arXiv:2304.00345v2 [math.AT] 6 Apr 2023

持久超有向图同调与持久超有向图拉普拉斯算子

Dong Chen [1]、Jian Liu [†2,3]、Jie Wu [*3]和 Guo-Wei Wei [*1,4,5]

[1]数学系，密歇根州立大学，美国密歇根州*48824*[2]数学科学研究中心，重庆理工大学，中国重庆*400054*[3]雁栖湖北京数学与应用数学研究院，中国北京*101408*[4]电气与计算机工程系，密歇根州立大学，美国密歇根州*48824*[5]生物化学与分子生物学系，密歇根州立大学，美国密歇根州*48824*

摘要 超图是描述结构化图中成员之间复杂关系的有用数学模型，而超有向图则是其一种推广，可用于编码数据中的非对称关系。然而，直接从超有向图中获取拓扑信息仍然是一项挑战。为解决这一问题，本文引入了超有向图同调。我们还提出了拓扑超有向图拉普拉斯算子，该算子能够从有向且内部具有组织结构的数据中提取调和谱和非调和谱。此外，我们通过滤子引入持久超有向图同调和持久超有向图拉普拉斯算子，从而能够捕捉有向结构化数据在多个尺度上的拓扑持久性和同伦形状演化。所提出的方法为拓扑数据分析提供了新的多尺度代数拓扑工具。

关键词 拓扑超有向图、拓扑超有向图拉普拉斯算子、同调、滤子、持久性。

[†]前两位作者贡献相同。
[*]通讯作者：wujie@bimsa.cn
[*]通讯作者：weig@msu.edu

目录

1 引言

3 2 拓扑超图简述 5 3 超有向图同调与拓扑超有向图拉普拉斯算子 103.1 超有向图同调.11 3.2 从超有向图同调到超图同调.13 3.3 拓扑超有向图拉普拉斯算子.15 3.4 拓扑超有向图拉普拉斯算子的计算.19**4 持久超有向图同调与持久超有向图拉普拉斯算子 22**4.1 超有向图上的拓扑持久性与超有向图拉普拉斯算子 . . . 23 4.2 基于体积的滤过.25 4.3 基于距离的过滤.27**5 应用 30 6 结论 32 7 致谢 33**

1 引言

拓扑学和同调研究几何对象在连续变形下的不变性质，为这些对象提供了高度抽象的描述 [1]。那个著名的笑话说，拓扑学家无法区分咖啡杯和甜甜圈，这凸显了拓扑学描述现实世界对象时面临的困难。然而，近年来，拓扑数据分析（TDA）已成为克服这一困难的一种方法。TDA促进了拓扑深度学习的发展；这是一种新兴的数据科学范式，已在各种应用中取得成功 [2, 3]。TDA的主要工具是持久同调，它通过滤子从给定数据集中构造一族多尺度拓扑空间，从而能够提取并分析数据在不同尺度下的拓扑不变量 [4, 5, 6]。通过比较分析，持久同调可用于推断数据的形状 [7]。然而，持久同调的一个局限在于，在每个维度上，贝蒂数仅统计独立连通分支的数量，并不描述各个分支的性质。例如，在维度1上，异质环与同质环会被计为相同。为解决这一局限，人们引入了持久上同调，将数据的几何和非几何性质都嵌入拓扑不变量中 [8]。此外，拓扑不变量是定性的，而非定量的。例如，在维度1上，由五个成员组成的环与由六个成员组成的环会被计为相同。这些问题可能会限制持久同调在网络分析及其他应用中的效用。

图拉普拉斯算子最初由基尔霍夫于1847年提出，用于分析电网络 [9]。例如，第二小特征值，也称为费德勒特征值 [10], ，描述图的代数连通度。1944年，埃克曼将图拉普拉斯算子推广到单纯复形，从而得到如今所称的组合拉普拉斯算子。组合拉普拉斯算子是霍奇拉普拉斯算子的离散对应物；后者在微分几何中也称为拉普拉斯－德拉姆算子。相关的德拉姆上同调常用于研究流形的拓扑学及其上向量场的行为。可微流形上的霍奇拉普拉斯算子与点云上的组合拉普拉斯算子之间的联系并不简单；人们曾在离散外微积分的背景下研究这一联系，以理解微分形式的离散对应物 [11, 12, 13]。霍奇拉普拉斯算子和组合拉普拉斯算子都有一项显著性质：它们的调和谱会产生相应的拓扑不变量或贝蒂数，因此我们称它们为拓扑拉普拉斯算子 [14]。此外，还有其他拓扑拉普拉斯算子，例如定义在胞腔层上的层拉普拉斯算子 [15] ，以及由丘成桐及其合作者提出、源自路径复形和路径同调的路径拉普拉斯算子 [16] [17, 18]。路径同调和持久路径同调能够对有向图进行拓扑分析，并在分子科学和材料科学中展现出有前景的应用 [19]。与相应的同调理论相比，拓扑拉普拉斯算子能够通过其非调和谱描述底层系统的定量性质[20]。

在 201 9，Wei 及其合作者通过引入 ng

持久拓扑拉普拉斯算子，扩展了拓扑拉普拉斯算子的能力，其性能优于持久同调[21, 22]。持久拉普拉斯算子也称为持久谱图或持久组合拉普拉斯算子，由 Wang 等人利用滤子引入 [22]。Memoli 等人 [23]和 Liu 等人 [24] 对其进行了数学研究，Meng 等人 [25], 、Chen 等人 [26], 、Wee 等人 [27], 以及 Qiu 和 Wei [28]则探索了其在生物学领域中的应用。研究人员还开发了一个开源在线软件包 [29]。演化 de Rham-Hodge 拉普拉斯算子，即持久 Hodge 拉普拉斯算子，被定义在一族演化流形上 [30]。离散外微积分被用于在带边界的流形上实现各种边界条件，从而帮助根据持久 Hodge 拉普拉斯算子调和谱中的信息准确计算拓扑不变量。持久 Hodge 拉普拉斯算子为无法通过持久同调描述的乐器建立了数学模型 [14]。此外，Wei 及其合作者在胞腔层上引入了持久层拉普拉斯算子 [31] ，并在路径复形上引入了持久路径拉普拉斯算子 [32]。前者允许将原子部分电荷等异质信息嵌入拓扑变体中，而后者则有助于对有向图和有向网络进行拓扑分析。Ameneyro 等人提出了持久狄拉克算子，以高效计算持久贝蒂数 [33]。该方法利用了狄拉克算子与拉普拉斯算子之间的关系。研究已证明，持久（拓扑）拉普拉斯算子能够捕捉数据的同伦形状演化，而这种信息在相应的持久同调分析中并不存在 [14]。非调和特征值的一个有趣性质是，当发生拓扑变化时，它们会出现不连续性。这些新的持久拓扑拉普拉斯算子显著拓展了 TDA 的应用领域和能力。

前面提到的方法都没有描述网络的内部组织结构。超图是一种用于表示具有复杂关系的数据的常用数学模型，已广泛应用于物理学 [34], 计算机科学 [35], 和工程学 [36]。然而，传统超图无法捕捉数据中的拓扑信息。为解决这一问题，Wu 及其合作者利用单纯复形将传统超图推广为拓扑超图 [37, 38]。人们引入了超图的嵌入同调，以研究超图的拓扑不变量 [38]。加权超图的 Hodge 分解类型也得到了研究 [37], ，并且有人探讨了超图的离散 Morse 函数 [39]。此外，Grbic 等人提出了超超图的概念，并研究了超超图的嵌入同调 [40]。最近，Liu 等人将滤子引入拓扑超图拉普拉斯算子 [41]。

超图不适用于有向图（digraphs）和有向网络。为解决这一局限性，超有向图被引入作为有向图的推广[42, 43, 44]。本质上，超有向图是在每条超边上额外赋予方向的超图。如 [45], 所述：“超有向图已应用于若干领域，在这些领域中，我们关注于表示蕴含系统（数据库理论、逻辑、人工智能等）”。作为数据分析的强大数学模型，超有向图已广泛应用于计算机科学的多个领域 [46, 47]。由于超有向图

能够编码不同对象之间的方向信息，因此在材料结构建模、分子群相互作用分析、生物系统分析等方面具有天然优-势。然而，由于超有向图的复杂性，目前尚未建立拓扑超有向图或超有向图同调的框架。借助路径同调理论 [48]，人们已尝试通过识别其上的路径复形来分析超有向图。尽管如此，构建拓扑超有向图仍需采用嵌入同调技术 [37, 38] 或专门针对超有向图同调的等价方法。

本文提出了几种新的拓扑数据分析模型：超有向图同调（HDGH）、拓扑超有向图拉普拉斯算子（THDGLs）、持久超有向图同调（PHDGH）和持久超有向图拉普拉斯算子（PHDGLs）。为引入拓扑结构，我们使用序列作为超有向图同调的构建单元。超有向图同调的链复形是嵌入由这些序列生成的空间中的极大链复形。我们开发了一种嵌入同调技术来构造 HDGH。为构造拓扑超有向图拉普拉斯算子，我们使用边界算子及其伴随算子。此外，我们通过引入过滤过程，定义了 PHDGH 和 PHDGLs，以分析不同过滤尺度下的几何对象。我们为 PHDGH 和 PHDGLs 提出了基于体积的过滤和基于距离的过滤。

本文其余部分安排如下。下一节回顾超图同调和拓扑超图拉普拉斯算子，并建立相关记号。第3节提出超有向图同调和拓扑超有向图拉普拉斯算子。第4节定义超有向图同调和拓扑超有向图拉普拉斯算子上的持久性。最后，第5节展示将本文提出的持久超有向图拉普拉斯算子应用于一个蛋白质-配体复合物的例子。

2 拓扑超图简要回顾

超图是单纯复形的一种推广，在理论和应用中受到了广泛关注。嵌入同调为拓扑超图提供了一种实现 [38]。本节回顾超图同调和拓扑超图拉普拉斯算子。从现在起， $\mathbb{K}$始终假设为一个基域，$|X|$ 表示有限集 X 中元素的个数。

设 V 是一个非空有限有序集。令 $\mathrm{P}(V)$ 表示 V 的幂集，但不包括$|V|$空集，也就是 V 的非空子集集。因此，我们有 $\mathrm{P}(V) = \coprod \mathrm{P}_n(V),_{n=1}$ 其中 $\mathrm{P}_n(V)$ 是 V 中含有 n 个元素的子集集。超图是一个有序对 $\mathcal{H} = (V, E)$，其中 E 是 $\mathrm{P}(V)$ 的子集。集合 E 称为超边集，其中的元素 $e \in E \cap \mathrm{P}_{n+1}(V)$ 称为 n-超边。特别地，超图 $\mathcal{H}(V) = (V, \mathrm{P}(V))$ 称为完全超图。超图 $\mathcal{H} = (V, E)$ 可以视为其关联的完全超图 $\mathcal{H}(V)$ 的子超图。值得注意的是，完全超图

恰好是一个抽象单纯复形。

现在，令 $\mathcal{H}=(V,E)$ 为一个超图。令 $C_p(\mathcal{H};\mathbb{K})$ 为由 $\mathcal{H}$ 的 p-超边生成的 $\mathbb{K}$-线性空间。于是， $C_*(\mathcal{H};\mathbb{K})=(C_p(\mathcal{H};\mathbb{K}))_{p\geq 0}$ 是一个分次 $\mathbb{K}$-线性空间。特别地，令 $C_p(V;\mathbb{K})$ 为由 $\mathcal{H}(V)$ 的 p- 超边生成的 $\mathbb{K}$- 线性空间。那么，$C_*(V;\mathbb{K})=(C_p(V;\mathbb{K}))_{p\geq 0}$ 是一个链复形，其边界算子 $d_p\colon C_p(V;\mathbb{K})\to C_{p-1}(V;\mathbb{K})$ 定义如下：

$$d_p\{v_0,v_1,\ldots,v_p\}=\sum_{i=0}^{p}(-1)^i\{v_0,\ldots,\widehat{v_i},\ldots,v_p\},\quad p\geq 1. \tag{1}$$

此处，$\widehat{v_i}$ 表示省略元素 v_i。我们约定，对所有 $v_0\in V$，均有 $d_0\{v_0\}=0$。定义在 $C_p(V;\mathbb{K})$ 上的边界算子 d_p 限制为映射 $d_p\colon C_p(\mathcal{H};\mathbb{K})\to C_{p-1}(V;\mathbb{K})$。于是，我们得到如下定义的下确界链复形：

$$\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{K})=\{x\in C_p(\mathcal{H};\mathbb{K})|d_px\in C_{p-1}(\mathcal{H};\mathbb{K})\} \tag{2}$$

对于 $p\geq 1$ 和 $\mathrm{Inf}_0(\mathcal{H};\mathbb{K})=C_0(\mathcal{H};\mathbb{K})$。可以验证，$\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{K})=(\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{K}))_{p\geq 0}$确实是一个链复形。

定义 2.1. 超图 $\mathcal{H}$ 的嵌入同调 定义为

$$H_p(\mathcal{H};\mathbb{K})=H_p(\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{K})),\quad p\geq 0. \tag{3}$$

在本研究中，所讨论的拓扑超图或超图同调是超图的嵌入同调。对应的 p-阶贝蒂数由超图$\mathcal{H}$ 定义为 $\beta_p=\dim H_p(\mathcal{H};\mathbb{K})$，其中 $p\geq 0$。

命题 2.1 ([38])**.** 同调 $H_*(-;\mathbb{K})$: **超图** $\to\mathbf{Vec}_{\mathbb{K}}$ 是从超图范畴到 $\mathbb{K}$-线性空间范畴的函子。

现在，考虑 $\mathbb{K}=\mathbb{R}$ 的情形。赋予 $C_*(\mathcal{H};\mathbb{K})$ 由下式给出的标准内积。

$$\langle x,y\rangle=\begin{cases}1, & x=y;\\ 0, & \text{otherwise.}\end{cases}$$

此处，x,y是 $\mathcal{H}$的超边。因此，$C_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$是一个有限维内积空间。下确界链复形 $\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$继承了$C_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$的内积结构。我们还将 $\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{R})$上的边界算子记为 $d_p\colon\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{R})\to\mathrm{Inf}_{p-1}(\mathcal{H};\mathbb{R})$。于是，我们得到相对于上述内积的 d_p的伴随算子 $(d_p)^*\colon\mathrm{Inf}_{p-1}(\mathcal{H};\mathbb{R})\to\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{R})$】【。

