

2 一般聚类方法

在这一章我们主要介绍一般的聚类方法，从而与持续同调方法进行一个对比。聚类（clustering）是将数据集中相似的样本进行分组的过程，每一个组称之为一个簇（cluster），注意我们事先并不知道有多少个簇。

2.1 K-means 聚类

K-means 聚类源于信号处理，它的目标是将n个样本划分到K个簇中，其中每个样本属于自己最近的簇。给定有限数据集 $S = \{x_1, \dots, x_n\} \subseteq \mathbb{R}^d$ ，引入一系列质心 $c_k \in \mathbb{R}^d$ ，我们想要为每一个样本找到一个簇，使得它与它最近的质心 c_k 之间距离的平方和最小。设

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{如果 } x_i \text{ 属于第 } k \text{ 个簇} \\ 0 & \text{其他的 } j \end{cases}$$

下面考虑目标函数：

$$J = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta_{ik} \|x_i - c_k\|^2$$

我们想要找到合适的 δ_{ik} 和 c_k 使得 J 达到最小值。具体做法就是先初始化 c_k ，然后通过调整 δ_{ik} 来最小化 J ，然后保持 δ_{ik} 固定，调整 c_k 来最小化 J 。不断重复迭代，直至收敛：由于 J 关于 δ_{ik} 是一个线性函数，并且不同的 i 的相关项是独立的，故我们可以对每个 i 进行优化，即如果 k 的取值使得 $\|x_i - c_k\|^2$ 最小，我们就令 $\delta_{ik} = 1$ ，否则就是 0。

当 δ_{ik} 固定时， J 是关于 c_k 的一个二次函数，令它的导数为 0，有：

$$\frac{\partial J}{\partial c_k} = 2 \sum_{i=1}^n \delta_{ik} (x_i - c_k) = 0$$

故

$$c_k = \frac{\sum_{i=1}^n \delta_{ik} x_i}{\sum_{i=1}^n \delta_{ik}}$$

不断重复上述过程，直到收敛为止，我们就得到了 K-means 聚类，不过，这个算法有可能会收敛到一个局部最优解。还有就是 K 值的选取对于该方法有很大的影响，或者说如何选择一个较好的 K ，也是一个问题。一般的解决办法有：

1. 通过贝叶斯信息准则（Bayesian information criterion）的统计学方法确定；
2. 从 $K = 1$ 开始，不断对簇进行聚类，直至每个簇的样本都服从高斯分布（normal distribution）。另外，离群值对它的影响也很大。

2.2 谱聚类

谱聚类方法从图割 (graph cut) 的角度来解决聚类问题。基本思路就是先建立一个带权重的无向图 $G = (V, E)$, 其中 V 的每个节点代表一个样本, E 的每条边代表两个样本之间的距离, 构成一个权重矩阵 W , 该权重矩阵的元素可以由计算每个节点与若干近邻点间距离得到。比如说令

$$W_{ij} := \begin{cases} e^{-||x_i - x_j||^2 / (2\sigma^2)} & \text{如果 } i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

如果我们想将该图切割成 K 个簇 $\{A_1, \dots, A_K\}$, 一个很自然的想法就是考虑最小化目标函数

$$\text{cut}(A_1, \dots, A_K) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K g(A_k, \overline{A_k})$$

其中 $\overline{A_k} = V - A_k$ 是 A_k 的补集, $g(A, B) := \sum_{i \in A, j \in B} w_{ij}$ 。当 $K = 2$ 时, 该问题很容易求解, 而最优解往往是将其中单个样本化为一族, 其余的所有样本归为另一族。为了保证每簇都尽可能大, 我们转而考虑下面的目标函数:

$$\text{Ncut}(A_1, \dots, A_K) := \frac{\text{cut}(A_k, \overline{A_k})}{\text{vol}(A_k)} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \frac{W(A_k, \overline{A_k})}{\text{vol}(A_k)}$$

其中 $\text{vol}(A) := \sum_{i \in A} d_i$, $d_i = \sum_{j=1}^n w_{ij}$ 为节点 i 的加权度 (weighted degree)。该函数使得簇内的样本尽可能相似, 同时簇间的样本尽可能不同。下面我们定义列向量 $h_i = (h_{1i}, \dots, h_{ni})^T$, 其每个分量为:

$$h_{ij} := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} & \text{如果 } x_i \in A_j \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

我们将这些列向量排成矩阵 H , 并且定义拉普拉斯矩阵 $L := D - W$, 其中 $D = \text{diag}(d_i)$ 为对角矩阵。对于任意的 $f \in \mathbb{R}^n$, 我们有

$$f^T L f = f^T D f - f^T W f = \sum_i d_i f_i^2 - \sum_{i,j} f_i f_j w_{ij} = \frac{1}{2} \left(\sum_i d_i f_i^2 - 2 \sum_{i,j} f_i f_j w_{ij} + \sum_j d_j f_j^2 \right) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} (f_i - f_j)^2$$

故

$$\begin{aligned} h_i^T L h_i &= \frac{1}{2} \sum_{m,n} w_{mn} (h_i m - h_i n)^2 = \frac{1}{2} \sum_{m \in A_i, n \in \overline{A_i}} w_{mn} \left(\frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} - 0 \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \notin A_i, n \in A_i} w_{mn} \left(0 - \frac{1}{\sqrt{\text{vol}(A_i)}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \text{cut}(A_i, \overline{A_i}) \frac{1}{\text{vol}(A_i)} + \frac{1}{2} \text{cut}(\overline{A_i}, A_i) \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \\ &= \frac{\text{cut}(A_i, \overline{A_i})}{\text{vol}(A_i)} \end{aligned}$$

由于 $cut(A_i, \overline{A_i}) = \frac{1}{2}W(A_i, \overline{A_i})$, 所以优化函数为

$$Ncut(A_1, \dots, A_K) = \sum_{i=1}^K h_i^T L h_i = \text{tr}(H^T L H)$$

另外, 我们有

$$h_i^T D h_i = \sum_{j=1}^n h_{ij}^2 d_j = \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \sum_{j \in A_i} d_j = \frac{1}{\text{vol}(A_i)} \text{vol}(A_i) = 1$$

