



# 细粒度多模态分子图表示学习

---

穆莹

# 介绍

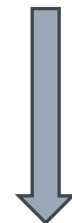
## 1. 研究背景与问题

### 核心问题：

现有分子表示学习方法（如MoleculeSTM、MoMu、MolCA）依赖**分子整体结构（SMILES、分子图）与文本的粗粒度对齐**，但忽视了**子结构（官能团、基元）与文本的细粒度关联**，导致：

**泛化能力受限**：难以处理包含已知子结构但整体未知的分子。

**下游任务性能不足**：在需要子结构认知的任务（如分子编辑）中表现不佳。



提出

### FineMolTex 框架

新型分子图-文本预训练框架，旨在通过细粒度对齐提升分子表示学习的效果。

## 核心创新

### 1. 双粒度学习:

1. **粗粒度**（分子级）：对比学习对齐分子图与文本描述。
2. **细粒度**（基元级）：掩码多模态建模任务，学习子结构（如“-COOH”）与文本片段（如“羧酸”）的关联。  
**羧酸的定义：以羧基为特征官能团的化合物**

### 2. 动态重要性掩蔽:

1. 优先掩蔽对分子性质关键的基元（如官能团）和文本词汇（如“chloride”），避免噪声干扰。

### 3. 跨模态交互:

1. 通过交叉注意力层整合分子图与文本信息，实现子结构-文本的相互预测。

# 方法

## 1. 核心思想

FineMolTex 是一种**分子图-文本预训练框架**，旨在同时学习分子的**粗粒度（分子级别）**和**细粒度（子结构级别）**知识，从而提升分子表示的质量。

**粗粒度知识**：整个分子的全局特征（如分子量、溶解度、毒性等）。

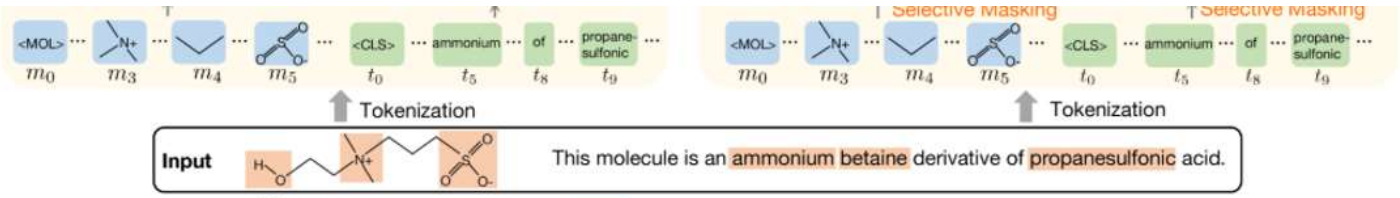
**细粒度知识**：分子内部的子结构（如官能团、反应位点、药效团等）。

传统方法通常只关注**分子级别的表示**，而 FineMolTex 额外建模**子结构与文本的细粒度关联**，使得模型能更精准地理解分子的局部化学特性。

# 核心组件

## 1.Tokenization 基元切分器

- 1. 将分子图分解为基元标记（如苯环、羧基）。
- 2. 将文本分解为单词标记（如“aromatic”“sulfonic acid”）。

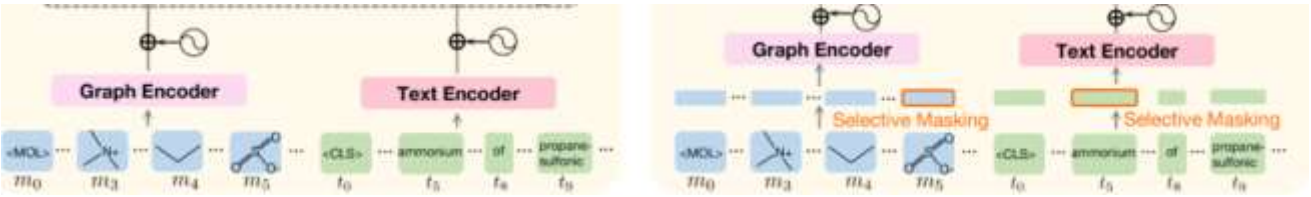


## 2.双模态编码器

- 1. 图编码器（ **Graph Encoder** ）：提取分子及基元的空间结构特征。
- 2. 文本编码器（ **Text Encoder** ）：提取文本语义特征。

输出：每个基序的向量表示

输出：每个单词 的上下文相关向量（如“acid”在化学文本中的含义）。



## 3.跨模态交互模块

- 1. 跨模态注意力层（ **Cross-Attention** ）：动态融合分子基元与文本单词的关联，让分子和文本的 token 互相参考，实现细粒度对齐。。
- 2. **Transformer**层：生成上下文感知的联合嵌入。让同一模态（分子或文本）内的 token 互相“交流”，增强上下文理解。

