

位相的データ解析理論の構築と 諸科学への応用

平岡 裕章
Yasuaki Hiraoka

東北大学 材料科学高等研究所 (AIMR)
理化学研究所AIPセンター
物質・材料研究機構 (NIMS) トポロジカル解析グループ

JST CREST
内閣府 SIP革新的構造材料
JST イノベーションハブMI²I
NEDO 超超プロジェクト

平岡裕章 (東北大) : パーシステントホモロジーとその応用

浅芝秀人 (静岡大) : クイバーの表現論とパーシステントホモロジー

白井朋之 (九州大) : 確率論とパーシステントホモロジー

福水健次 (統数研) : パーシステント図に対する統計的機械学習

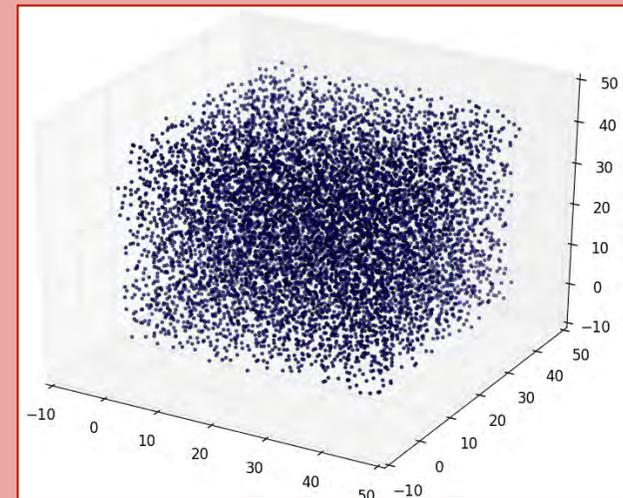
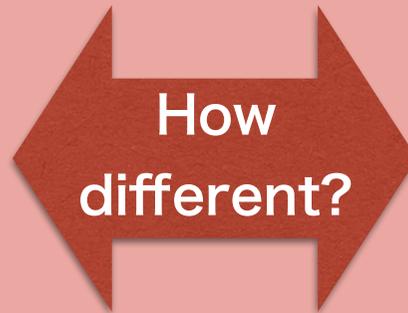
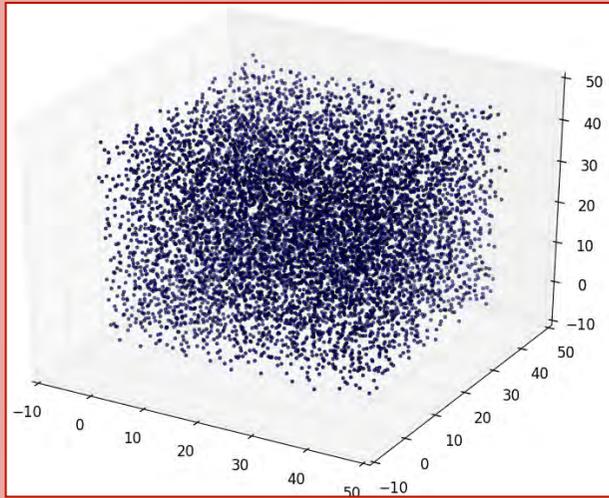
一宮尚志 (岐阜大) : 高分子・タンパク質フォールディングのTDA

大林一平 (東北大) : ソフトウェアHomCloudの開発

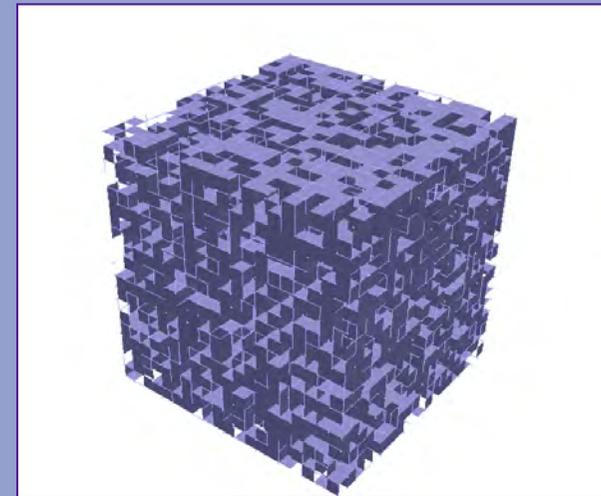
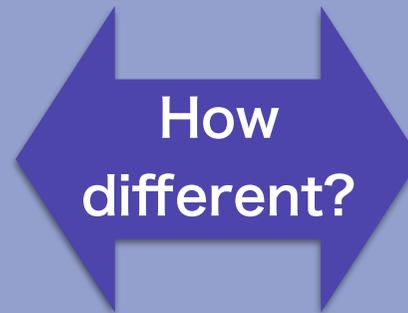
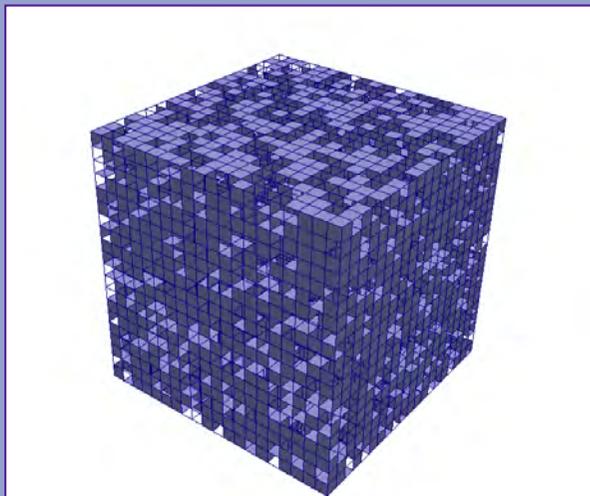
Background : Shape of Data

