

硕士学位论文

持续同调的理论与计算

**Persistent Homology: Theory and
Computations**

研 究 生：刘纪章

指 导 教 师：朱一飞助理教授

二〇一〇年六月

国内图书分类号：O189
国际图书分类号：QA612.O93

学校代码：14325
密级：公开

理学硕士学位论文

持续同调的理论与计算

硕士研究生：刘纪章

指导教师：朱一飞助理教授

申请学位：理学硕士

学科专业：数学

答辩日期：2020年5月

培养单位：数学系

学位授予单位：南方科技大学

Classified Index: O189

U.D.C: QA612.O93

Thesis for the degree of Master of Science

Persistent Homology: Theory and Computations

Candidate:	Liu Jizhang
Supervisor:	Assistant Professor Zhu Yifei
Academic Degree Applied for:	Master of Science
Speciality:	Mathematics
Date of Defence:	May, 2020
Affiliation:	Department of Mathematics
Degree-Conferring-Institution:	Southern University of Science and Technology

学位论文公开评阅人和答辩委员会名单

公开评阅人名单

郇真	副研究员	华中科技大学
黄瑞芝	助理研究员	中国科学院数学与系统科学研究院
胡勇	助理教授	南方科技大学

答辩委员会名单

主席	袁平之	教授	华南师范大学
委员	胡勇	助理教授	南方科技大学
	李展	助理教授	南方科技大学
秘书	黄少创	访问助理教授	南方科技大学

摘要

本毕业论文是一篇关于持续同调的综述报告，主要参考文献是 Edelsbrunner^[1], Oudot^[2] 和 Hatcher^[3]。持续同调理论在应用层面通过对数据集探测尺度的变化计算相应的同调群，发现在尺度变化下持续最久的同调群生成元，从而完成对数据集样本几何特征的提取。理论层面可以抽象为 quiver 表示论。

关键词：持续同调，Betti 数，离散 Morse 理论，quiver 表示论

Abstract

This thesis is a survey of persistent homology. The main references are Edelsrunner^[1], Oudot^[2], and Hatcher^[3]. Towards applications, the method of persistent homology first builds complex structures according to the scale change of the data set. It then calculates the corresponding homology groups of the complexes, and identifies those generators that last the longest under the scale change. In this way, persistent homology extracts the geometric features robust under perturbation. Theoretically it can be interpreted as quiver representation theory.

Keywords: persistent homology; Betti number; discrete Morse theory; quiver representation theory

摘 要.....	I
Abstract.....	II
第 1 章 背景介绍	1
第 2 章 一般聚类方法	3
2.1 K-means 聚类	3
2.1.1 谱聚类.....	4
2.2 密度聚类	6
第 3 章 复形	7
3.1 单纯复形	7
3.1.1 单纯映射.....	8
3.1.2 重心重分.....	8
3.1.3 单纯逼近.....	9
3.1.4 凸集系统.....	10
3.1.5 Nerves	11
3.1.6 Čech 复形.....	11
3.1.7 Vietoris-Rips 复形	11
3.2 Delaunay 复形.....	12
3.2.1 反转 (Inversion).....	12
3.2.2 Voronoi 图.....	13
3.2.3 提升 (lifting).....	14
3.3 Alpha 复形.....	15
3.3.1 Alpha 权重复形.....	16
3.3.2 滤链 (filtration).....	16
3.3.3 抽象单形结构.....	17
3.3.4 坍塌.....	18
第 4 章 同调	20
4.1 单纯同调	20
4.2 简约同调	21
4.3 链映射及诱导同态.....	22

4.4	矩阵表示	22
4.5	正合序列	23
4.6	相对同调	24
4.7	上同调与对偶	25
4.7.1	上同调群	25
第 5 章	Morse 理论	31
5.1	连续 Morse 理论	31
5.2	离散 Morse 理论	32
第 6 章	持续同调	34
6.1	持续图	34
6.2	矩阵计算	35
6.3	稳定性	37
6.4	持续图像分布法	41
6.5	Quiver 理论与持续同调	41
结 论	46
参考文献	47
致 谢	49
个人简历、在学期间完成的相关学术成果	51

第 1 章 背景介绍

现代科学与工程的一个重要特征是各种各样的数据正在以前所未有的速度产生。数据体量大、数据类型繁多、价值密度低、数据增长速度快、数据的准确性和可信赖度要求高，这是大数据典型的五大特征。现代社会的各行各业都充满了数据，这些数据的类型多种多样，不仅包括传统的结构化数据，也包括网页、文本、图像、视频、音频等非结构化数据。大数据的核心问题在于如何去分析海量的数据，从中获取有价值的信息或者规律，从而帮助我们更好地理解这个世界。由此诞生出一门新兴的学科——数据科学。数据科学主要包括两个方面：用数据的方法研究科学和用科学的方法研究数据。前者包括生物信息学、天体宇宙学等等。后者包括统计学、机器学习等等。用数据研究科学，最典型的例子是开普勒根据天文学家第谷留下的行星运行观测数据总结出开普勒三大定律；用科学研究数据，伟大的数学家、物理学家牛顿就是这样做的，他通过建立常微分方程组将行星运动问题划归为一个纯粹的数学问题，也能够得到开普勒的结论，而且这种方法更加本质。但现实中，往往“牛顿模式”很难，因为我们可能对某一些现象缺乏本质的了解，但是“开普勒模式”往往是行之有效的。一般来说，数据集可以看成是一个流形，从而引入一些数学结构进行分析，例如度量结构、网格结构、代数结构、拓扑结构、函数结构^[4]等等。传统的数据分析经常会遇到一些问题：

1. 需要一些先验的行业知识，例如朴素贝叶斯方法。
2. 往往需要一个度量的选取，但是对于一些复杂问题而言，我们事先并不知道取什么度量才好。
3. 高度依赖于参数的选取，例如密度聚类中半径的选取，机器学习中超参数的选取等等。
4. 对于异常值的敏感性。

为了解决上述问题，持续同调（persistence homology）的拓扑学方法被引入。简单来说，持续同调通过对数据集探测尺度的变化计算相应的同调群，发现在尺度变化下持续最久的同调群生成元，从而完成相应的聚类。值得注意的是，持续同调以一种不那么敏感的方式研究数据，它忽略一些敏感的几何特性，如曲率。事实上，持续忽略了距离函数的影响。这种对度量的不敏感在研究中是极其有用的，在这种情况下，人们只需要任意选取一种度量方式即可。另外持续同调是一种无监督学习聚类方法（unsupervised learning），事先不需要行业先验知识。至于对参数的低依赖性，则是因为持续同调理论本身就是在尽可能地遍历所有参数的可能性，从中选出最好的，而最终聚类效果的好坏却独立于参数的选取，只与数据集本身

的拓扑性质有关。最后，由于普通的聚类只关心数据集连通分支的个数，而持续同调理论不仅仅只关心连通分支（0-维 Betti 数），更关心高维的 Betti 数，如果数据集中有某个点是异常离群值，那么在高维的持续同调计算中（barcode）将会被视为噪声抹去它的影响。正是因为以上一些原因，持续同调理论与普通聚类算法相比具有与生俱来的优势，也因此引起了人们的高度重视。下面将从持续同调的发展历史谈起：

1992 年，P.Frosini^[5] 引入 “size function”，相当于今天的 0 维持续同调，标志着该方法正式起步。

1995 年，K.Mischaikow 和 M.Mrozek 发表了一个计算机辅助的 Lorenz 方程中混沌的证明^[6]；关键的一步是计算 Conley 指数，它是相对同调类。这对于研究者在机器计算有限近似空间的同调群方面产生了相当大的兴趣。

1999 年，V.Robins 发表了一篇论文^[7]，强调函数性有助于从有限样本的 Cech 复形中逼近底层空间的同调性；同时，T.Kaczynski、K.Mischaikow 和 M.Mrozek 出版了关于通过胞腔复形的简单同伦类型约化进行有效同调计算的书籍。

2002 年，H.Edelsbrunner、D.Letscher 和 A.Zomorodian 从计算几何的角度引入了持续性^[8]，但是他们的算法仅适用于球体的子复形，并且仅适用于 mod-2 系数。

2005 年，A.Zomorodian 和 G.Carlsson^[9] 通过分次主理想整环上分次模的表示理论重新解释了滤链的持续性，从而给出了任意域系数上所有有限胞腔复形的一种算法。另外，他们还引入了 “barcode”。

2007 年，H.Edelsbrunner, D. Cohen-Steiner 和 J.Harer 引出了持续同调算法稳定性的考量^[10]。

2008 年，G.Carlsson, Singh 和 Sexton, 一起创办了 Ayasdi 公司, 将数学与金融相结合，真正将理论用于实践当中。

2009 年，G.Carlsson 和 A.Zomorodian 用 quiver 表示理论指出，得到多参数持续模的有限 “barcode” 是不可能的，并强调维数 2 是该领域理论工作的新前沿^[11]。

2012 年，F. Chazal, V. de Silva, M. Glisse, 和 S. Oudot 对稳定性定理进行了扩展^[12]：关于 “tameness” 和 “sub-levelsets” 的各种假设都消失了。他们为持续同调的代数和范畴化解释打开了大门，例如 bubenik-scott^[13]。

2015 年，M. Lesnick 发表了一篇关于多参数持续模中的交织距离的全面研究^[14]。

2018 年，R. MacPherson 和 A. Patel 创造了一种 “bisheaves” 去研究可三角剖分流形映射纤维的多参数持续性^[15]。

第 2 章 一般聚类方法

在这一章我们主要介绍一般的聚类方法，聚类（clustering）是将数据集中相似的样本进行分组的过程，每一个组称之为一个簇（cluster），注意我们事先并不知道有多少个簇。这里不仅可以与持续同调方法进行一个对比，而且在大多数实际情况中，我们往往使用的是一种集成方法。比如说先用持续同调方法提取数据样本的特征，这些特征基于空间的拓扑性质，比如说连通分支个数，高维 Betti 数等等，当我们提取完了这些特征之后，我们再用一般的简单聚类方法进行处理，从而得到一个比较好的结果，所以这里我们有必要简单介绍一些常用的聚类方法^[4]。

2.1 K-means 聚类

K-means 聚类源于信号处理，它的目标是将 n 个样本划分到 K 个簇中，其中每个样本属于自己最近的簇。给定有限数据集 $S = \{x_1, \dots, x_n\} \subseteq \mathbb{R}^d$ ，引入一系列质心 $c_k \in \mathbb{R}^d$ ，我们想要为每一个样本找到一个簇，使得它与它最近的质心 c_k 之间距离的平方和最小。设

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{如果 } x_i \text{ 属于第 } k \text{ 个簇} \\ 0 & \text{其他的 } j \end{cases}$$

下面考虑目标函数：

$$J = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta_{ik} \|x_i - c_k\|^2$$

我们想要找到合适的 δ_{ik} 和 c_k 使得 J 达到最小值。具体做法就是先初始化 c_k ，然后通过调整 δ_{ik} 来最小化 J ，然后保持 δ_{ik} 固定，调整 c_k 来最小化 J 。不断重复迭代，直至收敛：

由于 J 关于 δ_{ik} 是一个线性函数，并且不同的 i 的相关项是独立的，故我们可以对每个 i 进行优化，即如果 k 的取值使得 $\|x_i - c_k\|^2$ 最小，我们就令 $\delta_{ik} = 1$ ，否则就是 0。

当 δ_{ik} 固定时， J 是关于 c_k 的一个二次函数，令它的导数为 0，有：

$$\frac{\partial J}{\partial c_k} = 2 \sum_{i=1}^n \delta_{ik} (x_i - c_k) = 0$$

故

$$c_k = \frac{\sum_{i=1}^K \delta_{ik} x_i}{\sum_{i=1}^K \delta_{ik}}$$

不断重复上述过程，直到收敛为止，我们就得到了 K-means 聚类，不过，这个算法有可能会收敛到一个局部最优解。还有就是 K 值的选取对于该方法有很大的影响，或者说如何选择一个较好的 K，也是一个问题。一般的解决办法有：

1. 通过贝叶斯信息准则 (Bayesian information criterion) 的统计学方法确定；
2. 从 $K = 1$ 开始，不断对簇进行聚类，直至每个簇的样本都服从高斯分布 (normal distribution)。

另外。离群值对它的影响也很大。

2.1.1 谱聚类

谱聚类方法从图割 (graph cut) 的角度来解决聚类问题。基本思路就是先建立一个带权重的无向图 $G = (V, E)$ ，其中 V 的每个节点代表一个样本， E 的每条边代表两个样本之间的距离，构成一个权重矩阵 W ，该权重矩阵的元素可以由计算每个节点与若干近邻点间距离得到。比如说令

$$W_{ij} := \begin{cases} e^{-\|x_i - x_j\|^2 / (2\sigma^2)} & \text{如果 } i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

如果我们想将该图切割成 K 个簇 $\{A_1, \dots, A_K\}$ ，一个很自然的想法就是考虑最小化目标函数

$$\text{cut}(A_1, \dots, A_K) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K g(A_k, \overline{A_k})$$

其中 $\overline{A_k} = V - A_k$ 是 A_k 的补集， $g(A, B) := \sum_{i \in A, j \in B} w_{ij}$ 。当 $K = 2$ 时，该问题很容易求解，而最优解往往是将其中单个样本化为一簇，其余的所有样本归为另一簇。为了保证每簇都尽可能大，我们转而考虑下面的目标函数：

$$Ncut(A_1, \dots, A_K) := \frac{\text{cut}(A_k, \overline{A_k})}{\text{vol}(A_k)} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \frac{W(A_k, \overline{A_k})}{\text{vol}(A_k)}$$

其中 $\text{vol}(A) := \sum_{i \in A} d_i$ ， $d_i = \sum_{j=1}^n w_{ij}$ 为节点 i 的加权重度 (weighted degree)。该函数使得簇内的样本尽可能相似，同时簇间的样本尽可能不同。下面我们定义列向量 $h_i = (h_{1i}, \dots, h_{ni})^T$ ，其每个分量为：

$$h_{ij} := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} & \text{如果 } x_i \in A_j \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

我们将这些列向量排成矩阵 H ，并且定义拉普拉斯矩阵 $L := D - W$ ，其中 $D = \text{diag}(d_i)$ 为对角矩阵。对于任意的 $f \in \mathbb{R}^n$ ，我们有

$$\begin{aligned} f^T L f &= f^T D f - f^T W f = \sum_i d_i f_i^2 - \sum_{i,j} f_i f_j w_{ij} = \frac{1}{2} \left(\sum_i d_i f_i^2 - 2 \sum_{i,j} f_i f_j w_{ij} + \sum_j d_j f_j^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} (f_i - f_j)^2 \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned} h_i^T L h_i &= \frac{1}{2} \sum_{m,n} w_{mn} (h_{im} - h_{in})^2 = \frac{1}{2} \sum_{m \in A_i, n \in \bar{A}_i} w_{mn} \left(\frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} - 0 \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \notin A_i, n \in A_i} w_{mn} \left(0 - \frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \text{cut}(A_i, \bar{A}_i) \frac{1}{\text{vol}(A_i)} + \frac{1}{2} \text{cut}(\bar{A}_i, A_i) \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \\ &= \frac{\text{cut}(A_i, \bar{A}_i)}{\text{vol}(A_i)} \end{aligned}$$

由于 $\text{cut}(A_i, \bar{A}_i) = \frac{1}{2} W(A_i, \bar{A}_i)$ ，所以优化函数为

$$N \text{cut}(A_1, \dots, A_K) = \sum_{i=1}^K h_i^T L h_i = \text{tr}(H^T L H)$$

另外，我们有

$$h_i^T D h_i = \sum_{j=1}^n h_{ij}^2 d_j = \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \sum_{j \in A_i} d_j = \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \text{vol}(A_i) = 1$$

故 $H^T D H = I$ ，因此目标函数转化为

$$\text{argmin} \quad \text{tr}(H^T L H) \text{ s.t. } H^T D H = I$$

由于我们的 H 中的指示向量 h 并不是标准正交基，作变量替换 $U = D^{1/2} H$ ，最终目标为

$$\text{argmin} \quad \text{tr}(U^T D^{-1/2} L D^{-1/2} U) \text{ s.t. } U^T U = I$$

再由线性代数中的 Rayleigh 商定理，问题的解就是求 $F = D^{-1/2} L D^{-1/2}$ 的前 k 个特征值，并找出对应的特征向量，并标准化，得到最后的特征矩阵 M ，最后对 M 进行一次传统的聚类（比如 K-Means），再返回原来的数据点即可。最终我们将最小化目标函数的问题转化成求解图的拉普拉斯矩阵的特征向量问题，简言之该方法就是在谱空间下进行 K-means 聚类。

