



UNIVERSIDAD DE SONORA

DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Programa de Licenciatura en Matemáticas

Titulo de la tesis

T E S I S

Que para obtener el título de:

Licenciado en Matemáticas

Presenta:

Nombre del tesista

Director de tesis: Prof. Jesús Francisco Espinoza Fierro

Hermosillo, Sonora, México

... de 20xx

Sinodales

...

...,

...

Dr. Fulano de tal

Departamento de Matemáticas,
Universidad de Sonora

Sutano...

Departamento de Matemáticas,
Universidad de Sonora

Mangano...

Departamento de Matemáticas,
Universidad de Sonora

Agradecimientos

...

Índice general

Introducción	IX
1. Espacios Métricos, Coberturas y Complejos Simpliciales	1
2. Utilizando Cubiertas y Nervios para el Análisis de Datos Exploratorio y Visualización: El Algoritmo Mapper.	7
3. Reconstrucción Geométrica e Inferencia Homológica	11
3.1. Inferencia Homológica	14
3.2. Aspectos estadísticos de la inferencia homológica	18
3.3. Más allá de la Distancia de Hausdorff: Distancia a una Medida	19
4. Homología Persistente	21
4.1. Filtraciones	21
4.2. Algunos Ejemplos	22
Apéndices	25
A. Cosas que no deberían ir en el texto principal	27
Bibliografía	29

Introducción

El análisis topológico de datos (ATD) es un campo reciente que emerge de varios trabajos en topología (algebraica) aplicada y la geometría computacional durante la primera década del siglo **XXI**. Aunque es posible encontrarse con acercamientos geométricos al análisis de datos desde mucho antes, el ATD comenzó a desarrollarse como un campo con los trabajos de Edelsbrunner et al. (2002) [40] y Zomorodian y Carlsson (2005) [74] en homología persistente, el campo fue popularizado en un destacado artículo en 2009 [16]. El ATD es motivado principalmente por la idea que la topología y la geometría brindan un acercamiento poderoso para inferir de manera robusta características cualitativas y cuantitativas sobre la estructura de un conjunto de datos [e.g., Chazal (2017) [21]].

El objetivo del ATD es generar métodos matemáticos, estadísticos y algorítmicos bien fundamentados para inferir, analizar y explotar las complejas estructuras topológicas y geométricas subyacentes a datos que usualmente son representados como nubes de puntos en espacios Euclidianos o espacios métricos más generales. En el transcurso de los últimos años se ha realizado un esfuerzo considerable para proporcionar estructuras de datos robustas y eficientes, además de algoritmos para ATD que actualmente son implementados y facilitados a través de paqueterías estándar como la paquetería GUDHI¹ (C++ y Python) Maria et al. (2014) [54] y su interfaz para el software R, Fasy et al. (2014a) [41], Dionysus², PHAT³, DIPHA⁴ o Giotto⁵. Aunque evoluciona con rapidez, el ATD proporciona un conjunto de herramientas maduras y eficientes que pueden ser usadas de manera complementaria o conjunta a otras herramientas de la ciencia de datos.

Estructura General del Análisis Topológico de Datos

El ATD se ha desarrollado recientemente en múltiples direcciones y campos de aplicación. Actualmente existe una variedad de métodos inspirados por acercamientos topológicos y geométricos. Dar un resumen que cubra con entereza de los acercamientos existentes se encuentra fuera del alcance de esta introducción. Sin embargo, muchos métodos estándar siguen la siguiente secuencia:

1. Suponemos que la entrada de datos es un conjunto finito de puntos con una noción de distancia o similitud entre ellos. Esta puede ser inducida por una métrica en el espacio de entrada (e.g. la métrica Euclidiana si se trata de datos inmersos en \mathbb{R}^d) o ser una métrica intrínseca definida por una matriz de distancia por pares. La definición de la

¹<https://gudhi.inria.fr/>

²<https://www.mrzv.org/software/dionysus/>

³<https://bitbucket.org/phant-code/phant>

⁴<https://github.com/DIPHA/dipha>

⁵<https://giotto-ai.github.io/gtda-docs/0.4.0/library.html>

métrica en los datos normalmente es parte de la entrada o es guiada por la aplicación. No obstante, es importante notar que la elección de dicha métrica puede ser crítica para revelar características topológicas y geométricas interesantes de los datos.

2. Se construye una figura “continua” sobre los datos con el propósito de resaltar las estructuras topológicas y geométricas subyacentes. Usualmente se trata de un complejo simplicial o una familia anidada de complejos simpliciales, llamada filtración, la cual refleja la estructura de los datos en diferentes escalas. Los complejos simpliciales pueden ser vistos como generalizaciones de gráficas vecinales que clásicamente son construidas sobre los datos en muchos tipos de análisis o algoritmos de aprendizaje. El desafío aquí es definir tales estructuras de tal manera que sean capaces de reflejar información relevante acerca de la estructura de los datos y que puedan ser construidas de manera efectiva y manipuladas en la práctica.
3. Información topológica y geométrica es extraída de las estructuras construidas sobre los datos. Esto puede resultar en una reconstrucción completa, típicamente una triangulación, de la forma subyacente de los datos de los cuales se pueden extraer fácilmente propiedades topológicas y geométricas en forma de resúmenes o aproximaciones las cuales requieren métodos específicos, como la homología persistente, para la extracción de información relevante. Más allá de la identificación de información topológica/geométrica interesante y su visualización e interpretación, el desafío en este paso es mostrar su relevancia, en particular su estabilidad con respecto a las perturbaciones o la presencia de ruido en los datos de entrada. Es por ello que entender el comportamiento estadístico de las propiedades inferidas es también una cuestión importante.
4. La información topológica y geométrica proporciona una nueva familia de características y descriptores de los datos. Estos pueden ser usados para entender mejor los datos (en particular a través de visualización) o pueden ser combinados con otros tipos de características para un análisis posterior o tareas de aprendizaje automático. Esta información también puede ser utilizada para diseñar modelos bien ajustados para el análisis de datos o el aprendizaje automático. Mostrar el valor añadido y complementario (con respecto a otras características) de la información proporcionada por las herramientas del ATD es un punto importante en este paso.

El Análisis Topológico de Datos y la Estadística

Hasta hace poco, los aspectos teóricos del TDA y la inferencia topológica recaían principalmente en acercamientos determinísticos. Estos acercamientos no tomaban en cuenta la naturaleza aleatoria de los datos y la variabilidad intrínseca de las cantidades topológicas que inferen. Así, la mayoría de los métodos correspondientes son de carácter explicativo, sin ser capaces de distinguir eficientemente entre información y lo que normalmente es llamado “ruido topológico”.

Un acercamiento estadístico al ATD implica considerar los datos como generados de una distribución desconocida y a su vez que las propiedades topológicas inferidas utilizando métodos del ATD son vistos como estimadores de cantidades topológicas que describen un objeto subyacente. Bajo este acercamiento, el objeto desconocido usualmente corresponde al soporte de la distribución de los datos (o parte del mismo). Los objetivos principales de

un acercamiento estadístico al análisis topológico de datos pueden ser abreviados como la siguiente lista de problemas:

- Tópico 1:* Demostrar consistencia y estudiar la tasa de convergencia de los métodos del ATD.
- Tópico 2:* Proporcionar regiones de confianza para características topológicas y discutir la significancia de las cantidades topológicas estimadas.
- Tópico 3:* Seleccionar escalas relevantes en las cuales el fenómeno topológico debe ser considerado, en función de los datos observados.
- Tópico 4:* Lidar con valores atípicos y brindar métodos robustos para el ATD.

Aplicaciones del Análisis Topológico de Datos en la Ciencia de Datos.

Desde el punto de vista de las aplicaciones, recientemente hay muchos resultados prometedores que han demostrado la eficacia de acercamientos topológicos y geométricos en una multitud de campos, tales como la ciencia de materiales (Kramar et al., 2013 [50]; Nakamura et al., 2015 [55]; Pike et al., 2020 [59]), análisis de formas 3D (Skraba et al., 2010 [67]; Turner et al., 2014b [70]), análisis de imágenes (Qaiser et al., 2019 [61]; Rieck et al., 2020 [62]), análisis de series de tiempo multivariadas (Khasawneh y Munch, 2016 [49]; Seversky et al., 2016 [64]; Umeda, 2017 [71]), medicina (Dindin et al., 2020 [39]), biología (Yao et al., 2009 [73]), genómica (Carrière y Rabadán, 2020 [20]), química (Lee et al., [51]; Smith et al., 2021 [68]), redes sensoriales (De Silva y Ghrist, 2007 [35]) y transportación (Li et al., 2019 [52]), entre otros. Dar una lista exhaustiva de las aplicaciones del ATD esta fuera del alcance de esta introducción. Por otra parte, la mayoría de los resultados del ATD son fruto de su combinación con otras técnicas de análisis y aprendizaje. De esta manera vemos que clarificar la posición y complementariedad del ATD con respecto a otros acercamientos y herramientas en la ciencia de datos es una cuestión importante y un campo de investigación activo.

Así, los objetivos generales de este documento son los siguientes. Primero, se intenta proporcionar a los analistas de datos con una breve pero exhaustiva introducción a los fundamentos matemáticos y estadísticos del ATD. Con este propósito, nos enfocamos en una selección de herramientas y tópicos, los complejos simplicales y su uso para el análisis topológico de datos exploratorio, la inferencia geométrica y la homología persistente, los cuales juegan un rol central en el ATD. Segundo, se apunta a demostrar como, gracias al reciente progreso del software, herramientas del ATD pueden ser fácilmente aplicadas en la ciencia de datos. En particular, mostraremos como la versión de Python de la paquetería GUDHI permite una sencilla implementación y uso de las herramientas presentadas. Nuestro objetivo es proporcionar al analista de datos referencias relevantes de manera que se obtenga una comprensión clara de los elementos básicos del ATD y sea capaz de utilizar sus métodos y software en un conjunto propio de problemas y datos.

Otros estudios del ATD, complementarios a este trabajo, pueden ser encontrados en la literatura. Wasserman (2018) [72] presenta una perspectiva estadística al ATD, y se concentra, en particular, en las conexiones entre el ATD y el agrupamiento por densidad. Sizemore et al. (2019) [66] propuso un estudio acerca de las aplicaciones del ATD a las neurociencias. Finalmente, Hensel et al. (2021) [48] presenta un resumen de las aplicaciones del ATD al aprendizaje automático.

Capítulo 1

Espacios Métricos, Coberturas y Complejos Simpliciales

Debido a que las características topológicas y geométricas suelen ser asociadas con espacios continuos, datos representados como un conjunto finito de observaciones no revelan información topológica directamente. Una manera natural de revelar algún tipo de estructura topológica en los datos es “conectar” puntos de datos que se encuentren cerca con el propósito de exhibir una forma continua global subyacente en los datos. Usualmente cuantificamos la noción de cercanía entre puntos utilizando una distancia (o medida de disimilaridad), y muchas veces resulta conveniente considerar conjuntos de datos como espacios métricos discretos o muestras de espacios métricos. Esta sección introduce conceptos generales para la inferencia geométrica y topológica; una presentación más completa del tema se encuentra en el estudio por Boissonnat et al. (2018) [7].

