2.4 パーシステンス図の計算アルゴリズム

以下の仮定をする。

仮定 添字集合 R として $\{0,1,\cdots,N\}$ を考え、空集合から1つずつセルが増えていくフィルトレーションを考える。すなわち、$\{\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_N\}$ という N 個のセルからなるセル複体を考え、

$$K_0 = \phi$$
$$K_r = \{\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r\} \quad (r=1,2,\cdots,N)$$

というフィルトレーションを考える。(K_r は K_N の部分複体となるようにする)

$\boxed{\text{記号}}$ $r=0,\cdots,N$ に対して、次の記号を導入する。($M := \dim K_N$)

$$\partial_n^{(r)} : C_n(K_r) \longrightarrow C_{n-1}(K_r)$$
$$C(K_r) := C_0(K_r) \oplus C_1(K_r) \oplus \cdots \oplus C_M(K_r) \quad (\text{lin.sp})$$
$$\partial^{(r)} := \bigoplus_{n=0}^{M} \partial_n^{(r)} : C(K_r) \to C(K_r) \quad (\text{lin.map})$$
$$Z(K_r) := \ker \partial^{(r)} \left(= \bigoplus_{n=0}^{M} Z_n(K_r) \right)$$
$$B(K_r) := \mathrm{Im}\, \partial^{(r)} \left(= \bigoplus_{n=0}^{M} B_n(K_r) \right) \qquad B_M(K_r) = 0 \quad (C_{M+1}(K_r) = 0 \text{ より})$$
$$H(K_r) = Z(K_r) / B(K_r) = \bigoplus_{n=0}^{M} H_n(K_r)$$

アルゴリズム1

$B \leftarrow \partial^{(N)} : C(K_N) \to C(K_N)$ の基底 $\{\sigma_1,\cdots,\sigma_N\}$ による表現行列

for $j = 1,2,\cdots,N$ do (LOOP1)

  while $i<j$ で、$L(i,B) = L(j,B) \neq -\infty$ となる i が存在する do (LOOP2)

    B の i 列を j 列に加える。(REDUCE)

return B

ここで、$L(B_0,j) = \begin{cases} \max\{i \mid (B_0)_{ij} \neq 0\} & (j\text{列が }0\text{ でない}) \\ -\infty & (j\text{列が }0) \end{cases}$

$\xrightarrow{\text{出力 } \hat{B}}$ $L(j) := L(\hat{B},j)$ で定めると、パーシステンス図は、次のようにして得られる。

$$\{(L(j),j) : L(j) \neq -\infty\} \cup \{(j,\infty) : L(j) = -\infty \text{ かつ } {}^{\forall} i,\ L(i) \neq j\}$$

---

proof は、以下の2つの claim を示すことでなされる;

<u>claim 2.4.3</u> アルゴリズム1は有限のステップで停止する。

<u>claim 2.4.4</u> アルゴリズム1の出力 $\hat{B}$ から、F, F', E を次のように def

$F := \{j \mid L(j) \neq -\infty\}$, $F' := \{L(j) \mid j \in F\}$, $E := \{j \mid L(j) = -\infty\} \setminus F'$

このとき、F, F', E は $\{1,\cdots,N\}$ の共通部分をもたない分割となり、次の条件(1)-(3)を満たすような $C(K_N)$ の基底 $\{\tilde{\sigma}_1,\cdots,\tilde{\sigma}_N\}$ が存在する。;

(1) すべての $1 \leq r \leq N$ に対して、$\{\tilde{\sigma}_1,\cdots,\tilde{\sigma}_r\}$ は $C(K_r)$ の基底である。

(2) L は F から F' への全単射で、すべての $j \in F$ に対して、$\partial^{(N)}\tilde{\sigma}_j = \hat{\sigma}_{L(j)}$ — (2.9)