定义 2.2。 拓扑超图拉普拉斯算子 $\Delta_p^{\mathcal{H}}\colon\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{R})\to\mathrm{Inf}_p(\mathcal{H};\mathbb{R})$ 的 $\mathcal{H}$定义为

$$\Delta_p^{\mathcal{H}}=(d_p)^*\circ d_p+d_{p+1}\circ(d_{p+1})^*,\quad p\geq 0.$$

特别地，如果 $\mathcal{H}$ 是一个抽象单纯复形，那么 $\mathcal{H}$的嵌入同调与 $\mathcal{H}$的单纯同调重合。此外， $\mathcal{H}$ 的拓扑超图拉普拉斯算子退化为单纯复形拉普拉斯算子。

对于 $p \geq 0$，我们选取 $\mathrm{Inf}^p(\mathcal{H};\mathbb{R})$ 的一组标准正交基。令 B_p 为 d_p 关于所选标准基的表示矩阵。那么， $\Delta_p^{\mathcal{H}}$ 的表示矩阵 [1] 为

$$L_p^{\mathcal{H}} = B_{p+1}^T B_{p+1} + B_p B_p^T. \tag{4}$$

这里， B_p^T 表示 B_p 的转置矩阵。下面的命题说明， $\Delta_p^{\mathcal{H}}$ 的所有特征值均为非负数。

命题 2.2。 算子 $\Delta_p^{\mathcal{H}}$ 是自伴且半正定的。

证明。 显然，对于任意 x， $y \in \mathrm{Inf}^p(\mathcal{H};\mathbb{R})$，我们有

$$\langle \Delta_p^{\mathcal{H}} x, y\rangle = \langle d_p x, d_p y\rangle + \langle (d_{p+1})^* x, (d_{p+1})^* y\rangle = \langle x, \Delta_p^{\mathcal{H}} y\rangle.$$

另一方面，

$$\langle \Delta_p^{\mathcal{H}} x, x\rangle = \langle d_p x, d_p x\rangle + \langle (d_{p+1})^* x, (d_{p+1})^* x\rangle \geq 0.$$

因此， $\Delta_p^{\mathcal{H}}$ 是自伴且半正定的。 □

根据代数霍奇分解定理，有如下结论。

命题 2.3. $\mathrm{Inf}^p(\mathcal{H};\ \mathbb{R}) = \ker \Delta_p^{\mathcal{H}} \oplus \mathrm{Im} d_p \oplus \mathrm{Im}(d_{p+1})^*$。此外，我们有 $\ker \Delta_p^{\mathcal{H}} = \ker d_p \cap \ker(d_{p+1})^* \cong H_p(\mathcal{H};\ \mathbb{R})$。

上述命题表明， $\Delta_p^{\mathcal{H}}$的零特征值个数等于 $\mathcal{H}$的第p个贝蒂数。

例 2.1. 设 $\mathcal{H} = (V, E)$ 是一个超图，具有 $V = \{1, 2, 3\}$，并且

$$E = \{\{1\}, \{2\}, \{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{1, 2, 3\}\}.$$

因此，有

$$\begin{aligned} C_0(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1\}, \{2\}\}, \\ C_1(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}\}, \\ C_2(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1, 2, 3\}\}. \end{aligned}$$

[1]这里，表示矩阵由基上的左乘作用给出。对于基上的右乘作用，拉普拉斯矩阵 $L_p^{\mathcal{H}} = B_{p+1} B_{p+1}^T + B_p^T B_p$。

根据公式（2），可得

$$\begin{aligned}\mathrm{Inf}_0(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1\},\{2\}\},\\ \mathrm{Inf}_1(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1,2\},\{1,3\}-\{2,3\}\},\\ \mathrm{Inf}_2(\mathcal{H};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{\{1,2,3\}\}.\end{aligned}$$

下确界复形 $\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$ 指包含在$\mathbb{K}$-线性空间 $C_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$中的极大子链复形。这里，$\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$ 的标准正交基 [2] 选取如下：

$$\{1\},\{2\},\{1,2\},\frac{1}{\sqrt{2}}\{1,3\}-\frac{1}{\sqrt{2}}\{2,3\},\{1,2,3\}.$$

因此，边界矩阵为

$$\begin{aligned}d_0\begin{pmatrix}\{1\}\\ \{2\}\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\\ d_1\begin{pmatrix}\{1,2\}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{1,3\}-\frac{1}{\sqrt{2}}\{2,3\}\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}-1 & 1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\{1\}\\ \{2\}\end{pmatrix},\\ d_2\{1,2,3\} &= \begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\{1,2\}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{1,3\}-\frac{1}{\sqrt{2}}\{2,3\}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

因此，拉普拉斯算子 $\Delta_0^{\mathcal{H}}$、$\Delta_1^{\mathcal{H}}$和 $\Delta_2^{\mathcal{H}}$的表示矩阵列举如下。

$$L_0^{\mathcal{H}}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2} & -\frac{3}{2}\\ -\frac{3}{2} & \frac{3}{2}\end{pmatrix}.$$

$$L_1^{\mathcal{H}}=\begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}^T=\begin{pmatrix}3 & 0\\ 0 & 3\end{pmatrix}.$$

$$L_2^{\mathcal{H}}=\begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}^T=3.$$

因此，拉普拉斯矩阵 $L_0^{\mathcal{H}}$、$L_1^{\mathcal{H}}$和$L_2^{\mathcal{H}}$的谱分别为 $\{0,3\}$、$\{3,3\}$和 $\{3\}$。

例2.2。 如图*1*a所示，令 $\mathcal{H}=(V,E)$ 为一个顶点集为$V=\{0,1,2,3,4,5\}$ 、超边集为 E的超图，其中 E 包含 *0*-超边 $E^0=\{\{1\},\{2\},\{3\},\{4\},\{5\}\}$ *(*图*1*b*)*、*1*-超边 $E^1=\{\{0,1\},\{1,2\},\{1,4\},\{2,3\},\{2,4\},\{2,5\},\{3,4\}\}$ *(*图*1*c*)*以及 *2*-超边 $E^2=\{\{0,1,2\},\{0,1,5\},\{1,2,4\},\{2,3,4\}\}$*(*图*1*d*)*。根据公式（2），$\mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{R})$ 的标准正交基选取如下，

$$\{1\},\{2\},\{3\},\{4\},\{5\};\{1,2\},\{1,4\},\{2,3\},\{2,4\},\{2,5\},\{3,4\};\{1,2,4\},\{2,3,4\}.$$

[2]需要指出的是，在持久路径拉普拉斯算子 [32], 的研究中，并未选取标准正交基，因此计算得到的非零特征值并不唯一。

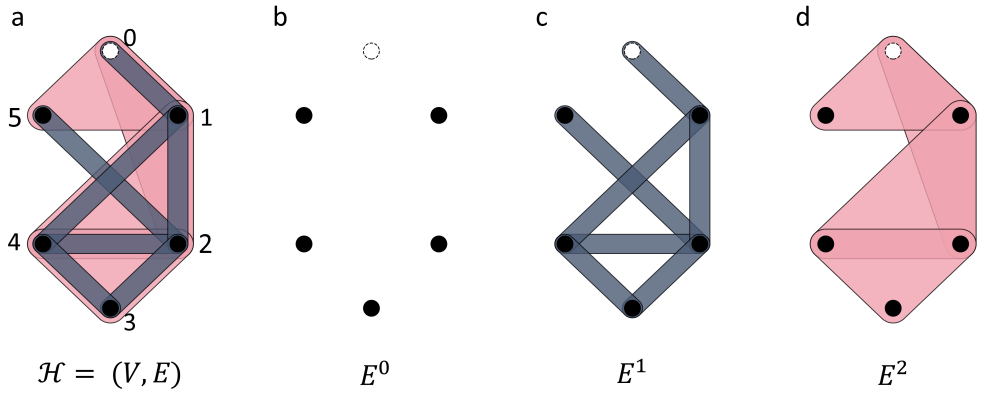


图1：**a** 例2.2中超图 $\mathcal{H}$ 的示意图。**b**、**c**和**d** 分别为0-超边、1-超边和2-超边的示意图。黑色实心顶点表示0-超边，紫色边表示1-超边，粉色区域表示2-超边。虚线空心圆表示不是0-超边的顶点。

那么， d_0、d_1和 d_2 的表示矩阵如下，

$$d_0 \begin{pmatrix} \{1\} \\ \{2\} \\ \{3\} \\ \{4\} \\ \{5\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$d_1 \begin{pmatrix} \{1,2\} \\ \{1,4\} \\ \{2,3\} \\ \{2,4\} \\ \{2,5\} \\ \{3,4\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{1\} \\ \{2\} \\ \{3\} \\ \{4\} \\ \{5\} \end{pmatrix},$$

$$d_2 \begin{pmatrix} \{1,2,4\} \\ \{2,3,4\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{1,2\} \\ \{1,4\} \\ \{2,3\} \\ \{2,4\} \\ \{2,5\} \\ \{3,4\} \end{pmatrix}.$$

基于 式（4）中，拉普拉斯算子的表示矩阵如下所列 ，

$$
\begin{aligned}
L_0^{\mathcal{H}} &= \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 3 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
L_1^{\mathcal{H}} &= \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \\
L_2^{\mathcal{H}} &= \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

然后，可以得到拉普拉斯矩阵的谱，分别为**谱**（$L_0^{\mathcal{H}}$）$=\{0,1,2,4,5\}$,**谱**（$L_1^{\mathcal{H}}$）$=\{1,2,2,4,4,5\}$和**谱**（$L_2^{\mathcal{H}}$）$=\{2,4\}$。贝蒂数为 $\beta_0=1$、$\beta_1=0$和 $\beta_2=0$；$L_0^{\mathcal{H}}$、$L_1^{\mathcal{H}}$和 $L_2^{\mathcal{H}}$对应的非调和谱的最小特征值分别为 $\lambda_0=1$、$\lambda_1=1$和 $\lambda_2=2$。

3 超有向图同调与拓扑超有向图拉普拉斯算子

超有向图有多种定义 [45, 49]。此外，“有向超图”和“定向超图”也都用来指代超有向图。为简单起见，我们采用 [50], 中给出的超有向图定义：超有向图由有限集合中互不相同元素组成的序列构成。这些序列称为有向超边，是超有向图同调的基本构件。相比之下，超图同调的基本构件是有限元素集，而路径同调的基本构件是有向路径。超有向图同调、超图同调和路径同调的拓扑结构，分别来自嵌入在由其基本构件生成的空间中的相应极大链复形。本节探讨超有向图的超有向图同调和拓扑超有向图拉普拉斯算子。我们沿用拓扑超图和路径复形中使用序列的技术，为超有向图同调构造链复形。我们的方法受到路径同调 [17, 51, 18] 和超图嵌入同调 [38]的启发。

3.1 超有向图同调

一个超有向图 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$在 V上是满足以下条件的一对： $\vec{E}$是$\mathbf{S}(V)=\coprod_{n=1}^{|V|}\Sigma_n\times\mathbf{P}_n(V)$的子集。这里， Σ_n是阶为 n的置换群。元素$(\sigma,e)\in\Sigma_n\times\mathbf{P}_n(V)$称为 σ-有向 $(n-1)$-超边。特别地，如果所有有向超边都是平凡有向的，即相应的置换都是平凡置换，那么我们称$\mathcal{H}$ 是无向 的，或像通常那样简称为超图。

设 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\ \vec{E})$ $\vec{\mathcal{H}}'=(V,\ \vec{E}')$ 是两个超有向图。超有向图的态射$f\colon\ \vec{\mathcal{H}}\to\vec{\mathcal{H}}'$是映射 $f\colon\ V\to V'$，使得对任意 $(\sigma,\ e)\in\vec{E}$，都有 $(\sigma,\ f(e))\in\vec{E}'$。

设 X 是一个含 n 个元素的有序集。设 Σ_nX 是 X 中元素的排列集合。

引理 3.1。 存在一个双射 $\Sigma_n\times\{X\}\to\Sigma_nX$，它将集合 $\Sigma_n\times\{X\}$ 映到集合Σ_nX，定义如下

$$\Sigma_n\times\{X\}\to\Sigma_nX,\quad(\sigma,\{X\})\mapsto(x_{\sigma(1)},x_{\sigma(2)},\dots,x_{\sigma(n)})$$

当 $X=\{x_1,x_2,\dots,x_n\}$ 和 $\sigma\in\Sigma_n$ 时。

证明。 满射性源于这样一个事实： Σ_nX中的每个序列（$x_{k_1},x_{k_2},\dots,x_{k_n}$）都可以唯一地表示为置换 σ作用于序列（$x_1,x_2,\dots,x_n$）所得的结果。另一方面，如果 $(x_{\sigma(1)},x_{\sigma(2)},\dots,x_{\sigma(n)})=(x_{\tau(1)},x_{\sigma(2)},\dots,x_{\tau(n)})$，则置换群作用表明 $\tau^{-1}\sigma=1$。这里，1 是单位元。因此我们有 $\sigma=\tau$，单射性得证。

□

注 3.1。 我们也可以用有序序列来定义超有向图同调。具体而言， V上的一个超有向图 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$ 是一对对象，其中 $\vec{E}$ 是 V中由互不相同元素组成的序列集的子集。 $\mathcal{H}$ 的一个有向 p-超边是 V中由互不相同元素组成的一个序列 $v_0v_1\cdots v_p$。该定义与之前的超有向图定义等价。

回顾一下，(p,q)-洗牌置换是指满足以下条件的置换 σ in Σ_{p+q}：

$$\sigma(1)<\cdots<\sigma(p),\quad\sigma(p)<\cdots<\sigma(p+q).$$

设 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$ 是一个超有向图，其中每条有向超边都配备了一个 (p,q)-洗牌置换。则我们称 $\vec{\mathcal{H}}$ 为一个 洗牌超有向图。换句话说，对于 $\vec{\mathcal{H}}$ 的每条有向超边 (σ,e)，置换 σ 对于某个$p+q=|e|$而言是一个 (p,q)-洗牌置换。注意，洗牌超有向图可以导出超有向图的另一种定义[42]。

