

# 基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法综述<sup>\*</sup>

邹慧琪, 史彬泽, 宋凌云, 韩笑琳, 尚学群



(西北工业大学 计算机学院, 陕西 西安 710072)

通信作者: 韩笑琳, E-mail: [xiaolin@nwpu.edu.cn](mailto:xiaolin@nwpu.edu.cn); 尚学群, E-mail: [shang@nwpu.edu.cn](mailto:shang@nwpu.edu.cn)

**摘要:** 随着传感技术的发展, 不同领域产生了大量时空数据。时空图是其中一种主要的时空数据类型, 具有复杂的结构、时空特征和时空关系。如何从复杂的时空图数据中挖掘关键模式, 并应用于不同的下游任务成为复杂时空数据挖掘任务的主要问题。目前, 日渐成熟的时序图神经网络为该研究领域的发展提供了有力的工具。此外, 新兴的时空大模型在现有时空图神经网络方法的基础上提供了新的研究视角。然而, 现有的大多数综述对该领域方法的分类框架较为粗略, 对复杂数据类型(如动态异质图和动态超图)缺乏全面和深入的介绍, 并且没有对时空图大模型相关的最新研究进展进行详细总结。因此, 基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法分成时空融合架构和时空大模型, 旨在从传统和新兴两个角度进行介绍。将时空融合架构根据具体的复杂数据类型划分成动态图、动态异质图和动态超图。将时空大模型根据时间维度和空间维度划分成时间序列和图, 并在基于图的大模型中列举时空图相关的最新研究。详细介绍不同关键算法的核心细节并对比不同方法的优缺点, 列举基于图神经网络的复杂时空数据挖掘的应用领域和常用数据集, 并对未来可能的研究方向进行展望。

**关键词:** 复杂时空数据挖掘; 图神经网络; 时空大模型

**中图法分类号:** TP311

中文引用格式: 邹慧琪, 史彬泽, 宋凌云, 韩笑琳, 尚学群. 基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法综述. 软件学报, 2025, 36(4): 1811–1843. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7275.htm>

英文引用格式: Zou HQ, Shi BZ, Song LY, Han XL, Shang XQ. Survey on Complex Spatio-temporal Data Mining Methods Based on Graph Neural Network. *Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software*, 2025, 36(4): 1811–1843 (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7275.htm>

## Survey on Complex Spatio-temporal Data Mining Methods Based on Graph Neural Network

ZOU Hui-Qi, SHI Bin-Ze, SONG Ling-Yun, HAN Xiao-Lin, SHANG Xue-Qun

(School of Computer Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract:** With the development of sensing technology, lots of spatio-temporal data springs up in different fields. The spatio-temporal graph is a major type of spatio-temporal data with complex structure, spatio-temporal features, and relationships. How to mine key patterns from complex spatio-temporal graph data for various downstream tasks has become the main problem of complex spatio-temporal data mining tasks. Currently, the increasingly mature temporal graph neural networks provide powerful tools for the development of this research field. In addition, the emerging spatio-temporal large models provide a new research perspective based on the existing spatio-temporal graph neural network methods. However, most existing reviews in this field have relatively rough classification frameworks for methods, lack comprehensive and in-depth introduction to complex data types (e.g., dynamic heterogeneous graphs and dynamic hypergraphs), and do not provide a detailed summary of the latest research progress related to spatio-temporal graph large models. Therefore, in this study, the complex spatio-temporal data mining methods based on graph neural networks are divided into spatio-temporal fusion architecture and spatio-temporal large models to introduce them from traditional and emerging perspectives. According to specific complex data types, spatio-temporal fusion architecture is divided into dynamic graphs, dynamic heterogeneous graphs, and dynamic hypergraphs. Moreover, the spatio-temporal large models are divided into time series and graphs according to temporal and spatial

\* 基金项目: 国家重点研发计划(2020AAA0108504); 国家自然科学基金(62302397, 62102321); 中央高校基本科研业务费专项资金(D5000230191, D5000230095); 陕西省创新能力支撑计划(2021TD-06); 先进计算与智能工程(国家级)实验室基金(2023-LYJJ-01-021)  
收稿时间: 2024-05-09; 修改时间: 2024-06-27; 采用时间: 2024-08-15; jos 在线出版时间: 2025-01-08

CNKI 网络首发时间: 2025-01-16

dimensions. The latest research related to spatio-temporal graphs is listed in graph-based large models. The core details of multiple key algorithms are introduced, and the pros and cons of different methods are compared. Finally, the application fields and commonly used datasets of complex spatio-temporal data mining methods based on graph neural networks are listed, and possible future research directions are outlined.

**Key words:** complex spatio-temporal data mining; graph neural network (GNN); spatio-temporal large model

## 1 背景与分类

时空数据挖掘是指对时空数据中时间和空间维度之间的相互作用进行模式识别的方法<sup>[1]</sup>。与传统单一维度的数据挖掘相比,时空数据挖掘需要对两个维度的数据模式进行提取,而时间和空间维度的信息具有相关性和异质性,因此该方法具有更高的复杂性<sup>[2]</sup>。近年来,时空数据挖掘通常应用于交通、气候、犯罪预测等领域,具有广泛的应用前景。然而在面对复杂、动态变化这两种不同特性的时空关系时,传统的时空数据挖掘方法无法较好地拟合非线性关系,同时需要手动进行特征工程,这使得传统方法无法较好地解决数据量较大、计算复杂度较高的复杂时空数据挖掘问题。近年来,图神经网络作为一类深度学习框架在处理图数据展现出了强大的建模和预测能力。然而,时空数据挖掘任务通常面临着收集的跨区域和跨时间的时空图数据具有分布偏差的问题,此外,现有时空图模型缺乏可解释性和可扩展性<sup>[3]</sup>,因此如何应用基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法以应对这些挑战成为研究人员关注的热点。我们将基于这类新技术的时空融合架构根据图的类型<sup>[4]</sup>进行分类,分别是基于动态图、动态异质图和动态超图的时空融合架构。

由于复杂时空数据与简单时空数据在数据结构、数据特征、数据关系以及数据处理方法上存在着显著差异,需要针对它们不同的特点采用相应的处理和挖掘策略。其中,本文将主要聚焦于对复杂时空数据挖掘方法进行介绍。如表1所示,表中展示了简单时空数据和复杂时空数据的对比。

表1 简单时空数据和复杂时空数据对比

比较项	简单时空数据	复杂时空数据
数据结构	结构简单,时间维度大多为一维,空间维度则为二维,多以网格的形式存在	结构复杂,可能具有多维结构且具有异质性,多以时空图的形式存在
数据特征	特征较少且表示的含义较为简单	特征复杂多样,包含大量的时空相关属性且属性间具有关联性
数据关系	时空数据间关系较为简单,通常为线性关系	时空数据间关系较为复杂,可能具有非线性和相关性
数据处理方法	传统的统计方法和机器学习方法	时序图神经网络和其他深度学习方法的结合

当今结合简单的图神经网络的时空数据挖掘方法主要是基于成对、同质的时空图,而不涉及异质性和超边。近年来,图卷积神经网络方法被广泛应用在时空图的空间信息提取上,它可以与时间序列预测方法以串联或耦合的方式提取时空信息。例如,Yu等人<sup>[5]</sup>提出的经典时空融合架构STGCN首次将谱域图卷积神经网络(谱域GCN)<sup>[6]</sup>和Gated TCN<sup>[7]</sup>模块串联提取时空信息;Qian等人<sup>[8]</sup>提出的DeepSTUQ则通过将GRU<sup>[9]</sup>中的线性单元替换成图卷积算子,并结合节点自适应参数学习(NAPL)模块<sup>[10]</sup>,以耦合的方式学习时空关系。除了基于图卷积神经网络的方法,还有应用注意力机制的时空融合架构,这类方法能够更好地考虑到其他因素对不同节点的重要性,增强节点的表达能力。例如Lu等人<sup>[11]</sup>提出的ST-GFSL结合了元学习的方法,引入了图注意网络(GAT)<sup>[12]</sup>和可调节的参数来学习时空融合信息。为了更好地融合图卷积网络和注意力机制的优点,Guo等人<sup>[13]</sup>提出的ASTGCN在时间和空间维度分别应用了注意力机制,与图卷积神经网络耦合,接着和时间卷积串联,从而实现时空融合。

除了针对简单时空图的时空图神经网络方法,近年来还涌现了不少针对复杂图的复杂时空融合架构,而现有综述对基于动态异质图的时空融合架构的介绍较为简单粗略,且缺乏对基于动态超图的时空融合架构的介绍。因此,本文针对不同类型的复杂图,将时空融合架构划分成基于动态图、动态异质图和动态超图这3大类。

### (1) 基于动态图的时空融合架构

根据时间粒度的粗细,基于离散时间动态图的时空融合方法中时间被划分成多个快照,每个快照对应一个静

态图, 在快照间捕获节点信息变化, 而在基于连续时间动态图的时空融合方法中会在快照内部捕获发生交互时节点的变化。在这类基于动态图的时空融合架构中涉及的图结构通过较为简单, 不涉及异质性和超边。根据对这种简单的动态图空间依赖关系提取方法的不同, 可将离散时间动态图分为基于卷积图神经网络、基于注意力机制、基于卷积图神经网络和注意力机制结合的方法, 而在基于连续时间动态图的时空融合方法中因为在发生交互时更新节点信息, 因此需要通过定义一些随着时间变化而更新节点表示的方法来融合时空信息。

### (2) 基于动态异质图的时空融合架构

在真实世界中, 时空网络中的节点和边可能有多种类型, 所形成的图结构也是异质的, 因此对这些不同类型的节点和边进行信息融合时, 需要考虑到处理方式的多样性。根据节点特征聚合时的信息传递方式, 可以将基于动态异质图的时空融合架构细分为两大类别: 一是基于关系类型感知的时空融合架构, 二是基于元路径的时空融合架构, 这种划分方式使得时空架构的设计更加灵活和多样化。基于关系类型感知的时空融合架构侧重对动态异质图中不同关系类型的邻居信息的聚合, 而基于元路径的时空融合架构通过引入元路径的概念能够对更高阶的空间关系进行充分的提取。

### (3) 基于动态超图的时空融合架构

在传统的简单图结构中, 每条边连接两个节点, 而超图中的超边可以连接多个节点, 形成更为灵活的关系模式。当前, 涌现了大量基于超图的研究, 其中包括在生物网络中的多元关系和在社交网络中的群体互动等方面。随着研究的深入, 在时空数据挖掘的应用领域, 也引入了一些基于动态超图的时空融合架构。由于现有大量基于超图的时空融合架构直接在处理超图时维持其原有的结构, 因此在这类时空融合架构中主要介绍非展开型方法。

由于大模型作为深度学习领域的一项新兴技术, 被广泛应用于自然语言处理、计算机视觉和多模态融合等领域。而在探索时空信息融合的挖掘领域, 大模型呈现出令人瞩目的潜力和广泛的应用前景。面向两种不同类型的提取时空信息的相关数据, 即时间序列和图, 其中图包括普通图和时空图, 我们介绍了时空大模型的相关内容, 并总结了相关领域的最新成果。

如图1展示了本文对于复杂时空数据挖掘预测方法的分类框架。在后续章节中, 我们将基于这个分类框架对不同部分进行详细的介绍。

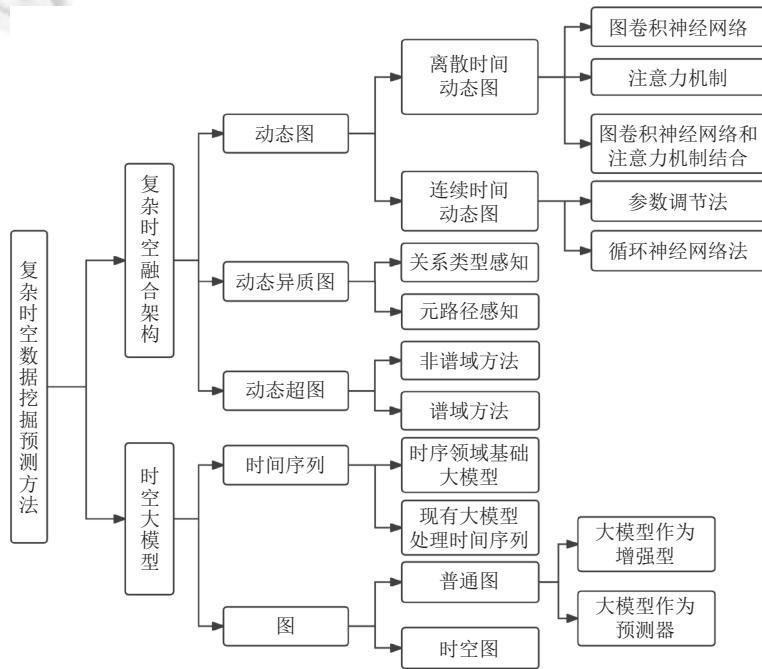


图1 复杂时空数据挖掘预测方法分类

## 2 相关综述工作

近年来,随着应用场景日益丰富,时空数据挖掘逐渐成为热点研究领域。为了方便后来的研究者快速了解该领域的最新进展,不少基于时空数据挖掘的相关综述被发表出来。其中,Liu 等人<sup>[14]</sup>从基于输出的融合、基于输入的融合和基于输入输出双阶段的融合这 3 个方面阐述了基于深度学习的城市大数据融合方法。Jiang 等人<sup>[15]</sup>总结了图神经网络用于交通预测的方法和数据集。Jin 等人<sup>[3]</sup>对城市计算中的时空图神经网络进行了介绍和总结,在这篇综述中对时空图神经网络中常用的基本深度学习架构和复杂的结合了流行先进技术的时空融合架构也进行了介绍,并对该领域未来的研究方向提出了展望。Jin 等人<sup>[16]</sup>则对时间序列和时空数据方面的大模型进行了相关介绍。

尽管现在已经有许多关于时空数据挖掘领域的综述,但它们仍存在以下缺陷:(1)现有综述对于时空数据挖掘领域的方法缺乏更细致的分类框架,如 Liu 等人<sup>[14]</sup>仅从基于深度学习输入、输出和输入输出双阶段的角度简要介绍了时空数据融合的方式,而没有从动态图、动态异质图、动态超图角度对时空图中基于图神经网络的融合方法进行更细致的分类介绍。(2)由于在时空数据挖掘领域的方法日新月异,新技术被广泛探索。然而,当前综述没有对基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法进行更全面和深入的归纳总结。例如 Jin 等人<sup>[3]</sup>的综述仅对城市交通领域中的时空数据挖掘方法进行了介绍,简要介绍了基于简单动态图的时空数据挖掘技术,缺乏了对于其他应用领域和更新的复杂类型的图(如动态超图)的潜在方法介绍,且对基于动态异质图的相关复杂数据挖掘方法介绍较为粗略。(3)现有综述缺乏对与时空图大模型相关的大模型的详细总结。例如 Jin 等人<sup>[16]</sup>的综述虽然总结了时空数据相关的大模型,而没有更聚焦到与时空图这种数据类型有关的时间和空间维度的大模型,即基于时间序列和图的大模型进行详尽的介绍。

综上所述,目前对于时空数据挖掘领域缺乏基于图神经网络更细致和全面的分类和总结工作。为此,本文针对时空图和不同的应用领域,同时结合了最新的技术方法提出了更系统性的分类框架并进行了总结。本文第 3 节给出了文中涉及的几种数据类型和时空数据挖掘任务的相关定义。第 4 节分别从动态图、动态异质图、动态超图对时空融合架构进行详细阐述以及分类比较。第 5 节介绍基于 2 种时空数据类型,即时间序列和图的时空大模型方法。第 6 节介绍时空数据挖掘领域的相关应用。第 7 节给出时空数据挖掘方法比较常用的数据集。第 8 节对时空数据挖掘领域未来的研究方向进行展望和总结。

## 3 概念与定义

在本节中,我们将对本文涉及的几类数据类型和时空数据挖掘任务进行定义。

**定义 1.** 动态图。动态图是一类节点属性和节点间连接关系可能会随时间发生改变的图,可以被定义为  $\mathcal{G}^{(t)} = \{\mathcal{V}^{(t)}, \mathcal{E}^{(t)}, X^{(t)}\}$ , 其中  $\mathcal{G}^{(t)}$  代表动态图,  $\mathcal{V}^{(t)}$  代表动态图上的节点集,  $\mathcal{E}^{(t)}$  代表动态图上的边集,  $X^{(t)}$  代表节点的属性。

**定义 2.** 动态异质图。动态异质图是一类具有不同类型的边和节点,且节点属性和边可能会随时间发生变化的图,可以被定义为  $\mathcal{G}^{(t)} = \{\mathcal{V}^{(t)}, \mathcal{E}^{(t)}, X^{(t)}, \mathcal{B}_{(v)}, \mathcal{B}_{(e)}\}$ , 其中  $\mathcal{G}^{(t)}$  代表动态异质图,  $\mathcal{V}^{(t)}$  代表动态异质图上的节点集,  $\mathcal{E}^{(t)}$  代表动态异质图上的边集,  $X^{(t)}$  代表节点的属性,  $\mathcal{B}_{(v)}$  代表节点的种类集合,  $\mathcal{B}_{(e)}$  代表边的种类集合,且二者满足  $|\mathcal{B}_{(v)}| + |\mathcal{B}_{(e)}| > 2$ 。元路径  $P$  代表动态异质图上任意两个节点之间的路径,记为  $v_1 \xrightarrow{R_1} v_2 \xrightarrow{R_2} \dots \xrightarrow{R_k} v_{k+1}$ ,  $\{v_1, v_2, \dots, v_{k+1}\}$  是动态异质图上的节点,它们的属性可能会随着时间发生改变,  $R_i$  是节点之间的关系。

**定义 3.** 动态超图。动态超图中一条边可能连接多个节点,同时连接关系和节点属性具有动态性,可以定义它为  $\mathcal{G}^{(t)} = \{\mathcal{V}^{(t)}, \mathcal{E}^{(t)}\}$ , 其中  $\mathcal{G}^{(t)}$  代表动态超图,  $\mathcal{V}^{(t)}$  代表动态超图上的节点集。定义一个关联矩阵  $H$ ,该矩阵可以表示超图的结构。对于节点  $v \in \mathcal{V}^{(t)}$  和边  $e \in \mathcal{E}^{(t)}$ ,  $H$  可表示如下:

$$H(v, e) = \begin{cases} 1, & v \in e \\ 0, & v \notin e \end{cases}.$$

如果超边具有权重,关联矩阵可以定义为:

$$H(v, e) = \begin{cases} w(v, e), & v \in e \\ 0, & v \notin e \end{cases},$$

其中,  $w(v, e)$  代表超边的权值.

**定义 4.** 时间序列. 时间序列是一组根据时间顺序排列的数据点, 时间轴长度为  $T$  的时间序列可以表示为:  $x = \{x_1, x_2, \dots, x_T\}$ , 其中  $x_t$  是时间为  $t$  时的数据点.

**定义 5.** 时空数据挖掘. 时空数据挖掘是从具有时间和空间信息的时空数据中发现能满足具体需求的有用模式和知识的任务. 其中复杂时空数据的主要表现形式为时空图  $\mathcal{G}^t$ , 通常包括动态图、动态异质图和动态超图等类型的图, 其服务的下游任务主要包括时空预测、时空异常检测和时空模式发现等.

## 4 复杂时空融合架构

复杂时空融合架构是本文探讨的主要部分, 因为它描述了如何将时间信息和空间信息进行集成. 基于不同类型的图, 复杂时空融合架构可以分为基于动态图, 基于动态异质图和基于动态超图的方法. 本节研究重点集中在如何将时间信息与空间信息集成到复杂时空融合架构中, 并对现有的主流方法进行阐述与比较.

### 4.1 基于动态图的时空融合架构

图神经网络 (GNN) 是学习非欧几里得空间中空间依赖关系的有效工具. 作为复杂图 (如异质图、超图等) 基础的简单图拥有静态、同质等特征, 然而, 在时空预测问题中, 图具有时序性, 传统的基于简单图的方法不适用于真实的复杂场景. 因此, 在介绍其他基于动态异质图和动态超图的时空融合架构前, 在本节中, 我们将着重阐述基于动态图的时空融合架构. 根据时间粒度的粗细, 基于动态图的时空融合架构可分为基于离散时间动态图和基于连续时间动态图. 根据基于空间的主流学习方法, 我们将基于离散时间动态图的时空融合架构主要分为 3 大类: 基于图卷积神经网络、基于自注意力机制和基于图卷积神经网络和自注意力机制结合.