故 $H^T D H = I$, 因此目标函数转化为

$$\text{argmin } \text{tr}(H^T L H) \text{ s.t. } H^T D H = I$$

由于我们的 H 中的指示向量 h 并不是标准正交基, 作变量替换 $U = D^{1/2} H$, 最终目标为

$$\text{argmin } \text{tr}(U^T D^{-1/2} L D^{-1/2} U) \text{ s.t. } U^T U = I$$

再由线性代数中的 Rayleigh 商定理, 问题的解就是求 $F = D^{-1/2} L D^{-1/2}$ 的前 k 个特征值, 并找出对应的特征向量, 并标准化, 得到最后的特征矩阵 M , 最后对 M 进行一次传统的聚类 (比如 K-Means), 再返回原来的数据点即可。最终我们将最小化目标函数的问题转化成求解图的拉普拉斯矩阵的特征向量问题, 简言之该方法就是在谱空间下进行 K-means 聚类。

谱聚类的一般步骤: 计算 F 的前 k 个特征向量 U_k , 令 $N = [u_1, \dots, u_K] \in \mathbb{R}^{n \times K}$, 令 $y_i \in \mathbb{R}^K$ 为矩阵 M 的第 i 行, 将向量集 $\{y_i\}_{i=1}^n$ 进行 K-means 聚类, 那么如果 y_i 归为第 k 类, 那么原始样本 i 也属于第 k 类。

总而言之, 谱聚类相比于 K-means 聚类效果要好得多, 但是作为一种集成聚类方法, 还是需要事先知道在谱空间选择什么样的聚类方法, 如果选择 K-means 聚类, 那么对于类的个数选取也是面临着同样的问题。

2.3 密度聚类

基于密度的聚类方法 (density-based clustering) 主要假设是可以通过样本分布的稠密程度来确定。值得注意的是, 该方法与持续同调方法源头相类似, 或者说后者可以看作是前者的推广。下面介绍一种最常见的密度聚类方法 DBSCAN:首先输入两个参数, 半径 ϵ 和形成高密度区域所需要的最少样本数 N_{min} 。然后由一个任意的未被访问过的样本开始, 探索这个样本的 ϵ 邻域, 如果 ϵ 邻域里面有足够多的样本 (不少于 N_{min}), 则建立一个新的簇。另外, 如果一个样本位于一个簇的密集区域里面, 它的 ϵ 邻域样本也在这个簇里面, 当这些新的样本被加进簇之后, 如果它们也在密集区域里面, 那么它们的 ϵ 邻域里面的样本也会被加进簇里面。这个过程一直重复, 直到遍历完所有的样本为止。

DBSCAN 的主要缺点在于对参数 ϵ, N_{min} 很敏感。如果 N_{min} 不变, ϵ 取值过大, 会将大多数样本聚集到同一个类中, 如果 ϵ 过小, 会将所有的样本都归为一类; 如果 ϵ 不变, N_{min} 取值过大, 同一个类中的样本会被标记为噪声, 如果 N_{min} 过小, 就会聚成很多的簇。在实际应用中, 这两个参数

十分依赖于经验知识，并且进行多次调整才能得到一个好的结果。到这里，一个好的、不需要先验知识的聚类方法就呼之欲出了，比如说持续同调理论。

3 复形

拓扑学中我们经常会考虑一个流形的拆解，使得拆解后的每一个部分都是简单的，这些简单的一部分就像是建造房子的砖块，而流形就是这个大房子。所以这一节我们主要介绍一些各种各样的基本的“砖块”。

3.1 单纯复形

定义 1. 设 u_0, u_1, \dots, u_k 是 \mathbb{R}^d 中的 $k+1$ 个仿射独立 (affine independent) 的点，一个 k -单纯形 σ 是指这 $k+1$ 个点的凸组合表示：

$$\sigma := \left\{ \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i : \sum_i \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0, u_i - u_0 \text{ 线性独立}, 1 \leq i \leq k \right\}$$

我们一般记作 $\sigma = \text{conv}\{u_0, \dots, u_k\}$ 。单纯形 σ 的一个面是指一个关于 u_i 的非空子集的凸包 (convex hull)，比如说 $\tau = \text{conv}\{u_1, \dots, u_k\}$ ，我们一般记作 $\tau \leq \sigma$ ，我们也称 σ 是 τ 的对偶面 (coface)。当 $\tau < \sigma$ 时，我们称 τ 是 σ 的真面 (proper face)。单纯形 σ 的边界是指所有真面的并集，记作 $\text{bd } \sigma$ ，剩下的就是它的内部 (interior)，即 $\text{int } \sigma = \sigma - \text{bd } \sigma$ 。注意 $x = \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i \in \text{int } \sigma$ 当且仅当它所有的系数 λ_i 都是正数。

定义 2. 单纯复形 (simplicial complex) 是指有限个单纯形构成的集族 K 使得

- 如果任意的 $\sigma \in K, \tau \leq \sigma$ ，那么 $\tau \in K$ 。
- 如果任意的 $\sigma, \sigma_0 \in K$ ，那么 $\sigma \cap \sigma_0$ 要么是空集要么是两者的公共面。

如果我们赋予 K 一个拓扑，自然地比如说欧式空间子拓扑，我们就可以得到一个拓扑空间，我们记作 $|K|$ ，也称为多面体 (polyhedron)。一般的，一个拓扑空间 X 的单纯剖分由一个单纯复形 K 和一个同胚映射 $h : |K| \rightarrow X$ 组成。我们说 L 是 K 的一个子复形 (subcomplex) 如果单纯复形 $L \subseteq K$ ，如果 L 包含了所有在 K 中由 L 的顶点所张成的单纯形，我们就说 L 是满的 (full)。另外，我们将 K 中所有维数小于或者等于 j 的单纯形称之为 K 的 j 维骨架，即 $K^{(j)} := \{\sigma \in K : \dim \sigma \leq j\}$

定义 3. 单纯形 τ 的星形 (star) 是指所有关于 τ 的对偶面： $\text{St } \tau := \{\sigma \in K : \tau \leq \sigma\}$ ，一般来说星形并不满足定义 2 中的第一条，但是我们可以将那些缺失的面加入从而得到一个单纯复形，我们称之为闭星形 (closed star)，记作 $\overline{\text{St}} \tau$ ，这是最小的包含星形 $\text{St } \tau$ 的子复形。

