

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H00119

研究課題名（和文）パーシステントホモロジーのランダム化とシューベルト計算のインタラクション

研究課題名（英文）Randomization of persistent homology and its interaction with Schubert calculus

研究代表者

平岡 裕章（Hiraoka, Yasuaki）

京都大学・高等研究院・教授

研究者番号：10432709

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 35,340,000円

研究成果の概要（和文）：本課題ではマルチパラメータ型パーシステント・ホモロジーの数学的構造を理解するために確率論および組合せ論を用いた研究を実施した。応用研究としてはそこで開発された手法を材料科学の構造解析に適用する研究を行った。データに含まれるランダム性に着目し、確率論的な設定のもとで安定な構造分解を抽出する方針で成果を挙げた。まず組合せ論的な成果としてはパーシステント図とシューベルト多様体の関係を解明し、パーシステント図に自然な積構造を導入できることを明らかにした。また区間近似を一般化することにも成功し、非区間表現の出現頻度に関する期待値の評価を得ることもできた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ビッグデータ時代の到来を受け、膨大かつ複雑なデータに対する数学的なデータ記述子を開発する必要性が高まっている。この背景の元、本研究ではデータの「かたち」と「うごき」に着目するパーシステントホモロジーの数学研究に主に取り組んだ。特にこのプロジェクトではデータを詳細に調べるパラメータが2つ以上の問題を扱っている。観測データにはノイズがのっていることを想定し、適切な確率論的な状況のもとで新規データ記述子を開発することに成功した。

研究成果の概要（英文）：In this project, we conducted several research to deeply understand the mathematical structures of multi-parameter persistence modules based on probability theory and combinatorics. Regarding its applications, we also performed structural analysis of several materials using the methods developed in this project. The basic idea is to focus on the randomness inherent in real data and try to find stable decomposition structures in the sense of probability theory. We clarified the relationship between persistence diagrams and Schubert varieties and found a natural multiplication on persistence diagrams. Furthermore, we succeeded in generalizing the interval approximation, and obtained estimates about the multiplicities of non-intervals under a certain random topology setting.

研究分野：トポロジカルデータ解析

キーワード：パーシステントホモロジー ランダムトポロジー 確率論 シューベルト計算

1. 研究開始当初の背景

網羅的な遺伝子発現データ、新材料開発の大規模データベース、マイクロ秒単位での株取引データなど、現代の社会ではデータが氾濫している。このような複雑なデータからその幾何構造に内在する情報を抽出する手法として、近年パーシステントホモロジーが注目されている。上記3つのデータへの応用を始めとして、急速な勢いで様々な分野に応用されている。またこのような応用研究での成功と同時に、世界的に多くの数学者が参入しその理論整備が進められている。

代表者はここに紹介した手法を材料科学者とともに開発し、材料科学における次世代解析手法として世界的な評価を得た(3.3 研究業績 平岡 3,5)。従来の手法では全く取り扱えない大域的なトポロジー情報が手に入る本手法は、内閣府、JST、NEDO 等が運営する複数の大型材料科学プロジェクトでも採択され実用化が進められているが、それと同時にパーシステントホモロジーのさらなる高性能・高機能化も求められている。例えば先の例では原子配置がなす点の集合は動かないものを想定しているが、タンパク質のフォールディングのように時間とともに動く状況下では、時空間解析を行えるように拡張したい。また近傍の密度が低い原子を徐々に間引く過程のもとで頑健なトポロジー構造を抽出することも、材料の階層的解析のために極めて重要な拡張となる。つまりパーシステントホモロジーをマルチパラメータの設定に拡張する必要がある。

しかしながら1パラメータとマルチパラメータでは数学的な複雑さが全く異なる。1パラメータの場合はガブリエルの定理(もしくは有限生成PID加群の構造定理)により、直既約表現は区間表現のみからなり、任意のパーシステントホモロジーはそれらの直和として一意に分解できる。よってその分解構造を調べることで元のデータのトポロジカルな構造が完全に記述される。一方マルチパラメータの場合は直既約表現に区間表現だけでなく非区間表現も現れ、また具体的に直和分解することも困難を極める。これが上述の応用研究からの要求に応える数学的課題の最も困難な部分である。しかしながら時空間トポロジカル解析や間引きによる階層的トポロジカル解析は応用上極めて重要であり、なんととしてでも数学的にこの問題に対する実用的な解決策を考案する必要がある。