#### 4.1.1 基于离散时间动态图的时空融合架构

在离散时间动态图中, 按照时间轴可将不断变化的动态图划分为多个快照, 其中每个快照可视作一个静态图, 这类方法在每个快照上单独应用图神经网络, 然后聚合不同时间的节点表示<sup>[17]</sup>. 因此, 在本节中, 我们根据基于空间的主流学习方法先对基于离散时间动态图的时空融合架构进行介绍.

##### (1) 基于图卷积神经网络的时空融合架构

近年来, 基于图卷积神经网络的时空融合架构在时空融合架构中应用广泛. 由于循环神经网络在进行不同层之间的迭代时误差逐级积累, 且计算复杂, Yu 等人<sup>[5]</sup>提出的经典时空融合架构 STGCN 使用了卷积神经网络, 首次提出用谱域 GCN<sup>[6]</sup> 和 Gated TCN<sup>[7]</sup> 模块分别对空间依赖和时间依赖进行特征提取, 该模型可以提取中长期的时间依赖, 被应用于交通预测领域, 具有较强的可扩展性. 图 2 展示了 STGCN 的整体网络结构.

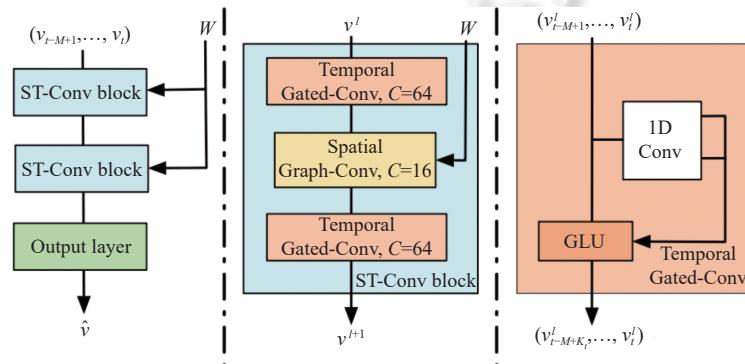


图 2 STGCN 的整体网络架构<sup>[5]</sup>

在 ST-Conv block 中, 作为时间学习模块的两个 TCN 模块和作为空间学习模块的一个 GCN 模块像“三明治”结构串联堆叠, 其中 TCN 模块的通道数是 64, GCN 模块的通道数是 16. 然而, STGCN 仅捕获了空间静态相关性, 而忽视了节点和边的特征可能会因为周期相关性而发生动态变化, 因此在性能上仍有提升的空间.

由于以往的方法中在空间层面上定义了固定的邻接矩阵来表示静态图, 而这对实际场景中真实的空间依赖关系建模不足, 此外, 时间层面中使用循环神经网络处理长期依赖具有固有限制. 基于此, Wu 等人<sup>[18]</sup>提出的 Graph WaveNet 分别使用了融合自适应邻接矩阵的空域 GCN<sup>[19]</sup>和基于门控机制的扩张因果卷积<sup>[20]</sup>, 并将这两个模块串行连接进行时空集成来解决以上两个主要问题.

Graph WaveNet 的模型结构如图 3. Graph WaveNet 中的 TCN 组件采用了门控机制, 其中包括两个 TCN 块, 它们共享相同的结构, 而参数不同, 此外, 它们的输出使用的激活函数不同. 在该 TCN 组件中, TCN-b 充当门的角色, 可以决定上一层输出信息有多少可以被传递到下一层中. 在 TCN 模块提取到时间依赖特征之后, 输出直接传到 GCN 层中提取空间依赖特征.

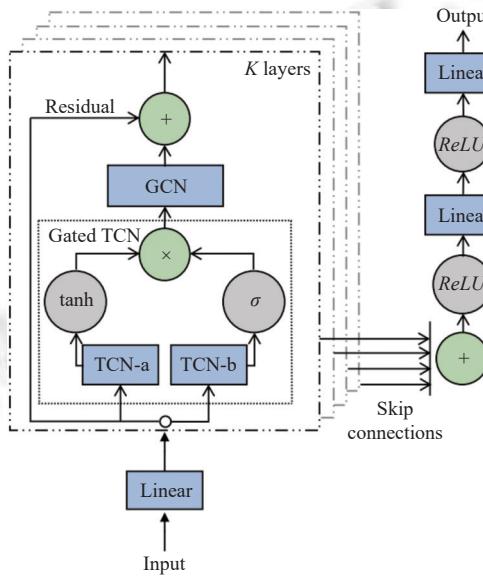


图 3 Graph WaveNet 的整体网络架构<sup>[18]</sup>

在时间层面, 基于门控机制的 TCN 组件可用数学公式表示为:

$$h = g(\Theta_1 * \mathcal{X} + b) \odot \sigma(\Theta_2 * \mathcal{X} + c) \quad (1)$$

其中,  $\Theta_1, \Theta_2$  是待训练的权重参数, 而  $b$  和  $c$  是待训练的偏置参数,  $\odot$  是 Hadamard 积,  $g(\cdot)$  是  $\tanh$  激活函数,  $\sigma(\cdot)$  是  $Sigmoid$  函数,  $*$  表示标准卷积. 由于得到输出的  $h$  会直接输入到后续的 GCN 模块作为空域 GCN 中用于迭代的初始的节点特征  $H$  进行下一步的空间信息提取, 因此 Graph WaveNet 的时空融合架构是因子化的.

然而, Graph WaveNet 同样忽略了交通数据的周期规律性, 如工作日、节假日和每周的交通状况具有某种程度上的周期重复, 因此在相关问题上仍有提升空间.

为了估计交通预测中的认知不确定性和任意不确定性, Qian 等人<sup>[8]</sup>提出的 DeepSTUQ 则通过将空域 GCN<sup>[19]</sup>和自适应图学习模块耦合进 GRU<sup>[9]</sup>中集成空间和时间信息, 并结合了使用蒙特卡罗 dropout 方法 (MCDO)<sup>[21]</sup>的变分推理和基于自适应加权平均 (AWA) 用来近似深度集成的方法量化认知不确定性, 并使用一种后处理模型校准方法的变体, 以提升估计的性能, 有助于提高时空模型的可解释性. 在 DeepSTUQ 中, 将 GRU 中原有的线性单元替换为一个图卷积算子, 并增加了节点自适应参数学习 (NAPL) 模块<sup>[10]</sup>, 可用公式表示为:

$$\hat{A} = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$z_t = S((I + \hat{A})[x_t, h_{t-1}]EW_z + Eb_z) \quad (3)$$

$$r_t = S((I + \hat{A})[x_t, h_{t-1}]EW_r + Eb_r) \quad (4)$$

$$c_t = \tanh((I + \hat{A})[x_t, r_t \odot h_{t-1}]EW_c + Eb_c) \quad (5)$$

$$h_t = z_t \odot h_{t-1} + (1 - z_t) \odot c_t \quad (6)$$

其中,  $z_t$  表示  $t$  时刻的更新门,  $r_t$  代表  $t$  时刻的复位门,  $h_t$  表示  $t$  时刻的隐藏状态,  $[ \cdot ]$  表示连接操作,  $c_t$  表示  $t$  时刻的存储单元,  $W$  和  $b$  分别表示各个门中待训练的权重和偏置,  $E$  是用来表示节点嵌入的可学习的矩阵, 用于自适应学习,  $A$  是邻接矩阵,  $D$  是度矩阵,  $S$  是激活函数. 与其他时空融合模型类似, DeepSTUQ 可用于交通预测, 并可以被集成于其他更复杂的时空融合架构中. 然而, DeepSTUQ 在建模时没有考虑到不同尺度交通数据的时空特征, 这制约了它对于时空信息的深度挖掘能力.

值得注意的是, 虽然近年来基于图卷积神经网络的时空融合架构中集成时间特征和空间特征的方法有所不同, 但是现有主流方法中有不少研究是基于 GCN 变体和时间序列预测方法通过模块堆叠或耦合的方式进行融合.

## (2) 基于注意力机制的时空融合架构

虽然基于图卷积神经网络的时空融合架构在不同的时空预测任务上取得了较好的效果, 但它仍存在两个主要的缺陷: 1) GCN 在建模图时对于图的处理是静态的, 没有考虑到图结构的变化, 这使得基于固定图结构训练得到的模型在其他图结构上泛化能力不高. 虽然有些方法通过采用自适应学习等方法, 在一定程度上解决了这个问题, 但是将提取空间层面和时间层面信息的组件融合后, 模型的运算成本也随之升高. 2) GCN 各个邻居节点的权重只和度有关, 而没有考虑到其他因素对节点重要性的影响, 这导致了该类模型对节点的表达能力不足, 影响了后续对时空特征的挖掘性能. 因此, 除了图卷积神经网络, 另一种应用广泛的时空融合架构采用了注意力机制提取空间层面信息, 其中, 图注意网络 (GAT)<sup>[12]</sup> 是一种较为主流的选择.

随着时间和平行组件结构变得复杂或单元组件数量的增加, 基于模块堆叠或耦合的方法需要训练的参数量不断累积. 与堆叠或耦合方法不同, Lu 等人<sup>[11]</sup>提出的 ST-GFSL 结合元学习的方法, 在时间域上采用 GRU<sup>[9]</sup>的方法, 在空间域上采用 GAT<sup>[12]</sup>的方法, 并以数据驱动的方式对时间元知识学习件和空间元知识学习件进行加权和, 最终得到时空融合后的元知识学习件. 该方法中时间组件和空间组件中的参数是独立的, 可以在很大程度上减少需要训练的参数量, 并通过元学习的方法在一定程度上解决了跨城市数据分布偏差的问题, 在进行跨城市时空数据的特征迁移学习时表现更佳. ST-GFSL 中使用的时空融合过程可通过公式 (7) 进行表示:

$$Z^{MK} = W^\gamma (Z^p \odot Z^p + (1 - \gamma) \odot Z^p) \quad (7)$$

其中,  $\odot$  表示 Hadamard 积,  $Z^{MK}$  表示了时空元知识学习件,  $Z^p$  和  $Z^p$  分别表示时间元知识学习件和空间元知识学习件,  $Z^p = (z_1^p, z_2^p, \dots, z_N^p)$ , 节点级时间元知识  $z_i^p$  是 GRU 隐藏状态的最后一个输出;  $Z^p = (z_1^p, z_2^p, \dots, z_N^p)$ , 节点级空间元知识  $z_i^p$  通过独立执行  $K$  次注意力机制并取平均获得.

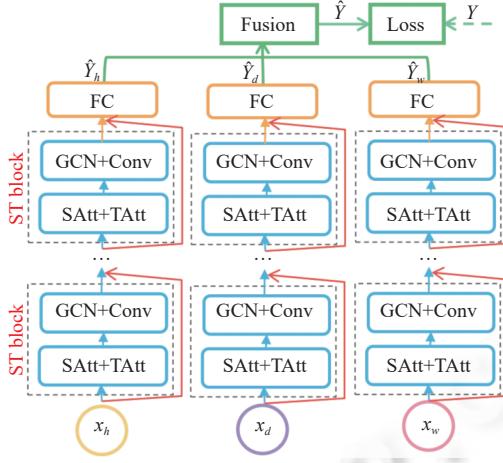
然而, 在进行不同城市的知识迁移时图可能会产生结构偏差, ST-GFSL 在可解释性等方面仍有提升的空间.

总的来说, 虽然注意力机制在处理动态图时具有很多优点, 但它也存在一些潜在的缺点和限制, 比如计算复杂和随机性较高. 在运用注意力机制时, 大多数方法中都需要计算每个节点与其他节点之间的注意力权重, 这增加了计算开销, 限制了注意力机制在大规模图上的应用. 此外, 用于训练的注意力权重是随机初始化的, 经过不同的训练运行, 模型的性能可能会有所不同, 为获得可靠的结果, 需要进行多次训练和验证.

## (3) 基于图卷积神经网络和注意力机制结合的时空融合架构

除了基于图卷积神经网络的时空融合架构和基于注意力机制的时空融合架构, 还有一类时空融合架构结合了图卷积神经网络和注意力机制, 它们兼具了图卷积神经网络计算简便、鲁棒性高和注意力机制能够更好地学习节点的不同特征的特点.

为更好地建模交通流动态时空关系, Guo 等人<sup>[13]</sup>提出一种带注意力机制的图卷积神经网络 ASTGCN, 它通过耦合和串联的方式实现时空融合. ASTGCN 的模型架构如图 4, 它的核心模块为注意力模块和卷积模块,  $X_h$ ,  $X_d$  和  $X_w$  分别表示与预测周期直接相邻的时间段, 日周期, 周周期后节点特征的原始输入切片.

图 4 ASTGCN 的整体网络架构<sup>[13]</sup>

以与预测周期直接相邻的时间段为例, 原始输入  $X_h$  需要分别采用空间注意力机制和时间注意力机制进行节点信息动态捕获。在空间域上, 空间注意力机制可表示为:

$$S = V_s \cdot \sigma((X_h^{(r-1)} W_1) W_2 (W_3 X_h^{(r-1)})^T + b_s) \quad (8)$$

$$S'_{i,j} = \frac{\exp(S_{i,j})}{\sum_{j=1}^N \exp(S_{i,j})} \quad (9)$$

其中,  $X_h^{(r-1)} = (X_1, X_2, \dots, X_{T_{r-1}})$  是第  $r$  个时空块的输入,  $V_s$ ,  $b_s$ ,  $W_1$ ,  $W_2$  和  $W_3$  都是待训练的参数。因为  $S$  中的元素  $S_{i,j}$  可表示节点  $i$  和节点  $j$  之间的相关性, 最终计算得到的动态计算注意力矩阵  $S$  经过归一化后的  $S'$  用于谱域 GCN<sup>[6]</sup> 中可以动态调整图中节点间的关联度。因此, 图卷积的公式最终可表示为:

$$g_{\theta*G}x = g_{\theta}(L)x = \sum_{k=0}^{K-1} \theta_k (T_k(\tilde{L}) \odot S')x \quad (10)$$

其中,  $\odot$  是 Hadamard 积,  $*$  表示标准卷积,  $x$  代表节点属性,  $\theta_k$  表示 ChebNet 方法的系数向量,  $\tilde{L}$  表示归一化的图拉普拉斯矩阵,  $T_k(\tilde{L})$  是  $k$  阶 ChebNet 多项式的递推结果。

在时间域上, ASTGCN 采用了与空间注意力机制类似的时间注意力机制, 获得时间关联矩阵  $E$ ,  $E$  中的元素  $E_{i,j}$  可表示时间  $i$  和时间  $j$  之间的相关性。 $E$  经过归一化后得到  $E'$  作用于原始输入得到  $\hat{X}_h^{(r-1)} = (\hat{X}_1, \hat{X}_2, \dots, \hat{X}_{T_{r-1}}) = (X_1, X_2, \dots, X_{T_{r-1}})E'$ 。

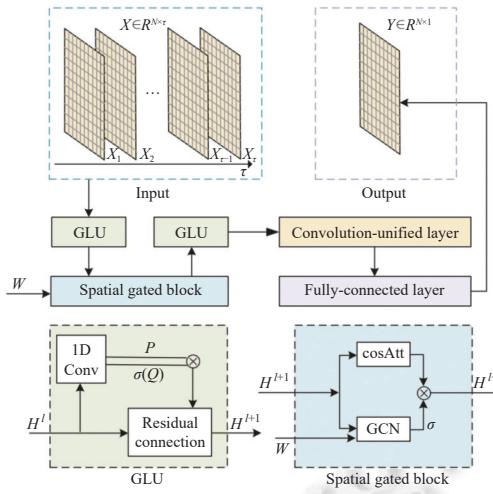
在时空融合部分, ASTGCN 先通过耦合再通过串联方式实现时间关系和空间关系的捕获。具体来说, 在空间域的图卷积部分, 公式(10)中的输入  $X$  被替换成经过时间注意力机制处理得到的  $\hat{X}_h^{(r-1)}$ , 实现时间特征和空间特征的耦合。通过在空间域上的图卷积操作捕获图上每个节点的相邻信息后, 再通过时间卷积模块实现时空特征的串联融合, 该过程可用如下数学公式表示:

$$X_h^{(r)} = \text{ReLU}(\Phi * (\text{ReLU}(g_{\theta*G}\hat{X}_h^{(r-1)}))) \quad (11)$$

其中,  $*$  表示标准卷积,  $\Phi$  表示时间维度的卷积核参数,  $g_{\theta*G}\hat{X}_h^{(r-1)}$  是第  $r-1$  层空间域上的图卷积操作的输出。

由于以往的研究方法 DCRNN<sup>[22]</sup> 和 ASTGCN<sup>[13]</sup> 在单个时间点同时预测多个未来时间步的值, 而不是逐步预测未来时间步的值, 这使得它们很难同时满足长期任务和短期任务的需求<sup>[23]</sup>。基于此, LSGCN<sup>[23]</sup> 设计了一种新的图注意网络 cosAtt, 它和谱域图卷积网络 (GCN)<sup>[6]</sup> 组合成空间门控块以提取空间信息, 该模块与时间维度的门控线性单元卷积 (GLU)<sup>[7]</sup> 串联以捕获复杂的时空特征。LSGCN 的网络结构如图 5 所示, 在 LSGCN 中, 两个 GLU 模块和一个空间门控块堆叠成“三明治”结构, 即空间模块和时间模块是通过串联的方式来捕获时空信息的。

在时间维度, GLU 由一维卷积层和残差连接模块组成, 可捕捉时间动态性。一维卷积层的输出是  $P$  和  $Q$ ,  $P$  和  $Q$  分别表示前半段和后半段卷积输出,  $Q$  与 Sigmoid 函数结合可作为门, 再用 Hadamard 积将两部分相乘。

图 5 LSGCN 的网络架构<sup>[23]</sup>

在空间维度, 空间门控块中的 GCN 和 cosAtt 模块分别用于捕获短期任务中的邻近道路条件和长期任务中的路况相似性。在 LSGCN 中的空间门控块中, GCN 的输出结果与 Sigmoid 函数结合作为一个门, 它与 cosAtt 模块的输出通过 Hadamard 积操作可以得到最终的输出  $H^{l+2}$ , 用来控制流入下一层的比例。具体来说, 在第 1 部分中, GCN 的输入包括了第 1 个 GLU 生成的输出  $H^{l+1}$  和邻接矩阵  $W$ 。而另一部分 cosAtt 模块的输入仅包括  $H^{l+1}$ 。其中, 与传统的图注意网络 GAT<sup>[12]</sup>中的公式相比, LSGCN 中的图注意力网络 cosAtt 生成的表示节点  $j$  对于节点  $i$  的重要性的  $e_{ij}$  值相对稳定。

因此, LSGCN 是通过先进行时间信息学习, 即输入通过第 1 个 GLU, 再进行空间信息学习, 即第 1 个 GLU 的输出通过空间门控块, 接着空间门控块的结果输入到第 2 个 GLU 进行第 2 次时间信息的提取, 最后通过卷积统一层实现时间维度的降维, 完成时空信息的融合。然而, 由于在 LSGCN 中, 图的结构是预定义的, 不一定能反映真实的空间依赖关系, 因此 LSGCN 在其他图上的泛化能力不足。

总的来说, 虽然在建模离散时间的动态简单图时, 相关的时间和空间方法可能综合了各种简单的神经网络方法(如 GCN、GAT 和循环神经网络方法等)及其变体, 但是由于离散时间的动态图本身的限制, 无法提取到每个时刻的信息, 可能会造成信息的丢失, 同时不同时间间隔的选择也可能会影响最终模型的性能。

#### 4.1.2 基于连续时间动态图的时空融合架构

相比离散时间动态图, 连续时间动态图在时间上连续, 它捕获快照内部的交互, 而不是快照间的交互, 并在交互发生后更新节点状态, 在时空数据挖掘领域成为新兴的一个热点方法, 常见于解决交通领域的出发地-目的地(OD)需求预测问题。因此, 根据节点内存更新方式的不同, 我们将在本节中介绍两种在 OD 需求预测中应用的基于连续时间动态图的时空融合架构, 它们也可被推广到其他时空数据挖掘问题上。

##### (1) 参数调节法

由于 OD 需求发生的时间是一个连续特征, 以往的基于固定的时间窗口进行处理从而用于预测的方法效果欠佳, 针对这个问题, Han 等人<sup>[24]</sup>提出的 CMOD 在事件发生时连续更新连续时间节点表示, 在更细粒度的时间尺度上学习站点的演化动态, 并建立多级结构, 将节点级信息投射到集群级和区域级, 最后融合节点级、集群级和区域级的节点信息, 从而实现多级空间信息建模。通过这种方式融合时空信息, 可达到更高的预测精度。其中, 节点级信息反映直观的最低一级的节点表示, 而集群级是基于地理距离和功能相似性得到的更高一级的空间依赖关系计算得到的节点信息, 区域级则表示基于需要提取时空信息的区域的全局空间依赖关系得到的节点信息, 集群级和区域级中的空间依赖关系信息都是通过建立映射机制和更新权重的方式自动挖掘得到。

首先, CMOD 建立了基于参数调节的节点级的内存更新机制, 该过程可用以下公式表示:

$$s_k = \|(r_j^{t^-}, F_j)\) (12)$$

$$p_i^t = \sum_{(v_i, v_j, t_k) \in E^t - E^{t^-}} \exp(-\lambda(t - t_k)) s_k (13)$$

$$q_i^t = \sum_{(v_i, v_j, t_k) \in E^t - E^{t^-}} \exp(-\lambda(t - t_k)) (14)$$

$$a_i^t = \exp(-\lambda(t - t^-)) a_i^{t^-} + MLP(p_i^t) (15)$$

$$b_i^t = \exp(-\lambda(t - t^-)) b_i^{t^-} + q_i^t (16)$$

$$r_i^t = \frac{a_i^t}{b_i^t} (17)$$

其中, 节点  $i$  和节点  $j$  相邻,  $t^-$  是节点上一次更新的时刻,  $r_j^{t^-}$  是节点  $j$  在  $t^-$  时刻的节点表示,  $F_j$  是节点  $j$  的特征向量,  $\|$  表示拼接,  $e_k = (v_i, v_j, t_k)$  表示乘客在时间  $t_k$  从节点  $i$  到节点  $j$  发生的交互.  $\lambda$  是一个控制权重衰减速度的超参数,  $p_i^t$  和  $q_i^t$  是事件表示的信息聚合,  $r_i^t$  是节点  $i$  在  $t$  时刻更新后的节点表示, 由两个累加器  $a_i^t$  和  $b_i^t$  构成,  $a_i^t$  为相邻节点表示的时间加权和,  $b_i^t$  是归一化因子.

