

対応のパーシステントホモロジー

簾の表現論の視点から

竹内 博志 (Hiroshi Takeuchi) *

概要

2014年に Shaun Harker らによって提案された対応 (correspondence) から誘導されるホモロジー準同型写像の理論は、ノイズや欠陥を含むデータ間の対応からも、真の写像の誘導写像の情報を復元することを可能にする強力な道具である。本研究では、応用トポロジーで研究されて来たパーシステント加群の枠組みで対応の誘導写像を再定義し、原論文で示されている諸定理を簡潔な形で示した。更にここで用いたアイデアを応用すれば、離散力学系において写像で対応付けられるホモロジー生成元のパーシステンスを解析することが出来る。

1 背景と先行研究

次のような問題設定を考える。

問題 1. 連続写像 $f: X \rightarrow Y$ が存在し、ある有限集合 $S \subset X$ 上の振る舞い $f|_S$ だけ与えられている。この時、ホモロジー誘導写像 $f_*: HX \rightarrow HY$ の情報を得ることが出来るだろうか。

先行研究 [1] では次のような解析を提案している。まず位相空間 X 及び Y を有限個に分割し、サンプル $\{(s, f(s)) \mid s \in S\}$ が乗っている領域 (図 2 の紫の部分) を F とおく。

定義 2. $X \times Y$ の部分集合を (X から Y への) 対応と呼ぶ。

定義 3. 対応 F に対し、標準的な射影から定まる図式 $X \xleftarrow{p} F \xrightarrow{q} Y$ を考える。二条件

- $\text{Im } p_* = HX$ (homologically complete)
- $q_*(\text{Ker } p_*) = 0$ (homologically consistent)

を満たす時、誘導写像 $F_* := q_* \circ p_*^{-1}: HX \rightarrow HY$ が well-defined に定まる。

ここで、連続写像 f のグラフ $\text{Gr}(f)$ は対応であり、 $\text{Gr}(f)_*$ が定まるが、これは f_* と一致することに注意する。次の二定理により、分割が十分に細かくサンプルが十分に取れている時、 f_* を F_* によって取り出せることが保証されている。

* 東北大学大学院理学研究科 (〒980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3, E-mail: hiroshi.takeuchi.s6@dc.tohoku.ac.jp)

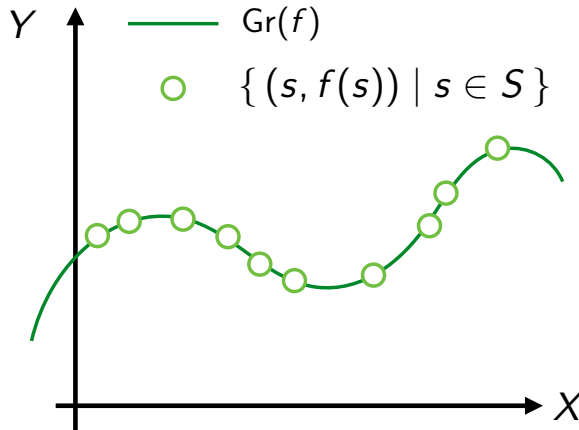


図1 f のグラフ $\text{Gr}(f)$ とサンプル

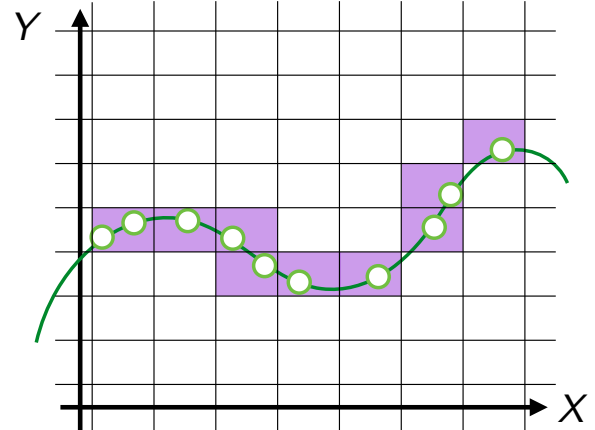


図2 分割して対応 F を取り出す

定理 4 ([1, Theorem 3.10]). 対応 F が $\text{Gr}(f) \subset F$ かつ homologically consistent 条件を満たすなら, F は homologically complete で F_* が定まり, $f_* = F_*$.