Data-driven science studies potential values of big and complicated data by machine learning and AI

Point cloud data



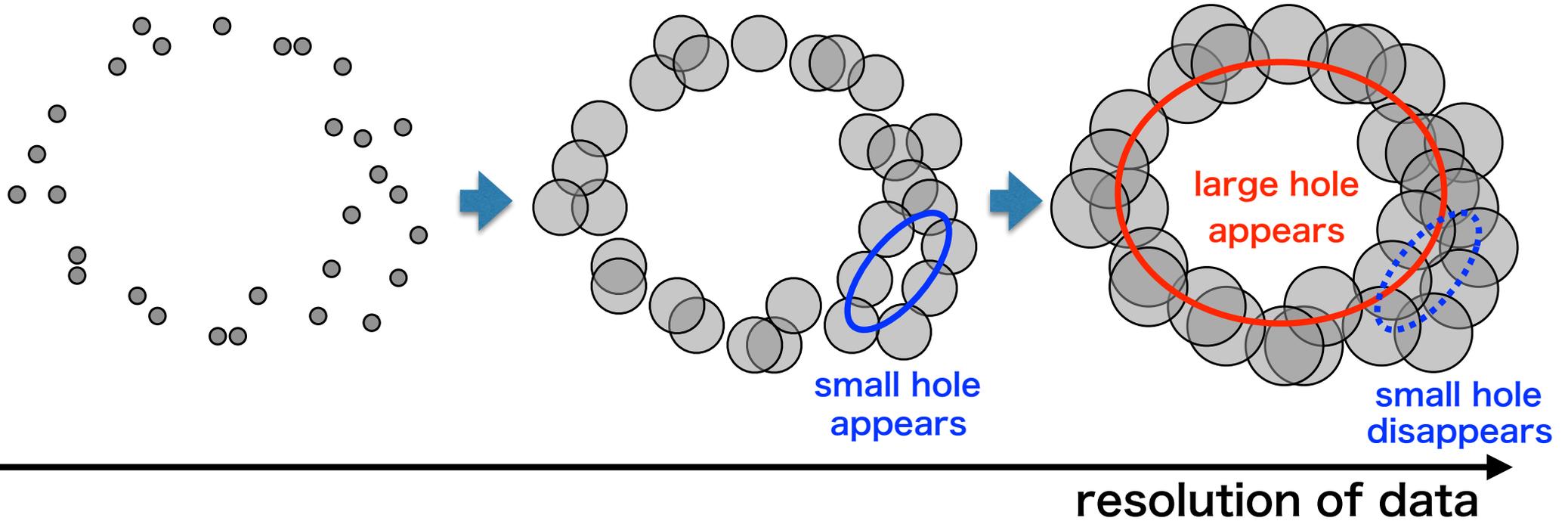
3D image data



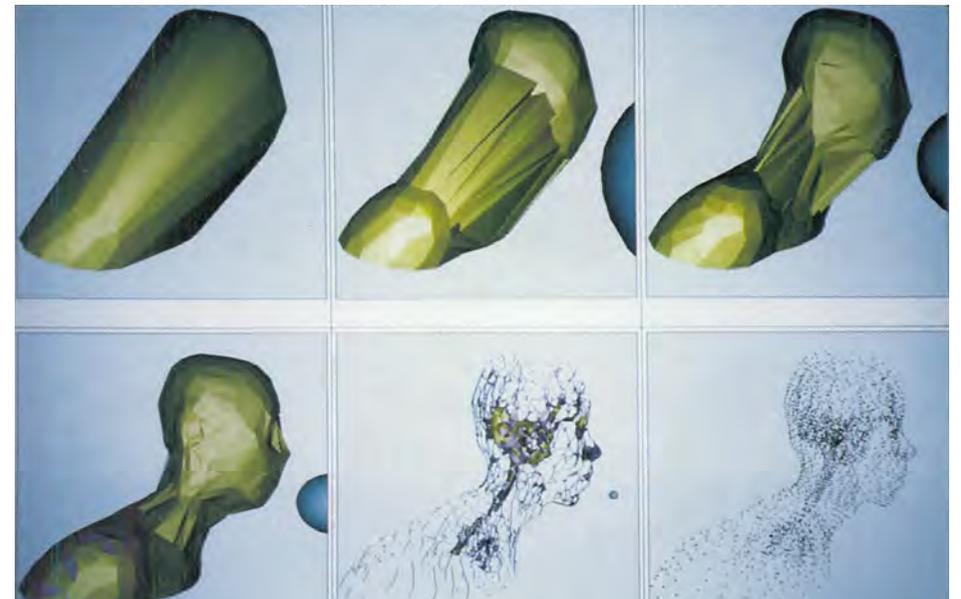
develop mathematical theory for **shape of data**

