To拓扑深度学习：新兴范式综述

Ali Zia[1,2] , **Abdelwahed Khamis**[2] , **James Nichols**[1] , **Zeeshan Hayder**[2] , **Vivien Rolland**[2] 和**Lars Petersson**[2]

[1]澳大利亚国立大学理学院，澳大利亚[2]澳大利亚联邦科学与工业研究组织，澳大利亚

arXiv:2302.03836v1 [cs.LG] 8 Feb 2023

摘要

拓扑数据分析（TDA）能够揭示数据形状。通过这些方法获得的概要，是对多维数据具有理论依据的全局描述，同时还表现出稳定性，例如对形变和噪声的鲁棒性。这些特性对深度学习流程而言十分理想，但通常是通过非 TDA 策略获得的。这在一定程度上是因为难以将 TDA 构造（例如条形码和持久图）与当前的深度学习算法相结合。值得庆幸的是，我们如今正见证越来越多的深度学习应用开始采用拓扑引导组件。本综述首先回顾 TDA 的核心概念，进而探讨 TDA 技术如何随着时间推移不断发展，以支持深度学习框架，以及如何将其整合到深度学习的不同方面。除此之外，我们还简要介绍 TDA 在分析现有深度模型中的用途，即深度拓扑分析。最后，我们讨论拓扑深度学习面临的挑战及其未来前景。

1 引言

拓扑数据分析（TDA）是理论与算法相结合的一门较新的领域，旨在从真实世界的应用中获得对数据的几何和拓扑理解。拓扑数据分析所采用的数据处理方法与统计学习有着根本区别。拓扑数据分析并不寻求计算汇总统计量、估计量，拟合近似分布、进行聚类或训练神经网络，而是致力于理解数据所在几何对象（通常是流形）的性质。这反映了一种普遍的直觉：数据往往位于或接近一个嵌入高维特征空间中的低维流形。在本文中，我们有时将其称为数据流形。

拓扑数据分析的主要目标是推断有关数据流形全局结构的信息，例如其连通性以及是否存在多维孔洞。所获得的拓扑信息有一项重要性质，那就是它对连续变形和缩放具有不变性。这一性质也使其能够抵御扰动和噪声。拓扑数据分析方法的另一项优势是多功能性，这主要得益于代数拓扑的抽象起源。这些方法适用于种类繁多的数据类型和对象，包括欧几里得空间中的点云数据、分类数据，以及对图像和函数的分析。鉴于这些特点、无需调节参数，以及拓扑数据分析方法的基础数学特性，将其纳入深度神经网络中颇具吸引力。

近期，人们在深度学习中引入拓扑方法方面开展了大量研究；然而，由于存在许多计算和理论方面的顾虑，对于应采用何种主导方法，仍有不少悬而未决的问题。本文讨论的拓扑数据分析方法只是拓扑数据分析与机器学习之间不断拓展的交叉领域中的一小部分。我们尽力选取与深度学习方法存在历史渊源且发展脉络清晰的研究，以便读者理解。

本综述为更广泛的机器学习社区提供了一个便捷的起点，帮助其探索拓扑数据分析如何与深度学习相结合。据我们所知，这是首篇全面涵盖拓扑深度学习，并以统一分类体系（第 3 节）组织该领域研究工作的成果。

我们首先在第 2 节介绍拓扑数据分析的关键理论概念及其用于学习的表示。在第 3 节，我们解释拓扑方法如何融入不同的深度学习构成要素，例如可学习特征、特征变换和损失函数。在第 3.4 节，我们阐述拓扑数据分析一种颇具前景的用途：理解和剖析训练好的深度模型，这一方法称为 深度拓扑分析。

我们在第 4.1 节继续讨论拓扑数据分析已知的挑战，以及将其应用于深度神经网络的适配问题。随后，我们进一步讨论拓扑深度学习的未来方向及相邻应用，并介绍当前的一些库。最后，我们在第 5 节作出总结性说明。

记号：我们用 $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 表示数据集，其中 n 为样本数， d 为特征数或维度数。我们用 $\mathcal{M}$ 表示底层数据流形；就本综述而言，它是嵌入在 $\mathbb{R}^d$中的局部欧几里得空间。我们用 BD 和