2. 研究の目的

上記背景および学術的問いをふまえて、本研究では以下の3つの研究テーマに取り組む。

研究テーマ1: パーシステントホモロジーの確率論的安定分解構造の決定(担当: 平岡・白井)

目的: パーシステントホモロジーをランダム化しその安定な分解構造を決定する。

内容: 1パラメータの場合は区間表現のみで完全に分解構造がわかるが、マルチパラメータでは非区間表現も考える必要がある。またその分解構造の決定は、代数的には極めて難しい問題に帰着する。この難点を回避するために、ここではデータ解析に応用されることを念頭に置き、データに含まれる観測誤差やノイズに起因するランダム性をあえて仮定した設定で分解論を研究する。大数の法則や大偏差原理といった確率論的手法を用いて、実用的な安定分解論を構築する。

研究テーマ2: パーシステントホモロジーのシューベルト計算と安定構造の解明(担当: 平岡・池田)

目的: パーシステントホモロジーの交叉理論をシューベルト計算を基盤に構築し、ランダム化のもとで現れる安定構造との関係を明らかにする。

内容: 準備研究により1パラメータ・パーシステントホモロジーの集まりは旗多様体の構造を有していることが明らかになった。特に各シューベルト胞体は、同一のパーシステント図を代数的不変量として持つパーシステントホモロジーが対応する。そこでこのテーマでは、シューベルト多様体の交叉、およびそのシューベルト計算が自然に誘導する積構造に、パーシステントホモロジーとしての意味付けを与える。また代表者が先行研究で開発したパーシステントホモロジーの逆問題を適用し、元の入力データ空間におけるこれら演算の意味も解明する。さらにテーマ1で取り扱う安定構造が、シューベルト多様体やその交叉理論でどのような意味を持つのか明らかにする。

研究テーマ3: アモルファス炭素材料の階層構造解析(担当: 平岡・赤木)

目的: 研究テーマ1,2で開発する手法を応用し、アモルファス炭素材料の階層構造を解明する。

内容: 代表者の長年にわたる先行研究により、パーシステントホモロジーは材料科学における新たな基盤解析技術として普及した。従来の二体相関を表す動径分布関数では捉えることができない、リングや空洞といった材料のトポロジーを扱えることが最も大きな長所である。しかしながらガラスに代表されるアモルファス材料では、マルチスケールな構造を階層的に特徴付ける必要があり、従来の1パラメータ・パーシステントホモロジーでは適切に扱うことができなかった。そこでこのテーマでは、原子を「間引く」操作でマルチスケールな構造を定式化し、研究テーマ1,2で構築されるパーシステントホモロジーの分解論を用いることで、アモルファス炭素材料の階層構造の特徴づけを目指す。さらに交叉理論と逆問題を組み合わせることで、代表的な

幾何構造の共通性を調べたり，準安定相への変化の時空間解析も実施する．

3．研究の方法

・研究テーマ1の計画

計画1.1：直既約表現に対する大数の法則の導出

空間 R^n 内の1辺 L の窓 $\Lambda_L = [-L, L]^n$ に点過程を制限したものを P_L とし，そこから定まるパーシステントホモロジー $H_q(P_L)$ を直既約分解する．このとき各直既約表現の重複度に対して，窓のサイズ L を無限に大きくした際の大数の法則を導出する．この問題の1パラメータ版は先行研究で解決しているが，そのマルチパラメータ版に相当する研究となる．窓サイズの増加にともなう局所的な幾何構造の変化が，大域的なトポロジーの変化に結びつく仕組みをランダムネスの影響のもとで調べることが鍵となる．材料科学の先行研究で行なった数値計算の傾向として，区間型は非区間型表現よりかなり多く現れることがわかっている．この現象を重複度関数に対する大数の法則として厳密に記述することを目指す．