(3) すべての $i \in F' \sqcup E$ に対して $\partial^{(N)}\tilde{\sigma}_i = 0$

claim 2.4.4 から $Z(K_r)$ と $B(K_r)$ の基底は、$\{\tilde{\sigma}_1, \cdots, \tilde{\sigma}_N\}$ によって次のように表せる。

$Z(K_r) : \{\tilde{\sigma}_i : i \in F' \sqcup E,\ 1 \leq i \leq r\}$

$B(K_r) : \{\tilde{\sigma}_{L(j)} : j \in F,\ 1 \leq j \leq r\}$

∵ $\{1, \cdots, r\}$ を F, F', E によって共通部分なく分割される。

(3)より、$j \in F' \sqcup E,\ 1 \leq j \leq r$ なら $\partial^{(r)} \tilde{\sigma}_j = 0$

$\forall j \in F,\ 1 \leq j \leq r$ に対して $\partial^{(r)} \tilde{\sigma}_j = 0$ とすると、

(2)より、 $0 = \partial^{(r)} \tilde{\sigma}_j = \tilde{\sigma}_{L(j)}$

となり、$C(K_N)$ の基底にゼロベクトルが含まれることになり矛盾。

∴ $C(K_r)$ の基底 $\{\tilde{\sigma}_1, \cdots, \tilde{\sigma}_N\}$ の中で $Z(K_r)$ の元は、$\{\tilde{\sigma}_j : j \in F' \sqcup E,\ 1 \leq j \leq r\}$ のみ。

→ $\{\tilde{\sigma}_j : j \in F' \sqcup E,\ 1 \leq j \leq r\}$ が $Z(K_r)$ の基底

更に、(2)より $\forall j \in F$, $\partial^{(r)} \underbrace{\tilde{\sigma}_j}_{} = \tilde{\sigma}_{L(j)}$

定義域 $C(K_r)$ に含まれる必要がある。

(1)より $\tilde{\sigma}_j \in C(K_r)$ になる最小の r は j

∴ $\{\tilde{\sigma}_j : j \in F' \sqcup E,\ 1 \leq j \leq r\}$ の中で、$B(K_r)$ の元であるのは、

$\{\tilde{\sigma}_{L(j)} : j \in F,\ 1 \leq j \leq r\}$ である。

→ $\{\tilde{\sigma}_{L(j)} : j \in F,\ 1 \leq j \leq r\}$ が $B(K_r)$ の基底。

$H(K_r)$ の基底は、

$\{[\sigma_i]_r : i \in F' \sqcup E \setminus \{L(j) : j \in F,\ 1 \leq j \leq r\},\ 1 \leq i \leq r\}$

$\{\tilde{\sigma}_i \mid i \in F' \sqcup E\}$ を構造定理のチェインとして選ぶ。

$i \in E$ に対して $\tilde{\sigma}_i$ のホモロジー類は、$H(K_i)$ で発生して $H(K_N)$ まで生き延びる。

一方、$j \in F$ に対応する $\tilde{\sigma}_{L(j)}$ のホモロジー類は $H(K_{L(j)})$ で発生して $H(K_j)$ で消滅する。

→ パーシステンス図は

$$\{(L(j), j) : j \in F\} \cup \{(i, \infty) : i \in E\}$$

(proof)

claim 2.4.3 について、(LOOP2) の $L(B_j)$ は正の整数もしくは $-\infty$ で、(REDUCE) を適用するごとに必ず小さくなるため、いずれ (LOOP2) が停止する。

claim 2.4.4 を証明する。

まず、(REDUCE) を実現するには、次の行列 R_{ij} を B に右からかける：

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ O & & & \ddots \end{pmatrix}$$

B の初期状態、つまり $\partial^{(N)}$ の $\{\sigma_1, \cdots, \sigma_N\}$ による表現行列を B_0 とすると、出力 $\hat{B}$ は、

$$\hat{B} = B_0 R_{i_1 j_1} R_{i_2 j_2} \cdots R_{i_s j_s}$$

と表される。（ここで、B_0 は正則とは限らず、$j_1, j_2, \cdots, j_s$ には同じものもあるかもしれない）

$U := R_{i_1 j_1} R_{i_2 j_2} \cdots R_{i_s j_s}$ とおくと，Uは上三角行列である。R_{ij}の対角成分がすべて1なので，Uもそうである。よって，Uは正則行列で，U^{-1}は対角成分がすべて1の上三角行列となる。

