

# 单纯形神经网络综述

唐春阳<sup>1,2,3,4)</sup>

冶忠林<sup>1,2,3,4)</sup>

白立冰<sup>1,2,3,4)</sup>

赵海兴<sup>2,3,4,5)</sup>

<sup>1)</sup>(青海师范大学计算机学院 西宁 810008)

<sup>2)</sup>(省部共建藏语智能信息处理及应用国家重点实验室 西宁 810008)

<sup>3)</sup>(藏文信息处理教育部重点实验室 西宁 810008)

<sup>4)</sup>(青海省藏文信息处理与机器翻译重点实验室 西宁 810008)

<sup>5)</sup>(青海民族大学智能科学与工程学院 西宁 810007)

**摘要** 图神经网络依托强大的计算能力在文本分类、节点分类和自然语言处理等领域取得了显著成果,其主要用于处理包含成对关系的图结构数据。然而,现实世界中的网络之间往往存在高阶交互关系,若使用图结构表示这种复杂关系,可能会丢失节点间的重要信息。最近,单纯形被证明不仅可以编码节点间的成对关系,还可以编码多节点间的高阶交互关系。因此,学者们开始探索如何在单纯形上设计神经网络,并随之提出了众多单纯形神经网络模型。与已有的神经网络综述不同,文中重点分析了单纯形神经网络在处理多元高阶交互关系中的前沿研究及应用。首先总结了近几年单纯形神经网络的发展脉络并介绍了单纯复形、边界矩阵和霍奇拉普拉斯矩阵等基础知识;其次依据构建单纯形神经网络时采用的不同方法对其进行归纳分类,并解释了每类的代表性模型;然后介绍了单纯形神经网络的实际应用及性能分析;最后总结并探讨了单纯形神经网络未来的研究方向。本文针对单纯形神经网络进行综述,旨在帮助读者了解单纯形神经网络的理论基础与模型构建方法,力争为模型优化与实际应用提供参考。

**关键词** 单纯形;单纯复形;单纯形神经网络;单纯形邻域;图神经网络

**中图法分类号** TP18      **DOI号** 10.11897/SP.J.1016.2025.01617

## A Review of Simplicial Neural Networks

TANG Chun-Yang<sup>1,2,3,4)</sup> YE Zhong-Lin<sup>1,2,3,4)</sup> BAI Li-Bing<sup>1,2,3,4)</sup> ZHAO Hai-Xing<sup>2,3,4,5)</sup>

<sup>1)</sup>(College of Computer, Qinghai Normal University, Xining 810008)

<sup>2)</sup>(The State Key Laboratory of Tibetan Intelligent Information Processing and Application, Xining 810008)

<sup>3)</sup>(Key Laboratory of Tibetan Information Processing, Ministry of Education, Xining 810008)

<sup>4)</sup>(Tibetan Information Processing and Machine Translation Key Laboratory of Qinghai Province, Xining 810008)

<sup>5)</sup>(School of Intelligence Science and Engineering, Qinghai Minzu University, Xining 810007)

**Abstract** Graph neural networks have received widespread attention due to their advantages in processing non-Euclidean spatial data. At present, graph neural networks have been successfully applied in various fields, such as text classification, node classification, and natural language processing. They mainly deal with graph-structured data with pairwise relations. However, real-world data often contains multiple higher-order relationships between networks, and using traditional graph structures to represent these complex interactions may lead to the loss of essential information between nodes. Recently, it has been proven that simplices can encode not only pairwise relations between nodes, but also capture high-order interaction relations between multiple nodes. Therefore, inspired by graph neural networks, designing neural networks on

收稿日期:2024-06-15;在线发布日期:2025-03-11。本课题得到国家重点研发计划项目(2020YFC1523300)、青海省创新平台建设项目(2022-ZJ-T02)资助。唐春阳,博士研究生,中国计算机学会(CCF)会员,主要研究方向为复杂网络、图神经网络、单纯形神经网络。E-mail: Tangcyyh@163.com。冶忠林,博士,教授,中国计算机学会(CCF)会员,主要研究领域为图神经网络、知识抽取、网络表示学习。白立冰,博士研究生,主要研究方向为网络药理学、计算生物学、图神经网络。赵海兴(通信作者),博士,教授,中国计算机学会(CCF)高级会员,主要研究领域为复杂网络、图神经网络、机器翻译、超图理论、网络可靠性。E-mail: h. x. zhao@163.com。

simplices data structures have attracted widespread attention. Subsequently, scholars have propose many neural network models related to simplices data, that is, simplicial neural networks. Unlike existing reviews of neural networks, this paper focuses on analyzing the cutting-edge research and applications of simplicial neural networks in handling multivariate high-order interaction relations. Firstly, we comprehensively summarize the research history of simplicial neural networks in recent years. We then introduce related basic knowledge, such as simplicial complexes, boundary matrices, and Hodge Laplacian matrix. We also provide graphical illustrations for better understanding. In Section 4, we first introduce the simplicial Fourier transform, which serves as the foundation for simplicial convolution in the spectral domain. In addition, we classify existing models into two categories based on different methods used to construct simplicial neural networks: simplicial convolutional neural networks and classical models. We further divide the simplicial convolutional neural network into spectral domain and spatial domain two types. For each type of model, we mainly summarize the total model design ideas and the basic framework. In addition, we have introduce the application scenarios and commonly used datasets for each type of model. In Section 5, on the one hand, we summarize the applications of existing simplicial neural network models in four main categories: missing data imputation, classification tasks, prediction tasks, and identification of influential simplexes. The classification tasks include image classification, node classification, and trajectory classification, while prediction tasks involve link prediction, simplex prediction, trajectory prediction, and chemical property prediction. We provide detailed descriptions of each application, including the model used, datasets, and a comparative analysis of the results. On the other hand, we analyze the performance of simplicial neural networks in terms of model application advantages, training and optimization, time complexity analysis and performance evaluation. Finally, we discuss future research directions for simplicial neural networks, highlighting six key areas: weighted simplicial neural networks, deep simplicial neural networks, dynamic simplicial neural networks, interpretability of simplicial neural networks, applications for large-scale datasets and diversified application scenarios. This paper aims to provide a comprehensive overview of simplicial neural networks, helping readers understand their theoretical foundations, model construction methodologies, and practical applications. We hope that this review will serve as a valuable reference for model optimization and practical applications in the field.

**Keywords** simplex; simplicial complex; simplicial neural network; simplicial neighbor; graph neural networks

## 1 引 言

基于图的通用表示以及神经网络的成功,图神经网络(Graph Neural Networks, GNN)应运而生,其主要用于处理节点间的成对关系。然而,现实世界中的网络结构比较复杂,除了成对关系外,节点间还存在多元高阶交互。如果一味地用图结构表示节点间的连接,可能会使得网络节点间的重要信息丢失。例如,在学术合著网络中,科研人员的论文合著不只局限于两两合著关系,还能以研究团队的形式共同发表论文。此外,团队成员之间也可能存在不

同层次的合著关系,这种多节点间的高阶交互可以通过单纯复形进行建模。单纯复形是由单纯形“黏合”而来,一个  $k$  维单纯形是由一组相互作用的  $k+1$  个节点构成的。比如,由 2 个节点构成的边为 1-单纯形、由 3 个节点构成的三角形为 2-单纯形、由 4 个节点构成的四面体为 3-单纯形等,相较于图和超图,单纯形提供了更丰富的结构表达。图 1 展示了图、超图和单纯形的区别,并以社交网络为例进行说明。其中,节点表示用户,边表示用户之间的互动关系。在图 1(a)中,图仅表示 2 位用户之间存在直接联系;在图 1(b)中,超图表示 3 位用户在一个群组中存在互动关系,但 3 位用户之间是否存在直接联

系无从得知;在图 1(c)中,2-单纯形不仅能表示3位用户属于同一个群组,还能表示3位用户彼此之间存在直接互动关系。

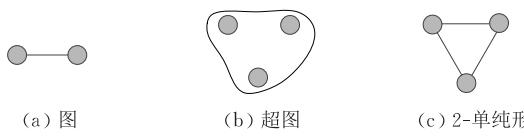


图 1 复杂网络结构示例

近年来,受单纯复形建模和 GNN 发展的影响,研究者们开始将神经网络方法应用于单纯形数据,提出了多种适用于实际场景的单纯形神经网络模型。Yang 等人<sup>[1]</sup>回顾了单纯形傅里叶变换,提出两种基于霍奇拉普拉斯算子的线性(Finite Impulse Response, FIR)滤波器。Ebli 等人<sup>[2]</sup>开发了单纯形神经网络(Simplicial Neural Networks, SNNs),并在引文网络上进行缺失数据插补实验。Hajij 等人<sup>[3]</sup>研究了单纯复形的表示学习问题。Bunch 等人<sup>[4]</sup>设计了适用于单纯 2-复形的卷积神经网络(Simplicial 2-Complex Convolutional Neural Networks, S2CCNN)等。目前,单纯形神经网络已经成功应用于缺失数据插补<sup>[2]</sup>、图分类<sup>[4]</sup>、节点分类<sup>[5]</sup>等各个领域。

上述单纯形神经网络,主要用于处理具有复杂高阶关系的单纯形数据。然而,现实生活中仍然存

在节点间仅具有成对关系的网络。对于这类数据,可以通过图神经网络进行处理。目前,已有多篇综述对图神经网络进行了归纳总结,表 1 列出了部分图神经网络综述和本文综述在模型类别和应用场景方面的差异。整体而言,文献[6-13]介绍了基于图数据构建的神经网络,而本文介绍了基于单纯形数据构建的神经网络,模型构建过程中主要考虑了节点间的多元高阶交互关系。具体地,文献[6-7]将图神经网络根据卷积操作的不同进行分类。文献[8]重点介绍了光谱图神经网络及其未来的研究方向。文献[9-10]主要总结了图神经网络编程框架及优化技术。文献[11-13]概括了图神经网络的发展历程、模型分类及未来研究方向等。与图神经网络综述相比,本文重点从模型算法和应用场景两个方面对单纯形神经网络进行了总结,并对单纯形神经网络未来的研究方向进行了展望。从表 1 可以看出,图神经网络模型的应用场景主要包括:自然语言处理、计算机视觉、推荐系统、交通预测和文本分类等,模型应用较为广泛。单纯形神经网络模型的应用场景主要包括:缺失数据插补、分类任务和预测任务等,模型应用较为单一。后续研究中可以进一步探究如何将单纯形神经网络应用于计算机视觉、自然语言处理和推荐系统等领域。

表 1 图神经网络综述与单纯形神经网络综述(本文)的对比

综述	主要内容	应用场景
图神经网络综述 <sup>[6]</sup>	基于频域的图卷积神经网络、基于空域的图卷积神经网络、门控图神经网络、图自动编码器、时空图神经网络、图嵌入网络、图迁移学习、图强化学习等	文本处理、图像处理、动作检测、图系统、商品推荐等
图卷积神经网络综述 <sup>[7]</sup>	基于谱方法的图卷积:图卷积神经网络、切比雪夫网络、图热核网络等;基于空域方法的图卷积:消息传递神经网络、图采样与聚合网络、图注意力网络、门控注意力网络等	计算机视觉、自然语言处理、生物化学、推荐系统、知识图谱、交通预测、物理学等
A survey on spectral graph neural networks <sup>[8]</sup>	基于特征值的谱域图神经网络:高级滤波器、多项式滤波器、线性滤波器;基于特征向量的谱域图神经网络:小波基、编码器;未来研究方向:信息交叉、信号处理学习等	多元时间序列预测、神经科学、计算机视觉等
大规模图神经网络系统综述 <sup>[9]</sup>	图神经网络概述、DGL、PyTorch Geometric、NeuGraph 等 10 个图神经网络系统架构、系统主要优化技术、分布式图神经网络系统的有效性实验	在引文网络、社交网络和网页超链上分别采用 GCN、GAT 和 GraphSAGE 方法验证图神经网络系统的有效性
大规模图神经网络研究综述 <sup>[10]</sup>	图卷积神经网络、图注意力神经网络、循环图神经网络、基于自编码器的图神经网络、DGL 及 PyG 等框架介绍、框架优化技术	自然语言处理、交通预测、推荐系统等
卷积神经网络研究综述 <sup>[11]</sup>	卷积神经网络的发展历史、卷积神经网络的结构、卷积神经网络的监督和无监督训练方法、常用开源工具	图像分类、人脸识别、音频检索、短文本聚类、视觉跟踪、图像融合等
Survey of graph neural networks and applications <sup>[12]</sup>	图神经网络发展历程、谱图理论、谱域卷积神经网络、切比雪夫网络、图卷积网络、空域图卷积、常见的空域图卷积模型、图神经网络、图注意力网络等	交通预测、电能预测、工业物联网中的应用等
图神经网络研究综述 <sup>[13]</sup>	图卷积神经网络、图注意力网络、图残差网络、图循环网络	推荐系统、自然语言处理、计算机视觉等
单纯形神经网络综述(本文)	基于谱域的单纯形卷积神经网络、基于空域的单纯形卷积神经网络、从池化角度考虑的单纯形卷积神经网络、单纯形映射神经网络、其他模型:对称单纯形神经网络、高阶跳跃网络、单纯复形表示	缺失数据插补、分类任务、预测任务、识别有影响力单纯形

近年来,关于单纯形神经网络的文章层出不穷,但有关单纯形神经网络的综述尚属空白。因此,对现有的单纯形神经网络模型进行全面总结显得尤为重要,这将有助于推动其在更多领域的发展和应用。为此,本文回顾并梳理了近几年单纯形神经网络的发展历程、代表性模型、应用场景以及未来的研究方向。

本文的内容章节如图 2 所示。第 2 节对单纯形神经网络的研究历程进行梳理;第 3 节对单纯复形的基础知识进行介绍;第 4 节根据设计单纯形神经网络时采用的方法不同,将其归纳总结为单纯形卷积神经网络和经典模型两大类,并对每类中的代表性模型进行了介绍;第 5 节总结探讨了单纯形神经网络的实际应用及模型性能;第 6 节展望了单纯形神经网络未来可能的研究方向。

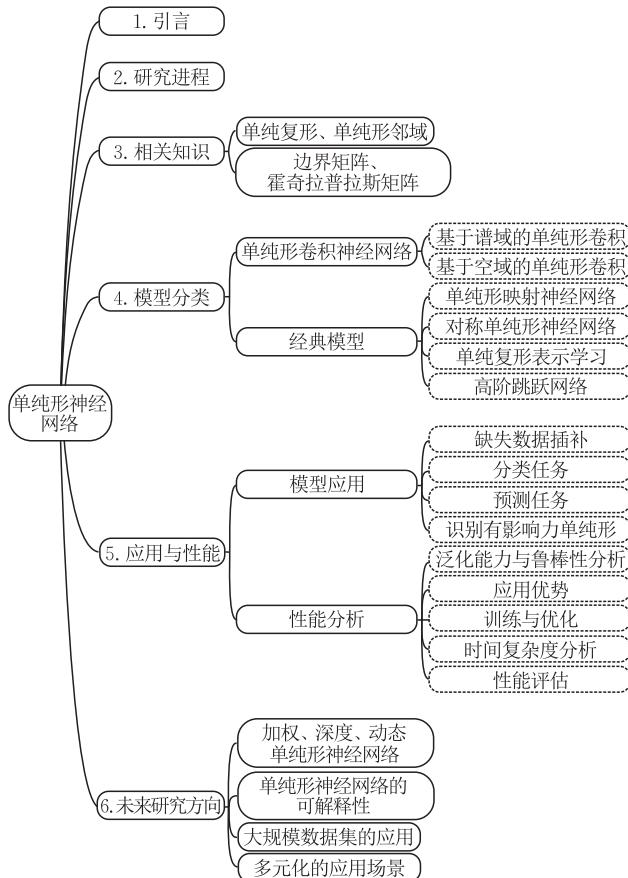


图 2 本文内容组织

## 2 研究进程

GNN 是一种专门针对图结构的神经网络,通过在图数据的连接关系上重新设计网络架构,实现端到端的学习。目前, GNN 已经成功应用于推荐系统<sup>[14-15]</sup>、节点分类<sup>[16-18]</sup>、链路预测<sup>[19]</sup>、图分类<sup>[20-22]</sup>、

