arXiv:2303.11193v2 [math.AT] 3 Aug 2023

通过上同调进行高效的双参数持久性计算

Ulrich Bauer
慕尼黑工业大学（TUM）数学系、TUM计算、信息与技术学院及慕尼黑数据科学研究所，德国

Fabian Lenzen
慕尼黑工业大学（TUM）数学系、TUM计算、信息与技术学院，德国

Michael Lesnick
美国纽约州立大学奥尔巴尼分校数学系

摘要

清除是持久同调（ph）标准算法的一种简单而有效的优化方法，能够显著提升 Vietoris–Rips过滤的持久同调计算速度和可扩展性。由于 Vietoris–Rips过滤的边界矩阵会随着维数增加而迅速膨胀，清除只有与标准算法的对偶（上同调）变体结合使用时才有效。这种方法此前尚未成功应用于双参数持久同调的计算。

我们提出了一种用于计算双参数持久同调极小自由分解的上同调算法，该算法支持清除。为推导该算法，我们将单参数方法所依据的对偶原理扩展到双参数情形。我们提供了该算法的实现，并报告了其在函数-Rips过滤上的实验运行时间。与当前最先进的方法相比，我们的方法速度最高可提升20倍。

2012年ACM学科分类 计算数学 → 代数拓扑；计算理论 → 《计算几何》

关键词与短语 持久同调、持久上同调、双参数持久性、清除

资助 *Ulrich Bauer*：由德国研究联合会（DFG）通过协作研究中心 SFB/TRR 109 资助几何与动力学中的离散化 – 195170736。

1 引言

研究动机 持久同调 [18, 49, 36] 分析过滤拓扑空间的同调如何随着过滤参数增大而变化。通过将过滤空间（例如 Vietoris–Rips 过滤）赋予数据集，持久同调为数据提供称为条形码的简明特征，用以编码数据形状的多尺度信息。得益于持久同调计算和软件 [4, 48, 1, 38, 44, 25, 26], 的最新进展，持久同调已在实际数据应用中广受欢迎 [24]。一项著名的稳定性结果 [15, 8, 11] 保证，输入数据的小幅扰动（按照格罗莫夫–豪斯多夫距离衡量）会使 Vietoris–Rips 过滤的持久同调条形码产生小幅扰动（按照瓶颈距离衡量）。然而，Vietoris–Rips 持久同调众所周知地容易受到离群点影响，稳定性较差。除其他策略外 [11, , 第 1 节7], 中常见的一种补救方法是引入第二个过滤参数来控制点云的局部密度，由此产生双参数和多参数持久同调的概念 [13, 42, 16, 33, 40, 12]。双参数持久同调的一个核心计算问题，有些类似于条形码的计算，是计算持久同调模的极小自由表示或极小自由分解（mfr）。虽然分解包含的信息多于表示，但其基础

算法问题本质上相同，因此本文重点讨论极小自由分解的计算。实践中，这种分解通常相当小 [22], ，而且计算它是求取多参数情形下不变量或度量的自然第一步 [12]。

计算双参数持久同调的最小自由分解，比单参数情形更为复杂。这个问题可以通过经典的 Gröbner 基算法解决；这类算法适用范围广得多，但扩展性不足，无法满足实际拓扑数据分析应用的需求 [34]。最近，有人提出了一种专用算法 [34, 31], ，其效率在理论和实践中都远高于 Gröbner 基方法。这大幅降低了将双参数持久性用于实际数据分析的门槛 [29]。近期应用参见例如[10, 45]。

然而，现有的双参数持久同调软件远比单参数持久同调实现缓慢，扩展性也较差，例如 [4, 1, 38, 48]。 [34, 31] 的方法归结为一种矩阵约化方案，与单参数持久同调的标准算法类似 [49]，渐近运行时间也相同，均为复形大小的立方。然而，现代单参数持久同调算法采用了多种关键优化。特别是，已知对于 Vietoris–Rips 过滤，清除 [5, 14]与标准持久性算法的对偶（上同调）变体结合时，能显著提升性能[17, 5]。所有最先进的 Vietoris–Rips 持久同调计算软件都采用了这一策略。然而，在双参数情形下，使用持久上同调（pc）更具挑战性，根本原因在于，与单参数情形不同，过滤复形的相对单纯上链并不构成自由模。

贡献为了更高效地计算函数-Rips 双过滤的同调持久模的最小自由分解，我们引入算法 [34, 31], 的一个上同调变体，现概述如下。

设 K_* 是一个有限单纯自然数集^n-滤过，且 $K = \bigcup_{z\in\mathbf{Z}_n} K_z$。假设 K_* 是单临界的，即对于每个 $\sigma \in K$，集合 $\{z \,|\, \sigma \in K_z\}$ 都有唯一的极小元 $g(\sigma)$。我们定义一个由自由持久模组成的上链复形 $N^\bullet(K_*)$。本文中， $H_\bullet(K)$ 始终表示 K 的约化单纯同调。如果对于除有限多个指标 $z \in \mathbf{Z}^n$ 外的所有 d， $H_d(K_z) = 0$ （这可以通过向 K_* 添加附加单形轻松实现），那么对于所有 d，$H^{d+n}(N^\bullet(K_*))$ 都同构于 $H_d(K_*)$ 的对偶模（见命题 6）。这可以视为单参数持久性中相应结论的推广；在该情形下， $N^\bullet(K_*)$ 等于相对上链复形 $C^\bullet(K, K_*)$ [17, 定理 2.4]；另见 [9]。

给定一个 n 参数持久模 M 的（极小）自由分解 $F_\bullet$，并为 $F_\bullet$ 的每个模选定一组基，我们证明，表示 $F_\bullet$ 的矩阵也表示 M 的一个（极小）内射分解；见定理 10。特别地，这使我们能够轻松地将一个模（例如 $H^{d+n}(N^\bullet(K_*))$）的（极小）自由分解转换为其对偶的（极小）自由分解（即 $H_d(K_*)$）；见推论 14。

对于 $n = 2$，我们提出一种仅根据余边界映射 $\delta^{d+1}\colon N^d(K_*) \to N^{d+1}(K_*)$ 计算 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 的最小自由分解（mfr）（从而计算 $H_d(K_*)$）的方法；见第 3.4 节。该方法的核心是一个用于解决以下问题的算法：给定一个自由持久模之间的态射 $f\colon F \to F'$，以及向量空间余极限像 f 的一组基，计算自由持久模 $\ker f$ 的一组基；见定理 19。该算法兼容清除优化，能够显著提升其性能。

我们已实现我们的方法 [32]，并报告了函数-Rips 双过滤计算实验的计时结果。在所考察的大多数实例中，我们的方法明显快于 `mpfree` 中使用的方法 [22]；在某些实例中，我们的实现速度最高可达该方法的 20 倍。

近期有不少多参数持久性计算方法，致力于在不改变同调的情况下缩减输入复形的规模 [21, 41, 22, 2]。这些方法可作为计算极小自由分解的预处理步骤。在我们的计算实验中，我们探究了 [22] 的分块预处理方法对我们方法效率的影响。实验发现，通常不进行这项预处理时，我们的方法表现更好。相比之下，我们观察到，这项预处理对 [34, 31]，的方法非常有帮助，这一点此前已有报告 [22]。我们还观察到，对上链复形而非链复形应用分块算法，即使是进行同调计算，也可能显著提升性能。

2 背景

2.1 持久模

设 k 是一个域，令 $n \in$ 为自然数集，令 vec 表示有限维 k 向量空间构成的范畴，并将 $\mathbf{Z}^n$ 视为带有通常乘积偏序的偏序集。一个（逐点有限维） $\mathbf{Z}^n$ 持久模，也称为 n 参数持久模，是一个函子 $M : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{vec}$。映射 $M_{z \le z'}$: $M_z \to M_{z'}$ 称为 M 的结构映射。若 $m \in M_z$，则称 z 为 m 的分级，记作 $g(m)$。 M 的总维数为 $\sum_{z \in \mathbf{Z}^n} \dim M_z$。我们将 $\mathbf{Z}^n$-pers 记为逐点有限维 $\mathbf{Z}^n$ 持久模构成的阿贝尔范畴。其态射为自然变换。$\mathbf{Z}^n$-pers 等价于环 $k[x_1, \ldots, x_n]$ 上多重分次模范畴的一个全子范畴；参见 [13]。除非 $n = 1$，代数 $k[x_1, \ldots, x_n]$ 不是主理想整环；因此，$\mathbf{Z}^n$ 持久模无法用 $n > 1$ 的条形码来描述。

令 $V^* = \mathrm{Hom}_k(V, k)$ 表示 k-向量空间 V 的对偶。 k-持久模 M 的对偶 是 M^*，它是一个$\mathbf{Z}^n$-持久模，并且满足 $(M^*)_z = (M_{-z})^*$ 以及 $(M^*)_{z \le z'} = (M_{-z' \le -z})^*$。阿贝尔范畴$\mathcal{C}$ 中的对象 M 称为投射（分别称为内射），如果函子 $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(M, -)$（分别是 $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, M)$）正合。对偶性 $M \mapsto M^*$ 是范畴的一个正合反变等价，因此将投射模映为内射模，反之亦然。

对于 $z \in \mathbf{Z}^n$，令 $F(z)$ 为满足以下条件的模：若 $z \le w$，则 $F(z)_w = \{k$；否则为 0；若$z \le w \le w'$，则 $F(z)_{w \le w'} = \mathrm{id}_k$。模 F 是自由模，如果存在元素 $(z_i)_{i \in I} \subseteq \mathbf{Z}^n$，其中指标集为 I，使得存在同构 b: $\bigoplus_{i \in I} F(z_i) \to F$。每个有限生成投射持久模都是自由模 [39, 43, 27]。令 e_i 表示 $\bigoplus_{i \in I} F(z_i)$ 中由 i 标记的分量里的元素 $1 \in F(z_i)_{z_i}$。集合 $\{b(e_i) \mid i \in I\}$ 是 F 的一组基。多重集 $\mathrm{rk}\ F := \{z_i \mid i \in I\}$ 由 F 唯一确定，称为其（分级）秩。模 M 是有限生成的，如果存在从有限秩自由模 F 到它的逐点满射 $F \to M$；在这种映射下， F 的一组基的像称为 M 的生成系。

分次矩阵 M 是一个矩阵，其元素为 $M_{ij} \in k$，行和列分别标有行分次 rg_*^M和列分次 cg_*^M。分次$m \times n$-矩阵 M的分次转置是分次 $n \times m$-矩阵 M^T，其元素为 $(M^T)_{ij} = M_{m+1-j, n+1-i}$，行分次为 $\mathrm{rg}_i^{M^T} = -\mathrm{cg}_{n+1-i}^M$，列分次为 $\mathrm{cg}_j^{M^T} = -\mathrm{rg}_{m+1-i}^M$。有限秩自由模 F和 F'之间的态射 f: $F \to F'$，相应的基为 $b_1, \ldots, b_n$和 $b'_1, \ldots, b'_m$，可唯一表示为分次 $m \times n$-矩阵 M，其中 $\mathrm{cg}_j^M = g(b_j)$、$\mathrm{rg}_i^M = g(b'_i)$，且其元素 M_{ij}满足：对所有 j，$f(b_j) = \sum_i M_{ij} F'_{g(b'_i) \le g(b_j)}(b'_i)$。

▶**引理 1.** 分次矩阵 M 表示有限秩自由模之间的态射，当且仅当$M_{ij} = 0$ 每当 $\mathrm{rg}_i^M \not\le \mathrm{cg}_j^M$。

