

パーシステントホモロジーの基礎と 材料工学への適用例

平岡裕章* 大林一平**

1. データの形

膨大な実験画像データ、Protein Data Bank、大規模シミュレーションで再現される原子配置データ等々、現在の諸科学・産業の現場ではデータが溢れている。このようなデータ群から考察対象に対して新たな発見や理解を深めることを可能にするデータ科学が昨今人気である。このようなデータ駆動型の問題では「データが多い」ことよりもむしろ「データが複雑」であることが問題である場合が多い。その場合一見複雑な構造に見えるデータを何らかの形で変換し低次元化できれば、よりデータ構造の本質に迫ることが可能になるであろう。複雑なデータに対して適切な記述子を開発することは現在のデータ科学における重要な課題となっている。

例えば N 次元ユークリッド空間の有限個の点の集まり

$$P = \{x_i \in \mathbb{R}^N \mid i = 1, \dots, m\} \quad (1)$$

からなるデータを考える。簡単な状況として P が周期的に配置された点の集まりの場合は、フーリエ解析が代表的な記述子を与える。また P が幾つかのクラスターの集まりで構成されているときは、各クラスターを記述子としデータを表現することも可能であろう。周期系 P では点たちの周期的なつながり、クラスター系では点たちの近さに関するつながりといったように、点たちのつながり具合を特徴付けることでデータの構造は表現できる。しかしながら、後述するガラスの原子配置などからも明らかのように、現在のデータ科学が直面している諸問題に対してこれらの古典的な解析手法は役不足であり、より詳細な構造を表現できる記述子の開発が望まれている。

例えば図1(a)で与えられる平面上のデータを考えて見る。この場合クラスターとしての特徴づけではなく、「穴」の存在としてデータのつながり具合を特徴づける方が自然に見える。このような図形のつながり具合を大雑把に調べることが、現代数学の一分野であるトポロジーが得意とするところである。特に、穴の存在に着目した特徴抽出は、従来ホモロ

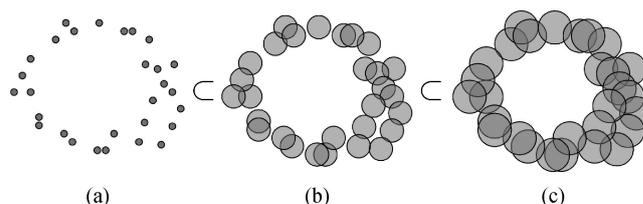


図1 「穴」の構造を持つデータ(a)とそれを球体で膨らませたモデル(b), (c).

ロジーと呼ばれる概念がその役割を担ってきた。実際、図1のようなデータに対しては、各点を適当に膨らませた球で置き換えることで、1次ホモロジーを用いてデータに内在する穴を検出することができる[†]。さらにホモロジーの概念を拡張したパーシステントホモロジーを用いることで、穴の存在だけでなくその形や大きさなどのより詳細な幾何情報も得ることができ、「データの形」を調べることが可能になる。

本稿では大学1年生程度の基本的な線形代数の知識のみを仮定して、パーシステントホモロジーについての解説を試みる。その後、著者らが近年取り組んでいるシリカガラスへの応用や機械学習との融合についても紹介する。なお、ここで取り扱う内容のより詳細については参考文献⁽¹⁾⁻⁽³⁾を参照されたい。また、我々のグループではここで紹介するパーシステントホモロジーの計算ソフトウェア「HomCloud」も開発している⁽⁴⁾。このソフトウェアはトポロジーの予備知識を仮定しない素人でも、パーシステントホモロジーを用いて材料の構造解析までを楽しめる。本解説記事とあわせて HomCloud を実際に計算させることで、より理解が深まると思われる。なお、本記事の前半は参考文献⁽³⁾をもとに構成している。

2. 幾何モデル

点列データ(1)に対して適当なデータ処理を施しその形を

* 京都大学高等研究院；教授，理化学研究所革新知能統合研究センター；チームリーダー（〒606-8501 京都市左京区吉田牛ノ宮町）

** 理化学研究所革新知能統合研究センター；研究員

Persistent Homology and Its Applications to Materials Science; Yasuaki Hiraoka* and Ippei Obayashi** (*KUIAS, Kyoto University and AIP, RIKEN., Kyoto. **AIP, RIKEN., Sendai)

Keywords: topology, homology, persistent homology, persistence diagram, machine learning, silica glass

† クラスター解析は0次ホモロジーに対応する。

2018年8月21日受理[doi:10.2320/materia.58.17]

調べていこう. その際, (i)穴の抽出が可能, (ii)計算機での処理が可能, の2点を満たす数学的概念に Čech 複体とよばれる単体複体(多面体)がある.