例3.1。 回顾一下，有向无环图（*DAG*）是不含有向环的有向图 *[52]*。无环有向图的路径复形是一个超图。每条路径都具有不同顶点的路径复形是一个超有向图。令 $(V,\mathcal{P})$ 为由$V=\{0,1,2\}$ 和给出的路径复形

$$\mathcal{P}=\{e_0,e_1,e_2,e_{01},e_{12},e_{20},e_{012}\}.$$

路径复形 $(V,\mathcal{P})$ 可以与超有向图 $(V,\vec{E})$ 等同，其中 e

$$\vec{E}=\{(0),(1),(2),(0,1),(1,2),(2,0),(0,1,2)\}.$$

现在，令 $S_p(V;\mathbb{K})$ 为由 $\Sigma_{p+1}\times\mathbf{P}^{p+1}(V)$ 中元素生成的 $\mathbb{K}$-线性空间。则 $S_*(V;\mathbb{K})=(S_p(V;\mathbb{K}))_{p\geq 0}$ 是一个链复形，其边界算子 $d_p\colon S_p(V;\mathbb{K})\to S_{p-1}(V;\mathbb{K})$ 定义为 $d_p=\sum(-1)^i\partial_i$。这里，$i=0$

$$\partial_i(x_0,x_1,\ldots,x_p)=(x_0,\ldots,\widehat{x_i},\ldots,x_p),\quad 0\leq i\leq p,$$

其中，$(x_0,x_1,\ldots,x_p)$ 是 $\Sigma_{p+1}V$ 中如引理 3.1 所述的一个序列。特别地，我们约定对每个 $e\in V$，$d_0e=0$。可以验证，对于$p\geq 1$，$d_{p-1}\circ d_p=0$ 在 $S_*(V;\mathbb{K})$ 上成立。令 $F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})$ 为由 $\vec{E}^p$ 生成的 $\mathbb{K}$-线性空间。这里，$\vec{E}^p\subseteq\Sigma_{p+1}\times\mathbf{P}^{p+1}(V)$ 是 $\vec{\mathcal{H}}$ 的有向 p-超边集合。显然，$F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})$ 是 $S_p(V;\mathbb{K})$ 的子空间。回顾一下，$S_*(V;\mathbb{K})=(S_p(V;\mathbb{K}))_{p\geq 0}$ 是一个链复形。d_p 在 $S_p(V;\mathbb{K})$ 上的边界算子可以限制为映射 $d_p\colon F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})\to S_{p-1}(V;\mathbb{K})$。我们记

$$\Omega_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})=F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})\cap d^{-1}F_{p-1}(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})=\{x\in F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})|dx\in F_{p-1}(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})\}.\tag{5}$$

那么 $\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})=(\Omega_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}))_{p\geq 0}$ 是一个链复形。

定义 3.1. 超有向图 $\mathcal{H}$ 的嵌入同调 定义为

$$H_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})=H_p(\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})),\quad p\geq 0.$$

如果 $\vec{\mathcal{H}}=(V,E)$ 是一个（无向）超有向图，那么上述定义就退化为超图的嵌入同调。

例 3.2. 拓扑超有向图的嵌入同调能够反映比拓扑超图的嵌入同调更多的信息。例如，考虑超有向图 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$，其中 $V=\{0,1\}$ 和 $\vec{E}=\{(0,1),(1,0)\}$。直接计算可得

$$H_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})=\begin{cases}\mathbb{K}, & p=1;\\ 0, & otherwise.\end{cases}$$

$F_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K})$ 中的圈由 $(0,1)+(1,0)$生成。然而，顶点集为 $\{0,1\}$ 的任意拓扑超图的一维同调都是平凡的。

例3.3。 例*3.1*续。设 $\mathcal{P}$ 是一个路径复形，其中每条路径的顶点各不相同。我们可以将 $\mathcal{P}$ 视为一个超有向图。于是，$\mathcal{P}$的嵌入同调与 $\mathcal{P}$的路径同调相同，即

$$H_p^{emb}(\mathcal{P};\mathbb{K})=H_p^{path}(\mathcal{P};\mathbb{K}),\quad p\geq 0.$$

按照 [40], 中的类似讨论，我们可以证明以下命题，从而确保第 4.1 节中引入的持久超有向图同调是一个持久模。

命题3.2。 同调 $H_*(-;\mathbb{K})\colon$ **超** $\to$ **向量**$_{\mathbb{K}}$ 是一个从超有向图范畴到 $\mathbb{K}$-线性空间范畴的函子。

3.2 从超有向图同调到超图同源

现在，设 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\ \vec{E})$ 是一个超有向图。对于每条有向超边 $(\sigma,\ e)$，我们有一个 $\mathbf{P}(V)$ 的子集 e。因此，我们得到一个超图 $\mathcal{H}=(V,\ E)$，其中每条超边 e 都是 E 中某条有向超边 $(\sigma,\ e)$ 在 $\vec{E}$ 中的投影。我们称 H 为超有向图 $\mathcal{H}$ 的约化超图[7]。此外，我们有一个 $\mathbb{K}$- 线性空间之间的映射

$$\pi : F_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}) \to C_*(\overline{\mathcal{H}};\mathbb{K})$$

由 $\pi(\sigma,\ e)\ =(-1)^{\epsilon(\sigma)}e$ 给出。这里，$\epsilon(\sigma)$ 是置换 σ 的列维-奇维塔符号。于是，$\pi(\vec{\mathcal{H}})$ 是一个超图。因此我们有交换图表

$$\begin{array}{ccc} F_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_*(\overline{\mathcal{H}};\mathbb{K}) \\ \big\downarrow & & \big\downarrow \\ S_*(V;\mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_*(V;\mathbb{K}). \end{array}$$

它诱导出一个 $\mathbb{K}$-线性映射

$$\pi : \Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}) \to \mathrm{Inf}_*(\overline{\mathcal{H}};\mathbb{K}).$$

引理 3.3. 映射 $\pi:\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}) \to \mathrm{Inf}_*(\mathcal{H};\mathbb{K})$ 是一个链映射。

证明。只需证明下图交换。

$$\begin{array}{ccc} F_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_p(\overline{\mathcal{H}};\mathbb{K}) \\ {\scriptstyle d_p}\big\downarrow & & \big\downarrow{\scriptstyle d_p} \\ S_{p-1}(V;\mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_{p-1}(V;\mathbb{K}). \end{array}$$

我们将证明 $(-1)^{\sigma(i)}\partial_{\sigma(i)}\circ\pi(v_{\sigma(0)},\ v_{\sigma(1)},\ \ldots,\ v_{\sigma(p)})\ =(-1)^i\pi\circ\partial_i(v_{\sigma(0)},\ v_{\sigma(1)},\ \ldots,\ v_{\sigma(p)})$，这意味着 $\partial_p\circ\pi=\pi\circ\partial_p$。这里，$e=\{v_0,v_1,\ldots,v_p\}$ 是一个有序集。通过直接计算可得

$$(-1)^{\sigma(i)}\partial_{\sigma(i)}\circ\pi(v_{\sigma(0)},v_{\sigma(1)},\ldots,v_{\sigma(p)}) = (-1)^{\epsilon(\sigma)+\sigma(i)}\partial_{\sigma(i)}e.$$

另一方面，令 $n_i(\sigma)$ 为 $|\{j<i|v_{\sigma(j)}>v_{\sigma(i)}\}|$ 与 $|\{j>i|v_{\sigma(j)}<v_{\sigma(i)}\}|$ 之和。那么我们有

$$\pi\circ\partial_i(v_{\sigma(0)},v_{\sigma(1)},\ldots,v_{\sigma(p)}) = (-1)^{i+\epsilon(\sigma)+n_i(\sigma)}\partial_{\sigma(i)}e.$$

如果我们固定序列 $v_{\sigma(i)}$ 中的 $v_{\sigma(0)},\ v_{\sigma(1)},\ \ldots\ldots,\ v_{\sigma(p)}$，并对任意两个其他元素进行置换 $v_{\sigma(s)},\ v_{\sigma(t)}$，就得到序列 $v_{\tau(0)},\ v_{\sigma(1)},\ \ldots\ldots,\ v_{\tau(p)}$，使得 $\tau(j)\ =\sigma(j)$ 对于 $j\neq s,\ t$ 且 $\tau(s)\ =\sigma(t)\ \tau(t)\ =\sigma(s)$。显然，$n_i(\sigma)$ 和 $n_i(\tau)$ 相差一个偶数。该置换不会改变符号。因此，$(v_{\sigma(0)},\ v_{\sigma(1)},\ \ldots\ldots,\ v_{\sigma(p)})$ 的符号可以归结为序列的符号

$$(v_0,\ldots,v_{i-1},v_{\sigma(i)},v_{i+1},\ldots,v_{\sigma(i)-1},v_i,v_{\sigma(i)+1},\ldots,v_p)$$

对于 $\sigma(i) > i$ 或序列

$$(v_0, \ldots, v_{\sigma(i)-1}, v_i, v_{\sigma(i)+1}, \ldots, v_{i-1}, v_{\sigma(i)}, v_{i+1}, \ldots, v_p)$$

f或 $\sigma(i) < i$。由此可得 $(-1)^{n_{i(\sigma)}} = (-1)^{\sigma(i)-i}$。因此我们有 $\partial_p \circ \pi = \pi \circ \partial_p$. □

上述链态射诱导出一个嵌入同调的态射。

定理 3.4。设 $\mathcal{H}$ 是一个超有向图。存在一个自然态射

$$H_*(\pi) : H_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{K}) \to H_*(\overline{\mathcal{H}}; \mathbb{K}).$$

证明。设 $f : \mathcal{H} \to \mathcal{H}'$ 是一个超有向图态射。那么存在一个 $\mathbb{K}$-线性映射 s

$$F_p(f) : F_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{K}) \to F_p(\vec{\mathcal{H}}'; \mathbb{K}), \quad (\sigma, e) \mapsto (\sigma, f(e))$$

and

$$C_p(\overline{f}) : C_p(\overline{\mathcal{H}}; \mathbb{K}) \to C_p(\overline{\mathcal{H}'}; \mathbb{K}), \quad e \mapsto f(e).$$

考虑以下图表

$$\begin{array}{ccc} F_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_p(\overline{\mathcal{H}}; \mathbb{K}) \\ \downarrow{\scriptstyle F_p(f)} & & \downarrow{\scriptstyle C_p(\overline{f})} \\ F_p(\vec{\mathcal{H}}'; \mathbb{K}) & \xrightarrow{\pi} & C_p(\overline{\mathcal{H}'}; \mathbb{K}). \end{array}$$

对于任意的（σ， e）$\in \vec{E}$，有

$$C_p(\overline{f}) \circ \pi(\sigma, e) = (-1)^{\epsilon(\sigma)} f(e) = \pi \circ F_p(f)(\sigma, e).$$

因此，我们得到 $C_p(\overline{f}) \circ \pi = \pi \circ F_p(f)$。由于嵌入超有向图同调 H_*是一个函子，我们得到了所需的结论。 □

一般而言，映射 $H_*(\pi)$ 不一定是满射或单射。

例 3.4. 令 $\vec{\mathcal{H}}_1 = (V_1, \vec{E}_1)$ 为一个超有向图，且满足 $V_1 = \{1, 2, 3\}$ 和

$$\vec{E}_1 = \{(1, 2), (1, 3), (3, 2), (1, 2, 3)\}.$$

由此可得 $H_p(\vec{\mathcal{H}}_1; \mathbb{K}) = \begin{cases} \mathbb{K}, & p = 1; \\ 0, & \text{否则}。 \end{cases}$ 并且 $H_p(\mathcal{H}_1; \mathbb{K}) = 0$。因此 $H_*(\pi)$： $H_*(\vec{\mathcal{H}}_1; \mathbb{K}) \to H_*(\mathcal{H}_1; \mathbb{K})$ 不是单射。令 $\vec{\mathcal{H}}_2 = (V_2, \vec{E}_2)$ 为一个超有向图，且满足 $V_2 = \{1, 2, 3, 4\}$ 和

$$\vec{E}_2 = \{(1, 2, 3), (2, 3, 4), (3, 4, 1), (4, 1, 2)\}.$$

那么，我们有 $H_p(\vec{\mathcal{H}}_2; \mathbb{K}) = 0$ 和 $H_p(\mathcal{H}_2; \mathbb{K}) = \begin{cases} \mathbb{K}, & p = 2; \\ 0, & \text{否则}, \end{cases}$ 映射 $H_*(\pi)$: $H_*(\vec{\mathcal{H}}_2; \mathbb{K}) \to H_*(\mathcal{H}_2; \mathbb{K})$ 不是满射。

3.3 拓扑超有向图拉普拉斯算子

本节将介绍拓扑超有向图拉普拉斯算子，作为一种可用于研究高维拓扑结构的数学工具。此外，它还可用于构建可应用于数据分析的拓扑持久性。我们将提供一些示例和计算，向读者阐释这些概念。从现在起，我们始终取 $\mathbb{K} = \mathbb{R}$。

设 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$ 是一个超有向图。我们有一个下确界复形

$$\cdots \to \Omega_{p+1}(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \xrightarrow{d_{p+1}} \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \xrightarrow{d_p} \Omega_{p-1}(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \to \cdots .$$

我们将有向超边的集合 $E_1, E_2, \cdots, E_n$ 视为$\mathbb{K}$-线性空间 $F_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 的标准基。这里，$n = |\vec{E}|$ 是 $\vec{\mathcal{H}}$的有向超边数。设$v_1, v_2, \ldots, v_N$为 $\mathbb{K}[V]$的标准基。这里，$N = |V|$。分别在 $F_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 和 $\mathbb{K}[V]$ 上赋予标准内积，定义如下：

$$\langle v_i, v_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \qquad \langle \vec{E}_i, \vec{E}_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

于是，链复形 $\Omega_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 继承了子空间 $F_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 的内积。函子 $d_p : \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \to \Omega_{p-1}(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 的伴随函子是一个 $\mathbb{K}$-线性映射 $(d_p)^* : \Omega_{p-1}(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \to \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$，满足

$$\langle d_p x, y \rangle = \langle x, (d_p)^* y \rangle$$

对任意 $x \in \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 和 $y \in \Omega_{p-1}(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$。

定义 3.2。超有向图超有向图拉普拉斯算子 $\Delta_p^{\vec{\mathcal{H}}} : \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) \to \Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 的 $\vec{\mathcal{H}}$ 定义如下

$$\Delta_p^{\vec{\mathcal{H}}} = (d_p)^* \circ d_p + d_{p+1} \circ (d_{p+1})^*, \quad p \geq 0.$$

与第 2 节中的讨论类似，我们有以下命题。

命题 3.5。算子 $\Delta_p^{\mathcal{H}}$是自伴且半正定的 .

