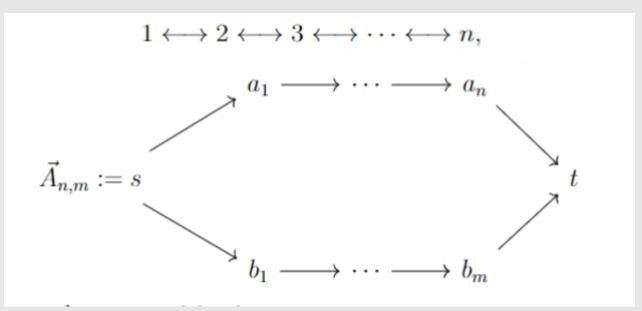
#### パーシステンス加群と区間表現

名前 多田駿介 所属 神戸大学 人間発達環境学研究科 エスカラ研 日付 2023/2/21



半順序集合のハッセ図

#### 自己紹介

名前 多田駿介 (位相的データ解析)

趣味 ・Youtube コスメティック田中 ホモサピ バキ童チャンネル (お勧めのチャンネルとか教えてください)

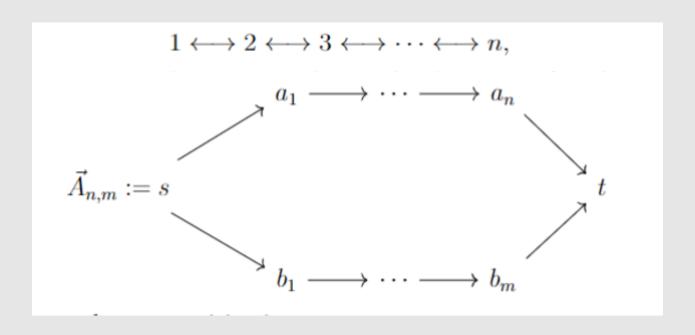
- ・散歩
- ・(友人と) グリーン・タオの定理のセミナー
- ・日本酒やみりん(甘いお酒が好きです)

皆様への一言 自分は数学とデータ解析の繋がりに興味を持っています. よろしくお願いいたします。

#### 結果

P:半順序集合(を圏としてみる)

Pから有限次元ベクトル空間の圏への任意の関手(パーシステンス加群と呼ぶ)が区間分解可能であるための半順序集合Pの必要十分条件を決定した。



#### 本日の発表の流れ

- ■位相的データ解析とは?
- | パラメータのパーシステンス加群
- ■2パラメータのパーシステンス加群
- ■区間表現

#### 本日の発表の流れ

- ■位相的データ解析とは?
- | パラメータのパーシステンス加群
- ■2パラメータのパーシステンス加群
- ■区間表現

2000年頃から発展し始めてきている データの解析手法

2000年頃から発展し始めてきている データの解析手法

- トポロジーを用いたデータ解析
- パーシステントホモロジー解析
- Mapper解析

など

2000年頃から発展し始めてきている データの解析手法

トポロジーを用いたデータ解析

- パーシステントホモロジー解析
- ・Mapper解析 など

パーシステントホモロジー解析の手法

データの形(穴や空洞)を記述

•

•

パーシステントホモロジー解析の手法

データの形(穴や空洞)を記述

・データに隠された複雑なものから規則など を見つける

•

パーシステントホモロジー解析の手法

データの形(穴や空洞)を記述

- ・データに隠された複雑なものから規則など を見つける
- ・データから穴を見つける

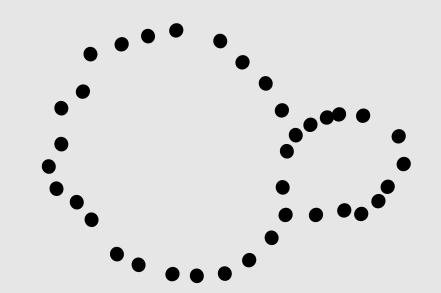
パーシステントホモロジー解析の手法

データの形(穴や空洞)を記述

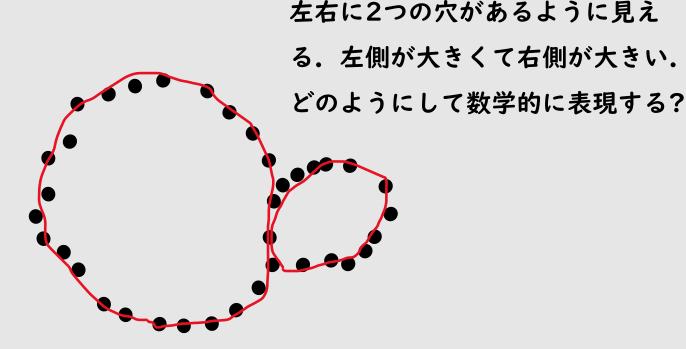
- ・データに隠された複雑なものから規則など を見つける
- ・データから穴を見つける