ここで有限集合 V 上の単体複体 X とは, V の部分集合の集まりで, (i)全ての点 $a \in V$ について $\{a\} \in X$, (ii) $\sigma \in X, \tau \subset \sigma \Rightarrow \tau \in X$, を満たすもので与えられる. X の要素 σ で点の個数が $|\sigma| = k+1$ 個となるものを k 単体といい, k を単体 σ の次元という ($|\sigma|$ は σ の点の個数). 単体複体 X の次元 $\dim X$ を, X に含まれる単体の次元の最大値で定め, また記号 X_k で X の k 単体の集まりを表すことにする.

このとき Čech 複体 $\mathcal{C}(P, r)$ とは P 上の単体複体であり, その単体は

$$\{x_{i_0}, \dots, x_{i_k}\} \in \mathcal{C}(P, r) \iff \bigcap_{a=0}^k B_r(x_{i_a}) \neq \emptyset$$

で割り当てられる. ここで $B_r(x_i) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \|x - x_i\| \leq r\}$ は点 x_i を中心とする半径 r の球を, 記号 \emptyset は空集合を表す. つまり半径 r の球の交わりを調べることで単体を構成していくのである.

図2は, パラメータ r を変化させた際の, Čech 複体の変化を表示している. ここで, 各半径 r ごとに上段の球の和集合と下段の Čech 複体は, 互いに連続変形で移り合えることに気がつく. これは脈定理と呼ばれるトポロジーの基本定理からの帰結であり, $\bigcup_{i=1}^n B_r(x_i)$ と $\mathcal{C}(P, r)$ は切り張りしない連続変形で移り合える[†]ことが保証されている. よって特に穴の情報は保存される.

このように Čech 複体はデータ P とパラメータ r により定まる. パラメータ r が十分小さいとき, Čech 複体は P と同じ離散的なデータ構造を与える. 一方, r が徐々に大きくなると, データ間のつながりが生まれ始め, 十分大きくすると全てが完全につながった状態になる. このように, r はデータのつながり具合を操る解像度とみなすことができる.

また, パラメータの増大列 $r_1 < \dots < r_n$ に応じて, Čech 複体の増大列 $\mathcal{C}(P, r_1) \subset \dots \subset \mathcal{C}(P, r_n)$ が得られることにも注意する. このような単体複体の増大列のことをフィルトレーションと呼ぶ.

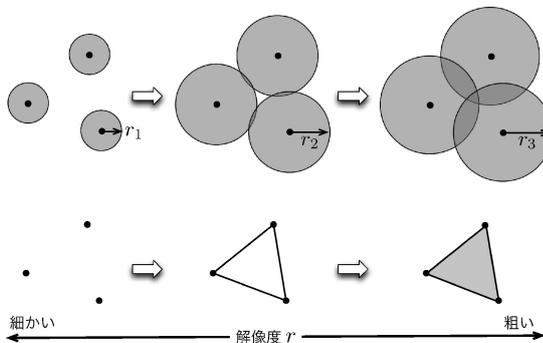


図2 上段は球の増大列. 下段は対応する Čech 複体の増大列.

[†] ホモトピー同値.

実際の数値計算では, ここで紹介した Čech 複体と同じ性質を持ちかつ計算効率の良いアルファ複体⁽¹⁾がよく用いられる. その説明には幾つか準備が必要なためここでは割愛するが, ソフトウェアとしては CGAL⁽⁵⁾ が公開されている. また本稿では式(1)の形の入力データのみ扱うが, その他の重要な幾何モデルとして方体複体が挙げられる. 方体複体に対しても次節以降の話題は適用でき, それらは画像解析などへの応用が強く期待されている. 方体複体の詳細については文献⁽⁶⁾を挙げておく.