自然语言处理<sup>[23-25]</sup> 和计算机视觉<sup>[26-28]</sup> 等各领域。GNN 重点关注图中节点间的成对关系,但现实网络中的节点之间通常存在更复杂的多元高阶关系。基于此,节点间的高阶交互作用可以使用单纯形进行建模。

近几年,单纯形神经网络的研究已经引起了学者们的广泛关注,主要包括以下 2 个方面:(1) 如何在单纯形数据上设计神经网络?(2) 如何将单纯形神经网络应用于各个领域? 基于以上两点,近年来相继涌现出了大量单纯形神经网络模型,并且已经成功应用于轨迹预测、图像分类和节点分类等下游任务中。图 3 详细展示了 2020 年至今单纯形神经网络的发展脉络。

从图 3 可以看出,单纯形神经网络模型逐年增加,具体表现为:单纯形神经网络的消息传递方式从最初的单纯形卷积到后来引入注意力机制、池化操作和单纯形映射等,使得模型应用更为广泛。最初, Ebli 等人<sup>[2]</sup> 提出基于傅里叶变换的单纯形神经网络 SNNs, 为基于谱域的单纯形卷积神经网络研究奠定了基础。基于谱域的单纯形卷积神经网络包括: Bunch 等人<sup>[4]</sup> 提出的单纯 2-复形卷积神经网络(Simplicial 2-Complex Convolutional Neural Network, S2CCNN)、Schaub 等人<sup>[29]</sup> 利用  $k$ -单纯形信号的线性滤波基础,提出的单纯形卷积神经网络、Yang 等人<sup>[30]</sup> 提出的单纯形卷积神经网络(Simplicial Convolutional Neural Network, SCNN)、Chen 等人<sup>[31]</sup> 设计的块单纯复形神经网络(Block Simplicial complex Neural Networks, BScNets)、Keros 等人<sup>[32]</sup> 提出的适用于同源定位的单纯形神经网络、Yang 等人<sup>[33]</sup> 提出的单纯复形卷积神经网络(Simplicial Complex Convolutional Neural Network, SCCNN)、Zeng 等人<sup>[34]</sup> 提出的影响力单纯形识别神经网络( Influential Simplices Mining Neural Network, ISMnet)、Huang 等人<sup>[35]</sup> 提出的高阶图卷积网络(Higher-Order Graph Convolutional Network, HiGCN)、Tan 等人<sup>[36]</sup> 提出的一种简单且高效的图嵌入算法 SHash、Gurugubelli 等人<sup>[37]</sup> 设计的单纯形感知神经网络(Simplicial-aware Neural Network, SaNN);其次,学者们设计了基于空域的单纯形卷积神经网络,如:基于消息传递机制的单纯形神经网络(Message Passing Simplicial Networks, MPSNs)<sup>[38]</sup>、单纯形消息传递神经网络(Simplicial Message Passing Neural Network, SMPNN)<sup>[39]</sup>、等变消息传递单纯形网络( $e(n)$  Equivariant Message Passing Sim-

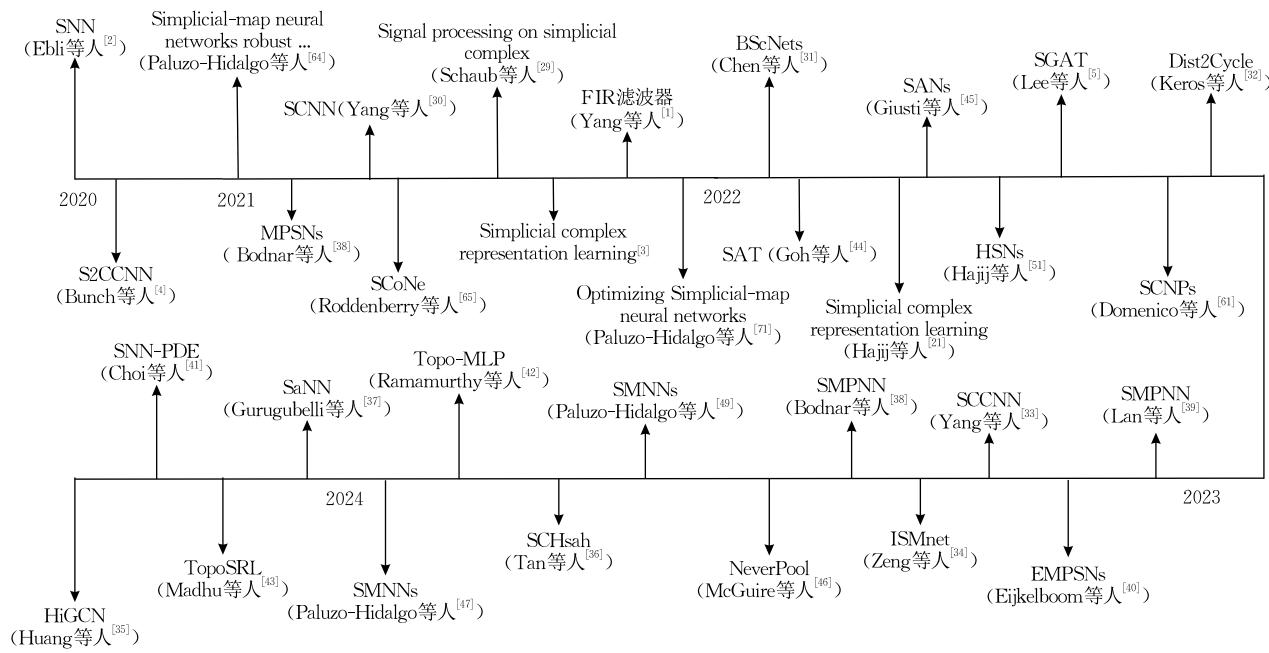


图 3 单纯形神经网络的发展脉络

plicial Network, EMPSNs)<sup>[40]</sup>、基于单纯形神经网络的偏微分方程(Physics informed machine learning, SNN-PDE)<sup>[41]</sup>、基于多层感知机的单纯形神经网络(MLP-based simplicial neural network, Topo-MLP)<sup>[42]</sup>、TopoSRL<sup>[43]</sup>模型、单纯形注意力网络(Simplicial Attention Network, SAT)<sup>[44]</sup>、单纯形注意力神经网络(Simplicial Attention Neural network, SANs)<sup>[45]</sup>和单纯形图注意力网络(Simplicial Graph AtTention network, SGAT)<sup>[5]</sup>；此外,为了减少模型计算量和参数,部分研究在单纯形卷积神经网络中引入了池化操作,提出 SCNPs 和 Nerve-Pool<sup>[46]</sup>池化模型；然后,通过将单纯形神经网络和单纯形映射相结合,Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[47-49]</sup>构建了许多单纯形映射神经网络(Simplicial Map Neural Networks, SMNNs)；最后, Rodriguez 等人<sup>[50]</sup>介绍了对称单纯形神经网络(Symmetric Simplicial Neural Networks, RSSNN)、Hajij 等人<sup>[3]</sup>首次介绍了单纯复形表示学习方法、Hajij 等人<sup>[51]</sup>设计了深层单纯形神经网络(High Skip Networks, HSNs)等。

从以上研究历程可以看出,单纯形神经网络的发展已经初步取得了显著成效。最早提出的基于谱域的单纯形卷积神经网络借助傅里叶变换和单纯形谱理论为单纯形卷积神经网络的发展奠定了基础;随后,单纯形注意力神经网络改进了基于空域的单纯形卷积神经网络不能自适应学习单纯形邻域重要性的缺陷;从池化角度考虑的单纯形神经网络减少了模型计算量和参数数量等问题,能有效防止模型

过拟合；接下来，学者们从代数拓扑角度出发，利用超球面投影和重心细分等知识，分析了单纯形神经网络的鲁棒性等。上述模型的提出表明单纯形神经网络的发展已经全面开花，由于单纯形能够处理和分析复杂的高阶拓扑数据，未来将会被应用于实际生活的各个领域当中。

### 3 相关知识

### 3.1 符号定义

本小节将对文中使用的符号含义进行解释,有助于读者更好地理解文中的公式。表 2 所示为每个符号所代表的含义。

表 2 符号及含义表示

符号	含义
$S_k$	$k$ -单纯形
$SC$	单纯复形
$S_i^k$	第 $i$ 个 $k$ -单纯形
$B_k$	边界矩阵
$L_k$	霍奇拉普拉斯矩阵
$L_d^{(k)}$	下拉普拉斯矩阵
$L_u^{(k)}$	上拉普拉斯矩阵
$N_{l,i}$	$S_i^k$ 的下邻域
$N_{u,i}$	$S_i^k$ 的上邻域
$S^0$	图信号
$S^k$	$k$ -单纯形信号
$\mathbb{R}^{N_k}$	单纯形信号空间
$x_0$	节点信号
$x_1$	边信号
$x_2$	三角形信号
$\sigma$	非线性激活函数

本文用  $S_k$  表示  $k$ -单纯形,  $S_i^k$  表示第  $i$  个  $k$ -单纯形,  $SC$  表示单纯复形, 其是  $S_k$  的集合。 $\mathbf{B}_k$  表示  $k$ -单纯形和  $(k-1)$ -单纯形之间的关联关系。 $\mathbf{L}_k$  表示霍奇拉普拉斯矩阵, 其中  $\mathbf{L}_d^{(k)}$  表示下拉普拉斯矩阵,  $\mathbf{L}_u^{(k)}$  表示上拉普拉斯矩阵, 它们分别编码第  $i$  个单纯形的下邻域  $N_{l,i}$  和上邻域  $N_{u,i}$ 。 $S^0$  表示图信号,  $S^k$  表示  $k$ -单纯形信号,  $\mathbb{R}^{N_k}$  表示单纯形信号空间,  $x_0$  表示节点信号,  $x_1$  表示边信号,  $x_2$  表示三角形信号,  $\sigma$  是非线性激活函数。

### 3.2 单纯复形

给定一个有限的顶点集  $V$ , 一个  $k$ -单纯形  $S_k$  是基数为  $k+1$  的  $V$  的一个子集。 $S_k$  的一个面是基数为  $k$  的  $S_k$  的子集, 因此  $S_k$  有  $k+1$  个面。 $S_k$  的共面是包含  $S_k$  的  $k+1$  单纯形<sup>[1]</sup>。单纯复形  $SC$  是由不同维度的单纯形  $S_k$  黏合得到, 对于  $SC$  中的任一  $k$ -单纯形  $S_k$  而言,  $S_k$  的任意子集也必须在  $SC$  中。 $SC$  的维数是其中任一单形  $S_k$  的最大维数, 记为  $k$ 。可以把 0-单形看作顶点, 1-单形看作边, 2-单形看作三角形, 3-单形看作四面体, 以此类推。图 4 为单纯形和单纯复形示意图。

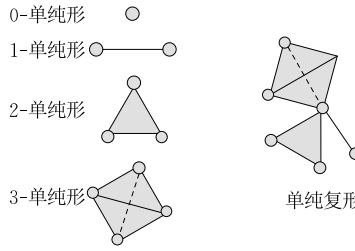


图 4 单纯形和单纯复形

### 3.3 单纯形邻域

对于单纯复形中的第  $i$  个  $k$ -单纯形  $S_i^k$ , 定义其下邻域  $N_{l,i}$  为与  $S_i^k$  共享一个公共面的  $k$ -单纯形集合; 定义其上邻域  $N_{u,i}$  为与  $S_i^k$  共享一个共面的  $k$ -单纯形集合。 $S_i^k$  的下邻域和上邻域分别编码在下拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_d^{(k)}$  和上拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_u^{(k)}$  的非零非对角元素中。对于图 5<sup>[52]</sup> 所示单纯复形中的边  $(2, 3)$ , 下邻域表示为  $N_l = \{(2, 5), (2, 6), (1, 2), (1, 3), (3, 7), (3, 8)\}$ , 上邻域表示为  $N_u = \{(1, 3), (1, 2)\}$ 。

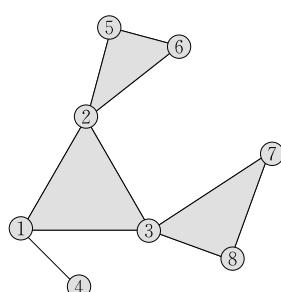


图 5 单纯复形图示

### 3.4 边界矩阵

一般的, 用边界矩阵  $\mathbf{B}_k$  表示  $k$ -单纯形  $S_k$  和  $(k-1)$ -单纯形  $S_{k-1}$  之间的关系。 $\mathbf{B}_k$  的行表示  $k$ -单纯形,  $\mathbf{B}_k$  的列表示  $(k-1)$ -单纯形。如,  $\mathbf{B}_1$  表示点和边的边界关系,  $\mathbf{B}_2$  表示边和三角形的边界关系<sup>[1, 41]</sup>。对于单纯形  $S_{k-1} \subset S_k$ , 给定一个参考方向,  $S_{k-1} \sim S_k$  表示  $(k-1)$ -单纯形和  $k$ -单纯形方向一致。相反地,  $S_{k-1} \not\sim S_k$  表示  $(k-1)$ -单纯形和  $k$ -单纯形方向不同。 $[\mathbf{B}_k]_{i,j}$ <sup>[52]</sup> 表示为

$$[\mathbf{B}_k]_{i,j} = \begin{cases} 0, & S_{k-1,i} \not\subset S_{k,j} \\ 1, & S_{k-1,i} \subset S_{k,j} \text{ 且 } S_{k-1,i} \sim S_{k,j} \\ -1, & S_{k-1,i} \subset S_{k,j} \text{ 且 } S_{k-1,i} \not\sim S_{k,j} \end{cases} \quad (1)$$

为了使读者更直观的理解边界矩阵的含义, 图 6<sup>[52]</sup> 给出了  $\mathbf{B}_1$  和  $\mathbf{B}_2$  边界矩阵示例图。

$$\mathbf{B}_1 = \begin{pmatrix} (1,2)(1,4)(1,6)(2,3)(2,4)(3,4)(4,5)(4,6)(5,6) \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 6 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} (1,4,6)(2,3,4) \\ (1,2) & 0 & 0 \\ (1,4) & 1 & 0 \\ (1,6) & -1 & 0 \\ (2,3) & 0 & 1 \\ (2,4) & 0 & -1 \\ (3,4) & 0 & 1 \\ (4,5) & 0 & 0 \\ (4,6) & 1 & 0 \\ (5,6) & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

图 6  $\mathbf{B}_1$  和  $\mathbf{B}_2$  分别表示节点到边和边到三角形的边界矩阵

### 3.5 霍奇拉普拉斯矩阵和霍奇分解

定义边界矩阵后, 通常利用边界矩阵和边界矩阵的转置来定义霍奇拉普拉斯矩阵, 这是图拉普拉斯的高阶推广<sup>[53]</sup>。霍奇拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_k$  可以用来描述  $k$  阶 ( $k=0, 1, \dots, K$ ) 单纯复形,  $\mathbf{L}_k$  表示为

