arXiv:2301.12742v1 [math.AT] 30 Jan 2023

用于密度鲁棒分析的圆形坐标

TAEJIN PAIK 和 JAEMIN PARK

Abstract. 降维是数据分析中的一项关键技术，因为它能够高效地可视化和理解高维数据集。圆坐标是与降维相关的一种拓扑数据分析技术，但可能对密度变化较为敏感。为解决这一问题，我们提出了新的圆坐标，以提取稳健且与密度无关的特征。我们提出的新方法生成一个取决于底层流形形状、同时保留拓扑结构的新坐标系。我们通过在合成数据集和真实世界数据集上进行广泛实验，展示了这些方法的有效性。

1. Introduction

降维有助于我们理解高维数据，并为我们提供关于数据集的直观信息。这一领域的主要挑战之一是保留内在拓扑结构。不同的降维策略试图以不同方式解决这一问题。

主成分分析（PCA） [1, 2] 是最基础的线性降维技术之一。给定一个数据集，PCA旨在找到一个投影，将数据映射到低维向量空间，并使方差最大化。作为一种非线性降维方法，t-分布随机邻域嵌入（t-SNE） [3] 常用于可视化高维数据。它是一种随机方法，旨在使低维嵌入中彼此接近的数据点在嵌入空间中仍然彼此接近。然而，包括上述降维技术在内的降维方法，在数据点从具有复杂拓扑结构的底层流形 M 中采样时，往往无法保持原始拓扑结构。

圆坐标是在 [4], 中引入的，它通过捕捉一维洞来部分解决这一问题；如果底层流形 M 中存在一维洞，这些坐标就会给出圆值映射 $\{\theta : X \to \mathbb{R}/\mathbb{Z}\}$ ，用于识别这些洞。这种方法的依据是如下双射

$$\langle \mathcal{K}, K(\mathbb{Z}, 1)\rangle \cong H^1(\mathcal{K}; \mathbb{Z})$$

对于每个 CW复形 $\mathcal{K}$，其中 $\langle \mathcal{K}, K(\mathbb{Z}, 1)\rangle$ 是从 $\mathcal{K}$ 到 Eilenberg-MacLane空间 $K(\mathbb{Z}, 1)$（即圆 S^1）的映射的保基点同伦类。也就是说，对于 $H^1(X; \mathbb{Z})$ 中的每个余循环，我们都可以得到一个映射 $f : X \to S^1$。在实践中，对于每个余循环 α，圆坐标是通过在与 α 上同调等价的余循环中寻找 L^2-范数极小化元得到的。我们将在第 4.6 节展示圆坐标如何帮助揭示隐藏在低维嵌入中的拓扑结构。

需要注意的是，圆坐标不仅取决于流形的形状，也取决于流形上的概率密度函数。例如，如图 1 所示，尽管我们在同一个圆上采样数据点，圆坐标仍会因概率密度函数不同而有所差异；在低密度区域，圆坐标变化很快，而在高密度区域，变化则极其缓慢。

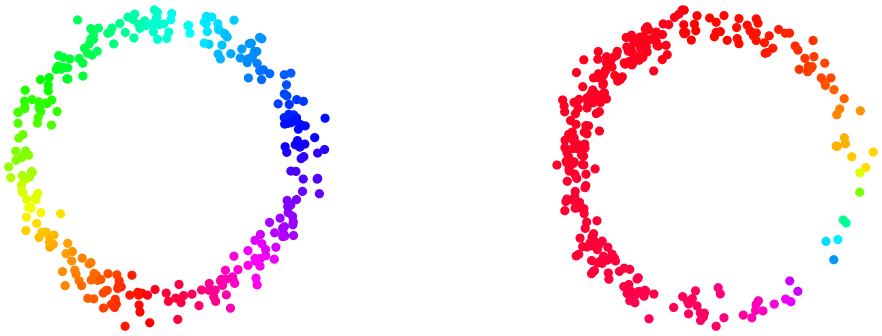


FIGURE 1. 概率密度变化对圆坐标的影响 S^1。

如果我们想要探索嵌入欧几里得空间中的流形的形状，那么当结果随密度变化时，可能会难以分析。

在本研究中，我们提出了新的圆坐标，其取决于底层黎曼子流形的形状，而非流形上的概率密度函数。为实现这一目标，我们提出了两种不同的方法：

(1) 使用拉普拉斯矩阵求解狄利克雷问题，从而获得圆坐标；该矩阵通过近似底层流形的拉普拉斯-贝尔特拉米算子得到。(2) 在优化过程中使用 L^p-范数代替 L^2-范数，以获得新的圆坐标。

在第 3 节中，我们说明了为什么每种方法都能生成一种对概率密度函数变化具有鲁棒性的新圆坐标。在第 4 节中，我们通过在合成数据集和真实世界数据集上进行评估，展示了这些方法的鲁棒性。我们的源代码可在 `https://github.com/TJPaik/CircularCoordinates` 获取。

2. PRELIMINARIES

本节简要回顾三种广为人知的理论：霍奇理论 [5], 持久上同调 [4],和圆坐标。

2.1. 上同调与霍奇理论。 设 X 是一个有限单纯复形。i-上链空间 $\mathcal{C}^i(X;\mathbb{R})$ 定义为 i-链空间 $\mathcal{C}_i(X;\mathbb{R})$ 的对偶向量空间，而余边界映射 d_i 是 $\mathcal{C}_i(X;\mathbb{R})$ 与 $\mathcal{C}_{i+1}(X;\mathbb{R})$ 之间边界映射的对偶。如果复形 X 的含义上下文明确，我们将 $\mathcal{C}^i(X;\mathbb{R})$ 简写为 $\mathcal{C}^i$。具体而言，余边界映射 $d_i:\ \mathcal{C}^i \to \mathcal{C}^{i+1}$ 对于 $i=0,\ 1$ 为

$$(d_0 f)(xy) = f(y) - f(x), \text{ and}$$
$$(d_1 \alpha)(xyz) = \alpha(xy) - \alpha(xz) + \alpha(yz).$$

对于 $\alpha \in \mathcal{C}^1$，如果 $d_1\alpha = 0$，即 $\alpha \in \ker d_1$，则称 α 为一个余循环。如果对于 $f \in \mathcal{C}^0$有 $\alpha = d_0 f$，即 $\alpha \in \operatorname{im} d_0$，则称 α 为一个余边界。由于对于所有 $f \in \mathcal{C}^0$都有 $d_1 d_0 f = 0$，因此有 $\operatorname{im} d_0 \subset \ker d_1$。现在定义 X 的*1*-上同调 为

$$H^1(X;\mathbb{R}) = \ker d_1 / \operatorname{im} d_0.$$

我们称 $\alpha, \beta \in \mathcal{C}^1$ 上同调等价，若 $[\alpha] = [\beta] \in H^1(X;\mathbb{R})$。

在本文中，我们在 $\mathcal{C}^i$ 上使用标准基，并在 $(\mathcal{C}^i)^*$ 上使用标准基的对偶基。对于每个 i，我们在 $\mathcal{C}^i$ 上指定一个内积。若未指定内积，则默认使用标准内积。由线性代数可知，$\mathcal{C}^1$ 可以分解为（称为 ***Fredholm*择一**）

$$\mathcal{C}^1 \cong \ker d_1 \oplus \operatorname{im} d_1^*, \tag{1}$$

其中，d_i^* 是 $i = 1,2$上 d_i 的伴随算子。注意，伴随算子取决于内积。此外，还有***Hodge*分解**

$$\mathcal{C}^1 \cong \operatorname{im} d_1^* \oplus \ker(d_1^* d_1 + d_0 d_0^*) \oplus \operatorname{im} d_0. \tag{2}$$

这里，我们称 $d_1^* d_1 + d_0 d_0^*$ 为（***1*维）*Hodge*拉普拉斯算子**，并记为 Δ_1。结合分解（1）和（2），可得

$$\ker(d_1^* d_1 + d_0 d_0^*) \oplus \operatorname{im} d_0 = \ker d_1.$$

因此，我们有

$$H^1(X;\mathbb{R}) = \ker d_1 / \operatorname{im} d_0 \cong \ker(d_1^* d_1 + d_0 d_0^*).$$

我们注意到，每个 $\alpha \in \ker \Delta_1$ 都是$\ker d_1 / \operatorname{im}\ d_0$中相应等价类的最小2-范数代表元。也就是说，对于每个 $[\alpha] \in \ker\ d_1 / \operatorname{im}\ d_0$，其代表元

$$\alpha_H = \underset{\overline{\alpha}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \|\overline{\alpha}\|_2 \mid \exists f \in \mathcal{C}^0, \overline{\alpha} = \alpha + d_0 f \right\}$$

包含 在 $\ker \Delta_1$ 中定义（见 [5]），因为 $\alpha_H \perp \operatorname{im}\ d_0$。我们将 α_H称为调和余循环 e.

2.2. 持久上同调。现在考虑欧几里得空间中的一个数据集 X，以及由 ϵ 参数化的一参数Vietoris-Rips复形族 $\{X^\epsilon\}$，其中 ϵ 是数据集的尺度参数。设 $\epsilon_1, \ldots, \epsilon_m$为 X^ϵ的同伦类型发生变化时的临界值。我们可以将这种情形写成如下形式：

$$X^{\epsilon_1} \xrightarrow{i_1} X^{\epsilon_2} \xrightarrow{i_2} \cdots \xrightarrow{i_{m-1}} X^{\epsilon_m}$$

其中 $\to$ 表示包含映射。这些 X^ϵ之间的包含映射诱导出 $H^1(X^\epsilon;\mathbb{R})$之间的同态：

$$H^1(X^{\epsilon_1};\mathbb{R}) \xleftarrow{i_1^*} H^1(X^{\epsilon_2};\mathbb{R}) \xleftarrow{i_2^*} \cdots \xleftarrow{i_{m-1}^*} H^1(X^{\epsilon_m};\mathbb{R})$$

对于非零上循环类 $[\alpha] \in H^1(X^{\epsilon_k};\ \mathbb{R})$，令

$$\begin{aligned} b_\alpha &= \inf \left\{ \epsilon \in \{\epsilon_1, \ldots, \epsilon_k\} : \exists [\beta] \neq 0 \in H^1(X^\epsilon;\mathbb{R}) \text{ such that } i^*[\beta] = [\alpha] \right\} \\ d_\alpha &= \sup \left\{ \epsilon \in \{\epsilon_k, \ldots, \epsilon_m\} : i^*[\alpha] \neq 0 \in H^1(X^\epsilon;\mathbb{R}) \right\}, \end{aligned}$$

其中 i^* 是由包含映射诱导的同态。我们将 b_α （分别为d_α）称为出生（分别为死亡），并将值 $d_\alpha - b_\alpha$ 称为寿命。收集所有非零余循环对应的 b_α 和 d_α，并在坐标平面上绘制点 $\{(b_\alpha,\ d_\alpha)\}_\alpha$，称之为持久图。