3. ホモロジー

ホモロジーとは, 単体複体の中に存在する穴を代数的に抽出する道具である. ここでは, 説明の簡略化と次節以降の話題を考慮して, ベクトル空間としてホモロジーを導入する.

単体複体 X の頂点集合を $V = \{1, \dots, n\}$ としよう. ここで単体 σ の頂点を順序付きで並べたものを $\langle \sigma \rangle = \langle v_0 \dots v_k \rangle$ と書くことにする. つまり $v_0 < \dots < v_k$ であり不等号は $V = \{1, \dots, n\}$ 上に定まる通常のものを用いる.

まず単体の次元 k ごとに, k 単体を基底として持つ体 K 上のベクトル空間^{*}

$$C_k(X) = \left\{ \sum_{\sigma \in X_k} a_\sigma \langle \sigma \rangle \mid a_\sigma \in K \right\}, \quad 0 \leq k \leq \dim X$$

を導入する. ここで $k < 0, k > \dim X$ では $C_k(X) = 0$ としておく. ホモロジーの考え方では, 穴を抽出する為にまずは境界を特徴づける. そこで, 境界作用素と呼ばれる線形写像 $\partial_k: C_k(X) \rightarrow C_{k-1}(X)$ を

$$\partial_k \langle v_0 \dots v_k \rangle = \sum_{i=0}^k (-1)^i \langle v_0 \dots \hat{v}_i \dots v_k \rangle,$$

$$\partial_k (\sum a_\sigma \langle \sigma \rangle) = \sum a_\sigma \partial_k \langle \sigma \rangle$$

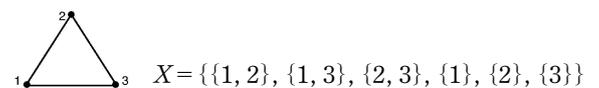
で導入する. ここで $\langle v_0 \dots \hat{v}_i \dots v_k \rangle$ は v_i を除くことを意味する. また2番目の式は1番目の式の線形拡張である.

定義に従って計算をすると, $\partial_k \circ \partial_{k+1} = 0$ を確認でき, これより $\text{im } \partial_{k+1} \subset \ker \partial_k$ が従う^{††}. このとき, 単体複体 X の k 次ホモロジーは, 商ベクトル空間

$$H_k(X) = \ker \partial_k / \text{im } \partial_{k+1} = \{[c] \mid c \in \ker \partial_k\}$$

で定められる. ここで $[c] = c + \text{im } \partial_{k+1}$ は同値類を表す記号である. また $H_k(X)$ のベクトル空間としての次元を $\beta_k(X)$ と書き k 次ベッチ数と呼ぶ. 次の例で確かめるが, $H_k(X)$ は X に存在する k 次元の穴をベクトル空間として表現し, またベッチ数 $\beta_k(X)$ は k 次元の穴の数を表すことになる.

Example 3.1. 頂点集合 $V = \{1, 2, 3\}$ 上の単体複体



のホモロジーを計算してみる. 境界作用素は $\partial_k = 0 (k \neq 1)$ と

[†] K は実数体 \mathbb{R} や有理数体 \mathbb{Q} と置いて良い.

^{††} im, \ker は線形写像の像と核を表す.

$$\partial_1 = \begin{bmatrix} \langle 12 \rangle & \langle 13 \rangle & \langle 23 \rangle \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \langle 1 \rangle \\ \langle 2 \rangle \\ \langle 3 \rangle \end{matrix}$$

で与えられる。よって、1次ホモロジーは

$$H_1(X) = \ker \partial_1 = \text{span}\{\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle\} \simeq K$$

となり、1次元の穴(リング) $\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle$ から生成される。同様に計算をしてみると、0次ホモロジーも1次元ベクトル空間 $H_0(X) \simeq K$ となり、0次元の穴(連結成分)が1つ存在する事を示している。

