JKSCI

한국컴퓨터정보학회논문지
Journal of The Korea Society of Computer and Information
Vol. 29 No. 11, pp. 97-105, November 2024
https://doi.org/10.9708/jksci.2024.29.11.097

A Review of Topological Deep Learning Focused on Simplicial Complex and Cell Complex

Ho-Sik Seok*

*Assistant Professor, Dept. of Artificial Intelligence and Data Science, Korea Military Academy, Seoul, Korea

[Abstract]

Lots of tasks including physical systems modeling, chemical reaction prediction, and relation extraction require dealing with higher-order relations. Graph neural networks (GNNs) are favorite models for relational data but they have inherent limits due to their focus on pairwise relationships. Topological data analysis (TDA) provides insight into the "shape" of data (or underlying data topology). TDA aims to infer information about data manifold such as connectivity and offers higher-dimensional analog of graphs. Topological deep learning (TDL) combines various deep learning techniques with TDA. TDL enables us to formulate simplicial complex and cell complex through techniques such as low-dimensional embedding and attention. In this paper, we summarize recent achievements especially on simplicial complex and cell complex. We also provide succinct descriptions of related concepts.

▸ **Key words**: TDL(Topological Deep Learning), TDA(Topological Data Analysis), Simplicial complex, Cell complex, Computational topology

[요 약]

화학 반응이나 경제 현상을 모델링할 때는 개체 간의 상호작용을 표현해야 한다. 상호작용의 분석이 필요한 도메인에서 그래프 뉴럴 네트워크를 활발히 적용하고 있으나, 데이터에 존재하는 위상 구조를 표현하는 과정에서 그래프 뉴럴 네트워크의 표현 능력이 충분하지 않다고 알려져 있다. 데이터에 존재하는 위상 구조를 활용하는 토폴로지 데이터 분석(TDA)과 딥러닝을 결합한 토폴로지 딥러닝(TDL)은 복잡한 관계를 내포한 데이터의 분석 및 표현에 강점이 있는데, 본 논문에서는 특히 단체 복합체(simplicial complex)와 셀 복합체(cell complex)에 주목하여 토폴로지 딥러닝의 주요 접근법을 소개하고자 한다. 본 논문에서는 단체 복합체와 셀 복합체를 이해하는 과정에서 요구되는 기본 개념과 주요 접근법을 요약 소개하여 토폴로지 딥러닝을 응용하려는 연구자에게 도움을 제공하고자 한다.

▸ **주제어**: 토폴로지 딥러닝, 토폴로지 데이터분석, 단체복합체, 셀복합체, 계산 토폴로지

• First Author: Ho-Sik Seok, Corresponding Author: Ho-Sik Seok
*Ho-Sik Seok (hosik.seok@gmail.com), Dept. of Artificial Intelligence and Data Science, Korea Military Academy
• Received: 2024. 10. 24, Revised: 2024. 11. 06, Accepted: 2024. 11. 18.

http://www.ksci.re.kr pISSN:1598-849X | eISSN:2383-9945

I. Introduction

관계형 데이터의 분석에 있어 그래프 뉴럴 네트워크(graph neural network)는 많은 성과를 보였으나 그래프로 표현할 수 있는 관계성이 제약되어 있다는 한계가 있다. 다양한 도메인에서 고차원의 상호작용에 대한 모델링을 요구하며 데이터 자체에 고차원의 구조 및 상호작용과 연관된 특성이 존재하기도 한다. 그러나 첫째, 그래프 기반 모델을 이용하여 자연계에 일반적으로 존재하는 구조(예: 분자의 고리 구조)를 취급하는 방법을 아직 확립하지 못하였으며, 둘째, 메시지 패싱 뉴럴 넷이 표현할 수 없는 구조가 존재하고, 마지막으로 그래프의 표현력을 높이기 위해 지불해야 하는 계산 비용이 너무나 과도하다는 것이 보고되었다[1-3]. 토폴로지 뉴럴 네트워크(topological neural network, TNN)는 보다 고차원의 관계 구조를 분석할 수 있는 기제를 제공하여 다양한 태스크에서 놀라운 성능을 달성하였다[4, 5]. 본 논문에서는 토폴로지 뉴럴 네트워크를 이해하는데 필요한 다양한 핵심 개념을 소개하고, 특히 단체 복합체(simplicial complex)와 셀 복합체(cell complex)를 활용한 데이터 분석 성과들을 요약하여 토폴로지 뉴럴 네트워크를 응용하려는 연구자들에게 도움을 주고자 한다.

II. Architectures of Topological Neural Networks and Message Passing[1)]

Ⅱ장에서는 주요 키워드의 의미를 설명하고, 메시지 패싱 방법의 기본 동작 과정을 간단하게 설명하여 토폴로지 뉴럴 네트워크의 최신 연구 성과의 이해에 필요한 기반 지식을 제공하고자 한다.

1. Important Keywords

토폴로지 공간(topological space) $(X, O(X))$은 집합 X와 X의 오픈 셋(open set)이라고 불리우는 X의 부분집합들의 컬렉션 $O(X)$로 구성되며 다음의 조건을 만족한다: (1) 공집합과 X는 $O(X)$에 속한다. (2) 오픈 셋들의 유한한 교집합은 $O(X)$에 속한다. (3) 오픈 셋들의 임의의 합집합은 $O(X)$에 속한다. 토폴로지 공간의 구성 요소 중 $O(X)$를 X에서의 토폴로지(Topology)라고 한다. $p \in X$인 포인트 p를 포함하고 있는 X의 오픈 셋 U_p $(U_p \subseteq X)$가 p의 이웃(neighborhood)을 구성한다.

단체 복합체(simplicial complex) K는 노드 집합 V의 공집합이 아닌 부분집합의 모음으로 다음의 조건을 만족한다: (1) K는 V의 모든 한 원소(singleton) 부분집합을 포함한다. (2) K의 부분집합은 K에 속한다. 기수가 $k+1$인 K의 원소 $\sigma = \{v_0, \ldots, v_k\} \in K$를 $k-$차원 단체 혹은 $k-$단체라고 하며, $k-$단체는 노드, 에지뿐만 아니라 보다 고차원의 개체들도 표현할 수 있다. $k-$단체가 주어졌을 때 기수가 k인 부분집합을 면(face), $k-$단체를 포함하는(면으로 갖는) $(k+1)-$단체를 해당 $k-$단체의 공면(coface)이라고 한다.

셀 복합체(cell complex)는 셀들의 서로소인 합집합(disjoint union)으로 구성된 토폴로지 공간이다. 정규 셀 복합체는 셀이 정의된 토폴로지 공간으로 다음의 성질을 만족한다: (1) 모든 σ, τ에 대하여 $X_\tau \cap \overline{X_\sigma} \neq \varnothing \Leftrightarrow X_\tau \subseteq \overline{X_\sigma}$. 여기서 $\overline{X_\sigma}$는 셀 X_σ와 경계를 함께 의미한다. (2) 모든 셀 X_σ는 일부 n에 대하여 R^n과 위상동형(homeomorphic)이다. (3) 모든 $\sigma \in P_X$에 대하여 R^{n_σ}의 닫힌 공(closed ball)에서 $\overline{X_\sigma}$로의 위상동형사상(homeomorphism) ϕ가 존재한다. 여기서 닫힌 공의 내부에 대한 ϕ의 제한(restriction)은 X_σ에 대한 위상동형사상이다. 셀은 노드 혹은 노드 간의 관계를 의미하며, 크기(포함하고 있는 셀의 수)와 랭크(고유 차원 혹은 내재 차원)의 특성을 갖는다. 도메인의 데이터는 셀에서의 특성으로 표현되는데, 예를 들어 $\mathbf{h}_{\mathrm{x}}^{\mathrm{t},(\mathrm{r})}$은 TNN의 t번째 층에 존재하는 랭크 r의 셀 $x \in X$와 연관된 특성 벡터를 의미한다.

