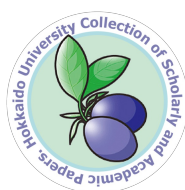




HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	応用数理サマーセミナー 2007 計算ホモロジーとその応用
Author(s)	石村, 直之; 坂上, 貴之; 櫻井, 鉄也 他
Citation	Hokkaido University technical report series in mathematics, 124, 1
Issue Date	2007-01-01
DOI	https://doi.org/10.14943/30329
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/32354
Type	departmental bulletin paper
File Information	20080308_02.pdf



応用数理サマーセミナー 2007

計算ホモロジーとその応用

日本応用数理学会・北海道大学数学 COE 共催

組織委員：石村 直之，坂上 貴之，櫻井 鉄也
長山 雅晴，奈良 高明，降旗 大介
松尾 宇泰

Series #124. September, 2007

HOKKAIDO UNIVERSITY
TECHNICAL REPORT SERIES IN MATHEMATICS

- #102 H. Kubo, T. Ozawa and K. Yamauchi, SAPPORO GUEST HOUSE SYMPOSIUM ON MATHEMATICS 20 "Nonlinear Wave Equations", 68 pages. 2005.
- #103 A. Miyachi and K. Tachizawa, Proceedings of the Harmonic Analysis and its Applications at Sapporo, 107 pages. 2005.
- #104 S. Izumiya (Ed), Y. Numata, J. Ishimoto, I. Sasaki, Y. Nagase and M. Yamamoto, 第2回数学総合若手研究集会 - The 2nd COE Conference for Young Researchers -, 274 pages. 2006.
- #105 T. Yamamoto, O. Hatori, M. Hayashi and T. Nakazi (Eds.), 第14回関数空間セミナー, 112 pages. 2006.
- #106 Y. Daido, 学位論文 Doctoral thesis "RECONSTRUCTION OF INCLUSIONS FOR THE INVERSE BOUNDARY VALUE PROBLEM OF HEAT EQUATION USING PROBE METHOD", 68 pages. 2006.
- #107 T. Yamamoto, 学位論文 Doctoral thesis "Singular fibers of two colored differentiable maps and cobordism invariants", 333 pages. 2006.
- #108 S. Izumiya, Singularity theory of smooth mappings and its applications: a survey for non-specialists, 41 pages. 2006.
- #109 J. Cheng, B. Y. C. Hon, J. Y. Lee, G. Nakamura and M. Yamamoto, Inverse Problems in Applied Sciences - towards breakthrough - Organizing Committee, 96 pages. 2006.
- #110 K. Matsumoto, 超幾何関数早春学校, 87 pages. 2006.
- #111 T. Ozawa, Y. Giga, S. Jimbo, G. Nakamura, Y. Tonegawa, K. Tsutaya and T. Sakajo, The 31th Sapporo Symposium on Partial Differential Equations, 91 pages. 2006.
- #112 H. Okamoto, D. Sheen, Z. Shi, T. Ozawa, T. Sakajo and Y. Chen, Book of Abstracts of the First China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics & The Second East Asia SIAM Symposium, 78 pages. 2006.
- #113 N. Ishimura, T. Ishiwata, T. Sakajo, T. Sakurai, M. Nagayama, T. Nara, K. Hayami, D. Furihata and T. Matsuo, 応用数理サマーセミナー「確率微分方程式」, 116 pages. 2006.
- #114 T. Abe, 第8回 COE 研究員連続講演会『超平面配置と対数的ベクトル場の幾何』, 23 pages. 2006.
- #115 H. Kubo and T. Ozawa, Sapporo Guest House Symposium on Mathematics 22 "Nonlinear Wave Equations", 67 pages. 2006.
- #116 S. Okabe, 第9回 COE 研究員連続講演会『ある束縛条件下における平面弾性閉曲線のダイナミクス』, 31 pages. 2006.
- #117 A. Suzuki, T. Ito, N. Sato, K. Shibuya, D. Hirose, Y. Maekawa and K. Matsumoto, 第3回数学総合若手研究集会 - 他分野との学際的交流を目指して, 264 pages. 2007.
- #118 T. Yamamoto, Y. Sato, N. Kataoka and H. Takagi, Proceedings of the conference on New Aspects of High-dimensional Nonlinear Dynamics, 73 pages. 2007.
- #119 T. Yamamoto and T. Nakazi, 第15回関数空間セミナー報告集, 82 pages. 2007.
- #120 K. Hirata, 第10回 COE 研究員連続講演会『正值調和関数に対する Martin 積分表現と非線形楕円型方程式の正值解の存在』, 25 pages. 2007.
- #121 K. Izuchi, 第12回 COE 研究員連続講演会『I) Segal-Bargmann 空間の巡回ベクトルについて II) 2重単位開円板上の逆シフト不変部分空間上のクロス交換子について』, 18 pages. 2007.
- #122 T. Ozawa, Y. Giga, S. Jimbo, G. Nakamura, Y. Tonegawa, K. Tsutaya and T. Sakajo, The 32nd Sapporo Symposium on Partial Differential Equations, 73 pages. 2007.
- #123 H. Kubo, T. Ozawa, H. Takamura and K. Tsutaya, Nonlinear Wave Equations, 53 pages. 2007.

応用数理サマーセミナー 2007
計算ホモロジーとその応用

札幌, 2007

日本応用数理学会・北海道大学数学 COE 共催

序

昨年度、日本応用数理学会は北大 COE との共催で、学生や若手研究者向けのサマーセミナー「確率微分方程式」を開催し、大好評のうちに終えることができました。

本年度のサマーセミナーでは、数学の一分野である力学系理論の研究者が中心になって近年開発されたソフトウェアパッケージ「Computational Homology(計算ホモロジー)」を取り上げます。

本ソフトウェアは与えられたオブジェクトの持つ位相量(連結成分の数、穴の数など)を計算機上で計算するものですが、数学以外の様々な分野の中で得られている大量の画像データから有益なトポロジカルな情報を抽出するのに大きな威力を発揮すると期待されています。

このパッケージは数学的予備知識があまりなくても利用は可能ですが、その強力な機能を有効に利用するにはトポロジーとその代数的表現であるところのホモロジーに関する基礎的な数学的知識が欠かせません。

そこで本セミナーではまずは数学の非専門家に向けたホモロジーに関する数学的基礎を解説いただき、その後本ソフトウェア利用に関するチュートリアルセッション、そしてこれらのソフトを使って実際に研究されている先生による具体的応用例の紹介までを一貫して行います。特にチュートリアルセッションでは本ソフトウェアの開発者の一人である Paweł Pilarczyk 博士による詳細な解説があり、参加者それぞれに向けた丁寧な指導が行われます。

組織委員：石村 直之, 坂上 貴之, 櫻井 鉄也, 長山 雅晴, 奈良 高明, 降旗 大介, 松尾 宇泰

プログラム

9月12日(水)

- 13:00-13:30 参加受付, ガイダンス
- 13:30-16:00 國府 寛司 (京都大学) 「計算ホモロジーへの誘い」
- 16:30-17:30 平岡 裕章 (広島大学) 「CHomP ソフトウェア入門 I」
- 17:30- 事前インストールが出来なかった参加者へ個別対応

9月13日(木)

- 9:30-10:30 平岡 裕章 (広島大学) 「CHomP ソフトウェア入門 II」
- 11:00-14:00 チュートリアルセッション
- 14:00-14:45 Pawel Pilarczyk (京都大学) 「CHomP ソフトウェア入門 III」
- 15:00-17:00 荒井 迅 (京都大学) 「計算ホモロジー理論の力学系への応用」
- 18:30- 懇親会

9月14日(金)

- 9:30-11:30 寺本 敬 (千歳科学技術大) 「複雑な空間パターンへの計算ホモロジーの応用」
- 11:30-13:00 頃 PC セッション

第1章 計算ホモロジーへの誘い

國府寛司
京都大学理学研究科

1 はじめに

ホモロジーは、幾何的対象とその性質をより計算しやすい代数的情報に変換する操作である。ホモロジーは、幾何的対象である図形が

- つながっているか
- つながっていなければ、いくつの部分（連結成分）に分かれているか
- 各部分には穴（トンネル）が開いているか
- 各部分には空洞（中空の部分）があるか

などの情報を（例えばベクトル空間のような）代数的な形で与える。ベクトル空間であるとする、その次元が連結成分の数、トンネルの数、空洞の数、などを与える。

計算ホモロジー理論は、対象となる幾何的情報を計算機上で扱いやすい形で表現し、計算機を用いてホモロジーを求めるためのノウハウの蓄積のことをいう。それは

- (1) 幾何的情報を計算機で扱えるようにするための考え方・方法
- (2) それを計算機で実際に扱うソフトウェア
- (3) 様々な問題へのホモロジー計算の有用性・可能性の発掘

の3つの部分からなる。現在のところ、たとえば：

(1) についてはホモロジーの一般論では、幾何と代数をつなぐための中間生成物である鎖複体と呼ばれるものを構築することが必要である。それには状況、目的によりいろいろな構築の仕方があるが、通常は三角形、四角錐を標準的構成要素とする単体複体 (simplicial complex) もしくは正方形や立方体を標準的構成要素とする方体集合 (cubical complex) の2つの方法がある。数学的には単体複体は基本的でホモロジーに関する入門書にはほぼ確実に取り扱われている。例えば田村 [4], 榊田 [2], 瀬山 [3] など。一方で方体集合は（考え方は単体複体と良く似ているが）Kaczynski 他 [1] で初めて本格的に扱われた計算ホモロジーに適した鎖複体の構成方法である。平岡・Pilarczyk の講義（第2章）ではこれが基本的な計算対象となる。

(2) については、平岡・Pilarczyk の講義（第2章）で解説される CHomP [5] と呼ばれるソフトウェアのパッケージがある。これは方体集合のデータからホモロジーを計算するソ

フトウェアである。他にもホモロジー計算のソフトはいくつかあるが、筆者はあまり良く知らない。

(3) が計算ホモロジーの主目的である。つまり図形のホモロジーを計算することによって何かを理解し、それを何かに役立てたいということである。どのようなことに利用できるかは利用する人のアイディア次第であり、その意味で無限の可能性があると信じている。

このサマーセミナーではそのような応用例の一部を荒井の講義 (第 3 章) と寺本・Gameiro の講義 (第 4 章) で紹介する。第 3 章では常微分方程式や写像の反復合成で与えられる力学系の時間発展の様子を調べるために、ホモロジー計算がどのように利用できるか、が解説される。また第 4 章では流体の熱対流実験に見られる渦状パターン、大理石の多結晶構造やソフトマターのミクロ相分離界面の 3 次元的ネットワーク構造などの様々な複雑な空間パターンとその時間変化を理解するためのホモロジー計算を用いた新しいアイディアが説明される。ホモロジー計算はその他にも例えば

- 迷路
- センサー・ネットワークにおける被覆問題
- 画像処理
- 動脈瘤の診断

など様々な方面への応用や可能性が示唆されており、さらに広い範囲への応用が期待される。このサマーセミナーに参加された方々がご自身の問題にそれを見いだされれば大変すばらしいことである。

この第 1 章では、このような計算ホモロジーへの入門のための基礎となるホモロジーの基本的事項をごく簡単に紹介し、第 2 章以降への準備とする。想定している読者は、数学的予備知識が微積分や線型代数程度であり、それ以上の数学は本格的には学んでいない方々である。それ以上の数学的素養をある程度持っている方々には冗長な部分が少なからずあることをあらかじめお断りしておく。

2 ホモロジーの基本的構成：鎖複体からホモロジーへ

上にも述べたように、対象とする図形のホモロジーを計算するためには、図形情報から何らかの鎖複体を構成する必要がある。鎖複体は既に代数的な対象であり、いったん鎖複体ができてしまえば、それから後の作業は (少なくとも原理的には) 一定である。この第 1 章では鎖複体として主に単体複体の鎖複体を扱う。

2.1 鎖複体

対象とする図形が (3 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^3$ 内の) 曲面である場合に、その曲面から作られる単体複体がどのようなものであるかをごく簡単に説明しよう。そのためにまず

その曲面を各面が三角形の多面体と思うと（あるいは多面体で近似すると），後述のようにしてその頂点，辺，面のデータをそれぞれに対応するベクトル空間の形で表し，頂点・辺・面のつながり方がそれらのベクトル空間の間の境界作用素と呼ばれる線型写像として表すことができる．このようなデータが得られれば，それから単純な線型代数的な操作で得られるいくつかのベクトル空間がこの曲面のホモロジーとなる．この手順は

- (1) 曲面を多面体とみなす（近似する）
- (2) 多面体の頂点・辺・面の情報から対応するベクトル空間を3つ作る（後述）
- (3) 頂点・辺・面のつながり方からそれらのベクトル空間の間の線型写像を作る（後述）
- (4) このベクトル空間と線型写像の組からホモロジーのベクトル空間を求める（後述）

に分解される．手順(1)はこの曲面を「三角形分割する」ともいい，これによりその曲面を作り上げるための頂点，辺，面（これらを単体と呼ぶ）とその接合の仕方についてのデータが得られる．このような複合的データを**単体複体**と呼ぶ．手順(2),(3)で作られるベクトル空間と線型写像の組が，この単体複体の**鎖複体**と呼ばれる*ものである．すなわち単体複体の鎖複体とは，頂点，辺，面に対応するいくつかのベクトル空間とそれらの間の線型写像を組にした代数的な対象のことである．

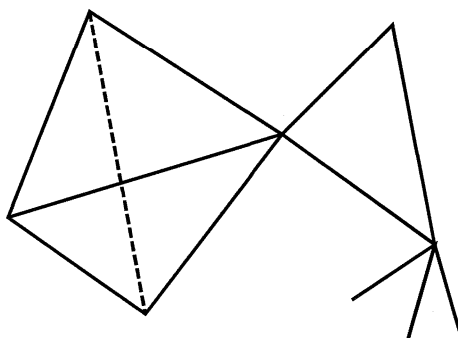


図 1: 三角形分割された図形．

計算ホモロジーで用いられる方体集合は，手順(1)の段階が単体複体と異なる．すなわち曲面を三角形分割する代わりに正方形分割する，すなわち各面が三角形であるような多面体で近似するのではなく，各面が同じ大きさの正方形であり，しかもすべての面が $\mathbb{R}^3$ の座標面のどれかに平行になっているような多面体とみなすのである．これができればその後の手順(2-4)は，もちろん三角形と正方形の違いのために「つながり方」をどうやって線型写像として表現するかなどの細部は少し異なるが，基本的には同じである．

重要なことは，同一の曲面からいろいろな単体複体，方体集合ができるということである．つまり曲面をどのように三角形分割ないし正方形分割するかにはいろいろな仕方があり，分割を粗くすることも細かくすることもできる．細かくすればそれだけ曲面の細かい構造を表現することができるようになるが，その代わり頂点・辺・面の数は増え，それによって対応する鎖複体のベクトル空間の次元が増えることになる．対象とする図形がきれ

*最近の本では**チェイン複体**と呼んでいるものも多い．

いな滑らかな曲面であれば、粗い三角形（正方形）分割でもその図形の情報は十分良く表現できるが、複雑な空間パターンを調べようとするときなどでは、パターンの境界のなす 2 次元的な図形は一般に非常に複雑なフラクタル的微細構造を持っていることも多く、そのような場合にそれを粗く三角形（正方形）分割したのではその微細構造を失ってしまう。もちろん無限に微細な構造はいくら分割を細かくしても捉えられないし、もともと与えられている図形のデータが有限な解像度しか持っていない場合も多いし、計算時間の制約から分割の細かさはどこかで何らかの打ち切りをしなければならないことも現実にはよくある。

どのように鎖複体を作るかは後で述べるとして、鎖複体というものがどういうものか、またそれからホモロジーをどうやって求めるかを先にごく簡単に述べておく。話を具体的にするために、言葉遣いは三角形分割された曲面から作られる単体複体の鎖複体を念頭におく。

ある図形に対して

- 頂点（0 次元の単体）に対応するベクトル空間 C_0
- 辺（1 次元の単体）に対応するベクトル空間 C_1
- 面（2 次元の単体）に対応するベクトル空間 C_2
- 3 次元の単体に対応するベクトル空間 C_3
- ...

のようにベクトル空間の列 $\{C_k\}$ を考える。ベクトル空間 C_k ではその図形のすべての k 次元の単体（以下では簡単に k 単体という）の集合が基底（標準的な基底）となっている。すなわち C_k の次元は k 単体がいくつあるかを示している。

k 鎖とはいくつかの k 単体の（実数係数の）1 次結合のことをいう。これは直接的な幾何的イメージを持たない、単なる代数的な概念であるが、ホモロジーを考える際には基本的である。1 つの k 単体の境界はいくつかの $(k-1)$ 単体からなるが、そのつながり具合がそれらのある 1 次結合として表現されるとする（詳しくは後で述べる）。これは 1 つの $(k-1)$ 鎖である。そこで各々の k 単体に対して、その境界となる $(k-1)$ 鎖を対応させることにより、ベクトル空間 C_k の基底の 1 つ 1 つに対して C_{k-1} の元が対応するので、これを自然に線型に拡張すれば、線型写像 $\partial_k : C_k \rightarrow C_{k-1}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) が得られる。これは境界を取る操作の代数的な表現なので**境界作用素**とか**境界準同型写像**と呼ばれる。

後述のように単体複体でも方体集合でも、境界作用素はすべての $k = 1, 2, \dots$ について

$$\partial_k \circ \partial_{k+1} = 0 \quad (1)$$

をみたす。すなわち、ある $(k+1)$ 単体の境界を取って得られる k 鎖を構成するそれぞれの k 単体についてさらにその境界を取り、それを元の k 鎖の係数によって足し合わせると常に 0 となるということである。標語的に言えば「境界の境界を取ると 0 となる」であり、これは鎖複体という概念に求められる基本的性質である。

そこで数学的な鎖複体の定義は次のようになる：

定義 2.1 ベクトル空間の列 $\{C_k\}_{k=0,1,2,\dots}$ とその間の境界作用素

$$\partial_k : C_k \rightarrow C_{k-1} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

の組がすべての k について性質 (1) をみたすとき、この組

$$\mathcal{C} = (C_k, \partial_k)_{k=0,1,2,\dots}$$

を鎖複体 (chain complex) と呼ぶ。いちいち k を書くのが煩わしい場合は $\mathcal{C} = (C_*, \partial_*)$ と書いてごまかすことも多く、慣れると結構便利である。

後述のように鎖複体 $\mathcal{C}$ が三角形分割から作られている場合には単体複体の鎖複体、正方形分割から作られている場合には方体集合の鎖複体[†]という。すなわちこれらの名称の違いは、どちらも代数的には鎖複体であるが、もとの図形との対応（すなわち図形から鎖複体を構成する方法）が違ふことをあらわしている。

注意 2.1 ここでは説明の簡単のために鎖複体を実ベクトル空間を基にして述べている。すなわち鎖 (chain) というものを実数係数の 1 次結合として考えているが、一般には 1 次結合の係数としてはそれ以外にも様々な「もの」をとることができる。本来は最も基本的なものは整数係数であり、それは「境界を取る」という操作の代数的な表現では通常は整数係数の 1 次結合だけを考えれば十分だからである。しかし整数は除法について閉じていないので、整数係数で考えると k 鎖の集合 C_k はベクトル空間にはならず、それを少し拡張した概念である「加群」と呼ばれるものになる。線型代数の範囲を超えると、例えば対角化などの標準形を求めることが複雑になるので、概念的にも実際上の計算でも話は少し面倒になる。この講義では最初は線型代数の範囲で話を進め、最後に加群について簡単に述べるが、CHomP の計算は基本的に整数係数のホモロジー、すなわち加群に基づいており、その際には Smith 標準形のような整数行列の標準形などの計算も用いられることになる。

2.2 鎖複体からホモロジーへ

鎖複体 $\mathcal{C} = (C_*, \partial_*)$ ができると、それから自然に以下のような部分ベクトル空間が作れる：

$$\begin{aligned} Z_k &= (\partial_k)^{-1}(0) = \text{Ker } \partial_k \\ B_k &= \partial_{k+1}(C_{k+1}) = \text{Im } \partial_{k+1} \end{aligned}$$

これらはいずれも C_k の部分空間である。このとき性質 (1) より $x \in B_k$ はある $y \in C_{k+1}$ を用いて $x = \partial_{k+1}(y)$ と書けるので、 $\partial_k(x) = \partial_k(\partial_{k+1}(y)) = 0$ となり、従って $x \in Z_k$ であることがわかる。すなわち性質 (1) が成り立てばいつでも

$$B_k \subset Z_k \subset C_k$$

[†]この言葉遣いはあまり整合的ではない。正確には方体複体の鎖複体というべきである。あるいは三角形分割の場合を多面体の鎖複体（もしくはホモロジー）というときには、正方形分割のときに方体集合の鎖複体（ホモロジー）と言ってもよい。しかし Kaczynski 他 [1] などの文献での慣例に従い、ここでも厳密には整合性を欠くが、単体複体の鎖複体とかホモロジーに対して、方体集合の鎖複体とかホモロジーを対比して使うことにする。

という基本的な包含関係が得られる． Z_k の元を k サイクル， B_k の元を k バウンダリ[‡]という．

この段階で形式的にホモロジーを定義するのは簡単である．

定義 2.2 鎖複体 $\mathcal{C} = (C_*, \partial_*)$ のホモロジーとは，商ベクトル空間

$$H_k(\mathcal{C}) = \frac{Z_k}{B_k}$$

によって定義されるベクトル空間の列

$$H_*(\mathcal{C}) = \{H_k(\mathcal{C})\}_{k=0,1,2,\dots}$$

のことをいう．これを鎖複体 $\mathcal{C}$ のホモロジー群という．また $H_k(\mathcal{C})$ のことを k 次元ホモロジー群ともいう．

ホモロジー「群」という理由は，上に注意したように本来は鎖複体はベクトル空間というよりは加群であり，従ってホモロジー群もベクトル空間というよりは加群だからである．しかし少なくとも第 1 章では主として実数係数の加群，すなわち実ベクトル空間の場合を扱うので，いっそホモロジー・ベクトル空間という言い方をしようかとも思ったが，あまり勝手に用語を作るのはよくないのでやめた．

k サイクルとは「境界」を取ると 0 になっているような k 鎖のことであり，それはあたかももとの図形の中での閉じた境界のない k 次元曲面（ k 次元部分図形というべきか）に相当するようなものであると思える．サイクルの中には k バウンダリ，すなわち何かある $(k+1)$ 鎖の「境界」に対応するものが含まれている．もとの図形の $(k+1)$ 次元部分図形のなす $(k+1)$ 鎖に境界作用素を施したものは，その $(k+1)$ 次元部分図形の境界に対応する k 鎖になっていると考えるのは自然であり，多くの場合そのような幾何的な直観は正しい．もちろん鎖複体の境界作用素と実際の幾何的な操作としての境界とは違うので，いくつかの k 単体を集めて 1 次結合を作った k 鎖が，その幾何的な状況に反して k サイクルになったり k バウンダリになったりすることも大いにあり得る．

Z_k を B_k で「割る」，すなわちそれらの商ベクトル空間を考えるということは，鎖複体 $\mathcal{C}$ に含まれる k サイクル全体の集合が k バウンダリの集合に比べてどれくらい大きいのか，を測ることに相当する．これは幾何的には「 $(k+1)$ 次元部分図形の境界にならない k 次元部分図形がどれだけあるか」を測っているようなものであるといえる．その意味で

- $H_0(\mathcal{C})$ の次元はもとの図形の連結成分の数を表し，
- $H_1(\mathcal{C})$ の次元はもとの図形の穴の数を表し，
- $H_2(\mathcal{C})$ の次元はもとの図形の空洞の数を表し，...

ということが納得されよう．これは後で述べる単体複体の構成を見ればより明確になる（と期待する）．

このようにホモロジーはもとの図形の何らかの幾何的情報を代数的情報に反映させ，計算によって幾何的性質を理解するような操作である．特に代数的な性質を利用すれば幾何

[‡]日本語では k 輪体， k 境界，などと言われるが，あまりしっくり来ないのでカタカナ書きにする．

的には直ちには明らかでない事実も計算により導かれるなどの扱いやすさがある。後に述べる「完全列」という概念は、このような代数的な性質をコンパクトにまとめたものである種の代数的な対象を機械的に操作することで思いがけない強力な結論が得られたりすることもあるなど、ホモロジーを扱う際の便利で重要な道具である。さらに2つ以上の図形の上に連続写像があれば、その情報をホモロジー群の間の準同型（線型写像）に移すことにより、その写像の持つ幾何的情報、さらには図形どうしの関係などについても知ることができる場合もある。

ホモロジー群についてはひとまずこの程度のごく曖昧な概観にとどめ、その性質などは次節で単体複体とそのホモロジーを導入した後で述べることにする。

2.2.1 商ベクトル空間に慣れていない人への補足

わかってしまえば何でもないことだが、商ベクトル空間というもの、あるいはより一般にある集合の同値関係による商集合というものは難しい概念で、それを感覚的に自然に扱えるようになるには相当程度の習熟を要する。

ベクトル空間の場合には、あるベクトル空間 V とその部分ベクトル空間 W に対して、 V の W による商ベクトル空間 V/W は、 V の中での W の補空間であると考えてもよいだろう。あるいは補空間の取り方はいろいろあるので、 V/W はそれらの補空間の抽象化、すなわちそれらに共通の性質を兼ね備えた抽象的なベクトル空間という方が適切かもしれない。例えば V 内での W の補空間の次元は（それが有限次元であるとして） $\dim V - \dim W$ という共通の値を持っているが、 V/W の次元はそれに等しい。

V/W の定義自体を述べるのはそれほど難しくはない。 V の2つの元 v_1, v_2 は $v_1 - v_2 \in W$ となるとときに同値であると定めて、 V の元 v に対しそれと同値なすべての V の元全体の集合を $[v]$ と書き、 v の同値類という。すると v_1 と v_2 が同値であることは $[v_1] = [v_2]$ となることと同じことなので、ベクトル空間 V は v の同値類 $[v]$ の形の集合の集まりに類別される。そこでこのような v の同値類の集まりに自然にベクトル空間としての演算を導入してそれをベクトル空間にしたものが商ベクトル空間 V/W である。ベクトル空間の演算とは和とスカラー倍だが、このように定義した同値類に対しては

$$\begin{aligned} [v] + [v'] &= [v + v'] \\ \alpha[v] &= [\alpha \cdot v] \quad (\alpha \in \mathbb{R}) \end{aligned}$$

と定めるのが自然であり、これで矛盾なく定義されていることは容易に確認できる。（つまり、 v_1 と v_2 が同値で v'_1 と v'_2 が同値なら、 $v_1 + v'_1$ と $v_2 + v'_2$ や $\alpha \cdot v_1$ と $\alpha \cdot v_2$ も同値であることが確認できるということである。心配な人は自分で確認されたい。）

定義はこのようにそれほど複雑ではないが、「同値類の集まりに自然に演算を導入してそれをベクトル空間とみなす」という操作は極めて抽象的な操作であり、それが直観的にどういうことに対応しているのかを心から納得するためには人によっては相当の時間がかかる。その直観的な理解の助けとして、 V/W は V 内の W の補空間のようなものである、と思うとわかりやすいのではないかということが上で言いたかったことである。実際、 $[v]$ は集合としては $v + W$ 、すなわち v を通り W に平行な $\dim W$ 次元の（アフィン）部分空間であり、従って $[v]$ の形の同値類全体の集合というのは W の補空間方向の情報を集めて

いるのであり、 W の補空間を任意に 1 つ固定すれば $v + W$ とその補空間の元とは 1 対 1 に対応するので、そのような理解は直観的にも納得されるだろう。このような理解に基づいて練習をすれば、商ベクトル空間というものを感覚的に理解し運用できるようになると期待する。

3 単体複体とそのホモロジー

幾何的対象である図形に対するホモロジーを考えるための第 1 歩は、その図形が単純な部品から組み立てられているように見なすことである。どのような種類の部品がどのように組み立てられているか、といういわば設計図の情報が複体と呼ばれる概念であり、どのような種類の部品から組み立てるかによって、単体複体、方体複体、特異複体、など様々な複体が考えられる。ここでは最も基本的な単体複体についてある程度丁寧な解説を試みる。前節でも述べたように、単体複体は与えられた図形を三角形や四面体などのような部品から組み立てるという考え方に基づく複体の構成方法である。そこでまずその部品となる「単体」の概念から始めて、単体複体の定義をし、それから単体複体のホモロジーの説明と基本的な例の計算をする。これにより、ホモロジーが図形のどのような情報を代数的に取り出しているかのおおまかな感覚がつかめるだろう。

3.1 単体複体

十分大きな次元[§]のユークリッド空間 $\mathbb{R}^N$ 内の $n+1$ 個の点 $A_0, A_1, \dots, A_n$ に対し、ベクトル $\mathbf{u}_k = \overrightarrow{A_0 A_k}$ と定める。

定義 3.1 もし n 個のベクトル $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ が 1 次独立ならば、それらによって張られる n 次元錐体、すなわち

$$|A_0 A_1 \dots A_n| = \overrightarrow{OA_0} + \left\{ \sum_{k=1}^n a_k \mathbf{u}_k \mid 0 \leq \sum_{k=1}^n a_k = 1, \forall k \ a_k \geq 0 \right\}$$

を点 $A_0, A_1, \dots, A_n$ を頂点とする n 単体という。 $\{A_k\}_{k=0, \dots, n}$ を明示せずに単に n 単体ということもある。また、 n をこの単体の次元という。

0 単体 $|A|$ とは 1 点 A のことであり、1 単体 $|AB|$ は線分 $\overline{AB}$ 、2 単体 $|ABC|$ は三角形 $\triangle ABC$ とその内部、3 単体 $|ABCD|$ は四面体 $ABCD$ とその内部、 $\dots$ のことである。単体を表すのに σ, τ などの記号を使うことも多い。

定義 3.2 ある n 単体 $\sigma = |A_0 A_1 \dots A_n|$ に対し、そこからいくつかの（例えば m 個の）頂点 $\{A_{k_1}, \dots, A_{k_m}\}$ を取り除いて得られる $(n-m)$ 単体を σ の $(n-m)$ 境界単体ということにする。

[§] 「十分大きな」という表現は、次元をいくつとは指定しないが、この議論のために必要となるだけの大きな次元を用意しておく、ということである。ここでは具体的にはせいぜい 4 次元くらいまでの図形くらいしか考えないので、わかりにくいと思う読者は、例えば 100 次元ユークリッド空間だと思っても構わない（たぶん）。

例えば σ が 2 単体すなわち三角形 $|ABC|$ とその内部のとき、その 1 境界単体は 3 辺 $|AB|$, $|AC|$, $|BC|$ のいずれかの辺であり、 σ が 3 単体、すなわち四面体 $|ABCD|$ とその内部のときは、その 2 境界単体は 4 つの面 $|ABC|$, $|ABD|$, $|ACD|$, $|BCD|$ のいずれか、1 境界単体は 6 辺 $|AB|$, $|AC|$, $|AD|$, $|BC|$, $|BD|$, $|CD|$ のいずれかである。このような場合には、境界単体をそれぞれ**辺単体**、**面単体**ということもある。単に境界単体と言え、適当な ℓ についての ℓ 境界単体のことをいう。単体 τ がある n 単体 σ の境界単体になっていることを $\tau \prec \sigma$ と表す。

定義 3.3 十分大きな次元のユークリッド空間内の有限個の単体の集合 K が**単体複体**¹であるとは

- (1) K に属する任意の単体 σ の任意の境界単体 τ もまた K に属し、
- (2) K の任意の 2 つの単体 σ_1, σ_2 の交わり $\tau = \sigma_1 \cap \sigma_2$ が空でなければ $\tau \prec \sigma_i$ ($i = 1, 2$) である、

の 2 条件が成り立つことをいう。単体複体 K に属する単体の次元のうちで最大のものを K の**次元**といい、 $\dim K$ と表す。 K に属する単体のうちで、その次元が k ($0 \leq k \leq \dim K$) のもの全体のなす部分集合を K_k と表す。

例えば次の左の図のようなものは単体複体ではないが、右図のようにすると単体複体となる。

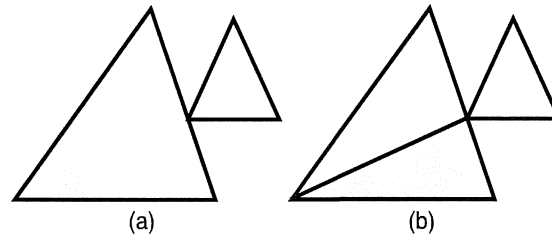


図 2: (a) 単体複体でない; (b) 単体複体。

注意すべきことは、単体複体とはあくまでいくつかの単体の集合であり、上の図のように描いた図形そのものではない。しかし単体複体が与えられたとき、各単体はユークリッド空間 $\mathbb{R}^N$ 内の部分集合であるから、それらの和集合を取れば、 $\mathbb{R}^N$ 内の図形が得られる。これを単体複体 K の**幾何的实现**、もしくは**多面体**と呼び、 $|K|$ で表す。

ここでいう多面体は正多面体のような普通に多面体として思い描くものだけではない。上の図の表す図形も通常は多面体とは呼ばないと思われるが、上の定義では「多面体」と呼ばれることに注意されたい。また、多面体は連結である必要もない。

定義 3.4 多面体 $|K|$ が**連結**とは、その上の任意の 2 点が $|K|$ の中で連続な曲線で結べることをいう。このことは、多面体 $|K|$ の任意の 2 つの頂点が K 内の 1 単体の列で結べることと同値である（なぜか？）

¹正確にはこれはユークリッド空間に埋め込まれている単体を用いて構成される「ユークリッド単体複体」と呼ばれるものの定義である。これに対し、より抽象的に単体を定義し、それから定まる「抽象単体複体」というものもある。例えば田村 [4] を参照。

多面体 $|K|$ が連結でないとき、その上のある点 $x \in |K|$ の連結成分とは、 $|K|$ 内で x と連続曲線で結べるような $|K|$ の点全体のなす部分集合をいう。多面体の連結成分はまた 1 つの多面体であり、しかもそれは連結である。多面体だけでなく、それを与えている単体複体についても、多面体の連結性や連結成分の定義を借用することもある。

3.2 単体複体のホモロジー

単体複体のホモロジーを考えるためには、まず単体複体の鎖複体を定義する必要がある。第 2 節で述べたように、鎖複体は鎖群と呼ばれるベクトル空間と、その間の線型写像である境界作用素からなる複合的な代数的対象である。

単体複体 K の鎖複体は単体の集合である K から抽象的に構成した鎖複体である。その定義のためには、 $\mathbb{R}^N$ の部分集合としての単体を、ベクトル空間の基底と見なせるような抽象的な記号と見直すことにする。このように、ある単体 σ を抽象的な記号と見ることを明確に示すために、記号としての単体は $\hat{\sigma}$ と表すことにする。同様に、 K や K_k の元をすべて記号と見なしたときの対応する集合を $\hat{K}$ や $\hat{K}_k$ と表す。

定義 3.5 単体複体 K に対し、 $\hat{K}_k$ で生成される実ベクトル空間を $C_k(K)$ と表し、 K の k 鎖群という。すなわち $\hat{K}_k = \{\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_m\}$ とするときに、 $C_k(K)$ は

$$a_1 \hat{\sigma}_1 + a_2 \hat{\sigma}_2 + \dots + a_m \hat{\sigma}_m \quad (a_i \in \mathbb{R})$$

のような形式和で表される元全体のなす集合である。これには和とスカラー倍の演算が自然に定義できるのでベクトル空間の構造が入り、 $\{\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_m\}$ はその基底となる。単体複体は有限個の単体からなるので、このようなベクトル空間は常に有限次元であることに注意されたい。

n 次元の単体複体 K が与えられると、このようにして鎖群 $C_k(K)$ ($k = 0, 1, \dots, n$) のなす $n+1$ 個のベクトル空間の列が得られる。

境界作用素を定義するためには、単体の境界が代数的にどのようなものに対応するか、ということを考える必要がある。例えば 2 単体、すなわち内部も含めた三角形 $\sigma = |ABC|$ に対し、その境界は $|AB|, |BC|, |AC|$ の 3 辺に対応する 3 つの 1 単体であり、従って代数的には $\hat{\sigma}$ の境界 $\partial \hat{\sigma}$ は $|\hat{A}\hat{B}| + |\hat{B}\hat{C}| + |\hat{A}\hat{C}|$ となると言いたいところだが、境界のつながり方まで考慮すると $|\hat{A}\hat{B}| + |\hat{B}\hat{C}| + |\hat{C}\hat{A}|$ とする方が自然である。 $|AC|$ と $|CA|$ は集合としては同一であるが、代数的にはこれらは「向き」が違うので、 $|\hat{C}\hat{A}| = -|\hat{A}\hat{C}|$ と考えると都合が良い。

このことを一般化して、 k 単体 $\sigma = |A_0 A_1 \dots A_k|$ に対し、 $A_0, A_1, \dots, A_k$ の順序を置換 π によって並べ替えたもの $\sigma' = |A_{\pi(0)} A_{\pi(1)} \dots A_{\pi(k)}|$ は、 $\mathbb{R}^N$ 内の部分集合としては σ と同一だが、記号として考えるときには、置換 π の符号（すなわちその置換を互換の積として表したときの互換の数の偶奇） $\text{sgn}(\pi)$ を用いて

$$\hat{\sigma}' = \text{sgn}(\pi) \hat{\sigma}$$

となると定めておく。

定義 3.6 k 単体 $\sigma = |A_0 A_1 \dots A_k|$ に対し, その記号化したもの $\hat{\sigma}$ の境界 $\partial \hat{\sigma}$ を

$$\partial_k \hat{\sigma} = \sum_{i=0}^k (-1)^i |\dots A_{i-1} A_{i+1} \dots|$$

と定める^{||}. これは $(k-1)$ 単体の記号化の 1 次結合なので $C_{k-1}(K)$ の元である. これを線型に拡張することにより, 線型写像

$$\partial_k : C_k(K) \rightarrow C_{k-1}(K) \quad (k = 1, \dots, \dim K)$$

が得られる. この線型写像を**境界作用素**という.

例えば $\sigma = |ABCD|$ のときには

$$\begin{aligned} \partial_3 \hat{\sigma} &= |BCD| - |ACD| + |ABD| - |ABC| \\ &= |BCD| + |ADC| + |ABD| + |ACB| \end{aligned} \quad (2)$$

となる. 以下の四面体の展開図を参照せよ.

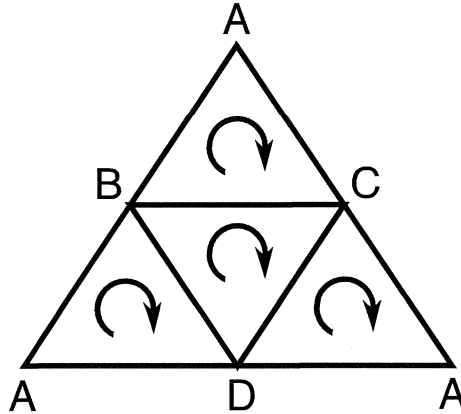


図 3: 四面体の展開図. 4つの三角形 $|BCD|, |ADC|, |ABD|, |ACB|$ はそれぞれ矢印の向きに頂点が並んでいることに注意.

定理 3.1 任意の $k = 0, \dots, \dim K$ に対し, 境界作用素 $\partial_{k+1} : C_{k+1}(K) \rightarrow C_k(K)$ と $\partial_k : C_k(K) \rightarrow C_{k-1}(K)$ との合成写像は性質 (1), すなわち

$$\partial_k \circ \partial_{k+1} = 0$$

をみたす. ただし $C_{-1}(K), C_{\dim K+1}(K)$ はいずれも 0 だけからなる自明なベクトル空間とする.

^{||} 右辺の $|\dots A_{i-1} A_{i+1} \dots|$ にも記号化の $\wedge$ をつけるべきだが, 記号が煩雑になるので省略した. 以下同様の省略を行う.

