arXiv:2302.01018v4 [cs.LG] 8 Jul 2023

时序图的图神经网络：最新进展、开放性挑战与机遇

Antonio Longa[1,2,*]、Veronica Lachi[3]、*、Gabriele Santin[1]、*、Monica Bianchini[3],Bruno Lepri[1],PietroLi`o[4], FrancoScarselli[3], 和 Andrea Passerini[2]

[1]Fondazione Bruno Kessler，特伦托，意大利[2]特伦托大学，特伦托，意大利[3]锡耶纳大学，锡耶纳，意大利[4]剑桥大学，剑桥，英国*共同贡献

2023年7月11日

摘要

图神经网络（GNN）已成为处理（静态）图结构数据的主流范式。然而，许多真实世界系统本质上是动态的，因为图以及节点/边属性会随时间变化。近年来，面向时序图的图神经网络模型逐渐成为一个颇具前景的研究领域，旨在拓展图神经网络的能力。在本文中，我们首次全面概述时序图神经网络的最新进展，介绍学习设置与任务的严格形式化定义，并提出一种新的分类体系，根据现有方法对时间维度的表示和处理方式对其进行分类。最后，我们从研究和应用两个角度讨论该领域最重要的开放性挑战。

1 引言

处理时序图的能力在推荐系统 [20, 88], 社交网络分析 [15, 19], 交通系统 [36, 101],等众多领域中正变得日益重要。面对面互动 [48], 人类移动 [52, 24],流行病建模和接触者追踪 [8, 74], 等许多领域也是如此。传统的基于图的模型并不适合分析时序图，因为它们假设图的结构固定，无法捕捉其时间演变。因此，过去几年中，人们开发了多种能够直接对时序图进行编码的模型，例如基于矩阵分解的方法 [1] 和基于时序模体的方法 [47]。

近年来，图神经网络也已成功应用于时序图。事实上，图神经网络在包括节点分类 [30, 81, 39, 22, 25, 56, 87] 和链接预测 [102, 7, 103], 在内的各种静态图任务中的成功，不仅确立了其作为静态图处理主流范式的地位，也表明有必要探索其在时序图等其他图领域中的潜力。从基于注意力的方法 [92] 到变分图自编码器（VGAE） [29], ，时序图神经网络（TGNNs）已在时序链接预测 [70],、节点分类 [66] 和边分类 [83]等任务上取得了当前最先进的结果。尽管基于图神经网络的模型在时

序图处理方面具有潜力，且已经出现了多种不同的方法，但目前仍缺乏对相关文献的系统化梳理。现有综述要么讨论时序图学习的一般技术，仅简要提及图神经网络的时序扩展 [37, 3, 96, 91], ；要么聚焦于特定主题，例如时序链接预测 [63, 73] 或时序图生成 [28], ；要么概述针对不同类型图而设计的图神经网络模型，却未对时序图神经网络进行深入介绍 [77]。本研究旨在填补这一空白，对现有的时序图基于图神经网络的方法进行系统化梳理，并对所涉及的任务进行形式化定义。

我们的主要贡献如下:

- 我们对不同的学习设置以及时序图上可执行的任务提出了统一的形式化定义，将文献中分散的现有形式化表述和非正式定义整合起来，并指出当前研究所涉及内容中的重大空白;

- 我们将现有的时间图神经网络研究整理为一个全面的分类体系，根据时间的表示方式及其纳入模型的机制对方法进行归类;

- 我们指出当前时间图神经网络方法的局限性，探讨值得进一步研究的开放性挑战，并介绍在现实世界中具有重要意义、采用时间图神经网络可能带来显著收益的应用。

2 时序图

我们对本文分析的不同类型的图给出形式化定义，并在统一框架下梳理现有的不同概念。

定义 1（静态图 - 快照图）一个静态图是一个元组 $G = (V, E, X^V, X^E)$，其中 V是节点集合，$E \subseteq V \times V$ 是边集合，而X^V和 X^E 分别是 d_V维节点特征和 d_E维边特征。

节点和边特征可以为空。在下文中，我们假设所有图都是有向图，即 $(u, v) \in E$ 并不意味着 $(v, u) \in E$。此外，给定 $v \in V$，集合

$$\mathcal{N}[v] := \{u \in V : (u, v) \in V\},$$

表示 G中 v 的邻域。

在扩展 [63], 后，我们将时间图定义如下。

定义 2（时间图 - TG）A时间图是一个元组 $G_T = (V, E, V_T, E_T)$，其中 V和 E 分别是在任意时间出现在图中的所有可能节点和边的集合，而

$$V_T := \{(v, x^v, t_s, t_e) : v \in V, x^v \in \mathbb{R}^{d_V}, t_s \leq t_e\},$$
$$E_T := \{(e, x^e, t_s, t_e) : e \in E, x^e \in \mathbb{R}^{d_E}, t_s \leq t_e\},$$

是时序节点和边，它们具有依赖于时间的特征以及初始和最终时间戳。时间图的集合表示为 $\mathcal{G}_\mathcal{T}$。

请注意，我们隐含地假设， E_T 中时态边的存在要求 V_T中对应的时态节点同时存在。此外，该定义意味着节点和边的特征在每个区间 $[t_s, t_e]$内保持不变，但在其他情况下可能随时间变化。由于同一节点或边可能以不同时间戳被列出多次，我们将$\bar{t}_s(v) = \min\{t_s : (v, x^v, t_s, t_e) \in V_T\}$ 和 $\bar{t}_e(v) = \max\{t_e : (v, x^v, t_s, t_e) \in V_T\}$ 分别表示节点首次和最后一次出现的时间；对于 $\bar{t}_s(e)$、 $\bar{t}_e(e)$、$e \in E$也采用类似记法。此外，我们将 $T_s(G_T) := \min\{\bar{t}_s(v) : v \in V\}$、$T_e(G_T) := \max\{\bar{t}_e(v) : v \in V\}$ 设为时间图 G_T中的初始和最终时间戳。对于两个时间图$G_T^i := (V^i, E^i, V_T^i, E_T^i)$、 $i = 1$、2，我们写作 $G_T^1 \subseteq_V G_T^2$以表示拓扑包含 $V^1 \subseteq V^2$，但不要求对应的时间戳之间存在任何关系。

Given $v \in V$, the set

$$\mathcal{N}_t[v] := \{u \in V : \exists\ (e, x^e, t_s, t_e) \in E_T \text{ with } e = (u, v), t_s \leq t\}$$

是 v 在时间 t 的时间邻域。

一般的时间图对其时间戳没有限制，时间戳可以取任意值（为简单起见，我们假设它们为非负值）。然而，在某些应用中，将这些值限定为固定时间步长的倍数是合理的。这便引出了离散时间时序图的概念，其定义如下。

定义 3（离散时间时序图 - DTTG）令 $\Delta t > 0$ 为固定时间步长，令$t_1 < t_2 < \cdots < t_n$为满足 $t_{k+1} = t_k + \Delta t$的时间戳。离散时间时序图 G_{DT} 是一种时序图，其中对于每个$(v, x^v, t_s, t_e) \in V_T$或$(e, x^e, t_s, t_e) \in E_T$，时间戳 t_s, t_e均取自固定时间戳集合（即 $t_s, t_e \in \{t_1, t_2, \ldots, t_n\}$，且$t_s < t_e$）。

2.1 时序图的表示

在现有文献中，动态图通常分为离散时间时序图（DTTG，如定义 3 所示）和连续时间时序图（CTTG）（或时间序列图），例如文献 [37, 3,50, 28] 中对它们进行了定义。

然而，我们发现，这种划分并不能很好地体现各种图表征之间的核心差异；这种差异主要取决于数据是表示为静态图流，还是表示为单个节点和边的添加与删除事件流。因此，我们根据快照或事件，正式定义以下两类用于描述时变图的类别。这些不同的表示方式会带来不同的算法方法，在整理方法并构建分类体系时尤其有用。

基于快照的策略着重关注整个图的时间演化。基于快照的时序图定义如下。

定义 4（基于快照的时序图 - STG）令 $t_1 < t_2 < \cdots < t_n$ 为 *TG* G_T中出现的所有时间戳 t_s, t_e构成的有序集合。设

$$V_i := \{(v, x^v) : (v, x^v, t_s, t_e) \in V_T, t_s \leq t_i \leq t_e\},$$
$$E_i := \{(e, x^e) : (e, x^e, t_s, t_e) \in E_T, t_s \leq t_i \leq t_e\},$$

并定义快照 $G_i := (V_i, E_i)$，$i = 1$，……，n。那么，G_T 的基于快照的时序图表示为序列

$$G_T^S := \{(G_i, t_i) : i = 1, \ldots, n\}$$

由带时间戳的静态图组成。

这种表示主要用于描述离散时间时序图，其中快照表示在周期性间隔（例如小时、天等）捕获的时间图。

而当关注重点是单个节点或边的时间演化时，基于事件的策略更为合适。由此得到以下定义。

定义 5（基于事件的时序图 - ETG）设 G_T 为时间图，且令 ε 表示以下事件之一：

- 节点插入 $\varepsilon_V^+ := (v, t)$：节点 v 在时间 t 被添加到 G_T 中，即存在 $(v, x^v, t_s, t_e) \in V_T$，满足 $t_s = t$。
- 节点删除 $\varepsilon_V^- := (v, t)$：节点 v 在时间 t从 G_T 中移除，即存在$(v, x^v, t_s, t_e) \in V_T$，且 $t_e = t$。
- 边插入 $\varepsilon_E^+ := (e, t)$：边 e 在时间 t添加到 G_T 中，即存在 $(e, x^e, t_s, t_e) \in E_T$，且 $t_s = t$。
- 边删除 $\varepsilon_E^- := (e, t)$：边 e 在时间 t从 G_T 中移除，即存在$(e, x^e, t_s, t_e) \in E_T$，且 $t_e = t$。

