

バイパス・パーシステンス図の安定性

Stability of Bipath Persistence Diagrams

多田駿介 (Shunsuke Tada)¹

¹ 東北大学 数理科学共創社会センター (Mathematical Science Center for Co-Creative Society, Tohoku University)

e-mail : shunsuke.tada.e6@tohoku.ac.jp

1 概要

本講演では、パーシステントホモロジーの拡張として提案されたバイパス・パーシステントホモロジーを紹介し、さらに、位相空間上のバイパス関数から誘導されるバイパス・パーシステントホモロジーの安定性定理について述べる。この定理は、従来のパーシステントホモロジーの安定性定理と同様に、入力（バイパス関数）の微小な変化が出力（バイパス・パーシステンス図）に与える影響も小さいことを保証するものである。本結果は、ノイズを含むデータに対して本手法を適用する際の理論的正当性を示唆する。

2 導入

パーシステントホモロジーは、データに内在する位相的特徴をパーシステンス図として出力する、位相的数据解析の基本的な手法の一つである。位相空間 X 上の実数値関数 f に対し、劣位集合フィルトレーション $\{(f \leq r)\}_{r \in \mathbb{R}}$ をとる。ただし、 $(f \leq r) := f^{-1}((-\infty, r])$ 。これにホモロジー関手を適用して得られるベクトル空間と線形写像の図式 $(\{H_q(f \leq s)\}_{s \in \mathbb{R}}, \{H_q(f \leq s) \rightarrow H_q(f \leq t)\}_{s \leq t})$ を f のパーシステントホモロジーと呼ぶ。これは区間加群に分解され、パーシステンス図は各区間加群に対応する区間 $[a, b)$ を平面上の点 (a, b) にプロットすることで得られる。

パーシステンス図の安定性定理 [1] は関数 f の摂動がパーシステンス図に及ぼす変化が微小となることを保証し、ノイズを含むデータへの適用が正当化され、応用上重要な役割を果たす。

最近、この枠組みを拡張したバイパス・パーシステントホモロジーが導入された [2]。これは、両端点が一致する2つのフィルトレーション（バイパス・フィルトレーション）にホモロジー関手を適用して得られる図式であり、区間加群に分解される。この性質により、バイパス・フィルトレーション内の位相的特徴はバイパス・パーシステンス図を用いて視覚的に解釈することができる。

3 バイパス・パーシステンス図の安定性

本節ではバイパス・パーシステンス図の安定性定理を述べる。本節の内容は [3] に基づく。

バイパス半順序とは、台集合を $(\mathbb{R} \times \{1, 2\}) \sqcup \{\pm\infty\}$ とし、順序を次で定めた半順序集合である：

$$x \leq y: \iff \begin{cases} x = -\infty, \text{ または} \\ y = +\infty, \text{ または} \\ x = (s, i), y = (t, i) \in \mathbb{R} \times \{i\} \text{ かつ } s \leq t. \end{cases}$$

これは (1) のように表示することができる。以降バイパス半順序を B と書く。 \mathbb{R} 上の区間の多重集合に定まるボトルネック距離の類似で、 B 上の区間の多重集合間にはボトルネック距離 d_B ([2, Definition 2.12]) が定まる。

$$B: \quad \begin{array}{ccc} & \mathbb{R} \times \{1\} & \\ -\infty & \hline & \mathbb{R} \times \{2\} & \\ & \hline & +\infty & \end{array} \quad (1)$$

位相空間 X 上の**バイパス関数** $f = (f_1, f_2)$ とは, X 上の B 値関数の組であり, 各 f_i は $(\mathbb{R} \times \{i\}) \cup \{\pm\infty\}$ に値を取る関数で, かつ $f_1^{-1}(\{-\infty\}) = f_2^{-1}(\{-\infty\})$ が成り立つものをいう.

