

結び目のパーシステントホモロジー

東京工業大学大学院 情報理工学院 数理・計算科学系 数理・計算科学コース
鈴木 拓己 (Takumi SUZUKI) *

概要

本研究では、結び目の離散近似である折れ線結び目の頂点データからパーシステンス図を計算し、その性質について、結び目の幾何学的な複雑さを測る量である結び目のエネルギーの観点から考察した。特に、エネルギーを最小化する結び目である正円に対して、正円上の点群データの1次パーシステンス図を決定した。また、より複雑ないくつかの結び目について、折れ線結び目のエネルギーおよびその1次パーシステンス図の数値計算結果に対して考察を与えた。

1 導入

結び目とは、円周 S^1 から3次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^3 への埋め込みおよびその像のことである。本研究の動機は、位相的データ解析の主要なツールの一つであるパーシステントホモロジー (Persistent Homology: PH) [6, 15] によって結び目の特徴的な幾何構造を抽出することである。具体的には、PHの典型的な応用先である点群データ (Point Cloud Data: PCD) の幾何構造の解析から着想を得て、結び目の離散近似である折れ線結び目の頂点データから PH を計算し、その記述子であるパーシステンス図 (Persistence Diagram: PD) の性質について、結び目の幾何学的な複雑さを測る量である結び目のエネルギー [7, 8, 14] の観点から考察した。結び目のエネルギーは、結び目を一様に荷電させたときの静電エネルギーのようなもので、対称性を反映するように各結び目型の標準形を定めるために導入された。例えば、図1の2つの trefoil では、左の trefoilの方が右の trefoil よりも、その形状が“標準的”であるように思える。

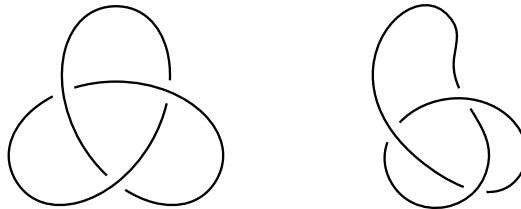


図1: 形状の異なる2つの trefoil

結び目の標準形は、結び目全体からなる空間 \mathcal{K} 上のエネルギー汎関数 $E: \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{R}$ の最小元 (また

* E-mail: suzuki.t.dk@m.titech.ac.jp

は極小元) によって定める. 本研究では, O'Hara [14] によって定義され, Freedman-He-Wang [7] によって解析的性質が調べられたエネルギー汎関数である Möbius エネルギーについて, Möbius エネルギーを最小化する結び目である正円 S^1 上に分布した PCD の 1 次 PD を決定した (定理 1). また, 他の結び目の解析の例として, 福原 [8] によって定義された折れ線結び目のエネルギーを用いた数値計算によって, いくつかの結び目のエネルギー極小元を求め, その頂点データから 1 次 PD を計算し, エネルギー極小元の幾何構造に対する考察を与えた.

本稿の構成は以下の通りである. 2 節では PH と結び目のエネルギーの定義と性質を簡潔に述べる. 3 節では主結果と考察を述べる. 3 節は 2 つのパートから構成される. 1 つ目は数学解析のパートであり, 正円 S^1 上の PCD から構成される有限型 Čech フィルトレーションの 1 次 PD を決定する. 2 つ目は数値計算のパートであり, trefoil のエネルギー最小化とその頂点データから計算される 1 次 PD について, 結果と考察を述べる. 4 節では本稿のまとめと今後の展望を述べる.

2 準備

本研究の主要なツールである PH と結び目のエネルギーの定義と性質を簡潔に述べる.

2.1 パーシステントホモロジー

本稿では, 次数付き $\mathbb{Z}_2[x]$ -加群としての PH の定式化を経由した PD の定義を紹介する. これは, 早期に [15] において確立された PH の代数構造である. 詳細は例えば文献 [15–17] 等を参照されたい. PH は単体複体および位相空間のフィルトレーションに対して定義されるが, 本稿では PCD の幾何構造の解析を扱うため, 相異なる N 個の点の集合 $P_N = \{p_i \in \mathbb{R}^n \mid i = 1, \dots, N, N \geq 1\}$ から構成される単体複体として代表的な Čech 複体 $\check{C}(P_N; r)$ の半径パラメータ $r \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ でパラメトライズされたフィルトレーション $\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N) := (\check{C}(P_N; r))_{r \in \mathbb{R}_{\geq 0}}$ に定義を限定する. 3.2 節の数値計算では Alpha 複体のフィルトレーションを用いるが, 以下の定義はすべて Alpha 複体についても全く同様である. Čech 複体および Alpha 複体の詳細については, 例えば文献 [16, 17] 等を参照されたい.

