

## 連結パーシステンス図の高速計算アルゴリズム

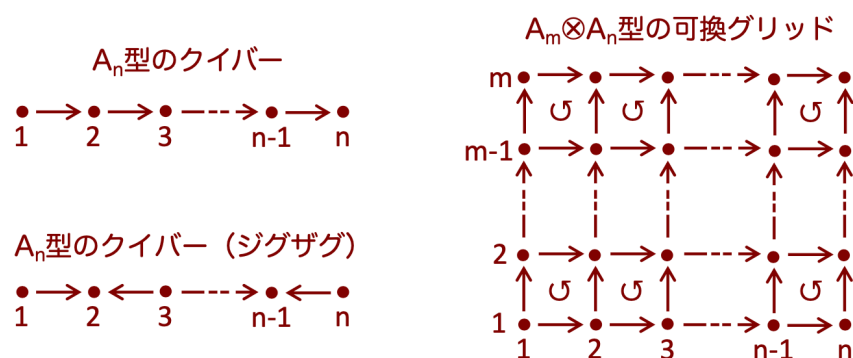
中島 健<sup>1</sup>, 大林 一平<sup>2</sup>

<sup>1</sup>島根大学, <sup>2</sup>岡山大学

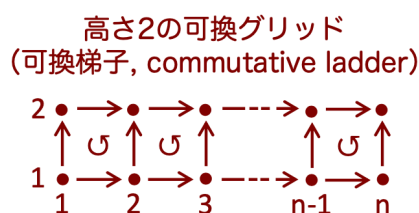
e-mail: knakashima@mat.shimane-u.ac.jp

### 1 背景

「パーシステンス図 (Persistence diagram, PD)」とは, 位相的データ解析における手法の1つであり, 解析対象となるデータ (例えば何らかの物質の原子配置など) にどのような「穴っぽい構造」がそれぞれどれくらい含まれているかを可視化したものである. この技術は抽象代数学 (具体的には「多元環の表現論」という分野である) に根差した理論によって裏打ちされており, その視点に立つと「PDを描く」という操作は「 $A_n$ 型のクイバーの表現の直既約分解を計算する」という操作と解釈することができ, PDの概念を一般化する方法論が見えてくる. 例えば  $A_n$ 型のクイバーの向き付けを自由にした「ジグザグパーシステンス」やクイバーのかたちを可換グリッド型にした「2次元パーシステンス」などが研究されてきた.



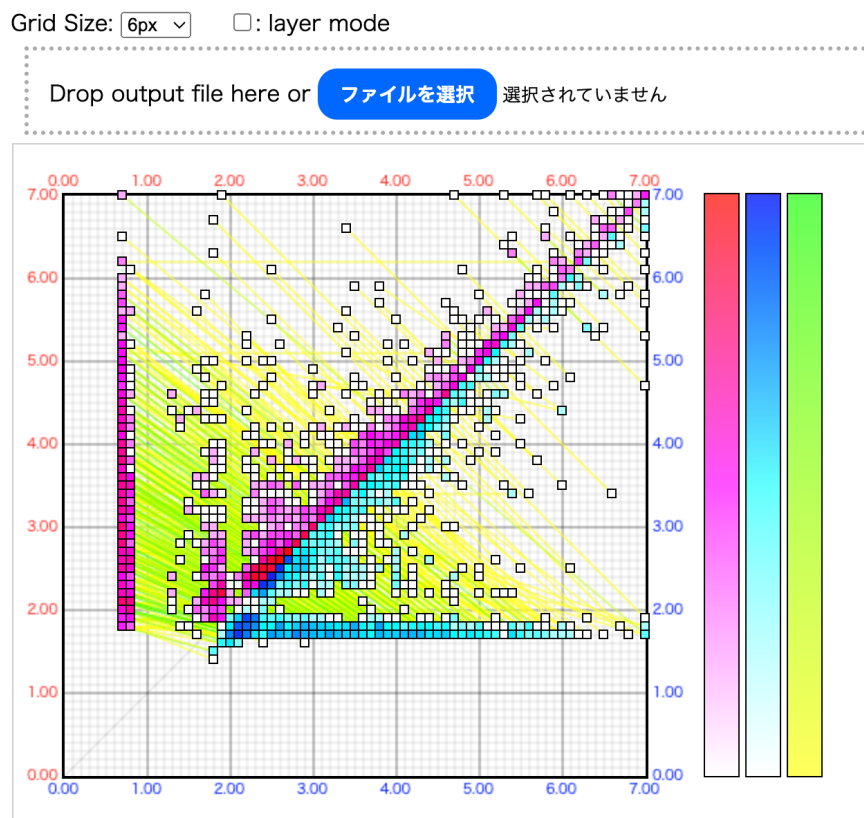
とくに後者について, 任意の入力に対し, その完全不変量である直既約分解を求めることは極めて難しいと分かっている. そのため, 完全不変量は一旦あきらめ, 直既約表現の中でも「区間表現」と呼ばれる性質の良い部品たちに着目し, それらの足し合わせとして近似的に分解する手法「区間近似 (interval approximationあるいはinterval replacement)」[1]が生み出された. 本講演のタイトルにも出てきている「連結パーシステンス図 (連結 PD, connected PD)」[2]とは, 高さ2の可換グリッドに対する区間近似の結果を可視化したものであり, 次ページのスクリーンショットのように, 2つのPDを対角線を挟んで配置し, 対応関係にある穴同士をそれぞれ線分で結んだような描像になっている. 対角線の下側にあるPDは反転した状態になっており, 水色の文字で書かれた目盛りのうち, 枠の下側に並んでいるものが death time, 枠の右側に並んでいるものが birth time に対応している. なお layer mode にすると反転が解除され, 2つのPDを重ねて配置し, 対応関係にある穴同士をそれぞれ線分で結んだような描像となる.