接着, 由于在交通预测问题中, CMOD 建立了多级结构, 将节点级节点表示通过投影聚合成虚拟集群级节点表示, 进而将得到的集群级节点表示再通过类似的方法聚合成虚拟区域级节点表示, 从不同空间尺度学习变化的空间依赖关系<sup>[24]</sup>. 其中, 节点级投影到集群级的关系矩阵可用公式 (18) 表示为:

$$A_h^c = (W_h^{c1}(r^{t^-})^T)^T (W_h^{c2}(r^{c,t^-})^T), h = 1, 2, \dots, H (18)$$

其中,  $A_h^c$  是根据注意力机制计算得到的节点和集群之间的关系矩阵,  $r^{t^-}$  是节点级的节点表示,  $r^{c,t^-}$  是集群级节点表示,  $W_h^{c1}$  和  $W_h^{c2}$  是待训练的权重矩阵,  $h$  代表注意力头, 用于在不同的子空间中学习到多方面空间关系. 集群级节点表示投影到区域级节点表示的计算过程与公式 (18) 的原理类似, 得到的结果可以表示某个集群对整个区域状态起到的作用.

然后, 在得到多级关系矩阵后, 需要根据关系矩阵更新多级记忆. 在更新时刻  $t$ , 集群级节点  $i$  的表示可用如下公式进行计算:

$$A_{h,j,i}^{c,m} = \frac{\exp(A_{h,j,i}^c)}{\sum_{j=1}^N \exp(A_{h,j,i}^c)} (19)$$

$$p_i^{c,t} = \|_{h=1}^H \sum_{j=1}^N A_{h,j,i}^{c,m} \left( W_h^{c3} \frac{p_i^t}{q_i^t} \right) (20)$$

其中,  $N$  表示节点个数,  $\|$  表示拼接操作. 区域级使用与集群级信息更新相似的方法完成信息更新.

因此, 在进行完  $t$  时刻集群和区域级的信息计算后, 集群级和区域级节点内存更新与公式 (15) 类似. 其中, 由于集群级和区域级  $t$  时刻的信息计算中包括了归一化, 在集群级和区域级节点更新时可省略公式 (16) 的过程.

最后, 为了融合多级记忆, CMOD 引入了一个跨层次融合模块. 由于前面在信息更新前, CMOD 将节点级节点映射到集群级和区域级, 因此需要将得到的集群级和区域级记忆投影回节点级. 在得到集群级和区域级信息投影对齐到节点级后, 可通过拼接节点级  $r^t$ 、集群级  $r^{c,t}$  和区域级  $r^{g,t}$  记忆完成信息融合. 其中, 将集群级信息投影到节点级的过程可用如下公式进行表示:

$$A_{h,i,j}^{c,e} = \frac{\exp(A_{h,i,j}^c)}{\sum_{j=1}^{N^e} \exp(A_{h,i,j}^c)}, r_i^{c,t'} = \frac{1}{H} \sum_{h=1}^H \sum_{j=1}^{N^c} A_{h,i,j}^{c,e} a_j^{c,t} (21)$$

## (2) 循环神经网络法

除了 CMOD, Xu 等人<sup>[25]</sup>提出了一个由连续时间和离散时间学习组成的模型 CDOD, 它主要利用循环神经网

络来连续更新节点信息, 并结合了图注意力块来集成空间信息。每个 CDOD 单元由 4 个主要部分组成, 分别是连续时间表示学习模块 (CTRL)、离散时间表示学习模块 (DTRL)、Co-Updater 和图注意力模块。在 CDOD 中, 时间信息和空间信息通过串联进行融合, CTRL 和 DTRL 分别负责提取离散和连续时间信息, Co-Updater 负责融合时间信息, 而图注意力模块负责挖掘空间信息。

在 CDOD 中, CTRL 由连续时间消息生成器、连续时间消息聚合器和连续时间内存更新器这 3 个模块构成。首先, 在连续时间信息生成器部分, 可由如下公式表示:

$$\phi(e_m) = e^{(t-t_m)/\tau} * f_{v_m} \quad (22)$$

$$\varphi(e_m) = \|(M_{v_m}, c_m, \phi(e_m))\| \quad (23)$$

其中,  $e_m = (u_m, v_m, t_m, c_m)$  是带时间戳的事件, 表示乘客在  $t_m$  从  $u_m$  出发到  $v_m$ ,  $\phi(e_m)$  代表时间编码过程,  $\varphi(e_m)$  代表边  $e_m$  产生的连续时间信息,  $f_{v_m}$  是目的地节点  $v_m$  的节点特征,  $c_m$  代表边特征,  $t$  是预测开始时间,  $\tau$  是输出时间窗长度,  $M_{v_m}$  是节点  $v_m$  的最新特征,  $*$  表示标准卷积。

接着, 在连续时间消息聚合器部分, 对于输入的 OD 对  $\mathbb{S}_s$  的一个批次  $\mathbb{B}$ , 通过对来自节点内存的部分进行平均聚合和利用对边特征进行时间编码的部分进行求和聚合拼接, 可以表示来自同一节点的消息的聚合过程。该过程表示为:

$$\bar{E}_n = \left\| \left( \sum \varphi(e_{nk})[:, d] / |e_{nk} \in \mathbb{B}|, \sum \phi(e_{nk})[d, :] \right), e_{nk} \in \mathbb{B} \right\| \quad (24)$$

其中,  $\varphi(e_{nk})$  是边  $e_{nk}$  的连续时间信息,  $d$  是节点内存的维数,  $e_{nk}$  是节点  $n$  到  $k$  的边,  $|e_{nk} \in \mathbb{B}|$  是当前批次  $\mathbb{B}$  中起点为  $n$  的边的总数。

最后, 在连续时间内存更新器部分, CDOD 将  $\bar{E}_n$  输入到循环神经网络 GRU<sup>[9]</sup>中来更新节点内存  $M_t$ 。这个步骤利用了 GRU 可以通过组合更新门、重置门和候选值, 从而自动计算新的节点状态的优点。

在 Co-Updater 部分, CDOD 通过可调节的参数将离散时间信息和连续时间信息融合, 以更新时间信息, 之后, CDOD 使用图注意力模块来融合全局空间信息。

首先, 需要生成每个节点的时间编码, 可用公式表示为:

$$\phi_u(t_{\text{pred}}) = \cos(W_T[t_{\text{pred}} - t_u]) \quad (25)$$

其中,  $\cos$  是 cosine 函数,  $W_T$  是待训练的权重矩阵,  $t_{\text{pred}}$  是预测 OD 需求的开始时间,  $t_u$  是节点  $u$  发生最后一次内存更新的时间。

接着, 为了聚合每个节点嵌入及其时间邻居的节点嵌入, CDOD 的  $L$  层图注意力层可用公式表示如下:

$$Z_u^l(t) = h_u^{l-1}(t) \|\phi_u(t) \quad (26)$$

$$Z_N^l(t) = \| \sum_{j=1}^{N_s} [h_j^{l-1}(t) \|\phi_j(t) \| f_j^u(t_j)] \quad (27)$$

其中,  $Z_u^l(t)$  和  $Z_N^l(t)$  是第  $l$  层的输入,  $h_j^{l-1}(t)$  是第  $l-1$  层图注意力层生成的节点  $u$  的节点嵌入,  $h^0(t)$  是由 Co-Updater 更新的节点内存,  $\phi_u(t)$  是节点  $u$  的时间编码,  $d_t$  是时间编码的维度,  $N_s$  是在时间  $t_{\text{pred}}$  前与节点  $u$  有交互的节点数量,  $f_j^u(t_j)$  是节点  $j$  和  $u$  之间对应 OD 对的边特征,  $d_e$  是边特征的维度,  $\|$  是拼接操作。

最后, 由于多头自注意力机制<sup>[26]</sup>可以学习多方面的信息, 因此在图注意力模块中, CDOD 在图上引入了传统的多头自注意力机制, 以学习不同的时间邻居节点对于节点  $u$  的重要性。 $Z_u^l(t)$  可用于生成查询  $Q_t^l$ ,  $Z_N^l(t)$  用于生成键  $K_t^l$  和值  $V_t^l$ 。多头注意力机制可用如下公式表示为:

$$a_i^l = \text{Softmax} \left( \frac{Q_t^l(K_t^l)^T}{\sqrt{d_k}} \right) V_t^l \quad (28)$$

$$\hat{h}_u^l(t) = \| \sum_{m=1}^{N_M} \alpha_j^l(m) V_t^l(m) \| W^O \quad (29)$$

其中,  $\sqrt{d_k}$  是缩放因子,  $W^O$  是待训练的权重矩阵,  $a_i^l$  表示节点  $u$  和时间邻居  $v_i$  之间的注意力权值, 计算过程如公式 (28),  $V_t^l(m)$  是通过  $Z_N^l(t)$  生成的值,  $N_M$  是并行的注意力头的个数,  $\hat{h}(t)$  是生成的每个节点的更新节点嵌入。

总结来说,由于连续时间动态图学习方法涉及的方法通常较为复杂,需要在每个时间步更新节点内存信息,在大规模图上计算复杂度高,限制了它在真实场景上的应用。此外,连续时间动态图学习方法的性能依赖于初始状态和参数的选择,鲁棒性较低,在实际应用时,可能需要通过多次调参,以提升模型的鲁棒性。

基于动态图的时空融合架构总结可见表2。

表2 基于动态图的时空融合架构

方法	类型	算法描述	缺陷	应用
STGCN <sup>[5]</sup>		使用谱域GCN和Gated TCN模块分别对空间依赖和时间依赖进行特征提取,并按照“三明治”结构进行堆叠	没有考虑到空间相关性随时间周期性的动态变化	交通预测
Graph WaveNet <sup>[18]</sup>	基于图卷积神经网络和离散时间	将自适应邻接矩阵的空间GCN和基于门控机制的扩张因果卷积串联	忽略了交通数据的周期规律性	
PM <sub>2.5</sub> -GNN <sup>[27]</sup>	基于注意力机制和离散时间	将空域GCN和GRU串联分别提取空间和时间信息	可能会提取到监测点PM <sub>2.5</sub> 数据之间冗余的空间依赖性	空气质量预测
HAGEN <sup>[28]</sup>		在GRU中耦合带同态感知约束的自适应图扩散卷积	只适用于同质性较强的网络而导致模型通用性不足	犯罪预测
DeepSTUQ <sup>[8]</sup>		将空间GCN和自适应图学习模块耦合进GRU中集成空间和时间信息	没有考虑到不同尺度交通数据的时空特征	交通预测
GMAN <sup>[29]</sup>	基于注意力机制和离散时间	通过门控机制自适应地将空间注意力机制和时间注意力机制融合组成编码器和解码器中的时空模块	只关注到长期预测而忽略了短期预测的影响	交通速度预测
ST-GFSL <sup>[11]</sup>		通过可学比率将图注意网络和GRU学习到的空间和时间元知识进行加权求和	在进行不同城市的知识迁移时图可能会产生结构偏差	交通流预测
ASTGCN <sup>[13]</sup>		时空注意力模块通过耦合的方式与时空卷积层结合	很难兼顾时间维度的长期和短期任务	
LSGCN <sup>[23]</sup>	基于图卷积神经网络和注意力机制结合和离散时间	将图注意网络cosAtt和GCN组成的空间门控块和门控线性单元卷积的时间块串联	图的拓扑结构是预定义的,不一定能反映真实的空间依赖关系	交通流预测
CausalGNN <sup>[30]</sup>		并行嵌入了流行病学背景的因果模块和时间编码模块再与基于注意力的动态GCN模块串联	学习模型的可解释性可能不足	传染病预测
STEP <sup>[31]</sup>		通过串联将用注意力机制和GCN组成的空间模块和GRU构成的时间模块结合成时空融合模块	没有考虑到不同尺度的空间特征的影响	疫情预测
CMOD <sup>[24]</sup>	基于连续时间和参数调节	根据新事务更新节点级信息并投射到集群级和区域级,最后融合节点级,集群级和区域级的节点信息	在同一框架内难以同时融合离散时间和连续时间信息	出发地-目的地(OD)需求预测
CDOD <sup>[25]</sup>	基于离散和连续时间、循环神经网络	通过协同更新模块融合连续时间信息和离散时间信息,并经过图注意力模块融合空间信息	在大规模的图可能适用性不足,计算量较大	出发地-目的地(OD)需求预测

## 4.2 基于动态异质图的时空融合架构

在真实世界中,时空网络中的点和边可能有多种类型,即时间和空间维度均存在异质性,而以往的时空融合架构研究多聚焦于对同质图的研究。因此,基于同质图的方法无法充分建模和提取异质图中的时空信息,近年来,研究人员针对这些问题,提出了一系列基于动态异质图的时空融合架构。根据节点特征聚合时信息传递方式的不同,可将基于动态异质图的时空融合架构分为基于关系类型感知的时空融合架构和基于元路径感知的时空融合架构。在本节中,我们将对这些方法进行详细的举例论述。

### 4.2.1 基于关系类型感知的时空融合架构

在处理异质图时,基于关系类型感知是其中一种策略,它主要关注从节点的邻居节点中学习表示,通过考虑不同关系类型的邻居节点来捕捉节点之间的多样性关系。

由于涉及不同交通方式的情境下,邻近站点之间的关系具有动态性和异质性<sup>[32]</sup>,因此为了建构跨多种交通方

式的异构关系, Zhou 等人<sup>[32]</sup>提出了 MOHER。该模型构建的异质图中节点是所有不同交通方式站点的集合, 异质边包括不同关系类型。由于不同交通模式与地理邻近度/兴趣点(POI)相似度构建的复合关系是异质的, 因此可以通过建立模式内(如地铁站)和模式间(如地铁站和出租车服务点间)站点之间的多重复合关系<sup>[32]</sup>得到异质边的类型。MOHER 中空间信息提取部分主要包括模内关系和模间关系编码和一个跨模式 GCN(CMR-GCN)模块, 时间提取部分为 LSTM<sup>[33]</sup>模块, 它们通过串联的方式实现时空信息的融合。

通过地理邻近度和 POI 相似度对模内关系和模间关系进行编码, 并且构建跨模局部图后, MOHER 设计了跨模式关系图卷积网络(CMR-GCN)对各种异质跨模式关系的相关性和差异性进行显式建模, 提取空间维度的人流信息。具体来说, 对于构建的局部图中除去规划的目标节点的其他节点  $v_i$ , 第  $l+1$  层模块中不同异构关系的相关性  $\{C_{i,r}^{l+1} | r \in R\}$  可用如下公式表示为:

$$C_{i,r}^{l+1} = \sum_{j \in N_r(i)} \sigma \left( \frac{\varepsilon_{r,ij}}{|N_r(i)|} x_j^l W_{r,c}^l + b_{r,c}^l \right) \quad (30)$$

其中,  $x_j^l$  表示第  $l$  层节点  $j$  的节点特征,  $\varepsilon_{r,ij}$  表示节点  $i$  和节点  $j$  构成的边的特征,  $\{W_{r,c}^l | r \in R\}$  和  $\{b_{r,c}^l | r \in R\}$  分别是关系类型为  $r$  的待训练权重矩阵和偏置,  $N_r(i)$  表示节点  $v_i$  关系类别为  $r$  的邻居节点的集合。除此之外, 采用不同交通方式, 在同一区域内的人流特征之间也存在差异性。因此, 跨模式节点特征的差异性  $\{D_{i,r}^{l+1} | r \in R\}$  可用如下公式表示为:

$$D_{i,r}^{l+1} = \sum_{j \in N_r(i)} \omega \left( \frac{\varepsilon_{r,ij}}{|N_r(i)|} |x_j^l - x_i^l| W_{r,d}^l + b_{r,d}^l \right) \quad (31)$$

其中,  $|x_j^l - x_i^l|$  表示节点  $v_i$  和邻居节点  $v_j$  差值的绝对值,  $\omega$  是  $\tanh$  函数, 第  $l+1$  层的输出  $x_i^{l+1}$  可通过不同类型的异构关系的相关性和差异性累加并与第  $l$  层的输出  $x_i^l$  得到, 这个更新迭代过程可由以下公式表示:

$$x_i^{l+1} = \sigma \left( x_i^l W_p^l + \sum_{r \in R} (C_{i,r}^{l+1} + D_{i,r}^{l+1}) \right) \quad (32)$$

对于有  $L$  个消息传递层的 CMR-GCNs, 节点  $v_i$  的节点表示可通过拼接  $x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^L$  得到。

从上述过程可以发现, 对于相同的关系类型  $r$ , MOHER 通过将节点和边的特征值进行简单加权, 从而得到节点  $v_i$  的相关性和差异性表示。在经过 CMR-GCNs 得到节点  $v_i$  的节点表示后, 为了提升计算效率, MOHER 通过选择特定关系类型下与目标节点相关性最高的节点得到目标节点的最终表示。因此, 目标节点  $v_0$  的表示可用如下公式表示为:

$$h = \|(\varepsilon_{v_0,r} \cdot g_r | r \in R_{v_0})\| \quad (33)$$

其中,  $R_{v_0}$  是关系  $R$  的子集, 包括连接到节点  $v_0$  的所有关系,  $g_r$  是关系  $r$  下与节点  $v_0$  连接的相关性最高的节点的表示,  $\varepsilon_{v_0,r}$  是边的特征值。通过 MOHER 中的  $L$  层 CMR-GCNs 和最大池化层后可得到不同时间的目标节点  $v_0$  表示。在时间维度, MOHER 将这些不同时间的  $v_0$  表示通过 LSTM 提取时间信息, 以串联方式融合时空信息。

MOHER 中的对于异质图中点信息聚合的处理仅基于简单的加权, 而无法进行自适应的学习, 可能无法对异质图中点的语义信息进行充分的提取。为了应对低流量道路上车流较少、统计值变化剧烈导致难以观测, 以及统计值对噪音敏感等挑战, Zhang 等人<sup>[34]</sup>提出了一个 T-Closure 框架, 该框架可用于基于 GPS 的轨迹表示学习或轨迹异常检测等相关任务。在其时空融合部分, 空间信息通过设计的 MVH-GNN 网络进行提取, 时间信息通过 LSTM<sup>[33]</sup>进行提取, 最后通过串联的方式融合时空信息。

T-Closure 中涉及 3 种主要的异质节点, 分别是经过节点、规划节点和扩展节点, 经过节点是轨迹实际经过的节点, 规划节点是原定规划经过的轨迹中的节点, 扩展节点表示目标道路的一跳邻域内不在经过轨迹和规划轨迹中的节点, 其中, 经过轨迹和规划轨迹分别是由经过节点和规划节点形成的路径。

根据上述 3 种不同类型的节点可以划分成不同的视图, 分别为经过节点构建的通过视图, 规划节点构建的规划视图和扩展节点构建的扩展视图, 这 3 种视图表示从 3 种角度提取不同类型节点和边的信息。在合并边的嵌入得到边的空间信息表示后, 需要对类别内的节点相关性进行建模。因此, MVH-GNN 引入了加权的注意力机制, 权重可代表不同节点在同一视图中的重要性。以通过节点的视图为例, 节点  $v_i$  的邻居节点  $v_j$  的权重可以用如下公式

进行表示:

$$a_{i,j} = \frac{\exp(w^T[h_i||x_{i,j}])}{\sum_{v_k \in N^{pa}(i)} \exp(w^T[h_i||x_{i,k}])} \quad (34)$$

其中,  $\parallel$  表示拼接操作,  $N^{pa}(i)$  表示在通过视图中节点  $v_i$  的邻居节点的集合,  $w$  是一个待训练的注意力权重向量,  $x_{i,j}$  是边的信息表示,  $h_i$  是节点  $v_i$  的特征表示. 在得到邻居节点的权重后, 需要根据权重和邻居节点嵌入计算视图嵌入, 根据这种方法类似计算可以得到节点  $v_i$  的 3 个不同视图的视图嵌入, 其中, 通过节点的视图嵌入可以表示为:

$$\bar{h}_i^{pa} = \sum_{v_j \in N^{pa}(i)} a_{i,j} \cdot W_{pa} x_{i,j} \quad (35)$$

其中,  $W_{pa}$  是通过节点视图的待训练权重矩阵, 它表示与视图相关的可学习权重矩阵, 不同视图的权重矩阵不同.