命题 3.6。$\Omega_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) = \ker \Delta_p^{\vec{\mathcal{H}}} \oplus \mathrm{Im} d_p \oplus \mathrm{Im}(d_{p+1})^*$。此外，我们有 $\ker \Delta_p^{\vec{\mathcal{H}}} = \ker d_p \cap \ker(d_{p+1})^* \cong H_p(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$。

上述命题表明，$\Delta_p^{\mathcal{H}}$的零特征值个数等于 $\mathcal{H}$的p阶贝蒂数。

定理 3.7. 设 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$ 是一个超有向图。设 $\lambda_0(k)$ 是 $\Delta_0^{\vec{\mathcal{H}}}$的第 k小拉普拉斯特征值。若 $\vec{E}_0 \neq \emptyset$，则

(i) $\lambda_0(1) = 0$;

(ii) $\lambda_0(2) > 0$ 当且仅当对于 $\vec{\mathcal{H}}$ 的任意有向0-超边$(v),(w)$，都存在一条从(v) 到(w)的1-超边路径。

证明。(*i*) 由于 $\vec{E}$ 中至少存在一条有向 0-超边，因此有 $\Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) = F_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$。此外，$\Delta_0^{\vec{\mathcal{H}}}$ 的表示矩阵：$\Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \to \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$ 是一个 $r \times r$ 矩阵。这里，$r = \dim \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \geq 1$。考虑增广链复形

$$\cdots \to \Omega_2(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \xrightarrow{d_2} \Omega_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \xrightarrow{d_1} \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \xrightarrow{\tilde{d}_0} \mathbb{K} \to 0,$$

其中 $\tilde{d}(\sum_{j=1}^{m} a_j \cdot (v_j)) = \sum_{j=1}^{m} a_j$ 对 $\sum_{j=1}^{m} a_j \cdot (v_j) \in \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$。由此可得

$$\operatorname{Im} d_1 \subseteq \ker \tilde{d}_0.$$

取一个有向 0-超边 $(v) \in \vec{E}$。注意到 $\ker \tilde{d}_0(v) \neq 0$。有 $\operatorname{Im} d_1 \subsetneq \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$。由此可得

$$H_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \neq 0.$$

由命题 3.6，$\dim \ker \Delta_0^{\vec{\mathcal{H}}} = \dim H_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) > 0$。由此可得 $\lambda_0(1) = 0$。

(*ii*) 若 $\lambda_0(2) > 0$，则有 $\dim H_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) = \dim \ker \Delta_0^{\vec{\mathcal{H}}} = 1$。因此，对于任意 (v)，$(w) \in \vec{E}^0$，我们有 $(v) - (w) \in \operatorname{Im} d_1$。假设从 (v) 到 (w) 不存在 1- 超边路径。令 $(v) - (w) = d_1 \sum_{j=1}^{k} a_i(v_j w_j)$。考虑函数 $f : \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ 定义为

$$f((x)) = \begin{cases} 0, & \text{if there is a path from } (v) \text{ to } (x); \\ 1, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

于是我们有

$$-1 = f((v) - (w))) = \sum_{j=1}^{k} a_i(f(w_j) - f(v_j)).$$

注意，由于 $(v_j w_j)$ 是一条有向 1-超边，因此 $f(w_j) = f(v_j)$。有 $\sum a_i(f(w_j) - f(v_j)) = 0$，矛盾。因此，从 (v) 到 (w) 存在一条 1-超边路径。

□

例 3.5. 令 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$ 为一个超有向图，具有 $V = \{1, 2, 3\}$ 和

$$\vec{E} = \{(1), (2), (1, 2), (1, 3), (3, 2), (1, 2, 3)\}.$$

于是我们有

$$\begin{aligned} F_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \operatorname{span}\{(1), (2)\}, \\ F_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \operatorname{span}\{(1, 2), (1, 3), (3, 2)\}, \\ F_2(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \operatorname{span}\{(1, 2, 3)\}. \end{aligned}$$

注意，$d(1, 2, 3) = (1, 2) - (1, 3) + (2,3) \notin F_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$。由式（5），我们得到

$$\begin{aligned} \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \operatorname{span}\{(1), (2)\}, \\ \Omega_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \operatorname{span}\{(1, 2), (1, 3) + (3, 2)\}, \\ \Omega_2(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= 0. \end{aligned}$$

现在，我们选择$\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$的标准正交基为$(1)$、$(2)$、$(1,2)$、$(1,3)+(3,2)\sqrt{2}$。于是边界矩阵为

$$d_0\begin{pmatrix}(1)\\(2)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$
$$d_1\begin{pmatrix}(1,2)\\\frac{(1,3)+(3,2)}{\sqrt{2}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(1)\\(2)\end{pmatrix}.$$

注意，秩$\begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=1$。我们有超有向图同调 $H_p(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})=\begin{cases}\mathbb{K}, & p=0,1;\\ 0, & \text{否则。}\end{cases}$此外，关于选定基的 $\Delta_p^{\mathcal{H}}$表示矩阵为

$$L_0^{\vec{\mathcal{H}}}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{2} & -\frac{3}{2}\\-\frac{3}{2} & \frac{3}{2}\end{pmatrix}$$

and

$$L_1^{\vec{\mathcal{H}}}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 1\\-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}^T=\begin{pmatrix}2 & \sqrt{2}\\\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}.$$

$\vec{\Delta}_0^{\mathcal{H}}$的谱为 $\{0,3\}$，零特征值的个数恰好为1。类似地，$\vec{\Delta}_1^{\mathcal{H}}$的谱为 $\{0,3\}$，这与贝蒂数一致。注意，若我们选择$\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$的标准正交基$(1)+(2)\sqrt{2}$、$(1)-(2)\sqrt{2}$、$(1)$、$(2)$、$(1,3)+(3,2)\sqrt{2}$，则可得到拉普拉斯算子相应的表示矩阵：

$$\tilde{L}_0^{\vec{\mathcal{H}}}=\begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 3\end{pmatrix},\quad \tilde{L}_1^{\vec{\mathcal{H}}}=\begin{pmatrix}2 & \sqrt{2}\\\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}.$$

事实上，上述矩阵的特征值与前面的相同 *es.*

例 3.6. 如图 *2*a所示，令 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$ 为一个顶点集为$V=\{0,1,2,3,4,5\}$ 、有向超边集为 $\vec{E}$ 的超有向图，其中 $\vec{E}$ 包含如下有向 *0*-超边（图 *2*b）、有向 *1*-超边（图 *2*c）和有向 *2*-超边（图 *2*d），

$$\begin{aligned}\vec{E}^0 &= \{(1),(2),(3),(4),(5)\},\\ \vec{E}^1 &= \{(0,1),(1,2),(2,1),(2,3),(2,4),(2,5),(3,4),(4,1)\},\\ \vec{E}^2 &= \{(0,1,2),(0,5,1),(2,3,4),(2,4,1)\}.\end{aligned}$$

因此，$\Omega_*(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})$ 的标准正交基可选为如下形式，

$$(1),(2),(3),(4),(5),(1,2),(2,1),(2,3),(2,4),(2,5),(3,4),(4,1),(2,3,4),(2,4,1).$$

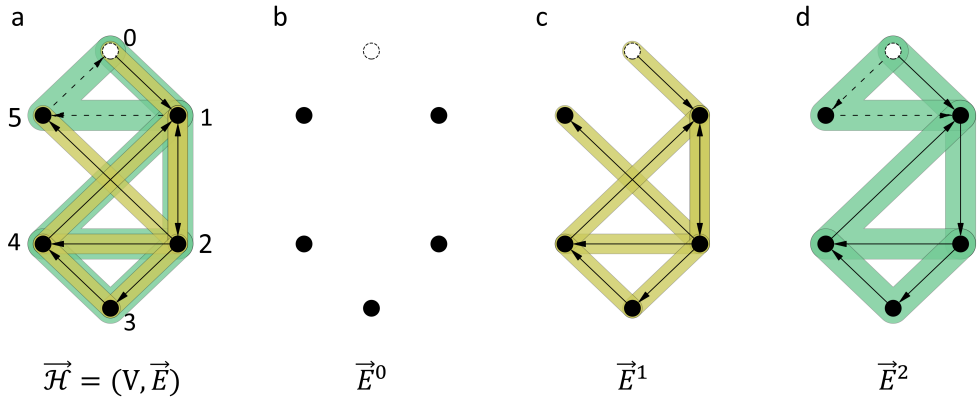


图 2：**a** 例 3.6 中超有向图 $\mathcal{H}$ 的示意图。**b**、**c** 和 **d** 分别为有向 0-超边、有向 1-超边和有向 2-超边的示意图。黑色实心顶点表示 0-超边，虚线空心圆表示非有向 0-超边的顶点。黄色背景与有向边组合表示有向 1-超边。绿色背景与连续两条有向边组合表示有向 2-超边。此处，虚线箭头表示不存在的有向边。

然后，边界算子 d_0、d_1 和 d_2 的表示矩阵如下，

$$d_0 \begin{pmatrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \\ (5) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$d_1 \begin{pmatrix} (1,2) \\ (2,1) \\ (2,3) \\ (2,4) \\ (2,5) \\ (3,4) \\ (4,1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \\ (5) \end{pmatrix},$$

$$d_2 \begin{pmatrix} (2,3,4) \\ (2,4,1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1,2) \\ (2,1) \\ (2,3) \\ (2,4) \\ (2,5) \\ (3,4) \\ (4,1) \end{pmatrix}.$$

表示 拉普拉斯算子相对于选定基的矩阵 $\Delta_p^{\mathcal{H}}$ 列示如下

如下，

$$
\begin{aligned}
L_0^{\vec{\mathcal{H}}} &= \begin{pmatrix} 3 & -2 & 0 & -1 & 0 \\ -2 & 5 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 3 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
L_1^{\vec{\mathcal{H}}} &= \begin{pmatrix} 2 & -2 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ -2 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}, \\
L_2^{\vec{\mathcal{H}}} &= \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

然后可以得到拉普拉斯矩阵的谱，分别为**谱**$(L_0^{\mathcal{H}}) = \{0, 1.044, 2.332, 4.080, 6.544\}$、**谱**$(L_1^{\mathcal{H}}) = \{0, 1.044, 2, 2.332, 4, 4.080, 6.544\}$和**谱**$(L_2^{\mathcal{H}}) = \{2, 4\}$。相应的贝蒂数为 $\beta_0 = 1$、 $\beta_1 = 1$和 $\beta_2 = 0$，非调和谱的最小特征值分别为 $\lambda_0 = 1.044$、 $\lambda_1 = 1.044$和 $\lambda_2 = 2$。

不同对象上存在各种同调和拓扑拉普拉斯算子。表 1 列出了这些对象——它们是一类满足某些性质的离散对象——以及相应的拓扑拉普拉斯算子。固定一个非空有限有序集 V. 回顾一下，$\mathsf{S}(V)$ 是由 V 中元素互不相同的所有序列构成的集合。令 $\mathsf{S}(V)$ 为由 V 中元素构成的所有序列的集合。对于 $\mathsf{P}(V)$ 的一个子集 K，令 $\partial_* K = \{\tau \subset \sigma | \sigma \in K\}$。对于 $\mathsf{S}(V)$ 的一个子集 P，令 $\partial_0 P = \{(x_1, \ldots, x_p) | (x_0, x_1, \ldots, x_p) \in P\}$，且 $\partial_\infty P = \{(x_0, \ldots, x_{p-1}) | (x_0, x_1, \ldots, x_p) \in P\}$。图是一个顶点集 V，配备由一维边构成的集合，也就是说，是 $\mathsf{P}_2(V)$ 的一个子集。单纯复形可视为一个顶点集，配备 $\mathsf{P}(V)$ 的一个子集 K，并满足 $\partial_* K \subseteq K$。有向图是一个顶点集 V，配备边集 E，并满足 $E \subseteq \mathsf{S}_2(V)$。路径复形可视为一个顶点集 V，配备一个集合 P，并满足 $\partial_0 P, \partial_\infty P \subseteq P$。超图同调和超有向图同调可视为一个顶点集 V，分别配备相应的边集 $E \subseteq \mathsf{P}(V)$ 和 $\vec{E} \subseteq \mathsf{S}(V)$。

3.4 拓扑超有向图拉普拉斯算子的计算

本节将通过更多示例来说明拓扑超有向图拉普拉斯算子。我们的算法基于以下计算过程。若不存在歧义，为方便起见，我们将序列 $(v_0, v_1, \ldots\ldots, v_p)$ 记作 $(v_0 v_1 \cdots v_p)$。

表 1：不同对象上的拓扑拉普拉斯算子

同调	符号	限制	拓扑拉普拉斯算子
图	$G = (V, E),\ E \subseteq \mathbf{P}_2(V)$	none	拉普拉斯算子
单纯复形	$\mathcal{K} = (V, K),\ K \subseteq \mathbf{P}(V)$	$\partial_* K \subseteq K$	拉普拉斯算子
有向图	$G = (V, E),\ E \subseteq \mathbf{S}_2(V)$	none	路径拉普拉斯算子
路径复形	$\mathcal{P} = (V, P),\ P \subseteq \tilde{\mathbf{S}}(V)$	$\partial_0 P,\ \partial_\infty P \subseteq P$	路径拉普拉斯算子
超图	$\mathcal{H} = (V, E),\ E \subseteq \mathbf{P}(V)$	none	超图拉普拉斯算子
超有向图	$\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E}),\ \vec{E} \subseteq \mathbf{S}(V)$	none	超有向图拉普拉斯算子

例3.7。 设 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$ 是一个超有向图，且有 $V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ 和

$$\vec{E} = \{(12), (25), (13), (35), (14), (45), (125), (135), (145)\}.$$

通过直接计算，我们得到

$$\begin{aligned}
\Omega_0(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) &= \text{span}\{(1), (2), (3), (4), (5)\}, \\
\Omega_1(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) &= \text{span}\{(12), (25), (13), (35), (14), (45)\}, \\
\Omega_2(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R}) &= \text{span}\{(125) - (135), (125) - (145)\}.
\end{aligned}$$