定理 5 ([1, Theorem 4.6]). 対応 F が homologically consistent 条件, 対応 G が homologically complete 条件を満たし, さらに $G \subset F$ の時, F は homologically complete, G は homologically consistent で F_*, G_* が定まり, $G_* = F_*$.

我々はこれを籓の表現論の枠組みで捉え直し, 更に様々な解析手法へと拡張した.

2 籓の表現論

以後, ベクトル空間の係数とホモロジー群の係数は全て体 K とする. 籓 (えびら, *quiver*) $Q = (Q_0, Q_1)$ とは, 頂点集合が Q_0 で有向辺の集合が Q_1 で与えられる有向グラフのことである. 籓 Q の頂点 $a \in Q_0$ から $b \in Q_0$ への辺 $\alpha \in Q_1$ を $\alpha: a \rightarrow b$ で表す.

籓 Q の表現 $M = (M_a, \varphi_\alpha)_{a \in Q_0, \alpha \in Q_1}$ (もしくは簡単に (M_a, φ_α)) とは, 各頂点 $a \in Q_0$ に有限次元ベクトル空間 M_a を割り当て, 各辺 $\alpha: a \rightarrow b \in Q_1$ に線形写像 $\varphi_\alpha: M_a \rightarrow M_b$ を割り当てたものである. 籓 Q の表現 $M = (M_a, \varphi_\alpha)$ から表現 $M' = (M'_a, \varphi'_\alpha)$ への射 $f := \{f_a: M_a \rightarrow M'_a \mid a \in Q_0\}: M \rightarrow M'$ を

$$\forall \alpha: a \rightarrow b \in Q_1 \text{ に対し, } \begin{array}{ccc} M_a & \xrightarrow{\varphi_\alpha} & M_b \\ \downarrow f_a & & \downarrow f_b \\ M'_a & \xrightarrow{\varphi'_\alpha} & M'_b \end{array} \text{ を可換にする.}$$

を満たすように定義すれば, 表現の (加法) 圏 $\text{rep}(Q)$, 特に零対象・表現の同型・表現の直和が定まる.

表現 M は, $M \cong N \oplus N'$ なる任意の直和分解に対して常に $N = 0$ もしくは $N' = 0$ となるとき直既約という. Krull-Remak-Schmidt の定理によると, 任意の表現 M は直既約な表現の直和

$M \cong N_1 \oplus \cdots \oplus N_s$ に同型を除いて一意に分解出来ることが知られている.

$A_n(\tau_n)$ 型籠 (もしくは A_n 型籠) とは, 次のような n 個の頂点が $n-1$ 個の辺で結ばれた有向グラフのことである:

$$A_n(\tau_n) : \overset{1}{\circ} \longleftrightarrow \overset{2}{\circ} \longleftrightarrow \cdots \longleftrightarrow \overset{n}{\circ}.$$

ここで, \longleftrightarrow は \rightarrow もしくは \leftarrow を表し, それぞれに記号 f, b (forward と backward) を用意し, $A_n(\tau_n)$ 型籠は f, b の $n-1$ 個の列 τ_n でその向き付けを表す. Gabriel の定理 [2] によると, A_n 型籠の任意の表現

$$M : M_1 \longleftrightarrow M_2 \longleftrightarrow \cdots \longleftrightarrow M_n$$

