

平岡 裕章

東北大学原子分子材料科学高等研究機構
准教授

ソフトマター記述言語の創造に向けた位相的データ解析理論の構築

§ 1. 研究実施体制

(1) TDA 班

- ① 研究代表者: 平岡 裕章 (東北大学原子分子材料科学高等研究機構, 准教授)
- ② 研究項目
 - ・ パーシステントホモロジー逆問題法の開発
 - ・ MD-TDA 研究の実施

(2) 表現論班

- ① 主たる共同研究者: 浅芝 秀人 (静岡大学大学院理学領域, 教授)
- ② 研究項目
 - ・ 行列問題を用いた有限型パーシステンス加群の直既約分解法開発
 - ・ bocs を用いた無限型パーシステンス加群の直既約分解法開発

(3) 確率論班

- ① 主たる共同研究者: 白井 朋之 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, 教授)
- ② 研究項目
 - ・ ランダムトポロジー理論

(4) 統計班

- ① 主たる共同研究者: 福水 健次 (情報・システム研究機構統計数理研究所, 教授)
- ② 研究項目
 - ・ パーシステント図に対するカーネル法の開発
 - ・ ガウス過程のエクスカッション集合と最大値分布に関する研究

(5)MD 班

- ① 主たる共同研究者:一宮 尚志 (岐阜大学医学系研究科, 准教授)
- ② 研究項目
 - ・ パーシステントホモロジーを用いたタンパク質のフォールディング過程の解析

§ 2. 研究実施の概要

本 CREST チームでは、位相的データ解析と呼ばれる「データの形」に着目した新たな解析手法の開発、付随する様々な数学理論構築、およびそれらをソフトマターの構造解析へ応用する一連の研究を実施した。中心となる数学的手法はパーシステントホモロジーおよびそれを表示するパーシステント(図 1 参照)であり、データに含まれる穴を幾何的特徴もとらえながら表現することを可能とする。チームは5つの班(TDA 班, 表現論班, 確率論班, 統計班, MD 班)から構成されており、各班の研究実施内容を以下で説明する。

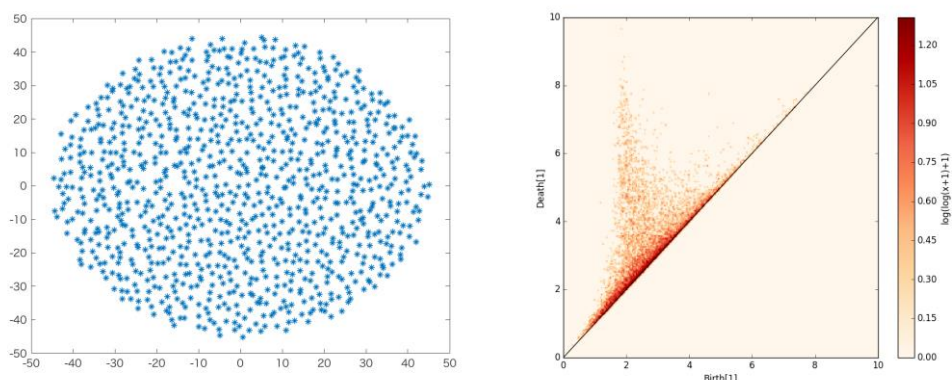


図 1 : 平面上のランダム点配置 (Ginibre 点過程) とそのパーシステント図

TDA 班では、データからパーシステント図を構成する手順の逆に相当する、パーシステント図からデータを再構成する逆問題法の一般化に取り組んだ。これにより、既知のデータとパーシステント図が与えられた際、パーシステント図の微小変形にともなうデータの微小変形を追跡する手法が確立された。また、ガラスの構造解析にパーシステント図を適用し、原子配置のリング構造に階層性が存在することや、第一シャープ回折ピーク(FSDP)のパーシステント図を用いた実空間構造の解明などに成功した。

表現論班では、 A_4 型可換ハシゴ(図 2 参照)上のパーシステント加群を行列問題によって直既約分解する方法を確立した。

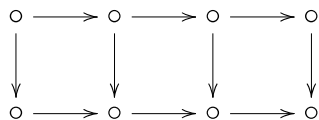


図 2: 可換ハシゴ

また bocs の理論を勉強し情報収集するために、静岡大学、東北大学、信州大学の間で Skype を使った遠隔セミナーを行い、知識を共有した。

確率論班では、ランダムトポロジーの研究を行った。ランダムグラフは数学・物理・情報等の分野

で様々な角度から研究されてきたが、2000年以降このランダムグラフの概念を拡張したランダム単体複体が盛んに研究されるようになった。本研究ではランダム複体の連結成分や穴の性質を反映したランダムなパーシステント図の性質を調べた。平成27年度はランダム単体複体をランダムセル複体に一般化することにより、2次元格子などで研究されているパーコレーション(浸透)の問題を高次元でも扱える枠組みを構築した。

統計班では、パーシステント図をより一般的なデータ解析手法として適用可能とする統計手法の開発を行った。今年度はまずカーネル法の確立を目指した。多くのパーシステント図が与えられたときに、それらをベクトル化してデータ解析を行うための新しいカーネルの提案を行い、さまざまな実データに適用して有効性を検証した。このカーネルによって、従来の多くの統計的データ解析手法が位相的データ解析の枠組みでも適用可能となった。また、位相的データ解析の結果の統計的信頼性の評価方法や、確率過程の最大値の分布などに関して、基礎的な検討を進めた。

MD班ではタンパク質折り畳みシミュレーションを主に実施した。生体内でのタンパク質の折り畳みがどのようなプロセスで進行するかという問題は、理論的に興味深いことはもちろん、創薬などの応用上も重要な問題である。この問題に取り組むため、平成27年度のMD班ではタンパク質のシミュレーションおよびパーシステントホモロジー解析の環境を整備し、そのテストとしてSH3と呼ばれる比較的簡単なタンパク質の折り畳みシミュレーションを行った。この結果、パーシステントホモロジーによりタンパク質の折り畳みにともなう形の変化をある程度捉えることができることが分かった。

今年度の代表的な原著論文:

E. Escolar and Y. Hiraoka. Persistence Modules on Commutative Ladders of Finite Type. *Discrete and Comput. Geom.* 55 (2015), 100-157.