2.3. 圆坐标。圆坐标在 [4]中引入。给定一个数据集X，其圆坐标 $\theta : \ X \to \mathbb{R}/\mathbb{Z} \cong S^1$ 通过一个非零上循环类$[\alpha] \in H^1(X^\epsilon;\ \mathbb{Z}_\mathbf{p})$ 定义，其中固定 ϵ 和一个素数$\mathbf{p}$ ，条件是 $[\alpha]$ 属于系数同态 $H^1(X^\epsilon;\ \mathbb{Z}) \to H^1(X^\epsilon;\ \mathbb{Z}_\mathbf{p})$的像。实际应用中，我们取一个较大的素数$\mathbf{p}$。简要算法如下。首先，求出与 α上同调等价的调和余循环 α_H ，即

$$\alpha_H = \underset{\overline{\alpha}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \|\overline{\alpha}\|_2 \mid \exists f \in \mathcal{C}^0(X^\epsilon;\mathbb{R}), \overline{\alpha} = \alpha + d_0 f \right\}. \tag{3}$$

接着，我们固定一个顶点 x，并指定 $\theta(x) = 0$。对于一个顶点 y，我们指定 $\theta(y) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_H(e_i)$，其中 $e_1 \cdots e_n$ 是一条从 x 到 y 的边路径。圆坐标 θ 是良定义的，因为 α_H 与一个具有整数系数的余循环上同调等价。注意，我们可以将 (3) 中的 f 用作圆坐标。

现在，我们用拉普拉斯算子来解释圆坐标。由于 $\alpha_H \in \operatorname{im} d_0^\perp = \ker d_0^*$，因此有

$$0 = d_0^* \alpha_H = d_0^* \alpha + d_0^* d_0 f.$$

这里，我们将 $d_0^* d_0$ 称为（*0* 维）图拉普拉斯算子，并记作 Δ_0。因此，圆坐标 f 是狄利克雷问题

$$\Delta_0 f = -d_0^* \alpha. \tag{4}$$

(4) 的解存在且唯一。更正式地说，

定理 2.1. 设 $\alpha \in \mathcal{C}^1$ 为一个余循环。那么，图（*Vietoris-Rips*复形的 *1*-骨架）上的狄利克雷问题的一个解

$$\Delta_0 f = d_0^* \alpha$$

存在，并且如果图是连通的，那么解在相差一个标量加法的意义下唯一。

证明见附录 A。

3. Methods

3.1. 加权圆坐标。 加权圆坐标 是圆坐标的一种推广，可以考虑数据集的密度。通过为Vietoris-Rips复形中的每条边赋予权重，我们可以得到一种新的加权圆坐标，它以下述方式考虑点云的密度。

假设我们有一个单纯复形 X，并且在 X的每条边e 上都有正权重 $w(e)$。我们将权重矩阵 W 定义为一个对角矩阵，其对角线元素为这些权重。形式上，我们写作

$$W = \operatorname{diag}\{w(e) \ : \ e \text{ is an edge of } X\}.$$

我们考虑一个加权余链复形

$$0 \xrightarrow{0} \mathcal{C}^0 \xrightarrow{Wd_0} \mathcal{C}^1 \xrightarrow{d_1 W^{-1}} \mathcal{C}^2 \tag{5}$$

其中， Wd_0和 $d_1 W^{-1}$定义如下：

$$\begin{aligned} (Wd_0)f(xy) &= w(xy)(f(y) - f(x)), && \forall f \in \mathcal{C}^0; \\ (d_1 W^{-1})\alpha(xyz) &= \frac{1}{w(xy)}\alpha(xy) - \frac{1}{w(xz)}\alpha(xz) + \frac{1}{w(yz)}\alpha(yz), && \forall \alpha \in \mathcal{C}^1. \end{aligned}$$

加权霍奇拉普拉斯算子$\Delta_{W,\ 1}$定义为

$$\Delta_{W,1} = (d_1 W^{-1})^*(d_1 W^{-1}) + (W d_0)(W d_0)^*.$$

注意，加权调和余循环$\alpha_{W,\ H} \in \ker\Delta_{W,\ 1}$是其上同调类中具有最小 2-范数的余循环。基于这一观察，我们引入加权圆坐标。

由于对于每个 $\alpha \in \ker\ d_1$都有 $W\alpha \in \ker(d_1 W^{-1})$，我们可以将链复形上的调和元理解为$W\alpha$，并且 $f' \in \mathcal{C}^0$满足

$$\|W\alpha + W d_0 f'\|_2 = \|W(\alpha + d_0 f')\|_2 \leq \|W(\alpha + d_0 g)\|_2$$

对于每个 $g \in \mathcal{C}^0$，正如上文所述。

我们可以通过以下方式用内积来理解这一点。假设我们在 $\mathcal{C}^1$ 上使用不同的内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_q$，而不是标准内积。那么，我们可以将该内积表示为一个矩阵：

$$\langle v, w\rangle_q = v^t Q w$$

其中 Q 是一个实对称正定矩阵。根据乔列斯基分解，对于实上三角矩阵 W_0，有 $Q = W_0^t W_0$。因此，我们有

$$\begin{aligned}\langle \alpha + d_0 f'', \alpha + d_0 f''\rangle_q &= (\alpha + d_0 f'')^t W_0^t W_0 (\alpha + d_0 f'') \\ &= (W_0\alpha + W_0 d_0 f'')^t (W_0\alpha + W_0 d_0 f'') \\ &= \|W_0\alpha + W_0 d_0 f''\|_2^2\end{aligned}$$

对于 $f'' \in \mathcal{C}^0$，使用内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_q$得到的对应调和元，与链复形 (5) 上的调和元相同，前提是 $W = W_0$。

对于一个数据集，我们希望得到一种对数据集密度具有鲁棒性的加权圆坐标。为了实现仅依赖于数据集形状的圆坐标这一目标，我们调整由 Vietoris-Rips 复形构造的图中各边的权重。现在，我们将图拉普拉斯算子视为流形M的拉普拉斯-贝尔特拉米算子 Δ_M 的近似，并据此介绍如何为每条边设置权重。

欧几里得空间中的数据点可以看作是从流形上的概率密度函数中抽取的样本。换言之，这些数据点是从定义在欧几里得空间某个子流形上的概率分布中独立同分布抽取的。Vietoris-Rips复形是一种拓扑空间，通过边和高维单形连接邻近的数据点而构造。它可用于近似底层流形的拓扑结构。

核心思想是，定义在 Vietoris-Rips复形的 1-骨架上的加权图拉普拉斯算子，可以近似底层流形的拉普拉斯-贝尔特拉米算子。如果我们近似拉普拉斯-贝尔特拉米算子，并在底层流形上找到一个调和解，那么该解将只取决于流形的形状，而与数据的密度无关。因此，我们需要利用给定数据近似拉普拉斯-贝尔特拉米算子。在继续之前，我们先介绍一些记号并作出一些解释。

假设我们有 n 个点 x_1，.....，$x_n \in M$，其中 M是 $\mathbb{R}^m$ 中的一个 k维黎曼子流形，并且有一个概率密度函数 P： $M \to \mathbb{R}$，满足 $\inf_{x\in M} P(x) > 0$。我们取由 n 个点构造的 Vietoris-Rips复形，其尺度参数为 $\epsilon > 0$，并考虑 Vietoris-Rips复形的1-骨架，它是一个图。在我们的设定中，我们将

图中的每条边都视为有方向的，这样我们便可以为每个方向赋予不同的权重。

给定 n 点和 $t>0$，我们构造一个加权有向图，将连接 x_i和 x_j的边的权重设为 $w_{ij}=\frac{1}{P(x_j)}g_{ij}$，其中 $g_{ij}=\frac{1}{(4\pi t)^{k/2}}e^{-\frac{\|x_i-x_j\|^2}{4t}}$。如果 x_i 和 x_j 不相连，则设 $w_{ij}=0$。相应的 加权有向图拉普拉斯矩阵定义为

$$\left(L_n^t\right)_{ij}=\begin{cases}-w_{ij} & \text{if } i\neq j\\ \sum_{k\neq i}w_{ik} & \text{if } i=j.\end{cases}$$

注意，矩阵 L_n^t 可以理解为定义在顶点上的函数所对应的算子:

$$L_n^t f(x_i)=\sum_j w_{ij}(f(x_i)-f(x_j)),$$

并且自然地，也可以理解为定义在流形 M上的函数所对应的算子:

$$\mathbf{L}_n^t f(x)=\sum_j w_t(x,x_j)(f(x)-f(x_j))$$

其中，对于定义在 $M\times M$上的 $w_t(x,y)$，$=\frac{1}{P(y)}g_t(x,y)$，且 $g_t(x,y)=\frac{1}{(4\pi t)^{k/2}}e^{-\frac{\|x-y\|^2}{4t}}$，如果 $\|x-y\|<\epsilon$且 $g_t(x,y)=0$。容易看出，对于每个$i=1,\ldots,n$，$L_n^t f(x_i)=\mathbf{L}_n^t f(x_i)$。

另一个需要注意的是，矩阵 L_n^t 可以分解为 $L_n^t=P(P^{-1}D-P^{-1}GP^{-1})$，其中 P 是一个对角矩阵，其对角元为 $P_{ii}=P(x_i)$； D 是一个对角矩阵，其对角元为 $(D)_{ii}=\sum_j g_{ij}/P(x_j)$，且 $(G)_{ij}=g_{ij}$。我们将矩阵 $P^{-1}D-P^{-1}GP^{-1}$ 记为 $L_{n,\,W}^t$。现在，我们可以近似底层流形的拉普拉斯-贝尔特拉米算子:

定理 3.1。设 M 是 k 维紧致黎曼子流形，嵌入于 $\mathbb{R}^n$ 中，且 $P:\ M\to\mathbb{R}$ 是定义在 M 上的光滑概率密度函数，并满足 下确界$_{x\in M}P(x)>0$。若数据点 x_1、……、x_n 是从分布 P 中独立同分布抽取的样本，且 $f:\ M\to\mathbb{R}$ 是一个光滑函数，则对于 $x\in M$ 和 $t_n=n^{-\frac{1}{k+2+\alpha}}$，其中 $\alpha>0$，有

$$\frac{1}{nt_n}\mathbf{L}_n^{t_n}f(x)\xrightarrow{p}\Delta_M f(x)$$

当 n趋于无穷大时。

证明见附录 A。由上述定理可知，对于适当的 t，我们可以将 $\frac{1}{nt_n}L_n^t$视为 Δ_M 的离散近似。由于无论数据的密度如何， Δ_M 都是底层黎曼流形上的拉普拉斯-贝尔特拉米算子，因此，如果我们用 L_n^t 求解余循环的狄利克雷问题，就会得到一个更依赖于流形形状、且对密度分布更稳健的圆坐标。

