

# 人工智能时代下的复杂网络研究

刘家臻<sup>1</sup>, 王寰东<sup>1</sup>, 丁璟韬<sup>1</sup>, 颜欢<sup>1</sup>, 徐丰力<sup>1</sup>, 范长俊<sup>2,\*</sup>, 李勇<sup>1,\*</sup>, 刘忠<sup>2,\*</sup>

(1. 清华大学电子工程系, 北京, 100084)

(2. 国防科技大学系统工程学院, 长沙, 410073)

**【摘要】**人工智能 (AI) 在本世纪取得了革命性的突破, AI方法驱动的研究范式正越来越多地融入到不同的科学研究中。复杂网络科学作为一个研究对象涵盖基本物质、生命体和社会等众多不同系统的跨学科研究领域同样受到了AI的深刻影响, 并有望获得仅使用传统科学方法可能无法获得的科学知识和应用效果。因此AI方法驱动的复杂网络研究新范式, 将为复杂网络的描述、理解、预测与优化提供一条全新的路径。本文对AI方法驱动的复杂网络研究进行前瞻性的综述, 我们回顾了现阶段的工作, 指出了复杂网络科学研究下面面临的挑战, 分析了这些挑战和AI算法的深层联系, 进而讨论了AI在不同领域的复杂网络的应用, 最后从基础设施网络、生态和生物网络、社交网络等不同类型网络展望了AI驱动下的复杂网络未来研究方向。

**关键词** 复杂网络; 人工智能; 机器学习; 数据科学  
**中图分类号** TP39 **文献标识码** A

## Complex Network Science in the Era of Artificial Intelligence

LIU Jiazhen<sup>1</sup>, WANG Huandong<sup>1</sup>, DING Jingtao<sup>1</sup>, YAN Huan<sup>1</sup>, FAN Changjun<sup>2</sup>, LI Yong<sup>1</sup>, LIU Zhong<sup>2</sup>

(1. Department of Electronic Engineering, Tsinghua University, Beijing, 100084)

(2. School of Systems Engineering, National University of Defense Technology, Changsha, 410073)

**Abstract** Artificial intelligence (AI) has made revolutionary breakthroughs in this century, and AI-driven methods are increasingly being integrated into different scientific research. As an interdisciplinary research field whose research objects cover different systems such as basic matter, living organisms, and society, complex network science has also been profoundly affected by AI and has obtained knowledge discoveries and application performance that may not be obtained using traditional scientific methods alone. Therefore, the new paradigm of complex network research driven by AI methods will provide a new path for the description, understanding, prediction and optimization of complex networks. This article provides a forward-looking review of complex network research driven by AI methods. By reviewing the representative works at the current stage, we point out the challenges faced by complex network science, and analyze the deep connection between these challenges and AI algorithms. Then we discuss the applications of AI in different types of complex networks. Finally, the future research and development direction of complex networks driven by AI is prospected from different types of networks such as infrastructure networks, ecological and biological networks, and social networks.

**Key words** Complex network; artificial intelligence; machine learning; data science

复杂网络 (Complex Network) 往往用于抽象刻画现实世界中的各种复杂性系统 (Complex System) 中的网络连接, 这些系统往往由巨大数量的个体组成, 同时个体间存在错综复杂的交互关系。复杂网络将系统中的个体抽象为节点 (Node/Vertex), 而将个体间的关系抽象为边 (Edge)。例如, 细胞被描述为通过化学反应连接起来的化学物质的复杂网络; 生态网络将种群通过食物链连接在一起; 而万维网

则是一个由网页和超链接构成的巨大虚拟网络。这些复杂系统只是众多示例中的几个, 它们往往可被抽象为具有非平凡拓扑结构的复杂网络。这些复杂网络的局部微观行为往往呈现出无序性和随机性, 然而在宏观尺度下却呈现出简洁、甚至具有对称性的有序结构和规律行为。理解复杂系统从微观无序到宏观有序的转变和演化机制, 正是复杂网络科学研究的核心目标。2021年的诺贝尔物理学奖授予了

收稿日期: 2023

基金项目:

作者简介: 刘家臻 (1994-), 男, 博士, 助理研究员, 主要从事复杂网络科学方面的研究。

\*通信作者: 刘忠, E-mail: liuzhong@nudt.edu.cn; 李勇, E-mail: liyong07@tsinghua.edu.cn; 范长俊, E-mail: fanchangjun@nudt.edu.cn