Espacios Métricos

Recordemos que un espacio métrico (M, ρ) es un conjunto M con una función $\rho : M \times M \rightarrow \mathbb{R}_+$, llamada distancia, tal que para cualquier $x, y, z \in M$, se tiene lo siguiente:

- I) $\rho(x, y) \geq 0$ y $\rho(x, y) = 0$ si y sólo si $x = y$,
- II) $\rho(x, y) = \rho(y, x)$, y
- III) $\rho(x, z) \leq \rho(x, y) + \rho(y, z)$.

Dado un espacio métrico (M, ρ) , el conjunto de subconjuntos compactos de (M, ρ) denotado por $\mathcal{K}(M)$, puede ser dotado con la distancia de Hausdorff; dados dos subconjuntos compactos $A, B \subseteq M$, la distancia de Hausdorff $d_H(A, B)$ entre A y B es definida como el número no negativo más pequeño δ , tal que para cualquier $a \in A$, existe $b \in B$ de manera que $\rho(a, b) \leq \delta$ (Figura 1.1). En otras palabras, si dado cualquier subconjunto compacto $C \subseteq M$, denotamos por $d(\cdot, C) : M \rightarrow \mathbb{R}_+$ a la función distancia de C definida por $d(x, C) := \inf_{c \in C} \rho(x, c)$ para cualquier $x \in M$, entonces se puede probar que la distancia de Hausdorff entre A y B esta definida por una de las siguientes igualdades:

$$d_H(A, B) = \max \left\{ \sup_{b \in B} d(b, A), \sup_{a \in A} d(a, B) \right\}$$

$$= \sup_{x \in M} |d(x, A) - d(x, B)| = \|d(\cdot, A) - d(\cdot, B)\|_\infty$$

Es un resultado clásico que la distancia de Hausdorff es en efecto una distancia en el conjunto de subconjuntos compactos de un espacio métrico. Desde la perspectiva del ATD, esta distancia brinda una manera conveniente de cuantificar la proximidad entre diferentes conjuntos de datos que provienen del mismo espacio métrico. Sin embargo, a veces es necesario comparar conjuntos de datos que no son muestreados del mismo espacio. Por fortuna la noción de la distancia de Hausdorff puede ser generalizada para comparar cualquier par de espacios métricos compactos, esta es la idea de la distancia de Gromov-Hausdorff.

Dados dos espacios métricos compactos, (M_1, ρ_1) y (M_2, ρ_2) , decimos que son isométricos si existe una biyección $\phi: M_1 \rightarrow M_2$ que preserve distancias, esto es, $\rho_2(\phi(x), \phi(y)) = \rho_1(x, y)$ para cualquier $x, y \in M_1$. La distancia de Gromov-Hausdorff mide cuan lejos están dos espacios métricos de ser isométricos.

Definición 1.1. La distancia de Gromov-Hausdorff $d_{GH}(M_1, M_2)$ entre dos espacios métricos compactos es el ínfimo de los números reales $r \geq 0$ tal que existe un espacio métrico (M, ρ) y dos subespacios compactos C_1 y $C_2 \subset M$ que son isométricos a M_1 y M_2 y que cumplen $d_H(C_1, C_2) \leq r$.

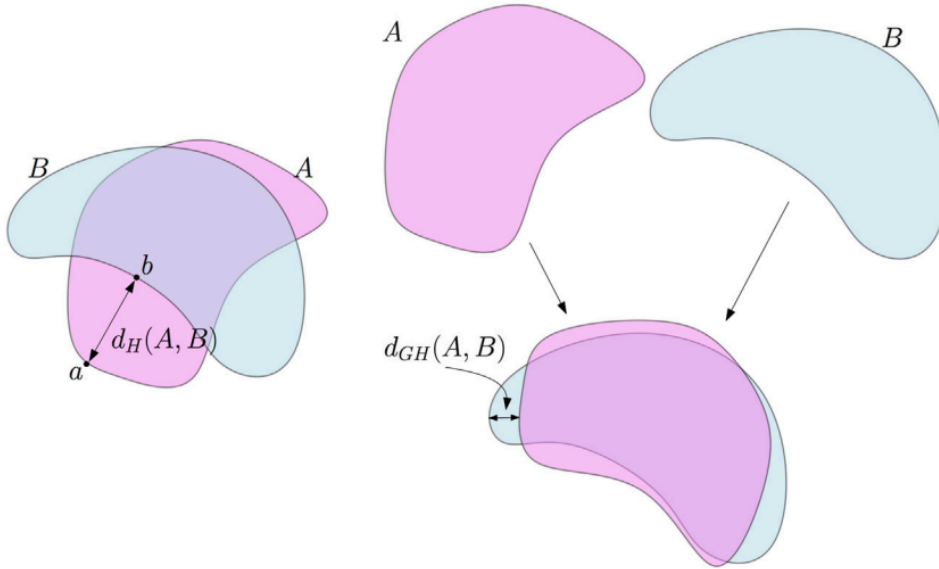


Figura 1.1: Izquierda: la distancia de Hausdorff entre dos subconjuntos A y B en el plano. en este ejemplo, $d_H(A, B)$ es la distancia entre el punto a en A que es el más lejano a B y su vecino más cercano b en B . Derecha: la distancia de Gromov-Hausdorff entre A y B . A puede ser rotado para reducir su distancia de Hausdorff a B . Así, $d_{GH}(A, B) \leq d_H(A, B)$.

Usaremos la distancia de Gromov-Hausdorff más adelante para el estudio de las propiedades de estabilidad de los diagramas de persistencia.

Conectar pares de puntos de datos cercanos mediante aristas lleva a la noción estándar de una gráfica simple de la cual la conectividad de los datos puede ser analizada usando, por ejemplo, algoritmos de agrupamiento. Para ir más allá de la conectividad, una idea central en el ATD es construir nociones equivalentes a las gráficas simples pero de dimensión más alta, utilizando no sólo pares sino $(k + 1)$ -tuplas de puntos de datos cercanos. El resultado son objetos llamados complejos simpliciales, los cuales nos ayudan a identificar nuevas características topológicas tales como ciclos, huecos, y sus correspondientes de dimensiones superiores.

Complejos Simpliciales Geométricos y Abstractos

Los complejos simpliciales pueden considerarse como gráficas generalizadas a dimensiones superiores. Son objetos matemáticos que son de naturaleza topológica y combinatoria a la vez, una propiedad que los hace particularmente útiles para el ATD.

Dado un conjunto $\mathbb{X} = \{x_0, \dots, x_k\} \subset \mathbb{R}^d$ con $k + 1$ puntos afínmente independientes, el simplejo k -dimensional $\sigma = [x_0, \dots, x_k]$ generado por \mathbb{X} es la envolvente convexa de \mathbb{X} . Los puntos de \mathbb{X} son llamados vértices de σ , y los simplejos generados por los subconjuntos de \mathbb{X} son llamados caras de σ . Un complejo simplicial geométrico K en \mathbb{R}^d es una colección de simplejos que cumplen lo siguiente:

- i) Cualquier cara de un simplejo de K es un simplejo de K y,
- ii) La intersección de cualesquiera dos simplejos de K es el conjunto vacío o una cara común de ambos simplejos.

La unión de los simplejos de K es un subconjunto de \mathbb{R}^d llamado el espacio subyacente de K que hereda la topología de \mathbb{R}^d . Así, K puede ser visto como un espacio topológico a través de su espacio subyacente. Es de notar que una vez que se conocen los vértices, K se encuentra completamente caracterizado por la descripción combinatoria de una colección de simplejos que satisfacen ciertas reglas de incidencia.

Dado un conjunto V , un complejo simplicial abstracto con un conjunto de vértices V es un conjunto \tilde{K} , de subconjuntos finitos de V tales que los elementos de V pertenecen a \tilde{K} y que para cualquier $\sigma \in \tilde{K}$, cualquier subconjunto de σ pertenece a \tilde{K} . Los elementos de \tilde{K} son llamados las caras o los simplejos de \tilde{K} . La dimensión de un simplejo abstracto es su cardinalidad menos 1 y la dimensión de \tilde{K} es la mayor de las dimensiones de sus simplejos. Es de notar que los complejos simpliciales de dimensión 1 son gráficas.

La descripción combinatoria de cualquier complejo simplicial geométrico K da lugar a un complejo simplicial abstracto \tilde{K} . El inverso también es cierto; siempre es posible asociar con un complejo simplicial abstracto \tilde{K} un cierto espacio topológico $|\tilde{K}|$ tal que si K es un complejo simplicial geométrico cuya descripción combinatoria es la misma que la de \tilde{K} , entonces el espacio subyacente de K es homeomorfo a $|\tilde{K}|$. Dicha K es llamada una realización geométrica de \tilde{K} . Como consecuencia de esto, los complejos simpliciales abstractos pueden ser vistos como espacios topológicos y los complejos simpliciales geométricos pueden ser vistos como realizaciones geométricas de la estructura combinatoria subyacente. Así, se puede considerar a los complejos simpliciales como objetos combinatorios que se ajustan bien a cálculos computacionales efectivos y a su vez como espacios topológicos de los cuales se pueden inferir propiedades topológicas.

Construcción de Complejos Simpliciales a partir de Datos

Dado un conjunto de datos, o más generalmente, un espacio métrico o topológico, existen varias maneras de construir complejos simpliciales. Esta es una presentación de algunos ejemplos clásicos que son usados con frecuencia en la práctica.

Comenzando con una extensión inmediata de la noción de una gráfica, Supóngase que tenemos un conjunto de puntos \mathbb{X} en un espacio métrico (M, ρ) y un número real $\alpha \geq 0$. El complejo de Vietoris-Rips $Rips_\alpha(\mathbb{X})$ es el conjunto de simplejos $[x_0, \dots, x_k]$ tal que $\rho_{\mathbb{X}}(x_i, x_j) \leq \alpha$ para todo (i, j) , ver Figura 1.2. De aquí vemos que el complejo de Vietoris-Rips es efectivamente un complejo simplicial abstracto. Aunque, en general, incluso cuando \mathbb{X} es un subconjunto finito de \mathbb{R}^d , $Rips_\alpha(\mathbb{X})$ no admite una realización geométrica en \mathbb{R}^d ; en particular, puede ser de una dimensión mayor a d , por ejemplo, si se tienen $d+2$ puntos en \mathbb{R}^d que cumplen $\rho_{\mathbb{X}}(x_i, x_j) \leq \alpha$ para todo (i, j) , entonces $Rips_\alpha(\mathbb{X})$ es de dimensión $d+1$, podemos ver un caso similar en el tetraedro formado en el complejo derecho de la Figura 1.2.