下面的定理将解释矩阵 L_n^t 的含义。在此之前，我们定义一个对角矩阵 Q_1 ，其中 $(Q_1)_{ii}=(L_{n,\,W}^t)_{jk}$ ，其中 i 是连接 x_j 和 x_k的边的索引。

定理 3.2。 我们在 $\mathcal{C}^0$ 上定义内积为 $\langle v,w\rangle=v^tP^{-1}w$，在 $\mathcal{C}^1$ 上定义内积为$\langle v,w\rangle=v^tQ_1w$。则图拉普拉斯算子 $d_0^*d_0$ 为 L_n^t。

证明见附录 A。由于 L_n^t 可以理解为图拉普拉斯算子，因此我们可以利用余循环，按照定理 2.1 构造并求解狄利克雷问题:

推论 3.3。设 α 是 $\mathcal{C}^1$ 中的一个余循环，并采用定理 *3.2* 中定义的内积。图上的狄利克雷问题的一个解

$$L_n^t f = d_0^* \alpha$$

该解存在；如果图是连通的，则解在相差一个加性常数的意义下唯一。

实际上，我们用 $\frac{1}{n}\sum_j g_{ij}$ 近似 $P(x_i)$。事实上，$\frac{1}{n}\sum_j g_{ij}$ 收敛到

$$d_t(x_i) := \int_M g_t(x_i, x) P(x)\, dV(x)$$

依概率收敛，其中 dV 是由环境欧几里得空间诱导的 M 的体积形式，满足 $\int_M P(x)\, dV(x) = 1$，并且当 t 趋于 0 时，$d_t(x_i)$ 收敛到 $P(x_i)$。具体而言，我们将通过加权有向图拉普拉斯矩阵得到的加权圆坐标称为 *WDGL* 圆坐标。对于每个余循环，我们都可以利用狄利克雷问题与圆坐标之间的关系，通过使用 $\mathcal{C}^1$ 上的内积 $\langle v, w\rangle = v^t Q_1 w$ 求出与该余循环对应的调和元，从而等价地得到 WDGL 圆坐标。

我们还尝试了其他几种权重候选方案。边的权重可以根据各种标准来选取，例如由该边连接的点之间的距离，或边周围区域内的点数。在实验中，我们展示了使用以下权重时，加权圆坐标具有密度鲁棒性：

(1) 一条边的权重为 $\frac{1}{D_0+D_1}$，其中 ~~D_0~~ 和 D_1 是与该边相连的顶点的度。(2) 一条边的权重为 $\frac{1}{\sqrt{D_0 D_1}}$，其中 D_0 和 D_1 是与该边相连的顶点的度。

我们在附录 C 的图中展示了使用上述两种权重得到的结果，并在图中分别用记号“1/(D 0 + D1)”和“1/sqrt(D0 D1)”表示上述两种权重。

3.2. **L^p-圆坐标**。圆坐标可以用代表上同调类 [4]的调和余循环来表示。将 L^p-范数记为 $\|\cdot\|_p$。给定一个单纯复形 X 和一个上链 $\alpha \in \mathcal{C}^1$，相应的调和余循环为

$$\operatorname*{argmin}_{\overline{\alpha}} \left\{ \|\overline{\alpha}\|_2 \mid \exists f \in \mathcal{C}^0, \overline{\alpha} = \alpha + d_0 f \right\},$$

在所有与 α 上同调等价的余循环中，关于 L^2-范数的极小余循环。达到最小值的函数 $f \in \mathcal{C}^0$ 即为圆坐标。我们可以考虑的变化之一，是具有 L^p-范数且具有不同 p, L^p-圆坐标的极小化元。也就是说，我们可以考察

$$\operatorname*{argmin}_{\overline{\alpha}} \left\{ \|\overline{\alpha}\|_p \mid \exists f \in \mathcal{C}^0, \overline{\alpha} = \alpha + d_0 f \right\}. \tag{6}$$

先前研究 [6] 表明，具有 L^1-范数或混合范数的圆坐标会变得更加“局部常数”。在这项工作中，我们研究具有不同 p的圆坐标的行为。我们的多项实验表明，p 越高，圆坐标对密度的鲁棒性越强。

要获得与 $p = 1$ 对应的元素 $f \in \mathcal{C}^0$，我们可以将该问题视为线性规划问题，并在线性时间内求解 [7, 6]。对于 $p = 2$，问题（6）

是众所周知的最小二乘问题，并且如 [4] 中所述，可以使用 LSQR [8] 。对于一般的 $p > 2$ 情况，我们可以使用梯度下降算法。我们在算法 1 中具体说明计算过程。

现在，我们介绍一种获得 L^∞-圆坐标的迭代方法。注意，$\|\alpha\|_\infty = \max\{|\alpha(e)|\}_{e}$ 我们有如下定理：

定理 3.4。假设 f 是定义在 X 上的复可测函数，且 μ 是 X 上的正测度。假设对于某个 $r < \infty$，有 $\|f\|_r < \infty$ 。那么

$$\|f\|_p \to \|f\|_\infty \quad as \;\; p \to \infty.$$

证明见附录 A。根据上述定理，具有较大 p 的 L^p-圆坐标可以近似一个 L^∞-圆坐标。基于这一观察，我们提出了一种获得 L^∞-圆坐标的迭代方法。也就是说，我们可以在某个范围内逐步增大 p，同时连续优化 L^p-圆坐标，从而获得一个 L^∞-圆坐标；最后，我们优化函数 f 以得到 L^∞-圆坐标。我们在算法 2 中写出了该算法。在实践中，由于下溢或上溢问题，我们将 p 增大到约 50，以获得估计损失。我们确认，对于许多超参数设置，该算法能够更快地收敛到 L^∞-圆坐标。

As a 采用类似的方法，我们可以使用不同温度参数的 softmax 函数：

定理 3.5. 设 $h\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 是满足 $(h(x))_i = |x_i|$ 的函数，s 是 *softmax* 函数。那么，对于 $v \in \mathbb{R}^n$，$(s \circ h)(tv) \cdot h(v)$ 当 t 趋于无穷大时收敛到 $\|v\|_\infty$。

证明见附录 A。类似地，在初始化向量 $f \in \mathbb{R}^n$后，我们可以在增大参数 t的同时优化 $(s \circ h)(tf) \cdot h(f)$。我们在算法 3 中具体说明了该方法。在我们的实验中，使用 softmax 函数并未带来明显收益；其收敛速度通常不比其他方法快。

在我们的算法中，我们使用超参数 τ 来判断函数 f 是否收敛。如果前一次损失与当前损失之差小于 τ，我们就判定该函数已收敛。

3.2.1. *p流形上的-调和。* 为了更深入地理解 L^p-圆坐标的概念，我们来考察一个流形上的类似例子。考虑一个 n维紧黎曼流形（M，g），因此我们可以定义通常的光滑霍奇理论。固定一个上同调类 $[\alpha] \in H^k_{dR}(M)$及其代表元 α，我们希望选择一个代表元 α_H，使其相对于 $p > 1$ 的 p-范数，而不是2-范数，达到最小值：

$$\alpha_H := \underset{\overline{\alpha}}{\operatorname{argmin}} \left\{ \int_M \|\overline{\alpha}\|^p \, dV \mid \exists f \in \Omega^{k-1}(M), \overline{\alpha} = \alpha + df \right\}$$

其中 dV 是体积形式。因此，我们有

$$\frac{d}{dt} \int_M \|\alpha_H + t df\|^p \, dV \,\Big|_{t=0} = 0.$$

对于每个 $f \in \Omega^{k-1}(M)$，根据欧拉-拉格朗日方程，我们有

$$d\alpha_H = 0 \quad \text{and} \quad \delta(\|\alpha_H\|^{p-2}\alpha_H) = 0 \tag{7}$$

因为

$$\int_M \langle \alpha_H, df \rangle \|\alpha_H\|^{p-2} \, dV = \int_M \langle \delta(\|\alpha_H\|^{p-2}\alpha_H), f \rangle \, dV$$

其中 δ 是余微分算子， $\|\alpha\|^2$ 定义为 $\sum_{i,\ j} g^{ij}\alpha_i\alpha_j$ 对于 1-形式 $\alpha = \sum_{i=1}^n \alpha_i\ dx^i$。满足 (7) 的 k-形式 α_H 称为 p-调和 k-形式。我们注意到，在欧几里得空间的情形下，这一定义退化为 p-拉普拉斯算子。我们不探讨上述方程的正则性，只通过一个简单的玩具例子来考察 p 对极小化元的影响。我们取 $M = S^1 \times D^{n-1}$作为流形，并取 x^1 作为圆上的坐标。对于 M上的 $\rho > 0$ ，定义度量

$$g = \rho^{2/n} \sum_{j=1}^{n} dx^j \otimes dx^j,$$

它只是对标准欧几里得度量进行共形缩放。我们将度量的变化理解为流形上概率密度函数的变化。所得密度为 $\sqrt{\det} g = \rho$。为简便起见，我们假设密度仅取决于 x^1。

现在来看看生成 $H^1_{dR}(M)$ 的 p-调和 1-形式 α 是什么样的。我们有 $\alpha_H = \sum_i \alpha_i dx^i$。要写出 p-调和方程，我们需要霍奇星算子 $\star$ ，以写出针对 k-形式的 $\delta = (-1)^{n(k-1)+1} \star d\star$ 。由于我们有

$$\star dx^i = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} g^{ij} \sqrt{\det g}\ dx^1 \wedge \ldots \wedge \widehat{dx^j} \wedge \ldots \wedge dx^n,$$

方程 $\delta(\|\alpha_H\|^{p-2}\alpha_H) = 0$ 等价于

$$d\left(\|\alpha_H\|^{p-2} \sum_{i,j=1}^{n} (-1)^{j+1} \alpha_i g^{ij} \sqrt{\det g}\ dx^1 \wedge \ldots \wedge \widehat{dx^j} \wedge \ldots \wedge dx^n \right) = 0.$$

如果使用度量的形式，这可以简化为

$$d\left(\rho^{\frac{n-p}{n}} \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^{p-2} \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \alpha_j\ dx^1 \wedge \ldots \wedge \widehat{dx^j} \wedge \ldots \wedge dx^n \right) = 0.$$

