

融合位置和结构信息的图神经网络的节点学习研究

郝佳辉, 万源, 张宇航

引用本文

郝佳辉, 万源, 张宇航. 融合位置和结构信息的图神经网络的节点学习研究[J]. 计算机科学, 2025, 52(7): 110-118.

HAO Jiahui, WAN Yuan, ZHANG Yuhang. [Research on Node Learning of Graph Neural Networks Fusing Positional and Structural Information](#) [J]. Computer Science, 2025, 52(7): 110-118.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

[基于跨模态超图优化学习的多模态情感分析](#)

Cross-modal Hypergraph Optimisation Learning for Multimodal Sentiment Analysis
计算机科学, 2025, 52(7): 210-217. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240600127>

[基于知识感知的图优化推荐模型](#)

Knowledge-aware Graph Refinement Network for Recommendation
计算机科学, 2025, 52(7): 103-109. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240600120>

[BiGCN-TL:软件错误部分定位场景下二分图图卷积神经网络Transformer定位模型](#)

BiGCN-TL: Bipartite Graph Convolutional Neural Network Transformer Localization Model for Software Bug Partial Localization Scenarios
计算机科学, 2025, 52(6A): 250200086-11. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250200086>

[基于选择状态空间图神经网络的互联网应用用户画像分析](#)

Internet Application User Profiling Analysis Based on Selection State Space Graph Neural Network
计算机科学, 2025, 52(6A): 240900060-8. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240900060>

[基于解耦自适应动态图卷积的交通预测模型](#)

Traffic Prediction Model Based on Decoupled Adaptive Dynamic Graph Convolution
计算机科学, 2025, 52(6A): 240400149-8. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240400149>

融合位置和结构信息的图神经网络的节点学习研究

郝佳辉 万源 张宇航

武汉理工大学理学院 武汉 430070

(281797@whut.edu.cn)

摘要 图神经网络是一种强大的学习图数据的模型,通过节点信息嵌入和图卷积运算实现图结构数据的表示。图数据中节点的结构信息和节点的位置信息对获取图特征至关重要,但现有的图神经网络同时捕获位置信息和结构信息的表达能力有限。对此,提出了一种新的图神经网络——融合位置和结构信息的图神经网络(Positional and Structural Information with Graph Neural Networks,PSI-GNN)。PSI-GNN的核心思想在于利用编码器获取节点的位置和结构信息,并将这些信息特征嵌入到网络中。通过在网络中更新和传递这两种信息,PSI-GNN实现了对位置和结构信息的有效融合与利用,为解决上述问题提供了有效的解决方案。同时,为应对不同类型的图学习任务,PSI-GNN给予位置和结构信息以不同的权重来应对不同的下游任务。为了验证PSI-GNN的有效性,在多个基准图数据集上进行了实验。实验结果表明,PSI-GNN在节点级任务上最高提升了约14%,在图级任务上最高提升了约35%,验证了PSI-GNN在同时捕获位置和结构信息方面的有效性。

关键词:图神经网络;位置信息;结构信息;拉普拉斯位置编码;Adamic-Adar结构编码

中图分类号 TP391

Research on Node Learning of Graph Neural Networks Fusing Positional and Structural Information

HAO Jiahui, WAN Yuan and ZHANG Yuhang

School of Science, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China

Abstract Graph neural networks are powerful models for learning graph-structured data, representing them through node information embedding and graph convolution operations. In graph data, the structural information and positional information of nodes are crucial for extracting graph features. However, existing GNNs have limited expressive ability in simultaneously capturing positional and structural information. This paper proposes a novel graph neural network, named Positional and Structural Information with Graph Neural Networks(PSI-GNN). The core idea of PSI-GNN lies in utilizing an encoder to capture the positional and structural information of nodes and embedding these information features into the network. By updating and propagating these two types of information within the network, PSI-GNN effectively integrates and utilizes positional and structural information, providing an effective solution to the aforementioned problem. Additionally, to accommodate different types of graph learning tasks, PSI-GNN assigns varying weights to positional and structural information based on the specific downstream tasks. To validate the effectiveness of PSI-GNN, experiments are conducted on multiple benchmark graph datasets. The experimental results demonstrate that PSI-GNN achieves a maximum improvement of approximately 14% on node-level tasks and approximately 35% on graph-level tasks. These results confirm the effectiveness of PSI-GNN in simultaneously capturing positional and structural information.

Keywords Graph neural networks, Positional information, Structural information, Laplace position encoding, Adamic-Adar structural encoding

1 引言

图神经网络(Graph Neural Networks, GNNs)具有强大的图结构数据处理能力,通过捕捉节点间的复杂关系,能够有效地挖掘社交网络、知识图谱和分子结构等图结构数据中隐藏的有价值的信息。近年来,各种强大的GNNs在节点

分类^[1-2]、链接预测^[1,3]和图分类^[4]等常见的图任务上展现了强大的优势。Bruna等^[5]首次将卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)应用于图结构数据,提出了基于谱域的和基于空间域的图卷积神经网络(Graph Convolutional Networks, GCNs)。基于空间域的图卷积神经网络从图的节点出发,每个节点特征与其邻居节点特征进行聚合,形成新的

到稿日期:2024-04-15 返修日期:2024-09-05

基金项目:中央高校基本科研业务费专项资金(2021III030JC)

This work was supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China(2021III030JC).

通信作者:万源(wanyuan@whut.edu.cn)

节点表示,这个过程通过消息传播机制(Message Passing Neural Networks,MPNNs)^[6]实现。这种节点间的信息传递和聚合,使GNNs能够捕捉和处理图数据的复杂关系,实现对图结构数据的深度特征提取,成为GNNs的主要研究方向。尽管GNNs在很多方面取得了不错的效果,但Xu等^[7]证明了现有的GNNs在捕捉图拓扑结构的表达能力方面,具有与Weisfeiler-Lehman测试(WL-Test)一样的表达上限,具体限制体现在以下两个方面。1)如果图中两个节点位于不同的区域但具有相同的局部拓扑结构,GNNs无法将它们区分开来,但节点的位置信息反映了节点在图中的层次结构和邻域关系,节点位于图的不同位置意味着它们之间存在区别。例如,在社交网络分析中,节点的位置可能代表了用户的社交地位和影响力。2)具有相同的计算嵌入的节点可能对应于不同的邻居节点,即图结构是不同的,但现有GNNs根据计算嵌入无法有效区分不同的图结构,如度信息和邻居连接模式。

图1(a)给出了一个例子,在不考虑节点属性的情况下,GNNs无法将节点A和B分为不同的类别,因为它们有同构的邻居结构并且它们的计算嵌入是相同的。因此,从GNNs的角度来看,它们是无法区分的。Xu等^[7]开发了启发式方法来解决这个问题,用独热编码来增强节点特征或者使用更多层数的GNNs。然而,用独热编码训练的模型不能推广到任意图,并且任意多层数的GNNs仍然不能区分结构上的同构节点。同样地,如图1(b)所示,假设节点不具有结构区分特征,在图分类任务中,现有GNNs不能区分d-正则图(每个顶点具有相同的度 d)^[8],无论它们的深度如何,总是会为节点C和节点D分配相同的计算嵌入。