单纯形 τ 的联结 (link) 是指所有在闭星形 $\overline{\text{St}} \tau$ 中与 τ 不交的单纯形，即 $\text{Lk } \tau := \{v \in \overline{\text{St}} \tau : v \cap \tau = \emptyset\}$ ，另外，如果说 τ 是一个顶点，那么 $\text{Lk } \tau = \overline{\text{St}} \tau - \text{St } \tau$

定义 4. 抽象的单纯复形 (abstract simplicial complex) 是指有限个集合构成的集族 A 使得如果任意的 $\alpha \in A, \beta \subseteq \alpha$ ，那么 $\beta \in A$ 。

A 里面的集合就叫做单形，其维数被定义为 $\dim \alpha := \text{card } \alpha - 1$ ，并且 A 的维数定义为其包含的单形中最大的维数。 A 的顶点集定义为所有单形的并集，即 $\text{Vert } A = \cup_{\alpha \in A} \alpha$ 。两个抽象的单纯复形是同构的 (*isomorphic*) 等价于说如果存在双射 $b : \text{Vert } A \rightarrow \text{Vert } B$ 使得 $\alpha \in A$ 当且仅当 $b(\alpha) \in B$ 。

给定一个单纯复形 K ，我们可以通过丢掉其他所有的单形而只保留顶点得到抽象单纯复形 A ，我们称 A 是关于 K 的顶点概型 (*vertex scheme*)，也称 K 是关于 A 的几何实现 (*geometric realization*)。

定理 5. 每个维数为 d 的抽象单纯复形都有一个在 \mathbb{R}^{2d+1} 里的几何实现。

下面介绍单纯映射 (*simplicial maps*) 以及重心重分 (*barycentric subdivision*)。

3.1.1 单纯映射

设单纯复形 K 的顶点为 u_0, \dots, u_n ，且 $x \in K$ ，则 x 必定在某个单形 α 里面，比如说 $\alpha = \text{conv}\{u_0, \dots, u_k\}$ ，我们有

$$x = \sum_{i=0}^k \lambda_i u_i, \quad \sum_i \lambda_i = 1, \quad \lambda_i \geq 0$$

定义

$$b_i(x) = \begin{cases} \lambda_i & 0 \leq i \leq k \\ 0 & k+1 \leq i \leq n \end{cases}$$

则 $x = \sum_{i=0}^n b_i(x) u_i$ ，这时我们称 $b_i(x)$ 为 x 在 K 中的重心坐标 (*barycentric coordinates*)。现在我们考虑两个单纯复形之间的连续映射，我们首先想要将顶点集映射到顶点集，如 $\varphi : \text{Vert } K \rightarrow \text{Vert } L$ ，并且要求将 K 中的每个单形顶点映射到 L 中某个单形的顶点，然后我们延拓到整个上面：

$$f(x) = \sum_{i=0}^n b_i(x) \varphi(u_i)$$

我们就得到一个连续的单纯映射 $f : |K| \rightarrow |L|$ 。

3.1.2 重心重分

现在我们想做一种操作，使得单纯复形 K 的单形变得更多更小，但是单纯复形的多面体却是一样的：

我们可以看到重心重分之后的 K^1 ，也记作 $Sd K$ ，的顶点就是 K 的单形的重心。一般地，我们定义某个单形的重心为

$$\hat{\alpha} := \frac{1}{k+1}(u_0 + \dots + u_k)$$

要求一组重心 $\hat{\alpha}_0, \dots, \hat{\alpha}_k$ 确定了 K^1 的一个 k -单形，当且仅当 $\alpha_{\sigma(0)} < \dots < \alpha_{\sigma(k)}$ ，其中 σ 是整数 $0, 1, 2, 3, \dots, k$ 的一个置换。我们定义 K 的网距 (*mesh*) 为其包含的所有单形中最大的直径，也就是某个单形中最

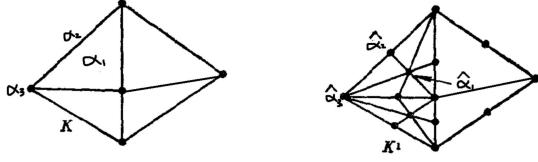


图 1: 重心重分

长的一条边的长度，记作 $\mu(K)$ 。

引理 6. 若 K 的维数为 n ，则 $\mu(K^1) \leq \frac{n}{n+1}\mu(K)$

证明：设 σ 是 K^1 内以 \widehat{A}, \widehat{B} 为顶点的一条棱，并设 $B < A$ ，则 $\sigma \subseteq A$ ，设 A 是 k 维的，则有

$$\begin{aligned} \mu(\sigma) &\leq \frac{k}{k+1}\mu(A) \\ &\leq \frac{n}{n+1}\mu(A) \\ &\leq \frac{n}{n+1}\mu(K) \end{aligned}$$

由于 σ 的任意性得出， $\mu(K^1) \leq \frac{n}{n+1}\mu(K)$ □

我们可以归纳地定义出 K 的第 m 次重心重分为： $K^m := (K^{m-1})^1$ ，并且由引理6可以看出当 $m \rightarrow \infty$ ，网距趋于0。

3.1.3 单纯逼近

有时候我们将顶点星形 (*vertex star*) 看成开集。首先，我们定义 $N(u) := \cup_{\sigma \in St u} \text{int } \sigma$ 。设 K 和 L 是单纯复形，我们说一个连续映射 $g : |K| \rightarrow |L|$ 满足星形条件 (*star condition*) 如果 K 中每个顶点星形的像都包含于 L 中某个顶点星形中，即 $\forall u \in K, \exists v \in L \text{ s.t. } g(N(u)) \subseteq N(v)$ ，注意 v 只要求存在，不要求唯一。由星形条件我们知道存在顶点映射 $\varphi : \text{Vert } K \rightarrow \text{Vert } L$ 使得 $\varphi(u) = v$ ，由此诱导单纯映射 $f : K \rightarrow L$ ，且满足 $g(N(u)) \subseteq N(f(u))$ 对每个顶点 $u \in K$ ，此条件也称之为单纯逼近条件 (*simplicial approximation condition*)，我们称 f 是 g 的单纯逼近。