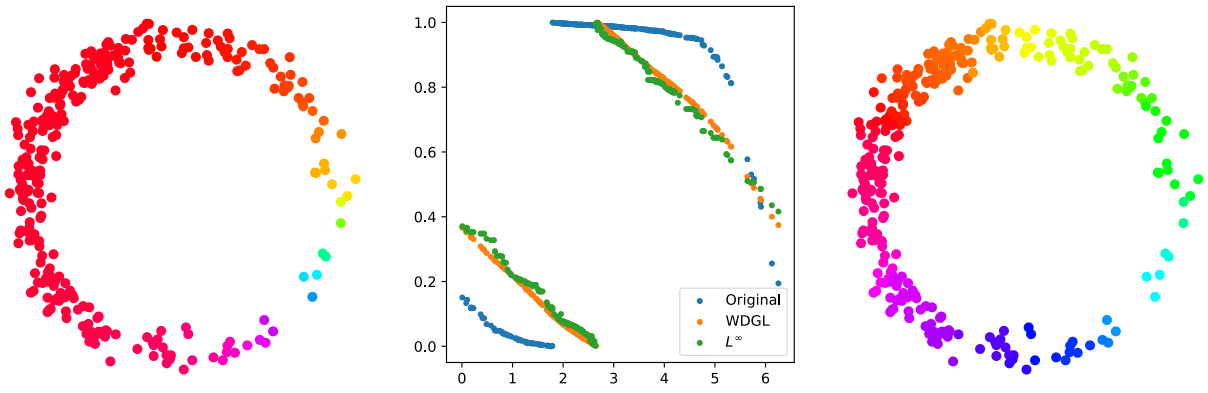
我们发现，如果设定

$$\alpha_H = \rho^{\frac{p-n}{n(p-1)}}(x^1) dx^1,$$

那么它满足式（7），因为

$$\rho^{\frac{n-p}{n}} \left(\sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^{p-2} \right) \left(\sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \alpha_j \right) = \rho^{\frac{n-p}{n}} (\rho^{\frac{p-n}{n(p-1)}})^{p-2} \rho^{\frac{p-n}{n(p-1)}} = 1.$$

对于 $n = 1$， p-调和代表元只是 $\rho(x^1)dx^1$，因此与 p 无关，并且随黎曼度量所诱导的密度线性变化。对于固定且较大的 n，p-调和代表元对密度的依赖形式为 $\rho^{1/n}$，这意味着当 n 较大时，它几乎不依赖于密度。另一方面，通常的调和代表元对密度的依赖形式为 $\rho^{2/n-1}$，与此截然不同。我们尚不清楚这个玩具示例的结论能在多大程度上推广，但该示例表明，当 p 较大且维数 n 也较大时，上同调类的 p-调和代表元对密度的依赖小于通常的调和代表元。在离散情形中，如果尺度参数足够大，我们可以将 Vietoris-Rips复形视为高维流形。



(A) 圆坐标 (B) 相关性散点图 (C) 加权圆坐标

FIGURE 2. 含噪圆数据集的结果；原始圆形坐标（左），使用原始方法、WDGL 和 L^∞-范数优化时的相关性散点图（中），WDGL 圆坐标（右）。

4. EXPERIMENTS

本节中，我们在若干合成数据上测试了我们的方法，包括带噪圆、带噪三叶结、两个相连圆以及一个环面数据集。对于真实数据分析，我们展示了 COIL-100 数据集 [9]的低维嵌入实验结果。

对于合成数据集，我们使用相关性散点图来展示结果。相关性散点图是两个圆坐标之间关系的图形表示。它由一组绘制在坐标平面上的点组成，其中一个圆坐标绘制在 x 轴上，另一个圆坐标绘制在 y 轴上。散点图用于比较两个圆坐标。在我们的实验结果中，大多数散点图用于展示实际圆坐标与通过我们的算法推断出的圆坐标之间的比较。我们使用色图将每个圆坐标置于原始数据集上，以表示结果。在我们的图中，我们使用循环 HSV 色轮。

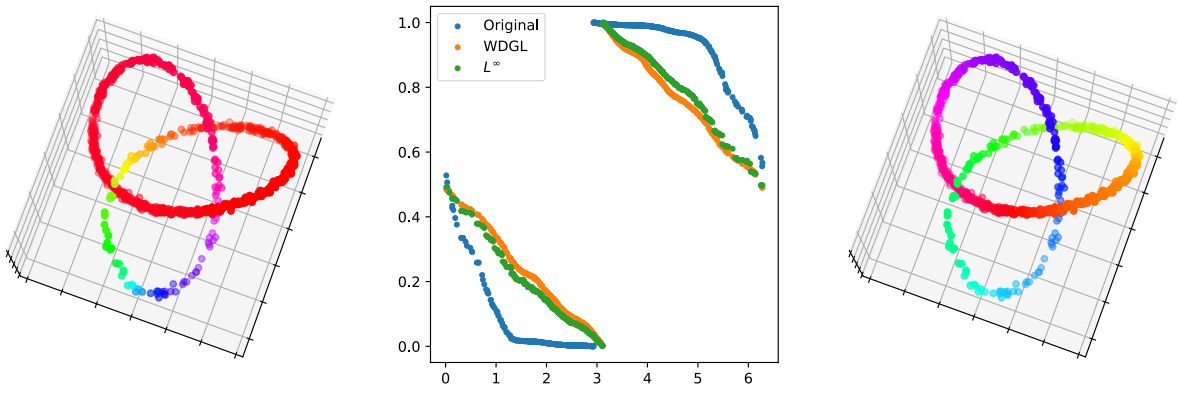
4.1. 实验细节。 我们可以选择使用各种软件来实现算法的部分功能，其中 Ripser [10] 和 SciPy [11] 专门用于获取余循环以及执行 LSQR 算法。为了优化 L^p-范数，我们使用 PyTorch [12]。为了可视化实验结果，我们使用 Scikit-learn [13]的 t-SNE 和 matplotlib [14]库。

对于非零余循环 α，我们选择 $\epsilon = \frac{b_\alpha + d_\alpha}{2}$，其中 b_α 和 d_α 分别是 α 的出生和死亡。为了获得持久图，我们使用 47 这一素数。如果使用 WDGL方法，我们启发式地将 t 设为相连顶点之间平均欧几里得距离的 0.2 倍。

4.2. 带噪圆。我们从一个密度不均的带噪圆开始。借助该圆，我们测试密度鲁棒圆坐标算法。该圆参数化为

$$\begin{cases} x = \sin(t) \\ y = \cos(t), \end{cases}$$

且 t 从 $\mathcal{N}\left(\pi, (0.4\pi)^2\right)$中采样，并添加均值为 0、标准差为 0.07 的高斯噪声。在实验中，我们采样了 300 个点。



(A) 圆坐标 (B) 相关性散点图 (C) 加权圆坐标

FIGURE 3. 含噪三叶结数据集的结果；原始圆形坐标（左图）、使用原始方法、WDGL 和 L^∞-范数优化时的相关性散点图（中图）、WDGL 圆坐标（右图）。

我们在图 2 中展示了数据集上的原始圆形坐标、使用各种方法得到的相关性散点图，以及 WDGL 圆坐标。在本实验中， L^∞-范数优化和 WDGL方法的结果相似，如相关性散点图所示，并且两者看起来都呈线性。

我们还尝试使用不同的权重来获得不同的加权圆坐标。正如我们在第 3.1 节的最后部分所解释的，我们尝试了两种权重来获得加权圆坐标，而这些结果与使用 WDGL方法时的结果相似。

对于 L^p 范数变化，我们尝试了 $p = 2$、4、6、10、20 和 ∞。注意， L^2 范数优化产生的结果与原始圆形坐标相同。通过在该数据集上的实验，我们确认， p 值越高，相关性散点图呈现得越线性。

为了提供更多实验结果，我们收集了加权圆坐标和 L^p 范数变化的相关性散点图，并将这些图展示在图12中。

现在，我们研究 a L^∞-圆坐标的收敛速度。获得 a L^∞-圆坐标的一种简单方法是直接使用算法 1。在该算法中， L^∞ 损失为$\|\alpha + d_0 f\|_\infty = \max\{|\alpha(e) + (d_0 f)(e)|\}$，因此可以优化函数 f。$_e$

相反，我们可以使用算法 2 优化函数 f 。我们对 Δ 和 η的若干超参数进行了实验，并观察到，在所有结果中，将 p 从 2 增加到 50 的算法似乎是最快的。有关实验细节，请参见图 10

我们还可以使用算法 3 得到一个 L^∞-圆坐标。详情请参见图 11。从实验结果中，我们发现，采用温度 softmax 的算法有时比算法 1 收敛得更快。不过，在大多数情况下，其收敛速度与算法 1 相似或更慢。

根据实验结果，我们得出结论：如果用原始圆形坐标初始化函数 f，即 L^2-圆坐标，然后使用算法 2，就能加快收敛速度。

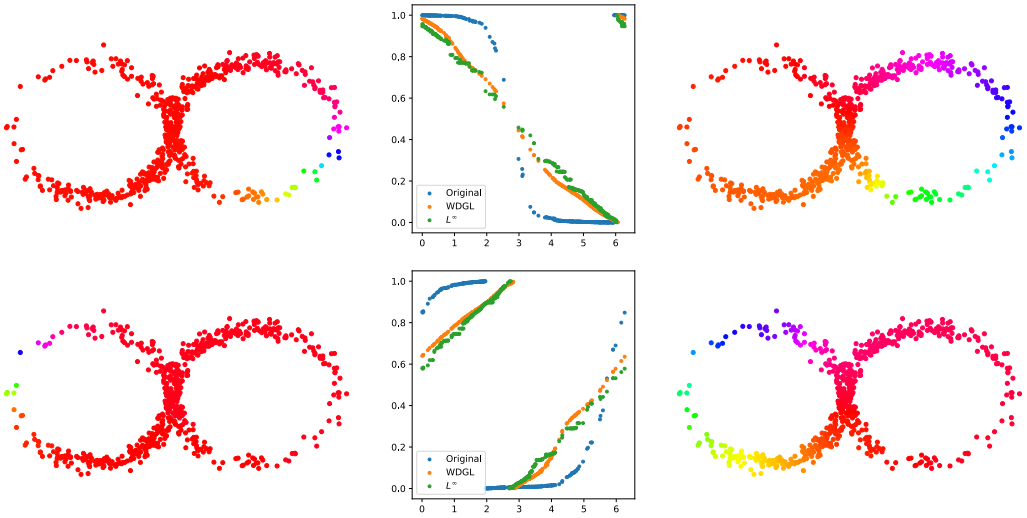


FIGURE 4. 两个相连圆数据集的结果；原始圆坐标（左列）、对应圆坐标（中列）、WDGL 圆坐标（右列）。

4.3. 带噪三叶结。接下来，我们在带噪三叶结上测试算法。我们使用参数化

$$\begin{cases} x = \cos(t) + 2\cos(2t) \\ y = \sin(t) - 2\sin(2t) \\ z = 2\sin(3t), \end{cases}$$

并且 t 从 $\mathcal{N}\left(\pi,(0.4\pi)^2\right)$中采样，同时添加均值为 0、标准差为 0.04 的高斯噪声。在实验中，我们采样 900 个点。