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_1^T \quad (2)$$

$$\mathbf{L}_k = \mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k + \mathbf{B}_{k+1} \mathbf{B}_{k+1}^T, k=1, 2, \dots, K-1 \quad (3)$$

$$\mathbf{L}_k = \mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k \quad (4)$$

其中,  $\mathbf{B}_k^T \mathbf{B}_k$  是下拉普拉斯矩阵,  $\mathbf{B}_{k+1} \mathbf{B}_{k+1}^T$  是上拉普拉斯矩阵, 两者分别编码下邻域和上邻域。当  $k=0$  时, 霍奇拉普拉斯矩阵为图拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_0 = \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_1^T$ 。

霍奇拉普拉斯矩阵允许霍奇分解<sup>[54-56]</sup>, 通过霍奇分解  $k$ -单纯形信号空间  $\mathbb{R}^{N_k}$  被分解为三个正交子空间直和<sup>[53]</sup>。

$$\mathbb{R}^{N_k} = \text{im}(\mathbf{B}_{k+1}) \oplus \text{im}(\mathbf{B}_k^\top) \oplus \text{ker}(\mathbf{L}_k) \quad (5)$$

其中,  $\oplus$  是向量空间的直和,  $\text{im}(\cdot)$  是矩阵的像空间,  $\text{ker}(\cdot)$  是矩阵的核空间。当  $k=1$  时, 上述子空间具有以下解释<sup>[53,57]</sup>。

(1) 梯度空间: 应用边界矩阵  $\mathbf{B}_1$  到边流  $x_1$ , 用于计算每个节点处的净流  $\mathbf{B}_1 x_1$ ,  $\mathbf{B}_1$  称为散度算子。 $\mathbf{B}_1^\top$  沿着边对节点信号  $x_0$  求微分从而引起边流  $\mathbf{B}_1^\top x_0$ , 即  $\mathbf{B}_1^\top$  是梯度算子。因此,  $\text{im}(\mathbf{B}_1^\top)$  中的任意流都可以写成节点信号  $x_0$  的梯度, 我们称  $N_1 \in \text{im}(\mathbf{B}_1^\top)$  为梯度流, 子空间  $\text{im}(\mathbf{B}_1^\top)$  为梯度空间。

(2) 旋度空间: 边界矩阵  $\mathbf{B}_2$  可以从三角形信号  $x_2$  中引入边流  $N_1 = \mathbf{B}_2 x_2$ ,  $f \in \text{im}(\mathbf{B}_2)$  称为旋度流, 子空间  $\text{im}(\mathbf{B}_2)$  为旋度空间。 $\mathbf{B}_2$  的伴随矩阵  $\mathbf{B}_2^\top$  称为旋度算子, 可以利用其计算沿着三角形循环的净边流  $\mathbf{B}_2^\top x_1$ 。

(3) 调和空间: 剩余空间  $\text{ker}(\mathbf{L}_1)$  称为调和空间, 调和空间的任意边流  $x_1 \in \text{ker}(\mathbf{L}_1)$  都是发散且无旋度的, 即每个节点的净流量为零, 沿三角形循环的流量也为零。

## 4 单纯形神经网络

单纯形神经网络是基于拓扑学中的单纯形结构进行学习的神经网络模型。与 GNN 不同, 单纯形神经网络不仅可以在节点和边之间传递信息, 还可以在高维单纯形(如三角形、四面体等)之间进行信息传递。其基本框架包括以下几个步骤:

(1) 特征初始化: 对于  $k$  维单纯形  $S_k$ , 初始化其特征  $x_{S_k}$  作为输入。

(2) 信息传递: 对于  $k$  维单纯形  $S_k$ ,  $S_k$  的特征通过与其上邻域( $k+1$  维单纯形)和下邻域( $k-1$  维单纯形)的信息传递进行更新, 该过程由霍奇拉普拉斯矩阵及其转置实现:

① 上邻域信息传递: 从  $k+1$  维单纯形(如面)向  $k$  维单纯形(如边)传递信息。

② 下邻域信息传递: 从  $k$  维单纯形(如边)向  $k-1$  维单纯形(如节点)传递信息。

(3) 特征聚合与更新: 对于  $k$  维单纯形  $S_k$ , 首先从  $S_k$  的上邻域和下邻域传递信息; 然后将这些邻域信息进行聚合, 并将聚合后的信息通过更新函数来更新当前单纯形的表示。

本节依据构建单纯形神经网络时所采用的不同方法, 将现有模型归为两大类: 单纯形卷积神经网络

和经典模型。进一步地, 根据卷积操作的实现方式不同, 单纯形卷积神经网络又可细分为谱域方法和空域方法。谱域方法基于单纯形卷积定理, 在谱域内执行卷积运算; 而空域方法基于单纯形邻域, 通过定义聚合函数来聚合每个单纯形及其邻域单纯形的信息。

### 4.1 单纯形卷积神经网络

#### 4.1.1 基于谱域的单纯形卷积神经网络

在介绍单纯形卷积神经网络之前, 我们首先给出单纯形傅里叶变换的定义。傅里叶变换是信号处理的基石, 其将信号从空域转换到谱域空间, 而谱域视角给信号处理带来了极大的便利。

##### (1) 单纯形傅里叶变换

给定基数为  $k+1$  的集合  $S_k$ , 信号被定义为  $S_k$  中元素上的实值映射, 表示为

$$f_k: S_k \rightarrow \mathbb{R}, k=0,1,2 \quad (6)$$

当  $k=0$  时,  $S^0$  表示图信号。在图信号处理中, 拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_0$  的特征向量被用作图傅里叶变换的基函数。从而, 将  $\mathbf{L}_0$  特征分解为

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{U}_0 \mathbf{\Lambda}_0 \mathbf{U}_0^\top \quad (7)$$

其中,  $\mathbf{\Lambda}_0$  为特征值构成的对角矩阵,  $\mathbf{U}_0$  为特征向量构成的正交矩阵, 且正交矩阵的逆等于正交矩阵的转置  $\mathbf{U}_0^{-1} = \mathbf{U}_0^\top$ , 故

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{U}_0 \mathbf{\Lambda}_0 \mathbf{U}_0^{-1} = \mathbf{U}_0 \mathbf{\Lambda}_0 \mathbf{U}_0^\top \quad (8)$$

那么, 对于图上的信号  $S^0$ , 首先将  $S^0$  经过傅里叶变换从空域转到谱域执行卷积操作:

$$\hat{S}^0 \triangleq \mathbf{U}_0^\top S^0 \quad (9)$$

然后, 利用傅里叶逆变换将卷积结果从谱域转化到空域:

$$S^0 = \mathbf{U}_0 \hat{S}^0 \quad (10)$$

将上述方法推广到单纯复形数据上, 可以得到单纯复形的傅里叶变换(Simplicial Fourier Transform, SFT)<sup>[57]</sup>。

##### (2) 基于谱域的单纯形卷积神经网络

基于谱域的单纯形卷积神经网络将图卷积神经网络的思想扩展到单纯形数据上, 利用单纯形的谱理论和拓扑特性, 在谱域中进行卷积操作, 从而有效处理高维单纯形数据, 如边、三角形和四面体等。

图 7 展示了谱域单纯形卷积神经网络的卷积过程。从图中可以看出, 单纯形卷积通过对霍奇拉普拉斯矩阵进行特征分解, 利用卷积定理在谱域中定义卷积操作。具体而言, 首先通过傅里叶变换将单纯形信号从空域映射到谱域, 在谱域内对信号进行逐点乘法操作, 随后利用傅里叶逆变化将卷积结果

还原至空域。因此,单纯形卷积可以理解为谱域中单纯形信号与卷积核的乘积,卷积公式如式(11)~(13)所示:

$$\hat{\mathbf{S}}^k = \mathbf{U}_k^T \mathbf{S}^k \quad (11)$$

$$\hat{\mathbf{Y}}_k = g_\theta(\mathbf{A}_k) \hat{\mathbf{S}} \quad (12)$$



图 7 谱域单纯形卷积

### (3) 模型

基于单纯形卷积操作的定义,陆续出现了许多有关单纯形卷积神经网络的研究。例如, Ebli 等人<sup>[2]</sup>将 GNN 的思想扩展到单纯复形数据上,提出单纯形神经网络 SNNs。SNNs 借助傅里叶变换将实值  $p$ -共链转换为谱域上的线性组合,通过共链  $c$  定义单纯形卷积层。SNNs 的卷积层表示为

$$\mathbf{F}_p^{-1}(\varphi w) \circ_p c = \sum_{i=0}^N \mathbf{W}_i \mathbf{L}_p^i c \quad (14)$$

其中,  $\mathbf{L}_p^i$  是拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_p$  的  $i$  次方,  $\mathbf{W}_i$  是权重矩阵,  $c$  是  $p$ -共链。

该方法虽然在单纯形上实现了卷积运算,为谱域单纯形卷积神经网络的发展奠定了基石。然而, SNNs 不能在单纯形的上邻域和下邻域内独立执行卷积,导致计算开销巨大。

针对 SNNs 的局限性, Yang 等人<sup>[30]</sup>提出单纯形卷积神经网络 SCNN,其利用霍奇拉普拉斯矩阵构建滤波器,解决了 SNNs 不能独立在单纯形上邻域和下邻域内执行卷积的问题。SCNN 的卷积层如下:

$$H = \epsilon I + \sum_{l_1=1}^{L_1} \alpha l_1 (\mathbf{B}_1^T \mathbf{B}_1)^{l_1} + \sum_{l_2=1}^{L_2} \beta l_2 (\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_2^T)^{l_2} \quad (15)$$

$$x_1^f = \sigma[z_1^f] = \sigma[H_1^f x_0], f=1,2,\dots,F \quad (16)$$

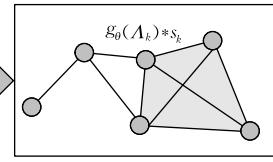
$$x_p^f = \sigma \left[ \sum_{g=1}^F z_p^g \right] = \sigma \left[ \sum_{g=1}^F H_p^g x_{p-1}^g \right], f=1,2,\dots,F \quad (17)$$

$$X_P = \sigma \left[ \sum_{g=1}^F z_P^g \right] = \sigma \left[ \sum_{g=1}^F H_P^g X_{P-1}^g \right] \quad (18)$$

模型构建过程中,首先设计了适用于高阶结构的单纯形滤波器  $H$ (式 15),  $H$  可以独立提取单纯形的上邻域信息和下邻域信息。式(15)中,  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{L_1})^T$  和  $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{L_2})^T$  是滤波器系数,  $L_1$  和  $L_2$  是滤波器长度,  $\mathbf{B}_1^T \mathbf{B}_1$  是下拉普拉斯矩阵,  $\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_2^T$  是上拉普拉斯矩阵;随之构建了 SCNN 层,其由单纯形滤波器和上一层的输出结果组成(式(16)~

$$Y_k = \mathbf{U}_k \hat{\mathbf{Y}}_k = \mathbf{U}_k g_\theta(\mathbf{A}_k) \mathbf{U}_k^T \mathbf{S}^k \quad (13)$$

其中,  $\mathbf{U}_k$  是霍奇拉普拉斯矩阵的特征向量,  $\mathbf{S}^k$  是  $k$  维单纯形信号,  $\mathbf{U}_k^T \mathbf{S}^k$  是输入信号  $\mathbf{S}^k$  的傅里叶变化,  $\mathbf{L}_k = \mathbf{U}_k \mathbf{A}_k \mathbf{U}_k^T$ ,  $\mathbf{A}_k$  是特征值构成的对角矩阵,  $g_\theta(\mathbf{A}_k)$  是可学习滤波器。



(18))。其中,  $x_0$  是输入特征,  $H_1^f$  是滤波器组,  $\sigma$  是非线性激活函数,  $X_{p-1} = [x_{p-1}^1, x_{p-1}^2, \dots, x_{p-1}^F]$  是中间层的输出特征,  $p=2,3,\dots,P-1, g=1,2,\dots,F$ 。

不同于 SCNN 利用霍奇拉普拉斯矩阵定义滤波器, Bunch 等人<sup>[4]</sup>通过文献<sup>[53]</sup>的方法对 2 阶霍奇拉普拉斯矩阵  $\mathbf{L}_2$  进行归一化,提出适用于 2 维单纯复形的卷积神经网络 S2CCNN。S2CCNN 的卷积层表示为

$$\mathbf{X}_0^{(h+1)} = \sigma(D_1^{-1} \mathbf{B}_1 \mathbf{X}_1^{(h)} \mathbf{W}_{0,1}^{(h)} + \tilde{\mathbf{A}}_0^u \mathbf{X}_0^{(h)} \mathbf{W}_{0,0}^{(h)}) \quad (19)$$

$$\mathbf{X}_1^{(h+1)} = \sigma(\mathbf{B}_2 D_3 \mathbf{X}_2^{(h)} \mathbf{W}_{1,2}^{(h)} + (\tilde{\mathbf{A}}_1^d + \tilde{\mathbf{A}}_1^u)) \quad (20)$$

$$\mathbf{X}_1^{(h)} \mathbf{W}_{1,1}^{(h)} + D_2 \mathbf{B}_1^* D_1^{-1} \mathbf{X}_0^{(h)} \mathbf{W}_{1,0}^{(h)}) \quad (21)$$

$\mathbf{X}_2^{(h+1)} = \sigma(\tilde{\mathbf{A}}_2^d \mathbf{X}_2^{(h)} \mathbf{W}_{2,2}^{(h)} + D_4 \mathbf{B}_2^* D_5^{-1} \mathbf{X}_1^{(h)} \mathbf{W}_{2,1}^{(h)})$  其中,  $\mathbf{X}_k^{(h)} (k=0,1,2)$  是  $k$ -单纯形在  $h$  层的特征表示,  $\mathbf{X}_k^{(h+1)}$  是  $k$ -单纯形在  $h+1$  层的特征表示,  $\mathbf{W}_{i,j}^{(h)}$  是  $h$  层的权重矩阵,  $\mathbf{D}_k (k=0,1,2)$  是  $k$ -单纯形的度矩阵,  $\mathbf{D}_k^{-1}$  是  $\mathbf{D}_k$  的逆矩阵,  $\mathbf{B}_k (k=0,1,2)$  是  $k$ -单纯形的边界矩阵,  $\mathbf{B}_k^*$  是  $\mathbf{B}_k$  的转置矩阵,  $\mathbf{A}_i^a$  是图的邻接矩阵,  $\tilde{\mathbf{A}}_i^a$  是添加自循环的邻接矩阵。当单纯复形维度为 1 的时候(即图结构),  $X_1$  的值为 0, 此时式(18)可以改写为

$$\mathbf{X}_0^{(h+1)} = \sigma(\tilde{\mathbf{A}}_0^u \mathbf{X}_0^{(h)} \mathbf{W}_{0,0}^{(h)}) \quad (22)$$

Chen 等人<sup>[31]</sup>首次将单纯形神经网络应用于半监督场景中,提出块单纯复形神经网络 BScNets,其包含图卷积和霍奇自适应块卷积(Hodge-style Adaptive Block Convolution, H-ABC)两个模块。BScNets 应用于链路预测任务时,首先通过 Fermi-Dirac 编码分别计算图卷积模块和 H-ABC 模块中两个节点之间的距离;然后,将两个模块的输出拼接后送入到 MLP 层进行链路预测。

$$dist = \text{ReLU}(f_{MLP}([\pi_\alpha \times dist^{GC}, \pi_\beta \times dist^{H-ABC}])) \quad (23)$$

其中,  $dist_{uv}^{GC} = (H_u^{(l+1)} - H_v^{(l+1)})^2$ ,  $dist_{uv}^{H-ABC} = (Z_u^{(l+1)} -$