この定理はホモロジー群を定義するために基本的である。その証明は上の境界作用素の定義に従って合成写像の計算を行うだけである。一般的に書くとうわかりにくいだが、例えば $\sigma = |ABCD|$ のときには $\partial_3 \hat{\sigma} = |BCD| - |ACD| + |ABD| - |ABC|$ だったので、

$$\begin{aligned}\partial_2(\partial_3 \hat{\sigma}) &= \partial_2(|BCD| - |ACD| + |ABD| - |ABC|) \\ &= (|CD| - |BD| + |BC|) - (|CD| - |AD| + |AC|) \\ &\quad + (|BD| - |AD| + |AB|) - (|BC| - |AC| + |AB|) \\ &= 0\end{aligned}$$

となる。一般の場合もこれと同様のことをやれば良い。

この定理により $\mathcal{C}(K) = (C_k(K), \partial_k)_{k=0, \dots, \dim K}$ は第2節で述べた鎖複体の定義 2.1 をみたすことがわかったので、第2節の手続きに従って単体複体 K のホモロジーが定義できる。すなわち

定義 3.7

$$\begin{aligned}Z_k(K) &= (\partial_k)^{-1}(0) = \text{Ker } \partial_k \\ B_k(K) &= \partial_{k+1}(C_{k+1}(K)) = \text{Im } \partial_{k+1}\end{aligned}$$

はいずれも $C_k(K)$ の部分ベクトル空間であり、性質 (1) より

$$B_k(K) \subset Z_k(K) \subset C_k(K)$$

をみたす。単体複体 K の k 次元ホモロジー群とは、商ベクトル空間

$$H_k(K) = H_k(\mathcal{C}(K)) = \frac{Z_k(K)}{B_k(K)}$$

のことをいい、単に K のホモロジー群といえば、これらの列

$$H_*(K) = \{H_k(K)\}_{k=0, \dots, \dim K}$$

のことをいう。

例 3.1 (1 単体のホモロジー) 一般に n 単体 σ とその境界単体をすべて集めたものは、1 つの単体複体を定める。これを σ の定める単体複体といい、 $K(\sigma)$ と表す。特に 1 単体 $\sigma = |AB|$ の場合には

$$K(\sigma) = \{|AB|, |A|, |B|\}$$

であり、これから定まる鎖複体は

$$\begin{aligned}C_0(K(\sigma)) &= \{\alpha|A| + \beta|B| \mid \alpha, \beta \in \mathbb{R}\} \\ C_1(K(\sigma)) &= \{\gamma|AB| \mid \gamma \in \mathbb{R}\}\end{aligned}$$

と与えられる。($k \neq 0, 1$ のとき $C_k(K(\sigma)) = \{0\}$ である。)

従って境界作用素 $\partial_k : C_k(K(\sigma)) \rightarrow C_{k-1}(K(\sigma))$ は $k \neq 1$ のとき $\partial_k = 0$ であり, $k = 1$ のときには

$$\partial_1(|AB|) = |B| - |A|$$

であるので,

$$\begin{aligned} Z_k(K(\sigma)) &= \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & C_0(K(\sigma)) \\ (k \neq 0 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases} \\ B_k(K(\sigma)) &= \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & \{\gamma(|B| - |A|) \mid \gamma \in \mathbb{R}\} \\ (k \neq 0 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases} \end{aligned}$$

となる. これより直ちに

$$H_k(K(\sigma)) \cong \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq 0 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases} \quad (3)$$

が得られる. ここで $H_0(K(\sigma)) \cong \mathbb{R}$ とは $H_0(K(\sigma))$ が $\mathbb{R}$ と同型, すなわち 1 次元の実ベクトル空間であることを意味する. より正確には, $Z_0(K(\sigma)) = C_0(K(\sigma))$ が $|A|, |B|$ を基底とする 2 次元ベクトル空間であり, $B_0(K(\sigma))$ が $|B| - |A|$ を基底とする 1 次元ベクトル空間であることから, 商ベクトル空間

$$H_0(K(\sigma)) = \frac{Z_0(K(\sigma))}{B_0(K(\sigma))}$$

において $|A|$ と $|B|$ の定める同値類は一致し, それが $H_0(K(\sigma))$ の基底となっている.

同様にすると, n が何であっても n 単体 σ のホモロジーは (3) で与えられることが確かめられる. ($n = 2$ の場合について各自やってみよ.)

一般に 0 次元ホモロジー群についてだけならば, 次の事実が簡単に証明できる.

命題 3.2 (連結成分とホモロジー)

- (1) 単体複体 K が連結でなく, その連結成分が $K(1), \dots, K(\ell)$ であるとき, 任意の k について

$$H_k(K) = H_k(K(1)) \oplus \cdots \oplus H_k(K(\ell))$$

である.

- (2) 単体複体 K が連結ならば, その 0 次元ホモロジーは

$$H_0(K) \cong \mathbb{R}$$

である. 従って上の事実と合わせると, ちょうど ℓ 個の連結成分を持つ単体複体 K については

$$H_0(K) \cong \mathbb{R}^\ell$$

が成り立つ.

言い換えると, $\dim H_0(K)$ は単体複体 K の連結成分の個数を表している. この命題の証明は定義に立ち返れば簡単に示せるが, ここでは省略する. 例えば梶田 [2, 定理 3.11 と 3.13] を参照されたい.

例 3.2 (内部を含まない三角形のホモロジー) 内部を含まない三角形 ABC の定める単体複体は

$$K = \{|AB|, |BC|, |CA|, |A|, |B|, |C|\}$$

で与えられる. これは 2 単体 $|ABC|$ の境界単体全体からなる単体複体である. その鎖複体は

$$\begin{aligned} C_0(K) &= \{\alpha|A| + \beta|B| + \gamma|C| \mid \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}\} \\ C_1(K) &= \{u|BC| + v|CA| + w|AB| \mid u, v, w \in \mathbb{R}\} \end{aligned}$$

であり, 従って境界作用素 ∂_1 は

$$\begin{aligned} C_0(K) &\cong \mathbb{R}^3 ; \quad \alpha|A| + \beta|B| + \gamma|C| \leftrightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \\ C_1(K) &\cong \mathbb{R}^3 ; \quad u|BC| + v|CA| + w|AB| \leftrightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \end{aligned}$$

なる同一視によって, 行列

$$\partial_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

と表される. この行列の階数は 2 なので

$$\dim Z_0(K) = 3, \dim B_0(K) = 2; \quad \dim Z_1(K) = 1, \dim B_1(K) = 0.$$

ゆえに

$$H_k(K) \cong \begin{cases} (k=0, 1 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq 0, 1 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

を得る. 特に $Z_1(K)$ の基底は $|BC| + |CA| + |AB|$ で与えられるが, これは三角形をぐるりと 1 周するような閉折れ線である. あるいは

$$\partial_1(|ABC|) = |BC| - |AC| + |AB| = |BC| + |CA| + |AB|$$

なので, 2 単体 $|ABC|$ の 1 境界単体と言ってもよい. $B_1(K) = \{0\}$ なので, この閉折れ線が $H_1(K)$ の基底であると考えられる.

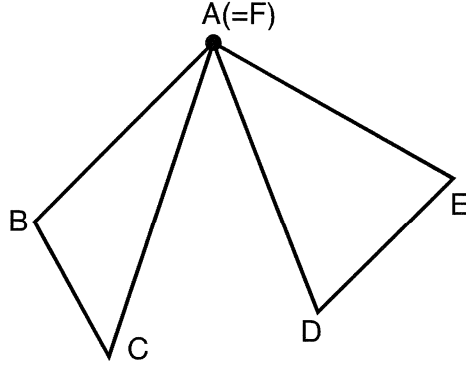


図 4: 内部を含まない 2 つの三角形の 1 点和.

例 3.3 (内部を含まない 2 つの三角形の 1 点和のホモロジー) 内部を含まない 2 つの三角形 ABC と DEF の頂点 A と F を接合した図形を考える. この図形の定める単体複体は

$$K = \{|AB|, |BC|, |CA|, |AD|, |DE|, |EA|, |A|, |B|, |C|, |D|, |E|\}$$

で与えられ, その鎖複体は

$$\begin{aligned} C_0(K) &= \{\alpha|A| + \beta|B| + \gamma|C| + \delta|D| + \eta|E| \\ &\quad | \alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta \in \mathbb{R}\} \\ C_1(K) &= \{p|AB| + q|BC| + r|CA| + s|AD| + t|DE| + u|EA| \\ &\quad | p, q, r, s, t, u \in \mathbb{R}\} \end{aligned}$$

であり, 従って境界作用素 ∂_1 は行列

$$\partial_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

と表される. この行列の階数は 4 なので

$$\dim Z_0(K) = 5, \dim B_0(K) = 4; \quad \dim Z_1(K) = 2, \dim B_1(K) = 0.$$

ゆえに

$$H_k(K) \cong \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k=1 \text{ のとき}) & \mathbb{R}^2 \\ (k \neq 0, 1 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

を得る. 特に $Z_1(K)$ の基底は $|AB| + |BC| + |CA|$ と $|AD| + |DE| + |EA|$ で与えられるが, これは 2 つの三角形をそれぞれぐると 1 周するような閉折れ線, 言い換えると 2 つの 2 単体 $|ABC|$ と $|ADE|$ のそれぞれの 1 境界単体であり, $B_1(K) = \{0\}$ なので, これが $H_1(K)$ の基底となる.

以上の2つの例から推察されるように、 $\dim H_0(K)$ が単体複体 K の連結成分の個数を表しているのに対し、 $\dim H_1(K)$ は単体複体 K の「穴」の数を表す。より正確に言うと、 $\dim H_1(K)$ は単体複体 K に含まれる閉折れ線のうちで代数的に独立なものが何種類あるかを表しているといえる。

例 3.4 (内部を含まない四面体のホモロジー) 内部を含まない四面体 $ABCD$ の定める単体複体は、各次元ごとに

$$\begin{aligned} K_0 &= \{|A|, |B|, |C|, |D|\} \\ K_1 &= \{|AB|, |AC|, |AD|, |BC|, |BD|, |CD|\} \\ K_2 &= \{|BCD|, |ACD|, |ABD|, |ABC|\} \end{aligned}$$

で与えられる。これは3単体 $|ABCD|$ の境界単体全体からなる単体複体である。その鎖複体は

$$\begin{aligned} C_0(K) &= \{\alpha|A| + \beta|B| + \gamma|C| + \delta|D| \mid \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}\} \\ C_1(K) &= \{p|AB| + q|AC| + r|AD| + s|BC| + t|BD| + u|CD| \\ &\quad \mid p, q, r, s, t, u \in \mathbb{R}\} \\ C_2(K) &= \{a|BCD| + b|ACD| + c|ABD| + d|ABC| \mid a, b, c, d \in \mathbb{R}\} \end{aligned}$$

であり、従って前と同様にして標準的な数ベクトル空間 $\mathbb{R}^\ell$ との同一視のもとで、境界作用素 ∂_1 は行列

$$\partial_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

と、また ∂_2 は

$$\partial_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

と表される。これらはともに階数3なので

$$\begin{aligned} \dim Z_0(K) &= 4, & \dim B_0(K) &= 3 \\ \dim Z_1(K) &= 3, & \dim B_1(K) &= 3 \\ \dim Z_2(K) &= 1, & \dim B_2(K) &= 0 \end{aligned}$$

ゆえに

$$H_k(K) \cong \begin{cases} (k=0, 2 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq 0, 2 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

を得る．特に $Z_2(K)$ の基底は $|BCD| - |ACD| + |ABD| - |ABC|$ で与えられるが、これは (2) より四面体 $|ABCD|$ の 2 境界単体に他ならない． $B_2(K) = \{0\}$ なので、この 2 境界単体が $H_2(K)$ の基底である．すなわち $H_2(K)$ の基底は、四面体の 4 つの面がなす「空洞」(中空の部分) を表現している．

同様にして、内部を含まない 2 つの四面体を 1 頂点で接合させた図形の定める単体複体の 2 次元ホモロジー群は、2 つの空洞に対応する 2 サイクルを基底とする 2 次元ベクトル空間である．一般に、ある単体複体 K に対して $\dim H_2(K)$ は、 K に含まれる空洞の数、より正確には K 内の空洞に対応する 2 サイクルのうちで代数的に独立なものの個数を表しているといえる．

これまでに見てきたことから、ある単体複体 K の k 次元ホモロジー群 $H_k(K)$ の次元は K の幾何的構造の情報を含んでいる．

定義 3.8 単体複体 K の k 次元ホモロジー群 $H_k(K)$ の次元を k 次元ベッチ (Betti) 数といい、 $\beta_k(K)$ と書く．

上で述べたように、 $\beta_0(K)$ は単体複体 K の連結成分の個数を、 $\beta_1(K)$ は K 内の「穴」の個数を、 $\beta_2(K)$ は K 内の「空洞」の個数をそれぞれ表している． K が例 3.3 の単体複体の場合のベッチ数は

$$\beta_0(K) = 1, \quad \beta_1(K) = 2, \quad \beta_k(K) = 0 \quad (k \neq 0, 1)$$

であり、例 3.4 の場合ならば

$$\beta_0(K) = 1, \quad \beta_2(K) = 1, \quad \beta_k(K) = 0 \quad (k \neq 0, 2)$$

である．

本稿ではここまで、ホモロジー群を実ベクトル空間として定義してきたので、その次元がわかれば同型を除いてベクトル空間としての構造は決定されてしまう．従ってベッチ数を知ることとホモロジー群を知るとはほとんど同義であるともいえる．しかしながら、上の例でもわかるように、ホモロジー群の計算においては、その次元を知ることだけでなく、基底がどういうサイクルによって表されているかを知ることが重要である．例 3.2 や例 3.3 では、1 次元ホモロジー群の基底が、それらの例での単体複体の穴を囲む閉折れ線を表しており、例 3.4 では 2 次元ホモロジー群の基底は、空洞、すなわち中空部分を表現していた．一般に単体複体 K に対し、 $H_1(K)$ の基底を知るとは、単に K にいくつの穴が空いているかだけでなく、それらの穴がどこにどのように空いているかの情報を持っている． $H_2(K)$ の基底は K の空洞がどこにどのように位置しているかの情報を持っており、それらを知ること、 K の空洞の単なる個数以上の幾何的構造を知ることができる．もちろんホモロジーは代数的な操作であるので、基底の持つ情報は穴や空洞の完全な位置情報とは言えないが、それでも基底を知ることによってベッチ数という単なる数情報以上の情報が得られることが多く、ホモロジー計算の応用においてもこのことが十分に意味のある結果に結びつくことは少なくない．第 5.1 節を参照せよ．

3.3 一般の図形の単体分割

この節の冒頭で、単体複体は単体を部品として組み立てた図形の設計図のようなものであると述べたが、同じ図形でもどれくらい細かい部品を使うかによって組み立て方の設計図（すなわち単体複体）は異なる。同じ図形から作られた異なる単体複体はどの程度まで共通の性質を持っているか、特にそれらのホモロジーは同じか、ということは基本的な問題である。この節ではホモロジーから一旦離れて、一般の図形（位相空間）の三角形分割、すなわち一般の図形を単体複体と関係づけるための考え方について簡単に解説する。一部の定義や説明は図に頼っておりあまり厳密ではないので、正確な定義や詳しい説明は田村 [4] などを参照されたい。

内部を含まない正四面体の表面は、球面の1つの三角形分割であると言える。このように言えるのは、正四面体がゴム膜でできているとして、その中に空気を一杯に入れば、それは丸くふくらんで球面になるからである。数学的にはこれは正四面体の表面の表す2次元図形と球面という2次元曲面が位相的に同型、すなわち同相だからである。一般に2つの図形（数学的には位相空間という） X, Y が同相とは、 X から Y への1対1で上への連続写像 $f: X \rightarrow Y$ であって、その逆写像 $f^{-1}: Y \rightarrow X$ もまた連続となるようなものが存在することをいう。このときこの写像 f を X から Y への同相写像という。

正四面体と球面の場合には、例えば正四面体を原点 O を内部に含むように置き、さらに原点を中心とする球面の半径を十分大きくして球面の内部に正四面体がすっぽりと含まれるようにするとき、原点を出て無限にのびる任意の半直線は、正四面体の表面および球面とそれぞれ1点ずつで交わる。そこでその交点同士を対応させることにより、正四面体の表面から球面への1対1で上への写像が定義され、それもその逆写像も連続であるので、これが正四面体の表面から球面への同相写像 f を与える。従って、正四面体の表面は球面と同相であると言える。

正四面体の表面は各面が三角形であるので2次元の単体複体 K の幾何的実現としての2次元多面体 $|K|$ であると見なせる。それから球面 S^2 への同相写像 $f: |K| \rightarrow S^2$ により、 K の各単体 σ の f による球面上の像 $f(\sigma)$ を考えると、それにより単体複体の持つ情報と同じ情報が球面上に与えられたことになる。このことを、写像 f によって球面上に1つの単体分割が与えられた、という。正四面体の代わりに正八面体や正二十面体などを用いても同様のことができ、それらは球面に正四面体の場合とは異なる単体分割を与える。

定義 3.9 位相空間 X がある単体複体 K の定める多面体 $|K|$ と同相であるとき、同相写像 $\xi: |K| \rightarrow X$ を指定することを、 X を単体分割するという。

注意 3.1 これまで「図形」という言葉をあいまいなままに用いて来た。一般に位相空間とは「位相」という遠近の概念が指定された集合を言うが、考えている位相空間があまりにも複雑なものであれば、それを単体分割できるとは限らないことに注意されたい。位相空間 X が単体分割可能であれば、ある単体複体 K と同相写像 $f: |K| \rightarrow X$ が存在するので、 X は多面体 $|K|$ と同相であり、位相空間としてはこれらは区別されない。しかし多面体というときにはそれは背後にある単体複体の構造を指定した位相空間であり、単なる位相空間よりも単体複体を指定された分だけ多くの情報を含んでいる。言い換えると、単体分割可能な位相空間は（後で述べるように）いろいろ異なる仕方で単体分割ができ、従っ

ていろいろ異なる多面体と考えることができる．そこで多面体と区別して，単体分割可能な位相空間を**位相多面体**と呼ぶことにする．

以下，本稿では「図形」と言えば位相多面体のことを意味する．

ある位相空間 X が2通りの単体分割 K, K' を持つならば，2つの同相写像

$$\xi : |K| \rightarrow X, \quad \xi' : |K'| \rightarrow X$$

が存在し，従って

$$f = (\xi')^{-1} \circ \xi : |K| \rightarrow |K'|$$

も同相写像ゆえ，2つの多面体 $|K|$ と $|K'|$ は同相である．しかしこの同相写像はもとの単体複体 K, K' の間の単体複体の構造を保つような写像とは限らない．一般に，2つの単体複体 K, K' に対して，連続写像 $f : |K| \rightarrow |K'|$ から対応する単体複体 K, K' の間の単体複体の構造を保つような対応関係が導かれるだろうか？そこでまず，単体複体の構造を保つ写像である単体写像の定義から述べる．

定義 3.10 2つの単体複体 K, K' の頂点，すなわち0単体の集合をそれぞれ K_0, K'_0 とする．写像 $\varphi : K_0 \rightarrow K'_0$ が次の性質(*)をみたすとき， φ を K から K' への**単体写像**といい，単に $\varphi : K \rightarrow K'$ と書く：

(*) 単体複体 K の任意の単体 $|A_0 A_1 \dots A_k|$ に対し， $|\varphi(A_0) \varphi(A_1) \dots \varphi(A_k)|$ は K' のある1つの単体である．(しかし $|A_0 A_1 \dots A_k|$ と同じ次元である必要はなく，次元が小さくなくてもよい.)

単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ が与えられると， K の任意の単体 σ の頂点が K' のある単体 τ の頂点に写るので，それを σ とそのすべての境界単体の内部に線型に拡張すると， σ から τ への写像が得られる．このような φ の拡張を K のすべての単体について行くと， $|K|$ から $|K'|$ への区分的線型写像 $|\varphi|$ が得られる．これは単体写像 φ から誘導される連続写像である．

特に単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ ，すなわちそれらの頂点の集合の間の写像 $\varphi : K_0 \rightarrow K'_0$ が1対1で上への写像であるとき，2つの単体複体 K, K' は**単体同型**であるという．このときには $\varphi^{-1} : K' \rightarrow K$ も単体写像であることに注意．また $|\varphi|$ により $|K|$ と $|K'|$ は自然に同相になることも容易に示せる．(考えてみよ.)

例えば K を五角形 $A_1 A_2 A_3 A_4 A_5$ の周が定める1次元単体複体， K' を三角形 $B_1 B_2 B_3$ の周が定める1次元単体複体とすると，写像

$$\varphi : \{A_1, A_2, \dots, A_5\} \rightarrow \{B_1, B_2, B_3\}$$

を

$$\varphi(A_1) = \varphi(A_2) = B_1, \quad \varphi(A_3) = B_2, \quad \varphi(A_4) = \varphi(A_5) = B_3$$

と定めると，これは K から K' への単体写像である．しかし

$$\psi : \{B_1, B_2, B_3\} \rightarrow \{A_1, A_2, \dots, A_5\}$$

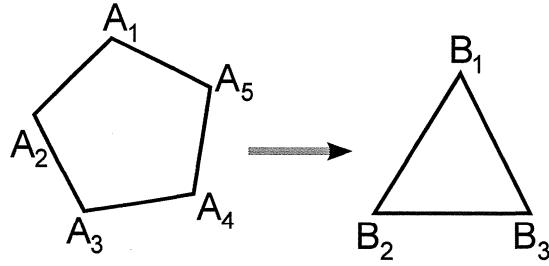


図 5: 単体写像.

を

$$\psi(B_1) = A_1, \psi(B_2) = A_3, \psi(B_3) = A_5$$

とすると、これは単体写像にはならない。(なぜか?)

単体写像は単体を単体に写しているので単体複体の構造を保っていると言って良いだろう。では、ある多面体 $|K|$ から別の多面体 $|K'|$ への連続写像 $f: |K| \rightarrow |K'|$ が与えられたとき、これが K から K' への単体写像を定めるだろうか? この問いに対しては、上の多角形の例を考えてみるだけで、一般には否定的であることが容易にわかる。しかし、この多角形の例から想像すると、一般に、与えられた単体複体から始めて、多面体は変えないでその単体分割を細かくしていくことにより、与えられた連続写像を十分良く近似する単体写像が得られるということは期待できそうである。

以下ではまず、単体複体の分割を細かくすることに対応する「細分」という概念と、連続写像を十分良く近似する単体写像を得るという「単体近似」の概念を説明し、基本的な定理である「単体近似定理」を述べる。

定義 3.11 2つの単体複体 K, L が同一の多面体を定める、すなわち $\mathbb{R}^N$ 内の集合として $|K| = |L|$ であるとき、 L の任意の単体 σ に対して K のある単体 τ が存在して $|\sigma| \subset |\tau|$ となるならば、 L は K の**細分**であるといい、 $L \triangleleft K$ と表す。

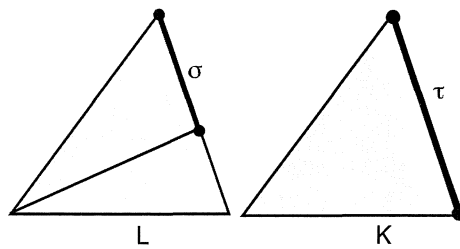


図 6: 単体複体 K とその細分 L .

定義 3.12 2つの単体複体 K, L に対し、それぞれの適当な細分 K', L' で K' と L' が単体同型となるようなものが取れるとき、 K と L は**組み合わせ同相**という。

単体複体 K と L が組み合わせ同相ならば、位相空間としては $|K| = |K'|$, $|L| = |L'|$ であり、また K' と L' が単体同型であることから $|K'|$ と $|L'|$ は同相なので、特に $|K|$ と $|L|$

は同相であることがわかる．すなわち単体複体の組み合わせ同相は対応する多面体の同相よりも強い概念である．

次に連続写像の単体近似の概念を説明する．

定義 3.13 単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ が連続写像 $f : |K| \rightarrow |K'|$ の**単体近似**であるとは、 $|K|$ の任意の点 x に対し、 $f(x)$ が K' のある単体 σ の内部に含まれたならば、 $|\varphi|(x) \in |\sigma|$ となることをいう．

単体複体 K の頂点 A に対し、 A を頂点に持つ K のすべての単体の内部の和集合を $\mathcal{O}(A, K)$ と書き、頂点 A の**開星状体**と呼ぶ．すなわち

$$\mathcal{O}(A, K) = \bigcup_{A \prec \sigma} \text{Int } \sigma$$

である．単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ が $f : |K| \rightarrow |K'|$ の単体近似であることは

$$f(\mathcal{O}(A, K)) \subset \mathcal{O}(\varphi(A), K')$$

が任意の $A \in K_0$ について成り立つことと同値である．

多面体の間の与えられた連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$ の単体近似を得るためには、一般には K の十分細かい細分を取る必要がある．そのための標準的な細分方法として用いられるものが**重心細分**と呼ばれるものであり、それは K の各単体にその重心を添加して、それから下の図のようにして得られる K の細分である．これを $\text{Sd}(K)$ と表す．

重心細分の正確な定義をきちんと述べるのは少し面倒であり、ここでは特に証明などの技術的な議論はしないので、図に頼る感覚的説明にとどめておく．詳細は例えば田村 [4, §9] を参照されたい．

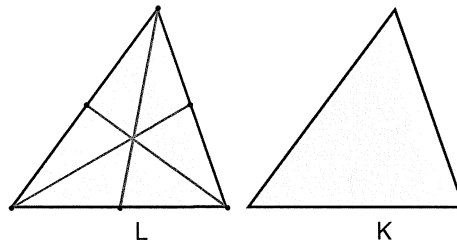


図 7: 単体複体 K の重心細分 L ．

次の定理は、単体複体 K, L の間の連続写像 $f : K \rightarrow L$ に対し、 K の重心細分を繰り返して行うことにより得られる単体複体 $\text{Sd}^m(K)$ から L への適当な単体写像で f を十分良く近似できることを述べており、**単体近似定理**と呼ばれる重要な定理である．

定理 3.3 (単体近似定理) 2つの単体複体 K, L と連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$ に対し、十分大きな自然数 m をとると f の単体近似 $\varphi : \text{Sd}^m(K) \rightarrow L$ が存在する．

単体近似がどれくらいもとの連続写像の性質を保存するかについて、次の結果が成り立つ：

命題 3.4 単体写像 $\varphi: K \rightarrow K'$ が連続写像 $f: |K| \rightarrow |K'|$ の単体近似ならば f と $|\varphi|$ はホモトープである。

ここで2つの写像がホモトープであることの定義は次のように定義される。

定義 3.14 2つの連続写像 $f, g: X \rightarrow Y$ がホモトープとは、連続写像

$$H: X \times [0, 1] \rightarrow Y$$

で、任意の $x \in X$ に対し $H(x, 0) = f(x)$, $H(x, 1) = g(x)$ という条件をみたすものが存在することをいう。このことは写像 f と g が連続変形で移り合うことを意味する。写像 f と g がホモトープであることを

$$f \sim g$$

と表す。

すなわち、単体近似定理とは、与えられた連続写像 $f: |K| \rightarrow |L|$ に対し、 K の重心細分を十分多く繰り返せば、細分された単体複体 $\text{Sd}^m(K)$ から L への単体写像 $\varphi: \text{Sd}^m(K) \rightarrow L$ で、それが誘導する連続写像 $|\varphi|$ が f とホモトープになるようなものが存在することを示している。この結果は次節で述べる連続写像のホモロジーへの誘導準同型写像の定義やホモロジー群の位相不変性などの議論において基本的である。

上の命題の証明は単体近似の定義からほぼ明らかである。実際、 $x \in K$ に対し、 $f(x)$ が K' のある単体 σ の内部に入れば $|\varphi|(x)$ も同じ単体 σ に属するので、その単体内で直線的に連続変形できるからである。

4 ホモロジーに誘導される写像, 相対ホモロジー

前節では単体複体とそのホモロジー群を導入したが、我々の興味は図形の幾何的性質を理解することであり、そのために対象とする図形（位相空間）を単体分割することによってそこに単体複体の構造を指定したのである。この指定された単体複体についてはホモロジー群を考えることができるが、同じ図形に異なる単体複体の構造が与えられたときに、それらのホモロジー群が一致するかどうかはまだ論じていなかった。この節では、これらの問題を考える。それには図形（位相空間）の間の連続写像や単体複体の間の単体写像がホモロジー群にどのように影響するかを考察することになる。

4.1 誘導準同型写像

まず最も考えやすい単体写像の場合から始める。2つの単体複体 K, K' の間の単体写像 $\varphi: K \rightarrow K'$ は K の k 単体 σ を K' の単体 τ に対応づける。ただし τ は一般には k 単体もしくはそれよりも低い次元の単体である。 K の k 単体 σ の記号化 $\hat{\sigma}$ の全体は鎖群 $C_k(K)$ の基底をなすので、

$$(\varphi\#)_k(\hat{\sigma}) = \begin{cases} (\varphi(\sigma) \text{ が } K' \text{ の } k \text{ 単体のとき}) & \varphi(\sigma) \\ (\varphi(\sigma) \text{ が } k-1 \text{ 次元以下の単体のとき}) & 0 \end{cases}$$

と定め、それを線型に拡張することにより線型写像

$$(\varphi_{\#})_k : C_k(K) \rightarrow C_k(K')$$

が得られる。このようにすると簡単な計算により、次が示せる。

命題 4.1 単体複体 K, K' から定まる鎖複体 $\mathcal{C}(K), \mathcal{C}(K')$ の境界作用素 ∂, ∂' と上で定めた線型写像 $\varphi_{\#k}$ との間には次の関係式が成り立つ：

$$\text{任意の } k = 0, \dots, \dim K \text{ に対し } \partial'_k \circ (\varphi_{\#})_k = (\varphi_{\#})_{k-1} \circ \partial_k \quad (4)$$

これを図式で表すと

$$\begin{array}{ccccccc} & & \downarrow & & \downarrow & & \\ \cdots & \leftarrow & C_{k-1}(K) & \xleftarrow{\partial_k} & C_k(K) & \leftarrow & \cdots \\ & & (\varphi_{\#})_{k-1} \downarrow & & (\varphi_{\#})_k \downarrow & & \\ \cdots & \leftarrow & C_{k-1}(K) & \xleftarrow{\partial'_k} & C_k(K) & \leftarrow & \cdots \\ & & \downarrow & & \downarrow & & \end{array}$$

となる。このような鎖複体間の可換図式をみたす線型写像は**鎖準同型写像**と呼ばれる。鎖準同型写像が得られれば、それから自然にホモロジー群の間の準同型が導かれる。すなわち性質 (4) より

$$\begin{aligned} (\varphi_{\#})_k(Z_k(K)) &\subset Z_k(K') \\ (\varphi_{\#})_k(B_k(K)) &\subset B_k(K') \end{aligned}$$

がただちに従うので、これらの商ベクトル空間の間の準同型写像（線型写像）

$$(\varphi_*)_k : H_k(K) \rightarrow H_k(K')$$

が導かれる。これを、単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ から誘導される**ホモロジー準同型写像**という。

定義 3.10 より、2つの単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$ と $\varphi' : K' \rightarrow K''$ の合成 $\varphi' \circ \varphi : K \rightarrow K''$ は明らかにまた単体写像である。従ってそれらが誘導する鎖準同型写像

$$\begin{aligned} \varphi_{\#} &: \mathcal{C}(K) \rightarrow \mathcal{C}(K') \\ \varphi'_{\#} &: \mathcal{C}(K') \rightarrow \mathcal{C}(K'') \\ (\varphi' \circ \varphi)_{\#} &: \mathcal{C}(K) \rightarrow \mathcal{C}(K'') \end{aligned}$$

が定義できるが、これらの間に

$$(\varphi' \circ \varphi)_{\#} = \varphi'_{\#} \circ \varphi_{\#} \quad (5)$$

が成り立つことも、ほぼ明らかであり、それからホモロジー群の準同型写像の間にも同様の関係が成り立つことが簡単に導かれる。

命題 4.2 単体写像 $\varphi : K \rightarrow K'$, $\varphi' : K' \rightarrow K''$ から誘導されるホモロジー群の準同型写像について

$$(\varphi' \circ \varphi)_* = \varphi'_* \circ \varphi_* : H_*(K) \rightarrow H_*(K') \rightarrow H_*(K'') \quad (6)$$

が成り立つ.

後で必要となる重心細分の性質を挙げておく.

命題 4.3 (1) 単体複体 K の重心細分 $\text{Sd}(K)$ に対し, 標準的な単体写像

$$\pi : \text{Sd}(K) \rightarrow K$$

が存在して, それはホモロジー群の間の同型

$$\pi_* : H_*(\text{Sd}(K)) \cong H_*(K)$$

を導く.

(2) $q \geq p$ なる任意の 0 以上の整数 p, q に対し, この標準的な単体写像 π を $q - p$ 回繰り返して合成することにより

$$\pi_p^q : \text{Sd}^q(K) \rightarrow \text{Sd}^p(K)$$

なる単体写像が定義できる. これももちろんホモロジー群の同型

$$(\pi_p^q)_* : H_*(\text{Sd}^q(K)) \cong H_*(\text{Sd}^p(K))$$

を導く.

(3) 単体写像 $\varphi : \text{Sd}^p(K) \rightarrow L$ が連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$ の単体近似であり, $q > p$ ならば,

$$\varphi \circ \pi_p^q : \text{Sd}^q(K) \rightarrow L$$

もまた f の単体近似である.

一般の図形 (位相空間) X, Y の間の連続写像 $f : X \rightarrow Y$ に対しては, 次のようにしてホモロジー群の準同型が導かれる. まず, 位相多面体 X, Y に対し, その単体分割 K, L を 1 つずつ指定する. (すなわち X と Y に多面体の構造を入れて, 位相空間として $X = |K|$, $Y = |L|$ とみなす.)

このとき単体近似定理により, 連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$ の単体近似 $\varphi : \text{Sd}^p(K) \rightarrow L$ が存在する. すると命題 4.3(2) より

$$(\pi_0^p)_* : H_*(\text{Sd}^p(K)) \cong H_*(K)$$

であるので, ホモロジー群の準同型写像

$$f_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L)$$

を

$$f_* = \varphi_* \circ (\pi_0^p)_*^{-1}$$

と定めると、これは単体近似となる p の取り方によらない。実際、別の単体近似 $\psi : \text{Sd}^q(K) \rightarrow L$ をとると $q \neq p$ なので、 $q > p$ として一般性を失わないが、このとき

$$\psi = \varphi \circ \pi_p^q$$

なので、命題 4.3(2) より

$$\psi_* \circ (\pi_0^q)^{-1} = \varphi_* \circ (\pi_p^q)_* \circ (\pi_0^q)^{-1} = \varphi_* \circ (\pi_0^p)^{-1} = f_*$$

となるからである。

定義 4.1 以上によって定義された準同型

$$f_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L)$$

を、連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$ から誘導されるホモロジー準同型写像という。

4.2 誘導準同型写像の性質

連続写像の誘導するホモロジー準同型写像は、単体写像が誘導するホモロジー準同型写像に基づいて定義されていることを考えると、次の命題が成り立つことは自然である。

命題 4.4 連続写像 $f : |K| \rightarrow |L|$, $g : |L| \rightarrow |M|$ から誘導されるホモロジー群の準同型写像について

$$(g \circ f)_* = g_* \circ f_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L) \rightarrow H_*(M) \quad (7)$$

が成り立つ。

実際、この命題は単体写像についての対応する命題 4.2 と連続写像から誘導されるホモロジー準同型写像の定義を用いれば容易に証明できる。

位相多面体 X に対しては、その単体分割 $X = |K|$ を与えるとそのホモロジー群は

$$H_*(X) = H_*(K)$$

と定義することができるが、それは X の単体分割に依存するよう見える。また位相多面体 X, Y に対し、連続写像 $f : X = |K| \rightarrow Y = |L|$ から誘導されるホモロジー準同型 $f_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L)$ もその定義自体は単体分割の仕方に依存している。しかしこれらは実は X, Y の単体分割の仕方によらないことがわかる。それを示す鍵となる性質がホモロジー群のホモトピー不変性である。

前に定義したように、2つの連続写像 $f, g : X \rightarrow Y$ がホモトープとはこれらが連続変形で移り合うことであった (定義 3.14)。

定理 4.5 2つの多面体の間の連続写像 $f, g : |K| \rightarrow |L|$ がホモトープであれば、それらが誘導するホモロジー準同型について

$$f_* = g_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L)$$

が成り立つ。

定義 4.2 2つの位相空間 X, Y がホモトピー同値であるとは、2つの連続写像

$$f: X \rightarrow Y, \quad g: Y \rightarrow X$$

が存在して

$$g \circ f \sim 1_X, \quad f \circ g \sim 1_Y$$

となることをいう。ただし $1_X: X \rightarrow X$ は X 上の恒等写像をあらわす。位相空間 X と Y がホモトピー同値であることを $X \simeq Y$ と書く。例えば図2の多面体は円周とホモトピー同値である。

従って上の定理より直ちに

系 4.6 (ホモロジー群のホモトピー不変性) 2つの多面体 $|K|, |K'|$ がホモトピー同値ならばそれらのホモロジー群は同型である：

$$H_*(K) \cong H_*(L)$$

を得る。実際、 $|K|, |L|$ がホモトピー同値であるので

$$g \circ f \sim 1_{|K|}, \quad f \circ g \sim 1_{|L|}$$

となる連続写像 $f: |K| \rightarrow |L|$, $g: |L| \rightarrow |K|$ が存在するが、上の定理からそれらが誘導するホモロジー準同型について

$$g_* \circ f_* = (1_{|K|})_*, \quad f_* \circ g_* = (1_{|L|})_*$$

となるので

$$f_*: H_*(K) \rightarrow H_*(L), \quad g_*: H_*(L) \rightarrow H_*(K)$$

は互いに他の逆写像であり、従ってそれらは同型写像である。

特に2つの多面体が同相であれば、あきらかにそれらはホモトピー同値であるので、

系 4.7 (ホモロジー群の位相不変性) 2つの同相な多面体のホモロジー群は同型である。

を得る。

位相多面体 X に対して、2通りの単体分割 K, K' が与えられた、すなわち同相写像

$$\xi: |K| \rightarrow X, \quad \xi': |K'| \rightarrow X$$

が与えられたとすると、

$$(\xi')^{-1} \circ \xi: |K| \rightarrow |K'|$$

は同相写像ゆえ、上の結果からそのホモロジー群は同型である：

$$\{(\xi')^{-1} \circ \xi\}_* = (\xi'_*)^{-1} \circ \xi_*: H_*(K) \cong H_*(K')$$

従って、位相多面体 X のホモロジー群を、 X の単体分割 $\xi: |K| \rightarrow X$ を1つ選んで

$$H_*(X) = H_*(K)$$

と定義すれば，単体分割を取り替えてもホモロジー群は2つの単体分割を与える写像から誘導されるホモロジー群の同型写像の違いしかない．この意味で位相多面体のホモロジー群は（同型を除いて）一意的に決まる．同様にして，連続写像 $f : X \rightarrow Y$ に対しても

$$f_* : H_*(X) \rightarrow H_*(Y)$$

を，単体分割 $\xi : |K| \rightarrow X, \eta : |L| \rightarrow Y$ に対し

$$(\eta^{-1} \circ f \circ \xi)_* : H_*(K) \rightarrow H_*(L)$$

のことに定めると，同型写像の違いを除いて， $f_* : H_*(X) \rightarrow H_*(Y)$ は矛盾なく定義される．

例 4.1 (球面のホモロジー群) 上に述べたように，球面 S^2 は正四面体の表面と同相であるので，例 3.4 より球面のホモロジー群は正四面体のそれと同型である．従って球面のホモロジー群は

$$H_k(S^2) \cong \begin{cases} (k = 0, 2 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq 0, 2 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

となる．

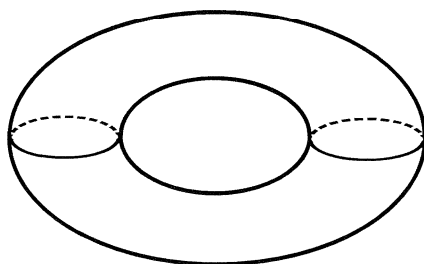


図 8: トーラス (円環面) .