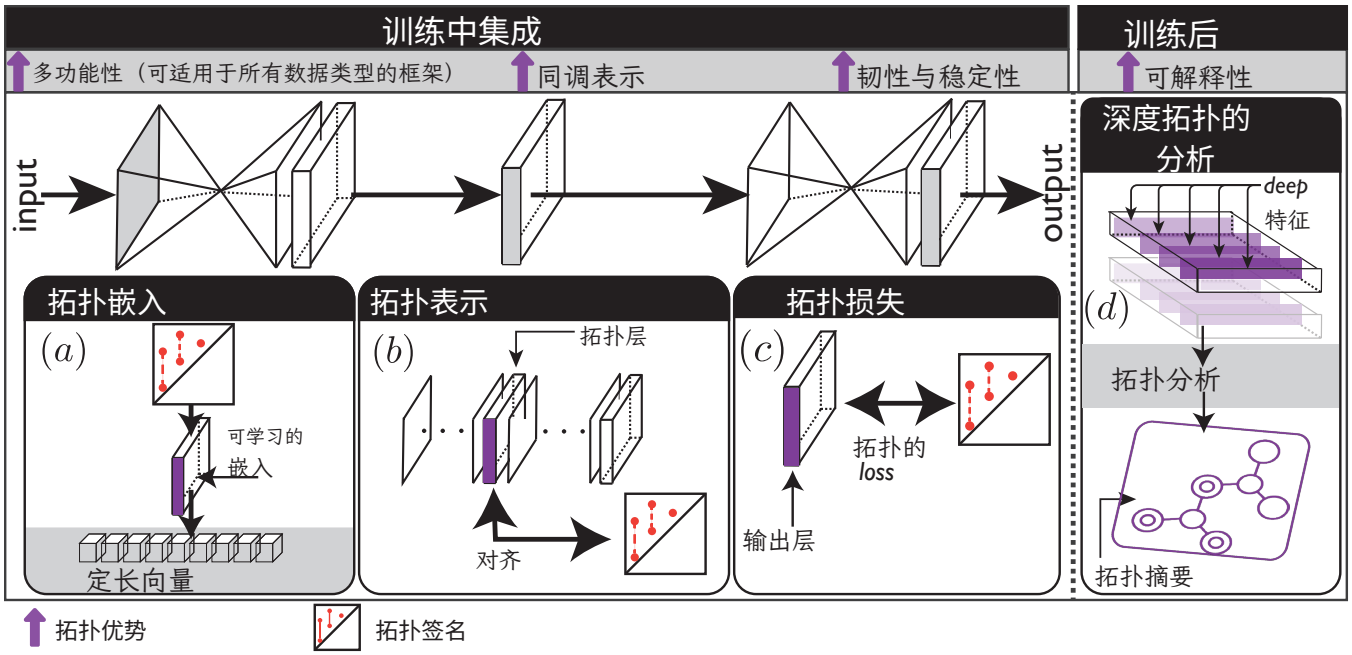

图 1：**拓扑深度学习**将拓扑数据分析方法引入深度模型，从而构建拓扑神经网络架构，有望解决深度学习局限性。具体做法是接入拓扑组件，以实现：(a) 学习特征**嵌入**（第 3.1 节）；(b) 增强已学习的**表示**（第 3.2 节）；和/或 (c) 使用拓扑**损失**对模型进行正则化（第 3.3节）。此外，(d) 训练后拓扑数据分析可用于揭示训练后的模型的见解（可解释性）（第 3.4 节）。

作为条形码图和持久图的缩写。

2 拓扑数据分析概述

物体的拓扑通常定义为在连续变形下保持不变的特征，就像物体是由软橡胶制成的一样。物体包含多少个连通分支、包含多少个孔洞或空洞，以及物体如何环绕自身，都是拓扑性质的一些例子。从某种意义上说，拓扑信息可以被视为定性的。例如，如果我们证明数据点位于两个完全不连通的子流形上，就能知道这些数据来自两个截然不同的来源，或者底层系统具有两种截然不同的状态。

一个核心概念是同调，它是刻画空间拓扑特征的强大工具。同调是一个抽象概念，难以处理；其一般定义超出了本文，甚至超出了大多数TDA文献的讨论范围 [Carlsson, 2009]。从本质上说，第 k阶同调（其中 $0 \leq k \leq d$）是一个群，用于刻画拓扑空间中的 k维孔洞（或空洞）的集合。1维孔洞可以用一条1维环路（如一圈线绳）沿其周围勾勒出来，而2维孔洞则是一个空洞，例如3维空间中空心球内部的空洞。这些 k维孔洞由贝蒂数计数。第 k个贝蒂数定义为第 k阶同调的秩，而这在一般情况下可能很难计算。幸运的是，有一些空间的贝蒂数相对容易计算——难以计算。

2.1 单纯复形与持久同调

当我们将研究范围限制在单纯复形上时，第 k阶同调会更便于处理；单纯复形是建立在离散集之上的结构。这是数据驱动应用和机器学习应用的自然领域。

单形可以看作三角形或四面体的推广，是给定维度下最简单的多胞体。零维单形是一个点，一维单形是一条线段，二维单形是一个三角形，三维单形是一个四面体，以此类推。我们用 k-单形来指维度为 k的单形。请注意，任何单形都由面构成，而这些面本身也是维度更低的单形。单纯复形 K 是由单形组成的集合，并满足两个性质： K 中单形的每个面也必须属于 K，且 K中任意两个单形的交集要么为空，要么是它们共有的一个面。

将数据集 X 中的每个点视为一个顶点（一个 0-单形）。我们可以将顶点对之间的连接定义为一组 1-单形，将三个顶点构成的集合之间的连接定义为一组 2-单形，以此类推。这样，我们就构建了一个单纯复形 K，用来描述数据点之间某种程度的“连通性”。它可以被视为 X上的一个超图 。请注意，K 在 X上并不一定是唯一的。

对于单纯复形而言，获取同调信息要容易得多；尤其是， k阶贝蒂数可以通过易于处理的线性代数计算得到。在这种情形下，贝蒂数与欧拉示性数密切相关，后者描述了多面体中顶点、边和面的数量之间的关系。

现在的目标是在 X上构造单纯复形，使其反映 $\mathcal{M}$的底层拓扑。通常通过改变尺度来实现，尺度一般由半径 $r > 0$表示。Čech复形和Vietoris-Rips复形是两种典型的构造方法[Chazal and Michel， 2021]。如果以每个顶点为中心、半径为 r 的球的集合有非空交集，那么Čech复形 $C_r(X)$就会在 X 的$(k+1)$个顶点上包含一个 k-单形。Vietoris-Rips（或简称 Rips）复形 $V_r(X)$则会在任意一组$(k+1)$个顶点上包含一个 k-单形，条件是这些顶点之间的两两距离都小于彼此之间的 r [Zomorodian， 2010]。对于同一个数据集，即使 r相同，这两种单纯复形构造也可能产生截然不同的结果。

持久同调 通过滤过 F获得，即一列不断增长的子复形： $K_1 \subseteq K_2 \subseteq .. \subseteq K_n = K$。两种常用的滤过示例是随着半径 r增大而得到的单纯复形集合， $C_r(X)$ 或 $V_r(X)$。随着我们改变 r，这些构造将自然地反映 $\mathcal{M}$拓扑的不同方面。随着 r增大，这些单纯复形之间存在单调包含关系，即对于两个半径 $r \leq r'$，有 $C_r(X) \subseteq C_{r'}(X)$，以及 $V_r(X) \subseteq V_{r'}(X)$。

核心思想是追踪拓扑特征在滤过过程中出现和消亡时发生的变化。随着我们增大 r，可能会看到新的环诞生、不同的连通分支相互连接，或孔洞逐渐被填充。我们记录这些特征相对于 r 的寿命，即某个特定拓扑特征的出现（在 b_i 处诞生）和消失 （在 d_i 处消亡）。

2.2 持久同调的表示

从滤过中得到的诞生与消亡坐标集合构成了持久同调的基础。表示这些信息的两种最常见方式是 条形码图和持久图 [Carlsson，2009]。区间的多重集（b_i, d_i）构成条形码图（BD）；这一名称源于将区间集合表示为一组堆叠线段的视觉形式。在持久图（PD）中，每个特征的寿命由$\mathbb{R}^2$ 中的一个点表示，其坐标为（b_i, d_i）。一个滤过中可能有多个相同的诞生与消亡区间副本，在 PD 中通过为点（b_i, d_i）赋予一个整数重数来表示。值得注意的是，BD 和 PD 包含等价的信息，因此二者之间可以定义双射。从此处开始，除非明确指明 BD，否则我们均使用 PD 一词指代这两种构造。

