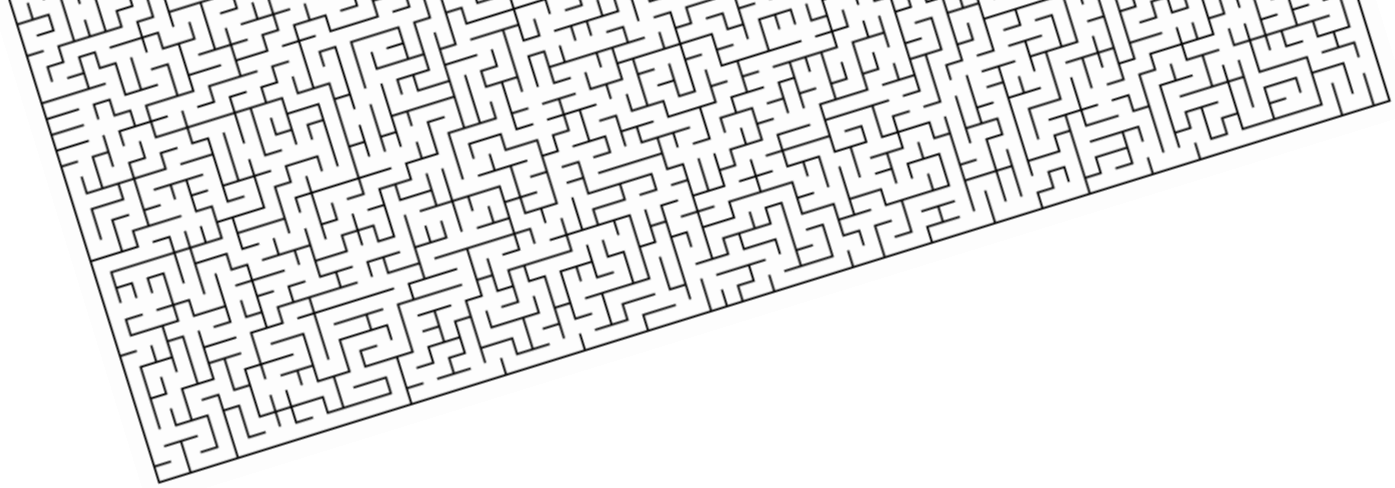
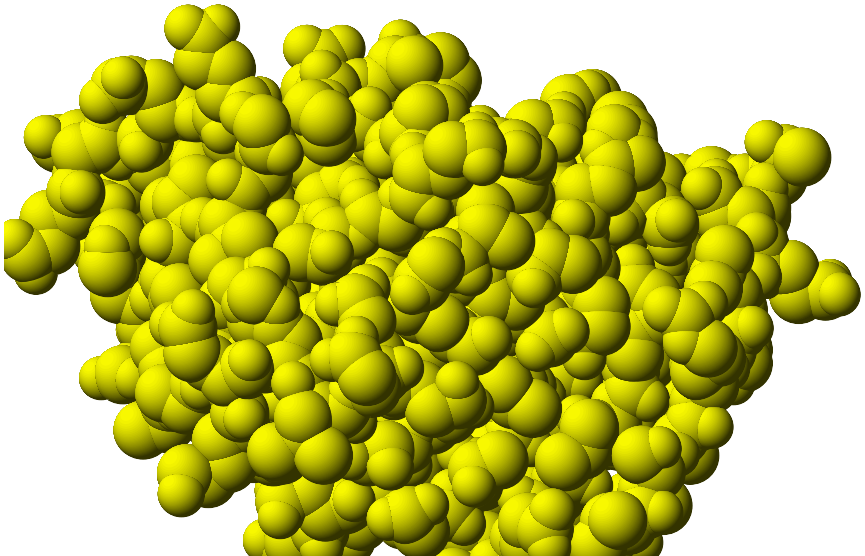
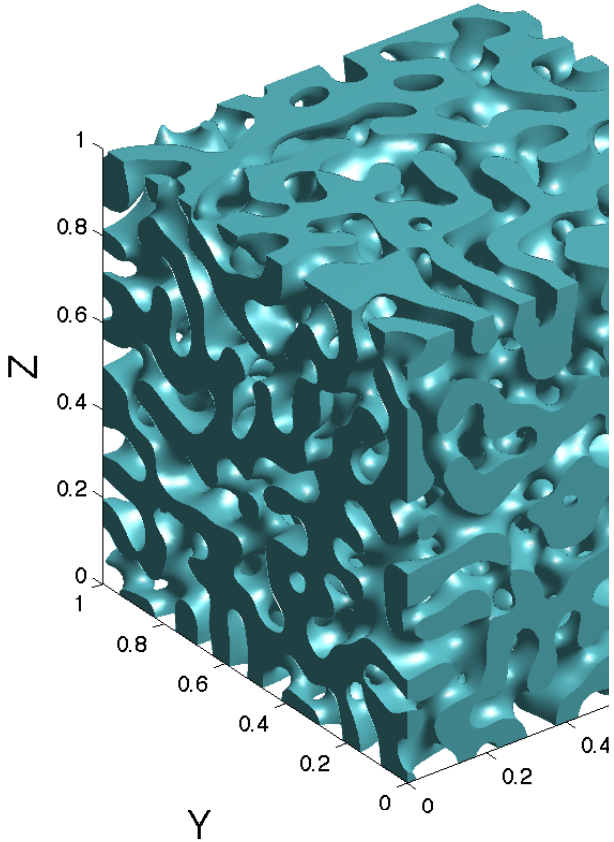