然后, 除了类别内的关系建模, MVH-GNN 通过门控融合块实现对类别间的关系进行建模. 假设有任意的两个视图嵌入, 该门控融合块可表示为:

$$z = Sigmoid(W_z[\bar{h}_i^a || \bar{h}_i^b] + b_z) \quad (36)$$

$$o_i = (1 - z) \odot \bar{h}_i^a + z \odot \bar{h}_i^b \quad (37)$$

其中,  $\bar{h}_i^a$  和  $\bar{h}_i^b$  分别表示的是任意两个视图的嵌入,  $W_z$  和  $b_z$  分别为待训练的权重矩阵和偏置. 在得到门控融合块的输出  $o_i$  后, 与原始节点嵌入  $h_i$  拼接, 经过线性层和激活函数后得到节点  $v_i$  的输出嵌入, 该过程可表示为:

$$e_i = \tanh(W_e[h_i || o_i^{pa-pl} || o_i^{pa-ex} || o_i^{pl-ex}] + b_e) \quad (38)$$

其中,  $e_i$  是通过 MVH-GNN 网络得到的节点  $v_i$  的嵌入表示,  $W_e$  和  $b_e$  分别是待训练的权重和偏置,  $o_i^{pa-pl}$ ,  $o_i^{pa-ex}$  和  $o_i^{pl-ex}$  代表节点  $v_i$  的 3 个视图两两融合的结果, 分别为通过视图和规划视图的关系输出, 通过视图和扩展视图的关系输出和规划视图和扩展视图的关系输出.

最后, T-Closure 将 MVH-GNN 网络分别应用于连续时间段的图序列  $\{G_1, G_2, \dots, G_{|T|}\}$  可以得到输出的视图嵌入序列  $\{e_1, e_2, \dots, e_{|T|}\}$ , 完成空间信息提取后, 再输入到 LSTM<sup>[33]</sup> 中完成时间信息提取.

#### 4.2.2 基于元路径感知的时空融合架构

基于关系类型感知的时空融合架构应用广泛, 在一定程度上可以融合动态异质图中的时空信息, 但它通常涉及的参数量较大, 计算开销提高. 除此之外, 基于关系类型感知的时空架构通常建模的空间关系较为简单, 对于高阶的语义信息捕获不足. 近年来, 随着越来越多研究者关注元路径在异质图中的应用, 这种基于节点之间的特定关系序列的方法也被引入到时空融合架构中.

为了解决交通问题中的缺失路况补全问题, Zhang 等人<sup>[35]</sup>提出了一个基于 GPS 轨迹的多视图异构图网络 HAN, 它考虑了复杂的空间异质信息, 如道路类型、特征和道路连接的多样性, 同时也考虑了时间异质性, 如邻接时间交通状态的相关性. HAN 分别在空间维度和时间维度上基于元路径进行异质图建模, 最后通过张量外积和低秩分解将空间维度的信息和时间维度的信息进行融合.

如图 6, 在空间维度上, HAN 构建了两种不同的元路径, 它们的区别在于相邻路段的道路类型是否相同, 图 6(a)类型的元路径中的节点是相同道路类型的相邻路段, 图 6(b)类型的元路径中的节点是不同道路类型的相邻路段. 在时间维度上, HAN 同样构建了两种不同的元路径, 图 6(c)类型的元路径中的节点表示相邻两天的同一时间点, 图 6(d)类型的元路径中的节点则表示同一天内的相邻时间点.

无论是在空间维度还是在时间维度, HAN 都通过构建异构图注意力网络来建模空间和时间依赖性, 该模型引入多头自注意力机制<sup>[26]</sup>, 首先在单个元路径上学习邻居节点权重, 再将学习到的权重聚合节点表示得到整条元路径的表示, 最后将每条元路径表示与学习到的元路径在时间/空间中的权重结合, 通过聚合得到时间和空间视图的表示. 下面将介绍该部分的具体过程.

首先, 在每条元路径  $\phi$  中, 需要用特定的变换矩阵将节点  $i$  的原始嵌入表示  $h_i$  转换为  $h'_i$ , 以区分同一节点在不同元路径中具有不同的表示. 在元路径  $\phi$  中, 相互连接的节点  $j$  对节点  $i$  的重要程度可用如下公式表示:

$$e_{ij}^\phi = \text{Softmax}_j(\text{att}_{\text{node}}(h'_i, h'_j; \phi)) \quad (39)$$

其中,  $\text{att}_{\text{node}}$  用的是自注意力机制<sup>[26]</sup>. 在得到元路径  $\phi$  中节点  $j$  对节点  $i$  的重要程度  $e_{ij}^\phi$  后, HAN 使用多头注意力机制将节点表示聚合为最终的单一元路径表示, 这个过程可用如下公式表示:

$$f_i^\phi = \frac{1}{K} \sigma \left( \sum_{j \in N^\phi} e_{ij}^\phi \cdot h'_j \right) \quad (40)$$

其中,  $K$  表示注意力头的数量,  $N^\phi$  表示的是节点  $i$  在元路径  $\phi$  上所有邻居节点.

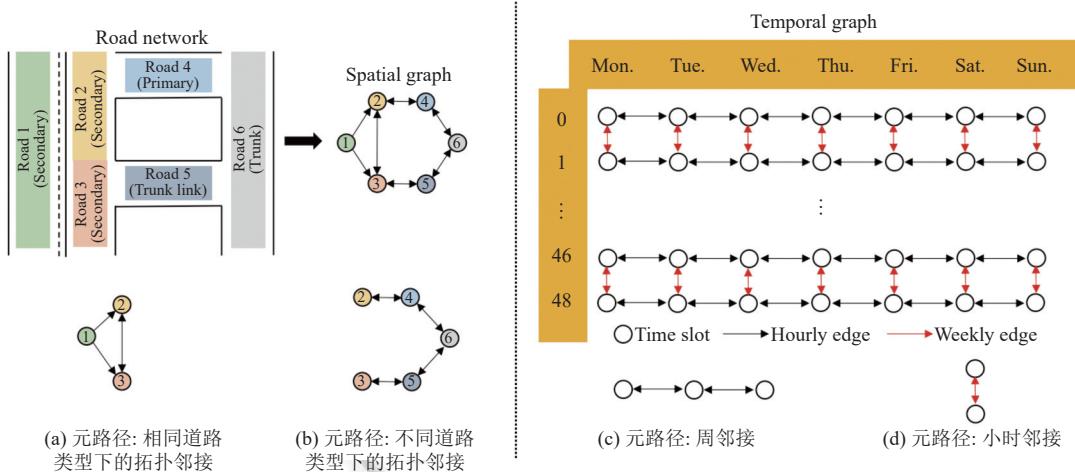


图 6 空间维度和时间维度不同类型元路径的示意图<sup>[35]</sup>

接着, HAN 将单一元路径的表示先经过 MLP 非线性变换, 接着用一个表示不同元路径在整个视图中的重要性的注意向量  $q$  将不同的元路径表示聚合起来, 分别得到空间和时间视图的嵌入表示. 对于空间/时间视图中的元路径集  $\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_p\}$ , 元路径  $\phi_p$  对插补任务中的视图的重要性权值可用如下公式表示:

$$m_{\phi_p} = \text{Softmax}_p \left( \frac{1}{|V|} \sum_{i \in V} q^T \tanh(W \cdot f_i^{\phi_p} + b) \right) \quad (41)$$

其中,  $W$  和  $b$  分别为待训练的权重和偏置,  $V$  表示图中的节点的集合. 最后, 通过元路径集中每条元路径和其重要性权值的加权求和可以得到时间/空间的向量表示  $F$ , 这个过程可表示如下:

$$F = \sum_{p=1}^P m_{\phi_p} \cdot F_{\phi_p} \quad (42)$$

最后, 在时空融合部分, HAN 利用低秩多模态融合 (LMF) 将时间和空间向量表示进行多模态融合. 为了实现多模态融合, 首先需要将输入映射成高维张量, 以捕获不同模态之间的相关性, 再将结果通过线性操作映射回低维张量. 最终对  $F_s$  和  $F_t$  进行信息融合得到插补结果的函数可表示为:

$$\text{fuse}(F_s, F_t) = \sum_{i=1}^r \odot_{m=1}^M w_m^{(i)} \cdot Z + b \quad (43)$$

其中,  $Z$  通过空间的向量表示  $F_s$  和时间的向量表示  $F_t$  通过张量外积得到, 它包含了两个模态的所有组合, 有助于捕捉两个输入模态之间的关联信息,  $w_m^{(i)}$  表示将权重矩阵进行分解得到的第  $i$  组模态  $m$  的低秩分解因子.

与基于关系类型感知的时空融合架构方法相比, 基于元路径的时空融合架构更能提取异质图中的高阶关系, 通过定义不同的元路径, 可以捕捉到不同类型的节点关联模式, 使得方法更适应于更多样的图结构, 有利于在不同领域中迁移和应用, 但与此同时, 它可能也会带来建模复杂, 需要领域知识辅助设计等缺点. 基于动态异质图的时空融合架构总结可见表 3.

表 3 基于动态异质图的时空融合架构

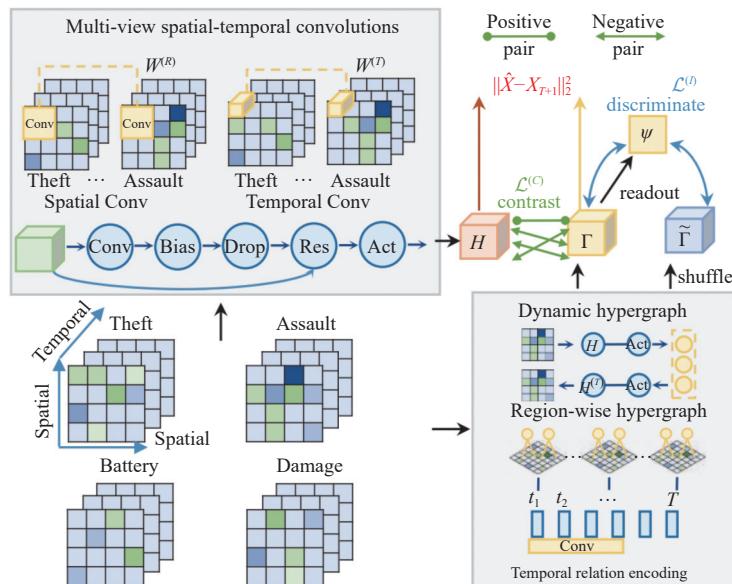
方法	类型	算法描述	缺陷	应用
HetETA <sup>[36]</sup>		用门控卷积机制对时间信息进行提取, 并与用基于不同关系得到的注意力矩阵计算得到的 ChebNet 局部滤波分别建模多关系道路网络和基于轨迹的空间异构信息串联	图结构是静态的, 不具有自适应性	预计到达时间
MOHER <sup>[32]</sup>	关系类型感知	根据地理邻近度和 POI 相似度对模内/模间关系进行编码, 用跨模 GCN 并行提取不同模式的空间信息, 并与提取时间信息的 LSTM 串联	仅基于简单的加权对异质图中的点进行信息聚合, 而没有自适应地考虑到相同关系下不同节点的重要性不同	人群流量预测
T-Closure <sup>[34]</sup>		根据经过节点、规划节点和扩展节点构建 3 种视图, 并引入加权的注意力机制计算同一视图下不同节点的权重, 用门控融合空间信息并串联 LSTM 提取时间信息	在图的规模较大时计算量增加	封路探测
HAN <sup>[35]</sup>	元路径感知	分别在空间和时间维度构建两种元路径, 并通过注意力机制构建空间和时间依赖性, 用张量外积和低秩分解融合时空信息	建模复杂, 需要额外的领域知识	缺失路况补全
STHAN <sup>[37]</sup>		对 3 种空间关系和一种时间关系构建元路径, 并在节点级和元路径级上使用注意力机制, 并与基于元学习的 RNN 时间预测块串联	未整合外部知识下的时间关系	交通需求预测

### 4.3 基于动态超图的时空融合架构

在传统的简单图结构中, 每条边连接两个节点, 而超图中的超边可以连接多个节点, 便于捕捉更丰富的节点关联模式。目前有不少基于超图的研究, 如生物网络中的多元关系和社交网络中的互动。随着研究的深入, 在时空数据挖掘的应用领域, 也引入了一些基于动态超图的时空融合架构, 可将这类架构分为谱域方法和非谱域方法。

#### 4.3.1 非谱域方法

为解决犯罪数据稀疏和犯罪数据分布的问题, Li 等人<sup>[38]</sup>提出了一个基于超图的学习框架 (ST-HSL), 如图 7, 它通过多视图的卷积网络捕获局部和全局的时空犯罪模式, 并引入了对比学习使局部和全局编码器相互协作监督。在这个模型中, 时间信息和空间信息通过串联的方式进行融合。值得注意的是, 在空间维度的全局角度, ST-HSL 直接在超图上执行卷积, 该卷积不涉及将空域信息转换到谱域中, 因此属于非谱域方法。

图 7 ST-HSL 的时间卷积部分<sup>[38]</sup>

在局部角度, ST-HSL 构建了分层卷积编码器来建模犯罪数据的时空关联性。具体来说, 在空间维度, 为了对不同类型的空间犯罪模式进行编码, ST-HSL 使用了一个卷积核, 在空间维度和犯罪类型维度上同时进行卷积操作, 用以建模局部区域的犯罪依赖关系。为了缓解梯度消失的问题, 在对嵌入进行完卷积操作后需要进行残差连接和相加操作, 再得到犯罪编码  $H_{t,c}^{(R)}$ 。该过程可用如下公式进行表示:

$$H_{t,c}^{(R)} = \sigma(\delta(W_c^{(R)} * E_t + b_c^{(R)}) + E_{t,c}) \quad (44)$$

其中,  $H_{t,c}^{(R)}$  为局部区域空间维度分层卷积的犯罪编码,  $E_t \in \mathbb{R}^{I \times J \times C \times d}$  表示在  $t$  时刻的犯罪嵌入,  $E_{t,c} \in \mathbb{R}^{R \times d}$  是在  $t$  时刻, 犯罪类型为  $c$  的犯罪嵌入,  $W_c^{(R)}$  和  $b_c^{(R)}$  分别是犯罪类型为  $c$  时的卷积核和待训练偏置,  $*$  表示标准卷积,  $R$  表示区域数,  $(R)$  表示不同区域的空间维度,  $I$  和  $J$  分别表示城市区域图中行和列划分的区域数量,  $C$  表示犯罪类型,  $d$  表示初始的嵌入维度,  $\delta(\cdot)$  表示 dropout 函数。在空间维度得到局部区域空间维度分层卷积的犯罪编码  $H_{t,c}^{(R)}$  后, 将上述的编码器叠加两层获得局部区域空间维度的最终犯罪表示  $H^{(R)} \in \mathbb{R}^{R \times T \times C \times d}$ 。

类似地, 在时间维度, 对于不同犯罪类型的时间犯罪编码, ST-HSL 在时间维度和犯罪类型维度上进行卷积操作, 用来建模相邻时间段内犯罪发生的时间依赖性。该过程可用如下公式进行表示:

$$H_{r,c}^{(T)} = \sigma(\delta(W_c^{(T)} * H_r^{(R)} + b_c^{(T)}) + H_{t,c}^{(R)}) \quad (45)$$

其中,  $H_r^{(R)} \in \mathbb{R}^{T \times C \times d}$ ,  $H_{t,c}^{(R)} \in \mathbb{R}^d$  是类型相关的时间卷积编码器的输出,  $W_c^{(T)}$  是卷积核,  $b_c^{(T)}$  是可学习的偏置,  $(T)$  表示时间维度,  $*$  表示标准卷积。在时间维度得到分层卷积的犯罪编码  $H_{r,c}^{(T)}$  后, 将上述的编码器叠加两层获得时间维度的最终犯罪表示  $H^{(T)} \in \mathbb{R}^{R \times T \times C \times d}$ 。

为了获得多个空间尺度的相关性, ST-HSL 对犯罪发生的全局关联性也进行了建模。具体来说, 在全局角度, ST-HSL 通过提出一个超图学习框架来对全局时空进行特征学习, 提高对全局跨区域发生的犯罪事件之间依赖关系的捕获能力, 并缓解犯罪分布差异的问题。在空间维度, ST-HSL 利用超边来连接一组犯罪区域, 这些超边可学习到不同空间维度的区域关联, 聚合具有相似犯罪分布的不同区域的全局信息。假设超边的数量为  $H$ , 超图中的消息传递过程可用如下公式表示:

$$\Gamma_t^{(R)} = \sigma(H_t^T \cdot \sigma(H_t \cdot E_t)) \quad (46)$$

其中,  $H_t \in \mathbb{R}^{H \times RC}$  表示信息在  $t$  时刻时区域和超边之间的可学习依赖关系,  $E_t \in \mathbb{R}^{RC \times d}$  为  $t$  时刻所有区域-犯罪类别组合的嵌入表示。

在时间维度, ST-HSL 采用了卷积操作将得到的全局空间表示和时间信息融合起来, 在这个部分, 用来捕获全局的时间关联的卷积核尺寸相较局部时间特征编码更大。该部分的时间关系编码器可用如下公式表示:

$$\Gamma_{r,c}^{(T)} = \sigma(\delta(V * \Gamma_{r,c}^{(R)} + c)) \quad (47)$$

其中,  $V$  是待训练的卷积核,  $c$  是待训练偏置,  $\Gamma_{r,c}^{(T)} \in \mathbb{R}^{T \times d}$  是在第  $r$  个区域, 犯罪类型为  $c$  的所有  $T$  个时间的嵌入向量,  $*$  表示标准卷积。

利用非谱域方法进行动态超图的时空融合时, 由于不涉及将特征转换到频域, 计算开销更小, 但是可能容易受到局部信息的干扰, 在设计相关方法时, 可能需要额外考虑对全局信息的提取。

#### 4.3.2 谱域方法

在基于动态超图的时空融合架构中还有一类方法是基于谱域的, 相比非谱域方法, 谱域方法更关注动态超图的全局信息, 然而处理大规模的动态超图时, 谱域方法的计算复杂度可能更高。由于地铁线路中点与点之间具有高阶关系, 而超边中一条边可包括多个节点, 因此 Wang 等人<sup>[39]</sup>提出的 DSTHGNC 分别根据地铁网络和出行流量构建横跨小时、日、周这 3 个时间跨度的两级超图, 并连接成一个超图, 通过谱域超图卷积和时间卷积串联分别提取空间和时间信息, 从而融合时空信息。超图卷积部分  $f(X^{(l)}, \Theta^{(l)})$  可以表示为:

$$X^{(l+1)} = \sigma_{ReLU}(\tilde{D}_v^{-\frac{1}{2}} \tilde{H}_d \tilde{W} \tilde{D}_e^{-1} \tilde{H}_d^T \tilde{D}_v^{-\frac{1}{2}} X^{(l)} \Theta^{(l)}) \quad (48)$$

