パーシステントコホモロジーの構造定理

東京都立大学大学院 理学研究科 数理科学専攻 深沢尚希 (Naoki FUKASAWA)

1 はじめに

単体複体のフィルトレーションにホモロジー関手を適応することでパーシステントホモロジーが得られる。パーシステントホモロジーの本質は、各ホモロジー類がどこで生まれ、どの程度持続 (persist) するかにある。それを表すのが区間分解定理で、主な証明方法に [1] のクイバーによる表現と、[2] の次数付き $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}[x]$ 加群の構造定理を用いたものがある。両者の違いは、後者は区間を表すホモロジー類の代表元も求まる所にある。この代表元を代表サイクルとよぶ。区間を集めて座標平面に視覚化したものはパーシステンス図とよばれ、これを用いて安定性定理という本分野の重要な結果が示される。

パーシステントコホモロジーはクイバーの表現を用いてパーシステントホモロジーと同じ区間を持つ事が分かる.しかし、コホモロジー群にはカップ積により環構造が入り、[3] はこれを用いてパーシステンス図より多くの情報を持つカップ長関数を導入した.カップ積を計算するには、各区間を代表するコホモロジー類の代表元(代表コサイクル)を求める必要がある.代表コサイクルを求めるアルゴリズムは[4]で提唱されているが、講演者はカップ長関数を計算するための理論整備のために構造定理のコホモロジー版の形でまとめた.本講演ではその概説と、代表コサイクルを用いて計算できるカップ長関数について紹介する.

2 パーシステントホモロジー

最初にパーシステントホモロジーの定義から安定性定理まで述べる.

定義 2.1. 有限単体複体の部分複体からなるフィルトレーション \mathbb{K} : $K_0 \subset K_1 \subset \cdots K_n$ にホモロジー関手を適応させた $H_*(\mathbb{K})$: $H_*(K_0) \to H_*(K_1) \to \cdots \to H_*(K_n)$ を \mathbb{K} のパーシステントホモロジーとよぶ.

チェイン複体の係数は一般の体でも以降の議論はできるが、計算の簡易化のために $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ として考える. フィルトレーションの添え字のことを時刻とよぶ. 先述のように、 $H_*(\mathbb{K})$ の本質は各ホモロジー類がどの時刻で発生し、どの程度持続するかである.

定理 2.2. [1] $H_*(\mathbb{K})$ は区間の集まり $\{[p,q]\}$ を用いて

$$H_*(\mathbb{K}) \simeq \bigoplus_{[p,q]} I[p,q]$$

と表される. ここで I[p,q] は

$$I[p,q] = 0 \to 0 \to \cdots \to \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \to \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \to \cdots \to \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \to 0 \to \cdots \to 0$$

である.

これは各時刻 t における $H_*(K_t)$ の階数に着目して示されているため、区間を表す具体的なホモロジー類については言及していない。ホモロジー類の代表元(代表サイクル)も求めることができるのは次の構造定理である。

定理 2.3. [2] t>n なら $K_t=K_n$ とする. $H_*(\mathbb{K})$ の各時刻で直和を取った $\bigoplus_{t=0}^n H_*(K_t)$ には次数 付き $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}[x]$ 加群の構造が入り,ある斉次元 $\{[e_i]\}_{i\in E\sqcup F},\ E,F\subset\{1,...,N\}$ と $l_i\in\mathbb{N}$ を用いて

$$\bigoplus_{t=0}^{\infty} H_*(K_t) \simeq \bigoplus_{i \in E \sqcup F} \langle [e_i] \rangle,$$

$$\operatorname{Ann}([e_i]) = \begin{cases} 0 & (i \in E) \\ (x^{l_i}) & (i \in F) \end{cases}$$

と表される.

定理 2.2 に現れる区間 [p,q] との対応は次にとおりである。各 $[e_i]$ には次数 $\deg([e_i])$ が定まっており、これが区間の開始時点 p に対応している。また、零化イデアル Ann が 0 なら、 $[e_i]$ はフィルトレーションの最後まで生き残るサイクルを表しており q=n となる。 $\operatorname{Ann}([e_i])=(x^{l_i})$ なら、 $q=\deg([e_i])+l_i-1$ となり、時刻 $\deg([e_i])+l_i$ で消滅するサイクルを表す。

3 REDUCE アルゴリズム

各 $[e_i]$ は時刻 n での境界準同型の表現行列を掃き出すことで求めることができる.この掃き出しのアルゴリズムはしばしば REDUCE アルゴリズムとよばれる.

