arXiv:2301.03627v2 [math.NA] 21 Jul 2023

量化单纯同调的结构稳定性*

Nicola Guglielmi†、Anton Savostianov†和 Francesco Tudisco†

摘要。 单纯复形是经典图的推广。其同调群广泛用于刻画数据的结构和拓扑，例如化学、神经科学和交通网络中的数据。在这项工作中，我们假设已知一个单纯复形，并且可以作用于其由 1-单形构成的底层图；我们研究该复形的同调对于该图中边的扰动的稳定性。具体而言，利用同调群与高阶拉普拉斯算子之间的同构关系，我们提出一种数值方法，用以计算足以改变单形的霍奇同调维数的最小图扰动。我们的方法基于一个表述为矩阵微分方程的矩阵接近问题，该问题要求对作用于霍奇代数同调群的边界算子进行适当的加权和归一化。我们针对所表述的矩阵接近问题开发了一种适用的双层优化方法，并通过多种合成准三角剖分数据集和真实世界交通网络展示该方法的性能。

关键词。 单纯复形、同调群、图拉普拉斯算子、霍奇拉普拉斯算子、矩阵逼近问题、矩阵常微分方程、谱优化、约束梯度系统

MSC 分类代码。 05C50,65F45, 65K10, 57M15, 62R40

1. 引言。 基于图的模型在科学和工程领域无处不在，因为它们能够以统一的形式对各种复杂系统建模。尽管基于图的模型得到了广泛且成功的应用，但它们仅限于描述成对关系。近期大量研究表明，许多复杂系统和数据集用超越成对交互的高阶关系来描述会更为恰当 [5, 7, 9]。关系数据中充满了以群体形式发生的交互。例如，友谊关系往往涉及两个以上个体组成的群体，而三角形是关系数据的重要构成单元 [1, 4, 24]。此外，在处理点云数据时，直接对高阶数据交互建模，已在许多数据挖掘任务中带来改进，包括聚类 [7, 16, 34],链接预测 [4, 8],和排序 [6, 33, 32]。

将二元模型推广到高阶情形的一种常见方法是使用超图，并依赖于从基于矩阵的模型向基于张量的模型的转变 [5, 9]。基于图谱理论向张量特征值问题的最新推广 [28, 17], ，许多基于矩阵的图方法，例如聚类、社区检测、中心性和观点动力学，已扩展为基于张量的高阶模型 [4, 34, 6, 25, 26]。

与超图和张量一样，单纯复形和高阶拉普拉斯算子是高阶相互作用的另一种标准模型，其中不同阶的单形可以连接任意数量的节点 [5, 9]。高阶拉普拉斯算子是线性算子，它推广了更为人熟知的图拉普拉斯算子，并提供关键的代数工具，使我们能够

*于 DATE 提交给编辑。

†格兰萨索科学研究所，拉奎拉，意大利（nicola.guglielmi@gssi.it，anton.savostianov@gssi.it，francesco.tudisco@gssi.it）。

描述单纯复形及其结构性质。具体而言，它们的核定义了数据的同调，并揭示了连通分支、洞和空腔等基本拓扑性质 [22, 11]。

本文旨在量化此类拓扑性质对于边扰动的稳定性。更具体地说，给定一个初始单纯复形 $\mathcal{K}$及其对应的同调，以及由 $\mathcal{K}$的 1-单形构成的底层图 $\mathcal{G}_{\mathcal{K}}$，我们希望量化它与另一个同调群维数严格不同的单纯复形相距多远。这里假设我们可以对 $\mathcal{G}_{\mathcal{K}}$ 的边进行操作，而“相距多远”则通过需要删除的 $\mathcal{G}_{\mathcal{K}}$ 的边的最少数量（或在加权情形下的最小权重）来衡量，以改变所选同调群的维数。虽然这种稳定性形式让人联想到文献中得到广泛研究的同调持久性，但我们指出二者有显著区别。我们并非从一组点数据出发，在其上构造单形链及相应的持久性图；在我们的设定中，给定的初始单形是数据同化与建模过程的结果，而我们无法接触该过程。因此，基于已知的基本成对信息——即 1-单形——我们希望量化刻画当前单形的同调的鲁棒性。近年来，人们投入了大量精力来衡量单纯同调 [13, 27], 的存在及持久性；然而，关于非正则（非几何）设定下同调类对于数据扰动的稳定性，现有研究则少得多 [10]。

由此得到的问题可以表述为一个结构化矩阵逼近问题，我们通过谱目标函数以及相应矩阵值梯度流的积分来处理该问题。为了对我们旨在解决的问题以及为其解决方案所设计的数值模型作出严谨的数学表述，本文余下部分的结构如下：第 2 节 我们详细回顾单纯复形以及相应高阶拉普拉斯算子的概念。在第 2.2 小节和第 3.1 小节中，我们讨论如何扩展这些算子，使其能够描述加权高阶节点关系，并在第 3 节和第 4 节中表述相应的稳定性问题。在引入适当的谱泛函后，将其最小化至零在数学上即可转化为稳定性问题；随后，在第 5 节和第 6 节中，我们提出一种两层方法：内层迭代由约束矩阵梯度流构成，我们的数值方法正是基于该梯度流；外层则调节一个适当的标量参数，以求解相关的标量方程。最后，我们在第 7 节中通过若干示例数据集说明所提出数值方案的性能。

2. 单纯复形与高阶关系。 图 $\mathcal{G}$ 是由两个集合（$\mathcal{V}$, $\mathcal{E}$）构成的一对，其中 $\mathcal{V} = \{1, \dots, n\}$ 是顶点集合，$\mathcal{E} \subset \mathcal{V} \times \mathcal{V}$是由无序对组成的集合，用来表示 $\mathcal{G}$的无向边。我们用 m 表示边数 $\mathcal{E} = \{e_1, \dots, e_m\}$，并假设这些边按字典序排列，约定 $i < j$ 对任意 $\{i, j\} \in \mathcal{E}$均成立。为简洁起见，我们常用 ij 代替 $\{i, j\}$，表示连接 i 与 j的边。此外，我们假设不存在自环，即 $ii \notin \mathcal{E}$ 对所有 $i \in \mathcal{V}$均成立。

图只考虑顶点之间的成对关系。单纯复形 $\mathcal{K}$ 是图的一种推广，它允许我们通过高阶单纯形对涉及任意数量节点的连接进行建模。形式上，k阶单形（或称 k-单形，

简称）是由 $k+1$ 个顶点 $\{i_0, i_1, \ldots, i_k\}$ 组成的集合，并且具有这样的性质：其中每个 k 个节点的子集本身都是一个 $(k-1)$-单形。 k阶单形的任意一个 $(k-1)$-单形都称为一个面。所有此类单形构成一个单纯复形 $\mathcal{K}$，因此它本质上由一组顶点集合组成，并且该集合中每个集合的任意子集也都属于该集合。因此，图 $\mathcal{G}$ 可以看作由 0-单形和 1-单形组成的集合：0-单形构成 $\mathcal{G}$的节点集，而 1-单形构成其边。为强调这种类比，在下文中我们通常会指出， $\mathcal{K}$ 是顶点集 $\mathcal{V}$上的一个单纯复形。

与图的边类似，对于任意单纯复形，我们都可以指定一个定向（或排序）。为强调排序已固定，我们用方括号 $\sigma = [i_0 \ldots i_k]$表示有序的 k-单形 σ。特别地，与边的情况一样，除非另有说明，我们总是假设采用字典序。也就是说，我们假设：

1. $\mathcal{K}$ 中的任意 k-单形 $[i_0 \ldots i_k]$ 都满足 $i_0 < \cdots < i_k$；2. $\mathcal{K}$ 的 k-单形 $\sigma_1, \sigma_2, \ldots$ 按如下方式排序：对所有 i，都有 $\sigma_i \prec \sigma_{i+1}$；其中 $[i_0 \ldots i_k] \prec [i'_0 \ldots i'_k]$ 当且仅当存在 h 使得 $0 \le h \le k$, $i_j = i'_j$对 $j = 0, \ldots, h$ 成立，并且$i_h < i'_h$。与边的情况一样，在此情形下，我们常用 $i_0 \ldots i_k$ 代替 $[i_0 \ldots i_k]$。

2.1. 同调、边界算子与高阶拉普拉斯算子。研究单纯复形的拓扑性质，可以考察边界算子、高阶拉普拉斯算子及其相关的同调。这里我们回顾这些概念，并着重强调其矩阵论特征。为此，我们先引入一些补充记号，并回顾实 k链的概念。

定义 2.1。设 $\mathcal{K}$ 是顶点集为 $\mathcal{V}$的单纯复形。对于 $k \ge 0$，我们将 k中所有定向的 $\mathcal{K}$ 阶单形的集合记为 $\mathcal{V}_k(\mathcal{K})$ 或简记为 $\mathcal{V}_k$。因此， $\mathcal{V}_0 = \mathcal{V}$ 和$\mathcal{V}_1 = \mathcal{E}$构成了 $\mathcal{K}$的底层图，记作 $\mathcal{G}_{\mathcal{K}} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}) = (\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1)$。

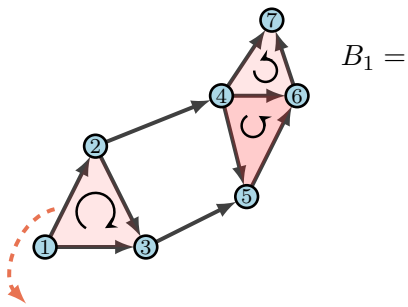
定义 2.2。由 $\mathcal{V}_k$ 的所有元素以实系数张成的形式实向量空间记为 $C_k(\mathcal{K})$。 $C_k(\mathcal{K})$中的任意元素，即 $\mathcal{V}_k$中单形的形式线性组合，称为 k链。

我们指出，在图论术语中， $C_0(\mathcal{K})$ 通常称为顶点状态空间，而 $C_1(\mathcal{K})$ 通常称为图中的流 空间。

链空间是由以下集合生成的有限维向量空间： k-单形。边界算子和余边界算子是 C_k 与 C_{k-1}之间的特定线性映射，在某种意义上，它们是连续流形上高阶微分算子（及其伴随算子）的离散类比。边界算子 ∂_k 将一个 k-单形映射为其（$k-1$）维面的交错和，这些面通过每次省略一个顶点得到。其精确定义将在下文回顾，而图 1则给出了其作用的一个说明性示例。

定义 2.3。设 $k \ge 1$。给定一个 $\mathcal{K}$ 基于集合 $\mathcal{V}$的单纯复形，边界算子 ∂_k： $C_k(\mathcal{K}) \mapsto C_{k-1}(\mathcal{K})$ 将每个有序的 k-单形 $[i_0 \ldots i_k] \in C_k(\mathcal{K})$ 映射为其各个面的以下交错和：

$$\partial_k [i_0 \ldots i_k] = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j [i_0 \ldots i_{j-1} i_{j+1} \ldots i_k] \in C_{k-1}(\mathcal{K})$$



$\partial_2([1,2,3]) = [1,2] - [1,3] + [2,3]$

$$B_1 = \begin{array}{c|cccccccccc} & \left[\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}1\\3\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}2\\3\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}2\\4\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}3\\5\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}4\\5\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}4\\6\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}4\\7\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}5\\6\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}6\\7\end{smallmatrix}\right] \\ \hline [1] & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [2] & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [3] & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ [4] & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ [5] & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ [6] & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 \\ [7] & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}$$

$$B_2 = \begin{array}{c|ccc} & \left[\begin{smallmatrix}1\\2\\3\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}4\\5\\6\end{smallmatrix}\right] & \left[\begin{smallmatrix}4\\6\\7\end{smallmatrix}\right] \\ \hline [1,2] & 1 & 0 & 0 \\ [1,3] & -1 & 0 & 0 \\ [2,3] & 1 & 0 & 0 \\ [2,4] & 0 & 0 & 0 \\ [3,5] & 0 & 0 & 0 \\ [4,5] & 0 & 1 & 0 \\ [4,6] & 0 & -1 & 1 \\ [4,7] & 0 & 0 & -1 \\ [5,6] & 0 & 1 & 0 \\ [6,7] & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