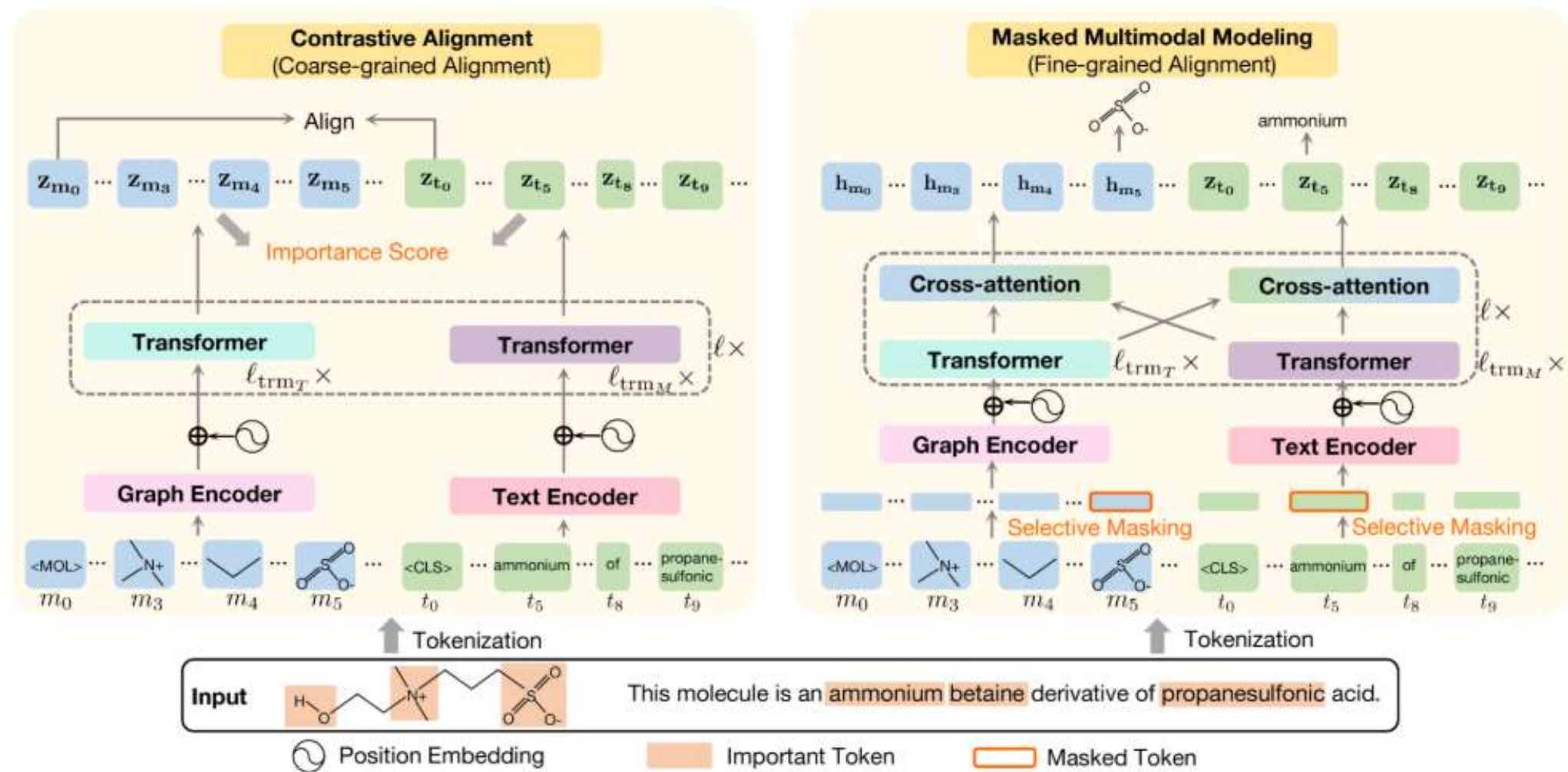


图 2. FineMolTex 的架构。输入是具有分子结构和相应描述的图形文本对。相同颜色的组件具有相同的权重。

FineMolTex 包含**两项预训练任务**，分别对应粗粒度和细粒度学习：

### (1) 对比对齐任务 (Coarse-grained Alignment)

**目标：**让模型学会**匹配整个分子图**与其对应的**文本描述**（如分子名称、SMILES 字符串或文献描述）。

**方法：**采用**对比学习 (Contrastive Learning)**，例如：

正样本：分子图 + 正确文本描述

负样本：分子图 + 错误文本描述

**作用：**确保模型能区分正确的分子-文本配对，学习分子级别的全局表示。

### (2) 掩码多模态建模任务 (Fine-grained Masked Multimodal Modeling)

**目标：**让模型学习**子结构与文本的细粒度关联**。

**方法：**

**选择性掩蔽 (Selective Masking)：**

在分子图中，随机掩蔽**重要分子基元**（如官能团）。

在文本中，掩蔽**相关词汇标签**（如“羟基”、“苯环”）。

