

# 基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法综述



软件学报

汇报人：庞媛媛

2025/8/31

# 目 录



研究背景与挑战



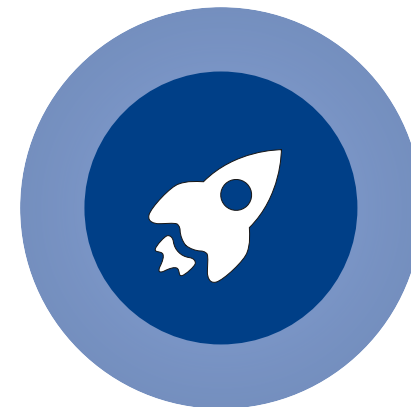
复杂时空融合架构



时空大模型



应用与数据集



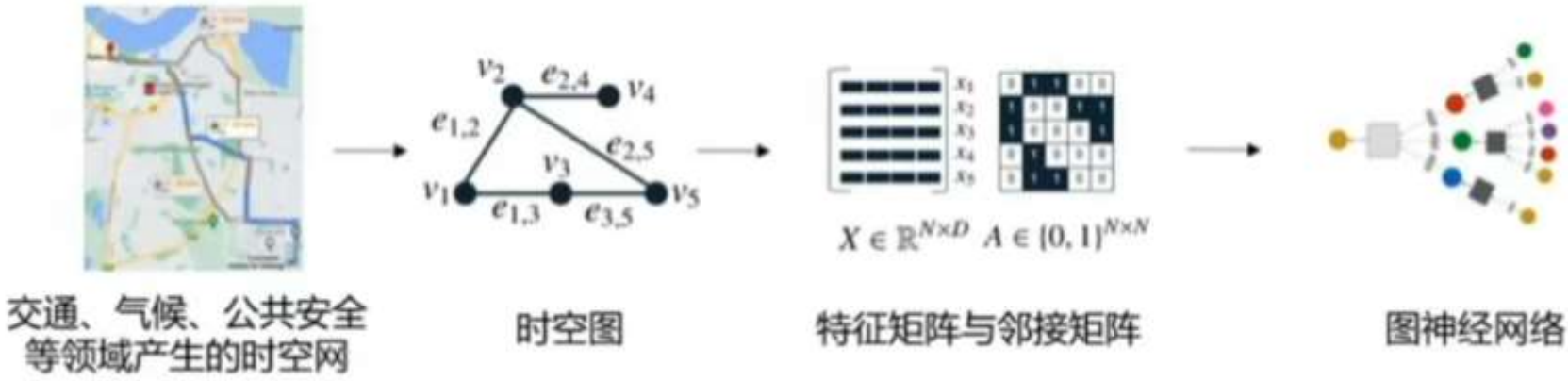
未来展望

# 1.研究背景与挑战

■ 时空数据挖掘：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

表1 简单时空数据和复杂时空数据对比

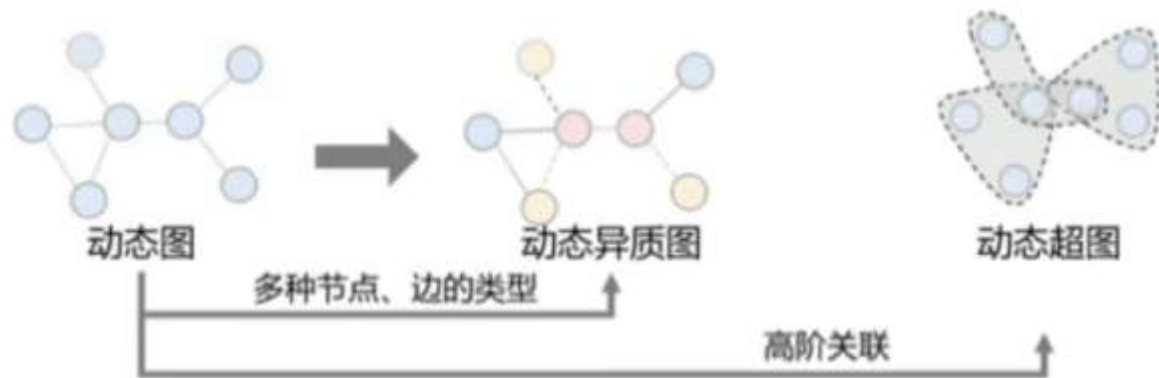
比较项	简单时空数据	复杂时空数据
数据结构	结构简单, 时间维度大多为一维, 空间维度则为二维, 多以网格的形式存在	结构复杂, 可能具有多维结构且具有异质性, 多以时空图的形式存在
数据特征	特征较少且表示的含义较为简单	特征复杂多样, 包含大量的时空相关属性且属性间具有关联性
数据关系	时空数据间关系较为简单, 通常为线性关系	时空数据间关系较为复杂, 可能具有非线性和相关性
数据处理方法	传统的统计方法和机器学习方法	时序图神经网络和其他深度学习方法的结合