## 2 本講演の内容

今回、発表者の2人は、上述の連結 PD の計算プログラムである「RuCPD」[3]を公開した.

### cPD Visualizer



(アモルファスシリカの原子配列のデータ[4]に対し, RuCPD で連結 PD を描いたもの)

ソフトウェアの具体的な使い方やデモンストレーションなどについては, 後続の講演「連結パーシステンス図計算ソフトウェア RuCPD の紹介」の方に譲るとして, 本講演では連結 PD の計算を高速化するための工夫について, 理論の観点からお話する. また, それによって実用に足るパフォーマンスが実現できたことを報告させていただく.

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 JP19KK0068, JP20H05884, JP22H05106 の助成を受けたものである.

### 参考文献

- [1] Hideto Asashiba, Emerson G. Escolar, Ken Nakashima, Michio Yoshiwaki, On Approximation of 2D Persistence Modules by Interval-decomposables, Journal of Computational Algebra, 6-7 (2023), 100007.
- [2] Yasuaki Hiraoka, Ken Nakashima, Ippei Obayashi, Chenguang Xu, Refinement of Interval Approximations for Fully Commutative Quivers, ArXiv preprint, 2310.03649 (2023).
- [3] RuCPD web site, <https://bitbucket.org/tda-homcloud/rucpd/src/main/> .
- [4] I. S. A. A. C. S. Examples, <https://isaacs.sourceforge.io/ex.html> .

## 連結パーシステンス図計算ソフトウェア RuCPD の紹介

大林 一平<sup>1</sup>, 中島 健<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 岡山大学, <sup>2</sup> 島根大学

e-mail : i.obayashi@okayama-u.ac.jp

### 1 講演の概要

「連結パーシステンス図 (連結 PD)」は、位相的データ解析で用いる「パーシステンス図 (PD)」を拡張したもので、2つの PD の間の関係を可視化したものになっている。中島と大林は共同して連結 PD の計算ソフトウェア「RuCPD」を開発した。本講演ではこのソフトウェアの実装およびユーザーとしての利用法について紹介する。

### 2 連結パーシステンス図計算ソフトウェア RuCPD について

パーシステントホモロジー (PH) はトポロジーの道具を使ってデータの形を特徴付けるツールで、材料科学や生命科学など様々な分野への応用が広がっている [1]。PH の概念図を図 1 に示す。PH の典型的入力としては点群データ (図 (a)) が用いられる。このデータが持つように「見える」2つのリング構造をそのスケール情報を含めて取り出すことを考えよう。PH の主要なアイデアは各点に円盤を置き、その半径を徐々に大きくしていったときのトポロジーの変化を調べる、というものである。PH の数学理論によって孔や空洞といったホモロジー生成元の生成消滅を一意的に対応づけることができる。この図の例であれば (b) で生成した孔  $X$  は (e) で消滅し、(c) で発生した孔  $Y$  は (d) で消える。そして生成消滅のタイミングの半径のペアによって各ホモロジー生成元の生成消滅を特徴付ける。このペアを生成消滅対と呼び、その集まりをパーシステンス図 (PD) と呼ぶ。PD は図 (f) のような散布図やヒストグラムで可視化される。この図を用いてデータの形の情報を縮約し解析する。

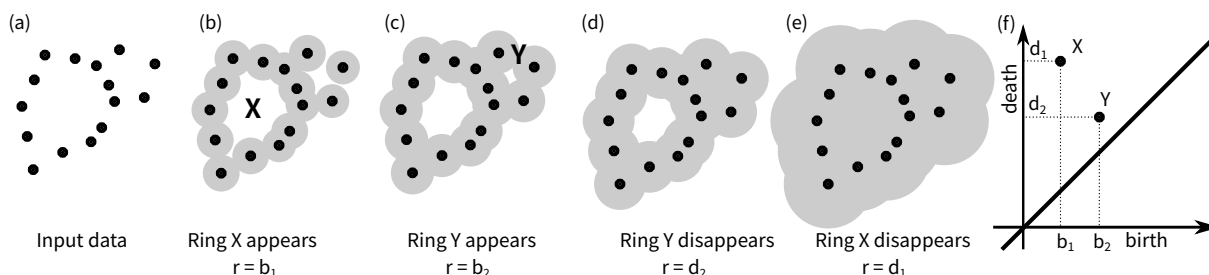


図 1. パーシステントホモロジーの概念図 ([1] より引用)