三位在复杂系统研究领域做出了杰出贡献的科学家：真锅淑郎（Syukuro Manabe），克劳斯·哈塞尔曼（Klaus Hasselmann）和乔治·帕里西（Giorgio Parisi）。这一奖项的颁发肯定了复杂系统科学在揭示基本科学规律和改善人类福祉方面的重要贡献，同时标志着复杂网络科学的研究进入一个新的历史阶段。近十年来，随着对复杂网络基本规律的理解愈发深入，如何利用这些规律预测和控制复杂网络的行为成为了新的热点，学界和社会可以进一步期待复杂网络科学发展带来的更多科学突破和社会应用。

同样，人工智能（Artificial Intelligence, 简称AI）这个研究领域在21世纪第二个十年里取得了革命性进步，实现了一系列里程碑式的研究突破。这些研究包括了深度学习神经网络AlexNet在图像分类竞赛中战胜了传统方法；DeepMind公司开发的AlphaGo击败了围棋世界冠军；同时，DeepMind团队开发的AlphaFold利用深度神经网络技术，成功地解决了蛋白质结构预测这一长期以来困扰科学家的难题；由OpenAI开发的大型语言模型ChatGPT涌现出上下文学习、指令遵循、逐步推理等小规模模型无法实现的能力；以生成式对抗算法、Transformer、扩散模型为代表的生成式AI算法在图像、语言、时空数据生成等领域都取得了令人炫目的成果。上述成就证明了人工智能在科学领域具备极大的应用潜力，具体而言有以下几方面：（1）现代的科学实验和模拟大部分具有极高的计算复杂度，掣肘了许多科学问题的进一步探索。人工智能算法有潜力加速实验流程并提供接近甚至高于传统实验精度的预测，为上述难题提供了可行的解决方案。（2）最近的研究结果表明，人工智能算法有潜力发现新科学知识和概念。例如，发现数学和物理中的守恒量和拓扑不变量；在新的功能材料发现前预测其应用；发现新的蛋白质等。（3）许多应用科学中的一大研究问题为控制优化，以人工智能为基础的优化策略在许多领域已经表现出了不可比拟的优越性。人工智能展现出的巨大潜力为不同科学领域打开了全新的可能性，引发了“AI for Science”的研究热潮。

在这样的背景下，复杂网络科学与AI的结合，预示着一种新的可能性。传统复杂网络科学的研究范式植根于解析性的数学物理模型。尽管传统范式在基本规律发现取得了巨大的成果，然而在越来越多的复杂问题中无法建立有效的理论体系。另外，由于数学物理理论追求简洁和可解析，在实际应用中往往存在过度简化和过度假设的问题。而上述问

题有望借助AI来解决。首先，AI在理论难以触及的领域，能够以数据为中心发展出新的知识获取和知识表达方法。同时，与传统数学物理模型相比，通过捕捉数据中的大量复杂信息，AI具备更高效准确地预测性能和更可靠的控制优化能力，以应对现实世界中的复杂问题和挑战。因此，通过以数据为中心、AI驱动的新范式，结合传统数理范式的复杂网络科学研究有可能突破领域瓶颈，加速复杂网络科学的发展。

为了更好地了解这一极具前景和价值的研究方向，从而为进一步研究和发展提供参考，本文对AI驱动视角的复杂网络科学研究进行前瞻性的综述，第一部分回顾复杂系统和复杂网络科学早期的研究，并指出了复杂网络科学领域现阶段所面临的三大问题，扼要讨论了AI方法在解决这些问题上的潜在优势。在第二部分中，我们进一步论证AI方法在解决复杂网络科学问题上的巨大潜力，并探讨了复杂网络科学与AI算法之间深层的联系，通过数学形式化的分析，我们发现复杂网络的三大挑战在数学本质上对应AI的三大类方法。接着我们分别从机制理解、预测模拟、控制优化等应用角度讨论了AI驱动的复杂网络科学研究。最后我们展望了AI视角下城市基础设施网络、生态和生物网络、社交网络等不同类型的复杂网络的潜在发展方向。

## 1 复杂网络科学相关研究概述

复杂网络科学研究的源头大致可追溯到两个重要的数理学科，分别为图论和统计物理。20世纪图论的一大突破为随机图理论[1]，其所蕴含的思想是复杂的拓扑结构源于简单的随机规则。随机图论通常与渗流理论（percolation）共同使用来对随机网络进行建模[2]。复杂网络科学的另一源头为复杂系统与统计物理，其中诞生了大量的重要的理论模型，如伊辛模型[6]、平均场理论（mean-field theory）[7]、非平衡热力学及耗散结构理论[8]、协同学理论、自旋玻璃模型[10]。从20世纪90年代开始，一些研究发现图论与统计物理的有机结合能够更好地对现实世界的复杂系统进行描述和理解，这催生了复杂网络科学。而其中的代表性研究为小世界模型和无标度网络模型[11][12]。这些模型蕴含了以下思想，即动力学驱动不平凡拓扑的结构涌现。这种思想深刻地影响了21世纪第一个十年的网络科学研究，诞生了许多具有代表性的工作，其中包括：复杂网络的重整化群方法[13][14]、级联动力学理论[15]、网络社