計画1.2：直既約表現に対する大偏差原理の導出

計画1.1で各直既約表現の重複度の平均的な挙動がわかるが，ここではさらに大偏差原理を調べることで，その平均から外れた状況を明らかにする．この計画の方針はSeppalainenとYukichによる方法論を本モデルに適用することである．すでに準備研究で1パラメータ版の大偏差原理が成立することは検証できているので，そこでの議論をマルチパラメータ版へ拡張することになる．しかしながらマルチパラメータ版では区間型と非区間型で典型的な幾何構造が異なることから，より詳細に点過程の局所的組み合わせ構造とその大域的なつながりを調べる必要がある．またレート関数についても区間型・非区間型ともに特徴づけを行う．

計画1.3：区間表現および非区間表現の確率論的安定性の研究

計画1.1の大数の法則に現れる窓サイズに関するスケール指数を，区間型および非区間型表現で調べることで，ランダム性の存在下でスケール極限として支配的な直既約表現を明らかにする．さらに計画1.2の大偏差原理に現れるレート関数を調べることで，区間型・非区間型の平均から大きく離れた生起確率の振る舞いを調べる．これら二つの側面からパーシステントホモロジーの確率論的な安定分解構造を決定する．なお上記計画では空間内のランダム点過程モデルで説明したが，画像解析などを念頭に置いたランダム立方体(cubical)複体モデルについても同様の研究を行う．

・研究テーマ2の計画

計画2.1：シューベルト計算の積構造および交叉構造のパーシステントホモロジー的研究

区間表現の発生・消滅時刻を指定することにパーシステントホモロジーの集まりは旗多様体として記述できるが，そのシューベルト多様体の交叉およびそのシューベルト計算が自然に誘導する積構造のパーシステントホモロジーとしての意味を解明する．さらにシューベルト多項式の組み合わせ構造のパーシステントホモロジーにおける対応物についても研究を進める．グラスマン多様体とシューア多項式の関係から類推すると，シューベルト多項式の各単項式は区間表現の生存時間に対応する量が情報として込められていると予想されるが，それを明らかにする．さらには研究テーマ1で考察する確率論的安定構造が，シューベルト多様体やその交叉構造としてどのように表現されるか調べる．また，1パラメータの場合は全順序が定めるボレル部分群による等質空間として旗多様体が定まるが，マルチパラメータの設定では半順序が定める部分群を扱う必要がある．このような拡張も取り込みながら本計画を実施する．

計画2.2：逆問題を組み合わせたデータ解析的研究

パーシステントホモロジーの逆問題(3.3 研究業績 平岡6)を用いることで，積構造および交叉構造をデータ空間で捉えることが可能になる．このアイデアを用いて，高次元複雑データの新たな解析方法を開発する．特にパーシステントホモロジーの交叉は入力データ空間における共通のトポジカルなデータ構造を特徴付けることに対応する．この共通構造を指標にしたトポジカルなクラスタリング法を開発し，研究テーマ3で適用する．

・研究テーマ3の計画

計画3：アモルファス炭素材料の中距離秩序構造の特徴づけ

動径分布関数とマルチパラメータ・パーシステントホモロジーを組み合わせることで，不規則に見える構造に隠れた，結晶性の中距離秩序構造を特徴付けることを目指す．ここでは原子間の二体相関を表す動径分布関数から適切な間引きパラメータを推定し，そこからテーマ1，テーマ2で開発されるマルチパラメータ・パーシステントホモロジーの安定分解構造を調べることで，階層的なトポジカル構造を特徴付ける．また時間発展が誘導するマルチパラメータ・パーシステントホモロジーを適用し，アモルファス炭素から準安定構造への遷移過程に対する時空間トポジカルデータ解析を実施し，骨格となる力学系モデルを抽出する．ここでの材料構造解析研究をもとに，レーザーを用いた急熱・急冷によって生成されるアモルファス炭素由来の多様な準安定構造を本手法により特徴づけ，コーティング材や潤滑材といった実用材料のミクロ構造の同定に寄与する．また次世代蓄電デバイス用の材料として注目される3Dグラフェン派生物の構造安定性に関する研究も実施する．なお初年度は，第一原理分子動力学計算を用いた構造データの取得に関する準備研究にあてる．