雰囲気をつかんでみよう

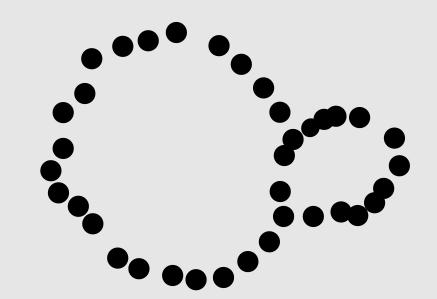
パーシステントホモロジー解析の手法



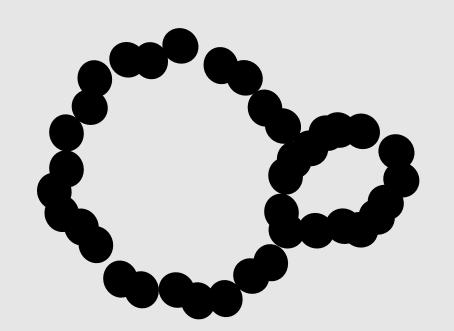
#### パーシステントホモロジー解析の手法



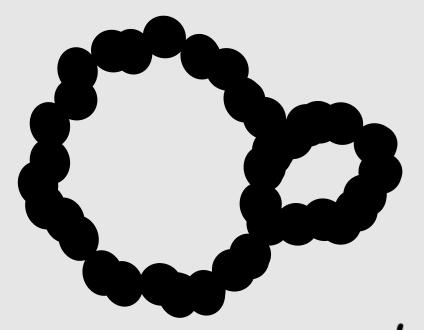
パーシステントホモロジー解析の手法



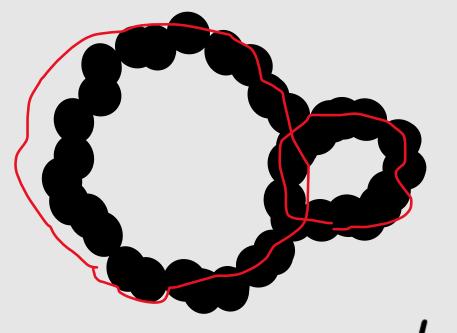
パーシステントホモロジー解析の手法

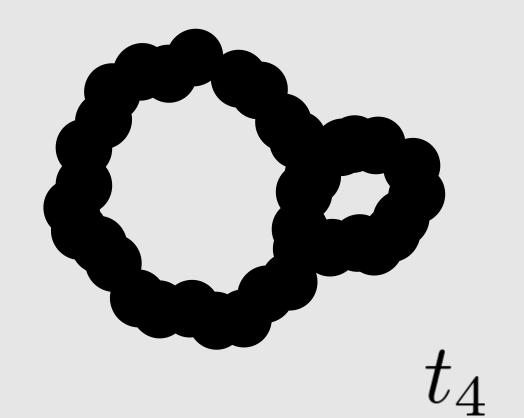


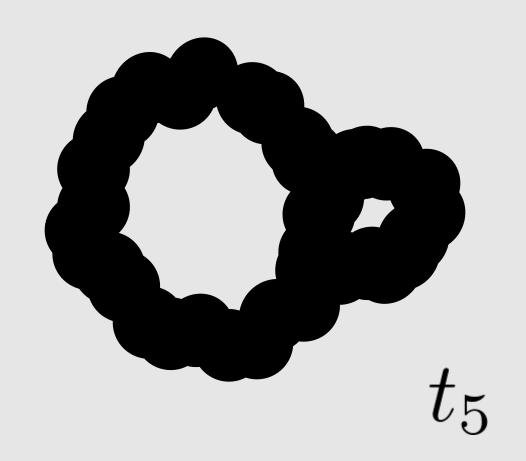
パーシステントホモロジー解析の手法

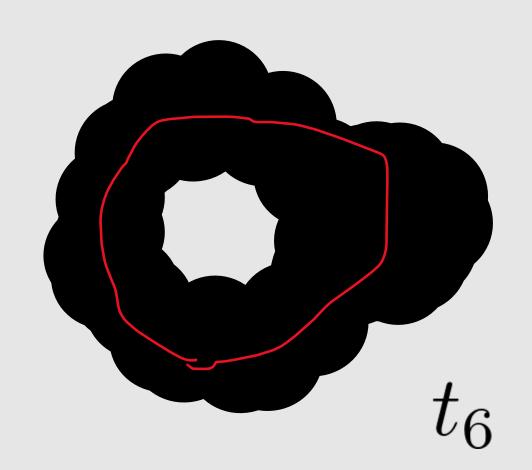


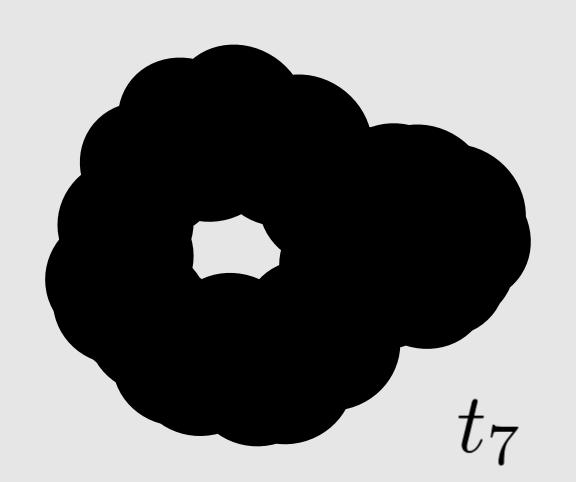
パーシステントホモロジー解析の手法

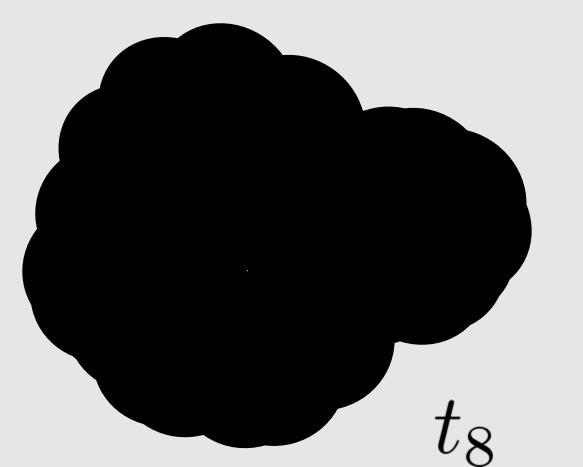


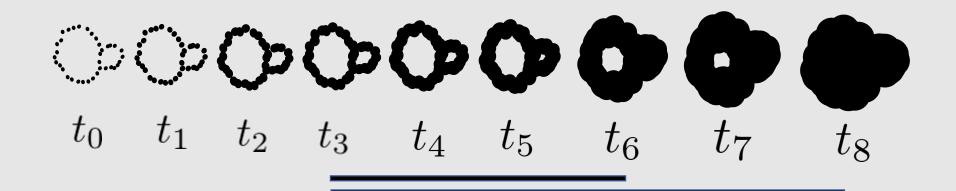


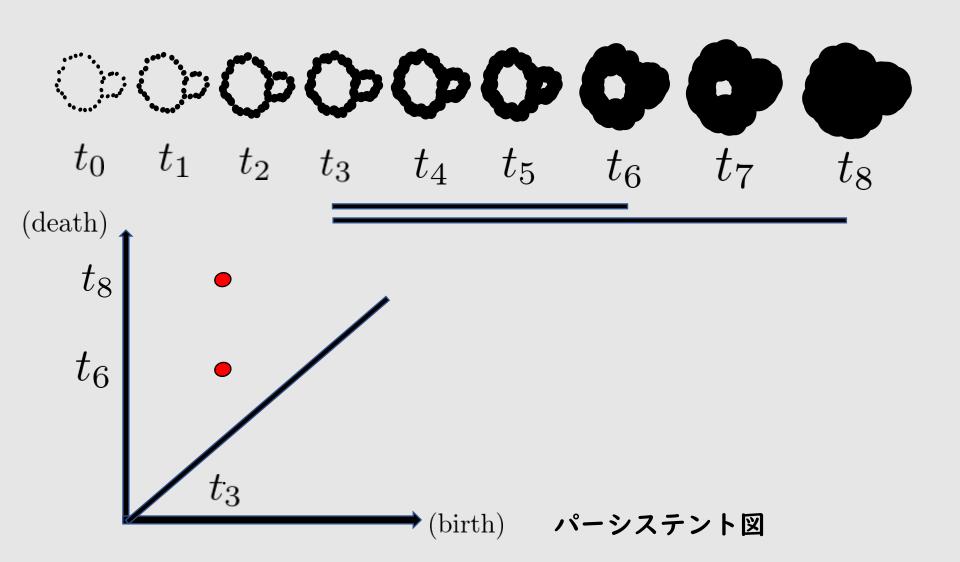


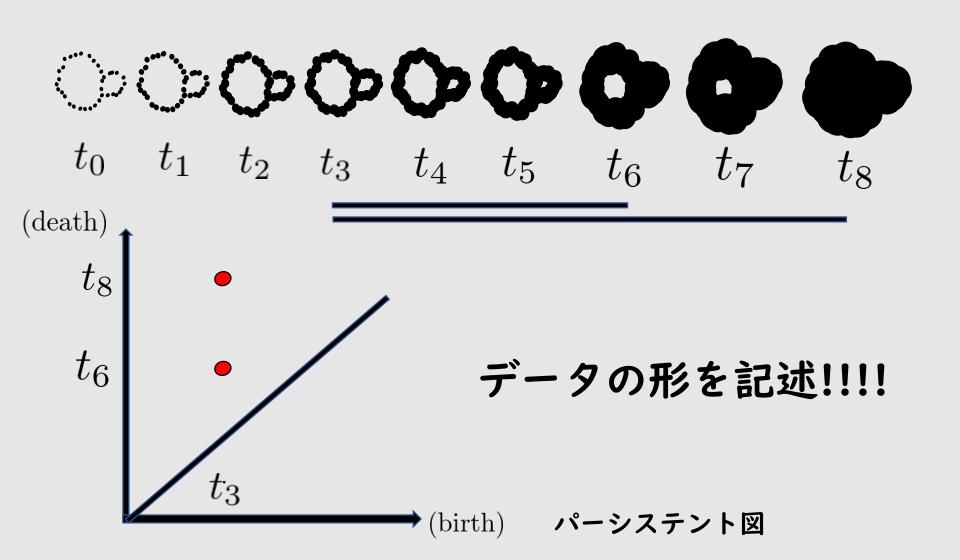












材料科学(Ex.ガラスの構造)