柔らかいトポロジーの穴から眺める世界

平岡裕章（東北大学）



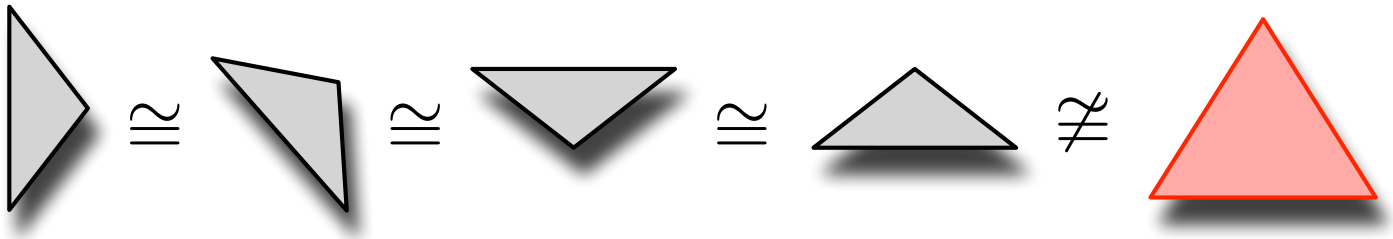


1. トポロジーと穴

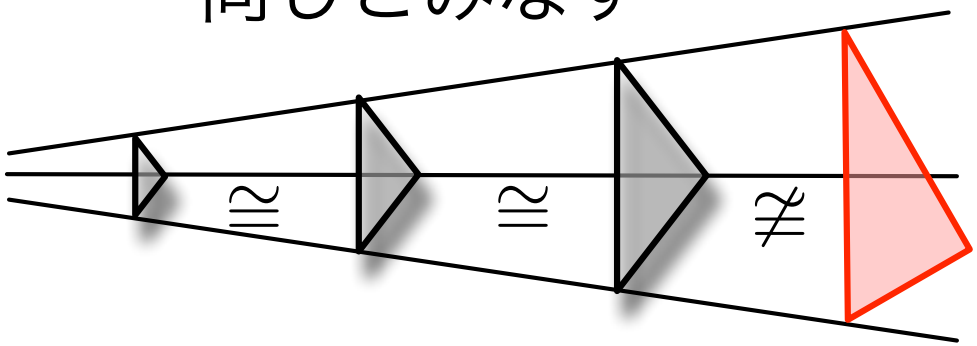
幾何学：ものの形を研究する数学の分野

図形の分類の仕方は基準の定め方によって様々

★ 基準「合同」：図形が重なり合うときは同じとみなす

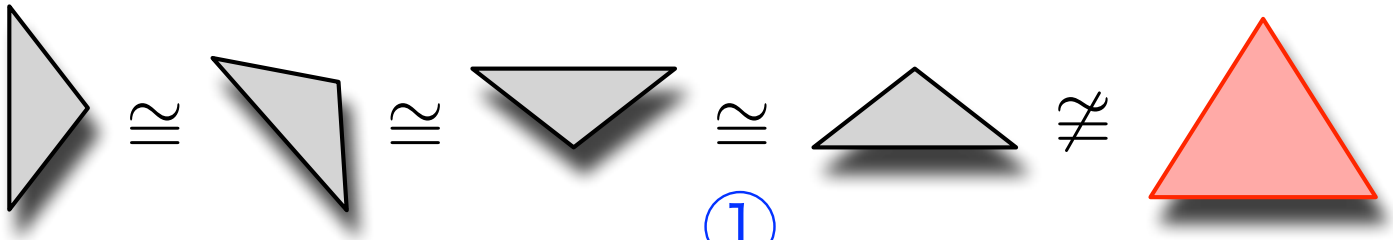


★ 基準「相似」：スケールをかえて重なり合う図形は同じとみなす



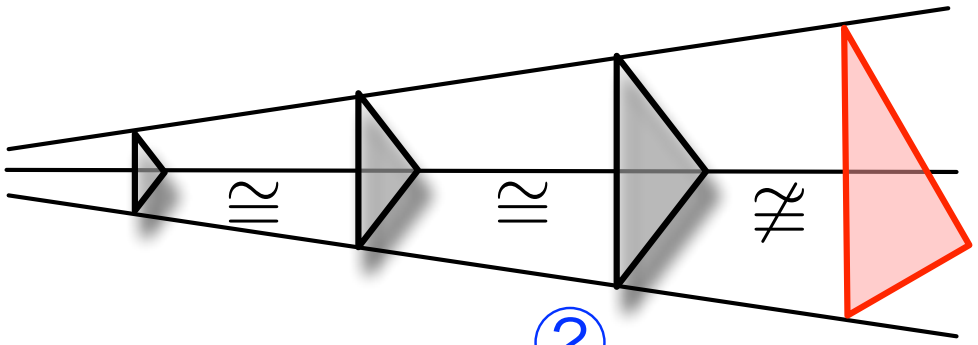
代数的（定量的）には，，，

★ 合同：図形が重なり合うときは同じとみなす



⟷ ３辺の長さが同じ①３角形は同じと見なす

★ 相似：スケールをかえて重なり合う図形は同じとみなす



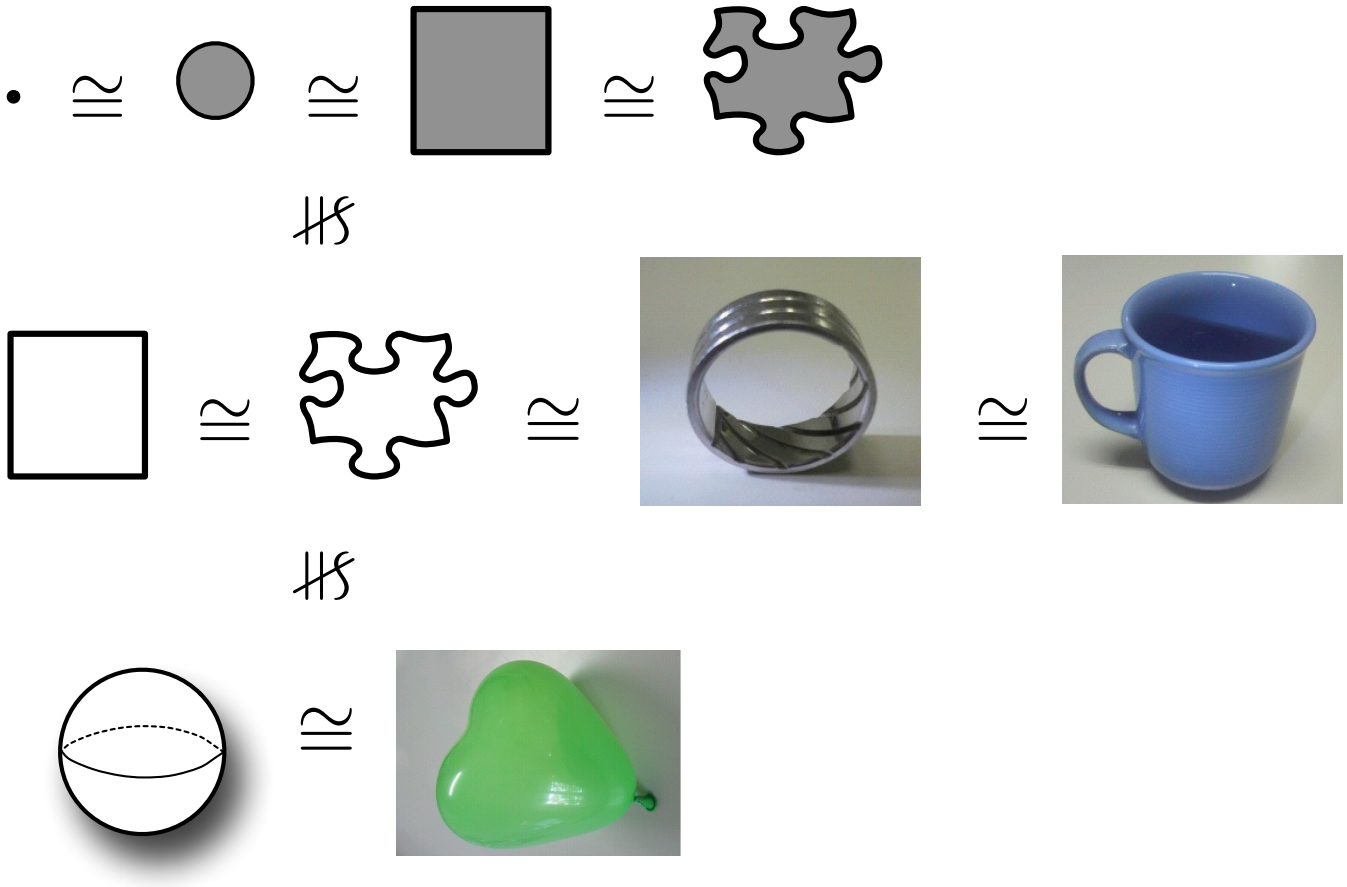
⟷ ２組の角が同じ②３角形は同じと見なす

- ①や②は代数的不変量とよばれるものの例
- それぞれの代数的不変量を調べることで図形の分類が可能

トポロジー：幾何学の１分野でその基準は

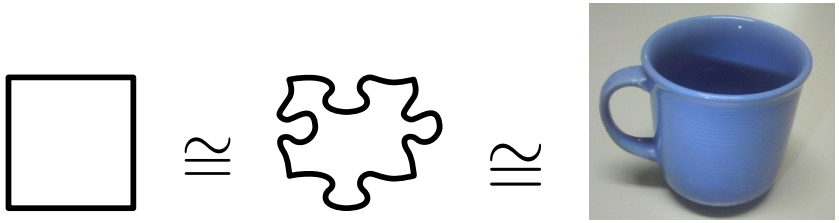
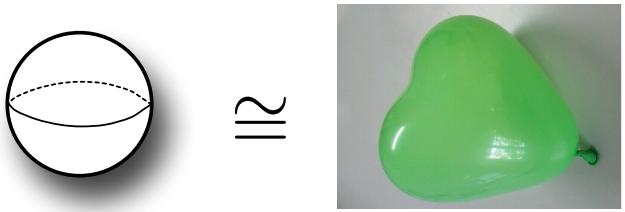
「切り貼りせずに連続的に変形させて重なり合う図形は同じもの」

で与えられます



トポロジー ＝ 切り貼りしない連続変形はOK！

疑問：何でもありって感じの世界だけど，そんな世界で不変な量ってあるの？

	連結成分	わっか	空洞
	1	0	0
	2	0	0
	1	1	0
	1	0	1

連結成分，わっか，空洞の数は不変量だ！

★ 連結成分，わっか，空洞：ものつながり方を表す量

- ０次元の「穴」：連結成分
- １次元の「穴」：わっか
- ２次元の「穴」：空洞

→ トポロジー：連続変形で重なり合う図形の穴の数は不変

★ 不満：あまりにも「穴」の定義があいまいだ、、、
正確な定義 ＝ 代数化

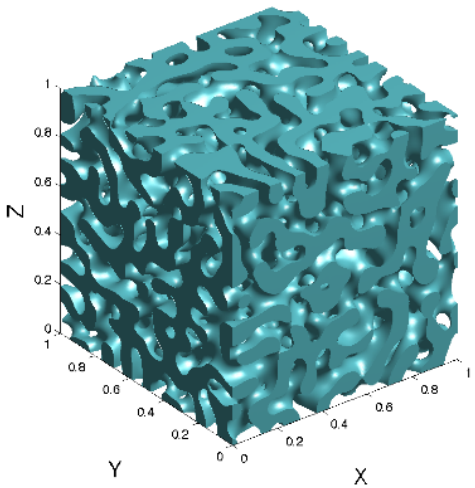
→ ホモロジー群

★ ホモロジー群とは

幾何学的対象Xに対して

$$H_0(X) = \mathbf{R}^{k_0} \qquad k_0：\text{連結成分の数}$$
$$H_1(X) = \mathbf{R}^{k_1} \qquad k_1：\text{わっかの数}$$
$$H_2(X) = \mathbf{R}^{k_2} \qquad k_2：\text{空洞の数}$$
$$\vdots$$
$$H_q(X) = \mathbf{R}^{k_q} \qquad k_q：\text{q次元の「穴」の数}$$

を表す，代数的な道具（現代数学に必須！）



$H_0($ $) = \mathbf{R}$

$H_1($ $) = \mathbf{R}^{847}$

$H_2($ $) = 0$

$H_0($ 西浦先生 $) = \mathbf{R}^{10}$

$H_1($ 西浦先生 $) = \mathbf{R}^{36}$

2．穴を定義する

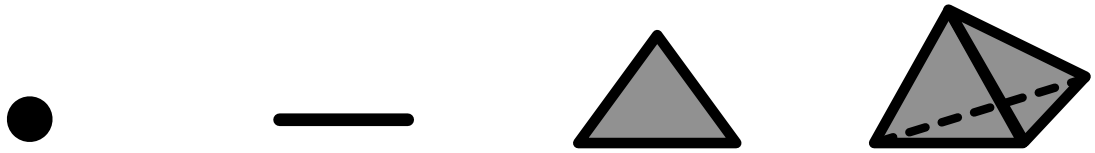
「連結成分，わっか，空洞」を表すホモロジー群を
代数的に定義してみよう

★ ホモロジー群の導入の流れ

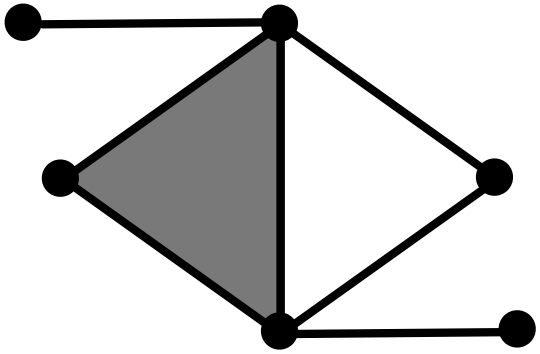
$$\begin{tikzcd}
\text{多面体} \arrow[r, "\text{代数化}"] & \text{鎖複体} \arrow[r, "\text{穴の情報抽出}"] & \text{ホモロジー群} \\
\text{幾何学的対象} \arrow[u] & \text{代数的対象} \arrow[ul] \arrow[ur] &
\end{tikzcd}$$

多面体（単体複体）

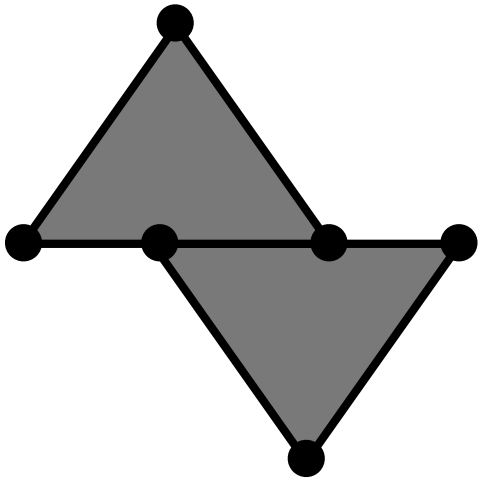
多面体：頂点，辺，三角形，…，高次元の三角形を
（ズレが無いように）張り合わせた図形



頂点　　辺　　三角形　　四面体
(０次元)　(１次元)　(２次元)　(３次元)

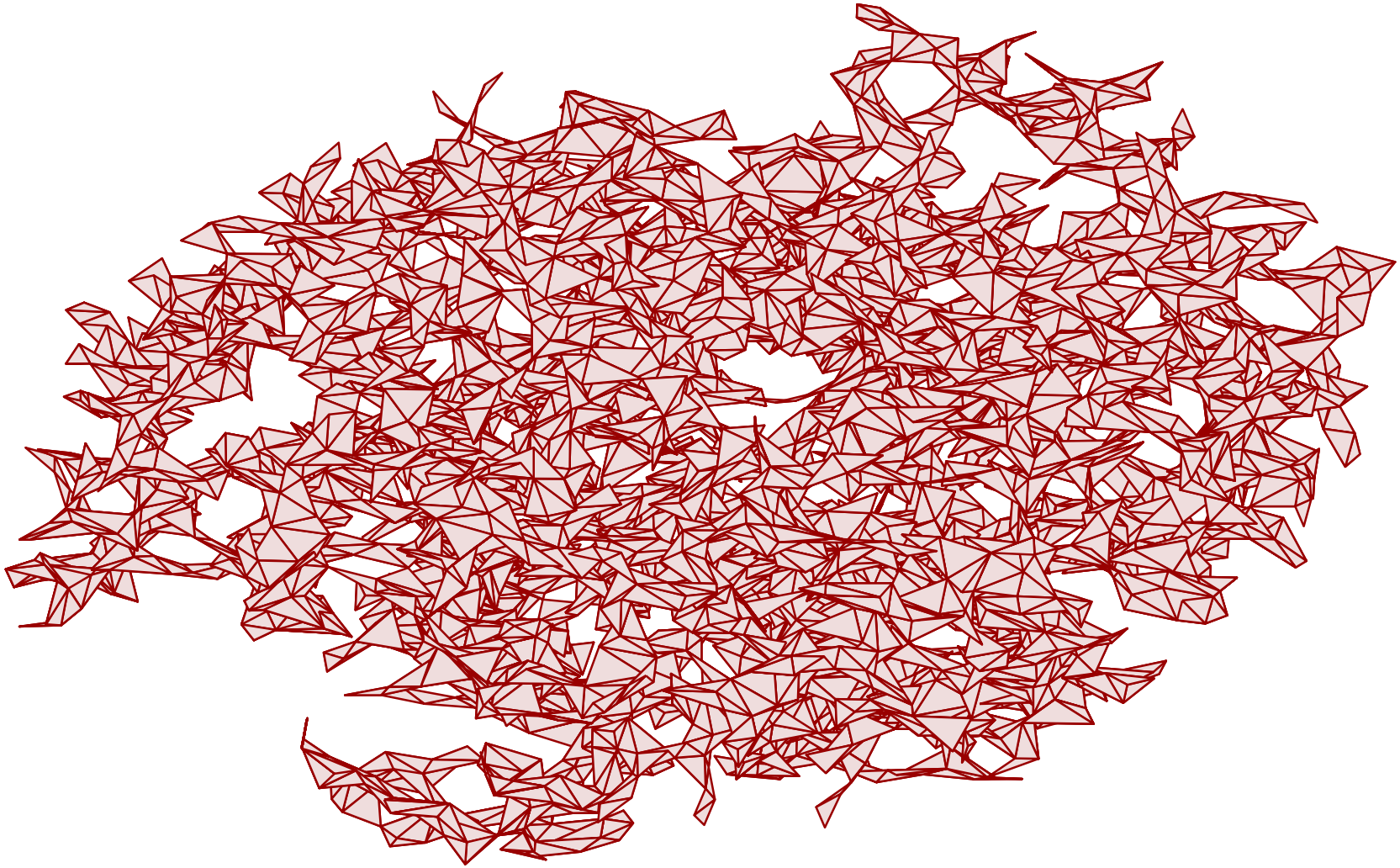


多面体の例



多面体ではない例

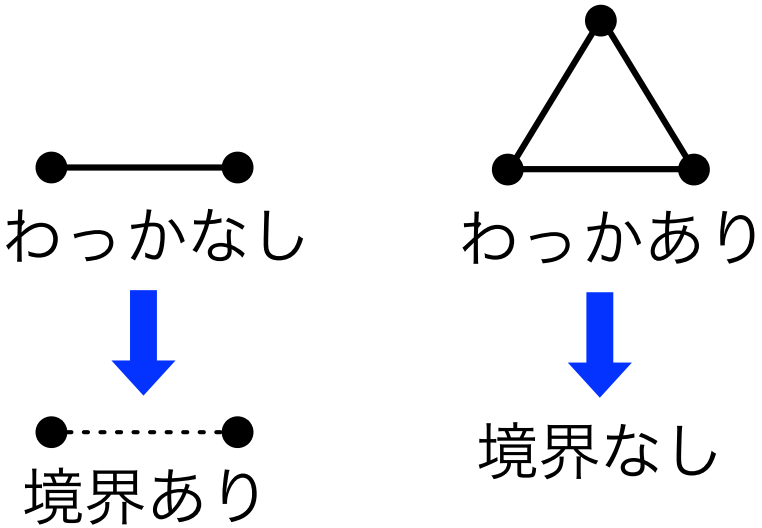
多面体の例



ヘモグロビンの多面体モデル

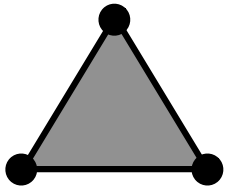
穴って何だ？

★１次元の穴：わっか



1次元図形は境界がなければ「わっか」？

そうでもない



わっかなし

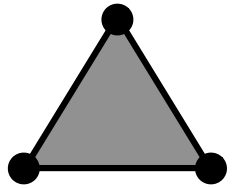
1次元図形 には境界がないが
２次元図形 の境界になっているので
わっかが消失！