我们选择$\Omega_*(\vec{\mathcal{H}}; \mathbb{R})$ 的标准正交基为

$$(1), (2), (3), (4), (5), (12), (25), (13), (35), (14), (45), (x), (y).$$

这里，$(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(125) - \frac{1}{\sqrt{2}}(135)$ 以及$(y) = \frac{1}{\sqrt{6}}(125) - \frac{1}{\sqrt{6}}(135) + \frac{2}{\sqrt{6}}(145)$。于是，边界矩阵为

$$d_0 \begin{pmatrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \\ (5) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad d_1 \begin{pmatrix} (12) \\ (25) \\ (13) \\ (35) \\ (14) \\ (45) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \\ (5) \end{pmatrix},$$

$$d_2 \begin{pmatrix} (x) \\ (y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (12) \\ (25) \\ (13) \\ (35) \\ (14) \\ (45) \end{pmatrix}.$$

因此， $\Delta_0^{\mathcal{H}}$、 $\Delta_1^{\mathcal{H}}$和 $\Delta_2^{\mathcal{H}}$的表示矩阵为

$$L_0^{\vec{\mathcal{H}}} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}, L_1^{\vec{\mathcal{H}}} = \begin{pmatrix} \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{8}{3} \end{pmatrix}$$

and

$$L_2^{\vec{\mathcal{H}}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

因此， $\Delta_0^{\mathcal{H}}$、 $\Delta_1^{\mathcal{H}}$和 $\Delta_2^{\mathcal{H}}$的谱分别为 $\{0,2,2,3,5\}$、 $\{2,2,2,2,3,5\}$和 $\{2,2\}$。注意，相对于标准正交基，边界算子 d_p 的表示矩阵的转置矩阵就是其伴随算子 d_p^* 的表示矩阵。然而，当选定基不是标准正交基时，这一结论并不总是成立。例如，选择如下基:

$$(1),(2),(3),(4),(5),(12),(25),(13),(35),(14),(45),(125)-(135),(125)-(145).$$

那么， d_2 对应的边界矩阵为

$$\tilde{B}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

如果 $\tilde{B}_2^T$ 是 d_2^*的表示，那么有

$$\langle d_2((125)-(135)),(12)\rangle = 1 \neq 3 = \langle (125)-(135), d_2^*(12)\rangle.$$

这就产生了矛盾。因此，当选定基不是标准正交基时，边界算子 d_p 的表示矩阵的转置矩阵并不总是其伴随算子 d_p^* 的表示矩阵。

例 3.8. 设 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$ 是一个超有向图，其中 $V = \{1,2,3\}$。这里， $\vec{E}$ 由 V中所有互不相同元素构成的序列给出。

$$\vec{E} = \{(1),(2),(3),(12),(13),(21),(23),(31),(32),(123),(132),(213),(231),(312),(321)\}.$$

由此可得

$$\begin{aligned} \Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \text{span}\{(1),(2),(3)\}, \\ \Omega_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \text{span}\{(12),(13),(21),(23),(31),(32)\}, \\ \Omega_2(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \text{span}\{(123),(132),(213),(231),(312),(321)\}. \end{aligned}$$

我们选择如下标准正交基

$$(1),(2),(3),(12),(13),(21),(23),(31),(32),(123),(132),(213),(231),(312),(321).$$

然后，计算结果如表 *2* 所示。

表 2：例 3.8 中超有向图的示意图

n	$n=0$	$n=1$	$n=2$
B_{n+1}	$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$	6×0 空矩阵
L_n	$\begin{pmatrix} 4 & -2 & -2 \\ -2 & 4 & -2 \\ -2 & -2 & 4 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5 & -1 & -2 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 5 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ -2 & 0 & 5 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 5 & 0 & -2 \\ 0 & -2 & -1 & 0 & 5 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -2 & -1 & 5 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3 & -2 & -2 & 1 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 & 0 & -2 & 1 \\ -2 & 1 & 3 & -2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -2 & 3 & 1 & -2 \\ 1 & -2 & 0 & 1 & 3 & -2 \\ 0 & 1 & 1 & -2 & -2 & 3 \end{pmatrix}$
β_n	1	0	2
谱(L_n)	{0,6,6}	{1,4,4,6,6,9}	{0,0,1,4,4,9}

例 3.9. 设 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\vec{E})$ 是一个超有向图，其中 $V=\{1,2,3,4,5\}$。这里，$\vec{E}$ 是如下的 $(p,1)$-洗牌集合

$$\vec{E}=\{(1)(2),(2)(1),(1)(3),(3)(2),(4)(2),(4)(3),(5)(2),(14)(2),(14)(3),(15)(2),(34)(2)\}.$$

由式（5），可得

$$\begin{aligned}
\Omega_0(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= 0,\\
\Omega_1(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{(1)(2)+(2)(1),(1)(3)+(3)(2)+(2)(1),(3)(2)-(4)(2)+(4)(3)\},\\
\Omega_2(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R}) &= \mathrm{span}\{(14)(2)-(14)(3)\}.
\end{aligned}$$

我们选取如下标准正交基

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\sqrt{2}}(1)(2)+\frac{1}{\sqrt{2}}(2)(1),-\frac{1}{\sqrt{10}}(1)(2)+\frac{1}{\sqrt{10}}(2)(1)+\frac{2}{\sqrt{10}}(1)(3)+\frac{2}{\sqrt{10}}(3)(2),\\
&\frac{1}{\sqrt{65}}(1)(2)-\frac{1}{\sqrt{65}}(2)(1)-\frac{2}{\sqrt{65}}(1)(3)+\frac{3}{\sqrt{65}}(3)(2)-\frac{5}{\sqrt{65}}(4)(2)+\frac{5}{\sqrt{65}}(4)(3),\\
&\frac{1}{\sqrt{2}}(14)(2)-\frac{1}{\sqrt{2}}(14)(3).
\end{aligned}$$

于是得到表 3 所示的计算结果。

4 持久超有向图同调与持久超有向图拉普拉斯算子

拓扑持久性是拓扑学领域中一种强大的计算工具，可用于分析给定数据集的拓扑特征。它包含一组

表 3：例 3.9 中超有向图的示意

n	$n=0$	$n=1$	$n=2$
B_{n+1}	0×3 空矩阵	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{3}{2\sqrt{5}} & -\frac{\sqrt{13}}{\sqrt{10}} \end{pmatrix}$	6×0 空矩阵
L_n	none	$\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{3}{4\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{13}}{2\sqrt{10}} \\ -\frac{3}{4\sqrt{5}} & \frac{9}{20} & -\frac{3\sqrt{13}}{10\sqrt{2}} \\ \frac{\sqrt{13}}{2\sqrt{10}} & -\frac{3\sqrt{13}}{10\sqrt{2}} & \frac{13}{10} \end{pmatrix}$	2
β_n	0	2	0
谱(L_n)	none	{0,0,2}	{2}

取决于数据集过滤参数的拓扑不变量。通过追踪这些拓扑特征的变化，可以确定数据集中发生显著变化的关键参数值。这些值对应着我们感兴趣的拓扑特征，并能帮助我们深入了解数据的底层结构与几何形态。

Wei 及其合作者提出的持久拓扑拉普拉斯算子 [21, 22, 14], 能够克服持久同调或持久拓扑的各种局限。这些方法比持久同调更具定量性和针对性，并能刻画非拓扑形状演化，以及将物理定律嵌入拓扑不变量中 [31]。本节介绍持久超有向图同调和持久超有向图拉普拉斯算子的概念。值得注意的是，拓扑超有向图上的持久性可归约为拓扑超图上的持久性，因为拓扑超图可视为方向平凡的拓扑超有向图。

4.1 超有向图上的拓扑持久性与超有向图拉普拉斯算子

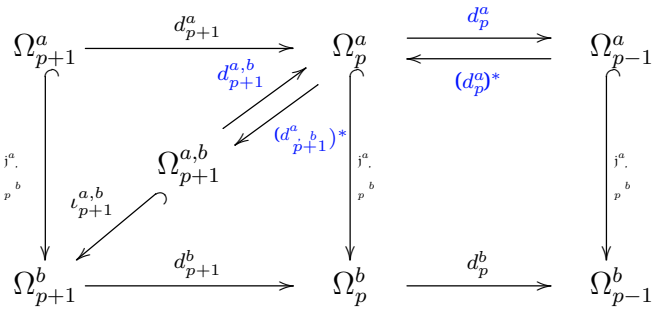
令 $(\mathbb{R},\ \leq)$ 为一个范畴，其对象为实数，态射由 $a\to b$ for $a\leq b$ 给出。一个持久超有向图 是一个函子 $\mathcal{P}:(\mathbb{R},\ \leq)\ \to\ \vec{}\mathbf{Hyper}$，它从 $(\mathbb{R},\ \leq)$ 映到超有向图范畴。对于实数 $a\leq b$，持久超有向图同调 $\mathcal{P}:(\mathbb{R},\ \leq)\ \to\ \vec{}\mathbf{Hyper}$ 的 $(a,\ b)$-持久同调 定义为

$$H_p^{a,b}(\mathcal{P};\mathbb{K})=\mathrm{Im}\,(H_p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})\to H_p(\mathcal{P}(b);\mathbb{R})).$$

$\mathcal{P}$ 的 $(a,\ b)$-持久贝蒂数 定义为 $\beta^{a,\ b}_{\ p}=\dim H^{a,\ b}_{\ p}(\mathcal{P};\ \mathbb{R})$，其中 $p\geq 0$。

接下来，我们定义持久超有向图拉普拉斯算子。令$\vec{}\mathbf{Hyper}^{\hookrightarrow}$ 为$\vec{}\mathbf{Hyper}$ 的子范畴，其对象为拓扑超有向图，态射为超有向图的包含映射。令 $\mathcal{P}:(\mathbb{R},\leq)\ \to\ \vec{}\mathbf{Hyper}^{\hookrightarrow}$ 为一个持久超有向图同调。对于实数 $a\leq b$，我们有拓扑超有向图的包含映射 $j^{a,b}:\mathcal{P}(a)\ \hookrightarrow\ \mathcal{P}(b)$。令$\Omega_p^t=\Omega_p^t(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})$，其中任意 $t\in\mathbb{R}$均成立。包含映射 $j^{a,b}$ 诱导出链复形的一个包含映射

$\mathfrak{j}_p^{a,b}:\Omega_p^a\hookrightarrow$ 对于 $p\geq 0$，有Ω_p^b。令$\Omega_{p+1}^{a,b}=\{x\in\Omega_{p+1}^b|\partial_{p+1}^b x\in\Omega_p^a\}$。令 $d_{p+1}^{a,b}=(\mathfrak{j}_p^{a,b})^*\circ d_{p+1}^b\circ\iota_{p+1}^{a,b}$.



第 p 阶 $(a,\ b)$-持久超有向图拉普拉斯算子 $\Delta_p^{a,b}:\Omega_p^a\to\Omega_p^a$ 定义为 b y

$$\Delta_p^{a,b}=d_{p+1}^{a,b}\circ(d_{p+1}^{a,b})^*+(d_p^a)^*\circ d_p^a.$$

我们分别为 $p\geq 0$ 选择 Ω_p^a 和 $\Omega_{p+1}^{a,b}$ 的两组标准正交基。设 B_p^a 和 B^a 分别为 d_p^a 和 d^a 的表示矩阵。那么，拉普拉斯算子 Δ^a 的表示矩阵 $_p{}^b$ 为

$$L_p^{a,b}=(B_{p+1}^{a,b})^T\circ B_{p+1}^{a,b}+B_p^a\circ(B_p^a)^T.$$

L^a 的谱 $_p{}^b$ 表示为

$$\mathbf{Spec}(L_p^{a,b})=\{\lambda_p^{a,b}(1),\lambda_p^{a,b}(2),\ldots,\lambda_p^{a,b}(n)\},\quad p\geq 0,$$

其中 $n=\dim\Omega_p^a$。Spec(L^a, $_p{}^b$) 中最小的非零特征值记为 $\tilde{\lambda}^a$, $_p{}^b$，它与 Cheeger等周常数有关。

根据持久霍奇分解定理 [24], ，有

定理 4.1。 $\Omega_p^a=\ker\Delta^a{}_p{}^b\oplus\mathrm{Im}\ d^a{}_{p+1}^b\oplus\mathrm{Im}(d_p^a)^*$，其中 $\ker\Delta^a{}_p^b\cong H^a{}_p{}^b(\mathcal{P};\mathbb{R})$。

给定一个持久超有向图 $\mathcal{P}:(\mathbb{R},\leq)\to\vec{\mathbf{Hyper}}$，该定理指出，$\Delta^a$ 的零特征值个数 $_p{}^b$ 等于 $(a,\ b)$-持久贝蒂数 β^a, $_p{}^b$。

推论 4.2。 $N(\Delta^a,{}_p{}^b)=\beta^a,{}_p{}^b$，其中 $N(\Delta^a,{}_p{}^b)$ 表示 $\Delta^a,{}_p{}^b$ 的零点数。

如果是 $a=b$，我们有一个分解

$$\Omega_p^a=\ker\Delta_p^a\oplus\mathrm{Im}\,d_{p+1}^a\oplus\mathrm{Im}\,(d_p^a)^*,\tag{6}$$

其中 $\ker\Delta_p^a\cong H_p^a(\mathcal{P};\mathbb{R})$。令 $\pi_p^a:\Omega_p^a\to\ker\Delta_p^a$。那么对于任意元素 $x\in\Omega_p^a$，元素$\psi_p^a(x)$是 x 的调和分量。令 $\mathcal{H}_p^a=\ker\Delta_p^a$。对于实数 $a\leq b$，我们将 $(a,\ b)$-持久调和空间 记为

$$\mathcal{H}_p^{a,b}=\mathrm{Im}\,(\pi_p^b\circ\mathfrak{j}_p^{a,b}:\mathcal{H}_p^a\to\mathcal{H}_p^b).$$

定理 4.3。 对于任意实数 $a \leq b$，有

$$\mathcal{H}_p^{a,b} \cong H_p^{a,b}(\mathcal{P}; \mathbb{R}), \quad p \geq 0.$$

证明。 我们首先证明 $i^a : \mathcal{H}_*^a \hookrightarrow \Omega_*^a$ 是一个拟同构。事实上，对于任意 $x \in \mathcal{H}_*^a$，如果 $i^a(x)$ 是 Ω_*^a 中的边界，那么 x 就是 Ω_*^a 中的边界。由式（6）可得 $x = 0$。因此，$H(i^a) : \mathcal{H}_*^a \to H_*^a(\mathcal{P}; \mathbb{R})$ 是一个单射。另一方面，对于 Ω_*^a 中的任意圈 z，由式（6）可将其写为

$$z = z_0 + d_*^a z_1$$

对某些 $z_0 \in \mathcal{H}_*^a$ 和 $z_1 \in \operatorname{Im} d_*^a$。因此我们有 $H(i^a)[z_0] = [z_0] = [z]$。所以映射 $H(i^a) : \mathcal{H}_*^a \to H_*^a(\mathcal{P}; \mathbb{R})$ 是一个满射。