其中,  $\tilde{D}_v$  表示节点的度矩阵,  $\tilde{D}_e$  表示包括自循环的超边的度矩阵,  $\tilde{W}$  表示包括自循环的权重矩阵,  $X^{(l)}$  表示第  $l$  层输入,  $\tilde{H}_d$  是构建的主超图和高级超边相拼接后的矩阵与自循环拼接的关联矩阵,  $\Theta^{(l)}$  表示谱超图卷积核,  $\sigma_{ReLU}$  表示 ReLU 激活函数。

组合了时间卷积和空间卷积的时空模块可以用如下公式表示:

$$H^{(l+1)} = \Gamma_{f \circ \tau}^{(l)} f((\Gamma_{b \circ \tau}^{(l)} H_d^{(l)}), \Theta^{(l)}) \quad (49)$$

其中,  $\Gamma_f$  表示前面的一维扩展卷积核,  $\Gamma_b$  表示后面的一维扩展卷积核,  $\Theta^{(l)}$  表示谱超图卷积核,  $H^{(l+1)}$  表示第  $l+1$  层输出。该部分可以用图 8 表示, 图中进行了两次卷积操作, 分别用  $\Gamma$  和  $\Gamma'$  进行表示,  $\odot$  表示 Hadamard 积,  $*$  表示标准卷积。

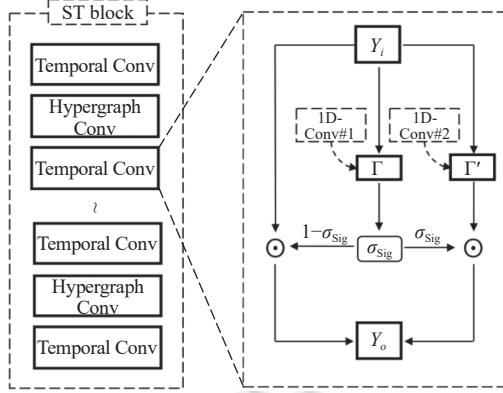


图 8 DSTHGCN 的时间卷积部分<sup>[39]</sup>

基于动态超图的时空融合架构总结可见表 4。

表 4 基于动态超图的时空融合架构

方法	类型	算法描述	缺陷	应用
DyHCN <sup>[40]</sup>		在时空超图卷积模块采用内注意力和外注意力机制学习空间维度的节点和超边的嵌入传播, 并与通过线性转换得到的时间嵌入连接融合, 再通过基于LSTM的协同预测学习时间依赖	随着节点和超边数量增长, 计算量较大	股票价格预测
ST-HSL <sup>[38]</sup>	非谱域方法	串联分别通过直接卷积对空间和犯罪、时间和犯罪进行的局部编码, 并通过对比学习协同学习局部和全局空间和时间关系	随着节点和超边数量增长, 计算量较大	犯罪预测
DyHSL <sup>[41]</sup>		通过推导出的超图关联矩阵进行超图卷积更新节点表示, 用交互式图卷积建模高阶时空关系并整合成多尺度提取模块进行局部池化提取时间信息	由于模型减少了参数, 可能有过拟合风险	交通流预测
DSTHGNC <sup>[39]</sup>	谱域方法	分别根据地铁网络拓扑和地铁流量构造两级超图并连接成一个超图, 通过谱域直接超图卷积提取空间信息, 并前后与时间卷积层串联和门控机制融合时空信息	超图结构是预定义的, 不具有自适应性	地铁客流预测

## 5 时空大模型

大模型, 具体指大语言模型 (LLM) 和预训练基础模型 (PFM)<sup>[16]</sup>, 是深度学习领域的一项新兴技术, 具有参数数量庞大, 层数较多等特点。目前基于大模型的研究主要在自然语言处理、计算机视觉和多模态融合方面取得突破性进展。而在时间和空间信息融合的挖掘上, 大模型也展现出广阔的前景。因此在本节中, 面向两种与时空信息提取相关的不同类型的数据进行大模型的介绍, 分别为时间序列和图。

### 5.1 基于时间序列的大模型

时序预测作为一项在时间序列中预测未来趋势的任务, 通常面临长距离依赖, 高维数据和对抗噪声等关键问题。而大模型的出现有助于有效解决上述问题, 成为气候预测、金融风险预测、交通预测等领域的有力工具。基于时序的大模型研究主要可分为两大类, 第 1 类是时序领域基础大模型, 第 2 类是使用现有大模型处理时间序列, 在本节中将分别对这两类研究进行简要的介绍。

#### 5.1.1 时序领域基础大模型

TimeGPT<sup>[42]</sup>是美国 Nixtla 公司提出的业界第 1 个基于时间序列的预训练基础通用大模型。由于 Transformer

架构<sup>[26]</sup>中采用的多头自注意力机制能够较好地处理不同频率和特征的时间序列, 同时 Transformer 对长距离依赖具有优秀的提取能力, 能够对不同长度的时间序列信息进行有效挖掘, 因此, 对于不同应用场景的复杂时间序列, TimeGPT 采用了与 Transformer 类似的基础模型结构。在训练集的选择上, 为了获得不同特征和频率的时间序列, TimeGPT 采用了包含超过 1000 亿个数据的最大的公开时间序列数据集, 其中还包括了噪声值和异常值, 以应对真实复杂的通用应用场景。在推断目标时间序列时, TimeGPT 采用滚动预测来估计误差。在这项工作的最后, Garza 等人<sup>[42]</sup>提出, 未来的时序大模型预测可以考虑将基础知识融入到预测过程中。此外, 在进行时间序列分类时, 需要对时间序列之间的相似性进行标准设定, 这也是未来值得进一步研究的方向, 可能在提高预测准确性和可解释性方面具有显著的效果。

除了 TimeGPT, Rasul 等人<sup>[43]</sup>提出了一个通用单变量概率时序预测模型 Lag-Llama, 与 TimeGPT 使用共形预测不同的是, Lag-Llama 直接使用概率预测。Lag-Llama 同样使用一个基于 Transformer 的结构, 为了向量化特定频率的单变量时间序列, 该模型使用了滞后特征。在训练时, 输入的单变量序列及其协变量首先通过一个共享的线性投影层, 从而将时间序列的不同特征进行维度映射对齐, 接下来, 通过  $M$  个掩码解码块进行投影, 然后将输出和位置编码一起输入到分布头中预测概率分布的参数, 最后利用对数概率计算损失。

### 5.1.2 现有大模型处理时间序列

除了时间序列的基础大模型, 还有一些使用现有大模型处理通用时间序列的研究工作。其中一项最新工作是 Xue 等人<sup>[44]</sup>提出的 PromptCast, 这是一种基于提示的首次使用自然语言处理大模型, 而没有修改现有的大语言模型结构来进行时间序列预测的方法。该方法使用了一个涵盖多应用场景的大规模时间序列数据集 PISA, 基于不同模板构造的提示将连续时间步上的数值转换为自然语言句子进行描述, 并将转换得到的文本输入到大语言模型中, 以类似自然语言处理任务中句子到句子的方式进行预测。由于这项工作主要聚焦于单变量时间序列预测任务, 未来可以通过在时间序列相关的数据集中补充多变量时间序列, 以适应更多的应用场景。

还有一项工作是 Jin 等人<sup>[45]</sup>提出的重编程框架 TIME-LLM, 与之前的进行时间序列预测相关的工作不同的是, 它的主要思想是在不改变大语言模型 (LLM) 主干的前提下, 将输入时间序列通过跨模态的重编程以适应现有的 LLM 的文本原型表示, 这样做避免了直接编辑时间序列。如图 9 为 TIME-LLM 的主要框架, 它分为 3 个主要部分, 分别是输入嵌入, patch 重编程和提示为前缀部分。

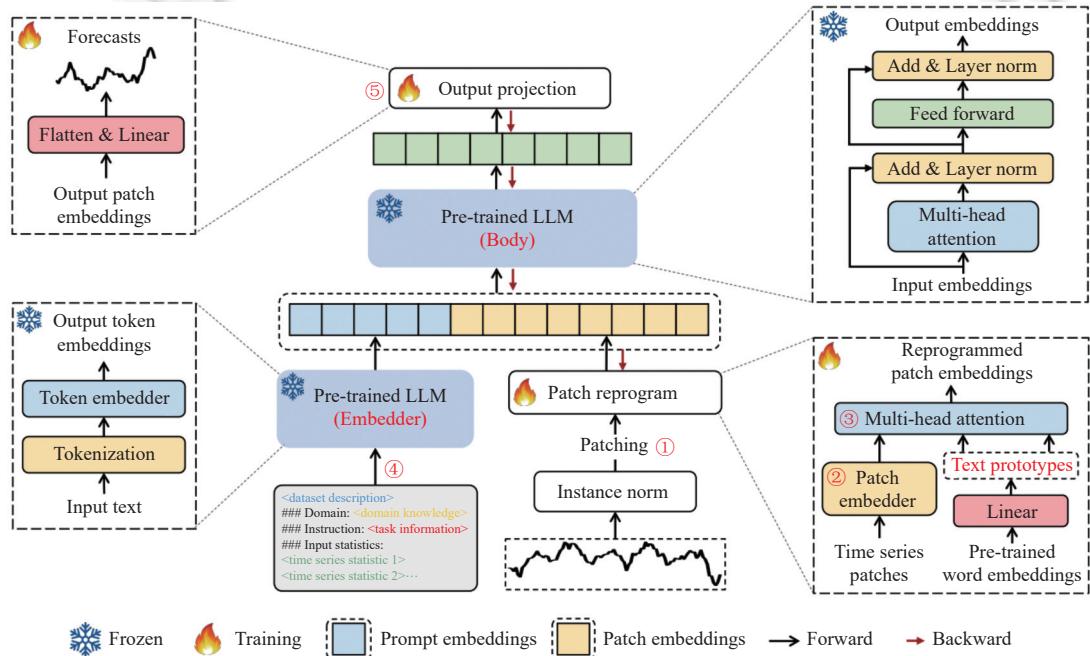


图 9 TIME-LLM 的架构<sup>[45]</sup>

在输入嵌入部分,时间序列先通过 RevIN 归一化为零均值和单位标准差<sup>[46]</sup>,然后分成不同的 patch 进行 embedding<sup>[47]</sup>.接下来,在 patch 重编程部分,为了将时序输入特征对齐到自然语言文本域上,TIME-LLM 使用交叉注意对两种模态进行转换,此外 TIME-LLM 采用了一个简单的线性层来提取文本原型,从而降低计算复杂度.在提示为前缀部分,TIME-LLM 将定制的前缀提示的自然语言嵌入向量与经过模态转换对齐后的时序嵌入拼接后输入到预训练好的 LLM 中,最后得到的输出经过线性投影层后进行预测.然而,由于 TIME-LLM 在重编程部分并未结合具体的领域知识,因此仍有提升的空间.

基于时间序列的大模型总结可见表 5.

表 5 基于时间序列的大模型

方法	类型	时间	算法描述	应用
TimeGPT <sup>[42]</sup>	时序领域基础大模型	2023	基于Transformer的通用大模型	通用
Lag-LLama <sup>[43]</sup>			基于Transformer的结构的单变量概率时间序列模型,加入了滞后特征	通用
PromptCast <sup>[44]</sup>			用基于提示的使用自然语言处理大模型处理单变量时间序列	
TIME-LLM <sup>[45]</sup>			通过跨模态的重编程以适应现有LLM的文本原型表示	
LLM4TS <sup>[48]</sup>			用两阶段微调和两级聚合的预训练大模型	
FPT <sup>[49]</sup>		2023	用预训练语言模型的残差块改进时间序列预测任务	
TEST <sup>[50]</sup>			分别用实例级、特征级和文本原型对齐进行对比学习完成编码和创建提示	通用
TEMPO <sup>[51]</sup>			将时间序列分解为趋势、季节性和残差并用生成式预训练Transformer和prompt引导预测时间序列	
LLMTIME <sup>[52]</sup>		2024	将时间序列编码成数字并将标记上的离散分布转换成连续密度,用LLM预测序列中的下一个token	
Xie等人 <sup>[53]</sup>	大模型处理时间序列		用ChatGPT结合历史股票价格和推特文本预测股票走势并尝试了思维链等提示策略	
Yu等人 <sup>[54]</sup>			将零样本/少样本技术与GPT-4和Open LLaMA进行微调结合并加入了思维链技术集成逐步推理过程进行可解释性股票价格预测	金融
Instruct-FinGPT <sup>[55]</sup>		2023	通过将情绪分析从分类转换成生成任务并用指令微调使LLM用于金融情绪分析	
Lopez-Lira等人 <sup>[56]</sup>			使用ChatGPT分数结合投资决策过程进行评估和推理	
Liu等人 <sup>[57]</sup>			用PaLM与生理和行为测量生成的问答对结合并进行基于提示的微调	
METS <sup>[58]</sup>			将心电图和自动生成的临床报告与大模型进行编码相结合,完成多模态的医疗自监督比较学习	医疗
AuxMobLCast <sup>[59]</sup>		2022	将人类移动数据转换成自然语言并加入辅助的POI类别分类任务,使用多个预训练LLM进行微调	交通

## 5.2 基于图的大模型

图数据一般包括两种情况,分别为大量的小尺度图和少数大尺度图,而可用的大规模的高质量数据往往不像计算机视觉领域和自然语言领域那样容易获取.除此之外,由于可能作为主干网络的图神经网络具有的模型容量是有限的,且与大模型中的缩放规律相反<sup>[60]</sup>,它的性能不会随着参数量和模型规模的增加而线性提升,相反,由于图数据中节点之间的连接关系是稀疏和复杂的,增加图神经网络的参数和模型容量可能会导致过拟合,性能可能会出现饱和或下降.另外,不同应用领域的图结构具有多样性和复杂性,这些都可能会成为制约大型图模型的开发和应用的重要挑战<sup>[61]</sup>.目前基于图大模型的相关工作主要可以分为基于普通图和时空图,其中普通图一般不包括时间和空间拓扑信息.在本节中,我们将对这两方面的最新进展进行介绍.

### 5.2.1 基于普通图的大模型

在普通图大模型的相关工作中,根据大模型在整个模型中扮演的角色不同,有两类主流策略:一类是将大模型作为增强器获得更好的节点文本特征表示,再将大模型的输出与图模型相结合;还有一类是将大模型作为预测器直接用于下游预测任务<sup>[61,62]</sup>.在本节中将对这两类策略进行介绍.

### (1) 大模型作为增强器

文本属性图 (TAG) 作为普通图的一种, 图上每个节点包括丰富的文本特征, 其中一个常见的例子是论文引用图.

He 等人<sup>[63]</sup>提出的 TAPE 设计了一种新颖的架构, 如图 10 所示, 它将大语言模型作为增强器, 先将原始的文章相关信息通过设计 prompt 和问题输入到 LLM 后生成预测和相应的解释, 再将生成的解释文本序列和原始文本序列输入到语言模型中进行微调, 从而生成更丰富的节点特征表示. 最后, 将微调语言模型生成的解释表示和原始文本和 LLM 生成的 top-k 预测的表示作为输入分别训练图神经网络并对输出取平均可用于下游预测任务中. 其中, TAPE 中的大模型使用了 GPT3.5<sup>[64]</sup>, 通过语言建模即服务 (LMaaS) 进行访问<sup>[65]</sup>, 而无需进行改动和微调, 用于微调的语言模型是 DeBERTa<sup>[66]</sup>. TAPE 较好地解决了 LLM 训练开销大的问题, 并结合了语言模型规模较小, 适合进行微调和图神经网络对图拓扑结构信息提取能力强的特点, 是文本属性图大模型相关工作的一个重要探索.

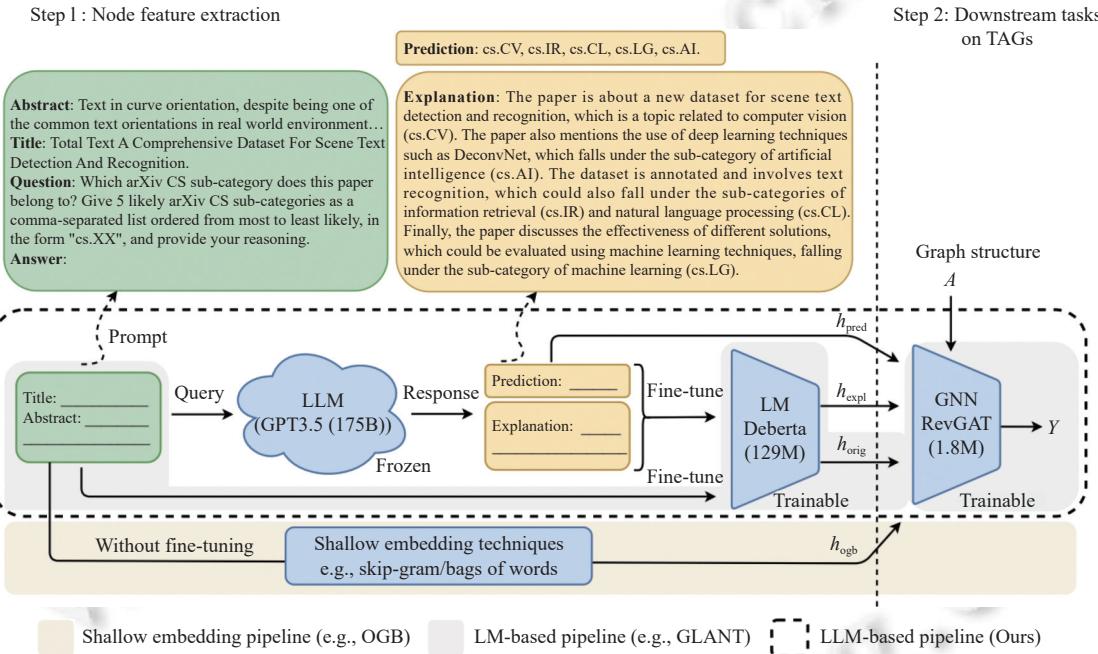


图 10 TAPE 的架构<sup>[63]</sup>

除了普通的文本属性图的相关应用, 还有一类常见的基于普通图的大模型应用于推荐系统, 比如 Ren 等人<sup>[67]</sup>提出的 RLMRec 相对于传统的仅基于 ID (即用户/物品标识) 的信息推荐, 该方法还额外提取了用户和物品相关的文本信息, 它将 GNN 增强协同过滤<sup>[68]</sup>得到的用户-物品协作关系与通过 LLM 得到的增强语义表示通过对比建模进行对齐, 最后通过最大化互信息以最优化推荐系统的优化目标. 其中, RLMRec 中的 LLM 将设计的系统 prompt 和用户/物品概述的 prompt 作为输入, 从而生成更准确的用户/物品概述, 所以该模型中 LLM 充当增强器的作用. 用户/物品概述的 prompt 中包括标题、原始描述、数据集特定属性和用户评论等信息.