区检测[16]、网络中的玻色-爱因斯坦凝聚等[17]。

然而随着复杂网络科学的蓬勃发展，一些具有挑战性的关键问题也逐渐浮出水面，主要分为以下三方面：

(1) 真实复杂网络的动力学机理不清晰。真实拓扑结构和个体上的动力学往往非常复杂并存在强耦合，传统理论模型的研究范式往往基于过度简化的假设，在此类复杂网络上往往无法建立有效的理论体系，更难以准确刻画现实世界复杂网络中的大量重要现象，例如：生态系统中物种的共演化和多样性演变、城市多层耦合网络中的级联反应和脆弱性分析、交通网络的韧性分析、城市网络上的传染病动力学分析等。尽管传统理论工作为我们理解提供了重要的启示，然而，这些工作往往由于过于简化的假设，无法刻画高维或强耦合场景中复杂网络中的交互机理，因而导致动力学交互函数与实际场景存在偏差，此偏差由于系统的高度非线性被进一步放大。因此如何更好地刻画真实世界复杂网络中的动力学机理，并提高实际预测精度，成为复杂网络科学中的重要问题。

(2) 复杂网络中的高阶拓扑特性难刻画。现阶段大多数关于网络的研究都集中在具有成对连接的网络上。然而，许多系统中的互动经常发生在一个网络的三个或多个实体之间。为了研究这种情况，研究人员越来越多地研究网络中的“高阶”结构，因为它们可以对动力学过程产生重大影响。解释网络中高阶结构的重要方法是将网络上的动态过程推广到单(复)流形上，然而由于涉及多个主体，高阶网络的研究不可避免地要对单(复)流型进行结合，这也引出了新的研究视角，即如何将代数几何和微分几何方法来表征高阶拓扑。

(3) 高维复杂网络难优化。高维复杂网络上的优化问题是复杂网络最重要的难题之一。传统的运筹学优化方法通过计算高维的连续时间的微分方程物理或离散时间上的动态规划方程来对复杂网络进行优化计算，如高维的贝尔曼方程组。然而传统方法对于高维复杂网络往往意味着当系统的动态规划方程组的解析解不存在。另外求解数值解则需要极高的计算复杂度和计算成本。而通过近似方法降低计算复杂度往往意味着与理论最优解的偏离。典型的计算复杂度极高的高维优化场景有化学反应网络、蛋白质网络、脑神经网络、伊辛模型等。因此，对高维复杂网络优化的探索有助于包括复杂网络科学在内多个学科的发展。

对于上述关键问题，一种潜在的解决思路是通过AI方法来解决。与传统数理方法相比，AI方法有以下优点：1) 数据驱动方法不依赖于数理模型假设，能够真实地反映数据中的所蕴含的复杂信息。另外数据驱动方法能够刻画高维数据中的非线性特征，并且无需将其简化为线性模型。因此，数据驱动方法有望更为准确地刻画动力学机理，提高真实场景下的预测精度；2) AI方法能够全方位，多目标地刻画复杂网络的几何性质，克服了传统理论模型只能刻画有限的拓扑特征的局限性；3) 以强化学习为代表的AI算法，仅需要知道复杂网络的基本拓扑特征，无需知道对应的优化方程组的具体信息即可对目标进行优化。同时强化学习的通用性很强，已经在诸多与复杂网络科学有关联的领域有了深入研究，如博弈论、控制论、运筹学、信息论、仿真优化、多智能体、群体智能和统计学等，因此强化学习有望成为高维复杂网络优化难题的解决方案。

## 2 AI与复杂网络内在联系

AI技术在解决上述复杂网络中的挑战问题中具有巨大潜力，不仅是由于AI算法本身强大的建模能力。更重要的是，复杂网络中的挑战问题与AI领域所重点解决的问题，具有更为深层的内在联系。如图1所示，我们发现复杂网络中的最为基本的表征问题、推断问题、优化问题，涵盖了我们从理解复杂网络到预测复杂网络、最后到干预复杂网络的整个流程，可以对应至AI领域的已经被广泛研究的经典问题，其包括图表征学习问题、时序图建模与预测问题、图强化学习问题。具体而言，在通过对这些问题进行数学形式化描述后，我们发现其本质上是同一个问题。因此，在本章节中，我们将探讨复杂网络中的表征、推断、优化问题，分别与图表征学习、时序图建模与预测、图强化学习问题之间的深层关系，解释AI技术在解决对应的复杂网络基本问题上的巨大潜力。