现在，为了证明我们的定理，只需证明下图可交换。

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H}_p^a & \xrightarrow{\pi_p^b \circ \mathrm{j}_p^{a,b}} & \mathcal{H}_p^b \\ \cong \downarrow & & \downarrow \cong \\ H_p^a(\mathcal{P}; \mathbb{R}) & \xrightarrow{H_p(\mathrm{j}_*^{a,b})} & H_p^b(\mathcal{P}; \mathbb{R}) \end{array}$$

对于任意 $x \in \mathcal{H}_p^a$，我们有

$$H_p(i^b) \circ \pi_p^b \circ \mathrm{j}_p^{a,b}(x) = [\pi_p^b(x)].$$

另一方面，我们得到

$$H_p(\mathrm{j}_*^{a,b}) \circ H_p(i^a)(x) = H_p(\mathrm{j}_*^{a,b} \circ i^a)(x) = [x].$$

由式（6），可写为

$$z = \pi_p^b(x) + d_*^a z_1$$

对于某个 $z_1 \in \operatorname{Im} d_*^a$。由此可得 $H_p(i^b) \circ \pi_p^b \circ \mathrm{j}^{a,}{}_p{}^b(x) = H_p(\mathrm{j}^{a,}{}_*{}^b) \circ H_p(i^a)(x)$。因此，上述图表是交换的。所需结果随即得出。 □

定理 4.3 表明，(a, b)-持久同调与 (a, b)-持久调和空间相一致。更准确地说，同调与调和空间具有相同的持久性。

在本节末尾，值得注意的是，超图同调可以视为方向平凡的超有向图同调，因此，上文讨论的定义和结果也适用于拓扑超图。因此，在此背景下，我们不再赘述持久超图拉普拉斯算子的相关内容。

4.2 基于体积的滤过

本节重点介绍如何利用拓扑超有向图模型构造点集的持久性，该模型涉及考察超边的体积。为说明这一方法，我们给出一个具体的构造示例。

设 $\vec{\mathcal{H}}$ =(V， $\vec{E}$) 是一个超有向图。设 f 是 $\vec{E}$ 上的一个实值函数。对于每个实数 a，我们有一个超有向图 $\vec{\mathcal{H}}^f(a)$ =(V， $\vec{E}(a)$)，其中 $\vec{E}(a)$ $=\{x \in E | f(x) \leq a\}$。因此， $\vec{\mathcal{H}}^f$: (ℝ， ≤) →超 $a \mapsto \vec{\mathcal{H}}^f(a)$ 是持久超有向图同调。于是，我们有由 $\mathcal{H}$ 上的函数 f 给出的持久超有向图同调:

$$H_p^{a,b}(\vec{\mathcal{H}}^f;\mathbb{R}) = \mathrm{Im}\,(H_p(\vec{\mathcal{H}}^f(a);\mathbb{R}) \to H_p(\vec{\mathcal{H}}^f(b);\mathbb{R})).$$

f 在 $\mathcal{H}$ 上的对应持久超有向图拉普拉斯算子可以用类似的方法构造。

现在，令 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$为超有向图同调，其中顶点集 V 是嵌入欧几里得空间 $\mathbb{R}^n$中的点集。对于每条有向超边 $e = (v_0, v_1, \ldots, v_p)$，令 $A = (v_1 - v_0, v_2 - v_0, \ldots, v_p - v_0)$。我们定义体积为

$$\mathbf{vol}\,(e) = \frac{1}{p!}\sqrt{|\det(A^T A)|}, \quad p \geq 1.$$

我们约定，对于任意，vol($\{v_0\} = 0$ $v_0 \in V$ $f\ e = p$ $e^{\frac{1}{p}} =$)。
| $A^T A\,|^{\frac{1}{2p}}$ V $f\ \{v_0\} = 0$
那么，( ) (!vol( )) det( )是在集合P( )上定义的实值函数。在这里，对于任意 $v_0 \in V$，我们设( )。基于体积的(a, b)-持久超有向图同调定义为

$$H_p^{a,b}(\vec{\mathcal{H}}^f;\mathbb{R}) = \mathrm{Im}\,(H_p(\vec{\mathcal{H}}^f(a);\mathbb{R}) \to H_p(\vec{\mathcal{H}}^f(b);\mathbb{R})).$$

第 p 个（a， b）持久超有向图拉普拉斯算子 $\Delta^{a,}{}_{p}{}^{b}$: Ωp($\vec{\mathcal{H}}^f$(a); ℝ) →Ωp($\vec{\mathcal{H}}^f$(a); ℝ) 对于$\vec{\mathcal{H}}^f$ 定义为

$$\Delta_p^{a,b} = d_{p+1}^{a,b} \circ (d_{p+1}^{a,b})^* + (d_p^a)^* \circ d_p^a.$$

其中， d_p^a 和 $d^{a,}{}_{p}{}^{b}$的定义与第 4.1 节相同。

例 4.1。考虑超有向图 $\vec{\mathcal{H}} = (V, \vec{E})$，使得 $V = \{v_0, v_1, v_2\}$ 在欧几里得空间 $\mathbb{R}^2$ 中包含 v_0 =(0， 0) v_1 =(1， 2) v_2 =(2， 1)，并且

$$\vec{E} = \{(v_0), (v_1), (v_2), (v_0v_1), (v_1v_2), (v_0v_2), (v_0v_1v_2)\}.$$

由此可得

$$f((v_0, v_1)) = \sqrt{5}, \quad f((v_0, v_2)) = \sqrt{5}, \quad f((v_1, v_2)) = \sqrt{2}, \quad f((v_0, v_1, v_2)) = \sqrt{3}.$$

于是我们得到如下超图滤子

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{H}}^f(0) &= (V, \{(v_0), (v_1), (v_2)\}),\\
\vec{\mathcal{H}}^f(\sqrt{2}) &= (V, \{(v_0), (v_1), (v_2), (v_1v_2)\}),\\
\vec{\mathcal{H}}^f(\sqrt{3}) &= (V, \{(v_0), (v_1), (v_2), (v_1v_2), (v_0v_1v_2)\}),\\
\vec{\mathcal{H}}^f(\sqrt{5}) &= (V, \{(v_0), (v_1), (v_2), (v_0v_1), (v_1v_2), (v_0v_2), (v_0v_1v_2)\}).
\end{aligned}$$

通过直接计算，我们得到表4中超有向图同调的基于体积的滤子所对应的贝蒂数和谱。

表4：第　4个示例中超有向图基于体积的滤子对应的贝蒂数和谱　.1

$\mathcal{H}^f(t)$	贝蒂数			谱		
	β_0	β_1	β_2	$p=0$	$p=1$	$p=2$
$t=0$	3	0	0	{0,0,0}	none	none
$t=\sqrt{2}$	2	0	0	{0,0,2}	{2}	none
$t=\sqrt{3}$	2	0	0	{0,0,2}	{2}	none
$t=\sqrt{5}$	1	0	0	{0,3,3}	{3,3,3}	{3}

4.3 基于距离的过滤

在本节中，我们将考虑嵌入欧几里得空间中的给定持久性超有向图拉普拉斯算子的基于距离的滤子。这一构造类似于Vietoris-Rips复形上的持久性。本文的应用主要基于基于距离的滤子。

设 $\vec{\mathcal{H}}=(V,\ \vec{E})$ 是一个超有向图同调，其中 V 是欧几里得空间中的点集。对于每个实数 $a\in\mathbb{R}$，我们令 $\mathcal{P}(a)=(V,\ \vec{E}(a))$，其中

$$\vec{E}(a)=\{x\in\vec{E}|\text{ the distance between every pair of points in } x \text{ is at most } a\}.$$

那么，$\mathcal{P}:(\mathbb{R},\ \leq)\ \to\ \vec{\mathbf{Hyper}}^{\hookrightarrow},\ a\mapsto\mathcal{P}(a)$ 是一个持久超有向图同调。类似地，$\vec{\mathcal{H}}$ 的 $(a,\ b)$- 持久超有向图同调定义为

$$H_p^{a,b}(\vec{\mathcal{H}};\mathbb{R})=\mathrm{Im}\,(H_p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})\to H_p(\mathcal{P}(b);\mathbb{R})).$$

此外，我们可以定义第 p 阶 $(a,\ b)$-持久超有向图拉普拉斯算子 $\Delta^{a,\ b}_p:\Omega^p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})\ \to\Omega^p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})$，其定义为

$$\Delta_p^{a,b}=d_{p+1}^{a,b}\circ(d_{p+1}^{a,b})^*+(d_p^a)^*\circ d_p^a.$$

此处，d_p^a 和 $d^{a,\ b}_p$ 的定义与第 4.1 节中的相同。分别为 $\Omega^p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})$ 和 $\Omega^{a\ b}_{p+1},$（其中 $p\geq 0$）选取两族标准正交基。此处，$\Omega^{a\ b}_{p+1}=\{x\in,\ \Omega^{p+1}(\mathcal{P}(b);\mathbb{R})|\partial^b_{p+1}x\in\Omega^p(\mathcal{P}(a);\mathbb{R})\}$。设 B_p^a 和 $B^{a,\ b}_p$ 分别为 d_p^a 和 $d^{a,\ b}_p$ 关于所选标准基的表示矩阵。我们得到 $\Delta^{a,\ b}_p$ 的表示矩阵如下：

$$L_p^{a,b}=(B_{p+1}^{a,b})^T\circ B_{p+1}^{a,b}+B_p^a\circ(B_p^a)^T.$$

相应的贝蒂数 $\beta^{a,\ b}_p$等于 $L^{a,\ b}_p$ 的零特征值个数。此外，谱可按升序排列为

$$\mathbf{Spec}(L_p^{a,b})=\{\lambda_p^{a,b}(1),\lambda_p^{a,b}(2),\ldots,\lambda_p^{a,b}(n)\}.$$

特别地，费德勒值 $\lambda^{a,\ b}_p(2)$，即 $L^{a,\ b}_p$ 的第二小拉普拉斯特征值，是许多领域中的一项重要特征。

如图3所示，超图同调（$\mathcal{H}$）和超有向图同调（$\vec{\mathcal{H}}$）定义在欧几里得空间中相同的顶点集 $V=\{0,1,2,3,4,5\}$ 上。距离

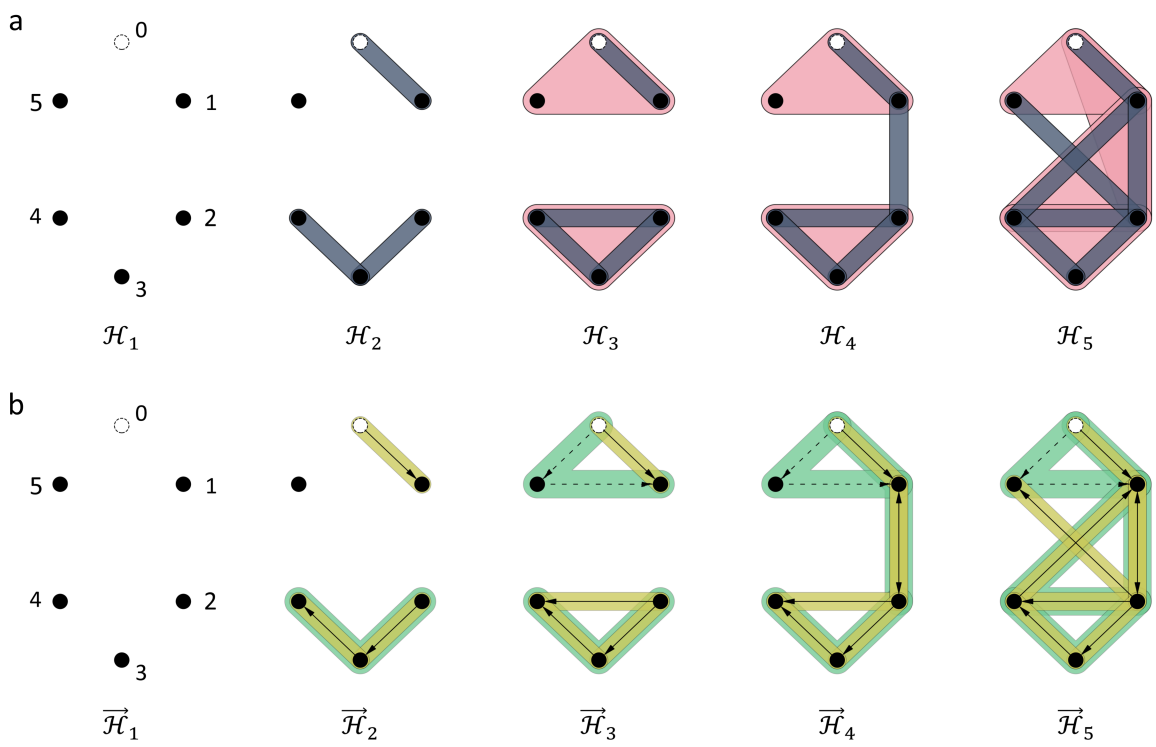


图3：**a** 6顶点系统（$\vec{\mathcal{H}}$）的持久超图。相关顶点之间的距离为$D_{45} = D_{12} = 6$、 $D_{05} = D_{01} = D_{23} = D_{34} = \sqrt{5}$和 $D_{24} = D_{15} = 4$。**b** 6顶点系统的持久超有向图（$\vec{\mathcal{H}}$）。对应顶点之间的距离与**a**相同。

i第 j个顶点之间的距离记为 D_{ij}。这里，我们有 $D_{45} = D_{12} = 6$、 $D_{05} = D_{01} = D_{23} = D_{34} = \sqrt{5}$和 $D_{24} = D_{15} = 4$。本例中预先定义了最大的超图同调（$\mathcal{H}_5$）和最大的超有向图同调（$\vec{\mathcal{H}}_5$）。 $\mathcal{H}_5$ 的超边集与例2.2相同。图3, $\mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_5$ 中的**a** 表示基于距离的滤子下的超图同调，相应的过滤参数分别为0、 $\sqrt{5}$、4、6和 $\sqrt{53}$。图3, $\vec{\mathcal{H}}_2, \ldots, \vec{\mathcal{H}}_5$ 中的**b** 表示基于距离的滤子下的超有向图同调。 $\vec{\mathcal{H}}_n$ ($n = 1,2,3,4,5$)的过滤参数与 $\mathcal{H}_n$对应的过滤参数相同。