$Z_v^{(l+1)})^2$ ,  $[\cdot, \cdot]$  表示将 H-ABC 模块和图卷积模块的输出进行拼接,  $\pi_\alpha$  和  $\pi_\beta$  表示第  $l+1$  层中每个距离权重的超参数, ReLU 是激活函数。

为了解决传统图神经网络处理高阶关系时的局限性, Yang 等人<sup>[33]</sup> 提出单纯复形卷积神经网络 SCCNN, 该网络通过单纯复形的多跳邻域信息进行卷积, 有效捕捉和处理高阶交互关系。特别地, SCCNN 在处理单纯复形和数据空间的对称性时, 能够实现置换和方向等变性。

除了上述代表性模型之外, Keros 等人<sup>[32]</sup> 提出适用于同源定位的单纯形神经网络 Dist2Cycle, 通过学习每个单纯形与最近的“最优”同调生成器之间的距离, 为同调定位问题提供了新的解决方案。Zeng 等人<sup>[34]</sup> 提出 ISMnet 网络, 通过引入层次二部图和高阶层次拉普拉斯矩阵, 以识别单纯复形中最具影响力的  $h$ -单纯形。Huang 等人<sup>[35]</sup> 使用花瓣算子定义单纯形卷积, 提出一种新颖的高阶花瓣 (Power-Petals, FP) 模型, 并将其应用到高阶图卷积网络 HiGCN 中, 能够有效识别和处理不同阶单纯形之间的关联关系。Tan 等人<sup>[36]</sup> 提出一种简单高效的图嵌入算法 SHash, 该算法结合局部敏感哈希 (Locality Aensitive Hashing, LSH) 技术, 通过 GNN 框架捕捉单纯复形中的高阶交互作用。同时, 针对现有的单纯形神经网络在训练过程中因顺序特征聚合, 导致的高内存占用和模型训练时间过长的问题, Gurugubelli 等人<sup>[37]</sup> 提出了单纯形感知神经网络 SaNN。

从上述模型分析可知, 基于谱域的单纯形卷积神经网络的共同点在于: 它们以谱单纯形理论为基础, 通过改进滤波器实现单纯形卷积, 并引入非线性操作提升模型的学习能力。Ebli 等人<sup>[2]</sup> 最早将图神经网络的思想扩展至单纯复形, 提出用于学习单纯复形表示的神经网络 SNNs。随后, Yang 等人<sup>[30]</sup> 为了克服 SNNs 在单纯形上、下邻域内无法独立进行卷积的限制, 提出了 SCNN 模型, 该模型明确支持基于单纯形上、下邻域的多跳处理。与 SCNN 类似, S2CCNN、SCCNN 和 Dist2Cycle 模型同样通过霍奇拉普拉斯算子定义单纯形卷积, 以学习单纯复形的结构表示, 区别在于它们对滤波器的定义方式不同。BScNets 利用块霍奇拉普拉斯算子定义单纯形卷积, HiGCN 则采用花瓣拉普拉斯算子定义卷积层, 而 ISMnet 通过样本单纯形的影响力分数构建模型。此外, SHash 和 SaNN 主要针对算法的时间复杂度和空间复杂度过高的问题, 进行了优化。

#### (4) 模型面临的挑战

基于谱域的单纯形卷积神经网络巧妙地结合单纯形信号和傅里叶变换, 实现了对单纯形数据的卷积操作, 具备滤波器设计灵活和平滑的特点。然而, 尽管该方法理论基础坚实, 但仍面临一些挑战: ① 难以适用于大规模图: 由于霍奇拉普拉斯矩阵特征分解的计算复杂度较高, 且模型训练时需要将整个网络存储在内存中, 导致其难以适用于大规模图的处理; ② 谱特征解释困难: 在高阶单纯形结构中, 霍奇拉普拉斯算子生成的谱特征难以进行直观解释, 使得从谱角度理解和分析网络结构变得更加困难。

##### 4.1.2 基于空域的单纯形卷积神经网络

基于空域的单纯形卷积神经网络通过设计聚合函数并采用消息传播机制, 旨在利用中心单纯形的邻域特征来更新其自身的特征表示。接下来, 本节将从模型的通用架构、注意力机制以及池化操作 3 个方面进行详细介绍。

##### (1) 通用架构

对空间方法具有重要影响的一项研究是消息传递神经网络 (Message Passing Neural Network, MPNN)<sup>[58]</sup>, 其是空域图卷积神经网络的通用架构。同样地, 学者们将 MPNN 的思想扩展到单纯形数据上, 提出单纯形消息传递神经网络 SMPNN<sup>[39]</sup>, 其可以看作是基于空域的单纯形卷积神经网络的通用架构。SMPNN 认为单纯形卷积可以视为 0-单纯形之间通过 1-单纯形进行消息传递, 1-单纯形之间通过 2-单纯形进行消息传递, 以此类推。SMPNN 的消息传递和更新过程如下:

$$m_{\sigma}^t = \sum_{\sigma_i^k < \tau^{k+1}} M_{t-1}(h^{t-1}(\sigma_i^k), h^{t-1}(\tau^{k+1})) \\ h_{\sigma}^t = U_t(h_{\sigma}^{t-1}, m_{\sigma}^t) \quad (24)$$

其中,  $M_{t-1}$  是消息传递函数,  $U_t$  是消息更新函数,  $h^{t-1}(\sigma_i^k)$  是  $\sigma$  单纯形的特征,  $h^{t-1}(\tau^{k+1})$  是  $\tau$  单纯形的特征。

Bodnar 等人<sup>[38]</sup> 首次将 (Weisfeiler-Lehman, WL) 图同构测试推广到单纯形上, 定义了单纯形上的同构测试算法 (Simplicial Weisfeiler-Lehman, SWL), 用于区分非同构单纯复形。Bodnar 依据 SML 测试所定义的消息传递框架, 提出了消息传递单纯形网络 (Message Passing Simplicial Networks, MPSNs)。MPSNs 的信息更新如下:

$$h_{\sigma}^{t+1} = U\{h_{\sigma}^t, m_B^t(\sigma), m_{C(\sigma)}^t, m_{\downarrow}^{t+1}(\sigma), m_{\uparrow}^{t+1}(\sigma)\} \quad (25)$$

其中,  $U(\cdot)$  表示消息更新函数,  $h_{\sigma}^{t+1}$  表示  $\sigma$ -单纯形在  $t+1$  步时的特征表示,  $h_{\sigma}^t$  表示  $\sigma$ -单纯形在  $t$  步时

的特征表示,  $m_B^t(\sigma)$  表示  $\sigma$  单纯形在  $t$  步时的边界邻域信息,  $m_{C(\sigma)}^t$  表示  $\sigma$  单纯形在  $t$  步时的上边界邻域信息,  $m_{\downarrow}^{t+1}(\sigma)$  表示  $\sigma$  单纯形在  $t+1$  步时的下邻域信息,  $m_{\uparrow}^{t+1}(\sigma)$  表示  $\sigma$  单纯形在  $t+1$  步时的上邻域信息。

除了上述模型之外, 还有许多学者对这方面的工作进行了研究。例如 Eijkelboom 等人<sup>[40]</sup>受等变图神经网络(e(n) Equivariant Graph Neural Network, EGNN)<sup>[59]</sup>的启发, 将几何不变量置于消息传递单纯形网络中, 提出用于学习几何图形和点云数据的等变消息传递单纯形网络 EMPSNs。Choi 等人<sup>[41]</sup>进一步将深度学习(Deep Learning, DL)和偏微分方程(Partial Differential Equations, PDEs)相结合, 提出基于单纯形神经网络的偏微分方程 SNN-PDE。具体地, SNN-PDE 使用边界算子和共边界算子定义单纯复形上的离散霍奇拉普拉斯矩阵, 并通过注意力机制来衡量节点嵌入的重要程度。Topo-MLP<sup>[42]</sup>借助高阶邻域对比损失(Higher Order Neighborhood Contrastive loss, HONC)将单纯形结构嵌入表示学习, 并基于多层感知器 MLP 学习单纯形特征, 避免了网络在高阶连接信息丢失或损坏时产生的信息缺失问题。

从上述分析可知, 除 Topo-MLP 之外, 其余模型均通过单纯形结构进行消息传递和更新。Topo-MLP 则采用多层感知器直接学习单纯复形的结构表示。此外, SMPNN 的架构可以看作是 S2CCNN 架构的概括。EMPSNs 和 SNN-PDF 的提出旨在解决传统方法无法有效利用高维结构信息的缺陷。

### (2) 注意力机制

研究者们通过在网络中引入注意力机制来定义聚合函数, 动态学习并调整不同邻域单纯形之间的信息传递和聚合过程。与图注意力网络(Graph Attention Network, GAT)<sup>[60]</sup> 原理类似, 单纯形注意力网络 SAT<sup>[44]</sup> 同样可以动态地衡量邻域单纯形之间的相互作用, 其卷积层表示为

$$h_{\sigma}^{k+1} = \phi \left( \sum_{\tau \in N_{\sigma}^{\uparrow}} \alpha_{\sigma, \tau}^{\uparrow} \mathbf{W}_1^k h_{\tau}^k, \sum_{\tau \in N_{\sigma}^{\downarrow}} \alpha_{\sigma, \tau}^{\downarrow} \mathbf{W}_2^k h_{\tau}^k \right) \quad (26)$$

其中,  $\alpha_{\sigma, \tau}^{\uparrow}$  是  $\sigma$ -单纯形的上邻域注意力系数,  $\alpha_{\sigma, \tau}^{\downarrow}$  是  $\sigma$ -单纯形的下邻域注意力系数,  $\phi$  是更新函数,  $\mathbf{W}_1^k$  是上邻域的权重矩阵,  $\mathbf{W}_2^k$  是下邻域的权重矩阵,  $h_{\tau}^k$  是  $\tau$ -单纯形的特征表示,  $h_{\sigma}^{k+1}$  是  $\sigma$ -单纯形的特征表示,  $k$  表示层数。

Giusti 等人<sup>[45]</sup>构造了单纯形注意力神经网络 SANs, 用于轨迹预测和缺失值插补任务。对于任意的  $k$ -单纯形, SANs 分别利用上注意力机制和下注意力机制为其上邻域和下邻域中的不同( $k \pm 1$ )-单纯形特征分配重要性权重。SAN 层表示为

$$Z_{l+1} =$$

$$\sigma_l \left( \sum_{p=1}^{J_l^{(d)}} (L_l^{(d)})^p Z_l \mathbf{W}_{l,p}^{(d)} + \sum_{p=1}^{J_l^{(u)}} (L_l^{(u)})^p Z_l \mathbf{W}_{l,p}^{(u)} + \hat{p}_l Z_l \mathbf{W}_l^{(h)} \right) \quad (27)$$

其中,  $L_l^{(u)}$  和  $L_l^{(d)}$  分别是上注意力拉普拉斯算子和下注意力拉普拉斯算子的系数,  $\{\mathbf{W}_{l,p}^{(d)}\}_p$ 、 $\{\mathbf{W}_{l,p}^{(u)}\}_p$  和  $\mathbf{W}_l^{(h)}$  是滤波器矩阵,  $J_l^{(d)}$  和  $J_l^{(u)}$  是滤波器阶数,  $Z_l$  是  $l$  层的特征表示,  $Z_{l+1}$  是  $l+1$  层的特征表示。特别地, SAN 层可以解释为三个滤波多项式之和, 第一个多项式表示基于下邻域的无旋分量, 第二个多项式表示基于上邻域的螺旋分量, 最后一个多项式表示谐波分量, 如图 8(a) 所示。

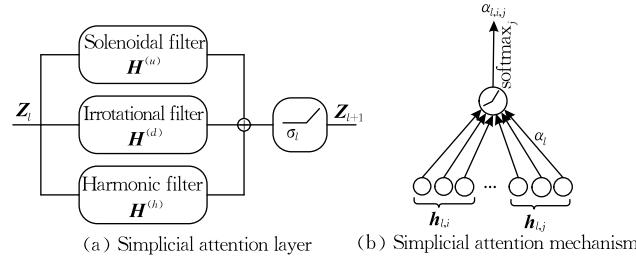


图 8 SANs 框架<sup>[45]</sup>

值得注意的是, 与 SAT 和 SANs 专注于同质图信息的学习不同, 为避免在将图转换为同质单纯形时丢弃非目标节点的特征, Lee 等人<sup>[5]</sup> 提出了单纯形图注意力网络 SGAT。该方法利用单纯复形及其上邻域知识, 将注意力机制应用于异质图的学习, 从而有效地提取和处理异质图中的信息。

### (3) 单纯形池化

当前针对单纯形卷积神经网络的研究集中在如何使卷积操作更加适用于单纯形数据, 忽略了单纯形池化的研究。在卷积神经网络中引入池化层, 通过交替进行池化和卷积操作, 能够在减少模型参数的同时防止过拟合。

Cinque 等人<sup>[61]</sup>在单纯形卷积神经网络中引入池化层, 提出 SCNPs 模型, 其引入包含聚合、缩减和选择的单纯形池化层, 并利用缩减机制和选择机制设计了最大池化、Top- $k$  池化、自注意池化和分离 Top- $k$  池化的四种池化操作。SCNPs 层表示为

$$Y = \sigma \left[ P \left( \underbrace{\sum_{p=1}^{J_d} \mathbf{L}_d^p \mathbf{X} \mathbf{D}_p}_{Z_d} + \underbrace{\sum_{p=1}^{J_u} \mathbf{L}_u^p \mathbf{X} \mathbf{U}_p}_{Z_u} + \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{H}}_{Z_h} \right) \right] \quad (28)$$

其中,  $\mathbf{X}$  是边信号矩阵,  $\mathbf{H}$  和  $\mathbf{U}_p$  是可学习参数矩阵,  $\mathbf{L}_d^p$  是下拉普拉斯矩阵,  $\mathbf{L}_u^p$  是上拉普拉斯矩阵,  $\mathbf{D}_p$  是残差权重矩阵,  $J_d$  和  $J_u$  是滤波器阶数,  $P(\cdot)$  是映射,  $\sigma(\cdot)$  是激活函数。图 9 为单纯形池化层和 (Jumping Knowledge, JK) 分层架构示例图, 将单纯形池化层应用在 JK 分层架构中, 该架构聚合单纯形池化层产生的中间嵌入以得到最终输出。

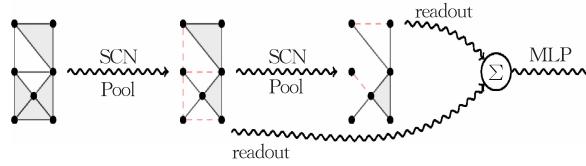


图 9 单纯形池化层和 JK 分层架构示例<sup>[61]</sup>

针对现有的图池化方法在处理高维数据时的局限性, McGuire 等人<sup>[46]</sup>提出 NervePool 模型。该模型通过学习和优化顶点聚类, 将传统的 GNN 池化方法扩展到高维度的单纯形上, 在保持网络拓扑特征的同时, 有效降低了计算复杂度, 减少了模型过拟合的风险。NervePool 的另一个优势在于模型的灵活性和可学习性, 其能够根据任务需求动态调整池化策略, 适用于分类和链路预测等多种深度学习任务。

从上述分析可知, SCNP 和 NeverPool 均在模型中引入了池化层, 目的是降低计算复杂度, 减少过拟合风险, 两者的主要区别在于池化操作的设计方法不同。

