

# 人工智能与复杂系统的拓扑理论\*

刘冉<sup>1</sup> 吴杰<sup>2</sup> 张蒙蒙<sup>3</sup>

**提要** 拓扑学被誉为“数学的哲学”，以其宏观而抽象的视角揭示空间与形状的本质结构，通过引入代数不变量，拓扑方法能够有效刻画复杂几何体与系统的核心内在特征。自 20 世纪 90 年代以来，拓扑思想不断向数据科学领域延伸，2009 年拓扑数据分析 (TDA) 的兴起标志着拓扑学与数据科学的深度融合。随着理论与算法的持续发展，TDA 已成为处理非线性与高维数据的重要数学工具。近年来，拓扑学理论进一步应用于机器学习、深度学习及复杂网络研究，为解析复杂系统中的高阶互作结构与机理提供了新的数学途径，并为非线性人工智能技术的发展注入了新的动力。作者面向一般科研读者系统介绍相关应用的基础拓扑理论，涵盖经典的单纯同调理论、层同调理论及近年兴起的拓扑新型应用框架，旨在为从事拓扑应用研究的数学工作者与学生、以及寻求非线性人工智能数学工具的科研人员提供系统性的理论导引与方法启示。

**关键词** 拓扑数据分析, 持续同调, 胞腔层论,  $\Delta$ -层同调, GLMY 同调, 双超图, 超网络, 互作复形

**MR (2020) 主题分类** 55N31, 55U10

**中图法分类** O189.2, Q-31, O231.5

**文献标志码** A

**文章编号** 1000-8314(2025)03-0225-22

## §1 概述

在大数据时代，面对高维、复杂、动态和异构的数据，传统的数据分析方法难以有效捕捉其中的结构和模式，导致数据处理软件无法有效应对。这种局限性阻碍了人工智能及相关行业的发展，尤其是在复杂疾病、中医与系统医学、中药与组合药设计、脑科学、材料科学、气象预测、城市交通管理、智慧城市、数字经济与金融、个性化教育等领域。由于这些领域涉及大量因素的复杂关联，传统的分析方法难以揭示大数据中的关键结构和演化规律，基于此方法的人工智能技术效果大打折扣。复杂网络是数据分析的重要工具，为应对复杂大数据的这一挑战，人们迫切需要破解高阶互动复杂系统的底层机理，近年来主要研究对象已从传统的两两互作结构转向多元互作结构<sup>[1–8]</sup>。

传统应用数学为两两互作网络提供了大量成熟的数学工具与理论方法，奠定了现有人工智能技术的基础。然而，解析高阶互作复杂网络的数学方法仍然十分有限，尚未形成

本文 2025 年 4 月 22 日收到，2025 年 9 月 15 日收到修改稿。

<sup>1</sup>北京航空航天大学数学科学学院，北京 100191；北京雁栖湖应用数学研究院复杂系统拓扑统计理论及应用北京市重点实验室，北京 101408。E-mail: ranliu@bimsa.cn

<sup>2</sup>河北师范大学数学科学学院，石家庄 050024；北京雁栖湖应用数学研究院复杂系统拓扑统计理论及应用北京市重点实验室，北京 101408。E-mail: wujie@bimsa.cn

<sup>3</sup>北京雁栖湖应用数学研究院复杂系统拓扑统计理论及应用北京市重点实验室，北京 101408。E-mail: mengmengzhang@bimsa.cn

\*本文受到河北省高端人才项目、北京雁栖湖应用数学研究院科研启动经费及上海数学与交叉学科研究院交叉项目 (No. SIMIS-ID-2025-TP) 的资助。

完整的理论体系. 人工智能技术所面对的高阶互作复杂网络比  $N$  体问题等经典物理学复杂系统更有挑战性, 主要体现在: 源自于现实世界的高阶互作关系往往难以如同物理学可以用数学方程予以刻画, 以及现实世界往往多重高阶互作并存, 形成高度复杂的高阶互作结构. 传统上, 对于源于物理学的复杂系统, 如  $N$  体问题, 数学方法往往倾向于细节分析, 面对远比物理学中的  $N$  体问题更复杂的系统时, 难以揭示其核心的拓扑结构; 高阶互作复杂网络的前沿研究往往运用代数拓扑学、微分几何学、离散微积分学等数学理论<sup>[9-10]</sup>, 超图与单纯复形已成为高阶互作复杂系统物理学研究的重要数学工具<sup>[1]</sup>.

拓扑学与微分几何学奠定了现代物理学与现代科技的数学基础, 可以预见拓扑学对于未来非线性人工智能技术扮演着同样的角色. 事实上, 在 1990 年代开始的前期探索<sup>[11-13]</sup>基础上, 拓扑数据分析作为新兴研究领域于 2009 年诞生<sup>[14]</sup>, 其后得到快速发展并进一步催生了拓扑深度学习研究领域<sup>[15-16]</sup>, 图 1.1 展示了拓扑数据分析 (TDA, Topological Data Analysis) 及持续同调 (PH, persistent homology) 近 20 多年来在前沿科技领域的应用情况.

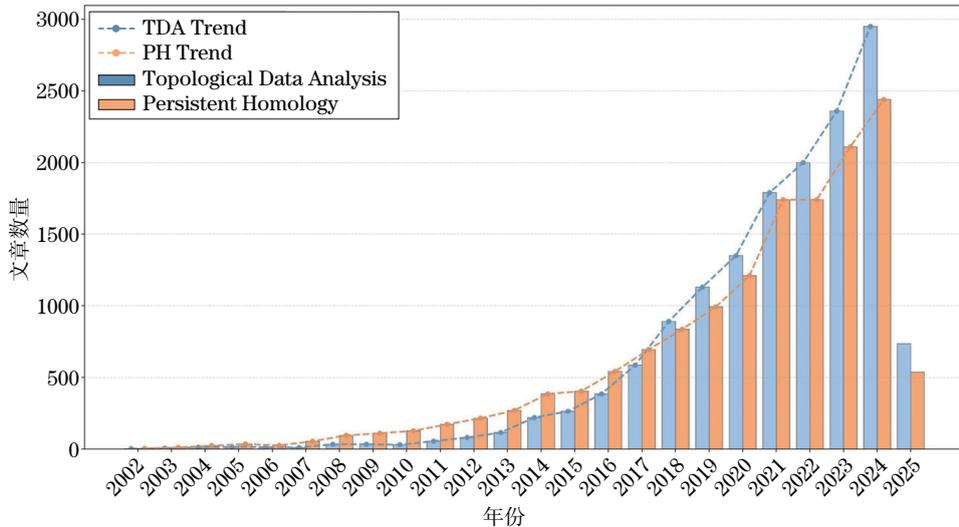


图 1.1 在谷歌学术 (Google Scholar) 中统计在题目和正文中包含完整字句 “Topological Data Analysis”, “Persistent Homology” 的文章数量, 包含 2002 年至 2025 年 (Q1) 每年统计结果.

拓扑数据分析通过捕捉数据的拓扑不变量 (如连通性、环、孔洞等), 在多个领域展现了强大的应用潜力. 在生物医学领域, TDA 已被用于分析基因表达、蛋白质相互作用网络、医学影像和疾病分类等具体问题<sup>[17-20]</sup>; 在材料科学领域, TDA 可以辅助理解材料性能, 分析材料的微观结构, 如: (非) 晶体结构、孔隙网络等<sup>[21-22]</sup>; 在网络科学领域, TDA 已被验证可以成功解析社交网络、交通网络和生物网络等复杂网络的拓扑结构<sup>[23-26]</sup>; 在金融经济领域也有 TDA 的身影, 市场数据分析、投资组合优化、时间序列模式识别及股票预测都可以与其有机结合<sup>[27-28]</sup>; 同时 TDA 还可以辅助深度学习, 用于可解释性分析和优化神经网络架构<sup>[29-30]</sup>.

TDA 的核心思想是基于代数拓扑学, 通过单纯复形建模, 依照距离尺度, 将欧氏空间

中点云数据的几何信息转化为持续变化的抽象几何结构. 通过计算这些几何体的代数拓扑不变量 (如持续同调), 为数据提取深层次的拓扑特征; 这一方法特别适用于具有显著几何结构的点云数据, 并在结合人工智能技术后, 展现出了卓越的分析效果. 拓扑数据分析的传统思路 (持续同调) 对于几何属性不明显的数据或高阶互作复杂网络, 依然存在局限性. 单纯复形建模对于一些社会网络或生物网络具有局限性, 例如: 合作者网络, 以拥有合作论文来定义作者间的超边关系, 并不满足单纯复形的约束条件. 超图建模具有更大的泛化性能<sup>[2]</sup>. 从拓扑角度, 超图是抽象单纯复形的推广, 不再满足抽象单纯复形的约束条件, 可视为“丢失一些面的单纯复形”, 拥有“拟几何结构”. 经典的单纯同调理论可以自然地推广到超图的嵌入同调<sup>[31]</sup>, 并可以进一步推广到双超图 (super-hypergraph) 的同调理论<sup>[32]</sup>; 这些新型代数拓扑理论, 极大地提升了拓扑方法在人工智能领域的泛化能力, 使得拓扑方法能够适用于更加抽象的数据, 并获得实效性应用的验证<sup>[33–34]</sup>.

高阶拉普拉斯算子 (Laplacian operator) 的引入使得 TDA 具有融合物理与微分几何思想的能力, 同时覆盖并大幅提升了传统图拉普拉斯 (graph Laplacian) 的分析能力. 拉普拉斯算子源于物理和微分几何, 其核心功能是刻画函数在局部区域内偏离平均值的程度. 在连续域上, 经典的拉普拉斯用于研究稳态问题、热扩散和波传播, 并通过 De Rham-Hodge 理论连接几何与拓扑. 在离散领域, 图的拉普拉斯是组合图论的核心工具, 其广泛应用于分子稳定性、电网络、神经科学和信号处理等领域. 在 TDA 中, 通过链复形的拓扑拉普拉斯 (如组合拉普拉斯或离散 Hodge 拉普拉斯), 可以从点云数据中提取几何信息和拓扑特征, 其谱信息同时揭示了数据的连接性和形状特性. 近年来, 诸多持续拉普拉斯的创新发展, 进一步增强了 TDA 在捕捉复杂数据动态行为方面的能力.