数据集的 PD 包含丰富的拓扑信息。持久区间较长（$d_i - b_i$）的特征通常被认为可能反映底层流形的真实拓扑特征 $\mathcal{M}$。在 PD 中，这些特征由远离对角线的点表示。持久区间较短意味着该特征可能由噪声产生，或不具重要意义。在 PD 中，持久性较短的特征由靠近对角线的点表示。因此，PD 中距离对角线越远的点通常被认为包含越多信息。

比较两个对象的持久图是评估其拓扑相似性的一种方法。在下一节中，我们将讨论各种以适用于机器学习和计算的方式表示它们的方法。

2.3 同调特征向量化

大多数机器学习方法都假设输入数据位于 $\mathbb{R}^d$ 或更一般的某个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中。因此，它们无法直接应用于由持久图构成的数据集，而持久图中包含的多重集信息需要用某种向量形式表示。这个过程称为向量化，需要定义一个连续映射 $f : \text{PD} \to \mathcal{H}$。文献中有大量不同的方法，而选择不同的向量化技术也会带来一些微妙的影响 [Ali等， 2022]。值得注意的是，这些向量化方法可以被视为手工设计的特征工程，而非特征学习。本节将讨论随着时间推移而发展出的各种策略。

表示持久图的一种简单方法是利用其统计属性，例如总和、均值、方差、最大值、最小值等 [Ali 等，2022]。某个滤过的总贝蒂数也可用作摘要表示 [Cang 等，2015]。不过，这些方法的输出是单变量的，会丢失信息，但仍可能有用。

另一种方法是使用类直方图方法 [Cang and Wei， 2017]对 BD 进行向量化。其基本概念是沿滤过轴对 BD 进行离散化，创建大小相等的区间，并在其中统计持久区间的数量。或者，在 BD 空间上定义的热带坐标也是一种有用且稳定的代数表示 [Kaliˇsnik,2018]。

还有一种不同的方法是从 PD 中构造各种形式的持久函数。这些函数本身很容易进行向量化；不过，对于许多任务而言，直接使用它们也很方便 [Bubenik，2020年；Adams *et al.*，2017]。这些持久函数的例子包括持久景观 [Bubenik，2020] , 、持久贝蒂数 [Edelsbrunner *etal.*， 2002], 、持久贝蒂函数 [Xia *etal.*，2017], 、持久曲面和持久图像 [Adams *et al.*，2017], 等。

一种实用的特征表示技术称为持久性码本 [Zieli´ nski等， 2020] 它使用词袋量化技术将数据点分组为固定大小的向量。Chevyrev 等人 [Chevyrev等， 2020] 提出了持久性路径，这是一种用于条形码的特征映射。

表示可以从简单结构到复杂结构不等。为了获得更好的结构表示，可以研究新的向量化方法，从而使拓扑学习模型受益。不过需要注意的是，当使用较大的特征向量表示持久图时，会出现维数灾难。在这种情况下，应考虑变量选择、正则化方法或丢弃法 [Pun等， 2022]。

此外，比较不同持久图也很重要。为此，人们提出了多种度量，例如瓶颈距离 [Mileyko 等， 2011],以及对 Gromov-Hausdorff 度量和 Wasserstein 度量的改进 [Bubenik 等， 2017]。文献中还探讨了许多其他度量。一个核心考量

是向量化和度量的稳定性。我们将在第3.3节进一步讨论这一点。

如前所述，向量化方法可用于输入空间，不过，基于核的模型是将持久图信息与机器学习模型结合的另一种重要方式 [Kwitt 等人， 2015]。由于度量可以转化为核函数，因此已有多种方法被提出，用于从持久图信息中构造核函数 [Pun等人， 2022] 并将其融入主成分分析和支持向量机等传统机器学习方法。基于拓扑的核方法已在多种场景中得到成功应用 [Zhu 等人，2016年；Kwitt等人， 2015], 然而，基于核方法的技术存在可扩展性问题 [Pun 等人， 2022], 因为训练通常会随着样本数量增加而难以扩展（例如，核支持向量机的计算复杂度大致为三次方）。本文不再进一步讨论拓扑核方法。

上述许多方法相对于持久同调中的标准度量（如 Wasserstein 距离或瓶颈距离）具有良好的稳定性性质。然而，它们都有一个共同的缺点：与现有学习技术兼容的拓扑表示映射是预先定义的。因此，该映射是固定的，且不针对任何特定学习任务进行调整，因而并非最优。深度神经网络取得的非凡成功表明，学习表示（即特征学习）是一种更可取的方法。

3 拓扑深度学习（TDL）

融合结构信息的拓扑表示为拓扑深度学习模型带来了巨大前景 [Hofer 等， 2017]。将这些线索与深度学习方法结合，在各种应用中具有固有优势。另一方面，深度学习方法有助于克服 TDA 方法在估计稳健拓扑特征时面临的一些常见难题。将拓扑概念融入深度学习是近来才开始受到研究的，以下是其一般优势：

• 可以高效、稳健地从输入数据中提取全局特征，而这些特征无法通过传统特征映射获取。

• TDA灵活且适应性强，这意味着我们不受特定问题和数据类型（如图像、传感器测量数据、时间序列、图等）的限制。

• TDA具有抗噪性，适用于多种不同问题，包括三维曲面网格分类、二维物体形状识别、自然图像块流形分析、视觉皮层活动模式分析，以及聚类 [Pun 等，2022；Ali等， 2022]。

• 只要采用合适的滤过，拓扑数据分析就能应用于任意数据结构，甚至无需进行任何预处理。

•一种新趋势正在兴起，使得能够通过持久同调连通分支进行高效反向传播。这一直是拓扑数据分析（TDA）长期面临的挑战（详见第 3.3 节），但如今拓扑层正逐渐与深度学习和端到端训练方案兼容。

我们再次强调，尽管将拓扑数据分析（TDA，更具体地说是持久同调）与深度学习结合已展现出成效，但在将 TDA 应用于数据时，仍面临一些理论和计算方面的挑战。我们在第 4.1 节对此进行了详细讨论。