在单纯形卷积神经网络中引入池化操作, 可以有效降低单纯形的特征维度, 提高模型的表达能力和计算效率。然而, 池化的难点在于如何设计合理的池化策略, 既能保留单纯形的结构信息和重要特征, 又能避免池化过程中产生的信息丢失和过拟合问题。

#### (4) 模型面临的挑战

基于空域的单纯形卷积神经网络通过直接聚合每个单纯形的邻域特征进行卷积操作, 具有局部不变性和灵活性等特点。然而, 由于空域卷积操作依赖消息传递机制来更新特征表示, 如何高效地在单纯形结构中传递信息, 同时避免信息丢失, 是未来研究的一个难点。此外, 由于单纯形的邻域结构较为复杂, 涉及不同维度的单纯形。因此, 如何设计合适的聚合函数以捕捉多维单纯形的邻域信息也是一

个挑战。

## 4.2 典型单纯形神经网络

除了基于谱域和空域的单纯形卷积神经网络外, 学者们还引入代数拓扑的知识, 提出许多经典的单纯形神经网络模型。

### 4.2.1 单纯形映射神经网络

以往的单纯形神经网络主要是根据卷积操作的不同来设计网络模型。最近学者们充分利用凸包、凸多面体、重心细分和超球面投影等代数拓扑知识, 将单纯形映射与神经网络相结合, 提出了单纯形映射神经网络。

为解决神经网络在面对对抗性示例时鲁棒性较低的问题, Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[48]</sup>提出一种基于代数拓扑的单纯形映射神经网络 SMNNs。该网络通过引入重心细分技术, 有效定义了决策边界, 从而增强了网络抵御对抗性攻击的能力。然而, 由于重心细分的迭代方法会导致模型存储和计算成本呈指数增长, Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[62]</sup>进一步优化了 SMNNs。他们对凸多面体进行分解, 减少了网络中的单纯形数量, 降低了计算和存储需求, 有效提高了网络的计算效率和鲁棒性。

Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[47]</sup>提出了单纯形映射神经网络 SMNNs, 其利用基于超球面投影的方法替代了传统的凸多面体的构建, 并首次引入了模型的可解释性。SMNNs 的另一个优势是采用了基于梯度下降的权重近似方法, 使得模型在训练过程中能够有效优化权重, 从而显著降低了模型的计算复杂度。SMNNs 表示为

$$N_{\varphi U}(x) = \max_{h \in 0, k} \text{softmax}(\mathbf{M} \cdot \xi(x)) \quad (29)$$

其中,  $\mathbf{M}$  是权重矩阵,  $\xi(x)$  表示点  $x$  相对于  $n$ -单纯形的重心坐标。

与此同时, 针对 SMNNs 泛化能力不足以及需要构建输入数据凸多面体的问题, Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[49]</sup>提出一种基于给定数据集支持子集的训练方法, 并采用超球面投影的方法替代了凸多面体的构建。

从上述分析可知, 不同于 Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[62]</sup>使用凸多面体方法构建单纯形映射神经网络, 文献[47]和文献[49]中均使用了超球面投影的方法替代了凸多面体的构建。此外, 文献[48]主要探讨了如何通过单纯形映射和重心细分方法来提升模型的鲁棒性。

### 4.2.2 对称单纯形神经网络

目前, 部分单纯形神经网络模型正逐步向几何

域和拓扑域的计算靠拢。这些模型不仅局限于对单纯形特征的聚合,还充分利用了几何形状与拓扑结构中的多维信息,从而更全面地捕捉数据中的高阶关系。

为提高模型的分类准确性,一些研究引入了形态学计算作为神经网络的第一层。然而,这些形态学操作在训练过程中是预先定义的,无法进行训练调整。为了解决这一问题,Rodriguez 等人<sup>[50]</sup>提出对称单纯形神经网络 RSSNN,通过引入可训练的对称单纯形函数替代传统神经网络中的形态学操作,以提高模型分类精度和计算效率。RSSNN 还利用对称性和分段线性函数的特性,使得模型在保持非线性计算能力的同时,简化了训练过程。

#### 4.2.3 单纯复形表示学习

由于单纯复形中高阶关系的复杂性,其表示学习尚未得到充分研究。为了解决这一问题,Hajij 等人<sup>[3]</sup>提出了邻接消息传递(Adjacency Message Passing Scheme,AMPS)和共邻接消息传递(Co-adjacency Message Passing Scheme,CMPS)方法,以实现单纯复形的表示学习。这两种方法均通过迭代应用消息传递函数来更新单纯复形中子单纯形的特征表示。具体来说,AMPS 利用邻接矩阵进行消息传递,而 CMPS 则使用共邻接矩阵进行消息传递。基于上述方法,Hajij 提出了单纯复形自编码器(Simplicial Complex Autoencoder,SCA)。SCA 由编码器和解码器组成,其中编码器将输入的单纯复形映射到低维表示,解码器则将低维表示重构为原

始的单纯复形。

Madhu 等人<sup>[43]</sup>提出了一种名为 TopoSRL 的自监督学习方法,用于学习单纯复形的结构表示。该方法通过对输入单纯复形进行数据增强,学习生成数据与原始数据之间的表示。此外,TopoSRL 通过最小化损失函数,最大化增强单纯复形表示和原始单纯复形中高阶关系之间的互信息。与现有图自监督学习方法相比,TopoSRL 通过保留单纯复形的内在结构和关系,生成增强视图,克服了传统方法仅关注节点间成对关系的局限性。

#### 4.2.4 高阶跳跃网络

Hajij 等人<sup>[51]</sup>将跳跃连接神经网络思想推广到单纯复形上,提出了 HSNs 模型。HSNs 通过引入高阶单纯形,将输入信号通过两个不同的前馈路径进行传递。其中一个路径经过高阶单纯形进行传递,另一个路径则直接进行传递。这种方法可以将不同路径的输出进行组合,使网络学习到更丰富的拓扑表示,并在不同维度的复形网络中进行消息传递和聚合。

从上述分析可知,SCA 和 TopoSRL 都是用于学习单纯复形表示的神经网络模型。RSSNN 在单纯形神经网络中引入对称单纯形层,巧妙地解决了部分模型由于形态学计算作为神经网络层而无法进行训练选择的问题。HSNs 通过引入跳跃连接,更加有效地学习和捕捉网络的深层拓扑表示。

表 3 从模型类别、算法描述、性能劣势和应用场景 4 方面对现有的单纯形神经网络进行了总结。

表 3 单纯形神经网络总结

类别	模型	算法描述	性能劣势	应用场景
谱域 单纯形 卷积	SNNs <sup>[2]</sup>	利用单纯复形上的傅里叶变化和卷积提取数据特征	无法在单纯形上、下邻域内独立进行卷积	缺失数据插补
	SCNN <sup>[30]</sup>	利用单纯形卷积和非线性函数学习数据特征	对于维度大于 2 的单纯形,模型性能优势不明显	缺失数据插补
	S2CCNN <sup>[4]</sup>	通过定义单纯形卷积层,处理高维数据	计算复杂度高,难以处理大规模网络结构	图分类 单纯形预测
	BScNets <sup>[31]</sup>	通过自适应霍奇拉普拉斯块学习不同维度的单纯形交互	只适用于链路预测领域	链路预测
	SCCNN <sup>[33]</sup>	利用单纯形耦合关系,实现多尺度耦合学习	模型训练耗时	单纯形预测 轨迹预测
	Dist2Cycle <sup>[32]</sup>	利用移位反转的霍奇拉普拉斯,计算单纯形到最近同调生成元的距离,实现同调信息的定位	无法准确捕捉和表达复杂的拓扑特征	同调定位
	ISMnet <sup>[34]</sup>	通过层次化二分图和高阶拉普拉斯矩阵,识别关键单纯形	难以扩展到大规模数据	识别有影响力 单纯形
	HiGCN <sup>[35]</sup>	使用高阶图卷积网络和花瓣拉普拉斯矩阵来增强信息传递和特征提取	处理具有较少高阶结构的数据集时,节点分类性能下降	图分类 节点分类
	SCHash <sup>[36]</sup>	通过随机哈希技术高效编码不同层次的单纯复形表示	对超参数敏感,需要调整 SimHash 函数的数量和迭代次数来优化性能	图分类
	SaNN <sup>[37]</sup>	结合 MLP 和边界矩阵来学习单纯复形的嵌入表示	处理具有复杂结构的拓扑数据时,模型性能下降	轨迹预测

(续表)

类别	模型	算法描述	性能劣势	应用场景
空域 单纯形 卷积	SMPNN <sup>[39]</sup>	利用信息传递和更新捕捉分子结构信息	无法充分捕捉和利用分子结构中复杂的非局部依赖关系	化学性质预测
	EMPSNs <sup>[40]</sup>	通过学习在不同维度的单纯形之间的信息传递,处理单纯形结构数据	模型效率低	化学性质预测
	SNN-PDE <sup>[41]</sup>	利用单纯形神经网络和霍奇理论来学习动态偏微分方程	没有多通道单纯形卷积编码器时,模型的平均相对误差会显著增加	预测任务
	Topo-MLP <sup>[42]</sup>	使用对比损失函数编码单纯形结构	高阶邻域对比损失函数只适应特定数据集或任务	节点分类
	SAT <sup>[44]</sup>	引入注意力机制来衡量相邻单纯形之间的交互	模型缺乏泛化能力和可解释性	图分类
	SANs <sup>[45]</sup>	通过结合单纯形滤波器和注意力机制来实现特征提取和信息传递	大量的可学习参数,可能导致模型过拟合	轨迹分类
	SGAT <sup>[5]</sup>	引入多头注意力机制学习节点和单纯复形的特征表示	面对大规模数据集时,模型计算复杂度高	节点分类
	SCNPs <sup>[61]</sup>	引入池化层和池化策略来处理单纯复形数据	对于特定的任务和数据集,需要选择不同的池化策略	图分类
单纯形 映射 神经 网络	NervePool <sup>[46]</sup>	引入池化层降低数据复杂度	计算复杂度高	—
	SMNNs <sup>[48]</sup>	利用单纯形复形和 Delaunay 复形来增强对抗性样本的鲁棒性	高度依赖输入数据的特性	—
	SMNNs <sup>[49]</sup>	超球面投影代替凸多面体构建	梯度下降法会导致模型陷入局部最优解	二元分类
对称单纯形 神经 网络	SMNNs <sup>[62]</sup>	基于单纯形映射构建神经网络	模型稳定性较差	分类任务
	RSSNN <sup>[50]</sup>	利用对称单纯形函数进行前向传播和反向传播	对称单纯形函数的计算依赖于输入向量的排序结果,影响模型泛化能力	图分类
	SCA <sup>[8]</sup>	通过几何消息传递方案来学习单纯复形的嵌入表示	计算复杂度高	图分类
单纯复形 表示学习	HSNs <sup>[51]</sup>	通过在单纯形复中传递信号,利用高阶结构实现跳跃连接	难适用于大规模图	链路预测
高阶跳跃 网络				

## 5 单纯形神经网络的应用与性能分析

尽管单纯形神经网络的研究起步较晚,但其已广泛应用于现实生活的各个领域。接下来,本节将深入探讨此类模型在不同领域的实际应用,并分析其在泛化能力、鲁棒性等性能指标上的表现。

### 5.1 应用

#### 5.1.1 缺失数据插补

在现实世界中,数据采集过程中常常由于信息遗漏、采集设备故障、传输媒体故障或属性值缺失等原因,导致数据不完整。这种数据缺失问题会对数据挖掘模型的准确性和稳定性产生负面影响,进而

导致模型输出结果不准确。因此,缺失数据插补(Missing Data Imputation, MDI)成为统计学和机器学习中的关键问题。近年来,GNN 被发现是解决数据缺失插补任务的强大工具<sup>[63]</sup>,通过将这一方法扩展至单纯形神经网络,可以进一步评估模型执行 MDI 任务时的性能表现。

在语义学者开放研究语料库中,通过在图上执行随机游走对合著复形(Coauthorship Complex, CC)进行采样。在采样过程中,一篇有  $k+1$  名作者的论文由  $k$ -单纯形表示,而  $k$ -单纯形的信号则表示该论文的引用次数。最终从语义学者开放研究语料库中提取出两个合著复形,其单纯形的数量如表 4 所示<sup>[2]</sup>。

表 4 单纯复形的每维单纯形的数量<sup>[2]</sup>

维度	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
CC1	352	1474	3285	5019	5559	4547	2732	1175	343	61	5
CC2	1126	5059	11840	18822	21472	17896	10847	4673	1357	238	19

展示了 SNN、SCNN、SAT 和 SAN 在表 4 所示的 CC1 数据集上的实验性能。可以明显看出,SCNN 的性能优于 SNN,这主要是因为 SCNN 的滤波器能够在单纯形的上、下邻域内独立执行卷积操作,从而增强了模型的表达能力。此外,表 5 显示 SAN 模型在单纯形的不同维度和不同缺失数据比例下均取得

了最佳性能,说明在单纯形神经网络中引入注意力机制对于提高模型性能至关重要。然而,与 SNN 和 SCNN 的实验结果相比,SAT 模型的性能最差,原因是 SAT 在单纯形的上、下邻域之间共享注意力机制,导致模型无法充分区分上、下邻域的不同影响,进而影响了模型性能。

表 5 缺失数据插补不同模型结果 (Accuracy  $\pm$  standard)<sup>[45]</sup>

%Miss/Order $N_k$	Method	模型类别	0	1	2	3	4	5
			352	1474	3285	5019	5559	4547
10%	SNN	谱域	91 $\pm$ 0.3	91 $\pm$ 0.2	91 $\pm$ 0.2	91 $\pm$ 0.2	91 $\pm$ 0.2	91 $\pm$ 0.4
	SCNN	谱域	91 $\pm$ 0.4	91 $\pm$ 0.2				
	SAT	空域	18 $\pm$ 0.0	31 $\pm$ 0.2	28 $\pm$ 0.1	34 $\pm$ 0.1	53 $\pm$ 0.1	55 $\pm$ 0.1
	SAN	空域	91 $\pm$ 0.4	95 $\pm$ 1.9	95 $\pm$ 1.9	97 $\pm$ 1.6	98 $\pm$ 0.9	98 $\pm$ 0.7
20%	SNN	—	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.5
	SCNN	—	81 $\pm$ 0.7	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	83 $\pm$ 0.3
	SAT	—	18 $\pm$ 0.0	30 $\pm$ 0.0	29 $\pm$ 0.1	35 $\pm$ 0.1	50 $\pm$ 0.1	58 $\pm$ 0.1
	SAN	—	82 $\pm$ 0.8	91 $\pm$ 2.4	82 $\pm$ 0.8	96 $\pm$ 0.4	96 $\pm$ 1.3	97 $\pm$ 0.9
30%	SNN	—	72 $\pm$ 0.6	73 $\pm$ 0.4	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	73 $\pm$ 0.5
	SCNN	—	72 $\pm$ 0.5	73 $\pm$ 0.4	81 $\pm$ 0.7	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	74 $\pm$ 0.3
	SAT	—	19 $\pm$ 0.0	33 $\pm$ 0.1	25 $\pm$ 0.1	33 $\pm$ 0.0	47 $\pm$ 0.1	53 $\pm$ 0.1
	SAN	—	75 $\pm$ 2.1	89 $\pm$ 2.1	82 $\pm$ 0.8	94 $\pm$ 0.4	95 $\pm$ 0.5	96 $\pm$ 0.5
40%	SNN	—	63 $\pm$ 0.7	64 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	65 $\pm$ 0.3
	SCNN	—	63 $\pm$ 0.6	64 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	65 $\pm$ 0.2
	SAT	—	20 $\pm$ 0.0	29 $\pm$ 0.0	22 $\pm$ 0.0	43 $\pm$ 0.1	51 $\pm$ 0.1	50 $\pm$ 0.1
	SAN	—	67 $\pm$ 1.9	85 $\pm$ 2.8	82 $\pm$ 0.8	91 $\pm$ 0.9	93 $\pm$ 1.1	95 $\pm$ 1.6
50%	SNN	—	54 $\pm$ 0.7	55 $\pm$ 0.5	81 $\pm$ 0.6	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.6	56 $\pm$ 0.3
	SCNN	—	54 $\pm$ 0.6	55 $\pm$ 0.4	81 $\pm$ 0.7	82 $\pm$ 0.3	81 $\pm$ 0.7	56 $\pm$ 0.3
	SAT	—	19 $\pm$ 0.0	30 $\pm$ 0.1	22 $\pm$ 0.0	32 $\pm$ 0.1	43 $\pm$ 0.0	48 $\pm$ 0.1
	SAN	—	61 $\pm$ 1.9	79 $\pm$ 4.3	82 $\pm$ 0.8	88 $\pm$ 1.5	92 $\pm$ 0.7	94 $\pm$ 1.1

