

平岡 裕章

東北大学材料科学高等研究所
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 (東北大学材料科学高等研究所 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 (統計数理研究所数理推論研究系 教授)
- ③ 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ージ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。

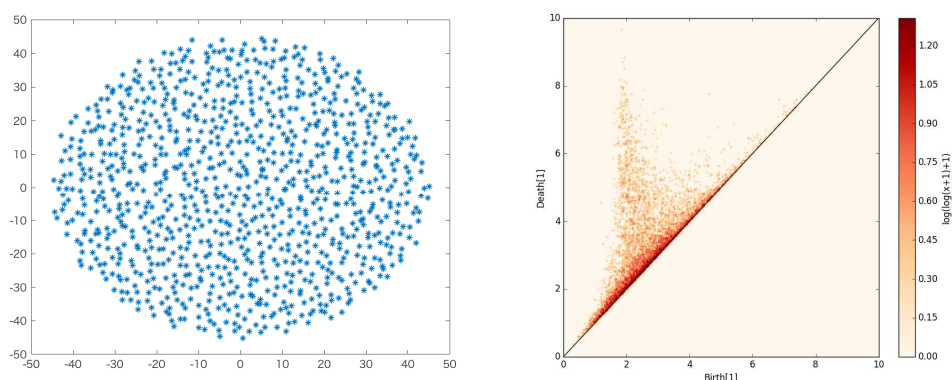


図 1: 平面上のランダム点配置 (Ginibre 点過程) とそのパーシステント図

TDA 班では、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や機械学習法の導入に取り組んだ。応用研究では粉体パッキング解析や焼結鉍に現れるマイクロクラック検出に関する内容で論文を発表し、また金属ガラス構造解析では PdSi 系に対して上記の機械学習法を適用し、冷却速度の違いが生み出す構造の特徴づけに成功した。

表現論班では、前年度の 2 つの結果、(1)有限表現型可換梯子上のパーシステンス加群の直既約分解(PD と略記)を行列問題の形で解いた結果と、(2) 単純関手の極小射影分解を用いた加群の PD の成分値を与える公式の簡単な証明、およびそのクロネッカー多元環への応用とを論文として投稿した。(1)は査読中、(2)は出版完了。さらに、PD を求める問題に bocs 理論を適用するために、その基礎理論の調査を継続した。それにより特に、bocs 変形のための便利な行列表示を得た。

確率論班では、ランダムトポロジー理論における極限定理の問題に取り組んだ。多様体学習で重要となるコンパクト多様体上の二項点過程から定まるチェック複体のベッチ数に関する極限定理を、ユークリッド空間上のポアソン点過程の大数の法則にあらわれる定数を用いた積分により表現した。またポアソン点過程の汎関数に対する中心極限定理についても考察を始めた。

統計班では、タンパク質のダイナミクスのように点集合の時系列から定まるパーシステント図の時系列を解析する方法を検討し、カーネル法によるベクトル化に対して特異値分解などの行列分解の方法が有効であることを確認した。また、ガウス確率過程に関して、独立でない 2 つの確率過程

の最大値の同時分布を導いた。

MD 班では, タンパク質フォールディングの粗視化分子動力学シミュレーションおよび全原子分子動力学シミュレーションの結果に対して, 位相的データ解析と機械学習を組み合わせた解析に取り組んだ。位相的データ解析と主成分分析を組み合わせることで, 安定構造と準安定構造がはっきりと分離されることを確認し, 日本物理学会第73回年会にて報告した。

今年度の代表的な原著論文:

Mohammad Saadatfar, Hiroshi Takeuchi, Nicolas Francois, Vanessa Robins, and Yasuaki Hiraoka. Pore configuration landscape of granular crystallisation. *Nature Communications*. 8:15082 (2017), DOI: 10.1038/ncomms15082.

M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao and Y. Hiraoka. Non-empirical identification of trigger sites in heterogeneous processes using persistent homology. *Scientific Reports* 8, Article number: 3553 (2018)

Y. Hiraoka and T. Shirai. Minimum spanning acycle and lifetime of persistent homology in the Linial-Meshulam process. *Random Struct. Alg.*. doi:10.1002/rsa.20718 (2017).