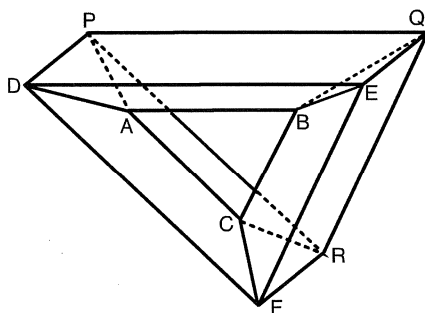


図 9: トーラスと同相な多面体（各面は四辺形であり，それらをさらに対角線で分割すれば単体分割が得られるが，図が煩雑になるので省略した）．

例 4.2 (トーラスのホモロジー群) トーラス (円環面) T^2 は図 8 のような曲面であり, それを多面体で表現したものが図 9 である. トーラスは正方形の向かい合う対辺を貼り合わせたものと見なせるので, この多面体を展開して, それに三角形分割を与えたもの (図 10) を考えると, そのホモロジーが計算しやすい. これよりトーラスを表す単体複体 $K(T^2)$ として

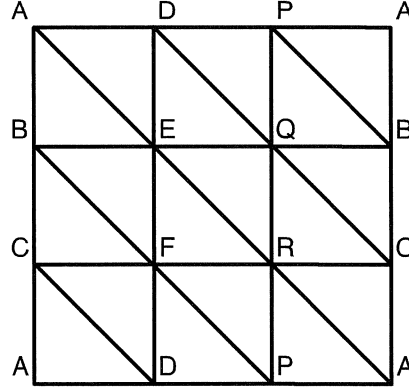


図 10: トーラスの展開図の三角形分割.

$$\begin{aligned}
K_0(T^2) &= \{|A|, |B|, |C|, |D|, |E|, |F|, |P|, |Q|, |R|\} \\
K_1(T^2) &= \{|AD|, |AE|, |AB|, |BE|, |BF|, |BC|, |CF|, |CD|, |CA|, \\
&\quad |DP|, |DQ|, |DE|, |EQ|, |ER|, |EF|, |FR|, |FP|, |FD|, \\
&\quad |PA|, |PB|, |PQ|, |QB|, |QC|, |QR|, |RC|, |RA|, |RP|\} \\
K_2(T^2) &= \{|ADE|, |ABE|, |BEF|, |BCF|, |CFD|, |CAD|, \\
&\quad |DPQ|, |DEQ|, |EQR|, |EFR|, |FRP|, |FDP|, \\
&\quad |PAB|, |PQB|, |QBC|, |QRC|, |RCA|, |RPA|\}
\end{aligned}$$

が得られる. これから生成される鎖複体 $\mathcal{C}(T^2)$ は $C_0(T^2)$, $C_1(T^2)$, $C_2(T^2)$ がそれぞれ 9, 27, 18 次元の実ベクトル空間であり, 従って境界作用素の行列表現は

$$\begin{aligned}
\partial_1 &: \mathbb{R}^{27} \rightarrow \mathbb{R}^9 \\
\partial_2 &: \mathbb{R}^{18} \rightarrow \mathbb{R}^{27}
\end{aligned}$$

である. これを具体的に書き上げるのはあまりに煩雑なので省略するが, これから頑張ってこれらの線型写像のランク (階数) を計算すると,

$$\begin{aligned}
\dim Z_0(T^2) &= 9, & \dim B_0(T^2) &= 8 \\
\dim Z_1(T^2) &= 19, & \dim B_1(T^2) &= 17 \\
\dim Z_2(T^2) &= 1, & \dim B_2(T^2) &= 0
\end{aligned}$$

となり、従ってトーラス T^2 のホモロジー群は

$$H_k(K(T^2)) \cong H_k(T^2) \cong \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k=1 \text{ のとき}) & \mathbb{R}^2 \\ (k=2 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \geq 3 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

を得る。特に $H_2(K(T^2))$ の生成元として

$$\begin{aligned} z_2 = & |ADE| - |ABE| + |BEF| - |BCF| + |CFD| - |CAD| \\ & + |DPQ| - |DEQ| + |EQR| - |EFR| + |FRP| - |FDP| \\ & + |PAB| - |PQB| + |QBC| - |QRC| + |RCA| - |RPA| \end{aligned}$$

をとれることが $\partial_2(z_2) = 0$ から確かめられる。同様に $H_1(K(T^2))$ の生成元としては

$$|AB| + |BC| + |CA|, \quad |AD| + |DP| + |PQ|$$

をとることができる。これらはトーラスの表面をまわる 2 種類の閉曲線に対応する。

このようにしていろいろな曲面やその他の図形のホモロジー群が計算できるが、このトーラスの場合の計算ですでにわかるように、ホモロジー群の計算を単体分割を与えて、手で計算するのはかなり大変である。CHomP などのホモロジー計算ソフトウェアは、このような計算を自動的にやってくれるので、複雑な単体複体のホモロジーを計算する際には大変便利である。詳しくは第 2 章を参照されたい。

この項の最後に、ホモトピーやホモトピー同値性に関連する概念を補足しておく。

定義 4.3 (1) 位相空間 X とその部分集合 A に対し、連続写像 $r: X \rightarrow A$ で $r|_A$ が A の恒等写像 1_A と一致するものが存在するときには、 A は X の**レトラクト**という。さらに $i: A \rightarrow X$ を包含写像とすると $i \circ r$ が X の恒等写像 1_X とホモトープであれば A は X の**変位レトラクト**という。このとき $r \circ i = 1_A$ は自明に成り立つので、 A と X はホモトピー同値であることに注意。

(2) 特に X 内の 1 点 x が X の変位レトラクトであるとき、 X は点 x に**可縮**であるという。これは定値写像 $x: X \rightarrow \{x\}$ が 1_X に (点 x を止めて) ホモトープであることと同値である。

例えば k 単体はすべて可縮である。(確かめよ。) しかし円周は可縮ではない。実際、もし可縮であればそのホモロジー群は同型でないといけませんが、円周のホモロジー群は内部を含まない三角形の周のホモロジー群と同じで、それは例 3.2 で計算したように、1 点のホモロジー群 (すなわち例 3.1 で計算した 1 単体のホモロジー群と同型な群) とは異なる。

4.3 部分複体と相対ホモロジー

単体複体 K の部分集合 L がそれ自身で単体複体であるとき、 L は K の**部分複体**であるという。このとき K とその部分複体 L との組 (K, L) を単体複体の**対**という。

単体複体の対 (K, L) が与えられたとき, L の定める鎖群 $C_k(L)$ は $C_k(K)$ の部分ベクトル空間であり, $C_k(L)$ の基底は自然に $C_k(K)$ の基底の部分集合となっているので, その商ベクトル空間

$$\frac{C_k(K)}{C_k(L)}$$

は, K の k 単体であって L の k 単体ではないものの全体の集合の記号化を基底とするベクトル空間と同一視できる. これを $C_k(K, L)$ と書くことにする.

部分複体の定義から, L の k 単体 (の記号化) に境界作用素を施したものはすべて L の $(k-1)$ 単体 (の記号化) の 1 次結合であるので, 鎖複体 $\mathcal{C}(K)$ の境界作用素 $\partial_k : C_k(K) \rightarrow C_{k-1}(K)$ は

$$\partial_k(C_k(L)) \subset C_{k-1}(L)$$

をみたす. 従って, ∂_k から自然に

$$\bar{\partial}_k : C_k(K, L) \rightarrow C_{k-1}(K, L)$$

なる線型写像が誘導され, これは性質 (1) をみたす. すなわち

$$\mathcal{C}(K, L) = \{C_k(K, L), \bar{\partial}_k\}_{k=0, \dots, \dim K}$$

は鎖複体となるので, そのホモロジー群 $H_k(\mathcal{C}(K, L))$ が定義できる. これを $H_k(K, L)$ と書き, 単体複体の対 (K, L) の k 次元**相対ホモロジー群**という.

簡単な例として, K をある n 単体 σ とその境界単体全体が定める単体複体 $K(\sigma)$ とし, L をその境界単体全体のなす単体複体とする. このとき明らかに $C_k(K, L)$ は $k = n$ のときは σ のみで生成される 1 次元ベクトル空間で, $k \neq n$ ならばすべて $C_k(K, L) = \{0\}$ である. 従って境界作用素 $\partial_k : C_k(K, L) \rightarrow C_{k-1}(K, L)$ はすべての k で $\partial_k = 0$ となり, それから直ちに

$$H_k(K, L) \cong \begin{cases} (k = n \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq n \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

が得られる. 次の例もこれをほんの少しだけひねった例である.

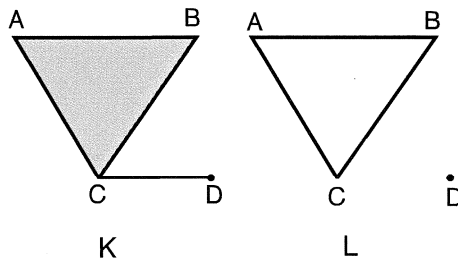


図 11: 単体複体 K とその部分複体 L .

例 4.3 図 11 のような単体複体 K とその部分複体 L を考える. これに対する鎖複体 $\mathcal{C}(K, L)$ は $C_2(K, L)$ が 2 単体 $|ABC|$ で生成される 1 次元ベクトル空間, $C_1(K, L)$ が 1 単体 $|CD|$

で生成される 1 次元ベクトル空間で、それ以外はすべて $\{0\}$ だけからなる自明なベクトル空間である。従って境界作用素はどの k についても $\partial_k = 0$ なので、ホモロジー群も直ちに

$$H_k(K, L) \cong \begin{cases} (k = 1, 2 \text{ のとき}) & \mathbb{R} \\ (k \neq 1, 2 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

となることがわかる。

4.4 ホモロジー完全列

CHomP などのソフトウェアを用いる限り、ホモロジー計算は計算機が自動的に行ってくれるのでユーザーは基本的にはデータファイルを用意して適当なコマンドを実行するだけでよい。しかしホモロジー理論の大きな利点の 1 つは幾何的な問題を代数計算に帰着することであり、その意味で代数的操作の便利さを活用することは理論的にも大変重要なことである。中でもホモロジー論で用いられる非常に強力な代数的操作として、**完全列**と呼ばれるものがある。これは代数的には、ベクトル空間とその間の線型写像の列

$$V_0 \xleftarrow{f_1} V_1 \xleftarrow{f_2} \cdots \xleftarrow{f_n} V_n$$

であって、すべての $1 \leq k \leq n-1$ について

$$\text{Ker } f_k = \text{Im } f_{k+1}$$

をみたすものをいう。ホモロジー論においては様々な種類の完全列が登場し、理論的にもまた具体例の計算においても大変便利な道具として利用される。例えば最も基本的な完全列として次のものがある。

定理 4.8 単体複体 K とその部分複体 L に対し、次の列は完全列である：

$$\cdots \xleftarrow{i_*} H_{k-1}(L) \xleftarrow{\partial_*} H_k(K, L) \xleftarrow{j_*} H_k(K) \xleftarrow{i_*} H_k(L) \xleftarrow{\partial_*} H_{k+1}(K, L) \xleftarrow{j_*} \cdots$$

ここで i_* は包含写像 $i: L \rightarrow K$ から誘導されたホモロジー準同型写像、 j_* は鎖複体の自然な写像 $j_\# : C(K) \rightarrow C(K, L) = C(K)/C(L)$ から誘導されたホモロジー準同型写像である。また ∂_* は境界作用素 $\partial: C_k(K) \rightarrow C_{k-1}(K)$ からある仕方で定義されるホモロジー準同型写像で**連結準同型写像**と呼ばれるものであるが、ここでは定義は省略する。詳細は例えば樹田 [2], 瀬山 [3] などを参照されたい。

初等的なホモロジー論に登場する重要な完全列としては他にもマイヤー・ヴィートリス完全列と呼ばれるものがあるが、これについてもここではこれ以上は触れられない。また、このサマーセミナーではホモロジー完全列を利用する場面が出てこないのも、そもそもこれらの完全列がホモロジー論でどのように利用され重要な役割を果たすかについてもここでは一切省略する。詳しくは田村 [4] や瀬山 [3] などをご覧ください。

5 第1章の終わりに

これまではホモロジー群をベクトル空間として扱って来たが、理論的にも計算の上でもホモロジー群は通常はベクトル空間より一般的な「加群」として考えるのが基本である。実際、第2章で紹介されるホモロジー計算ソフトウェア CHomP でも、計算結果はベクトル空間でなく加群として出力され、それは一般にベッチ数よりも精密な情報を含んでいる。そこで、第1章の終わりに加群とそれを用いたホモロジー群について、および CHomP で用いられる鎖複体である方体集合のホモロジーについて簡単にまとめる。

5.1 加群と整数係数ホモロジー

加群とは一言で言えば「加法」と呼ばれる演算 $+$ とその逆演算である「減法」 $-$ が定義された代数的な対象をいう。そこでは加法の結合法則と交換法則が成り立ち、また加法の単位元である零元 0 、および任意の元 a の逆元 $-a$ が一意的に存在する。ベクトル空間は加群であるが、ベクトル空間でない加群もある。例えば整数全体のなす集合 $\mathbb{Z}$ は加群であるが、あきらかにベクトル空間ではない。また、ある自然数 m を法とした整数の余り全体のなす集合

$$\mathbb{Z}_m = \{[k] \mid k \in \mathbb{Z}\} = \{[0], [1], \dots, [m-1]\}$$

についても、整数の加法から定まる自然な演算

$$[a] + [b] = [a + b]$$

によって加群となる。ただしもちろん任意の整数 k に対し、 $[k + m] = [k]$ であることを用いる。

ベクトル空間と加群の主な違いは次のようなものである：

スカラー倍：ベクトル空間では実数や複素数などのスカラー倍が定義されるが加群では整数倍しか定義されない**。

ねじれ元：ベクトル空間では、 0 でないスカラー倍が $\alpha u = 0$ となるような元は $u = 0$ に限るが、加群ではそうとは限らない。

基底：ベクトル空間には必ず基底が存在するが、加群ではそうとは限らない。

加群 G の任意の元 a に対し、その整数倍を考えることができる。実際、 $k \in \mathbb{N}$ ならば ka は a を k 個足し合わせたものであり、 k が負の整数ならば a の逆元 $-a$ を $|k|$ 個足し合わせたものを ka と定めれば良い。特に $a = 0$ ならば常に $ka = 0$ である。一方で $a \neq 0, k \neq 0$ であっても k の値によっては $ka = 0$ となることがある。例えば $G = \mathbb{Z}_m$ のとき $a = [1]$ とすると $ma = m[1] = [m] = [0]$ である。 $a \in G$ のとき、 0 でない任意の整数 k に対し $ka \neq 0$ となるならば ka ($k \in \mathbb{Z}$) はすべて互いに異なる G の元であり、その全体の集合

$$G_a = \{ka \mid k \in \mathbb{Z}\}$$

**ただし加群でも係数環を考えることができる。むしろその係数環が体である場合がベクトル空間というべき。

は G の部分集合であって、それ自体が加群である。このように加群 G の部分集合 H が G の演算によってそれ自体で加群となるとき、 H を G の**部分加群**という。同様に、零でない元 $b \in G$ がある整数 m に対して $mb = 0$ となるときも $G_b = \{kb \mid k \in \mathbb{Z}\}$ は G の部分加群となるが、これは有限集合である。このような G の元 b を**ねじれ元**といい、部分加群 G_b は**ねじれ部分加群**と呼ばれる。

2つの加群 G, H の間の写像 $f: G \rightarrow H$ がそれぞれの加法の演算 $+_G, +_H$ と両立する、すなわち任意の $g_1, g_2 \in G$ に対し

$$f(g_1 +_G g_2) = f(g_1) +_H f(g_2)$$

となるとき f を加群 G から H への**準同型写像**という。特に f が上への 1 対 1 写像であるときにはその逆写像 $f^{-1}: H \rightarrow G$ も自然に準同型写像となるが、このような上への 1 対 1 の準同型写像を**同型写像**といい、加群 G, H の間に同型写像が存在するときには G と H は加群として**同型**であるという。上の場合に、加群 G のねじれ部分加群は適当な自然数 m に対し $\mathbb{Z}_m$ と同型になる。また、 $a \in G$ がねじれ元でなければ G_a は $\mathbb{Z}$ と同型になる。

一般に 2つの加群 G_1 と G_2 に対し、それらの元 $g_i \in G_i$ ($i = 1, 2$) の組 (g_1, g_2) の全体を、それらの**直和** $G_1 \oplus G_2$ という。すなわち

$$G_1 \oplus G_2 = \{(g_1, g_2) \mid g_i \in G_i \ (i = 1, 2)\}$$

である。このとき $G_1 \oplus G_2$ の演算は

$$\begin{aligned}(g_1 + g'_1, g_2) &= (g_1, g_2) + (g'_1, g_2) \\ (g_1, g_2 + g'_2) &= (g_1, g_2) + (g_1, g'_2)\end{aligned}$$

と定義すれば良い。例えば

$$\mathbb{Z} \oplus \mathbb{R}, \quad \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}, \quad \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}_3$$

などはすべてこのような直和によって定義される加群である。特に $\mathbb{Z}$ を ℓ 個直和したものを $\mathbb{Z}^\ell$, $\mathbb{Z}_m$ を k 個直和したものを $\mathbb{Z}_m^k$ と書く。

加群 G が、そのある有限部分集合 $\{\gamma_i \mid i = 1, 2, \dots, n\}$ によって G の任意の元 g が必ず

$$g = k_1\gamma_1 + \dots + k_n\gamma_n \quad (k_1, \dots, k_n \in \mathbb{Z})$$

の形で表されるときには、加群 G は**有限生成**であるといい、このような γ_i ($i = 1, \dots, n$) を**生成系**、各々の γ_i たちを**生成元**という。特に g の生成系による表現が一意的であるときには、その生成系を**基底**という。例えば $G = \mathbb{Z}^2$ のときには $(1, 0), (0, 1)$ が生成系であり、同時に基底でもあるが、 $G = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}_3$ では $(1, [0]), (0, [1])$ は生成系だが基底ではない。実際、

$$(1, [2]) = 1 \cdot (1, [0]) + 2 \cdot (0, [1]) = 1 \cdot (1, [0]) + 5 \cdot (0, [1])$$

のように生成系による表示が一意的でないからである。

有限生成の加群については次の定理が基本的である。

定理 5.1 (有限生成加群の基本定理) 有限生成加群 G は適当な自然数 $\ell, m_1, \dots, m_s$ によって次の形の加群と同型になる：

$$G \cong \mathbb{Z}^\ell \oplus \mathbb{Z}_{m_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}_{m_s}$$

このとき ℓ を加群 G の**階数**という。

単体複体のホモロジー群を考える際には、単体複体の k 鎖群をその k 単体の整数係数の形式和、すなわち k 単体によって生成される加群とする。その境界作用素の定義は定義 3.6 と全く同様にできるので、その商加群として得られるホモロジー群も同様に定義される。これをこの単体複体の**整係数ホモロジー群**という^{††}。単体複体は有限個の単体からなるのでその鎖複体は有限生成加群であり、従ってその商加群であるホモロジー群も有限生成加群となるので、上の基本定理から単体複体 K の整係数 k 次ホモロジー群は常に

$$H_k(K) \cong \mathbb{Z}^\ell \oplus \mathbb{Z}_{m_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}_{m_s}$$

の形となる。このときその階数 ℓ が単体複体 K の整係数ホモロジー群の k 次元ベッチ数になるが、整係数ホモロジー群にはそれ以外にねじれ部分加群 $\mathbb{Z}_{m_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}_{m_s}$ が含まれており、そこにベッチ数では捉えられない幾何的情報が含まれている。

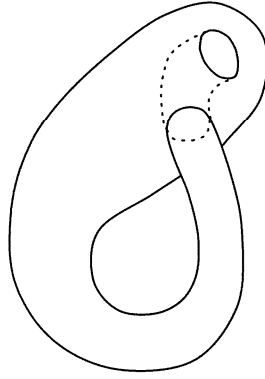


図 12: クラインの壺.

例 5.1 (クラインの壺のホモロジー群) クライン (Klein) の壺 K^2 とは、トーラスのときとは違い、正方形の 1 組の対辺は同じ向きに貼り合わせるが、もう 1 組の対辺は互いに逆向きになるように貼り合わせてできる図 12 のような曲面である。図からわかるように、クラインの壺を 3 次元空間に実現しようとすると（互いに絡み合った 2 つの円周を 2 次元平面に描こうとするとかならず自己交差をするのと同様に）どうしても自己交差を起こしてしまう。しかしトーラスのときと同様にして展開図で考えれば、その単体分割 $K(K^2)$ はとなる。これからトーラスのときと同様にして、今度は整係数のホモロジー群を計算すると、

$$H_k(K(K^2)) \cong H_k(K^2) \cong \begin{cases} (k=0 \text{ のとき}) & \mathbb{Z} \\ (k=1 \text{ のとき}) & \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}_2 \\ (k \geq 2 \text{ のとき}) & \{0\} \end{cases}$$

^{††}これに対してこれまで考えてきた実ベクトル空間としてのホモロジー群は実係数ホモロジー群と呼ばれる。またこれら以外にも有理係数ホモロジー群や $\mathbb{Z}_2$ 係数ホモロジー群などのいろいろな係数のホモロジー群が考えられる。

となる.

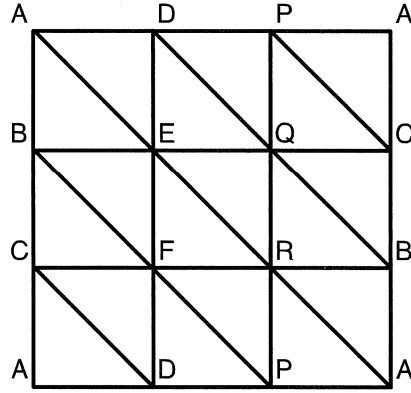


図 13: クラインの壺の単体分割.

ここでトーラスの場合とは異なり

$$\begin{aligned} z_2 = & |ADE| - |ABE| + |BEF| - |BCF| + |CFD| - |CAD| \\ & + |DPQ| - |DEQ| + |EQR| - |EFR| + |FRP| - |FDP| \\ & + |PAB| - |PQB| + |QBC| - |QRC| + |RCA| - |RPA| \end{aligned}$$

は $Z_2(K(K^2))$ の元ではない. 実際,

$$\partial_2(z_2) = 2(|AB| + |BC| + |CA|) \quad (8)$$

となるからである. これより $Z_2(K(K^2)) = 0$ であり, 従って $H_2(K(K^2)) = 0$ となる. 一方で (8) に注意すると

$$(|AB| + |BC| + |CA|) \in Z_1(K(K^2)), \quad 2(|AB| + |BC| + |CA|) \in B_1(K(K^2))$$

であり, これから $H_1(K(K^2))$ のねじれ部分加群 $\mathbb{Z}_2$ が現れることがわかる.

5.2 方体集合とそのホモロジー

第2章で詳しく紹介されるホモロジー計算ソフトウェア CHomP [5] では単体複体のホモロジーを計算することもできるが, その基本は単体ではなく「方体」(cube)と呼ばれるものを基本とする方体複体によって定義されるホモロジーを扱う. それは三角形を基本要素とする単体に比べて正方形を基本要素とする**方体集合**の方が応用上はいろいろ都合が良いからである. 実際, 第3章や第4章で紹介されるいろいろな応用の場面でも, ユークリッド空間内の幾何的対象を正方格子で区切られる適当な (さまざまな次元の) 「立方体」の集合で近似して方体集合を構成し, そのホモロジーを計算するというのが基本的な手段となる. また計算機上に実現された図形であれば, それはピクセルの集合として自然に方体集合の構造を持つので, 計算機を用いてホモロジー計算をするには方体集合が適していることも容易に想像されるだろう.

方体集合とそのホモロジーの定義の詳細は第2章に譲るが, その基本的構成の手順はこれまで述べたことと全く同じである. すなわち

- (1) 「方体」と呼ばれる基本単位を定義する
- (2) (一般に様々な次元の) 方体の有限個の集合として方体集合を定義する
- (3) それを各次元ごとに「記号化」したもので生成される鎖複体を構成する
- (4) 境界作用素 ∂_k を定義し, それが性質 (1) をみたすことを確認する
- (5) $Z_k = \text{Ker } \partial_k$, $B_k = \text{Im } \partial_{k+1}$ からホモロジー群を $H_* = Z_*/B_*$ によって定義する

を順番に実行すれば良い. このうちの手順 (1) と (4) 以外はほとんど自動的にできるので, 手順 (1) と (4) が本質的である. これについては第 2 章で確認されたい.

参考文献

- [1] T. Kaczynski, K. Mischaikow, and M. Mrozek, *Computational Homology*, Applied Mathematical Science Vol. 157, Springer, 2004.
- [2] 柘田幹也, 代数的トポロジー, 講座<数学の考え方> 15, 朝倉書店, 2002.
- [3] 瀬山士郎, トポロジー: 柔らかい幾何学, 日本評論社, 2003.
- [4] 田村一郎, トポロジー, 岩波全書, 岩波書店, 1972.
- [5] <http://chomp.rutgers.edu/>

第2章 CHomP 入門

— 基礎編 —

平岡裕章

広島大学理学研究科

1 はじめに

ホモロジー群計算ソフトウェア CHomP はホモロジー群の計算機を用いた高速計算，及びその応用を目指したプロジェクト Computational Homology Project [6] によって開発された．現在サポートしている OS は Windows, Mac, Unix, Linux であり，ウェブページ [6] からダウンロード可能である．ここで主に扱う幾何学的対象は方体集合と呼ばれる区間の直積で構成されるものであり，そのデータ構造の特徴（三角形分割を必要としない）から様々な分野への応用が展開されている．

そこでこの章の基礎編では CHomP の基本的な扱い方について解説を行うことにする．特に，頻繁に使われるいくつかのコマンドの入出力関連についての説明を中心に進めていく．インストール方法についてはウェブページ [6] 内にプログラム開発者による詳しい解説があるので本章では取り扱わないことにする．ちなみにこのウェブページにはここでは取り扱わないコマンドの使用法，豊富な例題，様々な応用例等の有益な情報が公開されているので一読をお勧めする．

まず始めに 2 節で単体複体のホモロジー群を扱う．上述のように CHomP は主に方体集合を幾何学的対象としているが，単体複体に対してもそのホモロジー群計算コマンドをいくつか用意している．単体複体のホモロジー群への応用を考えている読者を想定して簡単な解説を加えてみた．なお単体複体のホモロジー群の基礎は 1 章にある國府寛司氏による解説もしくは [2][4][5] 等を参照されたい．次に 3 節において方体集合を扱う．方体集合のホモロジー群については [1] に詳しいが，その概略を 3.1 節にまとめている．これらの準備をもとに 3.2 節では CHomP を用いた方体集合のホモロジー群計算を扱う．また本章発展編で一般の連続写像の誘導準同型写像に対する CHomP の使い方が説明されるが，4 節ではその導入という位置づけで CHomP を用いた包含写像に対する誘導準同型写像の計算方法についての解説を与える．

2 単体複体のホモロジー群計算

この節では単体複体のホモロジー群計算に関連した CHomP の使用方法について解説していく．図 1 に示された 2 つの多面体を例に挙げて考えてみよう．それぞれの単体複体は



図 1: 多面体

$$K_1 = \{|A_1A_2A_3|, |A_1A_2|, |A_2A_3|, |A_1A_3|, |A_3A_4|, |A_1|, |A_2|, |A_3|, |A_4|, |A_5|\},$$

$$K_2 = \{|A_1A_2|, |A_2A_3|, |A_1A_3|, |A_3A_4|, |A_1|, |A_2|, |A_3|, |A_4|, |A_5|\}$$

で与えられる．ここで単体複体 $K = \{s_i \mid i = 1, \dots, N\}$ が与えられたとき対応する多面体を $|K| = \cup_{i=1}^N s_i$ で表すことにしよう．CHomP はこのような単体複体のホモロジー群計算コマンドとして `homsimpl` を提供している．入力ファイルは単体複体の情報であり，図 1(a), (b) の場合では各頂点 A_i の添字 i を用いてそれぞれ次のテキストファイルで単体複体が定義される．

<pre> ; (a) ファイル: sc1.txt {1,2,3} {3,4} {5} </pre>	<pre> ; (b) ファイル: sc2.txt {1,2} {2,3} {1,3} {3,4} {5} </pre>
--	--

コマンド `homsimpl` は入力ファイルを読み込む際，単体複体を構成する為に必要となる面（図 1(a) であれば $|A_1A_2|$, $|A_2A_3|$, $|A_1A_3|$, $|A_1|$, $|A_2|$, $|A_3|$, $|A_4|$ ）を自動的に補間する機能を持っている．よって入力ファイル内に全ての単体を記述する必要はない．ちなみに CHomP が取り扱う入力ファイルではセミコロン; の後には使用者のコメントが記入できるようになっている．

このように用意された入力ファイル (`filename`) に対して単体複体のホモロジー群はターミナル上で

`homsimpl filename`

と入力すればよい．図 2 はターミナル上に出力された結果であり，ホモロジー群は

$$(a) H_0(K_1) = \mathbb{Z}^2, \quad (b) H_0(K_2) = \mathbb{Z}^2, H_1(K_2) = \mathbb{Z}$$

で与えられていることがわかる．実際 (a), (b) とともに連結成分は 2 つあり，(b) では 1 つのループが頂点 A_1, A_2, A_3 により構成されている．なおその他の出力内容としてはバージョン情報，計算過程，計算時間が示される．

さて次にコマンド `homsimpl` が持っているオプション機能について解説する．まず CHomP で用意されているコマンドはターミナル上でそのコマンド名のみを入力すると，簡単な解

```

HOMSIMPL, ver. 0.01, 11/09/04, Copyright (C) 2003-2004 by Pawel Pilarczyk.
This is free software. No warranty. Consult 'license.txt' for details.
[Tech info: simpl 4, chain 12, addr 4, integr 2.]
Reading simplices to X from 'sc1.txt'... 3 simplices read.
Collapsing faces in X... .. 8 removed, 2 left.
Note: The dimension of X decreased from 2 to 0.
Creating the chain complex of X... Done.
Time used so far: 0.00 sec (0.000 min).
Computing the homology of X over the ring of integers...
H_0 = Z^2
Total time used: 0.00 sec (0.000 min).
Thank you for using this software. We appreciate your business.

```

(a) homsimpl sc1.txt

```

HOMSIMPL, ver. 0.01, 11/09/04, Copyright (C) 2003-2004 by Pawel Pilarczyk.
This is free software. No warranty. Consult 'license.txt' for details.
[Tech info: simpl 4, chain 12, addr 4, integr 2.]
Reading simplices to X from 'sc2.txt'... 5 simplices read.
Collapsing faces in X... .. 2 removed, 7 left.
Creating the chain complex of X... Done.
Time used so far: 0.00 sec (0.000 min).
Computing the homology of X over the ring of integers...
Reducing D_1: 0 + 2 reductions made.
H_0 = Z^2
H_1 = Z
Total time used: 0.00 sec (0.000 min).
Thank you for using this software. We appreciate your business.

```

(b) homsimpl sc2.txt

図 2: ターミナル上の出力画面

説や使用可能なオプション群が表示される。homsimpl についても様々なオプションが用意されているが、ここでは応用上重要になってくる生成元の保存について実演してみる。入力される単体複体 (filename1) に対して、そのホモロジー群の生成元を出力ファイル (filename2) に保存するには homsimpl に -g オプションをつけて

```
homsimpl filename1 -g filename2
```

と入力すればよい。図3は例(a), (b)に対するそれぞれの出力ファイル gene1.txt, gene2.txt

```

The 2 generators of H_0 follow:
generator 1
1 * (5)
generator 2
1 * (3)

```

(a) gene1.txt

```

The 2 generators of H_0 follow:
generator 1
1 * (5)
generator 2
1 * (3)

The generator of H_1 follows:
1 * (1,2)
1 * (2,3)
-1 * (1,3)

```

(b) gene2.txt

図 3: 生成元の表示

を表示させたものである。まず (a) の例では頂点 A_5 と A_3 が H_0 の生成元として出力されている。また (b) では H_0 に加えて $|A_1A_2| + |A_2A_3| - |A_1A_3|$ が H_1 の生成元となることが示されている。実際 $-|A_1A_3| = |A_3A_1|$ であることから、向きまで考慮した $|A_1A_2| + |A_2A_3| - |A_1A_3|$ がループを構成している。ここで生成元の選択には任意性が含まれることを注意しておく。よってこの出力は homsimpl が内蔵している固有のアルゴリズムに従って適当に選ばれたものであり、生成元の代表元として特に意味を持つものではない。

homsimpl の使い方として最後に相対ホモロジー群について述べておく。単体複体 K_1 に対してその部分複体 $K_2 \subset K_1$ が与えられたとき、その相対ホモロジー群 $H_*(K_1, K_2)$ とは、多面体 $|K_1|$ の中で部分多面体 $|K_2|$ を 1 点に縮めた図形ホモロジー群に対応するものであった (ただし $H_0(K_1, K_2)$ の次元は連結成分の数から 1 つ引いたものとなる)。相対ホモロジー群の計算コマンドは再び homsimpl であり、 K_1 を記述したファイルを filename1, K_2 を記述したファイルを filename2 として

`homsimpl filename1 filename2`

と入力すればよい. 例えば図 1 に示した K_1 と K_2 に対して, その相対ホモロジー群を計算してみると図 4 のような計算結果を得る.

$H_0 = 0$
 $H_1 = 0$
 $H_2 = \mathbb{Z}$

The generator of H_2 follows:
 $1 * (1, 2, 3)$

ターミナル上の出力画面

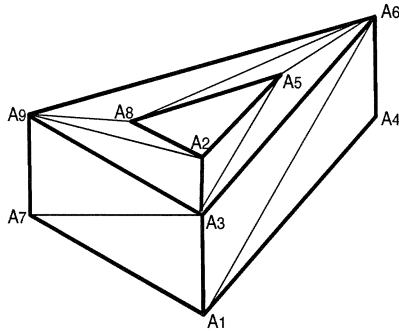
生成元

図 4: 相対ホモロジー群

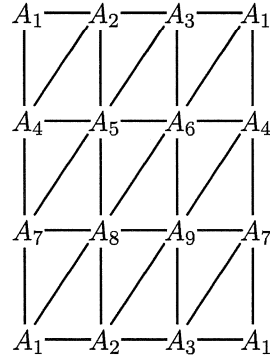
ここまでの例は $\mathbb{R}^2$ 内の多面体を扱ってきたため, 自動的に $H_i = 0, i \geq 2$, となり H_0, H_1 のみが表示されていたが, この例では非自明な $H_2(K_1, K_2) = \mathbb{Z}$ が得られた. 図 4 に示された生成元を見てもわかるように, これは $|K_2|$ を $|K_1|$ 内で 1 点に縮める際に現れた空洞 ($\simeq S^2$) を反映したものである.

以上がコマンド `homsimpl` の基本的な使い方である. では図 1(a), (b) 以外の単体複体に対してそのホモロジー群をいくつか計算してみよう.

(c) トーラス



(i) トーラスの単体分割



(ii) 展開図

図 5: トーラス

図 5 で与えられるトーラスのホモロジー群を計算してみよう. トーラスは長方形のそれぞれの対辺を同一視した閉曲面 (浮き輪) と同相であり, 図 5(i) の展開図は (ii) で与えられる. この展開図に従って単体複体を構成し `homsimpl` によってホモロジー群を計算させると, その結果は

$$H_0 = \mathbb{Z}, H_1 = \mathbb{Z}^2, H_2 = \mathbb{Z}$$

となる. 展開図からも明らかなように, $H_1 = \mathbb{Z}^2$ は独立な 1 次元の生成元が 2 つ (例えば $|A_1A_2| + |A_2A_3| + |A_3A_1|$, $|A_1A_4| + |A_4A_7| + |A_7A_1|$) 取れることに対応し, $H_2 = \mathbb{Z}$ は表裏の区別がつく閉曲面が 1 つ存在することを意味する. $H_0 = \mathbb{Z}$ は連結成分の個数が 1 つであることを反映している.

(d) クラインの壺

クラインの壺 (図 6) は幾何学的にはトーラスを構成する際におこなった長方形の対辺の同一視のうち, 1 対をねじらせて張り合わせたものとして実現される. $\mathbb{R}^3$ 空間内では実現不可能な対象であるが, ここでそのホモロジー群を計算してみよう. 図 7 に示した展開図をもとに入力ファイルを構成しホモロジー群を計算させると

$$H_0 = \mathbb{Z}, H_1 = \mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}, H_2 = 0$$

が得られる (ターミナル上では $\oplus$ は $+$ で表現されている). さてこの場合 H_0 はトーラスと等しいが, H_1 と H_2 については異なったホモロジー群が得られた. $H_2 = 0$ はクラインの壺が表裏の区別がつかないことに対応する. H_1 が $\mathbb{Z}_2$ と $\mathbb{Z}$ の直和になっているのは, 長方形の片方の対辺 (例えば $|A_1A_4| + |A_4A_7| + |A_7A_1|$) をねじって同一視した影響により, トーラスの場合は $\mathbb{Z}^2$ となっていた生成元の一つが $\mathbb{Z}_2$ に変わってしまったと理解できる.

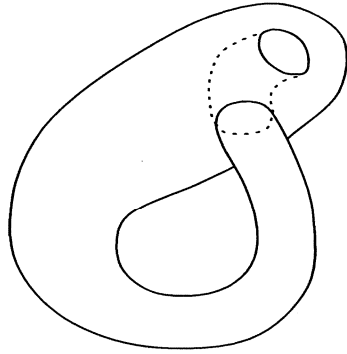


図 6: クラインの壺

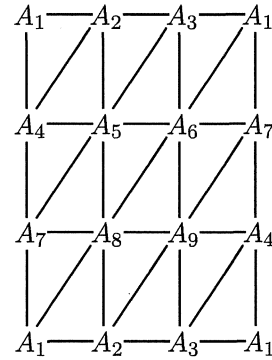


図 7: クラインの壺の単体分割の展開図

(e) Stanford Bunny

最後にスタンフォード大学が提供している The Stanford 3D Scanning Repository の中から Stanford Bunny の多面体近似 (図 8) を例に用いて, そのホモロジー群を計算してみる. ウェブページ [7] からデータをダウンロードし, `homsimpl` の入力用に加工してホモロジー群を計算してみると

$$H_0 = \mathbb{Z}, H_1 = \mathbb{Z}^7$$

が得られる. ここで用いたスキャンデータはメッシュが荒いものを選んだため, 1 次ホモロジー群が示している 7 つの欠陥が多面体近似をする際に発生していることがみてとれる.

