

# 深度图表示学习： 方法、应用与挑战

张旭龙<sup>1</sup>, 瞿晓阳<sup>1</sup>, 肖春光<sup>2</sup>, 王健宗<sup>1</sup>

1. 平安科技（深圳）有限公司，广东 深圳 518063；

2. 深圳市宝安区教育事业发展中心，广东 深圳 518101

## 摘要

图表示学习是近年来的一个重要研究领域，旨在生成能够准确捕捉图结构和特征的向量表示。这些向量在节点分类、链接预测和异常检测等下游任务中发挥着至关重要的作用。全面综述了图表示学习方法，将其分为传统的图嵌入方法和基于图神经网络（GNN）的方法；讨论了这些类别中的技术，包括矩阵分解、随机游走、图卷积网络和图Transformer；此外，深入探讨了GNN在异构图嵌入中的具体应用，涵盖了静态和动态方面，包括节点分类、链接预测和推荐系统等；最后分析了图表示学习的挑战和未来发展方向，包括可扩展性和动态性等。

## 关键词

图表示学习；图神经网络；图嵌入；异构图；深度学习

中图分类号：TP391

文献标志码：A

doi:10.11959/j.issn.2096-0271.2025066

## *Deep graph representation learning: methods, applications, and challenges*

ZHANG Xulong<sup>1</sup>, QU Xiaoyang<sup>1</sup>, XIAO Chunguang<sup>2</sup>, WANG Jianzong<sup>1</sup>

1. Ping An Technology (Shenzhen) Co., Ltd., Shenzhen 518063, China

2. Shenzhen Baoan District Education Information Center, Shenzhen 518101, China

## *Abstract*

Graph representation learning has emerged as a crucial research area in recent years, aiming to generate vector representations that accurately capture the structure and features of graphs. These vectors play a vital role in downstream tasks such as node classification, link prediction, and anomaly detection. This paper presents a comprehensive survey of graph representation learning methods, categorizing them into traditional graph embedding methods and Graph Neural Network (GNN) based approaches. We discuss various techniques within these categories, including matrix factorization, random walks, graph convolutional networks, and graph Transformers. Furthermore, we delve into the specific applications of GNN in heterogeneous graph embedding, encompassing both static and dynamic aspects. This paper also explores the challenges and future directions of graph representation learning, including scalability and dynamics.

## *Key words*

graph representation learning, graph neural networks, graph embedding, heterogeneous graph, deep learning

# 1 引言

## 1.1 研究背景及意义

图是一种有序对  $G=(V,E)$ ，其中  $V$  是节点集， $E$  是边集。图作为一种表达各种结构化和复杂数据的强大工具，近年来得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。从社交网络、交通网络到信息系统、知识图谱、蛋白质相互作用网络和物理交互网络，图结构都能自然地表达这些数据的内在关系。作为一种通用的数据组织形式，图结构能够刻画各种非欧几里得结构，由于其灵活的适应性，在众多学科和领域中发挥着至关重要的作用。例如，在将社交网络编码为图时<sup>[4]</sup>，图中的节点表示单个用户，边表示两个个体之间的关系，如朋友关系。在生物学领域<sup>[5]</sup>，节点可以表示蛋白质，边可以表示各种蛋白质之间的生物相互作用，如蛋白质之间的动态相互作用。因此，通过分析和挖掘图结构数据，我们可以理解隐藏在数据背后的深层含义，进一步发现有价值的知识。

在过去的10年中，人们开发了大量的机器学习算法<sup>[6]</sup>来学习图结构数据。其中，传统的图核方法通常将图分解成不同的子结构，然后使用核函数来度量所有子结构对之间的相似性。虽然图核可以提供建模图拓扑的视角，但这些方法通常基于给定的人工标准生成子结构或特征表示。这些规则启发式较强，容易出现高计算复杂度的问题，因此可扩展性较弱，性能欠佳。

尽管深度学习在计算机视觉、自然语言处理、生物医学成像、生物信息学等多个领域取得了进展，但它仍然缺乏关系和因果推理、智力抽象以及其他各种人类能力<sup>[7]</sup>。以图的形式构建深度神经网络的计算和表示是解决这些问题的方法之一。近

年来，图嵌入算法不断涌现<sup>[8-11]</sup>，这些算法试图将图的结构信息（通常是一个高维稀疏矩阵）进行编码并映射到一个低维稠密向量嵌入中，以尽可能多地保留嵌入空间中的拓扑信息和属性信息，从而使学习到的图嵌入能够自然地融入传统的机器学习算法中。与以往在预处理阶段使用特征工程提取图结构特征的工作相比，目前的图嵌入算法<sup>[12-13]</sup>以数据驱动的方式利用机器学习算法对图的结构信息进行编码。

受神经网络近期取得显著成功的启发，一系列深度学习方法被应用于图表示学习，并在各种图分析任务中取得了优异的表现。这些方法能够通过多层非线性变换提取图数据背后丰富的信息，并学习图的有效表示。这些类型的方法被称为图神经网络（graph neural network, GNN）<sup>[14-17]</sup>。

GNN在采用不同学习范式（监督、半监督、自监督和无监督）的各个领域的基于图的数据集上都取得了成功，引起了学术界和工业界的广泛关注。然而，现有的GNN综述通常集中在单一的学习范式或通用GNN上，缺少对GNN的整体介绍，例如监督学习、半监督学习、自监督学习和无监督学习，以及图神经网络的核心方法和图表示学习的具体应用和相关数据以及开源代码等工具。本文旨在为读者提供一个关于图表示学习的全面、深入、系统的综述，涵盖了从传统方法到深度学习方法、从理论到应用、从现状到未来的各个方面，以促进读者对图表示学习的理解和研究。

## 1.2 图表示学习概述

图是表示实体及其之间关系的强大工具。形式上，图  $G$  定义为一个元组  $G=(V,E)$ ，其中  $v=\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$  是  $n$  个节点/顶点

的集合,  $E=\{e_0, e_1, \dots, e_m\} \subseteq V \times V$  是  $G$  的  $m$  个边/链接的集合, 其中一条边连接两个顶点。图可以是有向的或无向的。在有向图中, 边  $e_k=(v_i, v_j)$  有一个方向,  $v_i$  是起始顶点,  $v_j$  是结束顶点。图可以用它们的邻接矩阵、度矩阵和拉普拉斯矩阵来表示, 这些矩阵定义如下。

**定义 1: (邻接矩阵)。**具有  $n$  个顶点的图  $G$  的邻接矩阵  $A$  是一个  $n \times n$  矩阵, 如果节点对  $v_i$  和  $v_j$  之间存在边, 则矩阵中的元素  $a_{ij}$  等于 1, 否则为 0。邻接矩阵可以是加权的, 其中元素的值表示它所代表的边的权重 (例如重要性)。

**定义 2: (度矩阵)。**具有  $n$  个顶点的图  $G$  的度矩阵  $D$  是一个  $n \times n$  对角矩阵, 其中元素  $d_{ii}$  是节点  $v_i$  的度,  $i=\{1, \dots, n\}$ , 所有其他  $d_{ij}=0$ 。在无向图中, 边没有方向, 节点的度是指连接到该节点的边的数量。对于有向图, 节点的度可以是该节点的入边或出边的数量, 分别产生入度矩阵或出度矩阵。

**定义 3: (拉普拉斯矩阵)。**具有  $n$  个顶点的图  $G$  的拉普拉斯矩阵  $L$  是一个  $n \times n$  矩阵, 定义为  $L=D-A$ , 其中  $D$  和  $A$  分别是  $G$  的度矩阵和邻接矩阵。

为了在下游机器学习和数据挖掘应用中使用图, 需要使用数值特征来表示图及其实体 (如节点和边)。表示图的一种方法是它的邻接矩阵。然而, 邻接矩阵表示非常大的图时是很耗费内存的, 因为它的尺寸是  $|V| \times |V|$ 。我们可以使用它们的特征来表示图及其元素。特别是, 图中的节点可以用一组特征来表示, 这些特征可以提升特定应用中表示的性能。例如, 在异常检测应用中, 具有最密集邻域的节点有可能是异常的<sup>[18]</sup>。如果在节点表示中包含节点的入度和出度, 则更有可能高精度检测到异常节点, 因为异常节点通常具有更大的

度。然而, 可能很难找到在不同应用中都很重要并且还可以表示图的整个结构的特征。此外, 手动提取这些特征非常耗时。因此, 人们提出了图嵌入方法, 研究自动生成图的表示向量的问题。这些方法将图表示学习制定为机器学习任务, 并利用图的结构和属性作为输入数据生成嵌入向量。图嵌入技术包括节点嵌入、边嵌入和子图嵌入技术, 其定义如下。

**定义 4: (节点嵌入)。**设  $G=(V, E)$  为一个图, 其中  $V$  和  $E$  分别是图的节点集和边集。节点嵌入学习一个映射函数  $f(): V \rightarrow R^d$ , 将每个图的节点  $v_i$  编码成一个  $d$  维的低维向量, 使  $d \ll |V|$ , 并且图中节点之间的相似性在嵌入空间中得以保留。如图 1 所示, 使用一种嵌入方法将图中的节点  $a$  映射到一个 4 维向量。

图 1 左侧包含 6 个节点  $\{a, b, c, d, e, f\}$  和 8 条边。图嵌入方法将图中的每个节点映射到维度为  $d$  的嵌入向量。右侧节点  $a$  被嵌入维度为 4 的嵌入向量  $Z_a$  中, 并赋予了具体的值。

**定义 5: (边嵌入)。**设  $G=(V, E)$  为一个图, 其中  $V$  和  $E$  分别是图的节点集和边集。边嵌入将  $G$  的每条边转换为  $d$  维的低维向量, 使  $d \ll |V|$ , 并且图中边之间的相似性在嵌入空间中得以保留。

虽然边嵌入可以直接从图中学习, 但最常见的是从节点嵌入中导出<sup>[19]</sup>。例如, 设  $(v_i, v_j) \in E$  是图  $G$  中两个节点  $v_i$  和  $v_j$  之间

