位相的データ解析の紹介

MT部 DSチーム 山本

2025/11/13

Topological Data Analysis (TDA)

トポロジー（位相幾何学）を用いてデータの「形」を分析する手法の総称

手法	分析
パーシステント ホモロジー	
Mapper	

Persistent Homology

単体復体

- k 単体 $|p_0p_1\cdots p_k| = \{x \in \mathbb{R}^k \mid x = \sum_{i=0}^k \lambda_i p_i, \sum_{i=0}^k \lambda_i = 1\}$
    - 例: 0単体（点）、1単体（辺）、2単体（正三角形）、3単体（四面体）
    - 例: 2単体 $|p_0p_1p_2|$ は、7つの面 $|p_0|, |p_1|, |p_2|, |p_0p_1|, |p_0p_2|, |p_1p_2|, |p_0p_1p_2|$ をもつ。
- 有限個の単体の集まり K が次の条件を満たす時、**単体復体**と呼ぶ:
    1. K に属する単体 τ の面 σ もまた K に含まれる
    2. 2 つの単体 $\tau, \sigma \in K$ の空でない共通部分 $\tau \cap \sigma$ は τ の面であり、σ の面でもある

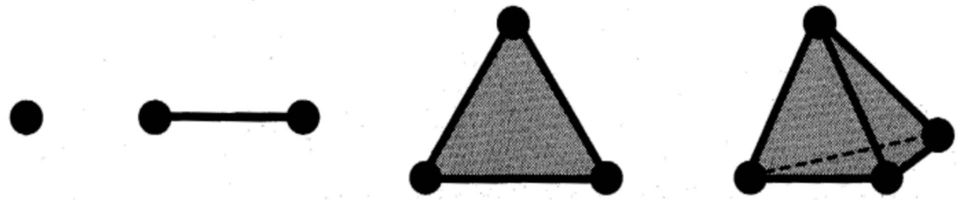


図 1.1　点，辺，三角形，四面体

Homology

- 1単体が作る「穴」=「**境界**のない1単体の集まりであって2単体の集まりの**境界**になっていないもの」
- n 次元単体復体 K に属する k 単体の集まりを K_k とし、k鎖群（K_k で生成される自由 $\mathbb{Z}$ 加群）$C_k(K)$ を定義:

$$C_k(K) = \left\{ c = \sum_{\sigma \in K_k} \alpha_\sigma \langle \sigma \rangle \middle| a_\sigma \in \mathbb{Z} \right\}$$

- 境界作用素 $\partial_k : C_k(K) \to C_{k-1}(K)$ を定義すると、
  - $\mathrm{Ker}\partial_k = \{\sigma \in C_k(K) \mid \partial_k(\sigma) = 0\}$ は境界のない k 単体
  - $\mathrm{Im}\partial_k = \{\sigma \in C_k(K) \mid \sigma = \partial_k(\tau), \tau \in C_{k+1}(K)\}$ は $k+1$単体 の境界となっている k 単体
  - k 次のホモロジー群: $H_k(K) = \mathrm{Ker}\partial_k / \mathrm{Im}\partial_{k+1}$