图论建模是数据处理、深度学习、复杂网络等研究领域最常用的方法, 描述节点之间关联性的数据, 可以用加权有向或无向图给予刻画. 有向或无向图的高阶数学结构, 对解析复杂网络的高阶互作关系具有重要的潜在应用价值. 1978 年, László Lovász 在文<sup>[35]</sup>中通过引入邻居复形的概念, 对无向单图进行单纯复形建模, 运用代数拓扑学解决了组合学中的 Kneser 猜想, 开创了拓扑组合学研究领域. 此后, 对无向图的代数拓扑学研究一直持续不断, 并得到有效的应用<sup>[36]</sup>.

Grigor'yan Alexander, 林勇, Muranov Yury 和丘成桐于 2012 年引入了有向图的道路同调理论<sup>[37]</sup>, 随后作者们进一步发展了有向图的同伦理论<sup>[38]</sup>, 并发表了一系列相关论文. 需要指出, 文<sup>[37]</sup>突破了传统代数拓扑的框架, 其所引入的有向图的道路复形 (即有向图的道路形成的集合), 一般不是单纯复形或其他具有几何形体结构的复形<sup>1</sup>, 并成功地在道路复形上建立同调理论, 从而引入有向图的道路同调理论; 这项工作催发了众多学者的跟进研究, 包括超图与双超图的嵌入同调理论<sup>[31–32]</sup>; 2022 年 11 月, 相关领域的学者达成共识, 将该新兴研究领域以四位作者的名字首字母命名, 称为 GLMY 理论.

GLMY 理论传承了代数拓扑学的思想方法, 并突破了“几何形体假说”的框架, 其超强的泛化能力为未来非线性人工智能的拓扑理论提供了可能的思路. 目前该研究领域已经呈现出如下特色:

1. 从网络视角, 一个单纯复形的同调是其面关系生成的有向图的道路同调, 即单纯同

<sup>1</sup>事实上, 近期研究表明, 有向图的道路同调可以不是任何一个拓扑空间的同调 (见<sup>[39]</sup>).

调是有向图道路同调的一种特殊情况;从建模视角,超图的嵌入同调是单纯同调的一个自然推广,从而 GLMY 理论覆盖传统的单纯同调理论.进一步,对于拓扑建模中关键的持续性问题, TDA 依照距离尺度产生的持续性,对于图结构数据,可以运用打分机制得以实现<sup>[32]</sup>,从而 GLMY 数据分析覆盖并超越了流行的持续同调 (PH).

2. 高阶拉普拉斯算子依然适用于 GLMY 理论,为 GLMY 数据分析提供了物理与几何的支撑点.

3. GLMY 理论与图论有着天然的相容性,可视为图论的现代化高阶版本,适用于解析图结构数据的连接性和拟几何形状特性,覆盖并大幅提升了传统图论的分析能力.

4. GLMY 理论的内涵具有拓展性. GLMY 理论以高阶互作复杂网络为研究导向,借助代数拓扑的思想与方法,从组合与代数的双重视角,对图结构数据进行系统刻画.目前,基于 GLMY 理论框架,已经发展出多种形式的同调理论<sup>[40-44]</sup>,不断地充实 GLMY 理论的内涵,为解析高阶互作复杂网络提供越来越多的拓扑工具.

5. GLMY 理论具备催化未来基础数学的能力.将有向图或箭图视为缺失复合运算的范畴,道路复形是范畴神经复形的推广,从而 GLMY 理论传承并突破了范畴神经复形理论;有向图或箭图的高阶同伦论与高阶范畴理论具有紧密的关联性;GLMY 理论同时提出了有向图的同伦群等极具挑战性的数学难题.

6. GLMY 理论具有超强的学科交叉性. GLMY 理论与前沿统计学及深度学习结合取得大量的成功应用<sup>[45-49]</sup>,其与前沿统计学超网理论<sup>[50]</sup>的结合,在复杂系统高阶互作的结构分析方面取得突破性进展<sup>[50]</sup>.

需要指出, GLMY 理论依然在不断发展之中,有向图的同伦论尚处于初级阶段,诸多基本数学问题依然未解决,相信其数学理论的深入发展将会带来更多的实效性应用.在接下来的章节,文章将从单纯同调开始,对 GLMY 理论的思想方法与发展思路给予通俗的介绍.

## §2 单纯同调论与持续同调

如同其他科学研究领域,代数拓扑学的核心问题是研究几何体在连续形变(同伦)下的分类;粗略地说,给定一个复杂几何体,我们可以运用代数拓扑对其在粗线条意义下进行同伦分类,进而运用几何拓扑与微分几何对其更精细的分类与分析.

尽管几何体的同伦分类问题远未获得解决,但拓扑学家们已经发展出一系列数学理论,并成功地运用于一些特殊几何体的分类,在数学其他研究领域与理论物理学中也取得广泛的应用,其中经典且具有良好的可计算性的工具是单纯同调理论;其基本思路是进行“剖分”,转化为组合问题,再运用代数方法引入单纯同调或上同调,对几何体赋予代数量(整数、群、环、模等),这些代数量在同伦下具有不变的性质,从而可以作为“几何体在同伦下的拓扑特征”,用于几何体的同伦分类研究.下面我们回顾单纯复形与剖分的数学概念.

**定义 2.1** (单形) 给定欧氏空间  $\mathbb{R}^m$  中的  $n+1$  个点  $A_0, A_1, \dots, A_n$ , 如果从  $A_0$  出发分别到  $A_1, \dots, A_n$  的向量组  $A_1 - A_0, A_2 - A_0, \dots, A_n - A_0$  线性无关, 则称点集

$\{A_0, A_1, \dots, A_n\}$  仿射无关, 否则称仿射相关. 一个  $n$  维 (几何) 单形  $\sigma$  是指欧氏空间中包含  $n+1$  个仿射无关的点的集合  $\{A_0, A_1, \dots, A_n\}$  形成的凸包, 简记为  $\sigma = [A_0, A_1, \dots, A_n]$ . 点集  $\{A_0, A_1, \dots, A_n\}$  的一个非空子集所张成的凸包被称为  $\sigma$  的一个面.

一个几何单形  $\sigma = [A_0, A_1, \dots, A_n]$  的顶点集  $\{A_0, A_1, \dots, A_n\}$  是固定的. 给定任意  $x \in \mathbb{R}^m$ , 从定义容易看出,  $x \in \sigma$  当且仅当存在实数  $t_0, t_1, \dots, t_n$  满足如下条件:

$$x = \sum_{i=0}^n t_i A_i, \quad \sum_{i=0}^n t_i = 1, \quad 0 \leq t_0, t_1, \dots, t_n \leq 1. \quad (2.1)$$

顶点集仿射无关的条件可以保证, 对于  $x \in \sigma$ , 满足上述条件的实数  $t_0, t_1, \dots, t_n$  具有唯一解, 称  $t_i$  为  $x$  关于顶点  $A_i$  的重心坐标, 记为  $t_{A_i}(x)$ . 重心坐标  $t_{A_i}(x)$  可解释为点  $x$  成为顶点  $A_i$  的概率, 在此视角下, 一个几何单形是其顶点集的概率分布空间.

粗略地说, 几何体的三角剖分是将其分解为一组单形, 其中每个单形都是最基本的几何单元. 为了对这一过程进行严格的数学刻画, 需要借助单纯复形和同胚的概念. 首先回忆下, 两个拓扑空间  $X$  与  $Y$  同胚是指存在单且满的连续映射  $f: X \rightarrow Y$ , 使得其逆映射  $f^{-1}: Y \rightarrow X$  也连续.

**定义 2.2** (几何单纯复形、多面体与可剖空间) 一个几何单纯复形  $K$  是欧氏空间中的一族单形, 满足如下条件: 给定  $K$  中的任意两个单形  $\sigma$  与  $\tau$ , 要么不相交, 要么相交于公共面. 一个单纯复形  $K$  的多面体, 记为  $|K|$ , 定义为  $|K| = \bigcup_{\sigma \in K} \sigma$ , 即  $K$  上所有单形的并, 同时赋予弱拓扑,  $|K|$  的子集  $A$  是一个闭集当且仅当  $A$  与  $K$  中每个单形  $\sigma$  的交  $A \cap \sigma$  是  $\sigma$  的一个闭子集. 给定一个拓扑空间  $X$ , 假如存在一个单纯复形  $K$ , 使得  $X$  同胚于  $|K|$ , 则称  $X$  是一个可剖空间, 以及  $K$  为  $X$  的一个剖分.

需要指出, 多面体  $|K|$  上可以拥有多种自然的拓扑空间结构, 除了定义中的弱拓扑, 多面体  $|K|$  作为欧氏空间的子集, 可以传承子空间拓扑; 同时, 每个单形的重心坐标可以系统化地延拓到多面体  $|K|$ , 从而可以在  $|K|$  上引入  $l^p$ -度量, 建立度量空间. 这三种不同的拓扑空间结构, 当  $K$  有无限个单形时, 会产生差异性; 但当  $K$  只有有限个单形时 (即  $K$  是有限单纯复形), 以上三种拓扑空间结构一致.

几何体通过三角剖分得到几何单纯复形, 从而获得一组单形及其之间的公共面, 这些信息可以用来重构原始几何体. 几何单纯复形还可以进一步抽象化理解.

**定义 2.3** (抽象单纯复形) 一个抽象单纯复形  $\mathcal{K}$  是一族满足子集运算封闭的非空有限集, 也就是说, 假如  $A \in \mathcal{K}$ , 则  $A$  的任一非空子集也属于  $\mathcal{K}$ .

抽象单纯复形与几何单纯复形在下面的意义下呈现一一对应关系, 此关系为拓扑数据分析提供了支撑点, 即“运用抽象单纯复形建模, 便可获得几何形体结构”:

1. 给定一个几何单纯复形  $K$ , 我们可以按如下方式构造一个抽象单纯复形  $\mathcal{K}$ , 称  $\mathcal{K}$  为  $K$  的抽象化以及多面体  $K$  为  $\mathcal{K}$  的几何实现,  $K$  的顶点集  $\{A_0, A_1, \dots, A_n\} \in \mathcal{K}$  当且仅当它可以张成  $K$  中的一个单形.

2. 任何一个抽象单纯复形  $\mathcal{K}$  均存在几何实现, 且  $\mathcal{K}$  的任意两个几何实现是局部线性同胚的.

这一对应为拓扑数据分析提供了理论基础: 通过将点云表示为抽象单纯复形, 能够重建潜在几何对象的几何结构.