１次元の穴（わっか）の特徴付け

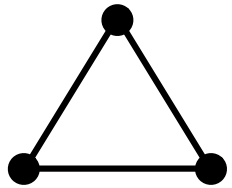
⟷ 境界のない１次元図形で２次元図形の境界になっていないもの

穴って何だ？

★２次元の穴：空洞

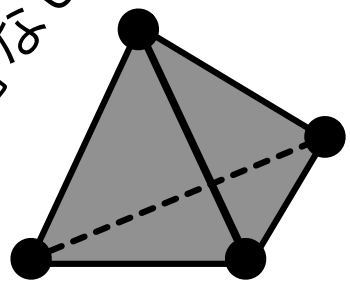


空洞なし



境界あり

中身なし



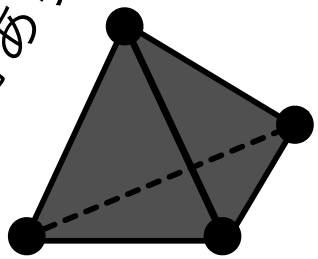
空洞あり

境界なし

2次元図形は境界がなければ「空洞」？

そうでもない

中身あり



空洞なし

２次元図形には境界がないが
３次元図形の境界になっているので
空洞が消失！

２次元の穴（空洞）の特徴付け

⟷ 境界のない２次元図形で３次元図形の境界になっていないもの

穴と境界

１次元の穴（わっか）の特徴付け

⟷ 境界のない１次元図形で２次元図形の境界になっていないもの

２次元の穴（空洞）の特徴付け

⟷ 境界のない２次元図形で３次元図形の境界になっていないもの

KEYWORD：境界

ホモロジー群のこころ
境界に着目した定式化を行うことで穴を代数化する

目標：境界を代数的に取り出そう！

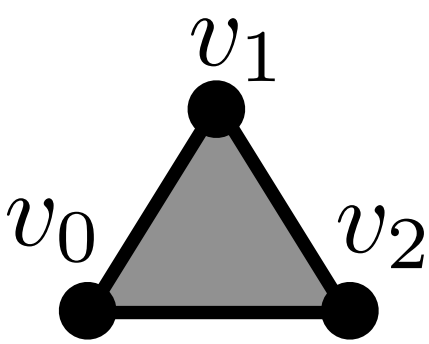
K：多面体, $Z_2 := \{0, 1\}$ $(0+0=1+1=0,\ 0+1=1+0=1)$

定義：鎖群（さぐん）

$$C_0(K) = \{\sum \alpha_i \underbrace{|v_i|}_{\text{Kの頂点}} \ ;\ \alpha_i \in \mathbf{Z}_2\}$$

$$C_1(K) = \{\sum \alpha_{ij} \underbrace{|v_i v_j|}_{\text{Kの辺}} \ ;\ \alpha_{ij} \in \mathbf{Z}_2\}$$

$$C_2(K) = \{\sum \alpha_{ijk} \underbrace{|v_i v_j v_k|}_{\text{Kの三角形}} \ ;\ \alpha_{ijk} \in \mathbf{Z}_2\}$$



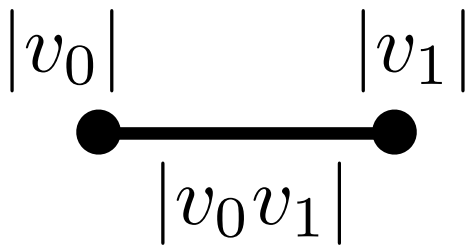
$$C_0(K) = \{a|v_0| + b|v_1| + c|v_2|\}$$

$$C_1(K) = \{a|v_0 v_1| + b|v_1 v_2| + c|v_0 v_2|\}$$

$$C_2(K) = \{a|v_0 v_1 v_2|\}$$

境界作用素

辺の境界：

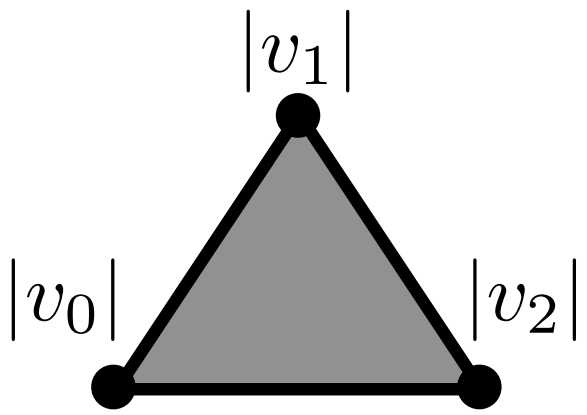


$|v_0v_1|$ の境界は $|v_0|, |v_1|$

T を境界を取り出す操作として

$T|v_0v_1| := |v_0| + |v_1|$ と書くことにする

三角形の境界：



$|v_0v_1v_2|$ の境界は $|v_0v_1|, |v_1v_2|, |v_0v_2|$

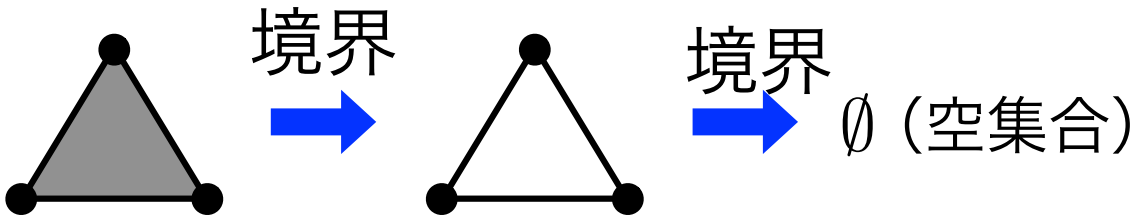
同様に境界を取り出す操作を

$T|v_0v_1v_2| := |v_0v_1| + |v_1v_2| + |v_0v_2|$

と書く

T を境界作用素と呼ぶ

境界の特徴の１つ：境界の境界は無い（空集合）



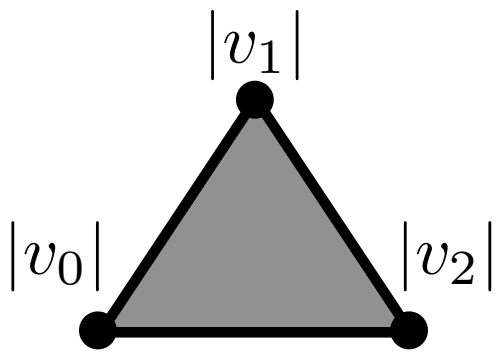
境界作用素は同様の性質を保っている？

命題： $T \circ T = 0$（続けて境界をとる作用をすれば零になる）

$$C_2(K) \xrightarrow{T} C_1(K) \xrightarrow{T} C_0(K)$$

注意）代数的に「境界の境界は無い」を表現している

ざっと確認：



$$\begin{aligned} T(T|v_0v_1v_2|) &= T(|v_0v_1| + |v_1v_2| + |v_0v_2|) \\ &= T|v_0v_1| + T|v_1v_2| + T|v_0v_2| \\ &= |v_0| + |v_1| + |v_1| + |v_2| + |v_0| + |v_2| \\ &= 0 \ (1 + 1 = 0 \text{ なので}) \ \blacksquare \end{aligned}$$