我们在图 3 中展示了数据集上的原始圆坐标、不同方法得到的相关性散点图，以及 WDGL 圆坐标。与此前含噪圆数据集的实验结果一样，L^∞-范数优化与 WDGL 圆坐标的结果相似，且呈线性。

我们进一步进行了两项关于加权圆坐标的实验，并使用相同的 p 对 L^p-范数变化技术进行了实验；这两项实验均与此前含噪圆数据集的实验设置相似。结果如图 14 所示，结论也与含噪圆数据集相似：三个加权圆坐标彼此相似，较高的 p 值会使相关性散点图呈现更强的线性。

4.4. 两个相连圆。接下来，我们在两个相连圆数据集上测试算法。该数据集中有两个清晰可见的圆，我们可以在由该数据集导出的持久图中观察到它们。因此，对于每个余循环，我们都运行算法两次。为了生成该数据集，我们像在带噪圆示例中那样生成两个圆，分别对每个圆进行随机旋转后，再将两个圆连接起来。对于每个圆，我们都有坐标信息，并用这些信息绘制相关性散点图。

我们在图4中展示了每个余循环的原始圆坐标、对应圆坐标和 WDGL 圆坐标。

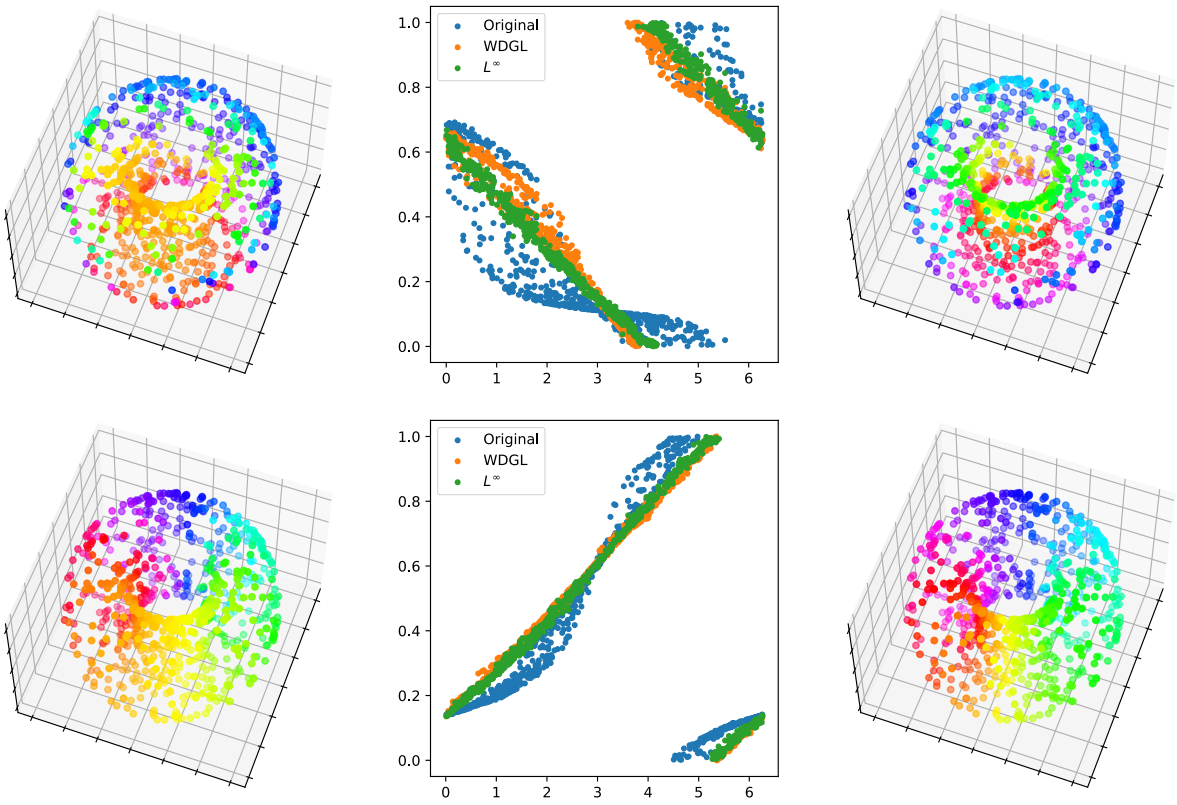


FIGURE 5. 环面数据集的结果；原始圆坐标（左列）、对应圆坐标（中列）、WDGL圆坐标（右列）。

对于这些数据， L^∞圆坐标看起来并不平滑，但总体上趋于与 WDGL 圆坐标相似。

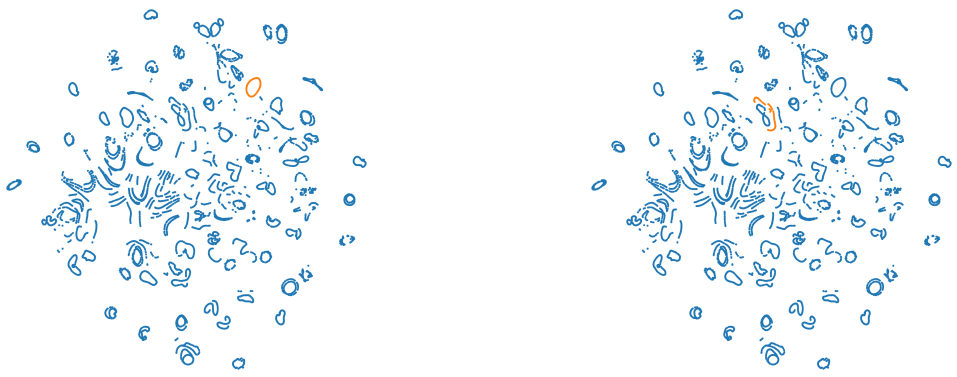
我们针对加权圆坐标进行了两项补充实验，并采用 L^p-范数变分方法进行实验，结果见图13。

4.5. 环面。 我们以环面数据作为合成数据的最后一个示例来说明我们的方法。与前一个数据集一样，该数据集有两个上循环；环面的贝蒂数为二，这一点可以从持久图中看出。环面参数化为

$$\begin{cases} x = (4 + 2\cos(s))\cos(t) \\ y = (4 + 2\cos(s))\sin(t) \\ z = 2\sin(s), \end{cases}$$

并且我们使用高斯混合模型；从概率密度函数$p(x) = \frac{1}{2}(\mathcal{N}(x \mid (\pi, 0)\ \Sigma) + \mathcal{N}(x \mid (0, \pi)\ \Sigma))$中采样 $(\bar{s}, t)$，其中 Σ 是 $\mathrm{diag}(0.4\pi, 0.4\pi)^2$。在本实验中，我们采样了800个点。

我们在图5中展示了每个余循环对应的原始圆形坐标、对应圆坐标和 WDGL 圆坐标。子午线方向和经线方向各对应一个余循环。请注意，使用 WDGL方法时，子午线方向余循环在相关性散点图中的结果并不十分线性。原因在于我们处理的并非平坦环面；环面上的均匀概率分布并非由.....上的均匀概率分布诱导而来



(A) S^1 形状嵌入。 (B) 损坏的 S^1 形状嵌入。

FIGURE 6

$[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$。不过，使用 L^∞-范数优化后，我们利用子午线方向余循环，在相关性散点图中得到了线性结果。

与前一个数据集一样，我们针对加权圆坐标和 L^p-圆坐标进一步进行了两项实验。结果如图15所示。

4.6. COIL-100。 在本实验中，我们使用 COIL-100 [9] 数据集作为真实数据集来测试我们的方法。每个物体有72张图像，物体每旋转5度拍摄一张，完成360度旋转。因此，很自然地可以认为，每个物体离散化后的 S^1 嵌入在这些图像构成的空间中。该数据集由哥伦比亚大学的哥伦比亚对象图像库（COIL）创建，常用于机器学习和计算机视觉研究中的物体识别与分类任务。

我们使用图像之间的欧几里得距离来获得圆坐标。为展示结果，我们使用 t-SNE 和主成分分析这两种流行的降维技术，生成图像的散点图，以可视化高维数据。

使用前面得到的圆坐标，我们将若干个上循环对应的圆坐标以颜色的形式呈现在 t-SNE 或主成分分析结果上。这样便能识别隐藏在降维结果中的拓扑结构。

此外，我们选取了若干个示例，展示与原始圆坐标方法相比，L^∞-圆坐标如何更好地揭示隐藏的拓扑结构。

首先，我们在图6中展示了 t-SNE 上的两个圆坐标。在 t-SNE 结果中，许多环呈现为“S^1 形”。然而，即使在 t-SNE 中，一些对象的某些环看起来仍被截断。这可能有几个原因：在嵌入初始化时，彼此相距较远的点难以合并；同时尝试嵌入许多对象也可能导致它们相互冲突。为了识别低维嵌入中的圆形结构，我们评估持久图中每个余循环对应的圆坐标。图7展示了持久图。

我们利用持久图中的条目获得圆坐标。然后，我们选取其中一些圆坐标，以帮助我们观察嵌入中的拓扑结构。

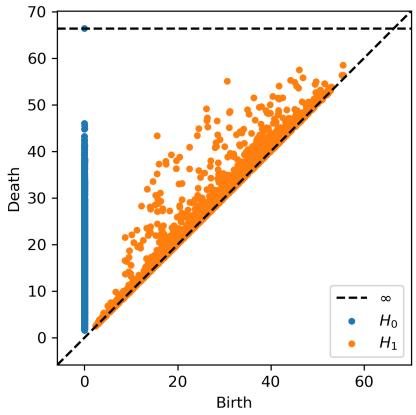
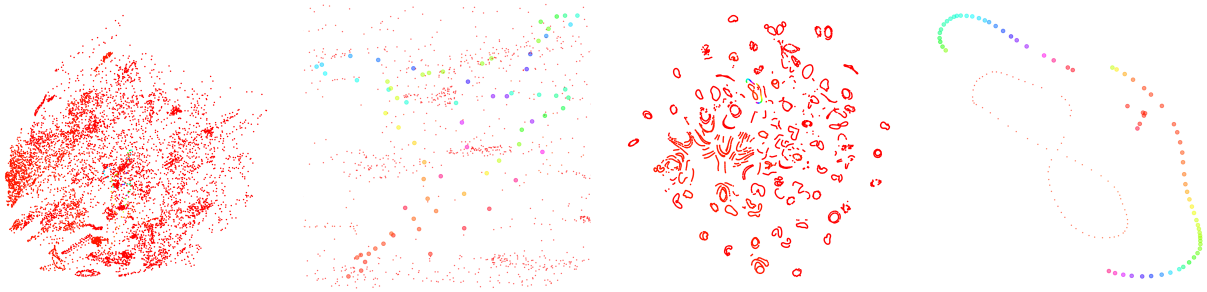