Idea : Shape of Data

Input data



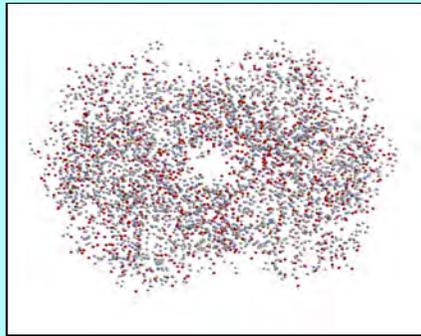
- fattening point data
- changing resolution for multi-scale analysis
- characterization using birth & death of holes



(ref. Edelsbrunner, Mucke)

Persistent homology and persistence diagram

Input data

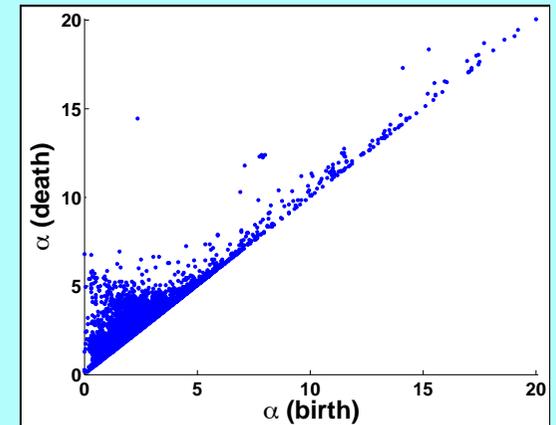


Atomic configuration of hemoglobin

Persistent Homology

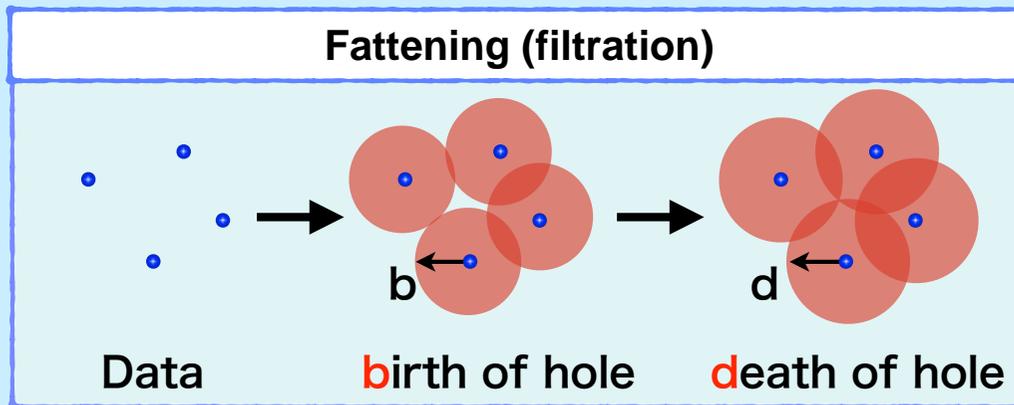
- characterize holes in data
- describe number, size, and shapes
- multi-scale analysis

Shape of data

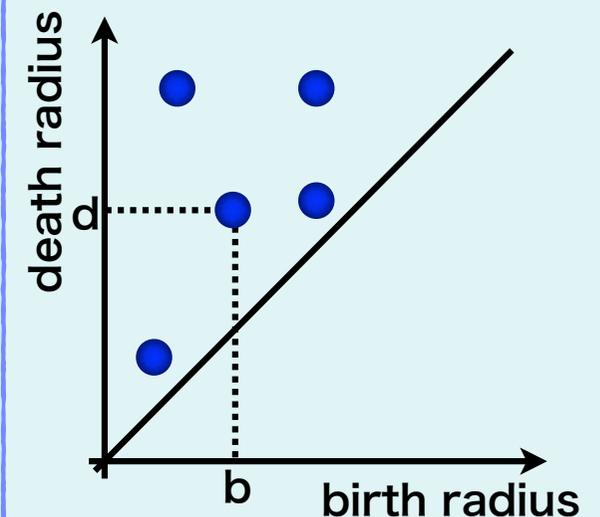


Persistence Diagram (PD)

Persistence diagram of point cloud



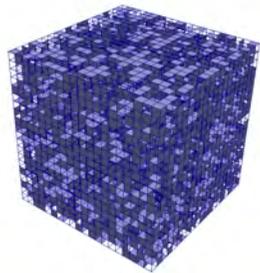
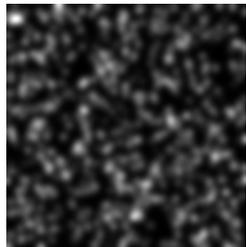
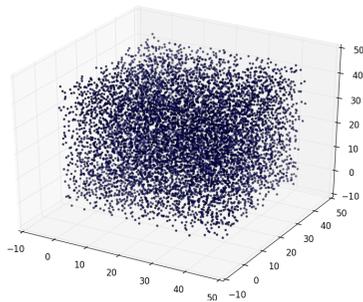
Persistence diagram