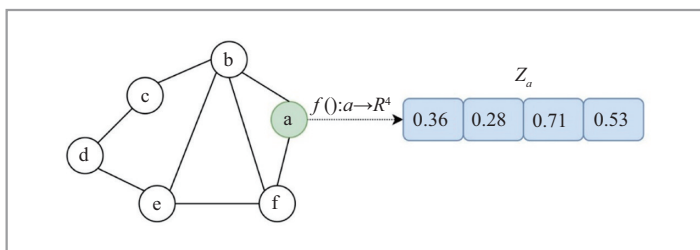


图1 图节点嵌入示例

的边,  $\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j$  是节点  $v_i, v_j$  的嵌入向量。可以通过对两个节点嵌入向量  $\mathbf{z}_i$  和  $\mathbf{z}_j$  应用二元运算 (例如 Hadamard 积、均值、加权-L1 和加权-L2) 来获得边  $(v_i, v_j)$  的嵌入向量。

**定义 6: (子图嵌入)。** 设  $G=(V, E)$  为一个图。机器学习中的子图嵌入技术将  $G$  的子图转换为  $d$  维的低维向量, 使  $d \ll |V|$ , 并且子图之间的相似性在嵌入空间中得以保留。

子图嵌入向量通常是使用聚合器 (如均值运算符) 聚合子图中节点的嵌入来创建的。生成的嵌入向量可用于不同的应用, 包括节点分类、链接预测和图分类。节点分类任务为测试数据集中的节点分配标签。在不同领域有许多应用, 例如, 在社交网络中, 可以根据一个人的朋友网络预测他的政治派别。在节点分类中, 训练数据集中的每个实例都是节点嵌入向量, 实例的标签是节点标签。可以在训练数据集上训练不同的常规分类方法 (如逻辑回归和随机森林), 并为测试数据生成节点分类分数。类似地, 可以使用图嵌入向量执行图分类。

链接预测<sup>[20]</sup>是节点嵌入方法的重要应用之一, 它预测两个节点之间形成边的可能性。链接预测可以表述为一个为边分配标签的分类任务。边标签为 1 表示两个节点之间可能会创建一条边, 否则标签为 0。对于训练步骤, 使用正样本和负样本生成样本训练集。正样本是图中存在的边。负样本是不存在的边, 它们的表示向量可以使用节点向量生成。与节点分类类似, 任何分类方法都可以在训练集上进行训练, 并预测测试边实例的边标签。

异常检测是节点嵌入方法的另一个应用。异常检测的目标是检测异常的节点、边或图以及异常发生的时间、异常节点或图偏离正常行为。例如, 在银行的交易网

络中, 突然发送或接收大量资金或与其他人建立大量连接的人可能是潜在的异常节点。异常检测任务可以表述为一个分类任务, 使数据集中的每个实例都是节点表示, 如果节点正常, 则实例标签为 0; 如果节点异常, 则实例标签为 1。这种表述需要有一个带有真实节点标签的数据集。异常检测中的一个问题是缺乏带有真实标签的数据集。这个问题的一种解决方法是生成模拟现实世界数据集行为的合成数据集。

除了分类任务之外, 图嵌入还可用于聚类任务<sup>[21]</sup>。此任务在社交网络等领域对于检测社区和生物网络以识别相似蛋白质组非常有用。可以对图/节点/边嵌入向量应用聚类方法 (例如 K 均值方法) 来检测相似图/节点/边的组。

节点嵌入方法也可以应用于图可视化<sup>[22]</sup>, 因为节点嵌入方法将节点映射到较低维度, 并且可以在嵌入空间中更好地体现到节点、边和图的不同属性。因此, 图可视化对于深入了解图数据非常有帮助, 尤其是难以可视化的超大型图。

### 1.3 研究现状

作为降维技术的一部分, 传统的图嵌入学习方法旨在将图数据嵌入低维向量空间中, 其思想是图中连接的节点在低维空间中仍然彼此更接近, 从而保留图中节点之间的结构信息。受经典降维技术的影响, 早期的图嵌入方法主要受到经典矩阵分解技术<sup>[23]</sup>和多维缩放<sup>[24]</sup>的启发。基于矩阵分解的方法是图嵌入学习的早期尝试。

基于随机游走<sup>[25]</sup>的方法在图嵌入学习中也引起了广泛关注。这些方法的基本思想是在图中的节点之间创建随机游走以捕获其结构特征。因此, 如果节点在短随机游走中共同出现, 则它们倾向于具有相似

的嵌入。与传统的基于矩阵分解的方法中的固定邻近度量相比，这些方法使用随机游走中的共现作为节点相似性的度量，这更加灵活，并且在各种应用中都表现出良好的性能。

与上述浅层图嵌入方法相比，非GNN深度学习方法通过深度神经网络将图的结构信息直接整合到编码器算法中。这些方法的基本概念涉及使用自动编码器方法<sup>[26]</sup>来压缩与节点局部邻域相关的信息。最近的研究工作集中在深度学习方法进行节点表示学习。这类方法广泛遵循邻域聚合（或消息传递）方案，并且已经展现出非常优异的结果<sup>[27-30]</sup>。这些模型学习迭代地将图中每个节点的隐藏特征与其相邻节点的隐藏特征聚合作为其新的隐藏特征，其中一次迭代由神经网络的一层进行参数化。从理论上讲， $k$ 次迭代的聚合过程利用了以每个节点为根的高度为 $k$ 的子树结构。这种方案已被证明可以泛化 Weisfeiler-Lehman 图同构测试<sup>[31]</sup>，从而同时学习拓扑以及邻域中节点特征的分布。GNN在处理复杂图结构方面有两大优势，即能够处理异构图和动态图。GNN可以通过不同的消息传递机制和聚合函数来处理异构图中不同类型的节点和边。GNN可以通过引入时间信息或使用循环神经网络等技术来处理动态图中节点和边的变化。

## 2 图表示学习方法

### 2.1 传统的图嵌入方法

#### 2.1.1 基于矩阵分解的方法

基于矩阵分解的算法以矩阵的形式表示节点之间的连接，并对该矩阵进行分解以获得嵌入。矩阵分解方法的核心思想<sup>[32]</sup>

是将图的邻接矩阵或其他相似性矩阵分解成低秩矩阵，这些低秩矩阵的每一行或每一列代表节点的嵌入向量。不同的矩阵分解方法在如何构建邻近度矩阵、如何进行矩阵分解、如何处理稀疏性等方面有所不同。矩阵分解方法的优点是简单易懂、计算效率高。矩阵分解方法的缺点是难以捕捉高阶邻近信息、难以处理异构图等。一些经典的基于矩阵分解的图嵌入方法如下。

- LLE (locally linear embedding) <sup>[33]</sup>: 其核心思想是高维数据中的每个样本点都可以由其近邻点的线性组合来近似表示。LLE 首先为每个样本点找到其 $k$ 个最近邻点，然后学习一组权重系数，使每个样本点都可以用其近邻点的线性组合来重构。之后 LLE 将这些权重系数应用于低维空间，以找到样本点的低维嵌入表示，使得在低维空间中，样本点与其近邻点之间的关系仍然能够保持。

- Laplacian Eigenmaps<sup>[34]</sup>: 核心思想是通过图拉普拉斯矩阵的特征向量来构建数据的低维表示。图拉普拉斯矩阵能够反映数据点之间的局部邻域关系，其特征向量可以看作数据在低维空间中的坐标。Laplacian Eigenmaps 试图找到图拉普拉斯矩阵的最小特征值对应的特征向量，这些特征向量能够捕捉数据的主要变化方向，并将其作为数据的低维嵌入表示。

- GF (graph factorization) <sup>[35]</sup>: GF 将图的邻接矩阵分解成两个低秩矩阵的乘积，这两个低秩矩阵的每一行代表节点的嵌入向量。GF 假设邻接矩阵中的非零元素表示节点之间的相似性，因此通过分解邻接矩阵可以学习到能够保留节点之间相似性关系的低维嵌入表示；节点之间的相似性不仅取决于它们之间的直接连接关系，还取决于它们之间通过其他节点的间接连接关系。

- GraRep<sup>[36]</sup>: GraRep 通过构建不同阶的邻近矩阵来捕获不同阶的邻近信息, 并对这些邻近矩阵进行分解来学习节点嵌入。

- HOPE<sup>[37]</sup>: HOPE 是一种能够保留高阶邻近信息的图嵌入方法, 特别适用于处理有向图。节点之间的相似性不仅取决于它们之间的直接连接关系, 还取决于它们之间通过其他节点的多步连接关系, 即高阶邻近信息。HOPE 通过近似高阶邻近性来学习节点嵌入, 并能够有效地捕获有向图中的非对称传递性。

### 2.1.2 基于随机游走的方法

随机游走已被用于逼近图中的许多属性, 包括节点中心性<sup>[38]</sup>和相似性<sup>[39]</sup>。当只能部分观察图或图太大而无法完整测量时, 它们特别有用。学者们已经提出了使用图上的随机游走来获得节点表示的嵌入技术<sup>[40-41]</sup>。基于随机游走方法的基本思想是通过模拟节点在图上的随机游走来生成节点序列, 然后将这些序列作为自然语言处理中的句子, 使用词嵌入技术 (如 Word2vec) 来学习节点的嵌入表示。随机游走方法的优点是能够捕获节点之间的高阶邻近信息, 并且能够处理各种类型的图, 包括有向图、无向图、加权图等。显而易见, 随机游走方法的缺点是需要生成大量的随机游走序列, 计算量较大。一些经典的基于随机游走的图嵌入方法如下。

- DeepWalk<sup>[40]</sup>: 核心思想是将图上的随机游走序列类比为自然语言中的句子, 并将节点类比为单词。使用自然语言处理中的词嵌入技术 (例如 Word2Vec), DeepWalk 可以学习到能够保留节点之间高阶邻近信息的低维嵌入表示。

- node2vec<sup>[41]</sup>: 它通过一种灵活的、

带有偏差的随机游走策略来学习节点的低维嵌入表示。通过控制随机游走的策略, node2vec 可以探索节点的不同类型的邻域, 从而学习到更丰富的节点表示。node2vec 引入了两个参数  $p$  和  $q$  来控制随机游走的偏向性, 从而平衡广度优先搜索和深度优先搜索的效果。

- Walklets<sup>[42]</sup>: 节点之间的邻近关系可以从不同的尺度来观察。Walklets 通过对随机游走路径进行不同长度的子采样, 捕获节点之间不同尺度的邻近信息, 并学习多尺度节点表示。