단체 복합체와 셀 복합체에서 $k-$스켈레톤(skeleton)을 정의할 수 있다. 단체 복합체 K에서 $k-$스켈레톤은 K를 구성하는 단체 중 차원이 k보다 작거나 같은 모든 단체의 집합을 의미한다. 셀 복합체의 $k-$스켈레톤은 셀 X_σ $(\dim \sigma \leq \mathrm{k})$들의 서로소인 합집합을 의미한다.

토폴로지 딥러닝에서 이웃 관계를 표현할 때는 경계 관계(boundary relation)를 활용한다. 랭크가 r인 셀 y가 랭크가 R인 x와 연결되어있고 $r < R$인 경우 셀 x의 경계에 존재한다고 정의한다.

경계 연산자($\partial_k : \mathbf{C}_{\mathrm{k}}(\mathrm{K,R}) \rightarrow \mathbf{C}_{\mathrm{k-1}}(\mathrm{K,R})$, boundary operator)를 이용하여 경계를 파악할 수 있는데 ∂_k는 차원 k인 영역을 입력으로 받아 입력의 경계에 해당하는 차원 $k-1$의 영역을 반환한다. 경계 연산자의 정의에서

1) Ⅱ장의 주요 내용은 [4]에서 정의된 개념들을 정리한 것임.

$\mathrm{C_k(K,R)}$ 혹은 $\mathrm{C_k}$는 실수를 계수로 하는 벡터 스페이스로 유향 $k-$단체(oriented $k-$simplex, 노드의 순서가 명시된 단체를 의미)를 기저로 갖는다. 또한, 해당 벡터 스페이스를 구성하는 원소를 k-체인이라고 한다. $\mathrm{C_k}$가 주어지면 기저 요소에 작용하는 경계 연산자를 다음과 같이 표현할 수 있다:

$\partial_k(v_0,\dots,v_k)=\sum_{i=0}^{k}(-1)^i(v_0,\dots,\hat{v}_i,\dots,v_k)$. 경계 연산자의 정의에서 $\hat{v}_i$는 v_i가 배재되었음을 의미한다. 경계 연산자는 $(v_0,v_1,\dots,v_k)$의 경계를 구성하는 면의 합을 계산한다. 경계 연산자 ∂_k를 행렬 $\mathbf{B}_\mathrm{k}$로 표현할 수 있는데 $\mathbf{B}_\mathrm{k}$의 행은 $(k-1)$-단체에 기반하여 인덱스를 부여하고 $\mathbf{B}_\mathrm{k}$의 열은 k-단체에 기반하여 인덱스를 부여한다.

2. Message passing

메시지 패싱(message passing)은 TNN의 t번째 층에서 이루어지는 연산을 정의한 것으로 (1) 메시지, (2) 이웃 내 통합(within-neighborhood aggregation), (3) 이웃간 통합(between-neighborhood aggregation), (4) 갱신(update)의 단계로 구성된다.

메시지 함수 M_{N_k}를 이용하여 랭크 r'의 셀 y에서 랭크 r의 셀 x로 전달되는 메시지를 $m_{y\to x}^{r'\to r}=M_{N_k}(\mathbf{h}_\mathrm{x}^{\mathrm{t,(r)}},\mathbf{h}_\mathrm{y}^{\mathrm{t,(r')}},\boldsymbol{\theta}^\mathrm{t})$로 표현한다. 여기서 $\boldsymbol{\theta}^\mathrm{t}$는 파라미터를 의미하며, $N_k(x)$는 셀 x의 이웃이다.

메시지가 전달되면 $N_k(x)$에 속한 모든 셀 y에서의 메시지가 통합되어 이웃 내 통합 메시지 $m_x^{(r'\to r)}$가 생성된다. 이웃 내 통합 메시지를 생성하는 과정은 다음과 같다(통합 과정에서 AGG는 통합연산을 의미): $m_x^{(r'\to r)}=\mathrm{AGG}_{\mathrm{y}\in\mathrm{N_k(x)}}\mathrm{m}_{\mathrm{y\to x}}^{(\mathrm{r'\to r})}$.

이웃내 통합 후에 이웃간 통합을 진행한다. 이웃 집합 N에 속한 이웃들에서 메시지가 통합되어 이웃간 통합 메시지 $m_x^{(r)}$을 생성한다. 이웃간 통합 메시지를 생성하는 과정은 다음과 같다: $m_x^{(r)}=\mathrm{AGG}_{\mathrm{N_k}\in\mathrm{N}}\,\mathrm{m}_\mathrm{x}^{(\mathrm{r'\to r})}$.

메시지 $m_x^{(r)}$를 수신하면 셀 x의 특성 $\mathbf{h}_\mathrm{x}^{\mathrm{t,(r)}}$를 갱신하게 된다(갱신 과정에서 U는 갱신 함수를 의미): $\mathbf{h}_\mathrm{x}^{\mathrm{t+1,(r)}}=\mathrm{U}(\mathbf{h}_\mathrm{x}^{\mathrm{t,(r)}},\mathrm{m}_\mathrm{x}^{(\mathrm{r})})$. $\mathbf{h}_\mathrm{x}^{\mathrm{t+1,(r)}}$은 셀 x의 갱신된 특성이며 $t+1$층의 입력으로 활용된다.

III. Important Results on Simplicial Complexes and Cell Complexes

Ⅲ장에서는 토폴로지 딥러닝 중 단체 복합체와 셀 복합체를 활용한 접근법과 주요 성과 그리고 향후 해결해야 할 문제들을 소개한다.

1. Hodge Laplacian

호지-라플라시안은 그래프와 같은 이산 표현의 고차 속성과 연속적인 표현을 연결해주는 역할을 한다[6-8]. 경계 연산자 ∂_k가 정해졌을 때, 유향 k-단체에 대하여 정의된 연산자:$\mathbf{L}_\mathrm{k}:\mathrm{C_k}\to\mathrm{C_k}$를 k-호지 라플라시안(k-Hodge Laplacian)이라고 하며 행렬식으로 표현하면 다음과 같다: $\mathbf{L}_\mathrm{k}=\mathbf{B}_\mathrm{k}^\mathrm{T}\mathbf{B}_\mathrm{k}+\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}^\mathrm{T}$ $(k=1,\dots,K-1)$.

k-호지 라플라시안에서 $\mathbf{B}_\mathrm{k}^\mathrm{T}\mathbf{B}_\mathrm{k}$를 하부 라플라시안 $\mathbf{L}_{\mathrm{k,l}}=\mathbf{B}_\mathrm{k}^\mathrm{T}\mathbf{B}_\mathrm{k}$, $\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}^\mathrm{T}$를 상부 라플라시안 $\mathbf{L}_{\mathrm{k,u}}=\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}\mathbf{B}_{\mathrm{k+1}}^\mathrm{T}$이라고 호칭한다. k-호지 라플라시안의 정의에서 $\mathbf{B}_\mathrm{k}$는 경계 연산자 ∂_k의 행렬 표현이며, $\partial_k^\mathrm{T}:\mathrm{C_k}\to\mathrm{C_{k+1}}$은 공통경계 연산자로 B_k^T는 ∂_k^T의 행렬 표현이다. 호지-라플라시안에 포함된 정보는 호몰로지 그룹(homology group)의 계산에 사용될 수 있는데, 호몰로지 그룹으로 사이클 혹은 루프의 숫자를 추정하거나 상호 연결된 컴퍼넌트의 개수를 추정하여 단체 복합체의 특성을 분석할 수 있다.