Estrechamente relacionado al complejo de Vietoris-Rips está el complejo de Čech $Cech_\alpha(\mathbb{X})$ el cual se define como el conjunto de simplejos $[x_0, \dots, x_k]$ tales que las $k+1$ bolas cerradas $B(x_i, \alpha)$ tienen intersección no vacía, ver Figura 1.2. Estos dos complejos están relacionados por

$$Rips_\alpha(\mathbb{X}) \subseteq Cech_\alpha(\mathbb{X}) \subseteq Rips_{2\alpha}(\mathbb{X})$$

y que si $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$, entonces $Cech_\alpha(\mathbb{X})$ y $Rips_{2\alpha}(\mathbb{X})$ tienen el mismo esqueleto 1-dimensional, esto es, comparten el mismo conjunto de vértices y aristas.

El Teorema del Nervio

El complejo de Čech es un caso particular de una familia de complejos asociados con cubiertas. Dada una cubierta $\mathcal{U} = (U_i)_{i \in I}$ de \mathbb{M} , conjunto de puntos en \mathbb{R}^d , es decir, una familia de conjuntos U_i tales que $\mathbb{M} = \cup_{i \in I} U_i$, el nervio de \mathcal{U} es el complejo simplicial abstracto $C(\mathcal{U})$ cuyos vértices son los U_i 's y que cumple

$$\sigma = [U_{i_0}, \dots, U_{i_k}] \in C(\mathcal{U}) \text{ si y sólo si } \cap_{j=0}^k U_{i_j} \neq \emptyset.$$

Dada una cubierta de un conjunto de datos, donde cada conjunto de la cubierta es, por ejemplo, una agrupación de los puntos de los datos que tienen ciertas propiedades en común, su nervio proporciona una descripción combinatoria, compacta y global, de las relaciones entre estos conjuntos a través de sus patrones de intersección. Ver Figura (1.3).

Un teorema fundamental en topología algebraica se encarga de relacionar, bajo ciertas condiciones, la topología del nervio de una cubierta con la topología de la unión de los conjuntos de dicha cubierta. Es necesario introducir algunas nociones adicionales para ser formales a la hora de enunciar este resultado conocido como el teorema del nervio.

Dos espacios topológicos, X y Y , usualmente son considerados iguales desde un punto de vista topológico si son homeomorfos, esto es, si existen dos funciones, biyectivas y continuas, $f: X \rightarrow Y$ y $g: Y \rightarrow X$ tales que $f \circ g$ y $g \circ f$ son las funciones identidad de Y y X , respectivamente. En muchas ocasiones, pedir que X y Y sean homeomorfos resulta ser una condición demasiado fuerte para asegurar que X y Y compartan propiedades topológicas de interés para el ATD. Dos funciones continuas $f_0, f_1: X \rightarrow Y$ se dicen ser homotópicas si



Figura 1.2: El complejo de Čech, $Cech_\alpha(\mathbb{X})$ (izquierda) y el de Vietoris-Rips $Rips_{2\alpha}(\mathbb{X})$ (derecha) en una nube finita de puntos en \mathbb{R}^2 . La parte inferior de $Cech_\alpha(\mathbb{X})$ es la unión de dos triángulos adyacentes, mientras que la parte inferior de $Rips_{2\alpha}(\mathbb{X})$ es el tetraedro generado por los cuatro vértices y todas sus caras. La dimensión del complejo de Čech es 2. La dimensión del complejo de Vietoris-Rips es 3. Es de notar que el complejo de Vietoris-Rips, en este caso, no puede ser inmerso en \mathbb{R}^2 .

existe una función continua $H : X \times [0, 1] \rightarrow Y$ tal que para cualquier $x \in X$, $H(x, 0) = f_0(x)$ y $H(x, 1) = g(x)$. Los espacios X y Y se dicen ser homotópicamente equivalentes si existen dos funciones, $f : X \rightarrow Y$ y $g : Y \rightarrow X$, tales que $f \circ g$ y $g \circ f$ son homotópicas a la función identidad de Y y X , respectivamente. Las funciones f y g son llamadas homotópicamente equivalentes. La noción de equivalencia homotópica es más débil que la de homeomorfismo; si X y Y son homeomorfos, entonces son homotópicamente equivalentes, pero el recíproco no es cierto. Sin embargo, espacios que son homotópicamente equivalentes aún comparten muchos invariantes topológicos, como la conexidad por caminos, los grupos de homotopía y, en particular, tienen la misma homología.

Un espacio se dice ser contraíble si es homotópicamente equivalente a un punto. Las bolas, y en general los conjuntos convexos en \mathbb{R}^d , son ejemplos básicos de espacios contraíbles. Las cubiertas abiertas, para las cuales se tiene que todos sus elementos e intersecciones son contraíbles, tienen la siguiente propiedad.

Teorema 1.2 (Teorema del Nervio). Sea $\mathcal{U} = (U_i)_{i \in I}$ una cubierta abierta de un espacio topológico X tal que la intersección de cualquier subcolección de los U_i 's es contraíble o vacía. Entonces, X y el nervio $C(\mathcal{U})$ son homotópicamente equivalentes.

Es fácil verificar que subconjuntos convexos de espacios euclidianos son contraíbles. Como consecuencia, si $\mathcal{U} = (U_i)_{i \in I}$ es una colección de subconjuntos convexos de \mathbb{R}^d , entonces



Figura 1.3: Nube de puntos muestreada en el plano y una cubierta de conjuntos abiertos para esta nube (izquierda). El nervio de esta cubierta es un triángulo (derecha). Los vértices corresponden a uno de los conjuntos de la cubierta mientras que las aristas corresponden a una de las intersecciones no vacías entre dos conjuntos de la cubierta.

$C(\mathcal{U})$ y $\cup_{i \in I} U_i$ son homotópicamente equivalentes. En particular, si \mathbb{X} es un conjunto de puntos en \mathbb{R}^d , entonces el complejo de Čech $Cech_\alpha(\mathbb{X})$ es homotópicamente equivalente a la unión de bolas $\cup_{x \in \mathbb{X}} B(x, \alpha)$.

El teorema del nervio juega un papel fundamental en el ATD; proporciona una manera de codificar la topología de espacios continuos en estructuras combinatorias abstractas que se ajustan con facilidad al diseño de estructuras de datos y algoritmos efectivos.

Capítulo 2

Utilizando Cubiertas y Nervios para el Análisis de Datos Exploratorio y Visualización: El Algoritmo Mapper.

Usar el nervio de cubiertas como una manera de visualizar y explorar datos es una idea natural que fue propuesta para el ATD en el estudio por Singh et al. [1], dando lugar al algoritmo Mapper.

Definición 2.1. Sea $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, una función continua y sea $\mathcal{U} = (U_i)_{i \in I}$ una cubierta de \mathbb{R}^d . la cubierta pull-back de \mathbb{X} inducida por (f, \mathcal{U}) es la colección de conjuntos abiertos $(f^{-1}(U_i))_{i \in I}$. El pull-back refinado es una colección de componentes conexas de los abiertos $f^{-1}(U_i)$, $i \in I$.

La idea del algoritmo Mapper es, dado un conjunto de datos \mathbb{X} y una función $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^d$, sintetizar \mathbb{X} a través del nervio del pull-back refinado de una cubierta \mathcal{U} de $f(\mathbb{X})$. Para cubiertas bien escogidas \mathcal{U} , este nervio es una gráfica que encapsula de manera conveniente el detalle de los datos y los vuelve fáciles de visualizar (Ver Figura 2.1).

El algoritmo de Mapper es muy sencillo; pero este recalca las diferentes elecciones que son dejadas al usuario y que discutiremos a continuación.

- **Entrada:** Un conjunto de datos \mathbb{X} con una métrica o medida de disimilaridad entre los puntos asociados a los datos, una función $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$ (o bien, $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^d$), y una cubierta \mathcal{U} de $f(\mathbb{X})$. Para cada $U \in \mathcal{U}$, descomponer $f^{-1}(U)$ en agrupaciones $C_{U,1}, \dots, C_{U,k_U}$. Calcular el nervio de la cubierta de \mathbb{X} definido por los $C_{U,1}, \dots, C_{U,k_U}$, $U \in \mathcal{U}$.
- **Salida:** Un complejo simplicial; el nervio que incluye un vértice $v_{U,i}$ por cada $C_{U,i}$ y una arista entre cada uno de los vértices $v_{U,i}$ y $v_{U',j}$ que cumplan $C_{U,i} \cap C_{U',j} \neq \emptyset$.



Figura 2.1: (A) Cubierta pull-back refinada de la función altura sobre una superficie en \mathbb{R}^3 . (B) Algoritmo de Mapper en una nube de puntos muestreada alrededor de un círculo y la función altura.

La Elección de f

La elección de la función f , a veces llamada la función filtro o lente, depende fuertemente de las propiedades de los datos que uno pretende resaltar. Las siguientes son algunas de las más encontradas en la literatura:

- Estimadores de densidad: El complejo Mapper puede ser útil para entender la estructura y conexidad de áreas de alta densidad.
- Coordenadas de análisis de componentes principales (coordenadas PCA) o funciones coordenadas obtenidas de una técnica de reducción de dimensionalidad no lineal (NLDR), eigenfunciones de laplacianos de gráficas pueden ayudar a revelar y entender parte de la ambigüedad en el uso de reducciones de dimensionalidad no lineales.
- La función de centralidad $f(x) = \sum_{y \in \mathbb{X}} d(x, y)$ y la función de excentricidad $f(x) = \max_{y \in \mathbb{X}} d(x, y)$ a veces resultan ser buenas elecciones que no requieren de ningún

conocimiento específico acerca de los datos.

- Para datos muestreados sobre estructuras filamentosas de dimensión uno, la función distancia a un punto dado permite recuperar la topología subyacente de las estructuras filamentosas [29].

La Elección de la Cubierta \mathcal{U}

Cuando f es una función de valores reales, una elección estándar de \mathcal{U} es un conjunto de intervalos espaciados regularmente y del mismo largo, $r > 0$, cubriendo al conjunto $f(\mathbb{X})$. El número real r es a veces llamado la resolución de la cubierta, y el porcentaje g de superposición entre dos intervalos consecutivos es llamado la ganancia de la cubierta. Nótese que si la ganancia g es escogida menor a 50 %, entonces cada punto de la línea real es cubierto por, a lo más, 2 conjuntos abiertos de \mathcal{U} , y el nervio resultante es una gráfica. Es importante notar que la salida de Mapper es muy sensible a la elección de \mathcal{U} , y cambios pequeños en la resolución o ganancia puede afectar de manera significativa al resultado, volviendo el método muy inestable. Una estrategia clásica consiste en explorar un rango de parámetros y seleccionar aquellos que sean más informativos desde el punto de vista del usuario.