谱聚类的一般步骤：计算 F 的前 k 个特征向量 U_k ，令 $N = [u_1, \dots, u_K] \in \mathbb{R}^{n \times K}$ ，令 $y_i \in \mathbb{R}^K$ 为矩阵 M 的第 i 行，将向量集 $\{y_i\}_{i=1}^n$ 进行 K-means 聚类，那么如果 y_i 归为第 k 类，那么原始样本 i 也属于第 k 类。

总而言之，谱聚类相比于 K-means 聚类效果要好得多，但是作为一种集成聚类方法，还是需要事先知道在谱空间选择什么样的聚类方法，如果选择 K-means 聚类，那么对于类的个数选取也是面临着同样的问题。

2.2 密度聚类

基于密度的聚类方法（density-based clustering）主要假设是可以通过样本分布的稠密程度来确定。值得注意的是，该方法与持续同调方法源头相类似，或者说后者可以看作是前者的推广。下面介绍一种最常见的密度聚类方法 DBSCAN: 首先输入两个参数，半径 ϵ 和形成高密度区域所需要的最少样本数 N_{min} 。然后由一个任意的未被访问过的样本开始，探索这个样本的 ϵ 邻域，如果 ϵ 邻域里面有足够多的样本（不少于 N_{min} ），则建立一个新的簇。另外，如果一个样本位于一个簇的密集区域里面，它的 ϵ 邻域样本也在这个簇里面，当这些新的样本被加进簇之后，如果它们也在密集区域里面，那么它们的 ϵ 邻域里面的样本也会被加进簇里面。这个过程一直重复，直到遍历完所有的样本为止。

DBSCAN 的主要缺点在于对参数 ϵ, N_{min} 很敏感。如果 N_{min} 不变， ϵ 取值过大，会将大多数样本聚集到同一个类中，如果 ϵ 过小，会将所有的样本都归为一类；如果 ϵ 不变， N_{min} 取值过大，同一个类中的样本会被标记为噪声，如果 N_{min} 过小，就会聚成很多的簇。在实际应用中，这两个参数十分依赖于经验知识，并且进行多次调整才能得到一个好的结果。到这里，一个好的、不需要先验知识的聚类方法就呼之欲出了，比如说持续同调理论。

第3章 复形

拓扑学中我们会经常考虑一个流形的拆解，使得拆解后的每一个部分都是简单的，这些简单的部分就像是建造房子的砖块，而流形就是这个大房子。所以这一节我们主要介绍一些各种各样的基本的“砖块”构成的“房子”。

3.1 单纯复形

定义1 设 u_0, u_1, \dots, u_k 是 \mathbb{R}^d 中的 $k+1$ 个仿射独立 (affine independent) 的点，一个 k -单形 σ 是指这 $k+1$ 个点的凸组合表示：

$$\sigma := \left\{ \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i : \sum_i \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0, u_i - u_0 \text{ 线性独立}, 1 \leq i \leq k \right\}$$

我们一般记作 $\sigma = \text{conv}\{u_0, \dots, u_k\}$ 。单形 σ 的一个面是指一个关于 u_i 的非空子集的凸包 (convex hull)，比如说 $\tau = \text{conv}\{u_1, \dots, u_k\}$ ，我们一般记作 $\tau \leq \sigma$ ，我们也称 σ 是 τ 的对偶面 (coface)。当 $\tau < \sigma$ 时，我们称 τ 是 σ 的真面 (proper face)。单形 σ 的边界是指所有真面的并集，记作 $\text{bd } \sigma$ ，剩下的就是它的内部 (interior)，即 $\text{int } \sigma = \sigma - \text{bd } \sigma$ 。注意 $x = \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i \in \text{int } \sigma$ 当且仅当它所有的系数 λ_i 都是正数。

定义2 单纯复形 (simplicial complex) 是指有限个单形构成的集族 K 使得

- 如果任意的 $\sigma \in K, \tau \leq \sigma$ ，那么 $\tau \in K$ 。
- 如果任意的 $\sigma, \sigma_0 \in K$ ，那么 $\sigma \cap \sigma_0$ 要么是空集要么是两者的公共面。

如果我们赋予 K 一个拓扑，自然地比如说欧式空间子拓扑，我们就可以得到一个拓扑空间，我们记作 $|K|$ ，也称为多面体 (polyhedron)。一般的，一个拓扑空间 X 的单纯剖分由一个单纯复形 K 和一个同胚映射 $h : |K| \rightarrow X$ 组成。我们说 L 是 K 的一个子复形 (subcomplex) 如果单纯复形 $L \subseteq K$ ，如果 L 包含了所有在 K 中由 L 的顶点所张成的单形，我们就说 L 是满的 (full)。另外，我们将 K 中所有维数小于或者等于 j 的单形称之为 K 的 j 维骨架，即 $K^{(j)} := \{\sigma \in K : \dim \sigma \leq j\}$

定义3 单形 τ 的星形 (star) 是指所有关于 τ 的对偶面： $St \tau := \{\sigma \in K : \tau \leq \sigma\}$ ，一般来说星形并不满足定义2中的第一条，但是我们可以将那些缺失的面加入从而得到一个单纯复形，我们称之为闭星形 (closed star)，记作 $\overline{St} \tau$ ，这是最小的包含星形 $St \tau$ 的子复形。

单形 τ 的联结 (link) 是指所有在闭星形 $\overline{St} \tau$ 中与 τ 不交的单形，即 $Lk \tau := \{v \in \overline{St} \tau : v \cap \tau = \emptyset\}$ ，另外，如果说 τ 是一个顶点，那么 $Lk \tau = \overline{St} \tau - St \tau$

定义4 抽象的单纯复形 (abstract simplicial complex) 是指有限个集合构成的集族

A 使得如果任意的 $\alpha \in A, \beta \subseteq \alpha$, 那么 $\beta \in A$ 。

A 里面的集合就叫做单形, 其维数被定义为 $\dim \alpha := \text{card } \alpha - 1$, 并且 A 的维数定义为其包含的单形中最大的维数。 A 的顶点集定义为所有单形的并集, 即 $\text{Vert } A = \bigcup_{\alpha \in A} \alpha$ 。两个抽象的单纯复形是同构的 (isomorphic) 等价于说如果存在双射 $b : \text{Vert } A \rightarrow \text{Vert } B$ 使得 $\alpha \in A$ 当且仅当 $b(\alpha) \in B$ 。

给定一个单纯复形 K , 我们可以通过丢掉其他所有的单形而只保留顶点得到抽象单纯复形 A , 我们称 A 是关于 K 的顶点概型 (vertex scheme), 也称 K 是关于 A 的几何实现 (geometric realization)。

定理 5 每个维数为 d 的抽象单纯复形都有一个在 \mathbb{R}^{2d+1} 里的几何实现^[1]。

下面介绍单纯映射 (simplicial maps) 以及重心重分 (barycentric subdivision)。

3.1.1 单纯映射

设单纯复形 K 的顶点为 u_0, \dots, u_n , 且 $x \in K$, 则 x 必定在某个单形 α 里面, 比如说 $\alpha = \text{conv}\{u_0, \dots, u_k\}$, 我们有

$$x = \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i, \quad \sum_i \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0$$

定义

$$b_i(x) = \begin{cases} \lambda_i & 0 \leq i \leq k \\ 0 & k+1 \leq i \leq n \end{cases}$$

则 $x = \sum_{i=0}^n b_i(x) u_i$, 这时我们称 $b_i(x)$ 为 x 在 K 中的重心坐标 (barycentric coordinates)。现在我们考虑两个单纯复形之间的连续映射, 我们首先想要将顶点集映射到顶点集, 如 $\varphi : \text{Vert } K \rightarrow \text{Vert } L$, 并且要求将 K 中的每个单形顶点映射到 L 中某个单形的顶点, 然后我们延拓到整个上面:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n b_i(x) \varphi(u_i)$$

我们就得到一个连续的单纯映射 $f : |K| \rightarrow |L|$ 。

3.1.2 重心重分

现在我们想做一种操作, 使得单纯复形 K 的单形变得更多更小, 但是单纯复形的多面体却是一样的:

我们可以看到重心重分之后的 K^1 , 也记作 $\text{Sd } K$, 的顶点就是 K 的单形的重心。

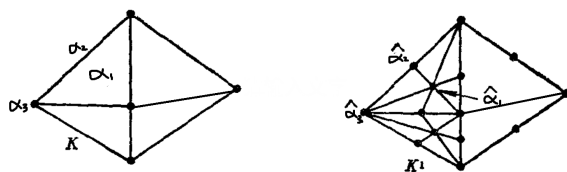


图 3-1 重心重分

一般地，我们定义某个单形的重心为

$$\hat{\alpha} := \frac{1}{k+1}(u_0 + \dots + u_k)$$

要求一组重心 $\hat{\alpha}_0, \dots, \hat{\alpha}_k$ 确定了 K^1 的一个 k -单形，当且仅当 $\alpha_{\sigma(0)} < \dots < \alpha_{\sigma(k)}$ ，其中 σ 是整数 $0, 1, 2, 3, \dots, k$ 的一个置换。我们定义 K 的网距 (mesh) 为其包含的所有单形中最大的直径，也就是某个单形中最长的一条边的长度，记作 $\mu(K)$ 。

引理 6 若 K 的维数为 n ，则 $\mu(K^1) \leq \frac{n}{n+1}\mu(K)$

证明： 设 σ 是 K^1 内以 \hat{A}, \hat{B} 为顶点的一条棱，并设 $B < A$ ，则 $\sigma \subseteq A$ ，设 A 是 k 维的，则有

$$\begin{aligned} \mu(\sigma) &\leq \frac{k}{k+1}\mu(A) \\ &\leq \frac{n}{n+1}\mu(A) \\ &\leq \frac{n}{n+1}\mu(K) \end{aligned}$$

由于 σ 的任意性得出， $\mu(K^1) \leq \frac{n}{n+1}\mu(K)$

我们可以归纳地定义出 K 的第 m 次重心重分为： $K^m := (K^{m-1})^1$ ，并且由引理 6 可以看出当 $m \rightarrow \infty$ ，网距趋于 0。

3.1.3 单纯逼近

有时候我们将顶点星形 (vertex star) 看成开集。首先，我们定义 $N(u) := \cup_{\sigma \in \text{St}_u} \text{int } \sigma$ 。设 K 和 L 是单纯复形，我们说一个连续映射 $g : |K| \rightarrow |L|$ 满足星形条件 (star condition) 如果 K 中每个顶点星形的像都包含于 L 中某个顶点星形中，即 $\forall u \in K, \exists v \in L \text{ s.t. } g(N(u)) \subseteq N(v)$ ，注意 v 只要求存在，不要求唯一。由星形条件我们知道存在顶点映射 $\varphi : \text{Vert } K \rightarrow \text{Vert } L$ 使得 $\varphi(u) = v$ ，由此诱导单纯映射 $f : K \rightarrow L$ ，且满足 $g(N(u)) \subseteq N(f(u))$ 对每个顶点 $u \in K$ ，此条件也称之为单纯逼近条件 (simplicial approximation condition)，我们称 f 是 g 的单纯逼近。

定理 7 设 $g : |K| \rightarrow |L|$ 是连续的，则存在足够大的 n 使得 g 有一个单纯逼近 $f : Sd^n K \rightarrow L$

证明： 我们选取关于 $|K|$ 的形如 $g^{-1}(N(v)), v \in \text{Vert } L$ 的一些开覆盖，由于 $|K|$ 是紧的 (compact)，故存在某个正实数 λ 使得任意直径小于 λ 的集合都包含在开覆

盖中的某一个集合中。我们选择 n 使得每一个 $Sd^n K$ 中的单形的直径都小于 $\frac{\lambda}{2}$, 然后每一个 $|K|$ 中的星形的直径都小于 λ , 导出其必定包含在某一个开覆盖的集合 $g^{-1}(N(v))$ 中, 因此 g 满足星形条件, 故存在单纯逼近 f 。

注记 8 有一个更强版本的单纯逼近定理在 20 世纪前半叶极大地推动的组合拓扑的发展, 说的是同一个拓扑空间的任意两种单纯剖分都有同构的重分 (*subdivisions*), 这对于 2 维或者 3 维单纯复形来说是对的, 然而高维却不一定, 第一个 7 维的反例由 *Milnor* 构造^[16]。

3.1.4 凸集系统

定理 9 (Helly) 设 F 是 \mathbb{R}^d 中一个有限的、闭的凸集族, 记作 $F = \{X_1, \dots, X_n\}$, 则每 $d + 1$ 个其中的集合的交非空当且仅当 F 中所有的集合的公共交都非空, 即 $\bigcap_{i=1}^n X_i \neq \emptyset$ 。

证明: 我们只证明不是显然的那个方向, 首先, $d = 1$ 是对的: 假设 $F = \{X_1, X_2, X_3\} = \{[a_1, b_1], [a_2, b_2], [a_3, b_3]\}$, 且 $X_1 \cap X_2 \neq \emptyset, X_2 \cap X_3 \neq \emptyset, X_1 \cap X_3 \neq \emptyset$, 我们有 $a_2 \leq b_1$ 且 $a_1 \leq b_2, a_3 \leq b_2$ 且 $a_2 \leq b_3, a_3 \leq b_1$ 且 $a_1 \leq b_3$, $X_1 \cap X_2 \cap X_3 = [a_2, b_1] \cap [a_3, b_3]$ or $= [a_1, b_2] \cap [a_3, b_3] \neq \emptyset$, 然后再用归纳法证 $card F = n$ 的情况即可。

对于一般的 d , 我们用反证法: 假设存在一个极小的 n 的反例, 使得 $Y_n = \bigcap_{i=1}^{n-1} X_i \neq \emptyset$, 但是 $Y_n \cap X_n = \emptyset$ 。由于他们都是闭的凸集, 我们可以找到一个 $d - 1$ 维的平面 h 分开 Y_n 和 X_n , 并且和他们两个不交。定义 $F' := \{Z_1, \dots, Z_{n-1}\}$ 构成的子集族, 其中 $Z_i = X_i \cap h, 1 \leq i \leq n - 1$ 是 \mathbb{R}^{d-1} 中的非空闭凸子集。由归纳假设, 任意 d 个前面的 $n - 1$ 个 X_i 都和 X_n 有公共的交, 推出这 d 个集合的公共交落在 h 的两侧, 故任意 d 个 Z_i 都有一个非空的公共交, 由极小性假设, 得到 $\bigcap F' \neq \emptyset$ 。即

$$\bigcap F' = \bigcap_{i=1}^{n-1} (X_i \cap h) = Y_n \cap h \neq \emptyset$$

但是这与 $h \cap Y_n = \emptyset$ 矛盾。

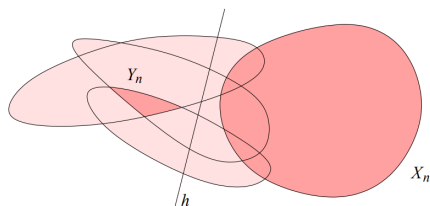


图 3-2 凸集系统^[1]

3.1.5 Nerves

我们定义集族 F 的脉络 (nerves) 为其所有公共交非空的子集族:

$$\text{Nrv } F := \{X \subseteq F : \cap X \neq \emptyset\}$$

定理 10 设 F 是 \mathbb{R}^d 中有限的闭凸集族, 则 F 的脉络与 F 中所有集合的并同伦等价 (homotopy equivalent), 即 $\text{Nrv } F \simeq \cup_{F_i \in F} F_i$ [1]

3.1.6 Čech 复形

定义 11 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 我们定义 Čech 复形:

$$\check{C}ech(r) := \{\sigma \subseteq S : \cap_{x \in \sigma} B_x(r) \neq \emptyset\}$$

其中 $B_x(r)$ 是以 r 为半径以 x 为中心的 d 维闭实心球。

注意一堆球的公共交非空当且仅当它们的中心都落在某个同样半径的球中, 即 $y \in \cap_{x \in \sigma} B_x(r)$ 等价于 $\|x - y\| \leq r, \forall x$, 并且由 Helly 定理我们知道 S 中任意 $d+1$ 个点落在某个半径为 r 的球中当且仅当 S 中所有的点都落在这个半径为 r 的球中。当半径增大时我们可以看到它会创造更多的重叠部分, 并且保留了之前的重叠部分, 故 $\check{C}ech(r_0) \subseteq \check{C}ech(r), r_0 \leq r$ 。注意判断 σ 属于 $\check{C}ech(r)$ 与否等价于判断 σ 是否在某个半径为 r 的闭球中。我们定义 σ 的极小球 (miniball) 为最小的包含 σ 的闭球, 则 $\sigma \in \check{C}ech(r)$ 等价于 σ 的极小球的半径小于等于 r 。

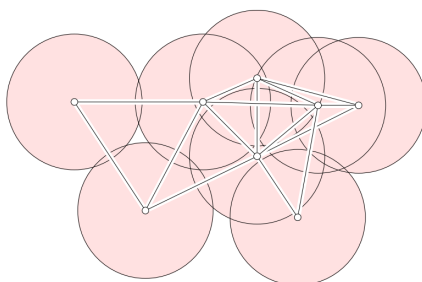


图 3-3 Čech 复形 [1]