# 1.研究背景与挑战

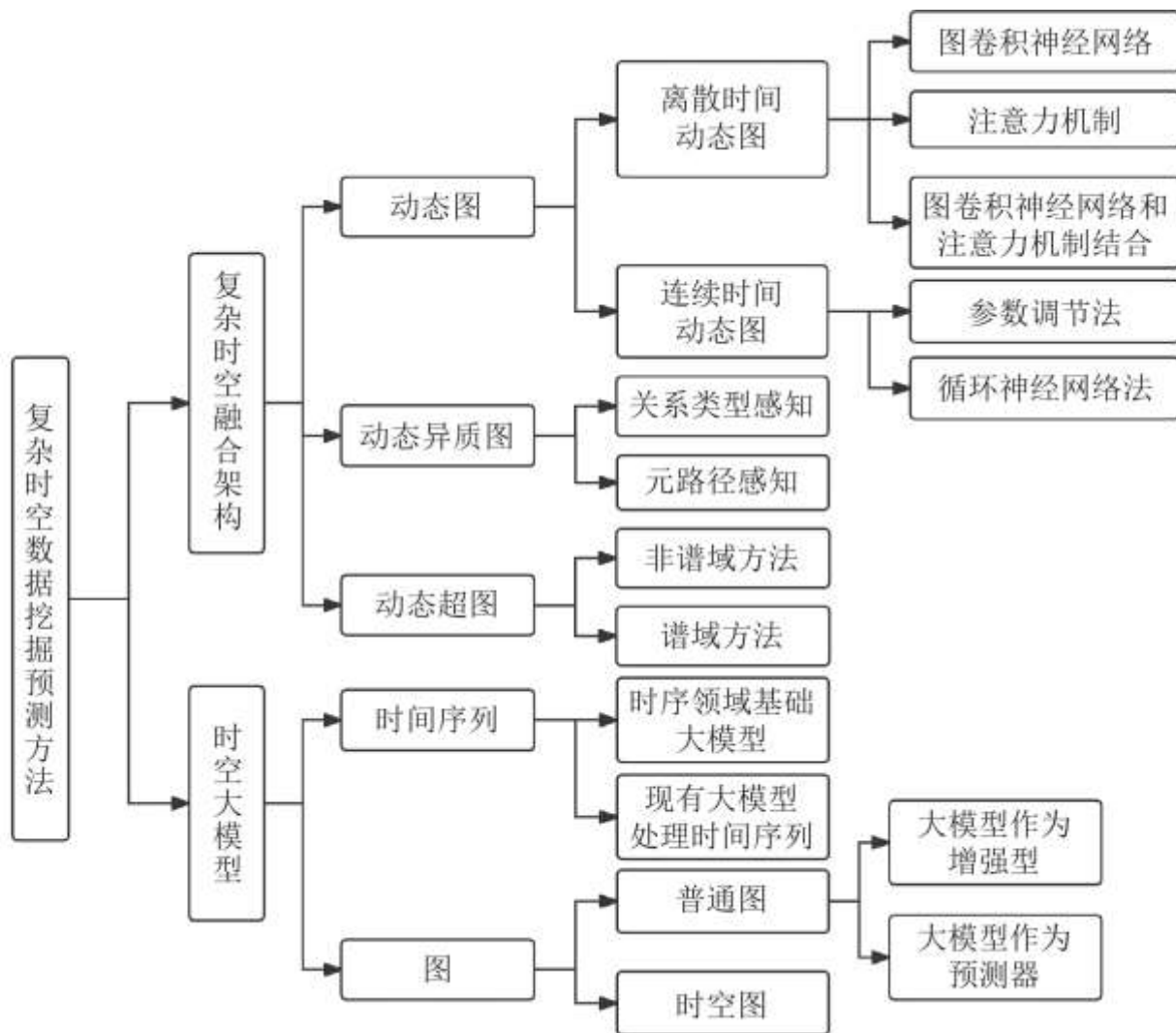
- 挑战1: 跨区域和跨时间的时空图数据具有**分布偏差**的问题
- 挑战2: 现有时空图模型缺乏可解释性和可扩展性
- 贡献1: 提出更细致的分类框架, 从动态图、动态异质图、动态超图角度对时空融合架构进行介绍
- 贡献2: 对基于图神经网络的复杂时空数据挖掘方法进行更全面和深入的归纳总结
- 贡献3: 详细总结时空图大模型相关的大模型