- HARP<sup>[43]</sup>: 通过将原始图压缩成一系列较小的图, HARP 可以简化图的结构, 并避免非凸优化中的局部最小值问题。HARP 首先找到一个较小的图来近似原始图的全局结构, 然后在这个简化图上学习一组初始节点表示。这些初始表示可以作为学习原始图中节点表示的良好初始化。HARP 递归地应用这个想法, 将原始图分解成一系列层次结构, 并从最粗糙的图到原始图逐步学习节点嵌入。

## 2.2 基于图神经网络的方法

GNN 是一种深度学习模型, 它通过聚合节点邻居的嵌入来生成节点嵌入。GNN 可以通过堆叠多个 GNN 层来生成节点表示向量, 每个 GNN 层都将节点嵌入作为输入。在每一层, 节点的嵌入都是通过聚合其邻居节点的嵌入来获得的, 经过  $L$  个 GNN 层后, 节点  $i$  的最终表示为  $h_i^L$ , 它是节点  $i$  的  $L$  跳邻居节点的聚合。与传统方法相比, GNN 可以很好地泛化到未见过的节点, 更好地利用节点/边的属性信息。

### 2.2.1 图卷积神经网络

图卷积网络 (graph convolutional

networks, GCN)<sup>[44]</sup>将卷积神经网络泛化到图结构数据。为了学习图表示,图卷积操作对节点的所有邻居应用相同的线性变换,然后进行非线性激活。当前大多数GCN模型很浅。大多数最新模型,如GCN<sup>[44]</sup>和图注意力网络(graph attention networks, GAT)<sup>[45]</sup>,通过二层模型实现了最佳性能。在GCN模型中添加残差连接<sup>[46]</sup>只会减缓过度平滑问题<sup>[44,47-49]</sup>;深度GCN模型仍然不如GCN或GAT等二层模型<sup>[50]</sup>。PPNP(personalized propagation of neural prediction)和APPNP(approximate PPNP)<sup>[51]</sup>将图卷积矩阵的幂替换为个性化PageRank矩阵来解决过度平滑问题。图扩散卷积(graph diffusion convolution, GDC)<sup>[52]</sup>通过将个性化PageRank推广到任意图扩散过程,进一步扩展了APPNP。然而,这些方法在每一层中执行邻居特征的线性组合,失去了深度非线性架构强大的表达能力,这意味着它们仍然是浅层模型。设计一个能够有效防止过度平滑并通过真正深度网络结构实现最先进结果的GCN模型仍然是一个悬而未决的问题。

## 2.2.2 图Transformer

虽然基于消息传递范式的GNN在多个知名任务上取得了令人印象深刻的性能<sup>[53-55]</sup>,但由于迭代的邻居聚合操作,它们仍然面临一些固有问题。许多先前的工作已经证明了消息传递GNN的两个主要缺陷,即过度平滑和长距离建模问题。过度平滑问题可以解释为各种GNN只关注低频信息<sup>[56]</sup>,不同类型节点之间的信息混合会破坏模型性能,GCN等效于拉普拉斯平滑<sup>[57]</sup>,邻居之间的各向同性聚合导致与随机游走相同的影响分布<sup>[58]</sup>等。GNN无法建模长距离依赖关系的部分原因是过度平滑

问题,因为在传统的邻居聚合GNN中,节点信息只能通过多个GNN层才能进行长距离传递。在解决这些问题的许多尝试中,最重要的是将Transformer<sup>[59]</sup>应用于图表示学习。Transformer已被用于各种深度学习领域,并取得了令人印象深刻的结果。最近,Transformer在许多研究中显示出强大的图建模能力<sup>[60-64]</sup>。

用于图表示学习的基于Transformer的方法可以分为两大类,一类是在注意力过程中考虑图结构,另一类是将图的拓扑信息编码到初始节点特征中。笔者将第一种称为注意力机制修改,将第二种称为编码增强。

注意力机制修改试图修改完全注意力操作以捕获结构信息,最普遍的方法是改变评分函数。门控图Transformer(gated graph transformer, GGT)<sup>[65]</sup>将每个节点特征限制为只能关注邻居节点,并通过将评分函数改写为以下形式来使模型能够表示边特征信息:

$$s(x_i, x_j) = \begin{cases} (W^Q x_i)^T (W^K x_j \circ (W^E e_{ji})), & \langle j, i \rangle \in E \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases} \quad (1)$$

其中, $x_i$ 表示节点*i*的特征向量, $x_j$ 表示节点*j*的特征向量, $e_{ji}$ 表示节点*j*和节点*i*之间边的特征向量。 $W^Q$ 是一个可学习的参数矩阵,用于将节点*i*的特征向量 $x_i$ 投影到查询空间。 $W^K$ 是一个可学习的参数矩阵,用于将节点*j*的特征向量 $x_j$ 投影到键空间。 $W^E$ 是一个可学习的参数矩阵,用于将边 $(j, i)$ 的特征向量 $e_{ji}$ 投影到边特征空间。 $\circ$ 表示Hadamard积,即两个向量对应元素相乘。 $\langle j, i \rangle \in E$ 表示节点*j*和节点*i*之间存在边,即 $(j, i)$ 属于边集*E*。

显然,GGT对评分函数的修改不能有效地建模长距离依赖关系,因为它只考虑了

1 阶邻居。GTSA (graph transformers with spectral attention)<sup>[66]</sup>通过结合原始图和全连接图改进了这种方法。节点之间的路径特征通常被视为添加到原始评分函数的归纳偏差。设  $\mathbf{SP}_{ij}=(e_1, e_2, \dots, e_n)$  表示节点对  $(v_i, v_j)$  之间的最短路径。GRUGT (gated recurrent unit graph Transformer)<sup>[67]</sup>使用门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU) 对前向和后向特征进行编码:  $r_{ij}=\text{GRU}(\mathbf{SP}_{ij})$ ,  $r_{ji}=\text{GRU}(\mathbf{SP}_{ji})$ 。然后, 最终的注意力分数通过将 4 个部分相加来计算:

$$s(x_i, x_j) = (\mathbf{W}^Q \mathbf{x}_i)^T \mathbf{W}^K \mathbf{x}_j + (\mathbf{W}^Q \mathbf{x}_i)^T \mathbf{W}^K r_{ji} + (\mathbf{W}^Q r_{ij})^T \mathbf{W}^K \mathbf{x}_j + (\mathbf{W}^Q r_{ij})^T \mathbf{W}^K r_{ji} \quad (2)$$

其中, 这 4 项分别代表基于内容的得分、依赖于源节点的偏差、依赖于目标节点的偏差和全局偏差。图归纳偏置 Transformer (graph inductive bias Transformer, GRIT)<sup>[68]</sup>将相对随机游走概率作为归纳偏差来编码相对路径信息。Graphormer-GD<sup>[69]</sup>将相对距离作为偏差, 并严格证明了这种偏差对于确定图的双连通性至关重要。

编码增强方法旨在增强初始节点表示, 使 Transformer 能够编码结构信息, 可以进一步划分为位置类比方法和结构感知方法。在欧几里得空间中, 拉普拉斯算子对应于梯度的散度, 其特征函数是正弦/余弦函数。对于图, 拉普拉斯算子是拉普拉斯矩阵, 其特征向量可以被视为特征函数。因此, 位置类比方法利用拉普拉斯特征向量来模拟位置编码。与位置类比方法相比, 结构感知方法并不试图在数学上严格地模拟序列位置编码。它们使用一些额外的机制来直接计算与结构相关的编码, 并将其添加到初始节点表示中。例如 Graphormer<sup>[70]</sup>提出将节点中心性作为额

外的信号来区分每个节点的重要性。

综上所述, 基于矩阵分解的方法优点是简单易懂、计算效率高, 但缺点是难以捕捉高阶邻近信息、难以处理异构图。基于随机游走的方法优点是能够捕获节点之间的高阶邻近信息、能够处理各种类型的图, 但缺点是需要生成大量的随机游走序列, 计算量较大。图卷积神经网络的优点是可以很好地泛化到未见过的节点, 可以更好地利用节点/边的属性信息, 缺点是存在过平滑问题、难以建模长距离依赖关系。图 Transformer 的优点是可以更好地建模长距离依赖关系, 可以更好地处理异构图和动态图, 缺点是模型复杂度较高、计算量较大。

## 2.3 图学习范式

### 2.3.1 图半监督学习

半监督学习 (semi-supervised learning, SSL) 在各种实际应用中取得了巨大的成功, 在这些应用中, 只有少数昂贵的标记样本可用, 而大量的未标记样本很容易获得。此外, 作为典型的 SSL 解决方案, 基于图的 SSL (graph SSL, GSSL) 非常有前景, 因为图结构可以自然地用作 SSL。具体来说, GSSL 方法首先构造一个图, 其中节点表示所有样本, 加权边反映一对节点之间的相似性。这种图构造方法意味着与大权重相关的边连接的节点倾向于具有相同的标签。在通常用于 SSL 的图结构中, 每个样本都由一个节点表示, 这些节点由加权边连接, 这些加权边测量它们之间的相似性。因此, GSSL 的主要过程是创建一个合适的图, 沿着该图可以轻松传播给定的标签。准确地说, 这个目标可以通过以下两个主要步骤来实现。

**步骤 1：图构造。**基于所有给定数据（包括标记样本和未标记样本）构造相似度图。在此步骤中，最大的挑战是如何很好地表示原始样本之间的关系。

**步骤 2：标签推断。**执行标签推断，以便通过合并上一步构造的图中的结构信息，将标签信息从标记样本传播到未标记样本。

与其他不涉及任何图结构的 SSL 方法相比，GSSL 优势如下：①普遍性，当前许多主流的数据集用图表示，如万维网、引文网络和社交网络；②凸性，无向图通常参与图构造步骤，因此无向图的对称特征使其更容易将学习问题公式化为凸优化问题；③可扩展性，许多 GSSL 方法经过了精心设计，时间复杂度与样本总数呈线性关系，因此它们通常很容易并行化以轻松处理大规模数据集。