3.1.7 Vietoris-Rips 复形

定义 12 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 我们定义 Vietoris-Rips 复形:

$$\text{Vietoris-Rips}(r) := \{\sigma \subseteq S : \text{diam } \sigma \leq 2r\}$$

由上面的讨论可以知道 $\check{C}ech(r) \subseteq \text{Vietoris-Rips}(r)$ 。下面陈述一个引理:

引理 13 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 则 $Vietoris-Rips(r) \subseteq \check{C}ech(\sqrt{2}r)$

证明: 我们不妨在标准的正规单形中讨论: 我们将 \mathbb{R}^{d+1} 中标准正规 d 维单形记作 Δ^d , 其由

$\{(1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, 1)\}$ $d+1$ 个点张成。由对称性我们知道, 此单形到原点的距离等于原点到重心的距离, 其中重心为 $z = \frac{1}{d+1}(1, 1, \dots, 1)$, 故 $\|z\| = \frac{1}{\sqrt{d+1}}$ 。注意到重心是过此单形所有顶点的最小的 d 维球的中心, 记此 d 维球的半径为 r_d , 则 $r_d^2 = 1 - \|z\|^2 = \frac{d}{d+1}$, 当维数愈来愈大时, 球的半径趋于 1。任意 $d+1$ 个或者更少的点中都至少有一对的距离大于或者等于 $\sqrt{2}$ 当它们都以同样的半径为 r_d 的极小球的时候, 故每一个直径小于或者等于 $\sqrt{2}$ 的单形都属于 $\check{C}ech(r_d)$, 乘以 $\sqrt{2}r$, 我们有 $Vietoris-Rips(r) \subseteq \check{C}ech(\sqrt{2}rr_d) \subseteq \check{C}ech(\sqrt{2}r)$, 因为 $r_d \leq 1$ 。

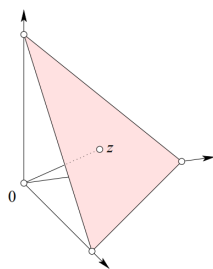


图 3-4 标准单形^[1]

3.2 Delaunay 复形

3.2.1 反转 (Inversion)

我们记 S^d 为中心在原点的 d 维单位球面。现在我们考虑映射 $\phi: \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}^{d+1}, \phi(x) := \frac{x}{\|x\|^2}$, 该映射会将球面内外的点调换, 而球面上的点还会映射到球面上。并且, 我们发现 $\phi(\phi(x)) = x$ 。现在我们将这个映射限制在球面上, 并且考查它的像是什么:

定理 14 设 Σ 是 \mathbb{R}^{d+1} 中一个 d 维的球面, 如果 $0 \notin \Sigma$, 那么 $\phi(\Sigma)$ 也是一个 d 维的球面; 如果 $0 \in \Sigma$, 那么 $\phi(\Sigma)$ 则是一个 d 维的平面。

证明: 首先考虑当 $0 \notin \Sigma$, 如果 0 恰好就是 Σ 中心, 那么结果是显然的。如果 0 不是 Σ 中心, 我们原点和球心连起来, 画一条直线, 该直线交 Σ 于两点 x, y , 并且设 z 是球面上另外一点, 它们在 ϕ 作用下的像分别是 x', y', z' , 我们有 $\|x\|\|x'\| = \|z\|\|z'\| = 1$, 推出三角形 $0xz$ 和三角形 $0z'x'$ 是相似的。类似地, 三角形 $0yz$ 和三角形 $0z'y'$ 也是相似的。由于 $\angle xzy = \pi/2$, 再根据相似三角形性质, 得出 $\angle x'z'y' = \pi/2$, 所以当 z 跑遍 Σ 时, 我们就得到 $\phi(\Sigma)$ 也是一个 d 维的球面。当

$0 \in \Sigma$ 时, 即 $0 = x$, $\angle 0y'z' = \angle 0zy = \pi/2$, $\phi(\Sigma)$ 则是一个 d 维的垂直于 y' 的平面。

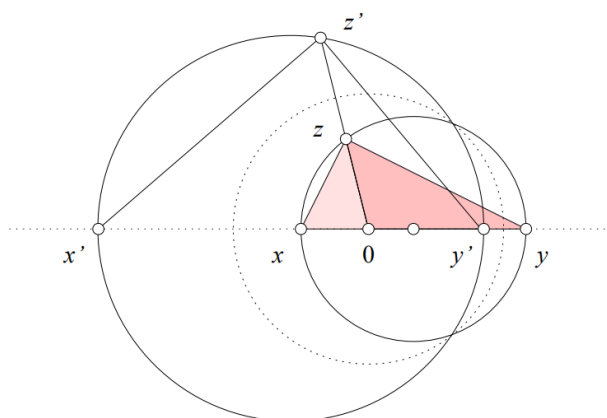


图 3-5 d 维球的反转^[1]

下面我们介绍球极投影 (stereographic projection)。首先对于任意的球心 $z \in \mathbb{R}^{d+1}$ 和半径 $r > 0$, 我们可以定义 $\psi(x)_{z,r} := r\phi(\frac{x-z}{r}) + z$, 不难验证 $\|x-z\|\|\psi(x)-z\| = r^2$ 。标准的单位球面的球极投影可以通过定义 $\zeta(x) : S^d - \{N\} \rightarrow \mathbb{R}^d, \zeta(x) := \psi_{N,\sqrt{2}}(x)$ 得到, 其中 N 是北极点。

推论 15 设 Σ' 是在 S^d 上的一个 $d-1$ 维的球面, 如果 $N \notin \Sigma'$, 那么 $\zeta(\Sigma')$ 也是一个 $d-1$ 维的球面; 如果 $N \in \Sigma'$, 那么 $\zeta(\Sigma')$ 则是一个 $d-1$ 维的平面。

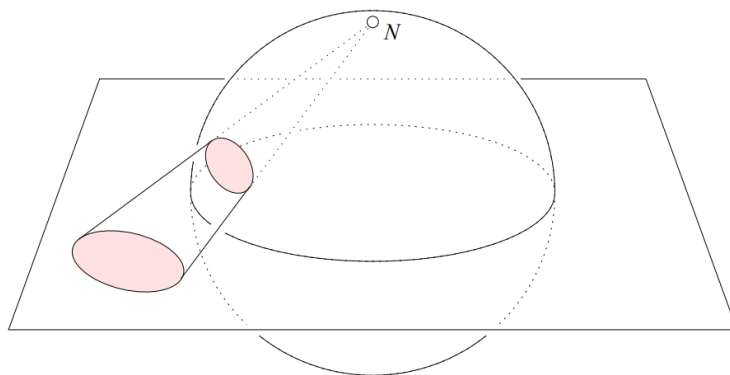


图 3-6 球极投影^[1]

3.2.2 Voronoi 图

定义 16 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, $u, v \in S$, 我们定义关于 u 的 Voronoi 胞腔为 \mathbb{R}^d 中与 u 距离最近的那些点:

$$V_u := \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - u\| \leq \|x - v\|, \forall v \in S\}$$

由定义我们可以知道 V_u 是 \mathbb{R}^d 中一个凸的多面体，并且任意两个 *Voronoi* 胞腔的公共部分最多是他们共同的边界，所有的 *Voronoi* 胞腔就会盖住整个空间 \mathbb{R}^d 。*Voronoi* 图就是所有的 *Voronoi* 胞腔所构成的集族。

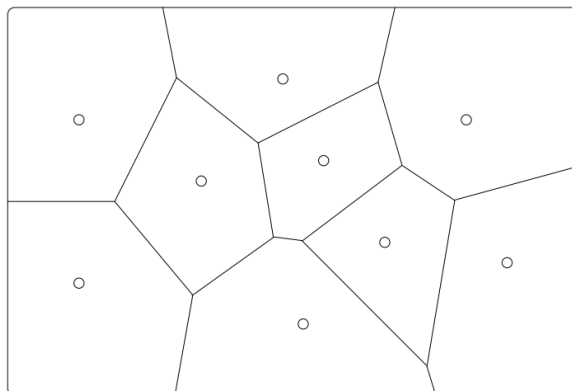


图 3-7 *Voronoi* 图^[1]

定义 17 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合， $u, v \in S$ ，我们定义关于 u 的 *Voronoi* 权重胞腔：

$$V_u := \{x \in \mathbb{R}^d : \pi_u(x) \leq \pi_v(x), \forall v \in S\}$$

其中 $\pi_u(x) := \|x - u\|^2 - w_u$ 为某种带权重的距离。

3.2.3 提升 (lifting)

下面我们介绍一种关于 *Voronoi* 图不一样的看法：通过提升 (lift) 它的胞腔到更高一维。设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，但是我们将它们嵌入到 \mathbb{R}^{d+1} 中，只需要将第 $d + 1$ 个坐标设成 0 即可。设 $u \in S$ ，且 Π_u 是与 S^d 相切在 $\zeta^{-1}(u)$ 的 d 维平面，然后再定义 $\Sigma_u := \phi(\Pi_u)$ ，它是一个过 S^d 北极点 N 的球面且与 \mathbb{R}^d 相切。

定理 18 一个点 $x \in \mathbb{R}^d$ 属于关于 u 的 *Voronoi* 胞腔当且仅当射线 xN 首次与 Σ_u 相交 (在所有的 d 维球面 Σ 中)^[1]。

定理 19 一个点 $x \in \mathbb{R}^d$ 属于关于 u 的 *Voronoi* 胞腔当且仅当射线 Nx 首次与 Π_u 相交 (在所有的 d 维平面 Π 中)^[1]。

定义 20 *Delaunay* 复形同构于 *Voronoi* 图的脉络 (nerve)：

$$Delaunay := \{\sigma \subseteq S : \cap_{u \in \sigma} V_u \neq \emptyset\}$$

我们说集合 S 是在一般位置的如果没有 $d + 2$ 个点落在同一个 $d - 1$ 维的球中，这可以导出没有 $d + 2$ 个 *Voronoi* 胞腔有非空的公共交。等价地，*Delaunay* 复形的维数是 d 。现在假设 S 是在一般位置，则我们取抽象单形的凸包得到 S 的几何实现，

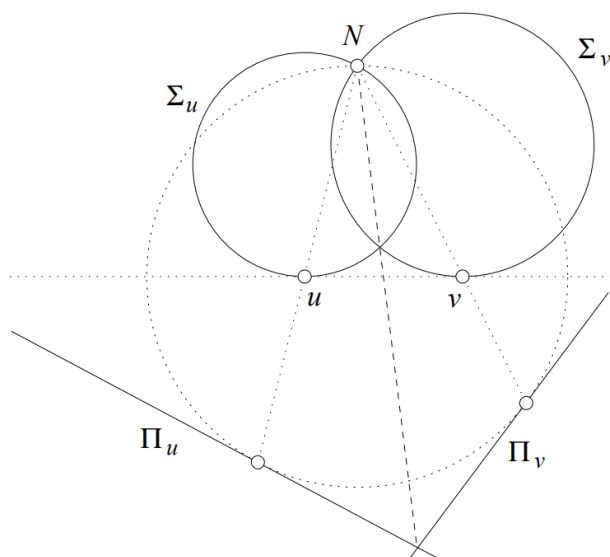


图 3-8 提升^[1]

结果就是 S 的 *Delaunay* 三角剖分。

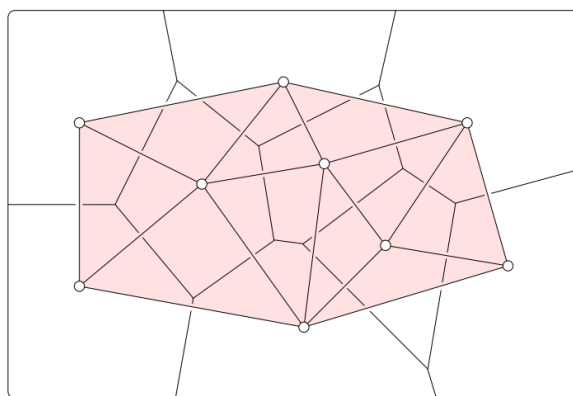


图 3-9 在 Voronoi 图上的 *Delaunay* 三角剖分^[1]

3.3 Alpha 复形

定义 21 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 对于 $u \in S, r \geq 0$, 我们定义 $R_u(r) := B_u(r) \cap V_u$, 其中 $B_u(r)$ 是半径为 r , 中心在 u 的 d 维闭球, $V_u(r)$ 是在 u 点的 *Voronoi* 胞腔。我们定义 *Alpha* 复形为:

$$\text{Alpha}(r) := \{\sigma \subseteq S : \bigcap_{u \in \sigma} R_u(r) \neq \emptyset\}$$

显然由于 $R_u(r) \subseteq V_u$, $\text{Alpha}(r) \subseteq \text{Delaunay}(r)$ 。故同样的对于处在一般位置的 S , 我们取抽象单形的凸包得到 S 的几何实现。另外, 由于 $R_u(r) \subseteq B_u(r)$, 故 $\text{Alpha}(r) \subseteq \check{\text{Cech}}(r)$ 。由于 $\bigcup_{u \in S} R_u(r) = \bigcup_{u \in S} B_u(r)$, 并且因为 $R_u(r)$ 是闭的并且凸

的, 由定理 10, 我们有

$$\cup_{u \in S} B_u(r) \simeq |\text{Alpha}(r)|$$

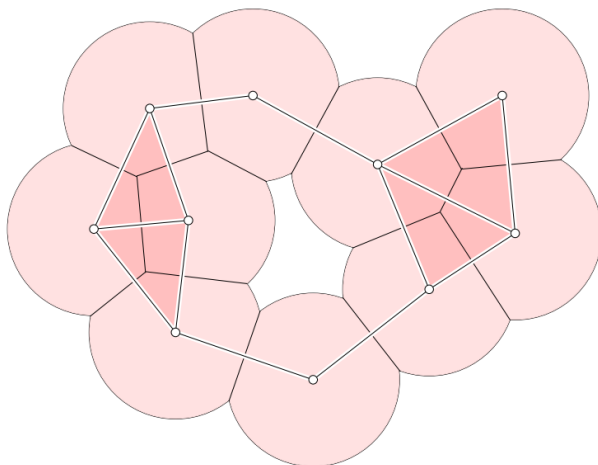


图 3-10 Alpha 复形^[1]

3.3.1 Alpha 权重复形

在现实应用中, 我们会常常使用带权重的 Alpha 复形, 比如说一些蛋白质、RNA、DNA 的建模。

定义 22 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 对于 $u \in S, r \geq 0$, 我们定义 $R_u := B_u \cap V_u$, 其中 B_u 是半径为 $r_u = \sqrt{w_u}$, 中心在 u 的 d 维带权重闭球, V_u 是在 u 点的 Voronoi 权重胞腔。我们定义 Alpha 权重复形为:

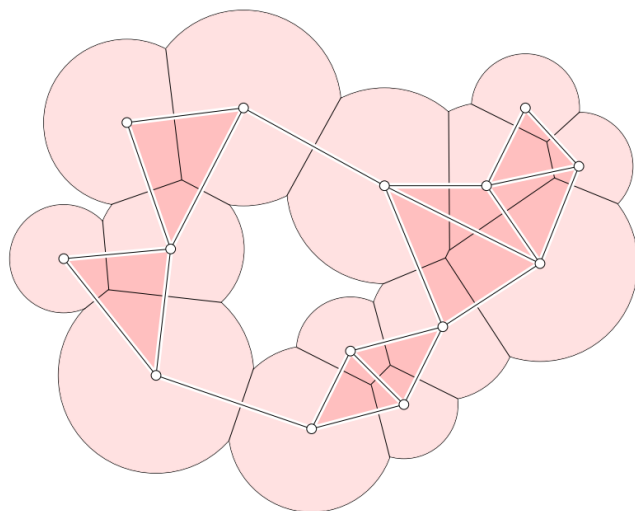
$$\text{Alpha}(r) := \{\sigma \subseteq S : \cap_{u \in \sigma} R_u \neq \emptyset\}$$

同样的, 它的几何实现大致如下图:

3.3.2 滤链 (filtration)

假设我们对于半径 r 有一个自由的选取, 随着 r 的变动, 构造的复形自然地也随之变动, 而我们往往想要找到一个最合适的 r 。首先, 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 我们让 r 连续地变动, 我们就会得到一系列嵌套 (nested) 的 Alpha 复形, 而由于他们都是某个 Delaunay 复形的子复形, 而这个 Delaunay 复形是有限的, 所以只有有限个是不一样的, 我们记作:

$$\emptyset = K_0 \subseteq K_1 \subseteq \dots \subseteq K_m$$

图 3-11 Alpha 权重复形^[1]