FIGURE 7. 使用欧几里得距离对 COIL-100 数据绘制的持久图。

在 t-SNE 中对一个不连通的对象进行采样后，我们开展了一项实验。结果如图 8 所示。该对象的环在主成分分析中看起来纠缠在一起，但圆坐标标出了环的位置。在 t-SNE 结果中，尽管该环在嵌入中看起来断裂了，圆坐标却揭示出这两部分实际上属于同一个环。

图 9 中的以下示例说明了 L^∞-圆坐标发挥作用的一种情况。在此实例中，一个环在 t-SNE 结果中被分成了两个部分。不幸的是，在原始圆形坐标中，左侧部分的圆坐标值与非环部分的值相近，因此很难识别出左侧部分也是该环的一部分。

然而，对于 L^∞-圆坐标，左侧和右侧部分的圆坐标分布平滑且均匀，这表明这两部分构成一个环。



(A) (B) (C) (D)

FIGURE 8. 圆坐标的结果由左侧两幅图中的 PCA 和 t-SNE 表示（(A)、(C)）。我们放大对应对象的点聚集区域，并分别通过调整点的大小来展示它们（(B)、(D)）。



(A) 原始圆形坐标。 (B) L^∞-圆坐标。

FIGURE 9. t-SNE 结果与圆坐标。我们放大相应对象的点聚集区域，并分别通过调整点的大小来展示。

5. 讨论

在本研究中，我们深入考察了用于分析数据的圆坐标。作为考察的一部分，我们研究了这些方法如何处理密度不均的数据，或数据集中的数据点分布不一致的情况。

通过观察，我们能够找出这些方法的结果仍有改进空间的地方。为了解决这一问题，我们开发了两种对不同数据密度更具鲁棒性的新方法。这些新方法旨在即使在数据密度不均的情况下，也能产生更准确、可靠的结果。

在加权圆形坐标法中，圆坐标会根据我们选择权重的方式而敏感地变化。因此，为每条边选择权重很重要。基于这一点，我们提出了一种使用 WDGL 的圆坐标方法，并且它在合成数据集上的表现符合预期。不过，定理 3.1 中的变量 t_n 仍然是我们的超参数；当 n 趋于无穷大时，我们知道，对于任意 $\alpha > 0$，只要使用$t_n = n^{-\frac{1}{k+2+\alpha}}$，我们的方法就会表现良好，但对于相对较小且有限的数据量，我们需要手动确定 t_n。

对于 L^p-圆坐标，优化时间是一大障碍。我们通过实验和理论分析得知，随着 p增大，L^p-圆坐标对密度函数的变化具有鲁棒性，但优化它需要相当长的时间。因此，我们研究了如何加快优化，并取得了相当大的提速，但要得到 L^∞-圆坐标仍然需要很长时间。

REFERENCES

[1] Karl Pearson。《关于空间中点系的最佳拟合直线与平面》。《伦敦、爱丁堡和都柏林哲学杂志与科学期刊》，2(11):559–572，1901年。[2] Harold Hotelling。《将一组统计变量分解为主成分》。《教育心理学杂志》，24(6):417，1933年。

[3] Laurens Van der Maaten 和 Geoffrey Hinton。《使用 t-SNE 可视化数据》。机器学习研究期刊，9(11)，2008年。[4] Vin De Silva 和 Mikael Vejdemo-Johansson。《持久上同调与圆坐标》。载于第二十五届计算几何年度研讨会论文集，第 227–236 页，2009年。[5] Lek-Heng Lim。《图上的霍奇拉普拉斯算子》。*SIAM*评论，62(3):685–715，2020年。[6] Hengrui Luo、Alice Patania、Jisu Kim 和 Mikael Vejdemo-Johansson。《圆坐标表示的广义惩罚项》。数据科学基础，3(4):729，2021年。[7] Xiaoye Jiang、Lek-Heng Lim、Yuan Yao 和 Yinyu Ye。《统计排序与组合霍奇理论》。数学规划，127(1):203–244，2011年。[8] Christopher C Paige 和 Michael A Saunders。《LSQR：用于稀疏线性方程和稀疏最小二乘的算法》。*ACM*数学软件汇刊 *(TOMS)*，8(1):43–71，1982年。[9] Sameer A Nene、Shree K Nayar、Hiroshi Murase 等。《哥伦比亚对象图像库 (COIL-20)》。1996年。[10] Ulrich Bauer。《Ripser：高效计算 Vietoris–Rips 持久条形码》。应用与计算拓扑期刊，5(3):391–423，2021年6月。[11] Pauli Virtanen、Ralf Gommers、Travis E. Oliphant、Matt Haberland、Tyler Reddy、David Cournapeau、Evgeni Burovski、Pearu Peterson、Warren Weckesser、Jonathan Bright、St´efan J. van der Walt、Matthew Brett、Joshua Wilson、K. Jarrod Millman、Nikolay Mayorov、Andrew R. J. Nelson、Eric Jones、Robert Kern、Eric Larson、C J Carey、Ilhan Polat、Yu Feng、Eric W. Moore、Jake VanderPlas、Denis Laxalde、Josef Perktold、Robert Cimrman、Ian Henriksen、E. A. Quintero、Charles R. Harris、Anne M. Archibald、Antˆonio H. Ribeiro、Fabian Pedregosa、Paul van Mulbregt 和 SciPy 1.0贡献者。《SciPy 1.0：Python科学计算的基础算法》。自然方法，17:261–272，2020年。[12] Adam Paszke、Sam Gross、Francisco Massa、Adam Lerer、James Bradbury、Gregory Chanan、Trevor Killeen、Zeming Lin、Natalia Gimelshein、Luca Antiga 等。《PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库》。神经信息处理系统进展，32，2019年。[13] F. Pedregosa、G. Varoquaux、A. Gramfort、V. Michel、B. Thirion、O. Grisel、M. Blondel、P. Prettenhofer、R. Weiss、V. Dubourg、J. Vanderplas、A. Passos、D. Cournapeau、M. Brucher、M. Perrot 和 E. Duch- esnay。《Scikit-learn：Python中的机器学习》。机器学习研究期刊，12:2825–2830，2011年。[14] J. D. Hunter。《Matplotlib：一个二维图形环境》。科学与工程计算，9(3):90–95，2007年。[15] Wassily Hoeffding。《有界随机变量之和的概率不等式》。载于*Wassily Hoeffding*文集，第 409–426 页。施普林格，1994年。[16] Mikhail Belkin 和 Partha Niyogi。《迈向基于拉普拉斯算子的流形方法的理论基础》。计算机与系统科学期刊，74(8):1289–1308，2008年。

Appendix A. Proof of theorems

定理 *2.1* 的证明。令 α_H 为相应的调和余循环。由于 α_H 与 α 上同调等价，我们有 $f \in \mathcal{C}^0$，使得 $\alpha - \alpha_H = d_0 f$。由于 α_H 属于 $\ker\ d_0^*$，因此得到

$$d_0^*\alpha = d_0^*(\alpha - \alpha_H) = d_0^* d_0 f = \Delta_0 f,$$

并且 f 是狄利克雷问题的一个解。假设图是连通的，且 g 是该问题的另一个解。那么，我们得到 $\Delta_0(f-g) = 0$。注意，$\ker \Delta_0$ 同构于 $H^0(X^\epsilon; \mathbb{R})$。由于 $H^0(X^\epsilon; \mathbb{R})$ 对每个连通分支都是常函数空间，因此 $f - g$ 是常数。□

定理 *3.1* 的证明。注意，$\frac{1}{n}\mathbf{L}_n^t$ 是一个.....的近似

$$\mathbf{L}^t f(p) = \int_M w(p,y)(f(p) - f(y))P(y)\, dV(y)$$

其中，dV是流形 M 的体积形式，满足 $\int_M P(y)\ dV(y) = 1$。由 Hoeffding 不等式 [15], ，由于我们有

$$\left|\frac{1}{t} w(x, x_i)(f(x) - f(x_i))\right| < \frac{1}{t(4\pi t)^{k/2} P(x_i)} \left|f(x) - f(x_i)\right| \leq \frac{a}{t(4\pi t)^{k/2}}$$

对于某个常数 $a > 0$，我们有

$$\mathbb{P}\left[\left|\frac{1}{nt}\mathbf{L}_n^t f(p) - \frac{1}{t}\mathbf{L}^t f(p)\right| > \epsilon_0\right] \leq 2\exp\left(-\frac{\epsilon_0^2 n (4\pi)^k}{2a^2} t^{k+2}\right).$$

因此，根据我们在定理 3.1 中对 t_n 的选择，

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}\left[\left|\frac{1}{nt_n}\mathbf{L}_n^{t_n} f(p) - \frac{1}{t_n}\mathbf{L}^{t_n} f(p)\right| > \epsilon_0\right] = 0. \tag{8}$$

定义函数 $w_t'(x,\ y) = \frac{1}{(4\pi t)^{k/2} P(y)} e^{-\frac{\|x-y\|^2}{4t}}$。若取 ε 球 $B_p(\epsilon) \subset \mathbb{R}^n$，并将 $B_p(\epsilon) \cap M$ 记为 B，则由 [16], 可得

$$(4\pi t)^{k/2}\left|\mathbf{L}^t f(p) - \int_B w'(p,y)(f(p) - f(y))P(y)\, dV(y)\right| = o\left(t^b\right)$$

对于任意 $b > 0$，由于对每个 $y \in B$ 都有 $w'(p,\ y) = w(p,\ y)$。由于我们知道

$$\frac{1}{t}\int_B w'(p,y)(f(p) - f(y))P(y)\, dV(y) = \frac{1}{t(4\pi t)^{k/2}} \int_B e^{-\frac{\|p-y\|^2}{4t}} (f(p) - f(y))\, dV(y)$$

根据 [16], 中的式（8），它收敛到 $\Delta_M f(p)$，因此结论成立。 □

定理 *3.2* 的证明。根据伴随算子的定义，d_0^* 是满足下图的唯一函数

$$\begin{array}{ccc} (\mathcal{C}^1)^* & \xrightarrow{\partial_1} & (\mathcal{C}^0)^* \\ {\scriptstyle\varphi_1}\uparrow & & \uparrow{\scriptstyle\varphi_0} \\ \mathcal{C}^1 & \xrightarrow{d_0^*} & \mathcal{C}^0 \end{array}$$

是交换图，其中 φ_i 定义在 $i = 1, 2$ 上，使得 $\varphi_0(v)(w) = v^t P^{-1} w$ 且 $\varphi_1(v)(w) = v^t Q_1 w$，并且 ∂_1 定义为 d_0的对偶映射。注意，对于 $i = 1,2$， φ_i 是同构。若将函数 φ_0、 φ_1和 ∂_1 表示为矩阵形式，则分别得到 P^{-1}、 Q_1和 $[d_0]^t$ ，其中 $[d_0]$ 是 d_0的矩阵形式。因此，$d_0^* d_0$ 的矩阵形式为 $P[d_0]^t Q_1 d_0$。由于$[d_0]^t Q_1 [d_0] = L^t_{n,W}$，结论得证。□