2. Simplicial Complex

세 개 이상의 노드가 참여하는 복잡한 상관관계를 표현할 수 있는 고차원 구조에 대한 초기 연구는 [9]에 잘 정리되어 있다. 단체 복합체는 그래프의 일반화라고 간주할 수 있는데, 두 노드를 연결하는 에지가 페어와이즈(pairwise) 관계를 표현하는 그래프와 다르게 세 개의 에지가 모여 삼각형의 면을 구성하고, 네 개의 삼각형이 모여 사면체를 구성한다.

단체 복합체와 신경망을 결합할 때 주의해야 할 성질이 존재할 수 있다. [10]에서는 permutation equivariance, orientation equivariance, 그리고 simplicial awareness의 세 가지 성질을 정의하였다. 참고로 세 가지 성질의 설명 과정에서 등장하는 $\mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial}:\mathbf{C}_\mathrm{j}\to\mathbf{C}_\mathrm{l}$은 $\mathbf{c}_\mathrm{j}\in\mathrm{C_j}$를 입력으로 하는 신경망을 의미하며 해당 신경망의 파라미터는 가중치 $\mathbf{W}$와 경계 연산자 ∂이다. 단체 복합체를 위한 신경망에서 Permutation equivariance를 다음과 같이 정의한다:

$P = \{\mathbf{P}_k\}_{k=0}^{K}$으로 치환 행렬(permutation matrix)의 집합을 표시하고, $\partial = \{\partial_k\}_{k=1}^{K}$로 경계맵을 표시할 때, $\mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial}(\mathbf{c}_j) = \mathbf{P}_l \mathrm{SCN}_{\mathbf{W},P\partial}(\mathbf{P}_j \mathbf{c}_j)$를 만족하면 permutation equivariance를 만족한다고 정의한다(조건식에서 $[P\partial]_k = \mathbf{P}_{k-1}\partial_k \mathbf{P}_k^T$).

Orientation equivariance는 임의로 주어진 $X, D, \mathbf{W}, \mathbf{c}_j$에 대하여 SCN이 $\mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial}(\mathbf{c}_j) = \mathbf{D}_l \mathrm{SCN}_{\mathbf{W},D\partial}(\mathbf{D}_j \mathbf{c}_j)$의 관계를 만족하는 상황을 의미한다. 이때 $D = \{\mathbf{D}_k\}_{k=0}^{K}$는 대각의 값이 ± 1인 대각 행렬의 집합을 의미한다(조건식에서 $[D\partial]_k = \mathbf{D}_{k-1}\partial_k \mathbf{D}_k$).

Simplicial awareness는 $\mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial}: \mathbf{C}_j \to \mathbf{C}_l$와 $k \neq j, k \neq l$인 자연수 k를 이용하여 설명된다. $X_0 = X_0' = V$(여기서 V는 노드 집합을 의미), $X_j = X_j'$, $X_l = X_l'$, $X_k \neq X_k'$인 단체 복합체 X와 X'이 존재한다고 가정하고 두 단체 복합체의 경계 연산자를 각각 ∂과 ∂'으로 표시하자. $\mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial}(\mathbf{c}_j) \neq \mathrm{SCN}_{\mathbf{W},\partial'}(\mathbf{c}_j)$를 만족하는 $\mathbf{c}_j \in \mathbf{C}_j$와 가중치 $\mathbf{W}$가 존재하면 SCN이 차수 k의 simplicial awareness를 만족한다고 한다. 단체 복합체에서 permutation equivariance, orientation equivariance, 그리고 simplicial awareness의 성질을 강조한 것은 도메인의 대칭성과 불변성을 반영함으로써 일반화 성능을 높이기 위함이다. [10]에서는 그래프 컨볼루션 네트워크에 기반한 SCoNe (simplicial complex net)를 제안하였으며 궤적 예측 문제에 적용하여 성능을 확인하였다. 궤도 예측 과정에서 SCoNe는 먼저 궤적을 구성하는 노드 시퀀스 $[i_0, i_1, \ldots, i_{m-1}]$을 유향 에지의 시퀀스 $[[i_0, i_1], [i_1, i_2], \ldots, [i_{m-2}, i_{m-1}]]$로 표현한다. 그리고 시퀀스 구조를 1-체인으로 변환한 후 활성화함수 ϕ와 경계맵을 이용하여 다음과 같이 $\mathbf{c}_1^l$로부터 $\mathbf{c}_1^{l+1}$을 계산한다: $\mathbf{c}_1^{l+1} \leftarrow \phi(\partial_2 \partial_2^T \mathbf{c}_1^l \mathbf{W}_2^l + \mathbf{c}_1^l \mathbf{W}_1^l + \partial_1^T \partial_1 \mathbf{c}_1^l \mathbf{W}_0^l)$. L개의 레이어를 통과하면 $\mathbf{c}_0^{L+1} = \partial_1 \mathbf{c}_1^L \mathbf{W}_0^L$을 계산한 후 후보 노드의 분포를 소프트맥스 함수로 추정하였다.

[11]에서는 메시지 패싱 알고리즘을 발전시켜 단체 복합체를 위한 MPSN (message passing simplicial networks)를 개발하였다. MPSN에서는 복합체를 구성하는 단체들이 메시지를 주고받으며 뉴럴 표현(neural representation)을 계산하는데, 단체간의 결합 관계(incidence relation)를 표시하는 공통경계 맵(coboundary map)이 메시지 패싱 절차를 결정한다. 단체 복합체에서는 하부 인접(lower adjacency) 관계와 상부 인접(upper adjacency) 관계를 정의할 수 있는데, 두 $k-$단체가 공통의 면을 갖는 경우가 전자에 해당하며 두 $k-$단체가 동일한 $(k+1)-$단체의 경계에 존재할 경우 후자에 해당한다. MPSN에서는 하부 인접과 상부 인접 관계를 이용하여 네 가지 유형의 인접 단체를 정의한다: (1) 경계 인접 $B(\sigma) = \{\tau | \tau \prec \sigma\}$, (2) 공통경계인접 $C(\sigma) = \{\tau | \sigma \prec \tau\}$, (3) 하부 인접 $N_\downarrow(\sigma) = \{\tau | \exists \delta,\ \delta \prec \tau \wedge \delta \prec \sigma\}$, (4) 상부 인접 $N_\uparrow(\sigma) = \{\tau | \exists \delta,\ \tau \prec \delta \wedge \sigma \prec \delta\}$. 여기서 $\prec$는 경계결합관계(boundary incidence relation)를 나타내는 연산자로 $\sigma \subset \tau$이고 $\sigma \subset \delta \subset \tau$인 δ가 존재하지 않을 때 $\delta \prec \tau$라고 표시한다. 네 가지 인접 관계에 대응하는 메시지를 다음과 같이 정의한다:

(1) $m_B^{t+1}(\sigma) = \mathrm{AGG}_{\tau \in B(\sigma)}\left(\mathrm{M_B}(\mathbf{h}_\sigma^t, \mathbf{h}_\tau^t)\right)$,

(2) $m_C^{t+1}(\sigma) = \mathrm{AGG}_{\tau \in C(\sigma)}\left(\mathrm{M_C}(\mathbf{h}_\sigma^t, \mathbf{h}_\tau^t)\right)$,

(3) $m_\downarrow^{t+1}(\sigma) = \mathrm{AGG}_{\tau \in N_\downarrow(\sigma)}\left(\mathrm{M}_\downarrow(\mathbf{h}_\sigma^t, \mathbf{h}_\tau^t, \mathbf{h}_{\sigma \cap \tau}^t)\right)$,

(4) $m_\uparrow^{t+1}(\sigma) = \mathrm{AGG}_{\tau \in N_\uparrow(\sigma)}\left(\mathrm{M}_\uparrow(\mathbf{h}_\sigma^t, \mathbf{h}_\tau^t, \mathbf{h}_{\sigma \cup \tau}^t)\right)$.