上面称之为 $K_m = Delaunay$ 的一个滤链 (filtration)。

接下来我们介绍带权重的滤链：首先从半径为 $r_u = \sqrt{w_u}$ ，中心在 u 的 d 维权重闭球开始，增加它的半径到 $\sqrt{w_u} + r$ ，但是这会导致关于不同半径 r 的这些球的 $Voronoi$ 图是不一样的，就会进一步导致得到的 Alpha 复形 K_i 并不是嵌套的。因此，我们定义 d 维权重闭球的半径为 $\sqrt{w_u + r^2}$ ， x 在权重距离下与球 $B_u(r)$ 和 $B_v(r)$ 的球心距离相等则满足

$$\|x - u\|^2 - (w_u + r^2) = \|x - v\|^2 - (w_v + r^2)$$

两边消去 r^2 我们发现 x 就在两球心平分点并且和 r 无关。因此，这些球的并集可以分解为由同一个权重 $Voronoi$ 图上面的凸集。更具体地，在权重系统中有 $Alpha(r_0) \subseteq Alpha(r), r_0 \leq r$ ，故我们同样有权重系统的滤链。

3.3.3 抽象单形结构

下面我们将研究滤链的两个相邻复形之间的差异，即 $K_{i+1} - K_i$ 。首先我们考虑抽象单形的结构，注意一个抽象的 d 维单形 α 是由 $d+1$ 个点的集合，它有 2^{d+1} 个子集，包括空集和它本身。

定义 23 一般来说，对于一个有限偏序集 (partially ordered set) S ，我们可以将它的每个元素当做一个顶点画在平面上，然后对于满足序关系 $x < y$ 并且不存在 z 使得 $x < z < y$ 的顶点用一条线连接，我们就可以得到关于 S 的 Hasse 图。

比如说考虑由 4 个点构成的集合的幂集 (power set)，序关系为集合的包含，则我们可以用 $\{0, 1\}$ 编码所有的幂集，其中 $\{1, 0\}$ 表示某个元素的有无。因此所有的抽象单形我们都可以画出它对应的 Hasse 图。

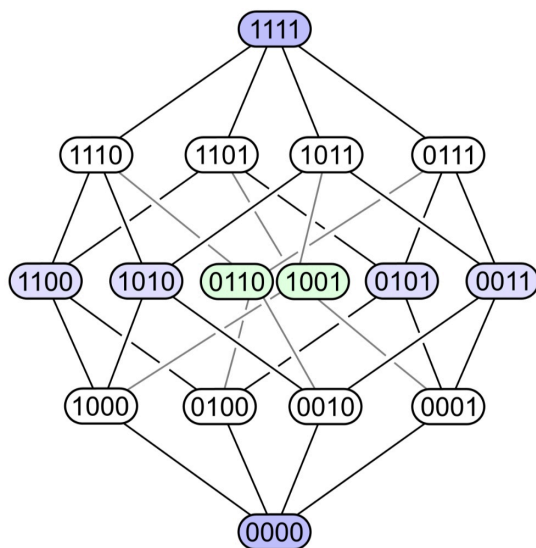


图 3-12 Hasse 图

3.3.4 坍缩

定义 24 现在我们假设有一个几何的 d -单形 σ ，我们定义一种基本的操作，基本坍缩 (*elementary collapse*): 我们移除一对点 $\beta_0 \subset \beta$ 和与之对应的一对面 $\tau_0 < \tau$ ，其中 τ 是唯一的满足 $\tau_0 < \tau$ 的面。我们也记作 $(k, k+1)$ 当坍缩其中 $\dim \tau_0 = k$ 时。一般地，一个 d 维单形 σ 能够通过 $2^d - 1$ 次基本坍缩变成一个点。如图 13 所示。更一般地，我们可以定义在单纯复形 K 上的坍缩，即某个形变收缩 (deformation

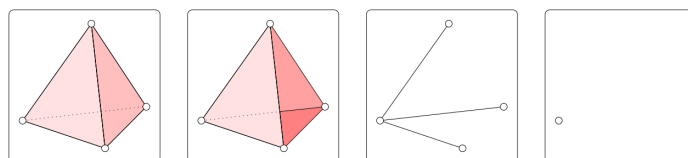


图 3-13 单形坍缩^[1]

retract) 映射 $f : |K| \rightarrow |L|$ 。我们说 K 是可坍缩的 (collapsible) 如果存在一系列基本坍缩使得 $|K|$ 变成一个点。由于坍缩保持同伦等价，所以 $|K|$ 也是可缩的 (contractible)，然而可缩的底空间 (underlying space) 并不一定是可坍缩的。

现在设 r_i 为使得 $K_i = \text{Alpha}(r_i)$ 的最小半径，对于一个单形 τ 来说，如果以半径为 r_{i+1} 的球的并和相对应的 *Voronoi* 胞腔有非空的公共交，则 $\tau \in K_{i+1}$ ；反之，若以半径为 r_i 的球的并和相对应的 *Voronoi* 胞腔有空的公共交，则 $\tau \notin K_i$ 。假设顶点集 S 在一般位置并且 $\dim \tau = k$ ，则 *Voronoi* 胞腔的交 $V_\tau = \bigcap_{u \in \tau} V_u$ 是一个 $d - k$ 维的凸多面体。由 r_{i+1} 的定义，这些球 $B_u(r_{i+1})$ 交 V_τ 于一个单点 x 。

第一种情况，假设 x 落在 V_τ 的边界上，那么存在其他的 *Voronoi* 多面体使得 x 是

第一次与这些球的并相交的。假设 V_τ 是在集族中最高维的多面体，并且 V_ν 是在集族中最低维的多面体。对应地， $\tau \in K_{i+1} - K_i$ 是里面最低维的单形， $\nu \in K_{i+1} - K_i$ 是里面最高维的单形， $K_{i+1} - K_i$ 中剩下的单形都是 ν 的面且是 τ 的对偶面。换句话说，我们可以通过对 K_{i+1} 做 (k, l) 坍缩得到 K_i ，其中 $k = \dim \tau, l = \dim \nu$ 。我们称这个坍缩是一个正则事件（regular event）在 Alpha 复形中。

第二种情况，假设 x 落在 V_τ 的内部，并且 $Voronoi$ 多面体 x 不是第一次与任意的高维 $Voronoi$ 多面体相交的。换句话说， τ 是 $K_{i+1} - K_i$ 中唯一的单形，我们称这个 τ 的添加是一个临界事件（critical event）因为它改变了复形的同伦型。由于球的并和 Alpha 复形有同样的同伦型，所以当半径逼近 r_{i+1} 时会同时改变这些球之并的同伦型。

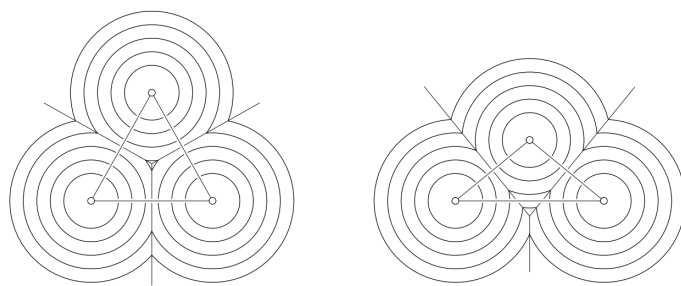


图 3-14 左边：三条构成三角形的边出现在临界事件之前；右边：两条边出现在正则事件和第三条之前^[1]

第 4 章 同调

这一章我们主要介绍一些同调论的基本代数知识以及矩阵表示。

4.1 单纯同调

定义 25 设 K 是一个 p 维单纯复形, 一个 p 维链是指一个 K 中的 p 维单形的有限形式和, $c := \sum a_i \sigma_i$, 其中 a_i 是系数, 一般取 $a_i \in \mathbb{Z}_2$, σ_i 是一些 p 维单形。

另外, 我们可以定义任意两个 p 维链之间的加法, 即如果 $c = \sum a_i \sigma_i, c' = \sum b_i \sigma_i$, 则 $c + c' = \sum (a_i + b_i) \sigma_i$ 。这些 p 维链和定义的加法运算构成一个群, 记作 C_p 。

定义 26 设 $\sigma = [u_0, \dots, u_p]$ 为由 $\{u_0, \dots, u_p\}$ 这些顶点所张成的单形, 我们定义它的边缘 (boundary) 为所有 $(p-1)$ 维的面的交错和

$$\partial_p \sigma := \sum_{j=0}^p (-1)^j [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p] \stackrel{-1=1}{=} \sum_{j=0}^p [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p]$$

其中 \hat{u}_j 表示第 j 个顶点 u_j 消失。

自然地, 我们可以线性地将边缘算子推广到任意 p 维链上去, 即 $\partial_p c := \sum a_i \partial_p \sigma_i$ 将是一个 $(p-1)$ 维的链, 故我们定义了边缘同态算子 $\partial_p : C_p \rightarrow C_{p-1}$ 。更形象地, 我们将链群和边缘同态放在一起, 称之为链复形 (chain complex):

$$\dots \xrightarrow{\partial_{p+2}} C_{p+1} \xrightarrow{\partial_{p+1}} C_p \xrightarrow{\partial_p} C_{p-1} \xrightarrow{\partial_{p-1}} \dots$$

定义 27 我们定义 p 维的闭链群 (p -cycle) 为

$$Z_p := \ker \partial_p = \{c \in C_p : \partial_p c = 0\}$$

我们定义 p 维的边缘链群 (p -boundary) 为

$$B_p := \text{Im } \partial_{p+1} = \{c \in C_p : \exists x \in C_{p+1} \text{ s.t. } c = \partial x\}$$

我们定义 p 维的同调群 (p -th homology group) 为

$$H_p := \frac{Z_p}{B_p}$$

另外, 我们定义同调群的秩 (rank) 为 (也叫做 p 维 Betti 数)

$$\text{rk}(H_p) := \beta_p = \text{rank } Z_p - \text{rank } B_p$$

或者从代数上看，由于 H_p 是有限生成阿贝尔群，根据有限生成阿贝尔群分解定理，我们可以知道 H_p 可以分解成自由的部分和挠 (torsion) 的部分，我们一般将同调群的秩定义为自由部分的维数。而这里取的是域系数 \mathbb{Z}_2 ，故 H_p 就是向量空间 (vector space)，直接取它的维数即可。另外，我们定义欧拉特征为所有维数的 *Betti* 数的交错和：

$$\chi := \sum_{p \geq 0} (-1)^p \beta_p$$

引理 28 $\partial^2 = 0$

证明： 对于任意 p 维单形 σ 有：

$$\begin{aligned} \partial^2 \sigma &= \sum_{i=0}^p (-1)^i \partial[u_0, \dots, \hat{u}_i, \dots, u_p] \\ &= \sum_{i=0}^p (-1)^i \left\{ \sum_{j < i} (-1)^j [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, \hat{u}_i, \dots, u_p] + \sum_{j > i} (-1)^{j-1} [u_0, \dots, \hat{u}_i, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p] \right\} \\ &= \sum_{0 \leq j < i \leq p} (-1)^{i+j} [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, \hat{u}_i, \dots, u_p] + \sum_{0 \leq j < i \leq p} (-1)^{i+j-1} [u_0, \dots, \hat{u}_i, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p] = 0 \end{aligned}$$

再由边缘算子的线性性质得到任意的 $c \in C_p$ ，我们都有 $\partial^2 c = 0$

4.2 简约同调

下面介绍一种便于计算的同调，简约同调，它和之前的单纯同调群只在 0 维有差别。具体来说，我们在之前的单纯链复形上面再增加 -1 维的链群 \mathbb{Z}_2 ，其他保持不变，即

$$\dots \xrightarrow{\partial_2} C_1 \xrightarrow{\partial_1} C_0 \xrightarrow{\epsilon} \mathbb{Z}_2 \xrightarrow{0} 0 \longrightarrow \dots$$

我们定义 p 维的简约同调群 (p -th reduced homology group) 为

$$\tilde{H}_p := \frac{\ker \partial_p}{\text{Im } \partial_{p+1}}$$

不难证明

$$H_p = \begin{cases} \tilde{H}_p & p \neq 0 \\ \tilde{H}_p \oplus \mathbb{Z}_2 & p = 0 \end{cases}$$

4.3 链映射及诱导同态

设 C, D 是链复形, 一个链映射 $f : C \rightarrow D$ 是一串同态 $f = \{f_p : C_p \rightarrow D_p\}$ 满足条件: 对于任意维数 p 有 $\partial_p \circ f_p = f_{p-1} \circ \partial_p$, 即下面图表交换

$$\begin{array}{ccccccc} \cdots & \longrightarrow & C_{p+1} & \xrightarrow{\partial_{p+1}} & C_p & \xrightarrow{\partial_p} & C_{p-1} & \xrightarrow{\partial_{p-1}} & C_{p-2} & \longrightarrow & \cdots \\ & & \downarrow f_{p+1} & & \downarrow f_p & & \downarrow f_{p-1} & & \downarrow f_{p-2} & & \\ \cdots & \longrightarrow & D_{p+1} & \xrightarrow{\partial_{p+1}} & D_p & \xrightarrow{\partial_p} & D_{p-1} & \xrightarrow{\partial_{p-1}} & D_{p-2} & \longrightarrow & \cdots \end{array}$$

定理 29 链映射 $f : C \rightarrow D$ 诱导同调群的同态 $f_* : H_*(C) \rightarrow H_*(D)$, $f_*([z_p]) := [f_p(z_p)]$, 任意的 $z_p \in Z_p(C)$

证明: 由于链映射与边缘算子可以交换, 故将闭链映射成闭链, 将边缘链映射成边缘链, 因此诱导商群的同态 $f_* : H_*(C) \rightarrow H_*(D)$

注意之前说的单纯映射 (simplicial map) $f : K \rightarrow L$, 即将 K 中的每个单形都线性地映射到 L 中某个单形, 其诱导了一个从 K 链复形到 L 链复形的一个链映射 $f_\#$. 具体地, 如果 $c = \sum a_i \sigma_i \in K$, 那么 $f_\#(c) = \sum a_i \tau_i$, 其中 $\tau_i = f(\sigma_i)$.

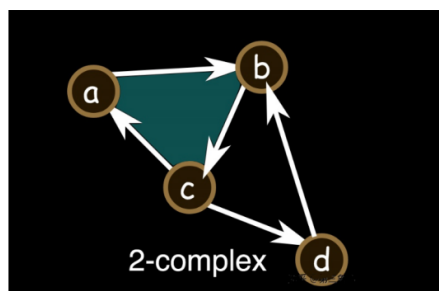
4.4 矩阵表示

为了能够便于计算机进行同调群的计算, 我们引入矩阵表示. 设 K 是一个单纯复形, $c = \sum a_i \sigma_i \in C_p$. 首先我们将所有的 p 维单形找出来, 然后以他们为基底, 任意的 c 我们可以用列向量进行编码, 比如说所有的 p 维单形总共有 n_p 个, 我们用列向量 $\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{n_p} \end{bmatrix}^T$ 进行编码, 其中 $a_{n_i} \in \mathbb{Z}_2$. 类似地, $(p-1)$ 维也是如此做. 我们将边缘算子 ∂_p 对应的矩阵表示为

$$\partial_p c = \begin{bmatrix} a_1^1 & a_1^2 & \cdots & a_1^{n_p} \\ a_2^1 & a_2^2 & \cdots & a_2^{n_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n_{p-1}}^1 & a_{n_{p-1}}^2 & \cdots & a_{n_{p-1}}^{n_p} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{n_p} \end{bmatrix}$$

其中 a_i^j 表示第 i 个 $(p-1)$ 维单形是否是第 j 个 p 维单形的一个面, 同样的 $a_i^j \in \mathbb{Z}_2$. 下面简单举个例子:

由于我们关注于空间的拓扑不变量, 比如说同调群的秩, 所以我们可以引入 Smith 标准型来简求矩阵的秩. 具体计算过程其实就是高斯消元法 (Gaussian elimination), 可以通过三种基本的操作:



∂	$[a, b]$	$[b, c]$	$[c, a]$	$[c, d]$	$[d, b]$
a	1	0	1	0	0
b	1	1	0	0	1
c	0	1	1	1	0
d	0	0	0	1	1

图 4-1 例子

- 对换矩阵的两行或者两列
- 将矩阵的某一行的 k 倍加到另外一行或者将矩阵的某一列的 k 倍加到另外一列
- 将矩阵的某一行乘以 $k \neq 0$ 或者将矩阵的某一列乘以 $k \neq 0$

我们最终会得到如图 16 的 Smith 标准型：

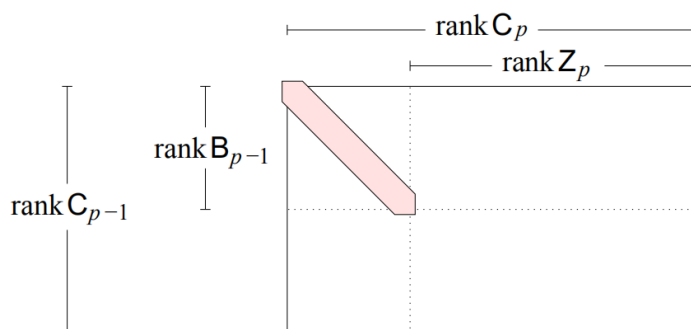


图 4-2 Smith 标准型^[1]

