# パーシステントホモロジーを用いたスピノーダル分解の特徴量抽出

## Feature extraction of spinodal decomposition by using persistent homology

東京理科大学 [1]，東北大学 AIMR[2]，MI[2]I-NIMS[3]，理研 AIP センター[4]，京都大学 高等研究院 [5]
○(B)青木 宏賢 [1]，(M1)沖 直人 [1]，(M1)山田 拓洋 [1,3]，大林 一平 [2,4]，赤木 和人 [2,3]，
平岡 裕章 [3,4,5]，小嗣 真人 [1,3]
Tokyo Univ. of Science [1], AIMR Tohoku Univ., MI[2]I-NIMS[3], AIP center RIKEN[4], KUIAS [5]
°(B)Hirotaka Aoki[1], (M1)Naoto Oki[1], (M1)Takumi Yamada[1,3], Ippei Obayashi[2,4],
Kazuto Akagi[2,3], Yasuaki Hiraoka[3,4,5], Masato Kotsugi[1,3]
E-mail: 8215002@ed.tus.ac.jp

近年のマテリアルズインフォマティクス (MI)の発展を背景に、大規模の解析データから情報抽出を行い、物質機能の予測やプロセス条件の最適化など、材料科学に情報科学を取り入れる試みが活発化している。顕微鏡による組織観察は、機能解析における重要な手段であり、これまでミクロな金属組織を元にマクロ機能の支配因子や原子スケールの物性値が議論されてきた。その一方でこれらの作業は研究者が経験に基づいて逐一判断していることから、大規模データへの対応が困難となっている。また、マクロ機能とミクロ組織の間には物質階層性に関わる重要な課題が残されており、基礎的にも大変意義深い。

そこで本研究では、相分離の代表例であるスピノーダル分解を対象に、フェーズフィールド法(PFM) [1]とパーシステントホモロジー(PH)を用いて、原子スケールの相互作用と広範囲の組織構造の対応関係を構築することを試みた。PH は構造データにおける「穴」や「島」の大きさ、形状、ゆらぎ、連結性を定量的に記述できる強力な数学的概念である[2]。本研究では特に、金属組織に PH を適用し、組織構造からの特徴抽出の可能性を検証した。実験では、ガラス、セラミックスなどで代表的なスピノーダル分解を対象に、初期濃度場をランダムに振って Pd-Al 系の組織画像を生成した(Fig. 1a,b)。次に、一連の組織画像に PH を適用しパーシステンス図(PD)を作成した(Fig. 1c,d)。その結果、組織形成初期段階では互いに組織形状が異なるにも関わらず共通の PD が得られた。cosine 類似度を用いて PD の類似度を評価したところ、99%以上の類似度が得られた。このことから、PH はスピノーダル分解における組織形状の特徴を適切に抽出できたと考えられる。

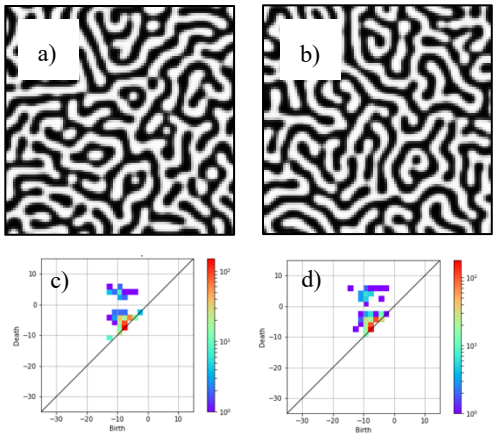


Fig.1 a, b) Microstructures of spinodal decomposition simulated by PFM under different initial concentration field. Black region shows Pd phase, white region shows Al phase. c, d) 0th Persistence Diagrams generated from Fig 1a), b) respectively.

[1] 小山 敏幸, 高木 知弘,フェーズフィールド法入門
[2] Y. Hiraoka *et al*. PNAS, 113 (2016) 7035-7040