La Elección del Agrupamiento

El algoritmo Mapper requiere el agrupamiento de la preimagen de conjuntos abiertos $U \in \mathcal{U}$. Existen dos estrategias para realizar este agrupamiento. La primera consiste en aplicar, a cada $U \in \mathcal{U}$, un algoritmo de agrupamiento, escogido por el usuario, a la preimagen de $f^{-1}(U)$. La segunda, más global, consiste en construir una gráfica sobre el conjunto de datos \mathbb{X} , por ejemplo, una gráfica k-NN o una ϵ -gráfica y, para cada $U \in \mathcal{U}$, tomar las componentes conexas de la subgráfica con el conjunto de vértices $f^{-1}(U)$.

Aspectos Teóricos y Estadísticos del Algoritmo Mapper

Basados en los resultados de estabilidad y la estructura de Mapper propuestos en el estudio por Carrière y Oudot (2017) [17], se han realizado avances en dirección a una versión de Mapper estadísticamente bien fundamentada en el estudio por Carrière et al. (2018) [19]. De aquí destaca que la convergencia de Mapper depende tanto del muestreo de los datos como de la regularidad de la función filtro. Más aun, estrategias de submuestreo pueden ser usadas para seleccionar un complejo en una filtración de Rips a una escala conveniente, así como la resolución y la ganancia para definir la gráfica Mapper. El caso para filtros estocásticos y multivariados también ha sido estudiado por Carrière y Michel (2019) [18]. Una descripción alternativa de la convergencia probabilística de Mapper, en términos de la categorificación, fue propuesta en el estudio por Brown et al. (2020) [11]. Otros acercamientos también fueron propuestos para estudiar y lidiar con la inestabilidad del algoritmo Mapper en los trabajos de Dey et al. (2016) [38], Dey et al. (2017) [37].

Análisis de Datos con Mapper

Como una herramienta del análisis de datos, Mapper se ha utilizado con éxito para tareas de agrupamiento y selección de atributos. La idea es identificar estructuras específicas en la gráfica (o complejo) Mapper, en particular, lazos. Estas estructuras son usadas para identificar cúmulos interesantes o seleccionar atributos que puedan diferenciar los datos en estas estructuras de manera apropiada. Aplicaciones en datos reales ilustrando estas técnicas pueden ser encontradas en, por ejemplo, los estudios por Carrière y Rabadán (2020) [20], Lum et al. (2013) [53], Yao et al. (2009) [73].

Capítulo 3

Reconstrucción Geométrica e Inferencia Homológica

Otra forma de construir cubiertas y usar sus nervios para exhibir la estructura topológica de los datos es considerar la unión de bolas centradas en los puntos de los datos. En esta sección suponemos que $\mathbb{X}_n = \{x_0, \dots, x_n\}$ es un subconjunto de \mathbb{R}^d , muestrado de manera i. i. d. de acuerdo con la medida de probabilidad μ con soporte compacto $M \subset \mathbb{R}^d$. La estrategia general para inferir información topológica acerca de M a través de μ consiste en dos pasos:

1. Se cubre \mathbb{X}_n con una unión de bolas de radio fijo con centros en las x_i 's. Bajo algunas condiciones de regularidad en M , se puede relacionar la topología de esta unión de bolas con la de M .
2. Desde una perspectiva práctica y algorítmica, las cualidades topológicas de M son inferidas del nervio de la unión de las bolas, utilizando el teorema del nervio.

De esta manera, es posible comparar espacios a través de equivalencias isotópicas, una noción más fuerte que la de homeomorfismo: $X \subseteq \mathbb{X}^d$ y $Y \subseteq \mathbb{X}^d$ se dicen ser (ambientalmente) isotópicos si existe una familia continua de homeomorfismos $H : [0, 1] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, H continua, tal que, para cualquier $t \in [0, 1]$, $H_t = H(t, \cdot) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ es un homeomorfismo, H_0 es el mapeo identidad en \mathbb{R}^d , y $H_1(X) = Y$. Es claro que, si X y Y son isotópicos, entonces son homeomorfos. El recíproco no es cierto: un círculo anudado y uno desanudado en \mathbb{R}^3 son homeomorfos pero no isotópicos.

Funciones DL y Reconstrucción

Dado un subconjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ y un número real no negativo r , la unión de bolas de radio r centradas en K , $K^r = \cup_{x \in K} B(x, r)$, llamado el r -cubrimiento de K , es el conjunto de r -subnivel de la distancia $d_K : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $d_K(x) = \inf_{y \in K} \|x - y\|$; es decir, $K^r = d_K^{-1}([0, r])$. Esto nos permite utilizar propiedades diferenciales de funciones distancia y nos ayuda a comparar la topología de los cubrimientos de conjuntos compactos que estén cerca el uno del otro con respecto a la distancia de Hausdorff.

Definición 3.1. (Distancia de Hausdorff en \mathbb{R}^3). La distancia de Hausdorff entre dos subconjuntos compactos K, K' de \mathbb{R}^d está definida como

$$d_H(K, K') = \|d_K - d_{K'}\|_\infty = \inf_{x \in \mathbb{R}^d} |d_K(x) - d_{K'}(x)|$$

Aquí, los conjuntos compactos son el conjunto de datos \mathbb{X}_n y el soporte M de la medida μ . Cuando M es una subvariedad compacta suave, bajo ciertas condiciones sobre $d_H(\mathbb{X}_n, M)$, para algún r bien escogido, las coberturas de \mathbb{X}_n son homotópicamente equivalentes a M , Chazal y Lieutier (2008) [30], Niyogi et al. (2008) [56] (Ver Figura 3.1). Estos resultados se extienden a clases más grandes de conjuntos compactos y llevan a resultados fuertes sobre inferencia de los tipos de isotopías de las coberturas de M , Chazal et al. (2009c) [23], Chazal et al. (2009d)[24]. También llevan a resultados en la estimación de otras cantidades geométricas y diferenciales tales como normales, Chazal et al. (2009c) [23], curvaturas Chazal et al. (2009e) [25], o medidas de frontera, Chazal et al. (2010) [26] bajo ciertas condiciones en la distancia de Hausdorff entre la forma subyacente y los datos muestrales.

Estos resultados dependen de la 1-semiconcavidad del cuadrado de la función distancia d_K^2 , esto es, la convexidad de la función $x \rightarrow \|x\|^2 - d_K^2(x)$, definida de a continuación.

Definición 3.2. Una función $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ es DL (distance-like) si es propia (la preimagen de cualquier conjunto compacto en \mathbb{R} bajo ϕ es un compacto en \mathbb{R}^d) y $x \rightarrow \|x\|^2 - \phi^2(x)$ es convexa.

Gracias a su semiconcavidad, una función DL ϕ tiene un gradiente $\nabla\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ bien definido, pero no continuo, que puede ser integrado en un flujo continuo (Petrinin, 2007 [57]) que permite rastrear la evolución de la topología de sus subniveles y compararla a una de los subniveles de funciones DL cercanas.

Definición 3.3. Sea ϕ una función DL y sea $\phi^r = \phi^{-1}([0, r])$ el r -subnivel de ϕ .

- Un punto $x \in \mathbb{R}^d$ es llamado α -crítico si $\|\nabla_x \phi\| \leq \alpha$. El valor $r = \phi(x)$ correspondiente, también es llamado α -crítico.
- El tamaño del atributo débil de ϕ en r es el mínimo $r > 0$ tal que ϕ no tiene ningún valor crítico entre r y $r + r'$. Lo denotamos por $\text{wfs}_\phi(r)$ (weak feature size). Para cualquier $0 < \alpha < 1$, el α -alcance de ϕ es el máximo r tal que $\phi^{-1}((0, r])$ no contiene ningún punto α -crítico.

El tamaño del atributo débil $\text{wfs}_\phi(r)$ (respecto al α -alcance) mide la regularidad de ϕ sobre sus r -niveles (respecto al 0-nivel). Cuando $\phi = d_K$ es la función distancia a un conjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$, el 1-alcance coincide con el alcance clásico de la teoría de la medida gemétrica, Federer (1959) [42]. Su estimación desde muestras aleatorias fue estudiada en Aamari et al. (2019) [2]. Una propiedad importante de una función DL ϕ es que la topología de sus subniveles ϕ^r sólo puede cambiar cuando r cruza un valor 0-crítico.

Lema 3.4. (Lema de isotopía). Sea ϕ una función DL y $r_1 < r_2$ dos números positivos tales que ϕ no tiene puntos 0-críticos, esto es, puntos x tales que $\nabla\phi(x) = 0$, en el subconjunto $\phi^{-1}([r_1, r_2])$. Entonces todos los subniveles $\phi^{-1}([0, r])$ son isotópicos para $r \in [r_1, r_2]$.

Como consecuencia inmediata del lema de isotopía, todos los subniveles de ϕ entre r y $r + \text{wfs}_\phi(r)$ tienen la misma topología. Ahora, el siguiente teorema de Chazal et al. [27], proporciona una conexión entre la topología de los subniveles de funciones DL cercanas.



Figura 3.1: Ejemplo de una nube de puntos \mathbb{X}_n muestreada en la superficie de un toro en \mathbb{R}^3 y sus coberturas para diferentes valores del radio $r_1 < r_2 < r_3$. Para valores bien escogidos del radio (por ejemplo r_1 y r_2), las coberturas son homotópicamente equivalentes al toro.

Teorema 3.5 (Teorema de reconstrucción). Sean ϕ, ψ dos funciones DL, tales que $\|\phi - \psi\|_\infty \leq \epsilon$, con α -alcance $\text{reach}_\alpha(\phi) \geq R$ para algunos ϵ y α positivos. Entonces, para todo $r \in [4\epsilon/\alpha^2, R - 3\epsilon]$ y cada $\eta \in (0, R)$ los subniveles ψ^r y ϕ^η son homotópicamente equivalentes si:

$$\epsilon \leq \frac{R}{5 + 4/\alpha^2}$$

Bajo condiciones similares pero ligeramente más técnicas, el teorema de reconstrucción puede ser extendido para probar que los subniveles son homeomorfos e incluso isotópicos (Chazal et al., 2009 [23]; Chazal et al., 2008 [30]).

Consideremos una vez más $\phi = d_M$ y $\psi = d_{\mathbb{X}_n}$ las funciones distancia al soporte de M de la medida μ y al conjunto de puntos asociados a los datos \mathbb{X}_n , la condición $\text{wfs}_\alpha(d_M) \geq R$ puede ser interpretada como una condición de regularidad sobre M^1 . El teorema de reconstrucción junto con el teorema del nervio nos indican que para ciertos valores de r, η y los η -cobertura son homotópicamente equivalentes al nervio de la unión de las bolas de radio r centradas en \mathbb{X}_n , es decir, el complejo de Čech $\text{Cech}_r(\mathbb{X}_n)$.

¹Por ejemplo, si M es una subvariedad compacta suave, el 0-alcance $\text{reach}_0(\phi)$ siempre es positivo se le llama el alcance de M Federer (1959) [42]

Desde un punto de vista estadístico, la principal ventaja de estos resultados sobre la distancia de Hausdorff es que el problema de estimación de cantidades topológicas se transforma en una serie de preguntas acerca de el soporte de ciertas medidas, las cuales han sido ampliamente estudiadas.