4.5 正合序列

定义 30 我们称下面的序列是正合的，如果 $\ker f_p = \text{im } f_{p-1}, \forall p$

$$\dots \xrightarrow{f_{p+2}} C_{p+1} \xrightarrow{f_{p+1}} C_p \xrightarrow{f_p} C_{p-1} \xrightarrow{f_{p-1}} \dots$$

定理 31 (Snake lemma) 设 $0 \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow 0$ 是一个关于链复形的短正合列，则

诱导下面的长正合列

$$\dots \rightarrow H_{p+1}(C) \rightarrow H_p(A) \rightarrow H_p(B) \rightarrow H_p(C) \rightarrow H_{p-1}(A) \rightarrow \dots$$

定理 32 (Mayer-Vietoris) 设 K 是一个单纯复形, 并且 K', K'' 是它的子单形使得 $K = K' \cup K''$, 设 $A = K' \cap K''$, 则存在下面的长正合列

$$\dots \rightarrow H_p(A) \rightarrow H_p(K') \oplus H_p(K'') \rightarrow H_p(K) \rightarrow H_{p-1}(A) \rightarrow \dots$$

4.6 相对同调

定义 33 设 $K_0 \subseteq K$ 是一个子单纯复形, 我们定义相对链群为

$$C_p(K, K_0) := C_p(K)/C_p(K_0)$$

边缘算子 $\partial_p : C_p(K) \rightarrow C_{p-1}(K)$ 将子群 $C_p(K_0)$ 映射入 $C_{p-1}(K_0)$, 它在商群上诱导的同态 $C_p(K)/C_p(K_0) \rightarrow C_{p-1}(K)/C_{p-1}(K_0)$ 称为空间偶 (pair) (K, K_0) 的边缘算子 $\partial_p : C_p(K, K_0) \rightarrow C_{p-1}(K, K_0)$, 显然也满足两次边缘为 0。其相对链复形为

$$\dots \xrightarrow{\partial_{p+2}} C_{p+1}(K, K_0) \xrightarrow{\partial_{p+1}} C_p(K, K_0) \xrightarrow{\partial_p} C_{p-1}(K, K_0) \xrightarrow{\partial_{p-1}} \dots$$

类似地, 我们定义相对闭链, 相对边缘链, 以及相对同调群

$$H_p(K, K_0) = \frac{\ker \partial_p}{\text{im } \partial_{p+1}}$$

定理 34 设 $K_0 \subseteq K$ 是一个子单纯复形, 则下面的同调序列正合:^[3]

$$\dots \rightarrow H_p(K_0) \rightarrow H_p(K) \rightarrow H_p(K, K_0) \rightarrow H_{p-1}(K_0) \rightarrow \dots$$

定理 35 (切除定理) 设 $K_0 \subseteq K, L_0 \subseteq L$ 是两对单纯复形偶, 并且满足 $L \subseteq K, L - L_0 = K - K_0$, 则存在下面的相对同调群的同构^[3]

$$H_p(K, K_0) \simeq H_p(L, L_0)$$

4.7 上同调与对偶

4.7.1 上同调群

定义 36 设 K 是一个 p 维单纯复形, $C_p(K)$ 是 p 维链群, 我们定义 p 维上链群为所有 p 维链群 $C_p(K)$ 到 $Abel$ 群 G 的同态:

$$C^p(K) := Hom(C_p(K), G)$$

我们一般会取 $G = \mathbb{Z}_2$ 域。而上边缘算子 δ^p 可以由边缘算子诱导:

$$\delta^p \circ f_p := f_p \circ \partial_{p+1} \text{ 或者写成 } \langle \delta^p f_p, c \rangle := \langle f_p, \partial_{p+1} c \rangle, f_p \in Hom(C_p(K), G)$$

其上链复形为

$$\dots \xrightarrow{\delta^{p+2}} C^{p+1} \xrightarrow{\delta^{p+1}} C^p \xrightarrow{\delta^p} C^{p-1} \xrightarrow{\delta^{p-1}} \dots$$

其上同调群为

$$H^p := \frac{\ker \delta^p}{\text{Im } \delta^{p-1}}$$

由定义不难证明 $\delta^2 = 0$ 。同样我们可以考虑上同调边缘算子的矩阵 (coboundary matrix):

定理 37 上边缘算子矩阵等于边缘算子矩阵的转置。

证明: 由于我们使用的是域系数 \mathbb{Z}_2 , 所以链群可以看成是向量空间。设线性变换 $A: V \rightarrow W$ 的矩阵表示为 $A = (a_{ij})$, $Ae_i = \sum_k a_{ki} f_k$, 其中 $\{e_i\}, \{f_j\}$ 分别是 V, W 的基底。现在考虑

$$A^* : Hom(W, G) \rightarrow Hom(V, G)$$

其中 $\{e_i^*\}, \{f_j^*\}$ 分别是 $Hom(V, G), Hom(W, G)$ 的基底。我们设在 $Hom(V, G)$ 中的矩阵表示为

$$A^*(f_j^*) = f_j^* \circ A = \sum_i b_{ij} e_i^*$$

$$f_j^* \circ A(e_i) = f_j^* \left(\sum_k a_{ki} f_k \right) = \sum_k a_{ki} f_j^*(f_k) = \sum_k a_{ki} \delta_{jk} = a_{ji}$$

因此, $B = A^T$ 。

另外, 我们同样可以考虑简约上同调 (reduced cohomology):

$$\dots \xleftarrow{\delta^1} C^1 \xleftarrow{\delta^0} C^0 \xleftarrow{\epsilon^*} Hom(\mathbb{Z}_2, G) \xleftarrow{0} 0 \xleftarrow{\dots}$$

定理 38 (万有系数定理) 设 K 是一个 d 维单纯复形, 则对任意的 p 我们有

$$H^p(K; G) \simeq \text{Ext}(H_{p-1}(K), G) \oplus \text{Hom}(H_p(K), G)$$

其中 $\text{Ext}(\cdot)$ 是扩张群。此定理给出了一个上同调群与同调群的具体联系。

定义 39 一个组合 d 维流形 (*combinatorial manifold*) 指一个 d 维流形 M 上面附带一个单纯剖分使得每一个 i 单形的联结 (*link*) 剖分了 $d-i-1$ 维球面。

定义 40 设 K 是有限单纯复形, A, B 是两个子复形, 我们将 $K = A * B$ 称为 A, B 的统联 (*join*), 如果

- K 的顶点集是 A 的顶点集与 B 的顶点集的不交并。
- K 的一组顶点 S 张成 K 的单形当且仅当其在 A, B 中的部分 $S \cap A, S \cap B$ 都分别张成 A, B 中的单形。

命题 41 统联的性质:

- 任意两个有限单纯复形 A, B , 一定能够把它们嵌入到某个有限单纯复形 K 中, 使得 $K = A * B$ 。

- 映射

$$|A| \times |B| \times I \rightarrow |A * B|, \quad (x, y, t) \mapsto (1-t)x + ty$$

是商映射, 将形如 $x \times |B| \times 0$ 子集缩成一点, 将形如 $|A| \times y \times 1$ 子集缩成一点, 就得到 $A * B$ 。

- 如果有同胚 $|A| \cong |A'|, |B| \cong |B'|$, 那么 $|A * B| \cong |A' * B'|$
- 统联满足结合律和交换律:

$$(A * B) * C = A * (B * C), \quad A * B = B * A$$

注意由组合流形的定义我们可以推出每个单形的闭星形都和 d 维球 B^d 有着同样的拓扑。因为单形 σ 的星形由所有包含 σ 的单形构成, 除了 σ 之外, 星形中的每个单形都是 σ 和某个 $Lk(\sigma)$ 中的单形的统联, 如果 σ 是一个 i 单形, 那么 $Lk(\sigma)$ 就是一个 $d-i-1$ 维的球, 我们再取统联, 我们就得到了一个 d 维球 B^d 。

4.7.1.1 对偶

下面我们从图形上讲对偶，这种讲法起源于图论中的“对偶地图”：假设我们有一张世界地图，我们在相邻的每个国家之间修一条连接两国首都的铁路，我们就会得到一张铁路图，这张图与原图有着惊人的相似之处：一张图的 p 维胞腔一一对应于另一张图的 $2 - p$ 维胞腔。这就是对偶定理的雏形了^[17]。

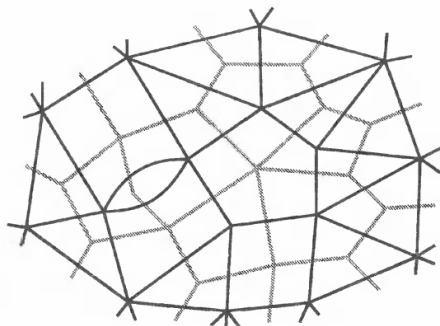


图 4-3 对偶剖分^[17]

定义 42 设 σ 是单纯复形 K 的子单形，我们定义关于 σ 在 K 中的闭对偶块和环绕复形，它们都是 $Sd K$ 的子复形：

$$\overline{\mathfrak{D}}(\sigma) := \{\hat{t}_0 \dots \hat{t}_k \in Sd K : t_0 > \dots > t_k \geq \sigma\}$$

$$\mathring{\mathfrak{D}}(\sigma) := \{\hat{t}_0 \dots \hat{t}_k \in Sd K : t_0 > \dots > t_k > \sigma\}$$

我们定义 σ 在 K 中的对偶块为：

$$\mathfrak{D}(\sigma) := \overline{\mathfrak{D}}(\sigma) - \mathring{\mathfrak{D}}(\sigma) = \{\hat{t}_0 \dots \hat{t}_{k-1} \hat{\sigma} \in Sd K : t_0 > \dots > t_{k-1} > \sigma\}$$

它由所有的以 $\hat{\sigma}$ 为末顶点的单形组成。

命题 43 对偶块构成 $Sd K$ 的分解，且

- $\cup_{\sigma \in K} \mathfrak{D}(\sigma) = Sd K$
- $\mathfrak{D}(\sigma) \cap \mathfrak{D}(\tau) = \emptyset$, 当 $\sigma \neq \tau$ 时
- $\sigma > \tau$ 当且仅当 $\mathfrak{D}(\sigma) \subset \mathfrak{D}(\tau)$

注意 $Sd \sigma = \{\hat{\sigma} \hat{t}_1 \dots \hat{t}_k \in Sd K : \sigma > t_1 > \dots > t_k\}$ 由所有以 $\hat{\sigma}$ 为首顶点的单形组成。并且我们定义

$$Sd \hat{\sigma} = \{\hat{t}_0 \dots \hat{t}_k \in Sd K : \sigma > t_0 > \dots > t_k\}$$

同样我们有

命题 44 对偶块构成 $Sd K$ 的分解, 且

- $\cup_{\sigma \in K} Sd \sigma = Sd K$
- $Sd \sigma \cap Sd \tau = \emptyset$, 当 $\sigma \neq \tau$ 时
- $\sigma > \tau$ 当且仅当 $Sd \tau \subset Sd \sigma$

故 $\{Sd \sigma\}$ 和 $\{\mathfrak{D}(\sigma)\}$ 分别是 $Sd K$ 的两种分解, 并且这两种分解是对偶的。如果我们将对偶块 $\mathfrak{D}(\sigma)$ 简记为 $\hat{\sigma}$, 那么我们可以定义它的对偶块链群 (dual block chain), 其元素为形式和 $\sum a_i \hat{\sigma}_i$, 边缘算子还是和原来一样, 那么我们可以计算对偶剖分的同调群。

定理 45 对偶块同调群和 $Sd K$ 的同调群同构。

4.7.1.2 相交数

设 K 是一个关于组合 d 维流形 M 的单纯剖分, $\sigma \in K$ 是一个 p 维单形, 则由上面的讨论我们知道它的对偶块 $\hat{\sigma}$ 是 q 维的, 其中 $p+q=d$, 则 $\hat{\sigma} \cap \sigma$ 等于 σ 的重心。如果 $\sigma \neq \tau$, 那么 $\hat{\tau} \cap \sigma = \emptyset$, 故我们定义相交数

$$\sigma \cdot \hat{\tau} = \begin{cases} 1 & \sigma = \tau \\ 0 & \sigma \neq \tau \end{cases}$$

为了方便起见我们将所有涉及到的系数群取 \mathbb{Z}_2 。我们可以将其线性地延拓到链群上, 设 $c = \sum_i a_i \sigma_i \in C_p, d = \sum_j b_j \hat{\tau}_j$, 则

$$c \cdot d = \sum_{i,j} a_i b_j (\sigma_i \cdot \hat{\tau}_j), \text{ where } a_i, b_j \in \mathbb{Z}_2$$

其意味着闭链和其对偶链相交次数是奇数还是偶数。同样的, 我们将相交数延拓到同调类上面:

$$\# : H_p(M) \times H_q \rightarrow G, \text{ i.e. } \#(\gamma, \delta) = c \cdot d$$

其中 c, d 分别是同调类 γ, δ 的代表元。不难验证该算子是对称双线性的:

$$(a\gamma + a_0\gamma_0) \cdot \delta = a(\gamma, \delta) + a_0(\gamma_0, \delta)$$

$$\gamma \cdot (b\delta + b_0\delta_0) = b(\gamma, \delta) + b_0(\gamma, \delta_0)$$

$$\gamma \cdot \delta = \delta \cdot \gamma$$

定义 46 更一般地, 我们设 U, V 是 $G = \mathbb{Z}_2$ 上的向量空间, 一个双线性的相交算子 $\# : U \times V \rightarrow G$ 诱导了一个自然的同态

$$\phi_{\#} : V \rightarrow \text{Hom}(U, G), \text{ i.e. } \phi_{\#}(v) = f_v, \quad f_v(u) = u \cdot v$$

我们说这个算子是完美的 (*perfect*) 如果对于任意的非零 $u \in U$, 都存在至少一个 $v_0 \in V$ 使得 $\#(u, v_0) = 1$ 并且对于任意的非零 $v \in V$, 都存在至少一个 $u_0 \in U$ 使得 $\#(u_0, v) = 1$

引理 47 算子 $\# : U \times V \rightarrow G$ 是完美的当且仅当 $\phi_{\#} : V \rightarrow \text{Hom}(U, G)$ 是同构。

证明: 假设 $\phi_{\#}$ 是同构, 我们取 $v \neq 0$, 那么由于 $\phi_{\#}$ 是单的, 则 $f_v \neq 0$, 意味着存在至少一个 $u_0 \in U$ 使得 $\#(u_0, v) = 1$ 。如果取 $u \neq 0$, 那么由于 $\phi_{\#}$ 是满的, 则存在一个 $v_0 \in V$ 使得 $\phi_{\#}(v_0) = u^*$, 即 $\#(u, v_0) = 1$

反过来, 假设 $\# : U \times V \rightarrow G$ 是完美的, 由于 $f_v = 0$, 则 $\#(u, v) = 0, \forall u$, 再由 $\#$ 是完美的, 推出 $v = 0$, 故 $\phi_{\#}$ 是单的。这可以推出

$$\text{rank } V \leq \text{rank } \text{Hom}(U, G) = \text{rank } U$$

类似地, 如果我们定义另外一个映射 $U \rightarrow \text{Hom}(V, G)$, 我们也可以得到

$$\text{rank } U \leq \text{rank } \text{Hom}(V, G) = \text{rank } V$$

故 $\text{rank } V = \text{rank } \text{Hom}(U, G)$, 因此 $\phi_{\#}$ 是一个在两个相同维数的向量空间之间的嵌入, 推出 $\phi_{\#}$ 是同构。

下面我们定义上同调的相交数。设 $\sigma \in K$ 是一个 p 维单形, 它的对偶块 $\hat{\sigma}$ 是 q 维的, 其中 $p + q = d$, 那么我们可以定义 $\varphi_q(\hat{\sigma}) = \sigma^*$ 为其上链元素且满足

$$\langle \sigma^*, \tau \rangle = \begin{cases} 1 & \sigma = \tau \\ 0 & \sigma \neq \tau \end{cases}$$

注意到 $\langle \varphi_q(\hat{\gamma}), \tau \rangle = \hat{\gamma} \cdot \tau$, 通过线性延拓, 我们最终可以定义在上同调类上面:

$$\langle \varphi_*(\gamma), \delta \rangle = \gamma \cdot \delta$$

通过这个式子, 我们可以得到

定理 48 (*Poincaré* 对偶) 如果 M 是一个 d 维紧组合流形, 那么算子 $\# : H_p(M) \times H_q \rightarrow G$ 是完美的, 对任意的 $p + q = d$, 其中 $\#(\gamma, \delta) = \gamma \cdot \delta$