本节接下来将从不同的放大尺度和视角探讨拓扑数据分析在深度学习中的应用，如图 1 所示。具体而言，我们将探讨持久同调的多种不同用法。第 3.1–3.3 节着重讨论拓扑数据分析的训练中集成，即构建拓扑神经网络架构。不过，全面的观点也应考虑拓扑数据分析对训练后分析（深度拓扑分析）的贡献。后者利用拓扑数据分析研究训练后模型的“形状”。因此，我们将在第 3.4 节回顾运用拓扑数据分析研究深度模型复杂性和可解释性的工作。

3.1 学习拓扑特征嵌入

本节在第 2.3 节关于固定向量化方法的讨论基础上，进一步介绍深度可学习的向量化（即嵌入）。其一项关键优势在于，可以利用深度模型，同时学习数据的向量化表示和目标任务的表征。例如，我们可以通过神经网络层 f_w 参数化持久图 PD 到嵌入向量 $V \in \mathbb{R}^d$ 的向量化，其中 w 表示可训练参数。在任务损失的指导下，我们可以高效地学习映射 $f_w : \mathrm{PD_x} \to V_x$，并自动回答“哪一类向量化方法最适合给定任务”这一问题。

利用神经网络处理持久图是许多深度拓扑嵌入研究的重点。通常，持久图的深度向量化层应当相对于输入具有连续性和置换不变性。后一个要求源于持久图的集合 性质。Hofer 等人 [Hofer 等人， 2017] 提出了首个可学习的持久图深度向量化方法。该方法通过将持久图中的点与高斯函数进行比较来采用置换不变变换，其中高斯函数的均值和方差在训练过程中学习得到。由于置换不变性已在其他深度学习问题中得到研究（例如用于点云的 Deep Set [Zaheer 等人， 2017]），因此一些持久图向量化技术借鉴了这些方法。例如，PersLay [Carri`ere 等人， 2019] 基于 DeepSets 对编码图的扩展持久图进行嵌入，并将其用于图分类。最近，Transformer 被用于持久图嵌入。Pers-former [Reinauer 等人， 2021] 架构在合成任务和图任务中表现出优越性，同时具备一定的可解释性特征。需要注意的是，不带位置编码的 Transformer 可以达到与深度集合同等的表达能力。因此，可以保持置换不变性要求。

除了持久图之外，研究人员还探索了将深度嵌入用于其他拓扑签名。例如，PLLay [Kim 等人,2020] 提供了一个用于嵌入持久景观的层。PLLay 声称能够抵御极端拓扑畸变，这一说法得到了紧致稳定性界的支持，且该界与输入复杂度无关。

拓扑嵌入将具有复杂结构的拓扑输入转换为与

深度模型兼容的向量表示。如本节所述，这一过程使用定制的拓扑输入层进行嵌入。在下一节中，我们将探讨能够增强深度学习表示的拓扑组件，它们通常可以灵活地插入网络中的任意位置。

3.2 拓扑表示的整合

表征学习是从数据中学习特征的过程，这些特征可用于提高模型的准确性。深度学习凭借强大的特征学习能力，在这方面表现出色；但良好的表示不仅仅意味着在目标任务上取得良好表现[Bengio 等， 2013]。例如，TDA 的稳定性可以使深度表示能够抵御输入扰动 [de Surrel等， 2022]。下面我们将回顾两类深度拓扑表示。

约束表示：一种方法是训练深度神经网络，使其学习能够保留输入数据持久同调的表示。同样，TDA 的多功能性确保了这种方法的可行性，因为可以针对输入和内部表示计算拓扑签名。例如，拓扑自编码器 [Moor 等，2020] 通过最小化输入与潜在表示的拓扑结构之间的差异损失（两者均由持久图捕获）来实现对齐。

增强表示：另一种拓扑表示方法是用拓扑签名增强深度特征。持久性增强图网络（PEGN） [Zhao 等， 2020] 提出了基于持久同调的图空间卷积。通常，卷积滤波器会利用节点度信息进行自适应调整，以适应局部图结构。相比之下，PEGN 利用持久图像所捕获的邻域信息，对消息传递（节点之间）进行加权。此外，图滤过学习（GFL） [Hofer 等， 2020] 使图神经网络（GNN）中的读出操作（一种类似图池化的操作）能够感知拓扑结构。针对图节点特征计算出生-死亡图（BD），并将其向量化。有趣的是，过滤函数是以端到端的方式学习得到的。拓扑图层（TOGL） [Horn 等， 2022] 扩展了 GFL 的思路，以端到端的方式学习图的多个滤过（而非一个）。

与需要预先指定输入类型（例如持久图）的嵌入层（如 PersLay [Carri`ere 等,2019]）不同，本节讨论的拓扑表示层在输入类型和网络中的放置位置方面更加灵活。但这也带来了相应的代价：需要仔细设计，并确保层特性（例如 [Hofer等，2020] 中梯度的一致性）。

3.3 拓扑损失

在深度学习中利用拓扑的最常见方法，是在损失中加入拓扑惩罚项。这种方法广受欢迎，原因在于基于损失的集成简单直接，无需更改架构或添加额外层。唯一需要注意的是，损失函数应当可微且易于计算。如前所述，拓扑特征能够捕捉数据的复杂结构，这意味着深度学习可以在拓扑损失的引导下学习鲁棒的表示。因此，这些表示可能对真实世界数据集中常见的变换（如噪声和离群点）具有不变性。一个例子是常见的持久性损失 [Hu 等人， 2019], 它最小化预测持久图 PD_X 与真实持久图 PD_Y之间的差异:

$$\mathcal{L}_{\text{topological}} = d(\mathrm{PD}_X, \mathrm{PD}_Y) \tag{1}$$

这种方法既可用作独立损失，也可用作正则化项（即增强另一种损失） [Hu 等，2019] ，应用包括语义分割 [Hu 等，2019]、生成建模 [Wang 等，2020]。

如 3.1 节所述，持久图并不适合用欧几里得空间中的向量表示。此外，持久图不可微（这是使用反向传播的关键要求）。解决这一问题的一种策略是利用能够处理持久图的散度或度量。p-Wasserstein[1] 距离和瓶颈距离是常见的选择:

$$d_{p,q}(\mathrm{PD}_X, \mathrm{PD}_Y) = \Big[\inf_{\pi \in \Pi(\mathrm{PD}_X, \mathrm{PD}_Y)} \sum_{t \in \mathrm{PD}_X} \|t - \pi(t)\|_q^p \Big]^{\frac{1}{p}} \tag{2}$$

$$d_\infty(\mathrm{PD}_X, \mathrm{PD}_Y) = \inf_{\pi \in \Pi(\mathrm{PD}_X, \mathrm{PD}_Y)} \sup_{t \in \mathrm{PD}_X} \|t - \pi(t)\|_\infty \tag{3}$$