证明。 这由以下事实可得：$\mathrm{Hom}(F(z)\ F(z')) = \{k$若 $z \ge z'$，否则为 0。 ◀

若固定自由模 F、$F\prime$的基，我们便将态射 $F \to F'$与表示它的分次矩阵等同。模 M 的自由分解（相应地，内射分解）是一个集中于非负次数、与 M拟同构的自由模链复形 $F_\bullet\colon \cdots \to F_1 \to F_0$（相应地，是一个内射模上链复形 $I^\bullet\colon\ I^0 \to I^1 \to \cdots$）。一个（同调） d-球是形如$\cdots \to 0 \to F(z) \xrightarrow{\text{恒等映射}} F(z) \to 0 \to \cdots$的无环链复形，其中 $z \in \mathbf{Z}^n$，且集中于次数 d，$d-1$。若一个自由分解，更一般地，一个自由模链复形，不含与某个球同构的直和项，则称其为极小。若一个内射分解的对偶是极小的，则称该内射分解极小。若自由模态射 $F_1 \to F_0$ 可扩张为模 M的（极小）自由分解，则称其为模 M 的（极小）自由表示。

▶**定理 2** (参见 [20, 定理 20。2], [37, 定理 7。5])。 每个有限生成模都有一个最小自由分解。每个自由分解都同构于一个最小自由分解与若干同调球的直和的直和。特别地，最小自由分解在链复形同构的意义下是唯一的。

因此，设 $F_\bullet$ 是有限生成持久模 M的一个最小自由分解，则分次秩$\beta_q(M) \coloneqq \operatorname{rk} F_q$（称为 M的分次贝蒂数）与 $F_\bullet$的选取无关。

▶**定理 3** （希尔伯特系子定理 [37, 定理 15.2], [20, 推论 19.7]）。 每个$\mathbf{Z}^n$-持久模都有一个长度至多为 n的最小自由分解。

2.2 滤过

对于 P任意偏序集，一个（单纯） P-滤过是从 ${K_*}^n$ $\mathbf{Z}$到单纯复形范畴的函子，其中单纯映射 $K_{z\le z'}$ 是包含映射。我们记作 $K = \bigcup_{z\in\mathbf{Z}_n} K_z$。

▶ **例 4.** 设 S为度量空间，并对每个有限的非空 $\sigma \subseteq S$，令 $\operatorname{diam}\ \sigma = \max_{s,t\in\sigma} d(s,t)$。与 S 相关联的***Vietoris–Rips*** 过滤 $VR_*(S)$ 是由$VR_r(S) = \{\sigma \subseteq S \mid 0 < |\sigma| < \infty, \operatorname{diam}\ \sigma \le r\}$给出的 $\mathbf{R}$-过滤。若 S有限且非空，令$r_1 < r_2 < \cdots < r_n$为 $\operatorname{diam}\ \sigma$在 $\sigma \subseteq S$上可取到的不同值。令

$$VR_i(S) = \begin{cases} \widehat{VR}(S)_{r_1} & \text{if } i \le 1, \\ \widehat{VR}(S)_{r_i} & \text{if } 1 < i < n, \\ \widehat{VR}(S)_{r_n} & \text{if } n \le i, \end{cases}$$

我们得到一个$\mathbf{Z}$-过滤$VR_*(S)$，我们也称之为 Vietoris–Rips 过滤。

若 K_* 是一个 $\mathbf{Z}^n$-过滤，其绝对和相对单纯链 $C_\bullet(K_*)$ 与 $C_\bullet(K, K_*)$（系数取自 k）构成 $\mathbf{Z}^n$-持久模的链复形；相应的圈 $Z_d(-)$、边界 $B_d(-)$ 和同调 $H_d(-)$ 对所有 d 都是 $\mathbf{Z}^n$-持久模。链复形 $C_\bullet$ 的对偶上链复形 $C^\bullet \coloneqq (C_\bullet)^*$ 的分量为 $C^d = (C_d)^*$。其上圈 $Z^d(C^\bullet)$、上边界 $B^d(C^\bullet)$ 和上同调 $H^d(C^\bullet)$ 对所有 d 都是 $\mathbf{Z}^n$-持久模。由于 $(-)^*$ 正合，对所有 d 都存在自然同构 $H^d(C^\bullet) \to H_d(C_\bullet)^*$。我们的指标约定是，链复形 $C_\bullet$ 的边界态射为 $\partial_d\colon\ C_d \to C_{d-1}$，而上链复形 $C^\bullet$ 的上边界态射为 $\delta^d = (\partial_d)^*\colon\ C^{d-1} \to C^d$。这与标准约定不同，但如此选取可使 $C^\bullet = (C_\bullet)^*$ 具有 $\delta^d = (\partial_d)^*$。

若对于每个 $\sigma \in K$，集合 $\{z \in \mathbf{Z}^n \mid \sigma \in K_z\}$ 都有唯一的极小元素 $g(\sigma)$，则称 $\mathbf{Z}^n$-过滤 K_* 为单临界 的；该元素称为 σ 的分级。此时，$C_\bullet(K_*) = \bigoplus_{\sigma\in K_*} F(g(\sigma))$ 是自由的，其基为 $\{e_\sigma \mid \sigma \in K_*\}$，满足 $g(e_\sigma) = g(\sigma)$。特别地，$\partial_\bullet$ 可以表示为分次矩阵 $[\partial_\bullet]$。

▶ **例5.** 与有限度量空间S 和函数 $f\colon\ S \to \mathbf{Z}$ 相关联的函数-***Rips*** 双过滤 $VR^f_*(S)$ 是一个单临界 $\mathbf{Z}^2$-过滤，其$VR^f_{x,y} = \{\sigma \in VR_y(S) \mid$

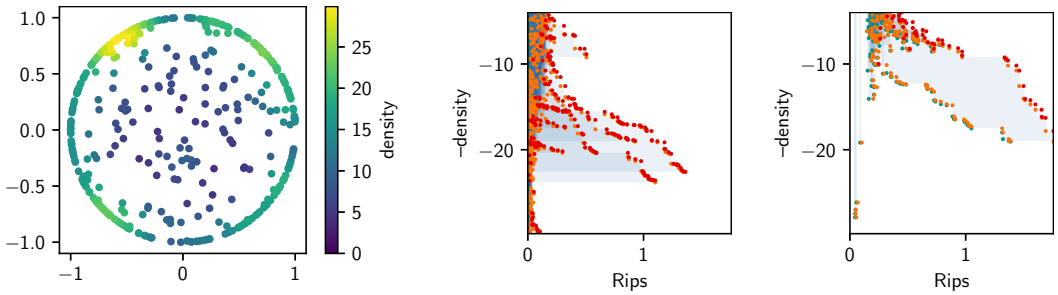


图 1 点集 S（左），其密度函数为 $\rho(p) := \sum_{q \in S \setminus \{p\}} \exp\left(-\frac{d(p,q)^2}{2\sigma^2}\right)$，其中 $\sigma = 0.15$；$H_0(VR^{\rho}_{*}(S))$（中）和 $H_1(VR^{\rho}_{*}(S))$（右）的分次贝蒂数（青色：β_0，红色：β_1，橙色：β_2）与希尔伯特函数（蓝色深浅随维数从 $= 0$ 增至 ≥ 10 而加深）。

$\max_{s \in \sigma} f(s) \leq x\}$。图1展示了函数-Rips 双过滤持久同调的希尔伯特函数和分级 Betti 数，其中该函数为密度函数。

2.3 单参数持久性与清除

接下来我们关注 $-\infty \leq b_i < d_i \leq \infty$ 上的持久模。对于 $-\infty \leq b_i < d_i \leq \infty$，令 $I(b,d)$ 为区间模，其定义为：若 $b \leq z < d$, 则 $I(b,d)_z = \{^{k}$，否则为 0；且若 $b \leq z \leq z' < d$，则 $I(b,d)^{z \leq z'} = \mathrm{id}_k$。每个逐点有限维的 上的持久模都同构于本质唯一的直和 $\bigoplus_{i \in I} I(b_i, d_i)$ [46, 49]。这些对 (b_i, d_i) 的集合称为 M 的条形码。

给定一个有限的自然数集过滤复形 K_*，通常我们希望计算 $H_\bullet(K_*)$ 的条形码。由于 $k[x]$ 是主理想整环，子模 $Z_d(K_*)$ $B_d(K_*) \subseteq C_d(K_*)$ 对所有 d 都是自由的。标准算法 [19, §3] 对每个分次矩阵 $[\partial_d]$ 应用一种遵循次序的高斯列约简方案，计算 $Z_d(K_*)$ 和 $B_d(K_*)$ 的基，进而得到 $H_\bullet(K_*)$ 的条形码。每个相对上链模 $C^d(K, K_*)$ 也是自由的，因此同一算法可根据表示上余边算子 δ^d 的分次矩阵 $[\delta^d] = [\partial_d]^T$，计算 $H^\bullet(K, K_*)$ 的条形码。通过考察对 (K, K_*) [17, 9] 的长正合列可见，$H_\bullet(K_*)$ 和 $H^\bullet(K, K_*)$ 的条形码可以简单地相互确定。

已经发现，对于 Vietoris–Rips过滤，计算 $H^\bullet(K,\ K_*)$ 比计算$H_\bullet(K_*)$ 高效得多。这种效率的提升得益于清除优化方案 [5, 14, 4], ，下面我们将对此进行说明。矩阵某一列的主元 是该列中非零元素对应的最大行索引。标准算法通过从左到右进行列加法，将 $[\delta^{d+1}]$ 化为约化 形式 R^{d+1}，也就是说，R^{d+1} 的所有列都具有两两不同的主元。如果列 R^d_j 非零，且主元为 i，那么$R^{d+1}_i = 0$。因此，如果此前的计算已经确定了 R^d ，就可以跳过将 $[\delta^{d+1}]_j$约化为零的步骤。标准算法通常会将大部分运行时间花在那些被约化为零的 $[\delta^{d+1}]$ 列上，因此跳过其中的大部分列可以显著加快算法。

若对所有 d，约化同调 $H_d(K)$ 都为零，则对 $(K,\ K_*)$ 的长正合列表明，对所有 d，$H^{d+1}(K,\ K_*)^* \cong H_d(K_*)$，因此可以预期它们能由相同的数据计算得出。事实上，可以仅用 δ^{d+1}（分别仅用 ∂_{d+1}）通过清除计算 $H^{d+1}(K,\ K_*)$（分别计算 $H_d(K_*)$）；见算法 3。

2.4 双参数持久性的计算

LW 算法 假设 $C_\bullet$ 是由有限秩自由 $\mathbf{Z}^2$-持久模组成的链复形；例如，对于单临界 $\mathbf{Z}^2$-过滤 K_*，$C_\bullet = C_\bullet(K_*)$，并设 D_d 是表示 ∂_d 的矩阵：对所有 d，$C_d \to C_{d-1}$。定理 2 和 3 表明，有限生成自由 $\mathbf{Z}^2$-模之间的态射的核是自由模。特别地，对所有 d，$Z_d(C_\bullet)$ 是自由模，因此序列 $0 \to Z_{d+1}(C_\bullet) \xrightarrow{i_{d+1}} C_{d+1} \xrightarrow{p_{d+1}} Z_d(C_\bullet)$ 是 $H_d(K_*)$ 的自由分解。根据 D_d，LW 算法 [34, 31]（见算法 4）计算一个分次矩阵 I_d，表示 i_d：$Z_d(C_\bullet) \to C_d$。该算法的一个变体（见算法 5）根据 D_{d+1} 计算分次矩阵 D'_{d+1}：$C'_{d+1} \to C_d$，其列表示 $B_d(C_\bullet)$ 的极小生成系；同时还计算一个分次矩阵 I'_{d+1}，表示由 D'_{d+1} 表示的态射的核 Z'_{d+1}。存在唯一的分次矩阵 P'_{d+1} 满足 $D'_{d+1} = I_d P'_{d+1}$，可由算法 9 得到。然后，I'_{d+1} 和 P'_{d+1} 表示一个自由分解

$$0 \to Z'_{d+1} \xrightarrow{I'_{d+1}} C'_{d+1} \xrightarrow{P'_{d+1}} Z_d(C_\bullet) \tag{1}$$

of $H_d(C_\bullet)$。要得到一个最小自由分解，还需要从 (1) 中拆分出与同调球同构的直和项。存在一种易并行算法，可以计算与给定链复形拟同构的极小链复形；参见注 23。特别地，该算法可用于将自由分解转换为极小自由分解。它还可用于从输入复形 $C_\bullet$ 中拆分出球。这称为 分块预处理，通常能显著提升 LW 算法的性能 [21, 31, 22]。