**预测任务：**

模型需要利用**未被掩蔽的信息**（如部分分子图或文本）预测被掩蔽的内容。

例如：给定一个掩蔽了“-OH”的分子图，模型应能从文本描述中预测出“羟基”。

**作用：**

增强模型对**子结构-文本对应关系**的理解。

提升模型在**局部化学特征识别**上的能力。



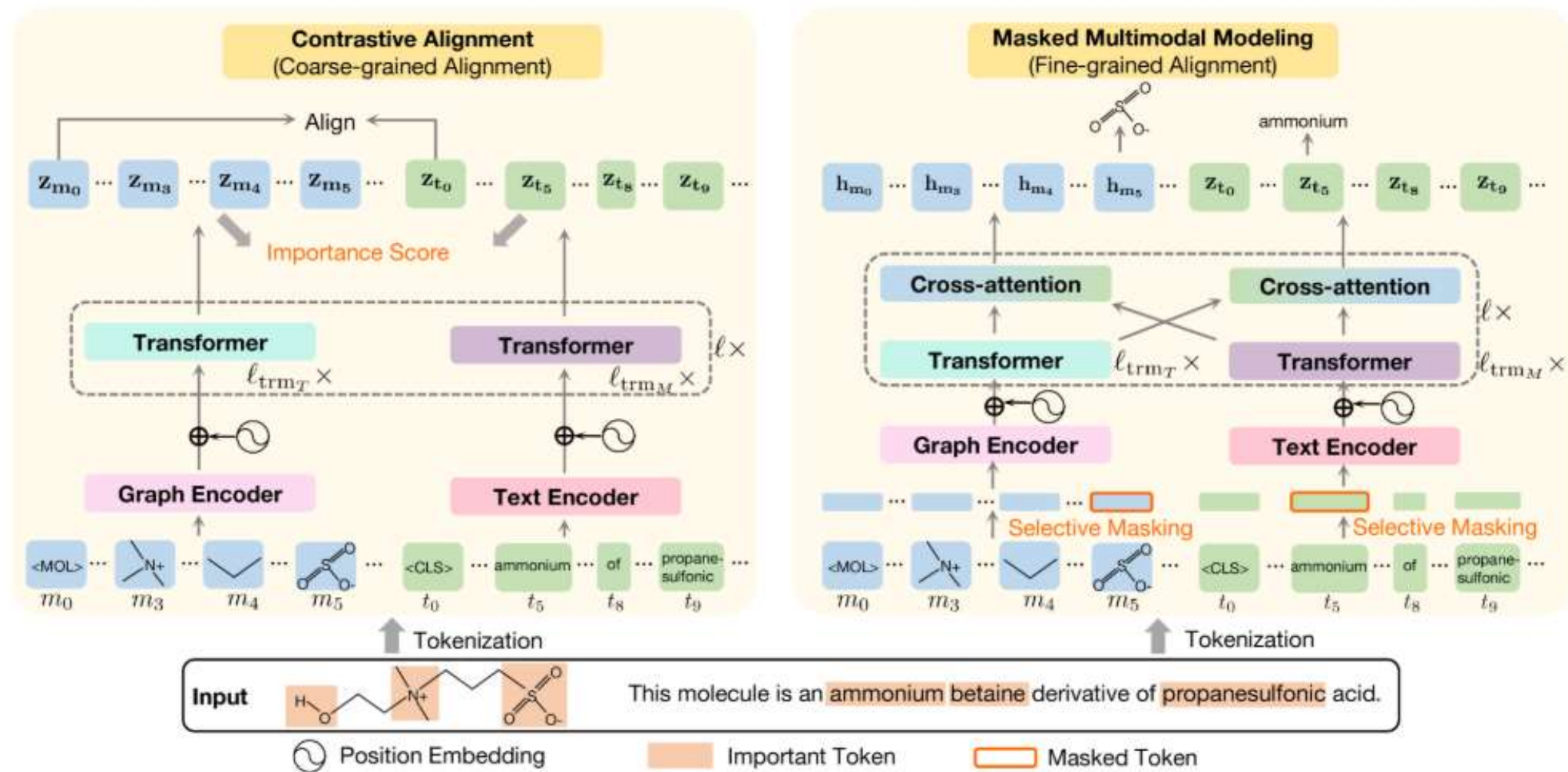


图 2. FineMolTex 的架构。输入是具有分子结构和相应描述的图形文本对。相同颜色的组件具有相同的权重。



### 3. 关键创新点

#### 1. 细粒度子结构建模

传统方法（如 MolT5、MolFM）仅关注**分子级别**的匹配，而 FineMolTex 额外建模**子结构-文本关联**，使模型能更精准地理解分子局部特征。

#### 2. 选择性掩蔽策略

不同于随机掩蔽（如 BERT 的 MLM），FineMolTex **优先掩蔽重要基元**（如官能团），迫使模型学习关键化学知识。

#### 3. 双模态协同学习

同时利用**分子图（结构信息）**和**文本（语义信息）**进行训练，增强模型的跨模态理解能力。

# 实验

目标: **验证一件事**: FineMolTex是不是真的能像“化学家+翻译官”一样, 既理解分子整体, 又懂局部基团和文本的对应关系?