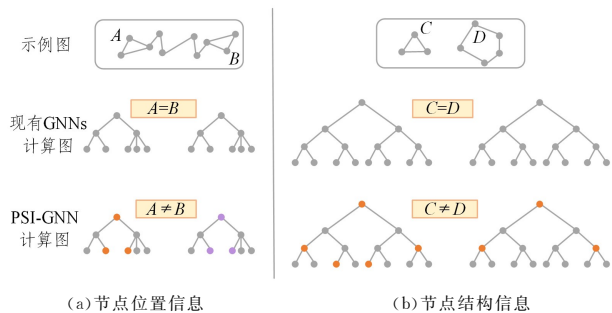


图1 现有GNNs与PSI-GNN的对比

Fig.1 Comparison between existing GNNs and PSI-GNN

为了突破现有的GNNs在捕捉节点位置信息方面的局限性,You等^[9]提出了位置感知图神经网络(Position-aware Graph Neural Networks,P-GNN),通过计算给定目标节点到每个锚节点的最短距离,捕获节点相对于锚节点的位置信息。You等^[10]提出了身份感知图神经网络(Identity-aware Graph Neural Networks,ID-GNN),解决了现有的GNNs受限于图同构检验的上界,通过在消息传递中对节点身份进行编码,使得现有GNNs架构能够捕获图的结构信息。然而,这些模型是为特定任务而设计的,通常只在位置信息和结构信息中选择其一,使得它们在可扩展性方面存在一定的局限性。为此,Chen等^[11]提出结构和位置感知图神经网络(Structure-and Position-aware Graph Neural Networks,SP-GNN),通过引入一种等距且位置感知的编码器以及一种可扩展的结构编码器,增强了GNNs架构的表达力。虽然SP-GNN同时引入了

位置和结构信息,但其不能在网络中学习,因此无法捕获深层次的位置和结构信息。

为了解决上述问题,本文将位置和结构信息与GNNs相结合,提出了融合位置和结构信息的图神经网络(PSI-GNN)。初始编码阶段,使用各自的编码器计算位置和结构嵌入,使得网络能够获得位置和结构信息。在特征更新阶段,采用类似节点特征更新的方式对位置和结构嵌入进行更新,使得网络能够学习到这两个特征。在特征融合阶段,将更新后的位置和结构嵌入与更新后的节点特征融合在一起,并用权重参数来平衡位置和结构信息对不同下游任务的重要性。在多个图数据集上对本文方法进行实验,并对比了目前主要的GNNs方法。实验结果表明,本文方法在节点级和图级任务中表现出更好的性能,并通过消融性分析证明了该模型的有效性。

2 相关工作

2.1 图神经网络

基于空间域的图卷积神经网络是GNNs的一个重要分支,现有的大多数模型基本上都是在此基础上变化推导而来的。Velickovic等^[12]提出了图注意力网络(Graph Attention Networks,GATs),首次将注意力机制引入到GNNs中,核心思想是通过神经网络学习不同邻居节点的权重,进而在对目标节点进行信息聚合时,只关注对目标节点作用大的节点,而忽视一些作用较小的节点。Hamilton等^[13]提出图采样和聚合(Graphs Sample and Aggregate,GraphSAGE),其并不需要为每一个节点训练单独的嵌入表示,而是通过学习一个可以先从目标节点的邻居进行采样然后再聚合特征的函数,然后借助该函数得到目标节点的嵌入表示。Chen等^[14]提出了基于初始残差和恒等映射的图卷积网络(Graph Convolutional Network via Initial residual and Identity mapping,GCNII),借鉴剩余连接的思路,为自己的模型设计出剩余连接变体,以提升模型的性能,同时成功缓解了过平滑的问题。

这些模型在节点级、边级和图级等任务中都取得了显著的效果。除了上述模型外,近期的研究还探讨了将其他信息纳入GNNs的问题,如节点与边上的多属性特征、图结构信息等^[15],以进一步扩展其应用领域以及提升性能表现。

2.2 节点位置编码

位置编码指图像中的像素、文本中的单词和图节点的全局位置概念,在卷积神经网络、循环神经网络以及Transformers^[16]等中发挥着重要作用。但在图结构数据中,节点不存在类似于图像中明确的上、下、左、右方位的全局位置和相对位置的概念,对于GNNs来说,节点的位置更具挑战性。理想的图节点位置编码,除了要为每个节点提供唯一的表示方法外,还应该具有置换不变性和距离敏感性,即图上两个较远节点的位置编码应该相差很大,而两个较近节点的位置编码则相差很小。

Li等^[17]提出距离编码(Distance Encoding,DE),利用随机游走矩阵的幂次来捕获图中节点之间的相对距离。所得到的GNNs比WL-Test具有更好的表达能力,但矩阵幂的计算成本和内存要求阻碍了其在大型图上的使用。You等^[9]提出了位置感知图神经网络(Position-aware Graph Neural Net-

works, P-GNN), 通过计算每个节点与选定锚节点之间的最短路径距离作为位置嵌入, 并与 GNNs 表示相结合, 然后将其输入到分类层。由于随机选择锚节点有其局限性, 因此他们提出的方法在归纳任务上的泛化能力较弱。Nishad 等^[18] 提出图可达性评估 (Graph Reachability Estimations, Graph-Reach), 通过贪婪爬山算法选择具有最大可达性的锚节点扩展了 P-GNN 方法。这种评估可以帮助模型更准确地识别重要节点和子图, 但需要对整个图进行多次迭代, 计算复杂度较高, 限制了其在大型图上的使用。Dwivedi 等^[19] 提出了基准图神经网络 (Benchmarking Graph Neural Networks, Benchmark-GNNs), 通过计算图的拉普拉斯特征向量作为模型的输入, 用于特征增强。拉普拉斯特征向量形成了一个有意义的局部坐标系, 同时保持全局图结构。但由于矩阵的特征向量可能具有正负两种符号, 这类位置编码存在符号模糊现象。

2.3 节点结构编码

另一方面, 大多数 GNNs 方法需要一个完整的图结构来学习信息嵌入, 但图拓扑结构通常存在噪音, 这在数据收集过程中是不可避免的。为了应对上述挑战, 人们从不同角度对嵌入图结构网络进行了大量研究。