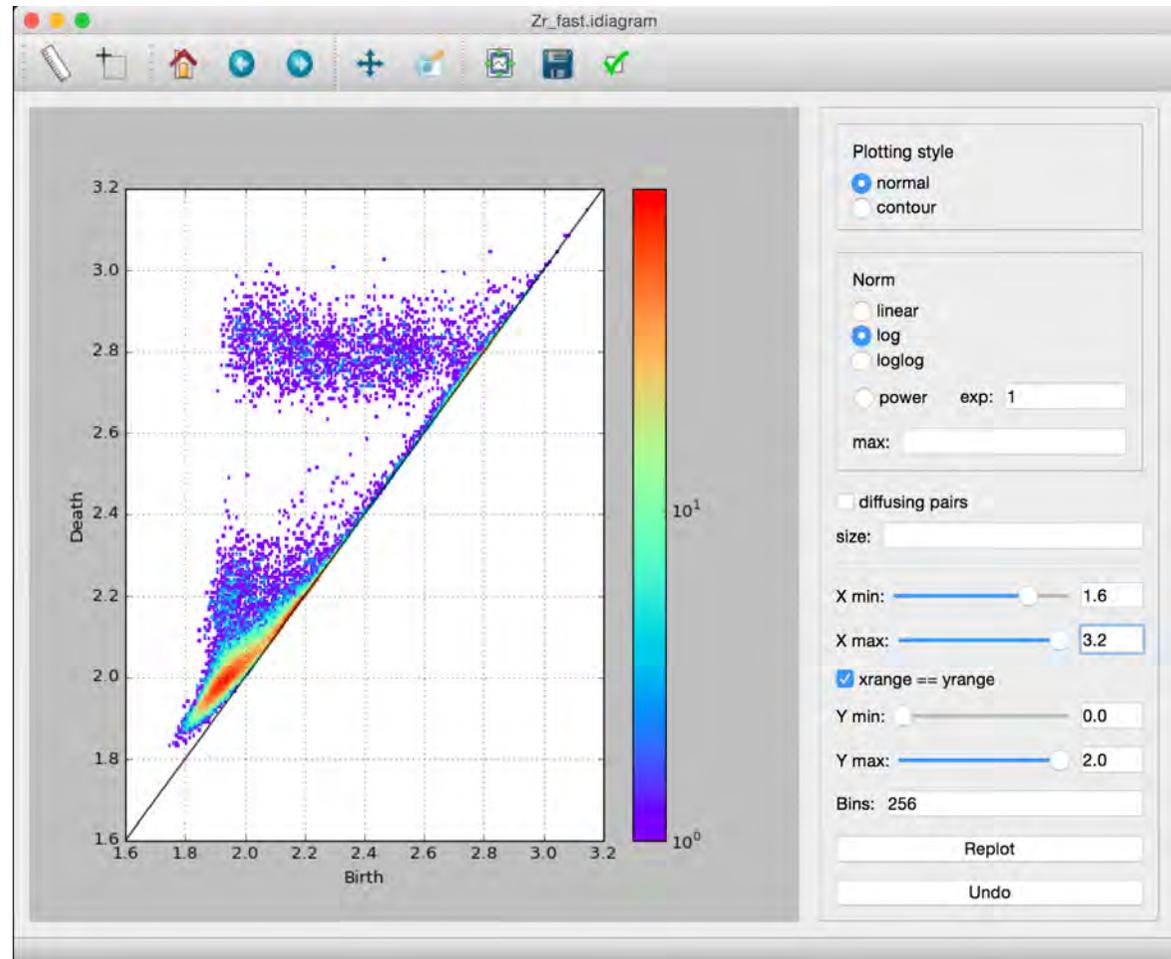
- each point (called generator) in PD expresses a hole in data
- birth & death axes measure shapes of holes
- points close to diagonal are noisy
- points away from diagonal are robust

Note: 2D histogram uncovers further geometry

入力データ



パーシステント図 (PD)



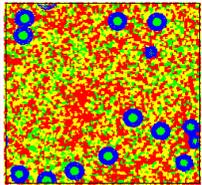
- 1) 東北大学AIMRで開発するTDAソフトウェア（開発リーダー：大林一平氏）
- 2) 高機能GUIの搭載による汎用性（トポロジーの予備知識は不要）
- 3) 高速PD計算PHAT、DIPHAを搭載
- 4) 空間点データおよび2D/3D画像データ解析
- 5) PD逆問題、PD機械学習、PDスパース解析

http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/index.html

Materials TDA

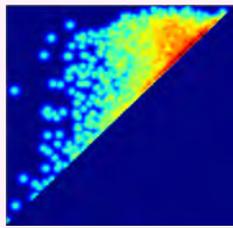
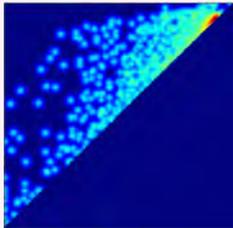
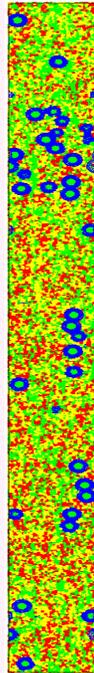
Supported by AIMR, CREST, SIP, MI²I, NEDO

