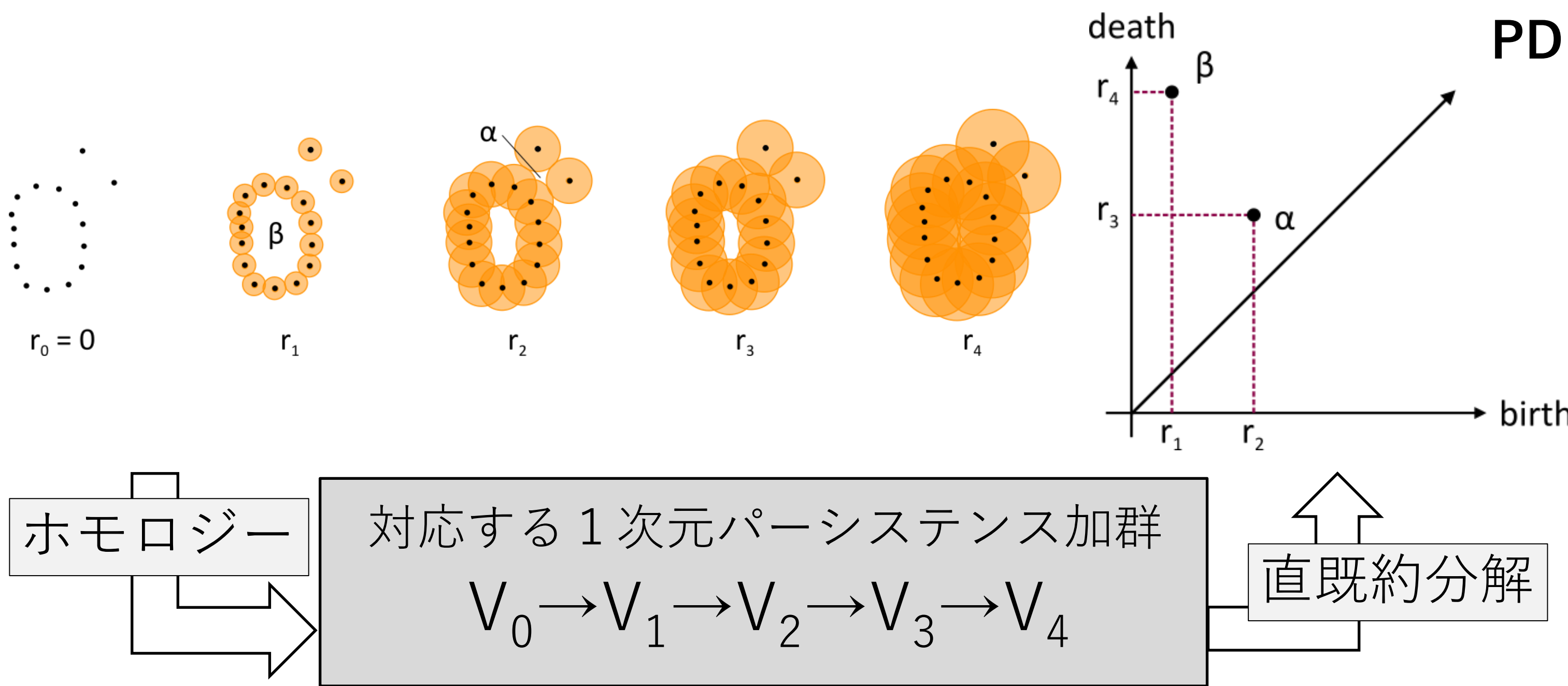


## パーシステントホモロジーの概要



## 高次元PDの開発とその実用化へ向けた研究

Hiraoka, Nakashima, Obayashi, Xu

### 背景

時間発展する点群のPDを描出するにあたり、可換グリッドの表現の直既約分解問題に行き当たる。完全な直既約分解を計算することは困難であるが、区間表現の足し合わせによる近似的な分解を与えることはできる。(Asashibaらとの共同研究 [arXiv:1911.01637])