定理 7. 设 $g : |K| \rightarrow |L|$ 是连续的，则存在足够大的 n 使得 g 有一个单纯逼近 $f : Sd^n K \rightarrow L$

证明：我们选取关于 $|K|$ 的形如 $g^{-1}(N(v))$, $v \in \text{Vert } L$ 的一些开覆盖，由于 $|K|$ 是紧的 (*compact*)，故存在某个正实数 λ 使得任意直径小于 λ 的集合都包含在开覆盖中的某一个集合中。我们选择 n 使得每一个 $Sd^n K$ 中的单形的直径都小于 $\frac{\lambda}{2}$ ，然后每一个 $|K|$ 中的星形的直径都小于 λ ，导出其必定包含在某一个开覆盖的集合 $g^{-1}(N(v))$ 中，因此 g 满足星形条件，故存在单纯逼近 f 。 □

注记 8. 有一个更强版本的单纯逼近定理在20世纪前半叶极大地推动的组合拓扑的发展，说的是同一个拓扑空间的任意两种单纯剖分都有同构的重分 (*subdivisions*)，这对于2维或者3维单纯复形来说是对的，然而高维却不一定，第一个7维的反例由Milnor构造[110]。

3.2 凸集系统

定理 9. (*Helly*) 设 F 是 \mathbb{R}^d 中一个有限的、闭的凸集族，记作 $F = \{X_1, \dots, X_n\}$ ，则每 $d+1$ 个其中的集合的交非空当且仅当 F 中所有的集合的公共交都非空，即 $\cap_{i=1}^n X_i \neq \emptyset$ 。

证明：我们只证明不是显然的那个方向，首先， $d=1$ 是对的：假设 $F = \{X_1, X_2, X_3\} = \{[a_1, b_1], [a_2, b_2], [a_3, b_3]\}$ ，且 $X_1 \cap X_2 \neq \emptyset, X_2 \cap X_3 \neq \emptyset, X_1 \cap X_3 \neq \emptyset$ ，我们有 $a_2 \leq b_1$ 且 $a_1 \leq b_2, a_3 \leq b_2$ 且 $a_2 \leq b_3, a_3 \leq b_1$ 且 $a_1 \leq b_3$ ， $X_1 \cap X_2 \cap X_3 = [a_2, b_1] \cap [a_3, b_3]$ or $= [a_1, b_2] \cap [a_3, b_3] \neq \emptyset$ ，然后再用归纳法证 $\text{card } F = n$ 的情况即可。

对于一般的 d ，我们用反证法：假设存在一个极小的 n 的反例，使得 $Y_n = \cap_{i=1}^{n-1} X_i \neq \emptyset$ ，但是 $Y_n \cap X_n = \emptyset$ 。由于他们都是闭的凸集，我们可以找到一个 $d-1$ 维的平面 h 分开 Y_n 和 X_n ，并且和他们两个不交。定义 $F' := \{Z_1, \dots, Z_{n-1}\}$ 构成的子集族，其中 $Z_i = X_i \cap h, 1 \leq i \leq n-1$ 是 \mathbb{R}^{d-1} 中的非空闭凸子集。由归纳假设，任意 d 个前面的 $n-1$ 个 X_i 都和 X_n 有公共的交，推出这 d 个集合的公共交落在 h 的两侧，故任意 d 个 Z_i 都有一个非空的公共交，由极小性假设，得到 $\cap F' \neq \emptyset$ 。即

$$\cap F' = \cap_{i=1}^{n-1} (X_i \cap h) = Y_n \cap h \neq \emptyset$$

但是这与 $h \cap Y_n = \emptyset$ 矛盾。 \square

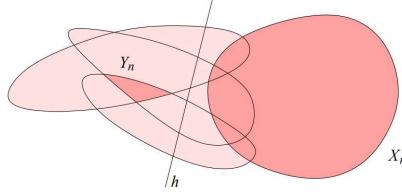


图 2: 凸集系统

3.2.1 Nerves

我们定义集族 F 的脉络 (*nerves*) 为其所有公共交非空的子集族：

$$\text{Nrv } F := \{X \subseteq F : \cap X \neq \emptyset\}$$

定理 10. 设 F 是 \mathbb{R}^d 中有限的闭凸集族，则 F 的脉络与 F 中所有集合的并同伦等价 (*homotopy equivalent*)，即 $\text{Nrv } F \simeq \cup_{F_i \in F} F_i$

3.2.2 Čech 复形

定义 11. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，我们定义 *Čech* 复形：

$$\check{\text{C}}\text{ech } (r) := \{\sigma \subseteq S : \cap_{x \in \sigma} B_x(r) \neq \emptyset\}$$

其中 $B_x(r)$ 是以 r 为半径以 x 为中心的 d 维闭实心球。

注意一堆球的公共交非空当且仅当它们的中心都落在某个同样半径的球中，即 $y \in \cap_{x \in \sigma} B_x(r)$ 等价于 $\|x - y\| \leq r, \forall x$ ，并且由 Helly 定理我们知道 S 中任意 $d + 1$ 个点落在某个半径为 r 的球中当且仅当 S 中所有的点都落在这个半径为 r 的球中。当半径增大时我们可以看到它会创造更多的重叠部分，并且保留了之前的重叠部分，故 $\check{Cech}(r_0) \subseteq \check{Cech}(r), r_0 \leq r$ 。注意判断 σ 属于 $\check{Cech}(r)$ 与否等价于判断 σ 是否在某个半径为 r 的闭球中。我们定义 σ 的极小球 (*miniball*) 为最小的包含 σ 的闭球，则 $\sigma \in \check{Cech}(r)$ 等价于 σ 的极小球的半径小于等于 r 。

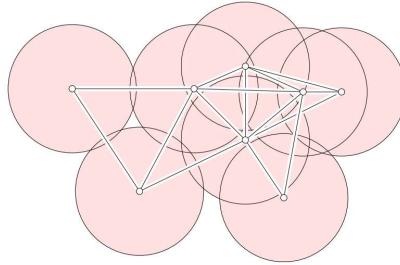


图 3: Čech 复形

3.2.3 Vietoris-Rips 复形

定义 12. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，我们定义 *Vietoris-Rips* 复形：

$$\text{Vietoris-Rips}(r) := \{\sigma \subseteq S : \text{diam } \sigma \leq 2r\}$$

