

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

2021年度 年次報告書

大林 一平

岡山大学 サイバーフィジカル情報応用研究コア
教授

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)というのは、トポロジー、特にその中でもホモロジーという数学の道具を使ってデータの形の情報を定量的に抽出するためのツールである。

本年度の研究成果の一つとして、PHと非負行列分解(NMF)との組み合わせによる新手法の開発とその応用がある。NMFは高次元データを低次元で表現するための手法で、主成分分析と類似した手法である。PCAとの違いは「正值性」と呼ばれる性質で、これはNMFの出力の解釈性に寄与している。これとPHとの組み合わせを少し工夫することでPHの異なる次元に共存した構造を抽出する仕組みを実現した。この手法を焼結鈇の3次元X線CT画像に適用することで、焼結鈇の反応での「形の変化」を解釈しやすい形で特徴付けることにも成功した。

より応用に近い方面ではアモルファス材料の熱伝導率と原子配置の相関を調べた研究がある。PHによりアモルファス物質の原子配置の形の情報を定量化し、統計的な手法(Ridge回帰)を適用することで熱伝導率に影響を与える形を特徴付けることに成功した。ここで特徴付けられた空間構造周辺の物理的情報(局在振動モード)を調べることで、データ解析に対応する物理現象を明らかにすることにも成功した。

本研究計画ではPHによるデータ解析ソフトウェアHomCloudの開発も以上のような研究を進めるにおいて重要な課題である。本年度も様々な改良を行ったが、代表的な改良点としては「Reconstructed shortest cycles」という手法を実装したことである。これは他のソフトウェアで既に実現されていた機能であるが、HomCloudに欠いていた有用な機能であるので追加したものである。その他Anaconda, M1Mac, Google Colabへの対応なども進め、より広い環境でHomCloudが利用できるようになった。

【代表的な原著論文情報】

1) Emi Minamitani, Takuma Shiga, Makoto Kashiwagi, and Ippei Obayashi. Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous materials. arXiv preprint.

<https://arxiv.org/abs/2107.05865>

2) Ippei Obayashi, Takenobu Nakamura, and Yasuaki Hiraoka. Persistent Homology Analysis for Materials Research and Persistent Homology Software: HomCloud. J. Phys. Soc. Jpn. 91, 091013 (2022). <https://doi.org/10.7566/JPSJ.91.091013>

3) Ippei Obayashi. Stable Volumes for Persistent Homology. arXiv preprint.

<https://arxiv.org/abs/2109.11711>