Wang 等^[20] 提出结构深度网络嵌入 (Structural Deep Network Embedding, SDNE), 利用自编码器开发了一个结构化的深层网络嵌入模型, 可以将节点嵌入到低维空间中。学习得到的向量表示能够保留局部和全局结构, 但该方法对图中的噪声和离群点比较敏感, 可能导致嵌入结果不准确。Ribeiro 等^[21] 提出从结构身份中学习节点表示 (Struct2vec: Learning Node Representations from Structural Identity, Struct2Vec), 通过将相邻节点的序列作为输入, 训练神经网络模型学习节点的向量表示来捕捉节点的结构信息, 包括相

邻节点和节点间的路径信息。但为了获得稳定的嵌入结果, 需要多次遍历, 导致计算复杂度很高。You 等^[10] 提出了身份感知图神经网络 (Identity-aware Graph Neural Networks, ID-GNN), 通过在消息传递过程中充分考虑邻居节点的身份, 扩展了现有的 GNNs 体系结构。然而, 其无法对图中节点的相对位置信息进行建模, 因此在位置感知图任务中可能表现不佳。Bai 等^[22] 提出结构身份感知图神经网络 (Structural-Identity-aware Graph Neural Network, SIGNN), 它既可以捕获独立于图节点位置之外的结构身份信息, 也可以捕获节点的邻居信息, 从而充分利用图中的信息进行更好的推荐。由于引入了结构身份信息并优化了 GNNs 的表示学习能力, 模型的复杂度可能相对较高。

本文受 Chen 等^[11] 和 Dwivedi 等^[23] 的启发, 分别将位置和结构注入到网络中。本文方法与上述两种方法在构造上有以下几点不同:

1) 位置编码器使用改进的拉普拉斯位置编码来学习节点位置嵌入, 不存在编码符号歧义问题; 结构编码器通过提取多跳邻居信息和节点信息计算节点结构嵌入。两个编码器的计算是相互独立的, 分别捕捉位置和结构信息。

2) 除对节点特征更新外, 对节点的位置和结构嵌入也进行类似更新。

3) 利用融合的方法来改善 GNNs 学习的性能, 将所有类型的特征进行融合。具体而言, 本文使用连接操作将更新后的位置和结构嵌入与更新后的节点嵌入进行融合。在训练过程中, ω_p 和 ω_s 这两个可学习的权重参数分别表示位置信息和结构信息对下游任务的重要性。PSI-GNN 的通用框架可适用于不同类型的任务。具体网络框架如图 2 所示。具体算法流程如算法 1 所示。

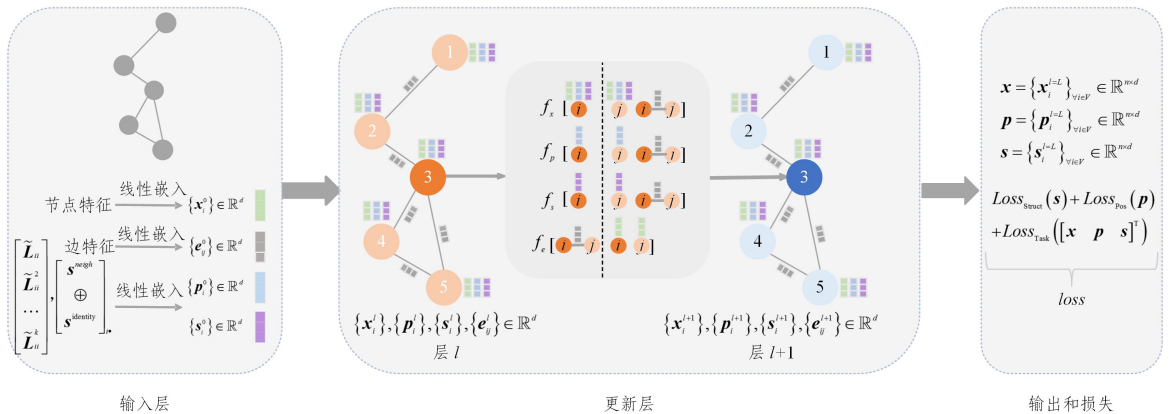


图 2 PSI-GNN 网络框架

Fig. 2 Framework of PSI-GNN network

算法 1 PSI-GNN 算法流程

输入: 图 $G=(V, E)$; 邻接矩阵 A ; 度矩阵 D ; 分别计算位置和结构嵌入的函数 ILPE 和 AASE; 边、位置、结构和节点嵌入的消息传递函数 f_e, f_p, f_s 和 f_x

输出: 对于节点 $i \in V$, 节点嵌入 x_i

1. 根据式(4)来获取位置嵌入 p_i
2. 根据式(7)来获取结构嵌入 s_i
3. for $l \leftarrow 1, 2, \dots, L$ do
4. 边嵌入更新 $e_{ij}^l = f_e(x_i^{l-1}, x_j^{l-1}, e_{ij}^{l-1})$

$$5. \text{位置嵌入更新 } p_i^l = f_p(p_i^{l-1}, p_j^{l-1}, e_{ij}^{l-1})_{j \in N_i}$$

$$6. \text{结构嵌入更新 } s_i^l = f_s(s_i^{l-1}, s_j^{l-1}, e_{ij}^{l-1})_{j \in N_i}$$

$$7. \text{节点嵌入更新 } x_i^l = f_x(h_i^{l-1}, h_j^{l-1}, e_{ij}^{l-1})_{j \in N_i}, \text{ 其中 } h_i^{l-1} = x_i^{l-1} \oplus p_i^{l-1} \oplus s_i^{l-1}$$

$$8. x_i \leftarrow x_i^l$$

9. end for

$$10. x_i \leftarrow x_i^l \oplus \omega_p p_i^l \oplus \omega_s s_i^l$$

3 网络模型与算法

3.1 符号说明

在本文中,图表示为 $G=(V,E)$,其中 $V=\{v_1,v_2,\dots,v_n\}$ 是元素个数为 $n=|V|$ 的节点集, $E=\{e_1,e_2,\dots,e_m\}\subseteq V\times V$ 是元素个数为 $m=|E|$ 的节点间边集。给定一个节点 $v\in V$,定义 k 跳邻居为从节点 v 出发长度不大于 k 的最短路径的节点。记节点 v 的 1 跳邻居为 N_v 。图的连通性由邻接矩阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 表示,如果节点 i 和节点 j 之间有边,则 $A_{ij}=1$,否则 $A_{ij}=0$ 。 $D\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 表示图的度矩阵。节点 i 的节点特征、位置特征和结构特征分别为 x_i, p_i, s_i 。连接节点 i 和节点 j 的边的特征为 e_{ij} 。