3.1. Inferencia Homológica

Los resultados anteriores proporcionan una estructura matemática bien fundamentada para inferir la topología de las formas de un complejo simplicial construido sobre una muestra finita que sirve como aproximación. Sin embargo, desde una perspectiva más práctica, aparecen dos problemas. Primero, el teorema de reconstrucción requiere de regularidad a través de la condición del α -alcance que a veces no puede ser garantizada, además de la elección del radio r que se debe realizar para construir el complejo de Čech $Cech_r(\mathbb{X}_n)$. Segundo, $Cech_r(\mathbb{X}_n)$ brinda una fiel descripción topológica de los datos a través de un complejo simplicial que normalmente no es adecuado para un procesamiento de datos adicional. Es conveniente tener descriptores topológicos que sean fáciles de manejar, en particular descriptores numéricos, que pueden ser calculados desde el complejo simplicial de manera sencilla. Este segundo problema se resuelve al considerar la homología del complejo simplicial en cuestión, tema que se desarrollara a continuación, por otra parte, el primer problema sera resuelto en la siguiente capítulo con la introducción a la homología persistente.

Homología

La homología es un concepto clásico en la topología algebraica, brinda una herramienta poderosa para formalizar y manejar la noción de características topológicas de un espacio topológico o un complejo simplicial de manera algebraica. Para cualquier dimensión k , los “hoyos” k -dimensionales son representados por un espacio vectorial H_k , cuya dimensión es el número de dichas propiedades. Por ejemplo, el grupo de homología 0-dimensional H_0 representa las componentes conexas del complejo, el grupo de homología 1-dimensional H_1 representa los lazos de dimensión uno, el grupo de homología 2-dimensional H_2 representa las cavidades de dimensión dos, y así sucesivamente.

Para evitar dificultades y sutilezas técnicas, restringimos esta introducción a la homología al mínimo necesario para continuar con nuestro programa. En particular, nos restringimos al caso donde la homología tiene coeficientes en \mathbb{Z}_2 , esto es, el campo con dos elementos, 0 y 1, tales que $1 + 1 = 0$, que tiene una interpretación geométrica más intuitiva. No obstante, todas las nociones y resultados presentados aquí se extienden de manera natural a la homología con coeficientes en cualquier campo. Referimos al lector al estudio por Hatcher (2001) [47] para una introducción completa a la homología y al estudio por Ghrist (2017) [45] para una introducción concisa y reciente a la topología algebraica aplicada y sus conexiones con el análisis de datos.

Sea K un complejo simplicial (finito) y k un entero no-negativo. El espacio de las k -cadenas en K , $C_k(K)$ es el conjunto cuyos elementos son las sumas formales (finitas) de los k -simplices de K . Más precisamente, si $\{\sigma_1, \dots, \sigma_p\}$ es el conjunto de los k -simplices de K , entonces cualquier k -cadena puede ser escrita como:

$$c = \sum_{i=0}^p \epsilon_i \sigma_i \text{ con } \epsilon_i \in \mathbb{Z}_2$$



Figura 3.2: Algunos ejemplos de cadenas, ciclos y fronteras en un complejo K de dos dimensiones: c_1 , c_2 y c_4 son 1-ciclos; c_3 es una 1-cadena pero no un 1-ciclo; c_4 es una 1-frontera, la frontera de la 2-cadena obtenida de la suma de los triángulos rodeados por c_4 . Los ciclos c_1 y c_2 generan el mismo elemento en $H_1(K)$ ya que su diferencia es la 2-cadena representada por la unión de triángulos que rodean la unión de c_1 y c_2 .

Si $c' = \sum_{i=1}^p \epsilon'_i \sigma_i$ es otra k -cadena y $\lambda \in \mathbb{Z}_2$, la suma $c + c'$ esta definida como $c + c' = \sum_{i=1}^p (\epsilon_i + \epsilon'_i) \sigma_i$ y el producto $\lambda \cdot c$ esta definido como $\lambda \cdot c = \sum_{i=1}^p (\lambda \cdot \epsilon_i) \sigma_i$, convirtiendo a $C_k(K)$ en un espacio vectorial con coeficientes en \mathbb{Z}_2 . Ya que estamos considerando los coeficientes en \mathbb{Z}_2 , geoméricamente, una k -cadena puede ser vista como una colección finita de k -simplices y la sumas de dos k -cadenas como la diferencia simétrica de las colecciones correspondientes².

La frontera de un k -simplejo $\sigma = [v_0, \dots, v_k]$ es la $(k-1)$ -cadena

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

donde $[v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_k]$ es el $(k-1)$ -simplejo generado por todos los vértices a excepción de v_i ³. Dado que los k -simplejos forman una base de $C_k(K)$, ∂_k se extiende como una función lineal de $C_k(K)$ a $C_{k-1}(K)$ llamado el operador frontera. El kernel de ∂_k denotado por: $Z_k(K) = \{c \in C_k(K) : \partial_k(c) = 0\}$ es llamado el espacio de k -ciclos de K , y la imagen de ∂_{k+1} denotada por: $B_k(K) = \{c \in C_k(K) : \exists c' \in C_{k+1}(K), \partial_{k+1}(c') = c\}$ es llamada el espacio de k -fronteras de K .

²Recordemos que la diferencia simétrica entre dos conjuntos A y B es el conjunto $A \Delta B = (AB) \cup (BA)$

³Ya que estamos considerando los coeficientes en \mathbb{Z}_2 , se tiene que $-1 = 1$ y por lo tanto $(-1)^i = 1$ para cualquier i .



Figura 3.3: Números de Betti en el círculo, la esfera de dimensión dos y el toro de dimensión dos. Las curvas azules en el toro representan dos ciclos independientes cuya clase de homología es una base para el grupo de homología de dimensión uno.

El operador frontera satisface la siguiente propiedad fundamental:

$$\partial_{k+1} \circ \partial_{k+1} \equiv 0 \text{ para cualquier } k \geq 1.$$

en otras palabras, cualquier k -frontera es un k -ciclo, esto es, $B_k(K) \subseteq Z_k(K) \subseteq C_k(K)$. Estas nociones son ilustradas en la Figura 3.2.

Definición 3.6. (grupo de homología simplicial y números de Betti). El k -ésimo grupo de homología (simplicial) de K es el espacio cociente

$$H_k(K) = Z_k(K) / B_k(K).$$

El k -ésimo número de Betti de K es la dimensión $\beta_k(K) = \dim H_k(K)$ del espacio $H_k(K)$.

La Figura 3.3 muestra los números de Betti de algunos espacios sencillos. Dos ciclos, $c, c' \in Z_k(K)$, se dicen ser homólogos si difieren por una frontera, esto es, si existe una $(k+1)$ -cadena d tal que $c' = c + \partial_{k+1}(d)$. Dichos ciclos dan lugar al mismo elemento de H_k . En otras palabras, los elementos de $H_k(K)$ son clases de equivalencia de ciclos homólogos.

Los grupos de homología simplicial y los números de Betti son invariantes topológicas; si K, K' son dos complejos simpliciales tales que sus realizaciones geométricas son homotópicamente equivalentes, entonces sus grupos de homología son isomorfos y sus números de Betti son iguales.

La homología singular es otra noción de homología que nos permite considerar una mayor variedad de espacios topológicos. Esta definida para cualquier espacio topológico X de manera similar a la homología simplicial, excepto que el concepto de simplejo, es reemplazado por el de simplejo singular, que consiste en una función continua $\sigma : \Delta_k \rightarrow X$ donde Δ_k es el simplejo estándar de dimensión k . El espacio de las k -cadenas es el

espacio vectorial generado por los simplejos singulares k -dimensionales, y la frontera de un simplejo σ esta definida como la suma (alternante) de la restricción de σ a las caras $(k-1)$ -dimensionales de Δ_k . Algo importante acerca de la homología singular es hecho de que esta coincide con la homología simplicial cuando X es homeomorfo a la realización gemétrica de un complejo simplicial. Esto nos permite hablar acerca de la homología de un espacio topológico o un complejo simplicial, sin tener que especificar si nos referimos a la homología singular o simplicial.

Observemos que si $f : X \rightarrow Y$ es una función continua, entonces para cualquier simplejo singular $\sigma : \Delta_k \rightarrow X$ en X , se tiene que $f \circ \sigma : \Delta_k \rightarrow Y$ es un simplejo singular en Y , de aquí, deducimos que funciones continuas entre espacios topológicos inducen homomorfismos entre sus grupos de homología. En particular, si f es una equivalencia homotópica, entonces se induce un isomorfismo entre $H_k(X)$ y $H_k(Y)$ para cualquier k entero no-negativo. Por ejemplo, sea $X \subset \mathbb{R}^d$ cualquier conjunto de puntos y $r > 0$, se sigue del teorema del nervio que la r -cobertura X^r y el complejo de Čech $Cech_r(X)$ tienen grupos de homología isomorfos y los mismos números de Betti.

Además de esto, tenemos como consecuencia del teorema de reconstrucción 3.5 el siguiente resultado que nos auxilia en la estimación de números de Betti.

Teorema 3.7. Sea $M \subset \mathbb{R}^d$ un conjunto compacto con alcance, $\text{reach}_\alpha(d_M) \geq R > 0$ para algún $\alpha \in (0, 1)$ y sea \mathbb{X} un conjunto finito de puntos tales que:

$$d_H(M, \mathbb{X}) = \epsilon < \frac{R}{5 + 4/\alpha^2}.$$

Entonces, para cada $r \in [4\epsilon/\alpha^2, R - 3\epsilon]$ y cada $\eta \in (0, R)$, los números de Betti de $Cech_r(\mathbb{X})$ y M^η son iguales.

En particular, si M es una subvariedad suave de \mathbb{R}^d de dimensión $m \in \mathbb{Z}$, entonces $\beta_k(Cech_r(\mathbb{X})) = \beta_k(M)$ para cualquier $k = 0, \dots, m$.

Desde una perspectiva más pragmática, este resultado nos genera tres problemas: primero, la suposición de regularidad acerca del α -alcance de M puede ser demasiado restrictiva; segundo, el cálculo del nervio de la unión de bolas requiere de métodos para probar que la unión finita de bolas sea no-vacía; tercero, la estimación de números de Betti recae en la elección del parámetro r .

Para solucionar los problemas anteriores, Chazal y Oudot (2008) [32] establecieron el siguiente resultado que ofrece la solución a los primeros dos problemas.