图4展示了图3**a** 和图3**b**中对象对应的持久超图拉普拉斯算子和持久超有向图拉普拉斯算子。对于本例中的6顶点系统，在持久超图同调和持久超有向图同调的整个滤子过程中， β_0 和 β_2 始终保持不变， β_0 则随着过滤参数增大而减小， β_2 始终为0。持久超图同调的 β_1 始终为0；而当过滤参数从6开始时，持久超有向图同调的 β_1 从0变为6，并持续至结束，这意味着相应的持久超有向图同调中形成了一个一维环。对于两类持久拓扑拉普拉斯算子的非调和谱，如图4下图所示。除 λ_2外， λ_0 和 λ_1 在参数从6开始时都会产生不同的特征值，相应的持久超图拉普拉斯算子和持久超有向图拉普拉斯算子分别为

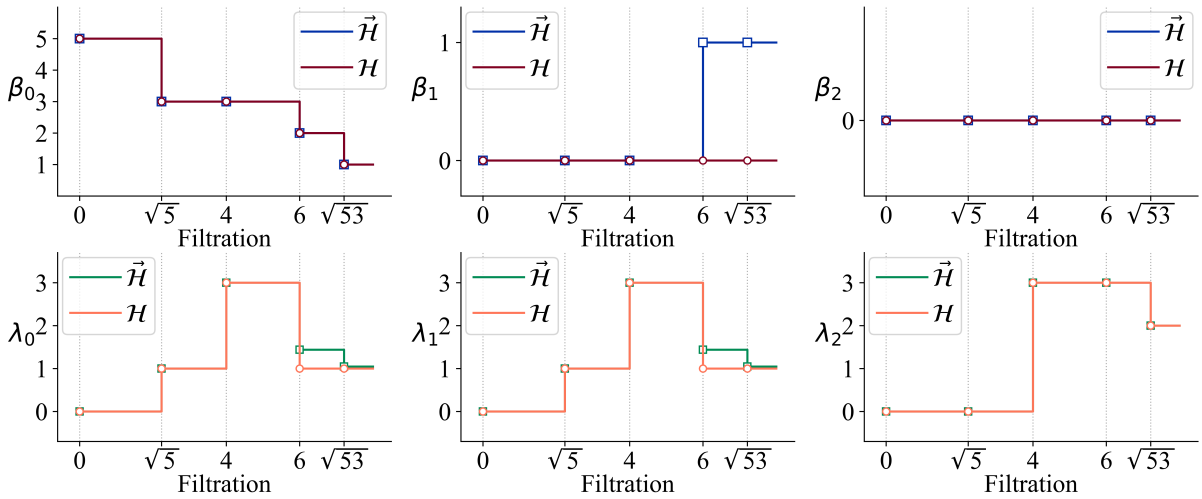


图4：持久超图拉普拉斯算子与持久超有向图拉普拉斯算子的比较。每个子图中的空心方形标记（$\vec{\mathcal{H}}$）和圆形标记（$\mathcal{H}$）分别对应图3中的五个过滤阶段$\vec{\quad}$ $\vec{\quad}$ $\vec{\quad}$，即 $\mathcal{H}_1$、 $\mathcal{H}_2$、...、 $\mathcal{H}_5$。以及 $\mathcal{H}_1$、 $\mathcal{H}_2$、...、 $\mathcal{H}_5$。

不同的特征值，相应的持久超图拉普拉斯算子和持久超有向图拉普拉斯算子分别为 $\mathcal{H}_4$ 和 $\mathcal{H}_4$。对于持久超图拉普拉斯算子，当过滤参数为6时，新生成了1-超边 $\{1,2\}$；对于持久超有向图拉普拉斯算子，则生成了有向1-超边(12)和(21)，以及有向2-超边(012)。值得注意的是，对于持久超有向图拉普拉斯算子，(12)和(21)是两个不同的有向1-超边，而持久超图拉普拉斯算子只有1-超边 $\{1,2\}$，这表明持久超有向图拉普拉斯算子能够区分顶点方向并包含更丰富的信息。

为了说明持久拓扑拉普拉斯算子比持久拓扑同调提供更多信息，我们在图5a 和图5c中展示了另一个例子。我们使用一个由6个顶点和正六边形构成的系统，其边长为 $D_{01} = D_{12} = D_{23} = D_{34} = D_{45} = D_{50} = 2$。该系统的最大超图同调（$\mathcal{H}_4$）和超有向图同调（$\vec{\mathcal{H}}_4$）与图3中的一致。图5b展示了维度为0、1和2的持久超图拉普拉斯算子的特征，其中绿色线条表示相应过滤参数下的贝蒂数，橙色表示相应过滤参数下非调和谱的最小特征值。我们观察到，当过滤参数为$2\sqrt{2}$时，相应的贝蒂数无法区分从 $\mathcal{H}_2$ 到 $\mathcal{H}_3$的变化，而 λ_0、 λ_1和 λ_2 可以识别出这些差异。这表明，仅使用调和谱（即贝蒂数）有时会忽略滤子过程中结构内部的变化，而非调和谱能够更灵敏地捕捉这些变化。我们还在图5d中发现了持久超有向图拉普拉斯算子特征的类似现象。当过滤参数增大到$2\sqrt{2}$时，有向边（5，1）和

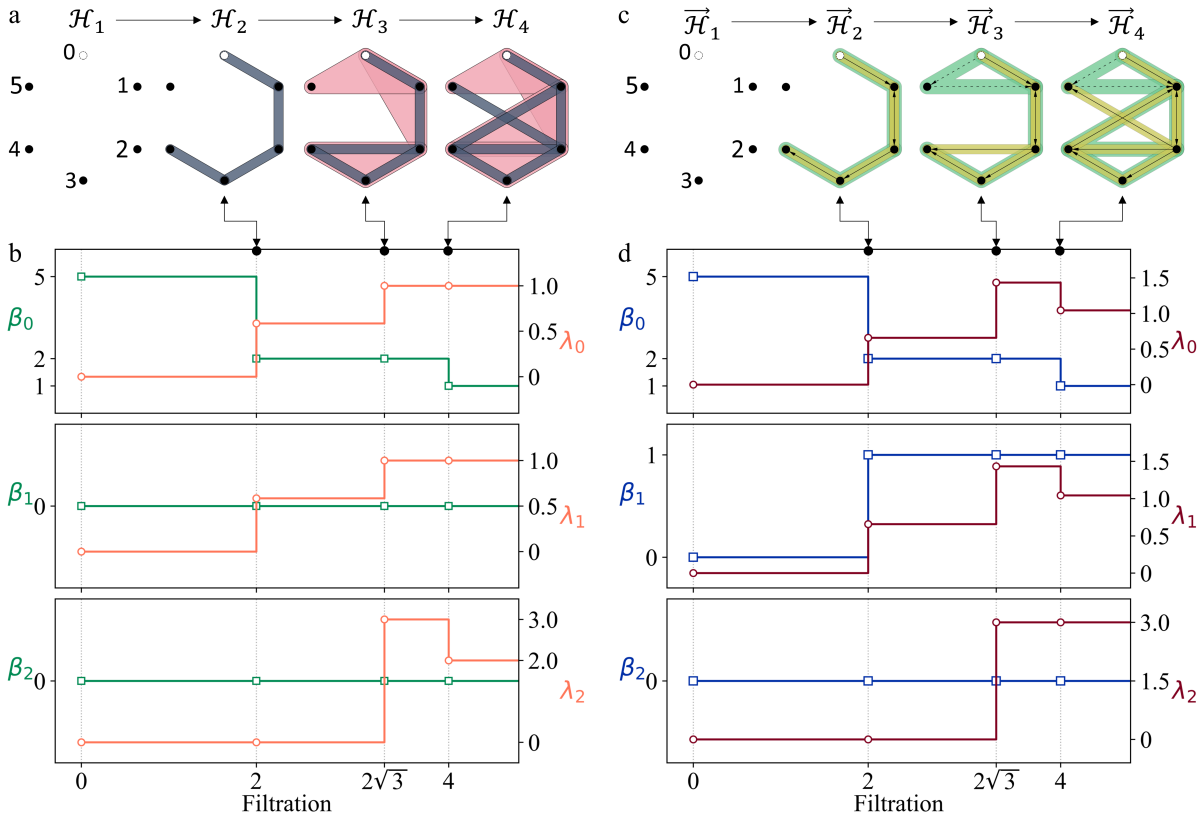


图5：**a** 6顶点系统（$\mathcal{H}$）的持久超图拉普拉斯算子。所有顶点均取自边长为 2 的正六边形的顶点，即 $D_{01} = D_{12} = D_{23} = D_{34} = D_{45} = D_{50} = 2$。**b** 持久超图拉普拉斯算子的贝蒂数（$\beta_0$、 β_1 和 β_2）与非调和谱的最小特征值（λ_0、 λ_1 和 λ_2）的比较。**c** 6顶点系统（$\vec{\mathcal{H}}$）的持久超有向图拉普拉斯算子。相应顶点之间的距离与**a**中的相同。**d** 持久超有向图 $\vec{\ }$ 拉普拉斯算子的贝蒂数（β_0、 β_1 和 β_2）与非调和谱的最小特征值（λ_0、 λ_1 和 λ_2）的比较。相应的贝蒂数无法体现从 $\mathcal{H}_3$ 到 $\mathcal{H}_4$ 以及从 $\mathcal{H}_3$ 到 $\mathcal{H}_4$ 的变化，而 λ_0、 λ_1 和 λ_2 可以捕捉到这种差异。

（2，4）形成。然而，相应的贝蒂数无法反映连通性的变化，而 λ_0、 λ_1和 λ_2 可以检测到这些变化。

5 应用

在本节中，我们展示如何应用持久超有向图拉普拉斯算子分析蛋白质-配体系统。具体而言，我们以蛋白质数据库（PDB）中编号为 1a99 的蛋白质-配体复合物结构为案例研究。如图6b所示，该复形包含一个小分子配体 $C4H14N_2^{2+}$。为便于展示蛋白质-配体结合，我们仅分析位于距配体 4 $^{\circ}$A 范围内的蛋白质碳原子，如图6a所示。

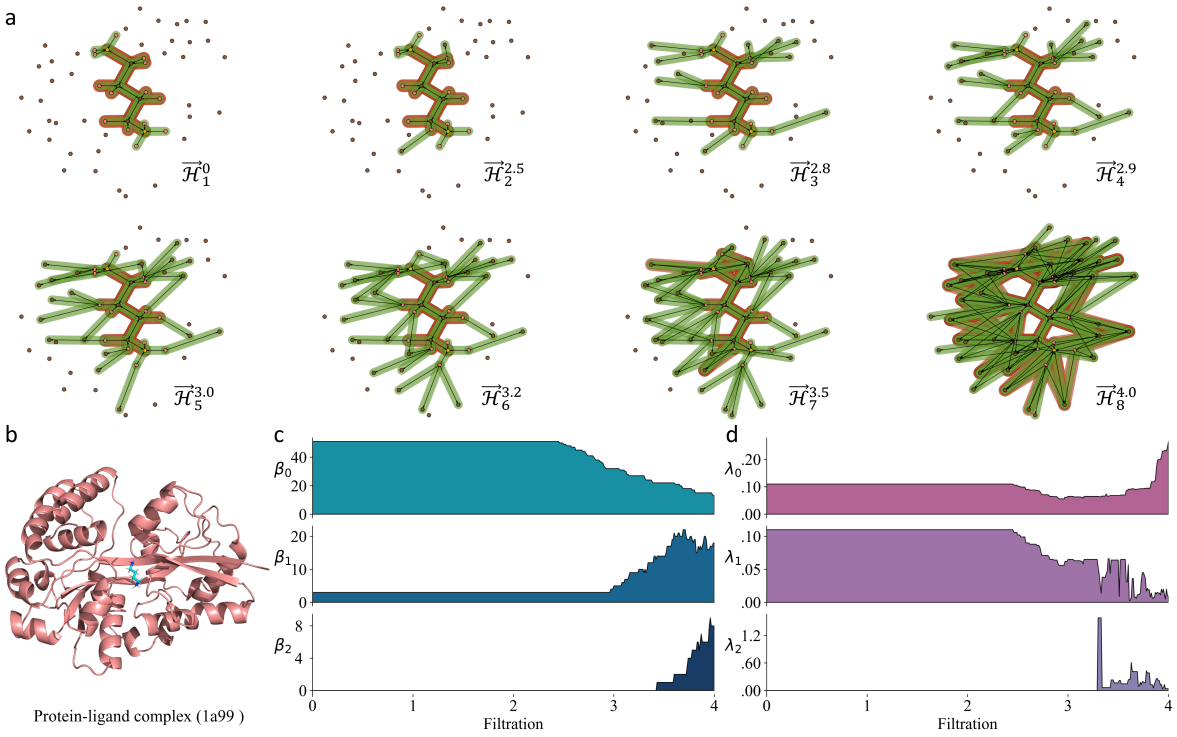


图6：蛋白质-配体复合物（PDB编号：1a99）的持久超有向图拉普拉斯算子分析示意图。**a** 过滤诱导的拓扑超有向图示意图。对于蛋白质结构（棕色圆点），仅考虑距离配体 4 $^{\circ}$A 以内的碳原子。绿色线段表示有向 1-超边，橙色线表示有向 2-超边。**b** 蛋白质-配体复合物的三维结构。**c** 蛋白质-配体复合物的持久超有向图拉普拉斯算子的贝蒂数 β_n (n=0,1,2) 及非调和谱 λ_n (n=0,1,2) 的最小特征值。

图6展示了使用持久超有向图拉普拉斯算子对蛋白质-配体复合物（PDB编号：1a99）进行的分析。在此分析中，我们仅关注配体与周围蛋白质碳原子之间的相互作用，并用有向边表示。每条边的方向由相关原子的电负性决定。具体而言，电负性较低的原子指向电负性较高的原子；若两个原子的电负性相同，则以方向相反的两条边连接。对于该蛋白质-配体复合物，我们可确定以下原子方向：H(2.2) $\rightarrow$ S(2.44) $\rightarrow$ C(2.5) $\rightarrow$ N(3.07) $\rightarrow$ O(3.5)，括号中的数值表示原子的电负性。