3.2 初始位置编码

位置编码反映了图的节点之间的相对位置,拉普拉斯位置编码通常用于 GNNs 中,以提供节点在图中的位置信息。拉普拉斯位置编码的核心思想是利用拉普拉斯矩阵的特征向量来表示节点的位置。拉普拉斯矩阵 $L\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 定义为:

$$L=D-A \quad (1)$$

通过对矩阵 L 进行归一化处理,从而求得对应的特征向量,即:

$$L=I-D^{-1/2}AD^{-1/2}=U^T\Lambda U \quad (2)$$

其中,矩阵 U 和矩阵 Λ 分别代表矩阵 L 的特征向量和特征值。因此拉普拉斯位置编码定义为:

$$p_i^L=[U_{i1},U_{i2},\dots,U_{im}]\in\mathbb{R}^n,i\in V \quad (3)$$

其中, i 为节点。

然而,计算矩阵的特征向量具有较高的计算复杂度,同时矩阵的特征向量可能具有正负两种符号,会导致其存在符号模糊问题。本文的目标是生成具有低复杂度的节点嵌入,使得它们能够充分保持原始位置信息。

受 Li 等^[17] 的启发,本文提出了改进的拉普拉斯位置编码(Improved Laplacian Positional Encoding, ILPE)。ILPE 定义为:

$$p_i^L=[\tilde{L}_{i1}^1,\tilde{L}_{i2}^1,\dots,\tilde{L}_{ik}^1]\in\mathbb{R}^k,i\in V \quad (4)$$

其中, $\tilde{L}=D^{-1/2}AD^{-1/2}$, i 为节点。与使用全矩阵来处理所有成对节点的方法不同,本文采用了低复杂度的矩阵,只考虑节点 i 本身,即 \tilde{L}_{ii} 。这样 ILPE 不需要进行矩阵分解,从而降低了计算复杂度,同时不会存在符号模糊问题。对于式(4)中的 k 来说,Dwivedi 等^[23] 已经证明在每个节点具有足够大的唯一 k 的条件下,ILPE 可以提供唯一的节点表示。位置编码可以捕获更多的位置信息,并取得更多的性能提升。图 1(a) 给出了一个例子,其中处于不同部分的两个节点具有相似结构,在这种情况下,GNNs 无法对二者进行区分。但 PSI-GNN 可以区分这种情况,其通过优化嵌入空间的表示,使得在嵌入空间中距离相近的节点在原始图中也具有相似的位置信息和关系。这样,节点的嵌入向量就可以作为反映其位置信息的重要特征,能反映图中节点之间的差异。

3.3 初始结构编码

结构信息在许多 GNNs 中同样很重要。设计结构编码的目的是捕捉现有 GNNs 中缺失的结构信息。结构嵌入可以用于区分传统 GNNs 无法区分的 d-正则图。通过图 1(b)

可以看出,虽然两个计算图的拓扑结构相同,但 PSI-GNN 捕获节点结构信息并生成不同的结构嵌入。因此,通过 PSI-GNN 可以进行区分。理想的结构编码能够捕捉更多跳邻居结构信息,但 Yan 等^[24] 证明了训练多跳邻居信息会导致 GNNs 中出现过度平滑问题。过度平滑问题指随着 GNNs 层数的增加,节点的表示(或嵌入)越来越相似,最终失去区分度。而将它们编码为结构嵌入则不会出现这样的问题,主要是因为结构编码能够生成具有丰富结构信息的节点表示,有助于缓解在信息传递和聚合过程中可能出现的过度平滑问题。

受 Chen 等^[11] 和 Ou 等^[25] 的启发,本文提出了 Adamic-Adar 结构编码(Adamic-Adar Structural Encoding, AASE)。AASE 定义为:

$$s^{\text{neigh}}=[\tilde{A},\tilde{A}^2,\dots,\tilde{A}^k]^T\in\mathbb{R}^{n\times n} \quad (5)$$

$$s^{\text{identity}}=[\text{diag}(\tilde{A}),\text{diag}(\tilde{A}^2),\dots,\text{diag}(\tilde{A}^k)]\in\mathbb{R}^{n\times n} \quad (6)$$

$$s_i^A=[s^{\text{neigh}}\oplus s^{\text{identity}}]_i\in\mathbb{R}^{2n},i\in V \quad (7)$$

其中, $\tilde{A}=AD^{-1}A$, $\text{diag}(\cdot)$ 为矩阵的对角矩阵, i 为节点。与其关注结构信息中多跳邻居信息(见式(5))和多跳节点信息(见式(6))类似,本文也采用同样的方式对节点结构信息进行嵌入,但并未使用普通的邻接矩阵,而是为每个邻居分配一个权重,即邻居度的倒数。进一步丰富节点表示的内容,增加其在嵌入空间中的可区分性,有助于模型更好地理解图的结构。

3.4 权重参数及融合

通过位置和结构嵌入,本文方法 PSI-GNN 使用 ω_p 和 ω_s 两个可学习的权重参数来平衡二者对下游任务的重要性,使得位置信息在节点级任务中起到主要作用。而结构信息在图级任务中更为重要,本文通过训练 PSI-GNN 模型,以使其对不同任务能够处理得当。

在详细阐述了位置和结构编码及其权重参数之后,本文提出了两种融合策略:早期融合和晚期融合。早期融合使用经典的特征融合方法(如 CONCAT 或 SUM)将位置嵌入和结构嵌入与原始特征向量融合,采用消息传递机制进行更新。早期融合的优点是在消息传递过程中聚合邻居结构和位置嵌入,为 GNNs 学习提供更多信息,但位置和结构嵌入没有单独更新,以至于无法学习更深层次的信息;晚期融合旨在将通过多层 GNNs 更新后的节点特征、位置嵌入和结构嵌入的输出组合在一起,然后将它们构造为下游任务的输入,如分类器。在这样的环境下,本文使用复合损失函数进行联合训练,该函数将任务损失与位置编码和结构编码损失相结合。经过实验对比发现,晚期融合的效果优于早期融合,因此本文在实验中使用了晚期融合。

3.5 损失函数

将位置嵌入和结构嵌入分别学习时,可以考虑特定的位置和结构编码损失以及任务损失。受 Dwivedi 等^[23] 的启发,本文采用与之类似的向量损失。因此,PSI-GNN 的最终损失函数由 3 项组成:

$$\text{Loss}=\text{Loss}_{\text{Task}}\left(\begin{matrix} x^{t=L} \\ p^{t=L} \\ s^{t=L} \end{matrix}\right)+\alpha\text{Loss}_{\text{Pos}}(p^{t=L})+\beta\text{Loss}_{\text{Struct}}(s^{t=L}) \quad (8)$$

其中, $l=L$ 是 PSI-GNN 的最终层, α 和 β 是两个超参数。将最终的位置向量 $\mathbf{p}^{l=L}$ 和结构向量 $\mathbf{s}^{l=L}$ 进行单位化, 即 $(\mathbf{p}^{l=L})_n = 0$, $\|\mathbf{p}^{l=L}\| = 1$ 和 $(\mathbf{s}^{l=L})_{2n} = 0$, $\|\mathbf{s}^{l=L}\| = 1$ 。为了更好地近似拉普拉斯特征向量损失, $\forall k$ 损失被定义为:

$$Loss_{\text{Pos}}(\mathbf{p}) = \frac{1}{n} \text{trace}(\mathbf{p}^T \Delta \mathbf{p}) + \frac{\lambda}{n} \|\mathbf{p}^T \mathbf{p} - \mathbf{I}_n\|_F^2 \quad (9)$$

$$Loss_{\text{Struct}}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2n} \text{trace}(\mathbf{s}^T \Delta \mathbf{s}) + \frac{\lambda}{2n} \|\mathbf{s}^T \mathbf{s} - \mathbf{I}_{2n}\|_F^2 \quad (10)$$