其中， t 是一个点，对应于 $\mathrm{PD_X}$中的一个（b_i， d_i） $\in \mathbb{R}^2$；$\Pi(\mathrm{PD}_X$， $\mathrm{PD}_Y)$表示 PD_X 与 PD_Y之间所有双射构成的集合，$\|.\|_q$ 是欧几里得范数。可以看出，瓶颈距离是在所有保持点偏序关系的双射中，任意一对对应点之间距离的最大值（也就是说，我们不能将一个点与诞生时间大于另一个点消亡时间的点匹配）。这确保了待匹配的拓扑特征具有可比性。

瓶颈距离最初受到欢迎，或许是因为 Cohen-Steiner 等人提出的一个稳定性定理 [，该定理针对连续函数的持久图给出了结果。根据这一定理，瓶颈距离受 L_∞ 距离控制，即

$$d_\infty(\mathrm{PD}_{f_1}, \mathrm{PD}_{f_2}) \leq C \|f_1 - f_2\|_\infty \tag{4}$$

构成某个常数 C。实际上，这意味着对于底层数据的小幅扰动，这些图具有稳定性。对于 p-Wasserstein 距离，也存在类似的稳定性结果。这些结果构成了近期深度学习研究中稳定性保证的基础，例如图中热核签名的稳定性 [Carri`ere 等人，以及拓扑自编码器中基于小批量的图距离的稳定性 2019] [Moor 等人， 2020]。

[1]拓扑数据分析文献中的“Wasserstein”距离与常见的 Wasserstein 度量略有不同（即 Kantrovich 最优质量传输 [Peyr´e 等人， 2019]）。前者寻求能使图表最佳对齐的确定性双射（硬分配），并且质量可以自由地添加到对角线或从对角线移除。后者则基于概率耦合（软分配）。这也影响了可用于估算该距离的算法类型。

（2）和（3）的局限性之一是，当点的数量较大时，这些距离需要很高的计算开销。由于该距离要求逐点匹配，对于 n 个点，其计算复杂度为 $\mathcal{O}(n^3)$ [Anirudh等人， 2016]。此外，在许多应用中 [Wang 等人，2020年；Chen 等人， 2019], 我们的目标是学习一个模型 f_w，使预测图 PD_P 与目标（即真实值）图 PD_T 对齐，方法是逐步将 PD_P 中的点移向 PD_T。通常，这是通过将 w 沿 $\nabla_w \mathcal{L}_{\text{topological}}$ 的负方向推动来实现的；显然，这要求损失相对于图是可微的。虽然 Wasserstein 距离通常满足这一要求，但它可能存在一些稳定性问题 [Solomon 等人， 2021]。下面，我们选取几篇在各种应用中使用拓扑损失的代表性论文，并展示它们如何处理这些问题。

在生成建模中，TopoGAN [Wang 等人， 2020]在医学图像应用中使用了略作修改的 1-Wasserstein 距离，以对齐生成图像与真实图像的持久图。该损失忽略消亡时间，只关注图特征的诞生时间。以这种方式构造后，该损失与切片 Wasserstein [Peyr´e 等人， 2019] 所用的方法类似，既可以高效计算，也仍然可微。 [Hu 等人， 2019] 在分割任务中使用了类似的损失，以鼓励深度模型生成拓扑结构接近真实值的输出。该方法在交叉熵损失中加入了持久图之间的 2-Wasserstein 损失。为减轻计算负担，该方法每次只在一个较小的图像块（图像的一部分）上进行计算。 [Clough 等人，2022] 则依靠贝蒂数进行半监督图像分割。其一项显著优势在于，即使网络仅使用少量带标签图像进行训练，其输出仍能准确反映实际的贝蒂数。这使我们能够先在贝蒂数损失 $\mathcal{L}_\beta$的引导下，使用一个小型带标签数据集对模型进行初始训练。随后，使用大型无标签数据集对模型进行微调，并由一种损失（其中包含 $\mathcal{L}_\beta$）提供引导。由于贝蒂数估计对无标签数据具有鲁棒性， $\mathcal{L}_\beta$ 将对第二阶段的训练（微调）起到正则化作用。在分类任务中， [Chen 等人，2019] 使用了拓扑正则化项。为加快计算，他们聚焦于零同调维数，因为该维数下的持久性计算尤其快。

3.4 深度拓扑分析

拓扑数据分析（TDA）的互补价值不仅体现在训练中集成 和构建拓扑神经网络架构上。事实上，在训练后 运用拓扑数据分析方法，甚至可能更有洞察力、效果也更强。目前，研究人员利用拓扑数据分析来解决深度学习透明性问题 [Liu 等， 2020],研究模型复杂度 [Rieck 等， 2019] 甚至追寻深度学习中看似神秘现象背后的答案，例如深度网络为何优于浅层网络 [Naitzat 等， 2020]。这些工作主要围绕使用拓扑数据分析方法分析深度模型展开。因此，我们将其称为深度拓扑分析。受篇幅所限，下面我们只探讨其中两个方面。

量化结构复杂性： [Watanabe 和 Ya- mana， 2021] 将神经网络视为加权图$G(V, E)$，其中 V和 E 分别表示网络中的神经元和相关性分数（根据权重计算）。通过计算滤过过程中的持久性特征（例如贝蒂数），我们可以深入了解网络的复杂性。例如，贝蒂数的增加（即一组神经元之间出现一个环）可以反映深度神经网络中知识的复杂性。在 [Rieck 等人的研究中， 2019] 作者沿用了相同的思路，并进一步开发了由同调特征提供指导的训练优化策略（例如提前停止）。

模型的可视化探索： 拓扑数据分析的另一种用途是提供事后解释，和/或可视化探索深度模型的内部运行机制。例如，拓扑信息有助于洞察高维函数的整体结构。 [Liu 等的作者2020] 利用这一点，为数据驱动（以及黑箱）模型提供可扩展的可视化探索工具。这是一个重要的研究问题，其核心挑战在于如何以直观的方式实现。他们还使用拓扑样条 来可视化模型的高维误差景观。同样，TopoAct [Rathore 等， 2021] 提供了关于神经网络学习到的表征的深刻见解，并提供了一种可视化探索工具，用于研究激活向量的拓扑摘要。