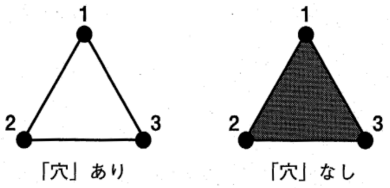


図 2.4　1 単体が作る「穴」

Persistent Homology（パーシステントホモロジー）

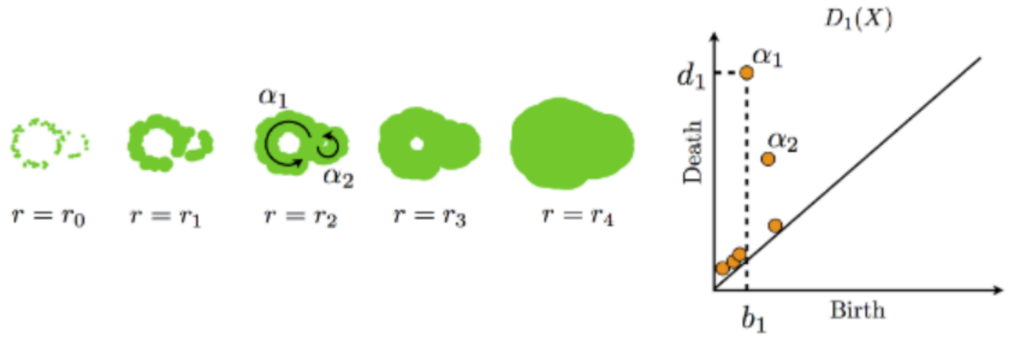
- 点群 X の「形状」を抽出する手法
- 各点 $x \in X$ を中心とした半径 r の集合 $B(X;r) = \bigcup_{x \in X} B(\boldsymbol{x}_i; r)$ に対して、r を大きくしていくとフィルトレーションを得る:

$$\mathbb{B}(X) : \cdots \subset B(X;a) \subset B(X;b) \subset \cdots \quad (a < b)$$

- ホモロジー群の系列（q **次元パーシステントホモロジー**）も得る:

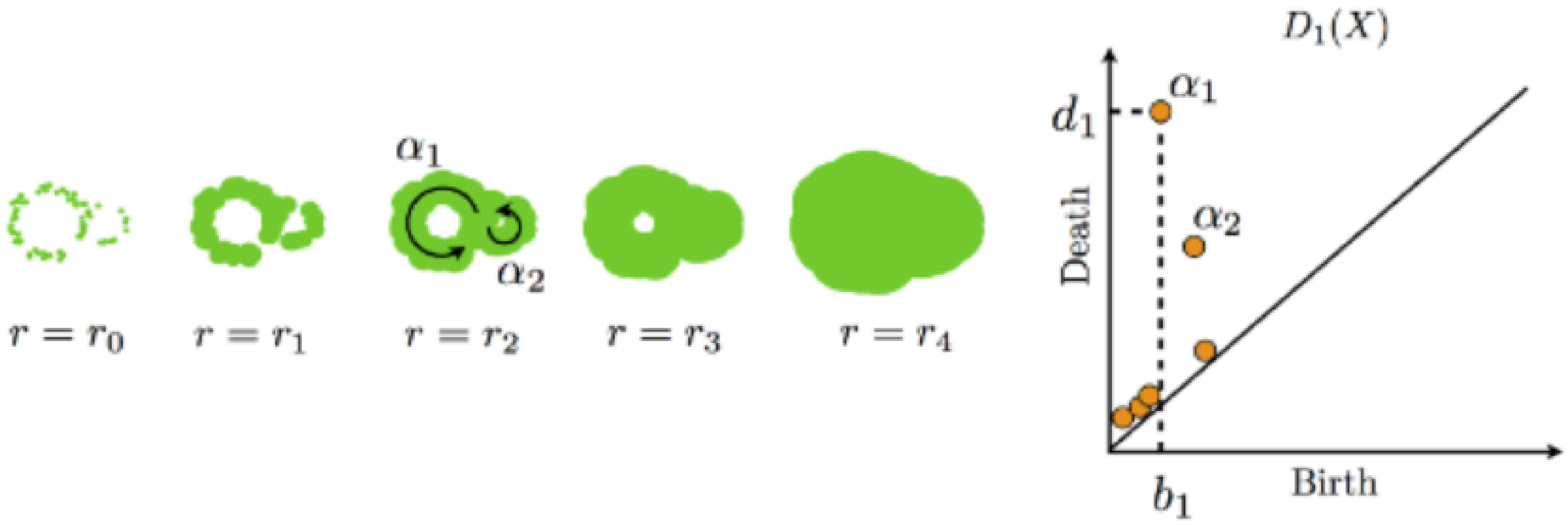
$$H_q(\mathbb{B}(X)) : \cdots \to H_q(B(X;a)) \xrightarrow{u_a^b} H_q(B(X;b)) \to \cdots \quad (a < b)$$