定理 *3.4* 的证明。如果 $\|f\|_\infty = 0$，则定理显然成立。假设 $\|f\|_\infty > 0$。注意到 $\|f\|_r > 0$。另一方面，令 t为满足 $t < \|f\|_\infty$的实数。于是有

$$\mu(\{|f| > t\})^{\frac{1}{p}} t \leq \left(\int_{|f|>t} |f|^p \, d\mu \right)^{\frac{1}{p}} \leq \|f\|_p.$$

令 p趋于无穷大并取极限，可得 $t \leq \liminf_{p\to\infty} \|f\|_p$，因此 $\|f\|_\infty \leq \liminf_{p\to\infty} \|f\|_p$，因为 t是小于 $\|f\|_\infty$的任意数。

另一方面，令 p 为满足 $0 < r < p$的实数。于是有

$$\|f\|_p^p = \int |f|^p \, d\mu \leq \int |f|^r |f|^{p-r} \, d\mu \leq \|f\|_r^r \|f\|_\infty^{p-r}.$$

因此，我们得到

$$\|f\|_p \leq (\|f\|_r^r)^{\frac{1}{p}} \, \|f\|_\infty^{1-\frac{r}{p}}.$$

由于 $0 < \|f\|_r < \infty$，若对 p 取极限，则得到

$$\limsup_{p\to\infty} \|f\|_p \leq \|f\|_\infty.$$

由不等式 $\limsup_{p\to\infty} \|f\|_p \leq \|f\|_\infty \leq \liminf_{p\to\infty} \|f\|_p$，可得 $\|f\|_\infty = \lim_{p\to\infty} \|f\|_p$。 □

定理 *3.5* 的证明。 不失一般性，假设 $v_i \geq 0$ for $i = 1, \ldots, n$，并证明

$$s(tv) \cdot v \longrightarrow \max_{i=1,\ldots,n} \{v_i\}.$$

令 M 为 $\{v_i\}$ 的最大值， K 为取得该最大值的 v_i 的数量。则有

$$\begin{aligned}
s(tv) \cdot v &= \sum_{i=1}^n \frac{v_i \exp(tv_i)}{\sum_{j=1}^n \exp(tv_j)} = \sum_{i=1}^n \frac{v_i \exp(t(v_i - M))}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} \\
&= \sum_{v_i = M} \frac{v_i \exp(t(v_i - M))}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} + \sum_{v_i < M} \frac{v_i \exp(t(v_i - M))}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} \\
&= \sum_{v_i = M} \frac{M}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} + \sum_{v_i < M} \frac{v_i \exp(t(v_i - M))}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} \\
&= \frac{KM}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))} + \sum_{v_i < M} \frac{v_i \exp(t(v_i - M))}{\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))}.
\end{aligned}$$

若 $v_i < M$，则当 $t \longrightarrow \infty$ 时，$\exp(t(v_i - M)) \longrightarrow 0$。因此， $\sum_{j=1}^n \exp(t(v_j - M))$ 收敛到 K，并且

$$s(tv) \cdot v \longrightarrow M$$

当 t 趋于无穷大时。 □

AppendixB. Algorithms

算法 1: L^p-圆坐标

输入: 一个单纯复形 X，包含 n 个顶点和 e 条边，以及一个上链 $\alpha \in \mathsf{C}^1(X;\mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}^e$、余边界矩阵 d_0、整数 $p \geq 1$，以及一个学习率 η

输出: L^p-圆坐标，f

初始化 $f = (f_1, \ldots\ldots, f_n) \in \mathbb{R}^n$;

重复

  $g \leftarrow \|\alpha + d_0 f\|_p$;

  $f \leftarrow f - \eta\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)$;

直到 f 收敛;

算法 2: L^∞-圆坐标(1)

输入: 一个单纯复形 X，包含 n 个顶点和 e 条边，以及一个上链 $\alpha \in \mathsf{C}^1(X;\mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}^e$、余边界矩阵 d_0、近似范围 $(p, p+1, \ldots\ldots, q)$、训练轮次数 N，以及学习率 η

输出: L^∞-圆坐标，f

初始化 $f = (f_1, \ldots\ldots, f_n) \in \mathbb{R}^n$;

$I \leftarrow p$;

$J \leftarrow 0$;

重复

  重复

    重复

      $g \leftarrow \|\alpha + d_0 f\|_I$;

      $f \leftarrow f - \eta\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)$;

      $J \leftarrow J + 1$;

    直至 f 收敛;

    $I \leftarrow I + 1$;

  直至 $I = q$;

  重复

    $g \leftarrow \|\alpha + d_0 f\|_\infty$;

    $f \leftarrow f - \eta\left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)$;

    $J \leftarrow J + 1$;

  直到 $J = N$;

直到 $J = N$;

算法 3： L^∞-圆坐标(2)

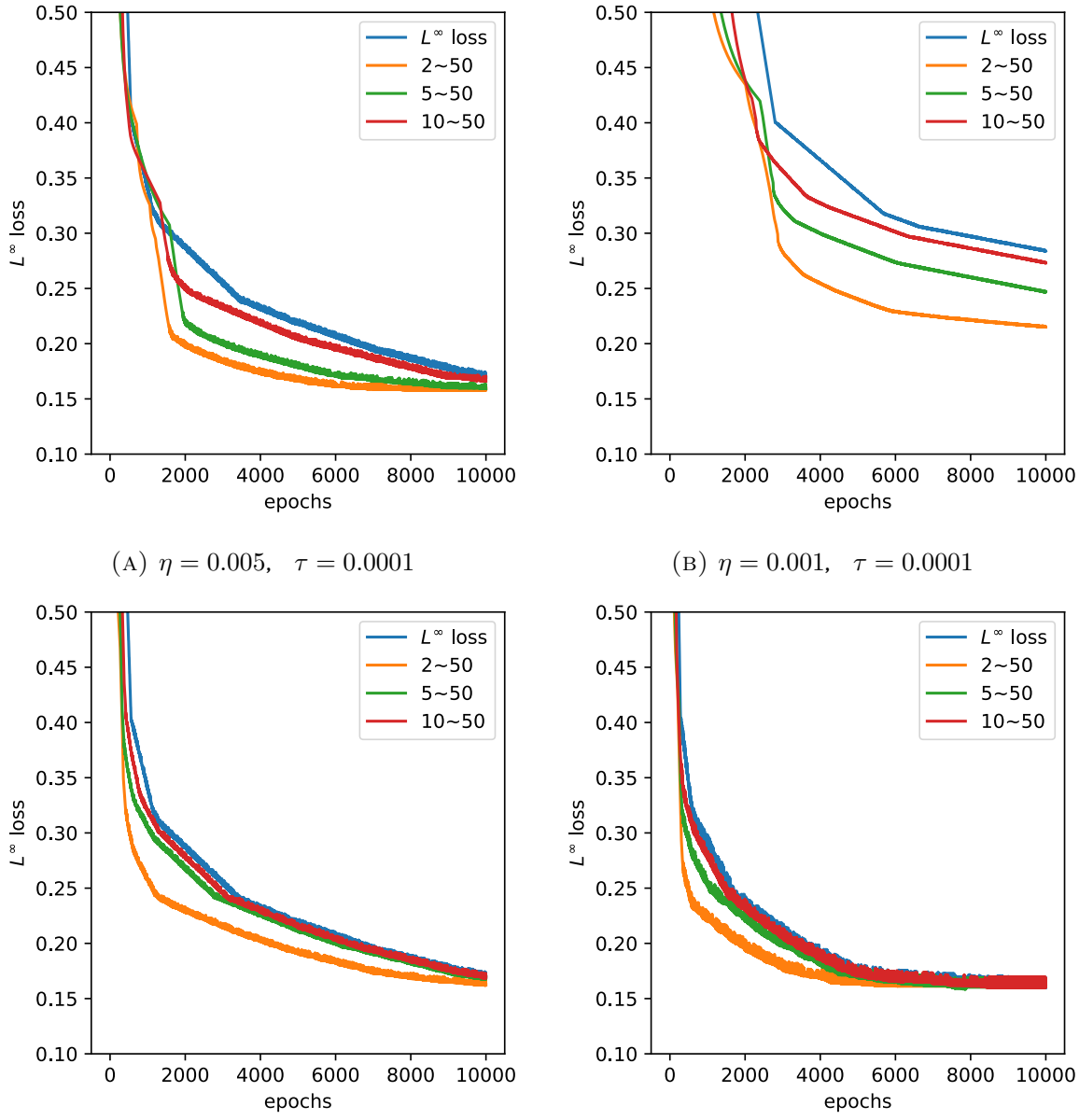
输入： 一个单纯复形 X，包含 n 个顶点和 e 条边，以及一个上链 $\alpha \in \mathsf{C}^1(X;\mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}^e$、余边界矩阵 d_0、函数 h 和 s，其中定理 3.5、初始温度 t、训练轮次数 N，以及一个学习率 η

输出： L^∞-圆坐标，f

初始化 $f = (f_1, \ldots, f_n) \in \mathbb{R}^n$;
$I \leftarrow 0$;

重复
  重复
    $g \leftarrow (s \circ h)(tf) \cdot h(f)$;
    $f \leftarrow f - \eta \left(\frac{\partial g}{\partial f}\right)$;
    $I \leftarrow I + 1$;
  直到 f 收敛;
  $t \leftarrow t + 1$;
直到 $I = N$;