4 讨论

拓扑数据分析是一个持续发展且前景广阔的领域，已在各种应用中取得成功。然而，将拓扑数据分析与深度神经网络结合应用仍有一些悬而未决的问题。本节将从实践和理论两个方面，着重介绍深度拓扑数据分析未来研究面临的若干挑战，并勾勒一幅推测性的图景，展望持续同调的未来前景。我们还列出了一些开源实现，供研究人员入门使用。

4.1 挑战

尽管拓扑数据分析已取得成功并应用于深度学习，我们在此仍将介绍一些值得关注的挑战。

计算成本： 计算持续同调的许多方面在计算上都难以处理。已知，针对给定的 r 构造Čech复形是一项 NP 困难任务。对于非常大规模的复形，计算给定单纯复形的贝蒂数也难以实现。计算拓扑数据分析信息的成本，会增加深度学习流程原本就高昂的计算开销。

缺乏通用的向量化框架： 目前尚无公认的通用框架，可将拓扑信息纳入深度学习。这既是理论问题，也是计算问题。例如，如前文所述，目前缺乏将持久图编码为向量的坚实理论。近年来， [Ali 等在 2022]中对各种优劣不一的临时解决方案进行了梳理。另一种做法是将向量化方法作为学习策略的一部分来选择 [Hofer 等，2017年；Moor等， 2020]。

统计保证： 本文一直未讨论由于有限抽样而产生的持久性的统计方面。例如，无法保证从 PD

从 X 得到的结果反映了 $\mathcal{M}$的真实同调。理解持久性信息统计稳健性的框架正在不断发展。文献中已采用一些简单的验证策略，例如子采样和交叉验证 [Chazal and Michel, 2021]。仍有必要进一步了解诸如为保证 PD 具有稳健性所需的最少数据点数量等问题。此外，从概率角度来看，我们对持久性的理解仍不充分，例如，从形状分布得到的持久性分布。

高维学习挑战：对于高维数据中预期会出现哪些拓扑特征，目前尚无相应的理论框架。抽象拓扑空间在高维中可能极其复杂，但我们不知道数据是否也会呈现类似的行为。此外，高维同调特征因计算成本过高而难以获得，而且无论如何，我们对持久图在高维中对采样或噪声的敏感性尚未充分了解。这使得学习数据的底层拓扑并将其用于深度神经网络颇具挑战。

对优良反向传播策略的需求：持久图或其他同调量不一定可微，其可微性也未必得到充分理解。这使得在纳入拓扑特征的深度神经网络中进行反向传播极具挑战，或者只有在特殊条件下才可行 [Moor 等， 2020]。

捕获多变量持久性：在某些情况下，需要多个并行的滤过才能充分捕获数据流形的拓扑，尤其是对于维度较高的数据。这便引出了多变量持久性，其中拓扑特征的诞生与消亡发生在多个维度中。与我们迄今讨论的一维出生-死亡图不同，这种持久性概念并没有完备的离散不变量。要在深度学习中实际应用多变量持久性，我们还需要新的理论框架和更好的计算方法。

4.2 成果与未来方向：

深度拓扑数据分析已在各种具有挑战性的场景中展现出潜力。持久同调信息对连续形变具有不变性，这意味着拓扑数据分析适用于这样的场景：物体应具有一致的形状，但可能会以某种方式发生变换。拓扑数据分析在衔接结构信息与先验知识方面也表现出色。如果我们掌握某一类物体的拓扑先验知识，那么持久图就是一种有效工具，可用于针对该类别对数据进行分类和比较，即使存在噪声或数据有限的情况也不例外。这种鲁棒性与深度学习相得益彰。

拓扑数据分析在小型数据集上也能取得良好效果，这对于医学影像应用尤其有用，因为成本和隐私方面的顾虑会限制数据采集 [Byrne 等， 2021]。拓扑数据分析也被用于其他数据有限或含有噪声的场景，例如电力预测 [Senekane 等， 2021], 航空摄影分割 [Mosinska 等，2018]以及天文学 [Murugan 和 Robertson, 2019]。

在某些应用中，拓扑信息可能比统计（逐像素）信息更重要。例如，在 [Vukicevic 等人的研究中， 2017] 检测心腔之间的孔洞比推断隔壁的厚度更重要。对于这类应用，在训练网络时，可以调整结合拓扑信息和统计信息的损失函数，使其更偏重拓扑。

由于持久同调能够概括全局结构，开发拓扑损失函数或许可以抑制小的假阳性或假阴性，尤其适用于计算机视觉任务。例如，在图像分割中，人们会使用形态学操作或基于条件随机场的技术来消除局部错误，但这些方法并不了解全局拓扑。基于持久同调的损失的优势在于，能够传播正确的全局拓扑，同时保持局部标签平滑性。

探索更复杂的深度学习架构将颇有意义，这类架构能够学习高维数据与其对应的持久图或其他拓扑表示之间的映射，从而进一步推进 [de Surrel 等人的工作， 2022]。此外，深度学习或许还能产生持久图以外的新型拓扑表示，并使其能够抵御不同的数据变形。持久同调还可进一步应用于多类开放集问题（其中数据可能包含未知类别）。如果类别之间的拓扑相对一致，就能更准确地预测未知类别的对象标签。

4.3 实现

目前有许多面向从业者的拓扑数据分析开源实现。这里介绍两个可与深度学习架构对接的库。

GUDHI 是一个开源库[2] ，用于实现相关的几何数据结构和拓扑数据分析算法，并可集成到 TensorFlow 框架中。Per- sLay [Carri`ere 等人， 2019] 以及 RipsLayer 是使用 GUDHI 实现的工具，可从复形和持久图中学习持久性表示。它们支持自动微分，并且易于集成到深度学习架构中。

Giotto-deep[3] 是 Giotto-TDA 库的一个开源扩展，旨在基于 PyTorch 实现拓扑数据分析与深度学习的无缝集成。为了利用拓扑进行数据预处理（使用多种可用方法），并在神经网络中加以应用，开发者希望提供若干开箱即用的架构。Persformer [Reinauer 等人， 2021]便是其中一例。