由上面的讨论可以知道 $\check{Cech}(r) \subseteq \text{Vietoris-Rips}(r)$ 。下面陈述一个引理：

引理 13. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，则 $\text{Vietoris-Rips}(r) \subseteq \check{Cech}(\sqrt{2}r)$

证明：我们不妨在标准的正规单形中讨论：我们将 \mathbb{R}^{d+1} 中标准正规 d 维单形记作 Δ^d ，其由 $\{(1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, 1)\}$ $d+1$ 个点张成。由对称性我们知道，此单形到原点的距离等于原点到重心的距离，其中重心为 $z = \frac{1}{d+1}(1, 1, \dots, 1)$ ，故 $\|z\| = \frac{1}{\sqrt{d+1}}$ 。注意到重心是过此单形所有顶点的最小的 d 维球的中心，记此 d 维球的半径为 r_d ，则 $r_d^2 = 1 - \|z\|^2 = \frac{d}{d+1}$ ，当维数愈来愈大时，球的半径趋于 1。任意 $d+1$ 个或者更少的点中都至少有一对的距离大于或者等于 $\sqrt{2}$ 当它们都以同样的半径为 r_d 的极小球的时候，故每一个直径小于或者等于 $\sqrt{2}$ 的单形都属于 $\check{Cech}(r_d)$ ，乘以 $\sqrt{2}r$ ，我们有 $\text{Vietoris-Rips}(r) \subseteq \check{Cech}(\sqrt{2}rr_d) \subseteq \check{Cech}(\sqrt{2}r)$ ，因为 $r_d \leq 1$ 。 \square

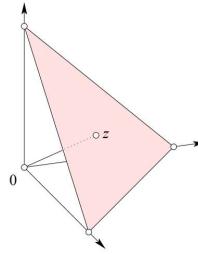


图 4: 标准单形

3.3 Delaunay 复形

3.3.1 Inversion

我们记 S^d 为中心在原点的 d 维单位球面。现在我们考虑映射 $\phi: \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}^{d+1}$, $\phi(x) := x/\|x\|^2$, 该映射会将球面外的点调换, 而球面上的点还会映射到球面上。并且, 我们发现 $\phi(\phi(x)) = x$ 。现在我们将这个映射限制在球面上, 并且考查它的像是什么:

定理 14. 设 Σ 是 \mathbb{R}^{d+1} 中一个 d 维的球面, 如果 $0 \notin \Sigma$, 那么 $\phi(\Sigma)$ 也是一个 d 维的球面; 如果 $0 \in \Sigma$, 那么 $\phi(\Sigma)$ 则是一个 d 维的平面。

证明: 首先考虑当 $0 \notin \Sigma$, 如果 0 恰好就是 Σ 中心, 那么结果是显然的。如果 0 不是 Σ 中心, 我们原点和球心连起来, 画一条直线, 该直线交 Σ 于两点 x, y , 并且设 z 是球面上另外一点, 它们在 ϕ 作用下的像分别是 x', y', z' , 我们有 $\|x\| \|x'\| = \|z\| \|z'\| = 1$, 推出三角形 $0xz$ 和三角形 $0z'x'$ 是相似的。类似地, 三角形 $0yz$ 和三角形 $0z'y'$ 也是相似的。由于 $\angle xzy = \pi/2$, 再根据相似三角形性质, 得出 $\angle x'z'y' = \pi/2$, 所以当 z 跑遍 Σ 时, 我们就得到 $\phi(\Sigma)$ 也是一个 d 维的球面。当 $0 \in \Sigma$ 时, 即 $0 = x$, $\angle 0y'z' = \angle 0zy = \pi/2$, $\phi(\Sigma)$ 则是一个 d 维的垂直于 y' 的平面。□

下面我们介绍球极投影 (stereographic projection)。首先对于任意的球心 $z \in \mathbb{R}^{d+1}$ 和半径 $r > 0$,

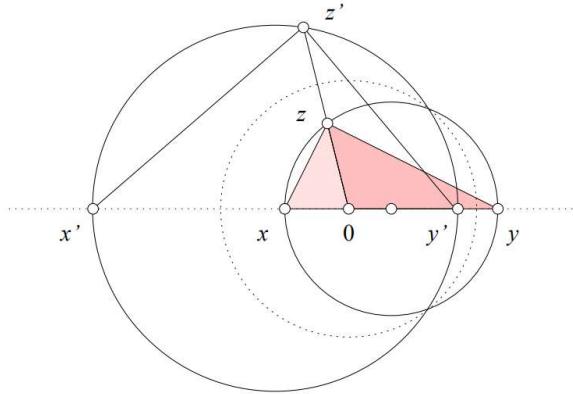


图 5: inversion of sphere

我们可以定义 $\psi(x)_{z,r} := r\phi(\frac{x-z}{r}) + z$, 不难验证 $\|x - z\| \|\psi(x) - z\| = r^2$ 。标准的单位球面的球极投影可以通过定义 $\varsigma(x) : S^d - \{N\} \rightarrow \mathbb{R}^d$, $\varsigma(x) := \psi_{N,\sqrt{2}}(x)$ 得到, 其中 N 是北极点。

推论 15. 设 Σ' 是在 S^d 上的一个 $d-1$ 维的球面, 如果 $N \notin \Sigma'$, 那么 $\varsigma(\Sigma')$ 也是一个 $d-1$ 维的球面; 如果 $N \in \Sigma'$, 那么 $\varsigma(\Sigma')$ 则是一个 $d-1$ 维的平面。