单纯复形概念的一个推广是  $\Delta$ -集或  $\Delta$ -复形, 粗略地说, 可以把单纯复形作为集合变成多重集; 技术上, 我们通过面算子来定义  $\Delta$ -集.

**定义 2.4** ( $\Delta$ -集)  $\Delta$ -集, 也叫半单纯集, 是一个有限或无限的集合序列  $S = \{S_0, S_1, \dots\}$  和一族映射

$$d_i: S_n \rightarrow S_{n-1} \quad (0 \leq i \leq n),$$

称为面算子, 满足  $\Delta$ -等式

$$d_i d_j = d_j d_{i+1} \quad (i \geq j).$$

下面讨论  $\Delta$ -集的几何实现, 记

$$\Delta^n = \left\{ (t_0, t_1, \dots, t_n) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid 0 \leq t_0, t_1, \dots, t_n \leq 1, \sum_{i=0}^n t_i = 1 \right\}$$

为  $n+1$  维欧氏空间的标准  $n$  单形, 以及余面算子

$$d^i: \Delta^{n-1} \rightarrow \Delta^n, \quad (t_0, t_1, \dots, t_{n-1}) \mapsto (t_0, \dots, t_{i-1}, 0, t_i, \dots, t_{n-1}),$$

其中  $0 \leq i \leq n$ . 标准  $n$  单形的内点集记为  $\text{Int}(\Delta^n)$ , 即

$$\text{Int}(\Delta^n) = \left\{ (t_0, t_1, \dots, t_n) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid 0 < t_0, t_1, \dots, t_n < 1, \sum_{i=0}^n t_i = 1 \right\}.$$

**定义 2.5** ( $\Delta$ -复形<sup>[51]</sup>) 一个拓扑空间  $X$  的  $\Delta$ -复形结构是一族映射

$$C_n(X) = \{ \sigma_\alpha: \Delta^n \rightarrow X \mid \alpha \in J_n \}, \quad n \geq 0,$$

这里  $J_n$  是  $n$  维指标集, 满足下面条件:

1. 每个映射  $\sigma_\alpha$  限制在内点集  $\sigma_\alpha|: \text{Int}(\Delta^n) \rightarrow X$  是单射, 且对于  $X$  中的每一个点  $x$ , 存在唯一的指标  $\alpha$ , 使得  $x \in \sigma_\alpha(\text{Int}(\Delta^n))$ .

2.  $C_n(X)$  在面运算下封闭, 即对于每一个  $\sigma_\alpha \in C_n(X)$ , 合成映射  $\sigma_\alpha \circ d^i$  ( $0 \leq i \leq n$ ) 属于  $C_{n-1}(X)$ ,  $\alpha \in J_n$ .

3. 弱拓扑, 即  $A \subseteq X$  是一个开子集当且仅当, 对于每一个  $\sigma_\alpha \in C_n(X)$ ,  $\sigma_\alpha^{-1}(A)$  是  $\Delta^n$  的一个开子集,  $\alpha \in J_n$ .

$\Delta$ -复形融合了胞腔复形的思想与单纯复形的组合属性. 从其定义容易看出, 每个  $\Delta$ -复形的指标集是一个  $\Delta$ -集; 通过逆向操作, 我们可以获得抽象  $\Delta$ -集的几何实现.

给定一个  $\Delta$ -集  $S$ , 将其视为待定的  $\Delta$ -复形的指标集; 对于  $S_n$  中的每一个元素  $x$  分配一个标准  $n$  单形  $\Delta^n$ , 作不交并以及引入等价关系作粘接; 确切地说, 作为集合

$$|S| = \left( \bigcup_{x \in S_n, n \geq 0} (\Delta^n, x) \right) / \sim = \left( \bigcup_{n \geq 0} \Delta^n \times S_n \right) / \sim,$$

这里的等价关系由下面的关系生成, 对于任一  $x \in S_n$  以及任一  $z \in \Delta^{n-1}$ ,

$$(d_i x, z) \sim (x, d^i z) \quad (0 \leq i \leq n).$$

直观地说, 将  $d_i x \in S_{n-1}$  所携带的标准  $n-1$  维单形, 依余面算子  $d^i: \Delta^{n-1} \rightarrow \Delta^n$  粘到  $x$  所携带的标准  $n$  单形, 然后对集合  $|S|$  赋予弱拓扑, 容易检验所获得的拓扑空间  $|S|$  是一个  $\Delta$ -复形.

$\Delta$ -集可以被视为一种类似于前馈神经网络 (feed-forward neural network) 的结构, 用来刻画几何体, 两者的相似性可以参见图 2.1.

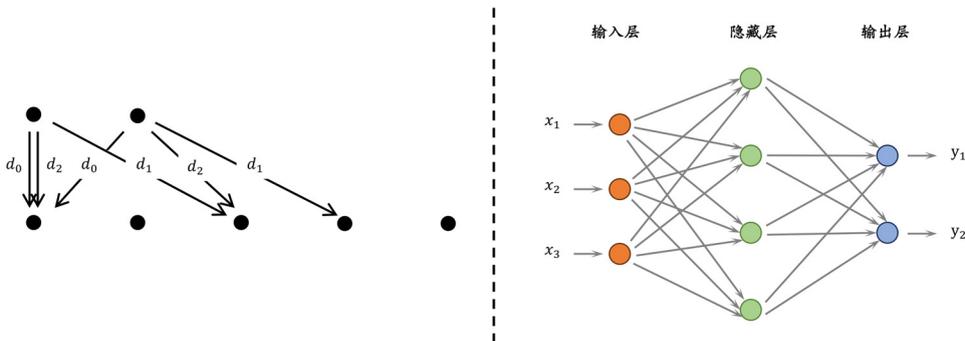


图 2.1  $\Delta$ -集结构 (左) 及简单前馈神经网络 (右) 的示例.

单纯复形赋予定向之后可以称为  $\Delta$ -集. 一个单纯复形的定向指的是其顶点集的一个偏序, 使得其上每个单形的顶点集是全序子集<sup>[52]</sup>. 每个单纯复形可以有多种定向, 取定一个定向的单纯复形被称为定向单纯复形.

给定一个定向几何或抽象单纯复形  $K$ , 令  $K_n$  为  $K$  中  $n$  单形所构成的集合. 按下面的规则引入面算子  $d_i: K_n \rightarrow K_{n-1}$ , 给定  $K_n$  中的一个单形  $\sigma = [A_0, A_1, \dots, A_n]$ , 根据定向, 可以假设  $A_0 < A_1 < \dots < A_n$ , 定义

$$d_i[A_0, A_1, \dots, A_n] = [A_0, A_1, \dots, A_{i-1}, A_{i+1}, \dots, A_n],$$

即去掉顶点  $A_i$  所张成的  $n-1$  维单形. 容易检验,  $K^\Delta = (K_0, K_1, \dots)$  在上述的面算子下成为  $\Delta$ -集.

从上面的构造容易看出,  $\Delta$ -集能够有效地将单纯复形概念推广到多重集的情况. 一个简单例子如下, 假设有两条线段  $e_1$  与  $e_2$  在其两端点  $v$  与  $w$  分别粘接, 几何形体会形成一个形如图 2.2 的圆圈.

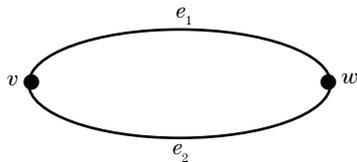


图 2.2  $\Delta$ -集示例.

从单纯复形角度, 给定两个点  $v$  与  $w$ , 其所张成的 1 单形是由  $v$  与  $w$  唯一决定的线段 (两点的凸包), 无法直接刻画重复计数的边  $e_1$  与  $e_2$ ; 从  $\Delta$ -集角度, 可以取  $S_0 = \{v, w\}$  以及  $S_1 = \{e_1, e_2\}$ , 规定面算子  $d_0 e_1 = d_0 e_2 = w$  与  $d_1 e_1 = d_1 e_2 = v$ , 形成  $\Delta$ -集, 其几何实

现是一个圆圈.

经典的教科书<sup>[52-53]</sup>通过单纯复形来引入单纯同调, 后来的教科书<sup>[51]</sup>使用  $\Delta$ -复形概念引入单纯同调. 我们采用 Hatcher 的办法用  $\Delta$ -集引入单纯同调, 为了简化复杂度, 我们假设系数群是一个域  $\mathbb{F}$ ; 在应用领域, 通常使用系数域  $\mathbb{F} = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} = \{0, 1\}$  或实数域  $\mathbb{R}$ , 理论上, 同调可以以任何一个交换群作为系数群.

给定一个  $\Delta$ -集  $S$ , 令  $C_n(S)$  为以  $S_n$  为基张成的向量空间, 对于每个  $x \in S_n$ , 定义边缘算子为

$$\partial_n(x) = \sum_{i=0}^n (-1)^i d_i(x),$$

并将其线性张成为映射  $\partial_n: C_n(S) \rightarrow C_{n-1}(S)$ . 由此获得一个线性变换序列

$$\cdots \rightarrow C_n(S) \xrightarrow{\partial_n} C_{n-1}(S) \xrightarrow{\partial_{n-1}} C_{n-2}(S) \rightarrow \cdots \rightarrow C_0(S)$$

满足  $\partial_{n-1} \circ \partial_n = 0$  (由  $\Delta$ -等式推导出), 称为  $\Delta$ -集  $S$  以  $\mathbb{F}$  为系数的链复形.

对于一个线性变换  $T: V \rightarrow W$ , 其零特征空间记为  $\text{Ker}(T)$ , 即  $\text{Ker}(T) = \{x \in V \mid T(x) = 0\}$ ; 其像空间记为  $\text{Im}(T)$ , 即  $\text{Im}(T) = \{y \in W \mid y = T(x) \text{ 有解}\}$ . 由等式  $\partial_n \circ \partial_{n+1} = 0$  可以导出  $\text{Im}(\partial_{n+1}) \subseteq \text{Ker}(\partial_n)$ .