GSSL 在创建图时可以分为无监督构造和有监督构造两大类，无监督图构造技术在构造过程中会忽略训练数据的所有给定标签信息。在所有用于图构造的无监督方法中， $K$  最近邻（ $K$ -nearest neighbor, KNN）图是最流行的方法。对于基于 KNN 的图构造方法，每个节点都根据预先配置的距离度量与其在结果图中的  $K$  个最近邻相关联。此外，基于 KNN 的方法贪婪地连接  $K$  个最近邻以生成节点度数大于  $K$  的图，这会导致不规则图。如果图中的每个节点都具有相同的度数，则称该图为规则图。基于 KNN 的方法需要一个邻近函数来量化训练数据中每个节点对之间的相似性或差异。位于样本空间中的中心点或枢纽可能会在经典 KNN 图中产生相应的枢纽，这可能会降低多个分类任务的预测性能。为了解决这个问题，Oziki 等<sup>[71]</sup>提出了一种新的图构造方法，将互 KNN（M-KNN）与最大生成树相结合。Vega 等<sup>[72]</sup>还引入了顺序 KNN（S-KNN）来生成图，

并在新的宽松条件下生成图，其中生成的图不包含枢纽，但不一定是规则图。

目前流行的图构建策略大多是无监督的，也就是说在构建阶段不使用任何给定的标签信息。然而，标记样本可以作为一种先验知识，用于改进下游学习任务生成的图。Dhillon 等<sup>[73]</sup>研究了利用标记点来衡量节点对之间相似性的可能性。Rohban 等<sup>[74]</sup>提出了另一种图构建监督方法，证明了只要采样率足够大，邻域图的最优解可以看作 KNN 图的子图。文献[75]介绍了一种新的基于标记实例信息量的图方法（graph-based on informativeness of labeled instances, GBILI），该方法也利用了标签信息。GBILI 不仅在分类任务中获得了不错的准确率，而且具有二次时间复杂度。此外，文献[76]提出了一种新的 SSL 学习方法——低秩半监督表示，它将标记数据合并到低秩表示（low-rank representation, LRR）中。Taherkhani 等<sup>[77]</sup>对此进行了后续研究，通过获取额外的监督信息，生成的相似度图可以在很大程度上促进后续的标签推理过程。

### 2.3.2 图自监督学习

图自监督学习可以从概念上分为 4 种类型，包括基于生成的方法、基于辅助属性的方法、基于对比的方法和混合方法。如图 2 所示，基于生成的方法将前置任务生成为图数据重建，从特征和结构两个角度进行。具体来说，它们侧重于节点/边特征或/和图邻接重建。对于大多数基于生成的方法，自监督目标函数通常被定义为测量重建的图数据和原始图数据之间的差异。其中一种代表性方法是图自编码器（graph auto-encoder, GAE）<sup>[78]</sup>，它通过重建图邻接矩阵来学习嵌入。基于生成的方法易于实现，重建任务易于构建，但

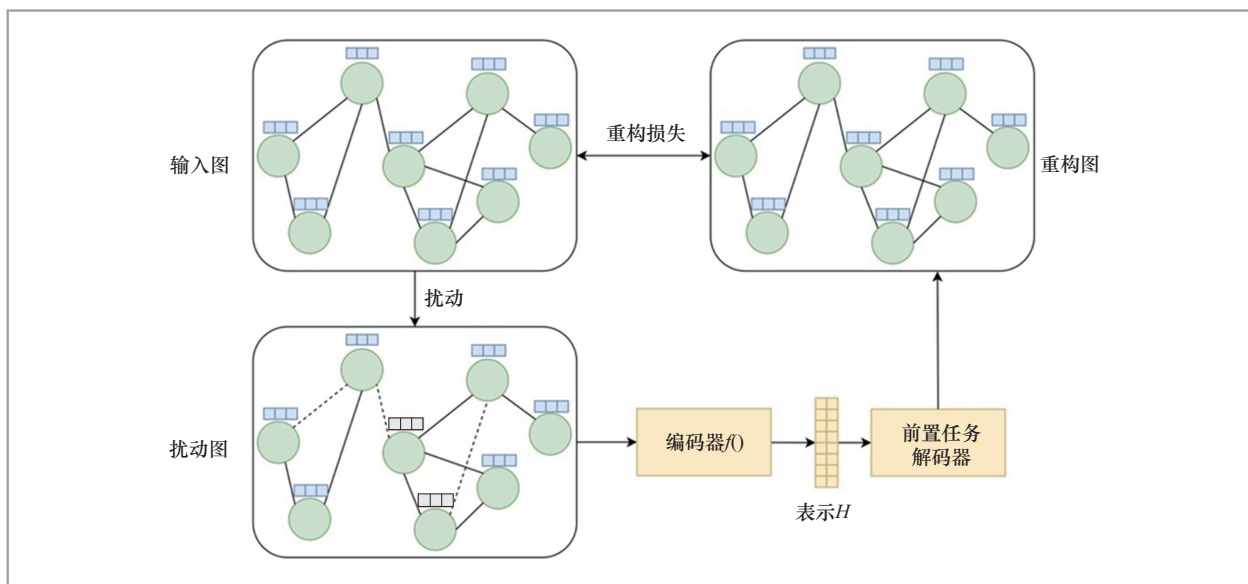


图2 基于生成的图自监督学习方法

有时恢复输入数据对于大规模图来说很耗内存。

如图3所示, 基于辅助属性的方法利用更大集合的属性和拓扑图属性来丰富监督信号。针对不同制作的辅助属性, 可将这些方法进一步分为两类: 基于回归的方法和基于分类的方法。对于基于回归的方法, 辅助属性可以是局部图属性或全局图

属性。对于基于分类的方法, 辅助属性通常构造为伪标签, 例如图分区或集群索引。在目标函数的选择上, 基于回归的方法通常采用均方误差 (mean squared error, MSE) 函数, 而基于分类的方法则多使用交叉熵 (cross entropy, CE) 损失函数。作为这类方法的代表, M3S<sup>[79]</sup>中使用节点聚类来构建提供监督信号的伪标签。基于

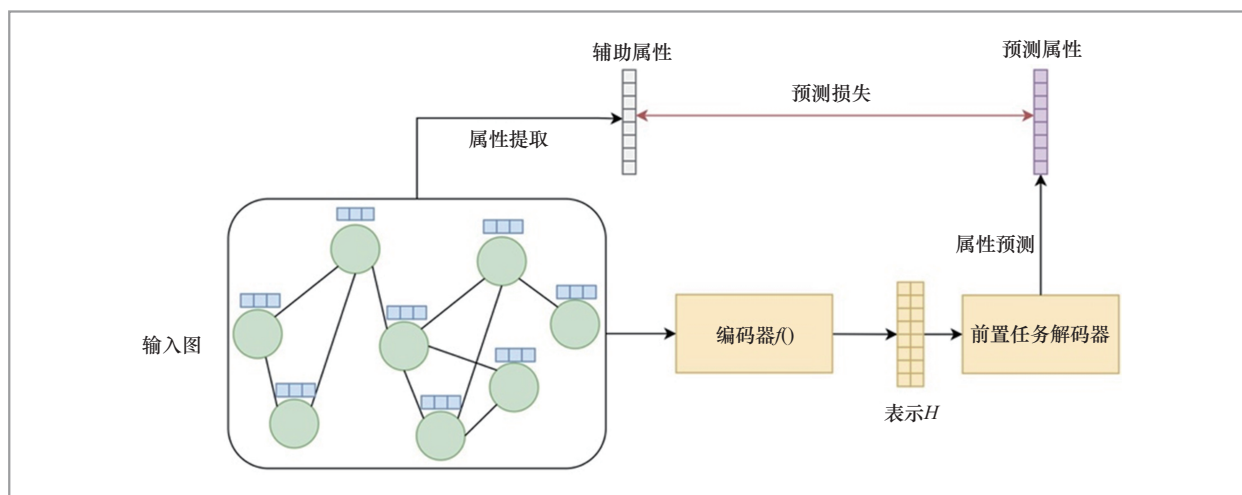


图3 基于辅助属性的图自监督学习方法

辅助属性的方法中解码器和损失函数的设计会相对简单。但是，选择有用的辅助属性通常需要领域知识。

如图4所示，基于对比的方法通常基于互信息（mutual information, MI）最大化的概念，其中最大化相同对象（如节点、子图和图）的增强实例之间的MI估计，并最小化负样本（如从不同对象派生的实例）之间的MI估计。其代表性的研究包括跨尺度方法（如DGI<sup>[80]</sup>）和同尺度方法（如GraphCL<sup>[81]</sup>和GCC<sup>[82]</sup>）。

混合方法通过整合多类前置任务来综合吸收不同监督信号的互补优势。其核心思路在于采用多任务学习机制——将不同r的自监督任务联合优化，通过加权求和的方式将多个自监督学习目标融合为统一的目标函数。在具体实现层面，常见做法包

括将特征重建、结构生成等生成式任务相结合，或者构建生成式与对比式任务的混合架构。此外，也有研究探索将多个对比学习任务进行组合，或将对比学习与基于节点属性的辅助任务相融合。

## 2.4 异构图嵌入

### 2.4.1 静态异构图嵌入

现有的大多数异构图神经网络模型聚焦于静态异构图表征学习，其核心目标在于有效捕获图中复杂的拓扑结构特征和深层语义关联。这类模型假设图结构具有时间不变性，因此主要研究如何将静态的异构信息（包括多类型节点关系及属性特征）高效编码至低维嵌入向量中。用于静