为更好地捕捉蛋白质与配体之间的相互作用，我们排除了蛋白质内部的相互作用。然而，如图6a的第一个子图所示，我们纳入了配体内部的共价键合关系。随后，持久超有向图拉普拉斯算子分析揭示了复形中的重要结构变化，如图6c和6d所示的持久贝蒂数和非调和持久特征值所展示的那样。这些结果表明，在捕捉复形的结构变化方面，非调和持久谱比持久贝蒂数或调和持久谱包含更多信息

。因此，持久超有向图拉普拉斯算子为数据分析提供了更强大的工具，尤其是在与机器学习和深度学习算法结合使用时，正如文献 [26]中先前讨论的那样。

图中的有向 0-超边是离散点，有向 1-超边由带绿色背景的边表示，而有向 2-超边则由带橙色背景的边标出。值得注意的是，有向 1-超边表示两个按固定顺序排列的不同顶点，有向 2-超边表示三个按固定顺序排列的不同顶点。因此，在我们的持久超有向图拉普拉斯理论中，由两个顶点构成的闭环（例如 $1\to2\to1$）将被视为一条有向 1-超边。这也是它与持久路径拉普拉斯理论 [32], 的不同之处；在后者中，闭环可以生成任意高维的路径。图6a 展示了滤过诱导的持久超有向图 $\vec{\mathcal{H}}$，即 $\vec{\mathcal{H}}_1^0$、 $\vec{\mathcal{H}}_2^{2.5}$、 $\vec{\mathcal{H}}_3^{2.8}$、 $\vec{\mathcal{H}}_4^{2.9}$、 $\vec{\mathcal{H}}_5^{3.0}$、 $\vec{\mathcal{H}}_6^{3.2}$、 $\vec{\mathcal{H}}_7^{3.5}$ 和 $\vec{\mathcal{H}}_8^{4.0}$，其中上标为相应的过滤参数。

图6c 和图6d 分别展示了由持久超有向图拉普拉斯算子得到的持久贝蒂数和非调和持久特征值。在此分析中，选取拉普拉斯矩阵的最小非零特征值来表示非调和谱信息。结果表明，持久贝蒂数和非调和持久特征值呈现出完全不同的特征。例如，当过滤参数约为 2.5时（对应于图6a中的第一个和第二个图表），配体与蛋白质中的碳原子相连，形成新的有向 1-超边。此时，复形的有向 0-超边数量减少，持久贝蒂数 β_0 随之减少。然而，更高维的贝蒂数 β_1 和 β_2保持不变。相比之下，非调和持久谱的 λ_0 和 λ_1 显著下降，表明形成了大型连通复形。此外，发生变化的β_2 范围小于 λ_2的范围。

这些结果表明，非调和持久谱比持久贝蒂数或调和持久谱包含更多信息。因此，与持久超有向图同调相比，持久超有向图拉普拉斯算子能更好地捕捉结构变化。

6 结论

既然超图是图的一种推广，那么将超有向图视为有向图（有向图）的一种推广也很自然。然而，在尝试将拓扑结构嵌入超有向图时，会出现一个问题。

在这项工作中，我们引入超有向图同调（即拓扑超有向图）的概念，将拓扑信息嵌入超有向图。拓扑超有向图中有向超边固有的顶点顺序能够区分不同的顶点集合，从而可以区分给定顶点集的所有可能排列。因此，拓扑超有向图可以视为拓扑超图的一种推广。我们还提出了一种将超有向图同调化简为超图

同调的方法。

我们提出了一组新的拉普拉斯方法，称为拓扑超有向图拉普拉斯算子，它们是超有向图同调的一种推广。这些拉普拉斯算子既能提供调和谱（与拓扑不变量或贝蒂数相关），也能提供非调和谱。

此外，我们通过滤子提出了持久超有向图同调和持久超有向图拉普拉斯算子。持久超有向图拉普拉斯算子不仅能返回持久超有向图同调的持久拓扑不变量，还能提供非调和持久谱，以捕捉数据在不同尺度下的同伦形状演化。我们通过大量示例展示了这些拓扑方法的实用性。

最后，我们通过刻画蛋白质与配体之间的相互作用，探索持久超有向图拉普拉斯算子的应用。我们相信，这些提出的方法，包括超有向图同调、拓扑超有向图拉普拉斯算子、持久超有向图同调和持久超有向图拉普拉斯算子，为拓扑数据分析（TDA）提供了一套强大的新工具。我们预计，将这些方法与机器学习和深度学习算法相结合，将对数据科学产生重大影响。

7 致谢

本研究部分得到了 NIH 项目资助（R01GM126189 和 R01AI164266）、NSF 项目资助（DMS-2052983、DMS-1761320 和 IIS-1900473）、NASA 项目资助（80NSSC21M0023）、MSU基金会、Bristol-Myers Squibb 65109 以及 Pfizer 的支持。Liu 和 Wu 的研究得到了国家自然科学基金委员会（NSFC 项目编号：11971144）、河北省高层次科学研究基金以及 BIMSA 启动研究基金的支持。

参考文献

[1] Tomasz Kaczynski、Konstantin Michael Mischaikow 和 Marian Mrozek。《计算同调》，第 3 卷。Springer，2004 年。[2] Jacob Townsend、Cassie Putman Micucci、John H Hymel、Vasileios Maroulas 和 Konstantinos D Vogiatzis。利用持久同调表示分子结构，以应用于化学中的机器学习。*Nature Communications*, 11(1):3230，2020 年。[3] Zixuan Cang 和 Guo-Wei Wei。TopologyNet：基于拓扑的深度卷积神经网络和多任务神经网络，用于生物分子性质预测。*PLOS Computational Biology*，13(7):e1005690，2017 年。

[4] Afra Zomorodian 和 Gunnar Carlsson。计算持久同调。载于第二十届计算几何年度研讨会论文集，第 347–356 页，2004 年。[5] Herbert Edelsbrunner、John Harer 等。持久同调综述。当代数学，453(26):257–282，2008 年。[6] Peter Bubenik 和 Pawe-l D-lotko。用于拓扑统计的持久性景观工具箱。符号计算杂志，78:91–114，2017 年。[7] Gunnar Carlsson。拓扑与数据。美国数学会通报，46(2):255–308，2009 年。[8] Zixuan Cang 和 Guo-Wei Wei。面向多组分异质信息数据的持久上同调。*SIAM* 数据科学数学杂志，2(2):396–418，2020 年。[9] Gustav Kirchhoff。关于研究线性电流分布时所导出的方程组的求解。物理学年鉴，148(12):497–508，1847 年。[10] Miroslav Fiedler。图的代数连通度。捷克斯洛伐克数学杂志，23(2):298–305，1973 年。[11] Anil Nirmal Hirani。《离散外微积分》。加州理工学院，2003 年。[12] Mathieu Desbrun、Anil N Hirani、Melvin Leok 和 Jerrold E Marsden。离散外微积分。*arXiv* 预印本 *math/0508341*，2005 年。[13] Douglas N Arnold、Richard S Falk 和 Ragnar Winther。有限元外微积分、同调技术及其应用。数值学报，15:1–155，2006 年。[14] Guo-Wei Wei。拓扑数据分析：聆听鼓与钟的形状。*arXiv* 预印本 *arXiv:2301.05025*，2023 年。[15] Jakob Hansen 和 Robert Ghrist。迈向胞腔层的谱理论。应用与计算拓扑杂志，3:315–358，2019 年。[16] Andr´e Gomes 和 Daniel Miranda。局部有限有向图的路径上同调、霍奇定理与 p-惰性随机游走。*arXiv* 预印本 *arXiv:1906.04781*，2019 年。[17] Alexander Grigor'yan、Yong Lin、Yuri Muranov 和 丘成桐。路径复形与有向图的同调。*arXiv* 预印本 *arXiv:1207.2834*，2012 年。[18] Alexander Grigor'yan、Yong Lin、Yu Yuri Muranov 和 丘成桐。路径复形及其同调。数学科学杂志，248(5):564–599，2020 年。

[19] Dong Chen、Jian Liu、Jie Wu、Guo-Wei Wei、Feng Pan 和 Shing-Tung Yau。分子与材料科学中的路径拓扑。《物理化学快报》，14：954–964，2023年。[20] Danijela Horak 和 J¨urgen Jost。单纯复形上的组合拉普拉斯算子的谱。《数学进展》，244：303–336，2013年。[21] Jiahui Chen、Rundong Zhao、Yiying Tong 和 Guo-Wei Wei。演化德拉姆-霍奇方法。*arXiv* 预印本 *arXiv:1912.12388*，2019。[22] Rui Wang、Duc Duy Nguyen 和 Guo-Wei Wei。持久谱图。*arXiv* 预印本 *arXiv:1912.04135*，2019。[23] Facundo M´emoli、Zhengchao Wan 和 Yusu Wang。持久拉普拉斯算子：性质、算法及影响。*SIAM* 数据科学数学杂志，4(2)：858–884，2022年。[24] Jian Liu、Jingyan Li 和 Jie Wu。持久拉普拉斯算子的代数稳定性。*arXiv* 预印本 *arXiv:2302.03902*，2023年。[25] Zhenyu Meng 和 Kelin Xia。用于蛋白质-配体结合亲和力预测的基于持久谱的机器学习（Perspect ML）。《科学进展》，7(19)：eabc5329，2021年。[26] Jiahui Chen、Yuchi Qiu、Rui Wang 和 Guo-Wei Wei。持久拉普拉斯算子促使 Omicron BA. 4 和 BA. 5 演化为新的优势变异株。《生物学与医学中的计算机》，151：106262，2022年。[27] JunJie Wee 和 Kelin Xia。用于蛋白质-蛋白质结合亲和力预测的基于持久谱的集成学习（Perspect-EL）。《生物信息学简报》，23(2)，2022年。[28] Yuchi Qiu 和 Guo-Wei Wei。持久谱理论指导的蛋白质工程。《自然·计算科学》，页码1–15，2023年。[29] Rui Wang、Rundong Zhao、Emily Ribando-Gros、Jiahui Chen、Yiying Tong 和 Guo-Wei Wei。HERME：持久谱图软件。《数据科学基础》（密苏里州斯普林菲尔德），3(1)：67，2021年。[30] Jiahui Chen、Rundong Zhao、Yiying Tong 和 Guo-Wei Wei。演化德拉姆-霍奇方法。《离散与连续动力系统：*B*辑》，26(7)：3785，2021年。[31]Xiaoqi Wei 和 Guo-Wei Wei。持久层拉普拉斯算子。*arXiv* 预印本 *arXiv:2112.10906*，2021年。[32] Rui Wang 和 Guo-Wei Wei。持久路径拉普拉斯算子。《数据科学基础》，5(1)：26–55，2023年。

[33] Bernardo Ameneyro、Vasileios Maroulas 和 George Siopsis。量子持久同调。*arXiv* 预印本 *arXiv:2202.12965*，2022年。[34] Ri Qu、Juan Wang、Zong-shang Li 和 Yan-ru Bao。将超图编码为量子态。《物理评论 *A* 》，87(2)：022311，2013 年。[35] Thomas Eiter 和 Georg Gottlob。超图横截计算及其在逻辑和人工智能中的相关问题。在《人工智能逻辑：第八届欧洲会议，*JELIA 2002*，意大利科森扎，*2002*年*9*月*23*日至*26*日，会议论文集 *8*》中，页码549–564。Springer，2002年。[36] Yaroslav Akhremtsev、Tobias Heuer、Peter Sanders 和 Sebastian Schlag。工程化一种直接的 k路超图划分算法。在《*2017*年第十九届算法工程与实验研讨会（*ALENEX*）论文集》中，页码28–42。工业与应用数学学会，2017年。[37] Shiquan Ren、Chengyuan Wu 和 Jie Wu。加权超图的霍奇分解。*arXiv* 预印本 *arXiv:1805.11331*，2018年。[38] Stephane Bressan、Jingyan Li、Shiquan Ren 和 Jie Wu。超图的嵌入同调及其应用。《亚洲数学杂志》，23(3)：479–500，2019年。[39] Shiquan Ren、Chong Wang、Chengyuan Wu 和 Jie Wu。超图的离散莫尔斯理论。*arXiv* 预印本 *arXiv:1804.07132*，2018年。[40] Jelena Grbic、Jie Wu、Kelin Xia 和 Guowei Wei。数据科学拓扑方法的若干方面。《数据科学基础》，2022年。[41] Xiang Liu、Huitao Feng、Jie Wu 和 Kelin Xia。用于蛋白质-配体结合亲和力预测的基于持久谱超图的机器学习（PSH-ML）。《生物信息学简报》，22(5)：bbab127，2021年。[42] Giorgio Gallo、Giustino Longo、Stefano Pallottino 和 Sang Nguyen。有向超图及其应用。《离散应用数学》，42(2-3)：177–201，1993年。[43] C. Berge 和 E. Minieka。《图与超图》。《图与超图》。North-Holland Publishing Company，1973年。ISBN 9780444103994。URL https://books.google.com.sg/books?id=X32GlVfqXjsC。[44] W D¨orfler 和 DA Waller。超图的范畴论方法。《数学档案》，34(1)：185–192，1980年。[45] Giorgio Ausiello 和 Luigi Laura。有向超图：引言与基本算法综述。《理论计算机科学》，658：293–306，2017年。

[46]Giorgio Gallo 和 Maria Grazia Scutella。有向超图作为建模范式。经济与社会科学数学杂志，21(1):97–123，1998。[47] Mysore Ramaswamy、Sumit Sarkar 和 Ye-Sho Chen。使用有向超图验证基于规则的专家系统。*IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineer-ing*，9(2):221–237，1997。[48] Yuri Muranov、Anna Szczepkowska 和 Vladimir Vershinin。有向超图的路径同调。*arXiv* 预印本 *arXiv:2109.09842*，2021年。[49] Mayur Thakur 和 Rahul Tripathi。有向超图中的线性连通性问题。《理论计算机科学》，410(27-29):2592–2618，2009。[50] Claude Berge。超图：有限集组合学，第45卷。Elsevier，1984。[51] Alexander Grigor'yan、Yuri Muranov 和 丘成桐。有向图同调与 K¨unneth 公式。*Communications in Analysis and Geometry*，25(5):969–1018，2017。[52] Frank Harary 和 Edgar M Palmer。图枚举。Elsevier，2014。