**定义 2.6** (单纯同调, Betti 数与欧拉数) 给定一个  $\Delta$ -集  $S$ , 依上述方式构建以  $\mathbb{F}$  为系数的链复形  $C_*(S)$ , 它以  $\mathbb{F}$  为系数的  $n$  维同调群定义为

$$H_n(S; \mathbb{F}) = \text{Ker}(\partial_n: C_n(S) \rightarrow C_{n-1}(S)) / \text{Im}(\partial_{n+1}: C_{n+1}(S) \rightarrow C_n(S)).$$

一个  $\Delta$ -集  $S$  的  $H_n(S; \mathbb{F})$  的维数被称为  $S$  的以  $\mathbb{F}$  为系数的  $n$  维 Betti 数, 记作  $\beta_n(S; \mathbb{F})$ , 即  $\beta_n(S; \mathbb{F}) = \dim(H_n(S; \mathbb{F}))$ , 通常简记为  $\beta_n$ ; 欧拉数  $\chi(S)$  则定义为 Betti 数的交错和:  $\chi(S) = \beta_0 - \beta_1 + \beta_2 - \cdots$  (假如等式右边的每个 Betti 数有限, 且只有有限个非零 Betti 数).

代数拓扑的定理确保了同调群  $H_*(S; \mathbb{F})$ , Betti 数与欧拉数均是  $|S|$  的同伦不变量, 不依赖于几何体  $|S|$  的连续形变.

对于一个单纯复形  $K$ , 其单纯同调群的定义依赖于定向的选取 (将单纯复形转化为  $\Delta$ -集), 但所得到的同调群 (以及 Betti 数与欧拉数) 不依赖于定向的选取、多面体  $|K|$  的剖分结构以及  $|K|$  的连续形变. 对于有限复形, 欧拉数总是可以定义, 且与系数域的选取无关; Betti 数与系数域的扩张无关但与系数域的选取密切相关, 例如: 2 维实射影平面  $\mathbb{R}P^2$ , 它的有理系数  $\mathbb{Q}$  的 Betti 数是

$$\beta_0(\mathbb{R}P^2; \mathbb{Q}) = 1; \quad \beta_i(\mathbb{R}P^2; \mathbb{Q}) = 0, \quad i > 0,$$

再计算其  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$  系数的 Betti 数

$$\beta_i(\mathbb{R}P^2; \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}) = 1, \quad i = 0, 1, 2; \quad \beta_i(\mathbb{R}P^2; \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}) = 0, \quad i > 2.$$

类似地, 可以引入单纯上同调. 令  $C^n(S)$  为  $S_n$  上所有  $\mathbb{F}$ -值函数构成的向量空间, 对于任意的  $\phi: S_{n-1} \rightarrow \mathbb{F} \in C^{n-1}(S)$ , 定义上边缘同态

$$\delta^n: C^{n-1}(S) \rightarrow C^n(S), \quad \phi \mapsto \delta^n(\phi),$$

这里

$$\delta^n(\phi): S_n \rightarrow \mathbb{F}, \quad x \mapsto \sum_{i=0}^n (-1)^i \phi(d_i(x)),$$

给出上链复形

$$\cdots \longleftarrow C^n(S) \xleftarrow{\delta^n} C^{n-1}(S) \xleftarrow{\delta^{n-1}} C^{n-2}(S) \longleftarrow \cdots \longleftarrow C^0(S).$$

上同调与同调的视角不同, 互为对偶; 如果系数群为一个环, 上同调会具有环结构 (Cup 积), 在流形的拓扑等方面有重要应用, 如 Poincaré 对偶定理.

单纯 (上) 同调可以推广到奇异 (上) 同调, 并产生其他变体或相关的 (上) 同调理论, 如微分几何中的 De Rham 上同调、 $L^2$ -上同调<sup>[54-55]</sup>、有界上同调理论<sup>[56]</sup>等. Allen Shepard 在其 1985 年的博士论文中引入的胞腔层上同调 (cellular sheaf cohomology)<sup>[57]</sup>, 在 Justin M. Curry 的博士论文<sup>[58]</sup>中得到极大的发挥, 使得胞腔层论具有良好的可计算性, 并获得实际应用<sup>[59-60]</sup>, 成为应用拓扑的重要工具之一. 在这里, 我们从  $\Delta$ -集的角度审视胞腔层同调, 因我们的刻画与 Curry 的叙述有所差异, 取名为  $\Delta$ -层同调 ( $\Delta$ -sheaf homology);  $\Delta$ -层推广了单纯复形的胞腔层概念, 比起更一般的胞腔层,  $\Delta$ -层保留面算子的组合特性, 便于计算的可操作性.

给定一个  $\Delta$ -集  $S$ , 我们将其范畴化, 令  $\mathcal{C}(S)$  为一个范畴, 其对象为  $S$  中的元素, 态射由  $S$  中元素间的面算子生成. 记  $\mathbf{Vect}$  为系数域  $\mathbb{F}$  上的向量空间范畴. 一个  $\Delta$ -余层 ( $\Delta$ -cosheaf) 是一个从范畴  $\mathcal{C}(S)$  到向量空间范畴的一个函子  $F: \mathcal{C}(S) \rightarrow \mathbf{Vect}$ . 直观地看, 对于  $S$  中的每个单形  $\sigma$  赋予一个向量空间  $F(\sigma)$ , 对于  $\tau = d_i(\sigma)$ , 赋予一个线性变换  $F(d_i): F(\sigma) \rightarrow F(\tau)$ ; 由  $F$  的函子性质,  $\Delta$ -等式  $F(d_i) \circ F(d_j) = F(d_j) \circ F(d_{i+1})$  ( $i \geq j$ ) 成立. 令

$$C_n^F(S) = \bigoplus_{\sigma \in S_n} F(\sigma), \quad n \geq 0.$$

对于向量空间  $F(\sigma)$  ( $\sigma \in S_n$ ), 定义线性变换

$$\partial_n|_{F(\sigma)} = \sum_{i=0}^n (-1)^i F(d_i): F(\sigma) \longrightarrow F(d_0\sigma) - F(d_1\sigma) + \cdots + (-1)^n F(d_n\sigma) \subseteq C_{n-1}^F(S),$$

并线性张成为映射  $\partial_n: C_n^F(S) \rightarrow C_{n-1}^F(S)$ , 获得链复形  $C_*^F(S)$ , 给出函子  $F$  的  $\Delta$ -层同调  $H_*^F(S)$ .

$\Delta$ -层同调的一个优势是以  $\Delta$ -集作为指标集可以简洁清晰地引入同调, 在数学层面, 向量空间范畴  $\mathbf{Vect}$  可以换成更一般的范畴, 并与空间图 (diagram of spaces) 的代数拓扑学密切相关; 在实际应用中, 函子  $F$  的选取是至关重要的.

持续同调在应用领域受到极大的关注, 主要是它将静态的拓扑不变量 (同调), 通过引入持续性 (persistence), 变成动态演化的拓扑特征, 从而克服同调群不依赖于几何度量的弱点, 在实际应用中取得良好的实效性. 在数学层面, 主要将构建的复形模型进行滤子化处理变成嵌套复形序列或依赖于参变量  $t \in \mathbb{R}$  的连续型嵌套复形序列, 由此产生持续性. 在理论层面, 任何一个连续或离散的空间或复形的序列图

$$\cdots \longrightarrow X_a \longrightarrow \cdots \longrightarrow X_b \longrightarrow \cdots$$

均可以产生持续同调, 这里的箭头表示存在连续映射 (无需假设是子复形). 滤子化 (即将空间过滤变成空间序列) 是拓扑学常用且经典的重要思想方法, 应用于 Morse 理论、谱序列等数学领域; 将滤子化应用于动态的同调 (持续同调) 到了 1990 年代才引起应用领域的重视 [11], 其原因也许是数学研究往往更多偏重于定性分析, 而应用对具有实效性的定量分析工具有更大的需求.

拓扑理论与持续性的结合可以大幅提升拓扑方法的能力, 单变量持续性也可以改为多变量持续性 (multi-persistence), 同时构造滤子化的方式也多种多样, 其选择的合理性与需求往往与应用场景有关; 多变量持续性需要代数学与范畴论的支持, 也促成数学研究领域之间更多的学科交叉.

### §3 GLMY 理论

GLMY 理论的一个基本思路是以实际应用为导向, 运用代数拓扑及其相关数学研究领域的思想方法, 在图结构数学对象上发展代数拓扑学, 为数据分析与复杂系统提供众多的拓扑工具. 下面我们分别从数据分析与复杂系统角度, 介绍该研究领域的一些新型数学理论.

#### §3.1 数据分析驱动下的应用拓扑理论发展

从数据分析角度来看, 传统拓扑方法是用单纯复形建模, 结合单纯同调和持续性, 从而给出拓扑特征; 然而实际数据往往带有权重, 是不均衡的系统, 在数学层面, Robert J. Dawson 在 1990 年引入了加权单纯复形与加权单纯同调 [61], 这项工作吴承远的博士论文 [62] 中得到极大的发挥, 系统地建立了加权拓扑数据分析理论, 为应用拓扑添加了新的重要工具 [63–65]. 为了便于理解, 我们在这里只讨论整数作为权重的加权单纯复形以及整系数加权同调群. 给定一个单纯复形  $K$ ,  $K$  上的一个权重系统是指对每个单形  $\sigma$ , 赋予一个整数  $w(\sigma) \in \mathbb{Z}$  且满足当  $\tau$  是  $\sigma$  的一个面时,  $w(\tau)$  整除  $w(\sigma)$ , 并称  $(K, w)$  为加权单纯复形. 给定一个加权单纯复形  $(K, w)$ , 取  $K$  的一个定向, 其  $n$  维链集  $C_n^w(K; \mathbb{Z})$  与通常的  $n$  维链集  $C_n(K; \mathbb{Z})$  一致, 即以  $n$  维单形集  $K_n$  为基张成的自由交换群 (整系数线性组合), 再将通常的边缘同态调整为加权交错和. 具体地, 对于  $\sigma \in K_n$ , 定义加权边缘同态

$$\partial_n^w(\sigma) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \frac{w(\sigma)}{w(d_i(\sigma))} d_i(\sigma), \quad (3.1)$$

由此获得加权链复形  $C_*^w(K; \mathbb{Z})$ , 其同调称为  $(K, w)$  的加权单纯同调  $H_*(K, w; \mathbb{Z})$ .

值得说的是, 加权同调有可能会获得与通常拓扑空间同调群不一样的同调. 见例 3.1.