非負整数 $k \in \mathbb{N}_0$ に対して, k 次 \mathbb{Z}_2 -係数ホモロジー群^{*1}と Čech 複体との間の包含写像が誘導するホモロジー群の間の \mathbb{Z}_2 -線型写像の族の組 $((H_k(\check{C}(P_N; r)))_{r \in \mathbb{R}_{\geq 0}}, (\iota_{s, r_*})_{r \leq s})$ を $\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N)$ の k 次パーシステントホモロジー (PH) といい, $H_k(\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N))$ と書く. すなわち, $H_k(\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N))$ は任意の $r \leq s \leq t$ について次の図式が可換となる無限列である:

$$\begin{array}{ccccc} H_k(\check{C}(P_N; r)) & \xrightarrow{\iota_{s, r_*}} & H_k(\check{C}(P_N; s)) & \xrightarrow{\iota_{t, s_*}} & H_k(\check{C}(P_N; t)). \\ & & & \searrow & \\ & & & & \xrightarrow{\iota_{t, r_*}} \end{array}$$

点の集合 P_N は有限集合なので, $\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N)$ において $\check{C}(P_N; r)$ の変化が起こるのは有限回である. すなわち, 任意の $r_t \leq u < v < r_{t+1}$ に対して $\check{C}(P_N; u) = \check{C}(P_N; v)$ となるような非負整数 $t \in \mathbb{N}_0$ か

^{*1} 係数は任意の体でよいが, 本稿では簡便のため係数体は $\mathbb{Z}_2 = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ に固定する.

ら定まる有限個の半径パラメータの増大列 $r_0 < \dots < r_T$ が存在する. これらの半径パラメータの添字からなる有限集合を $\mathbb{T} = \{0, \dots, T\}$ とすると, 集合 \mathbb{T} は Čech 複体の変化を表す離散時刻と解釈することができる. 時刻 $t = T+1, T+2, \dots$, に対しては $\check{C}(P_N; r_t) = \check{C}(P_N; r_T)$ とすることで離散時刻 $t \in \mathbb{N}_0$ でパラメトライズされた Čech 複体のフィルトレーション $\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N) := (\check{C}(P_N; r_t))_{t \in \mathbb{N}_0}$ が定まり, これを**有限型 Čech フィルトレーション**と呼ぶ. また, 集合 \mathbb{T} の最大元 T を $\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)$ の**飽和時刻**と呼ぶ. 有限型 Čech フィルトレーションの k 次 PH $H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ は 1 変数多項式環 $\mathbb{Z}_2[x]$ の通常の数構造のもとで次数付き $\mathbb{Z}_2[x]$ -加群となることが知られており [15, Theorem 3.1], 各時刻 $t \in \mathbb{N}_0$ での Čech 複体の k 次 \mathbb{Z}_2 -係数ホモロジー群の直和と同型になる:

$$H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)) \cong \bigoplus_{t \in \mathbb{N}_0} H_k(\check{C}(P_N; r_t)).$$

このとき, 不定元 x の $H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ への作用は包含写像が誘導する \mathbb{Z}_2 -線型写像

$$\iota_{t,s*} : H_k(\check{C}(P_N; r_s)) \ni [z] \mapsto x^{t-s} \cdot [z] \in H_k(\check{C}(P_N; r_t)), \quad s \leq t$$

で与えられる. 点の集合 P_N は有限集合なので, $H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ は単項イデアル整域 $\mathbb{Z}_2[x]$ 上の有限生成次数付き $\mathbb{Z}_2[x]$ -加群となり, $H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ は次数を保つ一意的な同型対応

$$H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)) \cong \bigoplus_{i=1}^p \left((x^{b_i}) / (x^{d_i}) \right) \oplus \bigoplus_{i=p+1}^{p+q} (x^{b_i})$$

をもつ. 前半の直和成分は $H_k(\check{C}(P_N; r_{b_i}))$ で生成して $H_k(\check{C}(P_N; r_{d_i}))$ で消滅するホモロジー生成元を表し, 後半の直和成分は $H_k(\check{C}(P_N; r_{b_i}))$ で生成して消滅しないホモロジー生成元*2を表している. これにより, $H_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ の情報は有限個のデータ $\{b_i\}_{i=1}^{p+q}, \{d_i\}_{i=1}^p$ を指定することで記述することができる. これらのデータから定まる多重集合

$$D_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)) := \{(b_i, d_i) \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0 \mid i = 1, \dots, p\} \cup \{(b_i, \infty) \in \mathbb{N}_0 \times \bar{\mathbb{N}}_0 \mid i = p+1, \dots, p+q\}$$

を $\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)$ の k 次パーシステンス図 (PD) という. ただし, $\bar{\mathbb{N}}_0 = \mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$ である. $D_k(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ の元は $\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)$ における各 k 次ホモロジー類の生成時刻と消滅時刻の対であり, これを**生成消滅対**という.