时间图的基于事件的时序图 表示是一个事件序列

$$G_T^E := \{\varepsilon : \varepsilon \in \{\varepsilon_V^+, \varepsilon_V^-, \varepsilon_E^+, \varepsilon_E^-\}\}.$$

这里隐含地假设节点和边事件是一致的（例如，节点删除事件意味着每条关联边都存在相应的边删除事件）。对于事件时态图，可以通过为每条时态边和每个节点配对插入事件与删除事件，恢复时序图结构。与快照时态图相比，事件时序图更适合表示具有任意时间戳的时间图。

在下一节形式化学习任务时，我们将采用时间图这一通用概念，它涵盖快照时态图和事件时态图。另一方面，在第6节介绍时序图神经网络方法的分类体系时，我们将重新使用快照时态图和事件时态图这两个概念，因为时序图神经网络在其算法方法中会采用其中一种表示策略。

3 图神经网络的基本概念

图神经网络是一类专为处理和分析图结构数据而设计的神经网络架构；它们学习一个函数$\mathbf{h}_v = \text{GNN}(v, G; \theta)$，其中 $v \in V$和 θ是一组可训练参数。图神经网络依赖所谓的消息传递机制，该机制通过局部计算方案处理图。形式上，与节点 v 相关的信息存储在特征向量 $\mathbf{h}v$ 中，该向量通过迭代聚合其邻居节点的特征来更新。经过 k次迭代后，向量 $\mathbf{h}_v^k$ 包含了 v的 k 跳邻域的结构信息和节点内容。经过足够次数的迭代后，节点特征向量可用于对节点或整个图进行分类。具体而言，消息传递图神经网络第k层的输出为：

$$h_v^k = \texttt{COMBINE}^{(k)}(h_v^{k-1}, \texttt{AGGREGATE}^{(k)}(x_u^{k-1}, u \in \mathcal{N}[v]))$$

其中，聚合$^{(k)}$ 是一个函数，用于聚合邻域 $\mathcal{N}[v]$ 中第（$k-1$）次迭代的节点特征；组合$^{(k)}$ 则是一个函数，用于将节点 v 的特征与其邻居的特征组合起来。聚合步骤通常会采用均值、最大池化和求和等置换不变操作。这些操作可确保最终聚合得到的表示不受节点顺序影响。组合函数通常采用拼接或求和。在节点级别任务中，会使用读出函数根据每个节点在最终层 K的特征为其生成输出：

$$\mathbf{o}_v = \texttt{READOUT}(\mathbf{h}_v^K)$$

而在图级别任务中，读出函数则根据最后一层 K 的特征向量生成最终输出：

$$\mathbf{o} = \texttt{READOUT}(h_v^K, v \in V\}).$$

在我们的工作中，我们探索了专门针对时序图、采用此类消息传递方案的模型。

4 时序图建模的其他方法

传统上，图的机器学习模型大多是为静态图设计的 [89, 104]。然而，许多应用涉及时序图[42, 14, 76]。由于节点、属性和边会随时间变化，这给学习和推理带来了重要挑战。近期，人们提出了许多用于时序图的表示学习技术。用于学习时序图嵌入函数的一类热门方法是随机游走方法。例如，在 [84] 中，利用时间随机游走高效且自动地采样时序网络模体，即在限定时间范围内出现连边的连通子图。类似地，在 [44], 中，提出了一种时间强化随机游走，以有效采样图演化过程中的结构和时间上下文。相比之下，DyANE [71],将时序图转换为一种称为超邻接表示的静态图表示。在这种方法中，节点被定义为原始时序图中的（节点，时间）对。这种静态图表示保留了原始网络的时间路径，这对于理解和约束底层动力过程至关重要。随后，采用随机游走的静态图标准嵌入技术被应用于此。时序图表示学习也利用了时间点过程。时间点过程是一类随机过程，用于对连续时间内发生的异步离散事件序列进行建模[43]。DyRep [79] 能够学习一组

可有效生成不断演化的低维节点嵌入的函数。利用得到的节点嵌入，通过时间点过程估计特定时间戳下节点之间存在一条边的可能性。而在 [80], 中，时序图中的边出现过程被建模为多元点过程，其强度函数受分配给该边的分数影响，而该分数是通过学习得到的实体嵌入计算得出的。实体嵌入随时间演化，并通过循环架构获得。此外，非负矩阵分解（NMF）也被用于时序图中的链接预测。在 [1], 中，提出了用于非负矩阵分解的新型迭代规则，以构建能够捕捉时序图关键特征的矩阵因子，从而提高链接预测的准确性。

最后，近期提出的大多数方法都采用了深度学习技术。例如，DynGem [26]是一种用于增长图的动态自编码器，它根据前一快照的嵌入构建当前快照的嵌入。相较之下，TRRN [94], 使用多头自注意力处理一组记忆，从而通过快捷路径实现信息从过去的观测到当前潜在表示的高效流动。它结合策略网络与可微二元路由器，估计每个记忆的激活概率，并在最相关的时间步动态更新记忆。在 [93], 中，研究者提出了一种名为 STAR 的时空注意力循环网络模型，用于可解释的时间节点分类。在 [59] 中，通过训练嵌入，使其最大化任意给定时间步的图块与未来图块中心节点特征之间的互信息，从而完成节点级回归任务。最后，TSNet [105] 是一个用于时序图中节点分类的综合框架，包含两个关键步骤。首先，利用边采样对图快照进行稀疏化处理，采样过程由从监督分类任务中学习得到的分布引导。此步骤有效降低了快照的密度。随后，将稀疏化后的快照进行聚合，并通过卷积网络处理，以提取用于节点分类的有意义特征。

在本综述中，我们旨在探讨和分析那些利用并适配图神经网络框架以处理时序图的方法。通过深入研究这一特定技术子集，我们希望更透彻地了解这些方法在捕捉复杂图结构的时间动态方面的适用性、有效性和潜力。

5 时序图上的学习任务

得益于其学习能力，时序图神经网络极其灵活，可适用于时间图上的各种任务。其中一些任务是其静态对应任务在时间维度上的直接扩展。然而，时间维度会对学习设置和任务的定义产生一些不可忽视的影响，而其中一些概念在文献中往往只有较为宽泛的形式化定义。我们先形式化定义时序图神经网络的传导式学习和归纳式学习，然后介绍可以解决的不同任务。

5.1 学习设置

机器学习文献将归纳式学习与传导式学习区分开来：归纳式学习是指在训练数据上学习模型，随后将其应用于未见的测试实例；传导式学习则假定训练实例和测试实例的输入数据均可用，学习过程相当于利用训练输入及其标签，根据测试实例的输入推断其标签。这一区分对于图结构数据尤为重要，因为拓扑结构在节点之间建立了天然联系，从而能够以传导方式传播信息。粗略而言，在图学习文献中，如果训练时已知待预测节点及其邻域，通常采用传导式学习——这也是节点分类任务的典型情况；而归纳式学习则表示无法获取这些信息，通常与图分类任务相关。

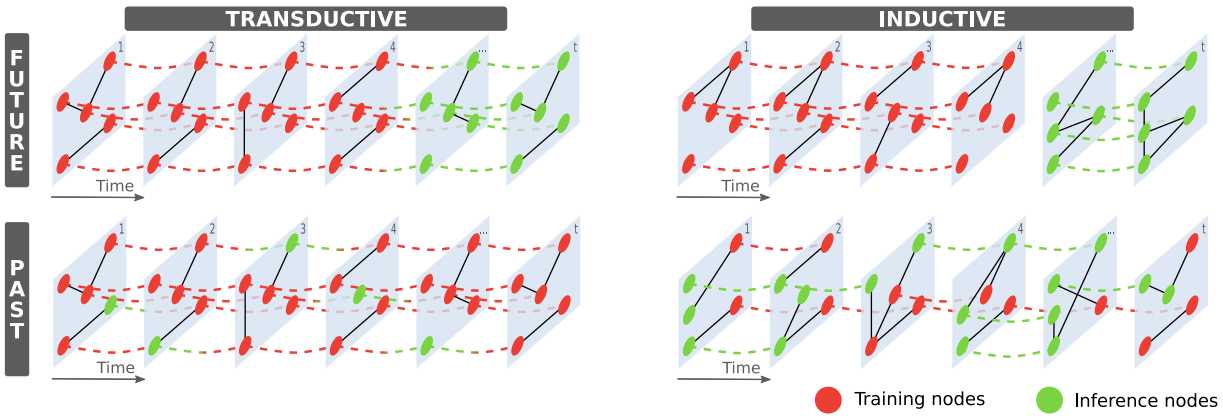


图1：**学习设置**。 第5.1节中形式化定义的时间图学习设置示意图。时序图表示为快照序列，其中训练节点（红色）和推理节点（绿色）通过边（实线）相连，虚线则连接连续快照中同一节点的实例（其特征和/或标签可能不同）。这四类设置由时间维度和拓扑维度的不同组合构成。**时间**维度区分了未来设置（第一行），在该设置中，所有训练节点都在推理节点之前被观测到；以及过去设置（第二行），在该设置中，推理也会针对最后一个训练节点被观测到之前出现的节点进行。**拓扑**维度包括传导式设置（左列），在该设置中，每个推理节点在训练期间也会被观测到（但未标注）；以及归纳式设置（右列），在该设置中，推理针对训练时尚未知晓的节点进行。