메시지 갱신 과정은 다음과 같다:

$\mathbf{h}_\sigma^{t+1} = \mathrm{U}\left(\mathbf{h}_\sigma^t, \mathrm{m_B^t}(\sigma), \mathrm{m_C^t}(\sigma), \mathrm{m}_\downarrow^{t+1}(\sigma), \mathrm{m}_\uparrow^{t+1}(\sigma)\right)$.

MPSN에서는 서로 다른 차원의 단체가 상호작용할 수 있다. TU데이터셋[12]에 대하여 성능을 확인해본 결과 다양한 상호작용이 발생하는 데이터에서 MPSN이 높은 성능을 발휘하고, 고차원의 상호작용이 존재하지 않는 경우 일반적인 그래프 기반 네트워크와 유사한 성능을 발휘함을 확인하였다.

BScNets에서는 AHLB (adaptive Hodge Laplacian based) 블록 연산자에 기반한 블록 컨벌루션 연산자를 제안하였다[8]. 블록 컨벌루션 모듈(H-ABC)의 정의는 다음과 같다: $\mathbf{Z}^{(l+1)} = \left(\tilde{\mathbf{L}}_2^B \mathbf{Z}^{(l)} \boldsymbol{\Theta}_1^{(l)}\right) \boldsymbol{\Theta}_2^{(l)}$. 모듈의 정의에서 $\boldsymbol{\Theta}_1^{(l)}$과 $\boldsymbol{\Theta}_2^{(l)}$는 학습으로 확보되는 가중치 행렬이며, $\mathbf{Z}^{(l)}$은 l번째 층의 노드 특성 행렬을 의미한다. $\tilde{\mathbf{L}}_2^B$는 어답티브 호지 블록으로 $\tilde{\mathbf{L}}_2^B = \mathrm{softmax}(\mathrm{ReLU}(\mathbf{L}_2^B))$로 획득된다. $\mathbf{L}_2^B = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{k_1} & f(\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}, \mathbf{L}_{k_2}) \\ f(\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}, \mathbf{L}_{k_2}) & \mathbf{L}_{k_{12}} \end{bmatrix}$는 AHLB 블록 연산자를 의미하며, 2블록 호지 라플라시안 $\mathbf{L}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{k_1} & 0 \\ 0 & \mathbf{L}_{k_2} \end{bmatrix}$와 유사도 함수 f에 의해 (일반적으로 유

사도 함수 f에 주어지는 인자의 차원이 일치하지 않기 때문에 $\mathbf{P}_{d_2}$를 이용하여 차원을 조정) 획득된다. $\mathbf{L}_{k_1}$과 $\mathbf{L}_{k_2}$의 관계는 유사도 함수를 학습하여 추정하는데, 유사도 함수로는 내적 함수와 내장 내적 함수(embedded inner-product)함수를 정의하였다. (1) 내적 함수: $f([\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}]_i,[\mathbf{L}_{k_2}]_j) = < [\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}]_i,[\mathbf{L}_{k_2}]_j >$과 (2) 내장 내적: $f([\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}]_i,[\mathbf{L}_{k_2}]_j) = < \Theta_\xi[\mathbf{P}_{d_2}\mathbf{L}_{k_1}]_i,\Theta_\psi[\mathbf{L}_{k_2}]_j >$($\Theta_\xi$와 Θ_ψ는 가중치 행렬). $Z^{(l+1)}$이 주어졌을 때 노드 u와 v사이의 거리는 $\mathrm{dist}_{uv}^{H-ABC} = (\mathbf{Z}_u^{(l+1)} - \mathbf{Z}_v^{(l+1)})^2$로 계산하며, 노드 사이의 에지 연결 확률을 다음과 같이 표현한다: $prob(u,v) = [\exp((\mathrm{dist}_{uv} - \delta)/\eta) + 1]^{-1}$($\delta$와 η는 하이퍼 파라미터). dist_{uv}는 $\mathrm{H-ABC}$모듈과 그래프 컨벌루션 연산의 출력을 모두 활용한 거리이다. 연결 관계를 표현하는 다양한 데이터([13, 14] 등)에서 링크 예측 성능이 기존 방법들을 능가함을 확인하였다.

단체 복합체로 모델링된 토폴로지 공간에서 신호를 처리할 수 있는 선형 필터인 단체 컨볼루션 필터(simplicial convolutional filter)가 제안되었다[15]. k차-호지 라플라시안(kth-Hodge Laplacian) $\mathbf{L}_k$가 주어졌을 때 단체 컨볼루션 필터를 다음과 같이 정의한다:

$\mathbf{H}_k = h_0\mathbf{I} + \sum_{l_1=1}^{L_1}\alpha_{l_1}(\mathbf{B}_k^T\mathbf{B}_k)^{l_1} + \sum_{l_2=1}^{L_2}\beta_{l_2}(\mathbf{B}_{k+1}\mathbf{B}_{k+1}^T)^{l_2}$.필터의 정의에서 $\mathbf{H}_k(\mathbf{H}_k = \mathbf{H}(\mathbf{L}_{k,l},\mathbf{L}_{k,u}))$는 하부 및 상부 호지 라플라시안의 행렬 다항식으로 필터 계수 h_0, $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1,...,\alpha_{L_1}]^T$, $\boldsymbol{\beta} = [\beta_1,...,\beta_{L_2}]^T$, 필터 오더 L_1, L_2와 함께 정의된다. Ⅲ-1에서 살펴보았듯 $\mathbf{B}_k$는 k-단체를 면에 해당하는 $(k-1)$-단체로 매핑하는 행렬로, $k-$호지 라플라시안 $\mathbf{L}_k$에서 하부 라플라시안은 단체간의 하부 인접 관계를 표현하고 상부 라플라시안은 상부 인접 관계를 표현한다. 하부와 상부 라플라시안에 별도의 계수를 부여함으로써, 단체 컨볼루션 필터는 하부 인접 관계와 상부 인접 관계를 분리하여 다룰 수 있게 되었다. 제안 구조는 외환시장 분석 및 페이지 랭크를 통해 표현된 런던 도로 구조 분석을 통해 성능을 확인하였다.

단체 복합체에서 어텐션 기제를 활용할 수 있도록 simplicial attention network가 제안되었다[16]. 단체 복합체에서의 어텐션 기제는 상부 및 하부 인접 관계를 활용하는데, [16]에서는 우선 상부 및 하부 인접 관계를 위한 어텐션 계수를 다음과 같이 정의하였다(σ와 τ는 단체, a는 어텐션 계산 함수, $o_{\sigma,\tau} \in \{\pm 1\}$은 단체 σ와 τ 사이의 상대 방향을 의미):
$\alpha_{\sigma,\tau}^{\uparrow} = o_{\sigma,\tau} \cdot \mathrm{softmax}_{\tau \in N_\sigma^\uparrow}(a(\mathbf{W}_1\mathbf{h}_\sigma^k, \mathbf{W}_1\mathbf{h}_\tau^k))$,
$\alpha_{\sigma,\tau}^{\downarrow} = o_{\sigma,\tau} \cdot \mathrm{softmax}_{\tau \in N_\sigma^\downarrow}(a(\mathbf{W}_2\mathbf{h}_\sigma^k, \mathbf{W}_2\mathbf{h}_\tau^k))$. 어텐션 계수를 활용하여 단체 σ의 표현을 다음 식과 같이 갱신한다: $\mathbf{h}_\sigma^{k+1} = \phi\left(\sum_{\tau \in N_\sigma^\uparrow}\alpha_{\sigma,\tau}^{\uparrow}\mathbf{W}_1^k\mathbf{h}_\tau^k, \sum_{\tau \in N_\sigma^\downarrow}\alpha_{\sigma,\tau}^{\downarrow}\mathbf{W}_2^k\mathbf{h}_\tau^k\right)$. 참고로 통합식에서 ϕ는 하부 및 상부 인접체에서 전달한 메시지를 결합하는 갱신 함수를 의미한다. 어텐션 헤드가 Z개 존재할 경우 $\mathbf{h}_\sigma^{k+1}$을 다음과 같이 표현할 수도 있다(표현에서 $\|$는 연결(concatenation) 연산을 의미):
$\mathbf{h}_\sigma^{k+1} = \|_{z \le Z}\,\phi\left(\sum_{\tau \in N_\sigma^\uparrow}\alpha_{\sigma,\tau}^{\uparrow,z}\mathbf{W}_1^k\mathbf{h}_\tau^k, \sum_{\tau \in N_\sigma^\downarrow}\alpha_{\sigma,\tau}^{\downarrow,z}\mathbf{W}_2^k\mathbf{h}_\tau^k\right)$. 제안 방법은 수퍼 픽셀 그래프 문제와 궤적 분류 문제[11]에 적용되어 다른 방법들보다 우수한 성능을 보유함을 확인하였다.

