

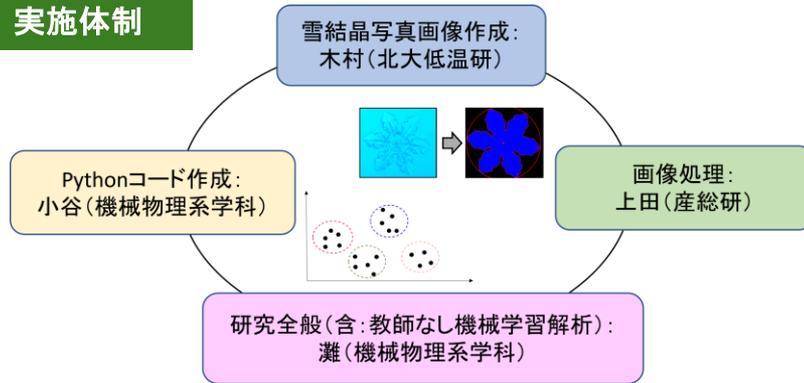
# 教師なし機械学習を使って物質の複雑なかたちに潜む特徴を抽出する

## 研究目的

教師なし機械学習を効果的に活用した物質科学分野の新しいデータサイエンス研究手法を創出する。

ターゲット: 雪結晶の複雑なかたちに潜む特徴の抽出

## 実施体制

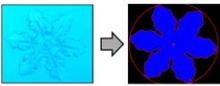


## 研究概要

### 1. 雪結晶画像作成とそこから外形データ(2D)を正確に抽出

高度な撮影技術

担当: 北大・木村

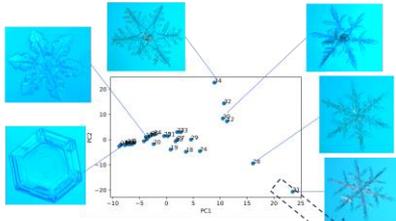


最適な画像解析技術

担当: 灘、産総研・上田

最適な二値化

### 2. 次元削減法とクラスタリング法による雪結晶形の仲間分け



最適な機械学習解析技術

担当: 灘、小谷

結晶形の回転対称性をどう扱うか

主成分分析 or 多段階アルゴリズム

K-means or DBSCAN

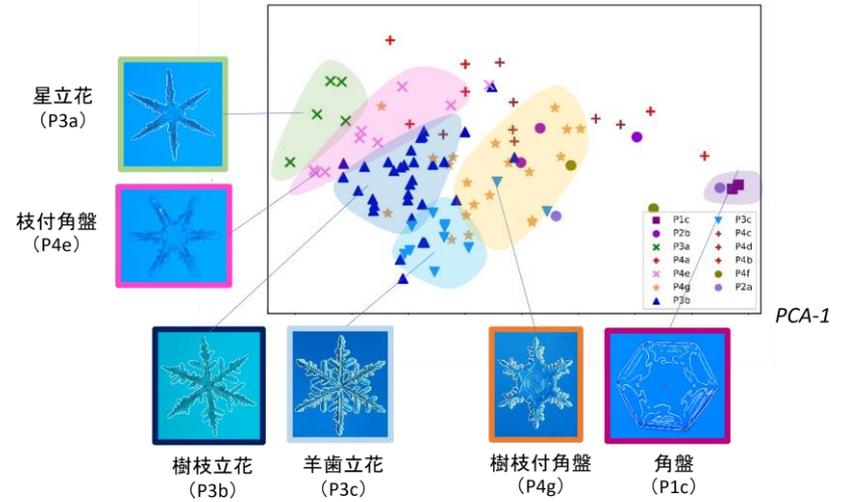
### 3. 新しい形の仲間の発見、その特徴を生む物理的要因の検討

正確な特徴抽出 担当: 全員

結晶成長機構の異方性との関係

## 研究成果1

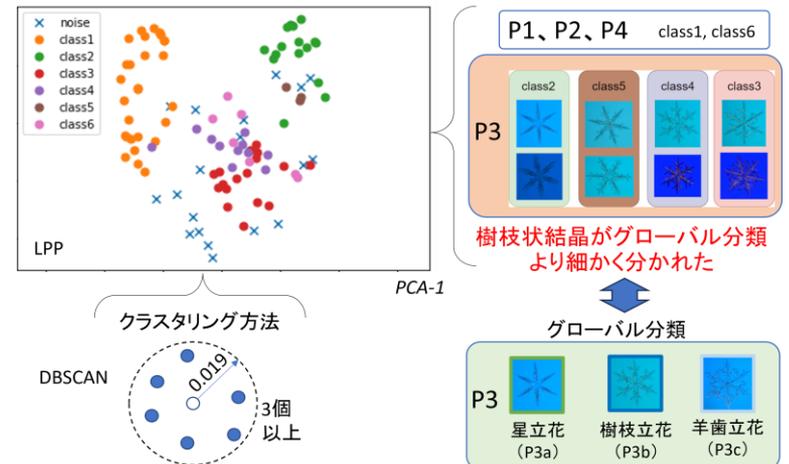
### 二次元平面への次元削減



グローバル分類の小分類 P1c~P4g を概ね再現

## 研究成果2

### 四次元空間への次元削減とクラスタリング



樹枝状結晶がグローバル分類より細かく分かれた

グローバル分類