- 分解定理により $H_q(\mathbb{B}(X)) \simeq \bigoplus_{i \in I} \mathbb{I}[b_i, d_i]$ と区間表現でき、これを $\mathbb{R}^2$ に表示した多重集合 $D_q(X) = \{(b_i, d_i) \mid i \in I\}$を q **次元パーシステントダイアグラム** と呼ぶ。



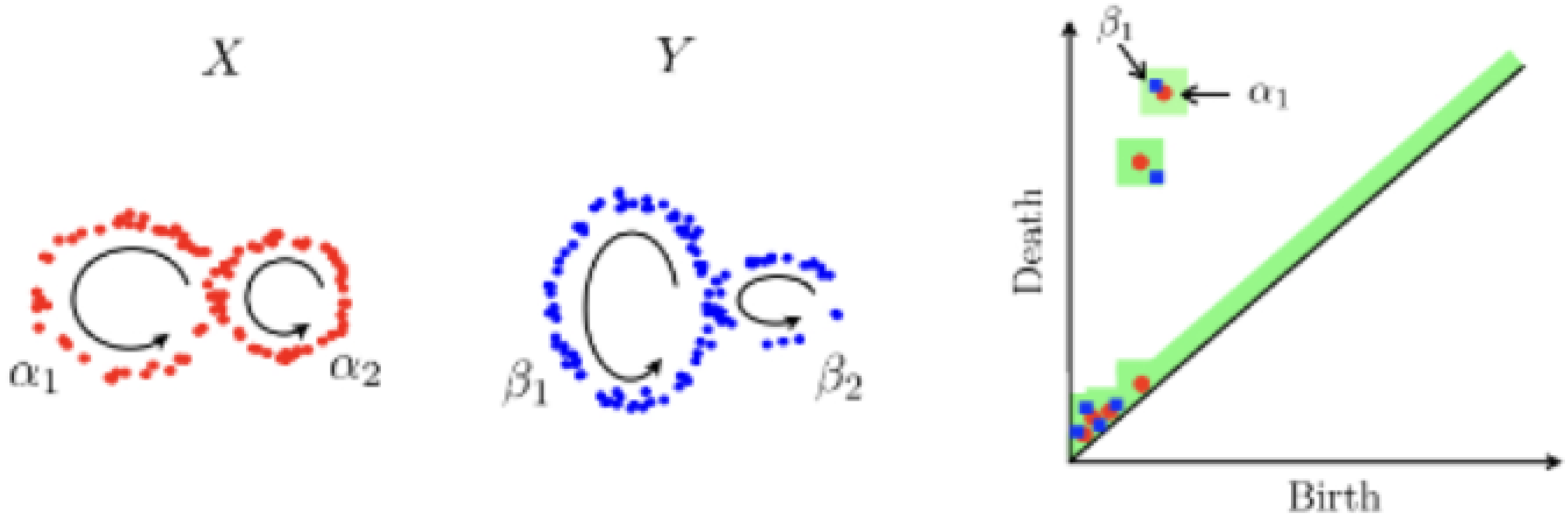
Persistent Homology の具体例

- パーシステントホモロジーとは「各点を太らせたときにできる"穴"の生成消滅の系列」とざっくり理解
- 例えば、
  - $r = b_1$ のとき、穴 α_1 が発生
  - $r = b_2$ のとき、穴 α_2 が発生
  - $r = d_2$ のとき、穴 α_2 消滅
  - $r = d_1$ のとき、穴 α_2 が消滅



Persistent Homology の魅力の一部分

- フィルトレーションを構成できれば、点群以外のあらゆるデータに対してパーシステントホモロジーを計算可能
- 摂動でパーシステントダイアグラム（PD）は大きく変わらない
  - PD の安定性解析も主テーマとなっている（例: $d_b(D(\mathcal{C}(X)), D(\mathcal{C}(X))) \leq d_H(X, Y)$）