バイパス関数間の距離を定めるため, 写像 $|\cdot, \cdot|_B: B \times B \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} \sqcup \{\infty\}$ を与える:

$$|b_1, b_2|_B := \begin{cases} 0 & (b_1 = b_2), \\ |r_1 - r_2| & (b_1 = (r_1, i), b_2 = (r_2, i) \in \mathbb{R} \times \{i\}, i = 1, 2), \\ \infty & (\text{それ以外}). \end{cases}$$

この記号のもと, 位相空間 X 上のバイパス関数 $f = (f_1, f_2)$, $g = (g_1, g_2)$ 間の距離を次で定義する:

$$\|f, g\|_B := \max \left\{ \sup_{x \in X} |f_1(x), g_1(x)|_B, \sup_{x \in X} |f_2(x), g_2(x)|_B \right\}.$$

次にバイパス関数からバイパス・パーシステントホモロジーの構成方法を述べ, 主定理を紹介する. バイパス関数 $f = (f_1, f_2)$ に対して, **バイパス・フィルトレーション** $\{(f \leq b)\}_{b \in B}$ を次で定める.

$$(f \leq b) := \begin{cases} f_1^{-1}(\{-\infty\}) & (b = -\infty), \\ X & (b = +\infty), \\ \{x \in X \mid f_i(x) \leq r\} & (b = (r, i) \in \mathbb{R} \times \{i\}, i = 1, 2). \end{cases}$$

構成から $b_1 \leq b_2$ なる B の要素に対して, $(f \leq b_1) \subseteq (f \leq b_2)$ が成立する. このバイパス・フィルトレーションにホモロジー関手を適用して得られるベクトル空間と線形写像の図式を $V(f)$ と書き, f の**バイパス・パーシステントホモロジー**と呼ぶ. また, 区間分解をして得られる区間の多重集合 $\mathcal{B}(V(f))$ を f の**バイパス・パーシステンス図**と呼ぶ.

定理 1 ([3, Theorem 4.1]) $f = (f_1, f_2)$ および $g = (g_1, g_2)$ をある位相空間 X 上のバイパス関数とする. ただし, 次の条件が成り立っているとすると:

$$f_1^{-1}(\{-\infty\}) = f_2^{-1}(\{-\infty\}) = g_1^{-1}(\{-\infty\}) = g_2^{-1}(\{-\infty\}).$$

このとき, 不等式 $d_B(\mathcal{B}(V(f)), \mathcal{B}(V(g))) \leq \|f, g\|_B$ が成立する.

この定理は(両端を除く)バイパス関数 f の摂動がバイパス・パーシステンス図 $\mathcal{B}(V(f))$ に及ぼす変化も微小であることを示唆している. なお, この定理は, 従来のパーシステンス図の安定性定理と同様に(バイパス・パーシステンス加群の)代数的安定性定理を介して示される.

参考文献

- [1] David Cohen-Steiner, Herbert Edelsbrunner, and John Harer. Stability of persistence diagrams. *Discrete & Computational Geometry*, 37:103–120, 2007.
- [2] Toshitaka Aoki, Emerson G. Escolar, and Shunsuke Tada. Bipath persistence. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 42:453–486, 2025.
- [3] Shunsuke Tada, Stability of Bipath Persistence Diagrams, arXiv preprint arXiv:2503.01614, 2025.

パーシステントホモロジーによる作用素論的力学系解析手法の評価

Evaluation of Operator-Theoretic Dynamical Systems Analysis Methods by Persistent Homology

山田 泰輝 (Taiki Yamada)¹, 藤原 寛太郎 (Kantaro Fujiwara)¹,

¹ 東京大学 (The University of Tokyo)

e-mail : yamada-taiki@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

本研究では、力学系に対する作用素論的データ解析（ODA）が、力学系の位相的性質をどの程度適切に抽出できるかを評価する。具体的には、ODA により得られた力学系の不変測度の台について、パーシステントホモロジーを用いてその位相的性質を定量化し、理論上の不変集合と比較する。基本的な離散力学系を用いた数値実験を通じて、ODA における推定誤差やパラメータ設定に対するロバスト性を議論する。

2 背景

力学系は状態の発展規則を定め、動的現象の記述に広く応用されている。これらの現象の本質的な振る舞いを理解するには、状態空間上の座標系に依存しない定性的性質に注目することが有効である。位相力学系理論では、固定点の数や不変集合の形状といった位相的性質を調べることで、こうした定性的理解が可能となる。しかし、このような解析を厳密に行えるのは、力学系が明示的に定義され、かつ構造が単純な場合に限られる。