## 动态图、动态异构图与动态超图:



# 1.研究背景与挑战

图1 复杂时空数据挖掘预测方法分类





## 2.复杂时空融合架构

- 基于动态图的时空融合架构（时间粒度不同）
- 基于离散时间动态图的时空融合架构（捕获快照间的交互）

### 图卷积神经网络:

STGCN(谱域GCN+TCN, “三明治”结构串联)、

Graph WaveNet(自适应邻接矩阵的空域 GCN+基于门控机制的扩张因果卷积, 串联)、

DeepSTUQ (空域 GCN+自适应图学习模块+GRU, 耦合)

### 注意力机制:

ST-GFSL (GRU+GAT, 加权和)

### 图卷积神经网络和注意力机制结合:

ASTGCN (空间注意力机制+时间注意力机制+谱域 GCN, 耦合与串联)

LSGCN(新的图注意网络 cosAtt+谱域 GCN+GLU)

- ◆ 局限1: 无法提取到每个时刻的信息, 可能会造成信息的丢失,;
- ◆ 局限2: 不同时间间隔的选择也可能会影响最终模型的性能。

按对空间信息提取方法不同划分

- 基于连续时间动态图的时空融合架构（捕获快照内部的交互）

### 参数调节法:

CMOD: 在事件发生时连续更新节点的连续时间表示, 在更细粒度的时间尺度上学习节点的演化动态, 并通过多级结构将节点级信息投射到集群级和区域级, 最后融合多级节点信息进行建模。

### 循环神经网络法:

CDOD: 循环神经网络更新节点信息, 图注意力块集成空间信息。其中包含的连续时间表示学习模块 (CTRL)集成了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三个子模块, 用于高效地进行连续时间建模。

按节点内存更新方式不同划分

- ◆ 局限1: 方法复杂, 需要每个时间需要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;
- ◆ 局限2: 性能依赖于初始状态和参数的选择, 鲁棒性较低。

## 2.复杂时空融合架构

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>	基于图卷积神经网络和离散时间	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>		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>		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>	基于图卷积神经网络和注意力机制结合和离散时间	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	交通流预测
LSGCN <sup>[23]</sup>		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	
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



## 2.复杂时空融合架构

- 基于动态异质图的时空融合架构（节点特征聚合时信息传递方式不同）
- 基于关系类型感知的时空融合架构

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。

- 基于元路径感知的时空融合架构

将节点之间的特定关系序列构建为元路径，捕获高阶的语义信息。

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

- ◆ 基于关系类型感知的方法：应用广泛；但建模的空间关系简单，对于高阶语义信息捕获不足；
- ◆ 基于元路径感知的方法：能建模节点间的不同类型的高阶关系，使得方法更适应于更多样的图结构；但建模复杂，需要领域知识辅助设计。