Teorema 3.8. Sea $M \subseteq \mathbb{R}^d$ un conjunto compacto tal que $\text{wfs}(M) = \text{wfs}_{d_M}(0) \geq R > 0$ y sea \mathbb{X} un conjunto de puntos finito tal que $d_H(M, \mathbb{X}) = \epsilon < \frac{1}{9}\text{wfs}(M)$. Entonces para cualquier $r \in [2\epsilon, \frac{1}{4}(\text{wfs}(M) - \epsilon)]$ y cualquier $\eta \in (0, R)$,

$$\beta_k(X^\eta) = \text{rk}(H_k(Rips_r(\mathbb{X}))) \rightarrow H_k(Rips_{4r}(\mathbb{X}))$$

donde $\text{rk}(H_k(Rips_r(\mathbb{X}))) \rightarrow H_k(Rips_{4r}(\mathbb{X}))$ denota el rango de del homomorfismo inducido por la inclusión canónica (continua) $Rips_r(\mathbb{X}) \hookrightarrow Rips_{4r}(\mathbb{X})$.

Aunque este resultado deja abierta la elección del parámetro r , en el estudio realizado por Chazal y Oudot (2008) [32] se provee una descripción de una estrategia multiescala que ayuda a identificar las escalas relevantes en las cuales se puede aplicar el teorema anterior.

3.2. Aspectos estadísticos de la inferencia homológica

De acuerdo a los resultados de estabilidad presentados en la sección anterior, un acercamiento estadístico a la inferencia topológica se relaciona fuertemente al problema de estimación de soportes de distribuciones y estimaciones de conjuntos nivel bajo la métrica de Hausdorff. Afortunadamente se cuenta con una variedad de metodos y resultados que nos atudan a estimar el soporte de una distribución. Por ejemplo, el estimador de Devroye y Wise (Devroye y Wise 1980 [36]) definido en una muestra \mathbb{X}_n es también una cobertura particular de \mathbb{X}_n . La tasa de convergencia de \mathbb{X}_n y el estimador de Devroye y Wise al soporte de la distribución para la distancia de Hausdorff fueron estudiados por Cuevas y Rodriguez-Casal (2004) [34] en \mathbb{R}^d . Recientemente, las tasas de convergencia minimax de estimación de variedades bajo la metrica de Hausdorff, particularmente relevantes para la inferencia topológica, fueron estudiadas por Genovese et al. (2012) [44]. También existe literatura acerca de la estimacion de los conjuntos de nivel en varias métricas (vease, por ejemplo, Cadre, 2006 [15]; Polonik, 1995 [60]; Tsybakov, 1997 [69]) y, particularmente, para la métrica de Hausdorff Chen et al. (2017) [33]. Todos estos trabajos acerca de la estimación de soportes y conjuntos nivel, dan lugar al análisis estadístico de procesos de inferencia topológica.

En el estudio por Nigoyi et al (2008) [56], se muestra que el tipo de homotopía de variedades Riemannianas con alcance mayor que cierta constante puede ser recuperado con una alta probabilidad de las coberturas de una muestra en (o bien, cerca) de la variedad en cuestión. Este articulo fue probablemente el primer intento de considerar la inferencia topológica en términos de probabilidad. El estudio por Nigoyi et al.[56] derivo de un argumento de contracción de retracts y utilizó cotas estrechas sobre el número de cobertura de la variedad para controlar la distancia de Hausdorff entre la variedad y la nube de puntos observada. La inferencia homológica en el caso de ruido presente, esto es, en el sentido de que la distribución de la observación se concentra alrededor de la variedad, también fue estudiado por Nigoyi et al. (2008) [56], Nigoyi et al. (2011) [56]. La suposición de que el objeto geométrico es una variedad Riemanniana suave solo es usada en el artículo para controlar la distancia de Hausdorff entre la muestra y la variedad y no es realmente necesaria para la “parte topológica” del resultado, el cual es similar a aquellos en los estudios por Chazal et al. (2009) [24], Chazal y Lieutier (2008) [30] en el entorno particular de las variedades Riemannianas. Empezando por el resultado del estudio por Nigoyi et al. (2008) [56], las tasas de convergencia minimax del tipo de homología han sido estudiadas por Balakrishnan et al, (2012) [4] bajo varios modelos de variedades Riemannianas con alcance más grande que cierta constante. En contraste, no se ha propuesto una versión estadística del trabajo por Chazal et al. (2009) [24].

Más recientemente, siguiendo las ideas encontradas en Nigoyi et al. (2008) [56], Bobrowski et al (2014) [6] se ha propuesto un robusto estimador homológico para los conjuntos de nivel de funciones de densidad y regresión, por medio de considerar la inclusión entre pares anidados de conjuntos de nivel estimados obtenidos mediante un estimador del kernel.

3.3. Más allá de la Distancia de Hausdorff: Distancia a una Medida

Es bien sabido que los métodos del ATD fallan rotundamente en presencia de puntos aislados, añadir un solo punto aislado al conjunto de datos puede alterar la función distancia de manera dramática (ver Figura 3.4). Como respuesta a esto, Chazal et al. (2011) [27] introdujeron una función distancia alternativa la cual es resistente ante el ruido, la distancia a una medida.

Dada una distribución de probabilidad P en \mathbb{R}^d y un parámetro real $0 \leq U \leq 1$, la noción de distancia al soporte de P puede ser generalizada como la función

$$\delta_{P,u} : x \in \mathbb{R}^d \mapsto \inf t > 0 : P(B(x, t)) \geq u$$

donde $B(x, t)$ es la bola cerrada (Euclideana) con centro en x y radio t . Para evitar problemas de discontinuidad con la función $P \rightarrow \delta_{P,u}$, la función distancia a la medida (DAM) con parámetro $m \in [0, 1]$ y potencia $r \geq 1$ esta definida como

$$d_{P,m,r}(x) : x \in \mathbb{R}^d \mapsto \left(\frac{1}{m} \int_0^m \delta_{P,u}^r(x) du \right)^{\frac{1}{r}} \quad (3.1)$$

Una propiedad deseable de las DAM demostrada por Chazal et al. (2011)[27] es la estabilidad con respecto a las perturbaciones de P en la métrica de Wasserstein, más precisamente, la función $P \rightarrow d_{P,m,r}$ es $m^{-\frac{1}{r}}$ -Lipschitz, esto es, si P y \tilde{P} son dos distribuciones de probabilidad en \mathbb{R}^d , entonces

$$\|d_{P,m,r} - d_{\tilde{P},m,r}\|_{\infty} \leq m^{-\frac{1}{r}} W_r(P, \tilde{P}) \quad (3.2)$$

donde W_r es la distancia de Wasserstein para la métrica Euclidiana en \mathbb{R}^d , con exponente r^4 . Esta propiedad implica que la DAM asociada con distribuciones cercanas en la métrica de Wasserstein tienen conjuntos subnivel cercanos. Más aún, cuando $r = 2$, la función $d_{P,m,2}^2$ es semiconcava, lo cual asegura fuertes propiedades de regularidad en la geometría de sus subniveles. Usando estas propiedades, Chazal et al. (2011) [27] mostró que bajo suposiciones generales, si \tilde{P} es una distribución de probabilidad que aproxima a P , así los conjuntos subnivel de $d_{\tilde{P},m,2}$ proveen una aproximación topológicamente correcta al soporte de P .

En la práctica, la medida P usualmente solo es conocida a través de un conjunto finito de observaciones $\mathbb{X}_n = \{X_1, \dots, X_n\}$ muestreada desde P , dando lugar a la pregunta de una aproximación a la DAM. Una idea natural para estimar la DAM desde \mathbb{X}_n es utilizar la medida empírica P_n en lugar de P en la definición de la DAM. Esto corresponde al computo de la distancia \tilde{A} la medida empírica (DAME). Para $m = \frac{k}{n}$, la DAME satisface

$$d_{P_n, k/n, r}^r(x) := \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \|x - \mathbb{X}_n\|_{(j)}^r$$

donde $\|x - \mathbb{X}_n\|_{(j)}$ denota la distancia entre x y su j -ésima vecindad en $\{X_1, \dots, X_n\}$. Esta cantidad es fácil de calcular en la práctica ya que solo requiere de distancias entre x y los puntos de la muestra. La convergencia de las DAME a las DAM ha sido estudiada por Chazal et al. (2017)[21] y Chazal et al (2016)[31].

⁴Ver Villiani (2003)[14] para la definición de distancia de Wasserstein

La introducción de las DAM a motivado trabajos y aplicaciones en diferentes direcciones tales como el análisis topológico de datos (Buchet et al., 2015[12]), análisis de trazas GPS (Chazal et al., 2011 [22]), estimación de densidad (Biau et al., 2011 [5]), pruebas de hipótesis (Brécheteau, 2019 [8]), y agrupamiento (Chazal et al., 2013 [28]), solo para nombrar algunos. También se han tomado en consideración, aproximaciones, generalizaciones, y variantes de las DAM (Guibas et al., 2013 [46]; Phillips et al., 2014 [58]; Buchet et al., 2015 [13]; Brécheteau y Levrard, 2020 [9]).



Figura 3.4: Efectos de los puntos aislados en los conjuntos subnivel de las funciones distancia. Añadir unos pocos puntos aislados a la nube puede alterar dramáticamente la función distancia y la topología de sus coberturas.

Capítulo 4

Homología Persistente

La homología persistente es una herramienta poderosa que es usada para el computo, estudio y codificación multiescala de propiedades topológicas de familias anidadas de complejos simpliciales y espacios topológicos. No solo provee algoritmos eficientes para calcular los números de Betti de cada complejo en las familias consideradas, como se requiere para la inferencia homológica cubierta en la sección anterior, sino que también codifica la evolución de los grupos de homología de los complejos anidados a través de las escalas. Ideas y resultados preliminares que culminan en la teoría de la homología persistente pueden ser encontrados desde antes del siglo XXI, en particular en los trabajos de Barannikov (1994) [10], Frosini (1992) [43], Robins (1999) [63]; pero su desarrollo en su forma moderna se concreto en los trabajos de Edelsbrunner et al. (2002) [40] y Zomorodian y Carlsson (2005) [74].

4.1. Filtraciones

Una filtración de un complejo simplicial K es una familia anidada de subcomplejos $(K_r)_{r \in T}$, donde $T \subseteq \mathbb{R}$, tal que para cualquier $r, r' \in T$, si $r \leq r'$ entonces $K_r \subseteq K_{r'}$ y $K = \bigcup_{r \in T} K_r$. El subconjunto T puede ser finito o infinito. En general, una filtración de un espacio topológico \mathbb{M} es una familia anidada de subespacios $(M_r)_{r \in T}$, donde $T \subseteq \mathbb{R}$, tal que para cualquier $r, r' \in T$, si $r \leq r'$ entonces $M_r \subseteq M_{r'}$ y $M = \bigcup_{r \in T} M_r$. Por ejemplo, si $f : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función, entonces la familia $M_r = f^{-1}((-\infty, r])$, $r \in \mathbb{R}$ define una filtración llamada la filtración del conjunto subnivel de f .

En la práctica, el parámetro $r \in T$ suele ser interpretado como un parámetro de escala, y las filtraciones comúnmente usadas en el ATD suelen pertenecer a uno de los siguientes dos tipos.