图 1. *Left-hand side panel: example of simplicial complex $\mathcal{K}$ on 7 nodes, and of the action of ∂_2 on the 2-simplex $[1,2,3]$; 2-simplices included in the complex are shown in red, arrows correspond to the orientation. Panels on the right: matrix forms B_1 and B_2 of boundary operators ∂_1 and ∂_2 respectively.*

由于我们假设 $\mathcal{V}_k$ 中的 k-单形按字典序排列，因此可以为 $C_k(\mathcal{K})$ 固定一个典范基，并据此将 ∂_k 表示为矩阵 B_k。事实上，一旦固定排序，$C_k(\mathcal{K})$ 就同构于 $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_k}$，也就是从 $\mathcal{V}_k$ 到 $\mathbb{R}$ 的函数空间，或者等价地说，是具有 $|\mathcal{V}_k|$ 个分量的实向量空间。因此，B_k 是一个 $|\mathcal{V}_{k-1}| \times |\mathcal{V}_k|$ 矩阵，而 ∂_k^* 与 $B_k^\top$ 重合。我们始终假设 $C_k(\mathcal{K})$ 的典范基按此方式固定，今后只讨论其矩阵表示 B_k。图 1 展示了 B_k 在 $k=1$ 和 $k=2$ 下的一个示例。

直接计算可知，下列基本恒等式成立（参见例如 [22,定理 5.7]）

$$B_k B_{k+1} = 0 \tag{2.1}$$

对任意 k。在连续情形中，这个恒等式也称为同调基本引理，它使我们能够为每个 k-链定义一个同调群。事实上，方程 (2.1) 特别意味着 $\operatorname{im} B_{k+1} \subset \ker B_k$，因此 k-阶同调群定义正确：

$$\mathcal{H}_k = \ker B_k \big/ \operatorname{im} B_{k+1}$$

k阶同调群的维数称为 k阶贝蒂数 $\beta_k = \dim \mathcal{H}_k$，而 $\mathcal{H}_k$ 的元素对应于单纯复形中所谓的 k维洞。例如，$\mathcal{H}_0$、$\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 分别描述连通分支、洞和三维空腔。通过标准的代数推导可知，$\mathcal{H}_k$ 与 $\ker\left(B_k^\top B_k + B_{k+1} B_{k+1}^\top\right)$同构。因此，$k$维洞的数量对应于一个线性算子核的维数，该算子称为单纯复形 $\mathcal{K}$的 k阶拉普拉斯算子或高阶拉普拉斯算子。

定义 2.4. 给定一个单纯复形 $\mathcal{K}$ 以及边界算子 B_k 和 B_{k+1}，k 阶拉普拉斯算子 L_k 的 $\mathcal{K}$ 是 $|\mathcal{V}_k| \times |\mathcal{V}_k|$ 定义如下的矩阵：

$$L_k = B_k^\top B_k + B_{k+1} B_{k+1}^\top \tag{2.2}$$

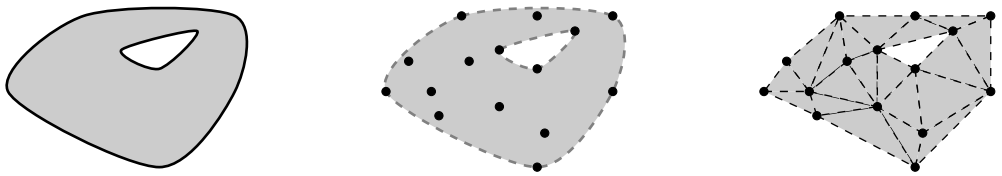


图 2. Continuous manifolds and their discrete counterparts. Left: a 2-dimensional manifold, embedded in $\mathbb{R}^3$. Middle: a sample of vertices from the manifold. Right: a simplicial complex built upon the mesh. Triangles in the simplicial complex $\mathcal{K}$ are colored gray (right).

特别地，我们指出：

- 零阶拉普拉斯算子是标准的组合图拉普拉斯算子 $L_0 = B_1 B_1^\top \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其对角元素由相应顶点的度组成（即每个顶点所属的 1-单形数量），而非对角元素（L_0）$_{ij}$ 在ij 为 1-单形时等于 -1，否则为零；
- 一阶拉普拉斯算子称为霍奇拉普拉斯算子 $L_1 = B_1^\top B_1 + B_2 B_2^\top \in \mathbb{R}^{m\times m}$。与零阶情形类似 L_0，可以根据单纯复形的结构描述 L_1 的各个元素，参见例如 [23]。

2.1.1. 连通分支与洞。 边界算子 B_k 作用于 $\mathcal{K}$ 与图上的微分算子的离散概念直接相关。特别是， B_1、$B_1^\top$和 $B_2^\top$ 分别是图的散度、梯度和旋度算子。更多详情请参阅 [22] 。由于 $\mathcal{H}_k$ 同构于 $\ker L_k$，因此有如下霍奇分解： $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_k}$ 成立

$$\mathbb{R}^{\mathcal{V}_k} = \operatorname{im} B_{k+1} \oplus \operatorname{im} B_k^\top \oplus \ker L_k = \operatorname{im} \overline{B}_{k+1} \oplus \operatorname{im} \overline{B}_k^\top \oplus \ker \overline{L}_k \,. \tag{2.3}$$

因此，顶点状态空间 $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_0}$ 可分解为 $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_0} = \operatorname{im} B_1 \oplus \ker\ L_0$，即无散向量与调和向量之和，它们对应于图的连通分支。特别地，对于连通图，$\ker L_0$ 是一维的，由各分量均为常数的向量构成。因此，对于连通图，$\operatorname{im} B_1$ 是分量之和为零的向量集合。

类似地，图的边上的流空间 $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_1}$ 可分解为 $\mathbb{R}^{\mathcal{V}_1} = \operatorname{im} B_2 \oplus \operatorname{im}\ B_1^\top \oplus \ker\ L_1$。因此，每个流都可以分解为其梯度部分 $\operatorname{im} B_1^\top$（由环路和为零的流构成）、其旋度部分 $\operatorname{im} B_2$（由 $\mathcal{K}$ 中围绕二阶单形的环流构成），以及其调和部分 $\ker L_1$；后者表示一维洞，即模去旋度流后的全局环流。

虽然 0 维洞很容易理解为图的连通分支$\mathcal{G}_\mathcal{K}$，但“图中的洞”这一概念 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 对应于 $\mathcal{K}$中的一维洞。这一术语源自与连续情形的类比。事实上，如果图是连续流形的离散化结果，那么同调群中的调和函数 $\mathcal{H}_1$就对应于流形中的洞，如图 2所示。此外，构建于流形中 N 随机采样点之上的单纯复形的霍奇拉普拉斯算子，在热力学极限下收敛到其连续对应物，如 $N \to \infty$ 所示， [12]。

2.2. 归一化加权高阶拉普拉斯算子。在经典图的情形中，应用中常常会使用拉普拉斯矩阵的归一化加权版本。从矩阵理论视角来看，加权图意味着定义该图的邻接矩阵可以具有任意非负元素。就边界算子而言，这等价于进行正对角缩放。类似地，归一化拉普拉斯算子是通过利用节点权重对标准拉普拉斯算子进行对角合同变换来定义的。下面简要回顾这两种构造。

设 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 是一个图，其节点和边权重函数 $w_0 : \mathcal{V} \to \mathbb{R}_{++}$和 $w_1 : \mathcal{E} \to \mathbb{R}_{++}$ 均为正。定义 $|\mathcal{V}| \times |\mathcal{V}|$ 和 $|\mathcal{E}| \times |\mathcal{E}|$ 对角矩阵 $W_0 = \mathrm{Diag}\{w_0(v_i)^{1/2}\}_{i=1}^n$ 和 $W_1 = \mathrm{Diag}\{w_1(e_i)^{1/2}\}_{i=1}^m$。那么，$B_1 = W_0^{-1} B_1 W_1$ 是 $\mathcal{G}$ 的归一化加权边界算子，并且有

$$\overline{L}_0 = \overline{B}_1 \overline{B}_1^\top = W_0^{-1} B_1 W_1^2 B_1^\top W_0^{-1} \tag{2.4}$$

是 $\mathcal{G}$ 的归一化加权图拉普拉斯算子。

特别地，注意到与 L_0的情形一样， L_0 的元素唯一确定了图拓扑，事实上有

$$(\overline{L}_0)_{ii} = \frac{\deg(i)}{w_0(i)}, \qquad (\overline{L}_0)_{ij} = \begin{cases} -\frac{w_1(ij)}{\sqrt{w_0(i)w_0(j)}} & ij \in \mathcal{E} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \text{ for } i \neq j$$

其中 $\deg(i)$ 表示节点 i 的（加权）度，即 $\deg(i) = \sum_{e \in \mathcal{E}:\ i \in e} w_1(e)$.

尽管对于无权边和单形， k阶拉普拉斯算子的定义已相当成熟，但加权且归一化的 k阶拉普拉斯算子尚无普遍适用的定义，具体形式可能取决于所面对的应用。例如，文献 [11, 20, 22, 29]中考虑了不同的加权霍奇拉普拉斯算子定义。

与此同时，我们注意到，公式（2.4）中使用的记法可直接推广到更高阶。因此，我们提出以下归一化加权 k阶拉普拉斯算子的定义

定义 2.5。设 $\mathcal{K}$ 是一个单纯复形，且 $w_k : \mathcal{V}_k \to \mathbb{R}_{++}$ 是定义在 k的 $\mathcal{K}$单形上的正值权重函数。定义对角矩阵 $W_k = \mathrm{Diag}\big\{w_k(\sigma_i)^{1/2}\big\}_{i=1}^{|\mathcal{V}_k|}$。那么， $B_k = W_{k-1}^{-1} B_k W_k$ 是归一化加权 k阶边界算子，与之对应的是归一化加权 k阶拉普拉斯算子

$$\begin{aligned} \overline{L}_k &= \overline{B}_k^\top \overline{B}_k + \overline{B}_{k+1} \overline{B}_{k+1}^\top \\ &= W_k B_k^\top W_{k-1}^{-2} B_k W_k + W_k^{-1} B_{k+1} W_{k+1}^2 B_{k+1}^\top W_k^{-1}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

注意，根据定义 $B_k = W_{k-1}^{-1} B_k W_k$ 和 公式（2.1），我们立即得到 $B_k B_{k+1} = 0$。因此，群 $\mathcal{H}_k = \ker B_k / \mathrm{im}\, B_{k+1}$ 对于任意选取的正权重 w_k 都有良好定义，且同构于 $\ker L_k$。虽然同调群可能取决于权重，但我们将在下文证明，其维数并不受影响。具体而言，我们有

命题 2.6。 的同调群维数 不受其 k-单形的权重影响。具体而言，若 W_k 是正对角矩阵，则有

$$\dim \ker \overline{B}_k = \dim \ker B_k, \quad \dim \ker \overline{B}_k^\top = \dim \ker B_k^\top, \quad \dim \overline{\mathcal{H}}_k = \dim \mathcal{H}_k\,. \tag{2.6}$$

此外，$\ker B_k = W_k \ker \overline{B}_k$和$\ker B_k^\top = W_{k-1}^{-1} \ker \overline{B}_k^\top$。

证明。 由于 W_k 是可逆对角矩阵，

$$\overline{B}_k \boldsymbol{x} = 0 \iff W_{k-1}^{-1} B_k W_k \boldsymbol{x} = 0 \iff B_k W_k \boldsymbol{x} = 0.$$