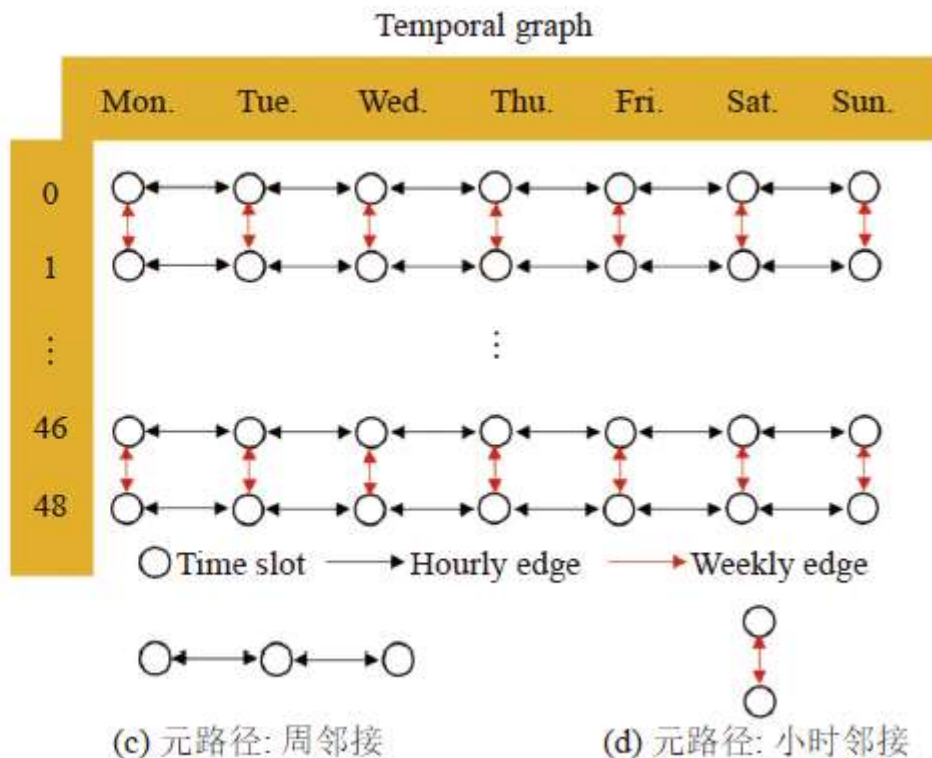
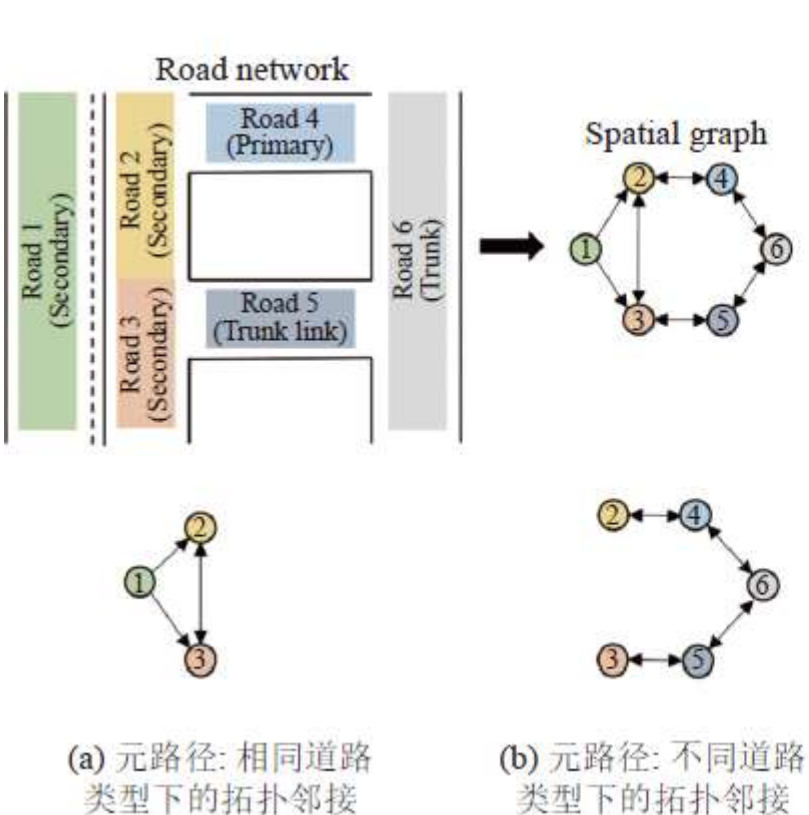
## 2. 复杂时空融合架构

### □ 基于元路径感知的时空融合架构-HAN

将节点之间的**特定关系序列**构建为元路径，捕获**高阶的语义信息**。

空间维度上：构建两种不同的元路径，区别在于相邻路段的道路类型是否相同

时间维度上：构建两种不同的元路径



## 2.复杂时空融合架构

■ 基于动态超图的时空融合架构（空间域处理方式不同）

□ 基于非谱域方法

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。

□ 基于谱域方法

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。

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
DSTHGCN <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

### 3.时空大模型

面向2种与时空信息提取相关的不同类型的数据分类：基于时间序列的、基于图的

■ 基于时间序列的大模型

□ 时间领域基础大模型

- ①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；
- ②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~~，可能在提高预测准确性和可解释性方面具有显著的效果。

□ 现有大模型处理时间序列

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>	大模型处理时间序列	2023	用预训练语言模型的残差块改进时间序列预测任务	通用
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	
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>			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>		2023	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>			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