图1 复杂网络中的基本问题与机器学习中的相关问题的内

## 2.1 复杂网络表征与图表征学习

在复杂网络中，无论是传统基于图论中邻接表的图表征还是基于流行学习等网络的几何空间嵌入方法的图表征，其所关注的核心问题都是如何在一个固定维度的、可计算的表征空间中，找到网络中每个节点在表征空间中的位置的映射，并且基于该映射能够有效的建模、复现复杂网络特定的性质。例如，弗拉基斯科斯·帕帕多普洛斯(Fragkiskos Papadopoulos)等人提出的经典的 Popularity-Similarity-Optimization (PSO)模型中[18]，就在双曲空间中描述了复杂网络的几何结构，其将通过蒙特卡洛马尔科夫方法估计了复杂网络中的每个节点在双曲空间中的坐标，并以相似性和流行性为复杂网络生长过程中竞争的两股核心力量解释了复杂网络几何结构形成的内在原因。奥斯汀·R·本森(Austin R. Benson)等人考虑了复杂网络中Motif等高阶结构，提出了基于motif的谱分析图表征技术以及相应的聚类技术，揭露了复杂网络中依赖于高阶作用形成的组织结构[19]。然而，传统复杂网络方法表征方法的重要局限是其依赖于专家知识建立的表征模型，并且一种模型往往仅针对较好的描述捕捉复杂网络的某方面性质与核心规律而建立，导致了其往往不能全方位描述复杂网络的多维复杂特性。

在另外一方面，AI领域研究已经被广泛研究的图表征学习同样旨在获取图节点的低维表征向量。不同的是，图表征学习所关注的方面更加多样化，多样的AI算法被开发来建模图数据中的节点属性、低阶拓扑结构、高阶拓扑结构等多方面的特征，并用来支撑节点分类、链接预测等多样性的下游任务。从数学形式上，图表征学习可以被定义如下：

$$\begin{aligned} \min_f L(E, A) \\ \text{s.t. } e_i = f(v_i, V, A) \quad \forall v_i \in V \end{aligned}$$

其中 $G = (V, A)$ 为我们所关注的复杂网络， $V$ 为网络节点的集合， $A$ 为网络中边的集合， $e_i$ 为表征空间中节点 $v_i$ 所对应的向量， $E = [e_1, e_2, \dots]$ 为所有节点的表征， $f$ 为特定的图表征机器学习算法， $L$ 是用以优化的目标函数。显而易见的是，复杂网络表征与图表征学习所重点解决的问题不谋而合。具体而言， $f$ 的获取分别由专家基于经验建立模型与基于神经网络迭代训练实现；而对于针对优化目标 $L(\cdot)$ ，传统复杂网络表征问题中其被替换成了衡量图表征结果是否具有某特定的性质的统计度量[18][19]。

因为所关注的问题在本质上具有一致性，所以

AI技术在帮助解决复杂网络表征问题上具有巨大潜力，并且已经取得一定的成功。例如，亚历山德罗·穆斯科洛尼(Alessandro Muscoloni)等人运用机器学习方法有效解决双曲空间中的网络几何问题[20]。内斯·查米(Ines Chami)与尤尔·莱斯科维奇(Jure Leskovec)等人进一步提出了利用图神经网络方法将复杂网络节点嵌入双曲空间的方法[21]。总体而言，我们可以看到，通过合理的设计优化目标函数 $L$ ，现有的保护特定性质或规律的复杂网络表征问题都可以转化为图表征学习问题。因此，在未来基于AI算法，有望帮助我们实现全方位描述复杂网络的多维复杂特性的表征方法。

## 2.2 复杂网络推断与时序图建模与预测

正如我们在前文中讨论到，真实复杂网络的动力学机理往往是不明晰的。尤其是生态系统中物种相互依存构成的复杂网络、城市多层基础设施相互耦合构成的复杂网络等涉及多样异质结点、多层作用关系的复杂网络中，我们往往仅能知道部分的、残缺的网络动力学机理，而复杂网络中大量的节点演化和交互的动力学机理对于我们是未知的，导致了无法对复杂网络总体演化趋势有效的理解和建模。因此，我们需要对复杂网络中的机制、机理乃至残缺的拓扑等进行有效的推断，从而使得基于推断得到的结果能够准确复现复杂网络未来的演化趋势。严钢等人[22]提出了一种基于基本函数库的方法对复杂网络动力学方程中的节点自演化机制函数 $F$ 和交互演化机制函数 $G$ 进行自动化的推断。巴斯蒂安·普拉斯(Bastian Prasse)等人[23]进一步证明了网络拓扑未知的情况下，使用估计的代理网络拓扑，复杂网络节点的演化趋势也能被准确预测。纵使取得了相当的成功，现有工作往往依赖于相当数量的假设，因而导致动力学交互函数与实际场景存在偏差，此偏差由于系统的高度非线性被进一步放大，尚且是一个有待解决的开放问题。

