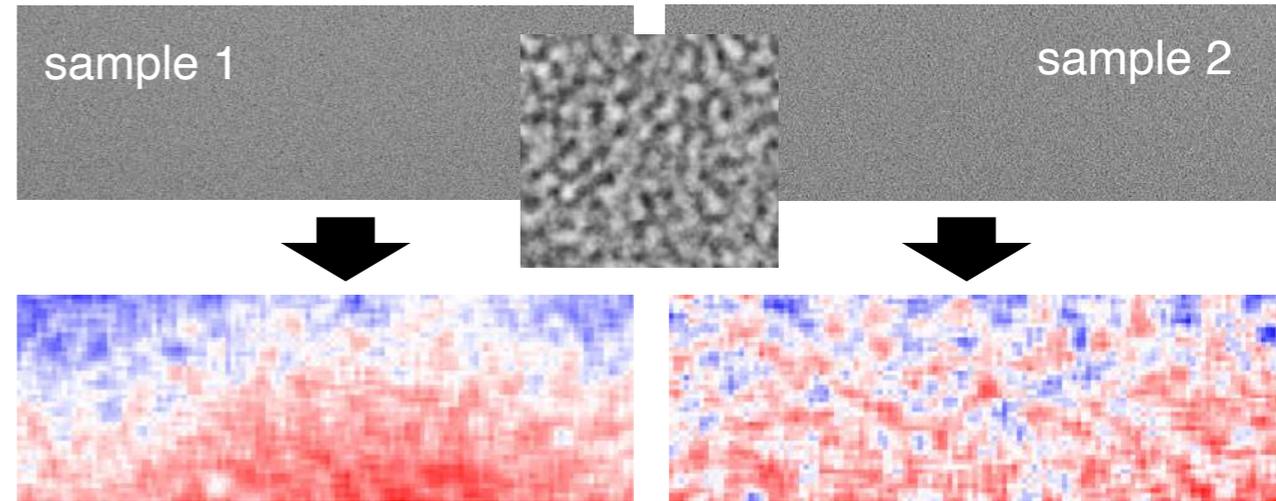
## ポーラス材料の分類

穴の連結構造に基づく3次元画像の分類/物性量との相関解析



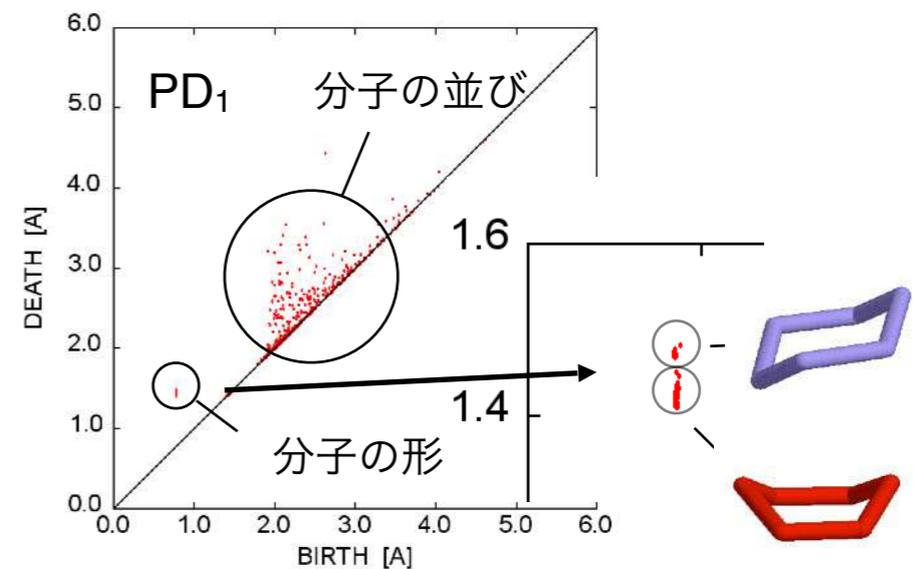
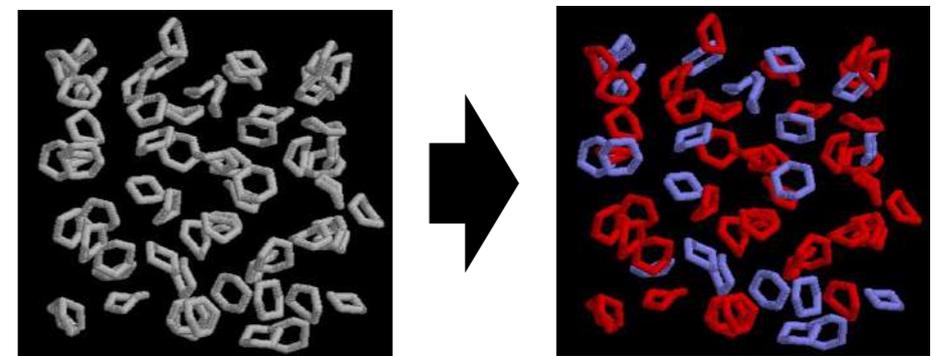
## アモルファス物質のTEM像の特徴づけ

目で違いが分からない画像を「形」の機械学習で塗り分け



## 分子シミュレーション結果の効率的な解析

パーシステント図からの逆解析により、形の定義を与えずに分子の形状を分別、可視化



## 関連情報

「HomCloud」ソフトウェアパッケージ

**“HomCloud AIMR”で検索！**

→ 原子配置や画像データ (2D,3D) を入力して、パーシステント図の計算 (順解析) やパーシステント図のどこが元のデータのどこに対応しているか (逆解析) を行えます。大林氏 (理研) と平岡氏 (京大/理研) がAIMRで開発を始め、無料で公開しています。

パーシステントホモロジーと材料構造解析 (平岡、大林、赤木)

→ 学会誌「人工知能」2019年5月号 特集：「マテリアルズインフォマティクス」の記事です。興味のある方はご連絡ください (akagi@wpi-aimr.tohoku.ac.jp : 別刷PDFを差し上げます)。

SIP戦略的イノベーション創造プログラム

「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」 : A5-3 チーム

<https://www.jst.go.jp/sip/p05/>

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I) : トポロジカル解析グループ

<https://www.nims.go.jp/MII-I/>

トポロジカルデータ解析関連 (コミュニティ立ち上げ等) の情報

<https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/~akagi/>