位相的データ解析への統計的機械学習アプローチ

福水　健次　　数理・推論研究系　教授　（東北大・AIMR・平岡裕章先生，草野元紀氏との共同研究）

■ 位相的データ解析 (TDA)

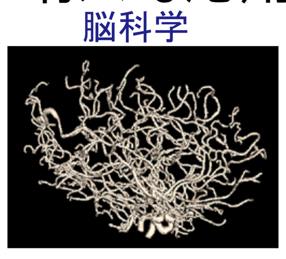
データの位相的・幾何的情報を抽出するための新しい方法論

キーテクノロジー ＝ パーシステントホモロジー

(Edelsbrunner et al 2002; Carlsson 2005)

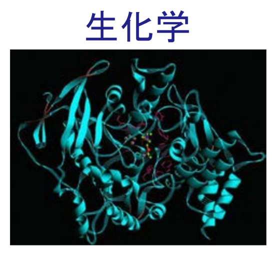
- 様々な応用

脳科学



脳動脈の木構造
年齢／性別による構造の違い
(Bendich et al 2014)

生化学

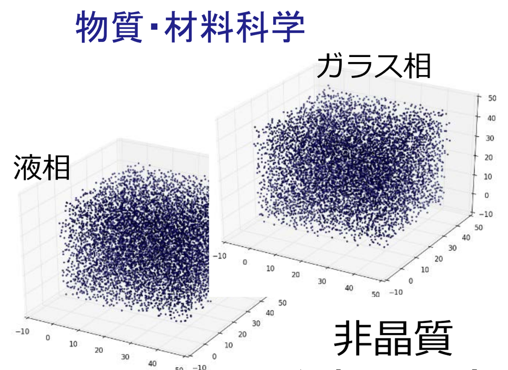


タンパク質の構造変化
構造による機能の違い
(Kovacev-Nikolic et al 2015)

コンピュータビジョン

形状の記述
(Freedman & Chen 2009)

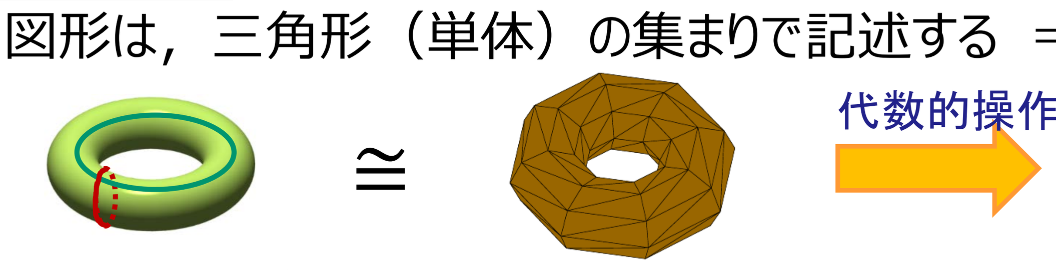
物質・材料科学



非晶質
(Nakamura et al. *Nanotechnology*, 2015)

- ホモロジー群　　位相的不変量

図形は，三角形（単体）の集まりで記述する ⇒ 代数的な扱い．



：1次元ホモロジー群の生成元

点，線，三角形の集まりと
そのつながり具合を記述

- ホモロジー群：位相的不変量として「穴」を群として表す．
  - ０次元＝連結成分　$H^0(X)$
  - １次元＝リング　$H^1(X)$
  - ２次元＝空洞 (cavity) $H^2(X)$　・・・