我々はtourなどの新概念を導入し、区間近似の道具立てを拡張した。

$M \in \text{rep } G_{m,n}$  に対し、区間近似  $\delta_M: \mathbb{I}_{m,n} \rightarrow \mathbb{Z}$  を次で定める。

$$\delta_M(l) := \sum_{S \subseteq \text{cov } l} (-1)^{\#S} d_{\text{tour}_{V_S} M}(\text{tour}_{V_S} \check{V}_S)$$

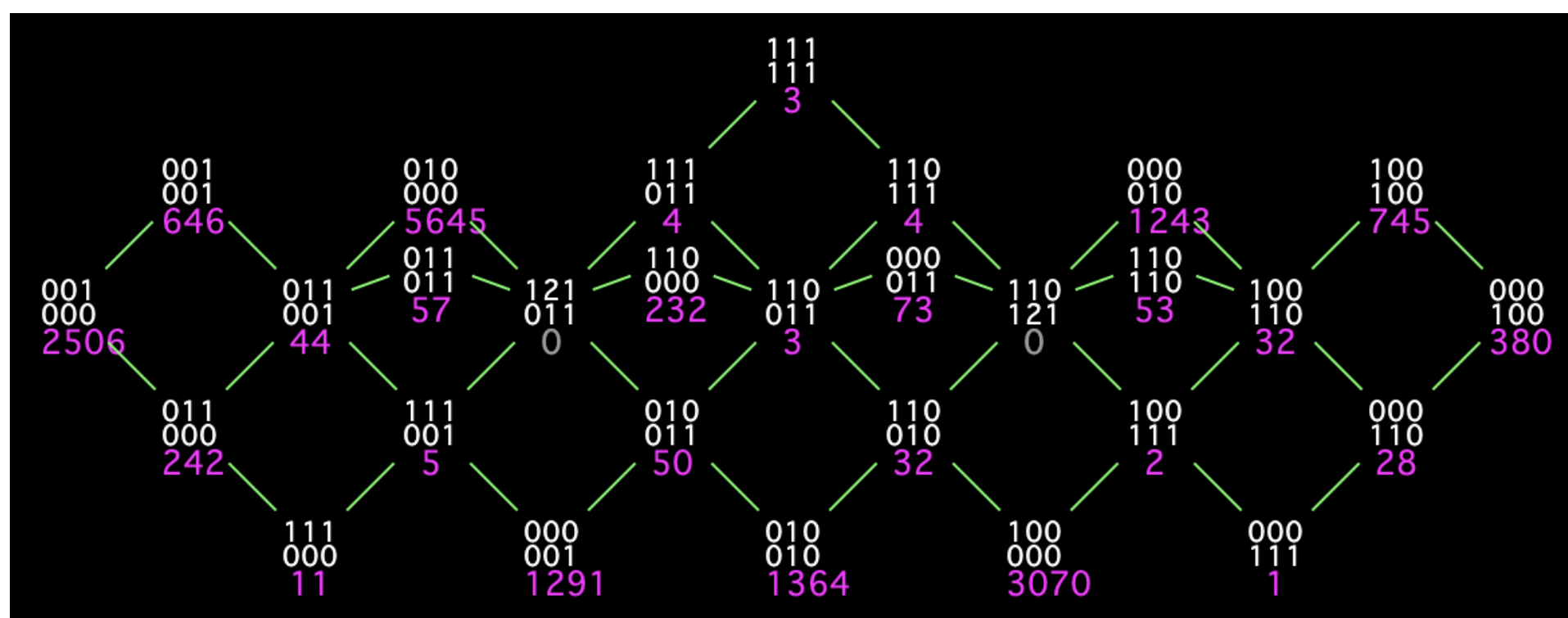
この拡張された区間近似もまたrank不変性などを満たしている。さらに、 $\xi$  を調整することで、 $M$  に対する複数の区間近似が得られる。これらの差分を考えることで、 $M$  の非区間因子にもアプローチできる。