3 上同调计算

设 K_* 是一个单临界 $\mathbf{Z}^n$-滤过。若 $n > 1$，则 $C^\bullet(K_*)$ 和 $C^\bullet(K, K_*)$ 都不是自由模复形。由于 LW 算法要求输入复形是自由模复形，因此不能使用第 2.4 节中的策略直接计算 $H^\bullet(K_*)$ 或 $H^\bullet(K, K_*)$。相反，我们考虑一个上链复形 $N^\bullet(K_*)$，它可用于计算 $H_d(K_*)$。

3.1 自由上链复形 $N^\bullet(K_*)$

对于模 M和 $z \in \mathbf{Z}^n$，令 Mz为具有分次分量 $Mz_w = M_{z+w}$ 的模。对于 $z \geq 0$，M 的结构映射给出一个态射 $M \to Mz$。注意，$Mz^* = M^* - z$。对于分次矩阵 A，令 Az为满足 $Az_{ij} = A_{ij}$、$\mathrm{rg}_i^{A\langle z\rangle} = \mathrm{rg}_i^A + z$ 且 $\mathrm{cg}_j^{A\langle z\rangle} = \mathrm{rg}_j^A + z$（对所有 i, j）的分次矩阵。

在 K_* 的单形上固定一个全序，使得链复形$C_\bullet(K_*) = \bigoplus_{\sigma \in K_*} F(g(\sigma))$ 的边界映射 $\partial_\bullet$ 由分次矩阵 $[\partial_\bullet]$ 表示。令 $\epsilon = (1, \ldots, 1) \in \mathbf{Z}^n$。令

$$N^\bullet(K_*) = \bigoplus_\sigma F(-g(\sigma) + \epsilon)$$

为其上余边算子 $\delta_N^\bullet$ 由 $[\partial_\bullet]^T \langle -\epsilon \rangle$ 表示的上链复形，其中所依据的是标准基。由引理 1 可知，这是一个定义良好的上链复形。这个链复形的关键性质总结在下面的命题中，其证明留待下一小节给出。

▶**命题 6**。若对所有 d，$H_d(K_*)$ 都有有限总维数，则存在自然同构 $H_d(K_*) \cong H^{d+n}(N^\bullet(K_*))^*$。

▶ **推论 7**。 若 $H_\bullet(K_*)$ 具有有限总维数，且 $F_\bullet$ 是 $H^{d+n}(N^\bullet(K_*))$的自由分解，则$(F_\bullet)^*$ 是 $H_d(K_*)$的内射分解。

3.2 持久模的卡拉比–丘性质

除了证明命题 6，我们还需要将推论 7 中 $H_d(K_*)$ 的内射分解转换为 $H_d(K_*)$ 的自由分解。这两者都将由定理 10 得出，该定理确立了持久模的一种性质，在代数的某些领域中称为卡拉比–丘性质 [23]；关于更一般情形下的证明，请参见 [28, 引理 4.1]。事实证明，内射分解与自由分解之间存在密切对应关系，我们将在本节探讨这种关系。对于 $z \in \mathbf{Z}^n$，我们定义内射模 $I(z) = F(-z)^*$；即，$I(z)_w = \begin{cases} k & \text{当 } w \le z \text{时，} 0 \text{否则，} \end{cases}$ 并且 $I(z)_{w \le w'} =$ 当 $w \le w' \le z$ 时为 id。

▶**定义 8**。 对于持久模 M、N，令 $\mathsf{Hom}(M, N)$ 为分量为 $\mathsf{Hom}(M, N)_z = \mathrm{Hom}(M, N\langle z\rangle)$ 的持久模。

令$\mathcal{P}_{\mathbf{Z}^n\text{-pers}}$ 和$\mathcal{I}_{\mathbf{Z}^n\text{-pers}}$ 分别表示$\mathbf{Z}^n$-pers 中由自由模和内射模组成的满子范畴。

▶ **引理 9** （参见 [3, 第三章命题 2.10]）。 中山函子

$$\nu := \mathsf{Hom}(-, F(0))^* : \mathcal{P}_{\mathbf{Z}^n\text{-pers}} \to \mathcal{I}_{\mathbf{Z}^n\text{-pers}}$$

是范畴等价，其拟逆为 $\nu^{-1} = \mathsf{Hom}(I(0)^*, -)$。

容易验证 $\nu F(z) = I(z)$ 和 $\nu^{-1} I(z) = F(z)$。因此，$N^\bullet(K_*) = (\nu C_\bullet(K_*)\langle\epsilon\rangle)^*$。对于链复形 $C_\bullet$ 和 $i \in \mathbf{Z}$，令 $C_\bullet[i]$ 为一个链复形，其第 d个模为 $(C_\bullet[i])_d = C_{i+d}$。类似地，对于上链复形 $C^\bullet$，令 $C^\bullet[i]$ 为一个上链复形，其 $(C^\bullet[i])^d = C^{i+d}$。注意，$C_\bullet[i]^* = (C_\bullet)^*[i]$。

▶**定理 10.** 若 $F_\bullet$ 是由自由 $\mathbf{Z}^n$-持久模构成的复形，且对所有 d，$H_d(F_\bullet)$ 都具有有限总维数，那么 $F_\bullet$ 与 $\nu F_\bullet[n]\langle\epsilon\rangle$自然拟同构。

证明。对于 $z \in \mathbf{Z}^n$，我们记作 $z = (z_1, \ldots, z_n)$。对于 $n \in$ 自然数集，令 $[n] := \{1, \ldots, n\}$，并令$\binom{[n]}{k} := \{S \subseteq [n] \mid |S| = k\}$。对于 $S = \{s_1 < \ldots < s_k\} \in \binom{[n]}{k}$ 和 $z \in \mathbf{Z}^n$, $w \in \mathbf{Z}^k$，我们令

$$z|_w^S := (z_1, \ldots, z_{s_1 - 1}, w_1, z_{s_1+1}, \ldots, z_{s_k - 1}, w_k, z_{s_k+1}, \ldots, z_n)$$

为由 z 替换索引为 S 的分量为 w中的元素后得到的 n-元组。对于任意模 $M \in \mathbf{Z}^n$-**持久模** 和 $S \subseteq [n]$，我们令 $\mathsf{Colim}_S M$ 为满足以下条件的模

$$(\mathrm{Colim}_S M)_z = \mathrm{colim}_{w \in \mathbf{Z}^k} M_{z|_w^S}, \qquad (\mathrm{Colim}_S M)_{z \le z'} = \mathrm{colim}_{w \in \mathbf{Z}^k} M_{z|_w^S \le z'|_w^S}.$$

例如，对于 $n = 3$，我们得到 $(\mathsf{Colim}_{\{1,3\}} M)_{(z_1,z_2,z_3)} = \mathsf{colim}_{(w_1,w_2) \in \mathbf{Z}^2} M_{(w_1,z_2,w_2)}$. 模 $\mathsf{Colim}_S M$ 沿着 S指定的坐标轴保持不变。特别地，$\mathsf{Colim}\, M = \mathsf{Colim}_{[n]} M$是恒为 colim M 的模。对于模 M，我们对每个 k 定义模 $K_k M = \bigoplus_{S \in \binom{[n]}{k}} \mathsf{Colim}_S M$。如果 $S \subseteq S'$，那么存在一个典范态射 $\mathsf{Colim}_S M \to \mathsf{Colim}_{S'} M$。对于自由模 $F(z)$，这些构成一个正合序列

$$0 \to F(z) \to K_1 F(z) \to \cdots \to K_n F(z) \to I(z)\langle\epsilon\rangle \to 0, \tag{2}$$

称为 $F(z)$ 的*Koszul*复形 。最后一个态射是典范态射 $K_nF(z) = \mathrm{Colim}\ F(z) = \mathrm{Lim}\ I(z)\langle\epsilon\rangle \to I(z)\langle\epsilon\rangle$。设 $F_\bullet$ 是一个由自由模组成的有界复形。利用 $\nu F(z) = I(z)$，我们得到一个正合序列

$$K_\bullet: \quad 0 \to F_\bullet \to K_1F_\bullet \to \cdots \to K_nF_\bullet \to \nu F_\bullet\langle\epsilon\rangle \to 0 \tag{3}$$

链复形，其构造方式是：对 $F_\bullet$ 中的每个 $F(z)$，取（2）的一个移位副本。我们将（3）拆分为短正合序列

$$\begin{array}{ccccccccccccc}
 & & & & 0 & & 0 & & 0 & & & & \\
 & & & & \searrow & \nearrow & & \searrow & & & & & \\
 & & & & & U_\bullet^{(1)} & & & U_\bullet^{(n-1)} & & & & \\
 & & & & \nearrow & & \searrow & & & \searrow & & & \\
0 & \to & F_\bullet & \longrightarrow & K_1F_\bullet & \longrightarrow & K_2F_\bullet & \longrightarrow\!\cdots\!\longrightarrow & K_nF_\bullet & \longrightarrow & \nu F_\bullet\langle\epsilon\rangle & \to & 0 \\
 & & \| & \nearrow & & & \searrow & & & \searrow & \| & & \\
 & & F_\bullet & & & & U_\bullet^{(2)} & & & & \nu F_\bullet\langle\epsilon\rangle & & \\
 & & \nearrow & & & & & \searrow & & & & \searrow & \\
 & & 0 & & & & & & 0 & & & & 0
\end{array} \tag{4}$$

其链复形为 $U_\bullet^{(k)}$，对应每个 k。这些短正合序列各自在导出范畴 $\mathcal{D}^{\mathrm{b}}(\mathbf{Z}^n\text{-pers})$ [47, §10.4.9] 中给出一个三角形。由此得到连接同态

$$\partial^{(1)}: U_\bullet^{(1)}[1] \to F_\bullet, \qquad \partial^{(2)}: U_\bullet^{(2)}[1] \to U_\bullet^{(1)}, \qquad \cdots \qquad \partial^{(n-1)}: \nu F_\bullet\langle\epsilon\rangle[1] \to U_\bullet^{(n-1)}$$

位于 $\mathcal{D}^{\mathrm{b}}(\mathbf{Z}^n\text{-pers})$ 中。它们构成以下长正合序列

$$\begin{aligned}
&\cdots \to H_{d+1}(K_1F_\bullet) \to H_{d+1}(U_\bullet^1) \xrightarrow{\partial^{(1)}} H_d(F_\bullet) \to H_d(K_1F_\bullet) \to \cdots, \\
&\cdots \to H_{d+2}(K_2F_\bullet) \to H_{d+2}(U_\bullet^2) \xrightarrow{\partial^{(2)}} H_{d+1}(U_\bullet^{(1)}) \to H_{d+1}(K_2F_\bullet) \to \cdots, \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
&\cdots \to H_{d+n}(K_nF_\bullet) \to H_{d+n}(\nu F_\bullet\langle\epsilon\rangle) \xrightarrow{\partial_{(n-1)}} H_{d+n-1}(U_{(n-1)\bullet}) \to H_{d+n-1}(K_nF_\bullet) \to \cdots,
\end{aligned} \tag{5}$$