2.2 結び目のエネルギー

結び目のエネルギーは, 結び目を一様に荷電させたときの静電エネルギーから着想を得て, 福原 [8] によって最初の例が提案された. 各辺の長さが 1 である頂点数 N の PL 閉曲線の集合 \mathbb{L}^N を N 個の有向辺 $\{e_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3\}_{i=1}^N$ および頂点 $\{v_i = \sum_{j=1}^i e_j \in \mathbb{R}^3\}_{i=1}^N$ を用いて

$$\mathbb{L}^N := \left\{ (e_1, \dots, e_N) \in \mathbb{R}^{3N} \mid \|e_1\| = \dots = \|e_N\| = 1, \sum_{i=1}^N e_i = 0 \right\}$$

*2 有限単体複体では生成した後に消滅しないホモロジー生成元は必ず 0 次なので, 本稿で考察する 1 次 PH にはこのようなホモロジー生成元は現れない.

と定義する．ただし，記号 $\|\cdot\|$ は標準的ユークリッドノルムを表す．PL 閉曲線の集合 \mathbb{L}^N から，相異なる添字の頂点において自己交叉をもつ PL 閉曲線の集合 $D := \{(e_1, \dots, e_N) \in \mathbb{R}^{3N} \mid v_i = v_j \text{ for some } 1 \leq i, j \leq N, i \neq j\}$ を除いた集合を $\tilde{\mathbb{L}}^N := \mathbb{L}^N \setminus D$ と書く． $\mathbb{R}^{3N} \setminus D$ 上の d 次エネルギー関数を

$$E_{N,d}: \mathbb{R}^{3N} \setminus D \ni (e_1, \dots, e_N) \mapsto \frac{1}{d} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{\|v_i - v_j\|^d} \in \mathbb{R}$$

と定め，エネルギー関数 $E_{N,d}$ の $\tilde{\mathbb{L}}^N$ への制限を $e_{N,d}$ と書く．ここで， $d \in \mathbb{N}$ は頂点間の反発力を制御するパラメータである．集合 $\tilde{\mathbb{L}}^N$ は有限次元なので，勾配ベクトル場 $\text{grad } e_{N,d}$ が簡単に計算でき，エネルギー最小化問題を勾配法によって数値的に解くことができる．

O'Hara [14] は発散積分の正則化手法を用いて，弧長パラメトライズされた C^2 -級の結び目 $\gamma: S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ のエネルギー汎関数を定式化した．Freedman-He-Wang [7] は O'Hara が定義したエネルギー汎関数が Möbius 変換によって不変 (Möbius 不変) であることを示し，さらに，エネルギーの Möbius 不変性および Möbius 変換の円円対応より，Möbius エネルギー E と任意の閉曲線 $\gamma: S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ に対して $E(\gamma) \geq 4$ が成り立ち，等号成立条件は γ が正円 S^1 であることを示した．

上記の結果から unknot の標準形は正円 S^1 であることがわかる．しかしながら，一般に結び目全体のなす空間は無限次元であるため，解析的な難しさから，他の結び目型については Möbius エネルギー最小元の具体的な形状は理論的には求められていないのが現状である．

3 主結果と考察

まず，正円 S^1 上の PCD から構成される有限型 Čech フィルトレーションの 1 次 PD に関する数学解析の結果を述べる．次に，trefoil のエネルギー最小化とその頂点データから計算される 1 次 PD の数値計算結果と考察を述べる．

3.1 正円 S^1 上の PCD から構成される有限型 Čech フィルトレーションの 1 次 PD

Möbius エネルギー最小元である正円 S^1 上の PCD から構成される有限型 Čech フィルトレーションの 1 次 PD を決定した．類似の問題設定として，例えば [4, Lemma 4.2] では S^1 上の一様分布から生成された PCD の 1 次パーシステンスバーコード*³について， S^1 上の距離 (すなわち，2 点間の弧長の短い方) でパラメトライズされた Vietoris-Rips フィルトレーションを用いて論じている．本研究では，PCD からフィルトレーションを構成する際に Čech フィルトレーションを用いた場合の 1 次 PD を決定した．

定理 1 (主結果). 中心を O とする正円 S^1 上の相異なる N 個の点の集合 $P_N = \{p_i \in S^1 \mid i = 1, \dots, N, N \geq 3\}$ から構成される有限型 Čech フィルトレーション $\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)$ の 1 次 PD $D_1(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N))$ について次が成り立つ．ただし， $\#$ は集合の元の個数を表す．

$$(1) O \notin \text{Int}(\text{Conv}(P_N)) \implies \#D_1(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)) = 0,$$

*³ PH における各ホモロジー類の生成消滅対 (b, d) から定まる区間 $[b, d)$ の集まりであり，PD と等価な情報をもつ．

(2) $O \in \text{Int}(\text{Conv}(P_N)) \implies \#D_1(\mathcal{F}_t^{\check{C}}(P_N)) = 1$.