4. 研究成果

・研究テーマ1の研究成果

ランダムトポロジーの問題として大数の法則, 中心極限定理, 大偏差原理といった代表的な極限定理を証明することに成功し, それらに関する論文を執筆して投稿まで完了させた. より具体的には, ユークリッド空間内の方体集合に対して, 適切な仮定を満たすランダムネスを各方体に与えることでランダム方体複体およびそのフィルトレーションモデルを定義し, それらに対してパーシステント図の極限的振る舞いを調べた. なお極限は方体複体が有限型になるように適当な窓で制限をかけ, その窓のサイズを無限大にする極限として定式化している. 特に今年度の成果としては, 大数の法則および大偏差原理について比較的緩い仮定のもとで, 満足のいく形で定理を証明することに成功した. この際に開発したいくつかの手法は今後ランダムトポロジーの分野で重要になってくると思われる. そのなかでもパーシステント図をラドン測度とみなし, ラドン測度の空間における大偏差原理を証明する際に開発した方法論は, 射影極限やベッチ数の空間サイズ依存性を精密に調べる手法となっており, 同様の方法論によって例えばランダム幾何学モデル(ユークリッド空間内のランダム点過程から作られる幾何モデル)への拡張なども可能にする重要な結果だと考えている. また大数の法則と大偏差原理を同様の設定で議論できるように問題を整理したことも, 極限定理を包括的に取り扱う際のボトルネックを浮き彫りにさせることに繋がり, その意味において重要な一歩であると考えている.

・研究テーマ2の研究成果

マルチパラメータ・パーシステントホモロジーの組合せ論的研究として区間近似理論の精密化に関して成果を得た. 従来の区間近似を一般化させるために「コース」と「ツアー」の概念をクイバーおよびその上の表現に対して導入し, ランク不変量の一般化を定式化することに成功した. ここで区間 subquiver に対するコースとはその区間の essential vertices を全て含むある subquiver として与えられる. また与えられた表現に対するコース上のツアーとは, コースが定める Hasse quiver 上の表現として定められる. これによって一般の表現を各区間および各コースごと精密に調べることが可能となった. この設定のもとで従来の区間近似同様の一連の性質(ランク関数の一般化, メビウス反転等)が成り立つことが証明できた. この一般化は理論的に見通しを良くしただけでなく, 実際のデータ解析に応用する際に近似精度と計算量のトレードオフを制御することを可能にした点も重要な貢献である. また可換はしご型 quiver 上のパーシステント加群に対して connected persistence diagram の概念を導入し, 計算アルゴリズムの開発や材料科学への応用研究なども実施した. さらにシューベルト計算に関する成果についても論文を投稿し現在査読中である.

・研究テーマ3の研究成果

おもに connected persistence diagram を用いた材料構造解析研究でいくつかの成果を得た. ガラスや高分子系を主な対象とし, 従来の1パラメータ・パーシステントホモロジーでは捉えることができない複雑なトポロジー構造を特徴づけることに成功した. そこから派生した数学的な問題として, 6 packs と呼ばれる不変量と connected persistence diagram の強弱関係についても研究を実施し, 現時点で connected persistence diagram が 6 packs を再構成することを数学的に証明できた. また非区間表現の出現頻度についても大規模数値計算を実施し, 我々の予想をさらに裏付ける結果が得られた. こちらについては数学的な証明を試みているがまだ解決には至っていない.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kohei Noda, Tomoyuki Shirai	4. 巻 -
2. 論文標題 Expected number of zeros of random power series with finitely dependent Gaussian coefficients	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Theor. Probab	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10959-022-01203-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Makoto Katori, Tomoyuki Shirai	4. 巻 98
2. 論文標題 Local universality of determinantal point processes on Riemannian manifolds	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proc. Japan Acad. Ser. A Math. Sci.	6. 最初と最後の頁 95-100
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3792/pjaa.98.018	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ippei Obayashi, Takenobu Nakamura, Yasuaki Hiraoka	4. 巻 91
2. 論文標題 Persistent Homology Analysis for Materials Research and Persistent Homology Software	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 HomCloud. Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Y. Hiraoka, Yuichi Ike, and M. Yoshiwaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Algebraic stability theorem for derived categories of zigzag persistence modules	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Topology and Analysis	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1793525322500091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Asao Yasuhiko, Hiraoka Yasuaki, Kanazawa Shu	4. 巻 154
2. 論文標題 Girth, magnitude homology and phase transition of diagonality	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the Royal Society of Edinburgh: Section A Mathematics	6. 最初と最後の頁 221 ~ 247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1017/prm.2023.7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kanazawa Shu, Hiraoka Yasuaki, Miyanaga Jun, Tsunoda Kenkichi	4. 巻 -
2. 論文標題 Large deviation principle for persistence diagrams of random cubical filtrations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Applied and Computational Topology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s41468-023-00161-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計20件(うち招待講演 17件/うち国際学会 4件)

