

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。

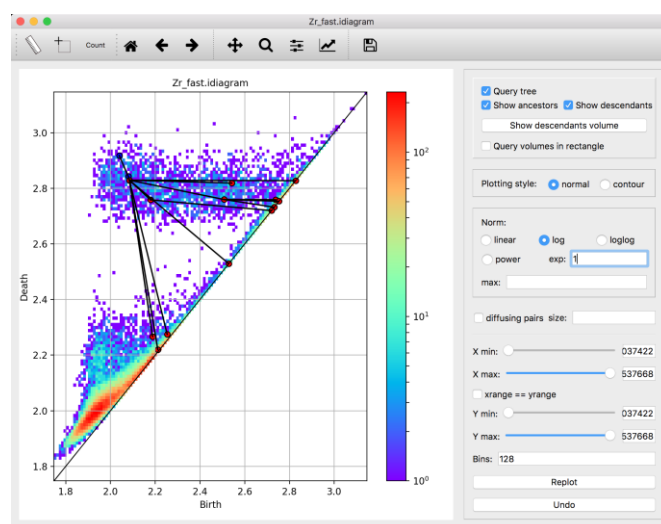


図 1 : パーシステントホモロジー計算ソフトウェア「HomCloud」の実行例

TDA 班では、基礎研究としてはパーシステントホモロジーの安定性定理を導来圏の枠組みに拡

張することに成功し、さらにその系として A_n クイバーの任意の向き付けで定まるパーシステント加群に対しても安定性定理が成り立つことを証明した。一方で応用研究では、本 CREST 研究成果の新たな応用として、肝腫瘍の T1-MR 画像に対する肝細胞癌、転移性腫瘍、肝血管腫を識別する方法論を開発し、論文を出版した。

表現論班では、パーシステント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、その論文を投稿した。その有効性を示すため、計算コストの評価について議論を進め、現在も進行中である。また、2D 可換グリッド上のパーシステント加群を、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1つ開発できたので、この結果を論文として投稿した。

確率論班では、パーシステントホモロジーに付随する種々の量についての極限定理を理解する立場から研究を進めている。本年度は特に大偏差原理の方向への理解が深まり、パーシステント図の大偏差原理に対する足がかりとなる進展があった。また、応用でしばしば現れるマーク付き点過程を基礎としたランダム複体の極限定理についても、いくつかの視点から研究を進めた。

統計班では、パーシステント図の統計的信頼性に関して、点過程から発生した点群のパーシステント図が点過程のどのような情報を担うかに関する研究や、雑音に対してロバストなパーシステント図についての研究を行った。統計科学に現れる代数構造の位相的研究として、非心実ウィシャートの固有値分布の期待オイラー標数法による近似法を研究した。加えて、さまざまな実データ解析への応用研究を行った。

MD 班では、昨年度提案した位相的データ解析を用いたタンパク質のフォールディング解析手法について更に研究を進めた。我々の手法と既存の解析手法を用いて、タンパク質 chignolin の分子動力学シミュレーションの解析を行い、本手法が従来の手法より効果的にフォールディング状態やミスフォールディング状態を同定できることを明らかにした。これらの結果は現在論文として投稿中である。

【代表的な原著論文】

A. Goel, K. D. Trinh and K. Tsunoda. Strong law of large numbers for Betti numbers in the thermodynamic regime. *J. Stat. Phys.* Vol. 174, (2019) 865–892.

A. Oyama, Y. Hiraoka, I. Obayashi, Y. Saikawa, S. Furui, K. Shiraiishi, S. Kumagai, T. Hayashi, and J. Kotoku. Hepatic tumor classification using texture and topology analysis of non-contrast-enhanced three-dimensional T1-weighted MR images with a radiomics approach. *Scientific Reports* 9, Article number: 8764 (2019).

S. Kohara, Y. Onodera, Y. Takimoto, H. Hijiya, T. Taniguchi, S. Urata, S. Inaba, S. Fujita, I. Obayashi, and Y. Hiraoka. Origin of the mixed alkali effect in the silicate glass. *NPG Asia Materials* volume 11, Article number: 75 (2019).

§ 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