**RQ1: 对未见分子的泛化能力**

**RQ2: 基于motif的任务表现**

**RQ3: 单模态任务表现**

**RQ4: 细粒度知识分析**

**RQ5: 消融实验**

# RQ1: 对未见分子的泛化能力（零样本检索）

## 任务

给定一个分子，从100个描述中找出正确的（或反之）。

难点：所有分子和文本都是模型没见过的（零样本）！

## 数据集

**DrugBank-Pharmacodynamics:** 药品分子+药理描述（如“此药通过抑制XX酶起作用”）。

**Molecule-ATC:** 药品+治疗分类（如“抗抑郁药”）。

表 3. 准确度（%±σ）的图文本检索任务。

<i>T</i>	给定分子图			给定文本		
	4	10	20	4	10	20
<b>KV-PLM</b>	68.38±0.03	47.59±0.03	36.54±0.03	67.68±0.03	48.00±0.02	34.66±0.02
<b>摩尔CA</b>	83.75±0.54	74.25±0.26	66.14±0.21	81.27±0.33	69.46±0.17	62.13±0.16
<b>MoMu-S</b>	70.51±0.04	55.20±0.15	43.78±0.10	70.71±0.22	54.70±0.31	44.25±0.43
<b>MoMu-K</b>	69.40±0.11	53.14±0.26	42.32±0.28	68.71±0.03	53.29±0.05	43.83±0.12
<b>3D-MoLM</b>	81.35±0.14	73.65±0.13	64.79±0.15	79.78±0.22	62.38±0.16	53.43±0.11
<b>MV-摩尔</b>	92.24±0.26	85.38±0.19	79.41±0.43	91.28±0.13	85.32±0.15	80.37±0.22
<b>分子STM</b>	92.14±0.02	86.27±0.02	81.08±0.05	91.44±0.02	86.76±0.03	81.68±0.03
<b>精细摩德克斯</b>	96.78±0.05	92.48±0.02	87.94±0.14	96.29±0.12	91.65±0.15	85.07±0.11

## RQ2: 基于motif的任务表现（分子编辑）

### 任务

按照文本指令修改分子，比如：

指令1：“增加水溶性” → 模型应加入“-OH”或“-COOH”。

指令2：“加入氯原子” → 模型需在特定位置加“-Cl”。

### 评测方法

1.物理性质类指令：用计算工具检查修改后的性质（如LogP值变化）。

2.基团类指令：用RDKit检查是否真的加入了指定基团。

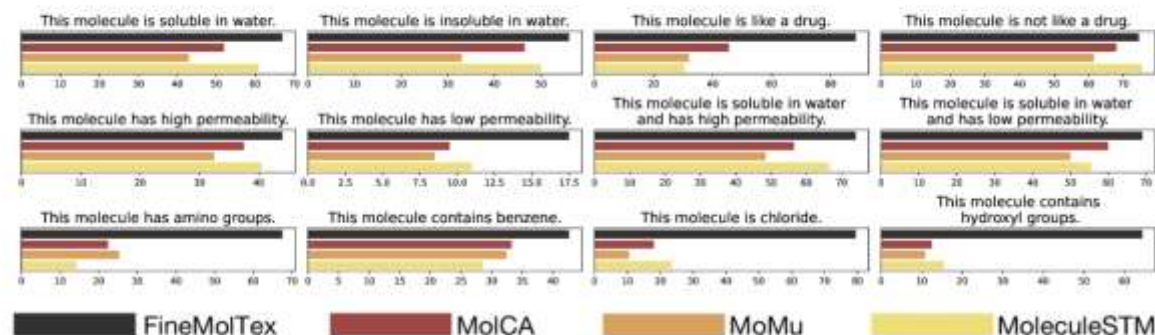


图 3. 12 个基于文本的分子编辑任务的命中率。

### RQ3: 单模态任务表现（分子性质预测）

#### 任务

预测分子的8种性质（如毒性、是否穿透血脑屏障）。  
特殊设定：只给分子结构，不给文本描述（测试单模态能力）。

#### 数据集

- BBBP**: 预测分子能否穿过血脑屏障。
- Tox21**: 检测分子毒性。

Table 6. Downstream results ( $\% \pm \sigma$ ) on eight binary classification datasets from MoleculeNet.