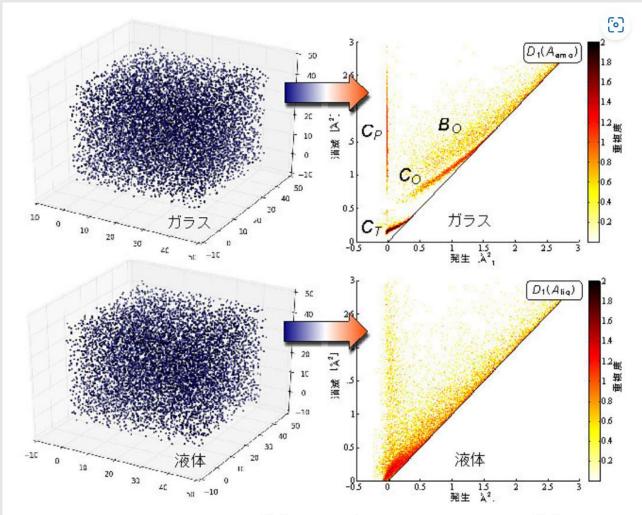


図1 SiO2の原子配置(左)とそのパーシステントホモロジー(右)

Y. Hiraoka et al. "Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology"

Proceedings of the National Academy of Sciences

#### 画像は

共同発表:ガラスの「形」を数学的 に解明~トポロジーで読み解く無秩 序の中の秩序~ (jst.go.jp)

から引用

#### 応用例

パーシステントホモロジー解析

- ・進化生物学
- ・材料科学
- ・スポーツ科学
- ・数学

#### など沢山ある

(<u>Zotero Groups > TDA-Applications</u>に掲載されているだけでも400部以上)

# 本日の発表の流れ

- ■位相的データ解析とは?
- | パラメータのパーシステンス加群
- ■2パラメータのパーシステンス加群
- ■区間表現

率直にいうと、ベクトル空間と線形写像の列

$$V_1 \to \cdots \to V_m$$

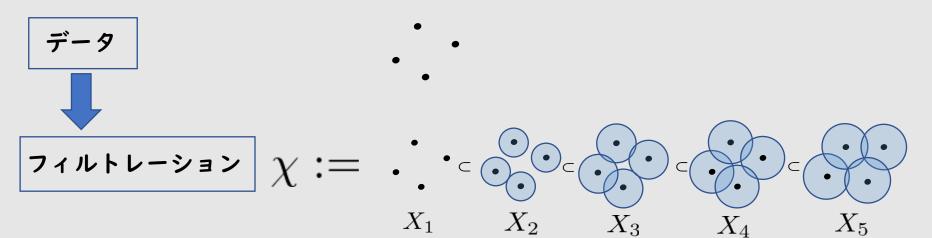
率直にいうと,ベクトル空間と線形写像の列

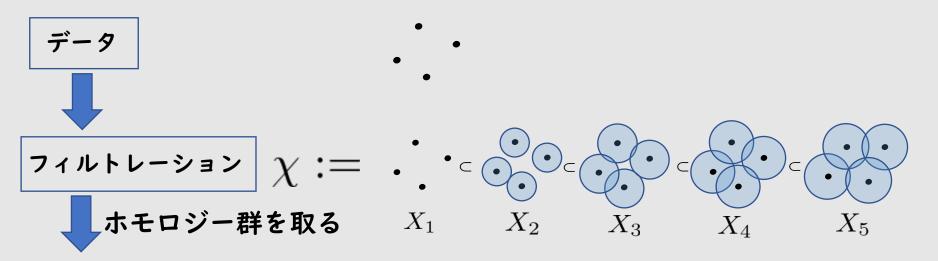
$$V_1 \to \cdots \to V_m$$

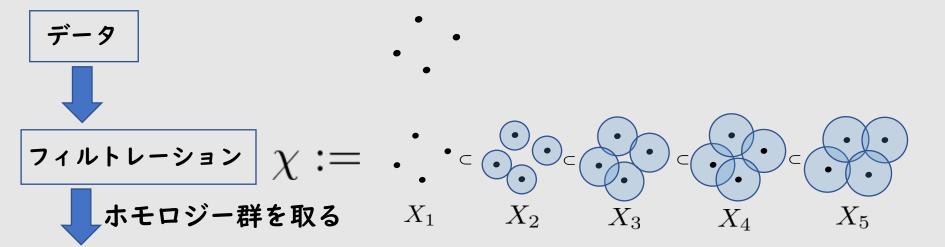
定義 全順序集合(を圏としてみたもの, Ex N) から有限次ベクトル空間の圏への関手

データ

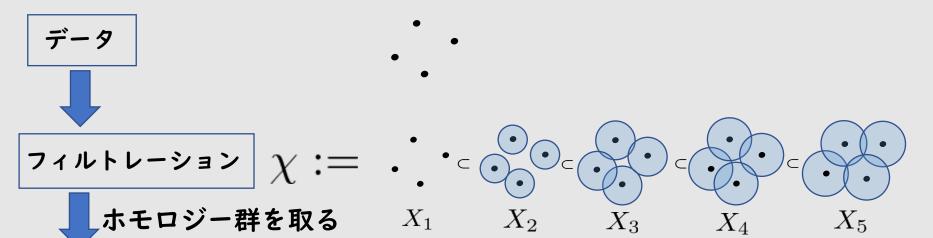








パーシステンス加群 
$$H_i(\chi):=H_i(X_1) o H_i(X_2) o H_i(X_3) o H_i(X_4) o H_i(X_5)$$

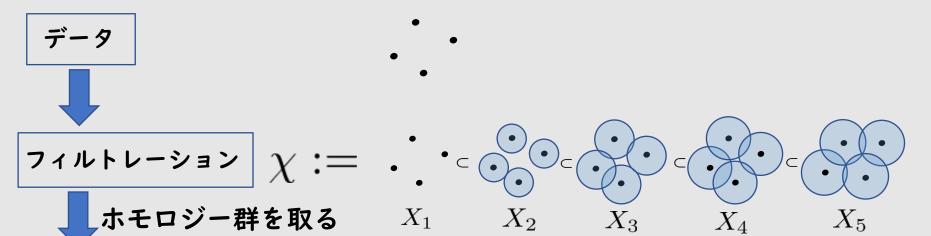


パーシステンス加群 
$$H_i(\chi):=H_i(X_1) o H_i(X_2) o H_i(X_3) o H_i(X_4) o H_i(X_5)$$



ガブリエルの定理(の一部)

パーシステンス加群

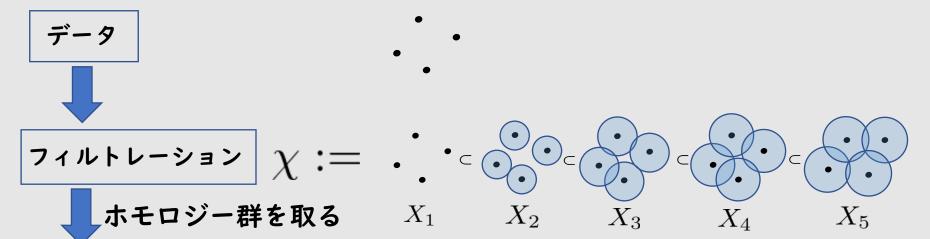


パーシステンス加群 
$$H_i(\chi):=H_i(X_1) o H_i(X_2) o H_i(X_3) o H_i(X_4) o H_i(X_5)$$



**ガブリエルの定理(の一部)** 加群の構造定理

パーシステンス加群 
$$H_i(\chi) \cong igoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$