因此，如果 $\boldsymbol{x} \in \ker \overline{B}_k$，那么 $W_k \boldsymbol{x} \in \ker B_k$；又由于 W_k 是双射，$\dim \ker \overline{B}_k = \dim \ker B_k$。类似地，可以观察到 $\dim \ker \overline{B}_k^\top = \dim \ker B_k^\top$。此外，由于 $\overline{B}_k \overline{B}_{k+1} = 0$，因此 $\operatorname{im} \overline{B}_{k+1} \subseteq \ker \overline{B}_k$ 且 $\operatorname{im} \overline{B}_k^\top \subseteq \ker \overline{B}_{k+1}^\top$。这就得到 $\ker \overline{B}_k \cup \ker \overline{B}_{k+1}^\top = \mathbb{R}^{\mathcal{V}_k} = \ker B_k \cup \ker B_{k+1}^\top$。因此，对于同调群，有 $\dim H_k = \dim \mathcal{H}_k$。 ■

2.3. 主谱继承。 在进入下一节之前，我们先回顾一个相对直接但重要的谱性质，它联系了 k阶拉普拉斯算子与（$k+1$）阶拉普拉斯算子的谱。

定理 2.7（高阶拉普拉斯算子的谱继承）。设 $L_k^{down} = B_k^\top B_k$ 和$L_k^{up} = B_{k+1} B_{k+1}^\top$。则：

1. $\sigma_+(L_k^{up}) = \sigma_+(L_{k+1}^{down})$，其中 $\sigma_+(\cdot)$ 表示正特征值集合；2. 对于任意 $\mu \in \sigma_+(L_k)$，要么 $\mu \in \sigma_+(L_k^{up})$，要么对应的特征向量 $\boldsymbol{v} \in \ker L_k^{up}$。类似地，对于任意 $\nu \in \sigma_+(L_{k+1})$，要么 $\nu \in \sigma_+(L_{k+1}^{down})$，要么对应的特征向量$\boldsymbol{u} \in \ker L_{k+1}^{down}$，并且

$$\overline{B}_k^\top \overline{B}_k \boldsymbol{v} = \mu \boldsymbol{v}, \qquad \overline{B}_{k+2} \overline{B}_{k+2}^\top \boldsymbol{u} = \nu \boldsymbol{u}.$$

证明。对于 $\mu > 0$，只需注意，若 $(\mu, \boldsymbol{x})$ 是 L_k^{up} 的一个特征对，则 $(\mu, \mu^{-1/2} B_{k+1}^\top \boldsymbol{x})$ 是 L_{k+1}^{down} 的一个特征对。类似地，若 $(\mu, \boldsymbol{y})$ 是 L_{k+1}^{down} 的一个特征对，则 $(\mu, \mu^{-1/2} B_{k+1} \boldsymbol{y})$ 是 L_k^{up} 的对应特征对，从而得到（1）。结论（2）直接由霍奇分解（2.3）得出。 ■

换言之，从一个阶次转到下一个阶次时，k 阶拉普拉斯算子的谱变化如下：下项 L_{k+1}^{down} 继承了 L_k^{up} 的上项谱中的正谱部分；与继承的正谱部分相对应的特征向量属于 L_{k+1}^{up} 的核；与此同时，“新”的上项 L_{k+1}^{up} 具有一部分新的、非继承的正谱（反过来，这部分正谱属于 $(k+2)$ 阶下项的核）。

特别是，我们注意到，对于 $k = 0$，由于 $B_0 = 0$ 和 $L_0 = L_0^{up}$，定理得出$\sigma_+(L_0) = \sigma_+(L_1^{down}) \subseteq \sigma_+(L_1)$。换言之，$L_0$ 的正谱被L_1 的谱所继承，而 $\sigma_+(L_1)$中剩余的（非继承）部分与$\sigma_+(L_1^{up})$相同。图3 展示了定理 2.7 在 $k = 0$下的陈述。

3. 问题设定：具有不同同调的最近复形。假设给定一个单纯复形 $\mathcal{K}$，其顶点集为 $\mathcal{V}$，单形权重函数为 w_0，w_1，……，并令 $\beta_k = $维数$\mathcal{H}_k = $维数$\mathcal{H}_k$为其 k-同调的维数。我们的目标是在相同的顶点集 $\mathcal{V}$上找到一个最接近的单形，使其洞的数量严格增加。由于高阶拉普拉斯算子是应用中最常见的拉普拉斯算子，且这已带来大量数值计算上的复杂问题，因此我们在此仅关注霍奇拉普拉斯算子的情形：

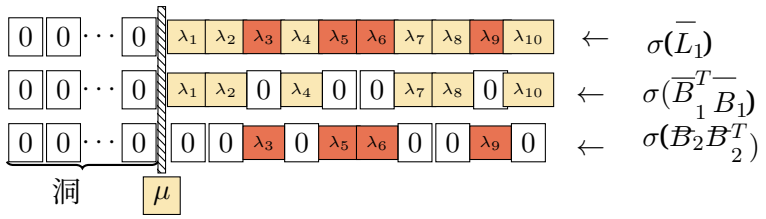


图3. *Illustration for the principal spectrum inheritance (Theorem 2.7) in case $k = 0$: spectra of $\mathcal{L}_1$ $\overline{\quad}$ $\overline{\quad}$ $\lambda_i > 0 \in \sigma\ L_1$; all yellow $\overline{\quad}$, eigenvalues are inherited from $\sigma_+\ L_0$; red eigenvalues belong to the non-inherited part. Dashed barrier μ signifies the penalization threshold (see the target functional in Section 4) preventing homological pollution (see Subsection 3 1).* L^{down} *and* L^{up} *are shown. Colors signify the splitting of the spectrum() ().*

给定单纯复形 $\mathcal{K} = (\mathcal{V}_0,\ \mathcal{V}_1,\ \mathcal{V}_2,\ .....)$，我们寻找对边 $\mathcal{V}_1$ 的最小扰动，使 $\mathcal{H}_1$的维数增加。更准确地说：

问题 3.1。 设 $\mathcal{K}$ 是一个阶至少为 2 的单纯复形，其对应的边权重函数为 w_1 ，对应的对角权重矩阵为 W_1，并设 $\beta_1(W_1)$ 为与 W_1中的权重对应的同调群的维数。对于 $\varepsilon > 0$，令

$$\Omega(\varepsilon) = \Big\{ \textit{diagonal matrices } W \textit{ such that } \|W\| = \varepsilon \Big\},$$
$$\Pi(W_1) = \Big\{ \textit{diagonal matrices } W \textit{ such that } W_1 + W \geq 0 \Big\}.$$

换言之，$\Omega(\varepsilon)$ 是一个 ε 球面，并且 $\Pi(W_1)$ 只允许非负单形权重。我们要寻找最小的扰动 ε ，使得存在一个权重修改 $\delta W_1 \in \Omega(\varepsilon) \cap \Pi(W_1)$ ，满足 $\beta_1(W_1) < \beta_1(W_1 + \delta W_1)$。

在本文中， $\|X\|$ 表示：若 X 是矩阵，则为弗罗贝尼乌斯范数；若 X 是向量，则为欧几里得范数。注意，由于我们要寻找最小的 ε，显然应选择等式 $\|W\| = \varepsilon$，而非 $\|W\| \leq \varepsilon$。

由于维数 β_1 与 L_1核的维数一致，我们通过最小化一个基于单纯复形的 0 阶和 1 阶拉普拉斯算子谱的泛函来处理这个问题。为了定义这样的泛函，我们首先作一些考量。

注意，由于 命题 2.6，只要所有边权重保持为正，扰动边权重并不会改变第一同调群的维数。因此，为了找到所需的扰动 δW_1，我们需要将部分初始权重设为零。这一操作会带来若干潜在问题，接下来将对此进行讨论。

首先，将一条边设为零，意味着形式上从单纯复形中移除该边。由于需要维持单纯复形的结构，这样做时还需要将任何包含该边的 2-单形的权重设为零。因此，若 $\widetilde{w}_1(e) = w_1(e) + \delta w_1(e)$ 是新的边权重函数，我们要求 2-单形的权重函数变为 $\widetilde{w}_2$，其定义如下

$$\widetilde{w}_2(i_1 i_2 i_3) = f\left(\frac{\delta w_1(i_1 i_2)}{w_1(i_1 i_2)}, \frac{\delta w_1(i_2 i_3)}{w_1(i_2 i_3)}, \frac{\delta w_1(i_1 i_3)}{w_1(i_1 i_3)} \right) \cdot w_2(i_1 i_2 i_3)$$

其中 $f(u_1, u_2, u_3)$ 是一个函数，满足 $f(0, 0, 0) = 1$，并且随着 $u_i \to -1$ 单调递减至零，对于任意 $i = 1, 2, 3$。此类 f 的一个示例如下

$$f(u_1, u_2, u_3) = 1 - \min\{u_1, u_2, u_3\}\,. \tag{3.1}$$

其次，将一条边的权重设为零时，可能会使底层图断开，并在霍奇拉普拉斯算子中产生一个全零列和行。这就产生了我们称为“同调污染”的现象，我们将在下一小节中详细讨论。

3.1. 同调污染：继承的近似不连通性。 由于霍奇同调的维数 β_1 对应于 L_1中的零特征值个数，直觉上，如果 L_1 有某个接近零的特征值，那么该单纯复形就“接近于”至少多出一个一维洞。然而，这种直觉判断存在若干问题。

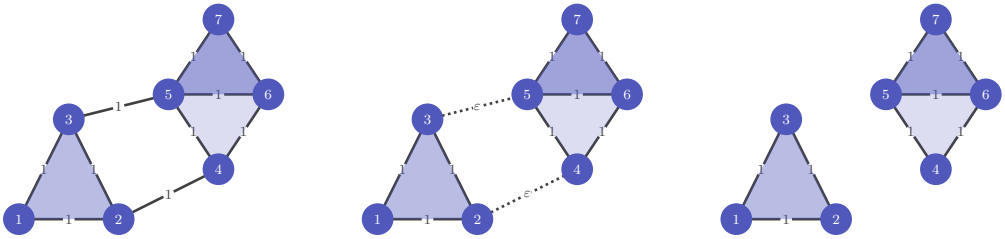
根据定理 2.7，对于 $k = 0$, $\sigma_+(L_1)$ 会继承 $\sigma_+(L_0)$。因此，如果 W_1 中的权重连续变化，使得 $\sigma_+(L_0)$中的一个正特征值趋近于 0，那么 $\sigma_+(L_1)$中也会发生同样的情况。假设初始图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 是连通的，那么 $\sigma(L_0)$中趋近于零的特征值意味着 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 正趋于不连通。这会导致 L_1 的核受到某种污染：一个来自 L_0 、对应于“近似”零维洞（不连通分量）的近零特征值被继承到 L_1的谱中，但 L_1 的这个小特征值并不对应于约化复形中一个新一维洞的产生。

为了更好地说明同调污染问题，我们来看下面这个说明性示例。

例 3.2。考虑图 4a 所示的 2 阶单纯复形。在这个例子中， $\mathcal{V}_0 = \{1, \ldots, 7\}$、$\mathcal{V}_1 = \{[1,2], [1,3], [2,3], [2,4], [3,5], [4,5], [4,6], [5,6], [5,7], [6,7]\}$ 和 $\mathcal{V}_2 = \{[1,2,3], [4,5,6], [5,6,7]\}$ 的权重均为 *1*： $w_k \equiv 1$ 对于 $k = 0$，*1*，*2*。唯一存在的一维洞以红色标出，因此相应的霍奇同调为 $\beta = 1$。现在，考虑将边 $[2,4]$ 和 $[3,5]$ 的权重扰动为 $\varepsilon > 0$ 图 *4b*。对于较小的 ε，这一扰动意味着 $\sigma_+(L_0)$ 中最小的非零特征值μ_2 按 ε 缩放。由于 $\sigma_+(L_0) \subseteq \sigma_+(L_1)$，我们有 $\dim \ker L_1 = 1$，且 $\sigma_+(L_1)$ 具有一个任意小的特征值，并随 $\varepsilon \to 0$ 趋近于 *0*。与此同时，当 $\varepsilon \to 0$ 时，如图 *4c* 所示，移除零权重边得到的约化复形不含任何一维洞，即 $\beta_1 = 0$。因此，在这种情况下，存在一个非常小的特征值$\mu_2 \in \sigma_+(L_1)$，并不意味着该单纯复形接近一个霍奇同调维数更大的单纯复形。