**例 3.1** 给定单纯复形  $K = \{a, b, ab\}$ , 赋予权重  $w(a) = w(b) = 1$  和  $w(ab) = 2$ , 取定向  $a < b$ , 根据定义可知

$$C_0^w(K) = \mathbb{Z}\langle a \rangle \oplus \mathbb{Z}\langle b \rangle, \quad C_1^w(K; \mathbb{Z}) = \mathbb{Z}\langle ab \rangle, \quad C_n^w(K) = 0 \quad n > 1.$$

进一步, 其加权边缘同态  $\partial_1^w(ab) = 2b - 2a$ , 经过计算可知,

$$H_0(K, w; \mathbb{Z}) = \mathbb{Z}\langle a \rangle \oplus \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}\langle b \rangle, \quad H_i(K, w; \mathbb{Z}) = 0, \quad i \geq 1.$$

然而, 对于通常的同调, 任何拓扑空间的 0 维整系数同调群不会出现挠因子  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ , 故存在某些单纯复形的加权同调不是几何体 (拓扑空间) 的通常同调. 另一方面, 如果系数

群为域,且每个单形的权重非零,则加权同调与单纯同调同构,详见文 [62].

一个自然简洁的加权方式是对单纯复形  $K$  上每个顶点加权(权重值可以取自一个交换环),取每个单形的权重为其顶点权重的乘积;如果  $\sigma = [a_0, a_1, \dots, a_n]$  ( $a_0 < a_1 < \dots < a_n$ ) 为  $K$  中一个单形,则加权边缘同态 (3.1) 中的加权系数  $\frac{w(\sigma)}{w(d_i(\sigma))} = w(a_i)$ ,此时加权边缘同态为丘成桐先生及其合作者引入的  $\delta$ -同调 [66] 的边缘同态.

加权单纯同调可以在两个不同的视角下得到推广,若将加权边缘同态 (3.1) 的权重系数  $\frac{w(\sigma)}{w(d_i(\sigma))}$  视为  $\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}$  的线性变换  $a \mapsto a \frac{w(\sigma)}{w(d_i(\sigma))}$ ,则加权单纯同调可转化为  $\Delta$ -层同调,即成为  $\Delta$ -层同调的一种重要特殊情况;另一个视角是,文 [67]<sup>2</sup>将加权单纯同调推广为  $\Delta$ -twisted 同调,这种方式可以清晰地将 1950 年代建立的经典单纯纤维丛理论 [69]、Carlssoon 的单纯群构造 [70]、twisted 单纯群与范畴的 twisted 同调 [71]、加权同调理论、 $\delta$ -上同调理论 [66] 统一于一个框架之下,并给出与 Brown twisted 张量 [72] 以及具有物理学背景的 twisted de Rham 上同调 [73-74] 的关联性,同时对  $\Delta$ -twisted 理论范畴化,可知其与  $\Delta$ -层理论统一.

上述介绍旨在说明,在数据处理方面,目前流行的 Vietoris-Rips 复形及其持续同调并非唯一的拓扑方法,尚有大量有待进一步开发的应用拓扑理论.另一方面,应用拓扑理论的发展应该以数据处理的底层问题为导向,与数据科学相向而行,形成多学科交叉互作的结构.

### §3.2 复杂网络驱动下的应用拓扑理论发展

高阶互作复杂系统是最具有挑战性的科学难题,目前尚未有成熟的科学理论可以有效解析高阶互作的机理.通过网络建模来描述复杂系统是一种自然的流行思路 [4-5,7],近几年以来,高阶互作复杂网络的物理学受到极大的关注 [1-3,49].回顾历史,物理学与数学始终呈现出孪生发展的关系.一个多世纪以来,拓扑学的蓬勃发展与现代物理学密不可分;反过来,拓扑学与几何学的深厚基础也为现代物理学的建立与进步提供了强有力的支撑.不同于传统物理学,高阶互作复杂网络的物理学尚未形成成熟的理论体系,其底层机理及数学基础仍不明晰,人们正从多个视角持续探索.在这样的背景下,拓扑理论的应用发展可从两个方向展开:一方面,借助高阶互作复杂网络的前沿研究,反哺数学本体,推动拓朴学科的创新与建设;另一方面,通过独立思考与前瞻布局,主动开辟新的研究路径,推动拓朴理论自身的持续发展.

单纯复形与超图是高阶互作构建复杂网络物理学模型的最重要的基本工具 [1-2,8].对于以单纯复形建模的复杂网络,第 3.1 节所介绍的应用拓扑理论具有丰富的应用前景.然而抽象单纯复形定义中“子集运算封闭”的条件,在一些实际应用中会有局限性.超图的数学定义是“一族有限子集”,没有单纯复形的条件限制约束,被学界认为是最泛化的建模方式 [2].文 [31]<sup>3</sup>将单纯同调理论推广到超图的嵌入同调理论,以此提升拓扑方法的泛化能力,并已经在实际应用中取得良好效果 [33-34].超图的嵌入同调可以进一步推广为双超图的嵌入同调 [32],下面我们介绍超图与双超图嵌入同调理论的基本思想方法.

从拓扑角度,超图可视为一个丢失了一些面的不完整单纯复形.将  $\Delta$ -集视为多重集版本的单纯复形,我们可以考虑丢失了一些面信息的不完整  $\Delta$ -集,为此我们引入双超图的概念,粗略地说,双超图是多重集版本的超图.

<sup>2</sup>该文章是张蒙蒙博士论文 [68] 的一部分.

<sup>3</sup>该文章是任世全博士论文 [75] 的一部分.

**定义 3.1** (双超图 (super-hypergraph)<sup>[32]</sup>) 一个双超图是一个集合对  $(\mathcal{H}, S)$ , 其中  $S$  是一个  $\Delta$ -集,  $\mathcal{H}$  是  $S$  的一个分次子集.

我们也可以从神经网络视角来理解双超图的概念. 如第 2 节所述,  $\Delta$ -集可以用神经网络来刻画, 一种具有特殊结构 ( $\Delta$ -结构) 的神经网络, 所以任何一个可嵌入到  $\Delta$ -集的神经网络均是双超图.

为了引入超图与双超图嵌入同调定义, 我们首先回顾文 [32] 中的命题 2.3, 该命题适用于一般的链复形, 包括非交换群的链复形. 为了便于理解, 我们只讨论向量空间的链复形情况. 一个链复形  $C_*$  指的是一个向量空间序列以及边缘同态

$$\cdots \longrightarrow C_{n+1} \xrightarrow{\partial_{n+1}} C_n \xrightarrow{\partial_n} C_{n-1} \longrightarrow \cdots$$

满足  $\partial_n \circ \partial_{n+1} = 0$ ,  $n \geq -1$ , 其中  $\partial_{-1}$  是零同态. 进一步定义  $n$  维同调群为  $H_n(C_*) = \text{Ker}(\partial_n)/\text{Im}(\partial_{n+1})$ ; 它的一个子复形  $D_*$  是在边缘同态下封闭的分次子空间, 就是说,  $D_n$  是  $C_n$  的一个子空间, 且  $\partial_n(D_n) \subseteq D_{n-1}$ ; 对于一个子复形  $D_*$ , 将边缘同态  $\partial_n$  限制于  $D_n$ , 给出了  $D_*$  的链复形结构 (从  $C_*$  传承的链复形结构).

现在假设在每个  $C_n$  中随机选取一个子空间  $V_n$ , 得到  $C_*$  的分次子空间  $V_*$ , 这种情况下,  $\partial_n(V_n)$  未必包含于  $V_{n-1}$ , 从而  $V_*$  可能无法构成一个子链复形. 令  $\text{sup}_*(V_*)$  为  $C_*$  中包含  $V_*$  的最小子链复形, 称之为  $V_*$  的上确界链复形; 令  $\text{inf}_*(V_*)$  为  $C_*$  中包含于  $V_*$  的最大子链复形, 称之为  $V_*$  的下确界链复形. 进一步, 由 [32, 命题2.3] 可知, 存在下确界链复形与上确界链复形, 并且从下确界链复形到上确界链复形的内射  $\text{inf}_*(V_*) \hookrightarrow \text{sup}_*(V_*)$  可以诱导出同调群的同构

$$H_*(\text{inf}_*(V_*)) \cong H_*(\text{sup}_*(V_*)). \tag{3.2}$$

因此, 我们可以将  $V_*$  的同调群自然地定义为  $H_*(V_*) := H_*(\text{inf}_*(V_*)) \cong H_*(\text{sup}_*(V_*))$ , 称之为  $V_*$  的嵌入同调. 如果  $V_*$  已经是  $C_*$  的子链复形, 则  $\text{inf}_*(V_*) = V_* = \text{sup}_*(V_*)$ , 从而其嵌入同调就是其自身作为子链复形的同调.

给定一个双超图  $(\mathcal{H}, S)$ , 首先由  $\Delta$ -集  $S$  得到链复形  $C_* = C_*(S)$ , 然后对  $\mathcal{H}$  中的元素作线性扩张得到  $V_*$ , 从而给出其嵌入同调. 给定一个超图  $\mathcal{G}$ , 首先我们补上其缺失的面形成单纯复形  $\Delta(\mathcal{G})$  ( $\mathcal{G}$  的单纯闭包), 给单纯复形  $\Delta(\mathcal{G})$  取定向转化为  $\Delta$ -集, 得到链复形  $C_* = C_*(\Delta(\mathcal{G}))$ , 再以  $\mathcal{G}$  中的元素作线性扩张得到  $V_*$ , 获得  $\mathcal{G}$  的嵌入同调.

**例 3.2** 给定超图  $\mathcal{G} = \{\{0, 1\}, \{0\}\}$ , 设系数群为  $\mathbb{R}$ . 则  $\Delta(\mathcal{G}) = \{\{0, 1\}, \{0\}, \{1\}\}$ ,

$$\text{sup}_i(\mathcal{G}) = C_i(\Delta(\mathcal{G})), \quad i \geq 0; \quad \text{inf}_0(\mathcal{G}) = \mathbb{R}\langle 0 \rangle, \quad \text{inf}_j(\mathcal{G}) = 0, \quad j > 0.$$

进一步, 计算可知

$$H_0(\text{inf}_*(\mathcal{G})) \cong H_0(\text{sup}_*(\mathcal{G})) = \mathbb{R}, \quad H_i(\text{inf}_*(\mathcal{G})) \cong H_i(\text{sup}_*(\mathcal{G})) = 0, \quad i > 0.$$

再给定  $\mathcal{G}' = \{\{0, 1\}\}$ , 我们有  $\Delta(\mathcal{G}') = \Delta(\mathcal{G}) = \{\{0, 1\}, \{0\}, \{1\}\}$ , 则

$$\text{inf}_*(\mathcal{G}') = 0,$$

$$\text{sup}_0(\mathcal{G}') = \mathbb{R}\langle \{1\} - \{0\} \rangle, \quad \text{sup}_1(\mathcal{G}') = C_1(\Delta(\mathcal{G}')) = \mathbb{R}\langle 01 \rangle, \quad \text{sup}_i(\mathcal{G}') = 0, \quad i > 1;$$

计算可知

$$H_i(\text{inf}_*(\mathcal{G}')) \cong H_i(\text{sup}_*(\mathcal{G}')) = 0, \quad i \geq 0.$$

在应用层面, 公式 (3.2) 的一个重要意义在于: 对于抽象的对象, 通过链复形表示, 可以获得拓扑特征 (同调群), 由于  $V_*$  的选取不具约束性, 使得拓扑方法拥有更强的泛化能力.