由短正合序列（4）诱导。由于对所有 d，$H_d(F_\bullet)$ 都具有有限总维数，因此当 $|S| > 0$ 时，$\mathrm{Colim}_S\, H_d(F_\bullet) = 0$。对所有 S，函子 Colim_S 都是正合的，因为它是一个有向余极限。特别地，对所有 $k > 0$，$H_d(K_kF_\bullet) = H_d\big(\bigoplus_{|S|=k} \mathrm{Colim}_S\, F_\bullet\big) = 0$。因此，长正合序列（5）表明所有连接同态 $\partial^{(k)}$ 都是拟同构。于是，$\partial^{(1)} \circ \cdots \circ \partial^{(n-1)}$: $\nu F_\bullet[n]\langle\epsilon\rangle \longrightarrow F_\bullet$ 是一个拟同构。◀

▶ **推论11.** 令 $M \in \mathbf{Z}^n\text{-pers}$ 具有有限总维数。
1. 若 $F_\bullet$ 是 M 的自由分解，则 $\nu F_\bullet[n]\langle\epsilon\rangle$ 是 M 的内射分解。**2.** 若 $I^\bullet$ 是 M 的内射分解，则 $\nu^{-1}I^\bullet[-n]\langle-\epsilon\rangle$ 是 M 的自由分解。

命题 6 的证明。 由 $N^\bullet(K_*) = (\nu C_\bullet(K_*)\langle\epsilon\rangle)^*$，定理 10 给出

$$H^{d+n}(N^\bullet(K_*))^* \cong H_d(N^\bullet(K_*)^*[n]) \cong H_d(\nu C_\bullet(K_*)\langle\epsilon\rangle[n]) \cong H_d(C_\bullet(K_*)) = H_d(K_*). \quad \blacktriangleleft$$

▶ **引理12.** 分次矩阵 M 表示一个态射 $\bigoplus_j I(\mathrm{cg}_j^M) \to \bigoplus_i I(\mathrm{rg}_i^M)$ 当且仅当 $M_{ij} = 0$ 在 $\mathrm{rg}_i^M \not\leq \mathrm{cg}_j^M$ 时。

证明。 这可由 $\mathrm{Hom}(I(z)\ I(z')) = \begin{cases} k \text{ 若 } 0 & z \geq z' \\ \text{否则} & \end{cases}$ ◀

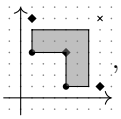
特别地，分次矩阵表示自由模之间的态射，当且仅当它表示内射模之间的态射（参见引理 1）。

▶ **引理 13。** 设 $f\colon \bigoplus_{j=1}^{n} F(z_j) \to \bigoplus_{i=1}^{m} F(z_i')$ 是由分次矩阵 $[f]$ 表示的自由模态射。那么，态射 $\nu f\colon \bigoplus_{j=1}^{n} I(z_j) \to \bigoplus_{i=1}^{m} I(z_i')$ 由同一个分次矩阵 $[\nu f] = [f]$ 表示。

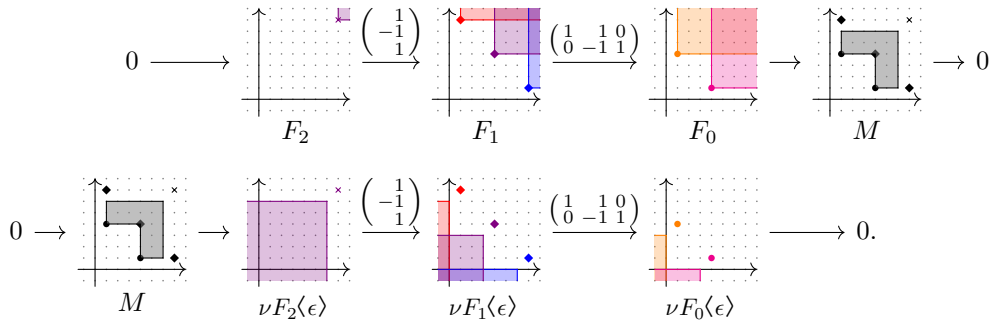
▶ **推论 14. </style}对于有限总维数的 $\mathbf{Z}^n$-*pers* </style}** 以及分次矩阵 $U_1, \dots, U_n$，以下条件等价：

1. $U_1, \dots, U_n$ 表示一个自由分解 $\cdots 0 \to F_n \xrightarrow{U_n} \cdots \xrightarrow{U_1} F_0$ ***of*** M**,2.** $U_1\langle\epsilon\rangle \dots, U_n\langle\epsilon\rangle$ 表示一个内射分解 $I^0 \xrightarrow{U_n\langle\epsilon\rangle} \cdots \xrightarrow{U_1\langle\epsilon\rangle} I^n \to 0 \cdots$ ***of*** M**,3.** $U_1\langle\epsilon\rangle^T, \dots, U_n\langle\epsilon\rangle^T$ 表示一个自由分解 $\cdots 0 \to G_n \xrightarrow{U_n\langle \epsilon^T \rangle} \cdots \xrightarrow{U_1 \epsilon^T} G_0 \langle\rangle$ ***of*** M^*。在此情况下，对于所有 q，$I^q = \nu F_{n-q}\langle\epsilon\rangle = G_q^*$。

▶ **例 15.** 考虑模

$M =$ ,

其中，若 z 位于阴影区域内，则 $M_z = k$；否则 $M_z = 0$；并且 M 中所有非零向量空间之间的结构态射均为恒等态射。下图的第一行展示了 $F_\bullet$ 作为 M的自由分解，第二行展示了 $\nu F_\bullet[2]\langle\epsilon\rangle$ 作为 M的内射分解：



3.3 从余极限拉回模

从现在起，我们只考虑$\mathbf{Z}^2$-持久模。还需要解释如何计算 $H^\bullet(N^\bullet(K_*))$。原则上，可以采用类似于第 2.4 节所述 LW 算法的过程来完成：交换图中的水平序列

$$\begin{array}{ccccccccc} & & N^d(K_*) & & & & & & \\ & & \downarrow & \searrow^{\delta^{d+1}} & & & & & \\ 0 & \longrightarrow & Z^{d+1}(N^\bullet(K_*)) & \xrightarrow[i^{d+1}]{} & N^{d+1}(K_*) & \xrightarrow{p^{d+1}} & Z^{d+2}(N^\bullet(K_*)) & & \\ & & & & & \searrow^{\delta^{d+2}} & \downarrow i^{d+2} & & \\ & & & & & & N^{d+2}(K_*) & \searrow^{\delta^{d+3}} & \\ & & & & & & & & N^{d+3}(K_*) \end{array} \tag{6}$$

是 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 的自由分解，并且我们可以按照第 2.4 节所述，得到表示该分解的矩阵。然而，这需要用到余边界映射 δ^{d+2} 和

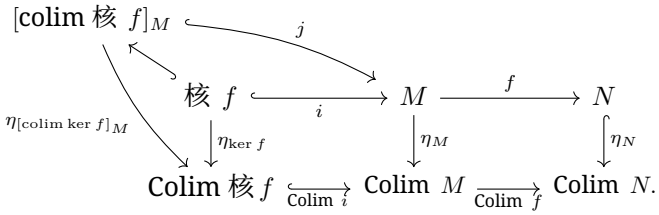
δ^{d+3}，导致计算代价非常高，尤其是对于函数-Rips 双过滤。相反，我们提出一种方法，仅根据 δ^{d+1} 计算 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 的自由分解。

对于一个向量空间 V，记 ΔV 为各分量为 $(\Delta V)_z = V$ 的持久模，并且 ΔV 的所有结构态射都是恒等映射。令 $\mathrm{Colim}\ M = \Delta$ 为 $\mathrm{colim}\ M$。

▶ **定义 16.** 对于一个模 $M \in \mathbf{Z}^2$-**pers** 和一个向量空间 $V \subseteq \mathrm{colim}\ M$，我们令 $[V]_M \in \mathbf{Z}^2$-**pers** 为 ΔV 在典范映射 $\eta_M\colon\ M \to \mathrm{Colim}\ M$ 下的原像。

▶ **引理 17.** 若 $f\colon\ M \to N$ 是一个态射且 N 是自由的，则 $\ker f = [\mathrm{colim} \ker f]_M$。

证明. 若 N 是自由的，则 $\eta_N\colon\ N \to \mathrm{Colim}\ N$ 是内射的。对于每个子模 $L \subseteq M$，我们有 $L \subseteq \eta_M^{-1}(\mathrm{Colim}\ L) = [\mathrm{colim}\ L]_M$，因此 $\ker f \subseteq [\mathrm{colim} \ker f]_M$。接下来只需证明另一侧的包含关系 $[\mathrm{colim} \ker f]_M \subseteq \ker f$。考虑交换图表



函子 Colim 是一个有向余极限，因此是正合的。因此，$\mathrm{Colim}\ \ker f = \ker \mathrm{Colim}\ f$。这意味着 $\eta_N \circ f \circ j = \mathrm{Colim}\ f \circ \mathrm{Colim}\ i \circ \eta_{[\mathrm{colim} \ker f]_M} = 0$。由于 η_N 是内射的，我们得到 $f \circ j = 0$。因此，j 唯一地通过 $\ker f$ 分解。这就证明了该断言。◀

字典序 $\preceq_{\mathrm{lex}}$ 和 逆字典序 $\preceq_{\mathrm{colex}}$ 是 $\mathbf{Z}^2$ 定义如下

$$(x,y) \preceq_{\mathrm{lex}} (x',y') \quad \text{iff either } x < x' \text{ or } x = x' \text{ and } y \leq y',$$
$$(x,y) \preceq_{\mathrm{colex}} (x',y') \text{ iff either } y < y' \text{ or } y = y' \text{ and } x \leq x'.$$

两个等级 z_1，$z_2 \in \mathbf{Z}^2$ 满足 $z_1 \leq z_2$ 当且仅当 $z_1 \preceq_{\mathrm{colex}} z_2$ 且 $z_1 \preceq_{\mathrm{lex}} z_2$。

▶ **定义 18.** 对于 $b \in k^m$ 和 $r \in (\mathbf{Z}^2)^m$，b 关于 r 的字典序主元(b)是满足 $b_i \neq 0$ 且 r_i 关于 $\preceq_{\mathrm{lex}}$ 取得最大值的最小指标 i。逆字典序主元，c-主元(b)，以类似方式定义。对于 $0 \in k^m$，我们令l-piv(0) =c-piv(0) $= 0$。

▶**定理 19**。 设 M 是一个有限秩的自由 $\mathbf{Z}^2$-持久模，且给定了一个基；设$V \subseteq \mathrm{colim}\, M$ 是一个子空间，并设 B 是表示 V的一个生成集的矩阵。那么$[V]_M$ 是自由的，且算法 *1* 会计算出一个分次矩阵，表示 $[V]_M$的一个基。

对于一个元组 $r \in (\mathbf{Z}^2)^m$ 和一个有 m 行的矩阵 M，设 $[M]_r$ 为分次矩阵，其行分次为 $\mathrm{rg}_i^{[M]_r} = r_i$、列分次为 $\mathrm{cg}_j^{[M]_r} = \bigvee_{M_{ij} \neq 0} r_i$。那么 $[M]_r$ 具有使得 $[M]_r$ 表示自由模之间的映射的最小列分次。

定理 19 的证明。 令 $m_1, \ldots, m_s$ 是 M的一个基，且 $r = (g(m_1) \ldots, g(m_s))$。不失一般性，假设 B 表示 V的一个基。算法 1 中的第一个 for 循环是一个标准的约化方案。每次迭代中，一列的主元索引都会减小，因此循环会终止。终止时，所有列的共字典序主元都互不相同。在第二个 for 循环的每次迭代中，一列的字典序主元都会减小。循环终止时，所有列的字典序主元都互不相同。在第二个循环中，第 $(*)$ 行确保没有任何一列