논문 공저자 관계[17]나 표현형 온톨로지(phenotype ontology)는 고차원 상호관계를 내포하기 때문에 단체 복합체로 표현하는 것이 적합하다. 저차원 모델이 표현할 수 없는 분포가 존재하기 때문에 고차원 모델을 채택할 필요가 있다는 사실은 이미 [18]에서 지적되었다. [18]에서는 $k-$차 라플라시안을 활용하여 k단체 $\sigma_{k,i}$와 $\sigma_{k,j}$의 k-차 인접 행렬(A_k)의 i,j 요소 $A_k(i,j)$를 다음과 같이 정의하였다: $A_k(i,j) = \mathrm{I}\{\sigma_{k,i},\sigma_{k,j}\}$(면을 공유하는 경우) $+\mathrm{I}\{\sigma_{k,i},\sigma_{k,j}\}$(공면을 공유하는 경우). A_k를 이용하여 단체 복합체의 k-체인에 대한 콘볼루션 층을 다음과 같이 정의할 수 있다(ψ는 활성화 함수, $\tilde{D}_{k,ii} = \sum_j \tilde{A}_k(i,j)$, $\tilde{A}_k = A_k + 2I_{N_k}$, N_k는 $k-$단체의 수를 의미): $\mathbf{H}_k^{(l+1)} = \psi\left(\tilde{\mathbf{D}}_k^{-1/2}\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{D}}_k^{-1/2}\mathbf{H}_k^{(l)}\mathbf{W}_k^{(l)}\right)$. 단체 컨볼루션 네트워크와 단체 복합체 컨볼루션 네트워크를 적용하면 논문 공저자 데이터처럼 고차원의 상호관계가 존재하는 데이터에 대하여 저차원 모델보다 높은 성능을 확보할 수 있음을 실험적으로 확인하였다.

[18]에서 제안한 네트워크 구조에 하부 인접 단체와 상부 인접 단체로부터 $k-$단체로의 프로젝션을 추가한 네트워크 구조가 제안되었다[19]. 제안 모델에서 메시지는 $\mathbf{x}_{k,d}^{l-1} = \mathbf{B}_k^T\mathbf{x}_{k-1}^{l-1}$과 $\mathbf{x}_{k,u}^{l-1} = \mathbf{B}_{k+1}\mathbf{x}_{k-1}^{l+1}$($\mathbf{B}_k$는 기수 k인 단체 복합체의 라플라시안$\mathbf{L}_k = \mathbf{B}_k^T\mathbf{B}_k + \mathbf{B}_{k+1}\mathbf{B}_{k+1}^T$의 구성 요소)를 이용하여 다음과 같이 계산한다: $\mathbf{x}_k^l = \sigma(\mathbf{H}_{k,d}^l\mathbf{x}_{k,d}^{l-1} + \mathbf{H}_k^l\mathbf{x}_k^{l-1} + \mathbf{H}_{k,u}^l\mathbf{x}_{k,u}^{l-1})$. 제안 구조는 단체 예측 문제 및 에지 흐름 예측 문제에서 우수한 성

능을 달성하였다.

TopoSRL (topology preserving self-supervised simplicial representation learning)에서는 단체 사이에 내재된 관계를 포착하는 증강기법을 제안하였다[20]. TopoSRL에서는 열린 단체(open simplex)와 닫힌 단체(closed simplex)의 개념을 활용하는데, 전자는 열린 단체 자체는 단체 복합체를 구성하지는 않지만 열린 단체의 모든 부분집합은 단체 복합체를 구성하는 상황에 해당하며, 후자는 단체 복합체를 구성하는 단체에 해당한다. TopoSRL에서 제안한 증강기법에서는 단체 복합체 X로부터 베르누이 샘플링에 기반하여 닫힌 단체를 제거한 단체 복합체 $X^{(1)}$과 역시 베르누이 샘플링에 기반하여 열린 단체를 추가한 단체 복합체 $X^{(2)}$를 생성하는데, $X^{(1)}$과 $X^{(2)}$가 단체증강(simplicial augmentation)에 해당한다. TopoSRL은 L_{sub}와 L_{rel}의 두 가지 손실함수를 정의하였는데(전체 손실함수는 $L = \alpha L_{\mathrm{sub}} + (1-\alpha)\mathrm{L}_{\mathrm{rel}}$로 정의), 각 손실함수의 정의는 다음과 같다:

$$L_{\mathrm{sub}} = \sum_{\mathrm{k}=0}^{\mathrm{K}} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{k}}^{(1)}} \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{k}}^{(2)}} [\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(1,2)}]_{\mathrm{i,j}} [\mathbf{W}_{\mathrm{k}}]_{\mathrm{i,j}}$$와

$$L_{\mathrm{rel}} = \sum_{\mathrm{k}=0}^{\mathrm{K}} \sum_{\mathrm{i,j}=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{k}}^{(1)}} \sum_{\mathrm{i',j'}=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{k}}^{(2)}} ([\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(1)}]_{\mathrm{i,j}} - [\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(2)}]_{\mathrm{i',j'}})^2 [\mathbf{W}_{\mathrm{k}}]_{\mathrm{i,i'}} [\mathbf{W}_{\mathrm{k}}]_{\mathrm{j,j'}}$$

. 손실함수 정의에서 $\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}$ $(i = 1,2)$는 단체 복합체 $X^{(i)}$를 구성하는 단체 표현 간의 거리로 구성된 비용 행렬, $\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(1,2)}$는 $X^{(1)}$과 $X^{(2)}$를 구성하는 k-단체 간의 거리로 구성된 비용 행렬이다. $\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}$의 (p,q)번째 원소 $[\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}]_{\mathrm{p,q}}$는 $[\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}]_{\mathrm{p,q}} = \|[\mathbf{Z}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}]_{\mathrm{p}} - [\mathbf{Z}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}]_{\mathrm{q}}\|_2^2$로 구해지며, $\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(1,2)}$의 (p,q)번째 원소는 $[\mathbf{C}_{\mathrm{k}}^{(1,2)}]_{\mathrm{p,q}} = \|[\mathbf{Z}_{\mathrm{k}}^{(1)}]_{\mathrm{p}} - [\mathbf{Z}_{\mathrm{k}}^{(2)}]_{\mathrm{q}}\|_2^2$로 구해진다. $[\mathbf{Z}_{\mathrm{k}}^{(\mathrm{i})}]_{\mathrm{p}}$는 $X^{(i)}$에 속한 k-단체 p의 표현을 의미하며, $\mathbf{W}_{\mathrm{k}}$는 $X^{(1)}$에 속한 단체와 $X^{(2)}$에 속한 단체의 관계를 표현하는 가중치 행렬이다. $N_k^{(i)}$는 $X^{(i)}$에 속한 k단체의 개수를 표시한다. 식에서 알 수 있듯 L_{sub}는 인접한 단체들이 더 가깝게 임베딩되도록 하며, L_{rel}은 다른 단체 복합체에 속하는 단체 쌍들이 유사한 관계를 공유할 때, 임베딩 공간에서 해당 관계 정보를 유지하면서 동시에 단체 쌍 사이의 거리를 줄이도록 학습을 진행한다.