穴を代数的にとりだしてみよう

思い出そう！

1 次元の「穴」（わっか）

$\Longleftrightarrow$ 境界のない 1 次元図形で ① 2 次元図形の境界に ② なっていないもの

①を代数的に表すと

$$Z_1(K) := \{Tc = 0 \text{ となる } c \in C_1(K)\}$$

②を代数的に表すと

$$B_1(K) := \{c = Tc' \text{ と書ける } c \in C_1(K)\}$$

ここで $c' \in C_2(K)$

ちなみに命題 $T \circ T = 0$ より $B_1(K) \subset Z_1(K) \subset C_1(K)$

1 次元の「穴」（わっか）

⟺ 境界のない１次元図形で２次元図形の境界になっていないもの ①②③

よって 1次元の「穴」を代数的に表現すると

「$Z_1(K)$に対して$B_1(K)$を零にする操作で生き残るもの」 ①②③

（操作をQと表す）

すると $z = z' + b,\ \ z, z' \in Z_1(K), b \in B_1(K)$ に対して

$$Q(z') = Q(z) + Q(b) = Q(z)$$

$Z_1(K)$の中で違いが$B_1(K)$である要素ごとにグループ分けした各グループが１次元の「穴」を表現することになる

定義：ホモロジー群

$$H_1(K) := Q(Z_1(K)) = Z_1(K)/B_1(K)$$
$$= \{[z] \mid z \in Z_1(K)\}$$

ここで $[z]$ は z が所属するグループを表す

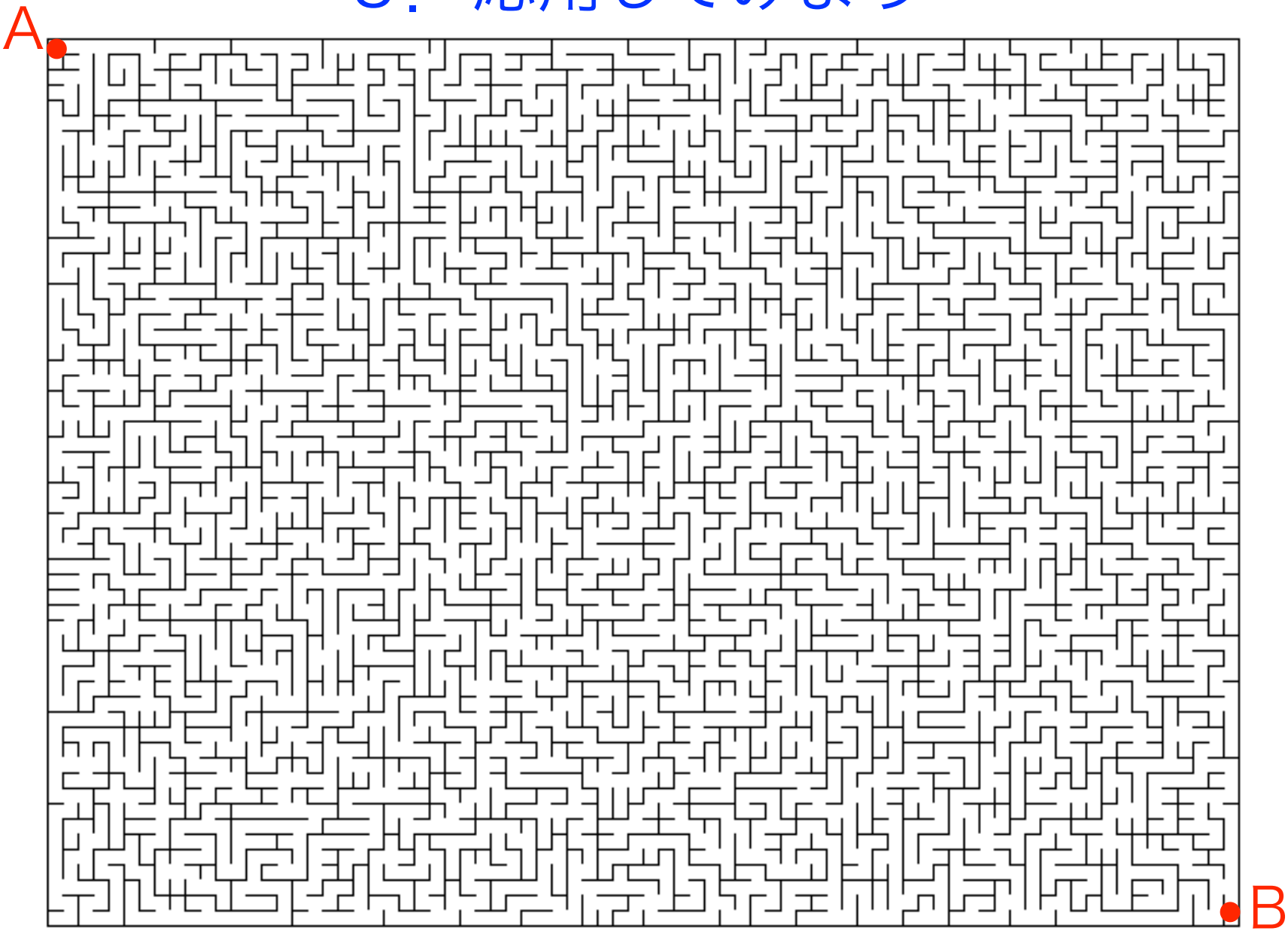
を１次元ホモロジー群とよぶ

宿題）具体的な図形に対して自分でホモロジー群を求めてみましょう

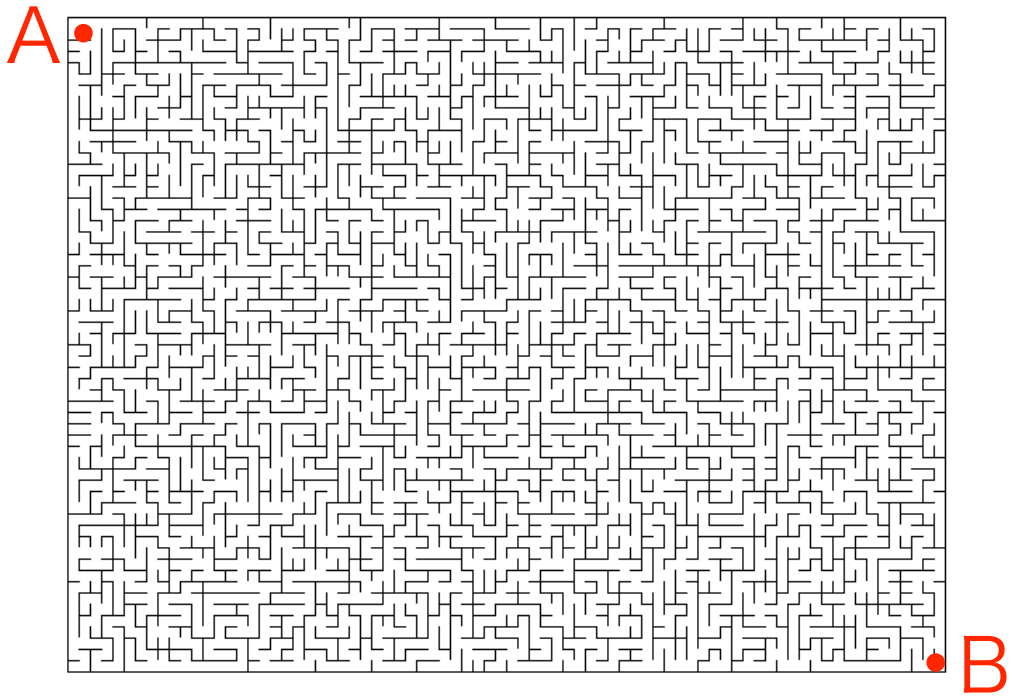
宿題）２次以上の定義も考えてみましょう（同様です）

宿題）穴の柔らかさは実は $B_q(K)$ が表します．なぜだか考えてみましょう

3．応用してみよう



問題：AからBまでの経路は存在するか調べよ．
存在する場合は何本経路が存在するかも答えよ．

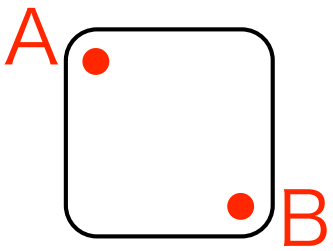


迷路 X のホモロジー群を調べてみると

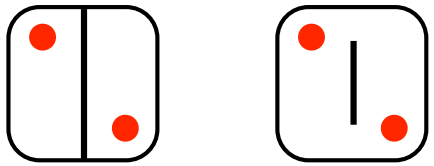
$$H_0(X) = \mathbf{R}^1$$ ：連結成分の個数は１つ

$$H_1(X) = \mathbf{R}^1$$ ：ループの個数は１つ

つまり切り貼りしない連続変形で迷路は

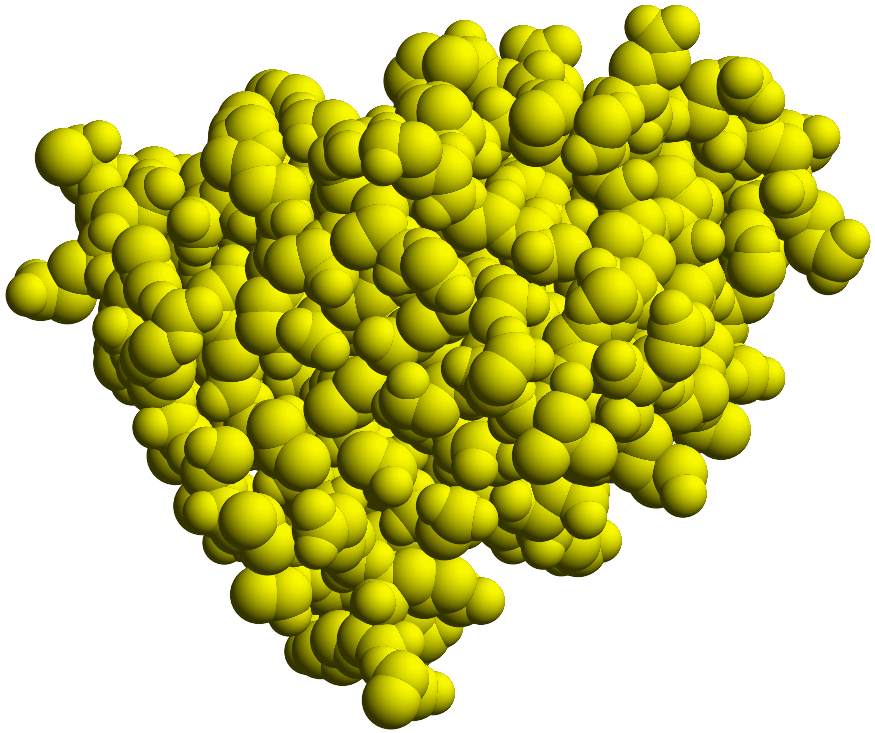


となる．よってただ一つの経路のみ存在する！



となっていない

生命科学への応用（タンパク質）



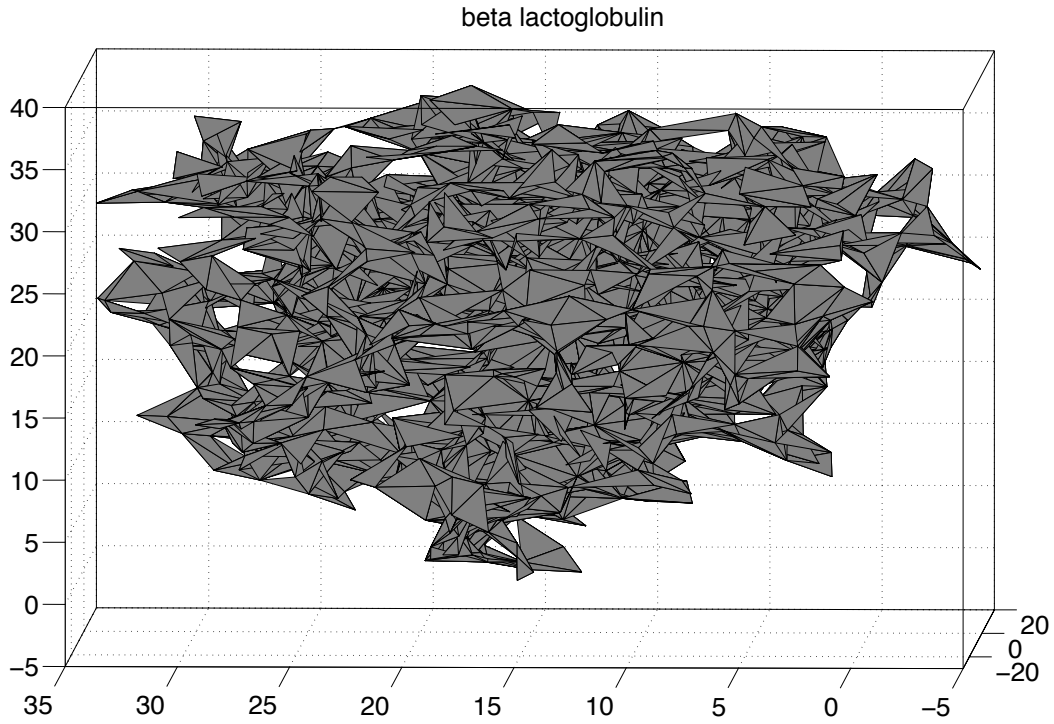
ジヒドロ葉酸還元酵素
（タンパク質の一つ）

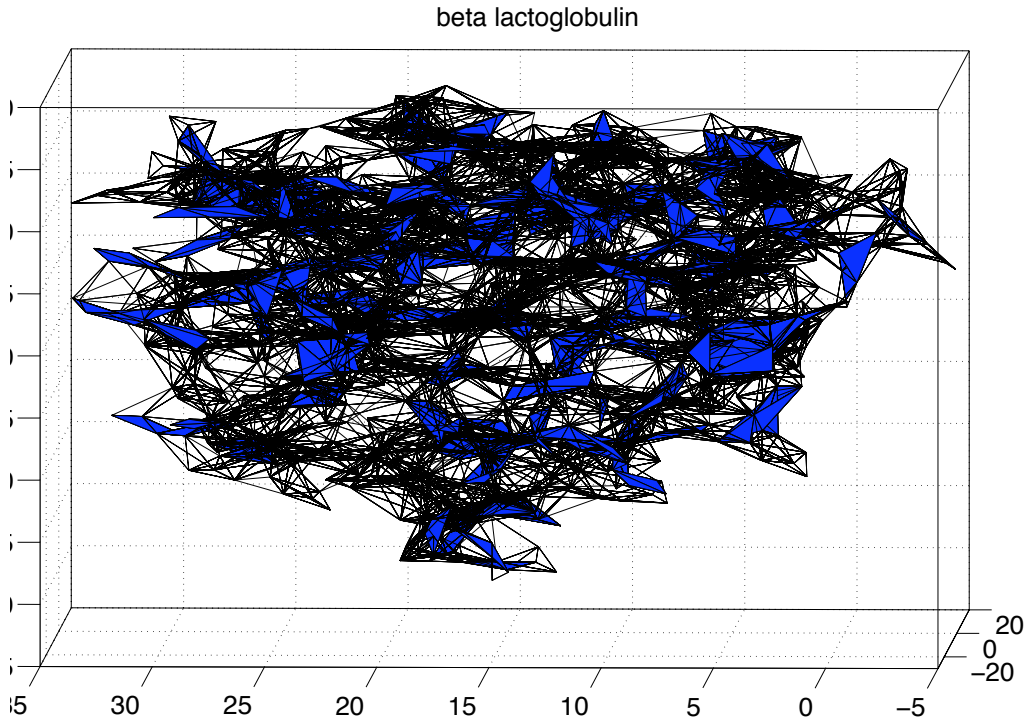
化学者：タンパク質の柔らかさって内部の空洞と関係あるんだけど実験じゃ求めにくいんだ。空洞を調べる方法しらない？
（泉俊輔さん）