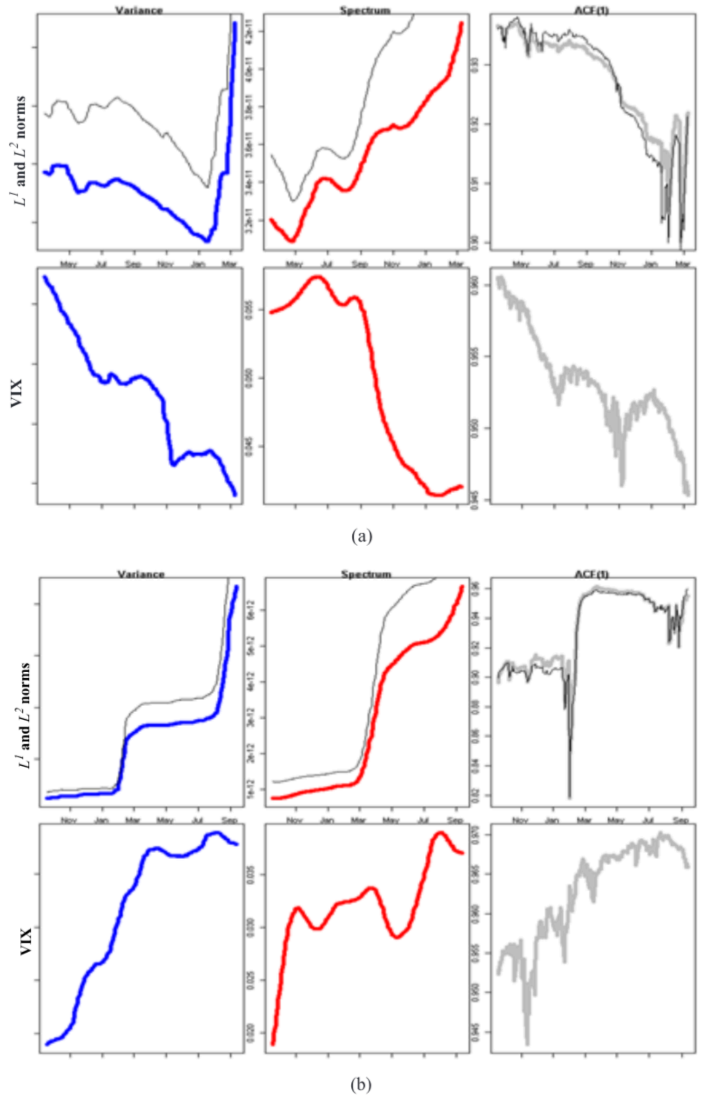


- TDA X 統計的機械学習の分野も盛ん

Persistent Homology の応用例

金融危機予兆（異常検知）への応用

- [Gidea and Katz 2018](#) は金融市場にパーシステントホモロジーを適応した草分け的な研究
  - 米国株式指数（S&P500など）の日次リターン系列を対象に分析
    - 時系列 $\rightarrow$ 遅延座標埋め込み $\rightarrow$ 1次のPD $\rightarrow$ パーシステントランドスケープの L^p 距離（位相的構造の全体的な大きさを示す指標）
  - (a)ドットコムバブル崩壊（2000年）および(b)リーマン・ショック（2008年）期で L^p の時系列の低周波成分が統計的優位に上昇
  - 右図は、各ショックの250日以前の（上）L^p 指標と（下）VIX に対して、（左）低周波成分が分散、（中央）低周波成分の平均、（右）1次の自己相関を示している
- 暗号通貨（Gidea+2020）、PH特徴量を機械学習モデルに利用（Guritanu+2025）など類似研究は割とある