为缓解同调污染现象，在我们针对问题 3.1 的基于谱的泛函中，我们加入一项，用以惩罚 L_0 的谱趋近于零。为此，我们将在下文指出，必须谨慎选择顶点权重。

拉普拉斯算子 $\mu_2 \in \sigma(L_0)$ 的最小非零特征值与图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 的连通性直接相关。这种关系众所周知，其历史可追溯至 Fiedler [14] 的开创性工作。特别是，由于 μ_2 是节点权重和边权重的函数，以下



(a) 连通 (b) 接近非连通 (c) 非连通

图 4. *Example of the homological pollution, Example 3.2, for the simplicial complex $\mathcal{K}$ on 7 vertices; the existing hole is $[2,3,4,5]$ (left and center pane) all 3 cliques are included in the simplicial complex and shown in blue. The left pane demonstrates the initial setup with 1 hole; the center pane retains the hole exhibiting spectral pollution; the continuous transition to the eliminated edges with $\beta_1 = 0$ (no holes) is shown on the right pane.*

切格不等式的广义形式成立（例如参见 [31]）

$$\frac{1}{2}\mu_2 \le h(\mathcal{G}_\mathcal{K}) \le \left(2\,\mu_2 \max_{i\in\mathcal{V}_0}\frac{\deg(i)}{w_0(i)}\right)^{1/2}, \tag{3.2}$$

其中， $h(\mathcal{G}_\mathcal{K})$ 是图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$的切格常数，定义为

$$h(\mathcal{G}_\mathcal{K}) = \min_{S\subset\mathcal{V}_0}\frac{w_1(S,\mathcal{V}_0\backslash S)}{\min\{w_0(S),w_0(\mathcal{V}_0\backslash S)\}},$$

与 $w_1(S,\ \mathcal{V}_0\backslash S) = \sum_{ij\in\mathcal{V}_1:\ i\in S\ j\notin S} w_1(ij)$， $\deg(i) = \sum_{j:\ ij\in\mathcal{V}_1} w_1(ij)$， 以及 $w_0(S) = \sum_{i\in S} w_0(i)$ 。

我们从 (3.2) 立即可以看出，当图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 不连通时， $h(\mathcal{G}_\mathcal{K}) = 0$也 $\mu_2 = 0$ 。反过来，如果 μ_2 趋于零，那么 $h(\mathcal{G}_\mathcal{K}$也会趋于零。尽管这一现象与 w_0 和 w_1无关，但如果 w_0 是 w_1 的函数，它可能无法捕捉到权重逐渐减小、即将导致图不连通的边。

为说明这一点，考虑如下选择： $w_0(i) = \deg(i)$，即图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 中节点 i 的度。请注意，这是图论文献中非常常见的选择，具有若干有用性质，其中包括切格不等式 (3.2) 中除 μ_2 之外不再出现其他依赖于图的常数。对于这种权重选择，考虑一个叶节点，即节点 $i \in \mathcal{V}_0$，它只有一条边 $ij_0 \in \mathcal{V}_1$ ，通过节点 j_0 将 i 与（连通的）图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 的其余部分连接起来。若设 $w_1(ij_0) = \varepsilon$ ，并令 ε 趋于零，则图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 正趋于不连通，我们会预期 $h(\mathcal{G}_\mathcal{K})$ 和 μ_2 也随之减小。然而，很容易验证，在这种情况下，只要 $\varepsilon \neq 0$， μ_2 和 $h(\mathcal{G}_\mathcal{K})$ 都相对于 ε 保持不变。

为了避免这种不连续性，在我们针对单形$\mathcal{K}$的权重扰动策略中，如果 w_0 是 w_1的函数，我们会对其施加一个常数平移。具体而言，如果 w_0 是 $\mathcal{K}$的初始顶点权重，我们设定 $\widetilde{w}_0(i) = w_0(i) + \varrho$，其中 $\varrho > 0$。例如，如果 $w_0 = \deg$，并且在添加 δW_1后形成了新的边权重函数 $\widetilde{w}_1(e) = w_1(e) + \delta w_1(e)$，我们设定 $\widetilde{w}_0(i) = \sum_j [w_1(ij) + \delta w_1(ij)] + \varrho$。

4. 适用于1阶同调稳定性的谱泛函。现在我们可以构造所提出的基于谱的泛函，其最小化将得到所需的

能够改变 $\mathcal{K}$的第一同调的小扰动。在问题 3.1的记号下，我们关注最小扰动 ε 及相应的修改 $\delta W_1 \in \Omega(\varepsilon) \cap \Pi(W_1)$，使 β_1增大。

由于 $\|\delta W_1\| = \varepsilon$，为方便起见，我们用 $\delta W_1 = \varepsilon E$ 表示 $\|E\| = 1$，因此 $E \in \Omega(1) \cap \Pi_\varepsilon(W_1)$，其中 $\Pi_\varepsilon(W_1) = \{W \mid \varepsilon W \in \Pi(W_1)\}$。为简洁起见，在不会引起歧义时，我们将省略依赖关系，记作 Ω 和 Π_ε。最后，我们用 $\beta_1(\varepsilon, E)$表示通过边修改而受到扰动的单纯复形所对应的第一贝蒂数εE。采用这一记号，我们可以将问题 3.1重新表述如下：

问题 4.1。求最小的 $\varepsilon > 0$，使得存在一个可容许扰动$E \in \Omega \cap \Pi_\varepsilon$，使洞的数量增加，即

$$\min \left\{ \varepsilon > 0 : \beta_1(\varepsilon, E) \geq \beta_1 + 1 \text{ for some } E \in \Omega \cap \Pi_\varepsilon \right\} \tag{4.1}$$

其中 $\beta_1 = \beta_1(0, \cdot)$ 是原单纯复形的第一贝蒂数。

为了处理 问题 4.1，我们引入一个目标泛函 $F(\varepsilon, E)$，它基于 1-拉普拉斯算子 $L_1(\varepsilon, E)$ 和 0-拉普拉斯算子 $L_0(\varepsilon, E)$，其中对ε和 E 的依赖是为了强调相应的权重扰动形式为 $W_1 \mapsto W_1 + \varepsilon E$。

我们的目标是将 $\sigma_+(L_1(\varepsilon, E))$ 中的一个正元素移入核中。同时，假设初始图 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 连通，应避免因 $\sigma_+(L_0(\varepsilon, E))$ 中的微小正元素而继承几乎不连通的性质。因为根据定理 2.7，对于 $k = 0$,$\sigma_+(L_0(\varepsilon, E)) = \sigma_+(L_1^{down}(\varepsilon, E))$，$L_1(\varepsilon, E)$ 中唯一能够连续地趋于 0 的特征值来自 $L_1^{up}(\varepsilon, E)$。因此，我们将上拉普拉斯算子 $L_1^{up}(\varepsilon, E)$ 的第一个非零特征值记为 $\lambda_+(\varepsilon, E)$。所提出的目标泛函定义如下：

$$F(\varepsilon, E) = \frac{\lambda_+(\varepsilon, E)^2}{2} + \frac{\alpha}{2} \max\left(0, 1 - \frac{\mu_2(\varepsilon, E)}{\mu}\right)^2 \tag{4.2}$$

其中 α 和 μ 是正参数，而 $\mu_2(\varepsilon, E)$ 是 $L_0(\varepsilon, E$的第一个非零特征值。正如 第 3.1 小节中所回顾的那样，$\mu_2(\varepsilon, E)$ 是衡量扰动后图连通性的代数指标，因此，当这种代数连通性低于阈值 μ时，式（4.2）中的整个第二项便会“激活”。

按照设计，$F(\varepsilon, E)$ 非负，且当且仅当 $\lambda_+(\varepsilon, E)$ 达到 0 时等于 0，从而增加 $\mathcal{H}_1$的维数。利用这一泛函，我们将问题 4.1改写为

$$\min \{\varepsilon > 0 : F(\varepsilon, E) = 0 \text{ for some } E \in \Omega_\varepsilon\} \tag{4.3}$$

注 4.2. 当 $\mathcal{G}_\mathcal{K}$ 连通时，$\dim \ker L_0 = 1$，并且根据定理 2.7，$\dim \ker L_1^{up} = \dim \ker L_1 + (n - \dim \ker L_0) = n + \beta_1 - 1$，因此 L_1^{up}的第一个非零特征值是第（$n + \beta_1$）个。尽管在实践中（$n + \beta_1$）可能是一个很大的数，我们将在第 6.1 小节讨论一种高效方法，无需计算前面的任何（$n + \beta_1 - 1$）个特征值，就能计算 $\lambda_+(\varepsilon, E)$。

5. 两层优化过程。 我们采用一种两层迭代方法来求解问题（ F），该方法基于对目标泛函 ε，E进行逐次最小化，随后对参数 ε进行调节。具体而言，我们提出以下两层方案。

1. **内层：** 固定 $\varepsilon > 0$，求解最小化问题

$$E(\varepsilon) = \operatorname*{arg\,min}_{E \in \Omega \cap \Pi_\varepsilon} F(\varepsilon, E)$$

通过下文所构造的约束梯度流，其中我们将计算得到的极小化点记为 $E(\varepsilon)$。

2. **外层：** 给定函数 $\varepsilon \mapsto E(\varepsilon)$，我们希望求解方程：

$$F(\varepsilon, E(\varepsilon)) = 0 \tag{5.1}$$

我们的目标是计算最小解 $\varepsilon^* > 0$ （5.1）。
类似的方法曾用于 [2, 3] 中的图谱近似问题以及其他矩阵近似问题 [19]。

我们通过约束梯度系统处理内层问题

$$\dot{E}(t) = -\mathbb{P}_{\Omega \cap \Pi_\varepsilon} G(\varepsilon, E(t)), \qquad G(\varepsilon, E) = \nabla_E F(\varepsilon, E) \tag{5.2}$$

其中，$\mathbb{P}_{\Omega \cap \Pi_\varepsilon}$ 是投影到可行集 $\Omega \cap \Pi_\varepsilon$（其中 ε 固定）上的正交投影算子（相对于 Frobenius 内积）。由于该系统对负梯度进行积分，因此可得到 $F(\varepsilon, E)$ 的一个极小化点（至少是局部极小化点），即 $t \to \infty$。

接下来的两个 小节 5.1 和 小节 5.2 将用于计算式（5.2）中的投影梯度。其思路是用扰动的导数来表示 F 的导数，从而确定自由梯度，然后将其投影到约束上，得到受约束梯度。为此，我们首先计算自由梯度，然后讨论如何处理向可行集的投影。

根据构造，所得算法收敛到 $F(\varepsilon, E)$ 的一个（局部）极小值。尽管无法保证全局收敛到全局最优解，但在一些简单的实验中，我们观察到该方法达到了预期的全局解。

5.1. 自由梯度。这里我们计算 F 关于 E的自由梯度，其中给定一个固定的 ε。为继续推导，我们需要一些预备结果。

以下是关于特征值的一个标准扰动结果；例如参见 [21], ，其中我们用 $\langle X, Y \rangle = \sum_{i,j} x_{ij} y_{ij} = \mathrm{Tr}(X^\top Y)$ 表示 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中的内积，该内积诱导出弗罗贝尼乌斯范数 $\|X\| = \langle X, X \rangle^{1/2}$。