パーシステンス加群 
$$H_i(\chi):=H_i(X_1) o H_i(X_2) o H_i(X_3) o H_i(X_4) o H_i(X_5)$$



ガブリエルの定理(の一部)

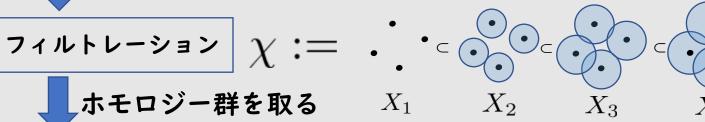
パーシステンス加群 
$$H_i(\chi) \cong igoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$

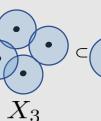
$$I[b_j, d_j] = \cdots \to 0 \to \overset{b_j}{K} \to \cdots \to \overset{d_j}{K} \to 0 \to \cdots$$





$$\chi :=$$







パーシステンス加群 
$$H_i(\chi):=H_i(X_1) o H_i(X_2) o H_i(X_3) o H_i(X_4) o H_i(X_5)$$



ガブリエルの定理(の一部)

パーシステンス加群 
$$H_i(\chi) \cong igoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$



$$I[b_j, d_j] = \cdots \to 0 \to \overset{b_j}{K} \to \cdots \to \overset{d_j}{K} \to 0 \to \cdots$$

パーシステント図

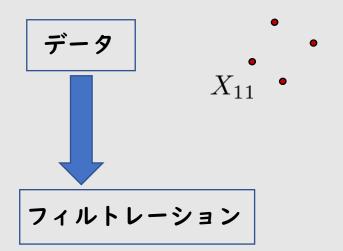
# 本日の発表の流れ

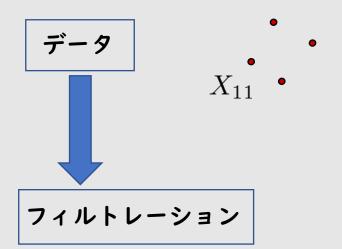
- ■位相的データ解析とは?
- | パラメータのパーシステンス加群
- ■2パラメータのパーシステンス加群
- ■区間表現

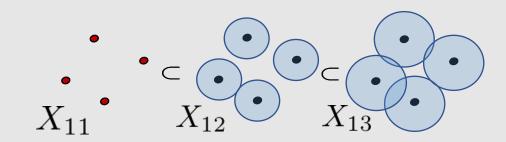
定義 2つの全順序集合 P,Q({1,···,n}, {1,···,m}) に対して、P×Q上の半順序≦を (p,q)≦(p',q')⇔ p≦p'かつ q≦q' で定める。

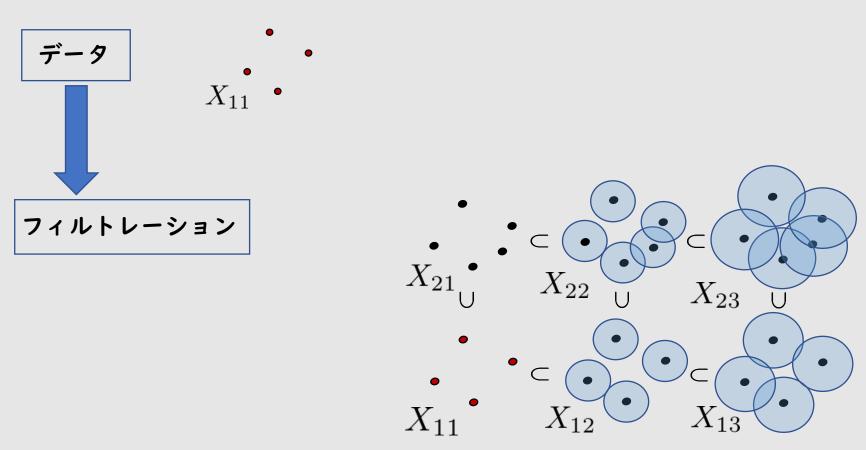
P×Qから有限次ベクトル空間の圏への関手を2パラメータのパーシステンス加群と呼ぶ.