下面我们不加证明地陈述以下在一般流形上的对偶定理^[3]:

定理 49 (*Poincaré* 对偶) 如果 M 是一个可定向闭的 d 维紧流形, 那么对任意的 p 我们有

$$H_p(M; G) \simeq H^{d-p}(M; G)$$

定理 50 (Lefschetz 对偶) 如果 M 是一个可定向的 d 维带边紧流形, 那么对任意的 p 我们有以下的同构

$$H_p(M, \partial M; G) \simeq H^{d-p}(M; G), \quad H_p(M; G) \simeq H^{d-p}(M, \partial M; G)$$

定理 51 (Alexander 对偶) 如果 (M, A) 是一个可定向的相对 d 维流形, K, L 是 M 的子复形, 且满足 $A \subset L \subset K \subset M$, 那么对任意的 p , 我们有以下的同构

$$H^p(K, L) \simeq H_{d-p}(M - L, M - K)$$

定理 52 (球面的 Alexander 对偶) 如果 M 是球面 S^d 的一个单纯剖分, K 是 M 的子复形, 那么对任意的 p , 我们有以下的简约同调群同构

$$\tilde{H}^p(K) \simeq \tilde{H}_{d-p-1}(S^d - K)$$

第 5 章 Morse 理论

在介绍离散 Morse 理论之前,我们先介绍在一般光滑流形上的 Morse 理论。相信大家平时在乘坐飞机或者火车时都需要过安检,其中有一道程序是过一个安检门,通过扫描通过者全身上下从而得到一个关于是否携带违禁物品的信息。Morse 理论也是类似的,我们通过一个流形上的实值函数 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 来计算该流形的临界点 (critical points) 来得到流形本身一种拓扑结构的信息。这部分内容主要来自 Dundas^[18] 和 Edelsbrunner^[1]。

5.1 连续 Morse 理论

定义 53 $p \in M$ 是一个流形上的实值函数 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 的临界点如果在这点的微分 (differential) $d_p f = 0$

定义 54 设 $f : N \rightarrow M$ 是一个光滑映射并且 L 是 M 的一个子流形, 我们说 f 横截 (transverse) L 如果对于任意的 $p \in f^{-1}(L)$, 像 $T_p f$ 和 $T_{f(p)} L$ 都张成了 $T_{f(p)} M$ 。

定义 55 我们说光滑映射 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 的临界点 $p \in M$ 是非退化的 (non-degenerate) 如果 df 和零截面 (zero section) 是在 p 点横截的 (transverse)。我们说光滑映射 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个 Morse 函数如果所有的临界点都是非退化的。

定义 56 光滑映射 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 在临界点 $p \in M$ 并且关于坐标卡 (chart) (x, U) 的 Hessian 矩阵是

$$D(D(fx^{-1}))(x(p))$$

f 在 p 点的指数 (index) 是指 Hessian 矩阵关于负的特征特征值的特征子空间的维数之和。

定理 57 光滑映射 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 的临界点 $p \in M$ 是非退化的当且仅当 Hessian 矩阵关于某个坐标卡下有极大的秩 (maximal rank)。

定理 58 (Morse 引理) 如果 $p \in M$ 是一个非退化的临界点且指数为 k , 则存在坐标卡 (x, U) 使得任意 $t = (t_1, \dots, t_n) \in x(U)$, 我们有

$$fx^{-1}(t) = - \sum_{i=1}^k t_i^2 + \sum_{i=k+1}^n t_i^2$$

定理 59 假设 M 是一个紧流形, $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个光滑映射并且 $a < b \in \mathbb{R}$, 如果 f 在 $[a, b]$ 上没有临界点, 则 M^a 微分同胚 (diffeomorphic) 于 M^b , 其中 $M^a := f^{-1}(-\infty, a]$ 。

定理 60 假设 M 是一个紧流形, $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个光滑的 Morse 函数, 如果 $f^{-1}[a, b]$ 包含了一个单独的临界点 p 即 $c = f(p) \in (a, b)$, 并且设 λ 是 f 在 p 点的指数, 那么 M^b 就可以通过 M^a 粘接一个 λ -胞腔得到。

下面看一个例子, 考虑一个立起来的环面 (torus), 测量高度的函数作为一个该流形上的 Morse 函数, 通过计算我们可以发现该环面一共有四个临界点, 从下往上依次对应的指数为 0,1,1,2。所以从一个 0 维的点出发依次粘接两个一维的胞腔和一个二维的胞腔, 从而得到该环面。

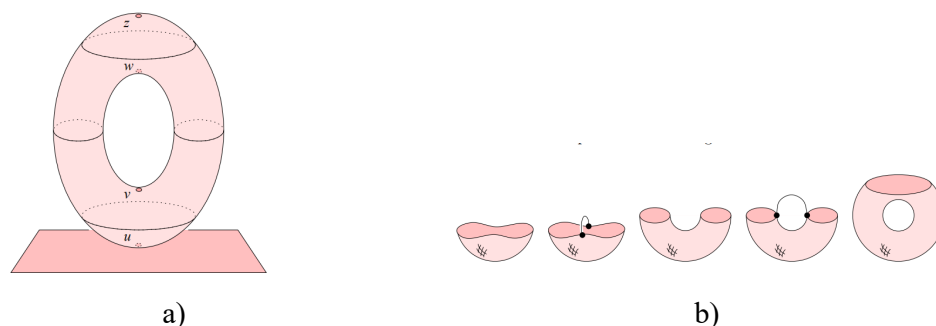


图 5-1 胞腔粘接过程^[1]

5.2 离散 Morse 理论

现在我们将目光转到离散 Morse 理论上面, 假设 K 是一个单纯复形, $f : |K| \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个分段线性函数, 它被定义为 $f(x) = \sum_i b_i(x)f(u_i)$, 其中 $\{u_i\}$ 是 K 的顶点, $b_i(x)$ 是 x 的重心坐标 (barycentric coordinates)。我们说 f 是一般的 (generic) 如果 f 所有的顶点上都具有不同的函数值, 并且, 我们可以将它们排序为 $f(u_1) < f(u_2) < \dots < f(u_n)$ 。对于任意的 $0 \leq i \leq n$, 我们定义 K_i 为让首次 i 个顶点构造的满子复形 (full subcomplex), 即一个单形 $\sigma \in K$ 属于 K_i 当且仅当 σ 的每一个顶点 u_j 满足 $j \leq i$ 。

定义 61 u_i 的星形 (star) 定义为

$$St(u_i) := \{\sigma \in K : u_i \in \sigma\}$$

u_i 的下星形 (lower star) 定义为

$$St_-(u_i) := \{\sigma \in St(u_i) : x \in \sigma \Rightarrow f(x) \leq f(u_i)\}$$

一般来说, 下星形并不一定是复形, 但是我们可以加入丢失的面使之成为 K 的一个子复形, 我们称之为闭下星形 (closed lower star)

定理 62 所有的下星形构成 K 的一个划分 (partition), 其中 K_i 是前面 i 个下星形的

并，并且对于 $f(u_i) \leq a \leq f(u_{i+1})$, K_i 和 $|K|_a := f^{-1}(-\infty, a]$ 同伦等价。

由此，我们可以得到一个 K 的下星形滤链 (filtration): $\emptyset = K_0 \subseteq K_1 \subseteq \dots \subseteq K_n = K$

定义 63 u_i 的联结 (link) 定义为

$$Lk(u_i) := \{\sigma \in \overline{St}(u_i) : \sigma \notin St(u_i)\}.$$

u_i 的下联结 (lower link) 定义为

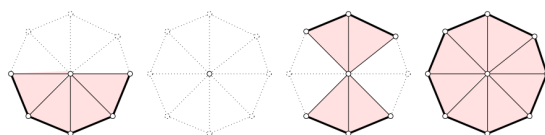
$$Lk_-(u_i) := \{\sigma \in Lk(u_i) : x \in \sigma \Rightarrow f(x) < f(u_i)\}.$$

我们说 u_i 是一个分段正规顶点 (PL regular vertex) 如果它的下联结是非空的并且是同调平凡的 (homologically trivial), 我们说 u_i 是一个指数为 q 的简单的分段临界顶点 (PL critical vertex) 如果它的下联结和一个 $q-1$ 维球面有着一样的简约同调群。

定义 64 我们说一个流形上的分段线性函数 $f : |K| \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个分段 Morse 函数如果

1. 每一个顶点要么是分段正规顶点或者是简单的分段临界顶点。
2. 该函数在每一个顶点上取值都不一样。

如何从 K_{i-1} 得到 K_i 呢? 离散 Morse 理论告诉我们可以从 K_{i-1} 的基础上沿着它的下联结粘接一个 u_i 的闭下星形, 并且我们可以对一些顶点进行分类: 以中心那个点为研究对象, 从左到右依次代表分段正规顶点、极小点、鞍点、和极大点, 其中边缘的黑色线条代表的是下联结。我们通过对于下联结的简约同调进行计算, 就能够知道具体代表哪种点 (注: 当下联结是空集时, 我们约定它的 -1 维简约同调群的秩为 1)。



	$\tilde{\beta}_{-1}$	$\tilde{\beta}_0$	$\tilde{\beta}_1$
regular	0	0	0
minimum	1	0	0
saddle	0	1	0
maximum	0	0	1

图 5-2 临界点的类别^[1]

第 6 章 持续同调

经过前面章节的铺垫，我们即将在本章节正式介绍持续同调理论。回顾我们前面第三章讲过的 Čech 复形，其定义依赖于参数半径 r ，我们让半径 r 连续变动，当从数据集中建立抽象复形时，我们就会得到一系列的嵌套 (nested) 复形，也称之为滤链 (filtration)。而我们的任务就是去确定到底其中哪一个或者哪几个能够比较好的刻画数据集本身，从而从中提取出我们想要的信息。如何评判好坏呢？比如说，我们可以认为在参数的连续变动下，选出某个拓扑不变量 (比如说 Betti 数) 持续时间最长的一段作为代表 (不一定唯一)，这个过程通常被称为 “barcode”。如图：图中最左侧是一些散点数据，我们让半径 r 连续变动 (在实际操作中我们可以取比较小的间隔从而让计算机能够实现)，然后依次建立相应的 Čech 复形，当我们画出生成元对应参数变化的图的时候，我们就会得到一些长短不一的线段。可以看出持续时间最长的那一段表示中间那个一维圆圈，我们就认为数据集的同伦形基本上和 S^1 一致，就这也与我们的直观契合，因为数据集看起来中间就有一个比较大的洞。

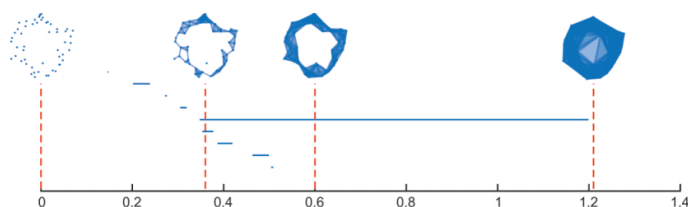


图 6-1 “barcode” 示例^[19]

6.1 持续图

定义 65 给定 \mathbb{R} 的一个子集 T ，一个关于 T 的滤链是指由一些拓扑空间 $\emptyset = X_0 \subseteq X_1 \subseteq \dots \subseteq X_i \subseteq \dots$ 构成的集族 \mathcal{X} ，其中下角标 $i \in T$ 。

这里 \mathcal{X} 可以看成是一种特殊的在拓扑空间范畴 (category) 下的表示 (representation)， \mathcal{X} 被称为有限单纯化的 (finitely simplicial) 如果 X_i 都是有限单纯复形并且 $X_i \subseteq X_j, \forall i \leq j$ 是子复形。当 X_i 都是某个拓扑空间 X 的子集并且 $\bigcap_{i \in T} X_i = \emptyset, \bigcup_{i \in T} X_i = X$ ，我们说 \mathcal{X} 是 X 的一个滤链，并且配对 (X, \mathcal{X}) 称之为一个滤链空间 (filtered space)。

现在，我们作用同调函子 (homology functor) 到 \mathcal{X} 上我们就会得到一个持续模 (persistence module)，对于某个维数 p 来说，我们表示为 $H_p(\mathcal{X})$ 。当 p 跑遍所有的维数

时，我们就得到了 \mathcal{X} 的持续同调 (persistent homology)，表示为 $H_*(\mathcal{X})$ 。对于每个 $i \in T$ 来说，每一个模 $H_p(\mathcal{X})$ 都有一个同调群 $H_p(X_i)$ 作为它的线性空间，并且由嵌入映射 $X_i \rightarrow X_j$ 诱导了同态 $f_p^{i,j} : H_p(X_i) \rightarrow H_p(X_j)$ ，它的像 $H_p^{i,j} := \text{im } f_p^{i,j}$ 通常被称为 \mathcal{X} 的 p 次持续同调群，对应的 p 次持续 Betti 数定义为 $\beta_p^{i,j} := \text{rank } H_p^{i,j}$ 。注意 $H_p^{i,i} = H_p(K_i)$ ，持续同调群 $H_p^{i,j}$ 里面的元素由 K_i 里面的并且在 K_j 里面非平凡的同调类组成，即 $H_p^{i,j} = Z_p(K_i)/(B_p(K_j) \cap Z_p(K_i))$ ， $i \leq j$ 。假设 $\gamma \in H_p(K_i)$ 是一个同调类，我们说 γ 生于 K_i 如果 $\gamma \notin H_p^{i-1,i}$ ；我们说 γ 死于 K_j 如果 $f_p^{i,j-1}(\gamma) \notin H_p^{i-1,j-1}$ 但是 $f_p^{i,j}(\gamma) \in H_p^{i-1,j}$ 。如果一个同调类 γ 生于 K_i 死于 K_j ，那么我们就将它们之间的函数值之差称之为持续值 (persistence)，即 $\text{pers}(\gamma) = a_j - a_i$ ，这里的函数是指 $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ 非递减函数。另外，我们将 $j - i$ 称之为 γ 的持续时间 (index persistence)，从定义可以看出，持续时间可以是无穷，就表示一个同调类从出生开始就一直存在。

定义 66 (persistence diagrams) 下面我们要将持续 Betti 数在二维实扩展平面中表示出来，即 $\overline{\mathbb{R}}^2 := (\mathbb{R} \cup \{\pm\infty\})^2$ ，假设 $\mu_p^{i,j}$ 是所有的生于 K_i 死于 K_j 的 p 维同调类个数之和，我们有

$$\mu_p^{i,j} = (\beta_p^{i,j-1} - \beta_p^{i,j}) - (\beta_p^{i-1,j-1} - \beta_p^{i-1,j}), \quad i < j, \forall p$$

其中第一项表示所有的生于 K_i 或者在 K_i 之前生于的同调类并且都死于 K_j 的个数，第二项表示所有的生于 K_{i-1} 或者在 K_{i-1} 之前生于的同调类并且都死于 K_j 的个数。我们可以在 $\overline{\mathbb{R}}^2$ 中画出每一个点 (i, j) 并且附带一个重数 (multiplicity) $\mu_p^{i,j}$ ，我们就可以得到一个 p 维的关于函数 f 的持续图，记为 $Dgm_p(f)$ ，图中某个点到对角线的垂直距离表示一个同调类的持续值。由于重数仅在 $i < j$ 时定义，所以所有的点都在对角线以上。

引理 67 假设我们有一个有限单纯复形滤链 $\emptyset = X_0 \subseteq X_1 \subseteq \dots \subseteq X_n = K$ ，对于任意的维数 p 和指标 $0 \leq k \leq l \leq n$ ，对应的 p 维持续 Betti 数为

$$\beta_p^{k,l} = \sum_{i \leq k} \sum_{j > l} \mu_p^{i,j}$$

6.2 矩阵计算

假设 K 是一个单纯复形， $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个非递减函数，即 $f(\sigma) \leq f(\tau)$ 当 $\sigma \leq \tau$ ，由函数的非递减性我们可以定义一个良序序列 (compatible ordering sequence): $\sigma_1, \dots, \sigma_m$ 使得 $i < j$ 如果 $f(\sigma_i) < f(\sigma_j)$ ，由此良序序列我们可以建立一个

$m \times m$ 的边缘矩阵 ∂ 去存储所有维数的所有单形，即

$$\partial[i, j] = \begin{cases} 1 & \sigma_i < \sigma_j \text{ 且余维数是 } 1 \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

下面我们通过矩阵的列变换 (将某一行加到另外一行) 来进一步简化问题: 即 $R = \partial \cdot V$, 由于边缘矩阵的定义, 导致 ∂ 会是一个上三角矩阵, 由于我们仅仅从矩阵的左边加到右边, 导致 V 也是一个上三角矩阵, 从而 R 也是一个上三角矩阵, 下面是具体的程序伪代码:

算法 6.1 Matrix reduction algorithm

$R = \partial$

- 1: **for** $j=1$ to m **do**
 - 2: **while** there exists $j_0 < j$ with $\text{low}(j_0) = \text{low}(j)$ **do**
 - 3: add column j_0 to column j ;
 - 4: **end while**
 - 5: **end for**
-

其中 $\text{low}(j)$ 表示第 j 列最低的那个 1 的行指标, 我们说 R 是被简化了的如果 $\text{low}(j) \neq \text{low}(j_0)$ 当 $j \neq j_0$ 。如何得到同调群 $H_p(K)$ 的秩呢? 我们注意到 Z_p 的秩就是矩阵 R 对应的所有的 p 维单形的所有的 0 列的个数, 同样的, B_p 的秩就是矩阵 R 对应的所有的 p 维单形的所有的非 0 列的个数, 它们的差就是 p 维 Betti 数。

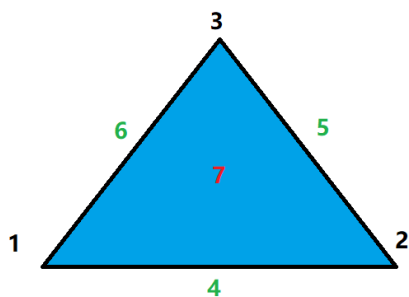
下面的引理是由于我们所作的矩阵列变换不导致矩阵的秩发生改变的结果:

引理 68 最低的 l 的个数是唯一的, 虽然被简化的矩阵不唯一。

定理 69 (a_i, a_j) 是一个在 $Dgm_p(f)$ 中的有限点当且仅当 $i = \text{low}(j)$ 并且 σ_i 是一个 p 维的单形; $(a_i, \infty) \in Dgm_p(f)$ 当且仅当第 i 列是 0 并且第 i 行没有一个最低的 $l^{[1]}$ 。

下面看一个简单的例子, 我们来考虑一个三角形和它所有的面, 如图所示, 依次标

号为 1 到 7。那么它的边缘矩阵 ∂ 以及简化矩阵 R 分别是：



$$\partial = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad R = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

R 中首个最低的 1 是在第二行第四列，表示在第二个顶点加入时出生了一个“0-cycle”，即多了一个连通分支，而在边 4 的加入使得这个连通分支消失；类似地，顶点 3 的加入使得多了一个连通分支，而在边 5 的加入使得这个连通分支消失；边 6 的加入没有导致任何东西消失，所以第六列全是 0，而边 6 的加入使得生成了一个一维闭链；最后，面 7 的加入使得这个闭链消失。下面是它的 0 维和一维的持续图：这里我们约定函数值就是单形的标号，由于这个函数是单射，故所有点的重数都是 1。

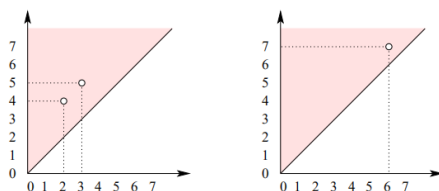


图 6-2 持续图^[1]

6.3 稳定性

接下来我们介绍持续同调算法的稳定性：即我们希望数据的微小连续扰动不会导致最终结果的很大变化，比如说微小扰动使得原来空间中的离散点位置发生改变，那么我们关心持续图反映出来的变化或者说同调群发生了什么变化。注意，这里我们考虑的是数据点的连续变化，对于数据点的突然增加或者消失这种现象不是连续的，而且一般来说也不会稳定，比如说由原来 100 个离散点减少到 50 个离散点，那么有可能会构造出来的复形发生翻天覆地的变化。在离散数

据点个数不变的情况下，由于两个滤链末尾都是同一个复形 K ，故我们分别考虑两个在面的序关系的单调函数 $f, g : K \rightarrow \mathbb{R}$ ，并且数据的连续变化实际上可以对应于直线同伦

$$F : K \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \quad F(\sigma, t) := (1 - t)f(\sigma) + tg(\sigma)$$

我们将 $F(\sigma, t)$ 简写为 $f_t(\sigma)$ ，对于每个 $t \in [0, 1]$ 来说， $f_t(\sigma)$ 都是单调的，即 $f_t(\sigma) \leq f_t(\tau)$ ， $\sigma \leq \tau$ ，用图画出来大致如下所示：其中横坐标表示 t ，纵坐标表示 f_t 在相应单形上的取值。为了方便起见，我们可以假设最多只有两条线交于同一个点，如果不是的话我们可以通过调整 f 或者 g 的函数值来达到这个假设，由于直线的个数是有限条，这确保我们能够做到这一点。

下面我们引入瓶颈距离 (bottleneck distance) 来解释持续图的稳定性。假设 X, Y 分

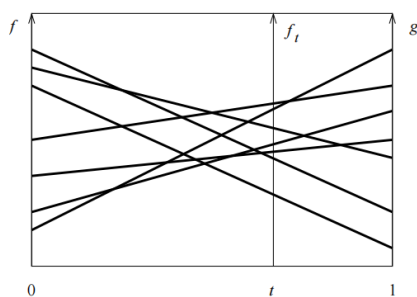


图 6-3 同伦直线^[1]

别是关于同一些数据点扰动前后的两个持续图，注意它们都是扩展实数平面 $\overline{\mathbb{R}^2}$ 中的多重点集，我们可以定义两点之间的无穷范数为

$$\|x - y\|_\infty := \max\{|x_1 - y_1|, |x_2 - y_2|\}$$

继而我们定义两张持续图的瓶颈距离为

$$W_\infty(X, Y) := \inf_{\eta: X \rightarrow Y} \sup_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty$$

其中 $\eta : X \rightarrow Y$ 是双射。注意这里为了能够定义双射我们需要人为地在 X, Y 的持续图的对角线上引入无穷多可数个点，这些点表示在 i 时刻出手立刻又在 i 时刻死亡，所以并没有对我们的分析造成影响，但是却可以帮助我们构建双射。容易验证，瓶颈距离满足度量的三条性质：正定性，对称性，三角不等式。

定理 70 假设 K 是一个单纯复形并且 $f, g : K \rightarrow \mathbb{R}$ 是上面的单调函数， $X = Dgm_p(f), Y = Dgm_p(g)$ ，则 $W_\infty(X, Y) \leq \|f - g\|_\infty$

证明： 我们注意到三个事实：

1. $W_\infty(X_{t_i}, X_{t_{i+1}}) \leq \|f_{t_i} - f_{t_{i+1}}\|_\infty$ ，这里 t_i 和 t_{i+1} 分别表示前后临近的两个交点。

2. $W_\infty(X_0, X_1) \leq \sum_i W_\infty(X_{t_i}, X_{t_{i+1}})$, 这里 $X_1 = Y$
3. $\|f_{t_i} - f_{t_{i+1}}\|_\infty = |f(\sigma) - g(\sigma)|(t_{i+1} - t_i)$, 对于某个 $\sigma \in K$

如果有以上三条成立, 那么我们立刻有

$$W_\infty(X_0, X_1) \leq \sum_i W_\infty(X_{t_i}, X_{t_{i+1}}) \leq \sum_i \|f_{t_i} - f_{t_{i+1}}\|_\infty \leq \|f - g\|_\infty \sum_i (t_{i+1} - t_i) = \|f - g\|_\infty$$

其中第二条根据瓶颈距离三角不等式, 第三条直接计算:

$$\|f_{t_i} - f_{t_{i+1}}\|_\infty = \|(1-t_i)f(\sigma) + t_i g(\sigma) - (1-t_{i+1})f(\sigma) - t_{i+1}g(\sigma)\| = |f(\sigma) - g(\sigma)|(t_{i+1} - t_i)$$

对于某个 $\sigma \in K$ 。至于第一条, 我们首先假设没有交叉的情况。根据瓶颈距离的定义, 我们有

$$W_\infty(X, Y) = \inf_{\eta: X \rightarrow Y} \sup_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty \leq \sup_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty$$

$$\text{for some } \eta: X \rightarrow Y, \quad \text{ie, } (f(\sigma), f(\tau)) \mapsto (g(\sigma), g(\tau))$$

$$\leq \|f - g\|_\infty$$

一般情况下我们以 2ϵ 为宽度将交叉点先去掉, 最后取极限即可, 由于函数都是有

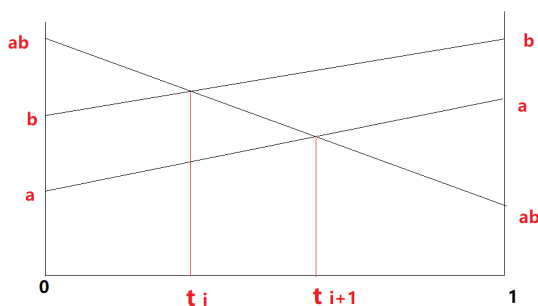


图 6-4 证明示意

界的, 并且交叉点个数有限, 当 $\epsilon \rightarrow 0$ 时, 我们会有一个很好的估计, 比如说在上式的末尾加上一项 $M\epsilon \rightarrow 0$ 。

下面我们推广这个定理。假设拓扑空间 M 是可三角剖分的, $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ 是上面的连续映射, 定义 $M_a := f^{-1}(-\infty, a]$, 我们说 $a \in \mathbb{R}$ 是同调临界值如果不存在 $\epsilon > 0$ 使得 $f_p^{a-\epsilon, a+\epsilon}: H_p(M_{a-\epsilon}) \rightarrow H_p(M_{a+\epsilon})$ 是同构; 我们说 f 是驯化的 (tame) 如果它仅有有限多个同调临界值并且所有的 M_a 的同调群的秩都是有限的。

定理 71 假设拓扑空间 M 是可三角剖分的, $f, g: M \rightarrow \mathbb{R}$ 是上面的两个驯化函数, $X = Dgm_p(f), Y = Dgm_p(g)$, 则 $W_\infty(X, Y) \leq \|f - g\|_\infty$ [10]

下面介绍 Wasserstein 距离下的稳定性: 首先 Wasserstein 距离定义为

$$W_q(X, Y) := \left[\inf_{\eta: X \rightarrow Y} \sup_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty^q \right]^{1/q}$$

同样我们考虑可三角剖分的拓扑度量空间 M , 上面有一个单纯复形 K 和同胚 $\phi : |K| \rightarrow M$, 我们之前定义它的网距 (mesh) 为 K 中同一个单形中任意两点间在像空间中的最大距离, 并且 $N(r)$ 表示网距不超过 r 的单形的最小个数 (在所有的三角剖分中), 我们说 M 的三角剖分是多项式增长的, 如果存在常数 c, j 使得 $N(r) \leq cr^j$. 另外我们定义持续图 X 的 k 次总持续同调量为 $\Phi^k(X) = \sum_{x \in X} \text{pers}(x)^k$; 我们说函数 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ 是 Lipschitz 的如果 $|f(x) - f(y)| \leq \|x - y\|, \forall x, y \in M$

定理 72 假设 $f, g : M \rightarrow \mathbb{R}$ 是可三角剖分的拓扑度量空间 M 上面的两个 Lipschitz 驯化函数, 并且 M 的三角剖分是多项式增长的, 那么存在常数 C 和 $k > j \geq 1$ 使得 $W_q(X, Y) \leq C \cdot \|f - g\|_\infty^{1-k/q}, \forall q \geq k$, 其中 $X = \text{Dgm}_p(f), Y = \text{Dgm}_p(g)$

证明: 假设 $\eta : X \rightarrow Y$ 是使得瓶颈距离取到下确界的双射, 即 $\|x - \eta(x)\|_\infty \leq \epsilon := \|f - g\|_\infty, \forall x \in X$, 并且 $\|x - \eta(x)\|_\infty \leq \frac{1}{2}[\text{pers}(x) + \text{pers}(\eta(x))]$ (如果不是的话, 则有 $\|x - \eta(x)\|_\infty > \frac{1}{2}[\text{pers}(x) + \text{pers}(\eta(x))]$ 对于某个 $x \in X$, 继而 $\epsilon \geq \|x - \eta(x)\|_\infty > \frac{1}{2}[\text{pers}(x) + \text{pers}(\eta(x))] \Rightarrow \text{pers}(x) < 2\epsilon, \text{pers}(\eta(x)) < 2\epsilon$, 设 $x = (x_1, x_2), y = (y_1, y_2), y = \eta(x)$, 即 $|x_1 - x_2| < 2\epsilon, |y_1 - y_2| < 2\epsilon$. 此时 x 到对角线 $y - x = 0$ 的欧式距离为 $\frac{|x_1 - x_2|}{\sqrt{2}} < \sqrt{2}\epsilon$, 则对应的无穷模距离为 ϵ , 这时候我们可以修改双射 $\eta(x) = x', \eta(y') = y$ 其他点不变, 则我们仍然有前面两条假设), 我们有

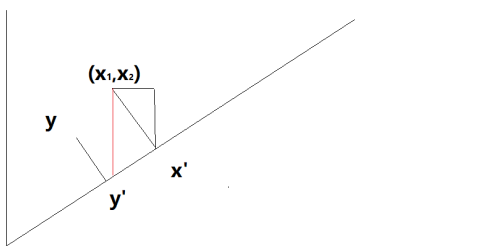


图 6-5 证明示意

$$\begin{aligned}
 W_q(X, Y)^q &\leq \sum_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty^q \\
 &\leq \epsilon^{q-k} \sum_{x \in X} \|x - \eta(x)\|_\infty^k \\
 &\leq \frac{\epsilon^{q-k}}{2^k} \sum_{x \in X} [\text{pers}(x) + \text{pers}(\eta(x))]^k \\
 &\leq \frac{\epsilon^{q-k}}{2^k} \sum_{x \in X} [(2\text{pers}(x))^k + (2\text{pers}(\eta(x)))^k] \\
 &= \epsilon^{q-k} [\Phi^k(X) + \Phi^k(Y)]
 \end{aligned}$$

两边开 q 次根号就是我们想要的了。

6.4 持续图像分布法

这一节我们主要介绍持续图像分布法 (persistence image)^[20], 此方法在某些应用的情况下会使我们的计算更加高效。首先假设 B 是一个持续图, 定义 $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ 即 $T(x, y) := (x, y - x)$ (这里不考虑 $\overline{\mathbb{R}^2}$ 的原因是因为一般我们实际应用中很少出现某个同调群生成元的持续时间是无穷, 而就算出现无穷我们也把无穷大当成 \mathbb{R}^2 平面中某个点进行处理), 这样横坐标就代表生成时间, 纵坐标代表持续时间。对于 $T(B)$ 中点 (u_x, u_y) , 我们定义关于该点的分布函数

$$\phi_u(x, y) := \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{(x-u_x)^2 + (y-u_y)^2}{2\sigma^2}}$$

对于每一个点 $u \in T(B)$, 我们定义权重函数为 $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, 这里权重函数衡量某个点的重要程度。对于的持续曲面 (persistence surface) 为 $\rho_B: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, 即

$$\rho_B(z) := \sum_{u \in T(B)} f(u) \phi_u(z)$$

注意如果某个点 u 具有重数, 那就按照 u 的重数进行求和。现在我们对于底平面 \mathbb{R}^2 作一些格子的划分, 比如说 3×3 的网格区域, 然后我们考虑密度函数 ρ_B 在每一块上面的积分, 即

$$I(\rho_B)_p := \iint \rho_B dy dx$$

其中 p 表示某个 p 维的持续图, 我们将每一块的积分值存储在相应的矩阵中 (比如说 3×3 矩阵), 根据矩阵数值大小我们就可以知道相应的持续时间长短, 另外的话, 该方法的另外一个优势就是可以将不同维数的持续图按照这种方法矩阵化, 然后拼接, 综合储存与处理。但是由于矩阵数值取的是积分值, 相当于某种平均, 在分块比较粗的情况下很难再返回去, 另外的话到底分多少块也是依据经验来定。

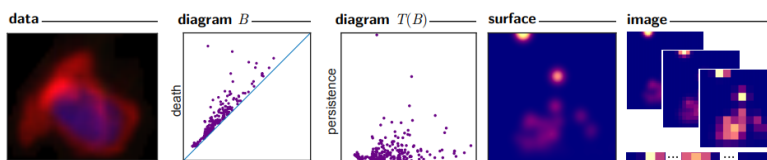


图 6-6 过程示意图^[20]

6.5 Quiver 理论与持续同调

这一节我们将从 Quiver 表示理论的观点来看持续同调^[2]。

定义 73 一个 quiver Q 由两个集合 Q_1, Q_0 和两个映射 $h, t: Q_1 \rightarrow Q_0$ 组成, 其

中我们将 Q_0 里面的元素称为顶点 (*vertices*), 将 Q_1 里面的元素称为箭头 (*arrows*)。如果 Q_0, Q_1 的个数是有限的, 我们就说 Q 是有限的。