算法 1 计算 $[V]_M$ 的一个基，其中 $M = \bigoplus_{i=1}^{m} F(r_i)$ 且 $V \subseteq \mathrm{Colim}\ M$。**数据：** 一个 $m \times n$-矩阵 B，它表示 V 的一个生成集，$r = (r_1, \ldots, r_m) \in (\mathbf{Z}^2)^m$。**结果：** 一个分级 $m \times n$-矩阵，其非零列表示 $[V]_M$ 的一个基。**函数** `Bireduce`(B)**：**

$p \leftarrow 0 \in [m]^n$ **for** $j = 1, \ldots, n$ **do while** $i \leftarrow$ **c-主元**(B_j) $\neq 0$ **do if** $p_i = 0$ **then** $p_i \leftarrow j$; **break** $B_j \leftarrow B_j + B_{p_i}$

$p \leftarrow 0 \in [m]^n$ **for** $j' = 1, \ldots, n$ **do** $j \leftarrow j'$ **while** $i \leftarrow$ **l-piv**(B_j) $\neq 0$ **do if** $p_i = 0$ **then** $p_i \leftarrow j$; **break** (*) **if c-主元**$(B_j) <$ **c-主元**(B_{p_i}) **then swap** p_i **and** $_j B_j \leftarrow B_j + B_{p_i}$ **return** $[B]_r$

将其添加到另一个共字典序主元较小的列中。由于经过第一个 for 循环后，所有列的共字典序主元都各不相同，因此在第二个 for 循环期间，这些列的共字典序主元不会改变。因此，算法终止时，B 的所有列的字典序主元和共字典序主元都两两不同。

令 $A = [B]_r$ 表示算法终止时 B 的状态。于是，A 表示自由子模 N 的一组基 $\alpha_1, \ldots, \alpha_t$，其中 $g(\alpha_j) = \mathrm{cg}_j^A$。剩下要证明 $N = [V]_M$。由于算法 1 执行的所有列变换都是可逆的，A 表示 V 的一组基。因此，colim N = colim V，这意味着 $N \subseteq [V]_M$。令 $v \in [V]_M$。于是，存在唯一的系数 ξ_j，使得 $\eta_M(v) = \sum_{j=1}^{t} \xi_j \eta_M(\alpha_j)$。由于 η_M 是内射的，对于所有 $z \geq g(v) \vee \bigvee_{\xi_j \neq 0} \mathrm{cg}_j^A$，都有 $M_{g(v) \leq z}(v) = \sum_{j=1}^{t} \xi_j M_{g(\alpha_j) \leq z}(\alpha_j)$。由于 A 的所有列都有互不相同的字典序主元和共字典序主元，v 的分级不可能小于 $\bigvee_{\xi_j \neq 0} \mathrm{cg}_j^A$，因此 $v \in N$。这就证明了该结论。◀

3.4 上同调的自由分解

假设 $C^\bullet$ 是一个由自由模构成的上链复形，满足 colim $H^\bullet(C^\bullet) = 0$，并回顾交换图 (6)。表示 δ^{d+1} 的矩阵 $[\delta^{d+1}]$ 是 colim $Z^{d+1}(C^\bullet)$ 的生成系，而引理 17 指出 $Z^{d+1}(C^\bullet) = [\mathrm{colim}\ Z^{d+1}(C^\bullet)]_{C^{d+1}}$。因此，对 $[\delta^{d+1}]$ 应用算法 1，可得到一个分次矩阵 $[i^{d+1}]$，它表示 $Z^{d+1}(C^\bullet)$ 的一组基。

▶**引理 20**。如果 $0 \to F_2 \xrightarrow{f_2} F_1 \xrightarrow{f_1} F_0$ 是一个模的自由分解，且该模具有有限总维数，那么 $(\nu F_0)^* = \ker(\nu f_2)^*$。

证明。序列 $0 \to F_2 \xrightarrow{f_2} F_1 \xrightarrow{f_1} F_0$ 是正合的。由定理 10，序列 $\nu F_2 \xrightarrow{\nu f_2} \nu F_1 \xrightarrow{\nu f_1} \nu F_0 \to 0$ 因而其对偶序列 $0 \to (\nu F_0)^* \xrightarrow{(\nu f_1\ ^*)} (\nu F_1)^* \xrightarrow{(\nu f_2\ ^*)} (\nu F_2)^*$ 也都是正合的。◀

因此，若已知表示 f_2 的矩阵 $[f_2]$，则可通过对 $[f_2]^T = [(\nu f_2)^*]$ 应用 LW 算法（算法 4）来计算矩阵 $[f_1]^T = [(\nu f_1)^*]$。特别地，若 $H_d(C^\bullet)$ 的总维数有限，则 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 的总维数也有限，因此可将引理 20 应用于 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 的自由分解 (6)。这表明，可通过对 $[i^{d+1}]^T$ 应用 LW 算法来计算 $[p^{d+1}]^T$。

算法 2 使用清除法，计算上链复形 $C^\bullet$（其由自由 $\mathbb{Z}^2$-模组成）的 $H^\bullet(C^\bullet)$ 的极小自由分解。输入：表示 $C^\bullet$ 的分次矩阵 $[\delta^\bullet]$。输出：表示 $d=0$ 的自由分解的分次矩阵对，其中 $H^d(C^\bullet)$， $d=0$ 为 $1,\dots.q \leftarrow \emptyset$ ▷ ；用于清除的主元 $d=0$，对于 $1,\dots$，令 $j \in q$ 对每个 $[\delta^{d+1}]_j \leftarrow 0$ ▷ 执行清除 $[i^{d+1}] \leftarrow$ `Bireduce`($[\delta^{d+1}]) n \leftarrow$ $[i^{d+1}]$ #列数 $\{\text{piv}, , \text{piv}[i^{d+1}]_n\}[i^{d+1}]^T$， $[p^{d+1}]^T \leftarrow$ `MGSWithKer`$([i^{d+1}]^T)$ ▷ 参 $q \leftarrow$ $[i^{d+1}]_1 \dots$ 见算法 5，生成 `MinimizeChainComplex`$([i^{d+1}], [p^{d+1}])$ ▷ 的 $H^{d+2}(\nu C^\bullet \epsilon)$ 极小自由分解 $\cong H^d(C^\bullet)$

▶ **推论 21.** 设 $C^\bullet$ 是一个自由模上链复形，且维数 $H^\bullet(C^\bullet)$ 有限。那么，算法 *2* 计算出 $H^d(C^\bullet)$的自由分解。

▶ 注记 22（清除）。一般而言， $[\delta^{d+1}]$ 不是内射的。与单参数持久上同调的情形一样，算法 1 的第一个循环会花费大量时间来约化那些最终会被约化为零的 $[\delta^{d+1}]$ 的列。调用算法 1 之前，利用约化矩阵 $[\delta^d]$的主元实施清除方案，可以显著加快计算。这一方法已在算法 2 中实现。

4 实验

我们已用 C++ [32] 实现了上同调算法。为了改变实现细节，我们还实现了 `mpfree` [30] 中使用的算法 [22] 。在适用情况下，我们的克隆版本运行时间与 `mpfree` 的版本相近。我们运行了该实现，以计算各种函数-Rips 双过滤的持久上同调的最小自由分解。

4.1 设置

所有计算都采用 $k = \mathbf{F}_2$ 作为系数。矩阵列以二叉堆的形式实现 [7]。我们的代码还实现了另一种列表示方式，即动态分配数组。我们在一台配备 2.3 GHz 双核 Intel Core i5 处理器和 16GB RAM 的 MacBook Pro 2017 上运行代码。代码使用 clang++ 15.0.7 编译。我们的程序实例最多可并行运行四个线程。

极小表示计算所用同调算法 [22] 的运行时间主要耗费在分块预处理和 LW 算法上。分块预处理通常采用易并行的方式实现，但目前尚无已知方法可以并行化 LW 算法。虽然我们的实现对算法 2 中的极小化步骤进行了并行化，但双分次约化（算法 1）并未并行化，不过我们推测它可以像 [35] 或 [6] 那样并行化。我们发现，极小化并非算法的性能瓶颈，因此预计在单核上也能获得相近的性能。

数据集 我们通过采样 n维球面 S^n、 n维环面 $S^1 \times \cdots \times S^1$以及正交群 $O(n)$生成了点云 S。此外，我们还使用了 [36]中的一些点云。对于每个点 $p \in S$，我们关联一个值$\sum_{q \in S \setminus \{p\}} \exp\left(-\frac{d(p,q)^2}{2\sigma^2}\right)$，其中参数 σ由人工选定。这些值和一个距离矩阵被写入文件，程序据此生成与相应全函数-Rips 双过滤相关的上边界矩阵。

分块预处理 结合分块预处理 [21, 22]时，LW 算法的运行效率最高； `mpfree`采用的就是这种方法。分块预处理（算法 7）对表示链复形 $C_\bullet$的矩阵应用特定的列变换方案。作为替代方案，我们提出对 $C_\bullet(K_*)$进行行操作。等价地，也可以将此过程视为对表示上链复形 $\nu C^\bullet(K_*)$的矩阵进行列变换；因此，我们将此方法称为上链复形分块预处理；参见算法 8。

锥化 为确保 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*)) \cong H_d(K_*)^*$，推论 21 要求 $C_\bullet$ 具有有限总维数的同调。因此，我们的实现提供了如下对复形进行锥化的功能。设 $C_\bullet$ 是由自由 $\mathbf{Z}^2$-持久模构成的链复形。赋值 C'_d: $y \mapsto \operatorname{colim}_{x \in \mathbf{Z}} (C_d)_{xy}$ 定义了一个由自由 Z-持久模构成的链复形 $C'_\bullet$。我们使用带清除的上同调标准算法（算法 3）计算 $H_d(C'_\bullet)$ 的条形码。利用这一方法，可以在同调标准算法中实现清除机制；我们用它来计算 $H_d(C'_\bullet)$ 条形码中同调类的代表元。设 y_0 满足：对于所有 σ，均有 $y_0 \geq g_y(\sigma)$，其中 $g(\sigma) = (g_x(\sigma)\ g_y(\sigma))$。令 $\hat{} C_\bullet = C_\bullet$。对于 $H_d(C'_\bullet)$ 中每个非零长度的条形码区间 (b, d)，若它由分级为 $g(c) = b$ 的 q-循环 $c \in C'_q$ 表示，则我们向 $\hat{} C_{q+1}$ 添加一个分级为 $g(\hat{c}) = (b, y_0)$ 的基元素 $\hat{c}$，使得 $\partial_{q+1}(\hat{c}) = c$。若 $d < \infty$，则 c 是一个链 c' 的边界，且 $g(c') = d$；此时我们向 $\hat{} C_{q+2}$ 添加一个分级为 $g(\hat{c}') = (d, y_0)$ 的基元素 $\hat{c}'$，使得 $\partial_{q+2}(\hat{c}') = c' - \hat{c}$。所得链复形 $\hat{} C_\bullet$ 满足：对于 $y \geq y_0$，有 $H_\bullet(\hat{} C_\bullet)_{xy} = 0$。除非另有说明，上同调计算均采用针对密度参数进行此预处理后的结果。

稀疏化 我们观察到，算法 1 中第二个 for 循环的运行时间明显长于第一个循环。该循环还会增加矩阵密度，这可能导致算法 2 后续步骤的成本很高。相关解释见注 24。为解决这一问题，我们添加了一个步骤，通过与列稀疏矩阵实现兼容的行操作来降低矩阵的稀疏度。具体而言，如果某一行仅包含一个元素，那么将该行加到另一行只会影响一个元素。因此，如果分级为 g 的某一行中有一个元素，而同一列中存在一行且该行仅包含一个元素，则可以直接消去该元素；见算法 10。所有上同调计算的运行时间均是在应用此稀疏化方案后报告的。