3 方体集合のホモロジー群

この節では Computational Homology Project の中で最もその本領を発揮する方体集合のホモロジー群を取り扱う. 簡単に言うと方体集合とは, 整数上に端点を持つ閉区間の直積を構成単位とする幾何学的対象である. 計算機内でのデータ構造を考慮すると, このよ

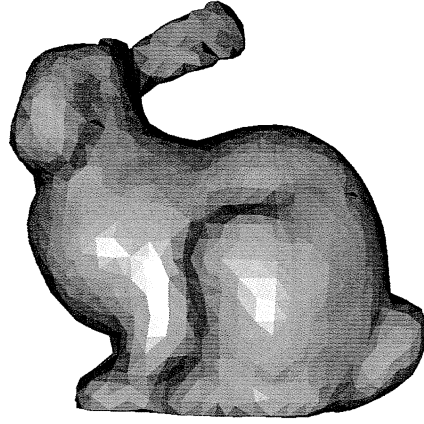


図 8: Stanford Bunny

うに区間の直積を構成単位とすることでその取り扱いは格段に容易になる。また、実際の観測・実験データ等は有理数の直積で構成される為、適当なスケーリングを施すことで上記の設定に持ち込むことが可能であり、その汎用性は高い。また得られた数値データの誤差（観測誤差や数値誤差）があらかじめわかっている場合には、その誤差分を区間として丸め込むことで、誤差を考慮した方体集合として数値データを幾何学的に表現することもできる。

3.1 方体集合のホモロジー群概論

前節の考察の対象であった単体複体は、図形の三角形分割を基礎とした単体を構成単位としていた。一方この節では基本方体と呼ばれる閉区間の直積からなる集合

$$Q = I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_n$$

$$I_i = [l_i, l_i + 1] \text{ もしくは } [l_i, l_i], l_i \in \mathbb{Z}$$

がその構成単位となる。これを用いて方体集合 $X \subset \mathbb{R}^n$ は基本方体の有限和

$$X = \bigcup_{k=1}^m \{Q_k : \text{基本方体}\}$$

として定義される。

さて単体複体 K が与えられたときそのホモロジー群をどのように定義したかを思い出してみると、鎖複体 $\{C_k(K), \partial\}$ と呼ばれる代数的対象が重要な役割を果たしていた。各 k 鎖群 $C_k(K)$ は K 内の k 単体が生成元となる加群であり、境界作用素 $\partial : C_k(K) \rightarrow C_{k-1}(K)$ は k 単体の境界を代数的に取り出す。この鎖複体を用いてホモロジー群は境界に関する特徴的な概念であるサイクル $Z_k(K) = \{c \in C_k(K) \mid \partial c = 0\}$ とバウンダリー $B_k(K) = \{c \in C_k(K) \mid c = \partial c', c' \in C_{k+1}(K)\}$ の差をはかる量として、剰余群

$$H_k(K) = Z_k(K) / B_k(K)$$

で定義される．よってホモロジー群の定義では幾何学的な対象である単体複体から，境界の情報を持った代数的対応物である鎖複体，特に境界作用素をいかにして構成するかがその本質となってくる．では方体集合に対してこの要求を満足する鎖複体をどのように構成するかを見ていこう．

まず始めに幾何学的設定に関する幾つかの記号を導入する． $\mathbb{R}^n$ 内で定義された基本方体 Q に対して $\text{emb } Q := n$ ， Q を構成している閉区間のうち 1 点に縮退していないものの数を $\dim Q$ で表す． $\text{emb } Q > \dim Q$ となる基本方体を縮退した基本方体と呼ぶことにする．これを用いて方体集合 X に対して以下の集合を定める：

$$K_k(X) := \{Q \subset X \mid \dim Q = k\}.$$

ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ 内で X が定義されていることを明記する際には右肩に n を付け $K_k^n(X)$ と表すことにする．全ての $K_k(X)$ の集まり $K(X) := \cup_{k=0}^n K_k(X)$ を方体複体と呼ぶ．なお一般に基本方体の集まり $K = \{Q_i \subset \mathbb{R}^n \mid i = 1, \dots, N\}$ が与えられたとき，その $\mathbb{R}^n$ 内での実現を $|K| := \cup_{i=1}^N Q_i$ で表すことにする．

では次に鎖複体を構成していこう．各基本方体 $Q \in K_k(X)$ を以下で定められる加群の生成元と見なしたものを $\hat{Q}$ で表し基本 k 鎖と呼ぶ．またそれらの集合を $\hat{K}_k(X) := \{\hat{Q} \mid Q \in K_k(X)\}$ と表す．この $\hat{K}_k(X)$ から生成される集合

$$C_k(X) := \left\{ \sum_{Q_i \in K_k(X)} a_i \hat{Q}_i \mid a_i \in \mathbb{Z} \right\}$$

に和を

$$\sum_{Q_i \in K_k(X)} a_i \hat{Q}_i + \sum_{Q_i \in K_k(X)} b_i \hat{Q}_i = \sum_{Q_i \in K_k(X)} (a_i + b_i) \hat{Q}_i$$

で与えて得られる加群を k 鎖群と定める． $C_k(X)$ の元を k 鎖と呼ぶことにする．

ここで定義した k 鎖群に対して境界作用素を適当に定めることで鎖複体を構成する．そのために基本方体 P, Q に対して積

$$\hat{P} \diamond \hat{Q} := \widehat{P \times Q}$$

を考え，それを線形拡張したものを方体積と定める．これを用いることで鎖群上の境界作用素 ∂ が次のように定義される．手順としてはまず始めに基本方体 Q に対する境界作用素を $\text{emb } Q$ に関して帰納的に定め，その後一般の k 鎖へは線形拡張していく．

まず $\text{emb } Q = 1$ の場合はある $l \in \mathbb{Z}$ を用いて $Q = [l, l]$ か $Q = [l, l+1]$ で与えられるので，それぞれに応じて

$$\partial \hat{Q} := \begin{cases} 0, & Q = [l, l] \\ \widehat{[l+1]} - \widehat{[l]}, & Q = [l, l+1] \end{cases}$$

で境界作用素を定める．次に $\text{emb } Q = n > 1$ の場合であるが， $Q = I_1 \times I_2 \times \dots \times I_n$ に対して $P = I_2 \times \dots \times I_n$ とおき，帰納的に

$$\partial \hat{Q} := (\partial \hat{I}_1) \diamond \hat{P} + (-1)^{\dim I_1} \hat{I}_1 \diamond (\partial \hat{P})$$

で定める．最後に一般の k 鎖 $c = a_1 \hat{Q}_1 + \cdots + a_m \hat{Q}_m$ については線形拡張

$$\partial c := a_1 \partial \hat{Q}_1 + \cdots + a_m \partial \hat{Q}_m$$

で定義する．

このようにして定めた境界作用素が $\partial : C_k(X) \rightarrow C_{k-1}(X)$ となることは明らかである．
例として $Q = [l, l+1] \times [k, k+1]$ に対して $\partial \hat{Q}$ を計算してみると

$$\begin{aligned} \partial \hat{Q} &= \partial \widehat{[l, l+1]} \diamond \widehat{[k, k+1]} - \widehat{[l, l+1]} \diamond \partial \widehat{[k, k+1]} \\ &= (\widehat{[l+1]} - \widehat{[l]}) \diamond \widehat{[k, k+1]} - \widehat{[l, l+1]} \diamond (\widehat{[k+1]} - \widehat{[k]}) \\ &= [l+1] \times \widehat{[k, k+1]} - [l] \times \widehat{[k, k+1]} - \widehat{[l, l+1]} \times [k+1] + \widehat{[l, l+1]} \times [k] \end{aligned}$$

を得る．基本 1 鎖の前の符号 $+$ を縮退していない区間の座標が増える方向， $-$ を座標が減る方向と思うと， Q を反時計方向にまわる境界が代数的に取り出せていることになる（図 9 参照）．また $\partial^2 = 0$ となることも定義に従って計算すれば導かれ，「境界の境界は空集

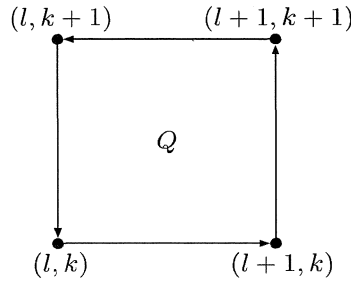


図 9: $Q = [l, l+1] \times [k, k+1]$ の境界

合」という事実が代数的に表現できていることになる．ここで得られた $\{C_k(X), \partial\}$ を方体集合の鎖複体と定める．

鎖複体が定義されたので，これを基にして方体集合のホモロジー群を定義する．単体複体のときと同様に $C_k(X)$ に対してサイクル $Z_k(X)$ とバウンダリー $B_k(X)$ を

$$\begin{aligned} Z_k(X) &:= \{c \in C_k(X) \mid \partial c = 0\} \\ B_k(X) &:= \{c \in C_k(X) \mid c = \partial c', c' \in C_{k+1}(X)\} \end{aligned}$$

で定める． $\partial^2 = 0$ より当然 $B_k(X) \subset Z_k(X)$ であるが逆は一般には成り立たず，その差に関する情報を剰余群

$$H_k(X) := Z_k(X) / B_k(X)$$

で与えたものが方体集合の k 次ホモロジー群となる．

このようにして定義された方体集合のホモロジー群が通常ホモロジー群と同様の性質を持つことは容易に確かめられる．詳しくは参考文献 [1] を参照されたい．

3.2 方体集合のホモロジー群計算

まずはじめに方体集合を記述する入力テキストファイルの書式について説明する．全ての基本方体の次元が扱っている空間の次元 n と等しい場合と，幾つかの基本方体が縮退している場合に応じて2通りの入力書式が用意されている．例を用いてそれぞれの書式を見ていこう．

(I) 全ての基本方体の次元が n の場合

この場合各基本方体は

$$[l_1, l_1 + 1] \times \cdots \times [l_n, l_n + 1]$$

と表されている為，端点 $(l_1, \dots, l_n)$ を定めれば基本方体が一意に定まる．よって方体集合を構成するそれぞれの基本方体に対して，この端点の情報を入力ファイルに記述すればよい．図10に示した方体集合の場合はその右に示してあるファイル `fullcubes.txt` が入力ファイルとして用いられる．ちなみに基本方体は閉区間の直積で表されているので，例

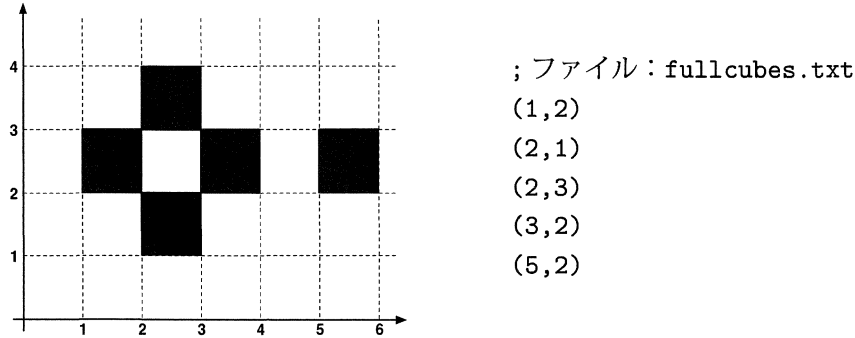


図 10: 方体集合の例 (右は入力ファイル)

えば基本方体 $(1,2)$ と $(2,1)$ は図10では交わっているものとして扱われる．

(II) 幾つかの基本方体が縮退している場合

この場合は縮退している基本方体があるため，それぞれの基本方体を各座標ごとに記述する必要がある．例えば k 番目の区間が縮退している基本方体

$$[l_1, l_1 + 1] \times \cdots \times [l_{k-1}, l_{k-1} + 1] \times [l_k, l_k] \times [l_{k+1}, l_{k+1} + 1] \times \cdots \times [l_n, l_n + 1]$$

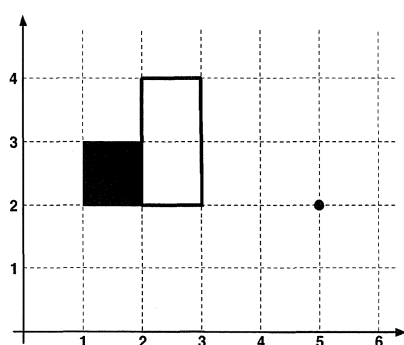
を考えた場合，そのまま各座標ごとにそれぞれの区間の情報を記載する書式

$$[l_1, l_1 + 1] \times \cdots \times [l_{k-1}, l_{k-1} + 1] \times [l_k, l_k] \times [l_{k+1}, l_{k+1} + 1] \times \cdots \times [l_n, l_n + 1]$$

と，次のように各座標成分の最小点と最大点の座標をスペースで区切って対として表示する方法

$$[(l_1, \dots, l_{k-1}, l_k, l_{k+1}, \dots, l_n) (l_1 + 1, \dots, l_{k-1} + 1, l_k, l_{k+1} + 1, \dots, l_n + 1)]$$

の2通りがある．ここでアルファベット x は直積記号 $\times$ を表すために用いられる．縮退している点が2つ以上ある場合もそれぞれ同様に拡張される．例えば図11からなる方体集合の場合は，その右に示してある `reducubes.txt` が入力ファイルとして用いられる．



```
; ファイル: reducubes.txt
[1,2] x [2,3]          [(1,2) (2,3)]
[2] x [3,4]            [(2,3) (2,4)]
[2,3] x [2]            [(2,2) (3,2)]
[2,3] x [4]            もしくは [(2,4) (3,4)]
[3] x [2,3]            [(3,2) (3,3)]
[3] x [3,4]            [(3,3) (3,4)]
[5] x [2]              [(5,2) (5,2)]
```

図 11: 方体集合の例 (右は入力ファイル)

このようにして構成される入力ファイルに対して、CHomP の基本ソフトウェアはベッチ数を計算するコマンド `chomp` を用意している。例えば図 10 と図 11 の例では方体集合を記述したファイル (filename) に対して

```
chomp filename
```

を入力すれば、出力としてベッチ数 "2, 1, 0" が得られる。なおこのコマンドにはベッチ数の計算に使われるアルゴリズムを指定するオプションがある。最もよく使われるアルゴリズムは `MM_CR` (とても速いが適用範囲は狭い) と `PP` (速くはないが適用範囲は広い) であり、その指定の方法は `--engine` オプションの後にアルゴリズム名を次のように指定すればよい。

```
chomp filename --engine MM_CR
```

一方 CHomP 拡張ソフトウェアではコマンド `homcubes` が用意されており、方体集合のホモロジー群が

```
homcubes filename
```

により出力される。図 12 は図 10, 図 11 で示した方体集合に対する出力ターミナル画面で

```
HOMCUBES, ver. 3.07, 04/25/97, Copyright (C) 1997-2007 by Pawel Pilarczyk.
This is free software. No warranty. Consult 'license.txt' for details.
Reading cubes to X from 'fullcube.txt'... 5 cubes read.
300 bit fields allocated (0 MB) to speed up 2-dimensional reduction.
Reducing full-dim cubes from X... 0 removed, 5 left.
Transforming X into a set of cells... 5 cells created.
Collapsing faces in X... 32 removed, 9 left.
Note: The dimension of X decreased from 2 to 1.
Creating the chain complex of X... Done.
Vertices used: 16 of dim 2.
Time used so far: 0.00 sec (0.000 min).
Computing the homology of X over the ring of integers...
Reducing D1: 0 + 5 reductions made.
H0 = Z^2
H1 = Z
Total time used: 0.01 sec (0.000 min).
Thank you for using this software. We appreciate your business.
```

```
homcubes fullcubes.txt
```

```
HOMCUBES, ver. 3.07, 04/25/97, Copyright (C) 1997-2007 by Pawel Pilarczyk.
This is free software. No warranty. Consult 'license.txt' for details.
Reading cubical cells to X from 'reducube.txt'... 9 cubical cells read.
Collapsing faces in X... 6 removed, 17 left.
Note: The dimension of X decreased from 2 to 1.
Creating the chain complex of X... Done.
Vertices used: 11 of dim 2.
Time used so far: 0.00 sec (0.000 min).
Computing the homology of X over the ring of integers...
Reducing D1: 0 + 7 reductions made.
H0 = Z^2
H1 = Z
Total time used: 0.00 sec (0.000 min).
Thank you for using this software. We appreciate your business.
```

```
homcubes reducubes.txt
```

図 12: ターミナル上の出力画面

あり、ホモロジー群はいずれも

$$H_0 = \mathbb{Z}^2, H_1 = \mathbb{Z}$$

で与えられていることがわかる。また生成元を保存するには `homsimpl` の場合と同様に

```
homcubes filename1 -g filename2
```

とすることで、`filename2` にホモロジー群の適当な生成元が各次元ごとに出力される。

以上はあらかじめ用意された方体集合を入力データとして取り扱ったが、実験や観測から得られる画像ファイルを直接入力として用いたい状況も当然考えられる。この要望に対して、CHomP では bitmap 形式の 2 次元画像データの方体集合表現を上記 (I) の形式で出力するコマンド `bmp2pset` を用意している。例えば入力 bitmap ファイル `picture.bmp` が白黒画像のとき、コマンド

```
bmp2pset picture.bmp picture.txt
```

により `picture.bmp` 画像の基本方体表現が `picture.txt` に出力される。この出力ファイルを `homcubes` の入力として使用することで、bitmap 画像のホモロジー群計算が容易に行われる。入力画像データがカラーデータのときは自動的にグレースケール (0 ~ 255) に変換されて処理が行われる。その場合はコマンド `bmp2pset` とオプション `-t` を組み合わせて閾値のグレースケールレベルを指定し、対応する範囲の方体部分集合を出力させることが可能である。オプション `-t` で閾値を指定しない場合は画像データから自動的に閾値のグレースケールレベルを判断して対応してくれる。例えば 3 色で色分けされた図 13 に対しては次のいずれかのコマンドを用いることでそれぞれの色ごとの方体部分集合が出力される。

```
bmp2pset picture.bmp -t100 -t150 A.txt B.txt C.txt  
bmp2pset picture.bmp A.txt B.txt C.txt
```

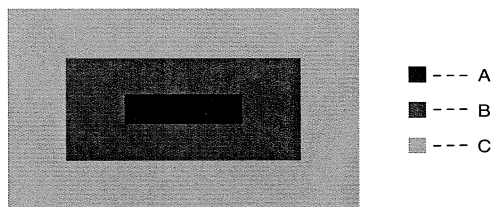


図 13: 3 色で色分け表示された方体集合

ここで `A.txt` には中心の黒い長方形 *A*, `B.txt` には中心から 2 番目の帯状領域 *B*, `C.txt` には最も外側の帯状領域 *C* にそれぞれ対応する方体部分集合が保存されることになる。オプション `-t100, -t150` はグレースケールの閾値レベルを 100 と 150 に設定していることを意味し、グレースケールレベル 0 ~ 99, 100 ~ 149, 150 ~ 255 に対応するピクセルがそれぞれ `A.txt`, `B.txt`, `C.txt` に出力されることになる。この例のように一目で 3 色から成り立つことがわかる場合にはオプションで閾値を指定する必要はあまりない。しかしほぼ 3 色から成り立っているが境界上で多数のグレースケールレベルのピクセルが混在している場合などでは適切な閾値レベルを指定しないと、望むべき方体部分集合が得られないこともあるので注意が必要である。

では図 13 の例で得られた方体集合 A.txt, B.txt, C.txt を用いて, 相対ホモロジー群を計算してみる. 書式自体は homsimpl の場合と同様に方体集合の対を

homcubes A.txt B.txt

のように入力すればよいが, その出力はホモロジー群 $H_*(A \cup B, B)$ を計算している点に注意しないといけない. よってこの場合の出力は

$$H_0(A \cup B, B) = 0, H_1(A \cup B, B) = 0, H_2(A \cup B, B) = \mathbb{Z}$$

となるのである.

4 包含写像に対する誘導準同型写像の計算

基礎編の最後にホモロジー群上の誘導準同型写像について解説をしておく. 1 章で解説されたように, 位相空間 X から Y への連続写像 $f: X \rightarrow Y$ が与えられたとき, 誘導準同型写像と呼ばれるホモロジー群上の準同型写像 $f_*: H_*(X) \rightarrow H_*(Y)$ が導かれる. この f_* には X が連続写像 f によってどのように Y に移されるかについての情報が含まれている. その情報はホモロジー群の各生成元に対するものであり, 写像 f のトポロジカルな振る舞いは f_* が示す各生成元の対応を見ることで理解可能となる.

位相幾何学を勉強していくと単体複体のホモロジー群を構成した後に特異ホモロジー群へ話が移っていく. その理由の一つは, 位相空間だけでなくその間の連続写像も代数的に扱うことの有用性を利用する為には, 特異ホモロジー群の設定が自然になってくるからである. では方体集合に対しても特異ホモロジー群のような概念を導入しているかというところではない. あくまで特異ホモロジー群は理論の構成の為には非常に便利であるが, 計算機で扱うことには全く向いていない概念である. この困難を克服し方体集合間の連続写像の取り扱いを可能にした概念が組み合わせ方体多価写像 (以後簡単に方体写像と呼ぶ) と呼ばれるものである [1].

方体集合 X, Y が縮退していない基本方体の集まり $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ を用いてそれぞれ構成されているとする. ($X = |\mathcal{X}|, Y = |\mathcal{Y}|$). このとき $\mathcal{X}$ から $\mathcal{Y}$ への方体写像 $\mathcal{F}: \mathcal{X} \multimap \mathcal{Y}$ ($\multimap$ は方体写像を表す記号) とは $\mathcal{X}$ 内の各基本方体 Q_i に対して $\mathcal{Y}$ 内の基本方体の集まりを対応付ける多価写像として定義される. 図 14 の場合であれば

$$\mathcal{F}(Q_1) = \{\bar{Q}_1, \bar{Q}_2\}, \mathcal{F}(Q_2) = \{\bar{Q}_3\}, \mathcal{F}(Q_3) = \{\bar{Q}_4\}, \mathcal{F}(Q_4) = \{\bar{Q}_5, \bar{Q}_6\}$$

が方体写像を定める. ここで X と Y の基本方体をそれぞれ $Q_i, \bar{Q}_i$ と表している. また方体集合の対 $X, Y, (X \subset Y)$, が与えられたとき, 包含写像 $i: X \rightarrow Y$ は自然に方体写像と見なすことができる (包含写像については方体写像と見なした場合も通常の写像の記号を用いることにする).

一般に, 方体集合間の連続写像 $f: X \rightarrow Y$ に対して方体写像 $\mathcal{F}: \mathcal{X} \multimap \mathcal{Y}$ が $\mathcal{X}$ 内の各基本方体 Q_i に対して $f(Q_i) \subset |\mathcal{F}(Q_i)|$ を満たし, かつ非輪状性 (定義は発展編を参照) という性質を満たせば, f の誘導準同型写像は $\mathcal{F}$ を用いて計算可能であることが知られている [1][3]. 方体写像に関する詳しい解説と CHomP を用いた本格的な応用は Pilarczyk 氏の

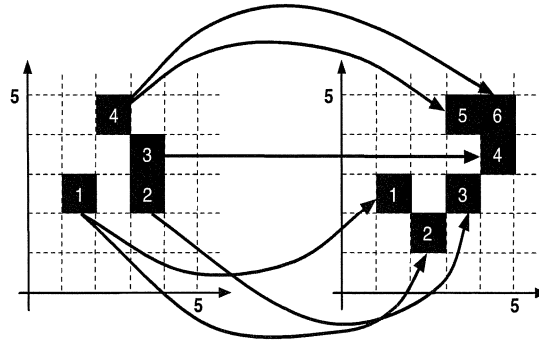


図 14: 方体写像の例

解説や以後の章にゆずることにし、ここでは上記の性質を自然に満たす包含写像を例に用いて誘導準同型写像がもつ意味や CHomP による扱い方を説明することにしよう。

包含写像に対する誘導準同型写像 $i_* : H_*(X) \rightarrow H_*(Y)$ には、 $H_*(X)$ の生成元をあらわす幾何学的対象は Y ではどういう存在であるかについての情報が込められている。よって包含写像 $i : X \rightarrow Y$ は単射であるが、そこから導かれる誘導準同型写像 $i_* : H_*(X) \rightarrow H_*(Y)$ が単射になるとは限らない。

図 15 と図 16 に示されている例を考えてみよう。方体集合 $X_i, Y_i, (X_i \subset Y_i), i = 1, 2$ のホモロジー群はいずれも

$$\begin{aligned} H_0(X_i) &= H_0(Y_i) = \mathbb{Z} \\ H_1(X_i) &= \mathbb{Z}, H_1(Y_i) = \mathbb{Z}^2, \\ H_k(X_i) &= H_k(Y_i) = 0, k \neq 0, 1, \end{aligned}$$

で与えられ、ホモロジー群を見ただけでは各 X_i が Y_i にどのように埋め込まれているかわからない。そこでこれらの包含写像に対して誘導準同型写像を CHomP を用いて計算してみる。

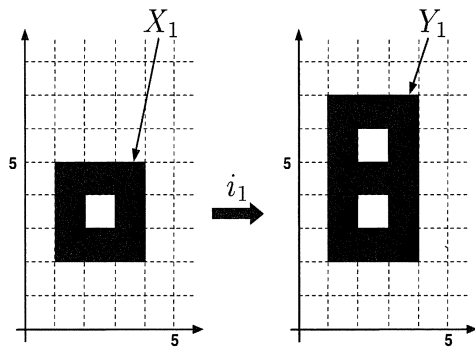


図 15: 包含写像の例 (1)

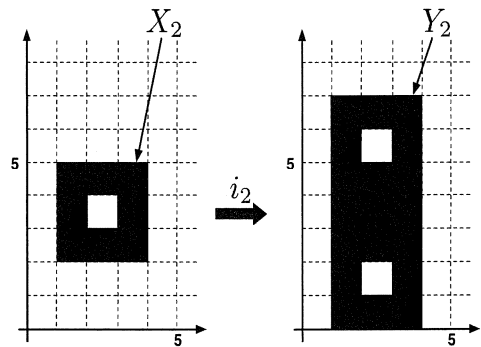


図 16: 包含写像の例 (2)

一般に方体写像 $\mathcal{F} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ が与えられたとき、その誘導準同型写像は

```
homcubes map.txt X.txt Y.txt
```

によって計算される。ここで `X.txt`, `Y.txt` には各方体集合 X, Y をこれまでと同様に入力する。`map.txt` には `X.txt` 内の基本方体が方体写像によってどのように移されるかを記述することになる。例えば図 14 の場合では `map.txt` は次のようになる。

```
(1,2) -> {(1,2) (2,1)}
(3,2) -> {(3,2)}
(3,3) -> {(4,3)}
(2,4) -> {(3,4) (4,4)}
```

ここでマイナス-と大小記号 $>$ は写像を表す記号として用いられ、中括弧 $\{ \}$ 内に基本方体の集まりがスペースで区切って指定される。この書式に従うと包含写像 i_1, i_2 に関する入力ファイルはいずれも次で与えられることになる。

```
(1,2) -> {(1,2)}
(2,2) -> {(2,2)}
(3,2) -> {(3,2)}
(1,3) -> {(1,3)}
(3,3) -> {(3,3)}
(1,4) -> {(1,4)}
(2,4) -> {(2,4)}
(3,4) -> {(3,4)}
```

なお包含写像の場合にはファイル `map.txt` はコマンド

```
cub2map -i X.txt map.txt
```

を用いることで自動的に生成される。

これらの入力ファイルに対して図 15 と図 16 の誘導準同型写像を `CHomP` を用いて計算させてみた結果が図 17 と図 18 である。この出力画面は $H_k(X)$ の各生成元が誘導準同型写

```
The map induced in homology is as follows:
Dim 0: f (x1) = y1
Dim 1: f (x1) = y2
```

図 17: i_{1*} の出力画面

```
The map induced in homology is as follows:
Dim 0: f (x1) = y1
Dim 1: f (x1) = 0
```

図 18: i_{2*} の出力画面

像によってどの $H_k(Y)$ の生成元に移っているかを各次元 $\text{Dim } k$ ごとに示している。ここで `CHomP` の出力では、写像は一般に記号 f , $H_k(X)$ の生成元は $x_1, x_2, \dots$, $H_k(Y)$ の生成元は $y_1, y_2, \dots$, のように表される。また生成元の番号はホモロジー群の各次元ごとに 1 から与えられており、その実体は `-g` オプションを用いて生成元を出力させた場合の各番号の生成元である。よって図 17 や図 18 の $\text{Dim } 0$ と $\text{Dim } 1$ の後に現れている x_1 は別の生成元を表している。さて出力の意味であるが、1 次元の生成元に対して両者の結果は異なっており、 i_{1*} では $H_1(X_1)$ の生成元が $H_1(Y_1)$ の生成元 y_2 に移り、 i_{2*} では $H_1(X_2)$ の生成元は 0 に移っている。これは図 15 と図 16 を見れば明らかで、 X_1 は包含写像 i_1 によって

$H_1(Y_1)$ の生成元となりうるサイクルに移っている. 一方 Y_2 に基本方体 $(2,3)$ があることから包含写像 i_2 による X_2 の像は $H_1(Y_2)$ の生成元にはなり得ないことに対応している.

— 発展編 —

Paweł Pilarczyk

京都大学

(訳：平岡裕章，広島大学理学研究科)

5 連続写像に対する誘導準同型写像の計算

方体集合対 (X, A) と (Y, B) , $(A \subset X, B \subset Y)$ の間の連続写像 $f: (X, A) \rightarrow (Y, B)$, $f(A) \subset B$ が与えられたとき，その誘導準同型写像は CHomP を用いて計算可能である．そこで使用されているアルゴリズムの詳細については [3] を参照されたい．このアルゴリズムは方体集合に付随する様々な特徴を用いており，単体複体間の連続写像に対する誘導準同型写像には適用できない．単体複体の誘導準同型写像に関しては効率的なアルゴリズムが現在のところ存在しておらず，このことは方体集合を基礎としたホモロジー群計算の有用性を意味している．

5.1 方体写像

方体集合 X, Y が与えられたとき連続写像 $f: X \rightarrow Y$ は多価写像 $\mathcal{F}: \mathcal{X} \multimap \mathcal{Y}$ を用いて表現可能である．ここで $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ はその実現が $X = |\mathcal{X}|, Y = |\mathcal{Y}|$ となる縮退していない基本方体の集まりである．また $\mathcal{F}$ は $\mathcal{X}$ の各基本方体 Q に対して $\mathcal{Y}$ の基本方体の集まり $\mathcal{F}(Q) \subset \mathcal{Y}$ を対応させる多価写像である．このような写像 $\mathcal{F}$ は組み合わせ方体多価写像もしくは単に方体写像と呼ばれる．また全ての基本方体 $Q \in \mathcal{X}$ について $f(Q) \subset |\mathcal{F}(Q)|$ が成り立つとき $\mathcal{F}$ を f の表現と呼ぶ．

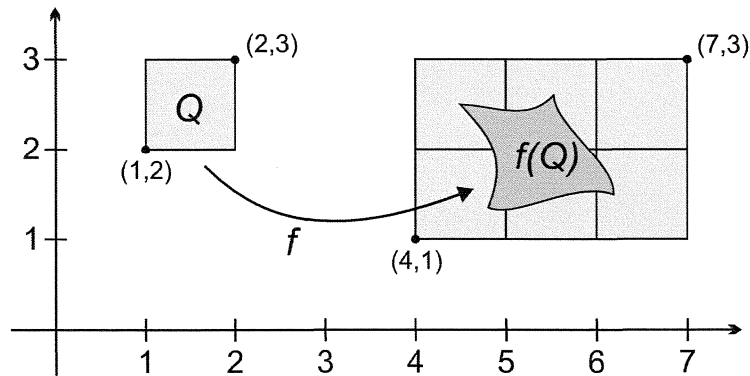


図 19: 基本方体 Q の f とその表現である方体写像 $\mathcal{F}$ による像

CHomP では方体写像を定めるテキストファイルに対して 2 通りの書式を用意している。1 つ目は異なる行ごとに対応 $\mathcal{X} \ni Q \mapsto \{Q_1, \dots, Q_n\} \subset \mathcal{Y}$ を記入する方法である。ここで基本方体の集まりは空白で区切って指定される。例えば $(1,2) \rightarrow \{(4,1) (4,2) (5,1) (5,2) (6,1) (6,2)\}$ は図 19 に示されている $\mathcal{F}([1,2] \times [2,3]) = \{[4,5] \times [1,2], [4,5] \times [2,3], [5,6] \times [1,2], [5,6] \times [2,3], [6,7] \times [1,2], [6,7] \times [2,3]\}$ を意味する。基本編でも説明しているが各基本方体は最も座標の値が小さい頂点で指定される。次のリストはこの書式に従った方体写像の例である。

例 1 書式 1

```
(0,0) -> {(0,0) (0,1)}
(0,1) -> {(0,1) (0,2) (0,3)}
(0,2) -> {(0,4) (1,4)}
(0,3) -> {(2,4) (3,4)}
(0,4) -> {(4,3) (4,4)}
(1,4) -> {(4,1) (4,2) (4,3)}
(2,4) -> {(3,0) (4,0)}
(3,4) -> {(1,0) (2,0)}
(4,4) -> {(0,0) (0,1)}
(4,3) -> {(0,1) (0,2) (0,3)}
(4,2) -> {(0,4) (1,4)}
(4,1) -> {(2,4) (3,4)}
(4,0) -> {(4,3) (4,4)}
(3,0) -> {(4,1) (4,2) (4,3)}
(2,0) -> {(3,0) (4,0)}
(1,0) -> {(1,0) (2,0)}
```

方体写像を定義する 2 つ目の書式は各基本方体 Q の像の実現 $|\mathcal{F}(Q)|$ が凸集合になる場合に適用される。この場合最も座標が小さい頂点と大きい頂点を指定すれば凸集合が定まることに注意しよう。 $\mathcal{X}$ の各基本方体も同様に表すと、この書式を用いた場合は図 19 の方体写像は $[(1,2) (2,3)] [(4,1) (7,3)]$ で定められる。像が多くの基本方体からなる凸集合で与えられる場合には、その入力を書式 1 に比べて非常に簡単になる。ただし書式 2 の入力ファイルにはその先頭に付加的な情報（空間次元、 $\mathcal{X}$ の構成要素数、写像の種類）を指定する必要がある。次の例 2 は書式 2 に従って記入された方体写像の例である。

例 2 書式 2

```
Space Dimension: 2
Number Of Primitive Arguments: 16
Map: AlmostPerfect
Primitive Argument    Value
[(0,0) (1,1)]         [(0,0) (1,2)]
[(0,1) (1,2)]         [(0,1) (1,4)]
[(0,2) (1,3)]         [(0,4) (2,5)]
[(0,3) (1,4)]         [(2,4) (4,5)]
```

[(0,4) (1,5)]	[(4,3) (5,5)]
[(1,4) (2,5)]	[(4,1) (5,4)]
[(2,4) (3,5)]	[(3,0) (5,1)]
[(3,4) (4,5)]	[(1,0) (3,1)]
[(4,4) (5,5)]	[(0,0) (1,2)]
[(4,3) (5,4)]	[(0,1) (1,4)]
[(4,2) (5,3)]	[(0,4) (2,5)]
[(4,1) (5,2)]	[(2,4) (4,5)]
[(4,0) (5,1)]	[(4,3) (5,5)]
[(3,0) (4,1)]	[(4,1) (5,4)]
[(2,0) (3,1)]	[(3,0) (5,1)]
[(1,0) (2,1)]	[(1,0) (3,1)]

END

5.2 方体写像についての仮定

連続写像 f の表現 $\mathcal{F}: (\mathcal{X}, A) \rightarrow (\mathcal{Y}, B)$ を用いて誘導準同型写像 f_* を構成する為には, $\mathcal{F}(Q) \neq \emptyset$ や $\mathcal{F}(A) \subset B$ といった自明な仮定の他に, 次で与えられる写像の非輪状性が満たされる必要がある [1][3].

定義 3 $\bigcap_{Q_i \in \mathcal{R}} Q_i \neq \emptyset$ となる基本方体の集まり $\mathcal{R} \subset \mathcal{X}$ に対して $|\mathcal{F}(\mathcal{R})|$ がつねに非輪状となるとき, 方体写像 $\mathcal{F}: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ は非輪状であると呼ぶ.

すぐわかるように対象としている方体写像がこの定義を満たしているかどうかを調べることは容易ではない. しかし書式 2 で扱ったように全ての基本方体の像の実現 $|\mathcal{F}(Q)|$ が凸集合になっている場合には自動的にこの定義は満たされることが知られている. よって誘導準同型写像の計算にとっては各基本方体の像の実現が凸集合になるような写像は扱いやすいことになる.

CHomP では与えられた方体写像が非輪状性を満たしているか確認するコマンド `chkmvmap` ("check multivalued map" の略) を提供している. このコマンドは次に紹介する `homcubes` と同様に用いられ, 方体写像 `F.map`, 方体集合 `X.cub, A.cub, Y.cub, B.cub` で与えられるテキストファイルに対して次のように用いられる.

```
chkmvmap F.map X.cub A.cub Y.cub B.cub
```

5.3 homcubes を用いた計算方法

基礎編にも出てきたコマンド `homcubes` を用いて非輪状性の仮定を満たす方体写像から誘導準同型写像を計算することができる. 空間対の写像 $\mathcal{F}: (\mathcal{X}, A) \rightarrow (\mathcal{Y}, B)$ を扱っている場合は $\mathcal{F}, \mathcal{X}, A, \mathcal{Y}, B$ を表す 5 つのテキストファイルが必要となる. $A = B = \emptyset$ の場合にはそれらを除いた 3 つのファイルが用いられる. 例えば $H_*(X, A), H_*(Y, B)$ の生成元も保存する場合にはコマンド

```
homcubes F.map X.cub A.cub Y.cub B.cub -g XA.gen -g YB.gen
```

で誘導準同型写像が計算される。ここで `XA.gen`, `YB.gen` にはホモロジー群 $H_*(X, A)$, $H_*(Y, B)$ の生成元がそれぞれ保存されることになる。

5.4 Conley 指数への応用

連続写像 $f: (X, A) \rightarrow (Y, B)$ (ここで $X \subset Y, A \subset B$) の誘導準同型写像を方体写像表現 $\mathcal{F}: (\mathcal{X}, A) \rightarrow (\mathcal{Y}, B)$ を用いて計算する際、包含写像 $i: (X, A) \rightarrow (Y, B)$ がホモロジー群上の同型写像を誘導する場合がある。ちなみに離散力学系の Conley 指数の計算ではよく登場する。このような状況では $H_*(X, A)$ の生成元は $H_*(Y, B)$ の生成元としても扱われ、 f と i^{-1} に対する誘導準同型写像の合成

$$(i_*)^{-1} \circ f_*: H_*(X, A) \rightarrow H_*(X, A)$$

が意味を持つことになる。

この合成写像は `homcubes` で `-i` オプションを付けることにより容易に計算される。実際には f_* と i_* の2つの誘導準同型写像を計算した後、 i_* の逆写像を計算し2つを合成している。よって i_* が同型写像にならない場合には逆写像の計算時にエラーが出ることになる。

またこの場合、コマンド `chkmvmap` はオプション `-i` を付けることで写像 $f: (X, A) \rightarrow (Y, B)$ に対して非輪状性に加えて $X \subset Y, A \subset B$ 等の必要になる仮定を検証してくれる。ただし i_* が同型写像であるかはこのオプションでは検証できず、`homcubes` を実行して見る必要がある。

6 C++インターフェース

CHomP ライブラリには C++ 言語で記述されたプログラム上でホモロジー群計算関連の関数へアクセスを可能にするインターフェースが整備されている。より高度な数値計算の為にこのようなインターフェースは必須であり、あらかじめデータを保存しその後 `chomp` や `homcubes` といったコマンドで計算させるといった手間が大幅に省ける。ここでは幾つかの基本的なインターフェースについて解説を与える。

6.1 基本インターフェース

基本インターフェースではコマンド `chomp` で用いられていたプログラムへの C++ 言語からのアクセスを可能にしている。ここで基本方体は縮退していないものが扱われ、それらから構成される方体集合は `bitmap` 形式で用意する必要がある。ちなみに `chomp` でオプション指定をしていた `engine` はここでも選択可能になっている。

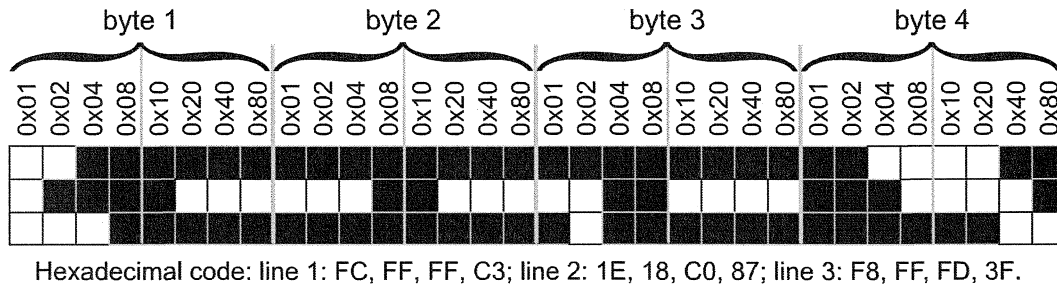


図 20: ビット列で表される bitmap 形式の例

6.1.1 Bitmap 形式

基本インターフェースでは方体集合を表すために bitmap 形式を採用しており、その n 次元 bitmap データは 1 次元配列として格納されることになる。ここでビット 1 は対応する場所に基本方体が存在しビット 0 は存在しないことを意味する。また取り扱う方体集合を内部に含む $\mathbb{R}^d$ 内の長方形領域 $[0 \times n_1] \times \cdots \times [0 \times n_d]$ をあらかじめ指定する必要がある。その為に整数 $n_1, \dots, n_d$ を配列に格納することになる。その際技術的制約から n_1 の値は 32 ビット計算機では 32 の倍数、64 ビット計算機では 64 の倍数にする必要がある。各 1 バイトは 8 つの連続した基本方体に対応し、下位のビットほど座標の値が小さい基本方体を表す（図 20 を参照）。つまり bitmap データの最初のビットは基本方体 $(0, \dots, 0)$ を表し、それに続く $n_1 - 1$ 個のビットが第 1 座標が 0 の基本方体を表すことになる。その後の n_1 個のビットは第 1 座標が 1 の基本方体に対応し、以下同様に各座標成分を大きくすることで d 次元方体集合が指定される。このように用意された方体集合に対してそのベッチ数を計算する関数は次で与えられる。

```
void ComputeBettiNumbers (const void *buffer, int *sizes, int dim,
int *result, const char *engine = 0, const int *wrapping = 0,
bool quiet = false);
```

次の C++ プログラムでは ComputeBettiNumbers を使って図 20 で表された方体集合のベッチ数を計算させている。

プログラム 4 bitmap 形式で用意された方体集合のベッチ数計算

```
01 #include <iostream>
02 #include "capd/homengin/homology.h"
03
04 int main ()
05 {
06     const int dim = 2;
07     int sizes [] = {32, 3};
08     char buffer [] = {
09         '\xFC', '\xFF', '\xFF', '\xC3',
10         '\x1E', '\x18', '\xC0', '\x87',
11         '\xF8', '\xFF', '\xFD', '\x3F',
12     };
13
14     const char *engine = 0;
15     bool quiet = false;
16
```

```

17  int betti [dim + 1];
18  ComputeBettiNumbers (buffer, sizes, dim, betti, engine, quiet);
19  for (int i = 0; i <= dim; ++ i)
20      std::cout << (i ? " " : "") << betti [i];
21  std::cout << '\n';
22  return 0;
23 }

```

6.1.2 クラス CubicalSet

ComputeBettiNumbers を使うには bitmap 形式で方体集合を構成する必要があるが、その作成や操作を簡単に行う為に CHomP ではクラス CubicalSet が用意されている。CubicalSet のオブジェクトを作るには方体集合が定義される長方形領域

$$[n_1^-, n_1^+] \times \cdots \times [n_d^-, n_d^+]$$

を, $d, n_1^-, \dots, n_d^-, n_1^+, \dots, n_d^+$ で指定する必要がある。ここで用意された長方形領域に基本方体を加えるには関数 Add を, 消去するには関数 Delete を用いればよい。これまでと同様に基本方体は座標の値が最小の頂点 $(k_1, \dots, k_d)$ で表されるが, 当然それらは不等式 $n_i^- \leq k_i < n_i^+$ を満たさなければならない。このようにして作られる方体集合に対してそのベッチ数を計算させるには関数

```

void ComputeBettiNumbers (const CubicalSet &s,
int *result, const char *engine = 0, bool quiet = false);

```

を用いればよい。CubicalSet を用いたサンプルプログラムは以下で与えられる。

プログラム 5 クラス CubicalSet の使用例

```

01 #include <iostream>
02 #include "capd/homengin/cubiset.h"
03
04 int main ()
05 {
06     int left_coords [] = {-6, -5, 0};
07     int right_coords [] = {6, 1, 4};
08     CubicalSet Q (left_coords, right_coords, 3);
09
10     int cube1 [] = {1, -5, 0};
11     Q. Add (cube1);
12     int cube2 [] = {5, -2, 2};
13     Q. Add (cube2);
14
15     int betti [4];
16     ComputeBettiNumbers (Q, betti, "MM_CR", true);
17     for (int i = 0; i < 4; ++ i)
18         std::cout << (i ? " " : "") << betti [i];
19     std::cout << '\n';
20     return 0;
21 }

```

6.2 拡張インターフェース

拡張インターフェースでは一般の基本方体 (辺が縮退していてもよい), 方体集合, 方体複体, 方体写像などに対応するクラスを用意している。またこれらのクラスに対してホ

モロロジー群を計算する関数も整っている。なおデータの入出力には通常の C++ と同様に << や >> を用いることができる。これらは名前空間 `chomp::homology` 内で使われることになる。

クラスのオブジェクトを指定するには頂点の座標を表す整数列を入力する必要があるが、標準では `coordinate` 型と呼ばれるものが用いられる (16 ビット整数 `short int` と同じ)。実用上は $[-32768, 32767]$ の整数で十分であると思われるが、それ以上の範囲を使用する際はソースコードを参照されたい。

ホモロジー群 H_q は有限生成アーベル群であり

$$H_q \simeq \underbrace{\mathbb{Z} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}}_{\beta_q} \oplus \mathbb{Z}_{p_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}_{p_k}$$

の形で表現される。拡張インターフェース内では関数 `BettiNumber` や `TorsionCoefficient` を用いることでベッチ数 β_q やねじれ係数 $(p_1, \dots, p_k)$ の情報が取り出せるようになっている。

6.2.1 クラス `Cube`, `SetOfCubes`

`Cube` は $\mathbb{R}^d$ 内で縮退していない基本方体を表す為に使われるクラスである。このクラスのコンストラクタは基本方体を指定する座標と次元の情報を必要とする。一方 `Cube` で指定されたオブジェクトから関数 `coord` によって座標の列、関数 `dim` で基本方体の次元が取り出せるようになっている。

このような基本方体で構成される方体集合を記述するクラスとして `SetOfCubes` がある。このクラスに基本方体を加えるには `add` 関数、消去するには `remove` 関数がそれぞれ用いられる。また与えられた基本方体が `SetOfCubes` のオブジェクトに既に含まれているかどうかを調べる関数 `check` も用意されている。

ここで紹介した `SetOfCubes` で表される方体集合 X や方体集合対 (X, A) のホモロジー群を計算する関数として `Homology` が用意されている。その使用例はプログラム 6 に示してある。(内容はプログラム 5 と同じ)。また `Homology` を用いた生成元や相対ホモロジー群の計算方法についてはプログラム 7, プログラム 8 を参照されたい。

プログラム 6 拡張インターフェースを用いたホモロジー群計算 (1)

```
01 #include <iostream>
02 #include "chomp/homology/homology.h"
03
04 using namespace chomp::homology;
05
06 int main ()
07 {
08     coordinate coords1 [] = {1, -5, 0};
09     Cube Q (coords1, 3);
10     SetOfCubes S;
11     S.add (Q);
12     coordinate coords2 [] = {5, -2, 2};
13     S.add (Cube (coords2, 3));
14
15     Chain *hom = 0;
16     int maxLevel = Homology (S, "S", hom);
```

```

17   for (int q = 0; q <= maxLevel; ++ q)
18       std::cout << (q ? " " : "") << BettiNumber (hom [q]);
19   std::cout << '\n';
20   delete [] hom;
21   return 0;
22 }

```

6.2.2 クラス CubicalCell, CubicalComplex

$\mathbb{R}^d$ 内の一般の基本方体を表すクラスとしては `CubicalCell` が用意されている。そのコンストラクタとしては縮退していない基本方体を作る為に `Cube` が必要とした入力や、縮退している場合に対応する最小と最大の頂点座標を表した整数列の対などが必要となる。

方体複体を表すクラスは `CubicalComplex` で与えられ、そのオブジェクトに基本方体を付け加えるには関数 `add` を用いる。与えられた方体複体 `C` の次元は関数 `dim` で参照でき、また指定された次元 k の基本方体の集まりを取り出すには `[]` を用いて `C[k]` とすればよい。ここで方体複体を定めるには全ての基本方体の面をあらかじめ `CubicalComplex` に入力しておく必要は無く、必要な面は計算の際に自動的に補間される。

次のサンプルプログラムは方体複体の構成からそのホモロジー群と生成元の計算までを示している。このプログラムではホモロジー群とその生成元を表示する際に関数 `ShowHomology` と `ShowGenerators` を用いている。

プログラム 7 拡張インターフェースを用いたホモロジー群計算 (2)

```

01 #include <iostream>
02 #include "chomp/homology/homology.h"
03
04 using namespace chomp::homology;
05
06 int main ()
07 {
08     coordinate left [] = {1, 2, 0};
09     coordinate right [] = {2, 2, 1};
10     CubicalCell Q (left, right, 3);
11     CubicalComplex C;
12     C.add (Q);
13
14     Chain *hom = 0;
15     Chain **gen = 0;
16     int maxLevel = Homology (C, "C", hom, &gen);
17     ShowHomology (hom, maxLevel);
18     ShowGenerators (gen, hom, maxLevel);
19
20     delete [] hom;
21     for (int i = 0; i <= maxLevel; ++ i)
22         delete (gen [i]);
23     delete [] gen;
24     return 0;
25 }

```

6.2.3 クラス CubicalMap

最後に方体写像を表すクラス CubicalMap について説明しておく．これまでと同様に方体写像を扱う場合は全ての基本方体は縮退していないものとする．例えば Q を Cube のオブジェクト， F を CubicalMap のオブジェクトとすると，その像は SetOfCubes 型として $F[Q]$ に格納される．像の指定にはこれまでも出てきた基本方体を加える関数 add を用いるか，=を使って基本方体の集まりを直接与える方法がある．このようにして構成される CubicalMap の誘導準同型写像を計算するには関数 Homology をプログラム 8 のように用いればよい．

プログラム 8 拡張インターフェースを用いた誘導準同型写像の計算

```
01 #include <iostream>
02 #include "chomp/homology/homology.h"
03
04 using namespace chomp::homology;
05
06 int main ()
07 {
08     coordinate c1 [] = {1, 1, 0}, c2 [] = {1, 1, 1};
09     CubicalMap F;
10     SetOfCubes S;
11     S.add (Cube (c1, 3));
12     S.add (Cube (c2, 3));
13     Cube Q (c1, 3);
14     F [Q] = S;
15
16     SetOfCubes X = F.getdomain (), A, Y = S, B;
17     Chain *homX = 0, *homY = 0;
18     ChainMap *homF = 0;
19     int maxX = 0, maxY = 0;
20     Homology (F, X, A, Y, B, homX, maxX, homY, maxY, homF);
21
22     delete homF;
23     delete [] homX;
24     delete [] homY;
25     return 0;
26 }
```

参考文献

- [1] T. Kaczynski, K. Mischaikow, and M. Mrozek, *Computational Homology*, Applied Mathematical Science Vol. 157, Springer, 2004.
- [2] 柘田幹也，代数的トポロジー，講座＜数学の考え方＞ 15，朝倉書店，2002.
- [3] K. Mischaikow, M. Mrozek, P. Pilarczyk, Graph approach to the computation of the homology of continuous maps, *Foundations of Computational Mathematics* 5 (2005) 199–229.
- [4] 瀬山士郎，トポロジー：柔らかい幾何学，日本評論社，2003.
- [5] 田村一郎，トポロジー，岩波全書，岩波書店，1972.