Filtraciones Sobre Datos

Dado un subconjunto \mathbb{X} de un espacio métrico compacto (M, ρ) , las familias de complejos de Vietoris-Rips $(Rips_r(\mathbb{X}))_{r \in \mathbb{R}}$ y los complejos de Čech $(Cech_r(\mathbb{X}))_{r \in \mathbb{R}}$ son filtraciones¹. Aquí, el parámetro r puede ser interpretado como la resolución con la que se considera el conjunto de datos \mathbb{X} . Por ejemplo, si \mathbb{X} , es una nube de puntos en \mathbb{R}^d , gracias al teorema del nervio, la filtración $(Cech_r(\mathbb{X}))_{r \in \mathbb{R}}$ codifica la topología de todo la familia de

¹Aquí consideramos $Rips_r(\mathbb{X}) = Cech_r(\mathbb{X}) = \emptyset$, si $r < 0$

uniones de bolas $\mathbb{X}^r = \cup_{x \in \mathbb{X}} B(x, r)$, cuando $0 < r < \infty$. Como la noción de filtración es algo flexible, se han considerado muchas otras filtraciones en la literatura para ser construidas sobre los datos, como el complejo testigo popularizado en el ATD por De Silva y Carlsson (2004)[65], las filtraciones de Rips con peso Buchet et al. (2015)[13], o las filtraciones DTM Anai et al. (2019)[3] que nos permiten trabajar con conjuntos de datos con ruido o con datos atípicos.

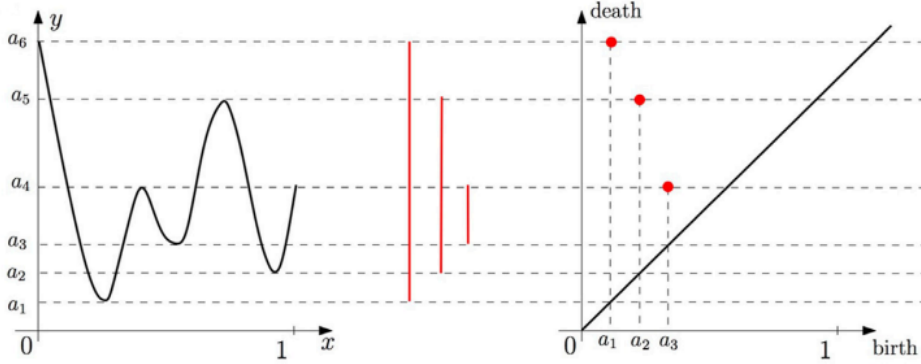


Figura 4.1: El código de barras de persistencia y el diagrama de persistencia de la función $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$.

Filtraciones de Conjuntos Subnivel

Definir funciones en los vértices de un complejo simplicial da lugar a otro importante ejemplo de filtración: sea K el complejo simplicial con el conjunto de vértices V y $f : V \rightarrow \mathbb{R}$. Entonces f puede ser extendida a todos los simplices de K definiendo $f([v_0, \dots, v_k]) = \max \{f(v_i) : i = 1, \dots, k\}$ para cualquier simplejo $\sigma = [v_0, \dots, v_k] \in K$ y la familia de subcomplejos, $K_r = \{\sigma \in K : f(\sigma) \leq r\}$, define una filtración llamada la filtración del conjunto subnivel de f . La filtración del conjunto sobre-nivel de f se define de manera similar.

En la práctica, incluso si el índice del conjunto es infinito, todas las filtraciones consideradas son construidas en conjuntos finitos y son, en si, finitas. Por ejemplo, cuando \mathbb{X} es finito, el complejo de Vietoris-Rips $Rips_r(\mathbb{X})$ cambia solo en un numero finito de índices, r . Esto nos permite manejarlos de manera sencilla desde una perspectiva algebraica.

4.2. Algunos Ejemplos

Dada una filtración $Filt = (F_r)_{r \in T}$ de un complejo simplicial o un espacio topológico, la homología de F_r cambia cuando r incrementa; pueden aparecen nuevos componentes conexos y algunos ya existentes pueden unirse, aros y cavidades pueden formarse o llenarse, etc. La homología persistente registra estos cambios, identifica las propiedades que aparecen y asocia un tiempo de vida a cada una. La información resultante se codifica como un conjunto de intervalos llamado código de barras, o bien, como un conjunto de puntos en

\mathbb{R}^2 donde la coordenada de cada punto es el punto de inicio y final de cada intervalo correspondiente.

Antes de dar una definición formal, ilustraremos el concepto de homología persistente con unos ejemplos.

Ejemplo 1

Sea $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ la función de la Figura 4.1, y sea $F_r = f^{-1}((-\infty, r))_{r \in \mathbb{R}}$ la filtración del conjunto subnivel de f . Todos los conjuntos subnivel de f son o bien vacíos o la unión de intervalos, así que la única información topológica no-trivial que brindan es su homología cero dimensional, esto es, su número de componentes conexas. Para $r < a_1$, F_r es vacío, pero para $r = a_1$, aparecen un primer componente conexo en F_{a_1} . La homología persistente registra a_1 como la “fecha de nacimiento” de una componente conexa la codifica como un intervalo que comienza en a_1 . Luego, F_r permanece conexo hasta que r toma el valor de a_2 donde una segunda componente conexa aparece. La homología persistente registra esta nueva componente conexa creando un segundo intervalo que comienza en a_2 . De manera similar, cuando r alcanza el valor de a_3 , una nueva componente conexa aparece y la homología persistente crea otro intervalo comenzando en a_3 . Cuando r alcanza a_4 , las dos componentes creadas en a_1 y a_3 se juntan para crear una sola componente conexa. En este paso, la homología persistente sigue la regla de que la componente que muere es la más reciente que ha aparecido en la filtración; Así, el intervalo que comenzó en a_3 termina en a_4 , y el intervalo de persistencia que codifica el tiempo de vida de la componente nacida en a_3 es creado. Cuando r alcanza a_5 , como en el caso previo la componente nacida en a_2 muere y se crea el intervalo (a_2, a_5) . El intervalo creado en a_1 permanece hasta el final de la filtración, dando lugar al intervalo (a_1, a_6) si la filtración se detiene en a_6 , o bien, (a_1, ∞) si r tiende a $+\infty$ (en cuyo caso la filtración se mantiene constante para $r > a_6$). El conjunto de intervalos obtenidos que codifican el tiempo de vida de diferentes características homológicas a lo largo de la filtración es llamado el código de barras de persistencia de f . Cada intervalo (a, a') puede ser representado en el plano \mathbb{R} por el punto (a, a') . El conjunto de puntos resultante es llamado el diagrama de persistencia de f . Es de notar que la función puede tener múltiples copias del mismo intervalo en su código de barras de persistencia. Como consecuencia, el diagrama de persistencia de f es un multiconjunto donde cada punto tiene una multiplicidad entera asociada. Finalmente, por razones técnicas que serán claras más adelante, se añaden al diagrama de persistencia todos los puntos de la diagonal $\Delta = \{(b, d) : b = d\}$ con multiplicidad infinita.

Ejemplo 2

Inicio EJ2

Apéndices

Apéndice A

Cosas que no deberían ir en el texto principal

Un apéndice, por qué no?!

Bibliografía

- [1] 8. *Tensor Decomposition*, pages 91–100. 2007.
- [2] E. Aamari, J. Kim, F. Chazal, B. Michel, A. Rinaldo, and L. Wasserman. Estimating the reach of a manifold. *Electronic Journal of Statistics*, 13(1):1359 – 1399, 2019.
- [3] H. Anai, F. Chazal, M. Glisse, Y. Ike, H. Inakoshi, R. Tinarrage, and Y. Umeda. Dtm-based filtrations. In N. A. Baas, G. E. Carlsson, G. Quick, M. Szymik, and M. Thaule, editors, *Topological Data Analysis*, pages 33–66, Cham, 2020. Springer International Publishing.
- [4] S. Balakrishnan, A. Rinaldo, D. Sheehy, A. Singh, and L. Wasserman. Minimax rates for homology inference. In N. D. Lawrence and M. Girolami, editors, *Proceedings of the Fifteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, volume 22 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 64–72, La Palma, Canary Islands, 21–23 Apr 2012. PMLR.
- [5] G. Biau, F. Chazal, D. Cohen-Steiner, L. Devroye, and C. Rodríguez. A weighted k -nearest neighbor density estimate for geometric inference. *Electronic Journal of Statistics*, 5(none):204 – 237, 2011.
- [6] O. Bobrowski, S. Mukherjee, and J. E. Taylor. Topological consistency via kernel estimation. *Bernoulli*, 23(1), feb.
- [7] J.-D. Boissonnat, F. Chazal, and M. Yvinec. *Geometric and Topological Inference*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2018.
- [8] C. Brécheteau. A statistical test of isomorphism between metric-measure spaces using the distance-to-a-measure signature. *Electronic Journal of Statistics*, 13(1):795–849, 2019.
- [9] C. Brécheteau and C. Levrard. A k -points-based distance for robust geometric inference. *Bernoulli*, 26(4):3017 – 3050, 2020.
- [10] C. Brécheteau and C. Levrard. A k -points-based distance for robust geometric inference. *Bernoulli*, 26(4):3017 – 3050, 2020.
- [11] A. Brown, O. Bobrowski, E. Munch, and B. Wang. Probabilistic convergence and stability of random mapper graphs. *Journal of Applied and Computational Topology*, 5(1):99–140, Mar 2021.