4.2 结果

结果概览见表1。我们仅报告计算最小自由分解所需的时间，以及在适用情况下应用分块预处理所需的时间。我们不报告建立（余）边界矩阵所需的时间。对于所有满足 $d \geq 2$ 的情况，计算 $H^{d+2}(N^\bullet)$（不进行分块预处理）都比计算 H_d 并进行分块预处理更快。我们的上同调方法无法从分块预处理中获益。上同调方法的加速比随维数增加。对于两个实例，计算 $H_d(K_*)$ 在五分钟内未能完成，而计算 $H^{d+2}(N^\bullet(K_*))$ 则没有问题。我们还观察到，对于几乎所有满足 $d \geq 2$ 的实例，上同调算法使用的内存更少。

矩阵表示 LW 算法和分块预处理的效率并不会因矩阵实现方式不同而有太大变化；参见表1和表2。相比之下，我们的上同调算法在采用二叉堆的实现中运行速度更快。我们观察到，基于向量的实现通常比堆占用更少的内存

表1 运行时间（单位：毫秒）：比较我们对 [34, 22] 的实现（包括分块预处理）与我们的上同调算法在 300 个顶点（$d = 1$）、100 个顶点（$d = 2$）和 60 个顶点（$d = 3$）上应用密度-Rips过滤的表现。RSS 为 `time` 测得的峰值常驻内存。加速比为同调计算的运行时间（包括分块预处理）除以上同调算法的运行时间。程序运行超过五分钟后被终止。

d	样本	块	H_d	sum	RSS	H^{d+2}	RSS	加速比
1	秀丽隐杆线虫	5,457	40,841	46,298	6,423,600	119,444	6,526,976	0.39
	二维环面	11,480	19,875	31,355	6,620,404	5,032	2,827,912	6.23
	四维环面	6,342	28,627	34,969	5,916,816	50,607	3,384,472	0.69
	龙	9,721	18,489	28,210	5,774,492	5,064	2,829,620	5.57
	二维球面	8,657	29,180	37,837	6,421,312	25,021	4,098,268	1.51
	四维球面	7,699	33,619	41,318	6,642,260	47,355	7,154,632	0.87
	$O(3)$	7,023	33,874	40,897	6,315,708	42,702	3,816,124	0.96
2	秀丽隐杆线虫	28,583	7,484	36,067	4,428,440	5,655	2,371,324	6.38
	二维环面	39,630	2,191	41,821	3,216,372	5,054	2,334,712	8.27
	四维环面	33,788	19,875	53,663	5,538,232	5,969	2,425,136	8.99
	龙	19,023	2,379	21,402	2,557,124	5,188	2,367,488	4.13
	二维球面	32,611	12,416	45,027	5,099,604	6,417	2,426,924	7.02
	四维球面	29,272	25,357	54,629	6,039,576	8,637	2,505,664	6.32
	$O(3)$	31,780	29,123	60,903	6,654,692	6,796	2,445,996	8.96
3	秀丽隐杆线虫	38,349	2,393	40,742	3,515,708	8,984	4,227,820	4.53
	二维环面	>300,000	–	–	7,141,648	11,725	5,072,192	>25.59
	四维环面	>300,000	–	–	10,843,356	9,930	4,358,580	>30.21
	龙	67,463	2,334	69,797	6,666,732	9,782	4,900,800	7.14
	二维球面	59,385	3,110	62,495	4,280,112	9,051	4,185,036	6.90
	四维球面	92,365	8,577	100,942	5,526,344	8,818	4,197,636	11.45
	$O(3)$	204,263	25,284	229,547	7,966,600	10,851	4,365,864	21.15

基于向量的实现。这是因为，与向量不同，堆中同一行索引可能对应多个条目。

上链分块预处理 对于同调计算，将上述上链复形分块预处理与矩阵列的堆实现结合起来，通常比块预处理更高效，见表3。对于较高的同调维数，情况尤其如此。若与基于向量的矩阵结合，上链分块预处理在几乎所有情况下都不如传统的块预处理高效，而且在五分钟内根本无法完成。

参考文献

1 Manu Aggarwal 和 Vipul Periwal。Dory：克服持久同调计算的障碍，2021年3月。 arXiv:2103.05608。 2 Ángel Javier Alonso、Michael Kerber 和 Siddharth Pritam。双滤过图中的滤过支配。载于《2023年算法工程与实验研讨会论文集》（ALENEX），第27–38页，2023年。 doi:10.1137/1.9781611977561.ch3。 3 Ibrahim Assem、Daniel Simson 和 Andrzej Skowronski。《结合代数表示论要义》，伦敦数学学会学生文本丛书第1卷。剑桥大学出版社，剑桥，2006年。 4 Ulrich Bauer。Ripser：高效计算Vietoris–Rips持久条形码。《应用与计算拓扑学杂志》，5(3)：391–423，2021年。 doi:10.1007/s41468-021-00071-5。 5 Ulrich Bauer、Michael Kerber 和 Jan Reininghaus。清除与压缩：分块计算持久同调。载于 Peer-Timo Bremer、Ingrid Hotz、Valerio Pascucci 和 Ronald Peikert 编，《数据分析与可视化中的拓扑方法 III》，第103–117页。施普林格国际出版公司，查姆，2014年。 doi:10.1007/978-3-319-04099-8_7。 6 Ulrich Bauer、Michael Kerber 和 Jan Reininghaus。持久同调的分布式计算。载于 Catherine C. McGeoch 和 Ulrich Meyer 编，《2014年第十六届算法工程与实验研讨会论文集》（ALENEX），第31–38页。工业与应用数学学会，费城，宾夕法尼亚州，2014年5月。 doi:10.1137/1.9781611973198.4。 7 Ulrich Bauer、Michael Kerber、Jan Reininghaus 和 Hubert Wagner。Phat——持久同调算法工具箱。《符号计算杂志》，78：76–90，2017年。 doi:10.1016/j.jsc.2016.03.008。 8 Ulrich Bauer 和 Michael Lesnick。诱导匹配与持久条形码的代数稳定性。《计算几何学杂志》，6(2)：162–191，2015年3月。 doi:10.20382/jocg.v6i2a9。 9 Ulrich Bauer 和 Maximilian Schmahl。持久同调中的寿命函子与自然对偶，2021年10月。即将发表于《同调、同伦与应用》。《 arXiv:2012.12881》。 10 Katherine Benjamin、Aneesha Bhandari、Zhouchun Shang、Yanan Xing、Yanru An、Nannan Zhang、Yong Hou、Ulrike Tillmann、Katherine R Bull 和 Heather A Harrington。多尺度拓扑对亚细胞空间转录组学中的细胞类型进行分类和量化。arXiv预印本 arXiv:2212.06505，2022年。 11 Andrew J. Blumberg 和 Michael Lesnick。二参数持久同调的稳定性。《计算数学基础》，2022年10月。 doi:10.1007/s10208-022-09576-6。 12 Magnus Bakke Botnan 和 Michael Lesnick。《多参数持久性的导论》，2022年3月。 arXiv:2203.14289。 13 Gunnar Carlsson 和 Afra Zomorodian。《多维持久性理论》。《离散与计算几何》，42(1)：71–93，2009年7月。 doi:10.1007/s00454-009-9176-0。

14 Chao Chen 和 Michael Kerber。带扭转的持久同调计算。载于第27届欧洲计算几何研讨会，2011年。网址： https://eurocg11.inf.ethz.ch/abstracts/22.pdf。 15 David Cohen-Steiner、Herbert Edelsbrunner 和 John Harer。持久性图表的稳定性。《离散与计算几何》，37：103–120，2007年1月。 doi:10.1007/s00454-006-1276-5。 16 René Corbet、Michael Kerber、Michael Lesnick 和 Georg Osang。计算多重覆盖双过滤。载于 Kevin Buchin 和 Éric Colin de Verdière 编，第37届国际计算几何研讨会（SoCG 2021），莱布尼茨国际信息学会议录第189卷，第27:1–27:17页，德国达格施图尔，2021年。达格施图尔城堡—莱布尼茨信息学中心。 doi:10.4230/LIPIcs.SoCG.2021.27。 17 Vin de Silva、Dmitriy Morozov 和 Mikael Vejdemo-Johansson。持久（上）同调中的对偶性。《反问题》，27(12)：124003，2011年12月。 doi:10.1088/0266-5611/27/12/124003。 18 Edelsbrunner、Letscher 和 Zomorodian。拓扑持久性与简化。《离散与计算几何》，28(4)：511–533，2002年11月。doi:10.1007/s00454-002-2885-2。 19 Herbert Edelsbrunner 和 John Harer。持久同调综述。载于 Jacob E. Goodman、János Pach 和 Richard Pollack 编，《当代数学》第453卷，第257–282页。美国数学会，罗得岛州普罗维登斯，2008年。 doi:10.1090/conm/453/08802。 20 David Eisenbud。《交换代数》，《数学研究生教材》第150卷。施普林格纽约，纽约州纽约市，1995年。 doi:10.1007/978-1-4612-5350-1。 21 Ulderico Fugacci 和 Michael Kerber。多参数持久同调的分块约简。载于 Gill Barequet 和 Yusu Wang 编，第35届国际计算几何研讨会（SoCG 2019），莱布尼茨国际信息学会议录第129卷，第37:1–37:14页，德国达格施图尔，2019年。达格施图尔城堡—莱布尼茨信息学中心。 doi:10.4230/LIPIcs.SoCG.2019.37。 22 Ulderico Fugacci、Michael Kerber 和 Alexander Rolle。双参数持久同调的压缩。《计算几何》，109：101940，2023年2月。 doi:10.1016/j.comgeo.2022.101940。 23 Victor Ginzburg。卡拉比–丘代数，2007年。 arXiv:math/0612139。 24 Barbara Giunti 和 J¯anis Lazovskis。TDA-Applications（一个收录数学领域之外TDA应用论文的在线数据库），2021年。网址： https://www.zotero.org/groups/2425412/tda-applications。 25 Gregory Henselman 和 Robert Ghrist。拟阵过滤与计算持久同调，2017年10月。 arXiv:1606.00199。 26 Gregory Henselman-Petrusek。Eirene，2021年。网址： https://github.com/Eetion/Eirene.jl。 27 Michael Höppner 和 Helmut Lenzing。偏序集上的射影图是自由的。《纯粹与应用代数杂志》，20(1)：7–12，1981年1月。 doi:10.1016/0022-4049(81)90045-1。 28 Bernhard Keller。卡拉比–丘三角范畴。载于 Andrzej Skowroński 编，《代数表示论及相关主题的发展趋势》，《欧洲数学学会会议报告系列》，第467–489页。欧洲数学学会出版社，第一版，2008年9月。 doi:10.4171/062-1/11。 29 Michael Kerber。多参数持久同调具有实用性。载于NeurIPS 2020拓扑数据分析及其拓展研讨会，2020年。网址： https://openreview.net/pdf?id=TDU6UycGYxR。 30 Michael Kerber。mpfree，2021年。网址： https://bitbucket.org/mkerber/mpfree。 31 Michael Kerber 和 Alexander Rolle。双分级持久模的快速极小表示。载于 Martin Farach-Colton 和 Sabine Storandt 编，《2021年算法工程与实验研讨会论文集》（ALENEX），论文集，第207–220页。工业与应用数学学会，2021年1月。 doi:10.1137/1.9781611976472.16。