[6] <http://chomp.rutgers.edu/>

[7] <http://graphics.stanford.edu/data/3Dscanrep/>

第3章 計算ホモロジー理論の力学系への応用

荒井 迅

京都大学大学院理学研究科

1 はじめに

本稿では計算ホモロジー理論を用いた力学系の研究手法について解説する。計算ホモロジー理論は現在でこそ幅広い応用を持つようになったが、Kaczyński-Mischaikow-Mrozek らによる研究はそもそも力学系への応用を念頭に始められたものである。力学系の位相不変量であるコンレイ指数をコンピュータで計算する方法を開発したい、それによりコンレイ指数理論を具体例に応用したい、というのが彼らの出発点である。

力学系理論とホモロジー理論は、その現代的な意味での創始者が Henri Poincaré であるという共通点がある。エントロピー予想やアーノルド予想など、力学系の重要な問題がホモロジーの言葉を用いて表現されることも多い。しかし、力学系を応用する立場からは、この二つの分野の関連が強く意識されることはあまりなかった。その一つの原因は、ホモロジー群が持つ情報が本質的に大域的なものであるため、ホモロジー理論により何かを示せても、それが相空間のどこで起きているのか詳しくはわからないという点であろう。これでは応用には使いにくい。また、ホモロジー群をコンピュータで計算する手法がなかった事も原因としてあげられる。複雑な力学系を研究する場合に、全ての計算を手で遂行するのは不可能である。これらの問題の前者を解決したのがコンレイ指数理論であり、後者を解決するために生まれたのが計算ホモロジー理論である。

ホモロジー理論と力学系の関係を考える上で重要なできごとを時系列に沿い並べると次のようになる。

1900 年ころ	H. Poincaré による力学系とホモロジー理論の創始	
1920 年代	S. Lefschetz による不動点定理	(§2)
1930 年代	M. Morse によるモース理論	(§2)
1970 年代	M. Shub らによるエントロピー予想	(§2)
1970 年代	C. C. Conley によるコンレイ指数理論	(§3)
1990 年代	計算ホモロジー理論の整備が始まる	(§4)
21 世紀 ~	計算ホモロジー理論の応用が広まる？	(§5)

本章はこの時間的な発展の順序を追うように構成されている。

コンレイ指数を用いた議論に入る前に、まず §2 においてホモロジー理論そのものを用いた二つの話題を紹介する。力学系と言うよりは幾何学やトポロジーの話題に見えるが、ホモロジー理論の力学系への応用で重要なアイデアは本質的に全てこの段階で現われていると言ってよい。次にコンレイ指数の定義を §3 で、計算機を用いてホモロジーコンレイ

指数を求める方法を §4 で解説する．本来の目的である計算ホモロジー理論の力学系への応用には最後の §5 があてられる．

2 ホモロジーと力学系

この節では、ホモロジーを用いた力学系研究の源流とも言える話題を簡単に紹介する．個々の定理の証明は述べないが、証明において重要な考え方には触れる．本節の話題に関して、より詳しくは John Franks によるその名も “Homology and Dynamical Systems” という素晴らしい本 [15] があるので、そちらを参照されたい．コンレイ指数の普及以前の本ではあるため、コンレイ指数については触れられていないが、力学系のゼータ関数とホモロジーゼータ関数の関係など、本章では触れられなかった話題も多く扱われている．

代数トポロジーの教科書は数多く出版されているが、力学系の研究でよく引用されるのが Dold の “Lectures on Algebraic Topology” [11] である．最近出版された Matveev による同名の本 [20] は、初等的なところから始めてホモロジー、ホモトピーの話題に一通り触れるにもかかわらず、100 ページに満たないコンパクトさであり、入門書として最適と思う．最近翻訳が出版された Seifert-Threlfall による古典的な教科書 [35] は古いぶん書き方が若干まわりくどい所もあるが、現代の教科書よりもかえって直感的なイメージが捕み易いところが多い．

2.1 不動点定理

写像 f の不動点とは $f(x) = x$ となるような点 x のことである．力学系的な言い方をすれば不動点とは f による時間発展の下にいつまでも動かずにいる点であり、静的な視点からは不動点とは方程式 $f(x) = x$ の解であるといえる．

数ある不動点定理のなかで、基本的かつ応用範囲の広いのは以下で述べる Lefschetz-Hopf の不動点定理であろう．簡単のため、ここでは有限多面体上の写像で考えるが、一般にコンパクトな ENR くらいの設定で成立する [11]．またホモロジー群の係数は何か適当な体 K とし、以下では特に必要にならない限り明示しない．

Lefschetz-Hopf の不動点定理. $f : P \rightarrow P$ を有限多面体 P 上の連続写像とする．このとき f がホモロジー群上に誘導する $f_* : H_*(P) \rightarrow H_*(P)$ の Lefschetz 数が 0 でないならば、 f は不動点を少なくとも 1 つ持つ．

ここで Lefschetz 数とは次のように定義される数（値を K にとる）である．

定義 1. 次数付きベクトル空間 $E = \{E_n\}$ の準同型 $L = \{L_n\}$ に対し、その Lefschetz 数を

$$\lambda(L) := \sum_{n \geq 0} (-1)^n \operatorname{tr}(L_n)$$

と定義する．ここで $\operatorname{tr}(L_n)$ は線型写像 $L_n : E_n \rightarrow E_n$ のトレースを表す．

なぜ素直に全ての次数のトレースの和を取らずに、 $(-1)^n$ などという係数をかけるのか、それは交代和にすることにより、ただの和では成立しない次の重要な性質が得られるからである．

命題 2. 鎖複体 $C_\bullet = \{C_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ 上の鎖写像 $L_\bullet = \{L_n : C_n \rightarrow C_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ がホモロジー群上に誘導する準同型写像 $H_*(L_\bullet) : H_*(C_\bullet) \rightarrow H_*(C_\bullet)$ に対し

$$\lambda(L_\bullet) = \lambda(H_*(L_\bullet))$$

が成立する.

鎖写像 $L_\bullet$ とそれが誘導する準同型 $H(L_\bullet)$ は, そもそも定義される空間からして異なるのだが, それにも関わらず, トレースの交代和は等しいという強い性質が成り立つのである. 命題の証明は述べないが, そのアイディアは最も簡単な鎖複体

$$\begin{array}{ccccccc} 0 & \longleftarrow & C_{n-1} & \xleftarrow{\delta_n} & C_n & \longleftarrow & 0 \\ & & \downarrow L_{n-1} & & \downarrow L_n & & \\ 0 & \longleftarrow & C_{n-1} & \xleftarrow{\delta_n} & C_n & \longleftarrow & 0 \end{array}$$

の場合を考えるとわかりやすい. いま係数を体にとっているので,

$$C_n = \ker \delta_n \oplus \frac{C_n}{\ker \delta_n} = H_n(C_\bullet) \oplus \frac{C_n}{\ker \delta_n}, \quad C_{n-1} = \operatorname{im} \delta_n \oplus \frac{C_{n-1}}{\operatorname{im} \delta_n} = \operatorname{im} \delta_n \oplus H_{n-1}(C_\bullet)$$

という直和分解を選ぶことができる. 次にこの直和分解に応じて L_n のほうも分解しよう. $L_\bullet$ は鎖写像なので

$$L_n(\ker \delta_n) \subset \ker \delta_n, \quad L_{n-1}(\operatorname{im} \delta_n) \subset \operatorname{im} \delta_n$$

が成立する. これと, 準同型定理により δ_n が $C_n / \ker \delta_n$ と $\operatorname{im} \delta_n$ の間の同型を与えることを用いると L_n および L_{n-1} は

$$L_n = \left(\begin{array}{c|c} H_n(L_\bullet) & * \\ \hline 0 & L' \end{array} \right), \quad L_{n-1} = \left(\begin{array}{c|c} L' & * \\ \hline 0 & H_{n-1}(L_\bullet) \end{array} \right)$$

という形に書けることがわかる. $H_n(L_\bullet)$ と $H_{n-1}(L_\bullet)$ はホモロジー群上に誘導される写像そのものであるが, L' という写像が良くわからない (ホモロジーを取ると消えてしまう情報に対応している). 良くわからないのだが, n 次と $n-1$ 次との差を取ることでにより上手くこの余分な部分がキャンセルして

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(L_n) - \operatorname{tr}(L_{n-1}) &= \{\operatorname{tr}(H_n(L_\bullet)) + \operatorname{tr}(L')\} - \{\operatorname{tr}(L') + \operatorname{tr}(H_{n-1}(L_\bullet))\} \\ &= \operatorname{tr}(H_n(L_\bullet)) - \operatorname{tr}(H_{n-1}(L_\bullet)) \end{aligned}$$

となり命題の性質が示される. 一般の鎖複体の場合の証明も今述べた場合に帰着される.

位相空間とその上の連続写像からホモロジー群上の準同型を取り出す手続きは, 鎖複体と鎖写像を経由していた. 連続写像から直接得られるのは鎖写像であるが, そこからホモロジーを取るときに一般には情報が抜け落ちてしまう. $L_\bullet$ の個々の固有値の情報も消えてしまうのだが, トレースの交代和を取った Lefschetz 数に関してはホモロジーを取っても変化せずに情報が保たれるという点が重要な訳である.

この命題を準備をすれば不動点定理の証明は簡単である.

Lefschetz-Hopf の不動点定理の証明のあらすじ. 不動点がないと仮定する. いま P はコンパクトなので, ある $\delta > 0$ が存在して任意の $x \in P$ は f により距離 δ 以上は移動するとしてよい. 重心細分をとることにより, P の各単体の直径は $\delta/2$ よりも小さいとする. 単体近似定理によれば, P の細分 P' と単体写像 $g : P' \rightarrow P$ で, $f : P \rightarrow P$ の単体近似となっているものが得られる. いま $\alpha : C(P) \rightarrow C(P')$ をホモロジー群の同型 $\alpha_* : H_*(P) \rightarrow H_*(P')$ を誘導する鎖写像とすると,

$$\begin{array}{ccc} & C(P) & \\ g \nearrow & & \downarrow \alpha \\ C(P') & \xrightarrow{\alpha \circ g} & C(P') \end{array}$$

という図式が得られ, 定義により $f_* = \alpha_* \circ (\alpha \circ g)_* \circ \alpha_*^{-1}$ である. よって仮定より $\lambda(\alpha \circ g)_* \neq 0$ となり, 命題 2 より $\alpha \circ g$ が鎖複体に誘導する写像の Lefschetz 数も 0 ではない. 従ってある P' の単体が存在して $\alpha \circ g$ により自分自身に移るが, これは δ の取り方に矛盾する. $\square$

この証明法は Hopf によるものである. 元々の Lefschetz の証明は, 直積集合 $P \times P$ の中で f のグラフ $\{(x, f(x)) \mid x \in P\}$ と対角線 $\{(x, x) \mid x \in P\}$ の交点を向きつきで数え挙げるという方法をとる. Lefschetz の方法が静的かつ幾何学的なものであるのに対し, Hopf による証明はより動的, 力学系的であると言えよう.

この Hopf による証明には本稿で解説する計算ホモロジー理論の力学系への応用における典型的な考えかたが既に現われている. ポイントは

- 十分に細かい細分を取ることで, 写像 $f : P \rightarrow P$ の欲しい情報が f から誘導される鎖写像の代数的な性質として現われる.
- その代数的な性質がホモロジーを取った後の $f_* : H_*(P) \rightarrow H_*(P)$ にも残っているので, f_* の代数的な性質を知ると元の f についての情報が得られる.

という 2 点である. さらに実際の計算に応用する場合には

- ホモロジー群上に誘導された準同型 f_* はホモトピー不変なので, f についてのおおまかな情報だけで計算できる.

という点が重要になってくる. すなわち, f が扱いにくい難しい写像であっても, f とホモトープな g で f より簡単な写像を見つければ, $f_* = g_*$ なので計算は g で行なってよいことになる.

後の節におけるコンレイ指数と計算ホモロジーを用いた議論も, 単体近似とグリッドによる方体近似の違いはあるものの, 基本的な考え方は同じである.

2.2 モース理論

多様体 M のホモロジーを考えると, 我々は M を単体に分割したり (単体複体のホモロジー), また単体から M への写像を考えたり (特異ホモロジー), 基本的には外側から M 全体を眺める視点でもの事を考えてきた.

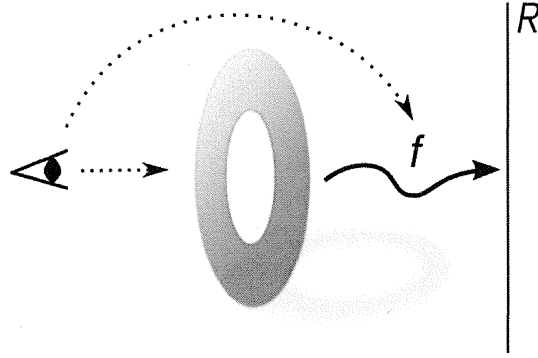


図 1: 多様体 M を見る視点と $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ を見る視点

じつは多様体そのものではなく、多様体上の関数の特異点を眺めることによって M のホモロジーを知ることが出来るというのがモース理論の主張である。 M そのものではなく、その上の関数を眺めることで M を知るという意味では、コホモロジー（ホモロジーの「双対」）の考えかたに近いが、モース理論では、 M を知るために必要な情報が関数の特異点に集約されているという点が重要である。

まず多様体 M 上の関数 $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ によって与えられる勾配ベクトル場

$$\dot{x} = -\nabla f(x)$$

を考える（ M は適当な計量によりリーマン多様体の構造を持つとする）。このベクトル場の生成する流れを考えると、関数 f の値が減少する方向に全ての点が流れてゆくような連続力学系が得られる。これを f の生成する勾配流と言う。

次にこのベクトル場の特異点、すなわち $\nabla f(x) = 0$ となるような x を考える。特異点が全て双曲型であるとき、 f はモース関数であるという。またモース関数の特異点 x に対し、その不安定多様体 $W^u(x)$ の次元を x の指数と呼ぶ。特異点の指数は、その近傍での f の値のみで決まることに注意する。

例えば図 2.2 のようにトーラス M （中身のないドーナツ型）を地面に立てて、関数 $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ としては点 x の地面から測った高さを $f(x)$ と定義してみよう。このとき f による勾配流は、 M の上を高いところから低いところへと、水のように流れ落ちるものになる。

この流れの特異点は、地面に対して水平な平面とトーラスが接する 4 点である。これらを上から順に p, q, r, s と名付けよう。すると流れが湧き出す p の指数は 2、流れの鞍点である p と r の指数は 1、流れが落ち込む先である s の指数は 0 となる。

定理 3 (モース不等式). f を n 次元多様体 M 上のモース関数、その指数 k の特異点の数を c_k とする。また多様体 M の k 次ベッチ数を β_k と書く。このとき $k = 0, \dots, n$ に対し

$$c_k - c_{k-1} + \dots \pm c_0 \geq \beta_k - \beta_{k-1} + \dots \pm \beta_0$$

が成り立つ。特に $k = n$ のときは等号が成立する。

定理より特に $c_k \geq \beta_k$ が $k = 0, \dots, n$ で成立する。すなわち、どんなモース関数に対しても、不安定次元が k である特異点が多様体 M の k -次ベッチ数以上の個数存在する。先

の例でいうと, $c_2 = 1$, $c_1 = 2$, $c_0 = 1$ となり, これらはトーラスのベッチ数と一致するので, これ以上特異点を減らすことはできないことがわかる.

証明は, 多様体を f の値で輪切りにし, 特異点のところでの変化を見るということをする. もう少し詳しくいうと, $M^a := \{x \in M : f(x) \leq a\}$ という集合を定義し, $f^{-1}([a, b])$ に特異点がなければ M^a と M^b の間には大きな違いはなく, また特異点のところで起きる構造の変化は, 「ハンドル」の張りつけにより記述される, という議論をする. トーラスの例で M^a の絵を描いてみるとわかりやすい. 詳しくはたとえば Milnor の “Morse theory” [23] を参照されたい.

古典的なモース理論は上のモース不等式を基本定理とするが, 近年では以下で紹介するように Witten 複体 (Morse-Conley-Witten 複体とも呼ぶ人もあり) という複体を経由した議論をすることが多い. Witten 複体により, フレーホモロジーなどの無限次元で定義されたホモロジーと多様体のホモロジーとの関係が見やすくなるというのが理由の一つであるが, 力学系への応用においても以下の見方は重要となる.

f をモース関数とする. さらに f の勾配流はモース・スモール条件を満たす, すなわち, 特異点の任意の組 p, q に対し, $W^u(p)$ と $W^s(q)$ は横断的に交わるとする. 任意のモース関数 f は, いくらでも小さい摂動でこの条件を満たすようにできる. 先ほどのトーラスの例では, トーラスが地面に対して鉛直なときはモース・スモールにならないが, ほんの少し傾ければ条件を満たすようになる.

全ての特異点 x に対し $W^u(x)$ の接空間に向きを 1 つ決めておく. f の指数 k の特異点たちを生成元とするベクトル空間を C_k で表す. すなわち

$$C_k = \bigoplus_{x \text{ は指数 } k \text{ の特異点}} K\langle x \rangle$$

である. $\dim_K C_k$ は指数 k の特異点の数であり, 上のトーラスの例で言えば,

$$C_k = \begin{cases} K\langle p \rangle & k = 2 \\ K\langle q \rangle \oplus K\langle r \rangle & k = 1 \\ K\langle s \rangle & k = 0 \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

となる. 例えば C_1 には $3q - 2r$ といった形式的な和が含まれていると考えるのである.

この C_k たちの上に, 次のようにして境界作用素 ∂^c が定義できる.

$y \in C_k$ を C_k の生成元としよう. 境界作用素は次数が -1 なので, $\partial^c(y) \in C_{k-1}$ となるはずである. C_{k-1} の生成元は指数が $k-1$ である特異点たちなので, そのような特異点 $x \in C_{k-1}$ のそれぞれに対して $\partial^c(y)$ の $K\langle x \rangle$ 成分を定めてやればよい. この成分を $\partial^c(y) = n(y, x) \in K\langle x \rangle$ と書くことにしよう. いま $\dim W^u(y) = k$, $\dim W^s(x) = \dim M - \dim W^u(x) = n - k + 1$ であり, また仮定から $W^u(y)$ と $W^s(x)$ は横断的なので, $W^u(y) \cap W^s(x)$ は 1 次元の多様体となることがわかる. $W^u(y) \cap W^s(x)$ は流れで不変なので, けっきょく $W^u(y) \cap W^s(x)$ は何本かの軌道の集合となる (少し議論をすると有限本であることがわかる).

$W^u(y) \cap W^s(x)$ から軌道を 1 本選び注目する. $W^u(y)$ 内において, この軌道の接線の直交補空間を取り, それを $\tilde{E}^u(y)$ とする. $\tilde{E}^u(y)$ には軌道の接線の向きと $E^u(y)$ の向きから

決まる向きを入れる. $\dim \tilde{E}^u(y) = k - 1 = \dim W^u(x)$ であり, 流れに沿って $\tilde{E}^u(y)$ の向きを流したときに, それが $W^u(x)$ の向きと一致するか, 逆になるかに応じて $+1$ か -1 かを決める. この ± 1 を y と x を結ぶ全ての軌道について和を取った数を $n(y, x)$ と定める. 作用素 ∂^c はこれを用いて

$$\partial^c(y) = \sum_{x \in C_{k-1}} n(y, x) \cdot x$$

と定義する.

この作用素を本当に「境界作用素」と呼ぶためには, $\partial_{k-1}^c \circ \partial_k^c = 0$ が必要である. この性質があるからこそホモロジー群が計算できるのであった. 次の定理は, 実際に ∂^c が境界作用素であることと, さらに ∂^c から計算されるホモロジーが実は M のホモロジーと同じものであるということを主張する.

定理 4 (R. Thom, S. Smale, J. Milnor, C. Conley, E. Witten). 任意の自然数 k に対し

$$\partial_{k-1}^c \circ \partial_k^c = 0$$

が成立する. よって $(\partial^c, \{C_k\})$ は鎖複体であり, そのホモロジー群は多様体 M のホモロジー群と一致する. すなわち

$$H_k(M) \cong \frac{\ker(\partial_{k-1}^c : C_k \rightarrow C_{k-1})}{\text{im}(\partial_k^c : C_{k+1} \rightarrow C_k)}.$$

が成立する.

多様体 M のホモロジーの定義にはモース関数は関係しない. それは単体複体のホモロジーや, 特異複体のホモロジーとして定義されるものである. それにも関わらず, モース関数の特異点と, その間の軌道の様子から構成した「ホモロジー」が多様体のホモロジーと同型になるのである. まったく別の定義から同じ群が計算されることが, この定理の面白さであり有用性でもある. この定理を誰が最初に認識していたかは議論のあるところだろうが, 本稿では D. Salamon の論説 [34] に従い上の 5 人を並べた. 現在ではこうして作られた鎖複体は一般に Witten 複体と呼ばれ, トポロジーを始めとする広い分野で用いられている.

証明にはいくつかの方法が考えられる. 先に挙げた Salamon の論説 [34] では, コンレイ指数の考え方を用いてモース理論からフレアーホモロジーまでに統一的な証明を与えている. これを力学系的な証明法とするならば, 対照的に静的な証明法としてはスペクトル系列を用いたものが考えられるが, これについては例えば [18] などを参照されたい.

2.3 エントロピー不等式

位相的エントロピーは, 力学系の軌道の増大度を計る最も基本的な不変量であり, 位相的エントロピーが大きいほど系はカオス的であると言える. 重要な「不変量」と言ったが, ではここで不変とは何に対して不変なのか. その意味をはっきりさせるために, 次の概念を導入する.

定義 5. 2つの力学系 $f: X \rightarrow X$ と $g: Y \rightarrow Y$ を考える. ある全射な連続写像 $h: X \rightarrow Y$ が存在して $g \circ h = h \circ f$ を満たす, すなわち

$$\begin{array}{ccc} X & \xrightarrow{f} & X \\ h \downarrow & & \downarrow h \\ Y & \xrightarrow{g} & Y \end{array}$$

が可換となるとき, f から g へ**位相半共役**があるという. h がさらに位相同型写像になるときは, f と g は**位相共役**であるという.

f と g が位相共役のときは, 同相写像 h により2つの力学系を同一視できるという訳である. また半共役のときは, g の各軌道に対して f はその軌道と対応する軌道を少なくとも1つは持つ, すなわち f の軌道は g よりは多様であるということを意味する.

力学系に対して決まる量は, 位相共役な系に対しては常に同じ値をとるときに位相不変であると言う. 例えば n -周期点の数 ($n \in \mathbb{N}$) は最も簡単な位相不変量である.

紙面の都合から位相的エントロピーの定義はここでは述べられないが, 次のような重要な性質を持つ.

命題 6. コンパクト距離空間 X 上の連続写像 $f: X \rightarrow X$ に対し, その位相的エントロピー $h_{\text{top}}(f) \in [0, \infty]$ が定義され, 以下をみたす.

- (1) f が可微分写像ならば $h_{\text{top}}(f) < \infty$.
- (2) $h_{\text{top}}(f^k) = k \cdot h_{\text{top}}(f)$. また f が同相写像ならば $h_{\text{top}}(f^{-1}) = h_{\text{top}}(f)$.
- (3) $X = X_1 \cup \dots \cup X_k$ を互いに交わらない閉不変集合への X の分割とすると

$$h_{\text{top}}(f) = \max_i (h_{\text{top}}(f|_{X_i})).$$

- (4) 位相的エントロピーは位相不変量である. すなわち, f と g が位相共役のとき

$$h_{\text{top}}(f) = h_{\text{top}}(g).$$

- (5) f から g へが位相半共役があるとき

$$h_{\text{top}}(f) \geq h_{\text{top}}(g).$$

位相的エントロピーは重要な不変量ではあるが, 有限個の軌道を追いかけるだけでは計算できず, また摂動に対して不連続に変化することがあるため, その値を評価することは難しい. 数値計算による軌道のプロットにストレンジアトラクターのようなカオス的な集合が見えたとしても, 位相的エントロピーは0かも知れない. また逆に単純な挙動しか持たないように見える力学系の位相的エントロピーが正だったりする. 例えば, 精度を倍精度に固定した数値計算では倍精度で表現できる最小数よりも小さな不変集合は見えないが, そのように微小な集合の上で任意に大きなエントロピーを稼ぐ写像を簡単に作ることができる.

このように評価の難しい位相的エントロピーであるが, 次の定理が示すように, ホモロジー群への f_* の作用からある程度の情報を得ることができる.

定理 7 (Yomdin [39]). 可微分多様体 M 上の C^∞ 微分写像 $f : M \rightarrow M$ に対し

$$h_{\text{top}}(f) \geq \log s(f_*)$$

が成立する. ただしここで $s(f_*)$ は $f_* : H_*(M, \mathbb{R}) \rightarrow H_*(M, \mathbb{R})$ のスペクトル半径である.

すなわち, ホモロジー群上に誘導された写像の固有値で元の写像の複雑さが下から評価できる. ただし, この定理はホモロジーの生成元が互いに絡み合っている複雑さのみしか捉えない. 例えば $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ に定理を適用しようとしても, $\mathbb{R}^n$ は可縮なため f は恒等写像とホモトープになってしまい, $\log s(f_*)$ は 0 となって意味のある評価は得られない.

なお, この不等式は M. Shub が 1970 年代に C^1 級の可微分写像に対して成立すると予想したもので, この元々の形の「エントロピー予想」はいまだ未解決である.

3 コンレイ指数

前節で我々はホモロジー理論を応用した写像や流れの解析法をいくつか見たが, どれも主張は相空間の全体に関わるものであった. 不動点定理は「空間のどこかに」不動点があることを主張し, モース理論はモース関数の特異点の情報と多様体全体のホモロジーとを関連づけるものであった. またエントロピー不等式も, 空間全体を見たらカオス的であると主張するのであって, カオス的な不変集合の位置についての情報を与えるものではない.

これはホモロジー群, もっと大きく言えばトポロジーという考え方の本質に関わる問題である. ホモロジー群の生成元は空間の中で連続的に変形しても同じ元を表すことに注意しよう. ホモロジーで考えるときは点 (0 次元ホモロジー群の生成元) や線 (1 次元ホモロジー群の生成元) の位置は気にしないのである. このように, 物事がある意味おおらかにしか見ないことにより, 座標にしばられていては見えてこなかった空間の本質的な構造を見い出すことに成功したわけである.

局所的な情報にとらわれずに大域的な情報をとらえるというこのホモロジー群の性質は, 空間の分類や構造を考えるときには威力を発揮するが, 我々のように力学系の解析に役立てようとする場合にはやっかいなものである. 数理モデルを力学系で解析しているときに, 「不動点がどこかにあるよ」とわかっても, それがいったいどのような意味を持つ点であるかわからなければ, モデルの記述する現象について理解が深まったとは言えないであろう.

このような問題から, 局所と大域を繋ぐような理論が必要となるのであるが, その基本的な考え方は既に前節で触れたモース理論, 特にその Witten 複体を用いたホモロジー群の構成に現われている. モース理論の設定においては, 不動点以外の点は全て不動点の間を繋ぐ軌道であった. そして不動点を持つ「指数」という局所的な情報を, その間を繋ぐ軌道たちを用いて代数的に関連づけてやることによって, 空間全体のホモロジーが回復されたのであった.

以下では考える力学系は局所コンパクト距離空間 X 上の同相写像 $f : X \rightarrow X$ であるとする. 点 $x \in X$ の時間 $n \in \mathbb{Z}$ 後の位置が $f^n(x)$ である (簡単のため f を同相写像としたが, 以下の議論のほとんどは単に連続写像に対しても成立する).

モース理論に習い, 力学系 $f : X \rightarrow X$ に対して X 全体における f の挙動を一度に考えるのではなく, 不変集合 (すなわち $f(S) = S$ となる $S \subset X$) 上での f のふるまいと, 不変集合たちの間の軌道の繋がり方に問題を分割して考えてみよう.

このような視点に立つとき、指導原理とも言えるのが「コンレイの力学系の基本定理」[32, §10.1]である。力学系 $f: X \rightarrow X$ のカオス的な軌道は全て「鎖回帰集合」 $\mathcal{R}(f)$ に含まれ、 $\mathcal{R}(f)$ の外側では軌道の振舞いは勾配流のようにおとなしい、ということを主張する定理である。ここで鎖回帰集合とは周期軌道や非遊走点を全て含むある閉不変集合であるが、さらに鎖成分と呼ばれる不変部分集合への分解を持つ。各鎖成分を一点に潰してしまえば、残りの部分はまさにモース理論的な状況になっているであろうというのが基本定理の思想である。

基本定理により鎖回帰集合の外の力学系は単純な構造をしているので、これらの鎖成分の全てを解析できれば、力学系の振舞いを理解したと言える。ところが、鎖成分そのものを対象として解析を行なうのは一般に難しい。それぞれの鎖成分は有限の大きさを持った閉不変集合であるが、それらが無限個連なって無限に微細な構造を構成していたり、また摂動により一度に無限個が消えてしまったりする。計算誤差により不変集合の構造が変化してしまう可能性を考えると、数学的に厳密な結果を数値計算から得るのは難しい。

そこで我々は次のような「よい」不変集合のクラスを考える。これはモース理論での特異点に対応するような役割を以下で果たすことになる。

定義 8. $S \subset X$ が**孤立不変集合** (isolated invariant set) であるとは、 S のコンパクト近傍 N が存在して S が N の最大不変集合となる、すなわち

$$S = \text{Inv}(N, f) := \{x \in N \mid \text{任意の } n \in \mathbb{Z} \text{ に対し } f^n(x) \in N\} \subset \text{int } N$$

となることである ($\text{int } N$ で N の内点集合を表す)。またこのとき N を S の**孤立化近傍** (isolating neighborhood) という。

コンパクト集合 N はその最大不変集合 $\text{Inv}(N, f)$ が N の内点集合 ($\text{int } N$ と書く) に含まれるとき $\text{Inv}(N, f)$ の孤立化近傍であると定義しても同じである。空集合も孤立不変集合の定義を満たすことに注意する。ここで重要なのは孤立化近傍であるという性質が微細な摂動に対し安定である、つまり N がある f に対し孤立化近傍であれば、 f と十分 (C^0 位相で) 近い g に対しても N は孤立化近傍であり続けるということである。摂動によって孤立不変集合は変化するので $\text{Inv}(N, f)$ と $\text{Inv}(N, g)$ の構造は一般に異なるが、 N が孤立化近傍であるという性質は安定であり、それは計算機で検証することが可能である。

このことから以下では孤立不変集合とその孤立化近傍に注目する。知りたいのはあくまで不変集合であるが、それは扱いが難しいのでまず大雑把にその近傍を観察し、そこで得られた情報から不変集合について何らかの結論を得ようという方針である。

では具体的な力学系が与えられたときに孤立化近傍をどのようにして構成すればよいのか、また孤立化近傍からどのような情報を得ればそこに含まれる孤立不変集合上の力学系について理解できるのか。

S を孤立不変集合としよう。 S とその近傍における f の挙動を理解するために、一旦 S を X 全体から切り離すことを考える。

定義 9. S の *index pair* とは $P_0 \subset P_1$ なるコンパクト集合対 $P = (P_1, P_0)$ で

- (1) $P_1 \setminus P_0$ の閉包が S の孤立化近傍であり
- (2) $f(P_0) \cap P_1 \subset P_0$

$$(3) f(P_1 \setminus P_0) \subset P_1$$

となるもののことである。このとき P_1/P_0 を P_1 の中で P_0 を一点に潰した空間とし (P_0 を潰して得られた点を $[P_0] \in P_1/P_0$ と書く), $f_P : P_1/P_0 \rightarrow P_1/P_0$ を

$$f_P([x]) := \begin{cases} [f(x)] & f(x) \in P_1 \text{ のとき} \\ [P_0] & \text{その他} \end{cases}$$

と定義すると f_P は連続写像となる。これを *index map* と言う。

index map は S の近傍での f のふるまいを記述していると考えられるので、ここから何らかの情報を引き出したい。位相幾何学的に言えば適当な関手により何らかの不変量を取り出そうという事であるが、具体例に応用するためには実際に計算できる関手でないといけない。第2章で見たように、計算ホモロジー理論の発展により、ホモロジーならば計算機で求めることができるようになった。そこでこれを適用することにしようすると空間 P_1/P_0 から加群 $H_*(P_1/P_0, [P_0])$ が、写像 f_P から自己準同型

$$f_{P*} : H_*(P_1/P_0, [P_0]) \rightarrow H_*(P_1/P_0, [P_0])$$

が得られる。ここで $H_*(P_1/P_0, [P_0])$ は位相空間対 $(P_1/P_0, [P_0])$ の双対ホモロジーを表わす。本稿で扱うような性質のよい空間の場合ならば $H_*(P_1/P_0, [P_0]) \cong H_*(P_1, P_0)$ となる。また $H_*(P_1/P_0, [P_0])$ は $H_k(P_1/P_0, [P_0])$ を直和した次数付き加群であり f_{P*} はその上の次数0の準同型であるが、とくにある次数 k を指定して表示したい場合は

$$f_{P*k} : H_k(P_1/P_0, [P_0]) \rightarrow H_k(P_1/P_0, [P_0])$$

などと表す。

上のように定義した $H_*(P_1/P_0, [P_0])$ や f_{P*k} は S の近傍での力学系についての何らかの情報を持っていると期待できるが、*index pair* の選び方は無数にあり $H_*(P_1/P_0, [P_0])$ も f_{P*} もその選び方に依存してしまう。そこで次のような同値関係を考える。

定義 10. (群の) 準同型 $f : X \rightarrow X$ と $g : Y \rightarrow Y$ は、ある自然数 m と準同型 $r : X \rightarrow Y$, $s : Y \rightarrow X$ が存在して

$$r \circ f = g \circ r, \quad s \circ g = f \circ s, \quad r \circ s = g^m, \quad s \circ r = f^m$$

となるとき**シフト同値**であると言う。

任意の孤立不変集合 S に対してその *index pair* は必ず存在し、 $P = (P_1, P_0)$ と $Q = (Q_1, Q_0)$ を S の *index pair* とすると f_{P*} と f_{Q*} はシフト同値であることが証明される。よって次のようにコンレイ指数を定義することができる。

定義 11. 孤立不変集合 S の**ホモロジーコンレイ指数**とは、 $P = (P_1, P_0)$ を S の *index pair* としたときの f_{P*} のシフト同値類のことである。

コンレイ指数から何がわかるのか。最も単純な結果は次のようなものである。

定理 12 (Ważewski principle [21, 27]). $P = (P_1, P_0)$ を S の *index pair* とする. このとき f_{P*} が $0 : \{0\} \rightarrow \{0\}$ とシフト同値でないならば, S は空集合ではない.

前に述べたように, 我々は直接 S を見ることができずその近傍しか扱えないのだが, もしその近傍から計算したコンレイ指数が 0 とシフト同値でなければ, 少なくとも S が空集合ではない, という情報は得られるのである.

他にも様々な情報がコンレイ指数から得られるのだが, では具体例においてどのようにコンレイ指数を計算すればよいだろうか. まず必要なことは index pair $P = (P_1, P_0)$ と index map $f_P : P_1/P_0 \rightarrow P_1/P_0$ の構成であり, さらにそのホモロジーも求めなくてはならない. 次節ではこれらをいかにして計算機で実行するかを見ることにしよう.

4 計算機によるコンレイ指数の計算

この節では $X = \mathbb{R}^n$ とする.

コンレイ指数の計算を計算機に実行させるためには, $\mathbb{R}^n$ の部分集合を計算機で扱える形で表現しなければならない. 様々な方法が考えられるが, 最も単純に $\mathbb{R}^n$ を等しい大きさの n 次元方体たちにより分割するという方法を採用する.

分割の要素となる n 次元方体の各辺の長さを d_i ($i = 1 \dots n$) とし,

$$\Omega := \left\{ \prod_{i=1}^n [k_i d_i, (k_i + 1) d_i] : k_i \in \mathbb{Z} \right\}$$

とおくと, $\mathbb{R}^n$ は Ω の要素により被覆される. 方体の集合 $\mathcal{B} \subset \Omega$ に対し, その実現を $|\mathcal{B}|$ と書く. これは $\mathcal{B}$ に含まれる方体の和集合として表される $\mathbb{R}^n$ の部分集合である. 前章では頂点が整数となるような方体しか扱わなかったが, 以下では d_i は任意の実数を取れるとする (ただし, ホモロジー計算をする段階で整数に変換する).

次に f を計算機で扱える形に表現しよう. 各方体 $\omega \in \Omega$ に対してその像 $f(|\omega|)$ を知りたいのだが, 丸め誤差などにより計算機では像を正確に求めることができない. ではどうしたらよいか.