Polymer

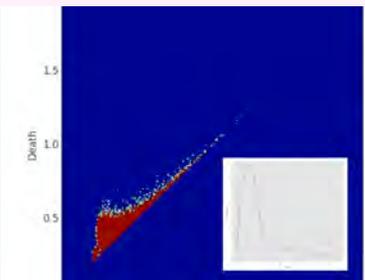


Atomic Force Microscopy image (by Nakajima)

expansion



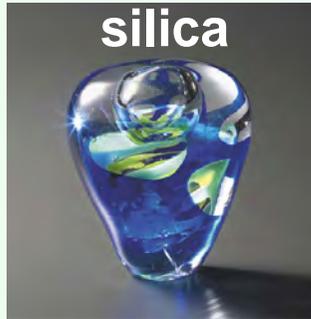
craze formation



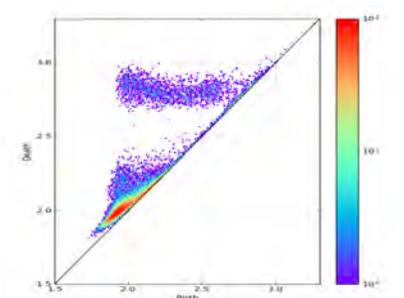
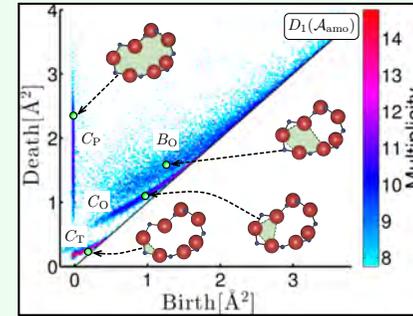
PRE (2017)



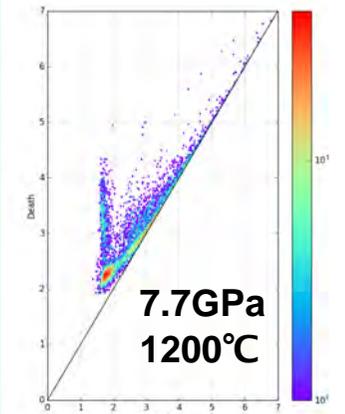
Glass



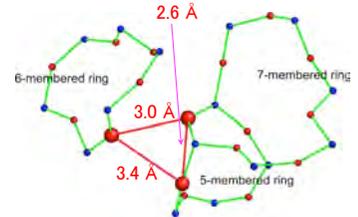
PNAS (2016)



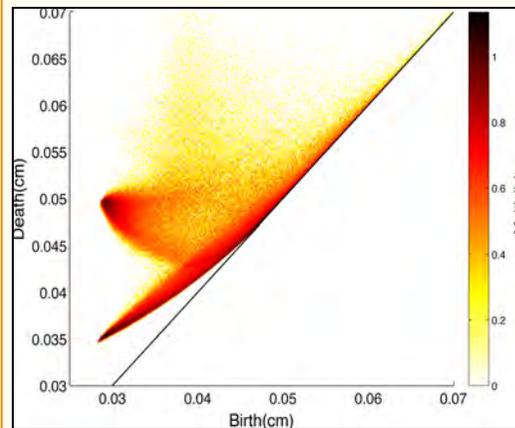
Nanotechnology (2015)



densified silica

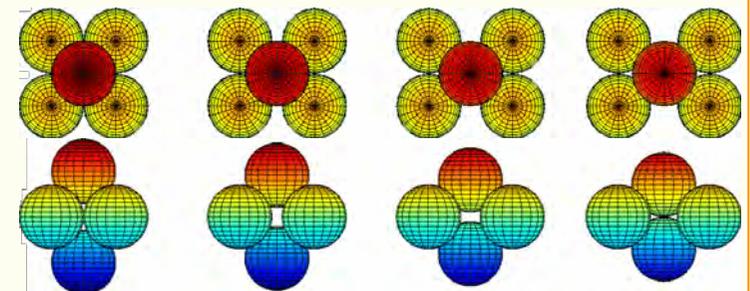


Grain



Nature Communications (2017)

deformation of octa.