PH 解析においては、複数の PD を比較することで元のデータの形を比較することが良く行なわれる。PH の安定性定理によって入力データの類似性が出力の PD の類似性を導くことが知られており、こういった解析の正当性を保証している。ただ、入力データ同士に類似性以上の関係がある場合にはこの定理では不十分である。例えば粒子の運動の時系列データを各時刻でのスナップショットを点群とみなして PH 解析する場合、スナップショット間には粒子の 1 対 1 対応があり、これを考慮した解析がしたくなる。しかしこのような状況に対応できる汎用的手法は現在の所存在しない。マルチパラメータパーシステンスの理論はこの問題に解決策と期待されるが、理論的な困難もありまだ試行錯誤の段階である。

我々はこのような汎用的な PH 解析手法への第一歩として、もっと簡単で数学的に取り扱いやすい

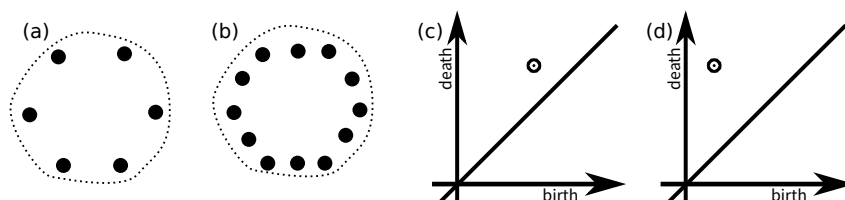


図 2. 包含関係にある 2 つの点群とその PD

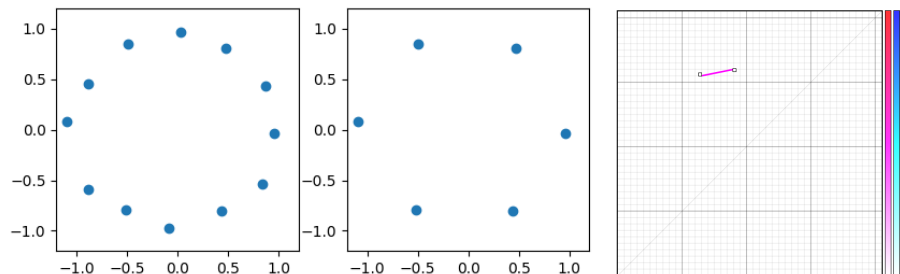


図 3. RuCPD の実行例

関係として 2 つの点群が包含関係にある場合の解析手法を考える。例として図 2(a)(b) のような 2 つの点群データを考える。それぞれの 1 次の PD は図 (c)(d) のようになり、それぞれ 1 つずつペアを持つ。このペアは図 (a)(b) のループに対応しているが、この 2 つのループは包含関係による関連があるように見える。そこで適当な数学的正当化により図 (c) のペアと (d) のペアを「結びつける」ことができるのが連結 PD[2] である。

中島と大林の二人はこの連結 PD を効率的に計算するためのソフトウェア RuCPD[3] を開発し、最近公開した。包含関係にある 2 つの点群と計算に利用する半径パラメータの列を入力として、連結 PD を出力する。図 3 の左 2 つが入力となる点群データで右がその連結 PD である。連結 PD 内で 2 つの点がピンク色の直線で繋がっているのが図 2(c)(d) のペアが結び付けられていることに対応する。本ソフトウェアは参考文献の URL[3] からダウンロード可能である。この URL から README を辿ることでインストール法や使い方について解説している。動作確認は Linux と Mac OSX で行なわれている。

本講演ではこのソフトウェアの利用法や実装上の工夫、ベンチマーク結果などを紹介する。時間が許せばソフトウェア利用のデモンストレーションもする。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP19KK0068, JP20H05884, JP22H05106 の助成を受けたものである。

## 参考文献

- [1] I. Obayashi, T. Nakamura and Y. Hiraoka, Persistent Homology Analysis for Materials Research and Persistent Homology Software: HomCloud, J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022), 091013.
- [2] Yasuaki Hiraoka, Ken Nakashima, Ippei Obayashi and Chenguang Xu, Refinement of Interval Approximations for Fully Commutative Quivers, Arxiv preprint, 2310.03649 (2023).
- [3] RuCPD web site, <https://bitbucket.org/tda-homcloud/rucpd/src/main/>.