与统计学的深度合作能够帮助应用拓扑的战略发展, 爱豆网 (IdopNetwork)<sup>[76]</sup> 是邬荣领带领团队和合作者于 2019 年引入的新型统计理论, 融合统计物理学的思想, 将实际应用问题有效转化为统计建模问题, 展现出广阔的研究前景与应用潜力.

从数学层面, 通过运用专业知识领域科学方程, 将实际问题转化为一个多层次的、动态的、加权的、有正负号的、个性化的有向图, 如图 3.1. 在此统计模型里, 需要能够解析其承载的有向图拓扑结构的数学工具, 丘成桐先生带领其合作者于 2012 年引入的有向图道路同调理论<sup>[37]</sup> 为其提供了可能的数学工具, 两者结合应用于复杂疾病代谢物的相互作用分析, 可以成功区分健康状态和疾病状态, 特别地, 通过计算同调的生成元, 可以探测出亚油酸盐在炎症性肠病中的重要作用, 发现溃疡性结肠炎和克罗恩病中亚油酸盐的连接信息有明显的区别; 该项成果<sup>[49]</sup> 引起医学界广泛关注, 代谢物互作的网络解析是医疗健康领域重要的新型思路. 将爱豆网与有向图道路同调理论结合应用于其他科学问题, 同样取得良好的实效性<sup>[45, 47-48, 50]</sup>.

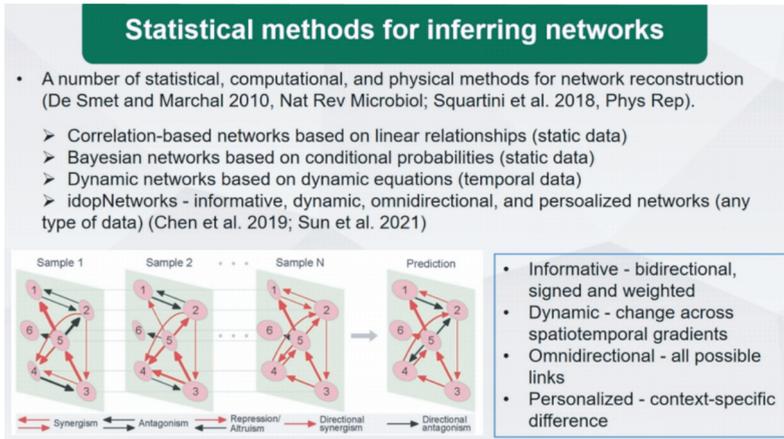


图 3.1 该图源于邬荣领教授 2024 年 3 月 4 日的学术报告.

下面介绍有向图道路同调的思想方法. 给定一个有向图  $G$ , 我们可以考虑沿着有向边行走得到的道路全体, 称之为道路复形 (path complex). 从应用角度, 可以理解为代谢相互作用关系的通路 (pathway) 或互作传递关系的信息流 (information flow). 在数学层面, 将有向图或箭图视为“缺失态射合成运算”的范畴, 道路复形是范畴的神经复形 (nerve complex of category) 的推广. 数学领域众所周知, 神经复形是将小范畴 (small category) 转化为几何体 (单纯集) 的一个函子, 大量运用于高阶范畴论.

有向图的道路复形, 由于缺失箭头 (有向边) 的合成运算, 在范畴神经复形的思路下, 一般来说, 无法构成单纯复形. 一个简单例子, 假设  $A$  到  $B$  有一条有向边以及  $B$  到  $C$  有一条有向边, 我们可以得到道路  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . 依范畴神经复形的构造思路, 该道路可抽象地视为三个顶点的 2 单形 (即三角形), 通过分别去掉顶点, 获得三个面. 当我们去掉顶点  $A$  或  $C$  时, 分别得到  $B \rightarrow C$  与  $A \rightarrow B$ , 依然是道路; 然而当我们去掉  $B$  时, 顶点  $A$  到  $C$ , 一般情况下, 可能不存在有向边, 从而发生“面缺失”的情况.

有向图的道路同调定义为其道路复形的超图嵌入同调. 需要说明一下, 丘成桐先生首先引入有向图的道路同调 [37], 后来的研究发现其定义可以推广到一般的超图 [31]. 为了便于叙述, 我们前面先介绍了超图的嵌入同调, 接下来简要介绍有向图的道路同调.

有向图道路同调的意义在于拓展了代数拓扑的泛化能力, 使拓扑分析得以从传统的几何形体延伸至拟几何结构的解析, 其在实际中的成功应用反哺了数学研究, 催生 GLMY 理论这一新兴研究方向, 并推动其蓬勃发展. 同时, 该理论推动了图论向高阶结构数学的深入发展. 当然, GLMY 理论不会止步于有向图道路同调, 有向图其他同调理论也在积极发展之中 [42-44]. 当然统计模型也不会止步于爱豆网, 下面介绍统计与 GLMY 理论携手共进的成功范例.

超网是邬荣领根据其多年生物学领域研究提出的统计模型, 其基本思想是不同超边之间依然会存在互作关系, 因而超图仍不足以刻画复杂网络的高阶互作. 一个简单的例子是, 在一个父、母、孩子的最小社会群体里面, 三个节点之间存在两两互作关系, 父母的关系好坏 (有向边) 对孩子的成长会产生很大影响. 图 3.2 展示这一基本模型.

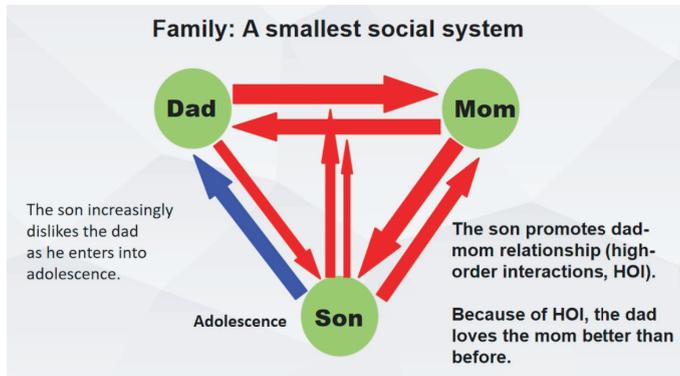


图 3.2 该图源于邬荣领教授 2024 年 3 月 4 日的学术报告.

根据邬荣领的想法, 我们在数学层面进行建模: 用括弧  $(a, b)$  来表示箭头  $a \rightarrow b$ , 然后  $((a, b), c)$  意味着  $\begin{matrix} b \\ \uparrow \\ a \end{matrix} \rightarrow c$  以及  $((b, a), c)$  指  $\begin{matrix} b \\ \downarrow \\ a \end{matrix} \rightarrow c$ . 重复该流程, 按固定顺序, 4 个节点  $a, b, c, d$  会产生 5 种可能的括弧  $((a, b), c), d), ((a, (b, c)), d), (a, ((b, c), d)), (a, (b, (c, d))), ((a, b), (c, d))$ .

在数学领域, Magnus 在其经典的组合群教科书 [77] 中引入括弧构型 (bracket arrangement) 的数学概念, 用以研究组合群的换位子问题.

**定义 3.2** (括弧构型) 关于字母的括弧构型, 依其括弧长度, 归纳定义如下:

1. 只有一个长度为 1 的括弧:  $\beta^1 = (*)$ .
2. 一个长度为  $n$  ( $n > 1$ ) 的括弧  $\beta^n$  是由长度分别为  $k$  与  $l$  的括弧  $\beta^k$  与  $\beta^l$  组成, 其中  $k + l = n$ , 记作  $\beta^n = (\beta^k, \beta^l)$ .

括弧构型广泛地运用于组合群、非结合代数、Lie 代数等数学研究领域. 容易检验, 括弧构型的一个等价刻画是图论中的二叉树 (binary tree). 利用括弧构型, 我们可以引入交互复形 (interaction complex) 的概念.

给定一个顶点集 (字母集)  $V$ , 令  $\text{Int}_n(V)$  为  $V$  中所有长度为  $n + 1$  括弧构型构成的

集合, 并定义一族面算子

$$d_i: \text{Int}_n(V) \rightarrow \text{Int}_{n-1}(V), \quad ((\beta^i, v_i), \beta^{n-i}) \text{ 或 } (\beta^i, (v_i, \beta^{n-i})) \mapsto (\beta^i, \beta^{n-i}).$$

由定义可知括弧构型集序列

$$\text{Int}(V) = (\text{Int}_0(V), \text{Int}_1(V), \dots)$$

形成一个  $\Delta$ -集. 然而在实际问题中, 可能只出现部分高阶交互. 在数学层面, 可以选取  $\text{Int}(V)$  的某个分次子集加以建模, 从而形成如下双超图  $\text{IntComplex}$  的概念.

**定义 3.3** (交互复形<sup>[78]</sup>) 设  $V$  为一个顶点集, 交互复形  $\text{IntComplex}$  是双超图  $(\mathcal{H}, \text{Int}(V))$ , 其中  $\mathcal{H}$  是  $\text{Int}(V)$  的一个分次子集.

双超图的嵌入同调理论可以应用于解析邹荣领的超网统计模型, 二者结合, 在复杂系统高阶互作的结构分析方面取得突破性进展<sup>[50]</sup>.

### §3.3 GLMY 理论的未来展望

自 2012 年有向图道路同调理论提出以来, GLMY 理论在过去十余年中取得了显著进展. 在国内外众多学者努力下, 该理论逐渐完善, 并已有大量相关研究成果. 该理论突破了传统代数拓扑学、图论、范畴论的框架, 大幅提升了代数拓扑理论的泛化能力, 拓宽了拓扑方法的应用领域.