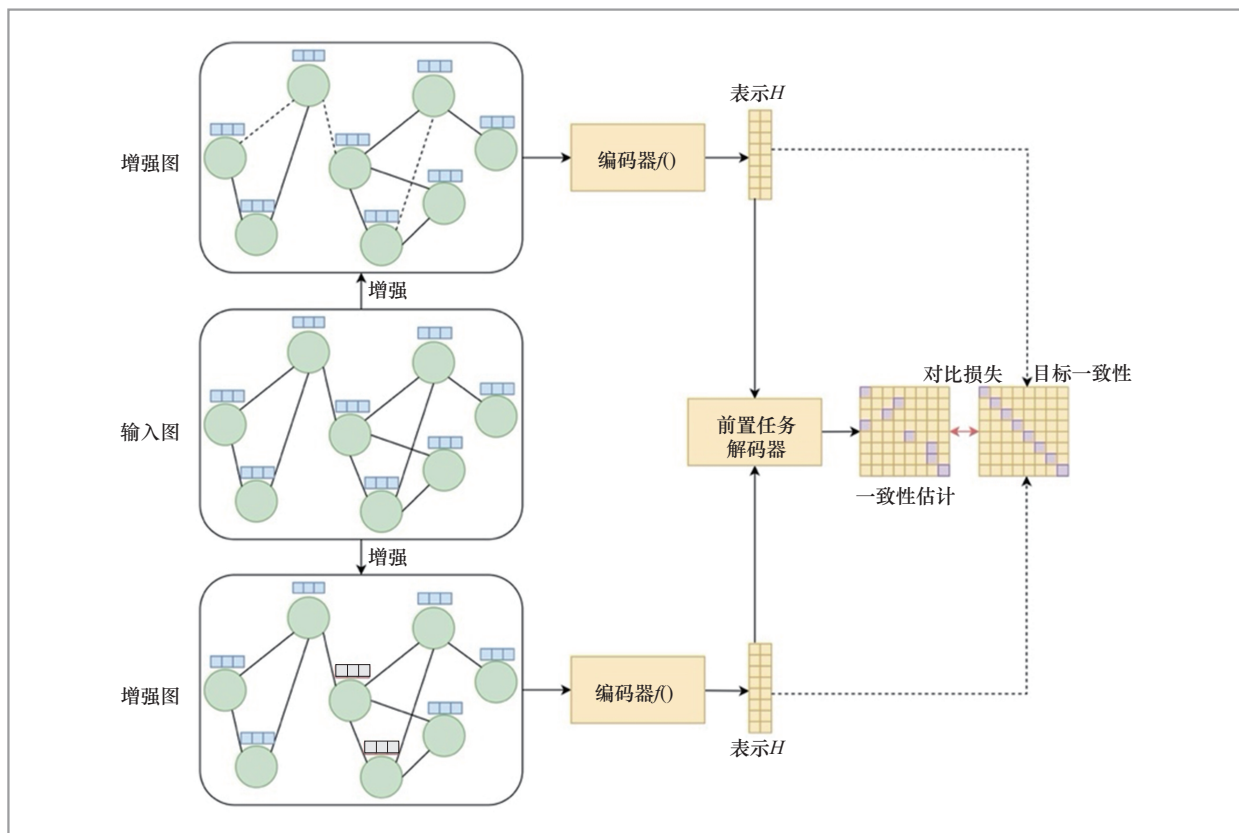


图4 基于对比的图自监督学习方法

态异构图的异构图神经网络模型可以分为3种方法,即基于卷积的方法、基于自动编码器的方法和基于对抗的方法。

基于卷积的方法核心思想是消息传递机制,即将邻居节点的信息传递给中心节点并进行聚合,以形成中心节点的嵌入。基于卷积的方法的关键问题是如何设计合适的异质性保留策略来捕获邻居中包含的语义信息。元路径是一种广泛用于异构图分析的异质性保留方法。基于元路径的模型旨在通过构建基于元路径的邻居来保持图中的异质性。例如,Wang等<sup>[83]</sup>设计了一个名为异构图注意力网络(heterogeneous graph attention network, HAN)的分层注意力模型来学习异构图中的节点嵌入。HAN中设计了节点级和语义级注意力来计算节点和元路径的重要性得分,以捕获结构和语义特征。

与大多数上述使用元路径来保留语义信息的方法不同,基于关系的方法可以通过聚合一跳邻居的特征来学习节点表示,而不需要人为设置元路径。为了避免人为设置元路径并自动学习有用的语义信息,Yun等<sup>[84]</sup>提出了一种名为图变换器网络(graph transformer network, GTN)的嵌入方法,通过自动查找有用的元路径来学习节点嵌入。它根据关系类型将异构图分成几个子图,并将子图邻接矩阵输入多通道GCN中以学习节点嵌入。

通过多通道卷积核的值,GTN可以得到有用的元路径。但GTN只考虑了边类型而忽略了不同类型的节点。Hong等<sup>[85]</sup>提出了一个名为异构图结构注意力神经网络(heterogeneous graph structural attention neural network, HetSANN)的无元路径嵌入模型,通过聚合具有关系重要性的邻居来学习每个节点的嵌入。首先,HetSANN选择一个节点及其邻居,

并将邻居节点投影到所选节点空间中;然后,HetSANN设计了一个类型感知注意力层,通过聚合具有不同关系重要性的邻居特征来学习每个节点的嵌入。Hu等<sup>[86]</sup>设计了异构图变换器(heterogeneous graph transformer, HGT)来学习异构图表示,HGT使用与多类型节点和边相关的可学习参数来记录异质性。它定义了一种元关系三元组注意力机制,将边信息作为传递消息的权重来计算邻居的重要性得分。

HetSANN和HGT本质上都使用分层注意力机制来学习节点的表示。但与基于元路径的模型不同,它们在节点级聚合中聚合相同关系下的节点特征,而不是相同元路径下的节点特征。然而,HetSANN和HGT需要堆叠更多的神经网络层来提取有用的高阶交互,并生成更多的模型参数。

Yang等<sup>[87]</sup>提出了ie-HGCN,它是一种可解释且高效的异构图卷积网络,通过使用节点类型区分的GCN来学习异构图嵌入。首先,ie-HGCN将不同类型邻居节点的表示投影到一个共同的语义空间中。异构图由多个二部图组成,并在节点级聚合中使用二部图的GCN。在类型级聚合中,ie-HGCN利用注意力来聚合不同类型的邻居节点,从而获得最终的节点嵌入。ie-HGCN通过块矩阵乘法有效地降低了计算消耗。

与基于卷积的模型不同,基于自动编码器的模型不使用任何监督信号,它们以无监督的编码器-解码器架构学习节点的表示,并通过重建误差来优化模型。这使基于自动编码器的模型能够应用于更多的任务和应用场景。基于自动编码器的方法的主要目的是使用神经网络作为编码器,从节点结构和/或属性中学习节点嵌入,并设计解码器以最大限度地保留原始图中的结构和/或属性信息。根据异构图中包含的不同信息,基于自动编码器的方法可以分

为仅保留结构和保留结构属性两种。

仅保留结构的模型通常在没有节点属性信息的情况下嵌入异构图。它们只需要维护图的拓扑信息。例如，Fu等<sup>[88]</sup>设计了一个基于自动编码器的异构图嵌入模型，称为HIN2Vec。HIN2Vec使用元路径解决异构性，并通过前馈神经网络融合元路径和节点的one-hot向量来学习节点和元路径的表示。它通过最大化节点对中出现的关系的概率来优化神经网络，通过最小化目标函数来学习节点嵌入和元路径。

为了嵌入具有不同类型节点的超图，Tu等<sup>[89]</sup>提出了DHNE，它是一个超图嵌入模型，即深度超网络嵌入模型。DHNE旨在学习具有不可分解超边的超图的表示。由于超边中的节点具有很强的关系，分解它们无法表示有用的信息，因此DHNE将每个超边输入自动编码器中，这些自动编码器用于学习节点的嵌入。之后，DHNE使用一个元组相似度函数来保持局部和全局邻近性并优化神经网络。为了通过交互网络预测人与人之间的情绪，Wang等<sup>[90]</sup>提出了SHINE，使用带符号的异构信息网络嵌入来预测社交网络中用户未观察到的情绪。它使用异构图来表示用户之间复杂的关系，并将构建的异构图划分为3个子图以获得不同的语义信息；之后，SHINE利用3个自动编码器将3个子图嵌入低维向量中，并将3个嵌入聚合为异构图表示以进行链接预测；最后，使用解码器来最小化重建误差以优化神经网络。SHINE利用异构图的拓扑结构来实现情绪预测，可以预测用户对其他用户的情绪。

在保留结构属性的方法中，属性信息通常附加到节点上。这使得相同类型的节点可能具有不同的嵌入向量，因为每个节点具有不同的属性特征。因此，属性异构图嵌入不仅保留了图的拓扑信息，还区分

了节点上属性的差异。例如，为了嵌入节点具有文本属性的异构图，Zhang等<sup>[91]</sup>提出了SHNE，旨在通过聚合文本数据的结构信息和语义信息来嵌入节点。SHNE利用元路径和GRU来提取异构结构和文本属性信息，将异构Skip-Gram模型作为编码器来学习节点嵌入。

Chang等<sup>[92]</sup>设计了HNE，它是一种面向图像-文本多模态异构图的网络嵌入模型，通过联合编码视觉特征与语义关系，实现跨模态节点的统一表征学习。每个图像和文本的内容都是唯一的，因此HNE需要保留每个节点的内容。HNE采用CNN和全连接层来提取图像和文本特征，使用两个变换矩阵作为编码器，将不同维度的特征投影到一个公共空间中作为节点嵌入。之后，HNE设计节点相似度函数作为损失函数来优化模型。为了在图中保留异质性以避免设置元路径，Zhao等<sup>[93]</sup>提出了NSHE，这是首次尝试利用网络模式在保持成对结构和网络模式结构的同时嵌入异构图。首先，NSHE利用GCN来学习节点嵌入以保持一阶邻近性；然后，它设计了多任务学习，其中多个自动编码器用于从网络模式实例中学习节点嵌入，并且学习到的嵌入通过预测任务进行优化。

Zhang等<sup>[94]</sup>提出了DIME来嵌入稀疏社交网络中的用户。为了解决新兴社交网络中的稀疏性问题，DIME定义了多个属性增强的元路径来捕获用户之间的各种语义信息。它使用自动编码器来学习每个元路径上的用户嵌入，并将所有基于元路径的嵌入融合在一起以获得完整的用户表示。为了学习具有多类型边的图表示，Wang等<sup>[95]</sup>引入了正则化图自动编码器(regularized graph auto-encoder, RGAE)模型，将异构图转换为多视图，并基于每个视图学习节点嵌入，使用多个

GCN 层作为编码器来学习每个视图的嵌入，并将它们聚合在一起作为异构图嵌入。然后，RGAE 模型通过内积运算重建每个视图的邻接矩阵，旨在最小化原始邻接矩阵和每个视图的重建邻接矩阵之间的差异。

与上述两种方法（判别方法）不同，基于对抗的方法属于深度生成模型，旨在通过对抗训练生成节点嵌入。这样，基于对抗的方法可以通过迭代生成对抗优化获得更鲁棒的表示。基于对抗的方法主要利用生成对抗网络（generative adversarial network, GAN），通过生成器和判别器之间的对抗训练来学习鲁棒的节点嵌入。受 GraphGAN<sup>[96]</sup> 的启发，许多研究人员将 GAN 扩展到异构图嵌入任务中。现有的基于对抗的方法使用节点对之间的关系来确定真假节点。这意味着基于对抗的方法仅维护异构图中的交互信息而忽略了节点属性。Hu 等<sup>[97]</sup> 设计了一个异构图嵌入框架 HeGAN，基于对抗原则嵌入异构图。为了适应异构环境，它扩展了判别器和生成器以关联关系感知。具体来说，对于给定的关系，节点是真还是假由判别器决定，生成器可以生成一个假节点来模拟真节点。

