

平岡 裕章

京都大学高等研究院
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. 研究成果の概要

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。

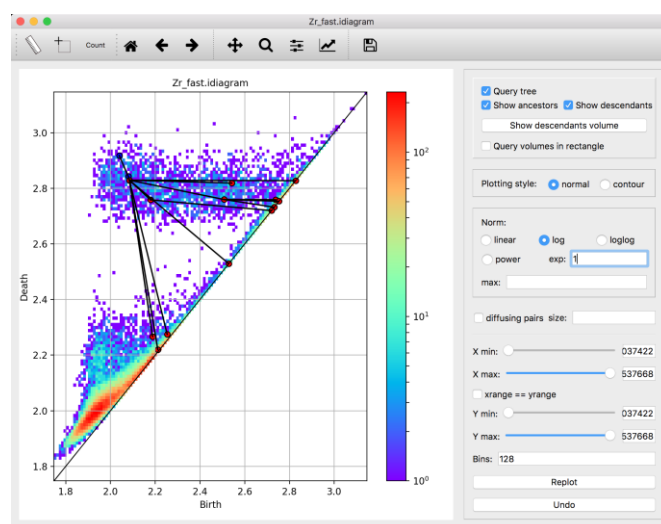


図 1 : ソフトウェア HomCloud の実行例

TDA 班では、今年度は代数幾何学的な視点からパーシステントホモロジーを特徴づける研究を実施した。応用研究では、昨年度に引き続き PdSi 金属ガラスの冷却速度の違いが生み出す構造の特徴づけに取り組み、論文執筆のためのデータ解析を行った。また超高压シリカガラスの構造

解析も実施し、圧力が高くなるに従って特徴的なホモロジーの次元が 1 次から 2 次へ変化する様子が確認できた。

表現論班では、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を行列問題の形で解いた結果を論文として出版した。また、2D 可換グリッド上のパーシステンス加群を、正確さを多少犠牲にしても短時間で調べる方法として、区間表現の直和による近似法を開発中であるが、その前段階として、パーシステンス加群が区間表現の直和に分解することの判定法を確立し、この結果を論文として投稿した。

確率論班では、昨年に引き続きランダムトポロジー理論における極限定理の問題に取り組んだ。マーク付き点過程の枠組みでのパーシステント解析や、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して、基本的な極限定理である大数の法則・中心極限定理・大偏差原理について考察した。また、差分に関して安定なポアソン点過程の汎関数に対する中心極限定理を示した。

統計班では、カーネル法によるパーシステント図の時系列解析の枠組み、および非線形回帰による有効生成元の抽出法を開発した。パーシステント図のベクトル化法に関する論文が、機械学習分野のトップ論文誌に掲載された。また、ポアソン点過程による点群データに対し、パーシステント図からポアソン点過程のどのような性質が再現可能かを研究し、新しい知見を得た。さらに、離散モース理論を用いた一般化包除原理に関する研究を進めた。

MD 班では、パーシステントホモロジーで得られた **optimal volume cycle** をデータの形状を表す『言語』と見做し、これに対してテキスト分析の手法を適用する新たな解析手法を提案した。提案手法をタンパク質 **chignolin** の分子動力学シミュレーションに対して適用し、2 次元空間に縮約することで、フォールディング状態、ミスフォールディング状態の構造や、二つの状態間の遷移過程を明らかにした。

【代表的な原著論文】

Y. Hiraoka, T. Shirai, K.D. Trinh. Limit theorems for persistence diagrams. *Annals of Applied Probability* 28, 2740-2780, 2018.

I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura. Persistence Diagrams with Linear Machine Learning Models. *Journal of Applied and Computational Topology* 1, 3-4, 421-449, 2018.

G. Kusano, K. Fukumizu, and Y. Hiraoka. Kernel method for persistence diagrams via kernel embedding and weight factor. *Journal of Machine Learning Research* 18 (189), 1-41, 2018.

§2. 研究実施体制

(1) TDA 班

- ① 研究代表者: 平岡 裕章 (京都大学高等研究院 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
 - ・ パーシステンス加群の近似および不変量に関する研究

(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
 - ・ 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