然而，谈及具备表示学习能力的图神经网络时，这种区分就不那么明确了。例如，在传导模式下接受节点分类训练的图神经网络，仍可应用于未见图，从而实际上执行归纳式学习。时间维度使这种分类更加难以界定，因为图结构会随时间变化，节点也会自然地出现和消失。因此，定义时序图中的节点隶属关系本身就是一项具有挑战性的任务。

下面，我们给出时序图神经网络的传导式学习与归纳式学习的形式化定义。该定义纯粹基于拓扑结构，即取决于训练时是否已知待预测实例，并在此基础上加入时间维度，以区分对过去和未来的预测任务。图1直观展示了这些学习设置。我们回顾一下（参见第2节）：T_e（G_T）是时间图 G_T 的最终时间戳。

定义6（学习设置）假设模型是在一组 $n \geq 1$ 时序图$\mathcal{G}_\mathcal{T}$上训练的：$= \{G_T^i := (V_i、 E_i、 X_i^V、 X_i^E)$ $i = 1, ..., n\}$。此外，设

$$T_e^{all} := \max_{i=1,\ldots,n} T_e(G_T^i),\ V^{all} := \cup_{i=1}^n V_i,\ E^{all} := \cup_{i=1}^n E_i,$$

分别表示最终时间戳以及训练集中所有节点和边的集合。于是，我们有以下设置：

- 传导式学习：只能对 $v \in V^{all}$、 $e \in E^{all}$ 或 $G_T \subseteq_V G_T^i with G_T^i \in \mathcal{G}_\mathcal{T}$ 执行推理。
- 归纳式学习：还可以对 $v \notin V^{all}$、 $e \notin E^{all}$ 或 $G_T \not\subseteq_V G_T^i$ 执行推理，适用于所有$i = 1、 ....、 n$。
- 过去预测：对 $t \leq T_e^{all}$ 进行推理。

- 未来预测：对 $t > T_e^{all}$ 进行推理。

我们指出，拓扑设置与时间设置的所有组合都有意义，唯独归纳式图任务的情况除外。事实上，时间图中使用的时间度量是相对于每个单独的图而言的。因此，转向一个未观测到的图会使过去与未来的区分变得毫无意义。此外，我们注意到，在其他所有情况下，这两种时间设置都是基于整个训练集的最终时间定义的，而非基于具体实例（节点或边），因为它们的嵌入也可能因训练集中邻居的变化而改变。

我们将在第5.2–5.3节使用这一分类来介绍监督学习任务和无监督学习任务，并在第6节展示现有模型。

5.2 监督学习任务

监督学习任务基于一个数据集，其中每个对象都标注有其标签（或类别），这些标签（或类别）来自有限个可能选项的集合 $\mathcal{C} := \{C_1, C_2, \ldots, C_k\}$。

5.2.1 分类

定义 7（时间节点分类） 给定一个时间图 $G_T = (V, E, V_T, E_T)$，节点分类任务旨在学习函数

$$f_{NC} : V \times \mathbb{R}^+ \to \mathcal{C}$$

该函数将每个节点映射到时间 $t \in \mathbb{R}^+$ 的一个类别 $C \in \mathcal{C}$。

这是时间图神经网络文献中最常见的任务之一。例如，[61, 92, 83, 106, 66] 关注未来传导式（FT）设置，即预测节点在未来时间戳的标签。TGAT[92] 执行未来归纳式（FI）学习，即预测未来未见节点的标签。最后，DGNN [51]是唯一在过去归纳式（PI）设置下接受测试的方法，即预测训练期间不可用（或被屏蔽）的过去节点的标签，而目前还没有任何方法应用于过去传导式（PT）设置。一个重要的应用场景可能是疫情监测：通过接触者追踪生成过去人类交互的时间图（TG），并通过抽样检测揭示一组个体的标签（感染状态）。识别未检测节点过去的感染状态是一项 PT 任务。

定义 8（时态边分类） 给定一个时间图 $G_T = (V, E, V_T, E_T)$，时态边分类任务旨在学习一个函数

$$f_{EC} : E \times \mathbb{R}^+ \to \mathcal{C}$$

该函数在给定时间 $t \in \mathbb{R}^+$ 将每条边分配到一个类别。

文献对时态边分类的研究较少。现有方法主要关注未来时间学习 [61, 83], ，而未来归纳、过去归纳和过去时间学习迄今尚未得到研究。过去时间学习的一个示例是，根据两位熟人的后续行为，预测他们在社交网络中未知的过去关系。对于未来归纳，可以预测新用户之间未来发生的交易是否属于欺诈。

在下一个定义中，我们使用正实区间集合 $I^+ := \{[t_s, t_e] \subset \mathbb{R}^+\}$。

定义 9（时序图分类） 令 $\mathcal{G}_\mathcal{T}$ 为时间图的一个域。图分类任务要求学习一个函数

$$f_{GC} : \mathcal{G}_\mathcal{T} \times I^+ \to \mathcal{C}$$

该函数将限定在时间区间 $[t_s, t_e] \in I^+$ 内的时序图映射到一个类别。

该定义包含对单个快照的分类（即 $t_s = t_e$）。如上所述，在归纳设置中，区分过去预测和未来预测毫无意义。而在传导设置中，若 $[T_s(G_T)\ T_e(G_T)] \subseteq [t_s, t_e]$，图 $G_T \in \mathcal{G}_\mathcal{T}$ 可以按过去模式进行分类；否则，则按未来模式进行分类。

目前唯一一种针对时序图分类的方法见于 [55], ，其中，对具有不同传播过程特征的 STG 进行区分被形式化为一项过去传导式分类任务。

不同传播过程之间的区分被形式化为一项过去传导式分类任务。时序图分类任务有许多相关应用。例如，归纳式时序图分类的一个实例是通过分析脑连接组来预测精神障碍 [32]。另一方面，根据基因表达谱检测疾病进展过程中的关键阶段 [23] ，可被表述为一项过去传导式图分类任务。

5.2.2 回归

只需将类别型目标 $\mathcal{C}$ 替换为集合 $\mathbb{R}$，即可将为分类引入的所有任务转换为相应的回归任务。为简洁起见，我们省略形式化定义。静态图神经网络在这一设定中已取得出色成果，例如天气预报 [38]以及地震定位与估算 [53]。然而，针对时序图神经网络在回归任务中的应用，相关研究仍然有限。值得注意的例外是，时序图神经网络被用于两项未来传导式回归任务：交通预测 [10]以及预测邻国水痘病例的发病率 [55]。

5.2.3 链接预测

链接预测要求模型预测给定两个节点之间的关系，其输入可以是任意可能的节点对。因此，如果训练时已知两个节点实例，则该设定属于传导式；否则属于归纳式。相反， [63] 采用了不同的方法，并将时序链接预测任务分为*1*级 （节点集合固定）和*2*级 （节点可能随时间推移而增加或移除）。

定义 10（时序链接预测）设$G_T = (V, E, V_T, E_T)$ 为一个时间图。时序链接预测任务旨在学习一个函数

$$f_{LP} : V \times V \times \mathbb{R}^+ \to [0, 1]$$

该函数用于预测在某个特定时间，给定的两个节点之间存在一条边的概率。

函数 f_{LP} 的定义域是所有可行节点对的集合，因为我们既可以预测过去曾经连接或未曾连接的节点之间未来交互的概率，也可以预测过去某个时间缺失边的概率。大多数用于时序链接预测的时间图神经网络方法都专注于未来预测，即预测在未来时间戳，现有节点之间（FT 是最常见的设置） [61, 70, 29, 100, 92, 50, 83, 51, 66, 106], 或未见节点之间（未来归纳） [29, 92, 66]是否存在一条边。唯一研究过去时序链接预测的模型是 [50], ，它通过屏蔽部分节点并预测这些节点之间过去是否存在一条边，设计了一种过去归纳式设置。请注意，预测过去的时序链接对于预测例如流行病学研究中的接触者追踪所缺失的交互，可能极为有用。

