

# トポロジカルデータ解析：「データの形」とトポロジー



京都大学 高等研究院 教授  
**平岡 裕章**

(お問い合わせ先) TEL : 075-753-9753 E-MAIL : hiraoka.yasuaki.6z@kyoto-u.ac.jp

## 研究の背景

膨大な実験画像データ、大規模シミュレーションで再現される原子配置データなど、現在の科学や産業の現場ではデータが溢れています。このようなデータ駆動型の問題では、データが多いことよりもむしろデータが複雑であることが問題になる場合が多く、複雑データに対して適切な記述子を開発することが望まれています。

この問題に対して、私が研究を進めているトポロジカルデータ解析では、トポロジーを用いてデータ構造を記述します。特にその解析手法の1つである「パーシステント図」(図1)は、複雑データに対する高速マルチスケール解析を可能とする道具として、現在、活発に研究されています。

## 研究の成果

具体的な応用の現場では、複雑データをパーシステント図を用いて記述し、その結果から特徴的なパターンを見出すことで、もとのデータの特徴づけていきます。特にパーシステント図に現れるパターンからもとのデータを再構成するプロセスは応用上特に重要であり、私たちのグループではこの問題を「パーシステント図の逆問題」として世界に先駆けて数学的に定式化し、成果を上げてきました。大きく分けて逆問題の解法としては、圧縮センシングを組み合わせた解法(図2)と、力学系分岐理論を用いた解法の2つを提案しました。

これらの手法により、複雑データ構造をパーシステン

ト図で記述するだけでなく、もとのデータ空間で直接目鼻をつけることが可能になり、応用の範囲が格段に広がりました。実際に材料科学の様々な問題では、ここで開発したパーシステント図の逆問題解法を用いることで、従来の手法では捉えることができない複雑材料の隠れた秩序構造を発見することに成功しています。このように、この挑戦的萌芽研究の成果は、現在JST CRESTをはじめとする複数の大型プロジェクトや企業の共同研究で用いられています。

## 今後の展望

トポロジカルデータ解析は幅広い分野で応用されていますが、このような応用研究を通じて新たな数学の課題がどしどし提案されています。従来の発想にとらわれない新たな切り口を求めて、数学の様々な分野と連携しながら、数学理論としても急速に発展しています。特に最近では、確率論、表現論、代数幾何といった分野の重要性も指摘されています。最先端の数学を用いた強力なデータ解析手法の開発は、今後の応用数学の大きな流れになるでしょう。

## 関連する科研費

2014-2016年度 挑戦的萌芽研究「パーシステントトポロジーと逆問題：タンパク質の構造・機能解析における新手法の確立」

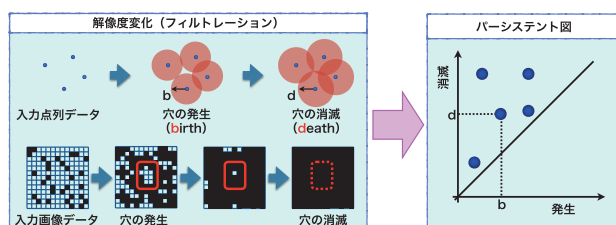


図1 パーシステント図の構成手順

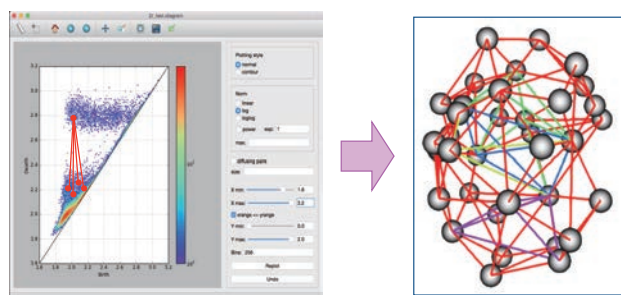


図2 パーシステント図の逆解析