5 结论

拓扑数据分析（TDA）的近期发展，以及深度学习已得到验证的有效性，使这两种技术的融合成为必然。TDA 与深度学习并没有一种通用的结合范式。本文综述了这些框架相互促进的诸多方式。我们首先概述了 TDA 的关键概念，随后从多个角度回顾了深度学习中的 TDA。我们还介绍了这一领域仍面临的诸多挑战与机遇，以及一些已观察到的成功案例。

[2]https://gudhi.inria.fr/ [3] https://github.com/giotto-ai/giotto-deep

参考文献

[Adams 等人， 2017] Henry Adams、Tegan Emerson、Michael Kirby、Rachel Neville、Chris Peterson、Patrick Shipman、Sofya Chepushtanova、Eric Hanson、Francis Motta 和 Lori Ziegelmeier。《持久图像：持久同调的稳定向量表示》。机器学习研究期刊，18(1):218–252，2017年1月。[Ali 等人， 2022] Dashti Ali、Aras Asaad、Maria-Jose Jimenez、Vidit Nanda、Eduardo Paluzo-Hidalgo 和 Manuel Soriano-Trigueros。《拓扑数据分析中的向量化方法综述》，2022年12月。[Anirudh 等人， 2016] Rushil Anirudh、Vinay Venkataraman、Karthikeyan Natesan Ramamurthy 和 Pavan Turaga。《用于拓扑持久图统计分析的黎曼框架》。载于 IEEE 计算机视觉与模式识别会议研讨会论文集，第68–76页，2016年。[Bengio 等人， 2013] Yoshua Bengio、Aaron Courville 和 Pascal Vincent。《表征学习：综述与新视角》。IEEE《模式分析与机器智能汇刊》，35(8):1798–1828，2013年。[Bubenik 等人， 2017] Peter Bubenik、Vin de Silva 和 Jonathan A. Scott。《交错与 Gromov–Hausdorff 距离》。arXiv：范畴论，2017年。[Bubenik， 2020] Peter Bubenik。《持久景观及其若干性质》。载于《拓扑数据分析》，第97–117页。Springer国际出版公司，2020年。[Byrne 等人， 2021] Nick Byrne、James R. Clough、Giovanni Montana 和 Andrew P. King。《基于持久同调的拓扑损失函数：用于心脏磁共振成像多类别 CNN 分割》。载于《心脏统计图谱与计算模型》，第3–13页。Springer国际出版公司，2021年。[Cang 和 Wei， 2017] Zixuan Cang 和 Guo-Wei Wei。《TopologyNet：用于生物分子性质预测的基于拓扑的深度卷积与多任务神经网络》。PLOS计算生物学，13(7)，2017年7月。[Cang 等人， 2015] Zixuan Cang、Lin Mu、Kedi Wu、Kristopher Opron、Kelin Xia 和 Guo-Wei Wei。《一种用于蛋白质分类的拓扑方法》。分子基础数学生物学，3(1):null，2015年。[Carlsson， 2009] Gunnar Carlsson。《拓扑与数据》。美国数学学会通报，46(2):255–308，2009年1月。[Carri`ère 等人， 2019] Mathieu Carri`ère、Fr´ed´eric Chazal、Yuichi Ike、Th´eo Lacombe、Martin Royer 和 Yuhei Umeda。《Perslay：用于持久图及新型图拓扑特征的神经网络层》。载于国际人工智能与统计学会议，2019年。[Chazal and Michel， 2021] Fr´ed´eric Chazal 和 Bertrand Michel。《拓扑数据分析导论：面向数据科学家的基础与实践要点》。人工智能前沿，4，2021年。[Chen 等人， 2019] Chao Chen、Xiuyan Ni、Qinxun Bai 和 Yusu Wang。通过持久同调为分类器构建拓扑正则化项。载于第 22 届国际人工智能与统计会议论文集，第2573–2582 页。PMLR，2019年。[Chevyrev 等人， 2020] Ilya Chevyrev、Vidit Nanda 和 Harald Oberhauser。拓扑数据分析中的持久性路径与签名特征。IEEE《模式分析与机器智能汇刊》，42(1):192–202，2020年1月。[Clough 等人， 2022] James R. Clough、Nicholas Byrne、Ilkay Oksuz、Veronika A. Zimmer、Julia A. Schnabel 和 Andrew P. King。利用持久同调实现基于深度学习的图像分割的拓扑损失函数。IEEE《模式分析与机器智能汇刊》，44(12):8766–8778，2022年12月。[Cohen-Steiner 等人， 2005] David Cohen-Steiner、Herbert Edelsbrunner 和 John Harer。持久图的稳定性。载于第二十一届计算几何年度研讨会论文集，第 263–271 页，2005年。[de Surrel 等人， 2022] Thibault de Surrel、Felix Hensel、Mathieu Carri`ere、Th´eo Lacombe、Yuichi Ike、Hiroaki Kurihara、Marc Glisse 和 Fr´ed´eric Chazal。Ripsnet：一种用于快速、稳健估计点云持久同调的通用架构。载于 2022 年拓扑、代数与几何学习研讨会论文集，第 96–106 页。PMLR，2022年。[Edelsbrunner 等人， 2002] Edelsbrunner、Letscher 和 Zomorodian。拓扑持久性与简化。《离散与计算几何》，28(4):511–533，2002年11月。[Hofer 等人， 2017] Christoph Hofer、Roland Kwitt、Marc Niethammer 和 Andreas Uhl。利用拓扑签名进行深度学习。《神经信息处理系统进展》，第 30 卷，2017年。[Hofer 等人， 2020] Christoph Hofer、Florian Graf、Bastian Rieck、Marc Niethammer 和 Roland Kwitt。图过滤学习。载于 Hal Daum´e III 和 Aarti Singh 编，《第 37 届国际机器学习会议论文集》，《机器学习研究论文集》第 119 卷，第 4314–4323 页。PMLR，2020年7月13–18日。[Horn 等人， 2022] Max Horn、Edward De Brouwer、Michael Moor、Yves Moreau、Bastian Rieck 和 Karsten Borgwardt。拓扑图神经网络。载于国际学习表征会议，2022年。[Hu 等人， 2019] Xiaoling Hu、Fuxin Li、Dimitris Samaras 和 Chao Chen。保持拓扑结构的深度图像分割。《神经信息处理系统进展》，第 32 卷，2019年。[Kaliˇsnik， 2018] Sara Kaliˇsnik。持久条形码空间上的热带坐标。《计算数学基础》，19(1):101–129，2018年1月。[Kim 等人， 2020] K. Kim、J. Kim、M. Zaheer、J. Kim、F. Chazal 和 L. andWasserman。PLLay：一种基于持久景观的高效拓扑层。载于《神经信息处理系统进展》