Model	BBBP	Tox21	ToxCast	Sider	ClinTox	MUV	HIV	Bace	Avg
AttrMask	67.8 $\pm$ 2.6	75.0 $\pm$ 0.2	63.6 $\pm$ 0.8	58.1 $\pm$ 1.2	75.4 $\pm$ 8.8	73.8 $\pm$ 1.2	75.4 $\pm$ 0.5	80.3 $\pm$ 0.0	71.2
ContextPred	63.1 $\pm$ 3.5	74.3 $\pm$ 0.2	61.6 $\pm$ 0.5	60.3 $\pm$ 0.8	80.3 $\pm$ 3.8	71.4 $\pm$ 1.4	70.7 $\pm$ 3.6	78.8 $\pm$ 0.4	70.1
InfoGraph	64.8 $\pm$ 0.6	76.2 $\pm$ 0.4	62.7 $\pm$ 0.7	59.1 $\pm$ 0.6	76.5 $\pm$ 7.8	73.0 $\pm$ 3.6	70.2 $\pm$ 2.4	77.6 $\pm$ 2.0	70.0
MolCLR	67.8 $\pm$ 0.5	67.8 $\pm$ 0.5	64.6 $\pm$ 0.1	58.7 $\pm$ 0.1	84.2 $\pm$ 1.5	72.8 $\pm$ 0.7	75.9 $\pm$ 0.2	71.1 $\pm$ 1.2	71.3
GraphMVP	68.1 $\pm$ 1.4	77.1 $\pm$ 0.4	65.1 $\pm$ 0.3	60.6 $\pm$ 0.1	84.7 $\pm$ 3.1	74.4 $\pm$ 2.0	77.7 $\pm$ 2.5	80.5 $\pm$ 2.7	73.5
GraphCL	69.7 $\pm$ 0.7	73.9 $\pm$ 0.7	62.4 $\pm$ 0.6	60.5 $\pm$ 0.9	76.0 $\pm$ 2.7	69.8 $\pm$ 2.7	78.5 $\pm$ 1.2	75.4 $\pm$ 1.4	70.8
KV-PLM	70.5 $\pm$ 0.5	72.1 $\pm$ 1.0	55.0 $\pm$ 1.7	59.8 $\pm$ 0.6	89.2 $\pm$ 2.7	54.6 $\pm$ 4.8	65.4 $\pm$ 1.7	78.5 $\pm$ 2.7	68.2
MoMu-S	70.5 $\pm$ 2.0	75.6 $\pm$ 0.3	63.4 $\pm$ 0.5	60.5 $\pm$ 0.9	79.9 $\pm$ 4.1	70.5 $\pm$ 1.4	75.9 $\pm$ 0.8	76.7 $\pm$ 2.1	71.6
MoMu-K	70.1 $\pm$ 1.4	75.6 $\pm$ 0.5	63.0 $\pm$ 0.4	60.4 $\pm$ 0.8	77.4 $\pm$ 4.1	71.1 $\pm$ 2.7	76.2 $\pm$ 0.9	77.1 $\pm$ 1.4	71.4
MolCA	70.0 $\pm$ 0.5	<b>77.2<math>\pm</math>0.5</b>	64.5 $\pm$ 0.8	63.0 $\pm$ 1.7	89.5 $\pm$ 0.7	72.1 $\pm$ 1.3	77.2 $\pm$ 0.6	79.8 $\pm$ 0.5	74.2
MoleculeSTM	70.0 $\pm$ 0.5	76.9 $\pm$ 0.5	65.1 $\pm$ 0.4	61.0 $\pm$ 1.1	92.5 $\pm$ 1.1	73.4 $\pm$ 2.9	77.0 $\pm$ 1.8	80.8 $\pm$ 1.3	74.6
FineMolTex	<b>73.5<math>\pm</math>1.6</b>	77.1 $\pm$ 1.2	<b>68.6<math>\pm</math>0.9</b>	<b>64.8<math>\pm</math>1.4</b>	<b>92.5<math>\pm</math>0.8</b>	<b>76.3<math>\pm</math>1.2</b>	<b>79.0<math>\pm</math>1.4</b>	<b>84.0<math>\pm</math>1.5</b>	<b>76.9</b>

## RQ4: 细粒度知识分析

### 方法

**1.可视化:** 用t-SNE将基序和单词向量投影到2D平面, 观察是否聚类。

1. 例如: “苯环” “芳香” “共轭” 应该聚在一起。

**2.LIME解释:** 遮挡部分文本, 看模型预测基序时依赖哪些词。

### 发现

**基序-单词对齐:**

“羧基” ( $-\text{COOH}$ ) 的向量  $\approx$  “carboxylic acid” 的向量。

“磺酰胺” ( $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ ) 的向量  $\approx$  “antibacterial” 的向量  
(因为磺胺类抗菌)。

**错误案例:**

模型曾把“吡啶环”误关联到“碱性” (正确), 但也关联到“苦味” (实际无直接关系)