展望未来, GLMY 理论具备较大的发展潜力. 随着后续研究的不断深入以及更多实际问题的提出, 期待它能够在拓扑学基础理论的建设以及人工智能等领域的非线性方法研究中发挥更加积极的作用. 下面从几个方面来展望 GLMY 理论的未来发展.

1. 与统计学联手共建拓扑统计学研究方向. 随着社会迈入人工智能时代, 跨学科深度融合已成为科研发展的主流趋势. 在已有良好合作基础之上, 拓扑学与统计学的结合将进一步加强, 推动“拓扑统计学”这一新兴交叉学科的发展.

2. 与统计学及人工智能领域联手建设具有特色的拓扑人工智能研究领域. GLMY 理论以复杂网络为导向极大地泛化拓扑的应用能力, 新型统计学往网络建模方向发展, 与人工智能领域建立紧密的合作机制, 具有特色的拓扑人工智能学科建设将是未来的趋势.

3. 建设有向图拓扑学研究领域. 复杂网络在数学的视角下是图结构对象, 人们可以从有向无向图拓展到多图、箭图、超图、有向超图以及双超图等, 但数学基础研究的学科设计往往从最底层的简洁对象入手, 获得深刻的数学定理, 再步步推广获得泛化. 例如, 点集拓扑学, 以简单明了的方式给出拓扑空间的定义, 再步步丰富其概念. 有向图是复杂网络的最简单数学模型, 其所蕴含的内在高阶数学结构, 对破解复杂网络高阶互作的底层数学机理具有重要意义, 因此 GLMY 理论的基础研究会更多地聚焦于有向图的拓扑学.

如本文所介绍, 有向图的同调理论在快速发展, 并获得大量的推广及应用; 基础研究仍有极大的发展空间, 更多具有可解释性的新型同调理论仍有待开发, 如有向图的 twisted 同调理论, 有向图的同调论本身引出许多数学难题, 如有向图道路上同调的 cup 积环结构是否分次交换、何种超图的嵌入上同调具有 cup 积的环结构等数学问题, 至今尚未解决.

有向图的同伦理论将是学科基础研究的主要攻坚方向. 与同调论通过代数方法获得拓扑特征的思路有所不同, 有向图的同伦论可以粗略地介绍为“一个有向图的子图, 在有向边形成的流 (flow) 推动下, 其结构的演化与分类”, 子图在这些有向流的驱动下的移动类似于几何体的连续形变, 由于错综复杂的方向干扰, 有向图的同伦论变得比传统代数拓扑学更具有挑战性, 可喜的是有向图的同伦论近期也取得了新进展<sup>[79]</sup>. 由于该研究方向

的艰难性, 需要年轻学者们的顽强意志力以及社会更多的支持与鼓励.

有向图的拓扑学不会止步于代数拓扑学, 纽结论是低维拓扑学中的重要研究方向, 与有向图有紧密关系. 近期纽结论在数据分析领域取得突破性进展<sup>[80]</sup>, 开启了纽结数据分析 (KDA) 领域. 代数拓扑学与低维拓扑学在有向图领域的交汇, 将是未来发展的一个重要方向.

有向图拓扑学将会是跨数学诸多研究领域的综合性研究方向, 高阶范畴论与同伦论有密切关联性, 有向图及箭图是缺失合成运算的不完整范畴, 各数学研究领域的思想方法有望落地于有向图, 以期应用于复杂网络.

**致谢** 刘冉、吴杰和张蒙蒙对本文工作做出了同等贡献.

## 参 考 文 献

- [1] Federico Battiston, Enrico Amico, Alain Barrat, et al. The physics of higher-order interactions in complex systems [J]. *Nature Physics*, 2021, 17:1093–1098.
- [2] Federico Battiston, Giulia Cencetti, Iacopo Iacopini, et al. Networks beyond pairwise interactions: Structure and dynamics [J]. *Physics Reports*, 2020, 874:1–92.
- [3] Boccaletti Stefano, De Lellis Pietro, Del Genio CI, et al. The structure and dynamics of networks with higher order interactions [J]. *Physics Reports*, 2023, 1018:1–64.
- [4] Domingo Júlia, Diss Guillaume, Lehner Ben. Pairwise and higher-order genetic interactions during the evolution of a tRNA [J]. *Nature*, 2018, 558:117–121.
- [5] Grilli Jacopo, Barabás György, Michalska-Smith Matthew J, Allesina Stefano. Higher-order interactions stabilize dynamics in competitive network models [J]. *Nature*, 2017, 548:210–213.
- [6] Iacopini Iacopo, Karsai Márton, Barrat Alain. The temporal dynamics of group interactions in higher-order social networks [J]. *Nature Communications*, 2024, 15(1):7391.
- [7] Levine Jonathan M, Bascompte Jordi, Adler Peter B, Allesina Stefano. Beyond pairwise mechanisms of species coexistence in complex communities [J]. *Nature*, 2017, 546:56–64.
- [8] Zhang Yuanzhao, Lucas Maxime, Battiston Federico. Higher-order interactions shape collective dynamics differently in hypergraphs and simplicial complexes [J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1):1605.
- [9] Ghorbanchian Reza, Restrepo Juan G, Torres Joaquín J, Bianconi Ginestra. Higher-order simplicial synchronization of coupled topological signals [J]. *Communications Physics*, 2021, 4(1):120.
- [10] Schaub Michael T, Benson Austin R, Horn Paul, et al. Random walks on simplicial complexes and the normalized hodge 1-Laplacian [J]. *SIAM Review*, 2020, 62(2):353–391.
- [11] Barannikov Serguei. The framed morse complex and its invariants [M]//Singularities and bifurcations, Advances in Soviet Mathematics, Providence, RI: Amer Math Soc, 1994, 21:93–115.

- [12] Edelsbrunner Herbert, Letscher David, Zomorodian Afra. Topological persistence and simplification [J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2002, 28(4):511–533.
- [13] Zomorodian Afra, Carlsson Gunnar. Computing persistent homology [J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2005, 33(2):249–274.
- [14] Carlsson Gunnar. Topology and data [J]. *American Mathematical Society, Bulletin, New Series*, 2009, 46(2):255–308.
- [15] Wei Guo-Wei. Topological deep learning: An emerging paradigm in data science [J]. *SIAM News*, 2024.
- [16] Zia Ali, Khamis Abdelwahed, Nichols James, et al. Topological deep learning: A review of an emerging paradigm [J]. *Artificial Intelligence Review*, 2024, 57, Paper No. 77.
- [17] Rabadán Raúl, Blumberg Andrew J. Topological data analysis for genomics and evolution: Topology in biology [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2019.
- [18] Sharma Pooja, Bhattacharyya D K, Kalita J K. Detecting protein complexes based on a combination of topological and biological properties in protein-protein interaction network [J]. *Journal of Genetic Engineering and Biotechnology*, 2018, 16(1):217–226.
- [19] Singh Yashbir, Farrelly Colleen M, Hathaway Quincy A, et al. Topological data analysis in medical imaging: current state of the art [J]. *Insights into Imaging*, 2023, 14(1):58.
- [20] Nicolau Monica, Levine Arnold J, Carlsson Gunnar. Topology based data analysis identifies a subgroup of breast cancers with a unique mutational profile and excellent survival [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2011, 108(17):7265–7270.
- [21] Hiraoka Yasuaki, Nakamura Takenobu, Hirata Akihiko, et al. Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2016, 113(26):7035–7040.
- [22] Saadatfar Mohammad, Takeuchi Hiroshi, Robins Vanessa, et al. Pore configuration landscape of granular crystallization [J]. *Nature Communications*, 2017, 8(1):15082.
- [23] Horak Danijela, Maletić Slobodan, Rajković Milan. Persistent homology of complex networks [J]. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009, 3, P03034, 24 pp.
- [24] Perea Jose A, Harer John. Sliding windows and persistence: An application of topological methods to signal analysis [J]. *Foundations of Computational Mathematics*, 2015, 15(3):799–838.
- [25] Sizemore Ann E, Phillips-Cremens Jennifer E, Ghrist Robert, Bassett Danielle S. The importance of the whole: topological data analysis for the network neuroscientist [J]. *Network Neuroscience*, 2019, 3(3):656–673.
- [26] Carrière Mathieu, Chazal Frédéric, Ike Yuichi, et al. Perslay: A neural network layer for persistence diagrams and new graph topological signatures [C]//International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, Palermo: PMLR, 2020, 108:2786–2796.

- [27] Gidea Marian. Topological data analysis of critical transitions in financial networks [C]//International conference and school on network science, Cham: Springer, 2017, 47–59.
- [28] Yen Peter, Xia Kelin, Cheong Siew Ann. Laplacian spectra of persistent structures in Taiwan, Singapore, and Us stock markets [J]. *Entropy*, 2023, 25(6):846.
- [29] Finlay Chris, Jacobsen Jörn-Henrik, Nurbekyan Levon, Oberman Adam. How to train your neural ODE: the world of Jacobian and kinetic regularization [C]//International conference on machine learning, Vienna: PMLR, 2020, 3154–3164.
- [30] Hofer Christoph, Kwitt Roland, Niethammer Marc, Uhl Andreas. Deep learning with topological signatures [C]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, 1633–1643.
- [31] Bressan Stephane, Li Jingyan, Ren Shiquan, Wu Jie. The embedded homology of hypergraphs and applications [J]. *Asian Journal of Mathematics*, 2019, 23(3):479–500.
- [32] Grbić Jelena, Wu Jie, Xia Kelin, Wei Guo-Wei. Aspects of topological approaches for data science [J]. *Foundations of Data Science*, 2022, 4(2):165–216.
- [33] Liu Xiang, Feng Huitao, Wu Jie, Xia Kelin. Persistent spectral hypergraph based machine learning (psh-ml) for protein-ligand binding affinity prediction [J]. *Briefings in Bioinformatics*, 2021, 22(5), Paper No. bbab127.
- [34] Liu Xiang, Wang Xiangjun, Wu Jie, Xia Kelin. Hypergraph-based persistent cohomology (hpc) for molecular representations in drug design [J]. *Briefings in Bioinformatics*, 2021, 22(5), Paper No. bbaa411.
- [35] Lovász László. Kneser’s conjecture, chromatic number, and homotopy [J]. *Journal of Combinatorial Theory, Series A*, 1978, 25(3):319–324.
- [36] Liu Xiang, Feng Huitao, Wu Jie, Xia Kelin. Hom-complex-based machine learning (hcml) for the prediction of protein-protein binding affinity changes upon mutation [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2022, 62(17):3961–3969.
- [37] Grigor’yan Alexander, Lin Yong, Muranov Yuri, Yau Shing-Tung. Homologies of path complexes and digraphs [J]. 2012, arXiv: 1207.2834.
- [38] Grigor’yan Alexander, Lin Yong, Muranov Yuri, Yau Shing-Tung. Homotopy theory for digraphs [J]. *Pure and Applied Mathematics Quarterly*, 2014, 10(4):619–674.
- [39] Fu Xin, Ivanov Sergei O. Path homology of digraphs without multisquares and its comparison with homology of spaces [J]. 2024, arXiv: 2407.17001.
- [40] Bi Wanying, Li Jingyan, Wu Jie. The magnitude homology of a hypergraph [J]. *Homology, Homotopy and Applications*, 2024, 26(2):325–348.
- [41] Chen Dong, Liu Jian, Wu Jie, Wei Guo-Wei. Persistent hyperdigraph homology and persistent hyperdigraph Laplacians [J]. *Foundations of Data Science (Springfield, Mo.)*, 2023, 5(4):558–588.