3. Cell Complex

셀 복합체는 단체 복합체를 일반화시킨 것으로 간주할 수 있는데, 공간에서 한 입체가 가질 수 있는 모양에 제한이 없다. 셀 복합체에서 셀은 다양한 차원의 볼(topological ball)과 위상동형인 개체를 의미하며, 셀 복합체는 셀의 서로소인 합집합에 의해 획득된 위상 공간이다. [21]에서 정의된 CXN(cell complex neural network)은 셀 복합체에서 뉴럴넷 형태의 연산을 가능하게 해주는 구조로 CXN에서 순전파를 다음과 같이 정의한다: $\mathbf{h}_{\mathrm{c}^{\mathrm{n}-1}}^{(\mathrm{k})} = \alpha_{\mathrm{n}-1}^{(\mathrm{k})}\left(\mathbf{h}_{\mathrm{c}^{\mathrm{n}-1}}^{(\mathrm{k}-1)}, \mathrm{E}_{\alpha^{\mathrm{n}-1} \in \mathrm{N}_{\mathrm{adj}}(\mathrm{c}^{\mathrm{n}-1})}(\cdot)\right)$. 정의에서 $E_{\alpha^{n-1} \in N_{adj}(c^{n-1})}(\cdot)$은

$$E_{\alpha^{n-1} \in N_{adj}(c^{n-1})}(\phi_{n-1}^{(k)}(\mathbf{h}_{\mathrm{c}^{\mathrm{n}-1}}^{(\mathrm{k}-1)}, \mathbf{h}_{\mathrm{a}^{\mathrm{n}-1}}^{(\mathrm{k}-1)}, \mathrm{F}_{\mathrm{e}^{\mathrm{n}} \in \mathrm{CO}[\mathrm{a}^{\mathrm{n}-1}, \mathrm{c}^{\mathrm{n}-1}]}(\mathbf{h}_{\mathrm{e}^{\mathrm{n}}}^{(0)}))$$

의 축약형을 의미한다. 정의 과정에서 사용된 기호 중 $\mathbf{h}_{\mathrm{c}^{\mathrm{n}-1}}^{(l)}$은 셀 c^{n-1}의 l층에서의 특징 벡터, $\alpha_j^{(k)}$와 $\phi_j^{(k)}$ $(0 \le j \le n-1)$는 훈련 대상인 미분 가능 함수, E와 F는 미분 가능한 불변환(permutation invariant) 함수, $CO[a^n, b^n]$은 셀 a^n 및 셀 b^n 과 인시던트(incident) 관계인 $(n+1)$-셀들의 교집합, $N_{adj}(a)$는 셀 a와 인접한 모든 셀의 집합을 의미한다(셀 복합체에서는 셀 a^n과 셀 b^n이 c^{n+1}과 인시던트한 셀 들의 집합에 속할 때 셀 a^n과 셀 b^n이 인접하다고 정의).

[22]에서는 셀 복합체를 활용한 셀 어텐션 네트워크(cell attention network)를 소개하였다. 셀 복합체, 그중에서도 $K-$셀 복합체는 고차 조합 라플라시안(higher-order combinatorial Laplacians)을 이용하여 다음과 같이 정의할 수 있다: $\mathbf{L}_{\mathrm{K}} = \mathbf{B}_{\mathrm{K}}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}_{\mathrm{K}}$, $\mathbf{L}_{\mathrm{k}} = \mathbf{L}_{\mathrm{k,l}} + \mathbf{L}_{\mathrm{k,u}}$($k$= $1,\ldots,K-1$), $\mathbf{L}_0 = \mathbf{B}_1\mathbf{B}_1^{\mathrm{T}}$. $K-$셀 복합체의 정의에서 $\mathbf{B}_{\mathrm{k}}$는 k-차 부호 경계 행렬(k-th signed boundary matrix)을 의미한다.

하부 라플라시안과 상부 라플라시안은 k-차 셀의 하부 인접과 상부 인접 관계의 개체들을 표현한다. 셀 어텐션 네트워크는 (1) 입력으로 주어진 그래프를 정규 셀 복합체로 임베딩 (2) 어텐션 리프트를 이용하여 노드 특성으로부터 에지 특성 추출의 단계를 거쳐 생성되며 [22]에서는 에지 레벨에서의 어텐션 메시지 패싱 방법을 제시하였다. 정규 셀 복합체로 임베딩 하는 과정은 [11]에서 소개된 셀룰러 리프팅 맵이 활용되었다. 에지 특성 추출 과정은 어텐션 리프트를 활용하였다. 어텐션 리프트는 학습 가능한 함수로 구체적인 정의는 다음과 같다: $\mathbf{x}_{\mathrm{e}} = \mathrm{g}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, \mathbf{x}_{\mathrm{j}}) = \|_{\mathrm{k}=1}^{\mathrm{F}^0} \mathrm{a}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{k}}(\mathbf{x}_{\mathrm{i}}, \mathbf{x}_{\mathrm{j}})$. 여기서 a_n^k는 어텐션 연산을 의미한다. 셀 어텐션 네트워크의 메시지 패싱 알고리즘은 메시지 교환이 에지 수준에서 발생함에 주목하여 개발되었다. l번째 메시지 패싱에서 에지 임베딩의 갱신은

다음과 같이 진행된다:

$$\tilde{\mathrm{h}}_{\mathrm{e}}^{\mathrm{l}} = \phi^{\mathrm{l}}(\mathbf{h}_{\mathrm{e}}^{\mathrm{l}}, \oplus_{\mathrm{k} \in \mathrm{N}_{\mathrm{d}}^{\mathrm{l}}(\mathrm{e})} \mathrm{a}_{\mathrm{d}}^{\mathrm{l}}(\mathbf{h}_{\mathrm{e}}^{\mathrm{l}}, \mathbf{h}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{l}}) \psi_{\mathrm{d}}^{\mathrm{l}}(\mathbf{h}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{l}}),. \oplus_{k \in N_u^l(e)} a_u^l(\mathbf{h}_{\mathrm{e}}^{\mathrm{l}}, \mathbf{h}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{l}}) \psi_{\mathrm{u}}^{l}(\mathbf{h}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{l}}))$$

갱신식에서 $\oplus$는 통합연산을 의미하며 대표적으로 sum, mean, max 연산 등이 활용될 수 있다. a_u^l과 a_d^l은 상부 및 하부 인접 관계를 활용한 어텐션 기제를 의미한다. ψ_d와 ψ_u는 어텐션 기제에서 밸류(value)에 해당하는 개체를 산출하는 역할을 한다. 제안 구조는 TU데이터셋과 PROTEINS 데이터셋[23]과 같이 복잡한 상호작용을 나타내는 데이터셋에 적용하여 성능을 확인하였다.

DCM (differential cell complex module)은 입력으로 주어진 데이터 포인트 간의 고차원 상호작용을 묘사하는 셀 복합체를 학습한다[24]. DCM의 출력은 갱신된 노드 특성 행렬과 은닉 셀 복합체를 출력하는데, (1) 은닉 셀 복합체의 1-스켈레톤을 샘플링한 후($\alpha-$DGM의 역할) (2) 샘플링된 에지로부터 생성된 사이클에서 다각형을 샘플링하여(PIM의 역할) 셀 복합체를 학습한다.