定理 1 の証明の概略. PD の定義より, Čech フィルトレーション $\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N)$ の自明でない 1 次ホモロジー類の生成消滅および一意性を示せばよい. ここで, 点の集合 P_N から定まる半径パラメータ $r_{P_N} \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ および 1 次サイクル $z_{P_N} \in Z_1(\check{C}(P_N; r \geq r_{P_N}))$ を次式で定義する:

$$r_{P_N} := \frac{1}{2} \max_{1 \leq i \leq N} \|p_i - p_{i+1}\|, \quad z_{P_N} := \sum_{i=1}^N \{p_i, p_{i+1}\}.$$

ただし, $p_{N+1} := p_1$ とする. すなわち, z_{P_N} は点の集合 P_N の隣接頂点間を結んだ 1 次サイクルであり, r_{P_N} はフィルトレーション $\mathcal{F}_r^{\check{C}}(P_N)$ における 1 次サイクル z_{P_N} の生成半径である. PD はフィルトレーションにおけるホモロジー類の生成消滅の情報を記述していたので, 定理 1 は次の定理 2 の系として従う.

定理 2. 1 次ホモロジー群 $H_1(\check{C}(P_N; r))$ について次が成り立つ. ただし, $[z_{P_N}]$ はサイクル $z_{P_N} \in Z_1(\check{C}(P_N; r \geq r_{P_N}))$ が定める 1 次ホモロジー類を表し, S^1 の半径は 1 とする*4.

$$(1) \quad O \notin \text{Int}(\text{Conv}(P_N)) \implies H_1(\check{C}(P_N; r)) = 0, \quad \forall r \in \mathbb{R}_{\geq 0},$$

$$(2) \quad O \in \text{Int}(\text{Conv}(P_N)) \implies H_1(\check{C}(P_N; r)) = \begin{cases} \{0, [z_{P_N}] \neq 0\}, & r_{P_N} \leq r < 1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$N = 3$ の場合は $\dim \check{C}(P_N; r) \leq 2$ なので, 対応する幾何学的単体複体のフィルトレーションを \mathbb{R}^2 において考えればよい. 一般の $N \geq 3$ の場合は, 次の補題 3 から示される.

補題 3. 任意に固定した半径パラメータ $r \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ と任意の 1 次サイクル $z \in Z_1(\check{C}(P_N; r))$ に対して, $z \sim 0$ または $z \sim z_{P_N}$ が成り立つ. ただし, 記号 \sim は 2 つのサイクルがホモログス, すなわち同じホモロジー類を定めることを表す.

補題 3 は, 任意の 1 次サイクル $z \in Z_1(\check{C}(P_N; r))$ は定理 2 (1) の $N = 3$ の場合を繰り返し適用すると $z \sim \sum_{i=1}^N \alpha_i \{p_i, p_{i+1}\}$, $\exists \alpha_1, \dots, \alpha_N \in \mathbb{Z}_2$ と書け, さらに $\sum_{i=1}^N \alpha_i \{p_i, p_{i+1}\}$ がサイクルであるための必要十分条件が

$$\partial_1 \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \{p_i, p_{i+1}\} \right) = 0 \iff \alpha_1 = \dots = \alpha_N \in \{0, 1\}$$

となることから示される. ただし, ∂_1 は 1 次の境界作用素である.

補題 3 より, 任意の半径パラメータ $r \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ において自明でない 1 次ホモロジー類となりうるのは $[z_{P_N}]$ のみであることがわかる. 一般の $N \geq 3$ の場合の定理 2 を示すには, 半径パラメータ $r \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ の値が (i) $0 \leq r < r_{P_N}$, (ii) $r_{P_N} \leq r < 1$, (iii) $1 \leq r$, のそれぞれの場合において, $[z_{P_N}] = 0$ か否かを確かめればよい. (i) $0 \leq r < r_{P_N}$ の場合は $z_{P_N} \notin Z_1(\check{C}(P_N; r))$ であるため $H_1(\check{C}(P_N; r)) = 0$ である. (iii) $1 \leq r$ の場合はすべての閉球 $B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)$ が S^1 の中心 O で交わる

*4 PD の元の個数は点の集合 P_N に対するスケール変換で不変であるので, 定理 1 の補題という意味で S^1 の半径が 1 であるという仮定は一般性を失わない.