在现实世界中，由于隐私或其他原因，关系通常被部分观察到，这导致图结构不完整。为了学习不完整异构图中的节点嵌入，Zhao 等<sup>[98]</sup> 提出了多视图对抗补全模型。根据多视图架构，应用对抗学习通过不同类型的关系捕获每个节点的互补信息，以获得完整且鲁棒的节点表示。具体来说，生成器试图生成最互补的视图以补全每个视图中每个节点的信息，而判别器试图区分生成的视图是不是每个视图中每个节点的互补。在生成器和判别器之间执行最小最大博弈后，生成器可以学习每种关系的潜在互惠性；最后，将学习到的互惠性与原始视图表示融合在一起以获得互补表示。

为了学习异构图的鲁棒表示，Ruan 等<sup>[99]</sup> 引入了 AGA2Vec 模型。与上述保留节点一阶邻近性的基于对抗的方法不同，AGA2Vec 使用元路径来捕获节点之间语义信息的高阶邻近性。它通过融合其基于元路径的邻居及其相应的元路径重要性来初始化每个节点的嵌入。然后，AGA2Vec 使用自动编码器作为生成器，将初始嵌入转换为低维空间以逼近真实数据样本的分布。通过最小最大博弈中的竞争，学习到的生成器可以用来嵌入节点。作为 HeGAN 的后续工作，Lan 等<sup>[100]</sup> 开发了 AGNE-HIN，通过应用 GAN 来获得保留关系的节点嵌入。AGNE-HIN 从高斯分布中采样节点并整合扰动，以形成对抗性输入数据，从而提高节点表示的鲁棒性。

## 2.4.2 动态异构图嵌入

与常规静态异构图不同，动态异构图会随时间演化，即图中的实体和交互会随时间变化。根据处理时间属性的不同策略，动态异构图学习大致可以分为两类，即基于独立学习的模型和基于增量学习的模型。

基于独立学习的方法将每个时间片上的输入动态图视为静态图并学习其表示，然后聚合所有时间片的图表示以形成集成了时间信息的动态图表示。例如，Yang 等<sup>[101]</sup> 提出了一个名为 DyHAN 的动态 HGNN 模型。与 HAN 类似，DyHAN 也利用分层注意力来提取复杂的异质性。但是 HAN 和 DyHAN 之间的主要区别在于 DyHAN 使用了一个额外的注意力层来学习动态异构图随时间的演化信息。首先，DyHAN 提出了节点级聚合，通过自注意力收集具有相同类型邻居的邻居特征。在学习了时间步  $t$  处节点  $i$  的嵌入之后，为了处理时间演化，DyHAN 使用点积注意力来区分每个时间步的重要性。与 DyHAN 类似，DyHATR<sup>[102]</sup>

也使用分层注意力来维护图中的异质性。但是, DyHATR和DyHAN之间的主要区别在于DyHATR使用RNN来发现随时间推移的重要演化信息。Yuan等<sup>[103]</sup>提出了DyHGCN模型来学习动态异构图表示以进行信息传播预测。它利用GCN来学习每种关系下的节点嵌入, 并通过启发式策略聚合来自不同关系的嵌入, 而不是DyHAN和DyHATR中使用的分层注意力。为了捕获时间演化, DyHGCN还使用自注意力来融合从每个时间步学习到的特征, 融合的嵌入将用于预测信息传播。

基于独立学习的模型本质上利用分层注意力来学习动态异构图表示。与用于静态图的HAN、HGT和其他分层注意力模型相比, 基于独立学习的模型具有额外的注意力机制来捕获时间演化信息, 但是这种架构会导致高计算量。与基于独立学习的方法学习每个时间步的表示不同, 基于增量学习的模型仅更新受时间变化影响的节点嵌入, 而不是在每个时间片上学习整个图。

Wang等<sup>[104]</sup>提出的DyHNE是一种基于增量学习的方法, 它在学习节点嵌入的同时考虑了依赖于矩阵扰动理论的异质性和演化信息。DyHNE通过保持一阶和二阶元路径邻近性来保持异质性。利用基于元路径的邻接矩阵的扰动, DyHNE捕获异构图的动态变化。Change2Vec<sup>[105]</sup>将Metapath2Vec中使用的异构Skip-Gram扩展到动态异构图学习。它设计了4种节点演化场景来模拟动态变化, 并利用Metapath2Vec来学习变化节点的嵌入。

### 3 图表示学习的应用和挑战以及未来方向

#### 3.1 图表示学习的应用

图表示学习可以用于预测分子的性质,

例如毒性、生物活性、溶解度等, 这对于药物发现和化学信息学至关重要。传统的定量构效关系(QSPR/QSAR)方法主要依赖于SMILES(简化分子线性输入规范)或指纹, 忽略了分子的拓扑结构。图表示学习可以将分子表示为图, 其中节点代表原子, 边代表原子键, 并通过消息传递机制学习分子级表示, 从而更好地捕捉拓扑信息。

图表示学习可以用于生成具有特定性质的新分子, 例如新颖性、结合亲和力和SA分数, 这对于药物发现至关重要。传统方法依赖于1D字符串格式, 如SMILES和SELFIES。图表示学习可以将分子图自然地体现为2D拓扑和3D几何结构, 从而生成更符合实际的分子结构。图表示学习提供了一个通用的框架来建模复杂分子结构, 可用于精确药物筛选。应用包括生物分子相互作用分析和分子性质预测等。图表示学习可用于单细胞数据插补、聚类和多组学数据整合等, 有助于理解疾病机制和进化生物学, 并促进医学发展。

图表示学习可以捕获图节点之间的高阶连接, 从而提高推荐性能。基于图的推荐系统可以利用用户和项目之间的交互以及它们的潜在联系来生成高质量的推荐。图表示学习可以解决推荐系统中的冷启动问题、预训练模型和选择偏差等问题。

此外, 图表示学习可以用于社交网络表示和不同的网络检测任务, 例如社区发现、影响力最大化和链接预测等。图表示学习可以利用交通数据的时空特征, 提供鲁棒和准确的交通状况预测; 可以用于无监督异常检测, 例如检测金融欺诈、网络入侵和虚假账户等; 可以将分子或化合物建模为图, 其中原子和化学键分别表示为节点和边, 用于研究化学反应、预测分子性质和设计新材料等。

### 3.2 图表示学习的挑战以及未来研究方向

尽管GNN已经在多个领域取得了成功,但仍面临诸多挑战。在实际应用中,图拓扑结构既灵活又复杂。许多研究致力于处理复杂图结构,如异构图或动态图。随着互联网社交网络的快速发展,新的问题、挑战和应用场景无疑将会出现,需要更强大的模型。虽然图是建模复杂系统的典型方法,但抽象有时过于简单,无法用作现实世界中动态的、随时间变化的系统。相应地可以将时间信息引入GNN模型中,使用循环神经网络等技术来处理动态图中的变化。

另外,可扩展性是工业应用的一个重要限制,这些应用通常处理大型图。社交网络拥有数百万个节点和数十亿条边,并且具有低时延限制。文献中提出的许多模型完全不适用于大规模环境。可以考虑设计更轻量级的GNN模型,使用分布式计算框架来训练和推理GNN,使用图采样技术来减少计算量。另一个重要的研究课题是当数据有噪声或受到对手攻击时GNN的稳健性。作为神经网络模型的一部分,GNN同样容易受到对抗性攻击。与仅关注特征的图像或文本对抗性攻击相比,图攻击还涉及图结构信息。

为了在未观察到的数据集上表现更好,理想情况下,学习到的表示应该能够更好地推广到一些分布外(out-of-distribution, OOD)数据。分布外与错误分类并不相同。错误分类的样本来自与训练数据相同的分布,但模型未能正确分类,而分布外是指样本来自与训练数据不同的分布。能够泛化到分布外数据将大大提高模型在现实生活中的可靠性,研究分布外泛化的图表示是一个开放的领域。

可解释性问题是研究人员尝试将深度

图表示学习应用于一些新兴应用领域时存在的另一个限制。即使是深度学习专家也很难向人们解释任务是如何执行的,以及模型从数据中学到了什么。这种情况降低了神经网络模型的可信度。因此需要开发可解释的GNN模型,例如基于注意力机制的GNN,使用图可视化技术来帮助人们理解GNN模型的预测结果。

### 参考文献:

- [1] LIAO X L, TU B, LI J, et al. Class-wise graph embedding-based active learning for hyperspectral image classification[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2023, 61: 5522813.
- [2] XIA W, WANG T X, GAO Q X, et al. Graph embedding contrastive multi-modal representation learning for clustering[J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2023, 32: 1170-1183.
- [3] GAO W B, WANG H, LIU Q, et al. Leveraging transferable knowledge concept graph embedding for cold-start cognitive diagnosis[C]//Proceedings of the 46th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. New York: ACM, 2023: 983-992.
- [4] LI S D, ZHAO C Y, LI Q, et al. Bot-Finder: a novel framework for social bots detection in online social networks based on graph embedding and community detection[J]. World Wide Web, 2023, 26(4): 1793-1809.
- [5] MA Y Z, ZHANG H, JIN C, et al. Predicting lncRNA-protein interactions with bipartite graph embedding and deep graph neural networks[J]. Frontiers in Genetics, 2023, 14: 1136672.
- [6] CHAMI I, ABU-EL-HAIJA S, PEROZZI B, et al. Machine learning on graphs: a