### 3.时空大模型

- 基于图的大模型
  - 基于普通图的大模型  
(不包含时间和空间拓扑信息)
- 按大模型在整个模型中扮演角色的不同分类

大模型作为增强器:  
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

大模型作为预测器:  
将大模型作为预测器直接用于  
下游预测任务

共通点: 普遍利用LLM在文本处理和生成方面的  
优势, 对附带丰富文本信息的图数据进行处理。

- 基于时空图的大模型

表6 基于图的大模型

方法	类型	时间	算法描述	应用
GraphGPT <sup>[69]</sup>	基于普通图的大模型	2023	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	节点分类 链路预测
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	
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	
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, 用图形提示范式(GPP)针对图进行基于特定任务的修改	节点分类
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	
RLMRec <sup>[67]</sup>			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	时序知识图谱补全
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	
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>	基于时空图的大模型	2024	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	交通预测
UrbanGPT <sup>[73]</sup>			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	
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	

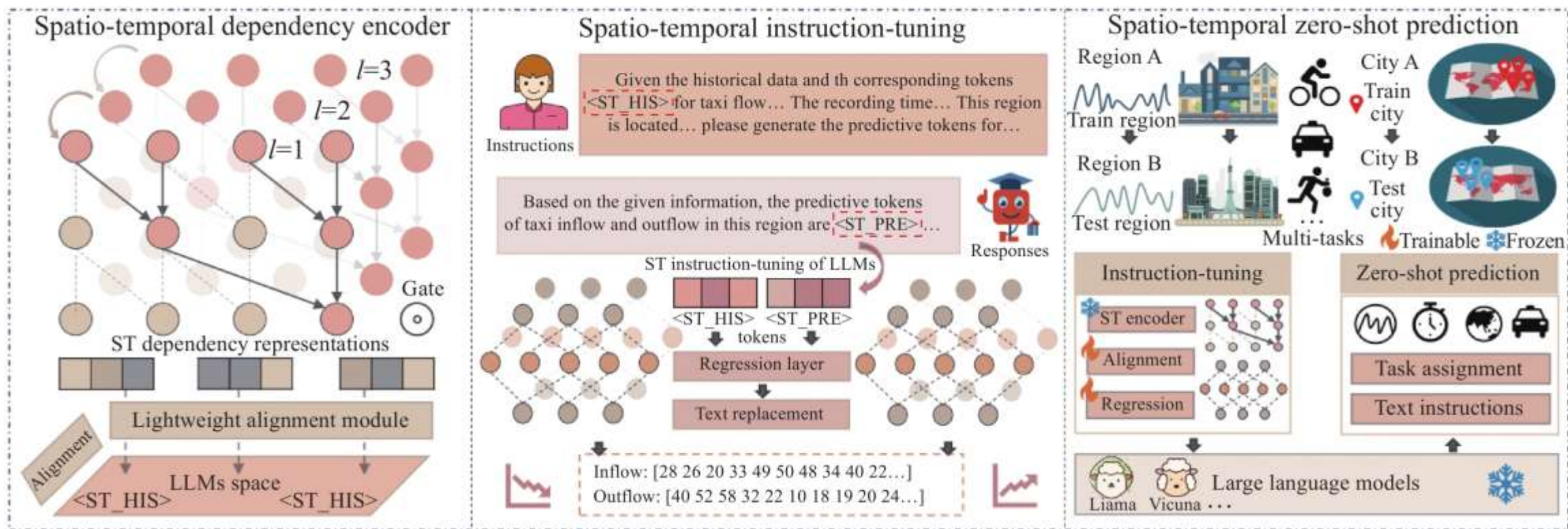


## 3.时空大模型

### ■ 基于图的大模型

### □ 基于时空图的大模型（包括时间和空间拓扑信息）

UrbanGPT（时空编码器+对齐模块+LLM生成预测）



- **挑战:** 大规模、多样化时空数据的匮乏, 大模型对数值数据较弱的处理能力.
- **展望:** 引入更丰富的文本信息, 与LLM处理文本的优势相结合;
- 通过不同特征空间的对齐, 解决数据带来的噪声问题, 减小大模型幻觉, 提高模型的可解释性.

# 4.应用与数据集

## ■ 应用



## ■ 数据集

表7 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>

## 5.未来展望

### ➤ 在线性:

关注动态图的实时更新与增量训练技术，以应对动态变化的数据场景。

### ➤ 可解释性:

结合因果推理方法，对时空模式进行深入挖掘，提高模型的透明度和可解释性。

### ➤ 大模型:

探索跨领域知识迁移、时空数据挖掘领域的垂直领域大模型开发，以及支持多样化学习任务的大模型架构。

### ➤ 迁移性:

聚焦于知识转移方法和小样本学习技术，提升模型在低资源场景下的适应能力。

谢 谢！