在AI领域，时序图建模与预测早已被广泛的研究。其旨在分析和预测图数据随时间的变化，它涵盖了时间序列数据与图结构之间的关系，包括节点属性和连接的动态演化。从数学形式上，图表征学习定义如下：

$$\begin{aligned} \min_{g, \hat{A}_t, \hat{X}_t} \|\hat{X}_{t+1:t+\tau} - X_{t+1:t+\tau}\| + \|\hat{A}_{t+1:t+\tau} - A_{t+1:t+\tau}\| \\ \text{s.t. } [\hat{X}_{t+1}, \hat{A}_{t+1}] = g(X_t, A_t) \end{aligned}$$

$X = [x_1, x_2, \dots]$ 为所有节点状态组成的向量， $g$ 为复杂网络状态演化的机理函数， $\|\cdot\|$ 表示衡量节点属性状态与连接一致性的度量。我们可以看到，现有的

复杂网络推断问题都可以概括在上述时序图建模与预测的框架下。对于[22]，推断的目标仅为 $g$ ，且复杂网络拓扑 $A_t$ 在全程不发生改变。类似地，在[23]中 $A_t$ 依然为静态，但是其是未知的推断目标，而 $g$ 在这个工作研究的复杂网络推断问题中是已知的。

我们可以看到时序图建模与预测问题从数学形式描述上与已有的复杂网络推断问题具有一致性。而于时序图建模与预测的AI算法的优势是，其在解决问题的过程中，并不依赖于其他假设。因此，其在给出一个不依赖于过强假设、且能使用与广泛的复杂网络的解决方案上具有巨大的潜力。AI算法在这方面已经取得了一些进展，例如Charles Murphy等人已成果利用图神经网络预测复杂网络上的传播动力学演化[24]，潘泰利斯·R·弗拉查斯（Pantelis R. Vlachas）等人也是用自编码器结合循环神经网络的方法有效预测了多个复杂系统的演化动态[25]。总体而言，使用深度学习推断复杂网络的动力学极具研究价值，其能够更好地刻画真实世界复杂网络中的动力学机理，更好地刻画其中重要的现象并提高实际预测精度，从而帮助解决复杂网络动力学未知情况下的态势演化的理解与预测的问题。

### 2.3 复杂网络优化与图强化学习

复杂网络优化问题旨在解决如何干预网络的节点或边以影响整个复杂网络的行为，但由于复杂网络灾难性的维度，对其的优化与干预的计算面临巨大的复杂度。经典的复杂网络计算方法中往往采用平均场[26]等近似方法减少计算任务的复杂度。高建喜等人提出了通过选取一个最小数量的干预节点从而实现复杂网络的控制，通过降低优化干预问题的搜寻空间，从而提升运算效率[27]。这样也往往使得近似计算、缩减搜寻空间的方法虽然提升了复杂网络优化的求解时间效率，但也极大的限制了复杂网络优化的性能。

而在另外一方面，图强化学习作为一个在AI领域已被广泛关注和研究的学术问题，其同样旨在解决如何在图结构的数据上进行干预，以实现特定的控制目标，如干预信息传播或优化网络性能。从数学形式上，图强化学习可以被定义如下：

$$\min_h U(X_{t+1:t+\tau}, A_{t+1:t+\tau})$$

$$s. t. \begin{cases} a_t = h(X_t, A_t) \\ [X_{t+1}, A_{t+1}] = g(X_t, A_t, a_t) \end{cases}$$

其中 $a_t$ 是外部干预的决策， $h$ 是基于当前网络状态进行干预的策略函数， $U(\cdot)$ 为评价干预优化最终效果的度量函数。不同于复杂网络推断问题，这里的复

杂网络机理函数 $g$ 是给定的，其可以通过单独求解一个时序图建模与预测问题给出。类似的，现有的复杂网络控制问题也可以被上述数学形式描述的问题所囊括。例如[27]中， $U(\cdot)$ 为系统状态是否达到目标状态与整个过程的能量成本的综合度量。同时不同于图强化学习基于求解高维Bellman方程从而获取 $h$ ，[27]中通过线性假设等约束结合数学推导直接给出 $h$ 的闭式解。总体而言，我们可以看到图强化学习与复杂网络优化本质上是同一问题。且在AI算法的赋能下，已有一些方法被提出来成功解决复杂网络的优化控制问题。范长俊等人[28]等人利用图强化学习方法找到复杂网络中的关键节点，使得通过将其删除后最大程度的降低复杂网络的连接性。进一步，现有工作利用深度强化学习有效找到了伊辛模型所描述的复杂网络的基态[29]。已有工作的成功表明图强化学习在解决复杂网络控制方面的有效性，其能够有效避免现有复杂网络优化工作需要近似、限制策略空间等手段，以数据驱动的方法实现更好的复杂网络优化，从而解决现实世界中复杂网络科学相关的实际问题，例如城市基础设施网络韧性的加强、生态网络韧性的干预、传染病传播控制等等。