32 Fabian Lenzen. 2pac（二参数持久上同调）。一个用于二参数持久上同调的 C++ 软件包，2023年。网址： https://gitlab.com/flenzen/2-parameter-persistent-cohomology。33 Michael Lesnick 和 Matthew Wright。《二维持久模的交互式可视化》，2015年12月。arXiv:1512.00180。34 Michael Lesnick 和 Matthew Wright。《计算二参数持久同调的极小表示与双分次贝蒂数》。《应用代数与几何的 SIAM 杂志》，6(2):267–298，2022年6月。doi:10.1137/20M1388425。35 Dmitriy Morozov 和 Arnur Nigmetov。《迈向无锁持久同调》。载于第32届 ACM算法与架构并行性研讨会论文集，第555–557页，美国线上活动，2020年7月。ACM。 doi:10.1145/3350755.3400244。36 Nina Otter、Mason A Porter、Ulrike Tillmann、Peter Grindrod 和 Heather A Harrington。《持久同调计算路线图》。《EPJ数据科学》，6(1):17，2017年12月。 doi:10.1140/epjds/s13688-017-0109-5。37 Irena Peeva。《分次合冲》。Springer London，伦敦，2011年。doi:10.1007/978-0-85729-177-6。38 Julián Burella Pérez、Sydney Hauke、Umberto Lupo、Matteo Caorsi 和 Alberto Dassatti。giotto-ph：一个用于高性能计算 Vietoris–Rips过滤持久同调的 Python 库，2021年8月。 arXiv:2107.05412。39 Daniel Quillen。《多项式环上的投射模》。《数学发明》，36(1):167–171，1976年12月。doi:10.1007/BF01390008。40 Alexander Rolle。《多参数层次聚类及其拓展》。载于 NeurIPS 2020拓扑数据分析及其拓展研讨会，2020年。网址： https://openreview.net/pdf?id=g0-tBxQTPRy。41 Sara Scaramuccia、Federico Iuricich、Leila De Floriani 和 Claudia Landi。《通过基于离散莫尔斯理论的方法计算多参数持久同调》。《计算几何》，89:101623，2020年8月。 doi:10.1016/j.comgeo.2020.101623。42 Donald R. Sheehy。《用于几何推断的多重覆盖神经》。载于第24届加拿大计算几何会议论文集，CCCG 2012，夏洛特敦，爱德华王子岛，加拿大，2012年8月8日至10日，第309–314页，2012年。网址： http://2012.cccg.ca/papers/paper52.pdf。43 Andrei Suslin。《多项式环上的投射模是自由模》。《苏联数学》，17(4):1160–1164，1976年。44 GUDHI项目。《GUDHI用户与参考手册》。GUDHI编辑委员会，3.6.0版，2022年。网址： https://gudhi.inria.fr/doc/3.6.0/。45 Oliver Vipond、Joshua A Bull、Philip S Macklin、Ulrike Tillmann、Christopher W Pugh、Helen M Byrne 和 Heather A Harrington。《多参数持久同调景观揭示肿瘤中的免疫细胞空间模式》。《美国国家科学院院刊》，118(41):e2102166118，2021年。46 Cary Webb。《分次模的分解》。《美国数学会会刊》，94(4):565–571，1985年。 doi:10.2307/2044864。47 Charles A. Weibel。《同调代数导论》。剑桥高等数学研究丛书第38卷。剑桥大学出版社，剑桥，1997年重印版，2003年转为数字印刷版。48 Simon Zhang、Mengbai Xiao 和 Hao Wang。《Vietoris–Rips持久条形码的 GPU 加速计算》。载于 Sergio Cabello 和 Danny Z. Chen 编，第36届国际计算几何研讨会（SoCG 2020），第164卷《莱布尼茨国际信息学会议录》（LIPIcs），第70:1–70:17页，德国达格施图尔，2020年。达格施图尔城堡—莱布尼茨信息学中心。 doi:10.4230/LIPIcs.SoCG.2020.70。49 Afra Zomorodian 和 Gunnar Carlsson。《持久同调计算》。《离散与计算几何》，33:249–274，2005年2月。doi:10.1007/s00454-004-1146-y。

表2 与表1相同，但矩阵采用向量格式。

d	样本	块	H_d	sum	RSS	H^{d+2}	RSS	加速比
1	秀丽隐杆线虫	7,148	78,592	85,740	4,576,160	207,787	4,795,428	0.41
	二维环面	14,381	25,010	39,391	5,318,176	5,797	2,997,160	6.80
	四维环面	7,028	39,563	46,591	4,538,204	17,483	3,149,484	2.66
	龙	11,493	23,769	35,262	4,791,380	6,185	3,006,328	5.70
	二维球面	10,420	47,390	57,810	5,001,668	157,839	3,724,396	0.37
	四维球面	8,677	42,742	51,419	4,989,432	>300.000	–	<0.17
	$O(3)$	8,397	53,641	62,038	4,874,744	85,476	3,548,940	0.73
2	秀丽隐杆线虫	34,822	5,896	40,718	3,263,528	4,968	2,545,052	8.20
	二维环面	22,772	1,830	24,602	2,026,840	5,679	2,527,568	4.33
	四维环面	35,221	20,224	55,445	4,387,188	7,937	2,505,016	6.99
	龙	24,914	2,338	27,252	2,057,320	4,979	2,511,392	5.47
	二维球面	35,732	8,952	44,684	4,122,656	14,455	2,546,872	3.09
	四维球面	36,476	24,779	61,255	4,792,056	22,485	2,566,200	2.72
	$O(3)$	35,287	21,767	57,054	4,482,248	9,477	2,525,464	6.02
3	秀丽隐杆线虫	31,102	2,023	33,125	2,949,772	14,885	3,715,832	2.23
	二维环面	35,045	2,460	37,505	3,021,448	10,924	4,623,784	3.43
	四维环面	190,647	5,444	196,091	4,083,284	14,579	4,667,328	13.45
	龙	33,626	2,029	35,655	2,997,148	10,564	4,602,516	3.38
	二维球面	127,959	3,040	130,999	3,328,716	10,436	4,610,180	12.55
	四维球面	172,314	7,343	179,657	4,506,468	12,118	4,665,124	14.83
	$O(3)$	222,455	9,461	231,916	4,795,464	13,840	4,683,228	16.76

进一步的备注

▶ 注 23（极小化）。回顾一下，若一个自由分解（或更一般地，自由模复形） $F_\bullet$ 不含任何同调球，则称其为极小 的；等价地，表示它的所有矩阵 $[\partial_\bullet^F]$ 均满足 $[\partial_\bullet^F]_{ij} = 0$ ，除非 $\mathrm{rg}_i^{[\partial_\bullet^F]} < \mathrm{cg}_j^{[\partial_\bullet^F]}$ ；参见引理 1。假设

$$\begin{array}{ccccccccccc}
\cdots & \longrightarrow & F_{d+1} & \xrightarrow{\partial^F_{d+1}} & F_d & \xrightarrow{\partial^F_d} & F_{d-1} & \xrightarrow{\partial^F_{d-1}} & F_{d-2} & \longrightarrow & \cdots \\
 & & \| & & \| & & \| & & \| & & \\
\cdots & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\binom{a}{b}} & B\oplus C & \xrightarrow{\left(\begin{smallmatrix} c & d \\ e & f \end{smallmatrix}\right)} & D\oplus E & \xrightarrow{(g,h)} & G & \longrightarrow & \cdots
\end{array}$$

对于自由模 $A, \ldots, G$。若 c 可逆，则 $F_\bullet$ 的直和项 $\cdots \to 0 \to C \to D \to 0 \to \cdots$同构于一个球。在这种情况下，交换图中的第一个垂直映射

$$\begin{array}{ccccccccccc}
\cdots & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\binom{a}{b}} & B\oplus C & \xrightarrow{\left(\begin{smallmatrix} c & d \\ e & f \end{smallmatrix}\right)} & D\oplus E & \xrightarrow{(g,h)} & G & \xrightarrow{(g\ h)} & \cdots \\
 & & \| & & \downarrow{\scriptstyle \left(\begin{smallmatrix} c & 0 \\ e & f-ec^{-1}d \end{smallmatrix}\right)} & & \| & & \| & & \\
\cdots & \longrightarrow & A & \xrightarrow{\binom{a+dc^{-1}b}{b}} & B\oplus C' & \xrightarrow{\left(\begin{smallmatrix} c & 0 \\ e & f-ec^{-1}d \end{smallmatrix}\right)} & D\oplus E & \xrightarrow{(g,h)} & G & \longrightarrow & \cdots \\
 & & \| & & \downarrow{\scriptstyle (0,1)} & & \downarrow{\scriptstyle (1,-ec^{-1})} & & \| & & \\
\cdots & \longrightarrow & A & \xrightarrow[b]{} & C' & \xrightarrow[f-ec^{-1}d]{} & E & \xrightarrow[h]{} & G & \longrightarrow & \cdots .
\end{array} \tag{7}$$

表3 使用基于堆的矩阵实现时，余链复形分块预处理比块预处理更快。加速比为采用块预处理的同调运行时间（见表1和表2）除以采用余链复形分块预处理的同调运行时间。

d	样本	堆 余链块	堆 H_d	堆 sum	堆 加速比	向量 余链块	向量 H_d	向量 sum	向量 加速比
1	秀丽隐杆线虫	2,994	41,158	44,152	1.05	6,771	82,732	89,503	0.96
	二维环面	7,646	19,766	27,412	1.14	49,376	23,064	72,440	0.54
	四维环面	3,662	28,792	32,454	1.08	7,770	41,340	49,110	0.95
	龙	6,793	18,512	25,305	1.11	52,949	23,664	76,613	0.46
	二维球面	4,868	28,967	33,835	1.12	14,583	45,654	60,237	0.96
	四维球面	4,153	33,685	37,838	1.09	11,393	44,709	56,102	0.92
	$O(3)$	3,902	34,299	38,201	1.07	8,798	48,319	57,117	1.09
2	秀丽隐杆线虫	13,749	7,431	21,180	1.70	>300,000	–	–	<0.14
	二维环面	4,937	2,218	7,155	5.85	100,607	2,009	102,616	0.24
	四维环面	12,265	19,583	31,848	1.68	154,250	21,376	175,626	0.32
	龙	4,202	2,259	6,461	3.31	160,389	4,481	164,870	0.17
	二维球面	13,006	11,297	24,303	1.85	203,685	10,390	214,075	0.21
	四维球面	14,520	25,726	40,246	1.36	177,485	23,683	201,168	0.30
	$O(3)$	12,800	27,704	40,504	1.50	180,528	29,686	210,214	0.27
3	秀丽隐杆线虫	2,078	2,033	4,111	9.91	38,301	1,981	40,282	0.82
	二维环面	9,564	1,793	11,357	26.42	5,053	1,899	6,952	5.39
	四维环面	33,826	9,901	43,727	6.86	>300,000	–	–	<0.65
	龙	1,229	2,172	3,401	20.52	3,212	2,255	5,467	6.52
	二维球面	7,351	3,757	11,108	5.63	171,650	3,211	174,861	0.75
	四维球面	25,289	13,386	38,675	2.61	>300,000	–	–	<0.60
	$O(3)$	38,122	17,841	55,963	4.10	>300,000	–	–	<0.77

是复形同构，而第二个是拟同构。条目 $f - ec^{-1}d$ 可通过对 $\left(\begin{smallmatrix} c & d \\ e & f \end{smallmatrix}\right)$ 执行列变换来计算。因此，从 $F_\bullet$ 中分离出 d-球可通过以下步骤实现：

1. 执行可逆列变换，将 $[\partial_d^F]$ 化为形式 $\left(\begin{smallmatrix} c & 0 \\ e & f-ec^{-1}d \end{smallmatrix}\right)$，其中 c是一个极大可逆矩阵。删除 $\left(\begin{smallmatrix} c & 0 \\ e & f-ec^{-1}d \end{smallmatrix}\right)$ 中对应于 B和 D的行；此步骤由算法 6 完成。