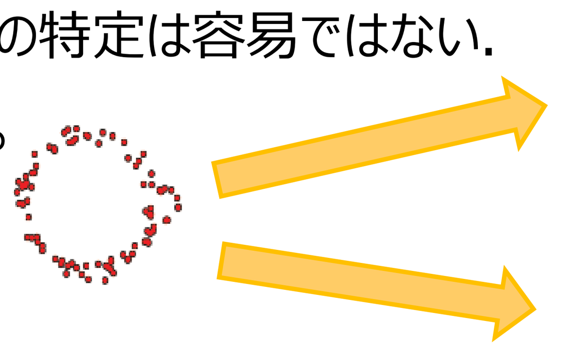
ホモロジー群の生成元：連続的に移り合えない「穴」の代表元

- 統計的推論における位相情報の利用

有限データからの位相の特定は容易ではない．

半径 ε の球(ε-ball)
により真の構造を
捉えよう

ノイズのある
有限個の
サンプル

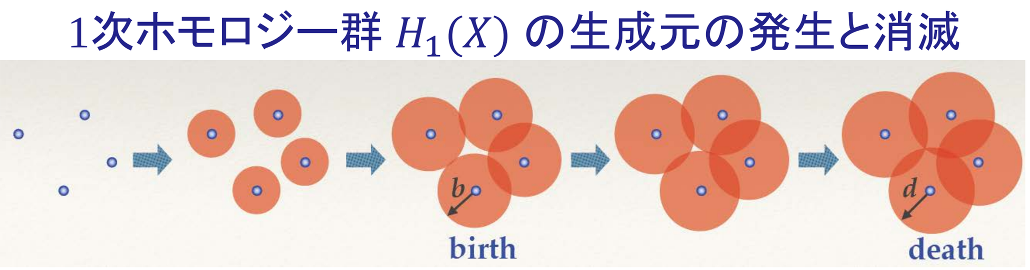


小さい ε
→ 不連続な集合

大きい ε
→ 小さいリングは
つぶれてしまう

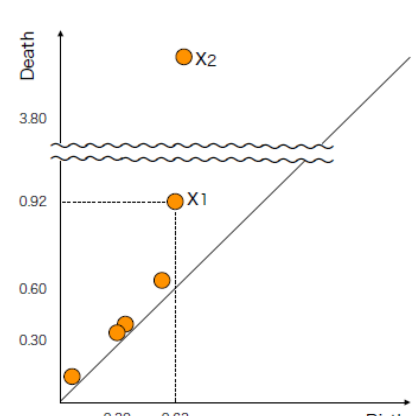
- パーシステントホモロジー　　すべての ε を同時に考える．
  - 点集合　$X = \{x_i\}_{i=1}^m \subset \mathbf{R}^d$，　$X_\varepsilon := \cup_{i=1}^m B_\varepsilon(x_i)$
  - 位相空間の増大列　$\mathbb{X}$：$X_{\varepsilon_1} \subset X_{\varepsilon_1} \subset \cdots \subset X_{\varepsilon_L}$　$(\varepsilon_1 < \cdots < \varepsilon_L)$
  - 異なるパラメータ $\varepsilon_i < \varepsilon_j$ に対し，ホモロジー生成元の関係づけが可能（新たに発生，継続，消滅）．　(厳密な定義はCarlsson 2009; 平岡2013)
  - 各生成元の発生と消滅時刻が定まる．

1次ホモロジー群 $H_1(X)$ の生成元の発生と消滅



- パーシステント図（PD, 生成，消滅の表現）

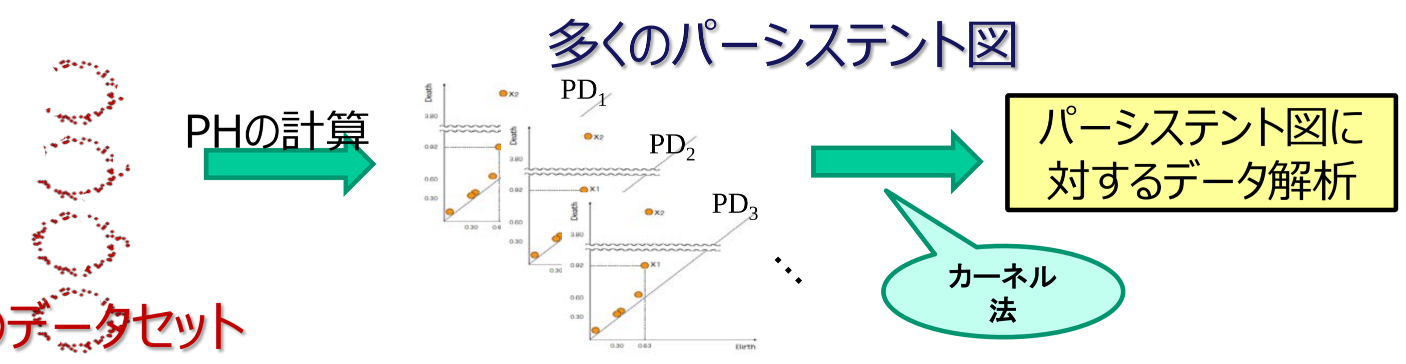
各PH生成元の発生(b)，消滅(d)時刻を，
2Dグラフ上の点 (b,d) で表したもの．