其中, $\lambda > 0$, $\|\cdot\|_F^2$ 是希尔伯特-施密特范数。

3.6 复杂度分析

除了 GNNs 训练过程中的正向和反向传播计算外, PSI-GNN 的复杂度主要集中在位置和结构编码器上。在位置编码方面, 传统的拉普拉斯位置编码器需要遍历图中的所有节点, 并进行特征分解, 这会导致在每次训练时产生较高的计算成本, 其复杂度通常为 $O(|v|^2)$ 或更高。

为了应对大图挑战, 改进的拉普拉斯位置编码仅考虑节点本身信息, 避免了全局的特征分解, 从而将复杂度降低到 $O(k|v|)$ 。

在结构编码方面, PSI-GNN 采用了 Adamic-Adar 结构信息, 如式(5)~式(7)所示, 其复杂度为 $O(k|v|^3)$ 。虽然复杂度分别为 $O(k|v|)$ 和 $O(k|v|^3)$, 但与 MPNNs 的线性复杂度相比, 它仍然是低效的。

4 实验与结果分析

本章通过对不同图大小、图类型和图任务的数据集进行测试来验证本文算法 PSI-GNN 的有效性。首先介绍实验所用的数据集、相关的实验设置和选择的实验对照组, 然后对

PSI-GNN 的性能进行验证, 之后给出实验结果, 并对其进行分析和讨论。

4.1 数据集、实验设置和基线模型

对于节点级任务, 选择引文网络数据集: CiteSeer 数据集^[26]以及 OGBN-ARXIV 数据集^[27]。在这两个数据集中, 节点对应于出版物, 边对应于引用关系。此外, 还使用了 OGBN-PROTEINS^[27] 和 OGBN-PRODUCTS 数据集^[27]。OGBN-PROTEINS 为蛋白质数据集, 节点代表蛋白质, 边表示蛋白质之间不同类型的具有生物学意义的关联。OGBN-PRODUCTS 数据集是亚马逊产品共同购买网络, 节点代表在亚马逊销售的产品, 边表示这两个产品是一起购买的。

对于图级任务, 采用不同大小的分子数据集, 包括一个图回归数据集(ZINC 数据集^[28])、两个分子性质预测数据集(OGBG-MOLTOX21 数据集和 OGBG-MOLPCBA 数据集^[27]), 以及 REDDIT-THREADS 数据集^[29]。其中图要预测的性质是其约束溶解度, 采用平均绝对误差(MAE)衡量回归任务的准确性。对于 OGBG-MOLTOX21 数据集, 使用整个任务的平均 ROC-AUC 作为评估指标。对于 OGBG-MOLPCBA 数据集, 使用平均精度(Average Precision, AP)作为评价指标。而 REDDIT-THREADS^[29] 为社交网络数据集, 使用平均 AUC 得分作为评估标准。

表 1 列出了数据集的详细统计数据。实验遵循节点级任务数据集和 OGB 数据集的默认划分方式。对于 ZINC 数据集的回归任务, 随机划分 10 000 用于训练, 1 000 用于验证, 1 000 用于测试。

表 1 数据集信息

Table 1 Datasets information

数据集	每个图的节点数	每个图的边数	图数	标签数	度量标准
CiteSeer	3 327	9 228	1	6	ACC
OGBN-ARXIV	169 343	1 166 243	1	40	ACC
OGBN-PROTEINS	132 534	39 561 252	1	121	ACC
OGBN-PRODUCTS	2 449 029	61 859 140	1	47	ACC
OGBG-MOLTOX21	25.50	27.50	7 831	2	ROC-AUC
ZINC	23.16	49.83	12 000	R(1)	MAE
REDDIT-THREADS	23.93	24.99	203 088	2	MAE-AUC
OGBG-MOLPCBA	26	28.10	437 929	2	AP

注: $R(n)$ 表示每个图具有 n 个任务的回归数据集。

为了评估本文所提出的 PSI-GNN 模型, 使用 GatedGCN^[30] 模型作为 PSI-GNN 的基本模型。将 PSI-GNN 与其他先进的 GNNs 结果进行比较, 对比方法包括: 图卷积网络(GCN)^[31]、图注意力网络(Graph Attention Networks, GAT)^[12]、图 Transformer(Graph Transformer, GT)^[32]、谱注意力网络(Spectral Attention Networks, SAN)^[33]、Graphormer^[34]、图同构网络(Graph Isomorphism Networks, GIN)^[7]、DeeperGCN^[35]、原则邻居聚合(Principle Neighborhood Aggregation, PNA)^[36]、有向图网络(Directional Graph Networks, DGN)^[37]、NOSMOG^[38]、AgentNet^[39]、SignNet^[40]、A-DGNs^[41], 以及图采样和聚合(Graph Sample and Aggregate, GraphSAGE)^[13]。

4.2 实验结果与讨论

表 2 和表 3 列出了在各种节点级和图级任务上, 基线模型和本文方法 PSI-GNN 的测试结果(其中 PSI-GNN-ILPE 表示仅将位置信息编码到 PSI-GNN 模型中, 同样地, PSI-GNN-AAASE 表示仅将结构信息编码到模型中)。结果表明, 相对于现有的 GNNs 模型, PSI-GNN 取得了显著的提升。

对于节点级任务, 位置和结构信息均提高了准确性。此外, 位置信息对准确率的提升程度明显大于结构信息。同时使用位置和结构信息时可以获得最佳的结果。本文模型在 CiteSeer, OGBN-ARXIV, OGBN-PROTEINS 和 OGBN-PRODUCTS 数据集上准确率分别提高了 9.3%, 4.2%, 14.1% 和 5.3%。

表2 在节点级任务上的结果
Table 2 Results on node-level tasks

Model	ACC			
	CiteSeer	OGBN-ARXIV	OGBN-PROTEINS	OGBN-PRODUCTS
GCN	0.743±0.010	0.717±0.003	0.713±0.004	0.756±0.002
GraphSAGE	0.743±0.012	0.715±0.003	0.781±0.002	0.783±0.002
GIN	0.731±0.003	0.707±0.002	0.763±0.001	0.781±0.004
GAT	0.746±0.005	0.732±0.001	0.798±0.003	0.795±0.006
NOSMOG	0.738±0.015	0.717±0.003	0.769±0.001	0.785±0.004
AgentNet	0.732±0.013	0.715±0.001	0.767±0.003	0.781±0.003
PSI-GNN-ILPE	0.801±0.003	0.752±0.003	0.795±0.004	0.819±0.004
PSI-GNN-AAASE	0.795±0.038	0.745±0.002	0.782±0.003	0.808±0.001
PSI-GNN	0.805±0.005	0.759±0.003	0.813±0.004	0.824±0.007