一般地, 我们可以用一张有向图来表示一个 quiver, 下面我们来看一个例子, $Q_0 = \{1, 2, 3\}$, $Q_1 = \{a, b, c, d, e\}$, $h : (a, b, c, d, e) \mapsto (2, 2, 3, 1, 1)$, 表示映射的箭头的顶点是什么。 $t : (a, b, c, d, e) \mapsto (1, 2, 2, 3, 3)$ 表示映射的箭尾的顶点是什么。如果其对应的有向图是连通的, 我们就称 Q 是连通的。

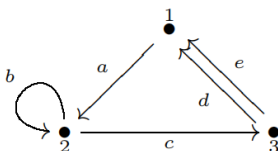


图 6-7 有向图^[2]

定义 74 一个关于 quiver Q 的在域系数 k 下的表示 (*representation*) 是指 $\mathbb{V} = (V_i, v_a)$, 其中 $\{V_i | i \in Q_0\}$ 是 k -线性空间, $\{v_a : V_{t_a} \rightarrow V_{h_a} | a \in Q_1\}$ 是 k -线性映射。

注意这里的线性空间和线性映射都是任意的, 比如说如果 $a, b, c \in Q_1$, 并且 $t_c = t_a, h_c = h_b, h_a = t_b$, 那么我们不一定有 $v_c = v_b \circ v_a$ 。并且, V_i 可以是无穷维的, 当所有的 V_i 的维数之和是有限的时, 我们就说表示 \mathbb{V} 是有限表示。我们称 $\mathbb{W} = (W_i, w_a)$ 表示是 $\mathbb{V} = (V_i, v_a)$ 的子表示 (*subrepresentation*) 如果对任意的 $i \in Q_0$, W_i 都是 V_i 的子空间并且 $w_a = v_a|_{W_{t_a}}$ 限制在子空间上。

定义 75 关于同一个 quiver Q 的两个表示之间的态射 $\phi : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{W}$ 由 k -线性映射 $\phi_i : V_i \rightarrow W_i$ 构成, 并且对于每一个 $a \in Q_1$, 我们有下列图表交换: 如果每一个 ϕ_i 都是双射, 我们就说 $\mathbb{V} \cong \mathbb{W}$ 同构。

$$\begin{array}{ccc} V_{t_a} & \xrightarrow{v_a} & V_{h_a} \\ \downarrow \phi_{t_a} & & \downarrow \phi_{h_a} \\ W_{t_a} & \xrightarrow{w_a} & W_{h_a} \end{array}$$

由于不同的表示之间的态射可以逐点复合, 即如果 $\phi : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{V}$, $\psi : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{W}$, 那么 $\psi \circ \phi : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{W}$ 被定义为 $(\psi \circ \phi)_i = \psi_i \circ \phi_i, \forall i \in Q_0$, 并且对于每个 \mathbb{V} 我们都有 $1_{\mathbb{V}} : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ 被定义为 $(1_{\mathbb{V}})_i = 1_{V_i}, \forall i \in Q_0$, 所以我们可以将 quiver Q 的所有表示看成一个范畴 (*category*), 记为 $Rep_k(Q)$, 其所有的有限维表示是其一个子范畴, 记为 $rep_k(Q)$, 两者都是阿贝尔 (*abelian*) 范畴。另外, 由所有的线性空间和线性映射构成的 0 表示是其中一个零对象。并且, 关于 quiver Q 的不同表示可以作直和 (*direct sum*), 即 $\mathbb{V} \oplus \mathbb{W}$ 里面的线性空间是 $V_i \oplus W_i, \forall i \in Q_0$, 里面的线性映射是

$v_i \oplus w_i = \begin{pmatrix} v_a & 0 \\ 0 & w_a \end{pmatrix}, \forall a \in Q_1$ 一个非零表示称之为可分解的 (decomposable) 如果它同构于某些非平凡的表示的直和。

定理 76 假设 Q 是一个域系数 k 上的有限 quiver, 那么 Q 的每一个有限维表示 \mathbb{V} 都可以分解为一些不可分解表示的直和, 并且该分解是在表示同构和不计顺序的情况下唯一 [2]。

$$\mathbb{V} = \mathbb{V}^1 \oplus \dots \oplus \mathbb{V}^r$$

如果 quiver Q 的图像表示在不考虑箭头顺序的情况下呈现图中的线形, 我们说 Q 是 A_n 类型的。

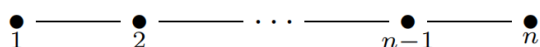
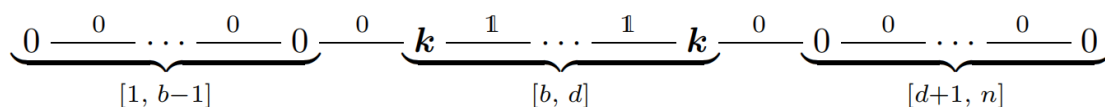


图 6-8 A_n 图

定理 77 如果 quiver Q 是 A_n 类型的, 那么 Q 的每一个不可分解的有限维表示同构于如下的区间表示, $\mathbb{I}_Q[b, d]$



该定理甚至可以推广至无限维表示以及可数无穷 quiver 线形表示。

现在假设 $T \subseteq \mathbb{R}$ 是指标集, 一般地, 我们可以将偏序集 $(\text{poset}(T, \leq))$ 视为一个范畴, 其对象是 T 中每一个点, 映射对应于 $i \leq j$ 。现在我们将 (T, \leq) 的一个表示视为函子在此范畴到 (线性空间, 线性映射) 范畴的像, 即其中的对象为 $(V_i)_{i \in T}$, 映射为 $(v_i^j : V_i \rightarrow V_j)_{i \leq j \in T}$, 满足

$$v_i^i = 1_{V_i}, \quad v_i^k = v_j^k \circ v_i^j, \forall i \leq j \leq k \in T$$

定义 78 关于指标集 $T \subseteq \mathbb{R}$ 的持续模 (persistence module) 是指关于偏序集 (T, \leq) 的表示。

定义 79 给定 $n \geq 1$, zigzag 模是指关于 A_n 类型的 quiver 的表示 (其中 "zigzag" 表示 quiver 的箭头指向变化反复的意思)。或者定义为关于偏序集 $(\{1, \dots, n\}, \leq)$ 的表示, 其中的偏序关系 \leq 是使得它的 Hasse 图是 A_n 类型的。

定理 80 一个关于偏序集 (T, \leq) 的表示 \mathbb{V} 能够分解为一些区间模 (interval modules)

的直和（在同构和不考虑顺序下唯一），如果满足以下条件之一：

1. T 是有限的并且关于偏序关系 \leq 的 Hasse 图是 A_n 类型的。
2. T 是任意的但是偏序关系 \leq 就是普通的 \leq ，并且 \mathbb{V} 是逐点有限维的（每个 V_i 都是有限维）。

下面约定一些记号：其中 d, b 分别都可以取得到 $\pm\infty$ ，这些被称为修饰区间。

$$[b^-, d^-] := [b, d]$$

$$[b^-, d^+] := [b, d]$$

$$[b^+, d^-] := (b, d)$$

$$[b^+, d^+] := (b, d)$$

给定指标集 $T \subseteq \mathbb{R}$ 的子集，我们可以写成一些连续的修饰区间来表示，使得 $S = [b^\pm, d^\pm] \cap T$ ，比如说 $T = \{1, 2, 3, 4\}, S = \{2, 3\}$ ，那么 $S = [2, 3] \cap T$ ，或 $S = (1, 3] \cap T$ ，或 $S = (1, 4) \cap T$ ，或 $S = [2, 4) \cap T$ ，注意到并不唯一，但是我们可以约定长度最小的那个作为表示（比如说例子中的 $[2, 3]$ ）。假设 \mathbb{V} 是一个满足区间分解的模，则 $\mathbb{V} \cong \bigoplus_{j \in J} \mathbb{I}[b_j^\pm, d_j^\pm]$ ，区间的集合 $[b_j^\pm, d_j^\pm]$ 就称之为 \mathbb{V} 的持续“barcode”，更进一步，它其实是一个多重集合 (multiset)，意即每一个区间有可能不只出现一次。当然，我们也可以将 $[b_j^\pm, d_j^\pm]$ 作为点 (b_j, d_j) 放在 $\overline{\mathbb{R}^2}$ 中表示出来，和之前的持续图对应，它被称为 \mathbb{V} 的修饰持续图 (decorated persistence diagram)，记为 $Dgm(\mathbb{V}) := \{(b_j^\pm, d_j^\pm) | j \in J\}$ 。

下面我们来看一个例子：假设图中的曲线 X 被高度函数 f 滤化，即滤链 \mathcal{X} 由 f 的原像集 $\mathcal{X}_i = f^{-1}(-\infty, i]$ 构成。下面我们看它的 0 维同调群 (即连通分支) 表现怎么样：首先从 a 开始生成第一个连通分支，之后一直没有消失，故我们得到区间分解其中一段 $[a, +\infty)$ ，而后随着 i 的不断上升，到达 b 开始出现了第二个连通分支，直到 c 处消失，而后到达 d 处又出现了一个新的连通分支，直到 e 处消失，再往上，就会一直是一个连通分支，直到无穷。

$$H_0(\mathcal{X}) \cong \mathbb{I}[a, +\infty) \oplus \mathbb{I}[b, c) \oplus \mathbb{I}[d, e)$$

持续同调理论不仅仅在数据分析应用方面有用武之地，而且在 quiver 表示论领域也有着深刻的影响。例如在证明 quiver 的有限类型分类定理的时候也很重要，这里由于篇幅原因就不展开叙述，感兴趣的读者可以参考 [2] 附录部分。

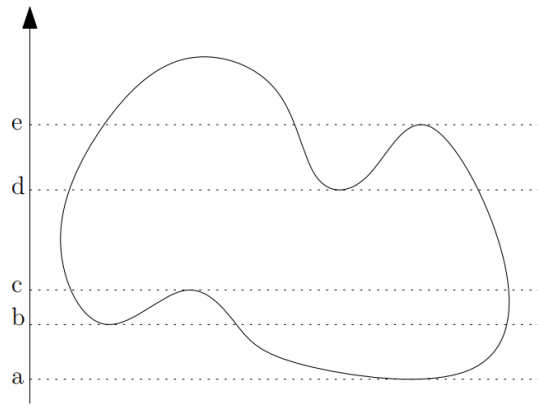


图 6-9 示意图^[2]

结 论

本篇硕士学位论文深入浅出地着重从理论层面介绍了当前异常活跃的一个前沿交叉研究领域，即“拓扑数据分析”（Topological Data Analysis），用代数拓扑学的方法和计算工具进行数据处理与分析，包括对采样数据点云的聚类 and 特征挖掘。这篇论文对于机器学习特别是用代数拓扑方法研究数据有很大的帮助。论文从大数据导论涉及聚类方法的回顾出发，介绍和定义了几何拓扑与代数拓扑应用于数据分析的基本概念和例子，进一步分专题介绍了 Morse 理论及其逐段线性情形、持续同调的若干表示（barcode, persistence diagram, persistence image, persistence module 等）、矩阵算法、关于 Wasserstein 距离的稳定性的证明方法，在很多例子中提出了自己的独特的见解。这篇论文源于作者硕士阶段阅读文献、参加讨论班、学术交流的积累和梳理，是国内为数不多的拓扑数据分析入门综述文章。展望未来，人工智能应该与拓扑大数据相结合，先用持续同调方法提取数据特征，而后进行机器学习。只有这样，我们才有可能真正了解数据的本质，窥探宇宙运行的真理。

参考文献

- [1] Edelsbrunner H, Harer J L. Computational topology[M/OL]. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010: xii+241. <https://doi.org/10.1090/mbk/069>.
- [2] Oudot S Y. Mathematical surveys and monographs: volume 209 persistence theory: from quiver representations to data analysis[M/OL]. American Mathematical Society, Providence, RI, 2015: viii+218. <https://doi.org/10.1090/surv/209>.
- [3] Hatcher A. Algebraic topology[M]. Cambridge University Press, Cambridge, 2002: xii+544.
- [4] 董彬, 鄂维南, 欧高炎, 等. 数据科学导论[M]. 高等教育出版社, 2017.
- [5] Frosini P. Discrete computation of size functions[J]. J. Combin. Inform. System Sci., 1992, 17 (3-4): 232-250.
- [6] Mischaikow K, Mrozek M. Chaos in the Lorenz equations: a computer-assisted proof[J/OL]. Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), 1995, 32(1): 66-72. <https://doi.org/10.1090/S0273-0979-1995-00558-6>.
- [7] Robins V. Towards computing homology from finite approximations[C]//Proceedings of the 14th Summer Conference on General Topology and its Applications (Brookville, NY, 1999): volume 24. 1999: 503-532 (2001).
- [8] Edelsbrunner H, Letscher D, Zomorodian A. Topological persistence and simplification [M/OL]//volume 28. 2002: 511-533. <https://doi.org/10.1007/s00454-002-2885-2>.
- [9] Zomorodian A, Carlsson G. Computing persistent homology[J/OL]. Discrete Comput. Geom., 2005, 33(2): 249-274. <https://doi.org/10.1007/s00454-004-1146-y>.
- [10] Cohen-Steiner D, Edelsbrunner H, Harer J. Stability of persistence diagrams[J/OL]. Discrete Comput. Geom., 2007, 37(1): 103-120. <https://doi.org/10.1007/s00454-006-1276-5>.
- [11] Carlsson G, Zomorodian A. The theory of multidimensional persistence[J/OL]. Discrete Comput. Geom., 2009, 42(1): 71-93. <https://doi.org/10.1007/s00454-009-9176-0>.
- [12] Chazal F, de Silva V, Glisse M, et al. Springerbriefs in mathematics: The structure and stability of persistence modules[M/OL]. Springer, [Cham], 2016: x+120. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-42545-0>.
- [13] Bubenik P, Scott J A. Categorification of persistent homology[J/OL]. Discrete Comput. Geom., 2014, 51(3): 600-627. <https://doi.org/10.1007/s00454-014-9573-x>.
- [14] Lesnick M. The theory of the interleaving distance on multidimensional persistence modules [J/OL]. Found. Comput. Math., 2015, 15(3): 613-650. <https://doi.org/10.1007/s10208-015-9255-y>.
- [15] Macpherson R, Patel A. Persistent local systems[J]. 2018.
- [16] Milnor J. Two complexes which are homeomorphic but combinatorially distinct[J/OL]. Ann. of Math. (2), 1961, 74: 575-590. <https://doi.org/10.2307/1970299>.
- [17] 姜伯驹. 同调论[M]. 北京大学出版社, 2006.

- [18] Dundas B r I. Cambridge mathematical textbooks: A short course in differential topology [M/OL]. Cambridge University Press, Cambridge, 2018: xii+251. <https://doi.org/10.1017/9781108349130>.
- [19] Perea J A. Topological times series analysis[J]. Notices Amer. Math. Soc., 2019, 66(5): 686-694.
- [20] Adams H, Chepushtanova S, Emerson T, et al. Persistence images: A stable vector representation of persistent homology[J]. Journal of Machine Learning Research, 2017, 18.

致 谢

衷心感谢朱一飞老师一直以来对我的帮助以及指导，感谢南科大计算拓扑讨论班易思恒，吴一凡，阮夏冰，岑思宇等同学的分享与讨论，使得我对这一课题有更加深刻的理解，谢谢大家。

南方科技大学学位论文原创性声明和使用授权说明

南方科技大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文是本人在导师指导下独立进行研究工作所取得的成果。除了特别加以标注和致谢的内容外，论文中不包含他人已发表或撰写过的研究成果。对本人的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中作了明确的说明。本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日期：

南方科技大学学位论文使用授权书

本人完全了解南方科技大学有关收集、保留、使用学位论文的规定，即：

1. 按学校规定提交学位论文的电子版本。
2. 学校有权保留并向国家有关部门或机构送交学位论文的电子版，允许论文被查阅。
3. 在以教学与科研服务为目的前提下，学校可以将学位论文的全部或部分内容存储在有关数据库提供检索，并可采用数字化、云存储或其他存储手段保存本学位论文。
 - (1) 在本论文提交当年，同意在校园网内提供查询及前十六页浏览服务。
 - (2) 在本论文提交 当年/ 一年以后，同意向全社会公开论文全文的在线浏览和下载。
4. 保密的学位论文在解密后适用本授权书。

作者签名：

日期：

指导教师签名：

日期：

个人简历、在学期间完成的相关学术成果

个人简历

1996年12月31日出生于广西桂林。

2015年9月考入南方科技大学数学系数学与应用数学专业，2019年6月本科毕业并获得理学学士学位。

2019年9月—2021年6月，在南方科技大学数学系基础数学学科学习并获得理学硕士学位。

获奖情况：美国大学生数学建模竞赛（MCM/ICM）S奖；武汉市江夏区基层政府公共服务窗口服务水平调研校级“优秀团队三等奖”，致新书院“最佳团队奖”；南科大硕士研究生全额奖学金。

工作经历：无

在学期间完成的相关学术成果

无