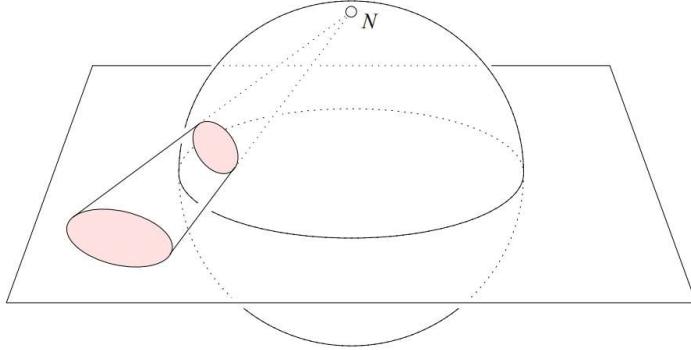


图 6: 球极投影

3.3.2 Voronoi 图

定义 16. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, $u, v \in S$, 我们定义关于 u 的 Voronoi 胞腔为 \mathbb{R}^d 中与 u 距离最近的那些点:

$$V_u := \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - u\| \leq \|x - v\|, \forall v \in S\}$$

由定义我们可以知道 V_u 是 \mathbb{R}^d 中一个凸的多面体, 并且任意两个 Voronoi 胞腔的公共部分最多是它们共同的边界, 所有的 Voronoi 胞腔就会盖住整个空间 \mathbb{R}^d 。Voronoi 图就是所有的 Voronoi 胞腔所构成的簇族。

定义 17. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, $u, v \in S$, 我们定义关于 u 的 Voronoi 权重胞腔:

$$V_u := \{x \in \mathbb{R}^d : \pi_u(x) \leq \pi_v(x), \forall v \in S\}$$

其中 $\pi_u(x) := \|x - u\|^2 - w_u$ 为某种带权重的距离。

3.3.3 lifting

下面我们介绍一种关于 Voronoi 图不一样的看法: 通过提升 (lift) 它的胞腔到更高一维。设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合, 但是我们将它们嵌入到 \mathbb{R}^{d+1} 中, 只需要将第 $d+1$ 个坐标设成 0 即可。设 $u \in S$, 且 Π_u 是与 S^d 相切在 $\varsigma^{-1}(u)$ 的 d 维平面, 然后再定义 $\Sigma_u := \phi(\Pi_u)$, 它是一个过 S^d 北极点 N 的球面且与 \mathbb{R}^d 相切。

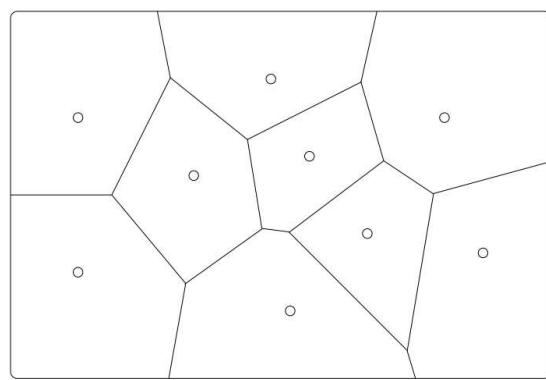


图 7: Voronoi 图

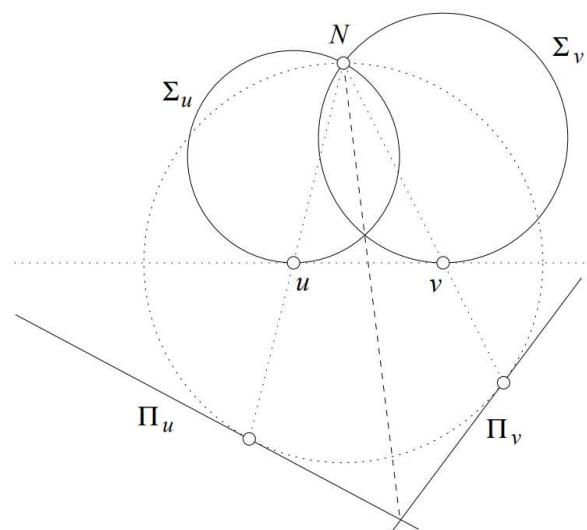


图 8: lifting

定理 18. 一个点 $x \in \mathbb{R}^d$ 属于关于 u 的 Voronoi 胞腔当且仅当射线 xN 首次与 Σ_u 相交（在所有的 d 维球面 Σ 中）。

定理 19. 一个点 $x \in \mathbb{R}^d$ 属于关于 u 的 Voronoi 胞腔当且仅当射线 Nx 首次与 Π_u 相交（在所有的 d 维平面 Π 中）。

定义 20. Delaunay 复形同构于 Voronoi 图的脉络 (nerve):

$$\text{Delaunay} := \{\sigma \subseteq S : \cap_{u \in \sigma} V_u \neq \emptyset\}$$

我们说集合 S 是在一般位置的如果没有 $d+2$ 个点落在同一个 $d-1$ 维的球中，这可以导出没有 $d+2$ 个 Voronoi 胞腔有非空的公共交。等价地，Delaunay 复形的维数是 d 。现在假设 S 是在一般位置，则我们取抽象单形的凸包得到 S 的几何实现，结果就是 S 的 Delaunay 三角剖分。

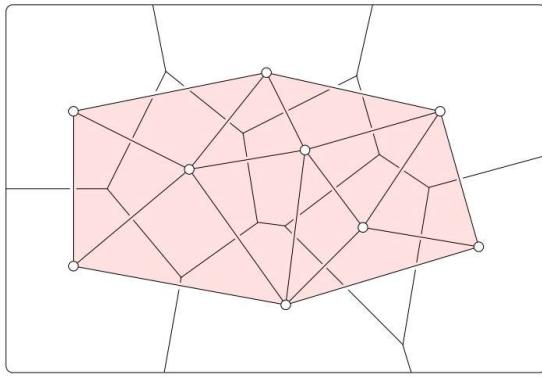


图 9: 在 Voronoi 图上的Delaunay 三角剖分

3.4 Alpha 复形

定义 21. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，对于 $u \in S, r \geq 0$ ，我们定义 $R_u(r) := B_u(r) \cap V_u$ ，其中 $B_u(r)$ 是半径为 r ，中心在 u 的 d 维闭球， $V_u(r)$ 是在 u 点的 Voronoi 胞腔。我们定义 Alpha 复形为：

$$\text{Alpha}(r) := \{\sigma \subseteq S : \cap_{u \in \sigma} R_u(r) \neq \emptyset\}$$