Takens の埋め込み定理

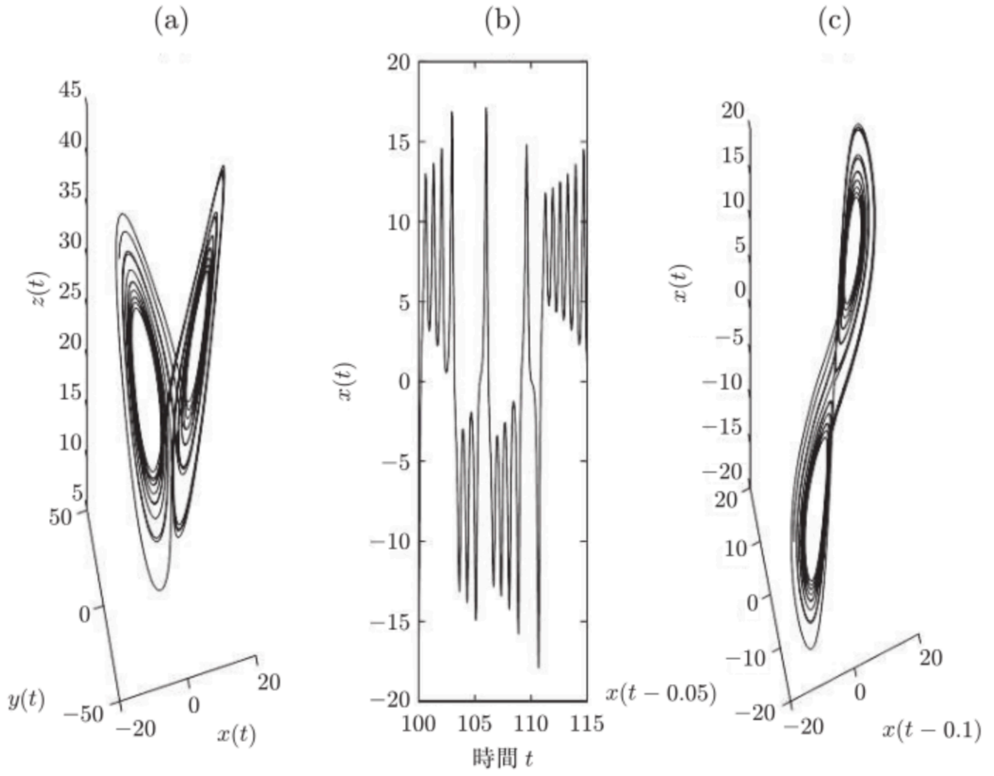
- 力学系 $f: M \to M$ と 観測関数 $g: M \to \mathbb{R}$ を考える:

$$x_{t+1} = f(x_t), \quad s_t = g(x_t)$$

- **時間遅れ座標** $\Phi_{(f,g)}: M \to \mathbb{R}^{2m+1}$ は埋め込みとなる:

$$\Phi_{(f,g)}(x) = (g(x), g(f(x)), \ldots, g(f^{2m}(x)))$$

- 例えば、米国の株式市場の「状態」x_t を株価指数（S&P500など）s_t で観測した場合、時間遅れ座標 $(s_t, s_{t+\tau}, \ldots, s_{t+2m\tau})$ でx_t の挙動を再現できる。