この制約を克服するために、作用素論的データ解析（Operator-Theoretic Data Analysis; ODA）が提案された。ODA は、力学系が生成する状態系列データから、元の力学系が定める転送作用素を近似し、その性質を推定する手法である（図 1）。特に、ODA により得られる不変測度の台は、元の力学系の不変集合を近似する情報を含むと期待される。しかし、ODA では近似対象である転送作用素の定義域となる関数空間の選択に任意性があるため、同一のデータに対しても出力が一意に定まらない。たとえば、計算上の利点からしばしば再生核 Hilbert 空間が関数空間として利用される [1] が、その定義に用いるカーネル関数の選択肢が無数に存在する。カーネルの選択は現状、主に経験的判断に基づいており、特に位相的性質を抽出するために適した選択指針は確立されていない。

本研究では、ODA により得られた不変測度の台に対し、その位相的性質の顕著性を、位相的データ解析（Topological Data Analysis; TDA）の一手法であるパーシステントホモロジー [2] を用いて定量化する手法を提案する（図 1）。これにより、力学系の構造を保持した近似が実現されているかを評価するための指標を提供する。

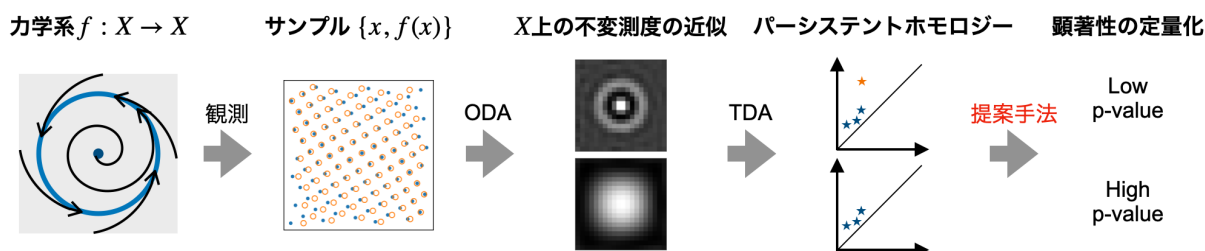


図 1. パーシステントホモロジーによる作用素論的力学系解析手法の評価の概要。

3 手法

原点に不安定固定点を持ち、原点を中心とする半径 $1/2$ の円が安定不変集合となる 2 次元離散力学系 $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ を、未知の力学系として定めた。領域 $[-1, 1]^2$ 上に並行移動・拡大した Fibonacci 格子上の n 点 x_1, \dots, x_n を初期値とし、サンプル $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$ を生成した。これに対して、ODA の一手法である kernel EDMD を適用し、サンプル $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^n$ から力学系 f の不変測度を近似した。カーネル関数にはガウシアンカーネル $k(x, x'; \gamma) = \exp(-\gamma \|x - x'\|^2)$ を用いた。ただし、 $\gamma > 0$ はスケールパラメータである。状態空間が \mathbb{R}^2 であるとき、近似された不変測度は領域 $[-1, 1]^2$ を分割した $m \times m$ のグレースケール画像として表現される。この画像に対して 1 次パーシステントホモロジーを計算し、対応するパーシステントダイアグラムにおいて、点と対角線との距離（パーシステンス）の最大値を pers とした。

提案手法では、帰無仮説 H_0 を「グレースケール画像が一様分布からランダムに生成されている」と置き、観測された pers に対する p 値を、構造の顕著性を表す指標として用いる。p 値は、 H_0 の下でランダムに生成された画像群から得られるパーシステンスの経験分布をフィッティングして得た関数を数値積分することで計算した。

4 結果

ガウシアンカーネルのスケールパラメータ γ と、近似された不変測度に対して提案手法で算出された p 値の関係を図 2 に示す。 $\gamma < 1$ の領域では、近似された不変測度がサイクル状の安定不変集合を捉えておらず、それに対応して得られた p 値も高い傾向を示した (p 値 ≈ 0.8)。一方、サイクル状の集合を明瞭に捉えた $\gamma = 2$ および $\gamma = 8$ 付近では、p 値は極めて小さくなった (p 値 $\approx 10^{-14}$ および p 値 $\approx 10^{-12}$)。さらに、原点の不安定固定点をも含んだ構造が現れる $\gamma = 4$ 付近では、p 値は中間的な値を示した (p 値 $\approx 10^{-2}$)。