### (2) 大模型作为预测器

Tang 等人<sup>[69]</sup>提出的 GraphGPT 中的 LLM 则是作为预测器, 它将文本信息和图数据进行对齐, 并使用双阶段的图指令微调方法, 分别是自监督的图匹配任务和特定任务的图数据指令微调来提高对图数据结构的理解能力和对不同的下游任务的泛化能力, 并通过融合“思维链”的方式提升模型的推理能力. 具体来说, 在对齐阶段, 为了将文本信息融合到图数据结构编码过程, GraphGPT 引入了对比学习的方法, 通过使用真值转换函数和交叉熵损失函数进行对比对齐, 其中图编码器用的是 graph Transformer<sup>[70]</sup>, 文本编码器用的是经典 Transformer<sup>[26]</sup>. 在双阶段的图指令微调部分, 第 1 阶段需要将图结构的相关信息融入到大语言模型中, 在指令构建阶段, GraphGPT 将图中的节

点视为中心节点，并通过进行  $h$  跳的随机邻居采样完成子图构建，在微调阶段则通过轻量级对齐投影将图中每个节点的标记与相关的文本描述关联。在第 2 阶段针对特定任务的微调时，则需要根据不同的下游任务设计不同的指令模板，并对第 1 阶段的投影进行参数优化以适应不同的应用场景。为了应对不同结构的图数据的分布变化给大语言模型带来的准确性等挑战，GraphGPT 结合了思维链技术<sup>[71]</sup>并通过蒸馏辅助生成高质量的思维链指令，提高了逐步推理能力。GraphGPT 总体准确率较高且具有出色的泛化性能，但由于模型总体参数量较大，仍有减少不必要的参数提升空间。

总的来说，近年来基于普通图的大模型工作利用了 LLM 在文本处理和生成方面的优势，在附带丰富文本信息的图数据上具有广阔的应用前景。

### 5.2.2 基于时空图的大模型

在时空图方面，有一些研究者也做了相关的工作，例如，Liu 等人<sup>[72]</sup>针对现有 LLM 对空间信息提取不足的问题，提出了 ST-LLM 框架，它包括时空嵌入层、将时空信息融合的卷积层、使用部分冻结注意力 (PFA) 的 LLM 层和回归卷积层，可用于交通预测。其中，ST-LLM 中的部分冻结注意力 (PFA) 的 LLM 层中前  $F$  层中的多头注意力部分和前馈层被冻结，用来保留预训练中的重要知识，后 U 层的多头注意力部分则被解冻，有助于更好地提取时空依赖性。

Li 等人<sup>[73]</sup>提出的 UrbanGPT 则设计了一个时空编码器并使用轻量级对齐模块投影得到时空表示，再输入到 LLM 生成有助于生成数值预测的 token，最后通过回归层生成更准确的预测值。UrbanGPT 的结构图如图 11 所示。其中，时空编码器主要由门控扩张卷积层<sup>[7]</sup>和多级相关注入层组成，UrbanGPT 对 LLM 设计了时间和空间维度的文本时空提示，并进行了时空指令调优。在表 6 中，我们总结了 UrbanGPT<sup>[73]</sup>与主流复杂时空融合架构 STGCN<sup>[5]</sup>和 ASTGCN<sup>[13]</sup>使用上述 3 个用于流量预测的经典数据集在零样本场景下进行评估的对比结果。相比现有的主流复杂时空融合架构，如 STGCN<sup>[5]</sup>和 ASTGCN<sup>[13]</sup>，UrbanGPT 使用流量预测的经典数据集，即 NYC-taxi, NYC-bike 和 NYC-crime 数据集中部分区域的数据进行预训练，在零样本数据（即训练过程中未出现过的区域的数据）上进行分类和回归任务的测试时表现更佳<sup>[73]</sup>，这表示对于时空预测任务中的零样本或者少样本场景，UrbanGPT 的泛化能力更强，可以更好地推广到新地区或新城市的预测任务中。

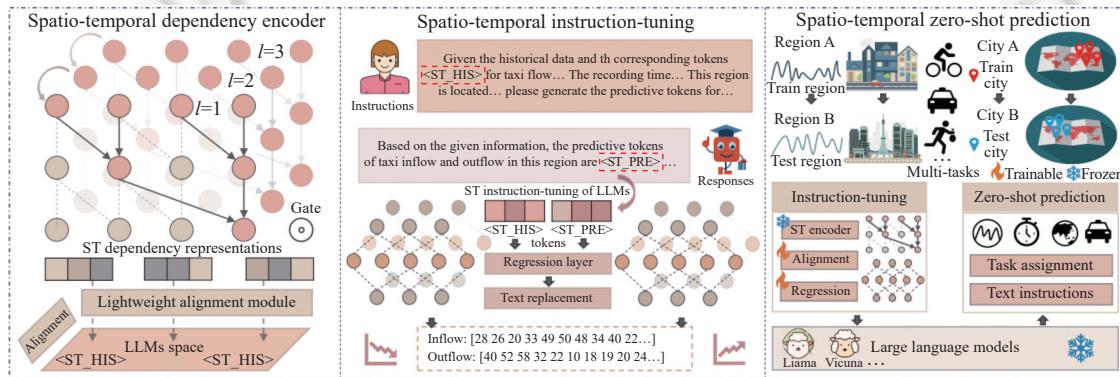


图 11 UrbanGPT 的架构<sup>[73]</sup>

表 6 UrbanGPT 与主流复杂时空融合架构在零样本场景下的对比结果<sup>[73]</sup>

模型	NYC-taxi		NYC-bike		NYC-crime			
	流入	流出	流入	流出	入室盗窃	召回率	Macro-F1	召回率
	MAE (平均绝对误差)	MAE (平均绝对误差)	MAE (平均绝对误差)	MAE (平均绝对误差)	Macro-F1	召回率	Macro-F1	召回率
UrbanGPT <sup>[73]</sup>	<b>6.16</b>	<b>6.83</b>	<b>2.02</b>	<b>2.01</b>	<b>0.67</b>	<b>0.34</b>	<b>0.69</b>	<b>0.42</b>
STGCN <sup>[5]</sup>	12.54	14.32	4.11	4.45	0.48	0.00	0.64	0.30
ASTGCN <sup>[13]</sup>	9.75	12.42	5.58	5.78	0.49	0.01	0.55	0.09

总结来说, 基于时空图的大模型相关的工作目前仍然较少, 这可能是受限于大规模多样化时空数据的匮乏和大模型对数值数据较弱的处理能力。如何在时空图相关工作中引入更丰富的文本信息, 与 LLM 处理文本的优势相结合, 并进行不同特征空间的对齐, 解决数据带来的噪声问题, 从而减小大模型幻觉<sup>[74]</sup>和提高模型的可解释性, 可能将成为该方面工作的研究重点。基于图的大模型总结可见表 7。

表 7 基于图的大模型

方法	类型	时间	算法描述	应用
GraphGPT <sup>[69]</sup>			将文本信息和图结构进行对齐, 并使用双阶段的图指令微调方法, 加入思维链方法来辅助推理	
InstructGLM <sup>[75]</sup>			使用自然语言描述图结构并在LLM上根据以中心节点为核心的图描述提示进行微调	节点分类
SIMTEG <sup>[76]</sup>			对预训练的语言模型进行微调并用微调后的语言模型生成节点嵌入	链路预测
OFA <sup>[77]</sup>			通过自然语言描述边和节点, 并引入了兴趣节点(NOI)子图和NOI提示节点统一不同任务, 用图形提示示范(GPP)针对图进行基于特定任务的修改	
TAPE <sup>[63]</sup>			设计prompt和问题输入到LLM后生成预测和相应的解释, 再用较小的语言模型进行微调, 生成嵌入后输入到GNN中	节点分类
RLMRec <sup>[67]</sup>	基于普通图的大模型	2023	通过对比建模对基于GNN的协同过滤 <sup>[68]</sup> 得到的用户-物品协作关系和LLM的语义空间对齐	推荐系统
GNP <sup>[78]</sup>			使用GNN进行图编码, 并与文本输入整合成图嵌入, 再用领域投影对不同模态的输出进行对齐, 结合自监督图学习获取实体关系, 输出与文本嵌入一起输入到LLM中进行推理	知识图谱问答
RoG <sup>[79]</sup>			设计了一个规划-检索-推理框架, 规划生成知识图谱相关的关系路径, 检索和推理使用LLM对检索的路径进行优化推理	时序知识图谱
PPT <sup>[80]</sup>			为时序知识图谱中的四元组的时间戳创建提示并用掩蔽策略训练预训练语言模型	全谱补全
GraphTranslator <sup>[81]</sup>		2024	将预训练的图模型与LLM结合, 并设计了一个包含LLM的producer将节点嵌入中编码的信息文本化, 用一个translator将文本信息和图模型生成的节点嵌入进行对齐, 用LLM生成预测	节点分类
ST-LLM <sup>[72]</sup>			通过时空卷积进行时空信息提取, 并与部分冻结注意力(PFA)的LLM层和回归卷积结合生成预测	
UrbanGPT <sup>[73]</sup>	基于时空图的大模型	2024	利用包括卷积的时空编码器生成时空编码, 并使用轻量级对齐进行映射, 连接LLM生成有助于预测的token, 最后通过回归层生成数值预测	交通预测
TPLLM <sup>[82]</sup>			使用CNN和GCN分别提取时间和空间特征, 并将GPT-2 <sup>[83]</sup> 作为基础模型, 使用LoRA <sup>[84]</sup> 对模型进行微调	

## 6 应用

以图为载体的时空数据在现实场景中表现多样。其中, 基于时空图的数据挖掘方法在城市交通计算<sup>[15]</sup>、环境与能源监测<sup>[85]</sup>和公共安全与卫生保障<sup>[14]</sup>等方面应用广泛。

### 6.1 城市交通

以交通路网中收集道路信息的监测点为基础建立路网图, 挖掘图中节点上交通信息的时空特征并预测未来路网中的交通流量、事故发生概率等是智能交通系统(ITS)的重要组成部分。

流量预测的经典方法 ASTGCN<sup>[13]</sup>将注意力机制与图卷积过程融合, 其中节点的特征由相邻时间片的特征融合更新。还有部分工作以改变输入模型的图结构为出发点设计方法, 如 Song 等人<sup>[86]</sup>对节点与不同时间步下的邻居建立连接以同步学习时间和空间特征。Lan 等人<sup>[87]</sup>不仅考虑构建信息更丰富的图结构, 同时结合多尺度的门控图卷积神经网络与自注意力机制学习多尺度的时空特征。另一方面, 常微分方程(ODE)也被研究者融入图卷积的过程以克服图神经网络无法处理长序列空间特征的情况, 如 Fang 等人<sup>[88]</sup>提出的 STGODE 方法和 Luo 等人<sup>[89]</sup>提出的 HOPE 方法。

交通流量预测在实际场景中最常见的细分应用之一就是预测城市间两地的行程耗时 (ETA prediction). 百度地图的 Fang 等人<sup>[90]</sup>设计了针对时空图的注意力机制与提取具体路况信息的上下文卷积机制学习并融合时空特征. 滴滴的 Fu 等人<sup>[91]</sup>则对 ETA Prediction 中的常见方法进行了简化, 使得模型可以做到对到达时间的低误差实时预测.

在预测交通事故方面, Zhou 等人<sup>[92]</sup>基于经典的 GNN-RNN 框架处理动态图用于事故预测, 并对交通信息进行了更加细粒度地划分和特征提取. Wang 等人<sup>[93]</sup>提出了一个基于图自编码器的多任务框架提取动态图的节点特征以用于预测交通事故的发生概率.

利用交通历史数据的前提是数据本身的完整性与准确性, 但在现实场景中收集到的数据由于传感器故障、网络故障或数据存储故障等原因均存在一定程度的缺失, 因此交通数据补全工作也是智能交通系统的重要组成部分. 近几年来, 诸多利用挖掘数据的时空分布特征以补全交通数据的方法被提出<sup>[94-97]</sup>, 以 Shen 等人<sup>[94]</sup>提出图注意力循环神经网络为例, 上述方法思路均为从时间和空间两个维度学习数据分布并综合考虑彼此影响以完成数据补全.

## 6.2 公共安全与卫生

时空图在公共安全与卫生中的应用包括社区犯罪率预测、传染病扩散预测与救护车调度等. 其中社区犯罪率预测指根据城市中社区的历史犯罪数据预测未来不同社区的犯罪概率和种类, 以此指导警员的巡逻调度与未来治安设施的建设. 以社区为节点建图并利用时空图神经网络提取犯罪模式特征是解决该预测问题的常见方式, Sun 等人<sup>[98]</sup>关注如何提高模型对空间特征的表达能力, 将图神经网络中的普通卷积核替换为基于社区特征的可训练卷积核. Xia 等人<sup>[99]</sup>则提出时空序列超图网络以提取社区中具有时空特征的复杂犯罪模式特征.

传染病预测指根据城市感染人数的历史数据预测未来不同城市可能增加的感染人数. 与预测社区犯罪率类似, 常见解决方法以城市为节点建立时空图并利用时空图神经网络提取不同城市感染人数增长趋势中的时空特征. Panagopoulos 等人<sup>[100]</sup>基于 MPNN-LSTM 框架学习时空特征, 并在学习过程中引入元学习将相似地区的传播特征进行迁移, 以提高在不同场景(国家)下训练的收敛速度.

救护车调度问题根据需求历史数据和市民活动信息预测城市中某些地区对救护车的需求概率. 基于该问题的建图方式和学习机制需要能够解决事件时间分布的特殊性与历史数据的种类较多这两点因素对预测准确率造成的影响. 其中, Jin 等人<sup>[101]</sup>将需求事件发生的地点与发车医院抽象为异质二部图, 并设计了相应的二部图卷积机制来学习节点特征.

## 6.3 气候与环境

空气质量、湿度、风速等气象条件相关数据由分布在各地的监测设备收集得到, 经过处理分析的结果可以用于未来空气质量及相关气象条件的预测工作. 监测站之间的关系蕴含了空间信息, 每个监测站根据时间推移也会收集到蕴含时序信息的监测数据. Liang 等人<sup>[102]</sup>利用飞镖图表示监测站的地理位置, 并根据飞镖图的特点设计了两种自注意力机制分别提取空气中的污染物指标历史数据的时间和空间特征, 最后利用变分自编码器预测未来时间节点的空气质量. Chen 等人<sup>[103]</sup>基于图神经网络预测河流网络中不同河段中的水量和水质, 并在学习过程中加入基于河段物理特征的元学习条件以增强方法在不同水文环境下的泛化能力.

## 6.4 能源系统

保障稳定的能源供应是现代城市发展与人类生活的基础. 随着城市化程度的提升, 对能源需求端的准确预测对能源系统的设计与调度至关重要. 近几年, Khodayar 等人<sup>[104]</sup>和 Karimi 等人<sup>[105]</sup>均基于时空图神经网络框架解决能源需求预测问题. 其中 Khodayar 等人<sup>[104]</sup>利用图神经网络融合电力需求和生产历史数据寻找电力传输系统的关键负载节点, Karimi 等人<sup>[105]</sup>则以不同电力设施的地理位置建模为图中节点并学习设置之间的关联特征用于下游预测任务.

## 6.5 神经科学

理解大脑的运作方式有助于诊断和治疗脑部疾病, 在神经科学中图神经网络通常被用来对人脑进行建模. 图

神经网络在神经科学中的应用主要可以分为脑部疾病诊断、功能性脑网络构建以及其他脑活动预测与分类。脑部疾病诊断指在给定的神经影像数据中预测特定疾病是否存在。对于脑电图(EEG)数据,通常将脑电图中的电极或通道抽象为图中的节点。对于磁共振成像(MRI),节点则通过对MRI划分的子区域抽象得到,并根据成像时间建立动态图序列。Yan等人<sup>[106]</sup>和Qiu等人<sup>[107]</sup>利用图神经网络及其变体处理由MRI得到的图数据用作脑部疾病诊断的功能性判据。功能性脑网络构建指对大脑不同功能区之间的关系与功能区本身进行建模,以更好地了解脑部活动紊乱形成的原因。Kim等人<sup>[108]</sup>和Yang等人<sup>[109]</sup>对功能区之间的连接建模为动态图,学习图中的时间与空间信息,赋予了功能区与其之间的连接更丰富的信息。其他脑类活动的预测与分类应用包括脑部年龄预测<sup>[110]</sup>和睡眠阶段分类<sup>[111]</sup>等。Stankeviciute等人<sup>[111]</sup>提出了时空图卷积神经网络模型对睡眠不同阶段中人脑电极之间的依赖关系进行建模并分类。

## 6.6 大模型

许多工作在训练大模型的场景下对图数据进行了适配,即针对图数据的预训练<sup>[112-115]</sup>、提示学习<sup>[116,117]</sup>、微调<sup>[118,119]</sup>和模型压缩<sup>[120-122]</sup>等。另一方面,也有许多工作<sup>[123]</sup>关注大语言模型(LLM)和图学习的结合,包括评价大模型解决自然语言描述图相关问题的能力,如Zhang等人<sup>[124]</sup>提出的LLM4DyG模型衡量LLM对自然语言描述的动态图相关任务的解决能力;以及利用LLM作为图数据中文字属性的增强器等方面,如Liu等人<sup>[72]</sup>提出的ST-LLM模型基于部分冻结注意力(PFA)的LLM层与时空图神经网络学习的时空特征进行对齐,用于交通与安全场景下的预测任务。同时,LLM与图结合在推荐系统<sup>[125]</sup>、知识图谱<sup>[126]</sup>和分子性质预测<sup>[127]</sup>等应用方面也有具体工作与展望被提出。

除时空图数据以外,时间序列也是研究者们希望大模型可以有效处理的时间信息数据。时间序列方面,基于朴素Transformer的TimeGPT<sup>[42]</sup>和Lag-Llama<sup>[43]</sup>成为时序领域通用大模型的代表。更具体地,时序大模型已经出现在金融场景下的股票走势预测<sup>[53,54]</sup>、金融情绪分析和投资决策;医疗场景下的行为问答、医学影像生成与评估;与交通场景下的POI分类等具体任务中。

## 7 数据集

本节我们整理了部分常用的时空数据挖掘任务的公开数据集。其中时空图数据集重点关注于应用场景下常用的公开数据集,忽略了常用来评价更宽泛的图神经网络性能的图数据集,对于被忽略的图数据集,可以参考Dwivedi等人<sup>[128]</sup>的工作。

如表8所示,最具代表性的PeMS系列数据集是由加利福尼亚交通部门通过城市中的传感器收集得到的交通信息,其中PeMS04<sup>[129]</sup>包含了3848个速度和流量监测器2018年1月1日-2月28日收集的数据,PEMS-BAY<sup>[129]</sup>包含了加州湾区325个监测器2017年1月1日-5月31日收集的数据。METR-LA<sup>[130]</sup>包含了洛杉矶周边高速公路207个监测器2012年3月1日-6月30日收集的数据。

表8 数据集表

数据类型	应用	数据集
图	动态图 交通流预测	PeMS03 <sup>[129]</sup> , PeMS04 <sup>[129]</sup> , PeMS07 <sup>[129]</sup> , PeMS08 <sup>[129]</sup> , PEMS-BAY <sup>[129]</sup> , METR-LA <sup>[130]</sup> , NYC taxi <sup>[131]</sup> , NYC bike <sup>[132]</sup>
	动态超图 生物与神经科学	ABID I <sup>[133]</sup> , HCP s1200 <sup>[134]</sup>
	动态异质图 犯罪预测	CHI_crime <sup>[135]</sup> , NYC_crime <sup>[135]</sup>
轨迹	轨迹相似度计算	AIS <sup>[136]</sup> , GeoLife <sup>[137]</sup> , T-Drive <sup>[138]</sup> , Porto <sup>[139]</sup> , Chengdu <sup>[140]</sup>
	POI推荐、TUL	Gowalla <sup>[141]</sup> , Brightkite <sup>[141]</sup> , Foursquare <sup>[142]</sup>

脑部医学领域常用的HCP s1200<sup>[134]</sup>数据集分为HCP-Rest和HCP-Task。其中HCP-Rest包含带有标签的1093张fMRI数据,其中男性样本499张,女性样本594张,HCP-Task包含其余107张用于脑活动多分类任务的测试数据集。

带有社交信息的 Gowalla<sup>[141]</sup>, Brightkite<sup>[141]</sup>, Foursquare<sup>[142]</sup>的用户轨迹数据集分别收集自奥斯汀、洛杉矶和纽约，并分别包含 7355, 6393, 13692 个用户, 5115, 20596, 25395 个位置信息和 35696, 20660, 21431 个社交关系。

AIS<sup>[136]</sup>, GeoLife<sup>[137]</sup>, T-Drive<sup>[138]</sup>, Porto<sup>[139]</sup>为基于 GPS 点阵的轨迹数据集。AIS<sup>[136]</sup>记录了 2019 年 1 月 1 日–12 月 1 日的船只在美国附近水域的航行路线。GeoLife<sup>[137]</sup>收集了 2007 年 4 月–2012 年 8 月北京 182 条人行道 2500 万个 GPS 位置点。T-Drive<sup>[138]</sup>收集了北京 2008 年 2 月 2 日–2 月 8 日 10357 辆出租车产生的 1500 万个 GPS 位置点。Porto<sup>[139]</sup>收集了葡萄牙波尔 2011 年 8 月–2012 年 4 月 442 辆出租车产生的 1700 万个 GPS 位置点。Chengdu<sup>[140]</sup>由滴滴公司收集于 2014 年 8 月成都的出租车产生的 2400 万个 GPS 位置点。

## 8 展望与总结

### 8.1 研究方向展望

基于图神经网络的复杂时空数据挖掘目前在时空融合维度和大模型方面都取得了一定进展。然而, 由于涉及时空的数据集通常规模不大, 这在一定程度上制约了这一领域的发展。本节将讨论未来基于图神经网络的复杂时空数据挖掘的几个潜在研究方向。