は, 直既約な区間表現

$$\mathbb{I}[b, d] : 0 \longleftrightarrow \cdots \longleftrightarrow 0 \xrightarrow{b \text{ 番目}} K \xleftarrow{\text{id}_K} K \xleftarrow{\text{id}_K} \cdots \xleftarrow{\text{id}_K} K \xrightarrow{d \text{ 番目}} 0 \longleftrightarrow \cdots \longleftrightarrow 0$$

の直和

$$M \cong \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq n} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}}, \quad (m_{b,d} \in \mathbb{Z}_{\geq 0} : \text{重複度}) \quad (1)$$

として同型を除いて一意に分解可能であることが知られている. 位相的データ解析で中心的な役割を果たしているパーシステントホモロジー群

$$HX : HX_1 \rightarrow HX_2 \rightarrow \cdots \rightarrow HX_n$$

は, A_n 型籠の射の向きが全て揃った $\tau_n = ff \cdots f$ の特別な場合の表現 (これをパーシステント加群と呼ぶ) として扱うことも出来, その直既約成分 $\mathbb{I}[b, d]$ は HX_b で発生し HX_{d+1} で消滅するホモロジー群の生成元を意味している. パーシステントホモロジー群の一意分解 (1) から定まる多重集合

$$D_M = \{ (b, d) \mid 1 \leq b \leq d \leq n, (b, d) \text{ は重複度 } m_{b,d} \text{ をもつ} \},$$

またはこれを平面上に描画したものをパーシステント図と呼ぶ. この表示は視覚的にわかりやすく, パーシステントホモロジー群の応用においては頻繁に利用されている.

3 籠の表現による対応の誘導写像の別定義

図式 $HX \xrightarrow{p_*} HF \xrightarrow{q_*} HY$ は A_3 型籠の表現として直既約表現の直和に分解することが出来, $(HX \xrightarrow{p_*} HF \xrightarrow{q_*} HY) \cong \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}}$ と書ける. 直既約分解は “良い” 基底の割り当てを選ぶことであり, 例えば $\mathbb{I}[1, 2]$ は HX の生成元を HY の 0 に割り当てている. 従って, ここで非自明な割り当ては $\mathbb{I}[1, 3] = (K \xleftarrow{\text{id}_K} K \xleftarrow{\text{id}_K} K)$ のみであり, 他の直既約表現を HX から HY への 0 写像と見做すことによって, HX から HY への準同型写像 F_* を改めて定義することが出来る (図 3).

この定義では定義 3 で述べた二条件は不要であり, またこの二条件を満たす時は, 先行研究の定義と一致することが示せる. この定義の下で再び定理 4 及び定理 5 は成り立ち, 可換梯子型パーシステント加群 [3] の議論を用いて非常に簡潔に証明した.

$$\begin{array}{ccccc}
HX & \xleftarrow{p_*} & HF & \xrightarrow{q_*} & HY \\
\downarrow \cong & & \downarrow \cong & & \downarrow \cong \\
K^\alpha & \xleftarrow{\quad} & K^\beta & \xrightarrow{\quad} & K^\gamma \\
\downarrow \Downarrow & & \downarrow \Downarrow & & \downarrow \Downarrow \\
K^{m_{1,3}} & \xlongequal{\quad} & K^{m_{1,3}} & \xlongequal{\quad} & K^{m_{1,3}}
\end{array}$$

これを F_* と定義する

図3 対応の誘導写像の別定義. 1行目から2行目は直既約分解.

上記の議論はこの形の図式に限らず, A_3 型箭の表現は向き付けに依らずに区間表現の直和に直既約分解することが可能であり, 例えばジグザグ加群 $M_1 \rightarrow M_2 \leftarrow M_3$ において M_1 と M_3 の対応が重要な時, 同様の定義で写像 $M_1 \rightarrow M_3$ を定義し, 本質的な部分だけを取り出すことが出来る.