神经信息处理系统（*NeurIPS 2020*），2020年。

[Kwitt 等人，2015] Roland Kwitt、Stefan Huber、Marc Ni- ethammer、Weili Lin 和 Ulrich Bauer。《统计拓扑数据分析——核视角》。载于 C. Cortes、N. Lawrence、D. Lee、M. Sugiyama 和 R. Garnett 编，《神经信息处理系统进展》第 28 卷。Curran Associates 公司，2015年。[Liu 等人，2020] Shusen Liu、Jim Gaffney、Luc Peterson、Peter B. Robinson、Harsh Bhatia、Valerio Pascucci、Brian K. Spears、Peer-Timo Bremer、Di Wang、Dan Maljovec、Rushil Anirudh、Jayaraman J. Thiagarajan、Sam Ade Jacobs、Brian C. Van Essen、David Hysom 和 Jae-Seung Yeom。《面向科学应用中数据驱动模型评估的可扩展拓扑数据分析与可视化》。IEEE 可视化与计算机图形学汇刊，26(1):291–300，2020年1月。[Mileyko 等人，2011] Yuriy Mileyko、Sayan Mukherjee 和 John Harer。《持久图空间上的概率测度》。《逆问题》，27(12):124007，2011年11月。[Moor 等人，2020] Michael Moor、Max Horn、Bastian Rieck 和 Karsten Borgwardt。《拓扑自编码器》。载于《国际机器学习会议》，第 7045–7054 页。PMLR，2020年。[Mosinska 等人，2018] Agata Mosinska、Pablo Marquez-Neila、Mateusz Kozinski 和 Pascal Fua。《超越用于拓扑感知描绘的逐像素损失》。载于 2018 年 IEEE/CVF 计算机视觉与模式识别会议。IEEE，2018年6月。[Murugan 和 Robertson，2019] Jeff Murugan 和 Duncan Robertson。《面向物理学家的拓扑数据分析导论：从 LGM 到 FRBS》，2019年。[Naitzat 等人，2020] Gregory Naitzat、Andrey Zhitnikov 和 Lek-Heng Lim。《深度神经网络的拓扑》。《机器学习研究期刊》，21(1):7503–7542，2020年。[Peyr´e 等人，2019] Gabriel Peyr´e、Marco Cuturi 等人。《计算最优传输：及其在数据科学中的应用》。《机器学习基础与趋势》，11(5-6):355–607，2019年。[Pun 等人，2022] Chi Seng Pun、Si Xian Lee 和 Kelin Xia。《基于持久同调的机器学习：综述与比较研究》。《人工智能评论》，55(7):5169–5213，2022年2月。[Rathore 等人，2021] Archit Rathore、Nithin Chalapathi、Sourabh Palande 和 Bei Wang。《TopoAct：直观探索深度学习中激活的形状》。《计算机图形学论坛》，40(1):382–397，2021年1月。[Reinauer 等人，2021] Raphael Reinauer、Matteo Caorsi 和 Nicolas Berkouk。《Persformer：一种用于拓扑机器学习的 Transformer 架构》，2021年。[Rieck 等人，2019] Bastian Rieck、Matteo Togninalli、Christian Bock、Michael Moor、Max Horn、Thomas Gumbsch 和 Karsten Borgwardt。《神经持久性：一种复杂度度量深度神经网络的代数拓扑方法。载于国际学习表征会议（*ICLR*），2019年。

[Senekane等人，2021] Makhamisa Senekane、Naleli Jubert Matjelo 和 Benedict Molibeli Taele。利用拓扑数据分析和机器学习改进短期电力输出预测。载于*2021*年电气、计算机与能源技术国际会议（*ICECET*）。IEEE，2021年12月。

[Solomon 等人，2021] Yitzchak Solomon、Alexander Wagner 和 Paul Bendich。全局拓扑函数优化的一种快速稳健方法。载于国际人工智能与统计会议，页码109–117。PMLR，2021年。[Vukicevic 等人，2017] Marija Vukicevic、Bobak Mosadegh、James K. Min 和 Stephen H. Little。心脏3D打印及其未来发展方向。《JACC：心血管影像》，10(2):171–184，2017年2月。[Wang 等人，2020] Fan Wang、Huidong Liu、Dimitris Samaras 和 Chao Chen。TopoGAN：一种具备拓扑感知能力的生成对抗网络。载于欧洲计算机视觉会议，页码118–136。施普林格，2020年。[Watanabe 和 Yamana，2021] Satoru Watanabe 和 Hayato Yamana。利用持久同调对深度神经网络进行拓扑测量。《数学与人工智能年刊》，90(1):75–92，2021年7月。[Xia 等人，2017] Kelin Xia、Zhiming Li 和 Lin Mu。用于生物分子结构表征的多尺度持久函数。《数学生物学通报》，80(1):1–31，2017年11月。[Zaheer 等人，2017] Manzil Zaheer、Satwik Kottur、Siamak Ravanbakhsh、Barnabas Poczos、Ruslan R Salakhutdinov 和 Alexander J Smola。深度集合。载于《神经信息处理系统进展》第30卷，页码3391–3401，2017年。[Zhao 等人，2020] Qi Zhao、Ze Ye、Chao Chen 和 Yusu Wang。持久性增强图神经网络。载于 Silvia Chiappa 和 Roberto Calandra（编），《第二十三届国际人工智能与统计会议论文集》，《机器学习研究论文集》第108卷，页码2896–2906。PMLR，2020年8月26–28日。[Zhu 等人，2016] Xiaojin Zhu、A. Vartanian、Mani Bansal、Duy Nguyen 和 Luke Brandl。随机多分辨率持久同调核。载于国际人工智能联合会议，2016年。[Zieli´nski 等人，2020] Bartosz Zieli´nski、Michał Lipi´nski、Mateusz Juda、Matthias Zeppelzauer 和 Paweł Dłotko。用于拓扑数据分析的持久性码本。《人工智能评论》，54(3):1969–2009，2020年9月。[Zomorodian，2010] Afra Zomorodian。快速构造Vietoris-Rips复形。《计算机与图形学》，34(3):263–271，2010年6月。