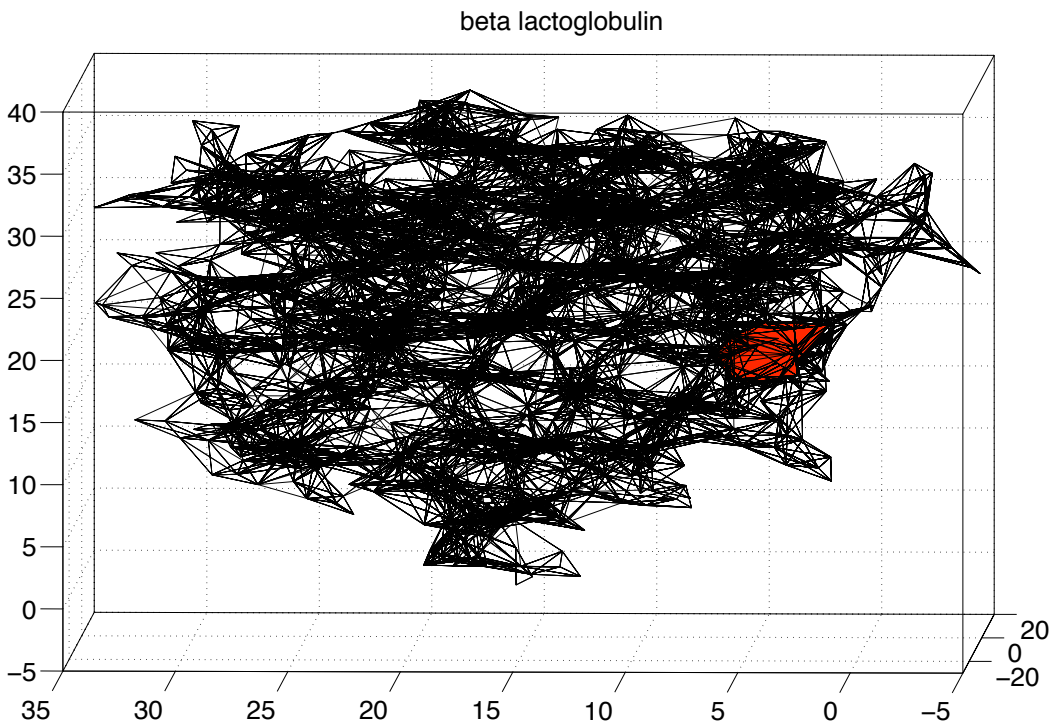
私：ホモロジー群いってみよー！

化学者：なんだかかるいなぁ。それって難しくない？

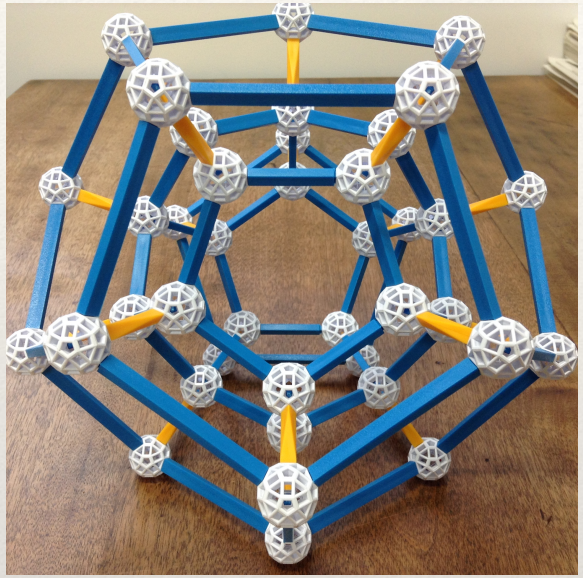
私：簡単ですよ。このとおり、、


beta lactoglobulin
40
35
30
25
20
15
10
5
0
−5
35
30
25
20
15
10
5
0
−5
20
0
−20

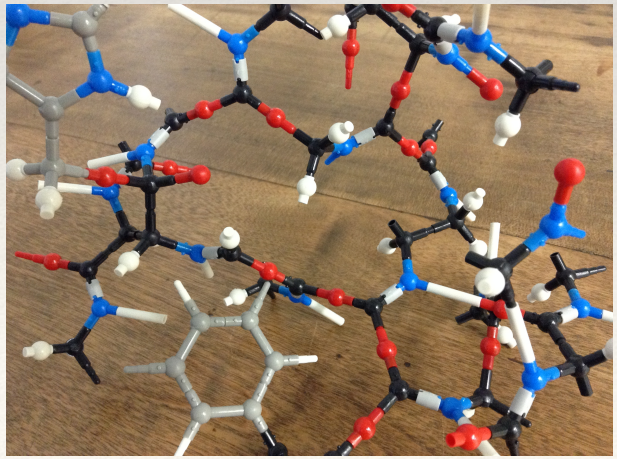

beta lactoglobulin
30
25
20
15
10
5
0
−5
20
0
−20


beta lactoglobulin
40
35
30
25
20
15
10
5
0
−5
35
30
25
20
15
10
5
0
−5
20
0
−20

原子配置と幾何



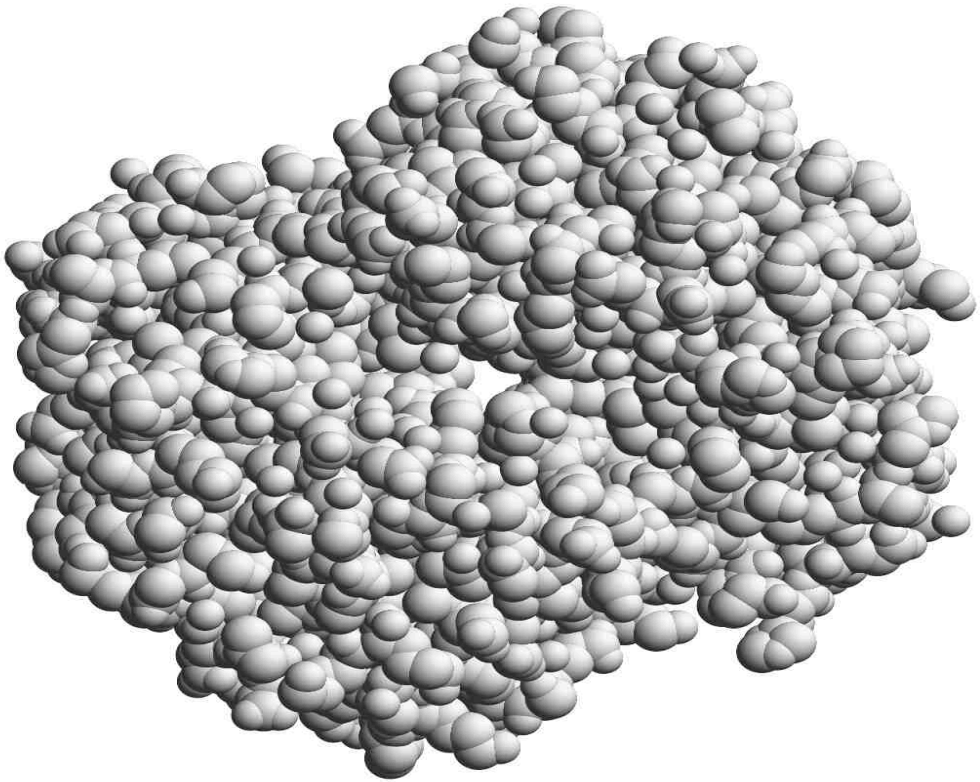
- 結晶構造：群論，組合せ論，離散幾何 etc.



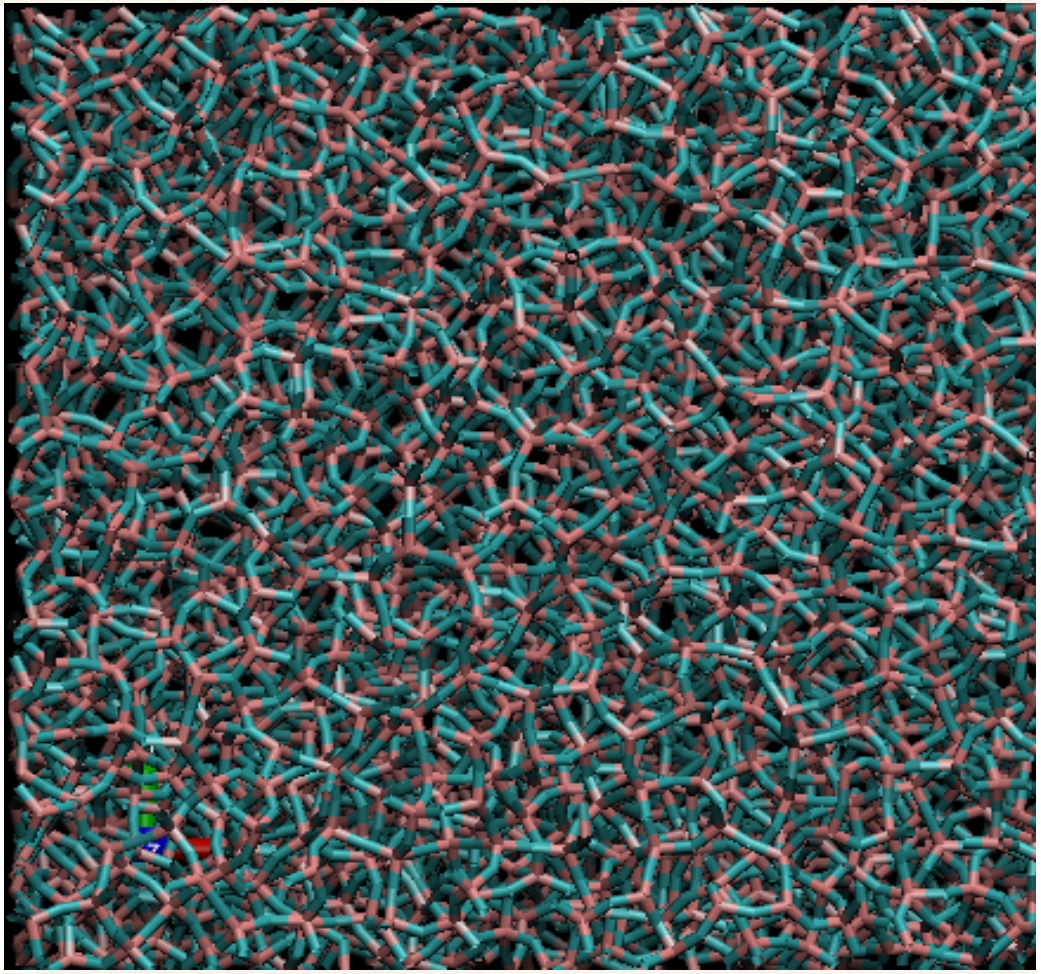
- 不規則構造 (タンパク質,ガラス)：適切な特徴付け（言語）???

原子配置と幾何

ヘモグロビン

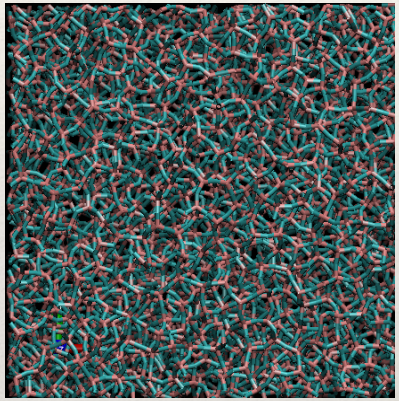


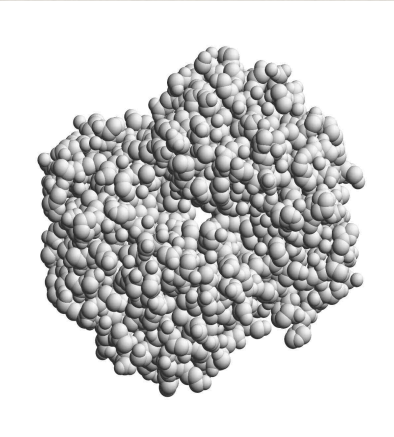
ガラス



データから情報を取り出す

幾何データ





入力 →

出力 → ???

要求

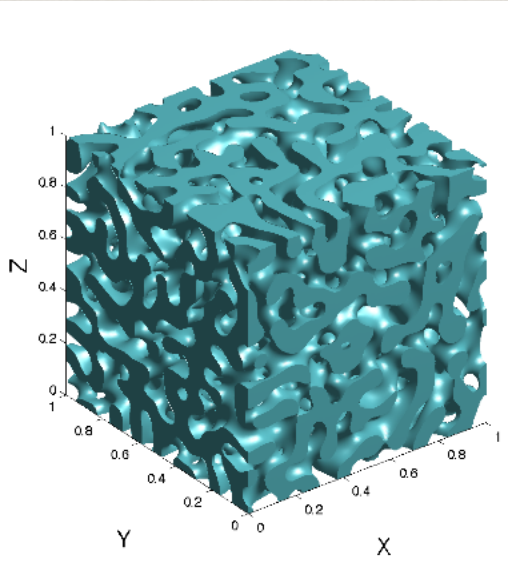
- 形の特徴を抽出して欲しい
- 理解しやすいものが良い
- 計算（実用化）可能なものが欲しい
- 膨大なデータに対して処理したい

ホモロジー

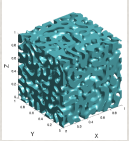
幾何データ $\xrightarrow{\text{入力}}$ H_ℓ $\xrightarrow{\text{出力}}$ ℓ 次元の穴