定义 11（事件时间预测）设$G_T = (V, E, V_T, E_T)$ 为一个时间图。事件时间预测任务旨在学习一个函数

$$f_{EP} : V \times V \to \mathbb{R}^+$$

用于预测一条边首次出现的时间。

现有方法均未涉及这一任务。事件时间预测的潜在未来应用包括预测客户何时向供应商支付发票，或预测在社交网络中连接两个相似用户需要多长时间。

5.3 无监督学习任务

本节将形式化定义时序图上的无监督学习任务；迄今为止，时间图神经网络文献对这一领域几乎没有关注。

5.3.1 聚类

时序图可以按节点或图级别进行聚类，而边级聚类只是节点级聚类的一种小幅变体。一些相关应用可以通过时态聚类来定义。

定义 12（时态节点聚类）给定一个时间图 $G_T = (V, E, V_T, E_T)$，时态节点聚类任务包括学习一个依赖时间的聚类分配映射

$$f_{NCl} : V \times \mathbb{R}^+ \to \mathcal{P}(V),$$

其中 $\mathcal{P}(V) := \{p_1, p_2, \ldots, p_k\}$ 是节点集 V 的一个划分，即 $p_i \subset V_T$， $p_i \cap p_j = \emptyset$，当 $i \neq j$，$\cup_{i=1}^{N} p_i = V_T$ 时。

虽然静态图中的节点聚类是一项非常常见的任务，但时序图神经网络尚未探索其时间维度上的对应任务，尽管它在流行病建模等应用领域具有潜在价值，例如识别暴露人群群体，适用于归纳式和传导式设置 [69, 33, 41, 12, 13]，；客户画像中的趋势检测主要适用于传导式设置 [45, 67]，；或者疾病聚类主要适用于未来传导式设置 [35, 54, 85, 60]。

定义 13（时序图聚类）给定一组时序图 $\mathcal{G}_{\mathcal{T}}$，时序图聚类任务包括学习一个聚类分配函数

$$f_{GCl} : \mathcal{G}_{\mathcal{T}} \times I^+ \to \mathcal{P}(\mathcal{G}_{\mathcal{T}}),$$

其中 $\mathcal{P}(\mathcal{G}_{\mathcal{T}}) := \{p_1, \ldots, p_k\}$ 是给定时间区间内时序图集合的一个划分。

归纳式时序图聚类任务的相关示例包括：根据社交互动网络（例如医院、工作场所、学校）的互动模式对其进行分组 [48]，，或根据疾病传播过程的相似性对疾病进行分组 [17, 58]。

5.3.2 低维嵌入（LDE）

低维嵌入在时间场景中尤其有用，例如，可用于直观地检查各个节点或整个图的时间动态，并识别相关趋势和模式。目前尚无基于图神经网络的模型应用于这些任务，无论是节点级别还是图级别。我们正式定义时态节点和图的低维嵌入任务如下。

定义 14（低维时间节点嵌入）给定一个时间图 $G_T = (V, E, V_T, E_T)$，低维时间节点嵌入任务包括学习一个映射

$$f_{NEm} : V \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}^d$$

将节点在给定时间映射到低维空间。

定义 15（低维时间图嵌入）给定一个时序图域 $\mathcal{G}_{\mathcal{T}}$，低维时间图嵌入任务旨在学习一个映射

$$f_{GEm} : \mathcal{G}_{\mathcal{T}} \times I^+ \to \mathbb{R}^d,$$

该映射在给定时间区间内将每个图表示为一个低维向量。

6 时间图神经网络分类体系

本节介绍用于对现有时间图神经网络方法进行分类的分类体系（见图2）。所有这些方法都会为时间图 TG 中的每个节点学习一个依赖于时间的嵌入 $\mathbf{h}_v(t) = \text{TGNN}(v, G_T; \theta)$，其中 θ 同样表示一组可训练参数。按照第2.1节所概述的表示策略，第一层将方法分为基于快照的和基于事件的两类。分类体系的第二层则根据用于管理时间依赖关系的技术，进一步划分这两个宏类别。图2中分类体系的叶节点对应各个模型，彩色符号表示其主要底层技术。

下文中，我们将能处理张量流 v_1，……，v_k 并预测序列中下一个张量的网络记作 REC(v_1，……，v_k)。这通常是一个循环神经网络（我们据此将其命名为 REC），但也可以采用时间注意力等其他机制。

6.1 基于快照的模型

基于快照的模型专为时序图设计（见定义 4），因此，与

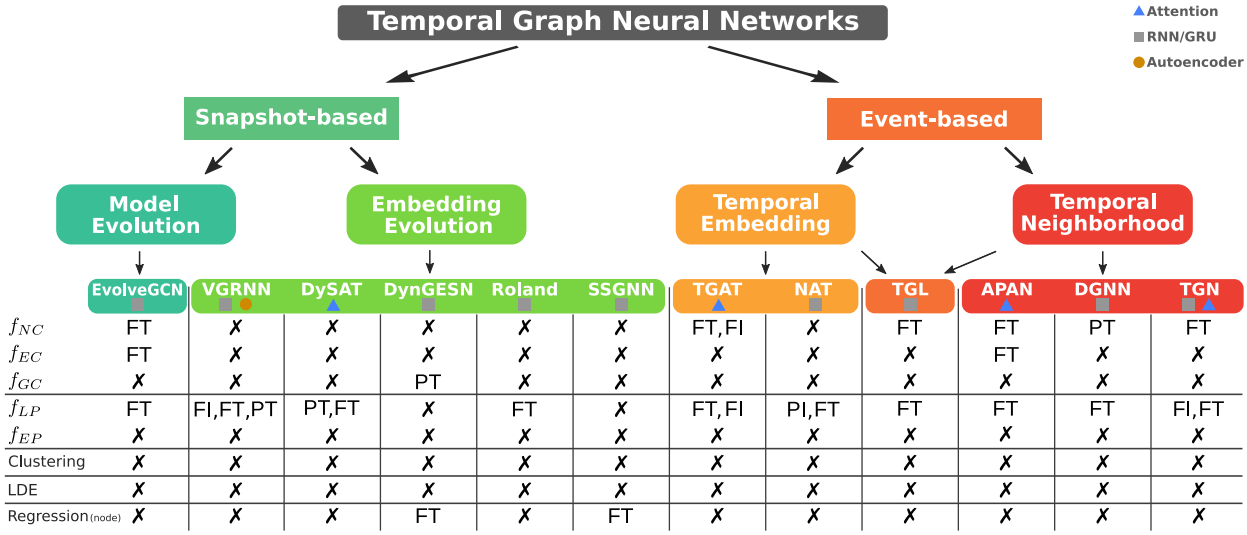


图2：**所提出的TGNN分类体系以及对所综述方法的分析**。顶部面板展示了本文引入的新类别及其对应的模型实例（第6节），其中彩色项目符号还表示这些模型所采用的主要技术。底部表格将这些方法映射到其在相应原始论文中应用的任务（第5节），并进一步标明它们在未来（F）、过去（P）、归纳（I）或传导（T）设置中的使用情况（第5.1节）。需要注意的是，目前尚无方法应用于图或节点的聚类和可视化。此外，十个模型中只有四个在过去模式下进行了测试（三个在PT模式下，一个在PI模式下）。

定义一致，它们配备了适当的方法来处理每个时间点的整个图，并配备了能够学习跨时间步长时间依赖关系的机制。根据所使用的机制，我们还可以进一步区分模型演化方法和嵌入演化方法。

6.1.1 模型演化方法

我们将静态图神经网络模型的参数随时间发生演化称为模型演化。这种机制适用于对STG进行建模，因为模型的演化是在快照级别上进行的。

更正式地说，这些方法学习一个嵌入$\mathbf{h}_v(t_i) = \text{GNN}(v, G_i; \theta(t_i))$，其中 $\theta(t_i) = \text{REC}(\theta(t_{i-j}) : 1 \leq j \leq i_{\max})$ 是一个参数演化网络，而$i_{\max}$ 是记忆长度。

据我们所知，属于这一类别的唯一现有方法是

EvolveGCN [61]。该模型利用循环神经网络（RNN）在每个时间步更新图卷积网络（GCN） [39]的参数，使模型能够适应变化，而不受节点是否存在的限制。该方法能够有效处理此前没有历史信息的新节点。此方法的一个关键优势是，GCN 参数不再直接训练，而是由训练好的 RNN 计算得出，因此模型规模更易于管理，且不会随着时间步数量的增加而增大。论文介绍了该方法的两个版本：EvolveGCN-O 使用长短期记忆网络（LSTM）使权重随时间演化；EvolveGCN-H 则将权重表示为门控循环单元（GRU）的隐藏状态，其输入为前一个节点嵌入。

6.1.2 嵌入演化方法

与演化静态图神经网络模型的参数不同，嵌入演化方法侧重于演化静态模型生成的嵌入。这意味着要将节点嵌入$\mathbf{h}_v(t_i)$ =REC($\mathbf{h}_v(t_{i-j})$ $i = 1, \ldots, t_{\max}$) 学习为先前嵌入的演化，其中$\mathbf{h}_v(t_{i-j})$ = GNN(v, G_{i-j}; θ) 是快照图 G_{i-j} 的图神经网络嵌入。