## 3 AI在复杂网络研究中的应用

复杂网络研究主要包括机制理解、预测模拟与控制优化三个方向。机制理解是为了揭示复杂网络宏观性质背后的微观基本规律，如网络结构、动态过程、生成机制等；在此基础上构建的模型通过模拟网络的行为，预测在特定条件下的行为；进一步为复杂网络的控制与优化提供指导，而面向真实世界应用的网络控制优化实践又可能揭示新的机制。接下来本文将讨论以上三个阶段中结合AI技术的代表性工作。

### 3.1 复杂网络中的机制理解问题

复杂网络研究的一个核心目标是理解复杂系统从微观无序到宏观有序的转变和演化规律，个体间通过一系列关系连接成具有复杂拓扑结构的网络，两两个体（或者多于两个体）间非线性相互作用看似无规律，但在不断增大的网络节点规模和异质性的共同作用下涌现出系统层面上的有序集体行为。现实世界中的复杂网络横跨自然生命系统和人类社会系统，传统研究遵循的“提出假设-演绎推理”模式在机理不清晰的条件下无法适用；而数据驱动的AI方法具备从数据中自动归纳提炼出复杂网络动力学过程、拓扑结构和演化生长过程机制规律的能力。

具体而言，基于真实数据以无监督或者有监督的方式训练图神经网络，表征复杂网络的节点状态及相互作用（边），从而在宏观层面保持同真实数据观测一致的网络性质；进一步结合符号回归技术，对真实数据拟合的节点状态和交互函数（即参数化的图神经网络）进行符号模型的学习[30]，可以提炼出描述节点状态和相互作用演化的符号公式，兼具高可解释性和拟合精度；由于符号搜索的状态空间巨大，属于NP难问题，因此采用深度强化学习技术可以大幅加速这一问题的求解过程[31]。

在复杂网络动力学推理方面，Gao等人的研究提出了基于基函数组合学习的两阶段动力学自动推理方法[22]，可以在真实世界的噪声数据及结构缺失条件下实现可靠的动力学推理，自动推断出复杂网络的节点及交互作用的演化动力学函数；进一步地，对于无法用基函数线性组合表示的复杂交互场景，近期的一项研究首先使用简约性指导的图神经网络对数据进行拟合，使用神经网络参数表征复杂交互作用，并使用符号回归方法提纯出简约的符号化动力学方程，该方法应用在真实世界的行人移动数据中，成功的学习到类牛顿力学的行人移动、交互机制[32]。

除了复杂网络上的动力学过程，利用观测到的网络动态演化数据，推断隐藏的网络结构同样是一个由来已久的研究问题[33][34]。特别是对于复杂网络中的高阶拓扑推断（单纯形、超图等），对动力学过程存在重大影响，但难以从理论角度求解。Wang等人的工作设计了基于统计推断方法的框架[35]，在社会传染和伊辛模型两种形式的动力学下，该纯数据驱动的方法实现从观测到的时间序列数据（无结构信息）中恢复出包含二体和三体相互作用的2-单纯复形网络；Samtore等人的工作提出了一个框架来表征多元时间序列中高阶依赖性的时间演化[36]，通过建模高阶共波动模式，该方法可以从基于节点的多元时间序列数据（大脑功能活动、金融市场和流行病数据）中动态重建高阶交互。以上基于统计的方法初步验证了数据驱动方法在复杂网络高阶拓扑结构推断上的潜力，未来工作将发展基于深度学习的AI推断框架，在海量多元时间序列数据的信息提取、高阶网络类型上提升方法的可用性。

复杂网络的生成机制研究往往采用网络科学的工具方法提出机制模型来解释现实世界中广泛存在的真实网络，如经典的无标度网络（BA）模型和小世界网络模型，但随着更多新型人机交互复杂网络