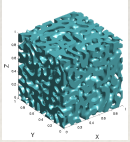
ホモロジー

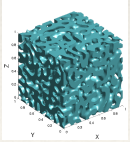
入力



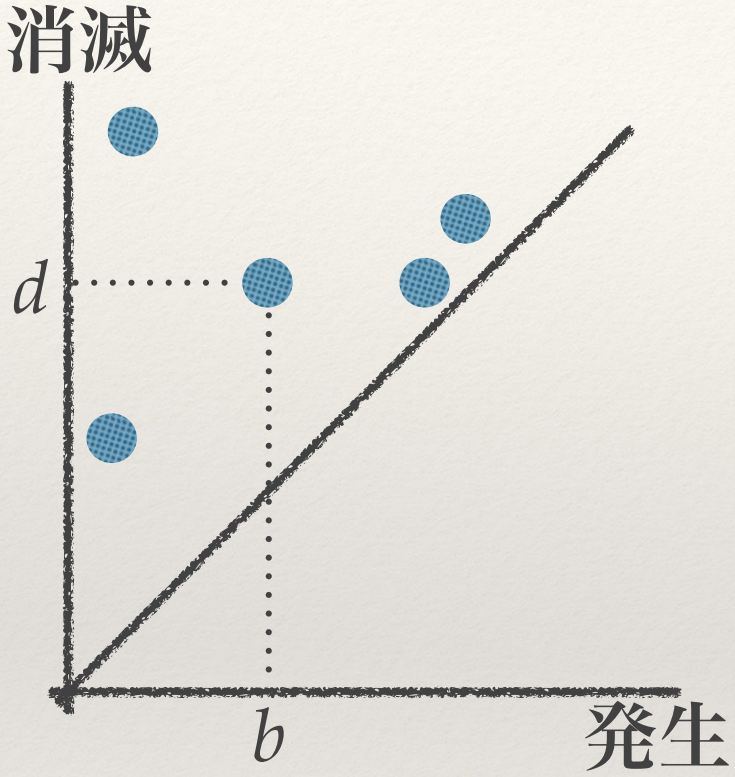
出力

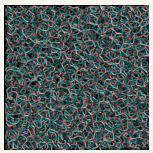
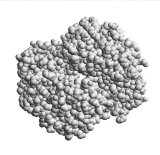
$H_0($  $) = \mathbf{R}$: 1 個の連結成分

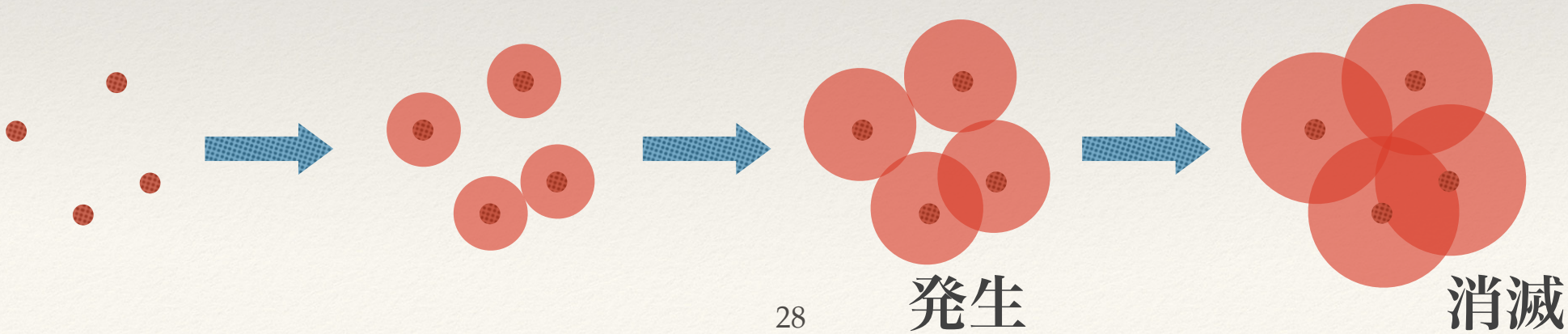
$H_1($  $) = \mathbf{R}^{847}$: 847個のリング

$H_2($  $) = 0$: 0 個の空洞

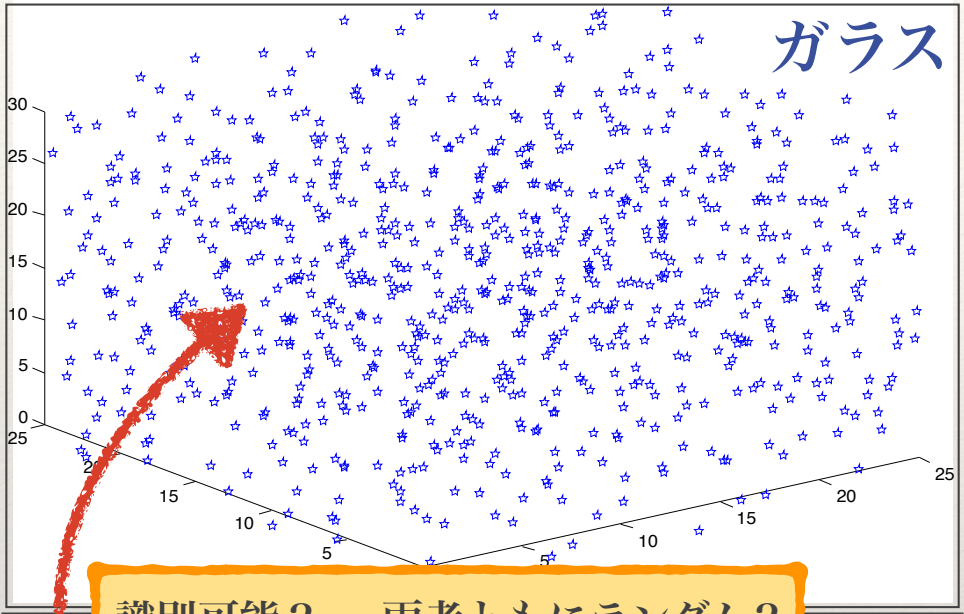
パーシステントホモロジー



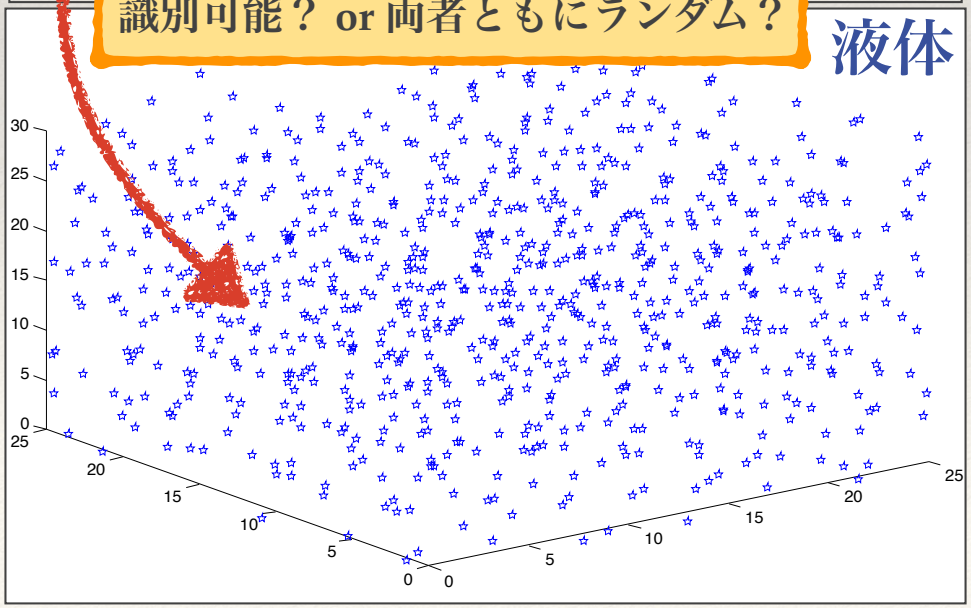
- 入力: 幾何データ  
- 出力: 平面内の点の集まり
- 各点 ● は ℓ 次元の穴に対応
- b & d は発生・消滅の半径スケール



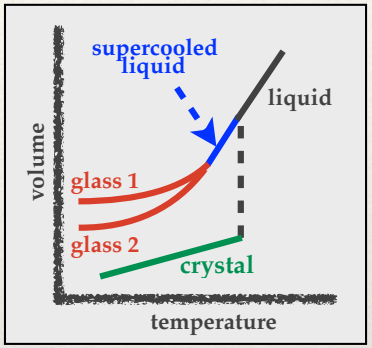
ガラスの幾何構造

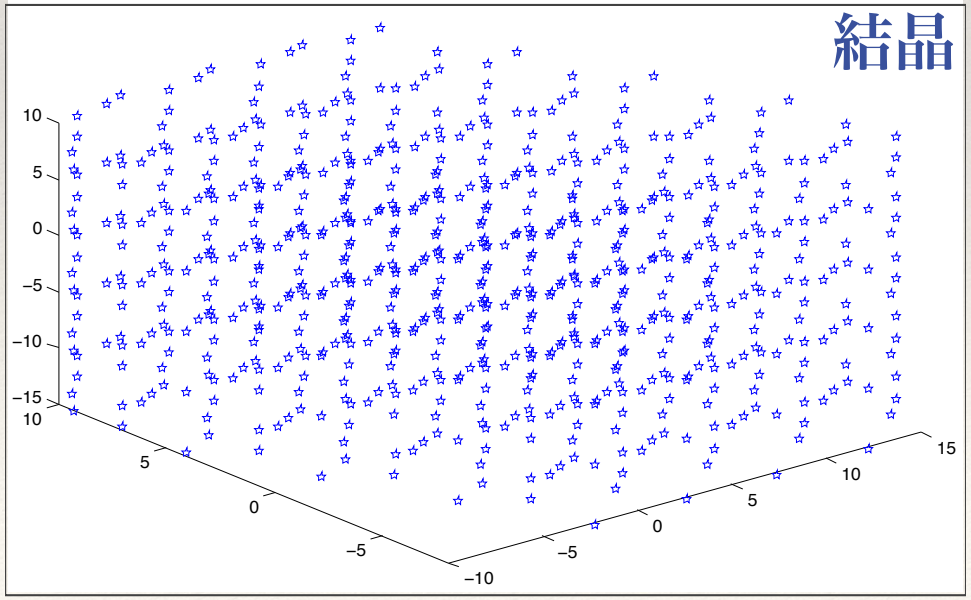


識別可能？ or 両者ともにランダム？

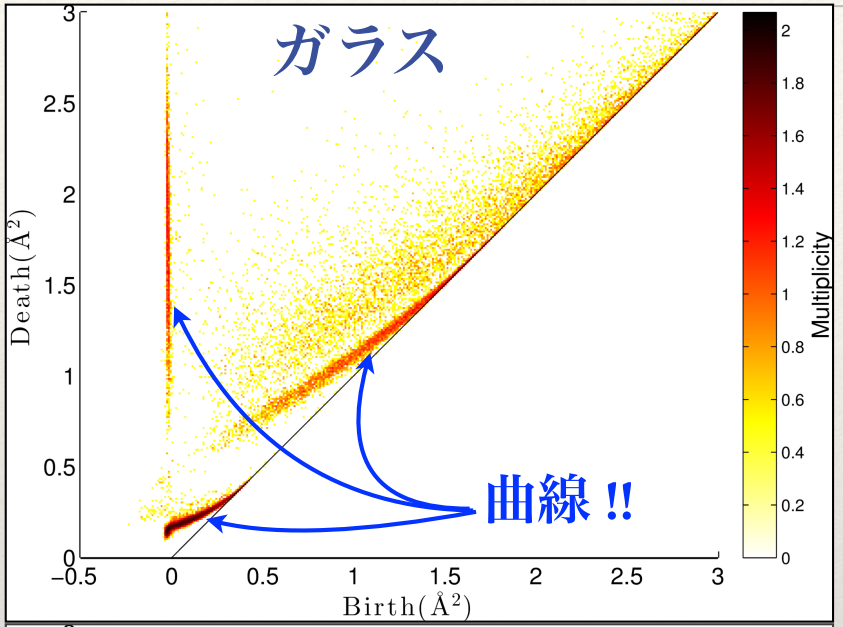


- 各状態での原子配置 (SiO2)
- ガラスの幾何構造記述は現代科学の未解決問題
- 太陽光発電やストレージ材料開発にとても重要
- 液体とガラスの違い???