4 離散力学系のパーシステンス

直既約分解をして $\mathbb{I}[1, 3]$ だけ見るという手法は, 離散力学系の固有空間関手を用いた解析 [4] に別の視点を与えることが出来る. 論文 [4] では, 問題 1 に条件 $X = Y$ を追加した離散力学系の問題を設定している. すなわち,

問題 6. (X, d_X) を距離空間とする. 連続写像 $f: X \rightarrow X$ が存在し, ある有限集合 $S \subset X$ 上の振る舞い $f|_S: S \rightarrow S$ だけ与えられている. この時, ホモロジー誘導写像 $f_*: HX \rightarrow HX$ の情報を得ることが出来るだろうか.

4.1 先行研究

先行研究では次のような解析手法を提案している.

まず S の位相的形状を捉えるような, S の点を頂点に持つ単体複体のフィルトレーション $\{C_1 \subset C_2 \subset \dots \subset C_n\}$ (e.g. Čech フィルトレーション, アルファフィルトレーション等) を生成する. $f|_S$ を用いて各フィルター C_i の自己単体写像を誘導したいが, 一般には部分写像^{*1} (partial map) $\kappa_i: C_i \rightarrow C_i$ を誘導する. この部分写像の列は, κ_i の定義域を $\text{dom } \kappa_i$ と表記すれば, 単体写像の組 (ι_i, κ'_i) の列 $\{C_i \xleftarrow{\iota_i} \text{dom } \kappa_i \xrightarrow{\kappa'_i} C_i\}$ と見做せる.

^{*1} 集合 X から Y への対応 F が部分写像であるとは, $x \in X$ に対し $F(x) := \{y \in Y \mid (x, y) \in F\}$ と書いた時, 任意の x について $F(x)$ が 1 点もしくは空集合であることをいう. つまり定義域が全体とは限らない写像.

注. この写像の組の列は, フィルトレーションの包含写像が誘導する写像によってフィルトレーションを成している.

$$\begin{array}{ccccc}
 & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 \kappa_{i+1}: & C_{i+1} & \xleftarrow{\iota_{i+1}} & \text{dom } \kappa_{i+1} & \xrightarrow{\kappa'_{i+1}} & C_{i+1} \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 \kappa_i: & C_i & \xleftarrow{\iota_i} & \text{dom } \kappa_i & \xrightarrow{\kappa'_i} & C_i \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 & \vdots & & \vdots & & \vdots
 \end{array}$$

この列にホモロジー関手を当てれば, $A_3(bf)$ 型叢の表現の列 $\{HC_i \xleftarrow{\iota_i^*} H \text{dom } \kappa_i \xrightarrow{\kappa_i'^*} HC_i\}$ を得る:

$$\begin{array}{ccccc}
 & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 \kappa_{i+1*}: & HC_{i+1} & \xleftarrow{\iota_{i+1}^*} & H \text{ dom } \kappa_{i+1} & \xrightarrow{\kappa_{i+1}'^*} & HC_{i+1} \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 \kappa_{i*}: & HC_i & \xleftarrow{\iota_i^*} & H \text{ dom } \kappa_i & \xrightarrow{\kappa_i'^*} & HC_i \\
 & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\
 & \vdots & & \vdots & & \vdots
 \end{array} \quad (\clubsuit).$$

各フィルターでは表現圏 $\text{rep}(A_3(bf))$ の対象であるが, “両端に同じベクトル空間を持つ” という制限を加えた充満部分圏 $\text{Pairs}(\text{Vect})$ の対象でもある, ということに注意すれば, 次の関手を適用することが出来る.

定義 7. 関手 $E_\lambda: \text{Pairs}(\text{Vect}) \rightarrow \text{Vect}$ を次で定義する. これを固有値 λ の固有空間関手と呼ぶ.

- 対象: $(V_1 \xleftarrow{f} V_2 \xrightarrow{g} V_1) \in \text{obj}(\text{Pairs}(\text{Vect}))$
 $\mapsto E_\lambda(f, g) := \text{Ker}(g - \lambda f) / (\text{Ker } f \cap \text{Ker } g) \in \text{obj}(\text{Vect})$
- 射: 中央の線形写像から自然に誘導される.

f が恒等写像のとき, 対象は g の通常の意味での固有値 λ の固有空間に対応づけられる.