定理 *5.1*（简单特征值的导数）。设 $A(t)$ 是定义在开区间 $\mathcal{I}$ 上、关于 t 连续可微的方阵对称矩阵路径。设 $\lambda(t)$, $t \in \mathcal{I}$ 是 $A(t)$ 的一条连续简单特征值路径。设 $\boldsymbol{x}(t)$ 是与特征值 $\lambda(t)$ 对应的特征向量，并假设对所有 t，均有 $\|\boldsymbol{x}(t)\| = 1$ 。则 λ 在 $\mathcal{I}$ 上连续可微，其导数（记作一个点）为

$$\dot{\lambda} = \boldsymbol{x}^\top \dot{A} \boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top, \dot{A} \rangle . \tag{5.3}$$

此外，假设和结论中的“连续可微”可以替换为“解析”。

我们将扰动后的权重矩阵记为 $\widetilde{W}_1(t) = W_1 + \varepsilon E(t)$，并将相应的 $\widetilde{W}_0(t) = W_0(\widetilde{W}_1(t))$ 和 $\widetilde{W}_2(t) = W_2(\widetilde{W}_1(t))$ 按照第 3 节中的讨论进行定义。从现在起，为简化记号，我们省略扰动后矩阵对时间的依赖。由于 W_0、W_1 和 W_2 必然为对角矩阵，根据链式法则，我们有 $\dot{\widetilde{W}}_i(t) = \varepsilon\,\mathrm{diag}\left(J_1^i \dot{E}\mathbf{1}\right)$，其中 $\mathbf{1}$ 是全 1 向量，$\mathrm{diag}(v)$ 是对角元素为向量 v 的对角矩阵，而 J_1^i 是第 i 个权重矩阵关于 $\widetilde{W}_1$ 的雅可比矩阵；对于任意 $u_1 \in \mathcal{V}_1$ 和 $u_2 \in \mathcal{V}_i$，其元素为 $[J_1^i]_{u_1,u_2} = \frac{\partial}{\partial \widetilde{w}_1(u_1)} \widetilde{w}_i(u_2)$。

接下来，在以下两个引理中，我们将拉普拉斯算子 L_0 和 L_1^{up} 的时间导数表示为 $\overline{E(t)}$ 的函数。这些结果的证明很直接，为简洁起见，此处省略。下文中，$\mathrm{Sym}[A]$ 表示矩阵 A 的对称部分，即 $\mathrm{Sym}[A] = (A + A^\top)/2$。

引理 5.2（L_0 的导数）。对于单纯复形 $\mathcal{K}$，其初始边权 $\widetilde{\ }$ 矩阵 W_1 以及固定的扰动范数 ε，设 $E(t)$ 为一条光滑路径，且 W_0、W_1、W_2 为相应的扰动权重矩阵。那么，

$$\frac{1}{2\varepsilon}\frac{d}{dt}\overline{L}_0(t) = \widetilde{W}_0^{-1} B_1 \widetilde{W}_1 \dot{E} B_1^\top \widetilde{W}_0^{-1} - \mathrm{Sym}\left[\widetilde{W}_0^{-1}\,\mathrm{diag}\left(J_1^0 \dot{E}\mathbf{1}\right)\overline{L}_0\right]. \tag{5.4}$$

引理 5.3（L_1^{up} 的导数）。对于单纯复形 $\mathcal{K}$，其初始边权 $\widetilde{\ }$ 矩阵 W_1 以及固定的扰动范数 ε，设 $E(t)$ 为一条光滑路径，且 W_0、W_1、W_2 为相应的扰动权重矩阵。那么，

$$\frac{1}{2\varepsilon}\frac{d}{dt}\overline{L}_1^{up}(t) = -\,\mathrm{Sym}\left[\widetilde{W}_1^{-1} B_2 \widetilde{W}_2^2 B_2^\top \widetilde{W}_1^{-1} \dot{E} \widetilde{W}_1^{-1}\right] + \widetilde{W}_1^{-1} B_2 \widetilde{W}_2\,\mathrm{diag}\left(J_1^0 \dot{E}\mathbf{1}\right) B_2^\top \widetilde{W}_1^{-1}$$

结合定理 5.1 与引理5.2 和引理 5.3，我们得到泛函自由梯度的如下表达式。

定理 *5.4*（$F(\varepsilon, E)$ 的自由梯度）。假设初始权重矩阵 W_0、W_1 和 W_2，以及参数 $\varepsilon > 0$、$\alpha > 0$ 和 $\mu > 0$ 已给定。此外，假设 $E(t)$ 是一个可微的矩阵值函数，使得 $L_1^{up}(\varepsilon, E)$ 的第一个非零特征值 $\lambda_+(\varepsilon, E)$ 和 $L_0(\varepsilon, E)$ 的第二小特征值 $\mu_2(\varepsilon, E)$ 均为单重特征值。令 $\widetilde{\ }$ 表示相应的扰动权重矩阵；则：

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\varepsilon}\nabla_E F(\varepsilon, E)(t) = \lambda_+(\varepsilon, E)\cdot \\
\cdot \Bigg[&\mathrm{Sym}\left[-\widetilde{W}_1^{-1} B_2 \widetilde{W}_2^2 B_2^\top \widetilde{W}_1^{-1} \boldsymbol{x}_+ \boldsymbol{x}_+^\top \widetilde{W}_1^{-1}\right] \\
&+ \mathrm{diag}\left(J_1^{2\top}\,\mathrm{diagvec}\left(B_2^\top \widetilde{W}_1^{-1} \boldsymbol{x}_+ \boldsymbol{x}_+^\top \widetilde{W}_1^{-1} B_2 \widetilde{W}_2\right)\right)\Bigg] - \frac{\alpha}{\mu}\max\left\{0, 1 - \frac{\mu_2(\varepsilon, E)}{\mu}\right\}\cdot \\
\cdot \Bigg[&B_1^\top \widetilde{W}_0^{-1} \boldsymbol{y}_2 \boldsymbol{y}_2^\top \widetilde{W}_0^{-1} B_1 \widetilde{W}_1 - \mathrm{diag}\left(J_1^{0\top}\,\mathrm{diagvec}\left(\mathrm{Sym}[\widetilde{W}_0^{-1} \boldsymbol{y}_2 \boldsymbol{y}_2^\top \overline{L}_0]\right)\right)\Bigg]
\end{aligned}$$

其中，$\boldsymbol{x}_+$ 是与 λ_+ 对应的 L_1^{up} 的单位特征向量，$\boldsymbol{y}_2$ 是与 μ_2 对应的 L_0 的单位特征向量，而算子 $\mathrm{diagvec}(X)$ 会将 X 的主对角线作为向量返回。

证明。 为了推导梯度 $\nabla_E F$的表达式，我们利用时间导数的链式法则： $\dot{\lambda} = \langle \frac{d}{dt} A(E(t)) \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top \rangle = \langle \nabla_E \lambda, \dot{E} \rangle$。然后，只需分别对 引理 5.2 和 引理 5.3 中的标量积应用 $\boldsymbol{x}_+\boldsymbol{x}_+^\top$和 $\boldsymbol{y}_2\boldsymbol{y}_2^\top$的循环扰动。最后一步需要用到以下公式：

$$\langle A, \operatorname{diag}(BE\mathbf{1}) \rangle = \left\langle \operatorname{diag}\left(B^\top (\operatorname{diagvec} A)\right), E \right\rangle.$$

注 5.5. 上述推导假设 $\mu_2(\varepsilon, E)$ 和 $\lambda_+(\varepsilon, E)$ 均为单重特征值。此假设并不构成限制，因为这些极端特征值为单重特征值是一种普遍性质。事实上，我们在所有数值测试中都观察到了单重性。

5.2. 约束梯度系统及其驻点。 本节将根据 定理 5.4 所确定的自由梯度，推导所考虑泛函的受约束梯度，即投影到流形 Ω 上的投影梯度（相对于 Frobenius 内积）$\cap\, \Pi_\varepsilon$，该流形由 E 范数为 1 且保持 W结构不变的扰动组成。

为了得到约束梯度系统，我们需要将 定理 5.4 给出的无约束梯度投影到可行集上，并对 E 进行归一化以保持其范数为 1。在 0 权重边的集合保持不变的时间区间内，利用 Karush-Kuhn-Tucker 条件，通过映射 $\mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E)$ 进行投影，其中

$$[\mathbb{P}_+ X]_{ij} = \begin{cases} X_{ij}, & [W_1 + \varepsilon E]_{ij} > 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}.$$

此外，为了满足约束 $\|E(t)\|^2 = 1$，我们必须有

$$0 = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|E(t)\|^2 = \langle E(t), \dot{E}(t) \rangle. \tag{5.5}$$

因此，我们得到最速下降的可行方向所对应的以下约束优化问题

引理 5.6（最速可行下降方向）。 设 E， $G \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 其中 G 由 （5.2） 给出，且 $\|E\| = 1$。在 0-权重边的集合保持不变的时间区间内，梯度系统为

$$\dot{E}(t) = -\mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E(t)) + \kappa \mathbb{P}_+ E(t), \quad \textit{where} \quad \kappa = \frac{\langle \varepsilon, G(E(t)),\, \mathbb{P}_+ E(t) \rangle}{\|\mathbb{P}_+ E(t)\|^2}. \tag{5.6}$$

证明。 我们需要将 E（t）与 E（t）正交化。为此，我们引入一个线性正交性校正，即令 $E = \mathbb{P}_+(-G - \kappa E)$，并通过施加条件确定 κ 约束 $\langle E,\ E \rangle = 0$。于是我们有

$$0 = \langle E, \dot{E} \rangle = \langle E, \mathbb{P}_+(-G - \kappa E) \rangle = -\langle \mathbb{P}_+ E, G \rangle - \kappa \langle \mathbb{P}_+ E, \mathbb{P}_+ E \rangle,$$

由此可得结果。

方程（5.6）表明，系统“主要”沿着反梯度方向 $-G(\varepsilon,\ E)$演化，因此泛函预计会沿该方向减小。

引理 5.7（单调性）。设 $E(t)$ 的弗罗贝尼乌斯范数为 *1*，且满足微分方程（*5.6*），其中 G 由（*5.2*）给出。则 $F(\varepsilon,\ E(t))$ 随 t单调递减。

证明。我们先考虑一个较简单的情形：不进行非负投影，因此 $G = G(\varepsilon,\ E)$（不含 $\mathbb{P}_+$）。于是

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}F(\varepsilon,E)(t) &= \left\langle \nabla_E F_k(\varepsilon,E),\, \dot{E}\right\rangle = \langle \varepsilon G(\varepsilon,E(t)),\, -G(\varepsilon,E(t)) + \kappa E(t)\rangle \\ &= -\varepsilon\|G(\varepsilon,E)\|^2 + \varepsilon\frac{\langle G(\varepsilon,E),\, E\rangle}{\langle E,\, E\rangle}\langle G(\varepsilon,E),\, E\rangle \\ &= \varepsilon\left(-\|G(\varepsilon,E)\|^2 + \frac{|\langle G(\varepsilon,E),\, E\rangle|^2}{\|E\|^2}\right) \le 0\end{aligned} \tag{5.7}$$

其中，最后一个估计由柯西-布尼亚科夫斯基-施瓦茨不等式给出。所得不等式在支撑 $\mathbb{P}_+$ 不发生变化的时间区间内成立（因此，非负投影不会禁止任何新的边）。