1. 発表者名 池田岳
2. 発表標題 Equivariant Schubert Calculus of Affine Grassmannian of Symplectic Group
3. 学会等名 Gauge Theory, Moduli Spaces and Representation Theory, Kashiwa 2023 In honor of the 60th birthday of Hiraku Nakajima (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池田岳
2. 発表標題 Geometric variants of Schur's Q-functions
3. 学会等名 Integrability, combinatorics and representation theory MATRIX/RIMS tandem workshop (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池田岳
2. 発表標題 アフィン・グラスマン多様体のシューベルト・カルキュラス 特に C 型の場合
3. 学会等名 AGU 表現論セミナー・研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 トポロジカルデータ解析を用いた電池材料の構造情報の定量化
3. 学会等名 2021年日本表面真空学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 シミュレーションデータのミクロな「形」とマクロなイオン挙動をつなぐ
3. 学会等名 第2回計算イオニクス研究会（第83回固体イオニクス研究会）（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 白井朋之
2. 発表標題 Zeros of random analytic functions with dependent Gaussian coefficients
3. 学会等名 確率・統計・行列ワークショップ 彦根 2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 白井朋之
2. 発表標題 パーシステントホモロジーとその応用
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 待ち行列研究部会 第299部会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 白井朋之
2. 発表標題 パーシステントホモロジーとその周辺の話題
3. 学会等名 ブロックチェーン研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 白井朋之
2. 発表標題 パーシステントホモロジーと確率論
3. 学会等名 集中講義 特別講義 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 白井朋之
2. 発表標題 Zeros of random analytic functions with dependent Gaussian coefficients
3. 学会等名 談話会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomoyuki Shirai
2. 発表標題 Persistent homology and its applications
3. 学会等名 Blockchain Kaigi 2022 (BCK2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藪奥 哲史, 蓮井 太朗, 白井 朋之
2. 発表標題 Enumeration of connected bipartite graphs with given Betti number
3. 学会等名 日本数学会2023年度年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuaki Hiraoka
2. 発表標題 Is the persistence diagram really a stable data descriptor?
3. 学会等名 International Conference on "Topology and its Applications to Engineering and Life Science". (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuaki Hiraoka
2. 発表標題 Is the persistence diagram really a stable data descriptor?
3. 学会等名 Computational Persistence 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuaki Hiraoka
2. 発表標題 Girth, magnitude homology, and phase transition of diagonality
3. 学会等名 Conference on Applied, Combinatorial and Toric Topology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平岡裕章
2. 発表標題 パーシステントホモロジー：理論と応用
3. 学会等名 日本数学会2023年度年会企画特別講演 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 トポロジカルデータ解析による電解質材料の特徴抽出
3. 学会等名 電気化学会東北支部 第51回セミコンファレンス (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 トポロジカルデータ解析を活用した実材料の性能予測
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池田岳
2. 発表標題 K理論的シューベルト・カルキュラス
3. 学会等名 日本数学会2022年度年会 函数解析学分科会 特別講演（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池田岳
2. 発表標題 アフィン・シューベルト計算と可積分系
3. 学会等名 早稲田大学整数論セミナー
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	池田 岳 (Ikeda Takeshi) (40309539)	早稲田大学・理工学術院・教授 (32689)	
研究分担者	赤木 和人 (Akagi Kazuto) (50313119)	東北大学・材料科学高等研究所・准教授 (11301)	
研究分担者	白井 朋之 (Shirai Tomoyuki) (70302932)	九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・教授 (17102)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 TDA week 2023	開催年 2023年～2023年
-------------------------	--------------------

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------