ので, $\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)$ は可縮ゆえ, 脈対定理*5およびホモロジー群のホモトピー不変性による同型

$$H_1(\check{C}(P_N; r)) \cong H_1(|\check{C}(P_N; r)|) \cong H_1\left(\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)\right) \cong H_1(O)$$

より, $\dim H_1(\check{C}(P_N; r)) = \dim H_1(O) = 0$ から $H_1(\check{C}(P_N; r)) = 0$ となる. (ii) $r_{P_N} \leq r < 1$ の場合を考える. (1) $O \notin \text{Int}(\text{Conv}(P_N))$ の場合は補題 2 (1) の $N = 3$ の場合を繰り返し適用して $z_{P_N} \sim 0$ となり, $H_1(\check{C}(P_N; r)) = 0$ となる. (2) $O \in \text{Int}(\text{Conv}(P_N))$ の場合は隣接する 2 点 $p_i, p_{i+1} \in P_N$ を結んだ線分 $e_i = \{(1-t)p_i + tp_{i+1} \mid 0 \leq t \leq 1\}$ の和集合 $\bigcup_{i=1}^N e_i$ は閉球の和集合 $\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)$ の変位レトラクトゆえ, ホモトピー同値 $\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r) \simeq \bigcup_{i=1}^N e_i$ と同相 $\bigcup_{i=1}^N e_i \cong S^1$ から, 脈対定理およびホモロジー群のホモトピー不変性による同型

$$H_1(\check{C}(P_N; r)) \cong H_1(|\check{C}(P_N; r)|) \cong H_1\left(\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)\right) \cong H_1\left(\bigcup_{i=1}^N e_i\right) \cong H_1(S^1)$$

が成り立ち, $\dim H_1(\check{C}(P_N; r)) = \dim H_1(S^1) = 1$ から $[z_{P_N}] \neq 0$ となる. したがって, 定理 2 が成り立つ. 定理 2 より, 定理 1 が直ちに従う. \square

3.2 trefoil のエネルギー最小化とその頂点データから計算される 1 次 PD

ここでは, 自明でない結び目型のうち最も単純な結び目である trefoil に対するエネルギー最小化および 1 次 PD の数値計算結果と考察を紹介する. 以下, trefoil の頂点データから計算した PD を単に trefoil の PD という.

2.2 節で述べた折れ線結び目のエネルギーの極小元を最急降下法によって求めるプログラムを C 言語によって実装した. 最急降下法で使用したハイパーパラメータは表 1 の通りである.

変数名	内容
degree	エネルギーの次数
initial_step_size	勾配降下のステップサイズの初期値
decay	ステップサイズの減衰率
decay_on	ステップサイズを減衰するかのフラグ

表 1: エネルギー最小化におけるハイパーパラメータ

PD 計算にはオープンソースのデータ解析ソフトウェア HomCloud [1] の Python API を使用し, 折れ線結び目の頂点データからフィルトレーションを構成する際は頂点集合の Alpha フィルトレーションを用いた. HomCloud の詳細については例えば文献 [13] 等を参照されたい.

エネルギー減少列における初期値と収束値の trefoil とその 1 次 PD を図 2 に示す. ハイパーパラメータの値は各図に記載した通りであり, 3 次元プロットにおける各軸のアスペクト比は等しく設定

*5 Čech 複体は脈体と呼ばれる単体複体のクラスに属しており, その幾何学的実現 $|\check{C}(P_N; r)|$ と閉球の和集合 $\bigcup_{i=1}^N B_{\mathbb{R}^2}(p_i; r)$ がホモトピー同値となることが知られている.

している。初期値の trefoil は各辺の長さを 1 とし、頂点数を 34 とした。また、最急降下法の各イテレーションにおけるエネルギーの値と勾配ベクトルの大きさは図 3 のグラフの通りであり、エネルギーの値が極小値に収束していることが見てとれる。