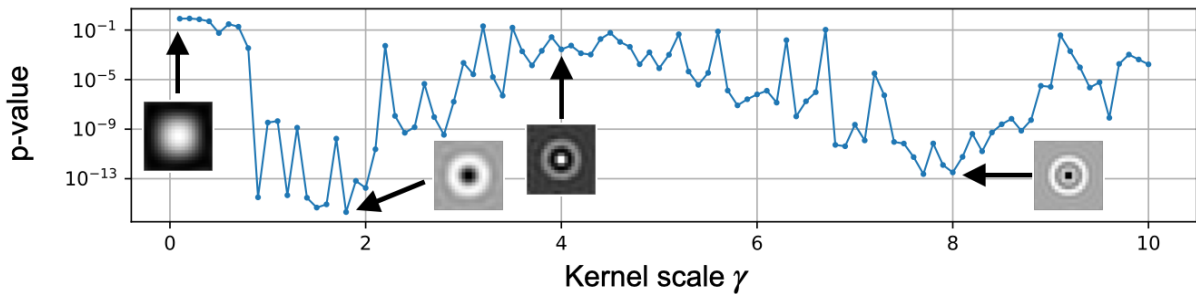


図 2. カーネルスケール γ に対する p 値の変化。データ数 $n = 10^4$ 、各軸方向における領域の分割数 $m = 20$ とした。

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 JP22K18419, JP24K15161, JP25KJ0990, JST ACT-X JPM-JAX24CT, ムーンショット型研究開発事業 JPMJMS2021 の助成を受けた。

参考文献

- [1] Stefan Klus, Ingmar Schuster, and Krikamol Muandet. Eigendecompositions of transfer operators in reproducing kernel hilbert spaces. *Journal of Nonlinear Science*, 30(1):283–315, 2020.
- [2] Vanessa Robins. Towards computing homology from finite approximations. In *Topology proceedings*, volume 24, pages 503–532, 1999. Issue: 1.

パーシステントホモロジーによる枝構造解析ツール

Persistent Homology Tool for Branch Structure Analysis

織田 遥向 (Haruhisa Oda)¹, 来田 真友子 (Mayuko Kida)¹,
中田 庸一 (Yoichi Nakata)^{1,2}, 栗原 裕基 (Hiroki Kurihara)^{1,3}

¹ 東京大学 (The University of Tokyo), ² アリスマー株式会社 (Arithmer Inc.),

³ 熊本大学 (Kumamoto University)

e-mail : haruhisa-oda0722@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

枝構造は血管・リンパ管・神経・気道など生命科学領域の様々な対象で現れるため、その解析技術の開発は重要な課題である。枝構造解析の際 “front” と “plexus” にパートを分けて議論が行われる場合がある [1]。ここで “front” とは外側に伸びだしている部分、“plexus” とは内部で網目状の構造を取っている部分を指している。しかしながら、このような「内部」と「外部」の区別は必ずしも明確でない。そこで、定量性・客観性を保ちながら用途に合わせてチューニングができる内部・外部構造の定め方が有用になる。本発表ではパーシステントホモロジー (PH)[2, 3] に基づいて枝構造の内部・外部を定める手法を導入し、複数の観点からの検証を行う。具体的には、モデル画像を用いて期待される挙動が見られるかの確認、様々な生物システムの画像に対する適用可能性の評価、検出される構造のパラメタチューニングでの変化についての数学的評価の 3 点から検証を行う。PH の計算には HomCloud[4] を用いた。

2 手法

入力となる 2 値画像 $I : D \rightarrow \{0, 1\}$ (D は画像領域の 2 次元グリッド) から、点群 $X = \{p \in D | I(p) = 1\} \subset \mathbb{R}^2$ を定める。 X の凸包の境界を $B(X)$ と書くことにする。本手法では X に加え、点群 $X \cup U$ ($U \subset B(X)$) を用いる。この U がチューニングするパラメタになる。 X および $X \cup U$ に対して alpha 複体を用いた filtration で PH を計算し、1 次のホモロジー $PD_1(X), PD_1(X \cup U)$ を記録する。ここで、内部構造を $PD_1(X) \cap PD_1(X \cup U)$ 、外部構造を $PD_1(X \cup U) \setminus PD_1(X)$ で定義する (図 1)。