- 在线性。由于在时空相关的任务上, 涉及的图总是在动态变化的。这种动态更新对模型的训练和预测时间都提出了更高的要求。如果建立一个传感器动态收集数据, 模型能够在短时间内对收集的动态数据进行重新训练和预测的学习系统, 对于适应大规模变化的图数据有着重要意义。
- 可解释性。当前时空数据挖掘领域的办法是由数据驱动主导的, 而图神经网络本身的黑盒特性使得探究各特征对模型的影响程度和模型预测结果的解释性不足。以往的研究设计的模型依赖于从历史的事件中预测未来的事件, 而较少考虑到事件之间的因果性。近年来, Deng 等人<sup>[143]</sup>将学习到的事件因果信息加入到先验知识中, 并引入特征加权模块和近似约束损失模块两个鲁棒性强的学习模块并证明了这个集成了因果效应的模型对估计独立因果效应和事件预测的优势。
- 大模型。随着大模型在计算机视觉、自然语言处理和多模态等领域的广泛应用, 如何建立时空图数据挖掘领域的通用或垂直领域的基础大模型, 从而实现时空领域更大规模的预测成为一项研究热点。由于复杂图本身特性, 在基于图类型的数据上构建或应用大模型面临着许多挑战。同时, 随着不同类型的公开数据集的丰富, 在超大规模的数据集上进行多样化的学习任务将成为一大研究方向。
- 迁移性。由于时空任务涉及的应用领域和具体场景是多样化的, 而在一些应用场景上数据较难收集到。因此, 将学习到的模型与具体领域知识的结合, 从而实现模型的迁移具有广阔的研究前景。例如, ST-GFSL<sup>[11]</sup>通过建立时空图小样本学习框架实现跨城市知识转移。

### 8.2 总结

基于图神经网络的复杂时空数据挖掘是近年来的研究热点。本文将复杂时空数据挖掘任务分为时空融合架构和时空大模型进行了介绍。针对这两大部分, 本文给出了全面和细致的分类框架, 并对不同方法的关键思想进行了介绍, 对比了它们之间的优劣。在时空融合架构部分, 本文讨论了基于 3 种类型时空图, 即动态图、动态异质图和动态超图的时空融合方法。在时空大模型部分, 本文根据时间维度和空间维度划分成时间序列和图, 介绍了与时空图大模型相关不同类型的大模型。本文还总结了时空图相关的数据类型的应用领域和一些具有代表性的公开数据集。最后, 本文对基于图神经网络的复杂时空数据挖掘未来的潜在研究方向进行了展望。

### References:

- [1] Hamdi A, Shaban K, Erradi A, Mohamed A, Rumi SK, Salim FD. Spatiotemporal data mining: A survey on challenges and open problems. *Artificial Intelligence Review*, 2022, 55(2): 1441–1488. [doi: [10.1007/s10462-021-09994-y](https://doi.org/10.1007/s10462-021-09994-y)]
- [2] Wang SZ, Cao JN, Yu PS. Deep learning for spatio-temporal data mining: A survey. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2022, 34(8): 3681–3700. [doi: [10.1109/TKDE.2020.3025580](https://doi.org/10.1109/TKDE.2020.3025580)]
- [3] Jin GY, Liang YX, Fang YC, Shao ZZ, Huang JC, Zhang JB, Zheng Y. Spatio-temporal graph neural networks for predictive learning in

- urban computing: A survey. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 36(10): 5388–5408. [doi: [10.1109/TKDE.2023.3333824](https://doi.org/10.1109/TKDE.2023.3333824)]
- [4] Liu J, Shang XQ, Song LY, Tan YC. Progress of graph neural networks on complex graph mining. *Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software*, 2022, 33(10): 3582–3618 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6626.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.006626](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.006626)]
- [5] Yu B, Yin HT, Zhu ZX. Spatio-temporal graph convolutional networks: A deep learning framework for traffic forecasting. In: Proc. of the 27th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Stockholm: ijcai.org, 2018. 3634–3640. [doi: [10.24963/ijcai.2018/505](https://doi.org/10.24963/ijcai.2018/505)]
- [6] Defferrard M, Bresson X, Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering. In: Proc. of the 30th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Barcelona: Curran Associates Inc., 2016. 3844–3852.
- [7] Dauphin YN, Fan A, Auli M, Grangier D. Language modeling with gated convolutional networks. In: Proc. of the 34th Int'l Conf. on Machine Learning. Sydney: JMLR.org, 2017. 933–941.
- [8] Qian WZ, Zhang DL, Zhao Y, Zheng K, Yu JJQ. Uncertainty quantification for traffic forecasting: A unified approach. In: Proc. of the 39th IEEE Int'l Conf. on Data Engineering. Anaheim: IEEE, 2023. 992–1004. [doi: [10.1109/ICDE55515.2023.00081](https://doi.org/10.1109/ICDE55515.2023.00081)]
- [9] Dey R, Salem FM. Gate-variants of gated recurrent unit (GRU) neural networks. In: Proc. of the 60th IEEE Int'l Midwest Symp. on Circuits and Systems. Boston: IEEE, 2017. 1597–1600. [doi: [10.1109/MWSCAS.2017.8053243](https://doi.org/10.1109/MWSCAS.2017.8053243)]
- [10] Bai L, Yao LN, Li C, Wang XZ, Wang C. Adaptive graph convolutional recurrent network for traffic forecasting. In: Proc. of the 34th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2020. 17804–17815.
- [11] Lu B, Gan XY, Zhang WN, Yao HX, Fu LY, Wang XB. Spatio-temporal graph few-shot learning with cross-city knowledge transfer. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 1162–1172. [doi: [10.1145/3534678.3539281](https://doi.org/10.1145/3534678.3539281)]
- [12] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, Romero A, Liò P, Bengio Y. Graph attention networks. arXiv:1710.10903, 2018.
- [13] Guo SN, Lin YF, Feng N, Song C, Wan HY. Attention based spatial-temporal graph convolutional networks for traffic flow forecasting. In: Proc. of the 33rd AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Honolulu: AAAI, 2019. 922–929. [doi: [10.1609/aaai.v33i01.3301922](https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.3301922)]
- [14] Liu J, Li TR, Xie P, Du SD, Teng F, Yang X. Urban big data fusion based on deep learning: An overview. *Information Fusion*, 2020, 53: 123–133. [doi: [10.1016/j.inffus.2019.06.016](https://doi.org/10.1016/j.inffus.2019.06.016)]
- [15] Jiang WW, Luo JY. Graph neural network for traffic forecasting: A survey. *Expert Systems with Applications*, 2022, 207: 117921. [doi: [10.1016/j.eswa.2022.117921](https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.117921)]
- [16] Jin M, Wen QS, Liang YX, Zhang CL, Xue SQ, Wang X, Zhang J, Wang Y, Chen HF, Li XL, Pan SR, Tseng VS, Zheng Y, Chen L, Xiong H. Large models for time series and spatio-temporal data: A survey and outlook. arXiv:2310.10196, 2023.
- [17] Sankar A, Wu YH, Gou L, Zhang W, Yang H. DySAT: Deep neural representation learning on dynamic graphs via self-attention networks. In: Proc. of the 13th Int'l Conf. on Web Search and Data Mining. Houston: ACM, 2020. 519–527. [doi: [10.1145/3336191.3371845](https://doi.org/10.1145/3336191.3371845)]
- [18] Wu ZH, Pan SR, Long GD, Jiang J, Zhang CQ. Graph WaveNet for deep spatial-temporal graph modeling. In: Proc. of the 28th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Macao: ijcai.org, 2019. 1907–1913. [doi: [10.24963/ijcai.2019/264](https://doi.org/10.24963/ijcai.2019/264)]
- [19] Kipf TN, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In: Proc. of the 5th Int'l Conf. on Learning Representations. Toulon: OpenReview.net, 2017.
- [20] van den Oord A, Dieleman S, Zen HG, Simonyan K, Vinyals O, Graves A, Kalchbrenner N, Senior AW, Kavukcuoglu K. WaveNet: A generative model for raw audio. In: Proc. of the 9th ISCA Speech Synthesis Workshop. Sunnyvale: ISCA, 2016. 125.
- [21] Gal Y, Ghahramani Z. Dropout as a Bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Machine Learning. New York: JMLR.org, 2016. 1050–1059.
- [22] Li YG, Yu R, Shahabi C, Liu Y. Diffusion convolutional recurrent neural network: Data-driven traffic forecasting. In: Proc. of the 6th Int'l Conf. on Learning Representations. Vancouver: OpenReview.net, 2018.
- [23] Huang RZ, Huang CY, Liu YB, Dai GN, Kong WY. LSGCN: Long short-term traffic prediction with graph convolutional networks. In: Proc. of the 29th Int'l Joint Conf. Artificial Intelligence. Yokohama: ijcai.org, 2020. 2355–2361. [doi: [10.24963/ijcai.2020/326](https://doi.org/10.24963/ijcai.2020/326)]
- [24] Han LZ, Ma XJ, Sun LL, Du BW, Fu YJ, Lv WF, Xiong H. Continuous-time and multi-level graph representation learning for origin-destination demand prediction. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 516–524. [doi: [10.1145/3534678.3539273](https://doi.org/10.1145/3534678.3539273)]
- [25] Xu Y, Han LZ, Zhu TY, Sun LL, Du BW, Lv WF. Continuous-time and discrete-time representation learning for origin-destination demand prediction. *IEEE Trans. on Intelligent Transportation Systems*, 2024, 25(3): 2382–2393. [doi: [10.1109/TITS.2023.3323945](https://doi.org/10.1109/TITS.2023.3323945)]
- [26] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, Uszkoreit J, Jones L, Gomez AN, Kaiser L, Polosukhin I. Attention is all you need. In: Proc. of the

- 31st Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017. 6000–6010.
- [27] Wang S, Li YR, Zhang J, Meng QY, Meng LW, Gao F. PM<sub>2.5</sub>-GNN: A domain knowledge enhanced graph neural network for PM<sub>2.5</sub> forecasting. In: Proc. of the 28th Int'l Conf. on Advances in Geographic Information Systems. Seattle: ACM, 2020. 163–166. [doi: [10.1145/3397536.3422208](https://doi.org/10.1145/3397536.3422208)]
- [28] Wang CY, Lin ZY, Yang XC, Sun J, Yue MX, Shahabi C. HAGEN: Homophily-aware graph convolutional recurrent network for crime forecasting. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022. 4193–4200. [doi: [10.1609/aaai.v36i4.20338](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i4.20338)]
- [29] Zheng CP, Fan XL, Wang C, Qi JZ. GMAN: A graph multi-attention network for traffic prediction. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 1234–1241. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5477](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5477)]
- [30] Wang LJ, Adiga A, Chen JZ, Sadilek A, Venkatraman S, Marathe M. CausalGNN: Causal-based graph neural networks for spatio-temporal epidemic forecasting. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022. 12191–12199. [doi: [10.1609/aaai.v36i11.21479](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i11.21479)]
- [31] Yu S, Xia F, Li SH, Hou ML, Sheng QZ. Spatio-temporal graph learning for epidemic prediction. ACM Trans. on Intelligent Systems and Technology, 2023, 14(2): 36. [doi: [10.1145/3579815](https://doi.org/10.1145/3579815)]
- [32] Zhou Q, Gu JJ, Lu XJ, Zhuang FZ, Zhao YC, Wang QH, Zhang X. Modeling heterogeneous relations across multiple modes for potential crowd flow prediction. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 4723–4731. [doi: [10.1609/aaai.v35i5.16603](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i5.16603)]
- [33] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory. Neural Computation, 1997, 9(8): 1735–1780. [doi: [10.1162/neco.1997.9.8.1735](https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735)]
- [34] Zhang JS, An KQ, Liu GP, Wen X, Hu RB, Shao J. Understanding the semantics of GPS-based trajectories for road closure detection. In: Proc. of the 29th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Long Beach: ACM, 2023. 5554–5563. [doi: [10.1145/3580305.3599926](https://doi.org/10.1145/3580305.3599926)]
- [35] Zhang ZW, Wang HJ, Fan ZP, Song X, Shibasaki R. Missing road condition imputation using a multi-view heterogeneous graph network from GPS trajectory. IEEE Trans. on Intelligent Transportation Systems, 2023, 24(5): 4917–4931. [doi: [10.1109/TITS.2023.3243087](https://doi.org/10.1109/TITS.2023.3243087)]
- [36] Hong HT, Lin YC, Yang XQ, Yang XQ, Li Z, Fu K, Wang Z, Qie XH, Ye JP. HetETA: Heterogeneous information network embedding for estimating time of arrival. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 2444–2454. [doi: [10.1145/3394486.3403294](https://doi.org/10.1145/3394486.3403294)]
- [37] Ling S, Yu Z, Cao SS, Zhang HP, Hu SM. STHAN: Transportation demand forecasting with compound spatio-temporal relationships. ACM Trans. on Knowledge Discovery from Data, 2023, 17(4): 54. [doi: [10.1145/3565578](https://doi.org/10.1145/3565578)]
- [38] Li ZH, Huang C, Xia LH, Xu Y, Pei J. Spatial-temporal hypergraph self-supervised learning for crime prediction. In: Proc. of the 38th IEEE Int'l Conf. on Data Engineering. Kuala Lumpur: IEEE, 2022. 2984–2996. [doi: [10.1109/ICDE53745.2022.00269](https://doi.org/10.1109/ICDE53745.2022.00269)]
- [39] Wang JC, Zhang Y, Wei Y, Hu YL, Piao XL, Yin BC. Metro passenger flow prediction via dynamic hypergraph convolution networks. IEEE Trans. on Intelligent Transportation Systems, 2021, 22(12): 7891–7903. [doi: [10.1109/TITS.2021.3072743](https://doi.org/10.1109/TITS.2021.3072743)]
- [40] Yin N, Feng FL, Luo ZG, Zhang X, Wang WJ, Luo X, Chen C, Hua XS. Dynamic hypergraph convolutional network. In: Proc. of the 38th IEEE Int'l Conf. on Data Engineering. Kuala Lumpur: IEEE, 2022. 1621–1634. [doi: [10.1109/ICDE53745.2022.00167](https://doi.org/10.1109/ICDE53745.2022.00167)]
- [41] Zhao YS, Luo X, Ju W, Chen C, Hua XS, Zhang M. Dynamic hypergraph structure learning for traffic flow forecasting. In: Proc. of the 39th IEEE Int'l Conf. on Data Engineering. Anaheim: IEEE, 2023. 2303–2316. [doi: [10.1109/ICDE55515.2023.00178](https://doi.org/10.1109/ICDE55515.2023.00178)]
- [42] Garza A, Challu C, Mergenthaler-Canseco M. TimeGPT-1. arXiv:2310.03589, 2024.
- [43] Rasul K, Ashok A, Williams AR, Ghonia H, Bhagwatkar R, Khorasani A, Bayazi MJD, Adamopoulos G, Riachi R, Hassen N, Biloš M, Garg S, Schneider A, Chapados N, Drouin A, Zantedeschi V, Nevmyvaka Y, Rish I. Lag-Llama: Towards foundation models for probabilistic time series forecasting. arXiv:2310.08278, 2024.
- [44] Xue H, Salim FD. PromptCast: A new prompt-based learning paradigm for time series forecasting. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2024, 36(11): 6851–6864. [doi: [10.1109/TKDE.2023.3342137](https://doi.org/10.1109/TKDE.2023.3342137)]
- [45] Jin M, Wang SY, Ma LT, Chu ZX, Zhang JY, Shi XM, Chen PY, Liang YX, Li YF, Pan SR, Wen QS. Time-LLM: Time series forecasting by reprogramming large language models. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [46] Kim T, Kim J, Tae Y, Park C, Choi JH, Choo J. Reversible instance normalization for accurate time-series forecasting against distribution shift. In: Proc. of the 10th Int'l Conf. on Learning Representations. OpenReview.net, 2022.
- [47] Nie YQ, Nguyen NH, Sinthong P, Kalagnanam J. A time series is worth 64 words: Long-term forecasting with transformers. In: Proc. of the 11th Int'l Conf. on Learning Representations. Kigali: OpenReview.net, 2023.

- [48] Chang C, Peng WC, Chen TF. LLM4TS: Two-stage fine-tuning for time-series forecasting with pre-trained LLMs. arXiv: 2308.08469V1, 2023.
- [49] Zhou T, Niu PS, Wang X, Sun L, Jin R. One fits all: Power general time series analysis by pretrained LM. In: Proc. of the 37th Conf. on Neural Information Processing Systems. New Orleans: NeurIPS, 2024. 36.
- [50] Sun CX, Li HY, Li YL, Hong SD. TEST: Text prototype aligned embedding to activate LLM's ability for time series. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [51] Cao DF, Jia FR, Arik SÖ, Pfister T, Zheng YX, Ye W, Liu Y. TEMPO: Prompt-based generative pre-trained transformer for time series forecasting. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [52] Gruber N, Finzi M, Qiu SK, Wilson AG. Large language models are zero-shot time series forecasters. In: Proc. of the 37th Conf. on Neural Information Processing Systems. New Orleans: NeurIPS, 2023. 36.
- [53] Xie QQ, Han WG, Lai YZ, Peng M, Huang JM. The wall street neophyte: A zero-shot analysis of ChatGPT over multimodal stock movement prediction challenges. arXiv:2304.05351, 2023.
- [54] Yu XL, Chen Z, Ling Y, Dong SJ, Liu ZY, Lu YB. Temporal data meets LLM—Explainable financial time series forecasting. arXiv:2306.11025, 2023.
- [55] Zhang BY, Yang HY, Liu XY. Instruct-FinGPT: Financial sentiment analysis by instruction tuning of general-purpose large language models. arXiv:2306.12659, 2023.
- [56] Lopez-Lira A, Tang YH. Can ChatGPT forecast stock price movements? Return predictability and large language models. arXiv:2304.07619, 2024.
- [57] Liu X, McDuff D, Kovacs G, Galatzer-Levy I, Sunshine J, Zhan JN, Poh MZ, Liao S, Di Achille P, Patel S. Large language models are few-shot health learners. arXiv:2305.15525, 2023.
- [58] Li J, Liu C, Cheng SB, Arcucci R, Hong SD. Frozen language model helps ECG zero-shot learning. In: Proc. of the 2024 Medical Imaging with Deep Learning. Nashville: PMLR, 2024. 402–415.
- [59] Xue H, Voutharoja BP, Salim FD. Leveraging language foundation models for human mobility forecasting. In: Proc. of the 30th Int'l Conf. on Advances in Geographic Information Systems. Seattle: ACM, 2022. 90. [doi: [10.1145/3557915.356102](https://doi.org/10.1145/3557915.356102)]
- [60] Kaplan J, McCandlish S, Henighan T, Brown TB, Chess B, Child R, Gray S, Radford A, Wu J, Amodei D. Scaling laws for neural language models. arXiv:2001.08361, 2020.
- [61] Zhang ZW, Li HY, Zhang ZY, Qin YJ, Wang X, Zhu WW. Graph meets LLMs: Towards large graph models. In: Proc. of the 2023 NeurIPS New Frontiers in Graph Learning Workshop. NeurIPS GLFrontiers, 2023. 1–12.
- [62] Chen ZK, Mao HT, Li H, Jin W, Wen HZ, Wei XC, Wang SQ, Yin DW, Fan WQ, Liu H, Tang JL. Exploring the potential of large language models (LLMs) in learning on graphs. ACM SIGKDD Explorations Newsletter, 2024, 25(2): 42–61. [doi: [10.1145/3655103.3655110](https://doi.org/10.1145/3655103.3655110)]
- [63] He XX, Bresson X, Laurent T, Perold A, LeCun Y, Hooi B. Harnessing explanations: LLM-to-LM interpreter for enhanced text-attributed graph representation learning. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [64] Brown TB, Mann B, Ryder N, et al. Language models are few-shot learners. In: Proc. of the 34th Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: NeurIPS, 2020. 1877–1901.
- [65] Sun TX, Shao YF, Qian H, Huang XJ, Qiu XP. Black-box tuning for language-model-as-a-service. In: Proc. of the 39th Int'l Conf. on Machine Learning. Baltimore: PMLR, 2022. 20841–20855.
- [66] He PC, Liu XD, Gao JF, Chen WZ. Deberta: Decoding-enhanced bert with disentangled attention. In: Proc. of the 9th Int'l Conf. on Learning Representations. OpenReview.net, 2021.
- [67] Ren XB, Wei W, Xia LH, Su LX, Cheng SQ, Wang JF, Yin DW, Huang C. Representation learning with large language models for recommendation. In: Proc. of the 2024 ACM Web Conf. Singapore: ACM, 2024. 3464–3475. [doi: [10.1145/3589334.3645458](https://doi.org/10.1145/3589334.3645458)]
- [68] Koren Y, Rendle S, Bell R. Advances in collaborative filtering. In: Ricci F, Rokach L, Shapira B, eds. Recommender Systems Handbook. New York: Springer, 2022. 91–142.
- [69] Tang JB, Yang YH, Wei W, Shi L, Su LX, Cheng SQ, Yin DW, Huang C. GraphGPT: Graph instruction tuning for large language models. In: Proc. of the 47th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Washington: ACM, 2024. 491–500. [doi: [10.1145/3626772.3657775](https://doi.org/10.1145/3626772.3657775)]
- [70] Yun S, Jeong M, Kim R, Kang J, Kim HJ. Graph transformer networks. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 1073.
- [71] Wei J, Wang XZ, Schuurmans D, Bosma M, Ichter B, Xia F, Chi EH, Le QV, Zhou D. Chain-of-thought prompting elicits reasoning in large language models. In: Proc. of the 36th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. New Orleans: Curran Associates

