

数学と情報科学で解き明かす多様な対象の数理構造と活用
2019年度採択研究者

2020年度 年次報告書

大林 一平

理化学研究所革新知能統合研究センター
研究員

パーシステントホモロジーによる位相高次構造抽出手法開発

§ 1. 研究成果の概要

パーシステントホモロジー(PH)とはトポロジーという数学を利用したデータ解析のための道具で、データの幾何的情報をパーシステント図の形に抽出することを可能とするツールである。本研究プロジェクトの目標はPHによる革新的なトポロジカル高次構造抽出フレームワークの構築であり、そのためPHの機械学習/PHへの数理最適化の活用/粗視化PH/PHに基づくデータ解析ソフトウェアの開発/開発したソフトウェアの材料科学などへの応用といった課題の解決を目指す。

今年度の研究成果としては

- (1) stable volume という「逆解析手法」の新しい手法を開発したこと
- (2) データ解析ソフトウェア HomCloud の開発の進展
- (3) 材料科学分野へのパーシステントホモロジー解析の応用、
などが挙げられる。

逆解析手法はPHが抽出した構造を入力データにマッピングしなおすための手法で、PHによるデータ解析に有用な道具であり、PHと数理最適化の組み合わせによって実現されている。Stable volume は既存の逆解析手法で問題となっていたノイズへの不安定性や直感と合わない解析結果などの問題を解決するための新手法で、数学的定式化やその性質の数学的証明、HomCloudへの実装、そして実験用データによる検証などを行った。

HomCloudはPHに基づくデータ解析ソフトウェアで、このソフトウェアの開発はこの研究プロジェクトの中心的課題の一つである。HomCloudの将来の発展のためには内部構造を改善する必要性があり、2020年度はこの課題に取り組み結果を新バージョンとして公開した。

材料科学へのPHの応用は本プロジェクトの出口として重視しており、2020年度には金属ガラスの原子配置構造の解析に関する論文が出版された。この研究はガラスに特徴的な「中距離秩序」と呼ばれる構造の理解を深める結果となった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Akihiko Hirata, Tomohide Wada, Ippei Obayashi and Yasuaki Hiraoka. Structural changes during glass formation extracted by computational homology with machine learning. Communications Materials 1, 98 (2020).