 K_n には時刻と面関係に関して単調非減少になるように全順序 $K_n = \{\sigma_1 < \sigma_2 < \dots < \sigma_N\}$ が定まっているとする. 時刻 n での境界準同型 ∂ の,この順に並べた基底に関する表現行列を B とする. すなわち $[\partial \sigma_1 \ \partial \sigma_2 \ \dots \ \partial \sigma_N] = [\sigma_1 \ \sigma_2 \ \dots \ \sigma_N] B$ で B を定める. B は上三角行列である. B を次のREDUCE アルゴリズムで掃き出しをする.

ここで行列 A に対し、 A_j で A の j 列目を表し、L(A,j) は $A_j \neq 0$ なら、 $A_{ij} \neq 0$ なる最大の i とし、 $A_j = 0$ なら 0 とする。 4 行目は j 列目に i 列目をを加える操作を表している。REDUCE アルゴリズムによる B の出力を \hat{B} とすると、基本行列の積 V を用いて $\hat{B} = BV$ と表される。実はこの \hat{B} と V の列を見ることで、代表サイクルとその区間の情報を得る事ができる(例えば [4] を参照).

Algorithm 1 REDUCE アルゴリズム

- 1: $B \leftarrow \partial$ の基底 $\{e_1,...,e_N\}$ に関する表現行列
- 2: **for** j = 1, ..., N **do**
- 3: **while** $\exists i < j \text{ s.t. } L(B, i) = L(B, j) \neq 0 \text{ do}$
- 4: $B_i \leftarrow B_i + B_i$
- 5: end while
- 6: end for
- 7: return B

4 パーシステントコホモロジーの構造定理

フィルトレーション \mathbb{K} : $K_0 \subset K_1 \subset \cdots \subset K_n$ にコホモロジー関手を適応して得られる $H^*(\mathbb{K})$: $H^*(K_0) \leftarrow H^*(K_1) \leftarrow \cdots \leftarrow H^*(K_n)$ を \mathbb{K} のパーシステントコホモロジーとよぶ. パーシステントコホモロジー版の構造定理も次のように表現できる.

定理 4.1. (主結果) t < 0 なら $H^*(K_t) = 0$ とする. $\bigoplus_{t=-\infty}^n H^*(K_t)$ には次数付き $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}[x]$ 加群 として、ある斉次元 $\{[e^j]\}_{i \in E' \sqcup F'}, \ E', F' \subset \{1,...,N\}$ と $l_i \in \mathbb{N}$ を用いて

$$\bigoplus_{t=-\infty}^{n} H^*(K_t) \simeq \bigoplus_{i \in E' \sqcup F'} \langle [e^i] \rangle$$
$$\operatorname{Ann}([e^i]) = (x^{l_i}) \ (i \in E' \sqcup F')$$

と表される.

ホモロジーの場合と包含写像から誘導される射の向きが違うため、時刻の順で見たときに最後まで残るコサイクルと途中で消えるコサイクルの差は $\deg([e^j])$ で表現される。証明はホモロジーのときと同様に、時刻 n における余境界準同型 δ の表現行列 D に REDUCE アルゴリズムを適応して求めることができる。ただし、ここでは双対基底を逆に並べて、 $[\delta\sigma_N^* \ \delta\sigma_{N-1}^* \cdots \delta\sigma_1^*] = [\sigma_N^* \ \sigma_{N-1}^* \cdots \sigma_1^*]D$ で定める。D に REDUCE アルゴリズムを適応して得られる出力を $\hat{D} = DU$ とすると、今度は U の列をみることで代表コサイクルとその区間の情報を得ることができる。これは既に [4] で提唱されており、Python ライブラリの Ripser ([5]) で実装されている。しかし、証明では相対パーシステントコホモロジーを経由したり、時刻 0 から順に代表コサイクルを変形したりすることで示しており、次のカップ長関数を考えるには適応させにくい。そこで講演者は、時刻 n で $C^*(K_n)$ 基底を変換し、それを包含写像から誘導される準同型を用いて n 未満の時刻へ写す方法でまとめることで、Ripser の出力を活用する方法を示した。

5 カップ長関数

[3] が提唱したカップ長関数についてまとめる. カップ積に関する理論は [6] を参考にしている.