### 5.1.2 分类任务

#### (1) 图分类

一个典型的分类任务是图分类。对于给定的图,通过学习图中的特征模式和类别标签之间的映射关系,可以将图归类到预定义的类别中。S2CCNN 将图像编码为单纯 2-复形,并通过对单纯复形执行卷积操作以提取图像特征。SAT 则从 MNIST 数据库中获取包含手写数字 0~9 的图像,并将其转化为超像素图。而超像素节点则通过区域邻接图与直接相邻的节点连接,形成最终的图表示以进行图分类。SCNPs 利用单纯形池化层提取图数据特征,并通过堆叠多个 SCN 层实现图分类任务。RSSNN 将输入图像传递至对称单纯形层,通过结合对称单纯形 SS 层与全连接层,利用差分操

作和 softmax 激活函数完成图分类任务。HiGCN 通过引入多层高阶图卷积,有效提取节点特征,显著提高了图分类性能。最后,SCHash 使用图神经网络框架,进一步结合局部敏感哈希 LSH 技术,实现图嵌入。

图分类数据集主要包括 MNIST<sup>[64]</sup>、TUDataset<sup>[64]</sup>、GTSRB<sup>[65]</sup>、网格数据集<sup>[66]</sup>、PROTEINS<sup>[67]</sup>、MUTAG、PTC<sup>[68]</sup>、IMDB-B<sup>[69]</sup> 和 IMDB-M<sup>[69]</sup> 等,具体描述如表 6 所示。表 7 记录了图神经网络与单纯形神经网络在图分类任务中的对比结果(结果引自 SAT<sup>[44]</sup>)。实验结果显示,SNNs、S2CCNN 和 SAT 模型的性能分别比 GCN 提高了 20.51%、25.41% 和 29.34%;S2CCNN 和 SAT 模型的性能分别比 GAT 提高了 0.11% 和 4.04%。

表 6 图分类任务常用数据集

数据集	说明
MNIST	MNIST 数据库由训练集中的六万张手写数字图像和测试集中的一万张图像组成,SAT 模型用到了 0~9 的手写数字图。
TUDataset	包含 www.graphlearning.io 上提供的 120 多个图数据集,SCNPs 模型中用到了 DD、PROTEINS、MSRC21 和 NCI109 四种数据集。
GTSRB	德国交通标志识别基准数据集包含 43 个类别的物理交通标志。
网格数据集	6 个类别是 60 个网格图像,包含猫、大象、脸部、头部、马和狮子各 10 个网格图像。
PROTEINS	PROTEINS 是蛋白质结构图,一个节点代表一个氨基酸,如果两个节点之间的距离小于 6A,则构成边。其中,图的标签代表蛋白质是酶还是非酶。
MUTAG	MUTAG 数据集包含 188 个硝基化合物,标签是判断化合物是芳香族还是杂芳族。
PTC	PTC 全称是预测毒理学挑战,是 344 种化合物的集合,以图表形式表示,报告对大鼠的致癌性。
IMDB-B	IMDB-B 是电影协作数据集,由 1000 名在 IMDB 中扮演电影角色的演员组成。在每个图中,节点代表演员,如果它们出现在同一部电影中,则它们间有一条边。这些图来源于动作和浪漫类型。
IMDB-M	IMDB-M 是一个关系数据集,由 1000 名在 IMDB 电影中扮演角色的演员组成。一个节点表示一个演员,当两个节点出现在同一部电影中时,则用边连接它们。其中,边来自三种不同的类型:喜剧、浪漫和科幻。
AIDS	AIDS 包含 2000 种分子化合物,每一种都以图表的形式表示。
PC-3	PC-3 由 27509 种具有抗癌活性的化合物组成。
BZR	BZR 包含 405 个苯二氮卓受体配体,每个配体都以图表形式表示。

通过以上分析,可以看出,单纯形神经网络在图分类任务中相较于传统的图表示学习方法取得了明显的性能提升。此外,从表 7 可以看出,在图神经网络中,GAT 的模型性能最佳,而在单纯形神经网络中,SAT 的模型性能表现最为突出。这进一步表明,与基于谱域的卷积神经网络相比,注意力机制能够有效捕捉网络特征,从而显著提升模型性能。

表 7 图分类在不同模型上的实验结果<sup>[44]</sup>

模型类别	模型	参数	准确率±标准差
谱域	GCN	10 634	63. 65±1. 82
空域	GAT	9 862	88. 95±0. 99
谱域	SNNs	10 612	84. 16±1. 23
谱域	S2CNN	10 315	89. 06±0. 47
空域	SAT	10 186	92. 99±0. 71

## (2) 节点分类

另一个常见的基准任务是节点分类。SGAT 通过多层图注意力机制进行消息传递和特征聚合,以获得节点特征表示,进而预测节点类别。在节点分类任务中,HiGCN 引入多层高阶图卷积层,以提取更丰富的节点特征表示,从而更有效地利用节点信息。Topo-MLP 不仅使用前馈传播算法计算节点的隐藏表示,还利用高阶邻域损失函数优化节点的分类准确性。TopoSRL 则基于自监督学习方法预测节点分类性能。

表 8 列出了常用的节点分类数据集。通过分析表 9 的实验结果,可以明显看出,SGAT 模型在节点分类任务上表现最佳,且 GAT 模型的性能显著优于 GCN。这表明,单纯形神经网络能够充分提取数

表 8 节点分类任务常用数据集

数据集	节点	边	类别	特征
DBLP	18 405	67 946	4	334
ACM	8 994	25 922	3	1 902
IMDB	12 772	37 288	3	1 256
Cora	2 708	5 429	7	1 433
Citeseer	3 327	4 732	6	3 703
Pubmed	19 717	44 338	3	500
Contact-high-school	327	5 818	9	—
Contact-primary-school	242	8 317	11	—
senate-bills	294	29 517	2	—

表 10 轨迹分类在不同模型上的实验结果(Accuracy±standard)<sup>[45]</sup>

模型类别	模型	激活函数	Synthetic Flow/%	Ocean Drifters/%
空域 (消息传递)	MPSNs	Id	92. 6±3. 0	73. 0±2. 7
		ReLU	50. 0±0. 0	46. 5±5. 7
		Tanh	95. 2±1. 8	72. 5±0. 0
谱域 (霍奇拉普拉斯)	SCNN	Id	66. 5±0. 16	98. 1±0. 01
		ReLU	100±0. 0	97. 0±0. 01
		Tanh	67. 2±0. 06	97. 0±0. 16

表 9 节点分类在不同模型上的实验结果<sup>[5]</sup>

数据集	度量	GCN(谱域)	GAT(空域)	SGAT(空域)
DBLP	Macro-F1	87. 65±0. 29	91. 69±0. 27	93. 80±0. 20
	Micro-F1	88. 71±2. 74	92. 65±0. 25	94. 58±0. 20
ACM	Micro-F1	91. 46±0. 48	92. 16±0. 32	92. 41±0. 36
	Macro-F1	91. 33±0. 47	92. 06±0. 33	92. 35±0. 36
IMDB	Macro-F1	56. 72±0. 49	57. 32±0. 88	59. 97±0. 41
	Micro-F1	58. 31±0. 51	58. 75±0. 98	62. 51±0. 54

据中的多元高阶关系,有效弥补了传统图神经网络在挖掘高阶拓扑信息方面的不足。此外,注意力机制显著提升了模型的分类准确性。

## (3) 轨迹分类

单纯形神经网络在轨迹分类任务中同样展现出巨大的应用潜力。将 SAT 应用于轨迹分类任务时,首先在单位正方形内采样 1000 个点,并对这些点进行 Delauney 三角剖分以生成数据集;随后,从左上角选取起点、右下角选取终点,生成不同类型的轨迹;接着,使用四层的 SAT 模型对生成的数据集进行训练,经过平均池化操作后,将输出结果送入多层感知器进行轨迹分类。在将 MPSNs 应用于轨迹分类任务时,可以通过合成单纯复形轨迹和海洋漂流者轨迹两类数据集评估模型性能。对于合成单纯复形轨迹,轨迹被表示为单纯复形上的信号,并依据路径的起始位置(左下角或右上角)被划分为两个不同的类别。对于海洋漂流者的真实世界轨迹,通过将其离散化为一个单纯复形,以表征马达加斯加岛周围的流动,从而区分顺时针和逆时针的流动模式。Cinque 等人<sup>[61]</sup>利用图形表示方法将轨迹数据转化为图形数据,提出了用于轨迹分类任务的 SCNP 模型。SANs 通过结合单纯形操作与注意力机制,实现对轨迹数据的有效分类。

表 10 给出了 SANs 与其他单纯形神经网络在轨迹分类任务中的对比结果,数据来源于文献<sup>[45]</sup>。实验结果表明,在合成流数据集上,SANs 模型的性能在三种激活函数下均达到了 100% 的准确率。在真实世界数据集上,SANs 同样取得了最好的实验结果,进一步证明了其在轨迹分类任务中的优越性。

(续 表)

模型类别	模型	激活函数	Synthetic Flow/%	Ocean Drifters/%
空域 (注意力机制)	SAT	Id	99.7±0.0	97.0±0.01
		ReLU	100±0.0	95.0±0.00
		Tanh	100±0.0	95.0±0.01
	SANs	Id	100±0.0	99.0±0.01
		ReLU	100±0.0	98.5±0.01
		Tanh	100±0.0	98.5±0.01

以及模型引入注意力机制的有效性。

### 5.1.3 预测任务

#### (1) 链路预测

HSNs 将输入信号经过一系列线性变换和非线性激活函数处理后, 与高阶跳跃连接的结果进行拼接。这种方法能够在模型中引入高阶结构信息, 从而提升链路预测性能。BScNets 是首次用于链路预测的单纯形神经网络, 其将网络表示为单纯复形。在进行链路预测时, BScNets 利用已知的网络结构信息作为训练数据, 通过学习网络的拓扑特征和节点属性, 对未知节点间的连接关系进行预测。

表 11 列出了常用的链路预测数据集。表 12 展示了 BScNets 与其他图神经网络模型在链路预测任务中的实验性能。结果表明, BScNets 在所有数据集上均实现了最佳性能, 表明其能够充分利用网

络中的高阶信息, 从而在链路预测中实现更为准确的结果。对于传统的图神经网络, GAT 性能优于 GCN, 这突显了在神经网络中引入注意力机制的重要性。此外, 对于 HGCN 而言, 除 Cora 数据集外, 模型在其他数据集上的性能仅次于 BScNets, 这证明双曲卷积能够更好地捕捉数据中的层级结构。

表 11 链路预测常用数据集

数据集	节点	边	特征
Cora	2708	5429	1433
PubMed	19717	44338	500
Meetings	101	256	4
Phone Calls	100	124	4
Airport	3188	18631	4
Disease	1044	1043	1000
High School	773	6342	4
Staff Community	55	441	4

表 12 链路预测在不同模型上的实验结果 (Accuracy±standard)<sup>[31]</sup>

类别	模型	Cora	PubMed	Mettings	Phone Calls	Airport	Disease
—	MLP	83.15±0.51	84.10±0.97	63.20±6.22	60.10±6.72	89.15±0.52	72.62±0.61
谱域	HNN <sup>[70]</sup>	89.00±0.10	94.87±0.11	71.00±3.28	60.90±4.25	90.78±0.22	75.10±0.35
谱域	GCN	90.42±0.28	91.11±0.55	72.08±4.19	61.50±5.80	89.27±0.42	67.40±0.56
空域	GAT	93.89±0.13	91.22±0.12	74.00±4.68	63.40±5.20	90.55±0.37	69.99±0.32
空域	SAGE	86.24±0.65	85.96±1.16	72.30±5.25	62.07±5.49	90.47±0.59	65.91±0.33
谱域	SGC	91.67±0.20	94.10±0.20	73.38±3.49	63.80±5.71	90.01±0.32	65.21±0.23
谱域	SEAL	92.55±0.50	92.42±0.12	71.09±7.50	62.96±4.17	95.16±0.39	85.23±0.79
谱域	HGCN	93.00±0.45	96.29±0.18	83.20±4.15	70.20±3.77	96.40±0.19	90.80±0.30
空域	PEGN	93.13±0.50	95.82±0.20	74.17±5.00	65.23±4.15	95.46±0.71	83.61±1.26
空域	TLC-GNN	94.22±0.78	97.03±0.10	73.20±5.32	66.17±3.90	96.60±0.69	86.19±1.23
谱域	BScNets	94.90±0.70	97.55±0.12	88.05±5.51	79.43±6.04	97.57±0.67	98.60±0.58

#### (2) 单纯形预测

SCCNN 将图上的链路预测任务扩展到单纯形数据上, 提出了一种用于单纯形预测的神经网络模型。TopoSRL 则通过训练编码器来实现单纯形预测任务。对于给定的开放单纯形, TopoSRL 首先使用编码器将其表示为一个向量, 然后利用该向量来预测开放单纯形的闭包, 即在输入数据中与该开放单纯形相关的其他单纯形。

表 13 展示了 GNN 与其他单纯形神经网络模型在单纯形预测任务中的实验结果。可以看出, SCoNe、SCNN、S2CCNN 和 SCCNN 在单纯形预测

任务上表现优异。特别地, 与传统的 GNN 相比, SCCNN 在预测 2-simplex 和 3-simplex 时, 性能分别提升了 4.5% 和 2.8%。

表 13 单纯形预测在不同模型上的实验结果 (Accuracy±standard)<sup>[33]</sup>

模型类别	模型	2-simplex	3-simplex
谱域(图拉普拉斯)	GNN	93.9±1.0	96.6±0.5
	SNN	92.0±1.8	95.1±1.2
	SCoNe	95.6±1.3	98.1±0.5
谱域(霍奇拉普拉斯)	SCNN	96.95±1.5	98.3±0.4
	S2CCNN	98.0±0.5	98.5±0.5
	SCCNN	98.4±0.5	99.4±0.3

### (3) 轨迹预测

SCCNN 通过对轨迹的边特征进行卷积操作, 学习轨迹的特征表示, 以实现轨迹预测任务。SCoNe 利用霍奇拉普拉斯算子对 2-维单纯复形上的轨迹进行建模, 该模型在全球漂流器数据集和柏林地图数据集上均取得了较好的预测准确性。SaNN 使用掩码函数提取相邻节点的嵌入, 并利用解码器进行轨迹预测。TopoSRL 将轨迹数据转换为单纯复形, 其中每个节点代表轨迹中的一个位置点。对于给定的轨迹序列, 编码器提取各节点的特征表示, 并通过预测下一个节点的特征表示以实现对下一个位置点的预测。