属于这一类别的时间图神经网络模型有多种。这些网络在处理快照时态图的结构信息和时间动态时所采用的技术各不相同。**DySAT** [70] 将图注意力网络（GAT） [81] 推广到快照时态图。首先，它使用自注意力机制，在每个时间戳生成静态节点嵌入。接着，它使用第二个自注意力模块处理节点过去的时序嵌入，从而生成新的嵌入。将图演化解耦为两个模块化的部分，可以高效计算时序节点表示。结构自注意力层和时间自注意力层相结合并堆叠，使模型兼具灵活性和可扩展性。**VGRNN** 模型 [29] 在每个快照上使用变分图自编码器 [40] ，其中潜在表示受一个通过半隐式变分推理（SIVI） [98]建模的状态变量所制约，以处理图随时间发生的变化。随后，学习到的潜在表示会通过一个长短期记忆网络进行演化，该网络以先前时刻的潜在表示为条件，使模型能够预测图未来的演化。**ROLAND** [100]是一个通用框架，可将最先进的图神经网络技术扩展到快照时态图。其核心洞见是，不同图神经网络层的节点嵌入可以视为层次化节点状态。为了将静态图神经网络推广到动态场景，模型通过门控循环单元（GRU）更新模块 [9]，根据新观察到的节点和边更新层次化节点状态。论文提出了该模型的两个版本：ROLAND-MLP 使用两层多层感知机更新节点嵌入；ROLAND-移动平均则通过对先前节点嵌入取移动平均来更新节点嵌入。最后，研究者还提出了储层计算技术。

DynGESN [55] 提出了一种方法：每个节点的嵌入通过循环机制，利用其时间邻域和先前的嵌入进行更新，同时循环权重保持固定并随机初始化。**SSGNN** [10] 采用了类似的方法，但在解码器中引入可训练参数，并在编码器中结合随机化组件：首先，编码器利用储层捕获不同时间尺度上的动态，从而为每个节点生成其观测到的时间序列数据的表示；随后进一步处理这些表示，以纳入由图结构决定的空间动态。

6.2 基于事件的模型

属于基于事件的宏类别的模型旨在处理事件时态图（参见定义 5）。这些模型能够处理事件流，方法是采用相关技术，在每次发生涉及某个节点的事件时更新该节点的表示。它们是消息传递在时间图上的扩展，因为它们会在时间邻域上组合并聚合节点表示。

这一宏类别中的模型还可根据用于学习时间依赖关系的技术，进一步分为时间嵌入方法和时间邻域方法。具体而言，时间嵌入模型使用循环机制或自注意力机制，对事件流中的序列信息进行建模，同时纳入时间编码。这样，便可通过时间嵌入、节点特征与图拓扑之间的交互，对时间信号进行建模。时间邻域模型则使用一个模块，存储在给定时间涉及特定节点的事件函数。这些值随后会被聚合，并随着时间推移用于更新节点表示。

6.2.1 时间嵌入方法

时间嵌入方法通过结合时间嵌入、节点特征和图拓扑来建模时间图。这些模型使用显式的函数式时间编码，即时间的向量嵌入$\mathbf{g}_t$

基于随机傅里叶特征（RFF） [64], ，它具有平移不变性（即只取决于经过的时间，而非绝对时间）。

他们将消息传递架构扩展到时间邻域，其中时间由$\mathbf{g}_t$编码，即，

$$h_v(t) = \texttt{COMBINE}((\mathbf{h}_v(t), \mathbf{g}_0), \texttt{AGGREGATE}(\{(\mathbf{h}_u(t'), \mathbf{g}_{t-t'}), u \in \mathcal{N}_{\mathcal{T}}[v]\}))$$

其中， t' 是 u与 v之间连接事件发生的时间。因此，$\mathbf{g}_{t-t'}$ 编码了当前时间 t 与u 和 v建立连接的时间之间经过的时间。

TGAT [92], 例如，引入了一种图时间注意力机制，该机制基于节点的时间邻居的嵌入进行运算，并以基于 RFF 的时间编码取代位置编码。此外，[92] 实现了一个 TGAT 版本，其中所有时间注意力权重都设为相同值（Const-TGAT）。另一方面，**NAT** [50] 将每个节点的时间邻居收集到字典中，然后利用当前节点的历史邻域和基于 RFF 的时间嵌入，通过循环机制学习节点表示。请注意， [50]提出了一种专用数据结构，以支持在 GPU 上并行访问和更新字典。

6.2.2 时间邻域方法

时间邻域类别包括所有使用特殊邮箱模块、根据事件更新节点嵌入的时间图神经网络模型。当事件 ε 发生时，会根据事件的详细信息计算一个邮件或消息$\mathbf{m}_\varepsilon$。例如，当两个节点之间出现一条新边时，系统会生成一条消息，并将事件发生的时间、节点特征以及新边的特征考虑在内。随后，在每个时间点，通过聚合生成的所有消息来更新节点表示。更具体地说，这些方法通过学习一种嵌入来扩展消息传递

$$\mathbf{h}_v(t) = \texttt{COMBINE}(\mathbf{h}_v(t), \text{聚合}(\{\mathbf{m}_\varepsilon, \ \varepsilon = \varepsilon_E^{\pm} = (u, \ t'), \text{其中} \ u \in \mathcal{N}_{\mathcal{T}}[v]\})),$$

其中 $\varepsilon_E^{\pm}$ （带有 $u \in \mathcal{N}_{\mathcal{T}}[v]$）表示 v 的时间邻居的添加或删除。

一些现有的时间图神经网络方法属于这一类。**APAN** [83] 引入了异步算法的概念，将图查询与模型推理解耦。基于注意力的编码器将邮箱中的内容映射为每个节点的潜在表示，再由针对下游任务调整的多层感知机进行解码。每次节点因事件而更新后，传播器都会将包含当前节点嵌入的邮件发送到其邻居的邮箱。**DGNN** [51] 结合了一个交互模块——该模块根据交互节点当前的嵌入及其过去的交互历史，为每个事件生成编码——以及一个传播模块——该模块将更新后的编码传递给交互节点的每个邻居。当前节点编码与其时间邻居编码的聚合使用了经过修改的长短期记忆网络，使其能够处理非恒定时间步长，并采用折扣因子降低远距离交互的重要性。**TGN**[66] 为事件时序图中的表示学习提供了一个通用框架，并致力于整合早期技术提出的概念。这个归纳式框架由彼此独立且可互换的模块组成。模型迄今见过的每个节点都由一个记忆向量表征，该向量是对其所有过去交互的压缩表示。给定一个新事件，邮箱模块会为涉及的每个节点计算一封邮件，随后利用这些邮件更新记忆向量。为解决所谓的陈旧性问题 [37], ，嵌入模块会在每个时间戳根据节点的邻域和记忆状态计算节点嵌入。最后，**TGL** [106] 是一个通用框架，通过分布式训练方法在包含数十亿个节点和边的图上训练时序图神经网络。在 TGL 中，邮箱模块用于存储数量有限的最新交互，这些交互称为邮件。发生新事件时，利用邮箱中的缓存消息更新相关节点的节点记忆。计算出节点嵌入后，再更新邮箱。推理期间也会采用这一过程，以确保节点记忆保持一致，尽管更新记忆

在此阶段并非必需。

6.3 类别比较

我们在分类体系中识别出的模型类别各有优势、劣势，也适用于不同的特定场景。首先，快照类方法与基于事件的方法这两个宏观类别之间的比较十分直观，关键在于选择时序图的表示方式，即 STG 或 ETG。在每个宏观类别内部，各子类别也各有优缺点。例如，在模型演化类别中，当 GNN 参数数量庞大时，学习 GNN 参数的演化会变得复杂。另一方面，嵌入演化类别的局限在于，时间学习完全依赖循环机制，而这未必能充分保证子结构之间时间相关性的保留。尽管存在这一缺点，该方法简单直观，可用于探索和评估各种循环机制。

在时间嵌入方法中，定义时间编码函数并非易事，因为它应捕捉图的不同方面，例如交互的时间周期性、随时间重复发生的交互等。不过，这一类别的一个优点是，可以根据应用领域定义特定的时间编码函数。

最后，对于时间邻域类别，构建邮箱可能颇为复杂。例如，稠密图的邮箱容量较大，因此需要处理可扩展性问题。需要精心设计一种机制，以确定将哪些节点纳入邮箱；而且这种机制也可能取决于具体领域。与时间嵌入类别类似，时间邻域模型的一项优势是能够定义领域特定的邮箱机制。

总而言之，用于时间图学习的每类模型都有各自的优缺点。类别的选择取决于输入图的表示方式、学习时间动态的复杂程度、是否需要领域专用编码或邮箱机制，以及可扩展性方面的考量。

7 开放性挑战

基于现有的图神经网络方法库，目前已开发出两个主要的时间图神经网络库，分别是基于 PyTorch Geometric[1], 的 PyTorch Geometric Temporal (PyGT) [68], ，以及基于 Deep Graph Library[2]的 DynaGraph [27], 。尽管这些库为 TGNN 模型的开发和实际应用作出了重要贡献，但要充分发挥这项技术的潜力，仍有若干开放性挑战需要应对。下文将讨论我们认为最为重要的挑战。