ここで写像 f に精度保証付き区間演算が適用でき, 各 $\omega \in \Omega$ に対して $f(|\omega|)$ を内点に含む方体を計算機で求められると仮定する. これは多項式や三角関数などの初等関数で書かれた写像ならば簡単に満たせる仮定である [2]. 例えば区間演算ライブラリ CAPD (<http://capd.wsb-nlu.edu.pl/>) を用いればよい. この方体を $\tilde{f}(|\omega|)$ と書く. $\tilde{f}(|\omega|)$ は方体ではあるが Ω の要素の和ではないので, $\tilde{f}(|\omega|)$ と交わる Ω の要素を全て集めこれを $\mathcal{F}(\omega)$ とおく. すなわち多価写像 $\mathcal{F} : \Omega \multimap \Omega$ を

$$\mathcal{F}(\omega) = \{\omega' \in \Omega : \tilde{f}(|\omega|) \cap |\omega'| \neq \emptyset\}$$

で定義する. $f(|\omega|) \subset \text{int } \mathcal{F}(\omega)$ が成立することに注意する. $f(|\omega|)$ は正確に求めることができないので, それを外側から近似する $\mathcal{F}(\omega)$ を求めていることになる. また実際の計算の場合には $\mathcal{F}$ は Ω 全体で求める必要はなく, 考えている領域の上で求めれば十分である.

$\mathcal{B}$ を Ω の有限部分集合とすると, $\omega \in \mathcal{B}$ を頂点とし, $\omega' \in \mathcal{F}(\omega)$ のときに ω から ω' への辺が存在すると定義することにより有向グラフ G が得られる. これは $f : |\mathcal{B}| \rightarrow |\mathcal{B}|$ の

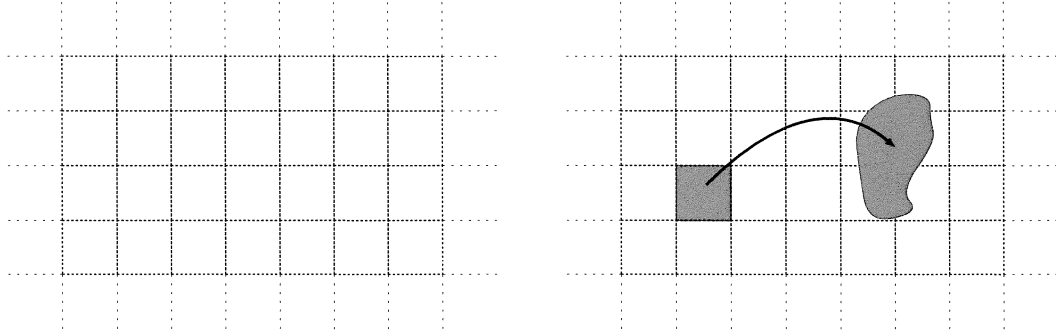


図 2: 左: 方体による $\mathbb{R}^2$ の分割, 右: 方体 $|\omega|$ とその f による像 $f(|\omega|)$

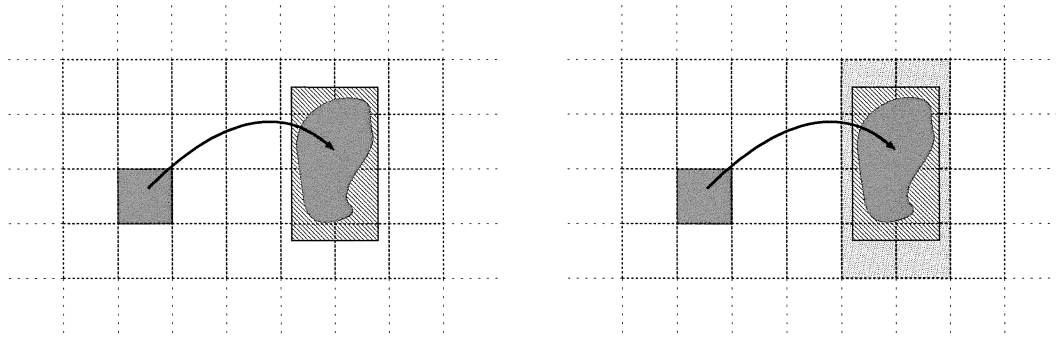


図 3: 左: 区間演算による $f(|\omega|)$ の被覆 $\tilde{f}(|\omega|)$, 右: $\tilde{f}(|\omega|)$ と交わる方体の集合 $\mathcal{F}(\omega)$

計算機による近似表現と考えることができる。近似とは言っても、精度保証がなされていることから、 f の全ての軌道に対して、それに対応する G の道が存在する。特に次の主張は有用である。

命題 13. f が $|B|$ 内に k 周期点を持つならば G は必ず k サイクルを持つ。

ここで k サイクルとは有向グラフの閉路で長さが k のものを指す (§5.2 も参照のこと)。グラフで表現することによりグラフ理論の高速なアルゴリズムを適用できるのがこの方法の一つの利点である。このようなデータ構造を扱うには M. Dellnitz や O. Junge らによって開発された力学系研究のための汎用パッケージである GAIO [12, 13] を用いると便

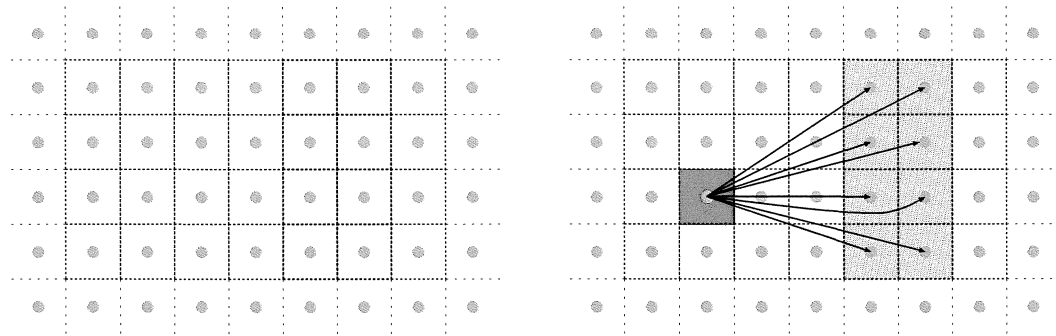


図 4: 左図: 有向グラフ G の頂点, 右図: G の頂点 ω から出る辺

利である.

コンレイ指数を計算機で求めるためのステップをまとめると次のようになる.

ステップ 1. 孤立化近傍の候補となる集合 $\mathcal{I} \subset \Omega$ をつくる

ステップ 2. 孤立化近傍の条件を満たすように $\mathcal{I}$ を修正する

ステップ 3. $\mathcal{I}$ から index pair を構成する

ステップ 4. ホモロジーを計算する

以下これらのステップを順に見ていこう.

ステップ 1. コンレイ指数を計算したい不変集合が存在すると予想される領域を被覆する方体の集合 $\mathcal{I}$ を構成する. これが孤立化近傍の第一近似となる. 各方体が十分小さくないと以後のステップで計算が破綻する, もしくは自明な結論しか導き出せなくなってしまうが, 単純に $\mathcal{I}$ の各方体を全て小さく分割すると, 方体の数が増えすぎて計算時間が莫大になってしまう. そこでまず各方体を 2 等分し, 次に注目する不変集合と関係ない方体を取り除くという作業を各方体が十分小さくなるまで繰り返す.

ステップ 2. $|\mathcal{I}|$ が孤立化近傍となる, すなわち $\text{Inv}(|\mathcal{I}|, f) \subset \text{int } |\mathcal{I}|$ が満たされるように $\mathcal{I}$ を再構成する. $\mathcal{B} \subset \Omega$ に対し

$$o(\mathcal{B}) := \{\omega \in \Omega : |\omega| \cap |\mathcal{B}| \neq \emptyset\}, \quad d(\mathcal{B}) := o(\mathcal{B}) \setminus \mathcal{B}$$

とおこう. $|o(\mathcal{B})|$ は Ω の部分集合により表すことができる $|\mathcal{B}|$ の近傍で最小のものである. また $\text{Inv}(\mathcal{B}, \mathcal{F})$ を

$$\text{Inv}(\mathcal{B}, \mathcal{F}) := \{\omega \in \mathcal{B} \mid \exists \gamma : \mathbb{Z} \rightarrow \mathcal{B} \text{ s.t. } \gamma(0) = \omega \text{ and } \gamma(k+1) \subset \mathcal{F}(\gamma(k)) \text{ for all } k \in \mathbb{Z}\}$$

と定義する.

区間演算により $f(|\omega|) \subset \text{int } \mathcal{F}(\omega)$ が保証されていることから $\text{Inv}(|\mathcal{I}|, f) \subset |\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})|$ が成り立つので, もし $o(\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})) \subset \mathcal{I}$ が言えれば

$$\text{Inv}(|\mathcal{I}|, f) \subset |\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})| \subset \text{int } |o(\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F}))| \subset \text{int } |\mathcal{I}|$$

となって目標が達成される.

そこで我々は $\mathcal{I}$ に方体を加減することで $o(\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})) \subset \mathcal{I}$ を満たすようにしたい. そのためのアルゴリズムとして, $o(\text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})) \subset \mathcal{I}$ が成立するまで $\mathcal{I}$ から方体を少しずつ減らしてゆくアルゴリズム [36] と, 逆に方体を付け加えてゆくアルゴリズム [19, 21] がある. 前者では最終的に空集合になってしまうことも多く, 面白い不変集合を捉えにくい. そこで本稿の計算例では主に後者を用いている.

ステップ 3. $|\mathcal{I}|$ が f の孤立化近傍のとき, $\mathcal{B} = \text{Inv}(\mathcal{I}, \mathcal{F})$,

$$(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_0) = ((d(\mathcal{B}) \cap \mathcal{F}(\mathcal{B})) \cup \mathcal{B}, d(\mathcal{B}) \cap \mathcal{F}(\mathcal{B}))$$

とおくと $P = (|\mathcal{P}_1|, |\mathcal{P}_0|)$ が $\text{Inv}(|\mathcal{I}|, f)$ の index pair となる [21, 36].

ステップ 4. 計算ホモロジー理論 [21] とその C++ による実装 CHomP [31] を利用し,

$$f_{P*} : H_*(|\mathcal{P}_1|/|\mathcal{P}_0|, [|\mathcal{P}_0|]) \rightarrow H_*(|\mathcal{P}_1|/|\mathcal{P}_0|, [|\mathcal{P}_0|])$$

を計算機上での f の近似表現 $\mathcal{F}$ から計算する. 単体近似定理の場合と同様に, 各方体が十分小さく, $\mathcal{F}$ による近似が十分よいことが計算可能性の必要条件となるが, 方体の数が多くなると計算に必要なメモリの量及び実行時間が大きな障害となる. この問題を回避するため, CHomP にはホモロジーを変化させずに方体の数を減らすアルゴリズムが実装されている.

例 14. CHomP の `example` ディレクトリに含まれている `repeller` を例として実行してみよう.

写像の情報は `repeller.map` に含まれている. 前章で述べたように CHomP における写像の表現形式には書式 1 と書式 2 があるが, `repeller.map` は書式 1 で書かれている. 見やすくするために書式 1 から書式 2 へ

```
cnvmvmap repeller.map repeller.mp
```

により変換しよう. 結果得られたファイル `repeller.mp` の内容は

```
(1) -> {(0)}
(2) -> {(0) (1) (2)}
(3) -> {(2) (3)}
(4) -> {(3) (4) (5)}
(5) -> {(5) (6)}
(6) -> {(6) (7) (8)}
(7) -> {(8)}
```

のようになっているはずである. これは方体 (1) が (0) に写像され, また方体 (2) は (0), (1), (2) という 3 つの方体に写像される, 等の情報を書きくだしたものである. 写像の定義域は (1) から (7) までの 7 つの方体であるのに対し, 値域は定義域を含む 9 つの方体の和であることに注意しよう.

このデータから index pair を得るには

```
indxpair repeller.cub repeller.mp repeller.q1 repeller.q0
```

を実行する. 計算結果は `repeller.q1` には $Q_1 = \{(2)(3)(4)(5)(6)\}$ という 5 つの方体が含まれ, `repeller.q0` は $Q_0 = \{(1)(7)\}$ という 2 つの方体の集合となっている. この計算により得られた index pair は $P = (Q_0 \cup Q_1, Q_0)$ という組である (図 4).

最終的にコンレイ指数を計算するには

```
homcubes -i repeller.map repeller.q1 repeller.q0
```

を実行する. 実行結果の最終部分を抜き出すと次のようになる.

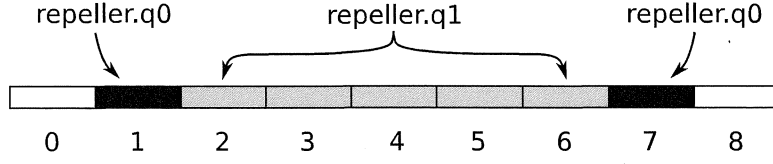


図 5: repeller.q0, repeller.q1

```

Computing the homology of the graph of F over the ring of integers...
Reducing D_1: 0 + 2 reductions made.
H_0 = 0
H_1 = Z
Computing the homology of Y over the ring of integers...
Reducing D_1:
H_0 = 0
H_1 = Z
The map induced in homology is as follows:
Dim 0: 0
Dim 1: f (x1) = y1
The map induced in homology by the inclusion:
Dim 0: 0
Dim 1: i (x1) = y1
The inverse of the map induced by the inclusion:
Dim 0: 0
Dim 1: I (y1) = x1
The composition of F and the inverse of the map induced by the inclusion:
Dim 0: 0
Dim 1: F (x1) = x1
Total time used: 0.01 sec (0.000 min).

```

普通の数式で書くと、上の計算結果は

$$H_k(Q_0 \cup Q_1, Q_0) = \begin{cases} \mathbb{Z} & (k = 1) \\ 0 & (k \neq 1) \end{cases}$$

となることと、 $H_1(Q_0 \cup Q_1, Q_0)$ の生成元を x_1 と書いたときに index map による x_1 の像は x_1 自身である、すなわち

$$f_{P*} = \begin{cases} \text{id} & (k = 1) \\ 0 & (k \neq 1) \end{cases}$$

を示している。

5 コンレイ指数の力学系への応用

前節では、計算ホモロジー理論によりコンレイ指数を計算する方法に触れたが、実際の力学系研究において、どのような結果をそこから得られるであろうか。現在も新しい応用

が盛んに研究されており，全てを網羅することは不可能であるが，そのうち基礎的なものを幾つか選んで触れることにする．

5.1 周期点の存在および非存在

コンレイ指数の基礎的かつ有用な応用として，まず周期点の存在検証があげられる．存在証明の原理は §2 で述べた Lefschetz の不動点定理であるが，コンレイ指数のみならず精度保証により得られた命題 13 を最大に利用することも議論の要点である．すなわち，サドル型の周期点のように単純に軌道を追いかけるだけでは見つけることが難しい周期点であっても有向グラフを用いて確実に発見することができ，また逆に有向グラフに k -サイクルが存在しなければ，考えている領域には k -周期点は 1 つも存在しないことを厳密に示せるのである．

Lefschetz の不動点定理を index pair により局所化された力学系 $f_P : P_1/P_0 \rightarrow P_1/P_0$ に対して適用すると，次のコンレイ指数版不動点定理が得られる．

定理 15 (index pair に対する Lefschetz 不動点定理 [21]). $P = (P_1, P_0)$ を *index pair* とするとき， $\lambda(f_{P*}) \neq 0$ ならば $S := \text{Inv}(P_1 \setminus P_0)$ は不動点を含む．より一般に $\lambda(f_{P*}^n) \neq 0$ ならば S 内に f^n の不動点が存在する．

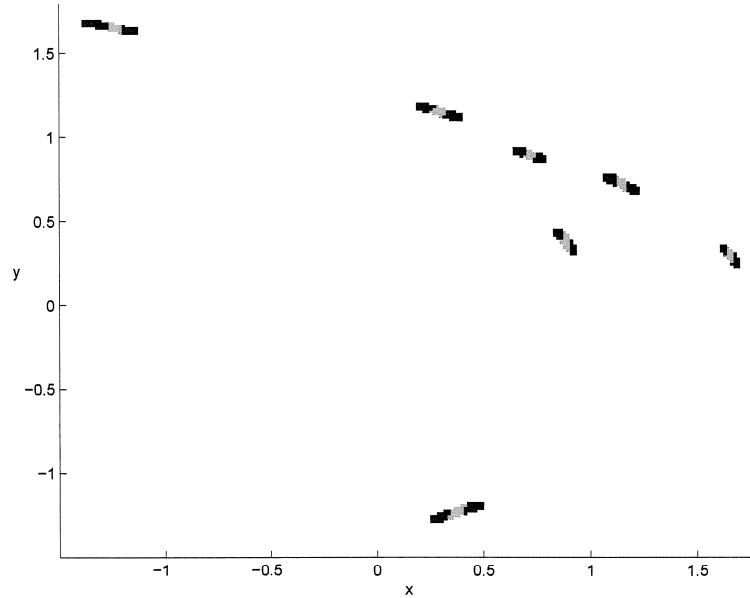


図 6: エノン写像のある 7 周期点に対する index pair

例 16. エノン写像 $H_{a,b} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 : (x, y) \mapsto (a - x^2 + by, x)$ に対して定理 15 を適用して周期点の存在を証明しよう．パラメータは古典的な $a = 1.4$, $b = 0.3$ を選んだ．図 5.1 は §4 の方法により構成した index pair であり，緑色の領域が $P_1 \setminus P_0$ ，黒の領域が P_0 を表

わす. CHomP による計算を実行すると

$$f_{P*1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} : \mathbb{Z}^7 \rightarrow \mathbb{Z}^7$$

となり, 1 以外の次数では f_{P*} は 0 であることがわかる. $\text{tr}((f_{P*1})^7) = 7$ であるから定理 15 より $\text{Inv}(P_1 \setminus P_0)$ は f^7 の不動点を含む. P_1 が f の不動点を含まないことは簡単に示せるので, 結局 $\text{Inv}(P_1 \setminus P_0)$ は 7 周期点を含むことが証明された.

例 17. 今度は同じパラメータ $a = 1.4, b = 0.3$ でエノン写像の 5 周期点を探してみよう. 先ほどと同様に GAIO を用いて 5 周期的な方体を探すと, じゅうぶん分割を細かくすると素周期が 5 となる方体は存在せず, 周期が 1, すなわち像が自分自身と交わる方体しか存在しないことがわかる. いまエノン写像の二つの不動点は双曲型であり, Hartman-Grobman

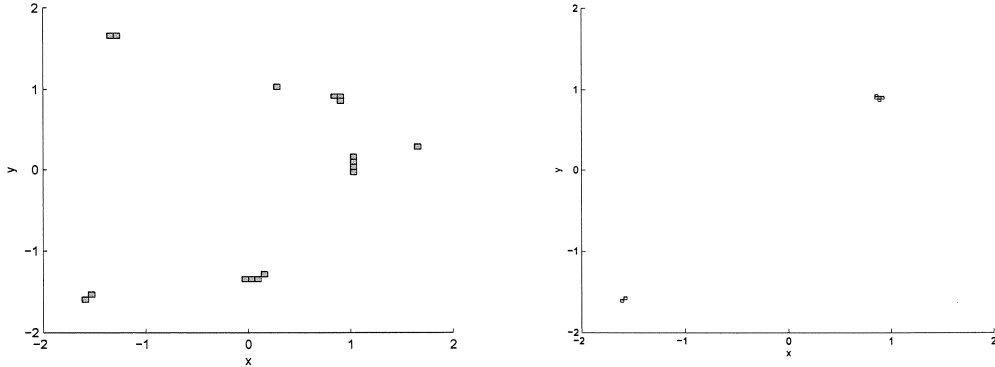


図 7: GAIO で探した 5 周期的な方体 (left: depth = 16, right: depth = 18)

の定理を成立する近傍の大きさを評価することで [3], 周期が 1 のボックスの中には不動点しか存在しないことが示せる (実はコンレイ指数を用いることにより $a = 1.4, b = 0.3$ のエノン写像は周期が 3 と 5 以外の周期の周期点は全て持つことが示されている [36]).

5.2 記号力学系・エントロピー

§2 で触れたエントロピー不等式にもコンレイ指数版が存在する [6]. しかし, 技術的な問題から (馬蹄形写像のコンレイ指数が消えてしまうことが原因) この不等式では有効な評価が得られない場合もあり, 実際の応用では記号力学系への半共役写像の存在を証明するというより強い主張を経由してエントロピーを評価する方法をとることが多い.

記号力学系の存在を Conley 指数で証明する方法の基本的なアイディアは Szymczak の論文 [38] で与えられた. その後 Lorenz 方程式における記号力学系の存在証明 [24, 25, 26]

などに応用が見いだされている。ここでは Day-Frongillo-Trevino の論文 [9] における定式化を簡単に紹介する。

記号力学系は普通は行列を用いて定義されるが、ここでは定理の記述を簡単にするため、有向グラフを用いた表現を与える（グラフの行列表現を経由して2つの定義は同値となる）。頂点の集合 V と辺の集合 E を持つ有向グラフ $G = (V, E)$ に対して

$$X_G := \{(v_i)_{i \in \mathbb{Z}} \mid \text{任意の } i \in \mathbb{Z} \text{ に対し } v_i \in V \text{ かつ } v_i \text{ から } v_{i+1} \text{ へ辺が存在する}\}$$

と定義する。すなわち、辺に沿って順にたどって行けるような頂点の無限列を全て集めたものである。 X_G に含まれる頂点の列で、周期的なものをサイクルと呼ぶ。これは文字通り G の中でくると輪状に繋がった頂点たちである。集合 X_G は距離

$$d((v_i)_{i \in \mathbb{Z}}, (w_i)_{i \in \mathbb{Z}}) := \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{|v_i - w_i|}{2^{|i|}}$$

により距離空間となる。さらに X_G 上に写像 σ_G を

$$\sigma_G((v_i)_{i \in \mathbb{Z}}) = (v_{i+1})_{i \in \mathbb{Z}}$$

により定義すると連続写像となり、従って $\sigma_G : X_G \rightarrow X_G$ は離散力学系と見ることができ、 σ_G のことを X_G 上のシフト写像と呼ぶ。

この力学系は代数的に構成されているため、様々な不変量を厳密に求めることができる。例えば位相的エントロピーも

$$h_{\text{top}}(\sigma_G) = \log s(T_G)$$

と代数的に求められる。ここで T_G はグラフ G の行列表現、 $s(T_G)$ はそのスペクトル半径である。

定理 18. 孤立化近傍 $N \subset X$ が互いに交わらないコンパクト集合 $N_1, \dots, N_k$ の和であるとする。さらに有向グラフ $G = (\{1, \dots, k\}, E)$ が存在して、 G の任意のサイクル $\gamma = a_1 \cdots a_m$ と $f_\gamma := f|_{N_{a_m}} \circ \cdots \circ f|_{N_{a_1}}$ に対し $\text{Inv}(N_{a_1}, f_\gamma)$ の *index pair* P_γ が存在して

$$\lambda(f_{P_\gamma}) \neq 0$$

を満たすとする。また G の全ての辺に対し、その辺を含むような G のサイクルが存在するとする。このとき $\rho : \text{Inv}(N) \rightarrow X_G$ を

$$(\rho(x))_i = j \iff f^i(x) \in N_j$$

と定義すると ρ は半共役写像となる。

この定理から得られる半共役に対して命題 6 の不等式 (5) を用いると

$$h_{\text{top}}(f) \geq \log s(T_G)$$

という f の位相的エントロピーの下からの評価が求まる。

証明のあらすじ. ρ が連続になることと, 可換性 $\sigma_G \circ \rho = \rho \circ f$ をみたすことは構成から簡単に従う. 問題は ρ の全射性である. X_G の周期点集合を P と書くと, G の辺に関する仮定より P は X_G で稠密, すなわち $X_G = \text{cl}(P)$ となる. また Lefschetz 数の仮定により, P の各サイクルに対して, ρ でそのサイクルに写像されるような f の周期点を定理 15 を用いて見つけることができる. よって $\text{im } \rho \supset P$ である. いま $\text{Inv}(N, f)$ がコンパクトで, かつ ρ が連続なので $\text{im } \rho$ もコンパクトである. さらに X_G はハウスドルフ空間なので $\text{im } \rho$ は閉集合. 従って

$$\text{im } \rho = \text{cl}(\text{im } \rho) \supset \text{cl}(P) = X_G$$

となり, これはすなわち ρ が全射であることを示している. □

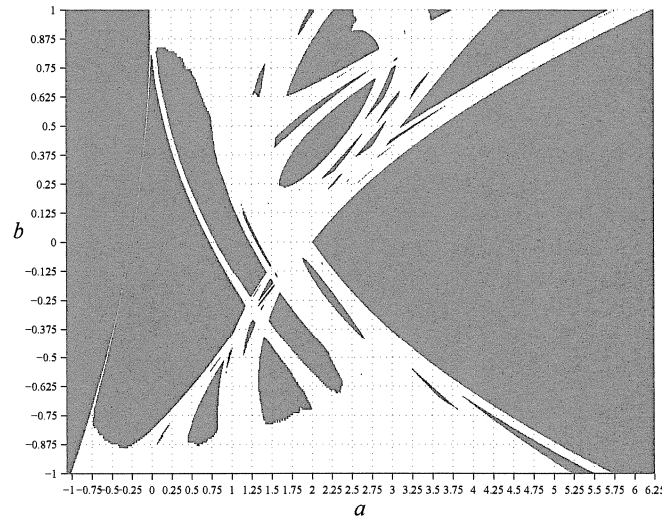


図 8: エノン写像の構造安定なパラメータ領域 (の部分集合) [4]

コンレイ指数は小さな摂動に対して安定なので, 定理 18 により発見される記号力学系もまた摂動に対して存続する. 一般の力学系に記号力学系が構造不安定な不変集合として含まれている場合もちろん考えられるが, そのような不変集合はこの定理では発見できない. ただし Katok の定理 [22] により, 2次元の力学系に対してはその位相的エントロピーを双曲型の不変部分集合によりいくらでも近似できることがわかっており, このことから計算精度を上げれば定理 18 による位相的エントロピーの評価は真の値に近づくと期待される.

定理 18 の威力が最も発揮されるのは, 構造安定ではあるが, 単純な馬蹄形でないために系の記述が難しい力学系に対してだと思われる. 構造安定なパラメータ領域を求めるアルゴリズムが近年著者により開発されており [4], Frongillo はまさにこの 2 つを組み合わせることでエノン写像の位相的エントロピー評価を広いパラメータ領域で得ることに成功した [16]. そこでは [4] において “plateau” と呼ばれている一様双曲的なパラメータ領域たち (図 8) のそれぞれからパラメータが 1 つずつ選ばれ, 定理 18 を用いて位相的エントロピーの評価が求められている. 構造安定性により各 plateau では位相的エントロピーは

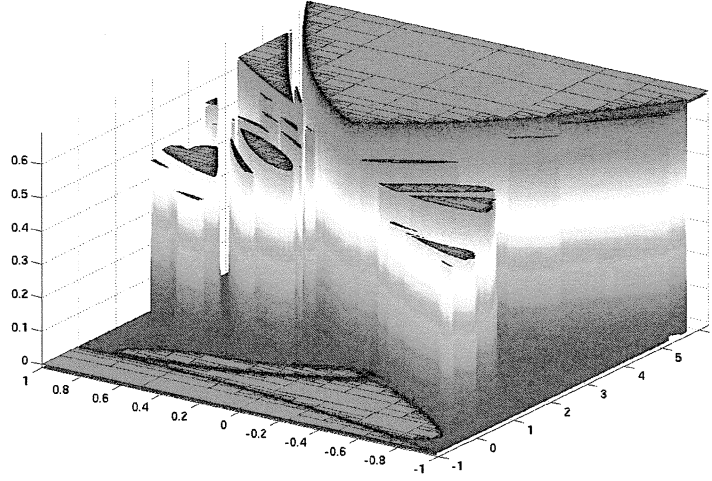


図 9: Frongillo によるエノン写像のエントロピーの下からの評価 [16]

一定であることが保証されているので，離散的に選んだパラメータに対してのみ計算を行なっても，図 9 のように広い範囲での評価を得ることができる訳である．

5.3 ホモクリニック接触

ホモクリニック接触や，より一般にホモクリニック分岐 [30] の研究は現在の力学系において中心的な話題の一つである．ホモクリニック接触の存在からストレンジアトラクター [28] や Newhouse 現象 [30, 33] の発生が導かれたり，また任意の力学系は双曲型の力学系かホモクリニック分岐を持つ力学系で近似できるという予想 [29] もあり，その研究はたいへん重要である．一方でホモクリニック分岐は本質的に大域的な現象であるため具体的な系に対しその存在を証明するのは簡単ではない．

この節では，双曲型周期点におけるホモクリニック接触の存在をコンレイ指数と計算機を利用して検証する手法 [3] について解説する．不変多様体の級数展開を用いた解析的な議論により同様の結論を得ることもできる [14] が，解析的な写像以外にも適用できること，また議論の簡明さや高次元化の容易さが位相幾何学を使う手法の利点である．

以下では多様体 M 上の可微分同相写像 $f: M \rightarrow M$ を考える．双曲型周期点 $p \in M$ は，その安定多様体 $W_f^s(p)$ と不安定多様体 $W_f^u(p)$ が非横断的な交わりを持つときにホモクリニック接触を起こすという．図 10 はエノン写像 ($a = 1.4, b = 0.3$) が第一象限に持つサドル型不動点 p の安定多様体と不安定多様体を描いたものである．このパラメータの近くで p がホモクリニック接触を持つように図から読みとれるが，以下に解説する手法を使うとこの観察を次のように数学的に正当化することができる．

定理 19 ([3]). b が 0.3 に十分近いとき，ある $a \in [1.392419807915, 1.392419807931]$ が存在して p はホモクリニック接触を持つ．

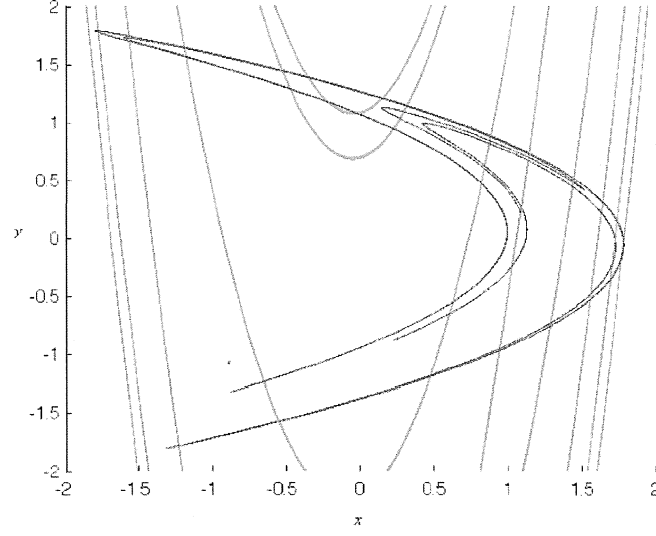


図 10: エノン写像の不動点の不变多様体

接触の存在を議論するためには必然的に微分の情報が必要となるが、コンレイ指数は微分の情報は持たないのでそのままでは議論が展開できない。そこで f とその微分の情報を同時に含む力学系 $Pf: PM \rightarrow PM$ を以下のように定義する。

PM を接束 TM の射影化とする。すなわち x 上のファイバー $P_x M$ が $T_x M$ の射影空間であり、 TM から誘導される局所自明化を持つ M 上のファイバー束である。 Pf は f の微分 $Tf: TM \rightarrow TM$ が PM 上に誘導する写像とする。 $0 \neq v \in T_x M$ の張る線型空間を $[v] \in P_x M$ と書くと $Pf([v]) := [Tf(v)] \in P_{f(x)} M$ である。 TM から PM への射影を π と書き $TM \rightarrow M$ の零切断の像と M を同一視すると、次の図式が可換になる。

$$\begin{array}{ccc} TM \setminus M & \xrightarrow{Tf|_{TM \setminus M}} & TM \setminus M \\ \pi \downarrow & & \downarrow \pi \\ PM & \xrightarrow{Pf} & PM. \end{array}$$

Tf からベクトルの長さに関する情報を捨て、ベクトルの張る空間の方向だけに注目した写像が Pf である。

この構成により周期点のホモクリニック接触はどのように PM に持ち上げられるかを見よう（図 11 参照）。 $p \in M$ を双曲型不動点、 $T_p M = E_p^s \oplus E_p^u$ を対応する接空間の分解とする。このとき安定部分空間 E_p^s と不安定部分空間 E_p^u を PM に射影した $\pi(E_p^s \setminus \{0\})$ および $\pi(E_p^u \setminus \{0\})$ は Pf の孤立不変集合となる。記号の節約のためこれらも E_p^s , E_p^u と書くことにする。

定理 20 ([1]). p を f の双曲型不動点とすると、 p がホモクリニック接触を持つ必要十分条件は $Pf: PM \rightarrow PM$ が E_p^u から E_p^s への *connecting orbit* を持つことである。

ここで集合 A から B への *connecting orbit* とは、 $f^n(x)$ が $n \rightarrow -\infty$ で A に収束し、 $n \rightarrow +\infty$ で B に収束するような軌道のことである。この定理によりホモクリニック接触

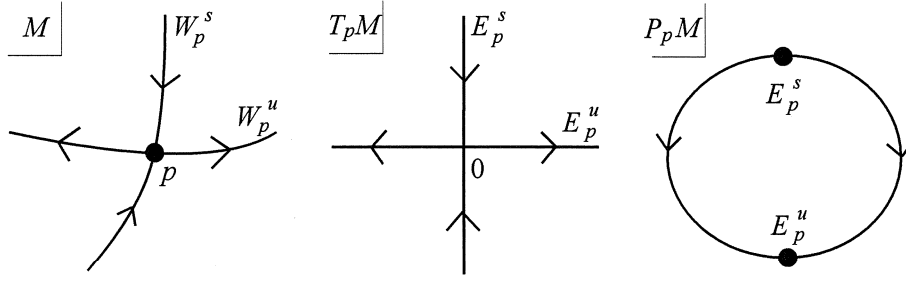


図 11: サドル型不動点 p

を検証するという問題は connecting orbit の存在を検証するという問題に言い換えられた。ではどのようにして connecting orbit を見つければよいであろうか。

定理 21 ([3]). 孤立化近傍 N が互いに交わらない閉集合 N_1, N_2 により $N = N_1 \cup N_2$ と表され、 $f(N_2) \cap N_1 = \emptyset$ と仮定する。 P, Q, R をそれぞれ N, N_1, N_2 の *index pair* とするとき、シフト同値類として $f_{P*} \neq f_{Q*} \oplus f_{R*}$ ならば $\text{Inv}(N_1, f)$ から $\text{Inv}(N_2, f)$ への *connecting orbit* が存在する。

例 22. 定理 21 が適用できる典型的な状況が図 12 である。 $f(N_2) \cap N_1 = \emptyset$ は明らか。 N_1 のみに着目すると、図から $\text{Inv}(N_1, f)$ はサドル型不動点と同じコンレイ指数を持つことがわかる。すなわち $f_{Q*1} = 1_{\mathbb{Z}} : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$ で 1 以外の次数では f_{Q*} は 0 である。 $\text{Inv}(N_2, f)$ も同様。よって $f_{Q*1} \oplus f_{R*1}$ は 2×2 単位行列 $1_{\mathbb{Z}^2} : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$ となる。 $\text{Inv}(N, f)$ 全体ではその *index pair* として図 12 の $P = (P_1, P_0)$ がとれ、 $H_1(P_1/P_0, [P_0])$ のホモロジーの生成元を α, β, γ とするとそれらは f_{P*1} により

$$\alpha \mapsto -\gamma, \quad \beta \mapsto \alpha + \beta, \quad \gamma \mapsto \gamma$$

と移される。よって

$$f_{P*1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} : \mathbb{Z}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^3$$

である。簡単な議論によりシフト同値類として $f_{P*1} \neq f_{Q*1} \oplus f_{R*1}$ であることがわかり、定理 21 より $\text{Inv}(N_1, f)$ から $\text{Inv}(N_2, f)$ への connecting orbit が存在する。

コンレイ指数が小さな摂動に対し安定であることから定理 21 で発見できる connecting orbit は構造安定なものに限ることに注意しよう。我々は定理 21 を Pf に適用して E_p^u から E_p^s への connecting orbit を発見したいのだが、この connecting orbit は構造安定ではない。例えば $\dim M = 2$ で p がサドル型とすると PM 内で E_p^u は 1 次元、 E_p^s は 2 次元の不安定方向を持つサドル型不動点となる。このとき $W_{Pf}^u(E_p^u)$ と $W_{Pf}^s(E_p^s)$ は共に 1 次元であり、3 次元の PM 内でこれらは横断的になれず、 E_p^u から E_p^s への connecting orbit は構造安定ではない。これは周期点のホモクリニック接触が写像の摂動により壊れてしまうことから明らかである。

そこで以下では写像 f を固定して考えるのではなく、1 パラメータ族の設定で問題を考える。「パラメータ区間のどこかでホモクリニック接触を持つ」という性質は 1 パラメータ

族の摂動に対しては安定（1パラメータ族が退化していなければ）なので、族全体を一個の写像として見て定理 21 を適用しようという方針である。

Λ を $\mathbb{R}$ の区間、 $\{f_\lambda : M \rightarrow M\}_{\lambda \in \Lambda}$ を λ に滑かに依存する可微分同相写像の族で、双曲型不動点の族 $p(\lambda)$ を持つものとする。 λ を動かしたときに $p(\lambda)$ がホモクリニック接触を持つ λ が存在するかどうかを問題にしよう。この設定の下で

$$F(x, \lambda) := (Pf_\lambda(x), \lambda) : PM \times \Lambda \rightarrow PM \times \Lambda$$

$$\tilde{E}_p^u := \bigcup_{\lambda \in \Lambda} E_{p(\lambda)}^u, \quad \tilde{E}_p^s := \bigcup_{\lambda \in \Lambda} E_{p(\lambda)}^s$$

と定義すると $\tilde{E}_p^u$ と $\tilde{E}_p^s$ は F の孤立不変集合となる。 F はパラメータ λ を保存するので、もし F の下で $\tilde{E}_p^u$ から $\tilde{E}_p^s$ への connecting orbit が存在するならば、ある $\lambda_0 \in \Lambda$ に対し $E_{p(\lambda_0)}^u$ から $E_{p(\lambda_0)}^s$ への f_{λ_0} による connecting orbit が存在することになり、それは定理 20 により $p(\lambda_0)$ がホモクリニック接触を持つことを意味する。

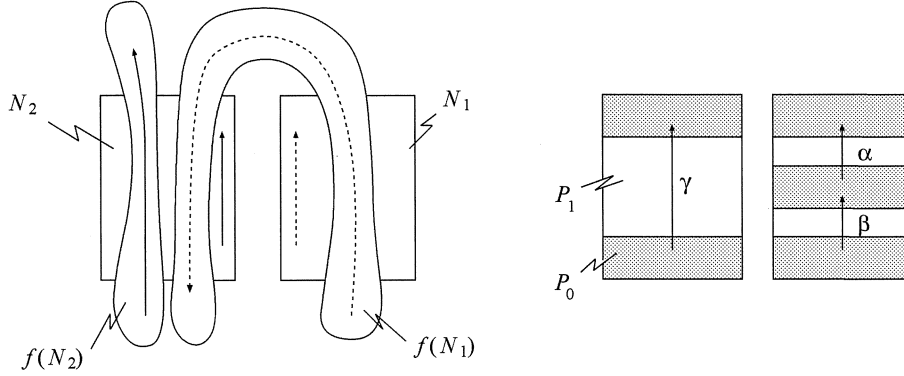


図 12: connecting orbit の存在が結論される典型的な状況

見つけたい $\tilde{E}_p^u$ から $\tilde{E}_p^s$ への connecting orbit は安定に存在すると期待できるが、まだ定理 21 が適用できる状況ではない。 $\tilde{E}_p^u$ と $\tilde{E}_p^s$ の不安定方向の次元が異なることから例 22 のような議論が成立しないのである。そこで $\tilde{E}_p^u$ のホモロジーコンレイ指数が懸垂されるように $\partial\Lambda \cap \tilde{E}_p^u$ の近傍で F を摂動して、定理 21 が使える状況に持ち込む。この摂動は Λ を適当に取り直すことにより connecting orbit の存在に影響しないように行うことができる（詳しくは [3] を参照）。

さて、以上の議論をエノン写像 $H_{a,b}$ に適用して定理 19 を証明しよう。 b を 0.3 に固定し、 $H_{a,0.3}$ を a をパラメータとして持つ 1 パラメータ族と考える。 Λ を 1.4 を含む適当な閉区間にとり $PM \times \Lambda \cong \mathbb{R}^2 \times S^1 \times \Lambda$ の局所座標を (x, y, θ, a) と書こう。まず図 13 にあるように $\tilde{E}_p^u$ から $\tilde{E}_p^s$ への connecting orbit を近似する 4 次元方体の集合を作る。各方体を 2^{16} 個に分割して近似を良くしたものが図 14 の集合である。分割しながら Λ の不要な部分を捨てることにより、最終的には $\Lambda = [1.392419807915, 1.392419807931]$ とする。また分割により $\tilde{E}_p^u$ と $\tilde{E}_p^s$ の近傍を十分小さくし、近傍内の最大不変集合が $\tilde{E}_p^u$ と $\tilde{E}_p^s$ となるようにしておく（Hartman-Grobman の定理の応用）。この精度が得られるまでに、最初の 1 個の方体は 2^{140} 個の方体に分割されている。ステップ 2, 3 を実行して index pair を作

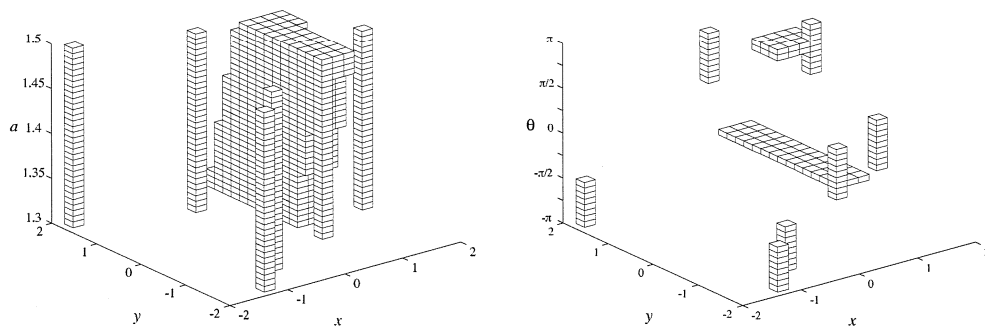


図 13: connecting orbit の被覆 $\mathcal{I}$

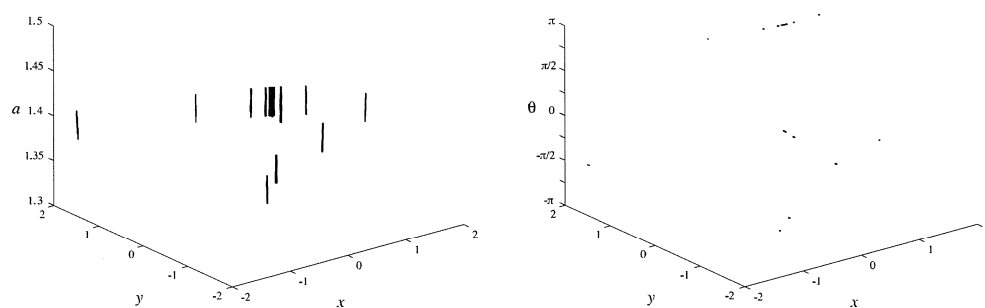


図 14: 分割により近似精度が改善された $\mathcal{I}$

り CHomP でホモロジーを計算すると、ある 59×59 行列 A により $F_{P*2} = A : \mathbb{Z}^{59} \rightarrow \mathbb{Z}^{59}$ と書けることがわかるが、基底を適当に取り換えることによりシフト同値類として

$$F_{P*2} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$$

となる。また $\tilde{E}_p^u$ と $\tilde{E}_p^s$ は共に不安定方向が 2 次元のサドル型不動点と同じコンレイ指数を持つことも CHomP により示される。 F_{P*2} は 2×2 単位行列とシフト同値でなく、また $\tilde{E}_p^s$ の近傍の F による像が $\tilde{E}_p^u$ の近傍と交わらないことも簡単に示せるので定理 21 より $\tilde{E}_p^u$ から $\tilde{E}_p^s$ への connecting orbit が存在する。これと定理 20 により $b = 0.3$ の場合に $a \in \Lambda$ が存在してホモクリニック接触が起きることがわかるが、コンレイ指数の摂動に対する安定性から b が十分 0.3 に近ければ以上の議論は全て同様に成立し、よって定理 19 の主張が証明された。

6 おわりに

本稿では力学系への応用と言いながら、離散力学系の場合しか扱えなかった。連続力学系の場合も基本的には同様の議論ができるが、計算の精度保証を得る段階でより大きな努力が必要である。離散力学系の場合には一回の写像で生じる誤差を評価すればよかったが、連続力学系の場合には軌道を有限時間積分せねばならぬため、蓄積される誤差を何らかの方法で抑え込まねばならない。精度保証付きの数値積分法は現在盛んに研究されている分野であり、[2] で紹介されている文献などを参照されたい。

「モース分解」の理論も重要である。これはモース理論の適用範囲を、関数の勾配流という限られた力学系からカオス的な不変集合を持つような一般の力学系にまで広げたものである。モース分解を計算機で自動的に実行する試みとして Ban-Kalies の仕事 [7]、またそれを用いて力学系の大域的な構造を自動的にデータベース化するプロジェクトとして [5] がある。

計算ホモロジーとコンレイ指数の応用はさらに偏微分方程式などの無限次元の力学系にも及んでいる [10]。もちろん計算機では無限次元空間をそのまま扱うことは出来ない。そのため、まず無限次元の系を何らかの方法で有限次元近似し、この有限次元力学系を計算ホモロジーとコンレイ指数を用いて解析する。そこで得られた結果を今度は無限次元の力学系に戻さなくてはならない。非常に困難な議論に思えるが、無限次元の力学系であっても有限次元のアトラクターが存在して系全体の振舞いを支配している場合などには上手くいくことも多い。

参考文献

- [1] Z. Arai, Tangencies and the Conley index, *Ergodic Theory and Dynamical Systems* **22** (2002), 973–999.
- [2] Z. Arai, 精度保証付き数値計算の力学系への応用について, 数理解析研究所講究録 **1485**.