表3 在图级任务上的结果
Table 3 Results on graph-level tasks

OGBG-MOLTOX21		ZINC		REDDIT-THREADS		OGBG-MOLPCBA	
Model	ROC-AUC	Model	MAE	Model	MAE	Model	AP
GIN	0.7491±0.0051	GCN	0.367±0.011	GCN	0.753±0.002	GIN	0.2266±0.0028
GCN	0.7529±0.0069	GAT	0.384±0.007	GCN-VN	0.804±0.001	GIN-VN	0.2703±0.0023
GCN-VN	0.7746±0.0086	GT	0.226±0.014	GIN	0.814±0.002	DeeperGCN	0.2781±0.0038
GIN-VN	0.7757±0.0062	SAN	0.139±0.006	GAT	0.825±0.001	PNA	0.2838±0.0035
GatedGCN	0.7743±0.0073	Graphormer	0.122±0.006	DGN	0.830±0.002	DGN	0.2885±0.0030
SignNet	0.7795±0.0054	SignNet	0.097±0.006	SignNet	0.886±0.003	SignNet	0.2862±0.0070
A-DGNs	0.7783±0.0034	A-DGNs	0.107±0.004	A-DGNs	0.868±0.002	A-DGNs	0.2851±0.0042
PSI-GNN-ILPE	0.7789±0.0028	PSI-GNN-ILPE	0.098±0.005	PSI-GNN-ILPE	0.873±0.001	PSI-GNN-ILPE	0.2853±0.0031
PSI-GNN-AAASE	0.7818±0.0072	PSI-GNN-AAASE	0.091±0.002	PSI-GNN-AAASE	0.889±0.001	PSI-GNN-AAASE	0.2875±0.0027
PSI-GNN	0.7824±0.0055	PSI-GNN	0.087±0.004	PSI-GNN	0.903±0.002	PSI-GNN	0.2883±0.0025

在图级任务数据集上,具有结构信息的测试结果均优于具有位置信息的测试结果。当将最佳表现与基准图神经网络模型在3个基准数据集上进行比较时,在ZINC数据集上,PSI-GNN大幅超过大多数基准模型,测试平均绝对误差(MAE)为0.087,相比于两个图神经网络模型SAN和Graphormer,分别提升了28.7%和37.4%。在MOLTOX21和REDDIT-THREADS上,PSI-GNN的测试ROC-AUC分数和平均AUC分数相比最佳基准模型均有提高。最后,PSI-GNN在MOLPCBA上达到了与最佳基线模型相当的性能水平。

针对不同的数据集和任务推导了位置和结构的感知度分数,结果如表4和图3所示。感知度指标用于评估信息对于不同任务的重要性和影响程度。通过计算感知度分数,可以了解在给定任务中,位置和结构信息在数据样本的标签等价性预测中的相对重要性。为了计算感知度分数,本文采用了以下方法:在每个数据集中,随机采样每个数据样本的5个正样本(即具有相同标签的样本)和5个负样本(即具有不同标签的样本),这样的采样策略确保了我们的分析既考虑了同类样本之间的相似性,也考虑了异类样本之间的差异。然后采用一个3层的多层感知机(Multi-Layer Perceptron, MLP)作为分类。这个分类器的任务是根据成对的嵌入(即数据样本的嵌入向量)来预测标签的等价性。通过将位置和结构信息嵌入到数据中,可以观察到这些信息对预测结果的重要性。

根据表4,可以观察到在节点级任务和图级任务数据集上,二者分别获得了较高的位置感知度得分和结构感知度得分。这表明对于节点级任务,位置信息比结构信息更重要,而

对于图级任务而言,结构信息更为重要。高度的位置感知得分与表2中的结果一致,其中位置信息极大地提高了模型整体表现;高度的结构感知得分也解释了在表3中的图级任务中具有结构信息比具有位置信息可以获得更大程度的提升。

表4 位置和结构感知度得分

Dataset	Position	Structure
CiteSeer	0.5907	0.4039
OGBN-ARXIV	0.5569	0.4431
OGBN-PRODUCTS	0.6393	0.3607
OGBG-MOLTOX21	0.4396	0.5604
ZINC	0.4705	0.5295
OGBG-MOLPCBA	0.3513	0.6487

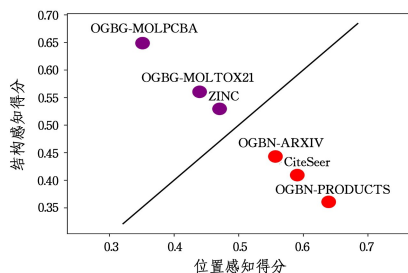


图3 位置和结构感知度得分

Fig. 3 Positional and structure-aware scores

根据图3,可以明显观察到无论是节点级任务还是图级任务,中型数据集(OGBN-ARXIV, ZINC)对位置信息与结构信息的需求是相似的。而小型数据集(CiteSeer, OGBG-MOLTOX21)和大型数据集(OGBN-PRODUCTS, OGBG-MOL-

PCBA)对位置信息与结构信息的需求则很明显,且大型数据集尤为明显。

4.3 消融性分析

为了验证 PSI-GNN 框架的有效性,本文进行了一系列消融性分析。首先,PSI-GNN 架构能够在每一层都学习并利用节点的位置和结构信息,而不是仅在输入层或最终层注入预先计算的信息。使用两个简单模型(即 PSI-I-GNN 和 PSI-F-GNN)作为对比,它们分别在输入层和最终层添加了预先计算的位置和结构编码。为了更全面地评估各模型,本文选择了中型数据集(OGBN-ARXIV, ZINC),并在相同的实验条件下进行训练和评估。此外,本文还研究了位置编码(ILPE)和结构编码(AASE)中选择步 k 的数量对性能的影响,以得出最佳的 k 值。

表 5 消融实验结果

Table 5 Ablation test results

Model	OGBN-ARXIV	ZINC
	Test ACC	Test MAE
PSI-GNN	0.759±0.003	0.087±0.004
PSI-I-GNN	0.741±0.007	0.103±0.002
PSI-F-GNN	0.734±0.005	0.117±0.004

表 5 中,PSI-I-GNN 对应于在第一层注入预先计算的位置和结构编码的模型,并且在后续层中不对位置和结构编码进行更新。PSI-F-GNN 对应于在最后一层注入预先计算的位置和结构编码的模型。首先,观察到将 ILPE 和 AASE 注入到最后一层而不是输入层会导致性能较差。ILPE 和 AASE 在输入层进行拼接能获得更好性能的原因在于它能够向聚合函数提供位置和结构信息,方便后续任务获得更多有用的信息。