大林一平（東北大）：機械学習とTDAによる画像解析

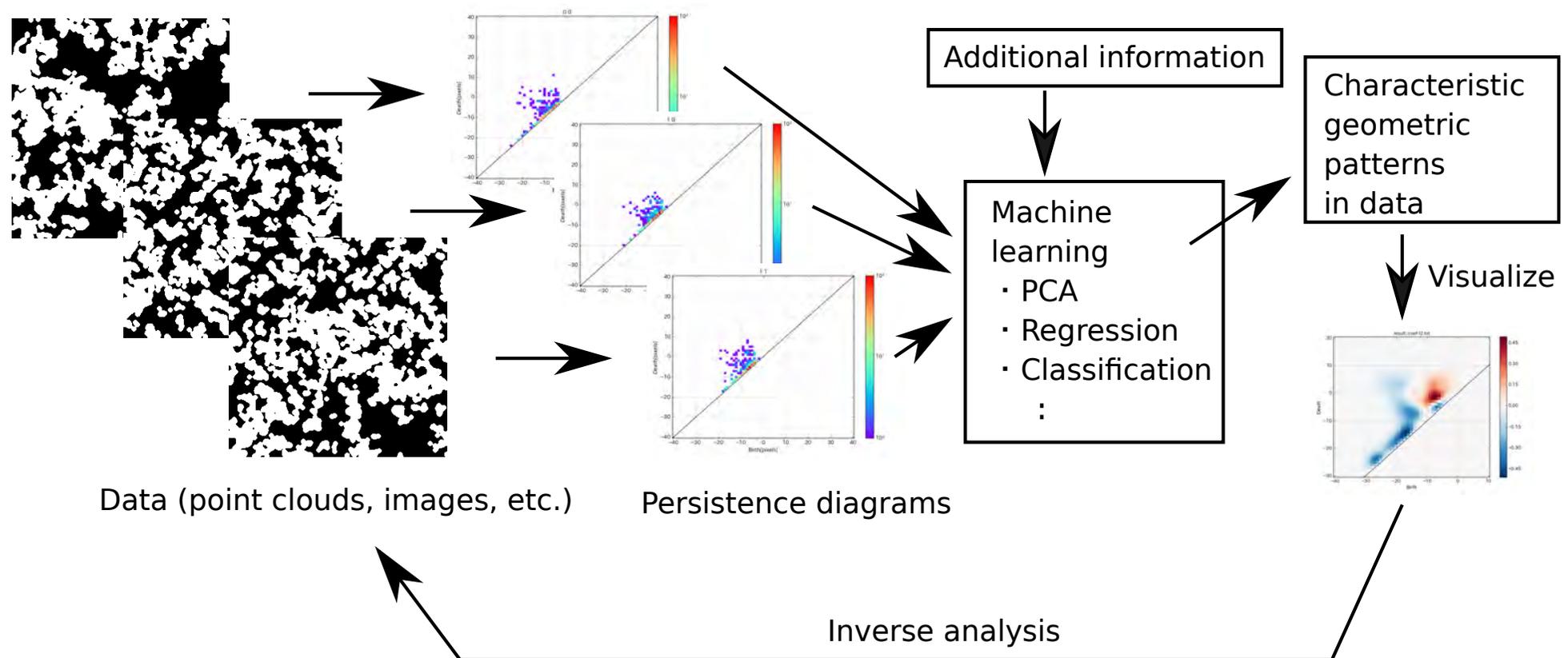
Buchet Mickaël（東北大）：パーシステントホモロジーとTDA

竹内博志（東北大）：粉体材料解析へのTDA

一宮尚志（岐阜大）：高分子・タンパク質フォールディングへのTDA

Digital Image Analysis using Persistent Homology and Machine Learning

Ippei Obayashi, (AIMR, Tohoku Univ.)



数学を使って「粉体が結晶になる際の構造の変化」を解明

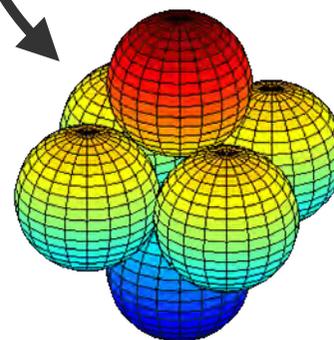
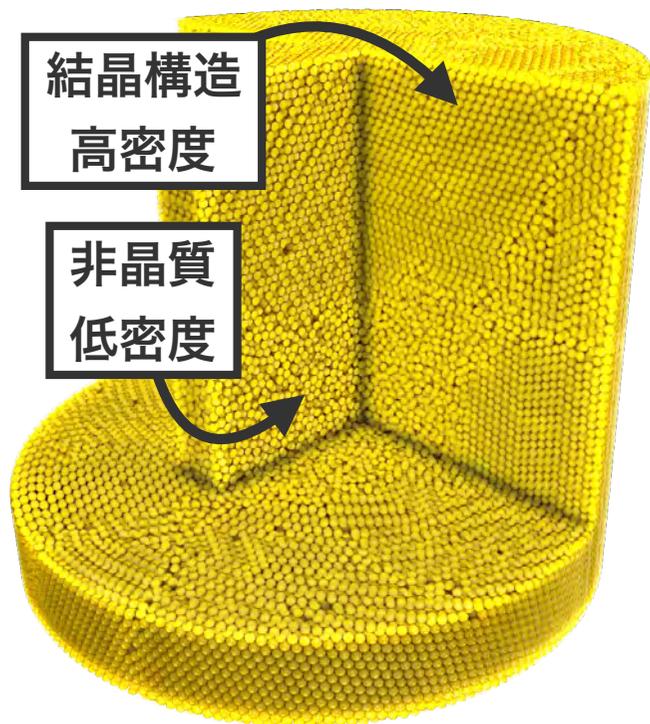
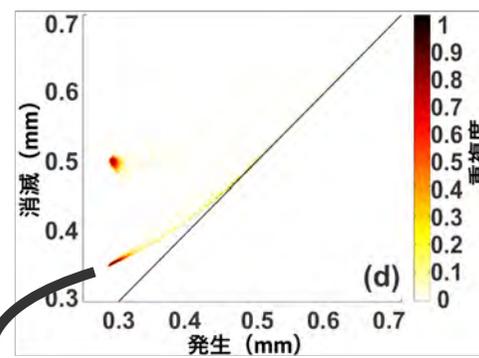
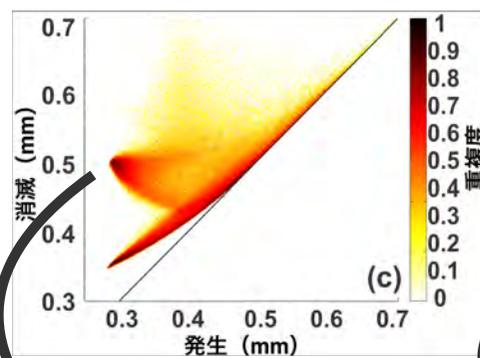
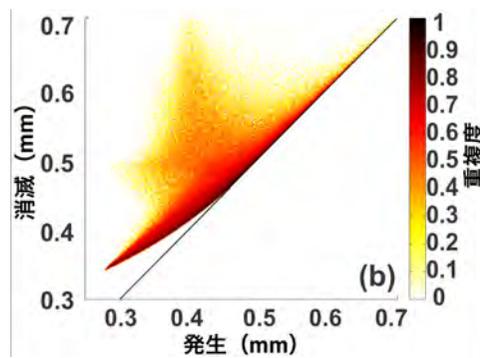
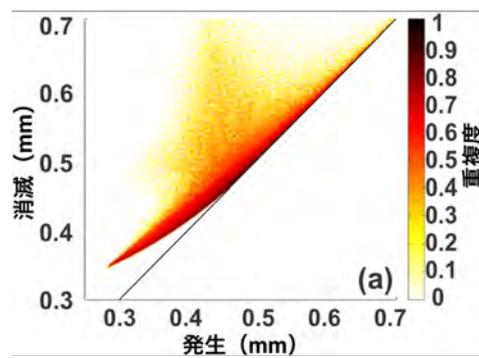
0.60