この関手を (\clubsuit) に適用すれば,

$$E_\lambda(\iota_{1*}, \kappa_{1*}') \rightarrow E_\lambda(\iota_{2*}, \kappa_{2*}') \rightarrow \cdots \rightarrow E_\lambda(\iota_{n*}, \kappa_{n*}')$$

であり, これは A_n 型叢の表現である. 従ってこの表現を直既約分解すれば, 各固有値に対してその固有ベクトルのパーシステンスをパーシステント図として描画することが出来る. 以上が論文 [4] のあらましである.

4.2 本研究

本研究の手法を用いると、違ったアプローチで f_* を調べることが出来る。上の (♣) までは同様である。ここで各フィルターごとに直既約分解すると、この表現の列は

$$\Lambda: \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^1} \rightarrow \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^2} \rightarrow \dots \rightarrow \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^n}$$

と同型であり、再び $\mathbb{I}[1, 3]$ に制限することで、部分表現の列

$$\Lambda[1, 3]: \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^1} \rightarrow \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^2} \rightarrow \dots \rightarrow \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^n}$$

を得る。 $\mathbb{I}[1, 3] = (K \xrightarrow{\text{id}_K} K \xrightarrow{\text{id}_K} K)$ は K と見做しても情報は落ちないので、この列はベクトル空間の列

$$K^{m_{1,3}^1} \rightarrow K^{m_{1,3}^2} \rightarrow \dots \rightarrow K^{m_{1,3}^n}$$

と見做すことが出来、これはパーシステント加群である。従って直既約分解することでパーシステント図を描画することが出来、両フィルトレーションで f によって繋がるホモロジーの生成元がどの程度持続しているかを調べることが出来る。

この手法では先行研究のように固有ベクトルを見ることは出来ないが、適用出来る範囲は広い。まず、固有空間関手を用いないので、両端に同じベクトル空間を持ってくる必要がない。従って、仮定で $f|_S: S \rightarrow S$ としたところを $f|_S: S \rightarrow f(S)$ に弱め、 $f(S)$ で別のフィルトレーションを取ることが出来る ($f(S)$ が X 全体をサンプリング出来ていない時は代わりに $S \cup f(S)$ を取れば良い)。また先行研究の手法では固有値を決めてから解析する必要があるため、事前に写像 f のふるまいに予測をつけておかなければならないが、本研究の手法ではその必要は無い。

4.3 補足

4.3.1 $\Lambda[1, 3]$ の構成について

$\Lambda[1, 3]$ の構成には注意すべき点がある。直和から定まる標準的な射影、入射をそれぞれ

$$\begin{aligned} \pi_i: \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^i} &\rightarrow \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^i} \\ \nu_i: \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^i} &\rightarrow \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^i} \end{aligned}$$

と表記し、 Λ における射を

$$\Phi_i: \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^i} \rightarrow \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^{i+1}}$$

と表記する。この時、 $\Lambda[1, 3]$ における射

$$\Phi_i^{1:3}: \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^i} \rightarrow \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^{i+1}}$$

を

$$\Phi_i^{1:3} := \pi_{i+1} \circ \Phi_i \circ \nu_i$$

で定義する．この構成は自然に見えるが，実は“ $\pi: \Lambda \rightarrow \Lambda[1, 3]$ ”は表現圏の射ではない．即ち，

$$\begin{array}{ccc} \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^i} & \xrightarrow{\Phi_i} & \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^{i+1}} \\ \downarrow \pi_i & & \downarrow \pi_{i+1} \\ \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^i} & \xrightarrow{\Phi_i^{1:3}} & \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^{i+1}} \end{array}$$