### 結果①

拡張した区間近似によって、可換梯子  $CL(m)$  ( $m \leq 4$ ) の表現に対して完全な直既約分解を計算するアルゴリズムを構築/実装した。

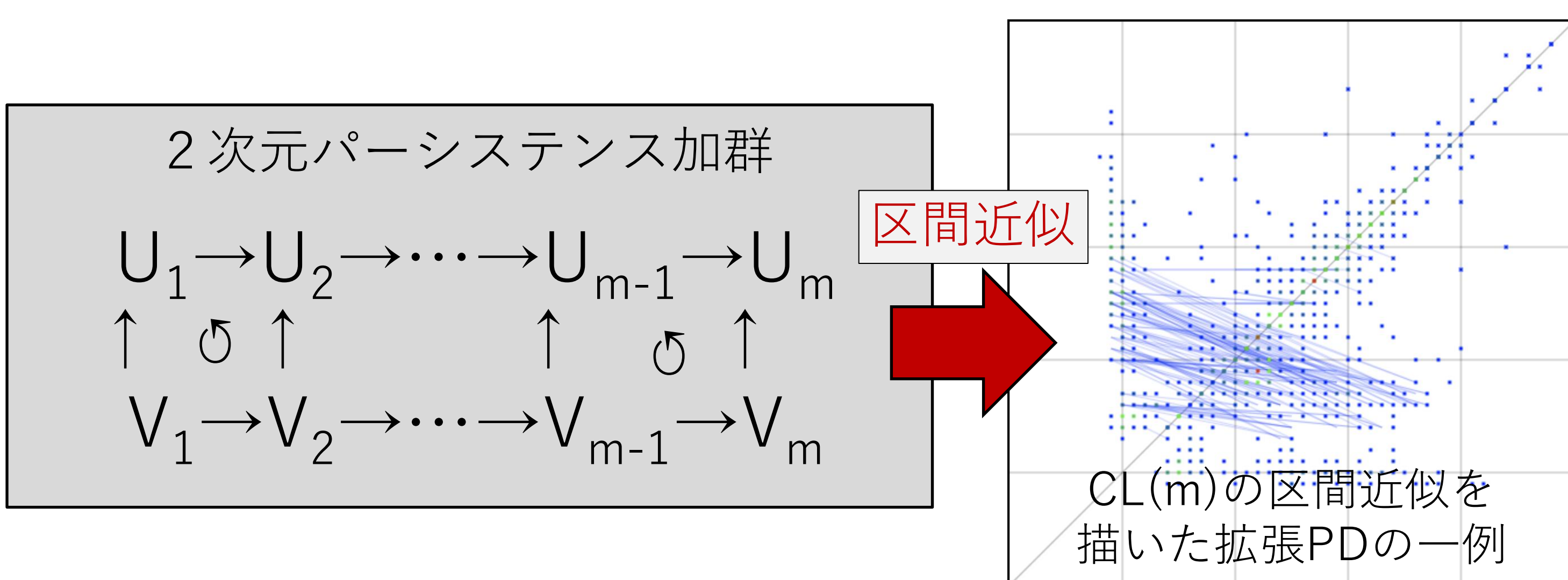
CL(3)での数値実験 →

ある条件下では非区間因子が生じづらいことなども明らかにした。



### 結果②

従来のPDを拡張した「拡張PD」を提案、その効率的描出法も得た。



### 展開

この手法を、現実の材料データの解析の現場に投入する。従来のPDでは捕捉できなかった秩序構造の描出や、新しい特徴量および記述因子の発見/開発に役立つことが期待される。

(中島 健)

## 時間依存 PD アルゴリズムの圏論的意味論

Yoshida

### 背景

時刻に応じて連続的に変化する点群に対し、その点群の微小変化に応じてPDを更新することでPDの「動画」を計算するアルゴリズムとして、Vineyard と呼ばれる手法が知られており、そこには時間依存構造の本質的な特徴量が現れていると期待されているが、その数学的意味付けは不明確であった。

圏論的意味論を用いることで、アルゴリズムそのものを幾何学と関連付けることができる。 $\mathbb{T}$  をパーシステンスパラメータの空間とし、PD を考える点群  $V$  がパラメータ空間  $X$  に連続的に依存している状況を考える。

開集合  $U \subset \mathbb{T} \times X$  に対して

$$K_V(U) := \{\sigma \subset V \mid \forall (t, x) \in U : \text{パラメータ } x \text{ での } \sigma \text{ の直径} < t\}$$