轨迹预测任务的常用数据集包括: Ocean Drifters 和 Synthetic。通过分析表 14 的实验结果可知, 在 Ocean Drifters 数据集上, TopoSRL 模型的性能相比于 Projection 提高了 14.85%, 这表明基于谱域的单纯形神经网络在轨迹预测任务上的优越性。

表 14 轨迹预测在不同模型上的实验结果  
(F1 scores  $\pm$  standard)<sup>[43]</sup>

模型类别	模型	Ocean Drifters	Synthetic
—	Projection	27.15 $\pm$ 0.0	52.0 $\pm$ 0.0
谱域	SCoNe	30.0 $\pm$ 0.6	55.4 $\pm$ 1.1
谱域	SCNN	28.5 $\pm$ 0.6	50.5 $\pm$ 1.0
其他	TopoSRL	42.0 $\pm$ 3.0	50.0 $\pm$ 1.0

### (4) 化学性质预测

EMPSNs 通过在抽象单纯复形上学习消息传递机制, 有效捕捉分子间的几何拓扑关系。与传统图神经网络相比, EMPSNs 能够在消息传递过程中充分利用高维单纯形结构, 从而更好地建模分子系统。SMPNN 则是另一种用于化学性质预测的单纯形神经网络模型, 其已在拓扑和几何两类化学数据

集上进行了实验。在拓扑数据集上, SMPNN 通过在分子的拓扑结构上执行消息传递, 有效捕捉分子间的相互作用。针对几何数据, SMPNN 以分子中各原子的笛卡尔坐标作为输入, 并通过模型输出各原子贡献的总和, 实现对化学性质的精确预测。

表 15 展示了 SMPNN 与 GCN 等传统图神经网络在化学性质预测任务中的实验结果。可以看出, SMPNN 在所有数据集上均实现了最先进的性能。整体而言, MPNN、D-MPNN 和 SMPNN 的实验结果优于 GCN 和 GAT, 这表明基于消息传递的神经网络架构在捕捉网络拓扑结构方面具有更强的表现力。此外, 相较于传统图神经网络, 单纯形神经网络能够更有效地挖掘数据中的高阶交互信息。

表 15 化学性质预测在不同模型上的实验结果<sup>[39]</sup>

(单位: log Mol/L)

Dataset	GCN (谱域)	GAT (空域)	MNPP (空域)	D-MPNN (空域)	SMPNN (空域)
Delaney	0.878	1.116	0.903	0.725	0.709
Huuskonen	0.917	0.967	0.723	0.714	0.687
OCHEM	0.952	0.788	0.675	0.693	0.508
Tang	0.719	1.027	0.704	0.669	0.566
Cui	1.072	1.017	0.983	1.023	0.957

### 5.1.4 识别有影响力单纯形

ISMnet 使用传染病传播模型生成真实的单纯形影响力得分作为标签, 并与传统的度中心性、接近度中心性等指标比较, 评估模型在识别有影响力单纯形方面的性能。表 16 展示了 ISMnet 模型与核心中心性(CC)、度中心性(DC)、H-指标(HI)、邻居度(ND)和广义度(HD)指标在识别有影响力单纯形任务时的实验结果, 可以发现 ISMnet 在识别单纯形影响力方面表现出了非常显著的效果。

表 16 Kendall 排名相关性在有影响力 2-单纯形挖掘任务中的表现<sup>[34]</sup>

SCs	DC	ND	HD	CC	HI	NI	ISMnet
Geology	0.142	0.141	0.237	0.151	0.149	0.274	0.463
History	-0.213	-0.239	-0.185	-0.305	-0.284	0.599	0.672
DBLP	0.084	0.065	0.091	0.038	0.055	0.204	0.352

## 5.2 性能分析

5.1 节系统性地总结了现有单纯形神经网络的应用, 发现其主要集中在图像分类、节点分类、链路预测和轨迹预测等领域。通过梳理这些应用中所涉及的数据集及其模型性能, 旨在帮助读者更好地理解单纯形神经网络未来的发展潜力。下文将进一步探讨单纯形神经网络的泛化能力、鲁棒性及其性能评估指标等, 以全面评估该类模型的实用性与可靠性。

### 5.2.1 泛化能力与鲁棒性分析

单纯形神经网络通过利用正则化和数据增强等

技术, 能够有效提升模型在图像、文本和网络数据等数据集上的泛化能力和鲁棒性。具体来说: (1) 在图像数据上, 单纯形神经网络利用旋转、缩放和翻转等数据增强技术, 可以丰富训练数据的多样性, 进而提高模型的泛化能力。同时, 通过对抗训练生成对抗样本, 可以增强模型在应对图像数据扰动时的鲁棒性, 提升模型对噪声或恶意攻击的抵抗力; (2) 在文本数据上, 通过对原始文本进行随机扰动、变换或添加噪声等操作, 可以增加训练数据的多样性, 有助于提高模型的泛化能力和鲁棒性; (3) 在网络数据上,

单纯形神经网络能够通过构建多维高阶几何结构来捕捉网络中的复杂关系,并通过节点扰动、边扰动和子图采样等数据技术,可以提升模型在不同网络结构上的泛化能力。

此外,以 5.1.1 小节的缺失数据插补实验为例,从表 5 的实验结果可以看出,随着缺失数据比例的增加,单纯形神经网络的鲁棒性逐渐减弱。这说明,当缺失数据较多时,尽管单纯形神经网络在一定程度上能够应对数据不完整的情况,但其表现仍受到缺失数据的显著影响,使得模型的鲁棒性有所下降。

### 5.2.2 应用优势

与图神经网络仅能处理节点间的成对关系不同,单纯形神经网络因其能够高效处理多元高阶数据而备受关注。因此,未来的研究可以考虑探索单纯形神经网络在生物信息学和社交媒体分析等领域的应用潜力。例如,在生物基因分析中,单纯形神经网络能够更好地捕捉基因间的复杂多元关系,为疾病诊断和治疗提供更精准的信息;在蛋白质结构预测中,单纯形神经网络可以对蛋白质序列和结构进行更准确的建模和预测,有助于加速新药研发和生物医学工程的发展等;在社交媒体分析领域,单纯形神经网络能够有效处理复杂的社交网络结构,深入解析用户之间的互动关系,增强对用户行为与社交动

态的理解。此外,单纯形神经网络在个性化推荐系统中也表现出强大的潜力,它可以更精准地捕捉用户偏好,提升推荐质量,从而增加用户满意度和黏性。

### 5.2.3 训练与优化

单纯形神经网络可以通过特征选择、数据预处理、正则化技术、早停策略和超参数调优等多种方法来提升模型训练效果。具体而言:(1)特征选择:在训练前,通过递归特征消除和 L1 正则化等算法减少特征维度,筛选出对模型最重要的特征,简化模型输入;(2)数据预处理:对数据进行去噪、标准化和归一化处理等,确保数据的一致性和有效性,以降低模型在处理数据时的计算负担;(3)正则化技术:通过 L2 正则化和 dropout 等方法防止模型过拟合,增强模型对新输入数据的处理能力;(4)早停策略:应用早停策略避免模型过度训练,确保其在验证集上的性能达到最优;(5)超参数调优:使用网格搜索等方法优化超参数,寻找最适合当前任务的模型配置,提升模型的整体性能。

综合运用以上方法,可以有效减少训练过程中不必要的计算开销,提升模型的性能和效率。

### 5.2.4 时间复杂度分析

由于本文涉及的单纯形神经网络模型较多,因此我们从谱域和空域方法中各选择了一个代表性模型,进行时间复杂度分析。相关结果如表 17 所示。

表 17 模型时间复杂度分析

模型	SCCNN(谱域)	SANs(空域)	
参数复杂度	$O(T_d + T_u)$	(30)	
计算复杂度	$O(k(N_k + N_{k+1}) + N_k M_k (T_d + T_u))$	(32) $O(U(J_l^{(u)} + J_l^{(d)}) F_l F_{l+1} + U(2(J_l^{(d)} + J_l^{(u)}) F_l F_{l+1} + 2(J_l^{(d)} + J_l^{(u)}) F_{l+1}))$	(33)

其中,式(30)中,  $T_d$  和  $T_u$  分别表示单纯形的下邻域和上邻域的滤波器阶数,这表示 SCNN 的参数复杂度仅取决于模型的卷积深度。式(31)中,  $J_l^{(d)}$  和  $J_l^{(u)}$  分别表示单纯形的下邻域和上邻域的滤波器阶数,  $F_l$  和  $F_{l+1}$  分别表示  $l$  层和  $l+1$  层的特征数。

通过表 17 不难发现, SANs 的参数复杂度高于 SCNN, 尤其是注意力机制的引入导致了额外的参数学习。特别地,对于两个模型的计算复杂度而言, SCNN 的计算复杂度相对较低,且每个邻域的卷积是独立执行的。而 SANs 模型在处理单纯形的更多邻域或者当网络层数较多时,注意力机制会增加模型计算负担。

综上所述,SCNN 设计相对简单,模型适用于卷积步数少以及单纯形邻域较少的场景,但在处理网络的高阶交互关系时效果不佳。SANs 引入注意力机制,可以动态的学习单纯形邻域的重要性权重,增强了模型对复杂结构的处理能力。然而,由于

SANs 模型计算复杂度过高,导致其难以适用于大规模图。

### 5.2.5 性能评估

单纯形神经网络目前已应用于节点分类、图像分类、缺失数据插补和链路预测等任务中。针对不同的下游任务,我们可以通过多种定量评估指标来评价模型性能。在分类任务中,可以通过准确率和 F1 分数等指标衡量模型在测试数据集上的分类准确性;在图像分类任务中,可以使用准确率和标准差来衡量模型性能;而在链路预测任务中, AUROC 和 AUPRC 等指标被用来评估模型性能。此外,还可以通过采用多种评估数据集以及交叉验证等方法,进一步确保模型的准确性和可靠性。

## 6 未来研究方向

近年来,受图神经网络研究的启发,单纯形数据

与神经网络的结合已经取得了显著成效,但由于单纯形神经网络研究起步晚,因而还存在一些问题亟待解决。

## 6.1 加权单纯形神经网络

目前已有的单纯形神经网络都是基于无权单纯复形数据构建的,然而在实际应用中,单纯复形通常是加权的。例如,在科研合作网络中,合作者团队可以根据他们的合作强度(合作产生了多少篇论文)进行加权。后续研究中,可以考虑利用加权单纯复形结构,构造更符合现实情况的单纯形神经网络,从而更好地挖掘数据间的高阶关系。

## 6.2 深度单纯形神经网络

以往的深度学习模型往往通过堆叠大量网络层以加深网络结构,从而提升模型的表达能力。然而,现有的图神经网络在层数较少时就已经实现了最佳性能,进一步增加卷积层反而会造成模型过平滑。为了解决这一挑战,学者们提出了许多针对深层图神经网络的改进方案,如 ResNet<sup>[71]</sup>、DII-GCN<sup>[72]</sup> 和 DeeperGCN<sup>[73]</sup> 等。近年来,虽然单纯形神经网络模型发展迅速,但大多数研究仍集中于浅层模型,针对深层模型的研究甚少。因此,深层单纯形神经网络的研究具有重要的学术价值。在深层模型的构建过程中,以下几个关键问题亟需解决:(1)如果单方面堆叠单纯形神经网络的层数,是否会出现与深度GCN训练时产生的过平滑、过拟合和梯度消失类似的问题;(2)是否可以将深度GCN技术推广到单纯形神经网络上,构建深度单纯形神经网络模型;(3)需要采用什么手段解决构建深度单纯形神经网络时产生的各种问题。

## 6.3 动态单纯形神经网络

目前,基于单纯形数据的神经网络都是静态的,涉及动态单纯形结构的网络模型几乎没有。然而,在现实世界中,网络常常随着时间动态变化,这种变化不仅包括网络结构的时变性,还涉及单纯形特征的动态演变。因此,开发能够处理时空数据和动态拓扑变换的单纯形神经网络,同样成为未来一个重要的研究方向。

## 6.4 单纯形神经网络的可解释性

神经网络的可解释性一直是备受关注的研究领域。Paluzo-Hidalgo 等人<sup>[47]</sup>首次引入了单纯形映射神经网络的可解释性,但如何全面地解释单纯形神经网络性能的显著提升,仍然是目前需要解决的难题。后续研究中,可以考虑从网络可视化和鲁棒性分析两个方面来增强模型的可解释性:(1)利用可视化工具展示网络的层次结构和权重分布,以直观地理解模型行为;(2)通过向模型提供污染数据,测试其鲁棒性和决策过程,有助于识别模型的薄弱

之处。

## 6.5 大规模数据集的应用

现实生活中,网络规模往往非常庞大,例如微博和微信等社交网络,通常包含数亿个节点和边。但单纯形神经网络由于计算复杂度高等问题,无法有效处理这些大规模网络。所以,开发适用于大规模数据集的单纯形神经网络是一个重要的研究领域。后续研究将重点关注以下两个方向:(1)考虑使用单纯形采样技术,从整个网络中随机或有选择地抽取子单纯形进行训练,以减少模型计算和存储开销;(2)探索分布式计算和单纯形嵌入等方法,降低模型计算复杂度并提高训练效率。上述技术有助于模型快速有效地处理大规模数据集,使得模型应用更为广泛。

## 6.6 多元化的应用场景

目前,单纯形神经网络主要应用于缺失数据插补、分类任务和预测任务。而在推荐系统、知识图谱以及生物信息等领域的应用几乎没有,模型应用场景较为单一。因此,未来的研究将考虑从单纯形模型构建(动态单纯形、时序单纯形)、数据预处理、多任务学习以及跨模态融合等方面设计单纯形神经网络模型,使其适应更多元化的应用场景。

## 7 总 结

在单纯形数据建模和图神经网络成功的推动下,单纯形神经网络已经取得了快速发展。从 2020 年提出的 S2CCNN 和 SNN 模型开始,到随后的 SAT、SMPNN 和 RSSNN 等各种模型的不断兴起,掀起了单纯形神经网络的研究热潮。虽然单纯形神经网络发展时限不长,但由于其可以捕捉高阶数据间的交互关系,已受到众多研究者的广泛关注。因此,通过阅读大量文献,本文对现有单纯形神经网络进行了全面分析和回顾。

首先,文中给出了近几年单纯形神经网络的发展历程;其次,给出了单纯复形、单纯形邻域、霍奇拉普拉斯矩阵和霍奇分解等一系列基础概念和数学表示,并用图示进行举例说明;然后,根据构建单纯形神经网络时采用的方法不同,将其划分为单纯形卷积神经网络经典模型两类,对于每类模型进行了详细介绍;接下来,将单纯形神经网络的应用归纳为缺失数据插补、分类、预测及识别有影响力单纯形 4 类,并对每类应用中的代表性模型及性能进行了详细解释;最后,针对单纯形神经网络未来可能的研究方向和亟待解决的问题进行了分析总结。单纯形神经网络作为一种新兴的神经网络结构,在未来具有广泛的研究和应用前景,例如:(1)模型设计:通过

探索更灵活、适应性更强的网络结构,单纯形神经网络可以更好地捕捉数据间的高阶关系;(2)理论创新:通过对单纯形理论和神经网络的探索,有助于加深对优化问题和几何问题的理解,为单纯形神经网络领域带来新的理论视角和方法论,推动单纯形神经网络理论的发展;(3)算法改进:通过利用单纯形中的几何特性,可以设计新的训练策略和正则化方法,有助于提高网络的鲁棒性和泛化能力;(4)实际应用:实际应用是衡量单纯形神经网络研究成果的重要指标之一,未来的研究可以聚焦于探索单纯形神经网络在生物医学、金融预测和智能交通等领域的应用潜力。