$\hat{B} = B_0 U$ とかけている。

基底$\{\sigma_1,\dots,\sigma_N\}$から基底変換行列を$U$とする基底変換によって得られる基底を$\{\hat\sigma_1,\dots,\hat\sigma_N\}$とかく。

∵ $E = \{\sigma_1,\dots,\sigma_N\}$, $F = \{\hat\sigma_1,\dots,\hat\sigma_N\}$, $V := C(K_N)$

$$\begin{tikzcd} & \mathbb{R}^N \\ V \arrow[ur, "\varphi_E"] \arrow[dr, "\psi_F"'] \arrow[r, phantom, "\circlearrowright"] & \\ & \mathbb{R}^N \arrow[uu, "U"'] \end{tikzcd}$$

$$U\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \varphi_E \circ \psi_F^{-1}\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{aligned} v &= x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + \cdots + x_N\sigma_N \\ &= y_1\hat\sigma_1 + y_2\hat\sigma_2 + \cdots + y_N\sigma_N \end{aligned} \right)$$

Uが対角成分が1の上三角行列より$\{\hat\sigma_1,\hat\sigma_2,\dots,\hat\sigma_r\}$は$C(K_r)$の基底である$(r=1,2,\dots,N)$

∵ $U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1N} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2N} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & u_{NN} \end{pmatrix}$ とおくと，$\hat\sigma_i = \sum_{j=1}^{i} u_{ji}\sigma_j$ $(i=1,2,\dots,N)$

$$\alpha_1\hat\sigma_1 + \cdots + \alpha_N\hat\sigma_N = 0$$

$$\alpha_1(u_{11}\sigma_1) + \cdots + \alpha_N\sum_{j=1}^{N} u_{jN}\sigma_j \qquad u_{N-1,N-1}\alpha_{N-1} + u_{N-1N}\alpha_N$$

$$(\alpha_1 u_{11} + \alpha_2 u_{12} + \cdots + \alpha_N \alpha_{1N})\sigma_1 + \cdots + \alpha_N u_{NN}\sigma_N = 0$$

$u_{jj} = 1$ $(j=1,2,\dots,N)$ より $\alpha_N = 0$.

どんどん $\alpha_{N-1} = 0$, … がわかる.

$\{\hat\sigma_1,\dots,\hat\sigma_N\}$は1次独立，他の$r$についても同様.

さらに，この基底による$\partial^{(N)}$の表現行列$\tilde B$は，$\tilde B = U^{-1}B_0U = U^{-1}\hat B$ となる。

∵
$$\begin{tikzcd} & \mathbb{R}^N \arrow[r, "B_0"] & \mathbb{R}^N & \\ \mathbb{R}^N \arrow[ur, "U"] \arrow[rrr, bend right, "\tilde B"'] & V \arrow[l, "\psi_F"'] \arrow[u, "\varphi_E"] \arrow[r, "\partial^{(N)}"'] & V \arrow[u, "\varphi_E"'] \arrow[r, "\psi_F"'] & \mathbb{R}^N \arrow[ul, "U"'] \end{tikzcd}$$

$\therefore \tilde B = U^{-1}B_0U = U^{-1}\hat B$

すると，任意の行列Bに対して，$L(B,j) = L(U^{-1}B,j)$であるので，次のclaimがわかる。

∵ $$(U^{-1}B)_{ij} = \sum_{k=1}^{N} u_{ik}b_{kj} = \sum_{k=i+1}^{N} u_{ik}b_{kj} + b_{ij}$$