评估图神经网络模型的评估因开放图基准（OGB）[34], 而得到极大提升。该基准提供了标准化的评估协议和一系列图数据集，使得不同图神经网络模型之间能够进行公平、一致的比较。目前尚不存在同样完善、用于评估时序图神经网络的标准化基准。因此，每种模型都在各自选择的数据集上进行测试，这使得难以公平地比较和排序不同的时序图神经网络。例如， [106] 推出了两个真实世界数据集，分别包含 2 亿和 13 亿条时序边，可用于评估时序图神经网络在大规模真实场景下的可扩展性，但他们只测试了 TGL模型 [106]。第5节中所述学习设置和任务的多样性与复杂性，使任务、数据集和处理流水线的标准化尤为重要；只有这样，才能公平评估不同方法，并推动该领域的创新。

评估图神经网络模型的另一个关键方面是可解释性，即解释和理解其决策过程的能力。尽管标准图神经网络的可解释性已得到广泛研究

[1]https://pytorch-geometric.readthedocs.io [2] https://docs.dgl.ai/

但只有少数研究关注如何解释时序图神经网络 [49, 99, 46, 2], [90, 82, 31]。

表达能力 受（静态）图神经网络广受欢迎的推动，近年来，人们对其表达能力给予了极大关注 [72]。例如，研究表明，恰当构造的消息传递图神经网络在区分图或节点方面，能力可与 Weisfeiler-Lehman 同构检验（WL 检验）相当 [95], ；此外，人们还提出了消息传递图神经网络的高阶推广，其表达能力可达到k-WL 检验的水平 [57]。此外，已有证明表明，图神经网络在由 WL 检验所诱导的节点等价关系下，是图上的一类通用逼近器 [16]。最后，文献 [5]也研究了配备池化算子的图神经网络的表达能力。

相比之下，时间图神经网络的表达能力仍远未得到充分探索，而设计适用于时间图神经网络的新型 WL 检验，是实现这一目标的关键一步。这是一项颇具挑战性的任务，因为由于节点和边会出现或消失，时序图中节点邻域的定义并不像静态图中那样简单。文献 [4], 提出了适用于时序图的新型 WL 检验，但仅适用于离散时间时序图。另一方面，文献 [75] 为事件时序图提出了一种新型 WL 检验，而 TGN 模型 [66]已被证明具有与该检验相当的能力。最后，文献 [4]证明了一个通用逼近定理，但该结果仅适用于一种特定的时序图神经网络模型，该模型面向快照时态图，由标准图神经网络与循环神经网络堆叠而成。

据我们所知，这些是迄今为止关于时序图神经网络表达能力的唯一研究成果。针对不同时间图表示的 WL 检验，尚缺乏完整的理论体系，例如事件型模型的通用逼近定理。此外，目前还没有人尝试引入高阶图结构来增强时序图神经网络的表达能力。这项任务尤其具有挑战性，因为它不仅需要定义 k-WL 检验的时间对应版本，还需要一些能够扩展到大型数据集的技术。事实上，考虑高阶结构的一个缺点是内存消耗较高；对于时间图而言，这一问题只会更加严重，因为时间图的节点数通常多于静态图。

可学习性在大型且复杂的图数据上训练标准图神经网络并非易事，往往会导致过平滑和过度挤压等问题。代数拓扑和层论为这一困难提供了理论解释 [6, 78]。更直观地说，我们仍不知道如何在训练深层图神经网络时，重现训练向量数据上的超深架构所取得的突破。对于时序图神经网络，这一难题更具挑战性，因为时间图通常存在长期依赖，因而会带来过平滑和过度挤压之外的额外问题。

现代静态图神经网络模型采用随机失活、虚拟节点和邻居采样等技术，应对数据复杂性所带来的问题，但目前仍远未找到通用解决方案。将上述技术扩展到时序图神经网络，以及开展相应的理论研究，都是开放性挑战；据我们所知，目前只有一项工作朝着这一目标迈进 [97]。另一方面，由于难以以层次化方式设计图动力学，提出通用的超深时序图神经网络更具挑战性。

现实世界应用 对第5节中各项任务的分析揭示了时序图神经网络在远超当前应用范围的领域中的诸多应用机会。我们将在此概述一些颇具前景的应用方向。

将机器学习与物理知识相结合，以学习动力系统，是时间图神经网络的一项颇具挑战性且可能带来颠覆性影响的发展方向 [86]。物理信息神经网络（PINNs） [65] 已在科学计算领域掀起变革 [11], ，而静态图神经网络也已成功应用于这一框架

并取得了显著成效 [62, 21]。将时间图神经网络应用于这一领域，或可将这些成果拓展至时变问题的处理。气候科学 [18] 是一个尤其具有吸引力的应用领域，既因为它对社会有着重大影响，也因为图神经网络在气候建模任务中已取得令人鼓舞的成果 [38]。我们相信，凭借独特的多尺度时空相关性捕捉能力，时间图神经网络有望成为这一领域的重要技术。流行病研究也是一个对日常生活影响巨大的课题，可借助时间图神经网络加以探索，因为要恰当地建模传播动力学，就必须将其与底层时序图结构紧密结合 [17]。这两个领域都需要进一步发展时间图神经网络，以解决回归问题；这一任务目前仍未得到充分研究（见第5节）。

8 结论

基于图神经网络的时序图模型已成为一个颇具前景的研究领域。然而，我们认为，图神经网络在这一领域的潜力尚未得到充分探索。在本研究中，我们提出了文献中尚缺乏的时序图神经网络任务与学习设置的系统化形式化定义，并构建了一个全面的分类体系，对现有方法进行归类并指出尚未解决的任务。在此基础上，我们梳理了当前最先进的研究成果，并探讨了亟待解决的开放性挑战，以充分释放时序图神经网络的潜力。最后我们强调，目前尚待解决的问题极具挑战性，因为它们要求同时考虑数据的时间维度和关系维度。这表明，未来的新型计算模型必须超越图神经网络框架，才能提供显著更优的解决方案。

致谢

本研究部分由 TAILOR 项目资助。该项目由欧盟地平线2020研究与创新计划资助，协议编号为 952215。

参考文献

[1] N.M. Ahmed, L. Chen, Y. Wang, B. Li, Y. Li, and W. Li. DeepEye：基于非负矩阵分解的动态网络链接预测。《大数据挖掘与分析》, 2018.[2] S. Azzolin, A. Longa, P. Barbiero, P. Li`o, and A. Passerini. 通过学习概念的逻辑组合实现图神经网络的全局可解释性。*arXiv* 预印本 *arXiv:2210.07147*, 2022.[3] C.D.T. Barros, M.R.F. Mendon¸ca, A. Vieira, and A. Ziviani. 动态图嵌入综述。*ACM CSUR*, 2021.[4]S. Beddar-Wiesing, G.A. D'Inverno, C. Graziani, V. Lachi, A. Moallemy-Oureh, F. Scarselli, and J.M. Thomas. Weisfeiler–Lehman 方法走向动态化：图神经网络对属性图和动态图的表达能力分析。*arXiv* 预印本 *arXiv:2210.03990*, 2022.[5]F.M. Bianchi and V. Lachi. 图神经网络中池化的表达能力。*arXiv* 预印本 *arXiv:2304.01575*, 2023.[6] C. Bodnar, F. Di Giovanni, B.P. Chamberlain, P. Li`o, and M. Bronstein. 神经层束扩散：从拓扑视角看图神经网络中的异配性与过平滑。发表于*ICLR*, 2022.[7] Lei Cai and Shuiwang Ji. 一种用于图链接预测的多尺度方法。发表于*AAAI* 人工智能会议论文集, 第34卷，第3308–3315页，2020年。[8]G. Cencetti, G. Santin, A. Longa, E. Pi-gani, A. Barrat, C. Cattuto, S. Lehmann, M. Salathe, and B. Lepri. 数字邻近性基于经验接触网络追踪以控制大流行病。《自然·通讯》，2021年。[9] J. Chung、C. Gulcehre、K. Cho 和 Y. Bengio。门控循环神经网络在序列建模中的实证评估。*arXiv* 预印本 *arXiv:1412.3555*, 2014年。[10]A. Cini、I. Marisca、F.M. Bianchi 和 C. Alippi。可扩展的时空图神经网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:2209.06520*，2022年。[11]S. Cuomo、V.S. Di Cola、F. Giampaolo、G. Rozza、M. Raissi 和 F Piccialli。通过物理信息神经网络实现科学机器学习：现状与未来方向。《科学计算杂志》, 2022年。[12] Alexandre Darbon、Davide Colombi、Eugenio Valdano、Lara Savini、Armando Giovannini 和 Vittoria Colizza。考虑感染期异质性的时间接触网络疾病持续性。《英国皇家学会开放科学》，6(1):181404，2019年。[13] Alexandre Darbon、Eugenio Valdano、Chiara Poletto、Armando Giovannini、Lara Savini、Luca Candeloro 和 Vittoria Colizza。基于网络评估意大利地区对牛布鲁氏菌病的易感性。《预防兽医学》，158:25–34，2018年。[14] Shib Sankar Dasgupta、Swayambhu Nath Ray 和 Partha Talukdar。Hyte：基于超平面的时间感知知识图谱嵌入。载于*2018*年自然语言处理实证方法会议论文集，第2001–2011页，2018年。[15] S. Deng、H. Rangwala 和 Y. Ning。学习动态上下文图以预测社交事件。载于*ACM SIGKDD*, 2019年。[16] G.A. D'Inverno、M. Bianchini、M.L. Sampoli 和 F. Scarselli。关于图神经网络逼近能力的新视角。*arXiv* 预印本 *arXiv:2106.08992*，2021年。