直感的には、内部構造は凸包の境界に点を追加したことで影響を受けない情報、外部構造は凸法の境界に点を追加したことで新たに生成した情報と解釈でき、我々の内部・外部構造の考え方に合うよう定義が行われている。PH の結果の可視化を行う際には、消滅単体の外心を内部構造は青い丸、外部構造は赤いひし形でプロットしている。

3 モデル画像を用いた検証

内部・外部のどちらか曖昧な構造が含まれているモデル画像に対し、凸包境界上の点を追加する間隔を調整することで内部・外部構造の判定が変化することが確認できる。また、同じ形態で枝の太さのみが異なるモデル画像に適用して検証すると、安定して類似した結果が得られることも確認でき、本手法が適切に形態情報に注目できていることが分かる。これらの検証から、本手法がパラメタチューニングによる客観的な内部・外部の判定調整を実現していること、主に枝構造のパターンを抽出できていることが確認される。

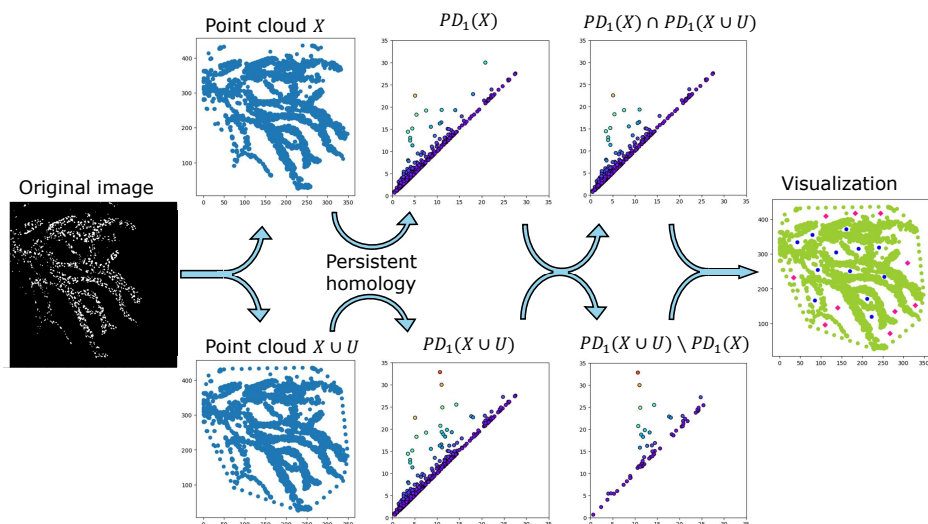


図 1. 提案手法の概要。入力画像から凸包境界上の点の有無で 2 つの点群を構成し、PH を計算する。内部構造を 2 つのパーシステンス図の共通部分、外部構造を差分として定義する。凸包境界上の点の取り方が本手法でチューニングできるパラメタである。

4 様々な生物画像を用いた検証

本手法をリンパ管、神経、血管の画像に適用することにより、多様な形態の解析に適用できること、検出すべきサイズ情報に合わせたチューニングがしやすいこと、定量評価との相性が良いことが確認できる。講演では本稿で省略した解析の内容も説明する。

5 数学的検証

上記のように定めた内部構造の特徴として、凸包境界上の点の包含関係に対する単調性を示す。まず、ループ構造が検出可能な内部構造であることを定義し、凸包境界上の点の集合 $\emptyset = U_0 \neq U_1 \subset U_2$ を考える。この時、 U_0 で検出可能な内部構造が U_1 で検出可能でなければ、 U_2 でも検出可能でないことが示せる。この単調性があることで、実際の使用時のパラメタチューニングが容易になる。

参考文献

- [1] Suchting S et al., The Notch ligand Delta-like 4 negatively regulates endothelial tip cell formation and vessel branching, PNAS, 104 (2007), 3225–3230.
- [2] Robins V, Towards computing homology from finite approximations, Topology Proceedings, 24 (1999), 503–532.
- [3] Edelsbrunner H, Letscher D, Zomorodian A, Topological persistence and simplification, Discrete & Computational Geometry, 28 (2002), 511–533.
- [4] Obayashi I, Nakamura T, Hiraoka Y, Persistent homology analysis for materials research and persistent homology software: HomCloud, Journal of the Physical Society of Japan, 91 (2022), 091013.