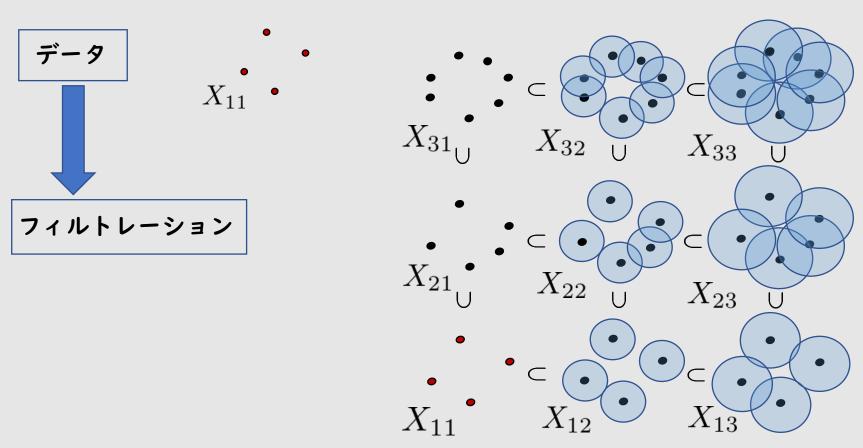
$$\vec{r}$$
  $\vec{r}$   $X_{11}$  •

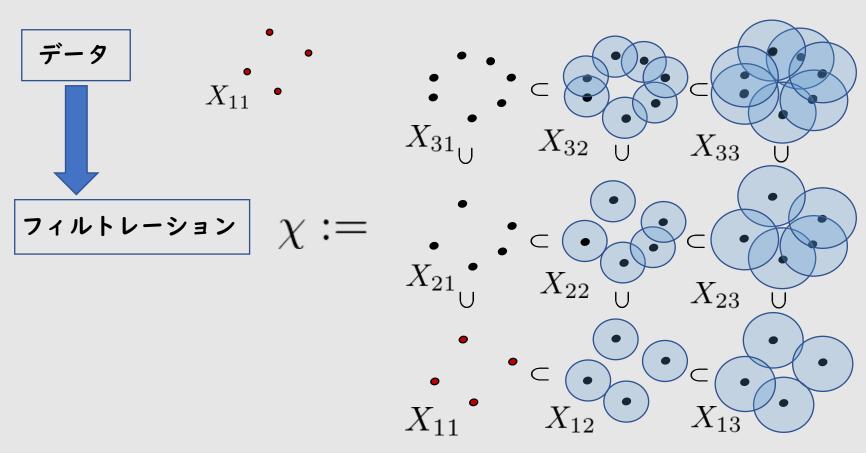


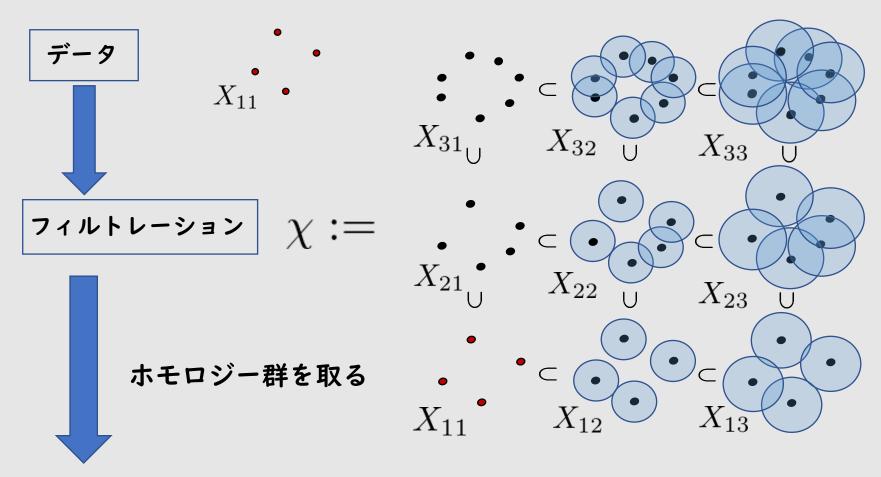


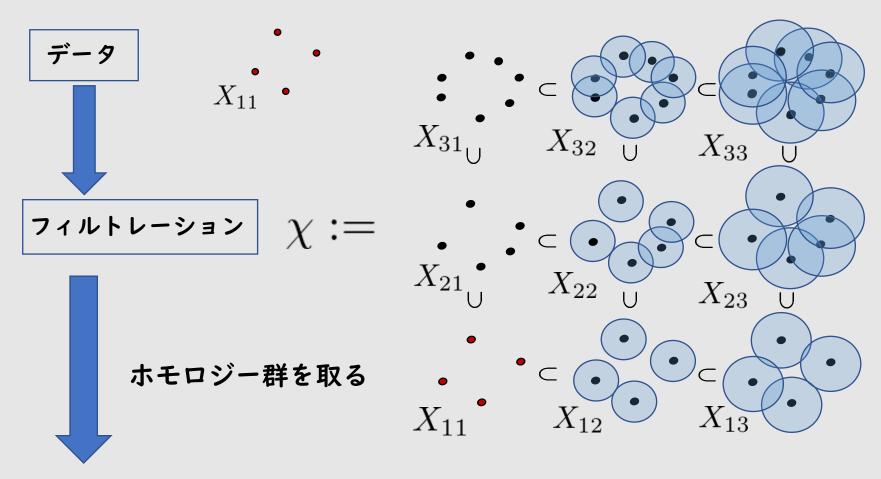






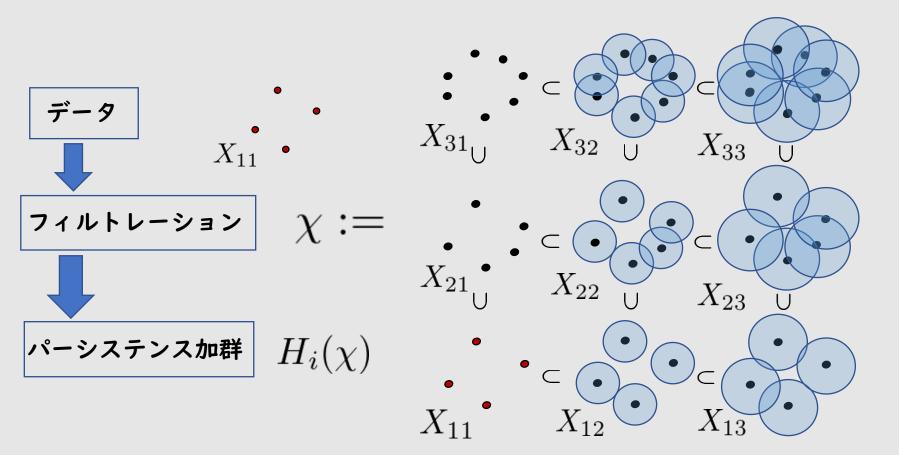


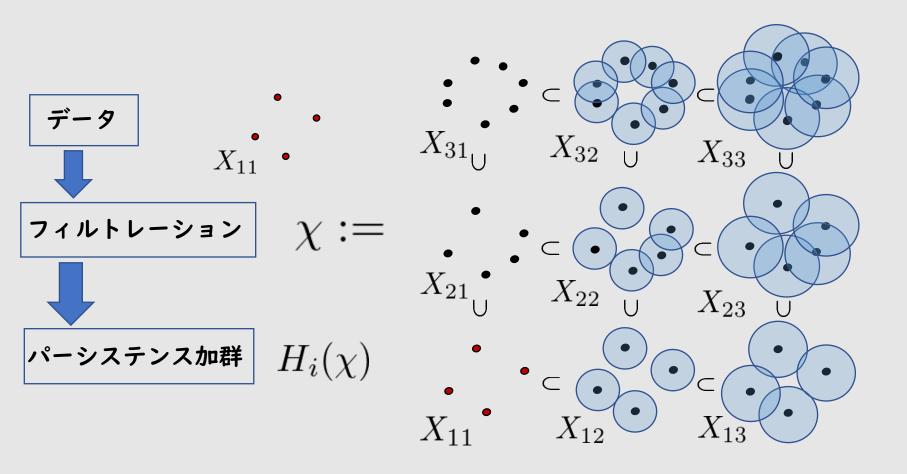




パーシステンス加群

 $H_i(\chi)$ 



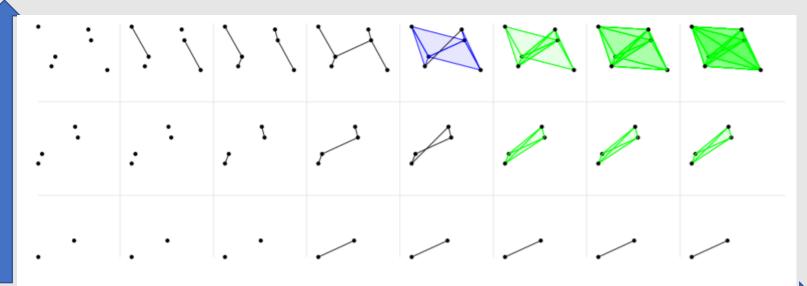


なぜこんなものを考える?

#### なぜ?

例 データに幾何以外の情報を持たせる(部分電化, 創薬の研究)

#### (部分電化)



2,3ブタンジオール

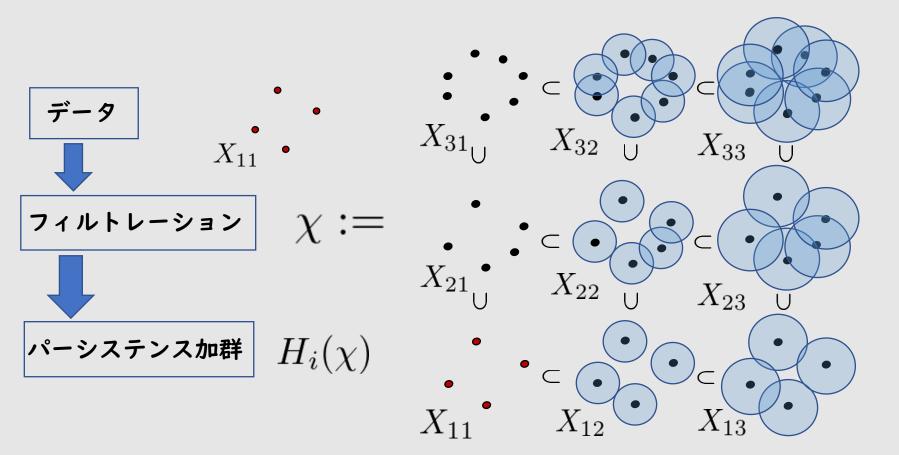
(半径)