$\alpha-$DGM ($\alpha-$differentiable graph module)은 은닉 셀 복합체의 1-스켈레톤을 추정하는 역할을 한다. $\alpha-$DGM의 계산 과정은 다음 식과 같이 표현할 수 있다: $\mathbf{p}_{\mathrm{i}} = \alpha_{\mathrm{ENT}}(\mathrm{LN}(\mathbf{z}_{\mathrm{i}}))$. 여기서 LN은 layer normalization을 의미하며, $\mathbf{z}_{\mathrm{i}}$는 노드 임베딩 사이의 근사도 계산 결과를 모은 것으로 $\mathbf{z}_{\mathrm{i}} = \{\mathrm{sim}(\mathbf{x}_{0,\mathrm{aux}}(\mathrm{i}), \mathbf{x}_{0,\mathrm{aux}}(\mathrm{j}))\}$와 같이 계산되는데 계산식에서 sim은 근사도 함수를 나타낸다. $\mathbf{x}_{0,\mathrm{aux}}(\mathrm{i})$는 $\mathbf{x}_{0,\mathrm{aux}}(\mathrm{i}) = \nu_0(\mathbf{X}_{0,in})$을 통해 확보된다. 이때 $\mathbf{X}_{0,in}$은 노드 특성 행렬을 의미하고, ν_0는 학습 가능 함수이다. 마지막으로 α_{ENT}는 [25]에서 소개된 $\alpha-$entmax function으로 다음과 같이 정의된다: $\alpha_{ENT}(\mathbf{s}) = \mathrm{argmax}_{\mathbf{u} \in \Delta^d} \mathbf{u}^{\mathrm{T}} \mathbf{s} + \mathrm{H}_{\alpha}(\mathbf{u})$. 여기서 Δ^d는 d 차원의 단체를 H_α는 Tsallis α 엔트로피를 의미한다.

PIM (polygon inference module)은 1-스켈레톤에 사이클 부분집합을 샘플링하여 은닉 셀 복합체의 다각형을 추정한다. 다각형 확률은 $\mathbf{p} = \alpha_{\mathrm{ENT}}(\mathrm{LN}(\mathbf{z}))$의 형태로 계산된다. α_{ENT}와 LN은 $\alpha-$DGM와 같은 의미를 갖는다. 벡터 $\mathbf{z} \in \mathrm{R}^{\tilde{\mathrm{P}}}$($\tilde{P}$는 추정된 사이클의 개수)에 유사도가 저장되는데 에지 i, j, v에 대한 유사도 계산 과정은 다음과 같다:

$$\begin{aligned} &(\mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{i}), \mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{j}), \mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{v})) \\ &= (\mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{i}), \mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{j})) + (\mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{i}), \mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{v})) \\ &+ (\mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{j}), \mathbf{x}_{1,\mathrm{aux}}(\mathrm{v})) \end{aligned}$$

또한 $\mathbf{X}_{1,\mathrm{aux}}$는 $\mathbf{X}_{1,\mathrm{aux}} = \nu_1(\mathbf{X}_{0,\mathrm{aux}})$로 확보된다.

4. Achievements and open problems

단체 복합체나 셀 복합체는 고차원의 상호작용이 존재할 때 우수한 성능을 발휘한다. 예를 들어, 감염성 질환의 전파 모델의 모델링 데이터[26]에 대한 링크 예측 작업에서 BScNets[8]은 ROC-AUC 측도로 98,60의 성능을 달성하였는데, 동일 작업에 대하여 Hyperbolic graph convolutional neural network[26]는 90.80의 성능을 달성하였고 GCN (graph convolutional neural network)은 64.70의 성능을 달성하였다. CiteSeer[27]와 같은 일반적인 그래프 노드 분류 벤치마크에서 DCM[24]은 GCN이 달성한 69.97의 정확도에 대비하여 78.72의 정확도를 달성하였다.

기존의 딥러닝 모델은 유클리드 기하학의 구조로 표현할 수 있는 데이터에 대하여 우수한 성능을 발휘하였다[28]. 그러나 의사소통 패턴분석, 그룹 상호작용 데이터의 분석, 복잡계 시스템에서 창발적으로 발생하는 현상의 분석 등은 고차원의 상호작용을 표시할 수 있는 표현 구조를 요구하고 있다[29, 30]. 단체 복합체나 셀 복합체에 기반한 모델은 그래프 모델의 벤치마크 데이터에서 그래프 기반 모델보다 우수한 성능을 달성하였으며 네트워크 분석, 교통흐름 모델링, 경제 현상 모델링, 화학 작용 모델링, 단백질 상호작용 모델링 등이 가능함을 보였다[28, 31, 32].

단체 복합체 및 셀 복합체 대한 연구가 활성화되기 위해서는 다음과 같이 몇 가지 해결되어야 하는 한계가 존재한다고 보고되었다[28]. 첫째, 단체 복합체나 셀 복합체와 같은 비유클리드 구조를 효율적으로 다룰 수 있는 소프트웨어 프레임워크가 개발될 필요가 있다. 둘째, 방향성을 갖는 에지를 취급할 수 있는 효율적인 방법이 개발되어야 한다. 셋째, 제한된 샘플을 이용하여 단체 복합체나 셀 복합체를 생성 모델에 적용할 수 있는 접근법이 필요하다.

IV. Conclusions

본 논문에서는 단체 복합체 및 셀 복합체를 적용하여 고차원의 상호작용을 내포하는 데이터를 분석하는 최신 연구 성과를 소개하였다. 단체 복합체는 그래프를 일반화한

개념이며, 셀 복합체는 단체 복합체를 일반화한 것으로 그래프 기반 모델보다 고차원의 상호작용 및 관계를 표현할 수 있다. 본 논문에서는 단체 복합체와 셀 복합체에 대한 다양한 연구 중 단체 복합체 및 셀 복합체에서의 임베딩 방법과 컨볼루션 필터의 구성, 어텐션 기제의 활용에 대한 최신 연구 성과를 요약하였다. 또한, 단체 복합체 및 셀 복합체에 기반한 모델들의 성능 향상에 필요한 향후 연구 방향을 간단하게 소개하였다.

ACKNOWLEDGEMENT

This study was supported by research fund of Korea Military Academy(Future Strategy and Technology Research Institute). (RN: 24-AI-Center-03).

REFERENCES

[1] Z. Wu, S. Pan, F. Chen, G. Long, C. Zhang, and P. S. Yu, "A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks," IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst., Vol. 32, No. 1, pp. 4-24, Jan. 2021. DOI: 10.1109/TNNLS.2020.2978386

[2] J. Zhou, G. Cui, S. Hu, Z. Zhang, C. Yang, Z. Liu, L. Wang, C. Li, and M. Sun, "Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications," AI Open, Vol. 1, pp. 57-81, Dec 2020. DOI: 10.1016/j.aiopen.2021.01.001

[3] C. Gao, Y. Zheng, N. Li, Y. Li, Y. Qin, J. Piao, Y. Quan, J. Chang, D. Jin, X. He, and Y. Li, "A Survey of Graph Neural Networks for Recommender Systems: Challenges, Methods, and Directions," ACM Tors, Vol. 1, No. 1, pp. 1-51, Mar 2023. DOI: 10.1145/3568022

[4] C. Bodnar, "Topological Deep Learning," Ph.D. dissertation, University of Cambridge, 2022.

[5] M. Papillon, S. Sanborn, M. Hajij, and N. Miolane, "Architectures of Topological Deep Learning: A Survey of Message-Passing Topological Neural Networks," arXiv https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.10031, 2024.