Appendix C. Additional experimental results



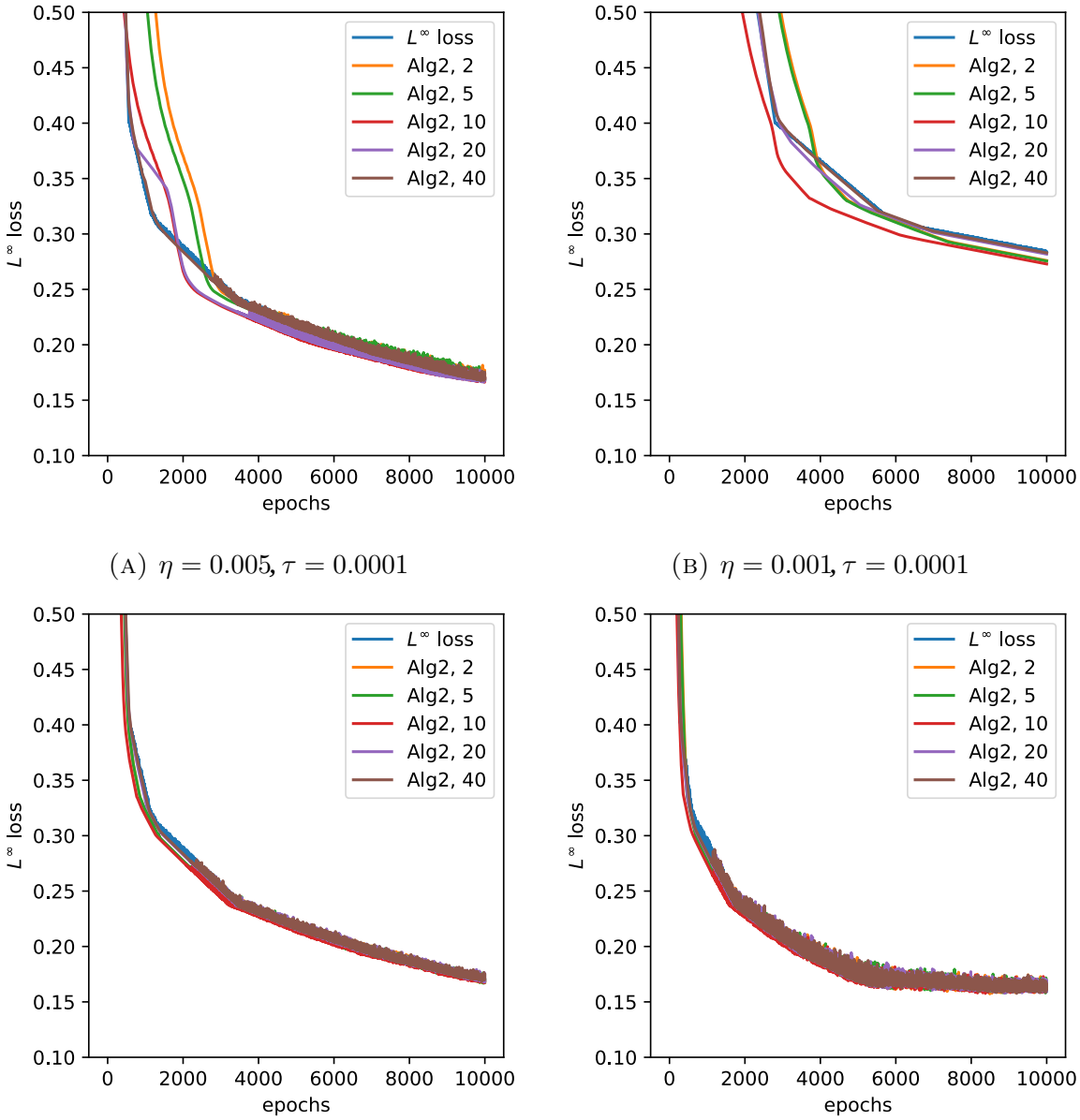
(A) $\eta = 0.005, \quad \tau = 0.0001$

(B) $\eta = 0.001, \quad \tau = 0.0001$

(C) $\eta = 0.005, \quad \tau = 0.001$

(D) $\eta = 0.01, \quad \tau = 0.001$

Figure 10. 不同超参数设置下的损失下降比较。η 为学习率，τ 为用于判断函数是否收敛的超参数。标签上的数字表示 p的递增范围。



(A) $\eta = 0.005, \tau = 0.0001$

(B) $\eta = 0.001, \tau = 0.0001$

(C) $\eta = 0.005, \tau = 0.001$

(D) $\eta = 0.01, \tau = 0.001$

FIGURE 11. 不同超参数设置下的损失下降对比。η 为学习率，τ 是用于判断函数是否收敛的超参数。标签上的数字表示算法温度的初始值。

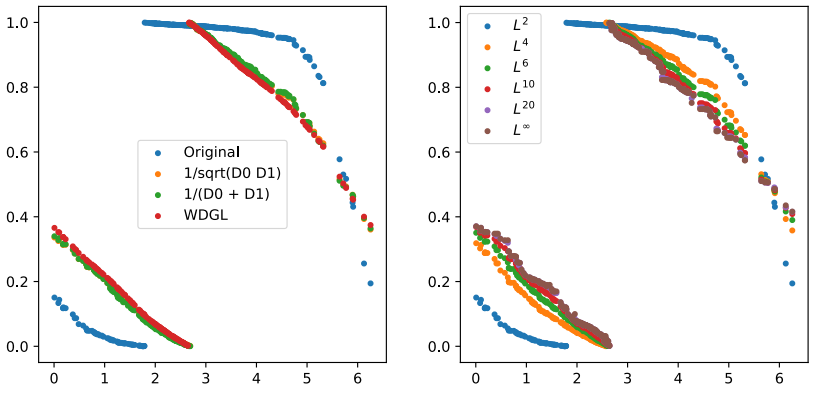


FIGURE 12. 含噪圆数据集的结果；加权圆坐标（左）， L^p-范数圆坐标（右）。

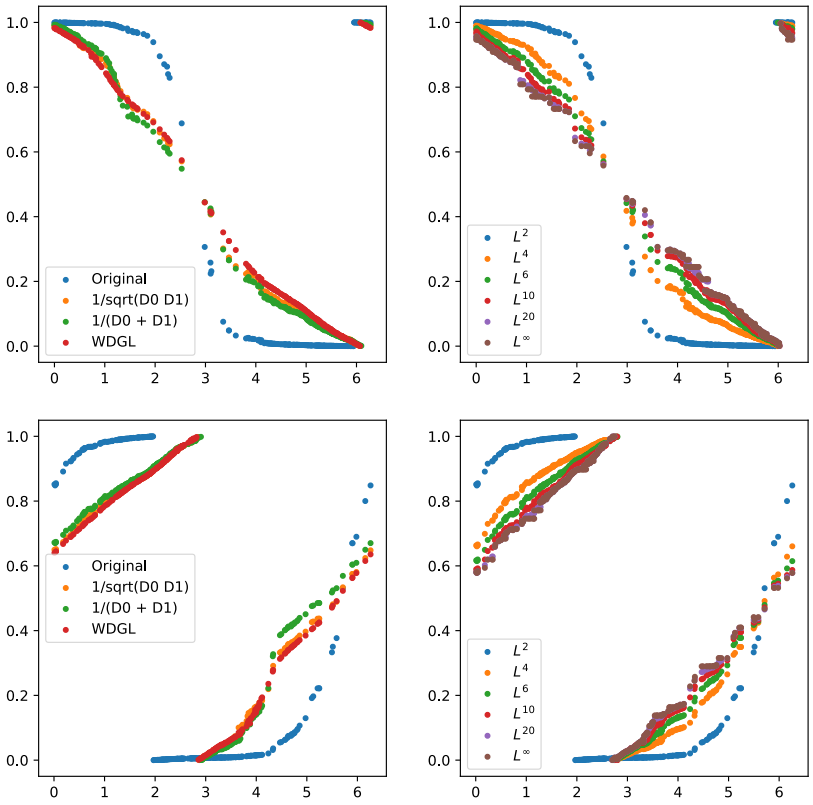


FIGURE 13. 双连圆数据集的结果；加权圆坐标（左列）， L^p 圆坐标（右列）。

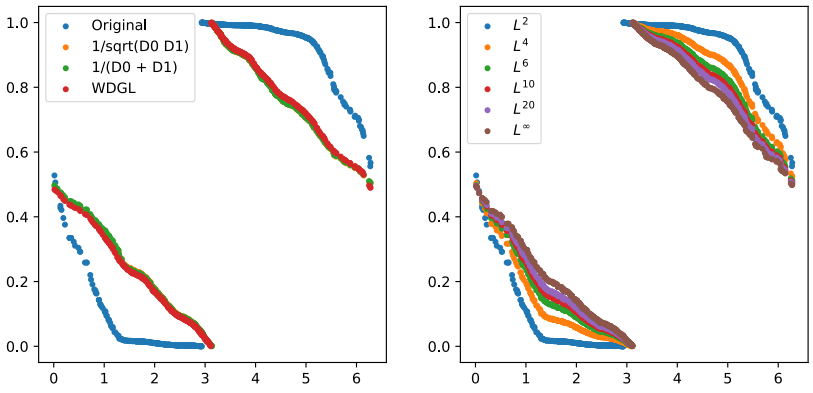


FIGURE 14. 含噪三叶结数据集的结果；加权圆坐标（左）， L^p-范数圆坐标（右）。

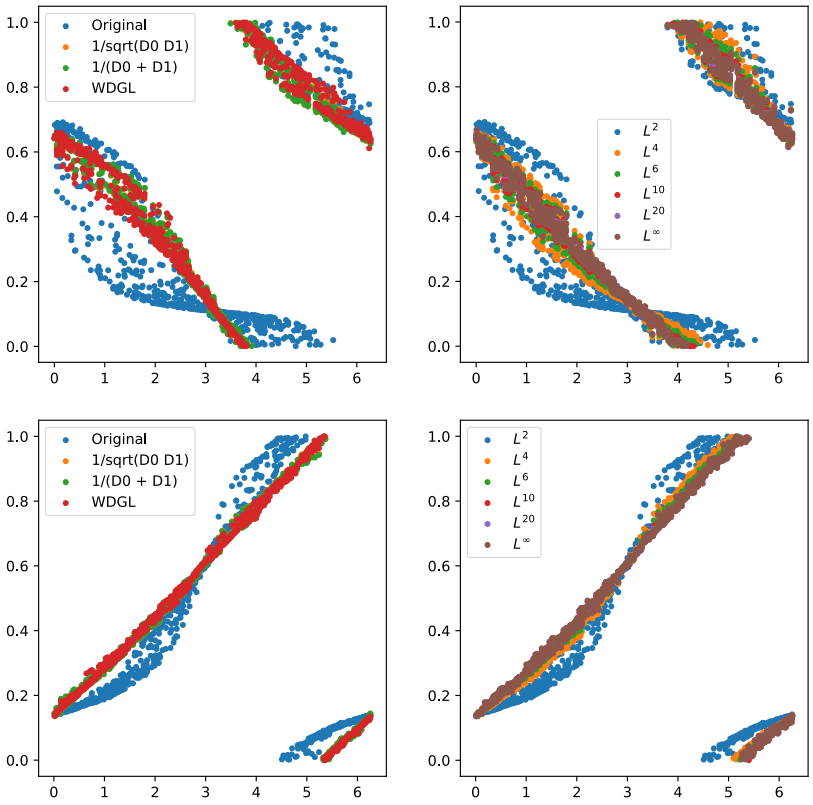


FIGURE 15. 环面数据集的结果；加权圆坐标（左列）， L^p 圆坐标（右列）。

Department of Mathematical Sciences and Research Institute of Mathematics, Seoul National University
电子邮件地址：paiktj@snu.ac.kr

Department of Mathematical Sciences and Research Institute of Mathematics, SeoulNational University电子邮件地址：woalsee@snu.ac.kr