5.3. 外层的自由梯度转变。内层的优化问题是非凸的，这是因为泛函 $F(\varepsilon,\ E)$ 非凸。因此，对于给定的 ε，计算得到的极小化点 $E(\varepsilon)$ 可能取决于初始猜测 $E_0 = E_0(\varepsilon)$。

初始选择的影响在受约束内层之间转换时尤为重要 $\widehat{\varepsilon} \to \varepsilon = \widehat{\varepsilon} + \Delta\varepsilon$：若 $\Delta\varepsilon$ 足够小，则应预期优化器 $E(\widehat{\varepsilon})$ 和 $E(\varepsilon)$ 相对接近，因此初始猜测 $E_0(\varepsilon)$ 应接近并取决于 $E(\varepsilon)$。

然而，这种看似十分自然的选择会导致不连续性

$$F(\widehat{\varepsilon}, E(\widehat{\varepsilon})) \neq F(\varepsilon, E(\widehat{\varepsilon})),$$

当 $F(\widehat{\varepsilon}, E(\widehat{\varepsilon})) < F(\varepsilon, E(\widehat{\varepsilon}))$ 时（这种情况可能并不常见），这可能会妨碍预期的关于 ε 的单调性。特别是当 $\Delta\varepsilon$ 未取足够小时，就可能出现这种情况；由于 $\Delta\varepsilon$ 的选择由类牛顿迭代驱动，我们希望找到一种方法来避免这种情况，使整个迭代方法更加稳健。我们的目标是保证泛函关于时间和 ε 均具有单调性。

当我们在外层迭代中增大 ε，使其从先前的值 $\widehat{\varepsilon} < \varepsilon$变为更大的值时，我们需要为约束梯度系统（5.6）选择合适的初始值，使得在驻点 $E(\widehat{\varepsilon})$ 处有 $F(\widehat{\varepsilon}, E(\widehat{\varepsilon})) < F(\varepsilon, E(\varepsilon))$（我们假设二者均为正，即位于 $\varepsilon^\star$ 所标识的泛函最近零点的左侧）。

为了保持相对于时间以及相对于 ε 的单调性，考察取值为 ε 的优化问题是很方便的，其初始数据$\delta W_1 = \widehat{\varepsilon}E(\widehat{\varepsilon})$的范数为 $\widehat{\varepsilon} < \varepsilon$。

这意味着我们实际上需要针对不等式约束$\|\delta W_1\| \le \varepsilon$进行优化，或者等价地求解以下问题（现在对 $\|E\|_F$ 加入不等式约束）：

$$E(\varepsilon) = \operatorname*{arg\,min}_{E\in\Omega,\|E\|\le 1} F(\varepsilon, E)$$

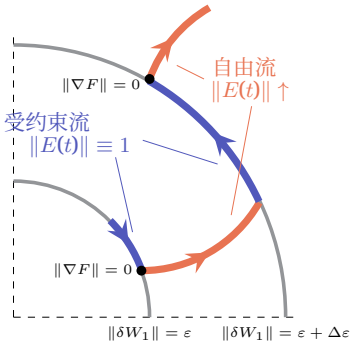


图 5. *The scheme of alternating constrained (blue, $\|E(t)\| \equiv 1$) and free gradient (red) flows. Each stage inherits the final iteration of the previous stage as initial E_0 ε_i or E_0 ε_i respectively; constrained gradient () () is integrated till the stationary point ($\|\nabla F$ E $\| = 0$) (), free gradient is integrated until $\|\delta W_1\| = \varepsilon_i + \Delta\varepsilon$. The (,) scheme alternates until the target functional vanishes (F ε E $= 0$).*

与上文讨论的情况相比，这里的情形只有些许变化。如果 $\|E\| < 1$，则所有方向都可取，最速下降方向由负梯度给出。因此，我们选择自由梯度流

$$\dot{E} = -\mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E(t)) \qquad \text{as long as} \quad \|E(t)\| < 1. \tag{5.8}$$

当 $\|E(t)\| = 1$ 时，有两种可能的情况。若 $\langle \mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E)\ E \rangle \geq 0$，则方程 (5.8) 的解满足

$$\frac{d}{dt}\|E(t)\|^2 = 2\langle \dot{E}, E\rangle = -2\langle \mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E(t)), E\rangle \leq 0,$$

因此，方程 (5.8) 的解的弗罗贝尼乌斯范数始终不超过 1。

否则，若 $\langle \mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E)\ E \rangle < 0$，最速下降的可行方向由方程 (5.6) 的右端给出，因此我们选择该常微分方程来演化 E。综上，若 $\|E(t)\| = 1$，则取

$$\dot{E} = -\mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E) + \mu E \quad \text{with} \quad \mu = \min\big(0, \kappa\big) \tag{5.9}$$

其中 $\kappa = \langle G(\varepsilon, E)\ \mathbb{P}_+ E\rangle / \|\mathbb{P}_+ E\|^2$。沿着方程 (5.9) 的解，泛函 F 单调递减，而方程 (5.9) 的驻点（即满足 $E = 0$ 且 $\mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E(t)) \neq 0$ 的点）由下式刻画

$$E \text{ is a } \textit{negative} \text{ real multiple of } \mathbb{P}_+ G(\varepsilon, E(t)). \tag{5.10}$$

如果可以排除梯度 $\mathbb{P}_+ G(\varepsilon,\ E(t))$ 在优化器处消失的可能性，那么便可得出结论：带不等式约束问题的优化器是带等式约束问题的梯度流（5.6）的驻点。

注释 5.8. 因此，$F(\varepsilon, E(t))$ 随时间 t 以及范数 ε 的值单调递减（当 $\varepsilon \leq \varepsilon^\star$ 时）。

算法 6.1完整的受约束和自由梯度流伪代码。

要求： 初始边扰动猜测 E_0；初始 $\varepsilon_0 > 0$； ε-步长 $\Delta\varepsilon > 0$；边界 α_*, α^*

对于 α-阶段；

$\alpha, E \leftarrow$ 阿尔法相位$(E_0, \varepsilon_0, \alpha_*, \alpha^*)$ ▷ 详情请参见 第 7 节

当 $|F(\varepsilon, E)| < 10^{-6}$ **do**

  $\varepsilon \leftarrow \varepsilon + \Delta\varepsilon$

  $E \leftarrow \frac{\varepsilon}{\varepsilon+\Delta\varepsilon} E$ ▷ 在自由梯度 $\|E\| < 1$之前

  $E_i \leftarrow$ 自由梯度变化过程$(E, \Delta\varepsilon, \varepsilon)$ ▷ 参见第 5.3 小节

  $E \leftarrow$ 约束梯度变化过程(E, ε) ▷ 参见第 6 节

结束循环

6. 算法详情。 在 算法 6.1 中，我们给出了整个双层过程的伪代码。初始的“α-阶段”用于选择合适的正则化参数值 α。为避免下降流早期阶段中，(4.2) 右侧的惩罚项主导损失函数 $F(\varepsilon, E(t))$，我们先运行这一初始阶段来选定 α，然后再进行主要的交替约束/自由梯度循环。在此阶段，我们固定一个较小的 $\varepsilon = \varepsilon_0$，并对初始的 $\alpha = \alpha_*$进行约束梯度积分。计算出一个局部最优解 E_*后，我们增大 α，并对相同的 ε_0 重新运行，以上一次结果 E_* 作为起点。我们重复这一过程，直到观察到 E_* 不再变化，或直到 α达到上界 α^*。

随后，在主循环中使用得到的 α 和 E_*，我们首先按选定的步长增加ε，将 E_i 按 $0 < \varepsilon/(\varepsilon + \Delta\varepsilon) < 1$重新缩放，然后执行第 5.3 小节中介绍的自由梯度积分，直到到达单位球面 E_i 上的新点 $\|E_i\| = 1$。接着，通过积分方程（5.6）执行内层约束梯度步，并迭代以下两步范数校正欧拉格式：

$$\begin{cases} E_{i+1/2} = E_i - h_i \left(\mathbb{P}_+ G(E_i, \varepsilon) - \kappa_i \mathbb{P}_+ E_i\right) . \\ E_{i+1} = \mathbb{P}_{\Pi_\varepsilon} E_{i+1/2} / \|\mathbb{P}_{\Pi_\varepsilon} E_{i+1/2}\| \end{cases} \tag{6.1}$$

由于离散化不会保持范数，且较大的步长h_i 可能会违反权重的非负性，因此需要进行第二步，以数值方式确保欧拉积分仍处于可容许流集合内。

在自由积分阶段和受约束积分阶段中，由于我们的目标是获得 $t \to \infty$ 处的解，而非精确轨迹，因此在已确立的单调性得以保持的前提下，我们倾向于采用较大的步长 h_i。具体而言，如果 $F(\varepsilon, E_{i+1}) < F(\varepsilon, E_i)$，则接受该步，并令 $h_{i+1} = \beta h_i$，其中 $\beta > 1$；否则，拒绝该步，并以较小的步长$h_i \leftarrow h_i/\beta$重复计算。

备注 6.1. 上述步长加速策略会在每次接受一步后立即增大 βh_i；如果该方法倾向于保持当前步长 h_i，则可能导致接受与拒绝步骤之间出现“振荡”。为避免这一潜在问题，在我们的实验中，只有连续两步均被接受后才会增大步长。也可以采用其他步长选择策略，例如基于 Armijo 规则或非单调稳定化技术 [18]。

6.1. 计算成本。 自由流或受约束流的每一步，都需要沿负梯度 $-\nabla_E F(\varepsilon, E(t))$ 执行一次显式欧拉积分。如 第 5 节所述，构造这样的梯度需要进行若干次稀疏矩阵和对角矩阵与向量的乘法运算，还需要计算以下两者的最小非零特征值：$L_1^{up}(\varepsilon, E)$ 和 $L_0(\varepsilon, E)$。后两者是数值过程的主要计算开销。幸运的是，由于这两个矩阵都具有 $A^\top A$的形式，其中 A 是两个边界算子或余边界算子之一，B_2 且 $B_1^\top$，因此这两个特征值问题都可归结为如下形式的问题

$$\min_{\boldsymbol{x} \perp \ker A} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}$$

即计算稀疏矩阵 A的最小奇异值。可以采用基于 Krylov 子空间方法的稀疏奇异值求解器，对 $A^\top A$的伪逆进行求解。实际中，我们通过求解相应的最小二乘问题来实现伪求逆

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\overline{L}_1^{up}(\varepsilon, E)\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|, \qquad \min_{\boldsymbol{x}} \|\overline{L}_0(\varepsilon, E)\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|,$$

在我们的实验中，我们使用 [15]中的最小二乘最小残差法（LSMR）求解这些问题。这种方法使我们能够为最小二乘问题对应的正规方程使用预条件器。为求简便，在测试中，我们使用了一个常量预条件器，该预条件器通过对初始未扰动的 L_1^{up} 进行不完全 Cholesky 分解计算得到，或者L_0。通过采用能够在矩阵流过程中高效更新的定制预条件器，或许可以取得好得多的性能。我们还注意到，图拉普拉斯算子 $L_0(\varepsilon, E)$的特征值问题也可以采用组合多重网格策略 [30]求解。不过，设计合适的预条件策略超出了本文的范围，将作为未来研究的课题。

7. 数值实验。本节给出若干合成示例和现实应用示例，以展示所提出的稳定性算法。所有示例的代码均可在 https://github.com/COMPiLELab/HOLaGraF 获取。所有实验均运行至满足全局停止准则 $|F(\varepsilon, E(t))| < 10^{-6}$ 为止。参数 μ 和 α 的选取如下。对于 μ，我们设 $\mu = 0.75\mu_2$，其中 μ_2 是初始拉普拉斯算子的最小非零特征值 L_0。对于 α，我们运行第 6 节中所述的 α 阶段第 6 节，参数为$\varepsilon_0 = 10^{-3}$，$\alpha_* = 1$ 和 $\alpha^* = 100$。