包含関係にある単体複体の組 $X \subset Y$ には、それぞれホモロジーが定まるが、さらに線形写像

$$H_k(X) \ni [c] \mapsto [c] \in H_k(Y)$$

が誘導される。ここで定義域の $[c]$ は $H_k(X)$ での同値類を、値域の $[c]$ は $H_k(Y)$ での同値類をそれぞれ示している。

Example 3.2. X を例3.1と同じ単体複体とし、 $Y = X \cup \{1, 2, 3\}$ とする。単体複体 Y では、 $\text{im } \partial_2 = \ker \partial_1 = \text{span}\{\langle 12 \rangle - \langle 13 \rangle + \langle 23 \rangle\}$ より、 $H_1(Y) = 0$ である。よって、誘導される線形写像 $H_1(X) \rightarrow H_1(Y)$ は零写像となる。これは、包含写像 $X \rightarrow Y$ で穴が消滅していることを示している。一方、 $Y' = X \cup \{4\} \cup \{1, 4\}$ としておくと、誘導される線形写像 $H_1(X) \rightarrow H_1(Y')$ は同型写像となる。これは包含写像 $X \rightarrow Y'$ での穴の存続を意味する。

Čech 複体 $\mathcal{C}(P, r)$ のホモロジーを計算することで、データ P に内在する穴の情報が取り出せることになる。例えば図1のデータについては、(a), (b), (c)の3つの半径パラメータ $r_1 < r_2 < r_3$ ごとに、1次ホモロジーは

$$H_1(\mathcal{C}(P, r_1)) = 0, \quad H_1(\mathcal{C}(P, r_i)) \simeq K (i=2, 3)$$

で与えられる。ここで r_2 では右下の方に存在する小さな穴、 r_3 ではデータ全体で構成されている大きな穴が、1次元のベクトル空間として表現されている。しかしながら、これらの1次元ベクトル空間を個別に調べるだけでは、それぞれの穴の大きさや、 r_2 での穴が消滅し r_3 で新たな穴が発生しているといった存続性を調べることはできない。

このような穴の性質を調べるには、例3.2のように、包含関係が誘導する線形写像 $H_1(\mathcal{C}(P, r_2)) \rightarrow H_1(\mathcal{C}(P, r_3))$ を調べればよい。この場合の線形写像は零写像で与えられ、穴の消滅と発生がきちんと記録されていることに注意されたい。

このように、ホモロジーと包含写像が誘導する線形写像をうまく組み合わせることで、データに存在する穴とその幾何学的な情報を抽出することが可能になる。次に説明するパーシステントホモロジーは、この考え方をさらに発展させた道具である。

4. パーシステントホモロジー

前節のホモロジーは単体複体に対して定められたが、パーシステントホモロジーは単体複体のフィルトレーション $\mathcal{X}: X^1 \subset \dots \subset X^i \subset \dots$ に対して定義される。ここでフィルトレーション \mathcal{X} は、あるパラメータ n 以降では $X^i = X^n (i \geq n)$ であ

ると仮定する。また、単体 $\sigma \in X^n$ の発生時刻を $t_\sigma = \min\{t | \sigma \in X^t\}$ で定める。このときパーシステントホモロジー $H_k(\mathcal{X})$ は、各 X_i でのホモロジー $H_k(X_i)$ とその間に誘導される線形写像の列

$$H_k(\mathcal{X}) : H_k(X_1) \rightarrow \dots \rightarrow H_k(X_i) \rightarrow \dots \rightarrow H_k(X_n) \quad (2)$$

として定められる。線形写像が包含関係から誘導されていることから、直感的には k 次元の穴がフィルトレーション内でどの程度存続しているかが記録されているであろう。実際、パーシステントホモロジー $H_k(\mathcal{X})$ に対して $b_i, d_i \in \{1, \dots, n\}$ ($b_i \leq d_i$)および非負整数 ℓ_k が一意に定まり

$$H_k(\mathcal{X}) \simeq \bigoplus_{i=1}^{\ell_k} I[b_i, d_i] \quad (3)$$

の形に分解できることが知られている。ここで区間 $I[b, d]$ は0および1次元ベクトル空間 K の n 個の列とそれらの間の線形写像として

$$I[b, d] : 0 \rightarrow \dots \rightarrow K \rightarrow \dots \rightarrow K \rightarrow \dots \rightarrow 0$$

で与えられ、左端の K は b 番目、右端の K は d 番目に位置している。ここで中央に連続して現れる $K \rightarrow K$ は恒等写像で与えられる。そのトポロジカルな意味は、 X_b で発生し X_d まで存続しその後消滅する k 次元の穴を表している。