とおくと、 $K_V$  は層の圏  $\text{Sh}(\mathbb{T} \times X)$  の単体的複体になる。

点群  $V$  のトポロジカルな特徴は  $K_V$  から取り出すことができる。

### 結果①

パラメータ  $x_0 \in X$  を固定した時、PDの計算アルゴリズムを  $\text{Sh}(\mathbb{T} \times \{x_0\})$  上に実装し、 $K_V$  の  $\text{Sh}(\mathbb{T} \times \{x_0\})$  への制限に適用することで、 $V$  のパラメータ  $x_0$  におけるPDが構成できることを示した。

### 結果②

$V$  がジェネリックである時、パラメータ  $x_0 \in X$  の「無限小近傍」 $\varepsilon$  について、 $K_V$  の  $\text{Sh}(\mathbb{T} \times \varepsilon)$  への制限のホモロジーが、広義の意味で区間の和になることを示した。また、Vineyard で計算される情報について、この和に関する意味付けを与えた。

### 展開

層の圏の幾何学を用いて、パラメータ  $x_0$  での挙動、その漸近挙動と大域挙動を有機的につなぐことができる。これを用いることで、パラメータ依存のPDのより深い解析が可能になると期待される。

(吉田 純)

## TDA・機械学習の材料科学への応用研究

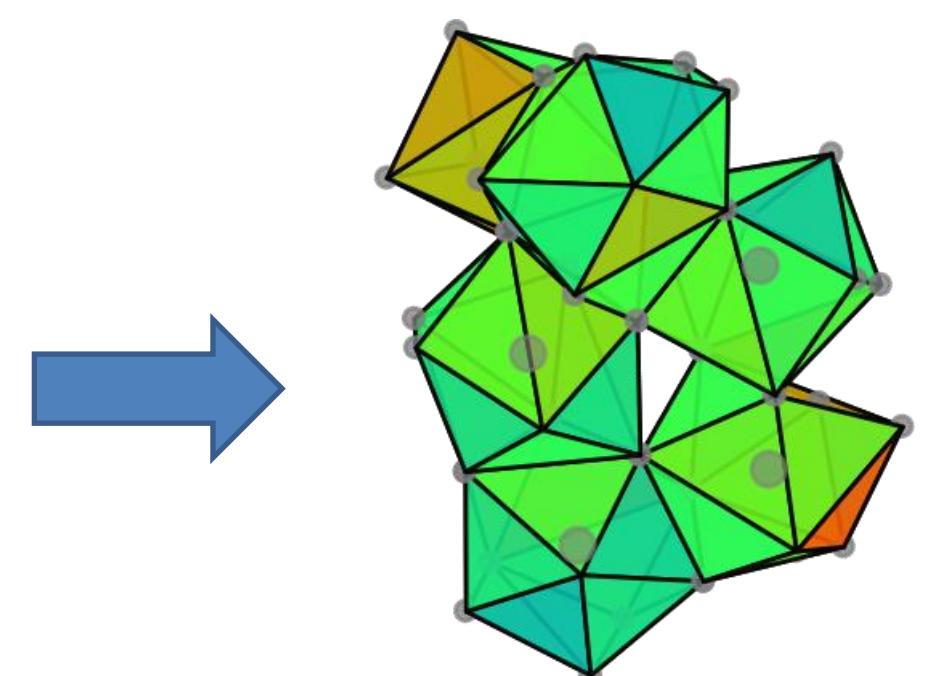
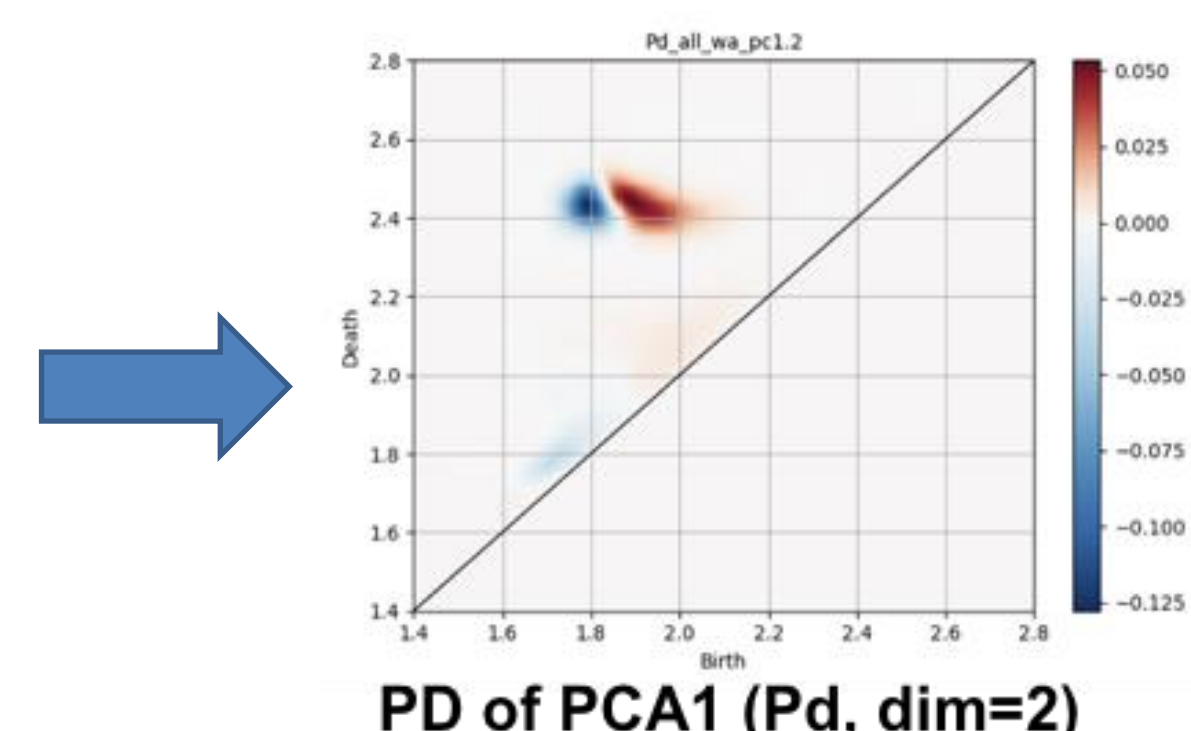
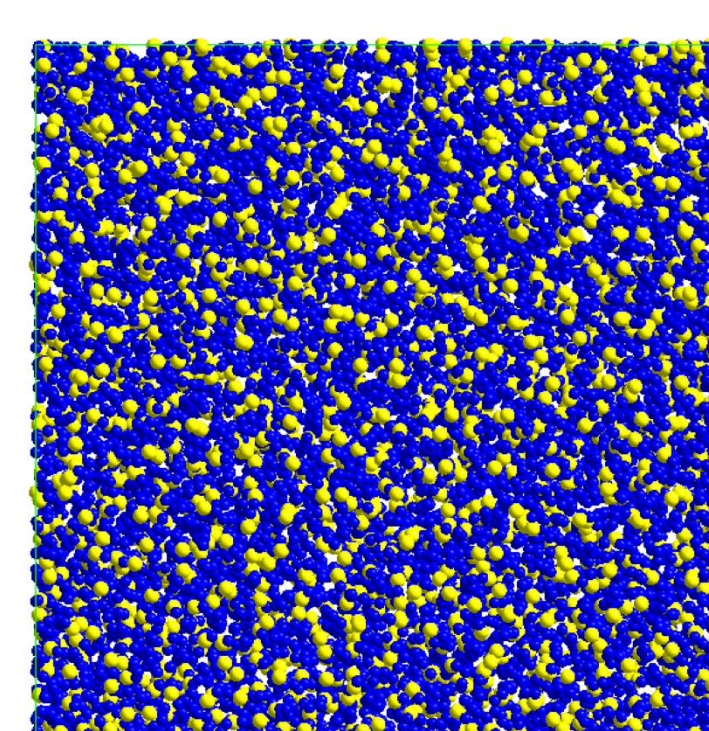
Hirata, Wada, Obayashi, Hiraoka, Commun Mater (2020)

### 背景

金属ガラスの原子配置構造は材料機能に密接に影響するため、材料生成時に可能な限り制御できることが望まれている

### 結果

金属ガラス生成時の冷却速度に依存する原子配置幾何構造を世界で初めて抽出し、かつ制御法を提案



### 展開

その他の材料（磁性材料、バッテリー材料、弾性体材料など）への応用・開発にも展開中

(平岡 裕章)