最后,分别研究了在第 3.2 节和 3.3 节中为初始位置编码和初始结构编码的特征选择合适的 k 步的影响。数值实验结果如图 4、图 5 所示。

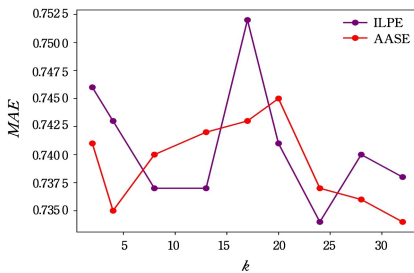


图 4 OGBN-ARXIV 数据集上的 k 值结果

Fig. 4 k -value results of OGBN-ARXIV dataset

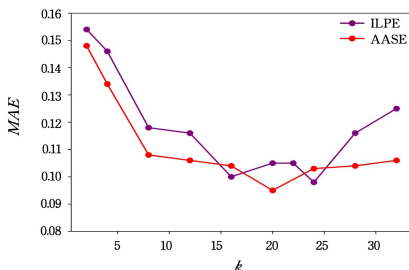


图 5 ZINC 数据集上的 k 值结果

Fig. 5 k -value results of ZINC dataset

对于使用 PSI-GNN 的 OGBN-ARXIV 数据集和 ZINC 数据集,最佳的 k 值分别为 16, 20 和 24, 20。这些值比 Li 等在文献[16]中使用的值($k=3, 4$)更大,主要原因是提出的 ILPE 及 AASE 需要使用较大的 k 值,以便为不同邻居提供唯一的节点表示。

结束语 本文针对 GNNs 在处理图数据时对节点位置和结构信息的表达能力不足的问题,提出了融合位置和结构信息的图神经网络(PSI-GNN)。该模型通过引入初始位置和结构的高阶编码,并在每个图神经网络层中更新这些信息,成功实现了对节点位置和结构特性的有效学习,显著增强了图神经网络的表达能力。实验结果表明,PSI-GNN 在多个基准图数据集上均展现出优异的性能,相对于经典图神经网络模型取得了显著的提升。这不仅验证了 PSI-GNN 在处理图数据时的有效性,也展示了其强大的应用潜力。值得一提的是,PSI-GNN 的设计具有通用性和可扩展性,可以与不同类型的图神经网络模型结合使用。这意味着 PSI-GNN 不仅能够适用于现有的图学习任务,还能够为未来的图神经网络研究提供新的思路和方法。未来,深入探讨 PSI-GNN 在动态图上的性能表现以及其在金融欺诈中的潜在价值和所面临的挑战,将是十分有意义的研究方向。

参考文献

- [1] ZHANG P, CHEN J, CHE C, et al. IEA-GNN: Anchor-aware Graph Neural Network Fused with Information Entropy for Node Classification and Link Prediction[J]. Information Sciences, 2023, 634: 665-676.
- [2] ZOU M, GAN Z, CAO R, et al. Similarity-navigated Graph Neural Networks for Node Classification [J]. Information Sciences, 2023, 633: 41-69.
- [3] DENG X, SUN J, LU J. Graph Neural Network-based Efficient Subgraph Embedding Method for Link Prediction in Mobile Edge Computing[J]. Sensors, 2023, 23: 4936.
- [4] WU F, JING X Y, WEI P, et al. Semi-supervised Multi-view Graph Convolutional Networks with Application to Webpage Classification[J]. Information Sciences, 2022, 591: 142-154.
- [5] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral Networks and Locally Connected Networks on Graphs[C]// International Conference on Learning Representations. Banff, Canada: OpenReview. net, 2014: 1-14.
- [6] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Neural Message Passing for Quantum Chemistry[C]// International Conference on Machine Learning. Sydney, Australia: ACM, 2017: 1263-1272.
- [7] XU K, HU W, LESKOVEC J, et al. How Powerful are Graph Neural Networks? [C]// International Conference on Learning Representations. Vancouver, Canada: OpenReview. net, 2018: 1-17.
- [8] MURPHY R L, SRINIVASAN B, RAO V, et al. Relational Pooling for Graph Representations[C]// International Conference on Machine Learning. Los Angeles, USA: ACM, 2019: 4663-4673.