- model and comprehensive taxonomy[J]. Journal of Machine Learning Research, 2022, 23(89): 1–64.
- [7] CHEN Y, WU L F, ZAKI M J. Iterative deep graph learning for graph neural networks: better and robust node embeddings[EB]. arXiv preprint, 2020, arXiv: 2006.13009.
- [8] FANOURLAKIS N, EFTHYMIU V, KOTZINOS D, et al. Knowledge graph embedding methods for entity alignment: experimental review[J]. Data Mining and Knowledge Discovery, 2023, 37(5): 2070–2137.
- [9] LEE J, CHUNG C Y, WHANG J J. In-Gram: Inductive knowledge graph embedding via relation graphs[C]//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. [S.l.:s.n.], 2023.
- [10] TANG W, TANG M W, BAN M C, et al. CSGVD: a deep learning approach combining sequence and graph embedding for source code vulnerability detection[J]. Journal of Systems and Software, 2023, 199: 111623.
- [11] XU M J. Understanding graph embedding methods and their applications[J]. SIAM Review, 2021, 63(4): 825–853.
- [12] 贺亚运, 彭俊清, 王健宗, 等. 节奏舞者: 基于关键动作转换图和有条件姿态插值网络的3D舞蹈生成方法研究[J]. 大数据, 2023, 9(1): 23–37.
- HE Y Y, PENG J Q, WANG J Z, et al. Rhythm dancer: 3D dance generation by keymotion transition graph and pose-interpolation network[J]. Big Data Research, 2023, 9(1): 23–37.
- [13] 戴筠. 基于双曲空间图嵌入的科研热点预测[J]. 大数据, 2022, 8(6): 94–104.
- DAI J. Emerging scientific topic prediction based on Poincare graph embedding[J]. Big Data Research, 2022, 8(6): 94–104.
- [14] YU Z D, ZHANG C H, DENG C. An improved GNN using dynamic graph embedding mechanism: a novel end-to-end framework for rolling bearing fault diagnosis under variable working conditions[J]. Mechanical Systems and Signal Processing, 2023, 200: 110534.
- [15] LI R, CAO Y N, ZHU Q N, et al. How does knowledge graph embedding extrapolate to unseen data: a semantic evidence view[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. [S.l.:s.n.], 2022.
- [16] LIU C, LI X C, ZHAO D Y, et al. A-GNN: anchors-aware graph neural networks for node embedding[M]//Quality, Reliability, Security and Robustness in Heterogeneous Systems. Cham: Springer International Publishing, 2020: 141–153.
- [17] TRAN D H, PARK M. Graph embedding for graph neural network in intrusion detection system[C]//Proceedings of the 2024 International Conference on Information Networking. Piscataway: IEEE Press, 2024: 395–397.
- [18] KHOSHRAFTAR S, AN A. A survey on graph representation learning methods[J]. ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, 2024, 15(1): 1–55.
- [19] JIANG X D, ZHU R H, JI P S, et al. Co-embedding of nodes and edges with graph neural networks[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 45(6): 7075–7086.
- [20] ROSSI A, BARBOSA D, FIRMANI D, et al. Knowledge graph embedding for link prediction[J]. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data, 2021, 15(2): 1–49.
- [21] GUO L, DAI Q. Graph clustering via variational graph embedding[J]. Pattern Recognition, 2022, 122: 108334.
- [22] LI H, WANG Y, ZHANG S, et al. KG4Vis: a knowledge graph-based approach for

- visualization recommendation[J]. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2022, 28(1): 195–205.
- [23] YANG C, SUN M S, LIU Z Y, et al. Fast network embedding enhancement via high order proximity approximation[C]// Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence. New York: ACM, 2017: 3894 – 3900.
- [24] CARROLL J D, ARABIE P. Multidimensional scaling[J]. Measurement, Judgment and Decision Making, 1998: 179–250.
- [25] PEROZZI B, AL-RFOU R, SKIENA S. DeepWalk: online learning of social representations[C]//Proceedings of the 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2014.
- [26] MAHDAVI S, KHOSHRAFTAR S, AN A. dynnode2vec: Scalable dynamic network embedding[C]//Proceedings of the 2018 IEEE International Conference on Big Data. Piscataway: IEEE Press, 2018.
- [27] VAN DEN BERG R, KIPF T N, WELLMING M. Graph convolutional matrix completion[EB]. arXiv preprint, 2017, arXiv: 1706.02263.
- [28] HAMILTON W L, YING R, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: ACM, 2017: 1025–1035.
- [29] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Neural message passing for quantum chemistry[C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. New York: ACM, 2017: 1263–1272.
- [30] KEARNES S, MCCLOSKEY K, BERNDL M, et al. Molecular graph convolutions: moving beyond fingerprints[J]. Journal of Computer-Aided Molecular Design, 2016, 30(8): 595–608.
- [31] BORIS W, LEMAN A. The reduction of a graph to canonical form and the algebra which appears therein[Z]. 1968: 12–16.
- [32] AGRAWAL R, ARQUAM M, SINGH A. Community detection in networks using graph embedding[J]. Procedia Computer Science, 2020, 173: 372–381.
- [33] ROWEIS S T, SAUL L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding[J]. Science, 2000, 290(5500): 2323–2326.
- [34] BELKIN M, NIYOGI P. Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering[C]//Proceedings of the 15th International Conference on Neural Information Processing Systems: Natural and Synthetic. New York: ACM, 2001: 585 – 591.
- [35] AHMED A, SHERVASHIDZE N, NARAYANAMURTHY S, et al. Distributed large-scale natural graph factorization[C]//Proceedings of the 22nd International Conference on World Wide Web. New York: ACM, 2013: 37–48.
- [36] CAO S S, LU W, XU Q K. Grarep: learning graph representations with global structural information[C]//Proceedings of the 24th ACM International on Conference on Information and Knowledge Management. New York: ACM, 2015: 891–900.
- [37] OU M D, CUI P, PEI J, et al. Asymmetric transitivity preserving graph embedding [C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2016: 1105–1114.
- [38] NEWMAN M E J. A measure of betweenness centrality based on random walks[J]. Social Networks, 2005, 27(1): 39–54.
- [39] FOUSS F, PIROTTE A, RENDERS J M, et al. Random-walk computation of similarities between nodes of a graph

- with application to collaborative recommendation[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2007, 19(3): 355–369.
- [40] PEROZZI B, AL-RFOU R, SKIENA S. DeepWalk: online learning of social representations[C]//Proceedings of the 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2014: 701–710.
- [41] GROVER A, LESKOVEC J. node2vec: scalable feature learning for networks [C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2016: 855–864.
- [42] PEROZZI B, KULKARNI V, CHEN H C, et al. Don't walk, skip!: online learning of multi-scale network embeddings[C]//Proceedings of the 2017 IEEE/ACM International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining 2017. New York: ACM, 2017: 258–265.
- [43] CHEN H C, PEROZZI B, HU Y F, et al. HARP: hierarchical representation learning for networks[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2018, 32(1): 4000470.
- [44] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[EB]. arXiv preprint, 2016, arXiv:1609.02907.
- [45] VELICKOVIC P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[J]. Stat, 2017, 1050(20): 10–48550.
- [46] HE K M, ZHANG X Y, REN S Q, et al. Deep residual learning for image recognition[C]//Proceedings of the 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Piscataway: IEEE Press, 2016: 770–778.
- [47] LI Q M, HAN Z C, WU X M. Deeper insights into graph convolutional networks for semi-supervised learning[EB]. arXiv preprint, 2018, arXiv: 1801.07606.
- [48] XU K Y L, LI C T, TIAN Y L, et al. Representation learning on graphs with jumping knowledge networks[C]//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. [S.l.: s. n.], 2018: 5453–5462.
- [49] RONG Y, HUANG W B, XU T Y, et al. DropEdge: towards deep graph convolutional networks on node classification [EB]. arXiv preprint, 2019, arXiv: 1907.10903.
- [50] WU F, SOUZA A, ZHANG T Y, et al. Simplifying graph convolutional networks[C]// Proceedings of the International Conference on Machine Learning. [S.l.:s.n.], 2019: 6861–6871.
- [51] GASTEIGER J, BOJCHEVSKI A, GÜNNEMANN S. Predict then propagate: graph neural networks meet personalized PageRank[EB]. arXiv preprint, 2018, arXiv: 1810.05997.
- [52] GASTEIGER J, WEIBENBERGER S, GÜNNEMANN S. Diffusion improves graph learning[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2019, 32: 12727–13498.
- [53] 冯鹏程, 张高豪, 谢刚. 门控变关系图卷积网络的涉烟案件当事人预警[J]. 大数据, 2024, 10(5): 45–55.
- FENG P C, ZHANG G H, XIE G. Gated variable graph convolutional network for warning of parties in tobacco-related cases[J]. Big Data Research, 2024, 10(5): 45–55.
- [54] 朱广新, 周春雷, 李俊妮, 等. 基于图模型的电力系统碳流计算优化研究[J]. 大数据, 2024, 10(2): 179–191.
- ZHU G X, ZHOU C L, LI J N, et al. Research on power system carbon flow calculation based on graph database and graph computing engine[J]. Big Data Research, 2024, 10(2): 179–191.

- [55] 张虎, 张振, 范越, 等. 基于因果图分析的可解释司法判决预测方法研究[J]. 大数据, 2024, 10(2): 109–121.
- ZHANG H, ZHANG Z, FAN Y, et al. Research on interpretable legal judgment prediction method based on causal graph analysis[J]. Big Data Research, 2024, 10(2): 109–121.
- [56] BO D Y, WANG X, SHEN H W, et al. Beyond low-frequency information in graph convolutional networks[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. [S. l.: s. n.], 2021: 3950–3957.
- [57] REISER P, NEUBERT M, EBERHARD A, et al. Graph neural networks for materials science and chemistry[J]. Communications Materials, 2022, 3(1): 93.
- [58] JU W, FANG Z, GU Y Y, et al. A comprehensive survey on deep graph representation learning[J]. Neural Networks, 2024: 106207.
- [59] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: ACM, 2017.
- [60] CHEN D X, O'BRAY L, BORGWARDT K. Structure-aware transformer for graph representation learning[C]//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. [S. l.: s. n.], 2022: 3469–3489.
- [61] RAMPÁŠEK L, GALKIN M, DWIVEDI V P, et al. Recipe for a general, powerful, scalable graph transformer[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2022, 35: 14501–14515.
- [62] MA X J, CHEN Q, WU Y, et al. Rethinking structural encodings: adaptive graph transformer for node classification task [C]//Proceedings of the ACM Web Conference 2023. New York: ACM, 2023: 533–544.
- [63] YING C X, CAI T L, LUO S J, et al. Do transformers really perform badly for graph representation[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2021, 34: 28877–28888.
- [64] ZHAO H T, MA S M, ZHANG D D, et al. Are more layers beneficial to graph transformers? [EB]. arXiv preprint, 2023, arXiv: 2303.00579.
- [65] DWIVEDI V P, BRESSON X. A generalization of transformer networks to graphs[EB]. arXiv preprint, 2020, arXiv: 2012.09699.
- [66] KREUZER D, BEAINI D, HAMILTON W L, et al. Rethinking graph transformers with spectral attention[EB]. arXiv preprint, 2021, arXiv: 2106.03893.
- [67] CAI D, LAM W. Graph transformer for graph-to-sequence learning[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2020, 34(5): 7464–7471.
- [68] MA L, LIN C, LIM D, et al. Graph inductive biases in transformers without message passing[C]//Proceedings of the International Conference on Machine Learning. [S. l.: s. n.], 2023: 23321–23337.
- [69] ZHANG B H, LUO S J, WANG L W, et al. Rethinking the expressive power of GNNs *via* graph biconnectivity[EB]. arXiv preprint, 2023, arXiv: 2301.09505.
- [70] YING C, CAI T, LUO S, et al. Do transformers really perform badly for graph representation[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2021, 34: 28877–28888.
- [71] OZAKI K, SHIMBO M, KOMACHI M, et al. Using the mutual k-nearest neighbor graphs for semi-supervised classification of natural language data[C]//Proceedings of the Conference of 15th Conference on Computational Natural Language Learning. New York: ACM, 2011: 154–162.