は可換とは限らない．従って，各フィルターにおける直既約分解の同型の取り方によっては，別のパーシステント図が出力されてしまう可能性がある．この出力されるパーシステント図が意味を成すためには，どんな同型の取り方をしても同じパーシステント図が出力される必要があり，次の定理がそれを保証する．

定理 8. 2つの射

$$\Phi_i, \Psi_i: \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^i} \rightarrow \bigoplus_{1 \leq b \leq d \leq 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}^{i+1}}$$

が表現圏の射の圏で同型ならば，誘導される2つの射

$$\Phi_i^{1:3}, \Psi_i^{1:3}: \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^i} \rightarrow \mathbb{I}[1, 3]^{m_{1,3}^{i+1}}$$

も同型である．

これは論文 [5] の議論を用いれば示すことができる．

4.3.2 安定性定理

パーシステント図が実データ解析において実用的であるためには，入力データにノイズが加わった時，出力されるパーシステント図もノイズ程度しか変動しないことが要求される [6, 7]．パーシステント図間には距離 (bottleneck 距離) が定まっており，この距離はパーシステント加群間の距離 (interleaving 距離) d_I と等しいことが知られている [8, 9]．先行研究の解析手法と同様に，本研究の解析手法においても次の安定性定理が成り立つ．

定理 9. $X \times X$ の距離を $d_{X \times X}((x_1, x_2), (x'_1, x'_2)) := \max\{d_X(x_1, x'_1), d_X(x_2, x'_2)\}$ で与え， d_H を $d_{X \times X}$ から定まる Hausdorff 距離とする．また，使用する単体複体のフィルトレーションは Čech フィルトレーションもしくは Vietoris-Rips フィルトレーションとする． X の2つの有限部分集合 S, S' と，その上の写像 $h: S \rightarrow X, h': S' \rightarrow X$ に対し，本研究の手法で誘導されるパーシステント加群をそれぞれ $M_h, M_{h'}$ とおけば，

$$d_I(M_h, M_{h'}) \leq d_H(\text{Gr}(h), \text{Gr}(h'))$$

が成り立つ．

従って、 S がノイズを含んでいても、その f による評価がノイズを含んでいても、得られるパーシステント加群及びパーシステント図には高々そのノイズ程度の影響しか与えない。

■謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16J03138 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] S. Harker, H. Kokubu, K. Mischaikow and P. Pilarczyk, *Inducing a Map on Homology from a Correspondence*, Proc. Amer. Math. Soc. **144** (2016), 1787–1801.
- [2] 草場公邦. 行列特論. 裳華房. (1979).
- [3] E. G. Escobar and Y. Hiraoka, *Persistence Modules on Commutative Ladders of Finite Type*, Discrete Comput. Geom. **55** (2016), 100–157.
- [4] H. Edelsbrunner, G. Jabłoński and M. Mrozek, *The Persistent Homology of a Self-Map*, Found. Comput. Math. **15** (2015), 1213–1244.
- [5] H. Asashiba, E. G. Escobar, Y. Hiraoka, and H. Takeuchi, *Matrix Method for Persistence Modules on Commutative Ladders of Finite Type*, arXiv:1706.10027.
- [6] D. Cohen-Steiner, H. Edelsbrunner, and J. Harer, *Stability of Persistence Diagrams*, Discrete Comput. Geom. **37** (2007), 103–120.
- [7] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, M. Glisse, L. J. Guibas, and S. Y. Oudot, *Proximity of Persistence Modules and their Diagrams*, In Proceedings of the Twenty-fifth Annual Symposium on Computational Geometry (SoCG '09), ACM, New York, NY, USA, 237–246.
- [8] M. Lesnick, *The Theory of the Interleaving Distance on Multidimensional Persistence Modules*, Found. Comput. Math., **15** (2015), 613–650.
- [9] U. Bauer and M. Lesnick, *Induced Matchings of Barcodes and the Algebraic Stability of Persistence*, In Proceedings of the Thirtieth Annual Symposium on Computational Geometry (SoCG '14), ACM, New York, NY, USA, 355–364.