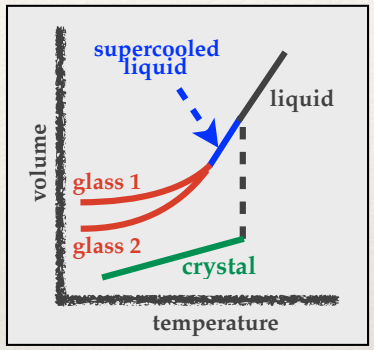


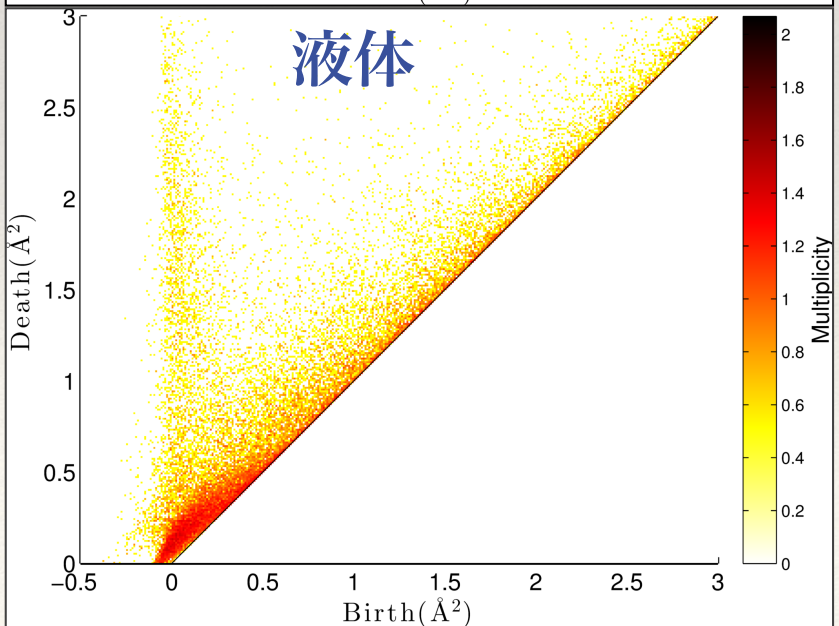


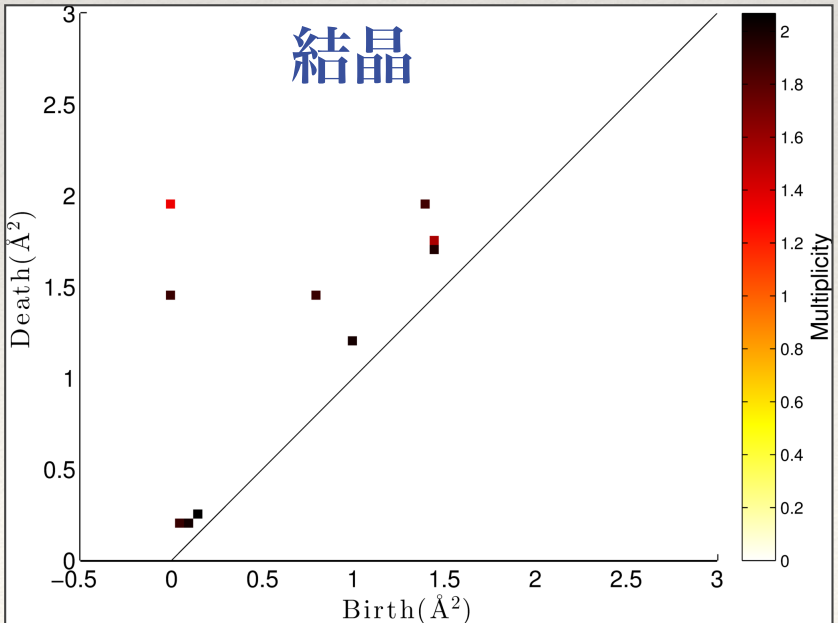
ガラスの位相的データ解析



- PD1を表示（リング構造に着目）
- 結晶の規則性は 0次元的分布
- 液体のランダム性は 2次元的分布
- ガラスは 1次元的分布（曲線）!!

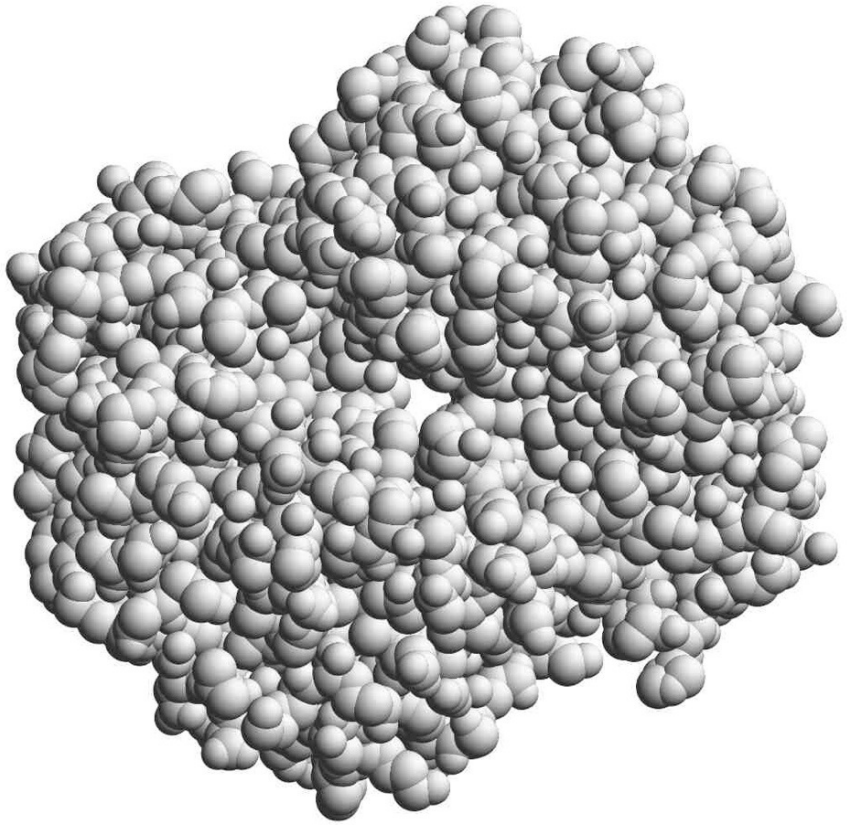






タンパク質への応用

ヘモグロビン



(約 5000 個の原子)

立体構造 ⟺ 機能

立体構造データベース

RCSB PDB
PROTEIN DATA BANK

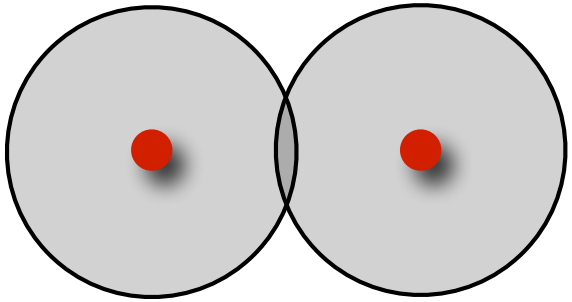
(約 100,000 個のデータ)