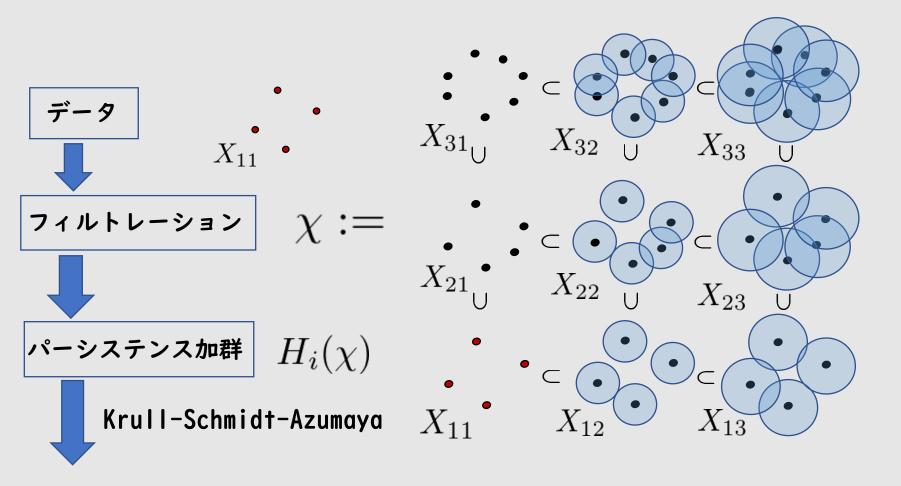
PHoS: Persistent Homology for Virtual Screening Bryn Keller, Michael Lesnick, Ted Willke

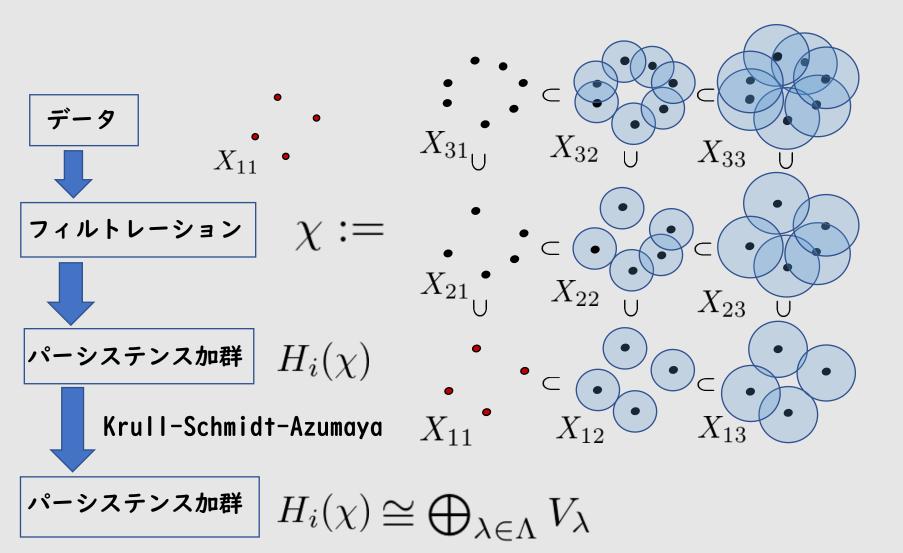
#### なぜ?

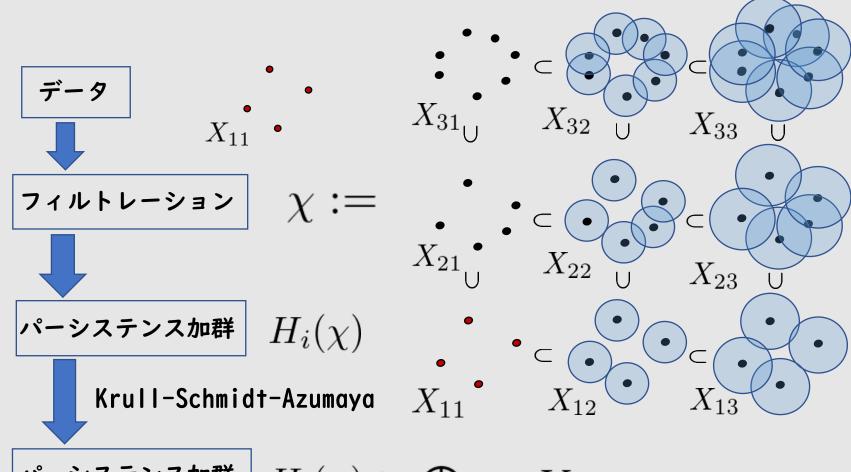
- 例 ・データに幾何以外の情報を持たせる(部分電化)
  - ・ノイズ削除、パラメータに点の密度を持たせる
  - ・画像解析? (白黒の濃淡)
  - ・曲率

1パラメータよりもデータを理解できる?







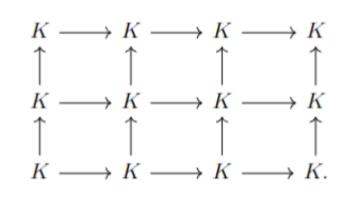


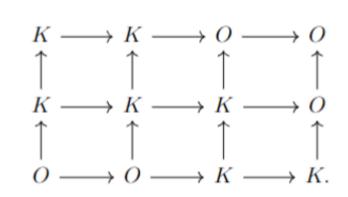
$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

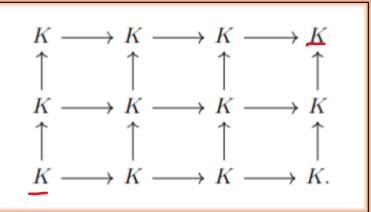


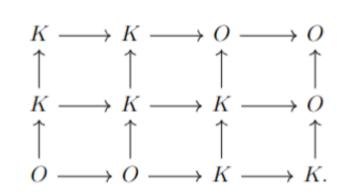
どのようにして図を得る?

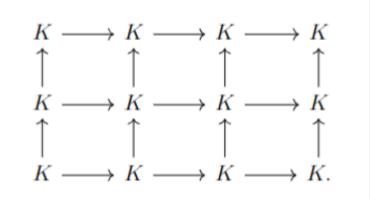
パーシステント図

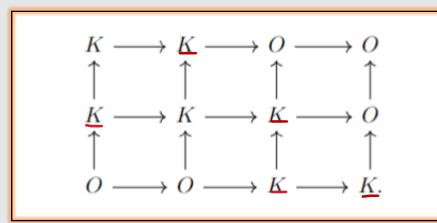












$$\begin{array}{c} K \to K \to K \\ \uparrow \qquad \uparrow \qquad \stackrel{[1\ 1]}{\uparrow} \\ K \to K \stackrel{[0]}{\to} K^2 \stackrel{[1\ 0]}{\to} K \to K \\ \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \qquad \stackrel{[1\ 0]}{\downarrow} \qquad \stackrel{[1\ 0]}{\downarrow} \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to K \stackrel{[0]}{\to} K^2 \to K^2 \to K^2 \stackrel{[0\ 1]}{\to} K \to K \\ & \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \downarrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to 0 \to K \\ \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to 0 \stackrel{[0\ 1]}{\to} \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to K \stackrel{[0]}{\to} K^2 \to K^2 \to K^2 \stackrel{[0\ 1]}{\to} K \to K \\ & \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \downarrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to K \stackrel{[0]}{\to} \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow \\ K \to K \to K \to K \end{array}$$

M. Buchet, Emerson G. Escolar "Every ID Persistence Module is a Restriction of Some Indecomposable 2D Persistence Module"

Journal of Applied and Computational Topology

١.