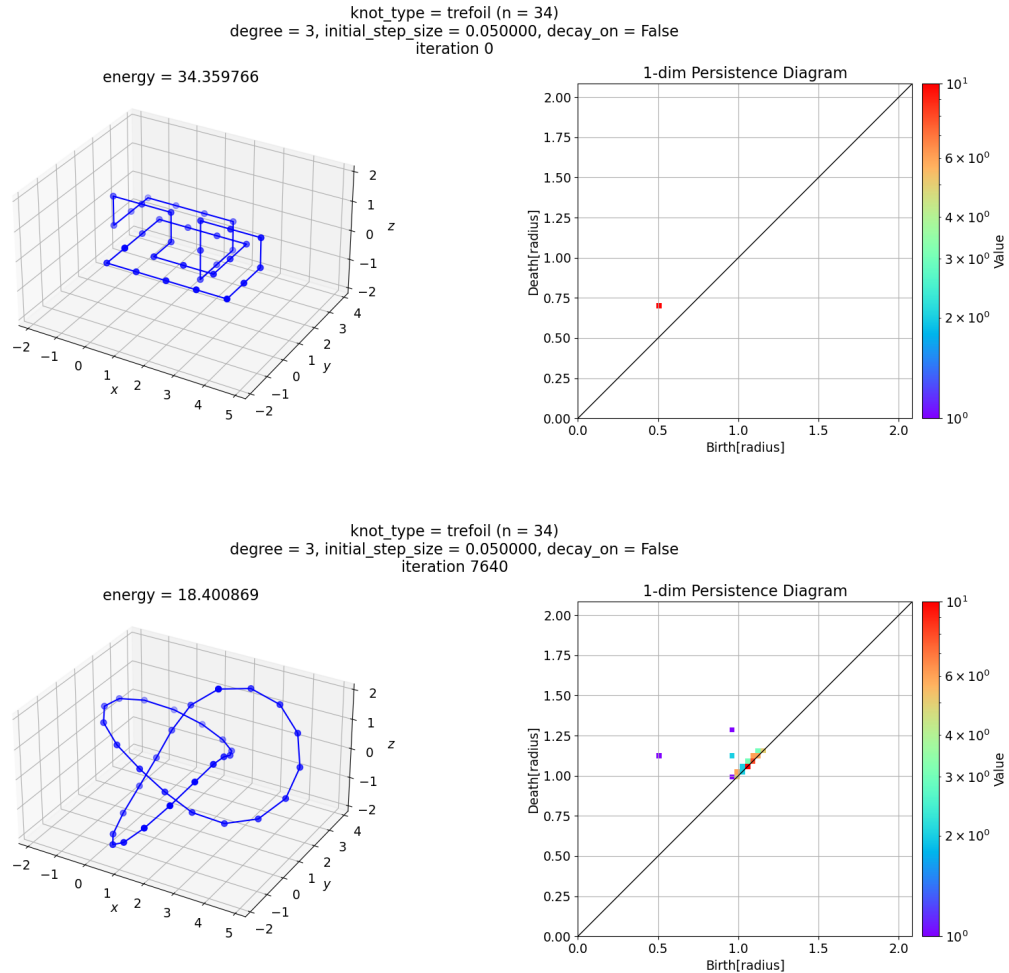


図 2: エネルギー最小化における初期値 (上段) と収束値 (下段) の trefoil (左図) とその 1 次 PD (右図)。PD の各軸の値は Alpha フィルトレーションの半径パラメータを表す。

図 2 のエネルギー極小元の PD について考察を与える。図 2 下段の PD において、特徴的な幾何構造を表している点は 4 点あることが見てとれる。このうち (0.5, 1.1) 付近の点は生成半径が 0.5 であることと trefoil の各辺の長さが 1 であることから、 \mathbb{R}^3 における閉曲線としての trefoil そのものとして得られるサイクルが定めるホモロジー生成元であると予想でき、実際に HomCloud に実装されている `optimal_1_cycle` メソッドによって逆解析を行うと図 4a のサイクルが得られる。ここで、逆解析とは PD の点に対応するホモロジー生成元を構成しているデータ点を元の点の集合の中から特定することであり、詳細は例えば文献 [11, 12] 等を参照されたい。他の 3 点については図 4b–4d の `stable volume shortest cycle` が得られる。trefoil のエネルギー極小元の PD のこれら 4 点の消滅半径を見ると、図 4a–4c のサイクルの消滅半径は 1.13 程度でほとんど等しいことから、図 5 の