总而言之,尽管现有的单纯形神经网络自身还存在一定的缺陷和不足,但随着理论体系的不断进步和完善,未来仍然是研究的热点。

**致谢** 感谢《计算机学报》编辑和各位审稿专家的辛勤工作!

## 参 考 文 献

- [1] Yang M, Isufi E, Schaub M T, et al. Finite impulse response filters for simplicial complexes//Proceedings of the 2021 29th European Signal Processing Conference. Dublin, Ireland, 2021: 2005-2009
- [2] Ebli S, Defferrard M, Spreemann G. Simplicial neural networks. arXiv preprint arXiv:2010.03633, 2020
- [3] Hajij M, Zamzmi G, Papamarkou T, et al. Simplicial complex representation learning. arXiv preprint arXiv:2103.04046, 2021
- [4] Bunch E, You Q, Fung G, et al. Simplicial 2-complex convolutional neural nets. arXiv preprint arXiv:2012.06010, 2020
- [5] Lee S H, Ji F, Tay W P. SGAT: Simplicial graph attention network//Proceedings of the 31st International Joint Conference on Artificial Intelligence. Vienna, Austria, 2022: 3192-3200
- [6] Wang Jian-Zong, Kong Ling-Wei, Huang Zhang-Cheng, et al. An overview of graph neural networks. Computer Engineering, 2021, 47(4): 1-12(in Chinese)  
(王健宗,孔令炜,黄章成等. 图神经网络综述. 计算机工程, 2021, 47(4): 1-12)
- [7] Liu Jun-Qi, Tu Wen-Xuan, Zhu En. A review of graph convolutional neural networks. Computer Engineering and Science, 2023, 45(8): 1472-1481(in Chinese)  
(刘俊奇,涂文轩,祝恩. 图卷积神经网络综述. 计算机工程与科学, 2023, 45(8): 1472-1481)
- [8] Bo D, Wang X, Liu Y, et al. A survey on spectral graph neural networks. arXiv preprint arXiv:2302.05631, 2023
- [9] Zhao Gang, Wang Qian-Ge, Yao Feng, et al. A review of large scale graph neural network systems. Journal of Software, 2022, 33(1): 150-170(in Chinese)
- [10] Xiao Guo-Qing, Li Xue-Qi, Chen Yue-Dan, et al. A review of research on large-scale graph neural networks. Chinese Journal of Computers, 2024, 47(1): 148-171(in Chinese)  
(肖国庆,李雪琪,陈玥丹等. 大规模图神经网络研究综述. 计算机学报, 2024, 47(1): 148-171)
- [11] Zhou Fei-Yan, Jin Lin-Peng, Dong Jun. A review of convolutional neural network research. Chinese Journal of Computers, 2017, 40(6): 1229-1251(in Chinese)  
(周飞燕,金林鹏,董军. 卷积神经网络研究综述. 计算机学报, 2017, 40(6): 1229-1251)
- [12] Liang F, Qian C, Yu W, et al. Survey of graph neural networks and applications. Wireless Communications and Mobile Computing, 2022, 2022(1): 9261537
- [13] Hou Lei, Liu Jin-Huan, Yu Xu, et al. A review of research on graph neural networks. Computer Science, 2024, 51(6): 282-298 (in Chinese)  
(侯磊,刘金环,于旭等. 图神经网络研究综述. 计算机科学, 2024, 51(6): 282-298)
- [14] Zheng Y, Gao C, Chen L, et al. DGCN: Diversified recommendation with graph convolutional networks//Proceedings of the Web Conference. Ljubljana, Slovenia, 2021: 401-412
- [15] Gao C, Wang X, He X, et al. Graph neural networks for recommender system//Proceedings of the 15th ACM International Conference on Web Search and Data Mining. Tempe, Arizona, 2022: 1623-1625
- [16] Sun Z, Zhang W, Mou L, et al. Generalized equivariance and preferential labeling for GNN node classification//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, Virtual, 2022, 36(8): 8395-8403
- [17] Maurya S K, Liu X, Murata T. Feature selection: Key to enhance node classification with graph neural networks. CAAI Transactions on Intelligence Technology, 2023, 8(1): 14-28
- [18] Tang J, Liao R. Graph neural networks for node classification. Graph Neural Networks: Foundations, Frontiers, and Applications, 2022: 41-61
- [19] Wu W, Li B, Luo C, et al. Hashing-accelerated graph neural networks for link prediction//Proceedings of the Web Conference. Ljubljana, Slovenia, 2021: 2910-2920
- [20] Wei L, Zhao H, He Z, et al. Neural architecture search for GNN-based graph classification. ACM Transactions on Information Systems, 2023, 42(1): 1-29
- [21] Hong X, Li W, Wang C, et al. Label attentive distillation for GNN-based graph classification//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada, 2024, 38(8): 8499-8507
- [22] Errica F, Podda M, Bacciu D, et al. A fair comparison of graph neural networks for graph classification. arXiv preprint arXiv:1912.09893, 2019
- [23] Liu B, Wu L. Graph neural networks in natural language processing. Graph Neural Networks: Foundations, Frontiers, and Applications, 2022: 463-481

- [24] Kumar V S, Aleman A, Karras D A, et al. Natural language processing using graph neural network for text classification//Proceedings of the 2022 International Conference on Knowledge Engineering and Communication Systems. Karnataka, India, 2022: 1-5
- [25] Zhang W. Exploring graph learning techniques for enhancing cross-domain applications in computer vision and natural language processing. *Applied and Computational Engineering*, 2024, 76: 267-272
- [26] Cao P, Zhu Z, Wang Z, et al. Applications of graph convolutional networks in computer vision. *Neural Computing and Applications*, 2022, 34(16): 13387-13405
- [27] Chhablani G, Sharma A, Pandey H, et al. Superpixel-based domain-knowledge infusion in computer vision. *arXiv preprint arXiv:2105.09448*, 2021
- [28] Munir M, Avery W, Marculescu R. MobileViG: Graph-based sparse attention for mobile vision applications//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Vancouver, Canada, 2023: 2211-2219
- [29] Schaub M T, Seby J B, Frantzen F, et al. Signal processing on simplicial complexes. *Higher-Order Systems*. Cham: Springer International Publishing, 2022: 301-328
- [30] Yang M, Isufi E, Leus G. Simplicial convolutional neural networks//Proceedings of the 2022 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing. Singapore, 2022: 8847-8851
- [31] Chen Y, Gel Y R, Poor H V. BScNets: Block simplicial complex neural networks//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. California, USA, 2022: 6333-6341
- [32] Keros A D, Nanda V, Subr K. Dist2Cycle: A simplicial neural network for homology localization//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. California, USA, 2022: 7133-7142
- [33] Yang M, Isufi E. Convolutional learning on simplicial complexes. *arXiv preprint arXiv:2301.11163*, 2023
- [34] Zeng Y, Huang Y, Wu Q, et al. Influential simplices mining via simplicial convolutional network. *Information Processing & Management*, 2024, 61(5): 103813
- [35] Huang Y, Zeng Y, Wu Q, et al. Higher-order graph convolutional network with flower-petals Laplacians on simplicial complexes//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada, 2024, 38 (11): 12653-12661
- [36] Tan X, Wu W, Luo C. SChash: Speedy simplicial complex neural networks via randomized hashing//Proceedings of the 46th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. Taipei, China, 2023: 1609-1618
- [37] Gurugubelli S, Chepuri S P. SaNN: Simple yet powerful simplicial-aware neural networks//Proceedings of the 12th International Conference on Learning Representations. Vienna, Austria, 2024: 1-26
- [38] Bodnar C, Frasca F, Wang Y, et al. Weisfeiler and Lehman go topological: Message passing simplicial networks//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Virtual, 2021: 1026-1037
- [39] Lan H, Wei X. Simplicial message passing for chemical property prediction. *arXiv preprint arXiv:2307.05392*, 2023
- [40] Eijkelenboom F, Hesselink R, Bekkers E. *E(n)* Equivariant message passing simplicial networks//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Honolulu, USA, 2023: 9071-9081
- [41] Choi J, Chen Y, Lee H, et al. SNN-PDE: Learning dynamic PDEs from data with simplicial neural networks//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada, 2024, 38(10): 11561-11569
- [42] Ramamurthy K N, Guzmán-Sáenz A, Hajij M. Topo-MLP: A simplicial network without message passing//Proceedings of the 2023 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing. Rhodes Island, Greece, 2023: 1-5
- [43] Madhu H, Chepuri S P. TopoSRL: Topology preserving self-supervised simplicial representation learning//Proceedings of the 37th International Conference on Neural Information Processing Systems. New Orleans, USA, 2023: 64306-64317
- [44] Goh CW, Bodnar C, Lio P. Simplicial attention networks. *arXiv preprint arXiv:2204.09455*, 2022
- [45] Giusti L, Battiloro C, Di Lorenzo P, et al. Simplicial attention neural networks. *arXiv preprint arXiv:2203.07485*, 2022
- [46] McGuire S, Munch E, Hirn M. NervePool: A simplicial pooling layer. *arXiv preprint arXiv:2305.06315*, 2023
- [47] Paluzo-Hidalgo E, Gutiérrez-Naranjo M A, González-Díaz R. Explainability in simplicial map neural networks. *arXiv preprint arXiv:2306.00010*, 2023
- [48] Paluzo-Hidalgo E, González-Díaz R, Gutiérrez-Naranjo M A, et al. Simplicial-map neural networks robust to adversarial examples. *Mathematics*, 2021, 9(2): 169
- [49] Paluzo-Hidalgo E, González-Díaz R, Gutiérrez-Naranjo M A. Trainable and explainable simplicial map neural networks. *Information Sciences*, 2024, 667: 120474
- [50] Rodriguez N, Julián P, Villemur M. Symmetric simplicial neural networks//Proceedings of the 2021 55th Annual Conference on Information Sciences and Systems. Baltimore, USA, 2021: 1-6
- [51] Hajij M, Ramamurthy K N, Guzmán-Sáenz A, et al. High skip networks: A higher order generalization of skip connections //Proceedings of the 2022 Workshop on Geometrical and Topological Representation Learning. Virtual, 2022: 1-7
- [52] Tang C, Ye Z, Zhao H, et al. DeepSCNN: A simplicial convolutional neural network for deep learning. *Applied Intelligence*, 2025, 55(4): 1-21
- [53] Schaub M T, Benson A R, Horn P, et al. Random walks on simplicial complexes and the normalized Hodge 1-Laplacian. *SIAM Review*, 2020, 62(2): 353-391
- [54] Lim L H. Hodge Laplacians on graphs. *SIAM Review*, 2020, 62(3): 685-715
- [55] Krishnagopal S, Bianconi G. Spectral detection of simplicial communities via Hodge Laplacians. *Physical Review E*, 2021, 104(6): 064303

- [56] Black M, Nayyeri A. Hodge decomposition and general Laplacian solvers for embedded simplicial complexes. arXiv preprint arXiv:2205.02134, 2022
- [57] Yang M, Isufi E, Schaub M T, et al. Simplicial convolutional filters. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2022, 70: 4633-4684
- [58] Gilmer J, Schoenholz SS, Riley PF, et al. Neural message passing for quantum chemistry//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Sydney, Australia, 2017: 1263-1272
- [59] Satorras V G, Hoogeboom E, Welling M.  $E(n)$  equivariant graph neural networks//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Virtual, 2021: 9323-9332
- [60] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, et al. Graph attention networks. arXiv preprint arXiv:1710.10903, 2017
- [61] Cinque D M, Battiloro C, Di Lorenzo P. Pooling strategies for simplicial convolutional networks//Proceedings of the 2023 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing. Rhodes Island, Greece, 2023: 1-5
- [62] Paluzo-Hidalgo E, Gonzalez-Diaz R, Gutiérrez-Naranjo M A, et al. Optimizing the simplicial-map neural network architecture. *Journal of Imaging*, 2021, 7(9): 173
- [63] Zuo J, Zeitouni K, Taher Y, et al. Graph convolutional networks for traffic forecasting with missing values. *Data Mining and Knowledge Discovery*, 2023, 37(2): 913-947
- [64] Deng L. The mnist database of handwritten digit images for machine learning research. *IEEE Signal Processing Magazine*, 2012, 29(6): 141-142
- [65] Stallkamp J, Schlipsing M, Salmen J, et al. The German traffic sign recognition benchmark: A multi-class classification competition//Proceedings of the 2011 International Joint Conference on Neural Networks. San Jose, USA, 2011: 1453-1460
- [66] Sumner R W, Popović J. Deformation transfer for triangle meshes. *ACM Transactions on Graphics*, 2004, 23(3): 399-405
- [67] Borgwardt K M, Ong C S, Schönauer S, et al. Protein function prediction via graph kernels. *Bioinformatics*, 2005, 21(Suppl\_1): 47-56
- [68] Toivonen H, Srinivasan A, King R D, et al. Statistical evaluation of the predictive toxicology challenge 2000-2001. *Bioinformatics*, 2003, 19(10): 1183-1193
- [69] Yanardag P, Vishwanathan S V N. Deep graph kernels//Proceedings of the 21st ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. Sydney, Australia, 2015: 1365-1374
- [70] Ganea O, Bécigneul G, Hofmann T. Hyperbolic neural Hnetworks//Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems. Montréal, Canada, 2018: 5350-5360
- [71] Chen D, Hu F, Nian G, et al. Deep residual learning for nonlinear regression. *Entropy*, 2020, 22(2): 193
- [72] Zhu J, Mao G, Jiang C. DII-GCN: Dropedge based deep graph convolutional networks. *Symmetry*, 2022, 14(4): 798
- [73] Li G, Xiong C, Thabet A, et al. DeeperGCN: All you need to train deeper GCNs. arXiv preprint arXiv:2006.07739, 2020



**TANG Chun-Yang**, Ph. D. candidate. Her research interests include complex network, graph neural networks and simplicial neural networks.

## Background

Graph neural networks have gained widespread attention due to their advantages in processing non-Euclidean spatial data, but they mainly model pairwise relations between nodes. However, the relations between network nodes in the real world are more complex, and using graph structure modeling will lose important information between nodes. In recent years, researchers have discovered that simplices can be used to model multivariate higher-order relations between nodes. Inspired by graph neural networks, scholars have developed many simplicial neural networks models, which have been applied to link prediction, node classification, and graph classification. At present, although there are numerous papers on the simplicial neural networks, the review research on the simplicial neural networks is still blank. Therefore, in this paper, we summarize the existing the simplicial neural

**YE Zhong-Lin**, Ph. D. , professor. His research interests include graph neural networks, knowledge extraction and network representation learning.

**BAI Li-Bing**, Ph. D. candidate. His research interests include network pharmacology, computational biology and graph neural networks.

**ZHAO Hai-Xing**, Ph. D. , professor. His research interests include complex network, graph neural networks, machine translation, hypergraph theory and network reliability.

network models, which will help promote the development and application of the simplicial neural networks in more fields in the future. Firstly, we introduce the development history of the simplicial neural networks in the past three years. Secondly, we divide the simplicial neural networks into two categories according to the different methods used in building the model, and introduce the representative models of each category. Then, we introduce the practical applications of the simplicial neural networks and commonly used datasets. Finally, the future research on the simplicial neural networks is discussed.

This work was supported by the National Key Research and Development Program of China (No. 2020YFC1523300) and the Innovation Platform Construction Project of Qinghai Province, China (No. 2022-ZJ-T02).