2.

#### 1.パーシステンス加群

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

が複雑

2.

1.パーシステンス加群

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

が複雑

(ハウメータのとき 
$$\bigoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$
 )

2.

1.パーシステンス加群

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

が複雑

(ハウメータのとき 
$$\bigoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$
 )

2.無限表現型であることが知られている(直既約加群が無限にある)

1.パーシステンス加群

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

が複雑

(ハウメータのとき 
$$\bigoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$$
 )

- 2.無限表現型であることが知られている(直既約加群が無限にある)
- パーシステント図を定めるのが難しい (従って応用が難しい)

パーシステント図を定めるのが難しい (従って応用が難しい)

| パラメータの時のようにデータを記述する 方法を探す必要がある!!!!

パーシステント図を定めるのが難しい (従って応用が難しい)

| パラメータの時のようにデータを記述する 方法を探す必要がある!!!!

区間表現を紹介します

# 本日の発表の流れ

- ■位相的データ解析とは?
- | パラメータのパーシステンス加群
- ■2パラメータのパーシステンス加群
- ■区間表現

#### 定義 P上のパーシステンス加群

Pを半順序集合とする.

Pから有限次ベクトル空間の圏への関手を P上のパーシステンス加群と呼ぶ.

## 定義 区間

Pを半順序集合、Pの部分集合 IをPの順序から定まる半順序集合とする。このとき、Iが次の2つを満たすとき、区間と呼ばれる。

Pを半順序集合、Pの部分集合 IをPの順序から定まる半順序集合とする。このとき、Iが次の2つを満たすとき、区間と呼ばれる。

l, a,bが*I*の元でa≦c≦b ならば cは*I*の元である. 2,

Pを半順序集合、Pの部分集合 TをPの順序から定まる 半順序集合とする.このとき,工が次の2つを満たすと き、区間と呼ばれる.

- I, a,bが $\mathcal{I}$ の元で $a \leq c \leq b$  ならば cは $\mathcal{I}$ の元である. 2. 任意のa.b に対して、a~cl~…~ck~bとなるよ うなcl, …, ckがI上に存在する.
- ただし、 $\lceil \sim \mid$  は  $\geq$  または  $\leq$  である.

Pを半順序集合、Pの部分集合 IをPの順序から定まる半順序集合とする。このとき、Iが次の2つを満たすとき、区間と呼ばれる。

- I, a, bがIの元で $a \le c \le b$  ならば cはIの元である。 2, 任意のa, b に対して、 $a \sim c \mid \sim \cdots \sim ck \sim b$ となるような $c \mid 1$ ,  $\cdots$ , ckがI上に存在する。
- ただし、「~」は ≧ または ≦ である.
- 2番目の条件を連結性と呼びます

Pを半順序集合、Pの部分集合 IをPの順序から定まる半順序集合とする。このとき、Iが次の2つを満たすとき、区間と呼ばれる。

- ただし、「~」は ≧ または ≦ である.

### 2番目の条件を連結性と呼びます

 $\mathbf{Ex.}\ \mathbb{N}\$ の部分集合 $\{1,\cdots,n\}$ は区間である

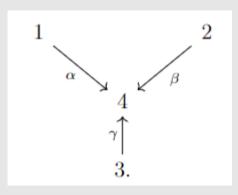
## 定義 区間表現(区間加群)

Pを半順序集合,Pの部分集合Iを区間とする. このとき、Pから有限次元ベクトル空間の圏への関手 $K_{I}$ 

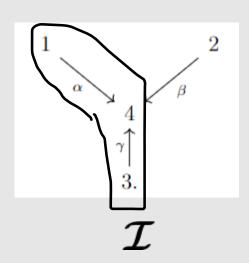
$$(K_{\mathcal{I}})(a) := \begin{cases} K & (a \in \mathcal{I}) \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases}$$
$$(K_{\mathcal{I}})(a \to b) := \begin{cases} id_K & (a, b \in \mathcal{I}) \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

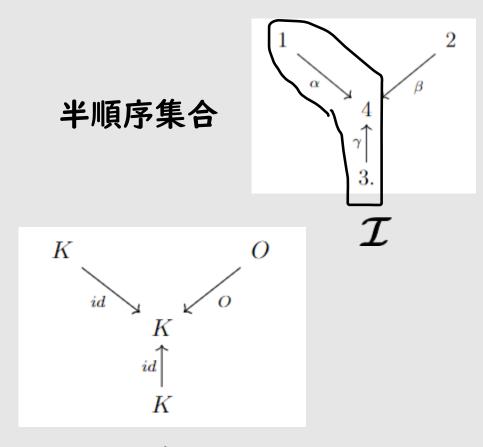
に同型なものを区間表現と呼ぶ。

半順序集合



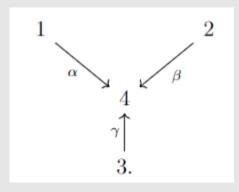
半順序集合

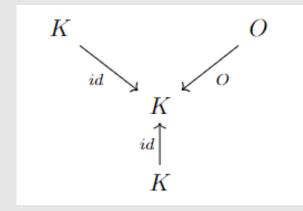




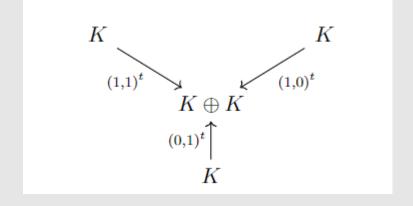
区間表現 $K_{\mathcal{I}}$ 

半順序集合





区間表現



区間表現でない

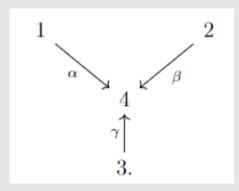
定義 区間分解可能

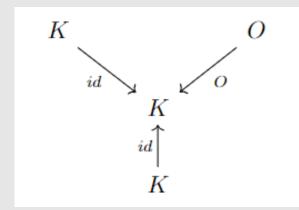
Pを半順序集合,VをP上のパーシステンス加群.

 $m{V}\cong igoplus_{\lambda\in\Lambda} V_\lambda$  において各  $V_\lambda$  が区間表現であるならば $m{V}$ は区間分解可能という

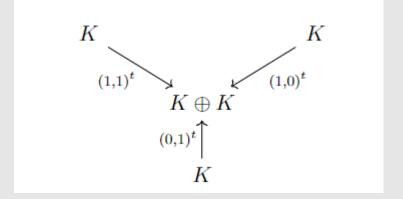
## 例 区間表現

半順序集合





区間表現



区間表現でない 区間分解不可能

## ガブリエルの定理(の一部)

任意のIパラメータのパーシステンス加群は 区間分解可能

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{j=1}^n (I[b_j, d_j])$$
  
 $I[b_j, d_j] = \cdots \to 0 \to K \to \cdots \to K \to 0 \to \cdots$ 

ガブリエルの定理(の一部)

任意のIパラメータのパーシステンス加群は 区間分解可能

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{j=1}^n (I[b_j, d_j])$$
  
 $I[b_j, d_j] = \cdots \to 0 \to K \to \cdots \to K \to 0 \to \cdots$ 

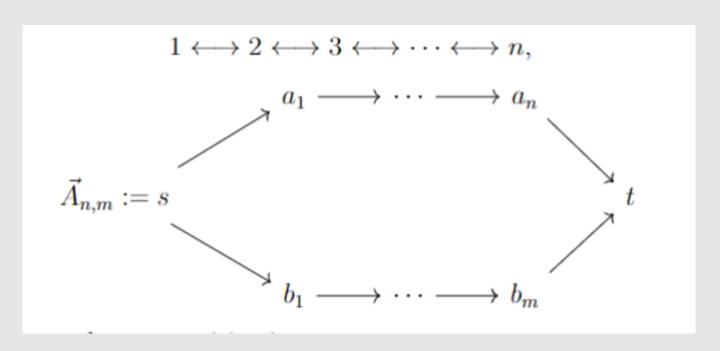
どんなフィルトレーション(半順序集合)を考えればパーシステンス加群は常に区間分解可能なのか???