[6] L.-H. Lim, "Hodge Laplacians on Graphs," SIAM Review, Vol. 62, No. 3, pp. 685-715. Aug 2020. DOI: 10.1137/18M1223101

[7] M. T. Schaub, A. R. Benson, P. Horn, G. Lippner, and A. Jadbabaie, "Random Walks on Simplicial Complexes and The Normalized Hodge 1-Laplacian," SIAM Review, Vol. 62, No.2, pp. 353-391, May 2020. DOI: 10.1137/18M1201019

[8] Y. Chen, Y. R. Gel, and H. V. Poor, "BScNets: block simplicial complex neural networks," Proceedings of the 36th AAAI Conference on Artificial Intelligence, pp. 6333-6341, virtual, 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2112.06826

[9] F. Battiston, G. Cencetti, I. Iacopini, V. Latora, M. Lucas, A. Patania, J.-G. Young, and G. Petri, "Networks Beyond Pairwise Interactions: Structure and Dynamics," Physics Reports, Vol. 874, pp. 1-92, Aug 2020. DOI: 10.1016/j.physrep.2020.05.004

[10] T. M. Roddenberry, N. Glaze, and S. Segarra, “Principled simplicial neural networks for trajectory prediction,” Proceedings of the International Conference on Machine Learning. pp. 9020-9029, virtual, 2021. DOI: 10.48550/arXiv.2102.10058

[11] C. Bodnar, F. Frasca, Y. G. Wang, N. Otter, G. Montúfar, P. Liò, and M. Bronstein, "Weisfeiler and Lehman go topological: message passing simplicial networks," Proceedings of International Conference on Machine Learning, pp. 1026-1037, virtual, 2021. DOI: 10.48550/arXiv.2103.03212

[12] C. Morris, N. M. Kriege, F. Bause, K. Kersting, P. Mutzel, and M. Neumann, "TUDataset: A collection of benchmark datasets for learning with graphs," Proceedings of International Conference on Machine Learning 2020 workshop "Graph Representation Learning and Beyond", virtual, 2020. DOI: 10.48550/arXiv.2007.08663

[13] R. Eletreby, Y. Zhuang, K. M. Carley, O. Yagan and H. V. Poor, "The Effects of Evolutionary Adaptations on Spreading Processes in Complex Networks," Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., Vol. 117, No. 11, pp. 5664−5670, Jan 2020. DOI: 10.1073/pnas.1918529117

[14] M. Salathé, M. Kazandjieva, J. W. Lee, P. Levis, M. W. Feldman, and J. H. Jones, "A High-Resolution Human Contact Network for Infectious Disease Transmission," Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., Vol. 107, pp. 22020−22025, Nov 2010. DOI: 10.1073/pnas.1009094108

[15] M. Yang, E. Isufi, M. T. Schaub, and G. Leus, "Simplicial Convolutional Filters," IEEE Trans. Signal Process., Vol. 70, pp. 4633−4648, Sep 2022. DOI: 10.1109/TSP.2022.3207045

[16] C. W. J. Goh, C. Bodnar, and P. Liò, "Simplicial attention networks," Proceedings of the ICLR 2022 Workshop on Geometrical and Topological Representation Learning, virtual, 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2204.09455

[17] J. Yang and J. Leskovec. "Defining and Evaluating Network Communities based on Ground-Truth," Knowl. Inf. Syst. Vol. 42, pp. 181−213 Jan 2015. DOI: 10.1007/s10115-013-0693-z

[18] R. Yang, F. Sala, P. Bogdan, "Efficient representation learning for higher-order data with simplicial complexes," Proceedings of the First Learning on Graphs Conference, pp. 13:1-13:21, virtual, 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2103.04046

[19] M. Yang and E. Isufi, "Convolutional Learning on Simplicial Complexes," arXiv preprint https://doi.org/10.48550/arXiv.2301.11163 2023.

[20] H. Madhu and S. P. Chepuri, "TopoSRL: topology preserving self-supervised simplicial representation learning," Advances in Neural Information Processing Systems 36, pp. 64306-64317, New Orleans, U.S.A. 2023.

[21] M. Hajij, K. Istvan, and G. Zamzmi, "Cell complex neural networks," Proceedings of NeurIPS 2020 Workshop Topological Data Analysis and Beyond, virtual, 2020. DOI: 10.48550/arXiv.2010.00743

[22] L. Giusti, C. Battiloro, L. Testa, P. Di Lorenzo, S. Sardellitti and S. Barbarossa, "Cell attention networks," Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks, pp. 1-8, Queensland, Australia, 2023. DOI: 10.1109/IJCNN54540.2023.10191530

[23] P. D. Dobson and A. J. Doig, "Distinguishing Enzyme Structures from Non-Enzymes without Alignments," J. Mol. Biol. Vol. 330, No. 4. pp. 771-783, July 2003. DOI: 10.1016/S0022-2836(03)00628-4

[24] C. Battiloro, I. Spinelli, L. Telyatnikov, M. Bronstein, S. Scardapane, and P. Di Lorenzo, "From latent graph to latent topology inference: differentiable cell complex module," Proceedings of International Conference on Learning Representation, Vienna Austria, 2024. DOI: 10.48550/arXiv.2305.16174

[25] B. Peters, V. Niculae, and A. F. T. Martins, "Sparse sequence-to-sequence models," Proceedings of the 57th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, pp. 1504-1519, Florence, Italy, 2019. DOI: 10.48550/arXiv.1905.05702

[26] I. Chami, R. Ying, C. Re´, and J. Leskovec, "Hyperbolic graph convolutional neural networks," Advances in Neural Information Processing Systems 32, pp. 4868-4879, Vancouver, Canada, 2019. DOI: 10.48550/arXiv.1910.12933

[27] C. L. Giles, K. D. Bollacker, S. Lawrence "CiteSeer: an automatic citation indexing system," Proceedings of the third ACM conference on Digital libraries, pp. 89-98, Pittsburgh, PA, U.S.A. 19998. DOI: 10.1145/276675.276685

[28] M. M. Bronstein, J. Bruna, Y. LeCun, A. Szlam, and P. Vandergheynst, "Geometric Deep Learning: Going Beyond Euclidean Data," IEEE Sig. Proc. Mag., Vol. 34, No. 4, pp. 18-42, Jul 2017. DOI: 10.1109/MSP.2017.2693418

[29] D. Lazer et al., "Life in The Network: The Coming Age of Computational Social Science," Science, Vol. 323, No. 5915, pp. 721-723, Feb 2009. DOI: 10.1126/science.1167742

[30] R. Lambiotte, M. Rosvall and I. Scholtes, "From Networks to Optimal Higher-order Models of Complex Systems," Nature Physics, Vol. 15, pp. 313-320, Mar 2019. DOI: 10.1038/s41567-019-0459-y

[31] J. Hoppe and M. T. Schaub, "Representing edge flows on graphs via sparse cell complexes," Proceedings of the Second Learning on Graphs Conference, pp. 1:1-1:22, virtual, 2023. DOI: 10.48550/arXiv.2309.01632

[32] N. Malod-Dognin and N. Pržulj, "Functional Geometry of Protein Interactomes," Bioinformatics, Vol. 35, No. 19, pp. 3727−3734, Mar 2019. DOI: 10.1093/bioinformatics/btz146

Authors

Ho-Sik Seok received the B.S., M.S. and Ph.D. degrees in Computer Engineering from Seoul National University, Korea, in 1999, 2001 and 2012, respectively. Dr. Seok joined the faculty of the Dept. of Computer and Communications Engineering, Kangwon National University, in 2016. He is currently with the Dept. of Artificial Intelligence and Data Science, Korea Military Academy. He is interested in computational topology, statistical learning, and deep neural networks.