- Inc., 2022. 1800.
- [72] Liu CX, Yang S, Xu QX, Li ZS, Long C, Li ZY, Zhao R. Spatial-temporal large language model for traffic prediction. In: Proc. of the 25th IEEE Int'l Conf. on Mobile Data Management. Brussels: IEEE, 2024. 31–40. [doi: [10.1109/MDM61037.2024.00025](https://doi.org/10.1109/MDM61037.2024.00025)]
- [73] Li ZH, Xia LH, Tang JB, Xu Y, Shi L, Xia L, Yin DW, Huang C. UrbanGPT: Spatio-temporal large language models. In: Proc. of the 30th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Barcelona: ACM, 2024. 5351–5362. [doi: [10.1145/3637528.3671578](https://doi.org/10.1145/3637528.3671578)]
- [74] Huang L, Yu WJ, Ma WT, Zhong WH, Feng ZY, Wang HT, Chen QL, Peng WH, Feng XC, Qin B, Liu T. A survey on hallucination in large language models: Principles, taxonomy, challenges, and open questions. arXiv:2311.05232, 2023.
- [75] Ye RS, Zhang CQ, Wang RH, Xu SY, Zhang YF. Natural language is all a graph needs. arXiv:2308.07134v2, 2023.
- [76] Duan KY, Liu Q, Chua TS, Yan SC, Ooi WT, Xie QZ, He JX. SimTeG: A frustratingly simple approach improves textual graph learning. arXiv:2308.02565, 2023.
- [77] Liu H, Feng JR, Kong LC, Liang NY, Tao DC, Chen YX, Zhang MH. One for all: Towards training one graph model for all classification tasks. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [78] Tian YJ, Song H, Wang ZC, Wang HZ, Hu ZQ, Wang F, Chawla NV, Xu PP. Graph neural prompting with large language models. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 19080–19088. [doi: [10.1609/aaai.v38i17.29875](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i17.29875)]
- [79] Luo LH, Li YF, Haffari G, Pan SR. Reasoning on graphs: Faithful and interpretable large language model reasoning. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna: OpenReview.net, 2024.
- [80] Xu WJ, Liu B, Peng M, Jia X, Peng M. Pre-trained language model with prompts for temporal knowledge graph completion. In: Proc. of the 2023 Findings of the Association for Computational Linguistics. Toronto: Association for Computational Linguistics, 2023. 7790–7803. [doi: [10.18653/v1/2023.findings-acl.493](https://doi.org/10.18653/v1/2023.findings-acl.493)]
- [81] Zhang MM, Sun MW, Wang P, Fan S, Mo YH, Xu XX, Liu H, Yang C, Shi C. GraphTranslator: Aligning graph model to large language model for open-ended tasks. In: Proc. of the 2024 ACM Web Conf. Singapore: ACM, 2024. 1003–1014. [doi: [10.1145/3589334.3645682](https://doi.org/10.1145/3589334.3645682)]
- [82] Ren YL, Chen Y, Liu S, Wang BY, Yu HY, Cui ZY. TPLLM: A traffic prediction framework based on pretrained large language models. arXiv:2403.02221, 2024.
- [83] Radford A, Wu J, Child R, Luan D, Amodei D, Sutskever I. Language models are unsupervised multitask learners. OpenAI Blog, 2019, 1(8): 9.
- [84] Hu EJ, Shen YL, Wallis P, Allen-Zhu Z, Li YZ, Wang SA, Wang L, Chen WZ. LoRA: Low-rank adaptation of large language models. In: Proc. of the 10th Int'l Conf. on Learning Representations. OpenReview.net, 2022.
- [85] Jin M, Koh HY, Wen QS, Zambon D, Alippi C, Webb GI, King I, Pan SR. A survey on graph neural networks for time series: Forecasting, classification, imputation, and anomaly detection. arXiv:2307.03759, 2024.
- [86] Song C, Lin YF, Guo SN, Wan HY. Spatial-temporal synchronous graph convolutional networks: A new framework for spatial-temporal network data forecasting. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 914–921. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5438](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5438)]
- [87] Lan SY, Ma YT, Huang WK, Wang WW, Yang HY, Li P. DSTAGNN: Dynamic spatial-temporal aware graph neural network for traffic flow forecasting. In: Proc. of the 39th Int'l Conf. on Machine Learning. Baltimore: PMLR, 2022. 11906–11917.
- [88] Fang Z, Long QQ, Song GJ, Xie KQ. Spatial-temporal graph ODE networks for traffic flow forecasting. In: Proc. of the 27th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Singapore: ACM, 2021. 364–373. [doi: [10.1145/3447548.3467430](https://doi.org/10.1145/3447548.3467430)]
- [89] Luo X, Yuan JY, Huang ZJ, Jiang HY, Qin YF, Ju W, Zhang M, Sun YZ. HOPE: High-order graph ODE for modeling interacting dynamics. In: Proc. of the 40th Int'l Conf. on Machine Learning. Honolulu: PMLR, 2023. 23124–23139.
- [90] Fang XM, Huang JZ, Wang F, Zeng LK, Liang HJ, Wang HF. ConSTGAT: Contextual spatial-temporal graph attention network for travel time estimation at baidu maps. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 2697–2705. [doi: [10.1145/3394486.3403320](https://doi.org/10.1145/3394486.3403320)]
- [91] Fu K, Meng FL, Ye JP, Wang Z. CompactETA: A fast inference system for travel time prediction. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 3337–3345. [doi: [10.1145/3394486.3403386](https://doi.org/10.1145/3394486.3403386)]
- [92] Zhou ZY, Wang Y, Xie XK, Chen LL, Liu HC. RiskOracle: A minute-level citywide traffic accident forecasting framework. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 1258–1265. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5480](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5480)]
- [93] Wang ZN, Jiang RH, Xue H, Salim FD, Xue H, Salim FD, Song X, Shibasaki R. Event-aware multimodal mobility nowcasting. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022. 4228–4236. [doi: [10.1609/aaai.v36i4.20342](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i4.20342)]
- [94] Shen GJ, Zhou WF, Zhang WY, Liu NL, Liu Z, Kong XJ. Bidirectional spatial-temporal traffic data imputation via graph attention

- recurrent neural network. *Neurocomputing*, 2023, 531: 151–162. [doi: [10.1016/j.neucom.2023.02.017](https://doi.org/10.1016/j.neucom.2023.02.017)]
- [95] Chen YK, Li ZH, Yang C, Wang XZ, Long GD, Xu GD. Adaptive graph recurrent network for multivariate time series imputation. In: Proc. of the 29th Int'l Conf. on Neural Information Processing. Singapore: Springer, 2022. 64–73. [doi: [10.1007/978-981-99-1642-9\\_6](https://doi.org/10.1007/978-981-99-1642-9_6)]
- [96] Kong XJ, Zhou WF, Shen GJ, Zhang WY, Liu NL, Yang Y. Dynamic graph convolutional recurrent imputation network for spatiotemporal traffic missing data. *Knowledge-based Systems*, 2023, 261: 110188. [doi: [10.1016/j.knosys.2022.110188](https://doi.org/10.1016/j.knosys.2022.110188)]
- [97] Wu XS, Xu MY, Fang J, Wu XW. A multi-attention tensor completion network for spatiotemporal traffic data imputation. *IEEE Internet of Things Journal*, 2022, 9(20): 20203–20213. [doi: [10.1109/JIOT.2022.3171780](https://doi.org/10.1109/JIOT.2022.3171780)]
- [98] Sun MJ, Zhou PY, Tian H, Liao Y, Xie HY. Spatial-temporal attention network for crime prediction with adaptive graph learning. In: Proc. of the 31st Int'l Conf. on Artificial Neural Networks. Bristol: Springer, 2022. 656–669. [doi: [10.1007/978-3-031-15931-2\\_54](https://doi.org/10.1007/978-3-031-15931-2_54)]
- [99] Xia LH, Huang C, Xu Y, Dai P, Bo LF, Zhang XY, Chen TY. Spatial-temporal sequential hypergraph network for crime prediction with dynamic multiplex relation learning. In: Proc. of the 30th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Montreal: ijcai.org, 2021. 1631–1637. [doi: [10.24963/ijcai.2021/225](https://doi.org/10.24963/ijcai.2021/225)]
- [100] Panagopoulos G, Nikolentzos G, Vazirgiannis M. Transfer graph neural networks for pandemic forecasting. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 4838–4845. [doi: [10.1609/aaai.v35i6.16616](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i6.16616)]
- [101] Jin RD, Xia TQ, Liu X, Murata T, Kim KS. Predicting emergency medical service demand with bipartite graph convolutional networks. *IEEE Access*, 2021, 9: 9903–9915. [doi: [10.1109/ACCESS.2021.3050607](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3050607)]
- [102] Liang YX, Xia YT, Ke SY, Wang YW, Wen QS, Zhang JB, Zheng Y, Zimmermann R. AirFormer: Predicting nationwide air quality in China with Transformers. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 14329–14337. [doi: [10.1609/aaai.v37i12.26676](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i12.26676)]
- [103] Chen SY, Zwart JA, Jia XW. Physics-guided graph meta learning for predicting water temperature and streamflow in stream networks. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 2752–2761. [doi: [10.1145/3534678.3539115](https://doi.org/10.1145/3534678.3539115)]
- [104] Khodayar M, Liu GY, Wang JH, Kaynak O, Khodayar ME. Spatiotemporal behind-the-meter load and PV power forecasting via deep graph dictionary learning. *IEEE Trans. on Neural Networks and Learning Systems*, 2021, 32(10): 4713–4727. [doi: [10.1109/TNNLS.2020.3042434](https://doi.org/10.1109/TNNLS.2020.3042434)]
- [105] Karimi AM, Wu YH, Koyuturk M, French RH. Spatiotemporal graph neural network for performance prediction of photovoltaic power systems. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 15323–15330. [doi: [10.1609/aaai.v35i17.17799](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i17.17799)]
- [106] Yan JD, Chen YZ, Xiao ZX, Zhang S, Jiang MX, Wang TQ, Zhang T, Lv JL, Becker B, Zhang R, Zhu DJ, Han JW, Yao DZ, Kendrick KM, Liu TM, Jiang X. Modeling spatio-temporal patterns of holistic functional brain networks via multi-head guided attention graph neural networks (Multi-Head GAGNNs). *Medical Image Analysis*, 2022, 80: 102518. [doi: [10.1016/j.media.2022.102518](https://doi.org/10.1016/j.media.2022.102518)]
- [107] Qiu WY, Ma L, Jiang TZ, Zhang Y. Unrevealing reliable cortical parcellation of individual brains using resting-state functional magnetic resonance imaging and masked graph convolutions. *Frontiers in Neuroscience*, 2022, 16: 838347. [doi: [10.3389/fnins.2022.838347](https://doi.org/10.3389/fnins.2022.838347)]
- [108] Kim BH, Ye JC, Kim JJ. Learning dynamic graph representation of brain connectome with spatio-temporal attention. In: Proc. of the 35th Conf. on Neural Information Processing Systems. NeurIPS, 2021. 4314–4327.
- [109] Yang HZ, Li XX, Wu YF, Li SY, Lu S, Duncan JS, Gee JC, Gu S. Interpretable multimodality embedding of cerebral cortex using attention graph network for identifying bipolar disorder. In: Proc. of the 22nd Int'l Conf. on Medical Image Computing and Computer-assisted Intervention. Shenzhen: Springer, 2019. 799–807. [doi: [10.1007/978-3-030-32248-9\\_89](https://doi.org/10.1007/978-3-030-32248-9_89)]
- [110] Li ML, Chen HB, Cheng ZX. An attention-guided spatiotemporal graph convolutional network for sleep stage classification. *Life*, 2022, 12(5): 622. [doi: [10.3390/life12050622](https://doi.org/10.3390/life12050622)]
- [111] Stankevičiūtė K, Azevedo T, Campbell A, Bethlehem R, Liò P. Population graph GNNs for brain age prediction. In: Proc. of the 2020 ICML Workshop on Graph Representation Learning and Beyond. 2020. 202.
- [112] Liu YX, Zheng YZ, Zhang DK, Lee VCS, Pan SR. Beyond smoothing: Unsupervised graph representation learning with edge heterophily discriminating. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 4516–4524. [doi: [10.1609/aaai.v37i4.25573](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i4.25573)]
- [113] Duan JC, Wang SW, Zhang P, Zhu E, Hu JT, Jin H, Liu Y, Dong ZB. Graph anomaly detection via multi-scale contrastive learning networks with augmented view. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 7459–7467. [doi: [10.1609/aaai.v37i6.25907](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i6.25907)]
- [114] Chen JL, Kou G. Attribute and structure preserving graph contrastive learning. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 7024–7032. [doi: [10.1609/aaai.v37i6.25858](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i6.25858)]

- [115] Tian YJ, Dong KW, Zhang CH, Zhang CX, Chawla NV. Heterogeneous graph masked autoencoders. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 9997–10005. [doi: [10.1609/aaai.v37i8.26192](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i8.26192)]
- [116] Sun MC, Zhou KX, He X, Wang Y, Wang X. GPPT: Graph pre-training and prompt tuning to generalize graph neural networks. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 1717–1727. [doi: [10.1145/3534678.3539249](https://doi.org/10.1145/3534678.3539249)]
- [117] Sun XG, Cheng H, Li J, Liu B, Guan JH. All in one: Multi-task prompting for graph neural networks. In: Proc. of the 29th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Long Beach: ACM, 2023. 2120–2131. [doi: [10.1145/3580305.3599256](https://doi.org/10.1145/3580305.3599256)]
- [118] Li SR, Han XT, Bai J. AdapterGNN: Efficient delta tuning improves generalization ability in graph neural networks. arXiv:2304.09595v1, 2023.
- [119] Gui AC, Ye JQ, Xiao H. G-Adapter: Towards structure-aware parameter-efficient transfer learning for graph Transformer networks. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 12226–12234. [doi: [10.1609/aaai.v38i11.29112](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i11.29112)]
- [120] Tian YJ, Pei SC, Zhang XL, Zhang CX, Chawla NV. Knowledge distillation on graphs: A survey. arXiv:2302.00219, 2023.
- [121] Zhang SC, Sohrabizadeh A, Wan C, Huang ZJ, Hu ZN, Wang YW, Lin YY, Cong J, Sun YZ. A survey on graph neural network acceleration: Algorithms, systems, and customized hardware. arXiv:2306.14052, 2023.
- [122] Wan BR, Zhao JT, Wu C. Adaptive message quantization and parallelization for distributed full-graph GNN training. In: Proc. of the 6th MLSys Conf. Miami Beach: mlsys.org, 2023. 5.
- [123] Jin BW, Liu G, Han C, Jiang M, Ji H, Han JW. Large language models on graphs: A comprehensive survey. arXiv:2312.02783, 2024.
- [124] Zhang ZY, Wang X, Zhang ZW, Li HY, Qin YJ, Zhu WW. LLM4DyG: Can large language models solve spatial-temporal problems on dynamic graphs? In: Proc. of the 30th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Barcelona: ACM, 2024. 4350–4361. [doi: [10.1145/3637528.3671709](https://doi.org/10.1145/3637528.3671709)]
- [125] Wu LK, Zheng Z, Qiu ZP, Wang H, Gu HC, Shen TJ, Qin C, Zhu C, Zhu HS, Liu Q, Xiong H, Chen EH. A survey on large language models for recommendation. World Wide Web, 2024, 27(5): 60. [doi: [10.1007/s11280-024-01291-2](https://doi.org/10.1007/s11280-024-01291-2)]
- [126] Pan SR, Luo LH, Wang YF, Chen C, Wang JP, Wu XD. Unifying large language models and knowledge graphs: A roadmap. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2024, 36(7): 3580–3599. [doi: [10.1109/TKDE.2024.3352100](https://doi.org/10.1109/TKDE.2024.3352100)]
- [127] Qian C, Tang HY, Yang ZR, Liang H, Liu Y. Can large language models empower molecular property prediction? arXiv:2307.07443, 2023.
- [128] Dwivedi VP, Joshi CK, Luu AT, Laurent T, Bengio Y, Bresson X. Benchmarking graph neural networks. The Journal of Machine Learning Research, 2024, 24(43): 1–48.
- [129] California Department of Transportation. Performance measurement system (PeMS). 2001. <https://pems.dot.ca.gov/>
- [130] Li Y. DCRNN: Diffusion convolutional recurrent neural network. 2018. <https://github.com/liyaguang/DCRNN>
- [131] New York City Taxi & Limousine Commission. TLC trip record data. 2015. <https://www1.nyc.gov/site/tlc/about/tlc-trip-record-data.page>
- [132] Citi Bike. Citi Bike trip data. 2013. <https://s3.amazonaws.com/tripdata/index.html>
- [133] ABIDE (Autism Brain Imaging Data Exchange). ABIDE I dataset. 2012. [http://fcon\\_1000.projects.nitrc.org/indi/abide/abide\\_I.html](http://fcon_1000.projects.nitrc.org/indi/abide/abide_I.html)
- [134] Human Connectome Project. HCP young adult: 1200 subjects data release. 2017. <https://www.humanconnectome.org/study/hcp-young-adult/document/1200-subjects-data-release>
- [135] Akaxlh. ST-SHN: Spatio-temporal self-hierarchical networks. 2021. <https://github.com/akaxlh/ST-SHN>
- [136] Marine Cadastre. Automatic identification system (AIS) data. 2009. <https://marinecadastre.gov/ais/>
- [137] Zheng Y, Wang LH, Zhang RC, Xie X, Ma WY. GeoLife: Managing and understanding your past life over maps. In: Proc. of the 9th Int'l Conf. on Mobile Data Management. Beijing: IEEE, 2008. 211–212. [doi: [10.1109/MDM.2008.20](https://doi.org/10.1109/MDM.2008.20)]
- [138] Microsoft Research. T-Drive trajectory data sample. 2011. <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/t-drive-trajectory-data-sample/>
- [139] Huang XC, Yin YF, Lim S, Wang GF, Hu B, Varadarajan J, Zheng SL, Bulusu A, Zimmermann R. Grab-posisi: An extensive real-life GPS trajectory dataset in Southeast Asia. In: Proc. of the 3rd ACM SIGSPATIAL Int'l Workshop on Prediction of Human Mobility. Chicago: ACM, 2019. 1–10. [doi: [10.1145/3356995.3364536](https://doi.org/10.1145/3356995.3364536)]
- [140] Didi. Chengdu dataset. 2017. <https://github.com/Whale2021/Dataset>
- [141] Cho E, Myers SA, Leskovec J. Friendship and mobility: User movement in location-based social networks. In: Proc. of the 17th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. San Diego: ACM, 2011. 1082–1090. [doi: [10.1145/2020408.2020579](https://doi.org/10.1145/2020408.2020579)]
- [142] Feng SS, Cong G, An B, Chee YM. POI2Vec: Geographical latent representation for predicting future visitors. In: Proc. of the 31st AAAI Conf. on Artificial Intelligence. San Francisco: AAAI, 2018. 102–108. [doi: [10.1609/aaai.v31i1.10500](https://doi.org/10.1609/aaai.v31i1.10500)]

- [143] Deng S, Rangwala H, Ning Y. Robust event forecasting with spatiotemporal confounder learning. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: Association for Computing Machinery, 2022. 294–304.

#### 附中文参考文献:

- [4] 刘杰, 尚学群, 宋凌云, 谭亚聪. 图神经网络在复杂图挖掘上的研究进展. 软件学报, 2022, 33(10): 3582–3618. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6626.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006626]



邹慧琪(2001—), 女, 博士生, 主要研究领域为时空数据挖掘, 图神经网络.



韩笑琳(1991—), 女, 博士, 副教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为时空数据挖掘, 图神经网络, 基于金融大数据的风险预测.



史彬泽(2000—), 男, 硕士生, 主要研究领域为图表示学习, 图神经网络, 知识图谱.



尚学群(1973—), 女, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 高级会员, 主要研究领域为数据挖掘, 机器学习, 生物信息学, 大数据.



宋凌云(1988—), 男, 博士, 副教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为计算机视觉, 基于金融大数据分析的风险预测, 基于教育大数据的认知诊断.