- [3] Z. Arai and K. Mischaikow, Rigorous computations of homoclinic tangencies, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **5** (2006), 280–292.
- [4] Z. Arai, On hyperbolic plateaus of Hénon maps, to appear in *Experimental Mathematics*.
- [5] Z. Arai, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, H. Oka and P. Pilarczyk, Building a database for the global dynamics of multi-parameter systems, in preparation.
- [6] A. Baker, Lower bounds on entropy via the Conley index with application to time series, *Topology and its Applications* **120** (2002), 333–354.
- [7] H. Ban and W. Kalies, A Computational Approach to Conley’s Decomposition Theorem, *Jouanal of Computational and Nonlinear Dynamics* **1** (2006), 312–319.
- [8] C. C. Conley, *Isolated invariant sets and the Morse index*, CBMS Regional Conference Series in Mathematics, **38**, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1978
- [9] S. Day, R. Frongillo and R. Trevino, Algorithms for rigorous entropy bounds and symbolic dynamics, preprint, 2007.
- [10] S. Day, O. Junge and K. Mischaikow, A rigorous numerical method for the global analysis of infinite-dimensional discrete dynamical systems, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **3** (2004), 117–160.
- [11] A. Dold, *Lectures on Algebraic Topology*, Classics in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 1995, ISBN: 3-540-58660-1.
- [12] M. Dellnitz and O. Junge, Set oriented numerical methods for dynamical systems, *Handbook of dynamical systems II*, North-Holland, 2002, 221–264.
- [13] M. Dellnitz and O. Junge, The web page of GAIO project,
<http://math-www.uni-paderborn.de/~agdellnitz/gaio/>
- [14] J. E. Fornæss and E. A. Gavosto, Tangencies for real and complex Hénon maps: an analytic method, *Experimental Mathematics* **8** (1999), 253–260.
- [15] J. Franks, *Homology and Dynamical Systems*, CBMS Regional Conference Series in Mathematics, **49**, American Mathematical Society, Providence, R. I., 1982.
- [16] R. M. Frongillo, Topological Entropy Bounds for Hyperbolic Dynamical Systems,
<http://www.cam.cornell.edu/~rfrongillo/dynamics/paper.pdf>
- [17] J. Franks and D. Richeson, Shift equivalence and the Conley index, *Trans. Amer. Math. Soc.* **352** (2000), 3305–3322.
- [18] K. Fukaya, シンプレクティック幾何学, 岩波講座 現代数学の展開, 1999, 岩波書店

- [19] O. Junge, Computing specific isolating neighborhood, *Progress in analysis*, Vol. I, World Sci. Publishing, (2003), 571–576.
- [20] S. V. Matveev, *Lectures on Algebraic Topology*, EMS Series of Lectures in Mathematics, European Mathematical Society, Zurich, 2006.
- [21] T. Kaczynski, K. Mischaikow and M. Mrozek, *Computational Homology*, Applied Mathematical Sciences **157**, Springer-Verlag, 2004.
- [22] A. Katok, Lyapunov exponents, entropy and periodic orbits for diffeomorphisms, *Inst. Hautes Études Sci. Publ. Math.* **51** (1980), 137–173.
- [23] J. Milnor, *Morse Theory*, Annals of Mathematics Studies **51**, Princeton University Press, Princeton, N.J. 1963.
- [24] K. Mischaikow and M. Mrozek, Chaos in the Lorenz equations: a computer-assisted proof, *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, **3** (1995), 66–72.
- [25] K. Mischaikow and M. Mrozek, Chaos in the Lorenz equations: a computer-assisted proof. II. Details, *Mathematics of Computation*, **67** (1998), 1023–1046.
- [26] K. Mischaikow and M. Mrozek, Chaos in the Lorenz equations: a computer-assisted proof. III. Classical parameter values, *J. Differential Equations*, **169** (2001), 17–56.
- [27] K. Mischaikow and M. Mrozek, The Conley index theory, *Handbook of Dynamical Systems II*, North-Holland, 2002, 393–460.
- [28] L. Mora and M. Viana, Abundance of strange attractors, *Acta. Math.* **171** (1993), 1–71.
- [29] J. Palis, A global view of dynamics and a conjecture on the denseness of finitude of attractors, *Astérisque* **261** (2000), 335–347.
- [30] J. Palis and F. Takens, *Hyperbolicity and Sensitive Chaotic Dynamics at Homoclinic Bifurcations*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics **35**, Cambridge University Press, 1993.
- [31] P. Pilarczyk, et al., Computational Homology Project,
<http://chomp.rutgers.edu/>
- [32] C. Robinson, *Dynamical Systems; Stability, symbolic dynamics, and chaos*, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 1999.
- [33] C. Robinson, Bifurcation to Infinitely Many Sinks, *Communications in Mathematical Physics* **90** (1983), 433–459.
- [34] D. Salamon, Morse Theory, the Conley index and Floer homology, *Bull. London Math. Soc.* **22** (1990), 113–140.

- [35] H. Seifert and W. Threlfall, 位相幾何学講義, シュプリンガー数学クラシックス, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2004.
- [36] A. Szymczak, A combinatorial procedure for finding isolating neighbourhoods and index pairs, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh. Section A* **127** (1997), 1075–1088.
- [37] A. Szymczak, The Conley index and symbolic dynamics, *Topology* **35** (1996), 287–299.
- [38] A. Szymczak, The Conley index for decompositions of isolated invariant sets, *Fundamenta Mathematicae* **148** (1995), 71–90.
- [39] Y. Yomdin, Volume growth and entropy, *Israel J. Math.* **57** (1987), 285–300.

第4章 複雑な空間パターンへの 計算ホモロジーの応用

寺本 敬・Marcio Gameiro
千歳科学技術大学・北海道大学

位相的に不変な量、ドメインの数や穴の数など、いわゆるホモロジー量は、なにか「構造」に初めてが接するとき、例えば、我々が新しく家を探すとき、部屋の数や窓の数、近ごろでは板の向こうは空洞かどうか、まずは壁や柱をたたいて確かめたいものである。この直感的に認知しやすい概念は、数学や物理学のみならず、生物学、医学、情報科学、建築工学、文化芸術など、多岐の分野で共有できるものであろうが、科学的視点では「構造」に関する粗いけれども安定した情報を引き出せる理路整然とした数理的手法が必要である。計算ホモロジー理論は、幾何学的データを保ちながら情報量を大幅に減らす体系的手段であり、コンピュータ上で効率よく利用できるアルゴリズムが開発されてきた [10]。実際、コンピュータと実験技術の発達により、現代科学のあらゆる分野で、複雑で膨大なデータを直接解析する必要性が益々高くなっている。これらのデータから必要な情報を効率よく抽出するには、統計的な処理やフーリエ解析が用いられることが多いが、位相幾何的な処理が用いられることは稀であった。これは得られた位相情報がどう利用できるかあまり知られていないことも理由であろう。

計算ホモロジープロジェクト (CHomP) を展開する Mischaikow 教授のグループでは、物質科学や流体科学の研究者を集めたワークショップを開催し、この異分野交流の機会から、CHomP ソフトウェアを活用した新たな共同研究も生まれている [2]。George Mason 大学の Wanner 教授らのグループは、重厚で壮麗な建造物でよく用いられる大理石について、その材料としての内部構造の観察手段としてホモロジー量、つまり多面体の Betti 数を取り入れ、マクロで観察される熱応力との相関の解明に新たな視点をもたらそうとしている [3]。なにか規則があるようで、そうでもない筋がならんだ模様をマーブル (大理石) 模様と呼ぶように、大理石は大きな結晶の塊ではなく、結晶軸の向きが異なる結晶粒が多数集まった多結晶構造をしている。この結晶粒の境界 (結晶粒界) での結晶軸の配向性が、大理石の熱への耐久性に影響を与える。例えば、構造内部の不均一性により生じる残留応力によって、微小亀裂が自然に形成される。焼きなまし法などの熱処理により、この不均一性はコントロールされるが、計算ホモロジーによって、これらの結晶粒界の幾何構造を定量的に評価するために、計算ホモロジーが用いられる。

図 1(a) は、実際の観察データから、コンピュータ解析によって 3 次元的に再現された多結晶構造の 2 次元断面画像である。直交した 2 方向からの結晶断面画像から得られる結晶粒の大きさと形状データに従って、ボクセルを組み合わせた 3 次元構造データとして、多結晶構造が再構成される。各結晶粒の結晶軸方向と結晶粒界を挟んだ配向関係は、断面の深さ方向に足し合わせて得られる分布関数が、観察データと統計的に

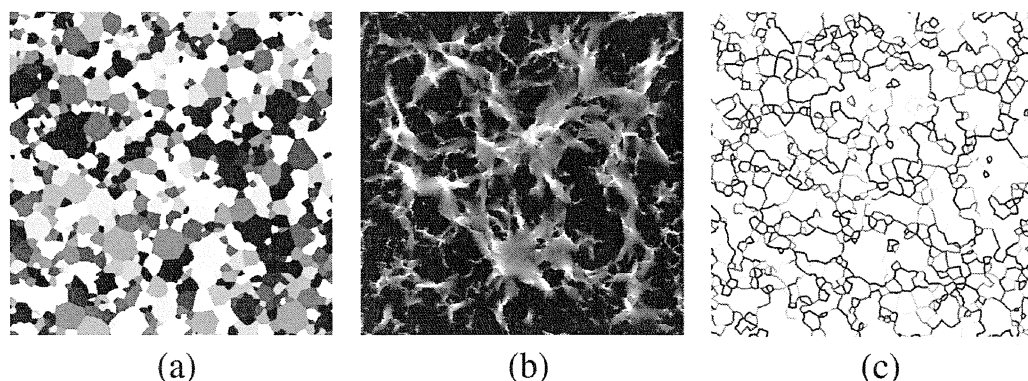


図 1: (a) 実験データから再構成された 931 個の結晶粒からなる多結晶構造. (b) 有限要素法シミュレーションによって得られた最大主応力の空間分布. 色の薄い部分ほど、応力が大きい. (c) 結晶粒界の空間分布. 色の濃い部分ほど、結晶粒間の配向角が大きい.

合うように決める. このようにして得た仮想的な多結晶構造を初期配置として, 有限要素法によるシミュレーション解析により, 計算された残留応力の空間分布を図 1(b) に示す. 白い部分ほど強い応力が発生しており, 微小亀裂が形成されやすいことがわかる. また, 結晶粒間の結晶軸配向差から, 結晶粒界のネットワーク構造が図 1(c) のように抽出される. 残留応力が大きい領域と, 結晶粒界のネットワーク構造のホモロジー解析を, 複数の多結晶構造について行ない, 結晶粒界での配向性のタイプを変えることで, 残留応力ネットワークをコントロールすることができることを明らかにしている.

この章では, 実験系で得られる複雑なパターンのトポロジー変化の解析に CHomP ソフトウェアを適用し, 位相情報である Betti 数を用いて系の振る舞いを特徴づける例について, 最近, 著者らが取り組んでいる研究例を 2 つ 紹介する. 1 つめは, 渦状欠陥カオスと呼ばれる, 時間的に複雑な乱流パターンのホモロジー解析である [4, 11]. これは, 底面を熱せられた流体が, 皿状の容器のなかでみせるスパイラルドメインの生成や崩壊を繰り返す空間 2 次元パターンである. 2 つめは, 空間的に複雑な 3 次元パターンのホモロジー解析である. 特に, ソフトマターで見られる共連続界面構造の紹介とその Betti 数を用いた分類について述べる [7, 14]. これらの 3 次元ネットワーク構造は, 単純な視覚化法だけでは, 空間 3 次元パターンは複雑すぎて容易に理解することができない.

レイリー・ベナール対流における乱流パターン

熱いコーヒーに冷たいクリームを入れると, 様相の異なるマーブル模様の美しい構造が生ずる. これは, 局所的に秩序が出現したことを意味しており, この部分に関してはエントロピーが増加ではなく減少している. 高温のコーヒーと低温のクリームの間に温度差があり, その結果として局所的に生じる流れと同じように, パターン (秩序) が形成される現象として, 「レイリー・ベナール (Rayleigh-Bénard) 対流」が知られている. 熱勾配によって生じる対流運動は, コーヒーカップのなかに限るものでなく, 大

気や海洋の季節的変動や、現在の学説では、地球内部のマントル対流によって、我々が暮らす大陸が移動してしまうと考えられているほど、普遍的で重要な非線形問題である [1].

実験室では、薄い平皿に液体を入れ、下から熱すると、液体の上 (表面) と下 (底面) との温度差 ΔT の大きさによって、異なる状況が観察される.*

- (1) 温度差が小さい場合は、下から上への単純な熱伝導が生じる。温度差が大きくなるにつれ、対流運動の揺らぎが成長していく。
- (2) 温度差がある臨界値 ($\Delta T_c \simeq 3.8^\circ\text{C}$) を超えると、ほぼ直線上のロール領域が現れ、これらのロール領域は全体として、縞模様の構造を形成する。各々のロール領域では、高温の中央部が上向きの流れ、低温の周辺部は下向きの流れになっている。この図 2(a) のような構造を理想的ロール (ideal straight roll, ISR) パターンと呼ぶ。
- (3) 温度差がさらに大きい場合には、構造は崩壊して、図 2(b)(c) のような乱流パターンになる。

本節では、ある渦状欠陥カオス (spiral defect chaos, SDC) パターンと呼ばれる、温度差が大きすぎないところで見られる弱い乱流パターンの計算ホモロジーによる特徴付けを行なう。

対流パターンの高温領域と低温領域での屈折率の差から生じる光強度分布を、シャドウグラフ (影絵) 法によって明暗画像として可視化する。このとき高温の上向き流れ領域は暗く、低温の下向き流れ領域は明るく表される。[†] 系を支配するコントロールパラメータとして、規格化された Rayleigh 数 $\epsilon = (\Delta T - \Delta T_c)/\Delta T_c$ を用い、0.125 から 4.125 まで 0.125 刻みで段階的に増加させる。鉛直方向への熱拡散時間 (約 2 秒) を基準として、その 1000 倍の間隔で、12 ビットデジタルカメラで撮影した 18000 枚の明暗画像の時系列データを解析する。それぞれの画像からは、実験系の光学的な不完全さによる対流の始まる前の背景光強度分布をさし引いている。またフーリエフィルタリング加工によって、カメラのノイズ等による 5 % 程度の短波長成分の画像乱れを取り除いている。これらの加工処理の後に、明暗度の平均値を閾値として、画像を二値化した例が図 1 である。表記 $X(n, \epsilon)$ は、規格化された Rayleigh 数 ϵ での n 番目の時系列データの二値化画像を表すものとする。このとき、黒い部分は高温の上向き流れ領域 $X^{\text{black}}(n, \epsilon)$ 、白い部分は低温の下向き流れ領域 $X^{\text{white}}(n, \epsilon)$ であり、それぞれの領域でのピクセル数は等しくなっている。

図 3 下段は Rayleigh 数が $\epsilon \simeq 1.0$ と 2.0 における、 $X^{\text{black,white}}(n, \epsilon)$ の 0 次と 1 次の Betti 数の時間変化を示している。観測された複雑な対流ロールパターンの状態変化を、これら Betti 数によって区別して表し、渦状欠陥カオスを引き起こす不安定化のメカニズムを、パターンのトポロジー変化の観点から考えてみよう。温度差が大きくなるにつれて、それぞれ対流パターンの至るところで、局所的な膨張や圧縮運動が活発になる。ロール構造の圧縮運動は、歪バリコース (skew-varicose) 不安定性と呼ばれ

*身近な器具で試すときは、サラダ油に銀色の油絵の具を溶かした液体をシャーレに入れ、ホットプレートで下から熱する。このとき底面での温度ムラがないように、シャーレの下にアルミ箔を敷くとよい。

[†]対流パターンの実験は、Georgia 工科大学の Schatz 教授の研究室で行なわれた [4, 11].

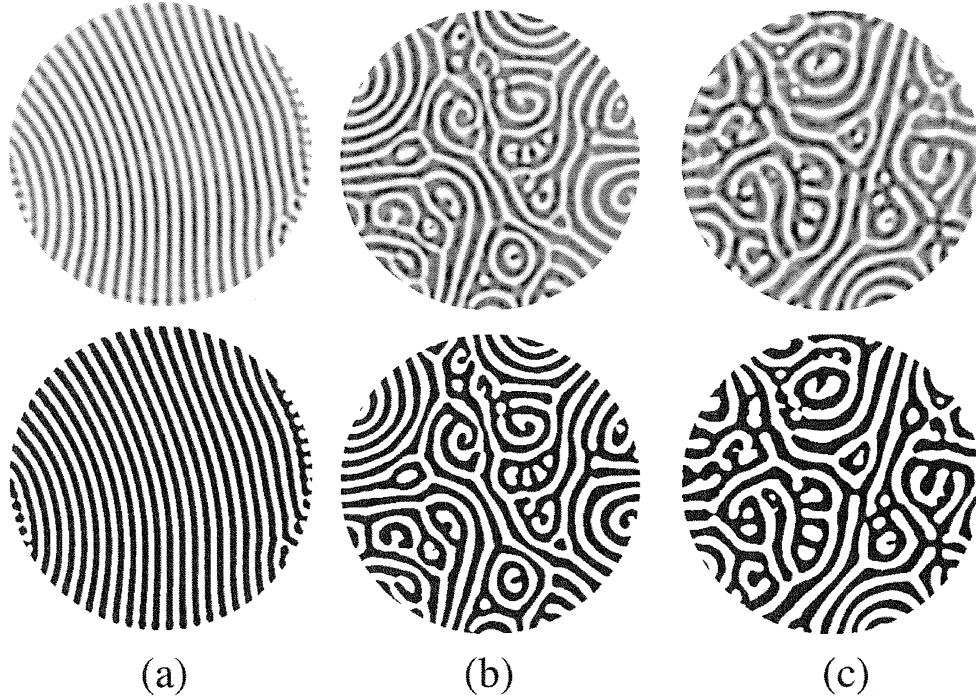


図 2: 温度差パラメータ ϵ が大きくなるにつれて, 理想直線状ロールパターンから, 渦状欠陥カオスパターンへと変化する. (a) $\epsilon = 0.125$, (b) $\epsilon = 1.0$, (c) $\epsilon = 2.0$. (上段) シャドウグラフ, (下段) 二値化画像.

るロール構造の局所的な拡張を生じ, 結果として, 近隣のロール構造ドメインとの合体を促す. 一方, 膨張運動によってドメインがちぎれたり, 合体によって, 生じた隙間に新たなドメインが出現することもある. ロール構造ドメインの合体によって 0 次の Betti 数 β_0 が 1 つ減り, そして新たなドメインの出現によって, 1 つ増える. あるロール構造ドメインの至るところで合体が進み, 1 つの大きなネットワークドメインが形成されていくなれば, 0 次の Betti 数 β_0 は減り続けるだろう. しかし, そのような大きなドメインでは, ドメイン内での自分自身との合体が生じるようになり, ループ構造を持つようになる. これは 1 次の Betti 数 β_1 の増加として表される. 渦状欠陥カオスの対流ロールパターンでは, 特にロール構造が渦をまいたり, 円くなったりしているところで, ドメイン同士がくっついたり, 千切れたりしながら, 系のトポロジーに影響を与えている.

このようなベナールの熱対流現象は, ブシネスク (Boussinesq) モデル方程式を用いて, 特に対流運動には上下対称面 (midplane symmetry) が仮定できる理想的な場合については, 理論的にもよく調べられている [1]. この状況を Betti 数を用いて表せば, 高温領域 (X^{black}) と低温領域 (X^{white}) について, 図 3(c) のように, $\overline{\beta_i^{\text{black}}(X)} \simeq \overline{\beta_i^{\text{white}}(X)}$ が成り立つはずである. 表記 $\overline{}$ は時間平均である. しかしながら, コントロールパラメータ ϵ が大きい図 3(d) では, それぞれの Betti 数 $\beta_i^{\text{black,white}}(X)$ の対称性が見られない. 図 4(a) は, Betti 数の時間平均値のパラメータ ϵ 依存性であるが, 温度差 ϵ が大きくなるほど, この破れは拡大していることがわかる. このような非対称性は非ブシネ

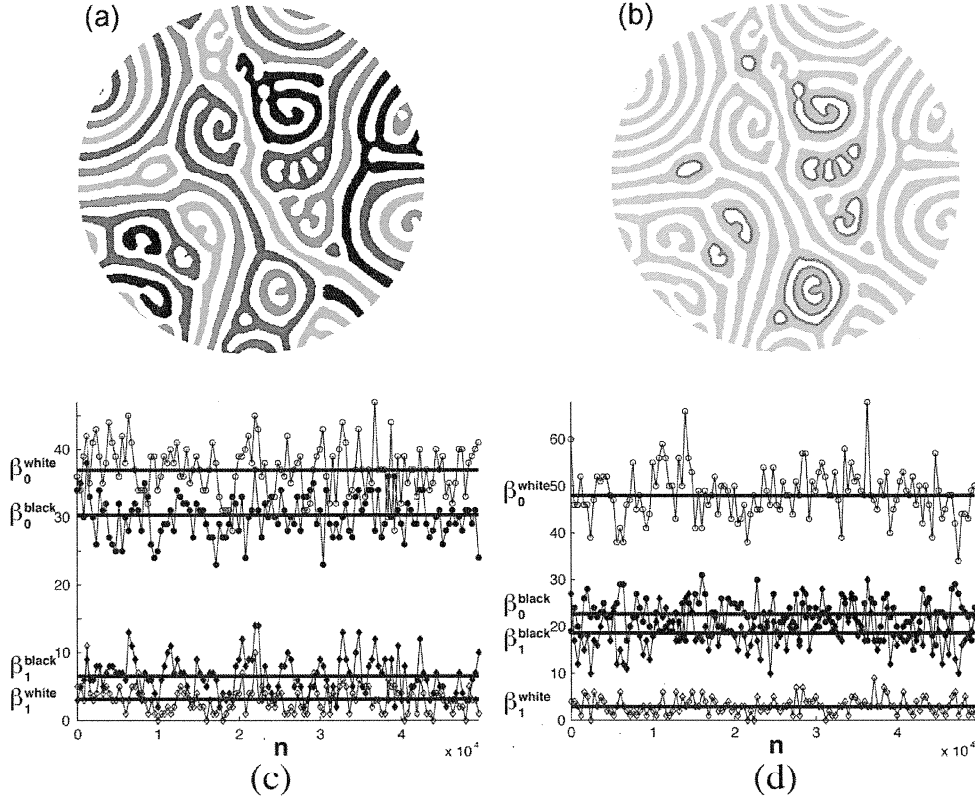


図 3: (上段) 過剰欠陥カオスパターンの Betti 数の計算例 (a) $\beta_0(X^{\text{black}}) = 34$ はドメインの数, (b) $\beta_1(X^{\text{black}}) = 17$ は穴の数を表す. (下段) Betti 数の時間変化 (c) $\epsilon = 1.0$ のとき, 高温領域と低温領域を入れ替えても変わらないが, (d) $\epsilon = 2.0$ では, その上下対称性がみられない. 黒丸: $\beta_0(X^{\text{black}})$, 黒角: $\beta_1(X^{\text{black}})$, 白丸: $\beta_0(X^{\text{white}})$, 白角: $\beta_1(X^{\text{white}})$ X^{white} . それぞれの Betti 数の時間平均値 $\bar{\beta}_i(X)$ を直線で示している.

スク (Non-Boussinesq) 効果と呼ばれ, ヘキサゴナルパターン (蜂の巣状パターン) での対称性の破れについては, 見た目からも明らかである. この非ブシネス効果は, 表面と底面での流体の物性値だけから決まる無次元量パラメータ Q によって特徴づけられる. ヘキサゴナルパターンについては, 正の Q 値では正六角形の細胞状の渦領域の中心部に上向きの流れ, 周辺部は下向きの流れになる. 一方, 負の場合は, 対流の向きはそれぞれ反転することが知られている. このように, 渦状欠陥カオスパターンでは, 非ブシネス効果が現れているかどうかは, 見た目では判断できないが, それらのホモロジー量は対称性の破れを定量的によく検出している. この観察条件では $Q \simeq 0.54$ が得られており, 非ブシネス効果が顕著に見えることと辻褄が合う.

高温, 低温領域, それぞれでの 0, 1 次の Betti 数の組 $(\beta_0^{\text{black}}, \beta_1^{\text{black}}, \beta_0^{\text{white}}, \beta_1^{\text{white}})$ によって, 系の状態を 2 次元パターンのホモロジーによって表すことを考える. 図 3 下段にあるような Betti 数の時系列データについて, 同じ Betti 数の組 $(\beta_0^{\text{black}}, \beta_1^{\text{black}}, \beta_0^{\text{white}}, \beta_1^{\text{white}})$ が出現する数を数えることにより, それらを規格化することによって, それぞれの状態 i の出現確率 p_i を計算することができる. この確率分布 p_i から, エントロピー S を次

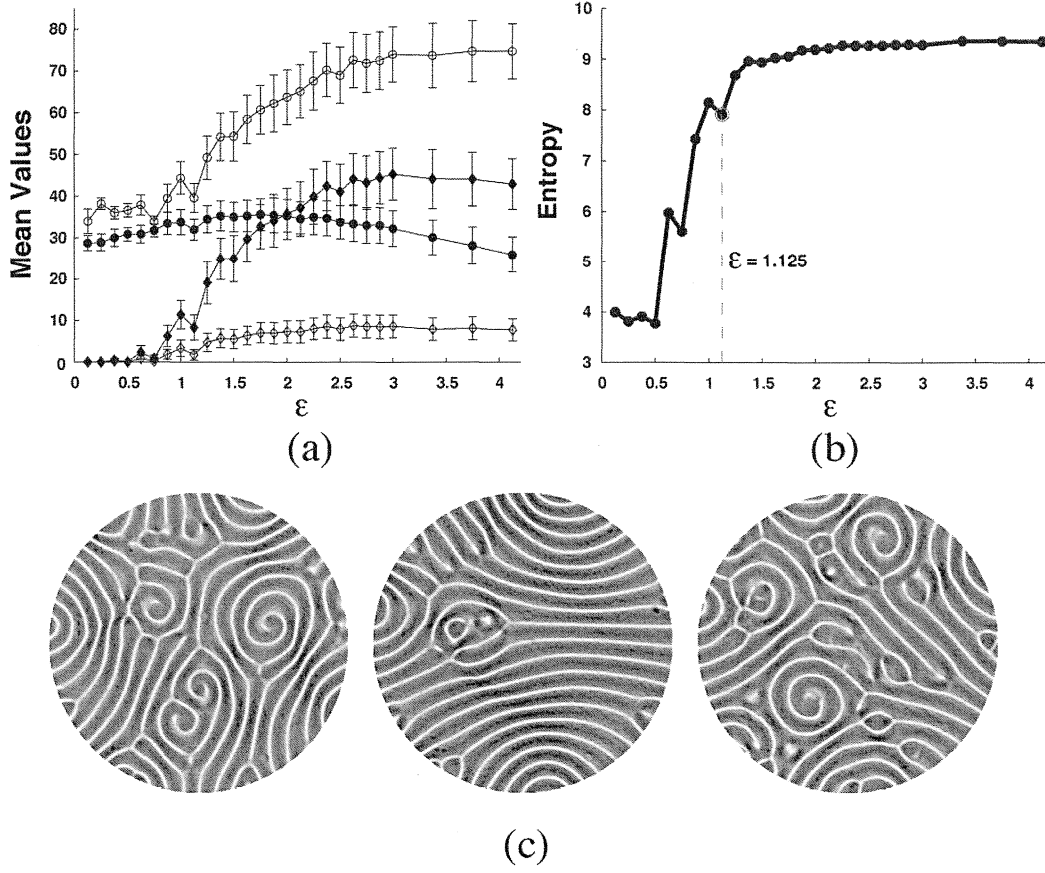


図 4: (a) Betti 数の時間平均値の温度差パラメータ ϵ 依存性. 黒丸: $\overline{\beta}_0(X^{\text{black}})$, 黒角: $\overline{\beta}_1(X^{\text{black}})$, 白丸: $\overline{\beta}_0(X^{\text{white}})$, 白角: $\overline{\beta}_1(X^{\text{white}})$. 温度差パラメータ ϵ が大きくなるにつれて, 過剰欠陥カオスパターンでは, 高温領域 X^{black} と低温領域 X^{white} の対称性の破れが生じる. (b) Betti 数の時間変化から計算したエントロピー S の温度差パラメータ ϵ 依存性. (c) それぞれ左から $\epsilon = 1.0, 1.25, 1.5$ での典型的な空間パターン.

のように定義される.

$$S = - \sum_i p_i \log(p_i).$$

ベナール対流の実験では, 薄い皿の流体という系に, 外部から熱エネルギーが加えられて, 表面と底に温度差が生じている. このように, 外部と遮断されていない系を散逸系と呼ぶ. この実験では, 外部から注入され続けるエネルギーを散逸させながらマクロな対流パターンが自己組織化している. シュレディンガーの言葉を借りれば, 「負のエントロピー」が系に供給され続けられるので, エントロピーの増大や無秩序の増大は起こらず, 対流ロールパターンのような秩序が壊れないで保たれている. 実験画像を基にした有限時間の時系列データから確率分布 p_i を計算したが, 観測時間を増やすとエントロピーは一定の値に漸近する傾向がある. 対流ロール構造ドメインの合体や生成がほとんど生じなければ, Betti 数の変化もなくエントロピーは減少し, 逆に活発

になればエントロピーは増加するだろう。よってエントロピー E は、図 4(b) のように、コントロールパラメータ ϵ と共に増加していく。しかしながら、単調に増加する訳ではなく、いくつかの凹みを伴っている。このような凹みのある温度差 ϵ 付近において、渦状欠陥カオスパターンのなかでも、より複雑なパターンへの質的な変化が段階的に生じていると考えられる。図 4(c) では 2 番目の凹みを示した $\epsilon = 1.25$ と、その前後のパラメータ値での、典型的な対流パターンを示している。温度差 ϵ が増加しているにも関わらず、 $\epsilon = 1.25$ での対流パターンは、ほかの 2 つに比べて、欠陥も少なく、対流ロールメインが平行に並んでいる領域が広い。これは Betti 数の変化も小さく、エントロピーが小さくなる状況に合っている。空間パターンの大域的分岐の観点からみれば、このエントロピー減少は、コントロールパラメータ ϵ の変化に伴って出現した新しい時空間パターンによってもたらされたとも考えられる。具体的には、平行ロールパターン全体が平行移動する進行波のような動きも部分的に見えることから、なにか動的な不安定パターン発見の手がかりになる可能性もある。今後の進展が期待される。

本節でとりあげた、ベナール対流での渦状欠陥カオスの Betti 数を用いた解析は、実験系で観察された複雑空間パターンのデータに、計算ホモロジーを直接応用した初めての例である。これらのトポロジー不変量である Betti 数は、渦状欠陥カオスパターンの分類に有効であり、その時系列データから、パターンダイナミクスの特徴を定量的に抽出することができた。特に、対流パターンにおける対称性の破れは、スペクトルなどの従来調べられてきた物理量では捉えることができなかったものである。

ソフトマターにおける空間 3 次元ネットワーク構造

水中の脂質や界面活性剤などの両親媒性分子は、疎水基と水分子が接触を避けるようにミクロ相分離界面を自発的に形成し、空間を 2 つの無限に連結した共連続な部分空間 ($X^\pm$) に分割する。この界面構造は数学的によく知られた空間 3 次元周期極小界面を自発的に形成し、ジャイロイド (Gyroid)、ダイヤモンド (Diamond)、プリミティブ (Primitive) の構造は共連続立方相とよばれる [8]。[‡] これら非相溶性により生じる 3 次元相分離構造のなかで、2 本のジャイロイドネットワークがお互いの懷をかいぐるように編み上げたダブルジャイロイド構造をとるときに、界面形成によるエネルギーの損失分を、周期的極小曲面のなかで最小にできることが理論的にわかってきた [14]。実験的にも、医療で用いられる CT (computerized tomography) スキャンの技術に応用した 3 次元電子顕微鏡法によって、ナノメートル (nm) オーダーの構造を 3 次元的に高分解能で観察することができるようになり、ブロック共重合体系の共連続相はダブルジャイロイドであることが決定的となった。従来の透過型電子顕微鏡では、試料を透過した電子の強弱から得られる画像は深さ方向の情報を失った 2 次元的なもので、ダブルジャイロイドのような複雑な構造の解明には不向きであった。陣内教授らが開発した 3 次元電子顕微鏡法では、試料を $\pm 60^\circ$ 程度の範囲の様々な方向から撮影し、得られた平面透過画像を積み重ねて 3 次元画像を構成できるようになった [9]。このように、実験技術の進歩によって得られてきたナノメートルレベルでの立体構造データを、どのように表示し、解析するのが問題となっている。

[‡]以下、G, D, P と略記する。

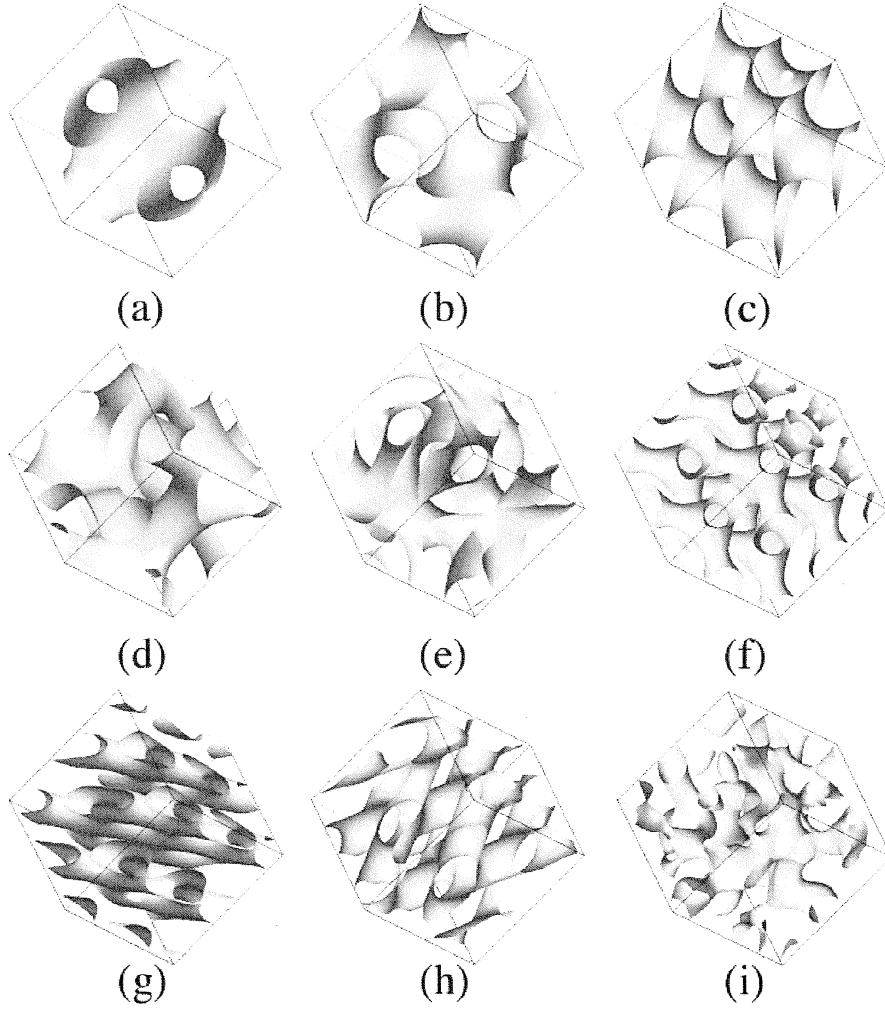


図 5: ソフトマターにおける共連続界面構造 (上段) シングルネットワーク構造, (a) プリミティブ, SP (b) ジャイロイド, SG (c) ダイヤモンド, SD. (中段) ダブルネットワーク構造, (d) ダブルプリミティブ, DP (e) ダブルジャイロイド, DG (f) ダブルダイヤモンド, DD. (下段) (g) 穴あきレイヤー構造. (h) 空間群 Fddd のメッシュネットワーク構造. Betti 数は $\beta_i(X^\pm) = (1, 13, 0, 0)$ である. (i) ダブルダイヤモンドと同じ Betti 数を示すランダムドメイン構造.

表 1: ソフトマターにおける共連続構造の Betti 数と空間群. シングルネットワーク構造ではドメイン X^+ とマトリックス X^- について対称だが, ダブルネットワーク構造にはあてはまらないことに注意せよ. 空間群の記号 I, P, F はそれぞれ体心, 単純, 面心の立方晶系のブラベー格子であることを示す.

