

現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築
2015 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

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

TDA 班では、マグニチュードホモロジーのランダム化に関する研究を、Erdős-Rényi グラフをモデルに考察した。得られた結果としては、対角性に関して相転移現象が発生していることを数学的に証明することに成功した。また TDA の経済学への応用研究も実施し、論文を投稿した。

表現論班では、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より詳しく解析し、その計算コストの評価を追加して論文を再投稿した。さらにそれをコンピュータ上で計算できるソフトを試作した。

確率論班では、ランダムトポロジーにおける極限定理、特に Linial-Meshulam 過程のベッチ数から定まる点過程のバルク極限についての考察、パーシステント図の大偏差原理とそのレート関数の非自明性の部分的証明、マーク付きポアソン点過程の汎関数の弱安定化条件の概念の導入と弱安定化汎関数に対する中心極限定理およびそのランダム接続モデルへの応用などの研究を行った。

統計班では、背景ノイズに対してロバストなパーシステント図の構成法としてロバスト密度関数を用いた方法を提案し、理論的、実験的により性能を持つことを示した。また、物質・材料科学への応用として、強磁性体の磁区構造形成と、ポリマーの共重合パターンの解析とを行い、パーシステント図が有効な記述子となることを確認した。

MD 班では、前年度までに開発したタンパク質の立体構造解析手法を用いて、あらたに villin headpiece HP35(nle-nle)のフォールディング過程の解析を行った。Stanford 大学の研究グループが公開している分子動力学シミュレーションデータを解析した結果、このタンパク質が折りたたまれる際には少なくとも 2 種類の経路があることが分かった。

§ 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

【代表的な原著論文情報】

1. Buchet, M., Escobar, E.G. Every 1D persistence module is a restriction of some indecomposable 2D persistence module. *J Appl. and Comput. Topology* **4**, 387-424 (2020).
2. Hirata, A., Wada, T., Obayashi, I. *et al.* Structural changes during glass formation extracted by computational homology with machine learning. *Commun Mater* **1**, 98 (2020).
3. S. Vishwanath, K. Fukumizu, S. Kuriki, & B. K. Sriperumbudur. Robust Persistence Diagrams using Reproducing Kernels. *Advances in Neural Information Processing Systems* (Vol. 33, pp. 21900-21911, 2020).
4. H. Takeuchi, . The persistent homology of a sampled map: from a viewpoint of quiver representations. *J Appl. and Comput. Topology* **5**, 179-213 (2021).
5. Yohei Onodera, Shinji Kohara, et al. Structure and properties of densified silica glass: characterizing the order within disorder. *NPG Asia Materials* volume 12, 85 (2020).