2. 分别删除 $[\partial_{d+1}^F]$ 中对应于 B 和 D的行，以及 $[\partial_{d-1}^F]$ 中对应于它们的列。特别地，无需对 $[\partial_{d+1}^F]$执行任何行操作。算法 6 返回矩阵 $f - ec^{-1}d$，以及 $[\partial_{d+1}^F]$ 中对应于 C 和 E的行和列的行指标 r 和 c。要在所有维数上从 $F_\bullet$ 中分离出球，必须依次对所有矩阵 $[\partial_1^F]$、$[\partial_2^F]$、.....应用步骤 1 和 2。链复形的这一过程由算法 7 完成，上链复形的这一过程由算法 8 完成。

▶ 注 24（算法 1 中循环的运行时间）。算法 1 中的第二个 for 循环比第一个耗时得多，即使交换二者也是如此。为了解释这一点，考虑传入算法 1 的分次矩阵 D。最初，D 的行和列按照其分级逆字典序排列。这种顺序使 D 表示一个**Z**-滤过的余边界态射，而我们知道，标准算法（即第一个 for 循环）在滤过复形上效率很高。这主要是因为由滤过复形产生的（余）边界矩阵几乎已经是阶梯形。假设 D' 是第一个 for 循环的结果。令 ρ, τ 为置换，使得 $\rho D'\sigma$ 的行按字典序排列，列则按 c-主元排列。于是，第二个 for 循环不过是将标准算法应用于 $\rho D'\sigma$。可以验证，$\rho D'\sigma$ 不可能来自非平凡滤过，这解释了其运行时间为何如此之长。

B 其他算法

算法 3 使用清除法计算单参数持久相对上同调的标准算法。如果 colim $H^\bullet(K, K_*) = 0$，则条形码中没有无限条形。

输入：分次矩阵 $[\delta^1], [\delta^2], \ldots$，其行和列按分级升序排列，表示一个链复形 $C^\bullet(K, K_*)$，其 Colim $H^\bullet(K, K_*) = 0$。输出：$H^\bullet(K_*)$ 的条形码。$p' \leftarrow \emptyset n \leftarrow$ #columns($[\delta^{d+1}]$) 对于 $d = 0$, 1, $\ldots$, 执行$p \leftarrow 0 \in$自然数集^{n}对于 $j = 1, \ldots, n$，若 $p'_j \neq 0$，则 $[\delta^{d+1}]_j \leftarrow 0$；继续 ▷ 清除，当 $p_i \neq 0$ 对于 $i =$ piv$[\delta^{d+1}]_j$ 执行 $[\delta^{d+1}]_j \leftarrow [\delta^{d+1}]_j + [\delta^{d+1}]_{p_i} p_i \leftarrow j$返回 (rg$_i^{[\delta^{d+1}]}$, cg$_j^{[\delta^{d+1}]}$)$p' \leftarrow p$

算法 4 LW 算法 [31, 34]计算 fre 态射的核的一组基 e
Z²-持久模。输入：一个分次 $m \times n$-矩阵 M，表示自由 Z²-持久模之间的态射。结果：一个分次矩阵 K，表示 ker M函数 `Ker(M):`$p \leftarrow 0 \in$自然数集
^{m} ▷ 主元行到列的赋值$Q \leftarrow \{(\mathrm{cg}_j^M, j)\}$，作为优先队列，且 $(z, j) \leq (z', j')$，若 $z \preceq_{\text{lex}} z'$ 或 $z = z'$，并且 $j \leq j'V \leftarrow n \times n$-单位矩阵 ▷ 约化矩阵$K \leftarrow$ 空的分次 $n \times 0$-矩阵，含 $\mathrm{rg}^K = \mathrm{cg}^M$当 $Q \neq \emptyset$ 时执行 $(z, j) \leftarrow$ `PopMin`(Q) 永久循环$i \leftarrow \mathrm{piv}\, M_j$若 $i = 0$，则将 V_j 追加到 K，并将 z 追加到 cg^K；跳出。否则，若 $p_i = 0$，则 $p_i \leftarrow j$；跳出。否则，若 $\mathrm{cg}_{p_i}^M \not\preceq z$，则 `Push`$(Q, (\mathrm{cg}_{p_i}^M \vee z))$；$p_i \leftarrow j$；跳出。否则$M_j \leftarrow M_j + M_{p_i}$
$V_j \leftarrow V_j + V_{p_i}$返回 K

算法 5 算法 4 的一种变体，用于计算 imag 的极小生成系 e
一个自由 Z²-持久模态射及其核。输入：表示自由 Z²-持久模态射的分次 $m \times n$-矩阵 M。结果：分次矩阵 M' 表示 im M 的极小生成系，K'表示 ker M' 的一组基。函数 `MGSWithKer(M):`
$p \leftarrow 0 \in$自然数集^m ▷ 将主元行到列的指派$Q \leftarrow \{(\mathrm{cg}_j^M, j)\}$作为优先队列，并以 $(z, j) \leq (z', j')$ 为序；如果 $z \preceq_{\text{lex}} z'$ 或 $z = z'$ 且 $j \leq j'M' \leftarrow$是分级 $m \times 0$-矩阵，满足 $\mathrm{rg}^{M'} = \mathrm{rg}^M V' \leftarrow$空矩阵$K' \leftarrow$分级 0×0-矩阵，满足 $\mathrm{rg}^{K'} = \mathrm{cg}^{M'} m \leftarrow 0 \in$自然数集^n ▷ 索引 M_j 在 M'时，当 $Q \neq \emptyset$ 时执行 $(z, j) \leftarrow$ `PopMin`(Q)，循环执行$i \leftarrow \mathrm{piv}\, M_j$如果 $i = 0$，则将 V'_{m_j} 追加到 K'，并将 z 追加到 $\mathrm{cg}^{K'}$；退出循环；否则，如果 $p_i = 0$，则 $p_i \leftarrow j$；退出循环；否则，如果 $\mathrm{cg}_{p_i}^M \not\preceq z$，则 `Push` $(Q, (\mathrm{cg}_{p_i}^M \vee z))$；$p_i \leftarrow j$；退出循环；否则$M_j \leftarrow M_j + M_{p_i}$如果 $z \neq \mathrm{cg}_j^M$，则 $V'_{m_j} \leftarrow V'^{m_j} + V'_{m_{p_i}}$如果 $M_j \neq 0$ 且 $z = \mathrm{cg}_j^M$，则 ▷ M_j 无法在 cg_j^M 处化为零，因此是极小生成系中的一个元素。
$M'_{m_j} \leftarrow M_j$ $^{M'}_{m_j} \leftarrow z$ # 中的列数和 cg$V' \leftarrow \begin{pmatrix} V' & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} K' \leftarrow \begin{pmatrix} K' \\ 0 \end{pmatrix}$以及 $\mathrm{rg}_{m_j}^{K'} \leftarrow z$返回 M'，
K'

算法 6 从 D 中拆分出与一个球同构的直和项。列表 r 和 c分别是 D 的行指标和列指标，它们表示式 (7) 中的直和项 C' 和 F。**输入：** 表示自由模映射 [21]的分次 $m \times n$-矩阵 D。

输出： 三元组 $(D',\ r,\ c)$。**函数** `Minimize`(D')**：**
$p \leftarrow 0 \in \mathbf{Z}^m$**对于** $j = 1,\ \ldots\ldots,\ n$ **执行**$i \leftarrow \mathrm{piv}($
$D_j)$**如果** $\mathrm{rg}_i^D \neq \mathrm{cg}_j^D$ **那么** $c \leftarrow c \cup \{j\}$；**跳出否**
则如果 $p_i = 0$ **那么** $p_i \leftarrow j$；跳出**否则**
$D_j \leftarrow D_j + D_{p_i}$**对于** $j \in c$ **执行**

▷ 易并行

当 $S := \{i \mid D_{ij} \neq 0 \wedge p_i \neq 0\}$ **非空时执行**
$D_j \nleftarrow D_j + D_{p_{\max S}} r \leftarrow \{i \leq m \mid p_i = 0\} D' \leftarrow (D_{ij})_{i \in r,}$
$_{j \in c}$**返回** $(D',\ r,\ c)$

算法 7 链复形的分块算法；参见注 23。
输入：输出： 分次矩阵 $[\partial_1]$，$[\partial_2]$，$\ldots\ldots$ **构成一个极小上链复形** $C_\bullet$。
`MinimizeChainComplex`$(D_\bullet)$**：**

$[\partial'_1],\ r,\ c \leftarrow$ `Minimize`$([\partial_1])$
对于 $d = 2,\ \ldots\ldots$ **执行**
$[\partial'_d] \leftarrow ([\partial_d]_{ij})_{i \in r} [\partial'_d],\ r,$
$c \leftarrow$ `Minimize`$([\partial'_d])[\partial'_{d-1}] \leftarrow$
$([[\partial'_{d-1}])_{ij})_{j \in r}$**返回** $[\partial'_\bullet]$

算法 8 上链复形的分块算法；参见注 23
输入： 分次矩阵 $[\delta^1],\ [\delta^2],\ \ldots$ 构成一个由自由 $\mathbf{Z}^2$-模组成的上链复形 $C^\bullet$。
输出： 分次矩阵 $[\delta'^1],\ [\delta'^2],\ \ldots\ldots$构成一个极小上链复形 $C'^\bullet \simeq C^\bullet$。
函数 `MinimizeCohainComplex`$([\delta^\bullet])$**：**
$[\delta'^1],\ r,\ c \leftarrow$ `Minimize`$([\delta^1])$
对于 $d = 2,\ \ldots\ldots$**执行**
$[\delta'^d] \leftarrow ([\delta^d]_{ij})_{j \in c} [\delta'^d],\ r,$
$c \leftarrow$ `Minimize`$([\delta'^d])[\delta'^{d-1}] \leftarrow$
$([\delta'^{d-1}])_{ij})_{i \in c}$**返回** $[\delta'^\bullet]$

算法 9 将分次矩阵因式分解为经过另一个矩阵的分解。
输入：</style}一个 $l \times m$-矩阵 L，其为阶梯形；以及一个 $l \times n$-矩阵 M，满足 $L = MN$，其中 N。
输出： 矩阵 N。
函数 `Factorize`$(L,\ M)$**：**
$p \leftarrow 0 \in$ **自然数集**^{l}
$N \leftarrow 0 \in k^{m \times n}$
对于 $j = 1$、$\ldots\ldots$、m，**执行** $p_{\mathrm{piv}\,M_j} \leftarrow j$
对于 $j = 1$、$\ldots\ldots$、n **执行**

▷ 易并行

当 $L_j \neq 0$ **时**
$i \leftarrow$ 主元 L_j

▷ 如果 N 存在，那么 $p_i \neq 0$

$L_j \leftarrow L_j + M_{p_i}$
$N_j \leftarrow N_j + e_{p_i}$
返回 N

算法 10 稀疏化。

输入： 一个分次 $m \times n$-矩阵 M，满足 $\mathrm{rg}_i^M \not\geq \mathrm{rg}_j^M$，若 $i \leq j$。

输出： 对于某个有效的可逆上三角矩阵 V，得到一个分次矩阵 $M' = VM$.

$d_j \leftarrow \emptyset$ 对所有 j

对于 $i = m, m-1, \ldots, 1$ **对** $u \leftarrow \emptyset$ **执行** $j = 1, \ldots, n$ 其中

  $M_{ij} \neq 0$ **若** $\exists h \in d_j$: $\mathrm{rg}_i^M \leq \mathrm{rg}_h^M$ **则**

    $M_{ij} \leftarrow 0$ **否则** $M'_{ij} \leftarrow M_{ij}$ $u \leftarrow u \cup \{j\}$ **若**

    $u = \{j\}$ 存在某个 j **则** $d_j \leftarrow d_j \cup \{i\}$