显然由于 $R_u(r) \subseteq V_u$ ， $\text{Alpha}(r) \subseteq \text{Delaunay}(r)$ 。故同样的对于处在一般位置的 S ，我们取抽象单形的凸包得到 S 的几何实现。另外，由于 $R_u(r) \subseteq B_u(r)$ ，故 $\text{Alpha}(r) \subseteq \check{Cech}(r)$ 。由于 $\cup_{u \in S} R_u(r) = \cup_{u \in S} B_u(r)$ ，并且因为 $R_u(r)$ 是闭的并且凸的，由定理 10，我们有

$$\cup_{u \in S} B_u(r) \simeq |\text{Alpha}(r)|$$

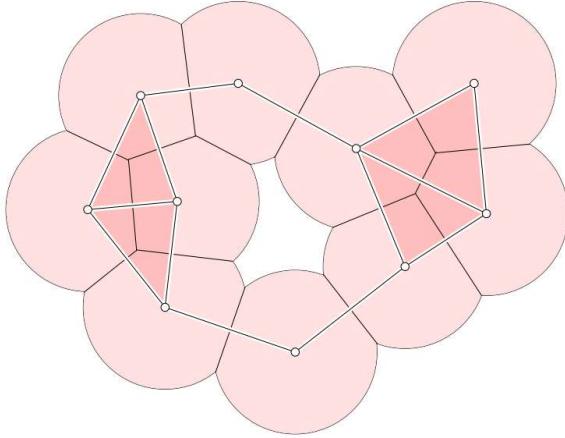


图 10: Alpha 复形

3.4.1 Alpha 权重复形

在现实应用中，我们会常常使用带权重的Alpha复形，比如说一些蛋白质、RNA、DNA的建模。

定义 22. 设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，对于 $u \in S, r \geq 0$ ，我们定义 $R_u := B_u \cap V_u$ ，其中 B_u 是半径为 $r_u = \sqrt{w_u}$ ，中心在 u 的 d 维带权重闭球， V_u 是在 u 点的Voronoi权重胞腔。我们定义Alpha权重复形为：

$$\text{Alpha}(r) := \{\sigma \subseteq S : \cap_{u \in \sigma} R_u \neq \emptyset\}$$

同样的，它的几何实现大致如下图：

3.4.2 滤子(filtration)

假设我们对于半径 r 有一个自由的选取，随着 r 的变动，构造的复形自然地也随之变动，而我们往往想要找到一个最合适的 r 。首先，设 S 是 \mathbb{R}^d 中一个有限个点的集合，我们让 r 连续地的变动，我们就会得到一系列嵌套（nested）的Alpha复形，而由于他们都是某个Delaunay复形的子复形，而这个Delaunay复形是有限的，所以只有有限个是不一样的，我们记作：

$$\emptyset = K_0 \subseteq K_1 \subseteq \dots \subseteq K_m$$

上面称之为 $K_m = \text{Delaunay}$ 的一个滤子（filtration）。

接下来我们介绍带权重的滤子：首先从半径为 $r_u = \sqrt{w_u}$ ，中心在 u 的 d 维权重闭球开始，增加它的半径到 $\sqrt{w_u} + r$ ，但是这会导致关于不同半径 r 的这些球的Voronoi图是不一样的，就会进一步导致得到的Alpha复形 K_i 并不是嵌套的。因此，我们定义 d 维权重闭球的半径为 $\sqrt{w_u + r^2}$ ， x 在权

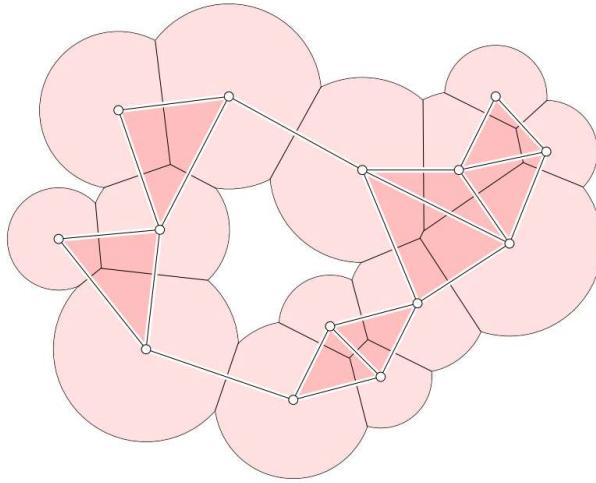


图 11: Alpha 权重复形

重距离下与球 $B_u(r)$ 和 $B_v(r)$ 的球心距离相等则满足

$$\|x - u\|^2 - (w_u + r^2) = \|x - v\|^2 - (w_v + r^2)$$

两边消去 r^2 我们发现 x 就在两球心平分点并且和 r 无关。因此，这些球的并集可以分解为由同一个权重 Voronoi 图上面的凸集。更具体地，在权重系统中有 $\text{Alpha}(r_0) \subseteq \text{Alpha}(r), r_0 \leq r$ ，故我们同样有权重系统的滤子。

3.4.3 抽象单形结构

下面我们将研究滤子的两个相邻复形之间的差异，即 $K_{i+1} - K_i$ 。首先我们考虑抽象单形的结构，注意一个抽象的 d 维单形 α 是由 $d+1$ 个点的集合，它有 2^{d+1} 个子集，包括空集和它本身。

定义 23. 一般来说，对于一个有限偏序集 (*partially ordered set*) S ，我们可以将它的每个元素当做一个顶点画在平面上，然后对于满足序关系 $x < y$ 并且不存在 z 使得 $x < z < y$ 的顶点用一条线连接，我们就可以得到关于 S 的 *Hasse 图*。

比如说考虑由 4 个点构成的集合的幂集 (*power set*)，序关系为集合的包含，则我们可以用 $\{0, 1\}$ 编码所有的幂集，其中 $\{1, 0\}$ 表示某个元素的有无。因此所有的抽象单形我们都可以画出它对应的 *Hasse 图*。

3.4.4 拆解

定义 24. 现在我们假设有一个几何的 d -单形 σ ，我们定义一种基本的操作，基本拆解 (*elementary collapse*)：我们移除一对点 $\beta_0 \subset \beta$ 和与之对应的一对面 $\tau_0 < \tau$ ，其中 τ 是唯一的满足 $\tau_0 < \tau$ 的面。我们也记作 $(k, k+1)$ 拆解其中 $\dim \tau_0 = k$ 时。