[17] J. Enright 和 R.K. Rowland。动态网络上的流行病。《流行病》，2018年。[18] J. H. Faghmous 和 V. Kumar。《理解气候变化的大数据指南：理论指导的数据科学案例》。《大数据》，2(3)，2014年。[19] W. Fan、Y. Ma、Q. Li、Y. He、E. Zhao、J. Tang 和 D. Yin。面向社交推荐的图神经网络。WWW '19，纽约，美国纽约州，2019年。计算机协会。[20] C. Gao、X. Wang、X. He 和 Y. Li。面向推荐系统的图神经网络。WSDM '22，第1623–1625页，纽约，美国纽约州，2022年。计算机协会。[21]H. Gao、M.J. Zahr 和 J. Wang。物理信息图神经伽辽金网络：求解由偏微分方程控制的正向和逆向问题的统一框架。《计算力学与工程方法》，2022年。[22]Hongyang Gao、Zhengyang Wang 和 Shuiwang Ji。大规模可学习图卷积网络。载于第*24*届 *ACM SI GKDD* 知识发现与数据挖掘国际会议论文集，第1416–1424页，2018年。[23] R. Gao、J. Yan、P. Li 和 L. Chen。基于时序网络流熵检测疾病发展过程中的临界状态。《生物信息学简报》，2022年。[24] S. Gao。移动时代探索人类移动模式与城市动态的时空分析。《空间认知与计算》，15(2):86–114，2015年。[25]Johannes Gasteiger、Aleksandar Bojchevski 和 Stephan G¨ unnemann。先预测，再传播：图神经网络与个性化PageRank相结合。*arXiv* 预印本 *arXiv:1810.05997*，2018年。

[26]Palash Goyal、Nitin Kamra、Xinran He 和 Yan Liu。DynGem：用于动态图的深度嵌入方法。*arXiv* 预印本 *arXiv:1805.11273*，2018年。[27] M. Guan、A.P. Iyer 和 T. Kim。DynaGraph：可扩展的动态图神经网络。发表于$ACM\ SIGMOD22\ GRADES\text{-}NDA$，2022年。[28]S. Gupta 和 S. Bedathur。时序图表示学习与生成式建模综述。*arXiv* 预印本 *arXiv:2208.12126*，2022年。[29]E. Hajiramezanali、A. Hasanzadeh、K. Narayanan、N. Duffield、M. Zhou 和 X. Qian。变分图循环神经网络。$NeurIPS$，32，2019年。[30] W. Hamilton、Z. Ying 和 J. Leskovec。在大图上进行归纳式表示学习。$NeurIPS$，30，2017年。[31] W. He、M. N. Vu、Z. Jiang 和 M. T. Thai。时序图神经网络解释器。发表于*GLOBECOM - IEEE* 全球通信大会*2022*，第6384–6389页。IEEE，2022年。[32] M.P. Van Den Heuvel、R.C.W. Mandl、C.J. Stam.、R.S. Kahn、P. Hulshoff 和 E. Hilleke。精神分裂症中异常的额叶与颞叶复杂网络结构：图论分析。《神经科学杂志》，2010年。[33] Pietro Hiram Guzzi、Francesco Petrizzelli 和 Tommaso Mazza。疾病传播建模与分析：综述。生物信息学简报，23(4)：bbac230，2022年。[34] W. Hu、M. Fey、M. Zitnik、Y. Dong、H. Ren、B. Liu、M. Catasta 和 J. Leskovec。开放图基准：用于图上机器学习的数据集。$NeurIPS$，33：22118–22133，2020年。[35]GM Jacquez、JR Meliker、RR Rommel 和 PE Goovaerts。利用时空信息技术进行暴露重建。环境健康百科全书，第793–804页，2019年。

[36] Weiwei Jiang 和 Jiayun Luo。用于交通预测的图神经网络：综述。*ExpertSystems with Applications*，207：117921，2022年。[37]S.M. Kazemi、R. Goel、K. Jain、I. Kobyzev、A. Sethi、P. Forsyth 和 P. Poupart。动态图表示学习：综述。*Journal of Machine Learning Research*，2020年。[38]R. Keisler。使用图神经网络预测全球天气。*arXiv* 预印本 *arXiv:2202.07575*，2022年。[39]T.N. Kipf 和 M. Welling。利用图卷积网络进行半监督分类。发表于*ICLR 2016*。[40]T.N. Kipf 和 M. Welling。变分图自编码器。*arXiv* 预印本 *arXiv:1611.07308*，2016年。[41] Andreas Koher、Hartmut HK Lentz、James P Gleeson 和 Philipp H¨ovel。用于时序网络疫情传播的基于接触的模型。*Physical Review X*，9(3)：031017，2019年。[42]Srijan Kumar、Xikun Zhang 和 Jure Leskovec。从时序交互中学习动态嵌入。*arXiv* 预印本 *arXiv:1812.02289*，2018年。[43]PAW Lewis。多元点过程。发表于伯克利数学统计与概率研讨会论文集，第1卷，第401页。加利福尼亚大学出版社，1972年。[44] Z. Liu、D. Zhou、Y. Zhu、J. Gu 和 J. He。通过时间强化随机游走实现细粒度时序网络表示。发表于*AAAI*，第34卷，第4973–4980页，2020年。[45] Karmela Ljubiˇci´c、Andro Mer´cep 和 Zvonko Kostanjˇcar。复杂客户网络分析：一个真实世界的银行业案例。发表于*2022*年第*45*届信息、通信与电子技术国际纪念大会（*MIPRO*），第321–326页。IEEE，2022年。

[46] A. Longa、S. Azzolin、G. Santin、G. Cencetti、P. Li`o、B. Lepri 和 A. Passerini。解释图神经网络中的解释器：一项比较研究。*arXiv* 预印本 *arXiv:2210.15304*，2022年。[47]A. Longa、G. Cencetti、S. Lehmann、A. Passerini 和 B. Lepri。邻域匹配可生成逼真的替代时序网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:2205.08820*，2022年。[48]A. Longa、G. Cencetti、B. Lepri 和 A. Passerini。一种挖掘自我中心时序模体的高效方法。*Data Miningand Knowledge Discovery*，2022年。[49] D. Luo、W. Cheng、D. Xu、W. Yu、B. Zong、H. Chen 和 X. Zhang。图神经网络的参数化解释器。神经信息处理系统进展，33:19620–19631，2020年。[50] Y. Luo 和 P. Li。邻域感知的可扩展时序网络表示学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:2209.01084*，2022年。[51] Y. Ma、Z. Guo、Z. Ren、J. Tang 和 D. Yin。流式图神经网络。发表于*ACM SIGIR*，2020年。[52] G. Mauro、M. Luca、A. Longa、B. Lepri 和 L. Pappalardo。利用生成对抗网络生成移动网络。*EPJData Science*，11(1):58，2022年。[53] I.W. McBrearty 和 G.C. Beroza。利用图神经网络进行地震定位和震级估计。发表于*IEEE ICIP*，2022年。[54] Jaymie R Meliker、Geoffrey M Jacquez、Pierre Goovaerts、Glenn Copeland 和 May Yassine。早期乳腺癌的空间聚类分析：一种利用癌症登记数据服务于公共卫生实践的方法。*Cancer Causes &Control*，20:1061–1069，2009年。[55] A. Micheli 和 D. Tortorella。离散时间动态图回声状态网络。*Neurocomputing*，496:85–95，2022年。

[56]Federico Monti、Davide Boscaini、Jonathan Masci、Emanuele Rodola、Jan Svoboda 和 Michael M Bronstein。使用混合模型卷积神经网络对图和流形进行几何深度学习。发表于*IEEE*计算机视觉与模式识别会议论文集，第5115–5124页，2017年。

[57] C. Morris、M. Ritzert、M. Fey、W.L. Hamilton、J.E. Lenssen、G. Rattan 和 M. Grohe。Weisfeiler 和 Leman 走向神经网络：高阶图神经网络。载于 *AAAI*，2019年。

[58]Audun Myers、David Mu˜noz、Firas A Khasawneh 和 Elizabeth Munch。利用之字形持久性进行时间网络分析。*EPJData Science*，12(1):6，2023年。

[59]F. L. Opolka、A. Solomon、C. Cangea、P. Veli˘ckovi´c、P. Li`o 和 R.D. Hjelm。时空深度图互信息最大化。*arXiv*预印本 *arXiv:1904.06316*，2019年。

[60] Al Ozonoff、Thomas Webster、Veronica Vieira、Janice Weinberg、David Ozonoff 和 Ann Aschengrau。应用于上科德角癌症数据的聚类检测方法。*EnvironmentalHealth*，4:1–9，2005年。

[61]A. Pareja、G. Domeniconi、J. Chen、T. Ma、T. Suzumura、H. Kanezashi、T. Kaler、T. Schardl 和 C. Leiserson。EvolveGCN：面向动态图的演化图卷积网络。发表于*AAAI*，2020年。

[62] T. Pfaff、M. Fortunato、A. Sanchez-Gonzalez 和 P. Battaglia。使用图网络学习基于网格的模拟。发表于 *ICLR*，2021年。