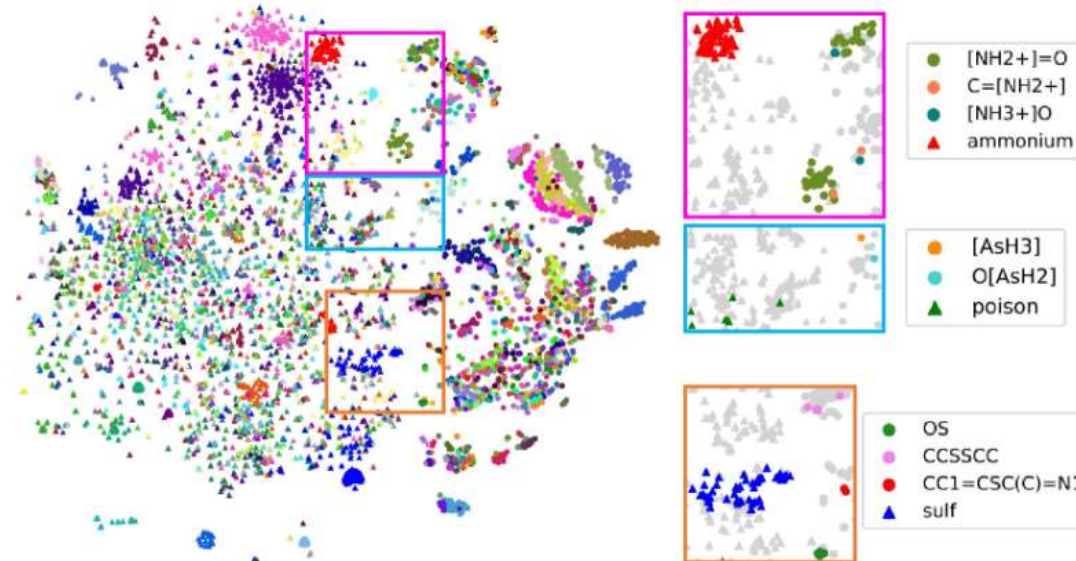


图 5. 使用t-SNE。三角形表示单词标记;圆圈表示主题标记。

## AI的化学笔记



### 测试组件

- 1.去掉跨模态注意力：**模型无法用文本帮助预测基序，性能暴跌15%。
- 2.随机掩码：**模型学会一堆无用信息（如“C”原子），编辑任务成功率下降40%。
- 3.仅掩码基序或仅掩码文本：**效果介于全模型和随机掩码之间。

# 总结

**理论贡献：**首次强调细粒度知识对分子-文本对齐的重要性。

**方法创新：**提出结合全局对比对齐和局部掩码预测的双任务框架，通过动态重要性掩码提升效率。

**应用价值：**在药物发现、催化剂设计等场景中展现出潜力，如分子编辑任务的显著改进。

FineMolTex通过细粒度对齐分子结构与文本描述，显著提升了分子表示学习的泛化能力和任务适应性，为多模态分子建模提供了新思路。实验证明其在检索、生成和预测任务中的优越性。



# 时序知识图谱 (TKG)

---

穆莹

# 时序知识图谱的定义

时序知识图谱(Temporal Knowledge Graph, TKG)是在传统知识图谱基础上引入时间维度的知识表示形式，将事实三元组扩展为四元组(h,r,t,τ)，其中：

h ∈ E: 头实体

r ∈ R: 关系

t ∈ E: 尾实体

τ ∈ T: 时间戳或时间区间

形式化表示为：G = (E, R, T, F)，其中F ⊆ E × R × E × T是事实四元组集合

## 与传统知识图谱的区别

特性	静态知识图谱	时序知识图谱
事实表示	(h, r, t)	(h, r, t, τ)
时间敏感性	无	事实仅在特定时间有效
演化能力	无法建模变化	可捕捉实体关系的动态演变
推理任务	实体/关系预测	增加时间预测和未来事件预测
应用场景	通用知识库	动态系统分析(金融、社交网络等)

# 技术体系与分类框架



多维分类体系						
按时间建模方式		按表示学习范式		按推理任务类型		
<p><b>静态快照法:</b> 将TKG分解为时间片序列 <math>\{G_1, G_2, \dots, G_T\}</math> 代表模型: RE-Net、RE-GCN 优点: 可直接应用静态图谱方法 缺点: 忽略时间连续性</p> <p><b>连续时间法:</b> 将时间作为连续变量建模 代表模型: Know-Evolve、HyTE 优点: 更精细的时间建模 缺点: 计算复杂度高</p>	<p><b>几何空间方法:</b> 翻译模型: t-TransE、TransE-TAE 双线性模型: TA-DisMult、TComplex 旋转模型: ChronoR、RotatE-T</p> <p><b>神经网络方法:</b> 序列模型: CyGNet、RE-Net 图神经网络: RE-GCN、TeMP 混合架构: CENET、EvoKG</p>	任务类型	输入	输出	评估指标	
		实体预测	$(h, r, \tau)$	$t$	MRR, Hits@K	
		关系预测	$(h, t, \tau)$	$r$	Accuracy	
		时间预测	$(h, r, t)$	$\tau$	MAE	
		未来事件预测	$(h, r, ?)$ $t > t_{max}$	$(h, r, t)$	F1-score	