7.1. 说明性示例。这里考虑一个小型的 2 阶单纯复形 $\mathcal{K}$，由八个 0-单形（顶点）、十二个 1-单形（边）、四个 2-单形组成$\mathcal{V}_2 = \{[1,2,3],[1,2,8],[4,5,6],[5,6,7]\}$，并有一个对应的洞 $[2,3,4,5],$，因此 $\beta_1 = 1$。按照设计，同调群 $\mathcal{H}_1$ 的维数只能通过消除边 $[1,2]$ 或 $[5,6]$ 来增加；对于所选的权重分布 $w_1([1,2]) > w_1([5,6])$，因此该方法应通过消除边收敛到最小扰动范数 $\varepsilon = w_1([5,6])$ [5,6],图6。

优化框架随时间演变的示例过程如图7所示。图7 的上方面板展示了目标泛函的持续变化过程 $F(\varepsilon, E(t))$，其中包含

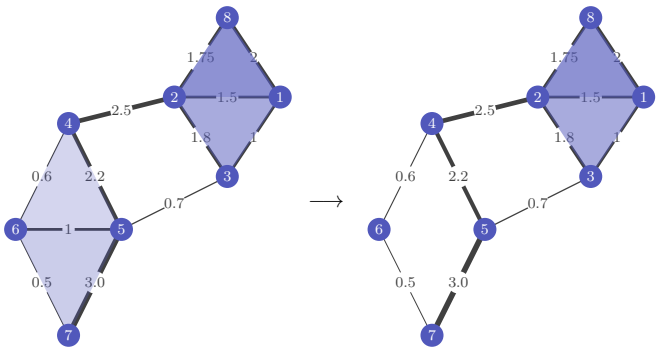
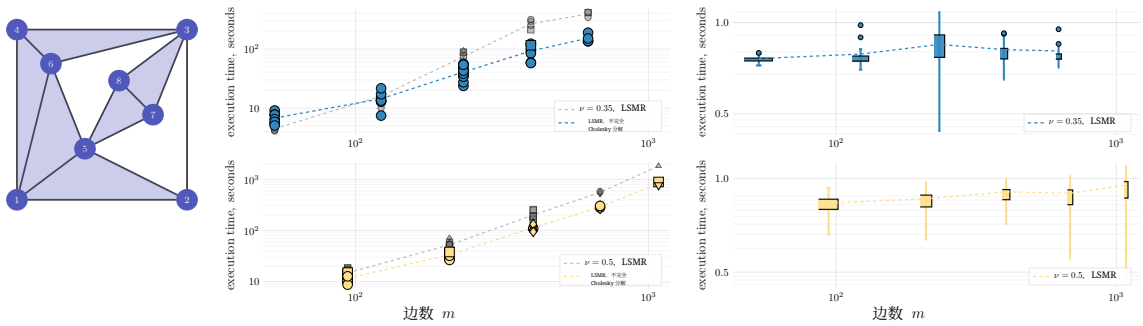


图 6 *Simplicial complex $\mathcal{K}$ on 8 vertices for the illustrative run (on the left): all 2-simplices from $\mathcal{V}_2$ are shown in blue the weight of each edge w_1 e_i () is given on the figure. On the right: perturbed simplicial complex $\mathcal{K}$ through the elimination of the edge $[5,6]$ creating additional hole $[5,6,7,8]$.*



图7。 *Illustrative run of the framework determining the topological stability: the top pane — the flow of the functional F ε E t ; the second pane — the flow of σ L_1 λ_+ is highlighted; third pane — the change of the perturbation norm $\|E$ t $\|$; the bottom pane — the heatmap of the perturbation profile E t .* (,)()()()()

初始的 α 阶段（绿色）以及交替进行的受约束阶段（蓝色）和自由梯度阶段（橙色）。如上所述， $F(\varepsilon,\ E(t))$沿变化过程严格单调，因为 $\mathbb{P}_+$ 的支撑不变。由于初始设置在连通性方面并非病态，初始的 α 阶段实质上简化为单次约束梯度流，并在一次运行后以 $\alpha = \alpha_*$ 结束。受约束梯度阶段的特征是 $E(t)$变化缓慢，这主要是因为变化过程只进行小幅调整以寻找



(a) 示例三角剖分 of and 洞

(b) 时间（以秒计）

(c) 扰动范数， ε

图 8 *Benchmarking Results on the Synthetic Triangulation Dataset: varying sparsities* $\nu = 0.35$ 0.5 。 ,,,,, *and* $N = 16$ 22 28 34 40*; each network is sampled* 10 *times. Shapes correspond to the number of eliminated* : , : , : , : (,) *edges in the final perturbation:* 1 ○ 2 □ 3 ⬠ 4 △. *For each pair* ν N *the un-preconditioned and Cholesky-preconditioned execution times are shown.*

在单位球面上进行正确的旋转，而自由梯度阶段会迅速降低目标泛函。

第二个面板展示了第一个非零特征值 $\lambda_+(\varepsilon,\ \underline{E}(t))$（实线）在 $L_1^{up}(\varepsilon,\ \underline{E}(t))$ 的排序中下降的情况（半透明）；与目标泛函 $F(\varepsilon,\ \underline{E}(t))$ 的情况类似， $\lambda_+(\varepsilon,\ \underline{E}(t))$ 单调下降。其余特征值仅有细微变化，而快速变化的 λ_+ 成功越过了连通性阈值 μ （虚线）。

第三和第四个面板分别展示了扰动范数$\|E(t)\|$ 以及扰动 $E(t)$本身的变化过程。在约束梯度阶段和 α-阶段，范数 $\|E(t)\|$ 保持不变；这些阶段对应于扰动形状的优化，如底部面板开头处的小幅正值所示，这些值最终会消失。在自由梯度积分过程中，范数 $\|E(t)\|$ 会增大，但随着 ε_i 的增长，范数的相对变化会减小，以避免越过可能的最小 ε。最后，由于该复形较为简单，我们希望消除的边 56 从一开始就主导了变化过程（见底部面板）；这种清晰的模式只会在小规模示例中持续存在，而对于大型网络，扰动分布最初会分散在所有边上。

7.2. 三角剖分基准测试。为了进一步了解该方法的计算行为，我们在此合成一个近似平面图数据集。具体而言，我们假设 N在单位正方形上均匀采样的顶点，并通过德劳内三角剖分构建网络；随后随机添加或删除边，以获得稀疏度 ν （使图总共有$\frac{1}{2}\nu N(N-1)$ 条边）。接着，通过令 $\mathcal{K} = (\mathcal{V}_0、\ \mathcal{V}_1、\ \mathcal{V}_2)$ 分别为 $\mathcal{V}_0$ 生成的顶点、 $\mathcal{V}_1$ 边以及 $\mathcal{V}_2$ 图中每个 3-团，构造一个二阶单纯复形；边的权重在 $1/4$与 $3/4$之间均匀采样，即 $w_1(e_i) \sim U[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}]$。

这种三角剖分的一个示例如图8a所示；这里 $N = 8$ 和边 $[6, 8]$ 以及$[2, 7]$ 被消去，以获得所需的稀疏度。

我们对顶点数各不相同的网络进行采样： $N = 10$、16、22、28；并改变稀疏模式 $\nu = 0.35$，0。5，该模式决定输出中的边数$m = \nu^{\binom{N(N-1)}{2}}$。由于采样过程具有高度随机性，即使参数对相同，所采样图的拓扑结构也可能存在显著差异，因此会生成 10 个具有相同（N、ν）参数对的网络。对于每个网络，运行时间（不计采样本身）和所得扰动范数 ε分别报告于图8b 和图8c中。正如第 6.1 小节所预期的，我们展示了该方法两种实现的性能：一种基于 LSMR，另一种则使用初始矩阵的不完全 Cholesky 分解对 LSMR 进行预条件处理。我们观察到，

- 整个过程的计算成本介于 $\mathcal{O}(m^2)$和 $\mathcal{O}(m^3)$之间
- 顶点数更多的稠密结构会导致更多的边被消除；与此同时，即使在最稠密的情况下，仍可能出现只需消除一条边的结构，这表明变化过程未必会偏向多边最优解；

- 所需的扰动范数 ε 会随着图的规模增大，图 8c，但增速不会太快：预计更稠密的网络需要更大的 ε 才能形成新的洞；与此同时，如果扰动随稀疏度 ν大幅增大，则意味着该方法试图消除多得多的边，这种行为类似于收敛到次优扰动；

- 使用为初始拉普拉斯矩阵计算的不完全乔列斯基乘子进行预条件，可以明显缩短中型和大型网络的执行时间。由于随着变化过程接近极小化点（非零特征值变为 0），预条件的效果会变差，因此值得研究一种可高效更新的上拉普拉斯算子预条件器的设计。

7.3. 交通网络。 最后，我们基于城市交通网络，给出一个面向现实世界实例的应用。我们考虑博洛尼亚、阿纳海姆、柏林米特区和柏林蒂尔加滕区的网络；每个网络都由节点（交叉口/公共交通站点）组成，这些节点通过边（道路）相连，并划分为若干区域；对于每条道路，已知其自由流行程时间、长度和限速；此外，数据集还提供了每对节点之间的出行需求，该需求来自记录的出行数据。本文使用的所有数据集均可公开获取，网址为 https://github.com/bstabler/TransportationNetworks；博洛尼亚网络由博洛尼亚大学物理系提供（通过 Google 地图 APIhttps://developers.google.com/maps进行了丰富）。

城市地图的规则性天然缺少 3-团，因此，像之前那样基于三角剖分构造单纯复形，往往会得到平凡结果。相反，在这里，我们将网络“提升”到城市区域层面，从而更有效地对图中的节点进行分组。具体而言：

1. 我们考虑一个完全连通图，其中节点代表城市/区域中的各个区域；2. 暂时将两个区域之间的自由流行程时间赋值为每条边的权重：该时间是初始图中区域之间的最短路径时间（通过经典的 Dijkstra算法计算）；3. 与持久同调所用的过滤方法类似，我们过滤掉距离过远的节点；此外，我们排除每个三角形中最长的边，以防它

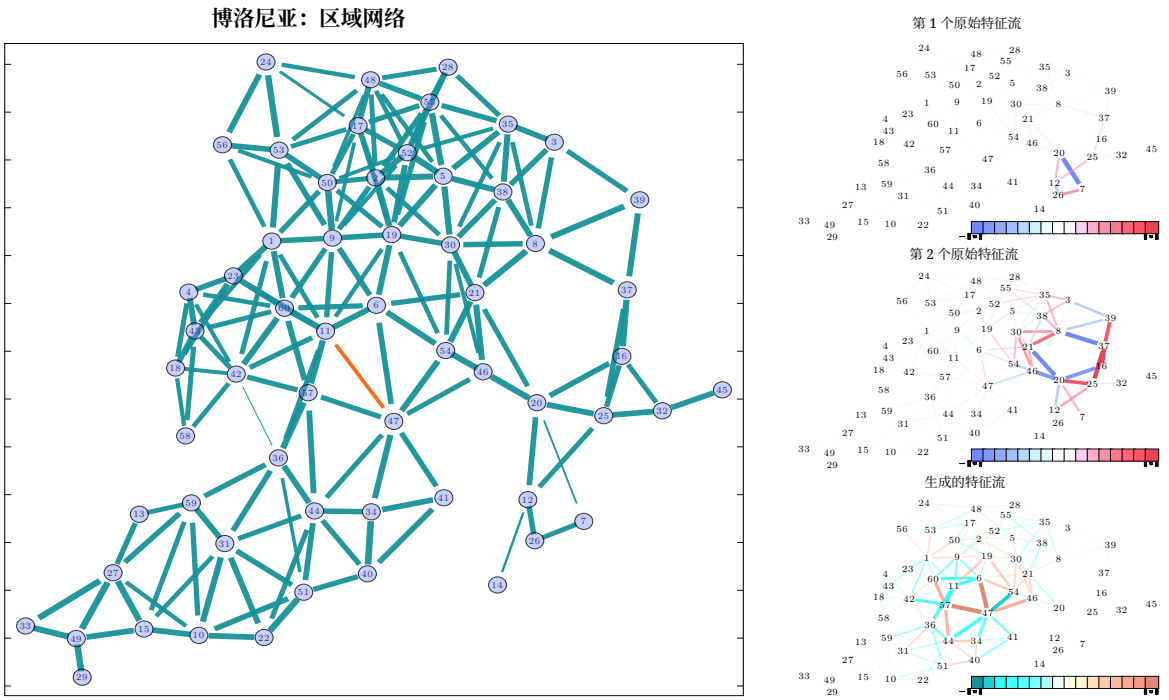


图 9 *Example of the Transportation Network for Bologna. Left pane: original zone graph where the width of edges corresponds to the weight to-be-eliminated edge is colored in red. Right pane: eigenflows original and created; color and width correspond to the magnitude of entries.*