[63] M. Qin 和 D Yeung。时序链接预测：统一框架、分类体系与综述。*arXiv* 预印本 *arXiv:2210.08765*，2022年。

[64] A. Rahimi 和 B. Recht。《大规模核机器的随机特征》。发表于*NeurIPS*，2008年。[65] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G.E. Karniadakis。《物理信息深度学习（第一部分）：非线性偏微分方程的数据驱动解》方程。*arXiv* 预印本 *arXiv:1711.10561*，2017年。

[66] E. Rossi、B. Chamberlain、F. Frasca、D. Eynard、F. Monti 和 M. Bronstein。用于动态图深度学习的时序图网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:2006.10637*，2020年。

[67] Asma Rosyidah、Isti Surjandari 等。利用时空分析探索客户数据：固定宽带服务提供商案例研究。*InternationalJournal ofApplied Science andEngineering*，16(2):133–147，2019年。

[68]B. Rozemberczki、P. Scherer、Y. He、G. Panagopoulos、A. Riedel、M. Astefanoaei、O. Kiss、F. Beres、G. L´opez、N. Collignon 等。PyTorch Geometric Temporal：利用神经机器学习模型进行时空信号处理。载于*ACM CIKM*，2021年。

[69]Xiaolei Ru、Jack Murdoch Moore、Xin-Ya Zhang、Yeting Zeng 和 Gang Yan。通过图神经网络在时序网络中推断零号患者。载于人工智能 *AAAI* 会议论文集，第37卷，第9632–9640页，2023年。

[70]A. Sankar、Y. Wu、L. Gou、W. Zhang 和 H. Yang。DySAT：通过自注意力网络在动态图上进行深度神经表征学习。发表于 *WSDM*，2020年。

[71] Koya Sato、Mizuki Oka、Alain Barrat 和 Ciro Cattuto。DyANE：面向时序网络、感知动态的节点嵌入。*arXiv*预印本 *arXiv:1909.05976*，2019年。

[72]R. Sato。关于图神经网络表达能力的综述。*arXiv*预印本 *arXiv:2003.04078*，2020年。

[73] J. Skarding、B. Gabrys 和 K. Musial。基于动态图神经网络的动态网络基础与建模：综述。*IEEE Access*，9：79143–79168，2021年。

[74] M. K.P. So、A. Tiwari、A. M.Y. Chu、J. T.Y. Tsang 和 J. N.L. Chan。通过网络连通性可视化新冠肺炎疫情风险。国际传染病杂志，96：558–561，2020年7月。

[75]A.H. Souza、D. Mesquita、S. Kaski 和 V. Garg。可证明具有表达能力的时序图网络。*NeurIPS*，2022年。

[76]Aynaz Taheri、Kevin Gimpel 和 Tanya Berger-Wolf。学习使用循环模型表示动态图的演化。载于*2019*年万维网会议附属论文集，第 301–307 页，2019年。

[77] Josephine M Thomas、Alice Moallemy-Oureh、Silvia Beddar-Wiesing 和 Clara Holzh¨uter。针对不同图类型设计的图神经网络：综述。*arXiv* 预印本 *arXiv:2204.03080*，2022年。

[78] J. Topping、F.Di Giovanni、B.P. Chamberlain、X. Dong 和 M. Bronstein。通过曲率理解图上的过度挤压和瓶颈。*arXiv* 预印本 *arXiv:2111.14522*，2021年。

[79]R. Trivedi、M. Farajtabar、P. Biswal 和 H. Zha。Dyrep：在动态图上学习表示。发表于国际学习表征会议，2019年。

[80]Rakshit Trivedi、Hanjun Dai、Yichen Wang 和 Le Song。Know-evolve：针对动态知识图谱的深度时序推理。发表于国际机器学习会议，第 3462–3471 页。PMLR，2017年。

[81]P. Veli˘ckovi´c、G. Cucurull、A. Casanova、A. Romero、P. Li`o 和 Y. Bengio。图注意力网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:1710.10903*，2017年。

[82] M. N. Vu 和 M. T. Thai。论黑盒时序图神经网络解释的局限。*arXiv* 预印本 *arXiv:2212.00952*，2022年。

[83]X. Wang、D. Lyu、M. Li、Y. Xia、Q. Yang、X. Wang、X. Wang、P. Cui、Y. Yang、B. Sun 等。APAN：用于实时动态图嵌入的异步传播注意力网络。发表于 *SIGMOD*，2021年。

[84] Y. Wang、Y. Chang、Y. Liu、J. Leskovec 和 P.Li。通过因果匿名游走，在时序网络中进行归纳式表示学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:2101.05974*，2021年。

[85]David C Wheeler. 俄亥俄州儿童白血病发病率空间聚类和聚类检测技术的比较，1996–2003年。国际健康地理学期刊，6(1):1–16，2007年。[86] J. Willard、X. Jia、S. Xu、M. Steinbach 和 V. Kumar。将科学知识与机器学习相结合，用于工程和环境系统。*ACM* 计算调查，55(4)，2022年。

[87]Felix Wu、Amauri Souza、Tianyi Zhang、Christopher Fifty、Tao Yu 和 Kilian Weinberger。简化图卷积网络。载于国际机器学习会议，第 6861–6871 页。PMLR，2019年。

[88] S. Wu、F. Sun、W. Zhang、X. Xie 和 B. Cui。推荐系统中的图神经网络：综述。*ACM CSUR*，2022年。

[89] FengXia、Ke Sun、Shuo Yu、Abdul Aziz、Liang-tian Wan、Shirui Pan 和 Huan Liu。《图学习：综述》。*IEEE* 人工智能汇刊，2(2):109–127，2021年。

[90] W. Xia、M. Lai、C. Shan、Y. Zhang、X. Dai、X. Li 和 D. Li。通过探索者-导航者框架解释时序图模型。载于第十一届国际学习表征会议。

[91] Y. Xie、C. Li、B.Yu、C. Zhang 和 Z.Tang. 关于动态网络嵌入的综述。*arXiv* 预印本 *arXiv:2006.08093*，2020年。

[92]D. Xu、C. Ruan、E. Korpeoglu、S. Kumar 和 K. Achan. 时序图上的归纳式表示学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:2002.07962*，2020年。

[93]Dongkuan Xu、Wei Cheng、Dongsheng Luo、Xiao Liu 和 Xiang Zhang。用于时序属性图节点分类的时空注意力循环神经网络。发表于 *IJCAI*，第 3947–3953 页，2019年。

[94]Dongkuan Xu、Junjie Liang、Wei Cheng、Hua Wei、Haifeng Chen 和 Xiang Zhang。用于时序网络建模的 Transformer 风格关系推理与动态记忆更新。发表于人工智能 *AAAI* 会议论文集，第 35 卷，第 4546–4554 页，2021年。

[95] K. Xu、W. Hu、J. Leskovec 和 S. Jegelka。图神经网络的能力有多强？*arXiv* 预印本 *arXiv:1810.00826*，2018年。

[96] G. Xue、M. Zhong、J. Li、J. Chen、C. Zhai 和 R. Kong。动态网络嵌入综述。*Neurocomputing*，2022年。

[97] M. Yang、Z. Meng 和 I. King。Featurenorm：用于动态图嵌入的 L2 特征归一化。发表于 *ICDM*，2020年。

[98] M. Yin 和 M. Zhou。半隐式变分推断。发表于 *ICML*，2018年。

[99] Z. Ying、D. Bourgeois、J. You、M. Zitnik 和 J. Leskovec。GNNExplainer：为图神经网络生成解释。发表于 神经信息处理系统进展，第 32 卷，2019年。

[100] J. You、T. Du 和 J. Leskovec。ROLAND：动态图的图学习框架。发表于 *ACM SIGKDD*，2022年。

[101] B. Yu、H. Yin 和 Z. Zhu。时空图卷积网络：一种用于交通预测的深度学习框架。*arXiv* 预印本 *arXiv:1709.04875*，2017年。

[102] M. Zhang 和 Y. Chen。基于图神经网络的链接预测。*NeurIPS*，2018年。[103]Muhan Zhang 和 Yixin Chen。用于链接预测的 Weisfeiler-Lehman 神经机器。载于第*23*届 *ACM SIGKDD* 国际知识发现与数据挖掘会议论文集，第575–583页，2017年。[104] Ziwei Zhang、Peng Cui 和 Wenwu Zhu。图上的深度学习：综述。*IEEE* 知识与数据工程汇刊，34(1):249–270，2020年。[105] Cheng Zheng、Bo Zong、Wei Cheng、Dongjin Song、Jingchao Ni、Wenchao Yu、Haifeng Chen 和 Wei Wang。通过随机稀疏化和时序结构卷积进行时序图节点分类。载于数据库中的机器学习与知识发现：*2020*年欧洲会议（*ECML PKDD 2020*），比利时根特，*2020*年*9*月*14–18*日，论文集，第三部分，第330–346页。施普林格，2021年。[106]H. Zhou、D. Zheng、I. Nisa、V. Ioannidis、X. Song 和 G. Karypis。TGL：用于十亿级图时序图神经网络训练的通用框架。*arXiv* 预印本 *arXiv:2203.14883*，2022年。