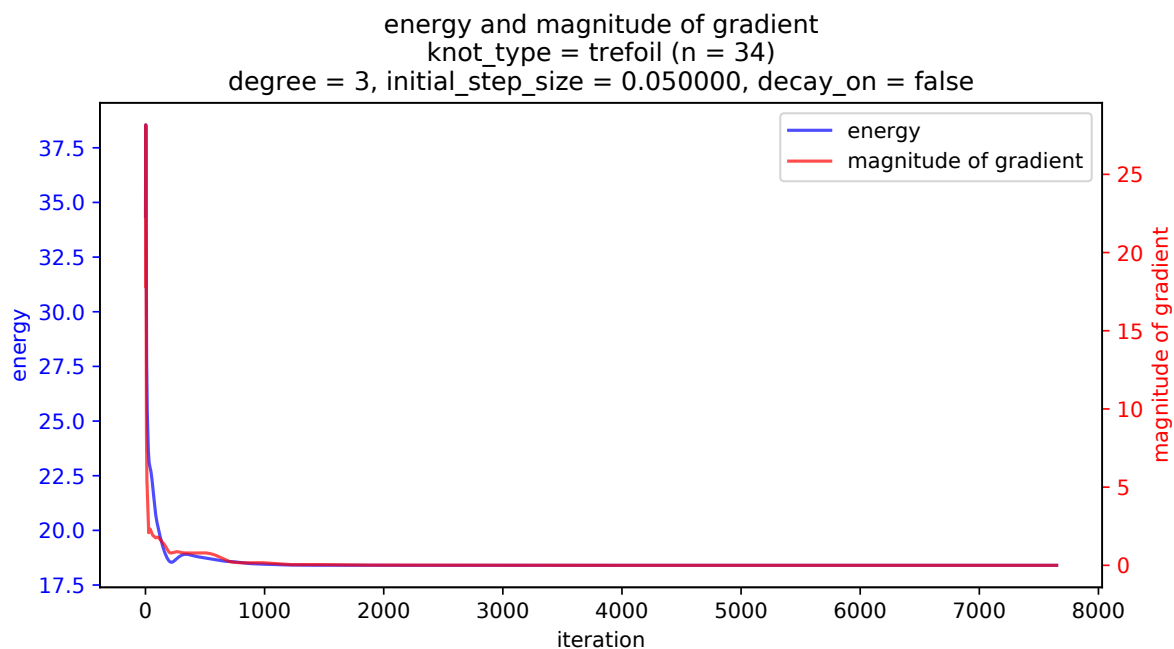


図 3: 最急降下法の各イテレーションにおけるエネルギーの値と勾配ベクトルの大きさ

trefoil のエネルギー極小元の射影図の交点で分かれる 4 つのサイクル (赤と緑の点線) のうち赤の点線で示した 3 つのサイクルに対応しており, 図 4d のサイクルは図 5 の trefoil のエネルギー極小元の射影図の交点で分かれる 4 つのサイクル (赤と緑の点線) のうち緑の点線で示したサイクルに対応していると考えられる. この結果から, 図 2 下段の trefoil のエネルギー極小元の PD で特徴的な点は, trefoil のエネルギー極小元の形状の対称性をエンコードしていると考えられ, trefoil のトポロジーの情報に加えて, 通常ホモロジーでは抽出できない結び目の \mathbb{R}^3 における幾何構造を記述していることがわかる.

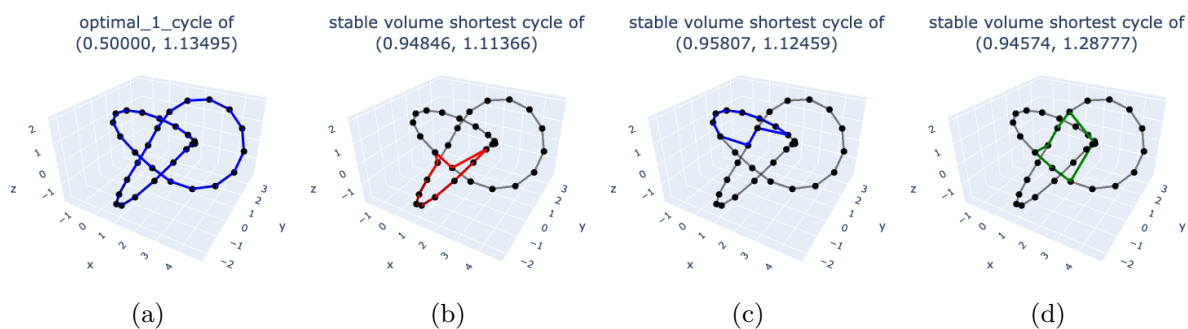


図 4: trefoil のエネルギー極小元の 1 次 PD において特徴的なリング構造を表す点に対応する optimal_1_cycle および stable volume shortest cycles

当日の講演では時間が許せば, 本稿で扱わなかった数値計算結果についても述べる予定である.

optimal_1_cycle of
(0.50000, 1.13495)

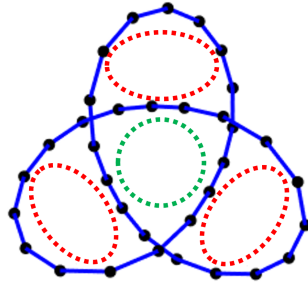


図 5: trefoil のエネルギー極小元の射影図の交点で分かれる 4 つのサイクル

4 まとめと今後の展望

本稿では、正円 S^1 上の PCD から構成される有限型 Čech フィルトレーションの 1 次 PD を決定した。また、trefoil のエネルギー最小化とその 1 次 PD について考察を与えた。

今後の展望として、折れ線結び目に限らない一般の結び目の PH の定式化がまず挙げられる。本研究では結び目の離散近似である折れ線結び目を経由することで PH の典型的な解析手法を用いたが、1 節で述べた動機に即した自然な対象は結び目の管状近傍の半径から定まるフィルトレーションの PH だろう。特異 PH [9] は本稿で扱った頂点数 N の折れ線結び目の PH の $N \rightarrow \infty$ の極限との関係という観点からも興味深い。この際、エネルギーを用いない他のアプローチとして、トーラス結び目等のパラメトリックな結び目上に等間隔に N 個の頂点を配置し、その $N \rightarrow \infty$ での PD の漸近挙動を見るというものも考えられる。