目標

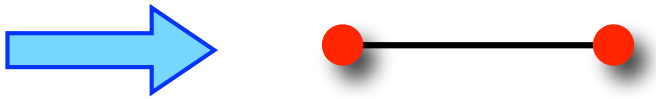
トポロジーを用いた
データ解析手法の開発

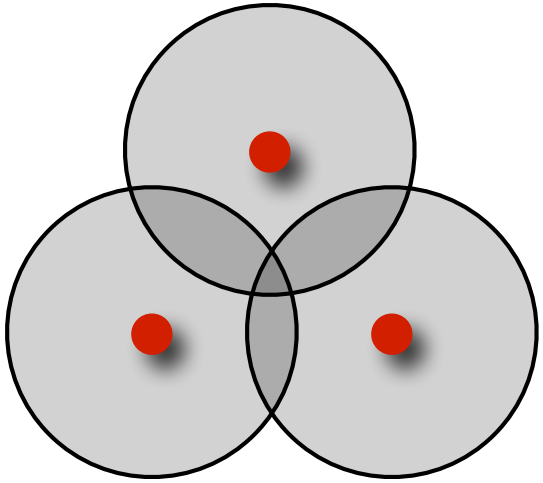
タンパク質への応用

- 各原子を適当な球で表現

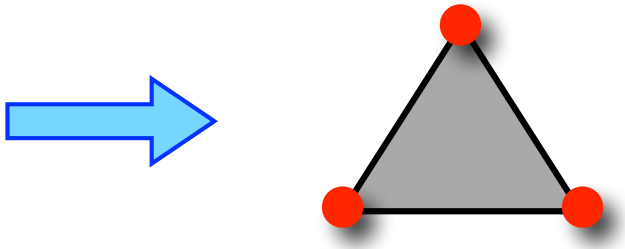


2つの原子球が
共通部分をもて
ば辺を張る





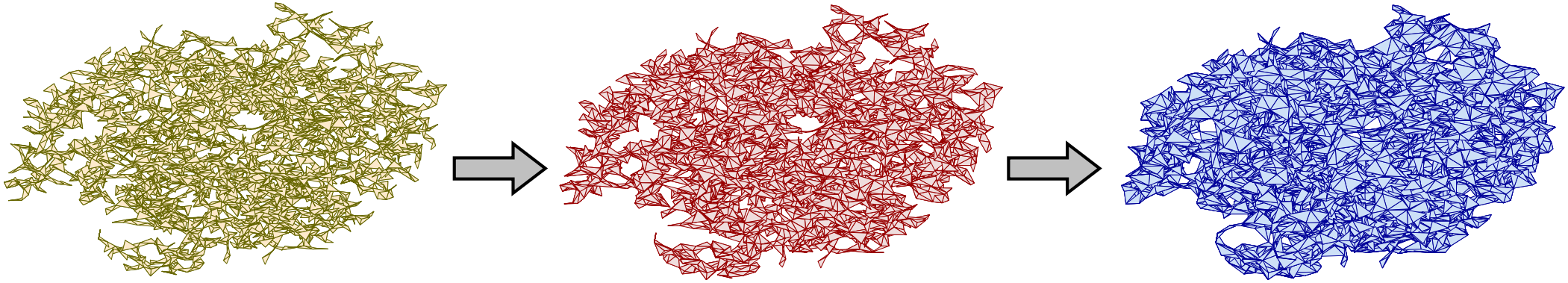
3つの原子球が
共通部分をもて
ば三角形を張る



以下同様にして作られる多面体を Čech複体 とよぶ

脈体定理：Čech複体はタンパク質球体モデルの
トポロジーに関する性質を保つ

タンパク質への応用



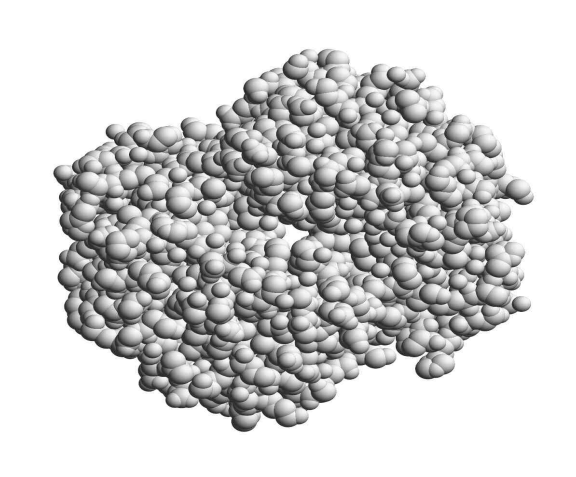
ヘモグロビンの Čech 複体増大列

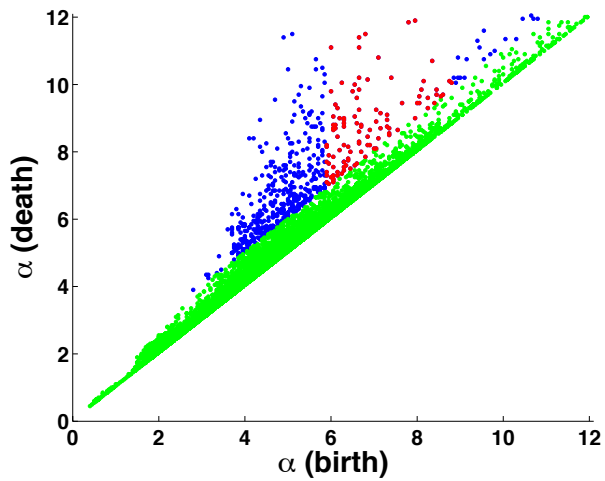
タンパク質内に現れるロバストな穴を取り出したい

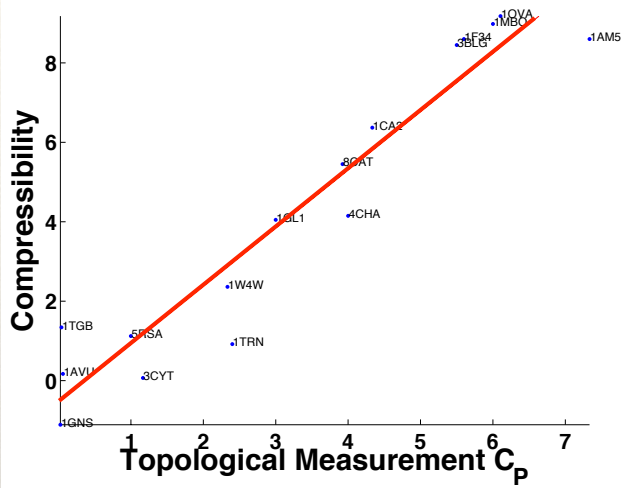
→ パーシステントホモロジー群

タンパク質の幾何解析

タンパク質 → ホモロジー計算 → 圧縮率推定

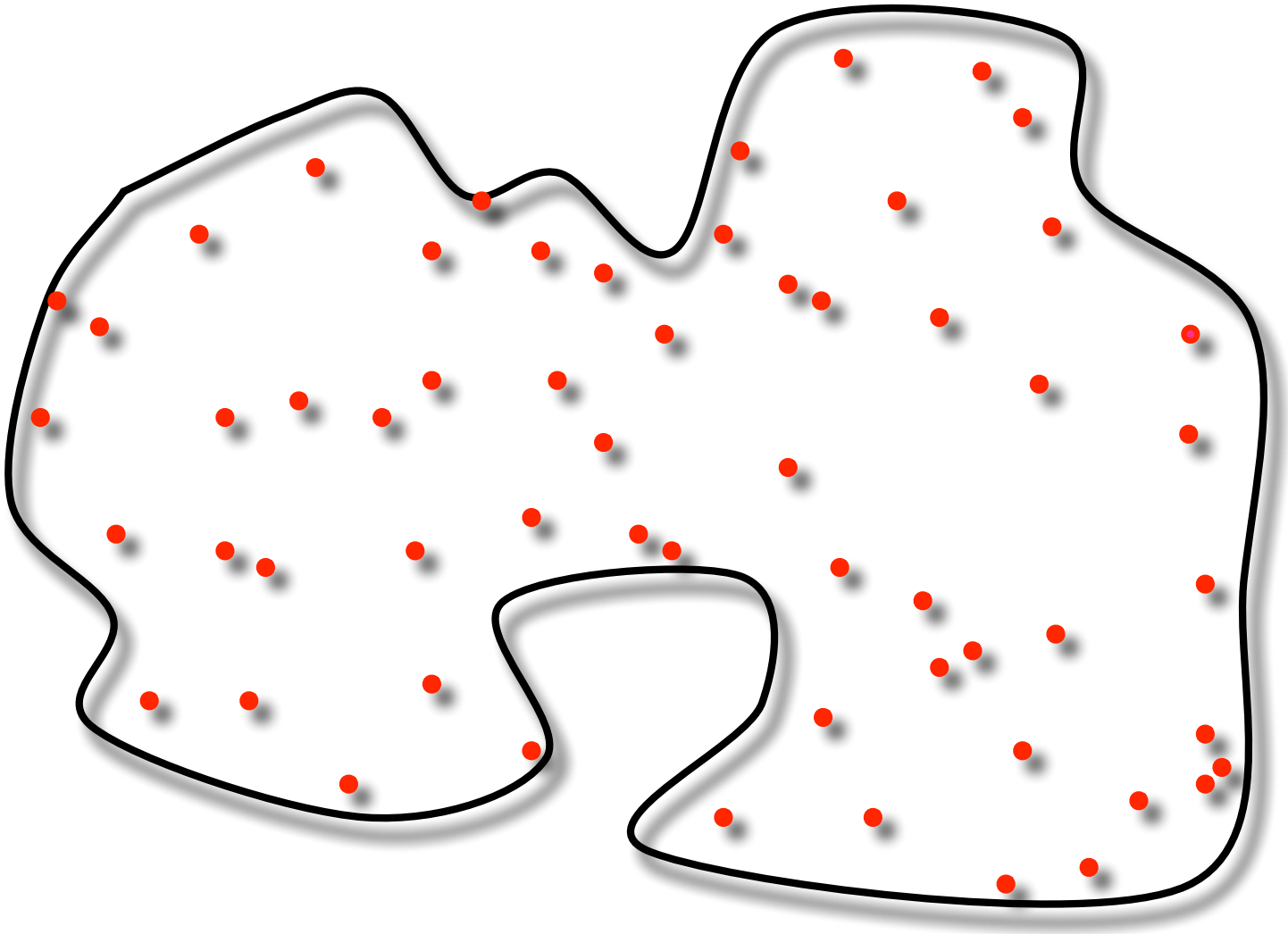




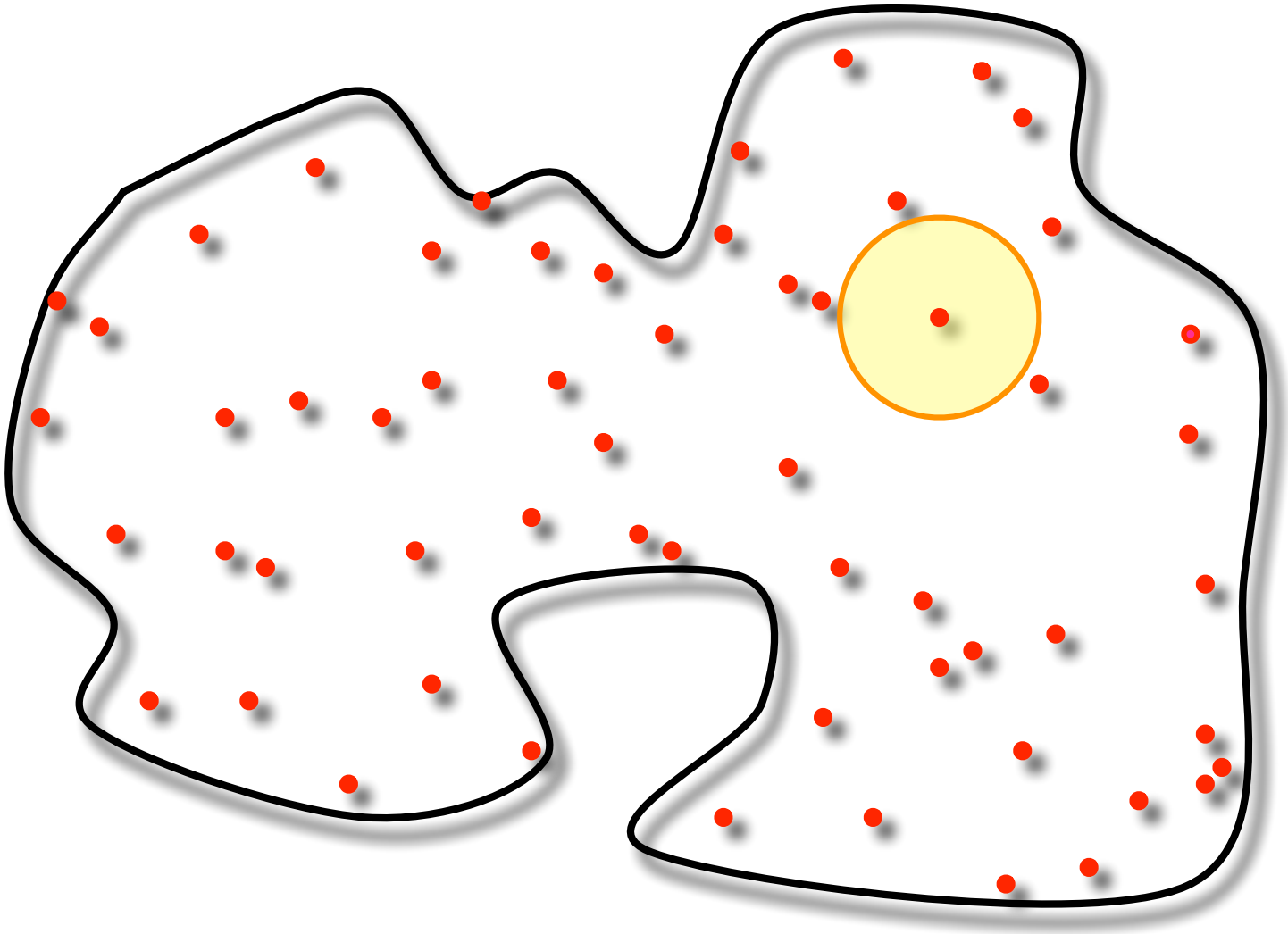


- 穴の数だけでなく，形についての情報も手に入る
  (RosettaHoles等より情報豊富)
- 幾何構造に基づく分類（系統樹）
- フォールディング問題

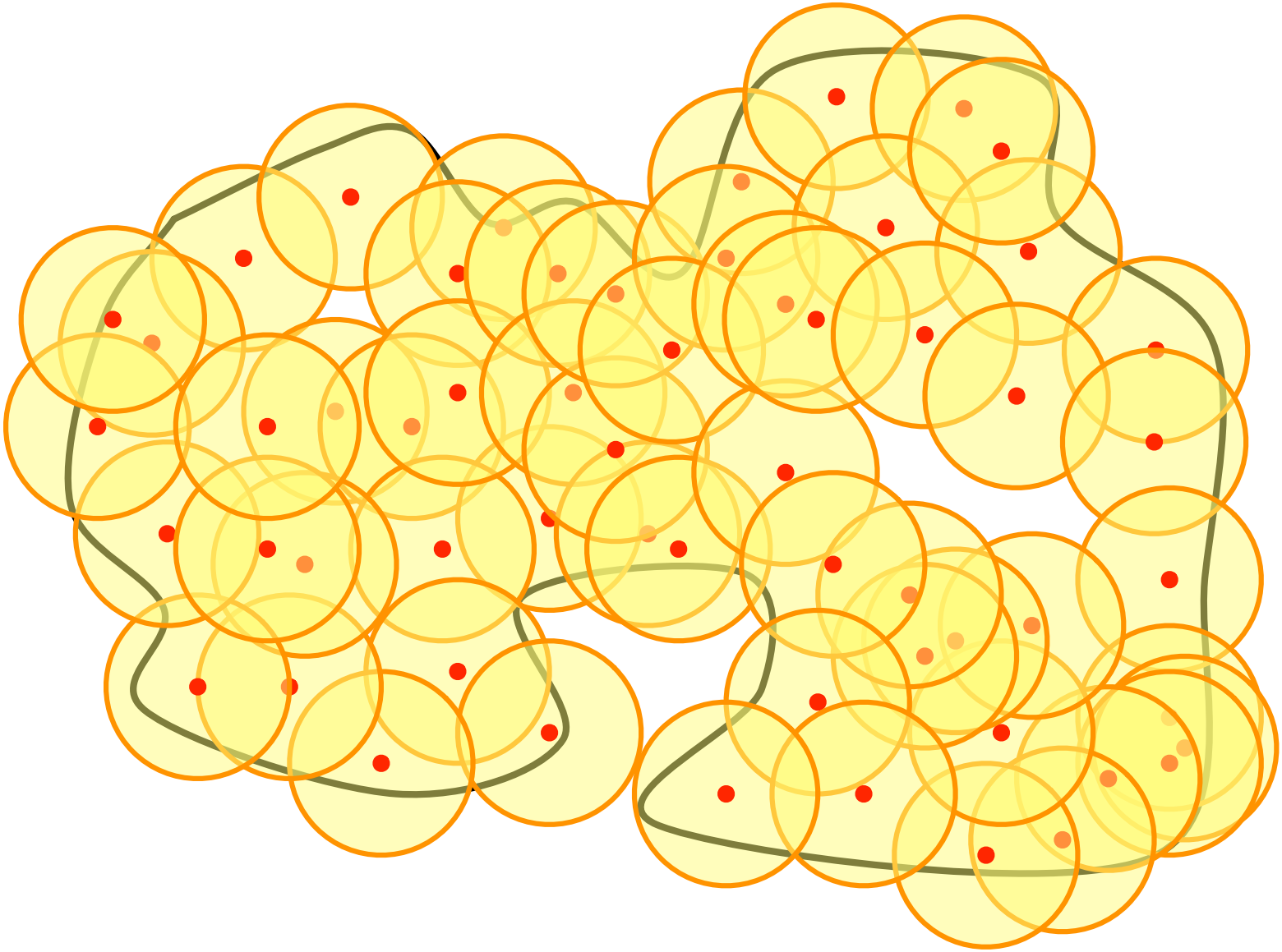
センサーネットワーク



センサーネットワーク



センサーネットワーク



被覆問題：センシング領域は対象領域を覆っているか？

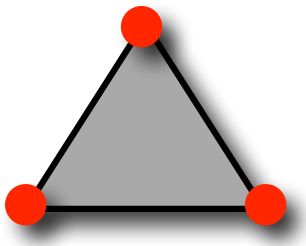
センサーネットワーク

- センサーは低性能（センシング半径 r_s，通信半径 r_c は小さい．特に $r_s \geq r_c/\sqrt{3}$）
- センサーの絶対位置はわからない

  ⇒ r_s を直接使えない！

- センサー間の通信情報から多面体（Rips複体）を構成（局所情報から構成可能）

センサー間で通信可能なら辺を張る



３辺に辺があれば三角形を張る

⇢ Rips複体 $\mathcal{R}$

まとめ

1. やわらかく穴を扱う数学の道具として
   ホモロジー群がある
2. 定義は少し難しかったが境界の特徴付けが
   大事そうだ
3. いろいろな分野に応用されつつあるらしい

数学では「定義」がとても重要です。興味を持った方は一度ホモロジー群の定義を自分で納得がいくまで考えてみてください。