等于另外两条边之和（此时三角形退化，沿最长边的行程总是通过另外两条边完成）；

4. 最后，我们将出行需求作为最终网络中边的实际权重；出行需求通过以下变换进行对数缩放 $w_i \mapsto \log_{10}\left(0.95^{w_i - \min w_i}\right)$；示例见图 9左侧面板。

根据网络中权重的定义，高不稳定性（对应较小的扰动范数 ε）意味着“近似孔洞”周围存在结构现象，此处更快、更短的路线的需求明显较低。

在博洛尼亚的案例中，图 9中，算法删除了边 $[11, 47]$ （卡萨莱基奥·迪·雷诺 – 皮亚诺罗），从而形成一个新的洞 $6 - 11 - 57 - 47$。我们还提供了霍奇拉普拉斯算子核中的特征流示例（原始及额外扰动后）：原始特征向量对应于洞周围的环流 $7-26-12-20$，并且 $8-21-20-16-37$在邻域内呈非局部扩散 [29]。

四个不同网络的结果汇总于表 1；p 与百分位数相似，$\varepsilon / \sum_{e \in \mathcal{V}_1} w_i(e)$，从整体上体现了较小的扰动范数。同时，我们强调，除博洛尼亚（其结果受当地地理拓扑影响）外，算法并未选择可能的最小权重；事实上，根据我们对拓扑不稳定性的解释，柏林-蒂尔加滕的复形是

表 1

Topological instability of the transportation networks filtered zone networks with the corresponding perturbation norm ε and its percentile among w_1 · profile. For each simplicial complex the number of nodes () , *edges and triangles in $\mathcal{V}_2$ $\mathcal{K}$* ( )

are provided alongside the initial number of holes β_1. The results of the algorithm consist ,,, of the perturbation norm ε computation time and approximate percentile p.

	网络			β_1	对数权重		
	n	m	Δ		time	ε	p
博洛尼亚	60	175	171	2	2.43秒	0.65	0.003
					[11, 47]（4th 最小值）		
阿纳海姆	38	159	221	1	5.39秒	0.57	0.003
					[10, 29]（11th 最小值）		
柏林-蒂尔加滕	26	63	55	0	2.46秒	1.18	0.015
					[6, 16]（20th 最小）		
柏林米特区	98	456	900	1	127s	0.887	0.0016
					[57, 87]（6th），**[58, 87]**，（17th）		

稳定，且交通网络已有效构建。

8. 讨论。在本研究中，我们将 k阶单纯复形的拓扑稳定性 $\mathcal{K}$ 定义为在 k阶洞中新增一个所需的最小数据扰动 $\mathcal{K}$。通过引入适当的加权和归一化，稳定性问题被转化为一个矩阵接近问题，并通过双层优化过程求解。尽管非凸景观高度复杂，我们提出的交替执行约束梯度步和自由梯度步的过程仍能实现单调下降方案。实验表明，该方法通常能够成功计算使$\beta_1(\varepsilon,\ E)$增大的最小扰动，即使是在诸如第 7.1 小节所提出的潜在困难情形下。

为简单起见，我们在此仅关注只引入一个新洞的最小扰动。然而，可以通过简单修改来处理引入多个 m 新洞的情况：在谱泛函（ m 中计入 $L_1^{up}(\varepsilon, E)$的非零特征值之和，而不只是第一个特征值（4.2）。我们还指出，由于谱继承原理2.7，针对$\mathcal{H}_1$ 提出的框架原则上可以扩展到一般的 $\mathcal{H}_k$；不过，这种扩展需要认真考虑数据修改过程和数值线性代数工具，因为高阶拓扑结构并非平凡时，需要更稠密的网络。

数值实现方面还可以进行多种改进，包括探索为梯度流系统（5.6）采用更复杂的积分器（例如隐式积分器）；这还需要使用 $\lambda_+(\varepsilon, E$ 的高阶导数）。此外，如第 6.1 小节中所述，用于计算较小奇异值的数值方法若采用高效预条件器，将会受益匪浅；该预条件器还应能在整个变化过程中有效更新。目前正在开展这方面的研究，并将作为未来工作的主题。

参考文献

[1] K. M. Altenburger 和 J. Ugander。同质偏好在社交网络中引入了朋友的朋友之间的相似性。*Nature human behaviour*, 2(4):284–290, 2018年。

[2] E. Andreotti、D. Edelmann、N. Guglielmi 和 C. Lubich。通过矩阵微分方程进行约束图划分。 *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*，40(1):1–22，2019年。doi: 10.1137/17M1160987。[3] E. Andreotti、D. Edelmann、N. Guglielmi 和 C. Lubich。衡量谱聚类的稳定性。*Linear Algebra and its Applications*，610:673–697，2021年。doi: 10.1016/j.laa.2020.10.015。[4] F. Arrigo、D. J. Higham 和 F. Tudisco。二阶特征向量中心性和聚类系数的框架。 *Proceedings of the Royal Society A*，476(2236):20190724，2020年。[5] F. Battiston、G. Cencetti、I. Iacopini、V. Latora、M. Lucas、A. Patania、J.-G. Young 和 G. Petri。超越成对交互的网络：结构与动力学。 *Physics Reports*，874:1–92，2020年8月。doi: 10.1016/j.physrep.2020.05.004。[6] A. R. Benson。三种超图特征向量中心性。 *SIAM Journal on Mathematics of Data Science*，1 2 293 312, 2019 ( ): – 。[7] A. R. Benson、D. F. Gleich 和 J. Leskovec。复杂网络的高阶组织。 *Science*，353 6295 163 166, 2016 10 1126 9029 ( ): – 。doi: . /science.aad 。[8] A. R. Benson 、 R. Abebe 、 M. T. Schaub 、 A. Jadbabaie 和 J. Kleinberg。单纯复形闭包与高阶链接预测。

Proceedings of the National Academy of Sciences 115 48 11221 11230, , ( ):E –E 。2018

[9] C. Bick、E. Gross、H. A. Harrington 和 M. T. Schaub。什么是高阶网络？ *SIAM Review*，abs/2104.11329，2023年。[10] F. Chazal、V. De Silva 和 S. Oudot。几何复形的持久性稳定性。 *Geometriae Dedicata*，173 1 193 214, 2014 ( ): – 。[11] Y.-C. Chen 和 M. Meila。由 k-拉普拉斯算子构造的高阶同调嵌入的分解。 *Advances in Neural Information Processing Systems*，34:15695–15709，2021年。[12] Y.-C. Chen、M. Meil˘a 和 I. G. Kevrekidis。亥姆霍兹特征映射：从点云数据中发现拓扑特征并进行边流学习。 *rXiv:2103.07626*，2021年。doi: 10.48550/ARXIV.2103.07626。[13] S. Ebli 和 G. Spreemann。单纯复形中的调和聚类概念，载于 *2019 18th IEEE International Conference On Machine Learning And Applications (ICMLA)* 1083 1090 ，页码 – 。IEEE，2019年。[14] M. Fiedler。图拉普拉斯算子与代数连通度。

Banach Center Publications 25 1 57 70, , ( ): – 。[15] 1989

D. C.-L. Fong 和 M. Saunders。LSMR：一种求解稀疏最小二乘问题的迭代算法。 *SIAM Journal on Scientific Computing* 33 5 2950 2971, 2011 ，( ): – 。[16]

K. Fountoulakis、P. Li 和 S. Yang。局部超流扩散。 *Advances in Neural Information Processing Systems* 34 27683 27694, 2021 ，: – 。[17] A.

Gautier、F. Tudisco 和 M. Hein。非负张量的非线性 Perron–Frobenius 定理。 *SIAM Review* 65 2 495 536, 2023 ，( ): – 。[18]

L. Grippo、F. Lampariello 和 S. Lucidi。无约束优化中的一类非单调稳定化方法。 *Numerische Mathematik*，59(1):779–805，1991年。[19] N. Guglielmi 和 C. Lubich。 *Matrix nearness problems and eigenvalue optimization*。准备中，2022年。[20] D. Horak 和 J. Jost。单纯复形上组合拉普拉斯算子的谱。 *Advances in Mathematics* 244 303 336, 2013 ，: – 。[21] R.

A. Horn 和 C. R. Johnson。 *Matrix Analysis*。剑桥大学出版社，1990年。[22] L.-H. Lim。图上的霍奇拉普拉斯算子。 *SIAM Review*，62(3):685–715，2015年。[23] A. Muhammad 和 M. Egerstedt。在网络拓扑中使用高阶拉普拉斯算子进行控制。载于

Proc. of，页码 – 。*17th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems* 1024 1038 Citeseer，2006年。[24] B. Nettasinghe、V. Krishnamurthy 和 K. Lerman。社交网络中的扩散：单亲性传染、友谊悖论和反应式网络的影响。 *IEEE Transactions on Network Science and Engineering* 2019 ，。[25] L.

Neuh¨auser、R. Lambiotte 和 M. T. Schaub。超图上的共识动力学与意见形成。载于 *Higher-Order Systems*，页码 347–376。施普林格，2022年。[26] L. Neuh¨auser、M. Scholkemper、F. Tudisco 和 M. T. Schaub。学习超图动力系统的有效阶数。 *arXiv preprint arXiv:2306.01813*，2023年。[27] N. Otter、M. A. Porter、U. Tillmann、P. Grindrod 和 H. A. Harrington。计算的路线图

持久同调。 *EPJ Data Science*，6:1–38，2017年。[28] L. Qi 和 Z. Luo。 *Tensor Analysis*。工业与应用数学学会，费城，宾夕法尼亚州，2017年。[29] M. T. Schaub、A. R. Benson、P. Horn、G. Lippner 和 A. Jadbabaie。单纯复形上的随机游走与归一化霍奇 1-拉普拉斯算子。 *SIAM Review*，62(2):353–391，2020年。[30] D. A. Spielman 和 S.-H. Teng。用于对称对角占优线性系统预条件与求解的近线性时间算法。 *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*，35(3): 835–885，2014年。[31] F. Tudisco 和 M. Hein。图 p- 拉普拉斯算子的节点域定理与高阶切格不等式。 *ArXiv*，1602.05567，2016 年 2 月。[32] F. Tudisco 和 D. J. Higham。超图中的核心-边缘检测。 *SIAM Journal on Mathematics of Data Science*，即将发表。

[33] F. Tudisco、F. Arrigo 和 A. Gautier。多重网络的节点与层特征向量中心性。 *SIAM Journal on Applied Mathematics*，78(2):853–876，2018年。[34] F. Tudisco、A. R. Benson 和 K. Prokopchik。非线性高阶标签传播。载于 *Proceedings of the Web Conference 2021* 2402 2413, 2021，页码 – 。