定義 5.1. (カップ積) $c^p \in C^p(K), c^q \in C^q(K)$ のカップ積 $c^p \cup c^q \in C^{p+q}(K)$ を, $[v_0,v_1,....,v_{p+q}] \in K$ に対し,

$$c^p \cup c^q([v_0, v_1, ..., v_{p+q}]) = c^p([v_0, ..., v_p]) \cdot c^q([v_p, ..., v_{p+q}])$$

で定める.

このカップ積はアルゴリズム的に計算できる. カップ積は $H^*(K)$ 上に誘導され, 環構造 $(H^*(K),+,\cup)$ が定まる. ある環の長さとは, 非零になる積の長さの最大値のことをいう.

定義 5.2. (環の長さ) 環 $R = (R, +, \times)$ に対し, $\operatorname{len}(R)$ を $\operatorname{len}(R) = \max\{l \in \mathbb{N} \mid a_1 \times a_2 \times \cdots \times a_l\}$ で定める.

定義 5.3. (カップ長関数) \mathbb{K} のカップ長関数 $\mathrm{cup}(K)$ を, $0 \le s \le t \le n$ に対し

$$\operatorname{cup}(K)([s,t]) = \operatorname{len}(\operatorname{Im}(H^*(K_t) \to H^*(K_s)))$$

で定める.

6 安定性

パーシステントホモロジーの文脈で、データのノイズ耐性を示すものとして、安定性定理がある. 安定性定理はいくつか種類があり、構成する単体複体のフィルトレーションによっても異なる. 今回はリップス複体から得られるフィルトレーションについて考える.

定義 6.1. X を有限距離空間とする. $r \in \mathbb{R}_{>0}$ に対し, $\mathrm{Rips}_r(X)$ を

$$\{v_0, ..., v_k\}$$
 が k 単体 $\Leftrightarrow d(v_i, v_j) \leq r (\forall i, j)$

で定める.

 $r \leq r'$ なら $\mathrm{Rips}_r(X)$ は $\mathrm{Rips}_{r'}(X)$ の部分複体になる. r を 0 から大きくして得られるフィルトレーションをリップスフィルトレーションとよび, $\mathrm{Rips}(X)$ とかく. リップス複体は組み合わせ的に計算できるためよく使われる.

もとの距離空間の近さを表す指標として次のグロモフハウスドルフ距離がある.

定義 6.2. 距離空間 Z のコンパクト部分空間 X,Y ハウスドルフ距離 $d_H(X,Y)$ を

$$d_H(X,Y) = \max\{\sup_{y \in Y}\{d(y,X), \sup_{x \in X}d(x,Y)\}$$

で定める. また, コンパクト距離空間 X,Y のグロモフハウスドルフ距離 $d_{GH}(X,Y)$ を

 $d_{GH}(X,Y) = \inf\{d_H(i_X(X),i_Y(Y))|$ ある距離空間 Z と等長埋め込み $i_X: X \to Z, i_Y: Y \to Z$ が存在 $\}$

2 つのカップ長関数の間にはイローション距離 d_E が定まる. この d_E に関して, リップスフィルトレーションから定まるカップ長関数には次の安定性が成り立つ.

定理 6.3. [3] 有限距離空間 X, Y に対し,

$$d_E(\operatorname{cup}(\operatorname{Rips}(X)), \operatorname{cup}(\operatorname{Rips}(Y))) \le 2 \cdot d_{GH}(X, Y)$$

が成り立つ.

グロモフハウスドルフ距離は一般に下からの評価が難しい.一方 d_E は X,Y の距離行列さえ与えられればアルゴリズム的に計算可能である.

参考文献

- [1] Oudot, Steve Y. Persistence theory: from quiver representations to data analysis. Vol. 209. American Mathematical Soc., 2017.
- [2] Zomorodian, Afra, and Gunnar Carlsson. "Computing persistent homology." Proceedings of the twentieth annual symposium on Computational geometry. 2004.
- [3] Contessoto, Marco, et al. "Persistent cup-length." arXiv preprint arXiv:2107.01553 (2021).
- [4] De Silva, Vin, Dmitriy Morozov, and Mikael Vejdemo-Johansson. "Dualities in persistent (co) homology." Inverse Problems 27.12 (2011): 124003.
- [5] Bauer, Ulrich. "Ripser: efficient computation of Vietoris-Rips persistence barcodes." Journal of Applied and Computational Topology 5.3 (2021): 391-423.
- [6] Munkres, James R. Elements of algebraic topology. CRC press, 2018.