

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
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

本武 陽一

統計数理研究所 統計的機械学習研究センター
特任助教

解釈可能 AI によるパターンダイナミクスの数理構造抽出と材料情報学への応用

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題の目的は、複雑な現象の物理法則・原理を発見することを試みる科学者をサポートする解釈可能 AI の開発を、材料科学分野でよくみられる複雑なパターンダイナミクスを対象として実現することである。具体的には、パターンダイナミクスの法則・原理を発見するための解釈可能な縮約モデルを構築する機械学習技術の開発を目指す。本年度は、二種類の解釈可能な縮約モデル構築手法の開発へ向けた事前調査を実施した。

一つ目は、系のポテンシャル関数を深層ニューラルネットワーク(DNN)でモデル化し、その勾配情報に基づいてダイナミクスをモデル化するハミルトニアン・ニューラルネットワーク(HNN)を元にした縮約モデル構築手法の事前調査である。磁性材料系を対象に調査をした結果、データを再構成するように縮約を行う自己符号化層と散逸系に対応する修正を加えた HNN によって強磁性体の磁区構造形成過程の既知の縮約モデルが再現されることを確認した。また、単純な構造の自己3符号化機をより高い精度が期待できる深層畳み込みニューラルネット(DCNN)に置き換えることを念頭に、DCNN で高分子材料の破壊試験画像データを分析した結果、その力学特性値を高精度に推定する特徴量を DCNN で抽出できることが確認された¹⁾。

二つ目は、パーシステントホモロジー(PH)を元にした特徴量を基底関数として用いた縮約モデル構築手法の事前調査である。磁性材料と高分子材料の材料パターン形成過程から PH を元にした特徴量を抽出した結果、その特徴量がモデルパラメータや系の自由エネルギーを良く表現できることが確認された²⁾。特に、磁区構造形成過程では、同じ迷路構造を形成する磁区構造形成過程の中に、位相幾何学的特徴量の観点で異なる振る舞いをもつ過程があることを発見した。さらに、この発見された構造を、機械学習を用いてさらに分析することで、この発見の背景にある物理的な機序を説明できる縮約モデルを開発した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) [Yoh-ichi Mototake](#), Kaita Ito, Masahiko Demura, “Quantitative Prediction of Fracture Toughness of Polymer by Fractography Using Deep Neural Networks”, arxiv:2204.13912, 2022.
- 2) [Yoh-ichi Mototake](#), Masaichiro Mizumaki, Kazue Kudo, Kenji Fukumizu, “Revealing the Mechanism of Magnetic Domain Formation by Topological Data Analysis,” arxiv:2204.12194, 2022.