カオスの流れのトポロジカルダイナミクスモデリング

Topological dynamics modeling for a chaotic flow

坂上 貴之 (Takashi Sakajo)¹, 松本 剛 (Takeshi Matsumoto)¹, 鍛冶 静雄 (Shizuo Kaji)²
 横山 知郎 (Tomoo Yokoyama)³, 宇田 智紀 (Tomoki Uda)⁴

¹ 京都大学 大学院理学研究科 (Kyoto University),

² 九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 (Kyushu University),

³ 埼玉大学 大学院理工学研究科 (Saitama University),

⁴ 富山大学 大学院理工学研究科 (Toyama University)

e-mail : sakajo@math.kyoto-u.ac.jp

乱流のような複雑ダイナミクスを呈する流体運動の理解する上で、Navier-Stokes 方程式の数値計算結果による解の可視化は有益である。また、支配方程式が明確でないような複雑な流動現象の研究においても、その実験や観測などで得られるデータを可視化することで、その理解を深めることができる場合も多い。しかしながら、数値計算や計測/観測で得られる流れの可視化データから定性的あるいは定量的にダイナミクスの特徴づけを行うことは容易ではない。こうした複雑な流体運動のパターンの数学的特徴付けを可能にする TDA の手法として、私達は Topological Flow Data Analysis (TFD 解析) の開発を進めている。これは、ベクトル場の指数に関する位相的制約を与えるポアンカレ・ホップ定理と、このベクトル場が定義するフローの極限軌道の分類を行うポアンカレ・ベンディクソンの定理に基づいて、2次元ベクトル場によって生成される粒子軌道のトポロジカルな構造を数学的に分類する方法である。TFD 解析の理論は、まず2次元非圧縮流れ、すなわちハミルトン流れの流線パターンの分類法として提案された [1]。次に、この分類理論に基づいて与えられた流線パターンの大域的な軌道構造が、後述するように平面グラフやそれに等価な文字列表現に一意に変換できることが明らかになり、流れパターンのトポロジカルデータ解析に利用できるようになった [2]。また、具体的なデータへの活用例として、気象学におけるブロッキング現象 [3] や海洋学における黒潮大蛇行 [4] などの異常状態の検出が TFD 解析により実現されている。さらに近年、TFD 解析は2次元圧縮性流れを含む一般的なベクトル場のクラスに対して拡張され [5]、産業課題や臨床医学データへの適用も進み、複雑な流れパターンの状態記述に有効なツールとなっている [6]。

こうした流れデータの状態記述の枠組を超え、本講演では TFD 解析に基づくカオス的な複雑流れのパターンの時間発展を縮約する数理モデル (トポロジカルダイナミクスモデル) の構築方法とその解析結果について紹介する [7]。ここで扱う例は、カオス的な流れへの遷移が起こる例として知られている蓋駆動キャビティ流れ (the lid-driven cavity flow) である。すなわち、図 1(a) に示すような、二次元の正方形キャビティ内にある非圧縮流体の運動を考える。流れはキャビティの左右境界と底辺境界ではゼロ境界条件を満たし、上部境界 (蓋) は左から右へ一定の速度で動き、これによりキャビティ内部の流体にエネルギーが注入される。その結果、図 1(b) に示すような時計回りの大きな回転流とキャビティの三つの角において閉じ込め渦領域 (Corner eddies) が形成される。レイノルズ数が大きくなると、流れが層流からカオス的な流れへと遷移することが知られている。まず、TFD 解析により、このパターンのトポロジカルな構造は図 1(c) に示すグラフ (COT) や文字列表現 (COT representation) へ一意に変換される。このグラフのラベル c_+^0 , c_+^1 , c_+^2 のノードより下部の枝構造は、それぞれ左上・左下・右下にある閉じ込め渦領域のパターン構造の詳細を表現している。我々は、