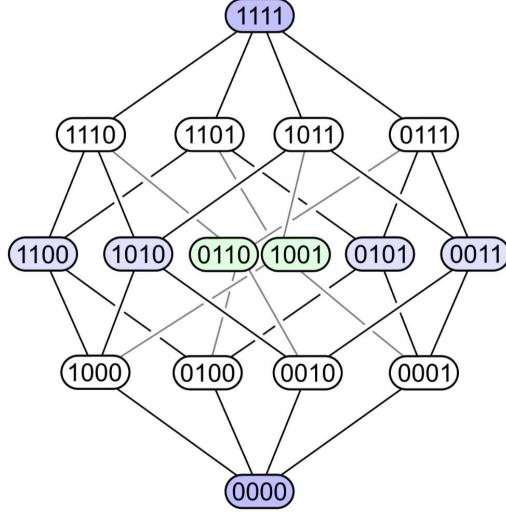


图 12: Hasse 图

一般地，一个 d 维单形 σ 能够通过 $2^d - 1$ 次基本拆解变成一个点。如图13所示。

更一般地，我们可以定义在单纯复形 K 上的拆解，即某个形变收缩（deformation retract）映

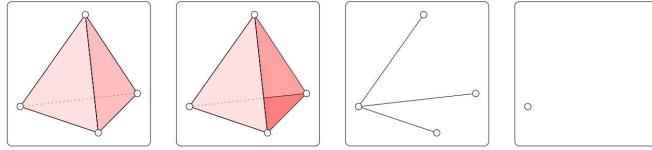


图 13: 单形拆解

射 $f : |K| \rightarrow |L|$ 。我们说 K 是可拆解的（collapsible）如果存在一系列基本拆解使得 $|K|$ 变成一个点。由于拆解保持同伦等价，所以 $|K|$ 也是可缩的（contractible），然而可缩的底空间（underlying space）并不一定是可拆解的。

现在设 r_i 为使得 $K_i = \text{Alpha}(r_i)$ 的最小半径，对于一个单形 τ 来说，如果以半径为 r_{i+1} 的球的并和相对应的Voronoi胞腔有非空的公共交，则 $\tau \in K_{i+1}$ ；反之，若以半径为 r_i 的球的并和相对应的Voronoi胞腔有空的公共交，则 $\tau \notin K_i$ 。假设顶点集 S 在一般位置并且 $\dim \tau = k$ ，则Voronoi胞腔的交 $V_\tau = \cap_{u \in \tau} V_u$ 是一个 $d - k$ 维的凸多面体。由 r_{i+1} 的定义，这些球 $B_u(r_{i+1})$ 交 V_τ 于一个单点 x 。

第一种情况，假设 x 落在 V_τ 的边界上，那么存在其他的Voronoi 多面体使得 x 是第一次与这些球的并相交的。假设 V_τ 是在集族中最高维的多面体，并且 V_v 是在集族中最低维的多面体。对应地， $\tau \in K_{i+1} - K_i$ 是里面最低维的单形， $v \in K_{i+1} - K_i$ 是里面最高维的单形， $K_{i+1} - K_i$ 中剩下的单形都是 v 的面且是 τ 的对偶面。换句话说，我们可以通过对 K_{i+1} 做 (k, l) 拆解得到 K_i ，其中 $k =$

$\dim \tau, l = \dim v$ 。我们称这个拆解是一个正则事件 (*regular event*) 在 *Alpha* 复形中。

第二种情况，假设 x 落在 V_τ 的内部，并且 *Voronoi* 多面体 x 不是第一次与任意的高维 *Voronoi* 多面体相交的。换句话说， τ 是 $K_{i+1} - K_i$ 中唯一的单形，我们称这个 τ 的添加是一个临界事件 (*critical event*) 因为它改变了复形的同伦型。由于球的并和 *Alpha* 复形有同样的同伦型，所以当半径逼近 r_{i+1} 时会同时改变这些球之并的同伦型。

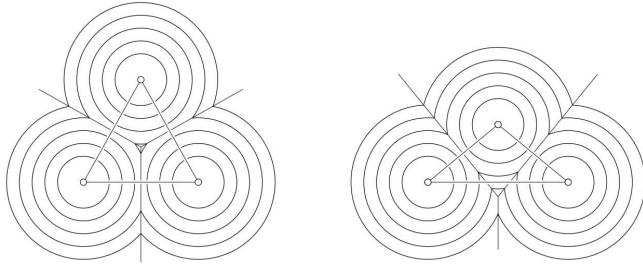


图 14：左边：三条构成三角形的边出现在临界事件之前；右边：两条边出现在正则事件和第三条之前

4 参考文献

[1] H. Edelsbrunner, J. Harer, Computational topology : An introduction. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010. xii+241 pp. ISBN: 978-0-8218-4925-5.

5 同调

这一章我们主要介绍一些同调论的基本代数知识以及矩阵表示。

5.1 单纯同调

定义 25. 设 K 是一个 p 维单纯复形，一个 p 维链是指一个 K 中的 p 维单形的有限形式和， $c := \sum a_i \sigma_i$ ，其中 a_i 是系数，一般取 $a_i \in \mathbb{Z}_2$ ， σ_i 是一些 p 维单形。

另外，我们可以定义任意两个 p 维链之间的加法，即如果 $c = \sum a_i \sigma_i, c' = \sum b_i \sigma_i$ ，则 $c + c' = \sum (a_i + b_i) \sigma_i$ 。这些 p 维链和定义的加法运算构成一个群，记作 C_p 。

定义 26. 设 $\sigma = [u_0, \dots, u_p]$ 为由 $\{u_0, \dots, u_p\}$ 这些顶点所张成的单形，我们定义它的边缘 (*boundary*) 为所有 $(p-1)$ 维的面的交错和

$$\partial_p \sigma := \sum_{j=0}^p (-1)^j [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p] \xrightarrow{-1=1} \sum_{j=0}^p [u_0, \dots, \hat{u}_j, \dots, u_p]$$