-
- [12] M. Buchet, F. Chazal, T. K. Dey, F. Fan, S. Y. Oudot, and Y. Wang. Topological analysis of scalar fields with outliers. In *Proc. Sympos. on Computational Geometry*, 2015.
- [13] M. Buchet, F. Chazal, S. Y. Oudot, and D. R. Sheehy. *Efficient and Robust Persistent Homology for Measures*, pages 168–180.
- [14] G. BURTON. Topics in optimal transportation (graduate studies in mathematics 58) by cdric villani: 370 pp., us\$59.00, isbn 0-8218-3312-x (american mathematical society, providence, ri, 2003). *Bulletin of the London Mathematical Society*, 36:285 – 286, 03 2004.
- [15] B. Cadre. Kernel estimation of density level sets. *Journal of Multivariate Analysis*, 97(4):999–1023, 2006.
- [16] G. Carlsson and R. B. Gabrielsson. Topological approaches to deep learning. In N. A. Baas, G. E. Carlsson, G. Quick, M. Szymik, and M. Thaule, editors, *Topological Data Analysis*, pages 119–146, Cham, 2020. Springer International Publishing.
- [17] M. Carrière, M. Cuturi, and S. Oudot. Sliced Wasserstein kernel for persistence diagrams. In D. Precup and Y. W. Teh, editors, *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*, volume 70 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 664–673. PMLR, 06–11 Aug 2017.
- [18] M. Carrière and B. Michel. Statistical analysis of mapper for stochastic and multivariate filters, 2021.
- [19] M. Carrière, B. Michel, and S. Oudot. Statistical analysis and parameter selection for mapper. *Journal of Machine Learning Research*, 19(12):1–39, 2018.
- [20] M. Carrière and R. Rabadán. Topological data analysis of single-cell hi-c contact maps. In N. A. Baas, G. E. Carlsson, G. Quick, M. Szymik, and M. Thaule, editors, *Topological Data Analysis*, pages 147–162, Cham, 2020. Springer International Publishing.
- [21] F. Chazal. High-Dimensional Topological Data Analysis. In *3rd Handbook of Discrete and Computational Geometry*. CRC Press, 2016.
- [22] F. Chazal, D. Chen, L. Guibas, X. Jiang, and C. Sommer. Data-driven trajectory smoothing. In *Proceedings of the 19th ACM SIGSPATIAL International Conference on Advances in Geographic Information Systems*, GIS ’11, pages 251–260, New York, NY, USA, 2011. Association for Computing Machinery.
- [23] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, and A. Lieutier. Normal cone approximation and offset shape isotopy. *Computational Geometry*, 42(6):566–581, 2009.
- [24] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, and A. Lieutier. A sampling theory for compact sets in euclidean space. *Discrete & Computational Geometry*, 41(3):461–479, Apr 2009.
- [25] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, A. Lieutier, and B. Thibert. Stability of Curvature Measures. *Computer Graphics Forum*, 2009.

-
- [26] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, and Q. Mérigot. Boundary measures for geometric inference. *Foundations of Computational Mathematics*, 10(2):221–240, Apr 2010.
 - [27] F. Chazal, D. Cohen-Steiner, and Q. Mérigot. Geometric inference for probability measures. *Foundations of Computational Mathematics*, 11(6):733–751, Dec 2011.
 - [28] F. Chazal, L. J. Guibas, S. Y. Oudot, and P. Skraba. Persistence-based clustering in riemannian manifolds. *J. ACM*, 60(6), nov 2013.
 - [29] F. Chazal, R. Huang, and J. Sun. Gromov–hausdorff approximation of filamentary structures using reeb-type graphs. *Discrete & Computational Geometry*, 53(3):621–649, Apr 2015.
 - [30] F. Chazal and A. Lieutier. Smooth manifold reconstruction from noisy and non-uniform approximation with guarantees. *Computational Geometry*, 40(2):156–170, 2008.
 - [31] F. Chazal, P. Massart, and B. Michel. Rates of convergence for robust geometric inference. *Electronic Journal of Statistics*, 10(2):2243–2286, 2016.
 - [32] F. Chazal and S. Y. Oudot. Towards persistence-based reconstruction in euclidean spaces. In *Proceedings of the Twenty-Fourth Annual Symposium on Computational Geometry*, SCG ’08, pages 232–241, New York, NY, USA, 2008. Association for Computing Machinery.
 - [33] Y.-C. Chen, C. R. Genovese, and L. Wasserman. Density level sets: Asymptotics, inference, and visualization. *Journal of the American Statistical Association*, 112(520):1684–1696, 2017.
 - [34] A. Cuevas and A. Rodríguez-Casal. On boundary estimation. *Advances in Applied Probability*, 36(2):340–354, 2004.
 - [35] V. de Silva and R. Ghrist. Homological sensor networks. 2007.
 - [36] L. Devroye and G. L. Wise. Detection of abnormal behavior via nonparametric estimation of the support. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 38(3):480–488, 1980.
 - [37] T. K. Dey, F. Memoli, and Y. Wang. Topological analysis of nerves, reeb spaces, mappers, and multiscale mappers, 2017.
 - [38] T. K. Dey, F. MÃ©moli, and Y. Wang. *Multiscale Mapper: Topological Summarization via Codomain Covers*, pages 997–1013.
 - [39] M. Dindin, Y. Umeda, and F. Chazal. Topological data analysis for arrhythmia detection through modular neural networks. In C. Goutte and X. Zhu, editors, *Advances in Artificial Intelligence*, pages 177–188, Cham, 2020. Springer International Publishing.
 - [40] Edelsbrunner, Letscher, and Zomorodian. Topological persistence and simplification. *Discrete & Computational Geometry*, 28(4):511–533, Nov 2002.
 - [41] B. T. Fasy, J. Kim, F. Lecci, and C. Maria. Introduction to the R package TDA. *CoRR*, abs/1411.1830, 2014.

-
- [42] H. Federer. Curvature measures. *Transactions of the American Mathematical Society*, 93(3):418–491, 1959.
 - [43] P. Frosini. Measuring shapes by size functions. In D. P. Casasent, editor, *Intelligent Robots and Computer Vision X: Algorithms and Techniques*, volume 1607, pages 122 – 133. International Society for Optics and Photonics, SPIE, 1992.
 - [44] C. R. Genovese, M. Perone-Pacifico, I. Verdinelli, and L. Wasserman. Manifold estimation and singular deconvolution under Hausdorff loss. *The Annals of Statistics*, 40(2):941 – 963, 2012.
 - [45] R. Ghrist. Homological algebra and data. *IAS/Park City Mathematics Series*, 2018.
 - [46] L. Guibas, D. Morozov, and Q. Mérigot. Witnessed k-distance. *Discrete & Computational Geometry*, 49(1):22–45, Jan 2013.
 - [47] A. Hatcher. *Algebraic topology*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
 - [48] F. Hensel, M. Moor, and B. Rieck. A survey of topological machine learning methods. *Frontiers in Artificial Intelligence*, 4, 2021.
 - [49] F. A. Khasawneh and E. Munch. Chatter detection in turning using persistent homology. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 70-71:527–541, 2016.
 - [50] M. Kramar, A. Goulet, L. Kondic, and K. Mischaikow. Persistence of force networks in compressed granular media. *Phys. Rev. E*, 87:042207, Apr 2013.
 - [51] Y. Lee, S. D. Barthel, P. Dłotko, S. M. Moosavi, K. Hess, and B. Smit. Quantifying similarity of pore-geometry in nanoporous materials. *Nature Communications*, 8(1):15396, May 2017.
 - [52] M. Z. Li, M. S. Ryerson, and H. Balakrishnan. Topological data analysis for aviation applications. *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, 128:149–174, 2019.
 - [53] P. Y. Lum, G. Singh, A. Lehman, T. Ishkanov, M. Vejdemo-Johansson, M. Alagappan, J. Carlsson, and G. Carlsson. Extracting insights from the shape of complex data using topology. *Scientific Reports*, 3(1):1236, Feb 2013.
 - [54] C. Maria, J.-D. Boissonnat, M. Glisse, and M. Yvinec. The gudhi library: Simplicial complexes and persistent homology. In H. Hong and C. Yap, editors, *Mathematical Software – ICMS 2014*, pages 167–174, Berlin, Heidelberg, 2014. Springer Berlin Heidelberg.
 - [55] T. Nakamura, Y. Hiraoka, A. Hirata, E. G. Escobar, and Y. Nishiura. Persistent homology and many-body atomic structure for medium-range order in the glass. *Nanotechnology*, 26(30):304001, jul year.
 - [56] P. Niyogi, S. Smale, and S. Weinberger. Finding the homology of submanifolds with high confidence from random samples. *Discrete & Computational Geometry*, 39(1):419–441, Mar 2008.
 - [57] A. Petrunin. *Applied Manifold Geometry*, pages 137–483. World Scientific, 2007.

-
- [58] J. M. Phillips, B. Wang, and Y. Zheng. Geometric inference on kernel density estimates, 2013.
- [59] J. A. Pike, A. O. Khan, C. Pallini, S. G. Thomas, M. Mund, J. Ries, N. S. Poulter, and I. B. Styles. Topological data analysis quantifies biological nano-structure from single molecule localization microscopy. *Bioinformatics*, 36(5):1614–1621, 10 2019.
- [60] W. Polonik. Measuring Mass Concentrations and Estimating Density Contour Clusters-An Excess Mass Approach. *The Annals of Statistics*, 23(3):855 – 881, 1995.
- [61] T. Qaiser, Y.-W. Tsang, D. Taniyama, N. Sakamoto, K. Nakane, D. Epstein, and N. Rajpoot. Fast and accurate tumor segmentation of histology images using persistent homology and deep convolutional features. *Medical Image Analysis*, 55:1–14, 2019.
- [62] B. Rieck, T. Yates, C. Bock, K. Borgwardt, G. Wolf, N. Turk-Browne, and S. Krishnaswamy. Uncovering the topology of time-varying fmri data using cubical persistence. *Advances in neural information processing systems*, 33, 2020.
- [63] V. Robins. Towards computing hology from finite approximations. *Topology Proceedings*, 24:503–532, 1999.
- [64] L. M. Seversky, S. Davis, and M. Berger. On time-series topological data analysis: New data and opportunities. In *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops (CVPRW)*, pages 1014–1022, 2016.
- [65] V. d. Silva and G. Carlsson. Topological estimation using witness complexes. In M. Gross, H. Pfister, M. Alexa, and S. Rusinkiewicz, editors, *SPBG'04 Symposium on Point - Based Graphics 2004*. The Eurographics Association, 2004.
- [66] A. E. Sizemore, J. E. Phillips-Cremins, R. Ghrist, and D. S. Bassett. The importance of the whole: Topological data analysis for the network neuroscientist. *Network Neuroscience*, 3(3):656–673, 07 2019.
- [67] P. Skraba, M. Ovsjanikov, F. Chazal, and L. Guibas. Persistence-based segmentation of deformable shapes. In *2010 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition - Workshops*, pages 45–52, 2010.
- [68] A. D. Smith, P. Dlotko, and V. M. Zavala. Topological data analysis: Concepts, computation, and applications in chemical engineering. *Computers & Chemical Engineering*, 146:107202, 2021.
- [69] A. B. Tsybakov. On nonparametric estimation of density level sets. *The Annals of Statistics*, 25(3):948 – 969, 1997.
- [70] K. Turner, S. Mukherjee, and D. M. Boyer. Persistent homology transform for modeling shapes and surfaces. *Information and Inference: A Journal of the IMA*, 3(4):310–344, 12 2014.
- [71] Y. Umeda. Time series classification via topological data analysis. *Transactions of the Japanese Society for Artificial Intelligence*, 32(3):D–G72.1–12, 2017.
- [72] L. Wasserman. Topological data analysis. *Annual Review of Statistics and Its Application*, 5(1):501–532, 2018.

-
- [73] Y. Yao, J. Sun, X. Huang, G. R. Bowman, G. Singh, M. Lesnick, L. J. Guibas, V. S. Pande, and G. Carlsson. Topological methods for exploring low-density states in biomolecular folding pathways. *The Journal of Chemical Physics*, 130(14):144115, 2009.
- [74] A. Zomorodian and G. Carlsson. Computing persistent homology. *Discrete & Computational Geometry*, 33(2):249–274, Feb 2005.