$L(B,j) = l$とすると，$i > l$に対して，

$$(U^{-1}B)_{ij} = \sum_{k=i+1}^{N} u_{ik}b_{kj} + b_{ij} = 0$$

$$(U^{-1}B)_{lj} = \sum_{k=l+1}^{N} u_{lk}b_{kj} + b_{lj} = 1$$

$\therefore L(B,j) = L(U^{-1}B,j)$. □

claim 2.4.5. 任意の j に対して、$L(j) = L(\hat{B}, j) = L(\hat{B}, j)$

更に、(LOOP2) の終了条件から次の主張が成り立つ.

claim 2.4.6 互いに異なる i, j が $L(i) \neq -\infty$ と $L(j) \neq -\infty$ の2条件をみたすならば、

$L(i) \neq L(j)$ となる.

claim 2.4.7 $\hat{B}$ の第 k 列が 0 でないことと、$L(k) \neq -\infty$ は同値であり、

このとき、次の2つが成り立つ.:

(1) $\tilde{B}_{L(k), k} = 1$

(2) $l > L(k)$ ならば、$\tilde{B}_{l, k} = 0$.

以下の主張が重要

claim 2.4.8 $\tilde{B}$ の第 j 列が 0 でないとき、$\hat{B}$ の第 $L(j)$ 列は 0 である.

(claim 2.4.8 の証明.)

実際、次の claim 2.4.9 を示せばいい.

claim 2.4.9 $\tilde{B}_{ij} = 1$ のとき、$\hat{B}$ の第 i 列は 0 である.

($\because$ $\hat{B}$ の j 列が 0 でないなら、$\tilde{B}_{L(j), j} = 1$.

claim 2.4.9 より $\hat{B}$ の $L(j)$ 列は 0)

以下で claim 2.4.9 を示す.

j を固定し、

$$I := \{ i \mid 1 \leq i \leq N, \tilde{B} \text{ の } i \text{ 列は } 0 \text{ でない}, \hat{B}_{ij} = 1 \}$$ とおく.

claim 2.4.9 が正しいならば、$I = \phi$ となるので、$I \neq \phi$ として矛盾を導く.

背理法の仮定より、

$$L(I) = \{ L(i) \mid i \in I \}$$

という集合の最大値を考えると、これを与える i が I に含まれる.

すると、claim 2.4.6 より、この i は I で重複しないので、この i を i_0 とあらわす.

$\tilde{B}^2$ の $(L(i_0), j)$ 成分は、$\sum_{i=1}^{N} \tilde{B}_{L(i_0), i} \tilde{B}_{ij}$ — (2.10)

この和を計算するため、$\{1, 2, \cdots, N\}$ を共通部分をもたないように分割する.:

$$\{1, 2, \cdots, N\} = I_1 \cup I_2 \cup (I \setminus \{i_0\}) \cup \{i_0\}$$

$$I_1 := \{ i \mid \tilde{B}_{ij} = 0 \}, \quad I_2 = \{ i \mid \tilde{B}_{ij} = 1 \text{ かつ } \hat{B} \text{ の } i \text{ 列は } 0 \}$$

すると、

$$\begin{aligned}
(2.10)\text{式} &= \sum_{i \in I_1} \tilde{B}_{L(i_0), i} \tilde{B}_{ij} + \sum_{i \in I_2} \tilde{B}_{L(i_0), i} \tilde{B}_{ij} + \sum_{i \in I \setminus \{i_0\}} \tilde{B}_{L(i_0), i} \tilde{B}_{ij} + \tilde{B}_{L(i_0), i_0} \tilde{B}_{i_0 j} \\
&= \sum_{i \in I \setminus \{i_0\}} \tilde{B}_{L(i_0), i} \tilde{B}_{ij} + \tilde{B}_{L(i_0), i_0} \tilde{B}_{i_0 j} \qquad (I_1, I_2 \text{ の def}) \\
&= 1 \qquad (L(i_0) \text{ の最大性と } i_0 \in I)
\end{aligned}$$

$\therefore$ $\tilde{B}^2$ の $(L(i_0), j)$ 成分は 1.