一意な分解式(3)より、発生と消滅の組 (b_i, d_i) を指定することでパーシステントホモロジーは同型の差を除いて決まる。そこでこの組を平面上の多重集合

$$D_k(\mathcal{X}) = \{(b_i, d_i) | i=1, \dots, \ell_k\}$$

として表示したものを、 \mathcal{X} の k 次パーシステント図と呼ぶ。

定義より、パーシステント図の点は全て対角線より上側に位置する。対角線付近の点 (b_i, d_i) は存続時間 $\ell_i = d_i - b_i$ が短く、一方で、対角線から離れた点は存続時間が長い穴に対応する。このように、パーシステント図を描かせることで、視覚的に穴の存続性を理解することができる。例えば、図1のデータからČech 複体のフィルトレーションを構成し、その1次パーシステント図を描かせると、中央の図に存在する右下の小さい穴は対角線付近に現れ、一方で右図にある大きな穴は対角線から離れたところに位置することになる(図3参照)。パーシステント図に現れる発生・消滅対 (b, d) (もしくは式(3)に現れる $I[b, d]$)をパーシステント図の生成元ともいう。

パーシステントホモロジーには幾つかの導入の仕方があるが、前節と同様に境界作用素を用いた定義や、行列の基本変

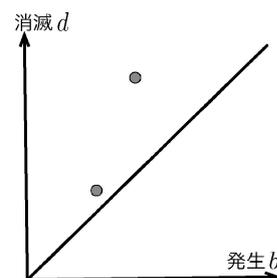


図3 図1の1次パーシステント図。

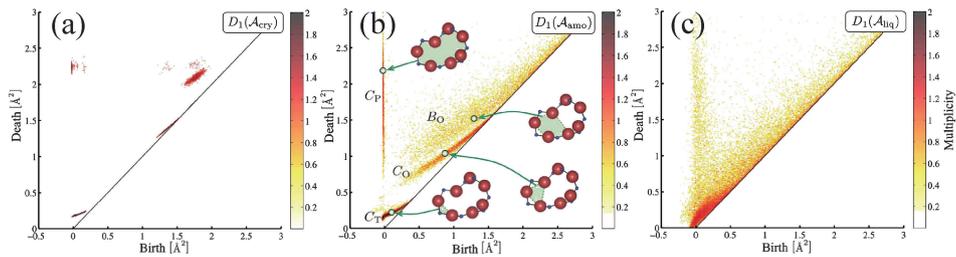


図4 シリカの1次パーシステント図((a):結晶, (b):ガラス, (c):液体). 色付けは対数重複度を用いている. (b)にはそれぞれの領域で特徴的な原子リング構造を示している(赤球:酸素原子, 青球:ケイ素原子). (オンラインカラー)

形を用いた表示式(3)の導出については, 例えば拙著⁽²⁾もしくは解説記事⁽⁷⁾を参照されたい.

5. シリカガラスの構造解析

この節では著者らが最近出版した論文⁽⁸⁾で議論した, パーシステントホモロジーを用いたガラスの構造解析に関する成果を部分的に紹介する.

よく知られているようにガラス状態の原子配置は一見無秩序に配置されているように見える. しかしながら動径分布関数や散乱パターンをみると, 液体状態とは近距離や中距離オーダーで違いが見られる. このようなガラスの幾何構造を明確に特徴付ける新たな記述子の開発は科学・産業の両側面から強く期待されている.

そこでガラスの原子配置を空間点データ(1)とみなしパーシステント図を描かせてみよう. 図4は分子動力学シミュレーションで計算したシリカの結晶, ガラス, 液体状態の原子配置に対して1次パーシステント図を計算したものである(シミュレーションを含む計算の詳細は原論文⁽⁸⁾を参照されたい). 1次のパーシステント図ということでリング構造に着目していることに注意しておく.

まず結晶状態(a)では実現できるリングの形が限られていることから, パーシステント図は幾つかの孤立島から構成されている(完全結晶の場合は0次元的な点の集まりに収束する). また液体状態ではリング形状をある程度自由に変形できることが反映されて, パーシステント図が2次元的に散布されている. 一方で, ガラスのパーシステント図にのみ曲線(C_P , C_T , C_O)が現れていることに注意する. いささか乱暴に要約すると, パーシステント図のサポートの次元が0, 1, 2に応じて結晶, ガラス, 液体の3状態が識別されていることになる. つまりパーシステント図のサポート次元はガラス転移を幾何学的に説明する「秩序変数」として振る舞っているようにも見える†.