	シングルネットワーク			ダブルネットワーク		
	$\beta_i(X^+)$	$\beta_i(X^-)$	空間群	$\beta_i(X^+)$	$\beta_i(X^-)$	空間群
P	(1, 3, 0, 0)	(1, 3, 0, 0)	I4 ₁ 32	(2, 6, 0, 0)	(1, 6, 1, 0)	Ia3d
G	(1, 5, 0, 0)	(1, 5, 0, 0)	Fd3m	(2, 10, 0, 0)	(1, 10, 1, 0)	Pn3m
D	(1, 9, 0, 0)	(1, 9, 0, 0)	Pm3m	(2, 18, 0, 0)	(1, 18, 1, 0)	Im3m

空間 2 次元パターンであれば, 根気さえあれば, 見た目からドメインの数や穴の数などを数え上げられるかもしれない. ところが空間 3 次元になると, 投影図をいくらスライドに並べても, 3 次元描画ソフトウェアでディスプレイに表示しても, 単純な視覚化法では複雑すぎて, おそらく容易に理解できない. このことは, 複雑な構造の「つながり」を解析するための視覚に頼らない方法が必要であることを示唆している. そのような最も古典的なものは典型的な代数的位相不変量でもある オイラー数 χ であろう. オイラー数は複雑なデータに対する単純だが有用な測定量であり, 位相空間 X の構造を連続変形しても変わらない. その変化は系のトポロジーが根本的に変わることを意味する. オイラー-ポアンカレの定理より, オイラー数は Betti 数の交代和

$$\chi(X) = \sum_{i=0}^3 (-1)^i \beta_i(X),$$

であることから, ホモロジーへの導入である Betti 数の方が, より情報量の多い位相不変量であることを示している. 実際, Betti 数を用いれば, 図 5 にあげるような様々の共連続界面構造について, 表 1 のように区別して表すことができる. ただし, 基本格子構造について Betti 数を計算した. ドメインや穴の数に対応する Betti 数は, 考慮する周期の数によって変化することに注意しよう. 閉曲面の三角形分割についてのガウス-ボンネの定理より, オイラー数は考慮する領域の大きさに依存するので, 上述のオイラー-ポアンカレの公式より任意の周期数についての Betti 数を得ることは可能である. また Betti 数によって, すべての空間 3 次元構造を分類して表すことはできないことにも注意しよう. 例えば, 図 5 (i) のように, ダブルダイヤモンドと同じ $\beta_i(X^+) = (2, 18, 0, 0), \beta_i(X^-) = (1, 18, 1, 0)$ を示す規則性のないランダムドメイン構造も無数に存在する.

以上の点に注意を払えば, Betti 数による空間 3 次元構造の分類はとても有効である. 例として, ミクロ相分離モデルの Cahn-Hilliard 方程式の数値シミュレーションで再現したモルフォロジー転移におけるトポロジー変化をあけておく.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta \{-\epsilon^2 \Delta u - u + u^3\} - \sigma(u - \bar{u}),$$

ここで $u(\mathbf{r})$ は, 非相溶な 2 成分の相対的な濃度差を表し, 記号 ϵ, σ はそれぞれ現象論パラメータである [13]. 片方の成分が他方について優勢である領域を平均濃度

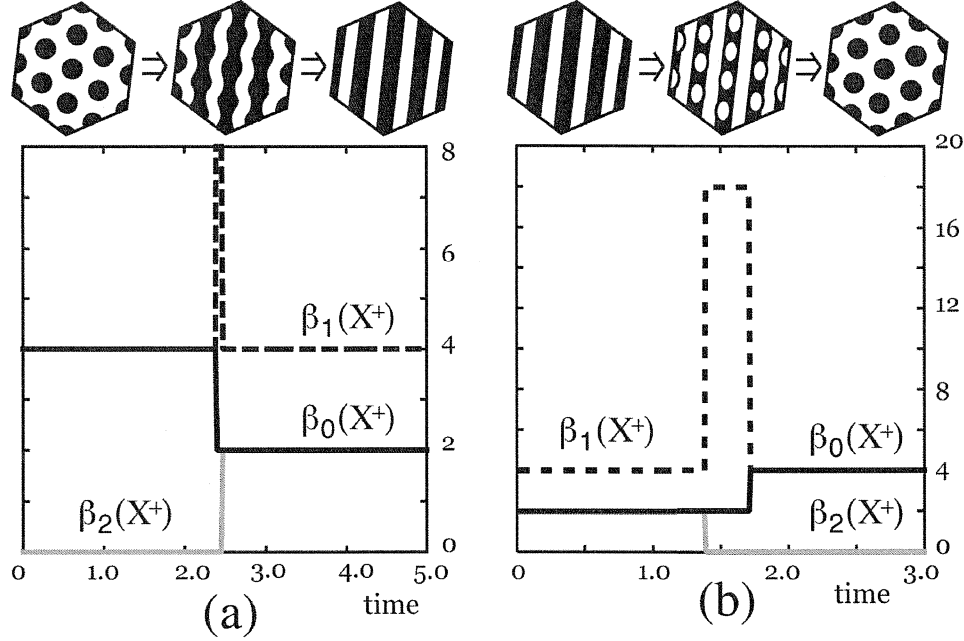


図 6: ミクロ相分離モデルの数値シミュレーションによるモルフォロジー間転移での Betti 数の変化. (a) ヘキサゴン → レイヤー転移. 同じ方向につぶれた柱状ドメインの側面同士がくっついてレイヤー構造にいたる. (b) レイヤー → ヘキサゴン転移. 層状ドメインに穴が等間隔にあいた穴あきレイヤー構造を経て, ヘキサゴン構造にいたる. 穴あきレイヤー構造の Betti 数は $\beta_i(X^+) = (2, 18, 0, 0)$ と $\beta_i(X^-) = (1, 19, 2, 0)$ であるので, 層状ドメイン 1 枚あたりに 8 個の穴があいている.

$\bar{u} = |\Omega|^{-1} \int_{\Omega} u(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ で分離する等濃度面を $\Gamma = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) = \bar{u}\}$ とする. このとき, この界面で分けられた領域をそれぞれ $X^+ = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) \geq \bar{u}\}$, $X^- = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) < \bar{u}\}$ とする. 図 6 は, それぞれ 4 本の柱状ドメインが蜂の巣状に並んだヘキサゴン構造と, 層状ドメインが 2 枚並んだレイヤー構造を初期条件として, 系のパラメータを変化させたときに得られる構造相転移について, その Betti 数の変化を示したものである. 転移の向きによって, ダイナミクスの道筋が異なることが明らかであろう. レイヤー → ヘキサゴン転移におけるダイナミクスの鞍点として, 穴あきレイヤー構造にどれだけ留まって見えるのかは, 非負の整数である Betti 数による評価ではっきりする.

この章の主題である実験室で得られた複雑空間パターンへの計算ホモロジーの応用として, 逆空間から実空間への有効なアプローチとして注目されているリバースモンテカルロ法シミュレーションによる放射光散乱実験データからの空間 3 次元構造の再構成法について紹介したい [7]. 大型放射光施設では, 放射光を物質に照射し, その散乱される光を測定することで, 物質の構造や性質を詳しく調べている. 散乱角が比較的小さい領域を測定する手法を X 線小角散乱と呼び, 密度ゆらぎ (構造の不均一性) やその特徴的な長さスケールから, 高分子混合系の複合材料の評価に利用されている. 光軸について物質試料を回転させながら, 図 7(a) のような散乱関数の 2 次元パターンを得る. リバースモンテカルロ法は, 実験で得られた散乱関数との差を評価関数としたメトロポリス法によって, 最も差を小さくする空間 3 次元構造を計算機上に推定す

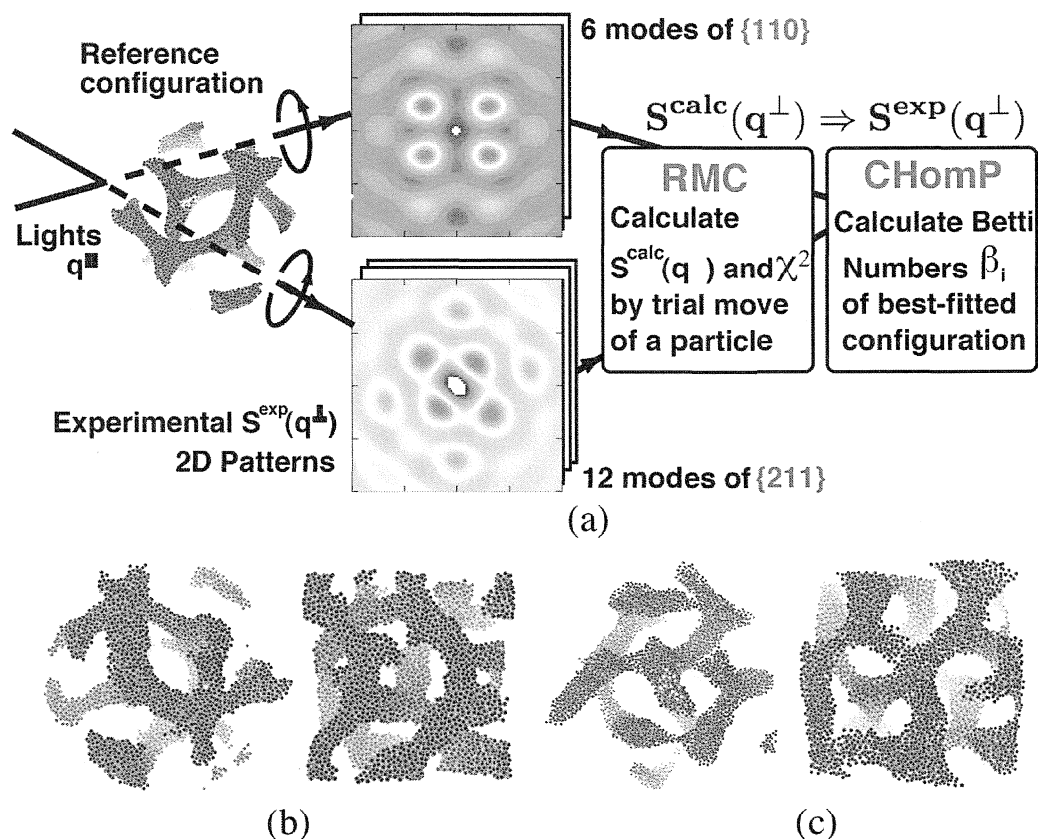


図 7: (a) 入射放射光 $q^{\parallel}$ 軸まわりに試料 (参照構造) を回転することで、その垂直平面方向の 2 次元散乱パターン $S^{\text{exp}}(q^{\perp}_{(hkl)})$ が得られる。複数の入射方向についての散乱パターンとの差の合計 χ^2 を最小にする構造をメトロポリス法アルゴリズムによって探索する。計算ホモロジーによって再構成された 3 次元構造が、エネルギー χ^2 の極小状態にとどまらずに参照した構造に等しいかを CHomP で検証する。(b) 18 方向の散乱パターンを用いた場合 (c) 7 方向だけの散乱パターンを用いた場合。

る分子シミュレーション法であり、等方性が仮定できる液体金属などの不規則系については、1 次元散乱関数からの構造推定が行われてきた。異方性がある場合については、まず延伸等の一軸異方性のある系について、2 次元散乱パターンからのリバースモンテカルロ法シミュレーションが萩田博士らによって開発された。この節では、さらに複数の入射光軸方向の 2 次元散乱パターンを用いて、ダブルジャイロイド構造などの複雑な異方性がある場合の構造推定の例を示す。まず理論的に求めたダブルジャイロイドの単位構造状の粒子群から、複数の入射光軸方向についての 2 次元散乱パターンを計算する。この複数の散乱パターンとの差を最小化する粒子配置をリバースモンテカルロ法シミュレーションにて探索し、再構成された粒子配置がとる構造を計算ホモロジーによって評価する。複数方向の散乱関数を近づけることで対称性を一致させ、Betti 数を評価することで構造の「つながり」を検証する二重の網でダブルジャイロイドを召し捕ることになる。

ダブルジャイロイドの空間群が $Ia\bar{3}d$ であることより、そのブラベー格子は体心

立方晶系である。体心立方格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a} = (L/2, L/2, -L/2)$, $\mathbf{b} = (-L/2, L/2, L/2)$, $\mathbf{c} = (L/2, -L/2, L/2)$ について、その逆格子ベクトルは $\mathbf{a}^* = (2\pi/L, 2\pi/L, 0)$, $\mathbf{b}^* = (0, 2\pi/L, 2\pi/L)$, $\mathbf{c}^* = (2\pi/L, 0, 2\pi/L)$ である。これらを基底として、散乱ベクトル $\mathbf{q}_{(hkl)} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ を表すとき、面指数 (hkl) が整数ならば、ブラッグ反射が生じる。つまり、入射光軸について結晶をその垂直面内で回転させると、特定の角度にだけ散乱される。それぞれの粒子からの散乱因子をすべて等しく f とすれば、体心立方格子の単位構造の構造因子は、同じ粒子が $\mathbf{r}_0 = (0, 0, 0)$ と $\mathbf{r}_1 = (L/4, L/4, L/4)$ にあるので、

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}_{(hkl)}) &= f(\exp(-i\mathbf{q}_{(hkl)} \cdot \mathbf{r}_0) + \exp(-i\mathbf{q}_{(hkl)} \cdot \mathbf{r}_1)), \\ &= f(1 + \exp(-i\pi(h + k + l))), \end{aligned}$$

となる。よって、面指数の和 $(h + k + l)$ が偶数のときにのみ、反射が現れるので、この反射条件を満たす $[hkl] = [211]$ の 12 方向と $[110]$ の 6 方向の合計 18 方向の 2 次元散乱パターンを用いてリバースモンテカルロ法シミュレーションを行なう。[§]

シミュレーションでは 8, 192 個の粒子配置について、18 方向の入射放射光 $\mathbf{q}^{\parallel}$ について、それぞれ回転させて得られる垂直平面方向のもとの 2 次元散乱パターン $S_{(hkl)}^{\text{exp}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})$ との差 χ^2 が収束するまで、次の手順を繰り返す。

ランダムに選んだ粒子を動かす向きと大きさをランダムに決める。

18 方向について、2 次元散乱パターン $S_{(hkl)}^{\text{calc}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})$ を計算する。

動径分布関数 $g_{(hkl)}(\mathbf{r}_{(hkl)}^{\perp})$ を計算する。

そのフーリエ変換より、 $S_{(hkl)}^{\text{calc}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})$ を計算する。

$S_{(hkl)}^{\text{exp}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})$ とのずれ χ^2 を計算する。

$$\chi^2 = \sum_{(hkl)} \sum_{\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp} \neq 0} \Delta(S_{(hkl)}^2(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})) / \sigma_{\text{std}}^2,$$

$\Delta(S_{(hkl)}^2(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})) = [S_{(hkl)}^{\text{exp}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})]^2 - [S_{(hkl)}^{\text{calc}}(\mathbf{q}_{(hkl)}^{\perp})]^2$ である。ここで σ_{std} は標準偏差パラメータであり、許容誤差の大きさである。

動かした前と後での差 $\Delta\chi^2$ を計算し、 $\Delta\chi^2 \leq 0$ なら試行配置を採用する。そうでなければ、確率 $\exp(-\Delta\chi^2)$ で新しい配置を採用する。

散乱パターンの差を表す χ^2 をエネルギー、許容誤差 σ_{std}^2 を温度と見立てたメトロポリス法であるため、温度パラメータの大きさや光軸方向の選び方によっては、極小状態の構造に落ちこむこともある。これらの極小構造は最小構造に似ていることが多く、見ただ目で区別することができない。そこで計算ホモロジーにより、再構成された粒子配置の Betti 数を評価することで適切なシミュレーション条件を探索し、リバースモンテカルロ法によって、18 方向の 2 次元散乱パターンから、ダブルジャイロイド構造が再構成されることを検証することができた。ダブルダイヤモンド構造など、他の 3 次

[§]立方晶系では、方向 $[hkl]$ は同じ指数をもつ面 (hkl) に垂直である。

元構造についても、散乱条件にあった入射光 $\mathbf{q}^{\parallel}$ を選ぶことで再構成することができている。現在は、実験家グループと連携し、実際の 2 次元散乱パターンからの 3 次元構造の再構成を進めている。これは実空間構造の直接観察実験だけでなく、より広く普及した散乱実験で得られてきた逆空間データについて、それらの精密な構造解析に対する潜在的な需要を掘り起こすブレイクスルーとして期待される。

この章では、実験系で得られる複雑なパターンの解析に、計算ホモロジーを適用する研究例を紹介してきた。CHomP ソフトウェアの開発により、二値画像さえ準備すれば、簡単にホモロジー量を知ることができるようになった。つまり、実験データからどのような方体集合を計算ホモロジーに渡すか、というところが残された課題である。

閾値点集合のホモロジー量の数値計算

渦状欠陥カオスパターンの例では、高温領域と低温領域の面積が等しくなるように、明暗度の空間平均値を二値画像の閾値としていた。共連続構造の例では、相分離する 2 種の物質の相対的な濃度分布の空間平均値を閾値とした。それぞれ、閾値より大きい領域であるドメインだけでなく、小さい領域のマトリックスの Betti 数も合わせて系の状態を表すことにより、より詳しいパターンの分類を行なった。2 次元平面上でマトリックス X^- の海のなかにドメイン X^+ がいくつも浮かんでいるようなパターンであれば、マトリックスの穴の数 $\beta_1(X^-)$ がドメインのクラスターの数 $\beta_0(X^+)$ と対応があることは容易に想像がつく。しかしながら、このような単純な場合でも、調べようとする微細なパターンに対して方体近似の空間解像度が粗い場合には、計算された Betti 数の解釈に注意が必要である。計算ホモロジーのアルゴリズムでは方体集合の第 2 近接格子点を同一クラスターと数えるため、図 9(a)(b) に示すような市松模様では、ドメインとマトリックスのどちらも 1 つにつながったクラスターと判定されてしまう。

例として、相分離モデルでみられるランダムな 2 次元ドメインパターンについて調べてみよう。2 成分の相対的な濃度差の分布 $u(\mathbf{r})(=u(x,y))$ を、正方領域 $\Omega \in [0, L]^2$ について、モード数 N のランダムフーリエ展開モデルを用いて構成する。

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N (g_{k,l}^{(1)} \cos(2\pi kx) \cos(2\pi ly) + g_{k,l}^{(2)} \cos(2\pi kx) \sin(2\pi ly) + g_{k,l}^{(3)} \sin(2\pi kx) \cos(2\pi ly) + g_{k,l}^{(4)} \sin(2\pi kx) \sin(2\pi ly)),$$

ここで $g_{k,l}^{(1)}, g_{k,l}^{(2)}, g_{k,l}^{(3)}, g_{k,l}^{(4)}$ は平均 0、分散 1 の正規乱数とし、なめらかに 2 階微分可能な濃度プロファイル $u(\mathbf{r})$ が得られる。平均濃度 $\bar{u} = 0$ での等濃度界面 $\Gamma = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) = \bar{u}\}$ によって、片方の成分が他方について優勢である領域を分ける。この界面で分けられた領域 $X^+ = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) \geq \bar{u}\}$, $X^- = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) < \bar{u}\}$ は、次のように方体近似して表される。

$$Q_M^{\pm} = \bigcup \{[l-1, l] \times [n-1, n] | \pm u(l, n) \geq \pm \bar{u}, (l, n) \in \{1, \dots, M\}\},$$

これは、正方格子の各格子点の位置座標 (l, n) での基本方体を $Q_{l,n} = [l-1, l] \times [n-1, n]$ と幾何学的においたときのドメイン (マトリックス) 領域を近似した方体集合である。

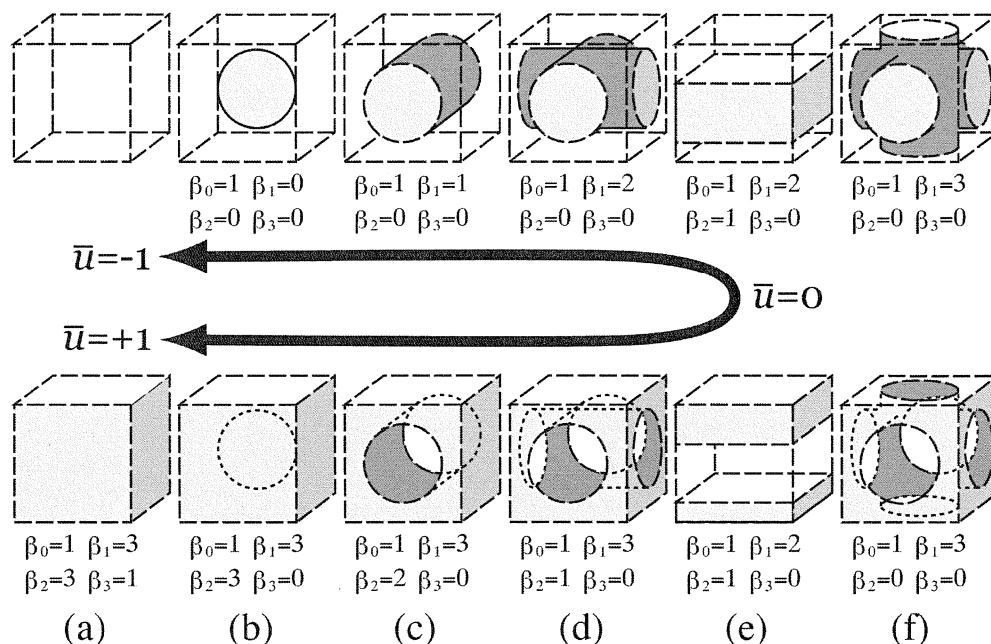


図 8: ミクロ相分離モデルにおいて、平均濃度 $\bar{u}$ を変化させたときに得られる典型的なドメインパターンのラインナップ。上段をドメイン X^+ とみれば、下段はそのマトリックス X^- である。対称組成 $\bar{u} = 0$ 近くでは、(d) 穴あきレイヤーを介して、(e) レイヤーと (f) ネットワーク構造が並ぶことに注意せよ。

次ページに、2次元ランダムドメインパターンの Betti 数を計算するサンプルプログラム (ファイル名: sample.cpp) を示す。[¶] プログラムコンパイルには複数のオプションを必要とするので、入力ミスを減らすために Make コマンドを利用する。

```
teramoto% make
teramoto% echo 16 | ./example
```

入力した解像度 M の値によって、Betti 数が表示される。

以下に CHomP ライブラリをプログラムの中から利用する方法について、簡単に補足しておく。

1 行目: `#include "capd/homengin/homology.h"`

CubicalSet クラスを利用するために、chomp/include フォルダ内のヘッダファイルを読み込む必要がある。サンプルプログラムでは、 x 軸方向に $N1$ マス、 y 軸方向に $N2$ マスの 2 次元平面領域として、CubicalSet クラスのオブジェクト Q を準備している。

18 行目: `CubicalSet Q(left_coord, right_coords, dim, wrapping);`

このとき、周期境界条件を課すには、以下のように `wrapping` 変数にて指定する。

16 行目: `int wrapping [] = { 0,0 };` デフォルト

16 行目: `int wrapping [] = { M,0 };` x 軸方向のみ、周期境界条件

[¶]それぞれのコンピュータ環境にあわせて、Make ファイル、環境変数の設定内容を変更してください。Make ファイルの例 (ファイル名: Makefile) も示します。コロンマークがある `make` ターゲットの下で行で、(タブ) と指定されている箇所は、必ず TAB キーを入力して字下げください。

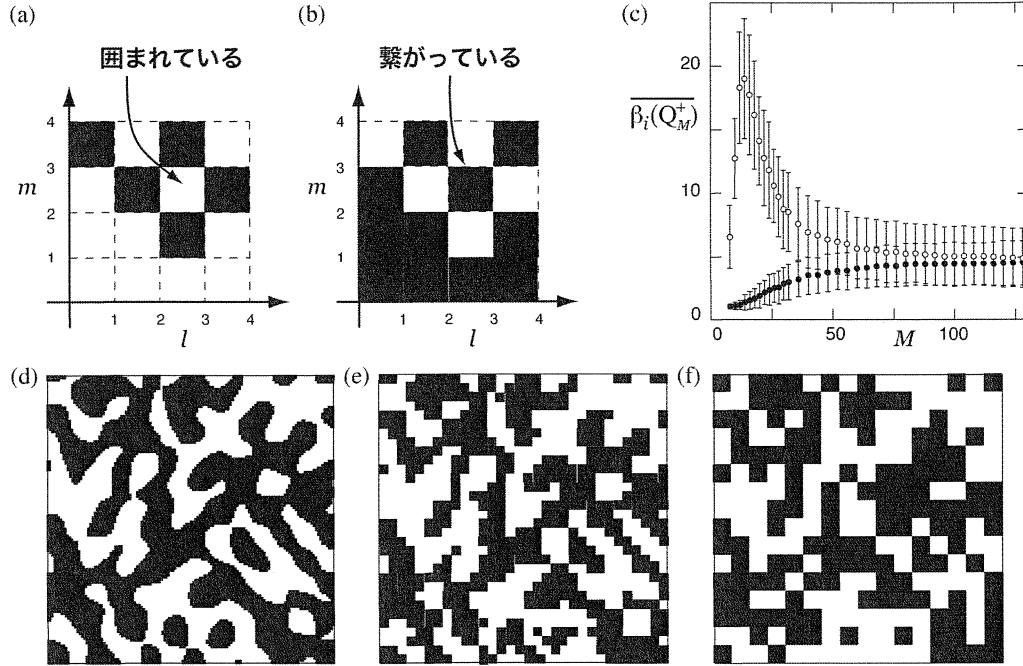


図 9: 計算ホモロジーは斜め方向の第2近接格子点も同じクラスターとして数えるために, (a) ドメイン $\beta_i(Q^+) = (1, 1)$ と (b) マトリックス $\beta_i(Q^-) = (1, 2)$ の Betti 数の関係に注意せよ. (c) 空間解像度 M を大きくすると, Betti 数は, それぞれある極限值に単調に近づく. モード数 $N = 8$ について, それぞれ 100 サンプルのドメインパターンについての平均値をプロットしている. $\overline{\beta_0(Q_M^+)}$: 黒丸, $\overline{\beta_1(Q_M^+)}$: 白丸. ランダムフーリエ展開モデルによるドメインパターンの例. (d) $M = 128$ のとき, $\beta_i(Q_{128}^+) = (5, 6)$ である. 空間解像度を (e) $M = 32$, (f) $M = 16$ と粗くすると, Betti 数が $\beta_i(Q_{32}^+) = (2, 11)$, $\beta_i(Q_{16}^+) = (3, 17)$ のように異なる.

16 行目: `int wrapping [] = { 0, M };`; y 軸方向のみ, 周期境界条件

16 行目: `int wrapping [] = { M, M };`; 両方向について, 周期境界条件

46 行目: `Q.Add(cube);`

問題の設定条件を満たす基本方体 `cube` を 1 つずつ加えながら, 方体集合オブジェクト `Q` を構成する.

53 行目: `Q.ComputeBettiNumbers(Betti, engine, quiet);`

方体集合オブジェクト `Q` の Betti 数を計算する. Betti 数のデータは整数型配列 `Betti[dim+1]` に格納される.

52 行目: `bool quiet = true;`

Betti 数の結果のみを表示させたいときには, `bool` 変数 `quiet` を `true` にすればよい.

```

#include "capd/homengin/homology.h"
#include <iostream>
#include <math.h>
#define N 8
double gauss(void) {
    double x = 0.0;
    for (int i=0; i<12; i++) x += drand48() - 0.5;
    return x;
}
int main (void) {
    int M;
    std::cin >> threshold;
    // create an empty 2-dim cubical set of the size MxM pixels
    int left_coords [] = {0, 0};
    int right_coords [] = {M, M};
    int wrapping [] = {M, M};
    const int dim = 2;
    CubicalSet Q (left_coords, right_coords, dim, wrapping);
    // initialize random number generator
    srand48(time(NULL));
    // create a random Fourier series field u
    double u[M][M];
    double threshold = 0.0;
    double g1, g2, g3, g4;
    for (int i=0; i<M; i++) for (int j=0; j<M; j++) u[i][j]=0.0;
    for (int k=1; k<N; k++) {
        for (int l=1; l<N; l++) {
            g1 = gauss(); g2 = gauss(); g3 = gauss(); g4 = gauss();
            for (int i=0; i<M; i++) {
                for (int j=0; j<M; j++) {
                    u[i][j] += g1*cos(2.0*k*M_PI*i/M)*cos(2.0*l*M_PI*j/M)
                        + g2*cos(2.0*k*M_PI*i/M)*sin(2.0*l*M_PI*j/M)
                        + g3*sin(2.0*k*M_PI*i/M)*cos(2.0*l*M_PI*j/M)
                        + g4*sin(2.0*k*M_PI*i/M)*sin(2.0*l*M_PI*j/M);
                }
            }
        }
    }
    // make the cubical set u >= threshold
    for (int i=0; i<M; i++) {
        for (int j=0; j<M; j++) {
            if (u[i][j] >= threshold) {
                // create an array of coordinates of the cube
                int cube[2];
                cube[0] = i; cube[1] = j;
                Q.Add (cube); // add the cube
            }
        }
    }
    // compute the Betti numbers of the cubical set
    int Betti[dim+1];
    bool quiet = true;
    Q.ComputeBettiNumbers (Betti, 0, quiet);
    // show the Betti numbers
    std::cout << "Betti numbers:";
    for (int i=0; i<=dim; ++i) std::cout << " " << Betti[i];
    std::cout << ".\n";
    return (0);
}

```

```

PROGRAM = random_chomp
CC = g++
INCDIR = -I/Users/teramoto/chomp/include
LIBDIR = -L/Users/teramoto/chomp/lib
CFLAGS = -O2 -Wall -Winline $(INCDIR) $(LIBDIR)
LDLIBS = -lchomp -lm
.cpp.o:
    $(CC) $(CFLAGS) -c $<

OBJS = $(PROGRAM).o
all: $(PROGRAM)
$(PROGRAM): $(OBJS) $(PROGRAM).cpp
    $(CC) -o $@ $(CFLAGS) $(OBJS) $(LDLIBS)
    chmod 700 $(PROGRAM)
clean:
    rm -f $(PROGRAM) $(OBJS) *~

```

図 9(d)-(f) では、モード数を $N = 8$ に固定した同一のランダムドメインパターンについて、空間解像度 M を変えて得た二値画像である。空間解像度 M が十分に大きいところでは、方体集合 $Q_M^\pm$ で近似したもとのドメイン $X^\pm$ に対する閾値集合 Γ に、近い滑らかな境界線が得られる。このとき、方体近似で得られた Betti 数 $\beta_i(Q_M^\pm)$ がもとの $\beta_i(X^\pm)$ に等しいことが期待される。実際、図 9(c) のように、空間解像度 M の大きいところで、それぞれ収束値を持つ。よって、それぞれのホモロジー群 $H_*(\cdot)$ が等しくなるような空間解像度 M の下限の整数値 $\bar{M}$ が存在すると考えてよいだろう。^{||}

$$\exists \bar{M} \in \mathbb{Z} \quad \text{s.t.} \quad \Pr(\text{For all } M \geq \bar{M}, H_*(X^\pm) \simeq H_*(Q_M^\pm)) = 1.$$

方体近似の任意の空間解像度 M でのランダムドメインパターンのホモロジー量が正確に得られる確率 $\Pr(H_*(X^\pm) \simeq H_*(Q_M^\pm))$ について、Wanner 教授らが得た結果を紹介しよう [5, 12]。全空間において、 $u(\mathbf{r}) = \bar{u} = 0$ となる点 $\mathbf{r} \in \Omega$ が 1 つもなく、2 階微分可能な濃度プロファイルを持つランダムドメインパターンについて、その濃度分布を $M \times M$ -正方形格子の各格子点での値 $u(l, n)$ で表す。このとき、ホモロジー量を正確に計算することは、零点 (閾値) 集合 $\Gamma = \{\mathbf{r} \in \Omega | u(\mathbf{r}) = \bar{u}\}$ の位置を正確に得ることと同じである。つまり、空間解像度 M の正方形領域 $Q_M(l, n) = [l-1, l] \times [n-1, n]$ と零点集合曲線 Γ の配置条件について考えよう。まず正方形領域の各頂点での $u(l, n)$ 値の符号が 1 つでも異なるときには、正方形内部に零点集合が存在することは明らかであろう。隣り合う 3 つの格子点、例えば $(l-1, n), (l, n), (l+1, n)$ での符号が交互に並ぶとき、或いは正方形の対角格子点ペアの符号が異なるときには、図 10 のようにこれらが解消するまで、空間解像度 M を倍にしていく。このとき基本方体 Q_{2M} について、新たに生じた格子点上の u 値の符号については、以下のように決める。

- 方体 Q_M の 4 つ角の値の符号がすべて等しければ、方体 Q_{2M} で新たに生じた内部の点の符号も等しい。
- 方体 Q_M でどれか 1 つでも異なる符号であるならば、方体内部の閾値集合は端点の符号が異なる 2 つの辺を結ぶ非交差の曲線である。この結ばれた 2 辺の関係を保つように、方体 Q_{2M} で新たに生じた内部の点の符号を決める。

^{||} 方体集合 Q のホモロジー群とは、 k 次元ホモロジー群 $H_k(Q)$ の列

$$H_*(Q) = \{H_i(Q)\}_{i=0, \dots, \dim Q},$$

のことをいう。このとき、それぞれの次元 $\dim H_i(Q)$ が i 次元 Betti 数 $\beta_i(Q)$ である。

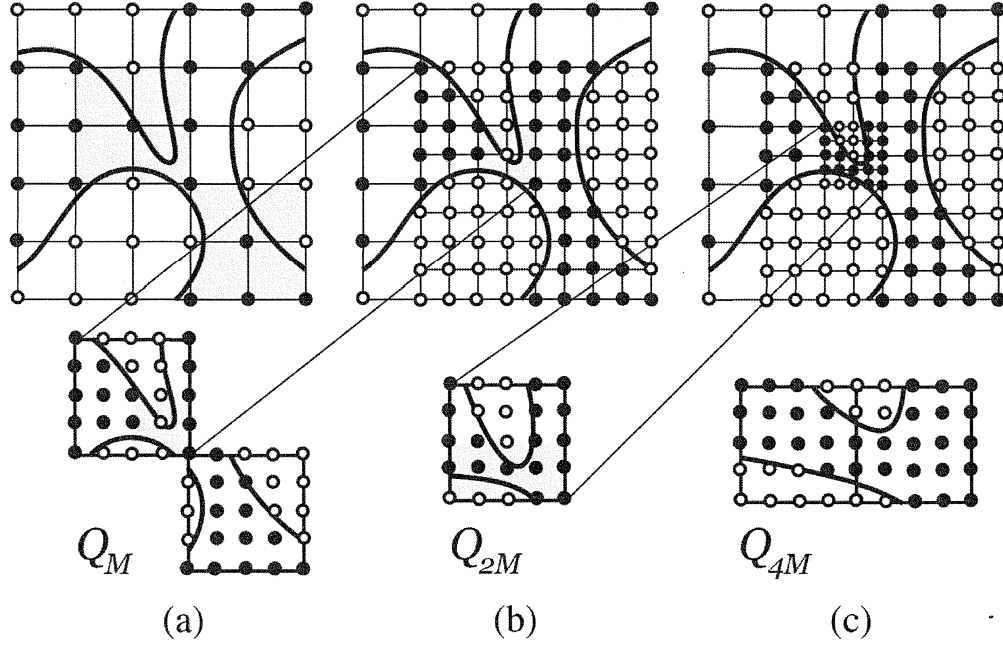


図 10: (a) 灰色の空間解像度 M での方体 Q_M には、隣り合う 3 つの格子点と対角格子点での符号条件を満たさないため、解像度を倍にしたものが (b) Q_{2M} である。さらに繰り返したものが (c) Q_{4M} である。より細かな解像度によって正確なトポロジーが決定される。黒丸と白丸はそれぞれ u 値の正負を表す。

この生成ルールに従って、解像度 M を大きくしていけば、近似して得た方体集合が零点集合で分けられたもとのドメインパターンにどんどん近づけるだろう。よって、任意の空間解像度 M について正確に得られる確率が得られる。

$$\Pr(H_*(X^\pm) \simeq H_*(Q_M^\pm)) \geq 1 - \frac{24C_1L^3 + 20C_2L^4}{3M^2}.$$

空間解像度 M が大きくなるにつれて、 $H_*(X^\pm) \simeq H_*(Q_M^\pm)$ を得る確率は 1 に近づく。定数 C_1, C_2 は、ランダムドメインパターン $u(\mathbf{r})$ が与えられるならば、格子点の生成ルールにしたがって、全てのとり得る配置について、具体的に計算される.**

空間解像度 M をいくらあげても方体近似をしている限り、正確なホモロジー量が得られない場合もあることに注意しよう。例えば、ヘキサゴナル → レイヤー転移の図 6(a) では、転移が起こる際に Betti 数の発散的な振る舞いが見える。立方領域の対角線上に並んだ柱状ドメインが同じ方向につぶれ、その側面同士が一斉にくっつく際に、側面を構成する格子点の濃度がほぼ閾値にそろうために生じたアーティファクトである。この状況では、基本方体 $[l-1, l] \times [m-1, m] \times [n-1, n]$ の対角格子点ペアの異符号を解像度を細かくすることでは解消できない。モデル方程式の数値計算で得られる非線形ダイナミクスの非常に繊細な状態変化を慎重に調べていくと、モデル方程式と問題を解く際の環境条件が持つ対称性が現れることがある。

パターンの幾何学的特徴付けは、構造についてだけでなく、それらが示すダイナミクスについて理解するのに重要である。直線や円形などの図形が規則的に並んでいる

**2 つめの生成ルールでは、新しい格子点の符号の配置は、符号と正方形の対称性に注意して 66 通りある。原論文では、より精密な生成ルールを考慮した議論が展開される。

ならば、見た目の数え上げによるパターンの特徴付けも簡単であるが、本解説で取り上げる、カオスパターンやネットワークモルフォロジーのように複雑になると、同じような数え上げによる特徴付けは破綻するであろう。常にノイズにさらされる実験系でのこれら複雑なパターンの特徴付けには、統計的なアプローチが有効ではあるが、幾何学的な特徴を抽出する一般的な方法論が欠けていた。そこで登場した「構造」について粗いけれども安定した情報を抽出するには、計算ホモロジー理論に基づいた CHomP ソフトウェアはとても効率のよい数理的ツールである。複雑で膨大なデータから、「構造」の幾何学的骨組みの情報を失わずに情報量を大幅に減らす精密な体系的手段であり、逡巡化された幾何学的特徴付けは、日常の感覚を超えた「見方」を提示し、問題解決への新しいアプローチのきっかけを与えるに違いない。

第1節、第4節で紹介した内容の多くは、Rutgers 大学の Mischaikow 教授, George Mason 大学の Wanner 教授によるものです。また、サンプルプログラムの作成にあたり、京都大学の Pilarczyk 博士から多くの助言を得ました。第2節の内容は Georgia 工科大学 Schatz 教授のグループとの共同研究によるものです。また、第3節の内容は、北海道大学 西浦教授と防衛大学校 萩田博士との共同研究によるものです。ここに、感謝の意を記します。

参考文献

- [1] Bodenschatz, E., Pesch, W., and Ahlers, G., Recent developments in Rayleigh-Bénard convection, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **32**(2000), 709 - 778.
- [2] Computational Homology Project, <http://chomp.rutgers.edu>.
- [3] Fuller Jr., E. R., Saylor, D. M., Wanner, T., Homological Characterization of Microstructure Response Fields in Polycrystals, preprint.
- [4] Gameiro, M., Topological Characterization of Patterns, Ph.D. Thesis (2005).
- [5] Gameiro, M., Mischaikow, K., and Wanner, T., Evolution of pattern complexity in the Cahn-Hilliard theory of phase separation, *Acta Materialia*, **53**(2005) 693-704.
- [6] Hahn, T., International Tables for Crystallography, Volume A, Space Group Symmetry, Kluwer Academic Press, Dordrecht (2002).
- [7] Hagita, K., Teramoto, T., Topological Validation of Morphology Modeling by Extended Reverse Monte Carlo Analysis, preprint.
- [8] Hoffman, D., Hoffman, J., Weber, M., The Scientific Graphics Project, <http://www.msri.org/about/sgp/SGP>.
- [9] Jinnai, H., Nishikawa, Y., Ikehara, T., Nishi, T., Emerging Technologies for the 3D Analysis of Polymer Structures, *Advances in Polymer Science*, **170**(2004), 115-167.
- [10] Kaczynski, T., Mischaikow, K., and Mrozek, M., Computational Homology, Springer-Verlag, NewYork (2004).

- [11] Krishan, K., Kurtuldu, H., Schatz, M. F., Gameiro, M., Mischaikow, K., and Madruga, S., Homology and symmetry breaking in Rayleigh-Bénard convection: Experiments and simulations, [nlin.PS/0701043](#).
- [12] Mischaikow, K., and Wanner, T., Probabilistic validation of homology computations for nodal domains, *The Annals of Applied Probability*, **17**(2007), 980-1018.
- [13] Nishiura, Y., and Ohnishi, I., Some mathematical aspects of the micro-phase separation in diblock copolymers, *Physica D*, **84**(1995), 31-39.
- [14] Teramoto, T., and Nishiura, Y., Double Gyroid Morphology in a Gradient System with Nonlocal Effects, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **71**(2002), 1611-1614.