しかし、$\hat{B}$ は $\partial^{(N)}$ の $\{\hat{\sigma}_1, \cdots, \hat{\sigma}_N\}$ に関する表現行列より、$\hat{B}^2 = 0$ となり、矛盾

これより $I = \phi$ で、claim 2.4.9 が示された. ┘

claim 2.4.8 から，F, F', E を式(2.9)でdefすると，FとF'は共通部分をもたない．

(∵ $k \in F \cap F'$とすると，$\exists j \in F$ s.t. $k = L(j)$，$L(j) \neq -\infty$．
$\hat{B}$のj列は0でないから，$L(k) = L(L(j)) = -\infty$
しかし，$k \in F$より，これは矛盾．
$\therefore F \cap F' = \phi$．)

F, F', Eは$\{1,2,\cdots,N\}$を分割し，共通部分をもたない．

(∵ $\{1,2,\cdots,N\} = \{j : L(j) \neq -\infty\} \cup \{j : L(j) = -\infty\}$
$= \{j : L(j) \neq -\infty\} \cup \{j : L(j) = -\infty\} \setminus F' \cup F'$
$= F \cup F' \cup E$．)

そこで，$\tilde\sigma_1, \tilde\sigma_2, \cdots, \tilde\sigma_N$を次のようにdefする；

$$\tilde\sigma_k = \begin{cases} \hat\sigma_k & (k \in F \sqcup E) \\ \hat\sigma_k + \sum_{1 \le i < k} \tilde B_{ij} \hat\sigma_i & (k \in F' \text{かつ } j = L^{-1}(k)) \end{cases}$$

$\{\tilde\sigma_1, \tilde\sigma_2, \cdots, \tilde\sigma_N\}$がclaim 2.4.3の(1).(2).(3)をみたす．

∵ (1)について

上と同様のギロンで，$\{\tilde\sigma_1, \tilde\sigma_2, \cdots, \tilde\sigma_r\}$が$C(K_p)$の基底であることはわかる．

(2)について

Lはclaim 2.4.6より全単射．

$$\forall j \in F,\quad \partial\tilde\sigma_j = \partial\hat\sigma_j \underbrace{=}_{\hat B\text{が表現行列}} \sum_{i=1}^{L(j)-1} \tilde B_{ij} \hat\sigma_i + \hat\sigma_{L(j)}$$

$$\underbrace{\tilde\sigma_{L(j)} =}_{\mathrm{def}} \hat\sigma_{L(j)} + \sum_{i=1}^{L(j)-1} \tilde B_{ij} \hat\sigma_i$$

$$\therefore \partial\tilde\sigma_j = \tilde\sigma_{L(j)} \quad (\forall j \in F)$$

(3)について

$i \in F' \sqcup E$；

$i \in E$ならば，$\tilde\sigma_i = \hat\sigma_i$

$$\partial\tilde\sigma_i = \underbrace{\partial\hat\sigma_i = 0}_{E\text{のdefより}\hat B\text{の}i\text{列は}0}$$

$i \in F'$ならば，$\exists k \in F$ s.t. $i = L(k)$

$$\tilde\sigma_i = \hat\sigma_i + \sum_{1 \le j < i} \tilde B_{j,k} \hat\sigma_j$$

$$\partial\tilde\sigma_i = \partial\hat\sigma_i + \sum_{1 \le j < i} \tilde B_{j,k} \partial\hat\sigma_j$$

$= \sum_{1 \le j < i} \tilde B_{j,k} \partial\hat\sigma_j$ 　($k \in F$より$\hat B$のk列は0でない．claim 2.4.8より$L(k) = i$列は0)

$= 0$ 　($\tilde B_{j,k} = 1$のとき．claim 2.4.9より$\hat B$のj列は0．$\therefore \partial\hat\sigma_j = 0$)