# 关键技术与模型演进

## 基于静态扩展的方法

### t-TransE (2016)

**核心：**在TransE（知识图谱经典模型）基础上，给关系加上“时间标签”，让关系在不同时间段有不同的含义。

**怎么做的？**

**关系演化矩阵：**比如“师徒关系”在1990年和2020年的含义可能不同，用矩阵调整关系表示。

**时间冲突检测：**同一关系在同一时间段内不能有矛盾事实（比如一个人不可能同时在两个地方）。

**缺点：**只考虑关系随时间变化，忽略了实体本身的变化（比如人的年龄、职位变化）。

### HyTE (2018)

**核心：**把实体和关系投影到“时间专属空间”，不同时间的数据互不干扰。

**怎么做的？**

**时间超平面：**每个时间点（如2020年）有一个独立的空间，数据和其它时间的数据隔开。

**投影操作：**类似把2020年的数据放在A房间，2021年的数据放在B房间，避免混淆。

**优点：**简单直接，适合处理精确时间点（如“某天发生了什么”）。

**缺点：**无法处理时间段（如“某十年间的趋势”）。

# 关键技术与模型演进

## 基于动态建模的方法

### Know-Evolve (2017)

**核心：**用“事件流”建模，像预测地震一样预测知识图谱中事件发生的概率。

**怎么做的？**

**事件强度函数：**比如“A和B合作”这件事，上次发生越久，下次发生的概率越高（类似社交互动规律）。

**动态实体表示：**实体的表示随时间推移自动更新（比如人的影响力会变化）。

**适用场景：**适合建模连续发生的动态事件（如社交网络互动、论文引用）。

**缺点：**无法处理静态事实（如“中国的首都是北京”这种不随时间变化的知识）。

### RE-Net (2020)

**核心：**用“历史记忆”预测未来，像写小说一样一步步生成后续事件。

**怎么做的？**

**历史编码器：**用图神经网络（R-GCN）记住过去的所有事件。

**序列预测：**像自动写诗一样，按时间顺序一步步预测“谁在什么时间可能做什么”。

**优点：**能预测复杂的多步事件链（比如“A先发表论文，B再引用，C随后加入合作”）。

**缺点：**计算量大，需要大量历史数据。

# 关键技术与模型演进

## 前沿混合方法

### ChronoR (2021)

**核心：**用“时间旋转”让同一关系在不同时间有不同的解释，像调整时钟指针一样调整语义。

**怎么做的？**

**旋转操作：**比如“导师”关系在1990年指向“严格指导”，2020年指向“合作研究”，通过数学旋转区分。

**保持语义不变：**旋转后不破坏原始关系含义（“导师”还是“导师”，只是细节变化）。

**优点：**同时保留时间敏感性和语义一致性。

**缺点：**数学复杂，训练难度高。

### CENET (2023)

**核心：**用“双通道”解决冷启动问题，既看历史规律，又看全局趋势。

**怎么做的？**

**历史流：**重点关注过去出现过的实体（比如常合作的学者）。

**非历史流：**挖掘潜在的新实体（比如突然冒出的新锐学者）。

**创新点：**特别擅长预测罕见事件（比如突然爆发的科研热点）。

**缺点：**需要平衡两个通道的权重，调参复杂。

对比总结

静态扩展：给知识加时间标签（贴日历）。  
动态建模：让知识像电影一样动态演变。  
混合方法：既考虑时间标签，又允许动态调整。

方法	核心思路	擅长场景	短板
t-TransE	关系随时间微调	简单时间约束	忽略实体变化
HyTE	不同时间数据分开放	精确时间点事件	无法处理时间段
Know-Evolve	预测事件发生概率	连续事件流（如社交网络）	不能处理静态知识
RE-Net	用历史记忆一步步预测未来	复杂事件链	计算量大
ChronoR	旋转关系表示区分时间	时间敏感的关系语义	训练复杂
CENET	历史+全局双通道预测	冷启动/长尾事件	需平衡双流

# 这些都是怎么完成时序知识图谱里的“时序”这个问题的？

## 一、时序的数学表征形式

### 时间点 (Timestamp)

表示事件发生的具体时刻（如 "2023-01-01"）。

适用方法：HyTE、Know-Evolve。

### 时间区间 (Time Interval)

表示事实的有效时间段（如 "[2010, 2020]"）。

适用方法：t-TransE、ChronoR。

### 事件序列 (Event Sequence)

按时间排序的事实集合

（如  $(e1, r1, e2, t1) \rightarrow (e2, r2, e3, t2)$   $(e1, r1, e2, t1) \rightarrow (e2, r2, e3, t2)$ ）。