さてここまでは与えられた原子配置に対してパーシステント図を求めたが, 得られたパーシステント図の生成元を指定した際, その生成元を構成している原子の集まりを再現することが可能である. これはパーシステントホモロジーの生成

元についての逆問題とみなすことができ, これによりパーシステント図の中で興味ある特徴(例えば曲線など)が得られた際に, 具体的にその特徴を生み出す原子配置を特定することが可能になる. ここで生成元は商ベクトル空間の元を用いて記述されていることから, 一般には指定された生成元を与える点データは複数存在するが, 適切な最適化問題の設定を導入することで逆を一意に定めることが可能となる. 詳細は論文⁽⁹⁾を参照されたい.

次にガラスのパーシステント図に現れる曲線の意味を考えてみる. まずこれらの曲線は, シミュレーションのパラメータを保ったまま時間発展させた場合, その形状は不変に保たれる. つまり熱的なゆらぎのもとでパーシステント図の生成元は曲線の接線方向には動けるが, 曲線の法線方向には動くことができないことが観測される. ここでパーシステント図の生成元は原子配置のリング構造から定められていることを思い出そう. よってここで観察される法線方向に動けないという制約条件は, 熱ゆらぎのもとでの原子のリング構造の幾何学的な制約に他ならない. また同様に接線方向はリング形状の許容される変形を示していることになる. つまりガラスの硬さに関する制約条件がパーシステント図に埋め込まれているとも思える. 実際, 論文⁽⁸⁾では加圧シミュレーションのもとでガラスのパーシステント図に現れている曲線が不変であることが示されている.

本稿では紙面の都合でシリカガラスの構造解析のみ取り扱ったが, その他の材料科学への適用例は論文⁽¹⁰⁾⁻⁽¹²⁾などを挙げておく.

6. パーシステント図の機械学習

上の節のようにパーシステント図を直接目で比較してデータの特徴的なパターンを発見できるというのは幸運な場合で, 実際にはそれではよくわからない場合が多い. そこでどうするかというと, 多くのパーシステント図を用意してそれを統計的に処理することで何らかの特徴的なパターンを発見するのである. この節では文献⁽¹³⁾で導入された手法について解説する.

ここで紹介する機械学習の手法の全体像は図5で示されたものである. 一般的な機械学習の手法では, 個々の入力データをデータの特徴を抽出したようなベクトルに変換し, その

† この考察を正当化することは興味深い課題であると思われる.

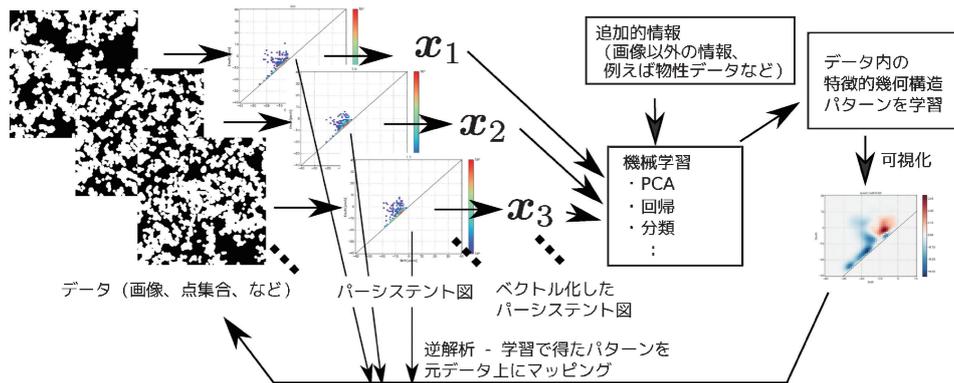


図5 パーシステントホモロジーを機械学習を組み合わせた手法の概要。(オンラインカラー)

