

平岡 裕章

東北大学原子分子材料科学高等研究機構
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, 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
 - ・ 粉体およびガラス構造解析に対する TDA 研究の実施

(2) 表現論班

- ① 主たる共同研究者: 浅芝秀人 (静岡大学理学部, 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 (統計数理研究所数理推論研究系, 教授)
- ② 研究項目
 - ・ カーネル法を用いたパーシステント図に対するデータ解析法の構築とその応用
 - ・ 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(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。

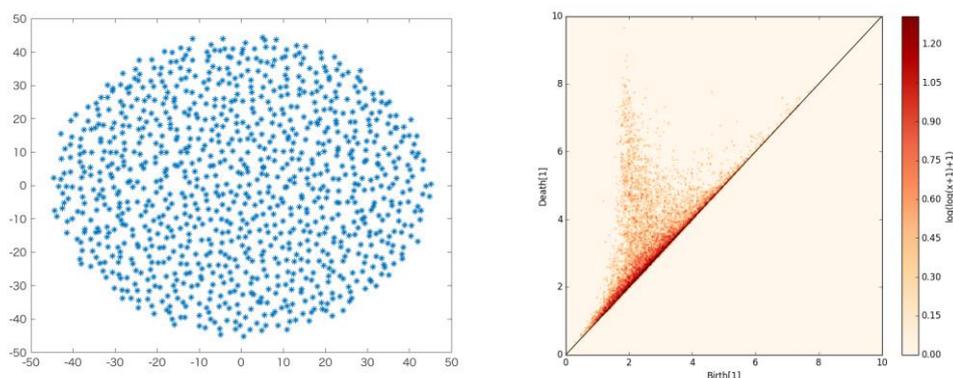


図 1: 平面上のランダム点配置 (Ginibre 点過程) とそのパーシステント図

TDA 班では、引き続き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み、主に生成元の個数が変化する枠組みへ一般化した。また、3次元粉体パッキングの高精度実験データに対してパーシステント図を用いた解析を実施し、粉体結晶化現象で重要になる変形過程の特徴づけに成功した。さらに PtZr 系金属ガラスに対する解析も実施し、冷却速度の違いによるガラス構造の違いを、パーシステント図を用いた 20 面体の歪みとして定量化することに成功した。

表現論班では、加群の直既約分解を一般的に与える公式を導いた。間接的に与える結果は知られていたが、ここでは直接的に与え、証明は極めて単純化できた。この直既約分解は時間変化するパーシステント図を解析するうえで不可欠な道具になる。特にクロネッカー多元環上の加群を効率的に直既約分解するアルゴリズムを与え、計算機に実装した。

確率論班では、昨年に引き続きランダムトポロジー理論の種々の側面の研究に取り組んだ。特に平行移動不変性をもつランダム複体の無限体積極限におけるパーシステント図およびその汎関数である平均生存時間の概収束について論じた。また、binomial 点過程より定義されるチェック複体のベッチ数に関する大数の法則を示した。

統計班では、H27 年度に提案した、カーネル法によるパーシステント図のベクトル化を通じた統計的データ解析の枠組みを發展させ、類似手法との比較や実データへの応用を図るとともに、時系列解析への展開を検討した。また、オイラー標数法を用いてランダム行列の固有値の最大値分布の近似を導出し、その精度評価を行った。

MD 班では、昨年度から引き続き、タンパク質フォールディングの粗視化MDシミュレーションに対してパーシステントホモロジーによる解析を行った。フォールディングに伴いパーシステント図が変化することを確認し、この変化を定量的に特徴づける手法について研究を進めている。また、これとは別に高分子ポリマーの一軸伸長破壊についても解析を行い、小さな空孔(ポイド)の融合過程が高分子ポリマーの破壊において本質的であることを見だした。

今年度の代表的な原著論文:

1. Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue, and Y. Nishiura. Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 113, 7035–7040, 2016.
2. G. Kusano, K. Fukumizu, and Y. Hiraoka, Persistence weighted Gaussian kernel for topological data analysis, *Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning, New York, NY, USA, JMLR: W&CP volume 48, 2004-2013*, 2016.
3. Takashi Ichinomiya, Ipppei Obayashi and Yasuaki Hiraoka, Persistent homology analysis of craze formation, *Physical Review E*, vol. 95, pp.12504, 2017.