前　言

近年来,由于图结构的强大建模能力,用机器学习方法分析图数据的研究越来越受到重视.图机器学习是一类基于机器学习的图数据处理方法.特别是,将经典卷积神经网络模型拓展到具有非欧特性的图数据而产生的图神经网络具有强大的结构和特征融合学习能力,已成为国际研究热点,是人工智能发展的前沿技术.图机器学习不局限于处理图数据,广泛应用于计算机视觉、自然语言处理、网络安全和药物发现等领域.

为进一步推动我国学者在图机器学习领域的研究,我们组织了本期“图机器学习”专题,聚焦图模型最新进展及其所面临的难题,报道相关领域的学者、科研人员、企业一线专家的研究成果.本专题于2024年5月征稿结束,经过30余位专家的两轮评审,最终收录了15篇论文,内容涵盖了图机器学习各个领域的最新研究进展,希望能够为同行学者带来帮助和启发.

接下来,本文将按照动态图学习、图推荐系统、图异常检测、图的可解释性以及图预训练五个方面,分别介绍本次专题收录的13篇文章,以展示我国在图机器学习专题方面的最新研究进展.

在动态图学习方面,中国人民大学王涵之等人的文章“动态有权图上的随机游走概率计算”针对动态有权图,提出了一种名为硬币翻转抽样的随机游走模拟方案以支持高效的动态图更新.人工智能与数字经济广东省实验室(深圳)何玉林等人的文章“针对大规模动态图流三角形计数的边哈希分布式抽样算法”通过边缘哈希分配策略在动态图流中利用分布式抽样提供准确的三角形计数估计.此外,南京大学李超等人的文章“图多智能体任务建模视角下的协作子任务行为发现”使用动态图来建模多智能体任务中的近似可分解结构,并提出协作子任务来增强智能体间局部以及全局协作.

在图推荐系统方面,中国科学技术大学卢晓凯等人的文章“GraphMLP-Mixer:基于图-多层感知机架构的高效多行为序列推荐方法”通过构建全局物品图来增强模型捕捉跨序列协作信号的能力,并利用感知机-混合器架构对用户兴趣进行充分挖掘.同时,山东科技大学张劲羽等人的文章“基于三分支图外部注意力网络的轻量化跨域序列推荐”将原始的跨域序列图分解成2个域内序列图和1个域间序列图,通过并行的三分支图卷积网络学习节点表示.而中国移动信息技术中心尚晶等人的文章“Graph4Cache:一种用于缓存预取的图神经网络模型”将单一访问序列建模为有向图,并引入虚拟节点来聚合节点信息和序列信息,以更好地确定缓存预取内容和提高缓存命中率.

在图异常检测方面,西南财经大学魏少朋等人的文章“面向企业信用风险评估的多视角异质图神经网络方法”利用多视角异质图神经网络分别挖掘企业内部传染风险和企业间传染风险,提供全面的信用风险评估.武汉大学林馥等人的文章“基于异常感知的变分图自编码器的图级异常检测算法”利用异常感知变分图自编码器同时提取正常和异常图数据的特征,用于图级异常检测.此外,西安交通大学曾智等人的文章“基于事件驱动的超图卷积网络的谣言检测方法”将用户、新闻和事件构建成统一的超图卷积网络来增强用户对于谣言的感知,并结合事件关联性来进行谣言检测.

在图的可解释性方面，中国科学院计算技术研究所李平等人的文章“HSEGRL：一种分层可自解释的图表示学习模型”引入了层次解释的概念，并设计了解释子来输出层次化的模型自解释结果和展示图模型的决策原理.而烟台大学祝传振等人的文章“基于元素分离与整体注意力的图卷积网络框架”在稠密连接的图中分离学习了图的连接特征和节点特征，增强了网络图的特征表达能力并提供了可解释性分析.

在图预训练方面，广东工业大学赖培源等人的文章“基于图提示微调的交通流量预测”通过引入图提示微调的范式，以及通过历史数据的预训练和可学习的提示向量，提升了交通流量预测模型的通用性.南京大学崔员宁等人的文章“基于规则提示的知识图谱通用推理预训练模型”通过筛选和利用高质量推理模式并设计基于置信度的注意力机制来减少低质量规则的影响，从而增强知识图谱的通用推理能力.

除了上述研究性论文外，本次专题还收录了2篇综述文章，以便于读者从更为宏观的视角了解图机器学习领域的前沿动态.其中，杭州电子科技大学焦鹏飞等人所撰写的“图神经常微分方程综述”一文从静态图、离散动态图和连续动态图三个方面探讨常微分方程在图神经网络所发挥的作用，并在鲁棒性、可解释性和与大模型相结合等方面对图神经ODE提出了展望.东北财经大学刘壮等人所撰写的“图终身学习：综述”一文则从6个方面，即基于重放的方法、基于正则化的方法、基于架构的方法、基于表示的方法、基于排练的方法和混合方法，来重新对图终身学习进行了较为完整的分类，并在收敛性、可扩展性、可解释性等方面对未来工作提出了展望.

作为人工智能领域前沿探索之一，图计算无疑正处于其发展的黄金时代.“以图之名，链接万物”不再仅仅是一种愿景，而已经成为推动大数据和高性能计算产业发展的核心驱动力之一.本专题所录用的15篇论文，无疑更进一步地向我们展现了这一领域的可喜现状与广阔前景.由于稿源丰富和专题篇幅有限等原因，本专题无法全面覆盖图机器学习领域各方面的最新研究进展，不当之处请同行学者批评指正！感谢各位作者、审稿专家和编辑部的全力支持和辛勤付出！

梁吉业（山西大学）
石川（北京邮电大学）
徐童（中国科学技术大学）
2024年7月