Persistent Homology を遊んでみたかった

金融時系列への応用

すみません。間に合いませんでした。今後進展あったら共有します。

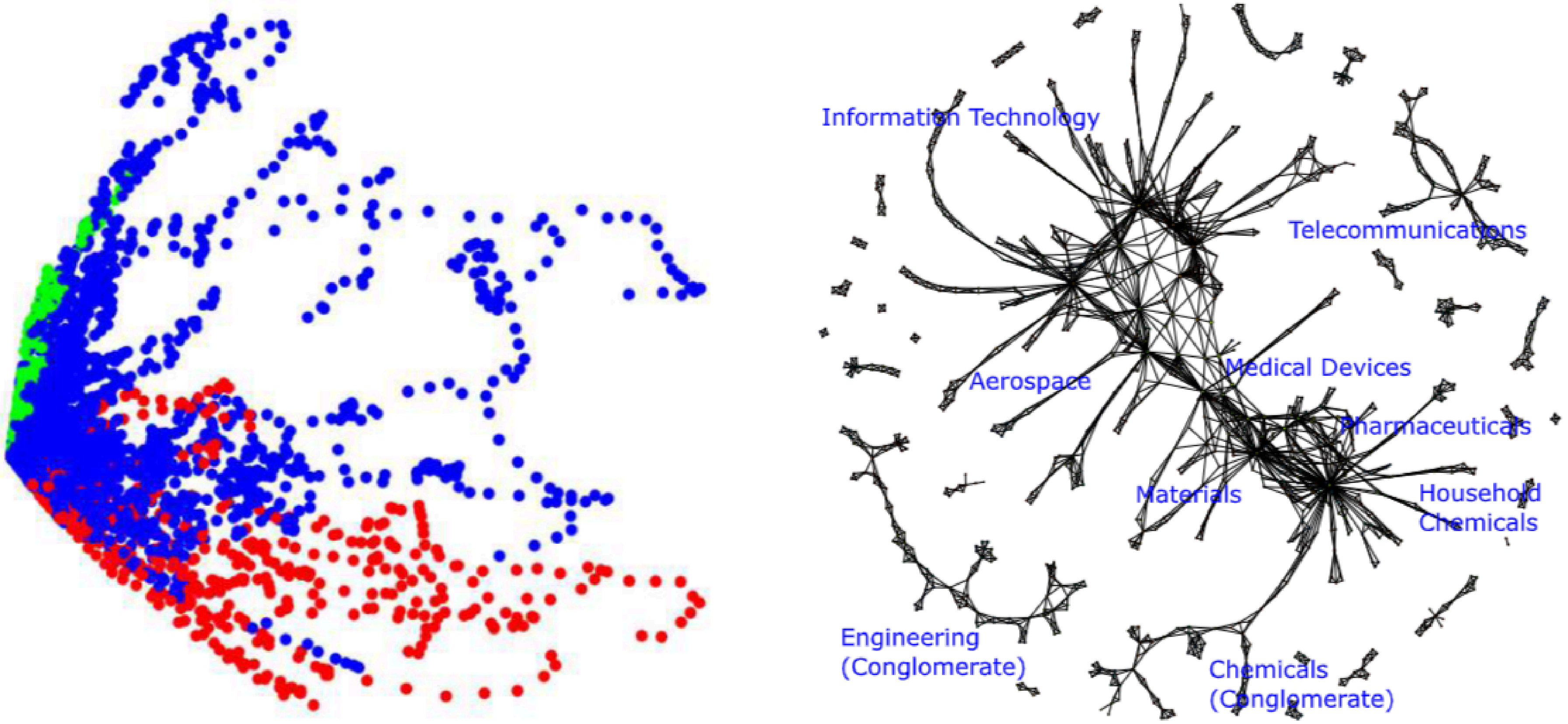
- 先行研究同様に、金融時系列の遅延座標埋め込みに対してTDAを実施
- 銘柄間や指標間の相関行列（距離行列 $d_{ij} = \sqrt{1 - \rho_{ij}^2}$）に対して閾値を設けることで、フィルトレーションを構築しTDAを実施