0.63

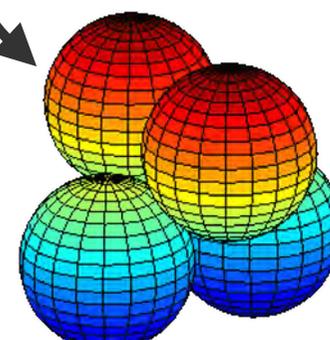
密度

0.69

0.73



正八面体配置



正四面体配置

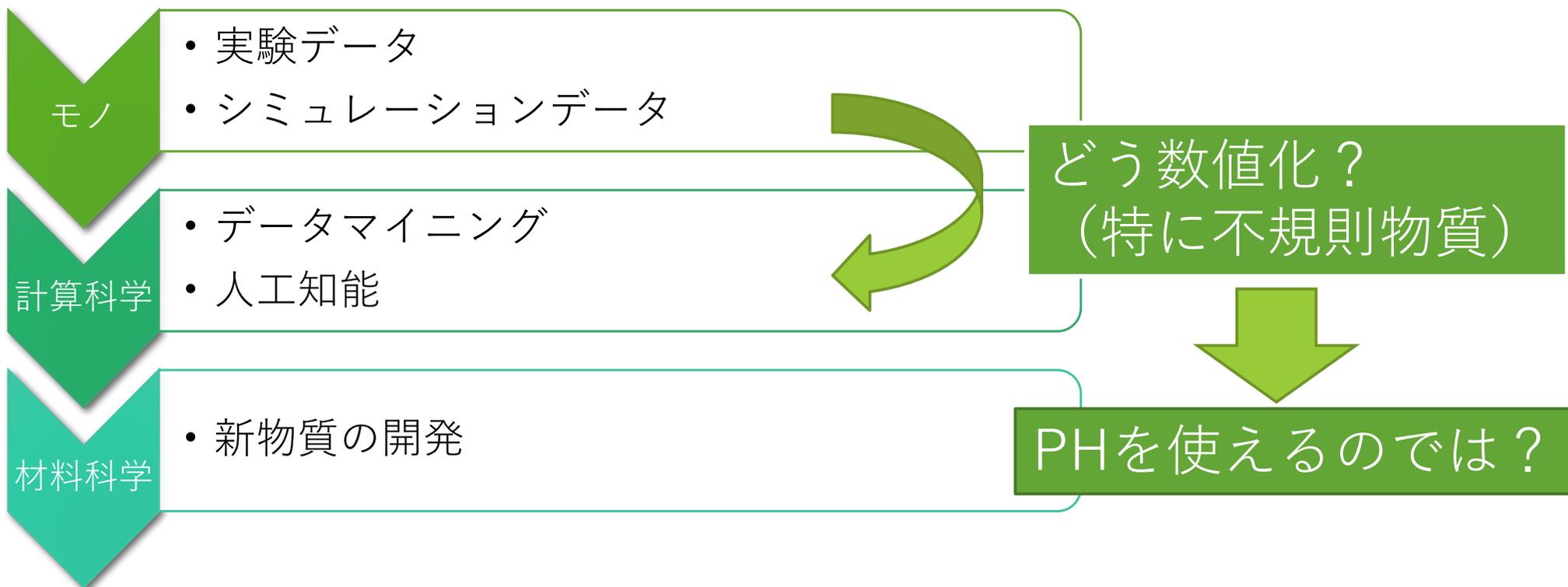
Nature Communications 8: 15082 (2017)