的出现，其背后的生成机制变得愈发复杂，亟需借助AI方法从真实数据中挖掘模式，一种可行的方法是采用基于智能体建模（Agent-based Modeling）的思路，将每一个节点建模为智能体，通过设计恰当的奖励函数驱动智能体之间交互，最终涌现出与数据匹配的真实网络结构，这样一个过程即实现了复杂网络生成机制的学习。Yuan等人的工作提出了一种社交网络形成模型[37]，该模型用一个向量表征每个智能体的特征，并使用博弈论方法来对智能体间社交关系形成的效用进行建模，通过对真实网络数据的拟合，得到的智能体特征向量既可以表征智能体间的异质性，同时可用于解释网络的形成机制。在网络演化过程状态数据可观测的条件下，可以考虑将智能体的链接建立行为建模为马尔科夫决策过程，使用逆强化学习方法从数据中学习驱动链接形成的奖励函数，并从中提炼出网络形成机制[38]。

### 3.2 复杂网络中的预测与模拟问题

由于复杂网络往往在微观个体和宏观系统等不同层面表现出截然不同的性质，因此不同尺度下的预测问题也有所侧重，微观层面关注与个体相互作用关联的链路预测问题，宏观层面关注网络集体行为的预测。基于复杂网络拓扑结构与演化动力学的建模，可以进一步研究网络动态行为的模拟问题。

在个体行为预测这一微观层面，网络科学中的基础预测问题是通过已有网络结构预测真实存在但尚未观测到的网络链路，传统研究从复杂网络的生长机制出发，提出了一系列基于资源分配、局部路径等结构信息的机制模型，这类方法虽然在观测有限（小样本）、节点信息缺乏的场景相比机器学习方法具备优势，但是在特征丰富的链路预测问题中存在预测精度不足的问题[39]；因此有必要设计综合机制模型和AI模型的知识与数据协同驱动新方法，兼具知识驱动方法的网络生长规律抓取能力和数据驱动方法的高预测精度。自然系统中的复杂网络拓扑往往具备一定的对称性，因此可以考虑结合几何深度学习来提升预测的效果。Pineda等人提出了一个基于几何深度学习的图神经网络框架[40]，可以实现生命系统动力学特性的准确估计，通过使用几何先验处理对象特征，网络能够执行微观个体层面多项预测任务，涵盖坐标链接、轨迹预测、动态属性推断等。

在网络集体行为预测这一宏观层面，例如社交网络的信息传播规模[41]、疫情传播的爆发[42]等，由于宏观性质的涌现来源于微观动力学与网络结构

的耦合，仅建模拓扑结构影响因素的图神经网络方法也难以有效预测，需要进一步结合动力学过程，因此图神经网络与神经常微分方程（Neural Ordinary Differential Equations）的结合成为一种可行的选择，并在近期一项基于微生物组成预测代谢组图的研究中采用[43]。传统网络科学方法致力于寻找可在不同网络中泛化通用的普适规律，通过在深度学习算法中嵌入这一知识约束，可以实现更加可靠的性质预测。例如Thomas M. Bury等人的研究基于不同动态系统在临界点附近普遍存在的标准形式和标度行为信息，设计了规律指导的临界点早期预警深度学习算法[44]。对于复杂网络中诸如稳定性[45]、韧性[46]、可控性[47]等网络结构与动力学耦合涌现出的宏观性质，一个具有前景的研究方向是综合利用上述考虑网络拓扑、动态演化与核心机制规律的AI方法以实现准确可靠的预测。

在复杂网络的状态演化模拟问题中，如上一章节所讨论的，使用AI方法进行复杂网络模拟具有速度快、无需完整的系统先验参数两大突出优势。

在模拟加速这一方面，AI方法的优势主要源于具备从数据中学习高维方程的替代模型（surrogate model）和基于表征学习降维的能力。前者的代表性工作是分子动力学模拟的加速[48]，利用量子力学模型（物理模型）提供训练数据，深度神经网络（数据驱动方法）对高维势函数进行拟合，在保证精度的同时实现计算速度的指数级别提升。后者主要通过深度学习映射的低维度表征空间实现原始高维系统的模拟，例如上一章节介绍的基于自编码器的复杂系统多尺度模拟工作[25]；但是数据驱动的AI方法也存在易过拟合、长程模拟泛化效果差的问题，因此需要考虑结合发现系统本征维度的方法，对神经网络进行相应的约束[49]；Li等人的工作受此启发，提出了一种基于时滞自动编码器框架的本征维度驱动学习方法[50]，该方法能够自适应的识别适当的时间尺度来同时分离复杂网络演化过程中的慢速和快速变量，实现高精度、可解释性强的长程模拟。

另一方面，数据驱动的AI方法无需完整的系统先验参数，发表于2020年的一项代表性工作[51]利用图神经网络实现了先验参数未知条件下复杂图结构物理机制（分子间的相互作用）的模拟仿真。然而在实际环境中，环境变化或者网络结构自身的变化均会对其演化动力学的参数产生影响，而仅依赖数据的AI方法在新参数下会存在泛化能力不足的问题，