ベクトルに対して解析をする(このベクトルは特徴量と呼ばれる)。パーシステント図をうまくベクトルに変換することで、入力データの特徴的な幾何パターンを取り出すことができる。パーシステント図の変換手法は様々な手法が提案されているが、ここでは Persistence Image (PI) と呼ばれるシンプルな手法を利用する。また、機械学習の手法としては単純な(一般化)線形モデルと呼ばれる手法を用いる。PI と線形モデルの組み合わせは、そのシンプルさゆえに図5のような逆解析を利用した手法と相性が良く、学習結果を理解するのに有効である。

まずはPIについて解説する。PIは論文⁽¹⁴⁾で導入された手法で、基本的なアイデアとしてはパーシステント図のヒストグラムの各ビンの頻度数をベクトルの各要素とみなす、というものである。ただ、このような安直な方法だと入力への微小なノイズに対してベクトルが大きく変化してしまうという欠陥がある。またパーシステント図の上の各点の重要度(対角線から離れるほど重要度が高い)が反映されないという欠点もある。これらの問題を解決するため、PIでは次のような平面上の分布関数 ρ をヒストグラムのかわりに考える。

$$\rho(x, y) = \sum_{(b_i, d_i) \in D_k(\mathcal{X})} w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) w(b, d) = \arctan(C(d-b)^p) \quad (4)$$

ここで σ, C, p はパラメータで、データに合わせて適当に事前に決める必要がある。これは $D_k(\mathcal{X})$ の各点に w の重みの2次元ガウス分布を置いて足し合わせたものである。 w は対角線との距離によって決まり、対角線に近くなるほど点の重要度が低くなることを反映している。またガウス分布を使うことで実用上はパーシステント図の2次元平面をグリッドに切ってこの関数を有限次元に近似して利用する。このようにすることでノイズの問題や重要度の問題に対応する。

次に機械学習について解説しよう。機械学習、特にここで紹介する教師あり機械学習の目的は $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ という n 個のデータからその背後に隠された \mathbf{x} と y の間の関係 $y=f(\mathbf{x})$ を発見することである。データにはノイズやランダムネスが含まれているので、 $y_i=f(\mathbf{x}_i)$ を満たすような f を見つければ良い、というわけではなく、ノイズなどの

影響を取り除いた f を見つけることが機械学習の鍵となる。線形モデルというのは f に

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + b + (\text{noise}) \quad (5)$$

という形を仮定し、 \mathbf{a} と b をデータからうまく調整する(これが「学習」である)ことで適切な f を見いだす。

この2つのアイデアを組み合わせるために、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ としてPIで得られたベクトルを利用する。パーシステント図が抽出した幾何的特徴をベクトルに符号化して機械学習と組み合わせることで、幾何構造と y の関連を見出すのである。(4)と(5)を組み合わせると、(5)に現れる \mathbf{a} をパーシステント図の平面上の符号付き分布と見なすことで、 y とパーシステント図の関係は近似的に

$$y = \sum_{(b_i, d_i) \in D_k(\mathcal{X})} \int a(x, y) w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) \times dx dy + b + (\text{noise}) \quad (6)$$

と表されることがわかる。ここで $a(x, y)$ はベクトル \mathbf{a} をPIの離散化のルールを逆に考えて平面上の分布とみなしたものである。この式の

$$\int a(x, y) w(b_i, d_i) \exp\left(-\frac{(x-b_i)^2 + (y-d_i)^2}{2\sigma}\right) dx dy$$

の部分がパーシステント図の各点 (b_i, d_i) がどの程度 y の値に貢献しているかを表しており、 $a(x, y)$ の正負や大きさによってその貢献度が変化するのわかる。これによって y の値に対する貢献度が大きい (b_i, d_i) を特定することができる。 b_i, d_i の各値はその幾何構造の特徴的の空間スケールに対応しているため、その値から y と関連の深い重要な空間スケールを特定することができる。さらにこの重要度が高い (b_i, d_i) を上で説明した逆問題の手法で入力データに戻すことで y の値に重要なかたちを具体的に特定することもできるのである。材料の問題にこの手法を適用する場合には y として注目している物性値を使うのである。文献⁽¹²⁾では焼結鈷のX線CT画像にこの解析手法を適用して、 \mathbf{x} としてCT画像の酸化鉄やカルシウムフェライトの部分の形状から計算されたパーシステント図をベクトル化したもの、 y として画像から取り出したクラックの大きさを使うことで、クラックと相関の強いかたちを特定することに成功した。このかたちは焼結鈷のき