このグラフをパターンの「トポロジカルモード分解」と捉え、 c_+^i , $i = 0, 1, 2$ 以下にある部分グラフを渦閉じ込め領域に対する「トポロジカルモード」と見なす。次に、このトポロジカルモードの変化を時間方向に追跡することで、カオス的な流動パターンの時間発展をトポロジカルモード間の離散力学系（遷移グラフ）に低次元縮約できる。この遷移グラフを我々は「トポロジカルダイナミクスモデル」と呼び、この縮約モデルに対して、グラフ理論的アプローチやパターンの変化に関する因果推定を行うことで、この流動パターンのダイナミクスを特徴づけられる。これは、過渡的な複雑なトポロジカル流動パターンの情報だけから低次元データ駆動型のトポロジカル縮約モデルを構築する新しい方法を示唆するものであり、TFD 解析に基づくダイナミクス解析の基礎となりうるものである。

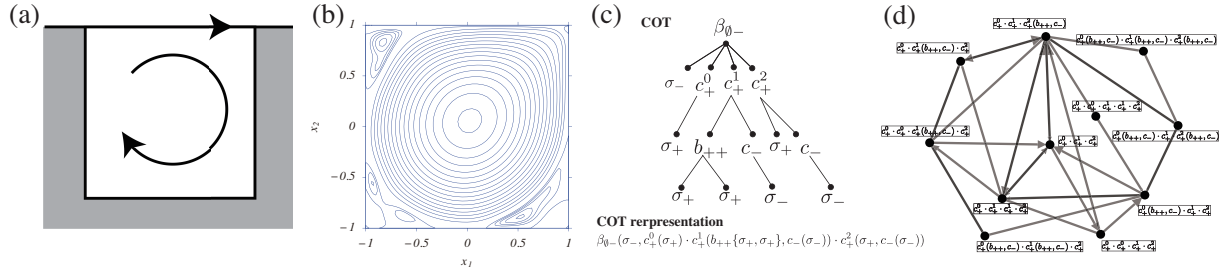


図 1. (a) 蓋駆動キャビティ流れの問題設定. (b) TFD 解析の対象となる流れパターンのスナップショット. (c) TFD 解析により、(b) のパターンに対して一意に割り当てられるツリー (COT) とその文字列表現 (COT 表現). ここから角の渦構造を表現するトポロジカルモードが定義される. (d) カオス的な流れパターンの TFDA のトポロジカルモードの時間発展を追跡することで得られるモード間の離散力学系 (トポロジカルダイナミクスモデル).

謝辞 本研究は JST 未来社会創造事業（課題番号 JPMJMI22G1）からの支援を受けている。

参考文献

- [1] T. Yokoyama and T. Sakajo, Word representation of streamline topologies for structurally stable vortex flows in multiply connected domains, *Proc. Roy. Soc. A*, **469** (2013), 20120558.
- [2] T. Sakajo and T. Yokoyama, Tree representation of topological streamline patterns of structurally stable 2D Hamiltonian vector fields in multiply connected domains, *IMA J. Appl. Math.*, **83** (2018), 380–411.
- [3] T. Uda et al., Identification of Kuroshio meanderings south of Japan via a topological data analysis for sea surface height, *J. Meteor. Soc. Japan*, **99** (2021), 169–1183.
- [4] T. Sakajo et al., Identification of Kuroshio meanderings south of Japan via a topological data analysis for sea surface height, *J. Oceanogr.*, **78** (2022), 495–513.
- [5] T. Sakajo and T. Yokoyama, Discrete representations of orbit structures of flows for topological data analysis, *Disc. Math. Algor. Appl.*, (2022), 250143.
- [6] T. Sakajo and K. Itatani, Topological identification of vortical flow structures in the left ventricle of the heart, *SIAM J. Imag. Sci.*, **16** (2023), 1491–1519.
- [7] T. Sakajo et al. Topological flow data analysis for transient flow patterns: a graph-based approach, *arXiv:2502.00664*, preprint (2025).