Mapper

Mapper

データの特徴となる部分を把握しやすようにグラフとして表示する手法

(a) Two-Dimensional PCA　　(b) Shape Graph by Mapper

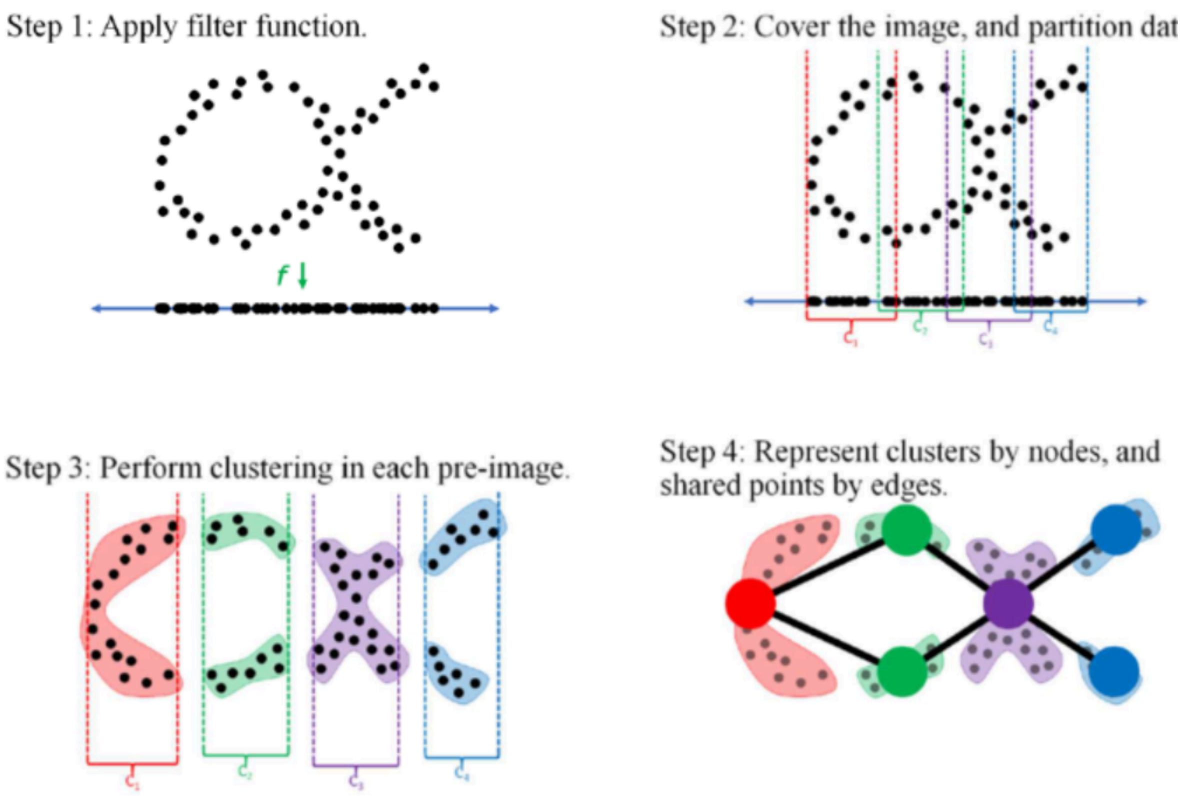


Mapper のアルゴリズム

1. 点群 X から低次元空間 $\mathbb{R}^k$ への写像 $f : X \to \mathbb{R}^k$ を与える
2. 像 $f(X)$ の被覆 $f(X) \subset \bigcup_i C_i$ を考えて、その逆像に$f^{-1}(C_i)$ により X を分割する
3. 各逆像 $f^{-1}(C_i)$ $(i = 0, 1, \ldots)$ ごとにクラスタリングする:

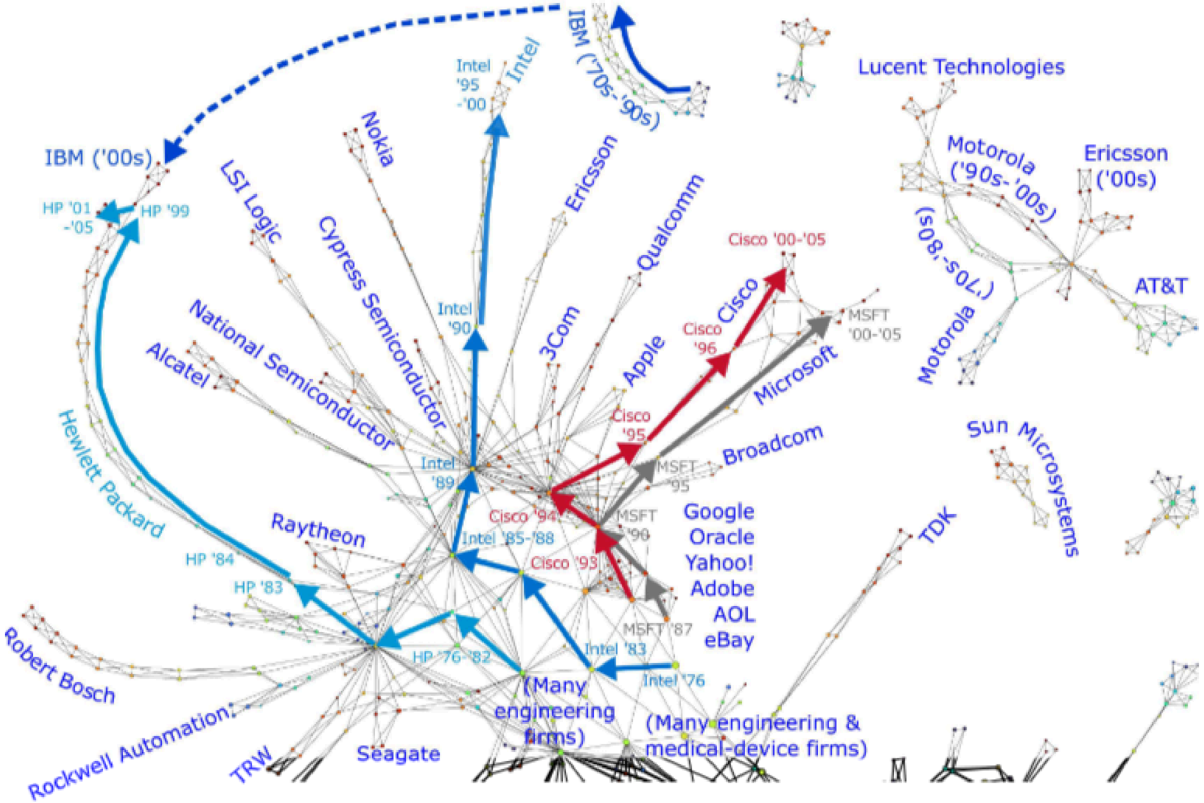
$$f^{-1}(C_i) = \bigsqcup_j V_{i,j}$$

4. $V_{i,j}$ をノードとして、2 頂点 U, V が元のデータ空間 X で共通部分を持つときエッジをはる



Mapper の応用

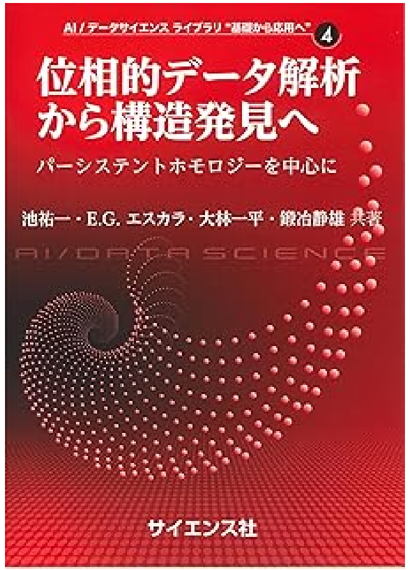
- [Escolar+2022](#) では、企業の特許データを利用して、企業の技術戦略の可視化を実施。
- $X=\{p_{i,t}=(p_{i,t,1},\ldots,p_{i,t,S})\in\mathbb{R}^S \mid i=1,\ldots,F, t=0,\ldots,T\}$
    - S 個の特許カテゴリ、F 個の企業数、T ステップ



参考図書とOSS

TDA の参考図書

- TDA の代表的な教科書
- 内容は難しいが、応用例が豊富



- Persistent Homology が中心
- 内容は難しいが、応用例が豊富

- Persistent Homology の入門書
- 学部程度の線形代数の知識で入門できることがありがたい

TDA OSS

GUDHI

- C++ ライブラリ
- Pythonモジュールも提供
- Persistent Homology がメイン
- 様々なタイプの複体やデータ構造に対応

Giotto-tda

- Scikit-learn に準拠
- Persistent Homology, Mapper に対応

Ripser

- Vietoris-Rips 複体に対するパーシステントホモロジーを高速に計算するソフトウェア

RIVET

- 2 パーシステント加群に対応