适用方法：RE-Net、Know-Evolve。

# 这些都是怎么完成时序知识图谱里的“时序”这个问题的？

## 二、时序建模的核心技术

### 1. 静态扩展方法

**思想：**在静态知识图谱嵌入（如TransE）基础上扩展时间维度。

**技术实现：**

**时间约束编码（t-TransE）：**

通过时间区间不相交约束保证时序逻辑一致性。

例：同一关系在同一实体的不同时间段必须互斥。

**时间超平面投影（HyTE）：**

将实体/关系投影到时间特定的超平面，实现时间解耦

**效果：**不同时间的表示空间相互独立。

### 2. 动态建模方法

**思想：**将时序视为连续过程，直接建模实体/关系的动态演化。

**技术实现：**

**时序点过程（Know-Evolve）：**

用强度函数  $\lambda_r^{h,t}(t)$  建模事件发生的概率密度：

$$\gamma_{p_1}^+(t) \propto \text{exb}(p(t)_{\perp} V^+(t)) \cdot e^{-\beta(t-t')^{\alpha}}$$

**物理意义：**事件概率随上次发生时间衰减（如社交互动）。

**自回归序列建模（RE-Net）：**

用GRU编码历史事件序列，预测未来事件的联合概率：

**关键：**显式建模事件间的时序依赖。



# 这些都是怎么完成时序知识图谱里的“时序”这个问题的？

## 二、时序建模的核心技术

### 3. 混合方法

思想：结合静态与动态优势，实现时间感知的几何变换。

技术实现：

时间旋转操作（ChronoR）：

在复数空间通过正交矩阵  $Q_{r,\tau} \in SO(d)$  旋转实体表示：  
 $h_\tau = Q_{r,\tau} h_r$     $Q_{r,\tau}^T Q_{r,\tau} = I$

优势：保持关系语义的同时引入时间敏感性。

双流对比学习（CENET）：

历史流捕捉时间局部性，非历史流建模全局分布，  
解决长尾问题

# 这些都是怎么完成时序知识图谱里的“时序”这个问题的？

## 三、时序逻辑的保障机制

### 时间冲突检测

如t-TransE的时间区间不重叠约束，确保事实的时间合理性。

### 时间衰减函数

Know-Evolve的  $\psi(t)=e^{-\beta t}$  建模事件影响力的衰减。

### 时序注意力

RE-Net通过GRU的隐状态自动学习事件间的时间依赖权重。

## 四、典型应用场景对比

场景	适用方法	时序处理特点
历史事实补全	t-TransE, HyTE	静态扩展时间维度
连续事件预测	Know-Evolve	强度函数建模事件流
多步未来预测	RE-Net	自回归序列生成
新事件冷启动	CENET	对比学习缓解数据稀疏

# 数据集

数据集	时间范围	时间粒度	实体数	关系数	四元组数	特点
ICEWS14	2014全年	24小时	6,869	230	96,730	政治事件密集
ICEWS05-15	2005-2015	24小时	10,094	251	461,329	长周期分析
GDELT	2014全年	15分钟	14,018	20	3,129万	超高频事件
YAGO15k	百年尺度	1年	15,403	34	138,056	常识知识为主
Wikidata	百年尺度	1年	11,134	95	150,079	新实体比例高(36.39%)

评估指标

1.标准指标

MRR（平均倒数排名）

Hits@{1,3,10}

2.时序特定指标

时间预测MAE

未来预测准确率

3.性能对比

最佳模型在ICEWS14上的演进：

Model	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10	参数量
t-TransE	0.083	0.056	0.092	0.142	2.1M
TA-DisMult	0.208	0.142	0.228	0.317	3.7M
RE-Net	0.455	0.382	0.486	0.581	8.2M
CyGNet	0.462	0.397	0.507	0.593	7.9M
CENET	0.533	0.482	0.541	0.592	9.6M

阶段	时间	技术特点	代表模型
萌芽期	2016-2017	静态模型 时间扩展	t-TransE
发展期	2018-2020	动态序列 建模	RE-Net
成熟期	2021-2023	多模态混 合架构	CENET

# 挑战和未来发展方向

**方法演进：**从静态扩展（2016-2018）到动态建模（2019-2021），再到混合方法（2022至今），MRR指标提升近6倍。

**技术共识：**GCN+时序编码的混合架构已成为主流，在ICEWS14上Top-3模型均采用此范式。

**待解问题：**时间预测精度（平均MAE 0.35）仍显著低于实体预测，反映时序建模的深层挑战。

## 时间编码瓶颈

当前方法对周期性、间隔建模不足

部分解决方案：BoxTE的时间盒子嵌入

## 增量学习效率

金融场景需要分钟级更新

突破方向：TIE的增量框架

## 评估标准缺陷

缺乏统一的外推测试集

论文建议：区分插值/外推任务

**应用前景：**金融和医疗领域被两篇论文共同列为最具潜力的应用方向，但需解决实时性（<100ms）和可解释性需求。

谢谢

OVER