発表担当 | 竹内 博志 (東北大)

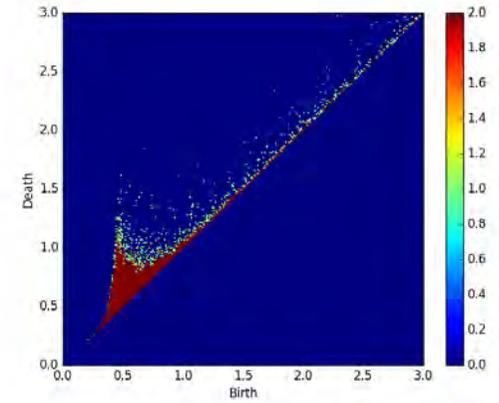
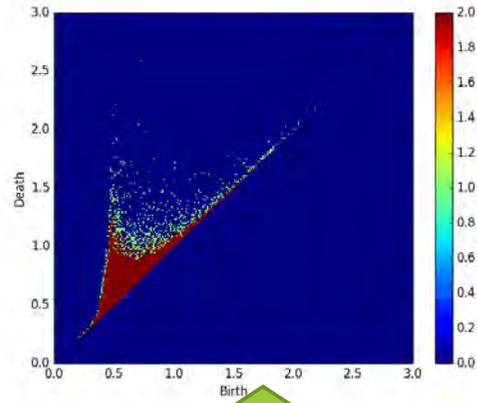
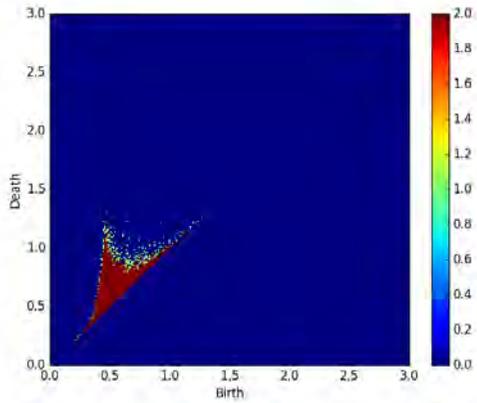
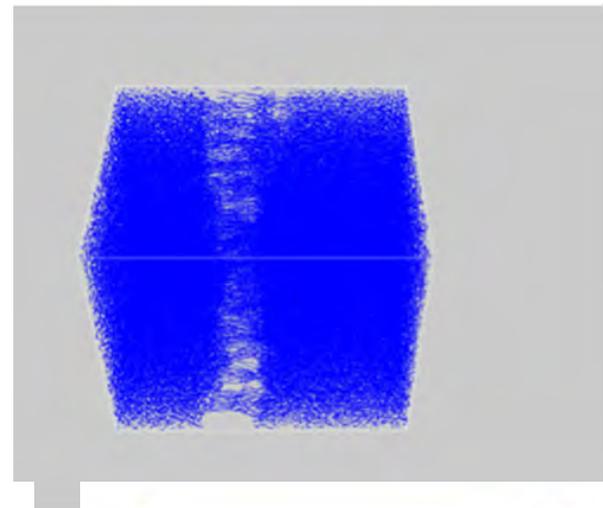
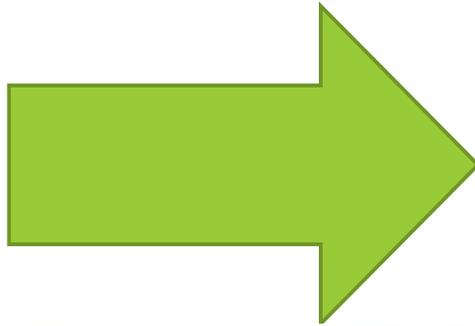
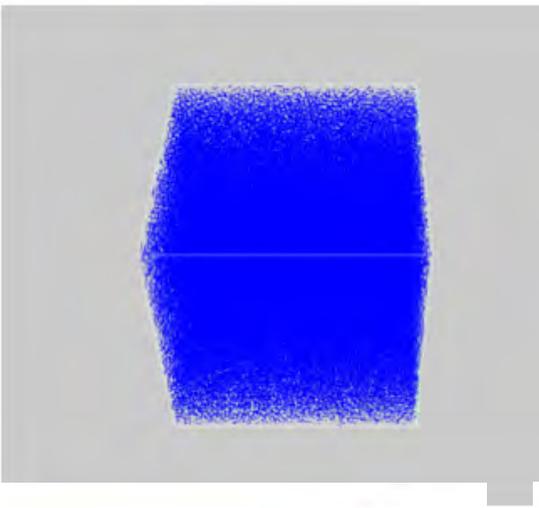
パーシステントホモロジーによる高分子材料の破壊過程の解析

岐阜大学、CREST 一宮 尚志

マテリアルズインフォマティクス



アモルファス高分子が壊れる過程をパーシステントホモロジー解析してみよう



大きな『空孔』の発生
詳細はポスターで