また、結び目のパーシステントホモロジーの先行研究として、Cielieba-Mahler [5] は結び目の全長を固定してランダムに生成した折れ線結び目について、その PH から得られる特徴量と、結び目の埋め込みの形から定まる様々な幾何学的量との間の相関を結び目型ごとに統計解析し、結び目の全長の関数として増加する相関の存在を示している。本研究で扱った結び目のエネルギーと結び目の PD はどちらも結び目の幾何学的な複雑さを定量化しており、また結び目の対称性を反映した量であることから、直観的ではあるが何らかの関係があると予想される。Cielieba-Mahler らの統計的なアプローチに倣えば、例えば 3.2 節のように結び目のエネルギー減少列に対応する PD の列を考え、PD のベクトル化手法を用いてこれらの列の間関係を統計的に解析するといったアプローチが考えられる。

本稿で述べた結果の直接的な応用として、定理 1 に関してはランダムに生成された PCD からの空間の再構築 [4, 10]、trefoil の 1 次 PD に関しては PD のノイズとデータ点の集合の局所的な形状との間の対応づけ [2, 3] 等も考えられる。

参考文献

- [1] HomCloud. <https://homcloud.dev/>, 2024-01-17 参照.

- [2] Henry Adams and Michael Moy. Topology applied to machine learning: From global to local. *Frontiers in Artificial Intelligence*, Vol. 4, , 2021.
- [3] Peter Bubenik, Michael Hull, Dhruv Patel, and Benjamin Whittle. Persistent homology detects curvature. *Inverse Problems*, Vol. 36, No. 2, pp. 025008, 23, 2020.
- [4] Peter Bubenik and Peter T. Kim. A statistical approach to persistent homology. *Homology Homotopy Appl.*, Vol. 9, No. 2, pp. 337–362, 2007.
- [5] Daniele Celoria and Barbara I. Mahler. A statistical approach to knot confinement via persistent homology. *Proc. A.*, Vol. 478, No. 2261, pp. Paper No. 20210709, 13, 2022.
- [6] Herbert Edelsbrunner, David Letscher, and Afra Zomorodian. Topological persistence and simplification. Vol. 28, pp. 511–533. 2002. *Discrete and computational geometry and graph drawing* (Columbia, SC, 2001).
- [7] Michael H. Freedman, Zheng-Xu He, and Zhenghan Wang. Möbius energy of knots and unknots. *Ann. of Math. (2)*, Vol. 139, No. 1, pp. 1–50, 1994.
- [8] Shinji Fukuhara. Energy of a knot. In *A fête of topology*, pp. 443–451. Academic Press, Boston, MA, 1988.
- [9] Boris Goldfarb. Singular persistent homology with geometrically parallelizable computation. *Topology Proc.*, Vol. 55, pp. 273–294, 2020.
- [10] Partha Niyogi, Stephen Smale, and Shmuel Weinberger. Finding the homology of submanifolds with high confidence from random samples. *Discrete Comput. Geom.*, Vol. 39, No. 1-3, pp. 419–441, 2008.
- [11] Ippei Obayashi. Volume-optimal cycle: tightest representative cycle of a generator in persistent homology. *SIAM J. Appl. Algebra Geom.*, Vol. 2, No. 4, pp. 508–534, 2018.
- [12] Ippei Obayashi. Stable volumes for persistent homology. *J. Appl. Comput. Topol.*, Vol. 7, No. 4, pp. 671–706, 2023.
- [13] Ippei Obayashi, Takenobu Nakamura, and Yasuaki Hiraoka. Persistent homology analysis for materials research and persistent homology software: HomCloud. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 91, No. 9, p. 091013, 2022.
- [14] Jun O’Hara. Energy of a knot. *Topology*, Vol. 30, No. 2, pp. 241–247, 1991.
- [15] Afra Zomorodian and Gunnar Carlsson. Computing persistent homology. *Discrete Comput. Geom.*, Vol. 33, No. 2, pp. 249–274, 2005.
- [16] 池祐一, E.G. エスカラ, 大林一平, 鍛冶静雄. 位相的データ解析から構造発見へ：パーシステントホモロジーを中心に. AI/データサイエンスライブラリ “基礎から応用へ” 4. サイエンス社, 2023.
- [17] 平岡裕章 (三村晶泰・竹内康博・森田善久 編). タンパク質構造とトポロジー –パーシステントホモロジー群入門–, シリーズ・現象を解明する数学. 共立出版, 2013.