- [42] Li Jingyan, Muranov Yuri, Wu Jie, Yau Shing-Tung. Primitive path homology [J]. 2024, arXiv:2411.18955.
- [43] Li Jingyan, Muranov Yuri, Wu Jie, Yau Shing-Tung. On singular homology theories of digraphs and quivers [J]. *Journal of Combinatorics*, to appear.
- [44] Liu Jian, Chen Dong, Pan Feng, Wu Jie. Neighborhood path complex for the quantitative analysis of the structure and stability of carboranes [J]. *Journal of Computational Biophysics and Chemistry*, 2023, 22(4):503–511.
- [45] Che Jincan, Jin Yuebo, Gragnoli Claudia, et al. Idopnetwork as a genomic predictor of drug response [J]. *Drug Discovery Today*, 2025, 30(1), Paper No. 104252.
- [46] Chen Dong, Liu Jian, Wu Jie, et al. Path topology in molecular and materials sciences [J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2023, 14(4):954–964.
- [47] Feng Li, Yang Dengcheng, Wu Sinan, et al. Network modeling and topology of aging [J]. *Physics Reports*, 2025, 1101:1–65.
- [48] Gong Huiying, Wang Hongxing, Wang Yu, et al. Topological change of soil microbiota networks for forest resilience under global warming [J]. *Physics of Life Reviews*, 2024, 50:228–251.
- [49] Wu Shuang, Liu Xiang, Dong Ang, et al. The metabolomic physics of complex diseases [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2023, 120(42), Paper No. e2308496120.
- [50] Feng Li, Gong Huiying, Zhang Shen, et al. Hypernetwork modeling and topology of high-order interactions for complex systems [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2024, 121(40), Paper No. e2412220121.
- [51] Hatcher Allen. Algebraic topology [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [52] Munkres James R. Elements of algebraic topology [M]. Boca Raton: CRC press, 2018.
- [53] Spanier Edwin H. Algebraic topology [M]. New York-Toronto-London: McGraw-Hill Book. Co., 1966.
- [54] Goresky Mark, MacPherson Robert. Intersection homology II [J]. *Inventiones Mathematicae*, 1983, 72(1):77–129.
- [55] Goresky Mark, MacPherson Robert. Intersection homology theory [J]. *Topology*, 1980, 19(2):135–162.
- [56] Gromov Michael. Volume and bounded cohomology [J]. *Institut des Hautes Études Scientifiques, Publications Mathématiques*, 1982, 56:5–99.
- [57] Shepard Allen Dudley. A cellular description of the derived category of a stratified space [D]. PhD thesis, Providence, RI: Brown University, 1985.
- [58] Curry Justin Michael. Sheaves, cosheaves and applications [D]. PhD thesis, Philadelphia: The University of Pennsylvania, 2014.
- [59] Curry Justin, Ghrist Robert, Nanda Vidit. Discrete morse theory for computing cellular sheaf cohomology [J]. *Foundations of Computational Mathematics*, 2016, 16(4):875–897.

- [60] Ghrist Robert. Network sheafmodels for social information dynamics [C]. In 2022 IEEE 8th International Conference on Collaboration and Internet Computing (CIC), 2022, 31–37.
- [61] Dawson Robert J MacG. Homology of weighted simplicial complexes [J]. *Cahiers de Topologie et Géométrie Différentielle Catégoriques*, 1990, 31(3):229–243.
- [62] Wu Chengyuan. Weighted topological data analysis [D]. PhD thesis, Singapore: National University of Singapore, 2019.
- [63] Meng Zhenyu, Anand D Vijay, Lu Yunpeng, et al. Weighted persistent homology for biomolecular data analysis [J]. *Scientific Reports*, 2020, 10(1), Paper No. 2079.
- [64] Ren Shiquan, Wu Chengyuan, Wu Jie. Weighted persistent homology [J]. *The Rocky Mountain Journal of Mathematics*, 2018, 48(8):2661–2687.
- [65] Wu Chengyuan, Ren Shiquan, Wu Jie, Xia Kelin. Discrete morse theory for weighted simplicial complexes [J]. *Topology and Its Applications*, 2020, 270, Paper No. 107038, 19 pp.
- [66] Grigor'yan Alexander, Muranov Yuri, and Yau Shing-Tung. On a cohomology of digraphs and hochschild cohomology [J]. *Journal of Homotopy and Related Structures*, 2016, 11(2):209–230.
- [67] Zhang Mengmeng, Li Jingyan, Wu Jie. The twisted homology of simplicial set [J]. *Acta Mathematica Sinica (English Series)*, 2022, 38(10):1781–1802.
- [68] Zhang Mengmeng. Related problems on the higher dimensional structure of multigraphs and hypergraphs [D]. PhD thesis, Shijiazhuang: Hebei Normal University, 2024.
- [69] Barratt Michael G, Gngenheim V K A M, Moore J C. On semisimplicial fibre-bundles [J]. *American Journal of Mathematics*, 1959, 81(3):639–657.
- [70] Carlsson Gunnar. A simplicial group construction for balanced products [J]. *Topology*, 1984, 23(1):85–89.
- [71] Li Yingyan, Vershinin V V, and Wu Jie. Twisted simplicial groups and twisted homology of categories [J]. *Homology, Homotopy and Applications*, 2017, 19(2):111–130.
- [72] Brown Edgar H. Twisted tensor products, I [J]. *Annals of Mathematics*, 1959, 69(1):223–246.
- [73] Rohm Ryan, Witten Edward. The antisymmetric tensor field in superstring theory [J]. *Annals of Physics*, 1986, 170(2):454–489.
- [74] Witten Edward. Supersymmetry and morse theory [J]. *Journal of Differential Geometry*, 1982, 17(4):661–692.
- [75] Ren Shiquan. The canonical vector bundle over unordered configuration spaces and its applications to regular maps [D]. PhD thesis, Singapore: National University of Singapore, 2017.

- [76] Chen Chixiang, Jiang Libo, Fu Guifang, et al. An omnidirectional visualization model of personalized gene regulatory networks [J]. *NPJ Systems Biology and Applications*, 2019, 5(1), Paper No. 38.
- [77] Magnus Wilhelm, Karrass Abraham, Solitar Donald. Combinatorial group theory: Presentations of groups in terms of generators and relations [M]. New York: Courier Corporation, 2004.
- [78] Liu Xiang, Liu Ran, Li Jingyan, et al. IntComplex for high-order interactions [J/OL]. 2024, arXiv: 2412.02806.
- [79] Li Jingyan, Wu Jie, Yau Shing-Tung, Zhang Mengmeng. Homotopy groups and puppe sequence of digraphs [J/OL]. 2024, arXiv: 2402.01110.
- [80] Li Shen, Feng Hongsong, Li Fengling, et al. Knot data analysis using multiscale Gauss link integral [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2024, 121(42), Paper No. e2408431121.

## Topology in Artificial Intelligence and Complex Systems

LIU Ran<sup>1</sup> WU Jie<sup>2</sup> ZHANG Mengmeng<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Mathematical Sciences, Beihang University, Beijing 100191, China; Beijing Key Laboratory of Topological Statistics and Applications for Complex Systems, Beijing Institute of Mathematical Sciences and Applications, Beijing 101408, China. E-mail: ranliu@bimsa.cn

<sup>2</sup>School of Mathematical Sciences, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China; Beijing Key Laboratory of Topological Statistics and Applications for Complex Systems, Beijing Institute of Mathematical Sciences and Applications, Beijing 101408, China. E-mail: wujie@bimsa.cn

<sup>3</sup>Beijing Key Laboratory of Topological Statistics and Applications for Complex Systems, Beijing Institute of Mathematical Sciences and Applications, Beijing 101408, China. E-mail: mengmengzhang@bimsa.cn

**Abstract** Topology is a research subject that provides a strategic and global framework for analyzing geometric shapes and complex systems. By introducing algebraic invariants, it aims to detect the core topological structures underlying these systems. The area of Topological Data Analysis (TDA for short) was born in 2009, following decades of exploration into the application of topological methods to data science since the 1990s. With continuous theoretical and methodological advances, TDA has become a widely used nonlinear mathematical tool in data analytics. In recent years, it has been further applied to machine

learning, deep learning, and complex network analysis, serving as an effective mathematical framework for capturing higher-order interaction structures in complex systems. In this article, the authors introduce the fundamental topological theories relevant to artificial intelligence, including simplicial homology, sheaf homology, and newly developed applied topology theories. The goal is to provide a conceptual and methodological guide for mathematicians and students interested in applied topology, as well as for researchers in artificial intelligence seeking nonlinear mathematical tools.

**Keywords** Topological data analysis, Persistent homology, Cellular sheaf,  $\Delta$ -sheaf homology, GLMY homology, Super-hypergraph, Hypernetwork, IntComplex

**2020 MR Subject Classification** 55N31, 55U10

The English translation of this paper will be published in

**Chinese Journal of Contemporary Mathematics, Vol. 46 No. 3, 2025**  
by ALLERTON PRESS, INC., USA