複雑な幾何的データの特徴ベクトル／
記述子として使おう！

■ カーネル法によるパーシステント図のベクトル化

- PDのデータ解析



- カーネル法によるベクトル化

PD ＝ 離散測度と思う　$\mu_D := \sum_{x_i \in D} \delta_{x_i}$　　$D = \{x_i\}$ 生成・消滅時刻

PDのRKHSへの埋め込み

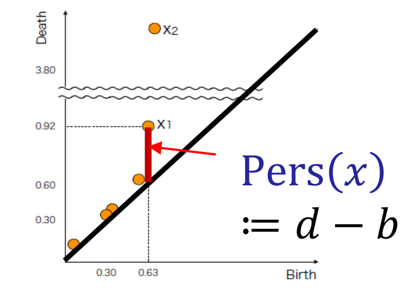
$\mathcal{E}_k$:　$\mu_D \mapsto \sum_i k(\cdot, x_i)$　$\in H_k$,　　e.g. $\sum_i \delta_{x_i} \mapsto \sum_i \exp\left(-\frac{\|y-x_i\|^2}{2\sigma^2}\right)$

- Persistence Weighted Gaussian Kernel

アイデア：対角線に近い生成元はノイズの可能性が高い→重みを小さく

$$k_{PWG}(x,y) = w(x)w(y)\exp\left(-\frac{\|y-x\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

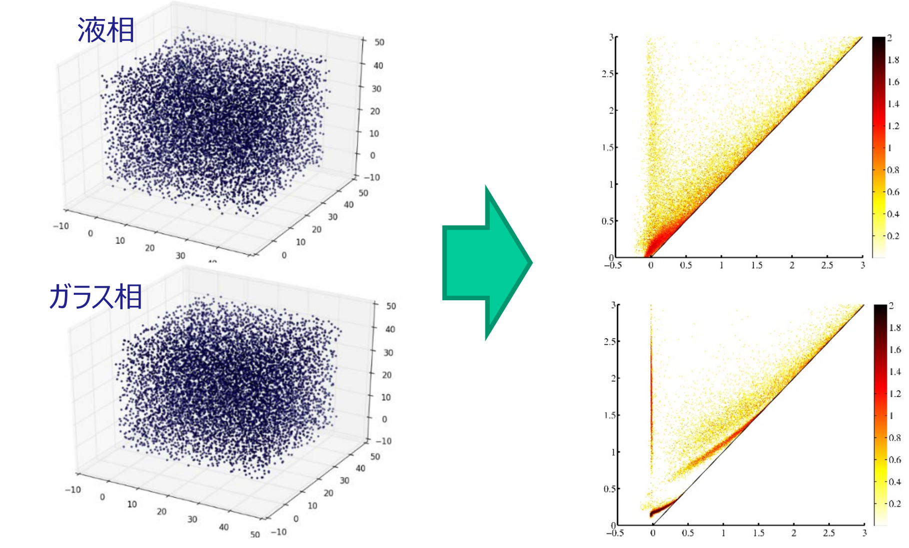
- 重み関数 $w(x) := \arctan(C\mathrm{Pers}(x)^p)$　$(C, p > 0)$
- ベクトル化により既存の統計的手法が利用可能
- 安定性定理が成立(Kusano et al ICML2016) 点集合がHausdorff距離で微小に変化したとき，そのベクトル表現もRKHSの距離で微小にしか動かない．