(簡単なパーシステンス加群しかでないならば応用 しやすそう)

## 結果(Pは連結な半順序集合とする)

任意のP上のパーシステンス加群が区間分解可能である。
⇔
Pが以下の半順序集合で表される。

ただし、←→はどちらかの向きを任意に選ぶ.



1. どのような応用があたえることができ るのか?

- 1. どのような応用があたえることができ るのか?
- 2.2パラメータのパーシステンス加群との関係は?

- 1. どのような応用があたえることができ るのか?
- 2.2パラメータのパーシステンス加群との関係は?

## まとめ

マルチフィルトレーションから構成されるマルチパラメータのパーシステンス加群は複雑



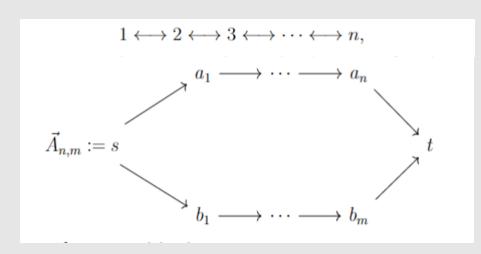
応用が難しい



単純なパーシステンス加群(区間表現) しかでないようなフィルトレーション を考えたい



フィルトレーションを決定した!



1パラメータ

2パラメータ

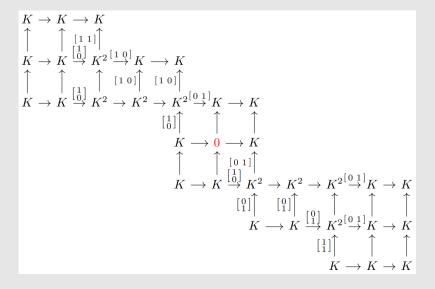


 $\bigoplus_{j=1}^n (I[b_j,d_j])$  パーシステンス加群

 $\bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$ 

$$b_j d_j$$

$$I[b_j, d_j] = \cdots \to 0 \to K \to \cdots \to K \to 0 \to \cdots$$



パーシステント図

パーシステント図





フィルトレーション



パーシステンス加群



Krull-Schmidt-Azumaya

パーシステンス加群

$$H_i(\chi) \cong \bigoplus_{\lambda \in \Lambda} V_{\lambda}$$

ではないか?

ここのフィルトレーションをうまくとれば

パーシステンス加群がそんなに複雑にならないの



パーシステント図

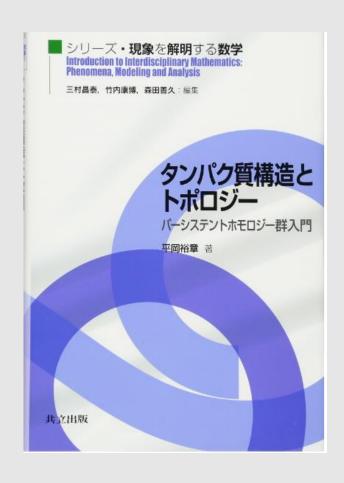
# 参考文献

- Herbert Edelsbrunner, David Letscher, and Afra Zomorodian "Topological Persistence and Simplification"
- 平岡裕章 "タンパク質構造とトポロジー パーシステントホモロジー群入門"
- Gunner Carlsson, Afra Zomorodian "The Theory of Multidimensional Persistence"
- Michael Lesnick "Lecture notes for Math 840: Multiparameter Persistence"
- Bryn Keller, Michael Lesnick, Ted Willke "PHoS: Persistent Homology for Virtual Screening"
- Paul Balmer "Tensor triangular geometry"
- Magnus Bakke Botnan and Michael Lesnick "An Introduction to Multiparameter Persistence"
- The RIVET Developers. Rivet, version I.I. https://github.com/rivetTDA/, 2020.

# 参考文献

- Benjamin Blanchette, Thomas Brüstle, Eric J. Hanson, "Homological approximations in persistence theory"
- Aaron Adcock, Erik Carlsson, Gunnar Carlsson "The Ring of Algebraic Functions on Persistence Bar Codes"
- Sara Kalisnik, "Tropical Coordinates on the Space of Persistence Barcodes"
- Jacek Skryzalin, Gunner Carlsson, "NUMERIC INVARIANTS FROM MULTIDIMENSIONAL PERSISTENCE
- Gunnar Carlsson "Topological pattern recognition for point cloud data"
- Woojin Kim, Samantha Moore, "The Generalized Persistence Diagram Encodes the Bigraded Betti Numbers"
- Heather A. Harrington, Nina Otter, Hal Schenck, Ulrike Tillmann "Stratifying multiparameter persistent homology"
- M. Buchet, E. G. Escolar "Every ID Persistence Module is a Restriction of Some Indecomposable 2D Persistence Module"

タンパク質構造とトポロジー 1パラメータのパーシステンス加群の代わりに次数付き多項式環での構造定理を用いたデータの記述方法が書かれている



## パーシステンス加群と環の理論の関係

可換環論(代数幾何)の視点から研究もされている

半順序集合  $(\mathbb{N}^n,\leq)$  を次のように定める。

$$(a_1,...,a_n) \leq (b_1,...,b_n) : \iff a_i \leq b_i \text{ for all } i$$

 $\operatorname{Fun}(\mathbb{N}^n,\operatorname{Vect})\cong(n\operatorname{-Mod})$ 

Elements of the Representation Theory of Associative Algebras: Volume 1: クイバーの表現論の本パーシステンス加群とpath algebra上の加群の関係も述べられているガブリエルの定理など

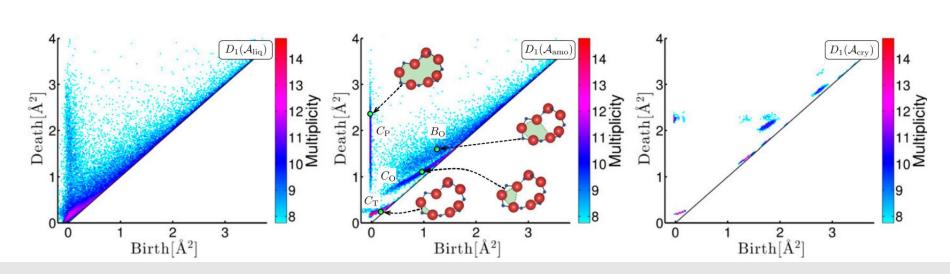
Elements of the Representation Theory of Associative Algebras

1: Techniques of Representation Theory

Ibrahim Assem Daniel Simson Andrzej Skowroński

# 位相的データ解析とは?

## 材料科学(Ex.ガラスの構造)



Y. Hiraoka et al. "Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology" Proceedings of the National Academy of Sciences