- [9] YOU J X, YING R X, LESKOVEC J. Position-aware Graph Neural Networks[C]// International Conference on Machine Learning. Los Angeles, USA: ACM, 2019: 7134-7143.
- [10] YOU J X, GOMES-SELMAN J, YING R, et al. Identity-aware Graph Neural Networks[C]// AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada: AAAI, 2021: 10737-10745.
- [11] CHEN Y, YOU J, HE J, et al. SP-GNN: Learning Structure and Position Information from Graphs[J]. *Neural Networks*, 2023, 161: 505-514.
- [12] VELICKOVIC P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph Attention Networks[C]// International Conference on Learning Representations. Vancouver, Canada: OpenReview. net, 2018: 1-12.
- [13] HAMILTON W L, YING Z, LESKOVEC J. Inductive Representation Learning on Large Graphs[C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach, USA: MIT Press, 2017: 1025-1035.
- [14] CHEN M, WEI Z, HUANG Z, et al. Simple and Deep Graph Convolutional Networks[C]// International Conference on Machine Learning. Vienna, Austria: ACM, 2020.
- [15] FAN X, GONG M, WU Y, et al. Propagation Enhanced Neural Message Passing for Graph Representation Learning[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 35(2): 1952-1964.
- [16] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is All you Need[C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach, USA: MIT Press, 2017: 5998-6008.
- [17] LI P, WANG Y, WANG H, et al. Distance Encoding: Design Provably More Powerful Neural Networks for Graph Representation Learning[C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Vancouver, Canada: MIT Press, 2020: 4465-4478.
- [18] NISHAD S, AGARWAL S, BHATTACHARYA A, et al. GraphReach: Position-aware Graph Neural Network using Reachability Estimations[C]// International Joint Conference on Artificial Intelligence. Montréal, Canada: Morgan Kaufmann, 2021: 1527-1533.
- [19] DWIVEDI V P, JOSHI C K, LAURENT T, et al. Benchmarking Graph Neural Networks[J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2023, 24(43): 1-48.
- [20] WANG D, CUI P, ZHU W. Structural Deep Network Embedding[C]// ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco, USA: ACM, 2016: 1225-1234.
- [21] RIBEIRO L F R, SAVERESE P H P, FIGUEIREDO D R. struc2vec: Learning Node Representations from Structural Identity [C]// ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. Halifax, Canada: ACM, 2017: 385-394.
- [22] BAI W, GUO C. Recommendation Based on Graph Neural Network with Structural Identity[C]// International Conference on Machine Learning. Baltimore, USA: ACM, 2022: 127-131
- [23] DWIVEDI V, LUU A, LAURENT T, et al. Graph Neural Networks with Learnable Structural and Positional Representations [C]// International Conference on Learning Representations. Virtual: OpenReview. net, 2022: 1-25.
- [24] YAN Y, HASHEMI M, SWERSKY K, et al. Two Sides of the Same Coin: Heterophily and Oversmoothing in Graph Convolutional Neural Networks[C]// International Conference on Data Mining. Orlando, USA: IEEE, 2022: 1287-1292.
- [25] OU M, CUI P, PEI J, et al. Asymmetric Transitivity Preserving Graph Embedding [C]// ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco, USA: ACM, 2016: 1225-1234.
- [26] SEN P, NAMATA G, BILGIC M, et al. Collective Classification in Network Data[J]. *AI Magazine*, 2008, 29(3): 93-106.
- [27] HU W, FEY M, ZITNIK M, et al. Open Graph Benchmark: Datasets for Machine Learning on Graphs[C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Vancouver, Canada: MIT Press, 2020: 4465-4478.
- [28] IRWIN J J, STERLING T, MYSINGER M M, et al. ZINC: A Free Tool to Discover Chemistry for Biology [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2012, 52(7): 1757-1768.
- [29] ROZEMBERCZKI B, KISS O, SARKAR R. Karate Club: An API Oriented Open-source Python Framework for Unsupervised Learning on Graphs[C]// International Conference on Information and Knowledge Management. Los Angeles, Electr Network, 2020: 3125-3132.
- [30] BRESSON X, LAURENT T. Residual Gated Graph ConvNets [J]. *arXiv*: 1711. 07553, 2018.
- [31] KIPF T, WELLING M. Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks [C]// International Conference on Learning Representations. Toulon, France: OpenReview. net, 2017: 1-14.
- [32] DWIVEDI V, BRESSON X. A Generalization of Transformer Networks to Graphs [J]. *arXiv*: 2012. 09699v2, 2021.
- [33] KREUZER D, BEAINI D, HAMILTON W L, et al. Rethinking Graph Transformers with Spectral Attention [C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Sydney, Australia: MIT Press, 2021: 1-12.
- [34] YING C, CAI T, LUO S J, et al. Do Transformers Really Perform Badly for Graph Representation [C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Sydney, Australia: MIT Press, 2021: 1-19.
- [35] LI G, XIONG C, THABET A, et al. DeeperGCN: All You Need to Train Deeper GCNs [J]. *arXiv*: 2006. 07739, 2022.
- [36] CORSO G, CAVALLERI L, BEAINI D, et al. Principal Neighbourhood Aggregation for Graph Nets [C]// Annual Conference on Neural Information Processing Systems. Vancouver, Canada: MIT Press, 2020: 13260-13271.
- [37] BEAINI D, PASSARO S, LÉTOURNEAU V, et al. Directional Graph Networks [C]// International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021: 748-758.
- [38] TIAN Y, ZHANG C, GUO Z, et al. Learning MLPs on Graphs: A Unified View of Effectiveness, Robustness, and Efficiency

[C]//International Conference on Learning Representations, Kigali, Africa; OpenReview. net, 2023; 1-12.

[39] MARTINKUS K, PAPP P, SCHESCH B, et al. Agent-based Graph Neural Networks [C] // International Conference on Learning Representations, Kigali, Africa; OpenReview. net, 2023; 1-32.

[40] LIM D, ROBINSON J, ZHAO L, et al. Sign and Basis Invariant Networks for Spectral Graph Representation Learning [C] // International Conference on Learning Representations, Kigali, Africa; OpenReview. net, 2023; 1-42.

[41] GRAVINA A, BACCIU D, GALLICCHIO C. Anti-Symmetric DGN: A Stable Architecture for Deep Graph Networks [C] // International Conference on Learning Representations, Kigali, Africa; OpenReview. net, 2023; 1-19.



HAO Jiahui, born in 1999, postgraduate. His main research interests include data mining, machine learning and pattern recognition.



WAN Yuan, born in 1976, Ph.D, professor. Her main research interests include data mining, pattern recognition, manifold learning, machine learning and feature selection.

(责任编辑:何杨)

启动申报 | 2025 CCF-百度松果基金

当下,大模型的爆发将人工智能推向了一个新的高潮,研发大模型,对深度学习平台等基础软件提出了新的挑战。6月16日,2025 CCF-百度松果基金(以下简称“松果基金”)发布,继续围绕深度学习框架、大模型技术、数据建设等主题展开,欢迎各高校与科研机构的青年学者申报。

一、八大议题,紧扣技术纵深,三大结构性升级

本次课题主要分为八大方向:深度学习基础理论和技术、深度学习框架技术与开源实现、大模型分布式训练关键技术与开源实现、大模型推理部署关键技术与开源实现、大模型技术、计算机视觉技术及多模态 AIGC 应用、AI+科学计算、大模型重点领域数据建设与应用。

今年课题进行了全面升级,首先更加重视大模型技术,覆盖深度学习基础理论和框架基础能力支撑、大规模训练、推理部署、模型算法、数据建设各维度及对应最前沿技术热点;其次“AI+科学计算”场景更加聚焦,问题更加明确,更注重实际应用验证;第三,强调开源开放,共建更加优质、高效的 AI 技术生态圈,加速自主创新的人工智能基础底座技术发展。

二、支持 AI 青年学者力量,促进技术生态共同发展

松果基金通过为期一年的课题项目,提供数百万课题基金,以及价值千万的平台、数据、技术等多维度支持,为全球 AI 创新人才搭建产教融合及学术交流的平台,作为百度“500 万 AI 人才培养”计划的重要组成部分。自 2020 年松果基金首次发起以来,已发布近两百项研究命题,累计支持 140 余项前沿课题,孵化顶级论文、专利及开源项目超 100 项,成为助力青年学者技术革新的重要平台之一。

2025 年,松果基金课题申报将于 8 月 15 日 24:00(北京时间)截止。成功申报的青年学者将获得基金资助,围绕相关课题开展研究,产出顶级期刊论文、专利、开源项目等引领学术创新的科研成果。

申请条件

申请者是 1985 年 1 月 1 日(含)之后出生的高校/科研院所在职的全职教师或研究人员;

具有高级专业技术职务(职称)或具有博士学位;

具有独立进行研究工作,能带领学生团队共同参与课题研究。

申报截止时间

2025 年 8 月 15 日 24:00(北京时间)

申报说明

每位申请人每年限提交一份申请;

申请人在申报前需确认所在高校/科研院所可以作为项目依托单位签署科研合作协议,申请人本人可以作为项目负责人签署项目保密协议等相关承诺文件;

任何针对项目申报的问题,请联系基金项目组,电子邮箱:pinecone@baidu.com。