■ 応用

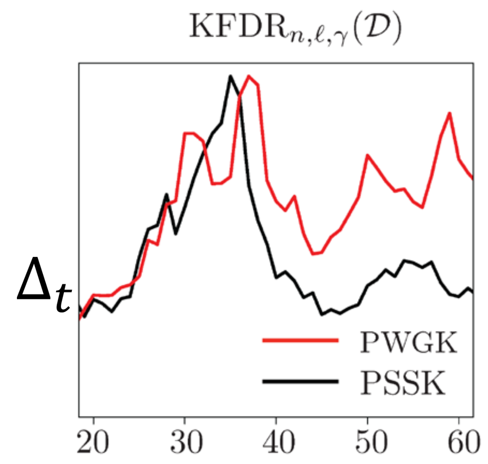
- シリカ(SiO2)の液相-ガラス相転移
  - 目的：液相からガラス相に転移する温度を特定したい．
  - データ：SiO2分子動力学（MD）シミュレーション
    (Nakamura et al 2016 PNAS)

- 温度を変えて80セットの3次元原子配置データ（スナップショット）を取得
- 原子の3次元配置データから，PDを計算．

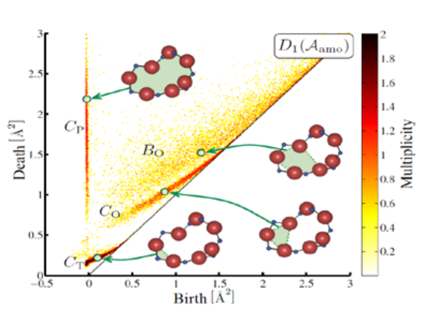


- 提案法：PDのベクトル化に対する変化点検出問題として転移点を推定

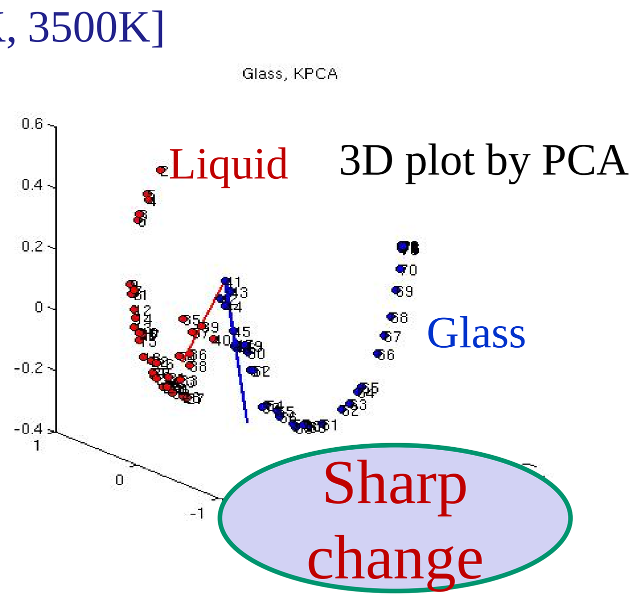
変化点検出



検出された変化点 = 3100K
物理的方法: [2000K, 3500K]