- [72] VEGA-OLIVEROS D A, BERTON L, EBERLE A M, et al. Regular graph construction for semi-supervised learning[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2014, 490: 012022.
- [73] DHILLON P S, TALUKDAR P P, CRAMMER K. Learning better data representation using inference-driven metric learning[C]//Proceedings of the ACL 2010 Conference Short Papers. [S.l.: s. n.], 2010: 377-381.
- [74] ROHBAN M H, RABIEE H R. Supervised neighborhood graph construction for semi-supervised classification[J]. Pattern Recognition, 2012, 45(4): 1363-1372.
- [75] BERTON L, DE ANDRADE LOPES A. Graph construction based on labeled instances for semi-supervised learning[C]//Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Pattern Recognition. Piscataway: IEEE Press, 2014: 2477-2482.
- [76] ZHUANG L S, ZHOU Z H, GAO S H, et al. Label information guided graph construction for semi-supervised learning[J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2017, 26(9): 4182-4192.
- [77] TAHERKHANI F, KAZEMI H, NASRABADI N M. Matrix completion for graph-based deep semi-supervised learning[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2019, 33(1): 5058-5065.
- [78] KIPF T N, WELING M. Variational graph auto-encoders[EB]. arXiv preprint, 2016, arXiv: 1611.07308.
- [79] SUN K, LIN Z C, ZHU Z X. Multi-stage self-supervised learning for graph convolutional networks on graphs with few labeled nodes[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2020, 34(4): 5892-5899.
- [80] VELICKOVIC P, FEDUS W, HAMILTON W L, et al. Deep graph infomax[J]. ICLR (Poster), 2019, 2(3): 4.
- [81] YOU Y N, CHEN T L, SUI Y D, et al. Graph contrastive learning with augmentations[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33: 5812-5823.
- [82] QIU J Z, CHEN Q B, DONG Y X, et al. GCC: graph contrastive coding for graph neural network pre-training[C]//Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2020: 1150-1160.
- [83] WANG X, JI H Y, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network[C]//Proceedings of the World Wide Web Conference. New York: ACM, 2019: 2022-2032.
- [84] YUN S, JEONG M, KIM R, et al. Graph transformer networks[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: ACM, 2019: 11983-11993.
- [85] HONG H T, GUO H T, LIN Y C, et al. An attention-based graph neural network for heterogeneous structural learning[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. [S.l.: s. n.], 2020: 4132-4139.
- [86] HU Z N, DONG Y X, WANG K S, et al. Heterogeneous graph transformer[C]//Proceedings of the Web Conference 2020. [S.l.: s. n.], 2020: 2704-2710.
- [87] YANG Y M, GUAN Z Y, LI J X, et al. Interpretable and efficient heterogeneous graph convolutional network[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(2): 1637-1650.
- [88] FU T Y, LEE W C, LEI Z. HIN2Vec: explore meta-paths in heterogeneous information networks for representation learning[C]//Proceedings of the 2017 ACM on Conference on Information and Knowledge Management. New York:

- ACM, 2017: 1797–1806.
- [89] TU K, CUI P, WANG X, et al. Structural deep embedding for hyper-networks[EB]. arXiv preprint, 2017, arXiv: 1711.10146.
- [90] WANG H W, ZHANG F Z, HOU M, et al. SHINE: signed heterogeneous information network embedding for sentiment link prediction[EB]. arXiv preprint, 2017, arXiv: 1712.00732.
- [91] ZHANG Y M, FAN Y J, SONG W, et al. Your style your identity: leveraging writing and photography styles for drug trafficker identification in darknet markets over attributed heterogeneous information network[C]//Proceedings of the World Wide Web Conference. New York: ACM, 2019: 3448–3454.
- [92] CHANG S Y, HAN W, TANG J L, et al. Heterogeneous network embedding via deep architectures[C]//Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2015: 119–128.
- [93] ZHAO J N, WANG X, SHI C, et al. Network schema preserving heterogeneous information network embedding[C]//Proceedings of the 29th International Joint Conference on Artificial Intelligence. [S.l.:s.n.], 2020.
- [94] ZHANG J W, XIA C Y, ZHANG C W, et al. BL-MNE: emerging heterogeneous social network embedding through broad learning with aligned autoencoder[C]//Proceedings of the 2017 IEEE International Conference on Data Mining. Piscataway: IEEE Press, 2017: 605–614.
- [95] WANG L, SONG Y, HUANG H, et al. Modeling heterogeneous edges to represent networks with graph auto-encoder[C]//Database Systems for Advanced Applications: 25th International Conference. Cham: Springer, 2020: 498–515.
- [96] WANG H W, WANG J, WANG J L, et al. GraphGAN: graph representation learning with generative adversarial nets[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2018, 32(1): 99.
- [97] HU B B, FANG Y, SHI C. Adversarial learning on heterogeneous information networks[C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2019: 120–129.
- [98] ZHAO K, BAI T, WU B, et al. Deep adversarial completion for sparse heterogeneous information network embedding[C]//Proceedings of the Proceedings of The Web Conference 2020. New York: ACM, 2020: 508–518.
- [99] RUAN C Y, WANG Y, MA J G, et al. Adversarial heterogeneous network embedding with metapath attention mechanism[J]. Journal of Computer Science and Technology, 2019, 34(6): 1217–1229.
- [100] LAN T, WU C X, YU C Y, et al. Adversarial network embedding on heterogeneous information networks[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2020, 1693(1): 012018.
- [101] YANG L W, XIAO Z B, JIANG W, et al. Dynamic heterogeneous graph embedding using hierarchical attentions[M]//Advances in Information Retrieval. Cham: Springer, 2020: 425–432.
- [102] XUE H S, YANG L W, JIANG W, et al. Modeling dynamic heterogeneous network for link prediction using hierarchical attention with temporal RNN[C]//Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Cham: Springer, 2021: 282–298.
- [103] YUAN C Y, LI J C, ZHOU W, et al. Dy-HGCN: a dynamic heterogeneous graph convolutional network to learn users' dynamic preferences for information diffusion prediction[M]//Machine Learning and Knowledge Discovery in

Databases. Cham: Springer, 2021: 347–363.

[104]WANG X, LU Y F, SHI C, et al. Dynamic heterogeneous information network embedding with meta-path based proximity [J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2022, 34(3): 1117–1132.

[105]BIAN R, KOH Y S, DOBBIE G, et al. Net-work embedding and change modeling in dynamic heterogeneous networks[C]// Proceedings of the 42nd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. New York: ACM, 2019: 861–864.

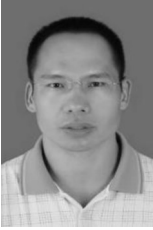
作者简介



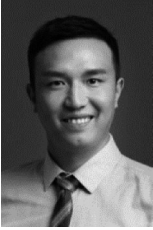
**张旭龙**（1988–），男，博士，平安科技（深圳）有限公司，高级算法研究员，复旦大学计算机理学博士，2023年入选上海市东方英才计划青年项目。兼任深圳清华大学研究院及中国科学技术大学先进技术研究院校外导师，中国自动化学会联邦数据与联邦智能专业委员会委员。目前是IEEE、中国自动化学会以及中国计算机学会会员。主要研究方向为大模型、具身智能、跨模态智能计算以及模型上下文协议（MCP）等。发表学术论文80余篇，申请国家发明专利授权20余项。



**瞿晓阳**（1988–），男，博士，平安科技（深圳）有限公司前沿机器学习算法分组负责人，清华大学深圳国际研究生院校外导师，中国科技大学先进技术研究院校外导师，中佛罗里达大学访问学者，从事机器学习、大数据、体系结构方面的研究工作，在语音语义分析、自动化机器学习、零样本和小样本学习、高性能计算与存储等方面经验丰富。在体系结构方向（如INFOCOM、DAC、IPDPS、TPDS）和人工智能方向（如NeurIPS、IJCAI、ICASSP、Interspeech）等国际会议和期刊发表过近50篇文章，其中1篇论文荣获会议最佳学生论文奖提名；担任多个国际期刊的评委，已授权专利70篇，已出版专著2本。



**肖春光**（1976–），男，深圳市宝安区教育事业发展中心高级教师，主要研究方向为教育数字化、网络安全、信息化教学创新。



**王健宗**（1983–），男，博士，平安科技（深圳）有限公司副总工程师，资深人工智能总监，联邦学习技术部总经理，智能金融前沿技术研究院院长。美国佛罗里达大学人工智能博士后，美国莱斯大学和华中科技大学联合培养博士，中国计算机学会资深会员，中国计算机学会大数据专家委员会委员，中国自动化学会联邦数据和联邦智能专业委员会副主任。主要研究方向为大模型、联邦学习和深度学习等。

收稿日期: 2025-03-24

通信作者: 王健宗, jzwang@188.com

基金项目: 广东省重点领域研发计划“新一代人工智能”重大专项(No.2021B0101400003)

Foundation Item: The Key Research and Development Program of Guangdong Province (No.2021B0101400003)