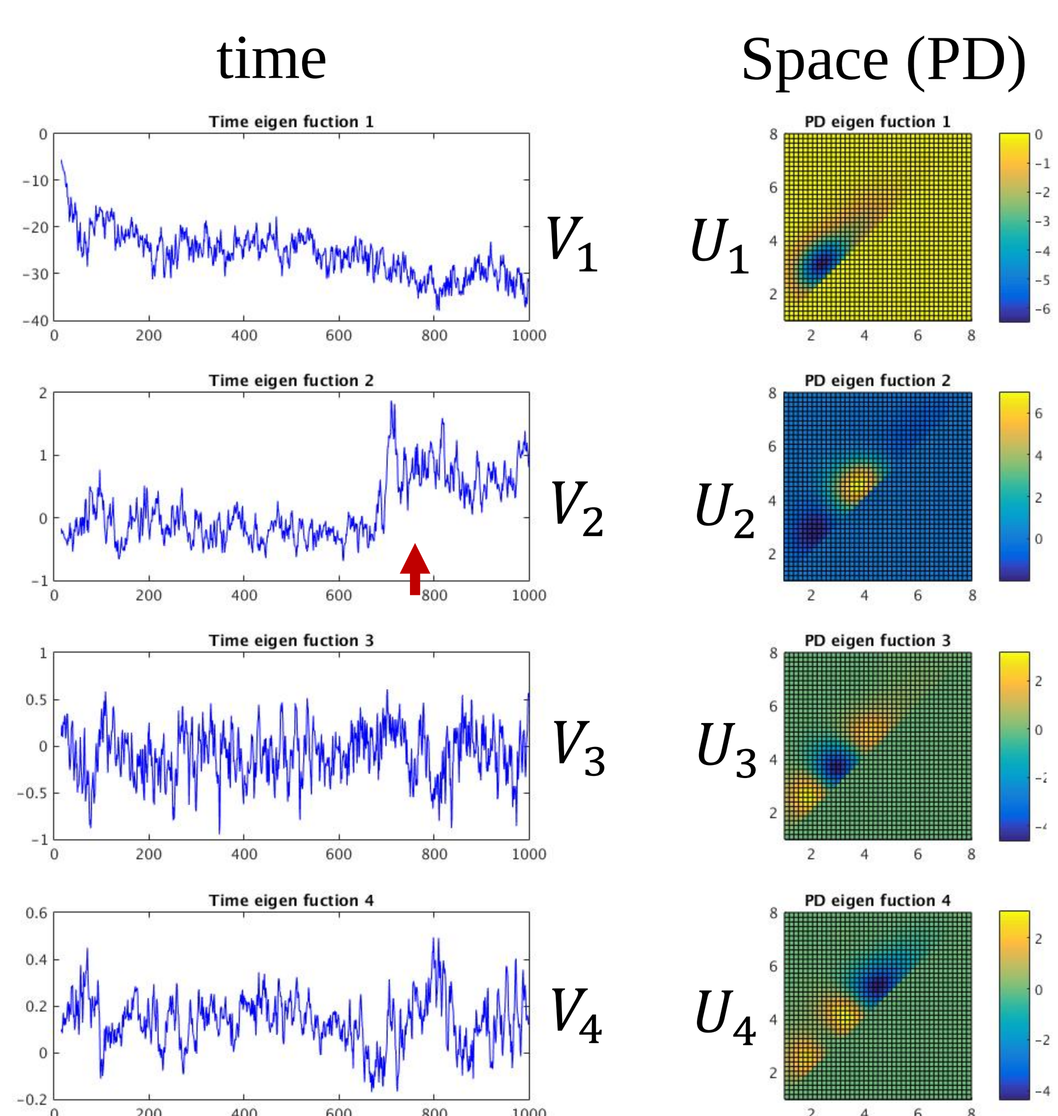
(Nakamura et al *Nanotechnology* 2015



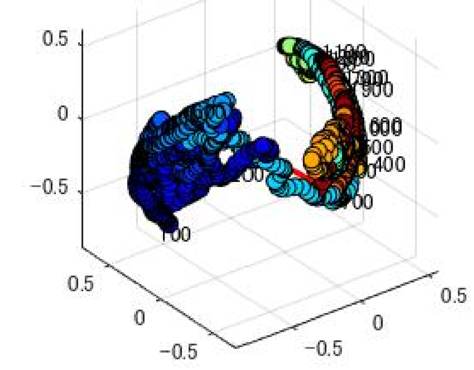
- 時系列解析
  - タンパク質（1BDD）のMDシミュレーションデータ（岐阜大・一宮尚志氏提供）
    60 Cα．初期状態は伸ばした状態．
  - カーネル法によるベクトル時系列をSVDによりモード分解

$(\mu_1, \ldots, \mu_t) = U\Gamma V^T$

U：空間固有ベクトル．　　V：時間固有ベクトル



カーネル主成分分析による
３次元プロット



変化点 t ＝ 670-700

参考文献 Kusano, G., Fukumizu, K., Hiraoka, Y. (2018) Kernel method for persistence diagrams via kernel embedding and weight factor. *Journal of Machine Learning Research*