因此近期研究热点关注如何能够基于收集自不同参数动力学系统的有限样本快速学习适配模型，主要有模型无关的元学习方法（Model-Agnostic Meta-Learning）[52]、解纠缠表征学习方法（Disentangled Learning）[53]等。

### 3.3 复杂网络中的控制与优化问题

基于对复杂网络节点及相互作用的有效表征、动态过程的精确模拟，设计AI方法干预复杂网络的节点状态和拓扑结构，从而实现控制与优化，对于解决现实世界中的复杂应用问题极具实用价值。

复杂网络的控制问题旨在设计反馈策略来引导网络的动态行为朝着某种期望的演化方向发展，理想情况下是通过影响相对较少的微观自由度[54]。此类控制问题的复杂性体现在网络中节点连接模式的异质性和节点行为的非线性，这些都对传统控制论方法在复杂网络上的可用性提出了挑战。相较而言，以强化学习为代表的AI方法能够克服高维问题求解的维数灾难，基于真实数据训练得到可用性强的模型；然而AI方法本身存在的黑盒不可解释性、求解质量的不稳定性，又与控制问题强调的安全稳定存在天然矛盾。因此，目前基于数据驱动的复杂网络控制方法研究关注对于未知系统从数据中学习系统动力学方程，进而结合传统基于优化的控制方法解决网络控制问题。Baggio等人的工作开发了一个数据驱动的复杂网络控制框架[55]，可以在不了解网络动态的情况下以最佳方式控制复杂网络，值得注意的是，其通过随机输入刺激未知网络的方式来构建训练最优控制策略的有限数据集，并且在存在噪声和非线性动力学的电网、大脑网络数据中验证了方法的可行性。然而面向超大规模的真实世界复杂网络实际应用问题，例如疫苗分配、社交网络影响力最大化等，如何设计鲁棒高效的AI控制方法仍旧极具挑战[56]。以Transformer、生成式AI为核心的决策基础模型提供了解决这一问题的潜在思路[57]。

另一方面，现实世界中的很多自然或者人工复杂网络均可以通过改变节点属性或拓扑的方式实现性质的优化，对应的应用方向有药物、蛋白质设计[58][59][60]以及城市结构优化（如道路网络、地块使用图等）[61][62]。Zheng等人近期的工作将城市空间规划问题建模为复杂网络上的顺序决策问题[61]，提出的基于图神经网络的强化学习模型能够有效应对巨大的解决方案空间的挑战，在客观指标方面优于人类专家设计的规划方案，并且可以快速生成适应不同情况和需求的候选方案。AI往往擅长做人类不

---

擅长的问题，在一个给定的问题下可以快速搜索、试错迭代，找到多目标优化下表现良好的候选解。因此，以变分自编码器、生成对抗网络、扩散模型为代表的深度生成模型技术，以及深度强化学习技术，均可以实现上述目标。

## 4 AI驱动下的复杂网络研究发展方向

早期研究表明，AI技术在复杂网络研究中发挥着至关重要的作用，为我们深入理解复杂网络提供了强有力的工具。借助AI技术，我们能更为全面地探究复杂网络的关键性质，揭示网络中微观节点以及整体网络行为变化所蕴含的复杂作用机理和演化规律。在实际应用中，我们会面临诸如城市基础设施网络、社交网络、生态网络和生物网络 (Biological network) 等多种不同类型的网络。由于这些网络有着独特的结构和特性，因此采用的研究方法也会有所不同。在此背景下，我们认为，AI驱动下的复杂网络研究应针对不同类型的网络展开，并重点探讨其在机制理解、模拟预测和优化控制等方面的发展潜力。

在研究城市基础设施网络，特别是交通网络、电力网络和供水排水网等时，我们需要利用各种AI技术来加深对这些网络内在机制的理解，提高模拟预测的准确性，以及实现网络的优化控制。首先，从机制理解的角度，利用图神经网络可以揭示网络的空间同质性和各个城市间的复杂依存关系，深入理解网络的微观结构和宏观行为[63]。其次，从模拟预测的方面，运用易感-感染-恢复 (SIR) 模型、渗流理论和XGBClassifier等工具，可以准确描述和预测网络中的动态行为[64]，拓扑结构变化[65]和临界模式特征。然后，从优化控制的视角，通过引入强化学习和其他先进控制策略，可以识别网络的脆弱点，优化网络性能，减轻城市基础设施的级联风险[66][67]。而且，在分析单一网络和多网络耦合[68][69]的基础上，这些AI技术可以帮助我们更全面地评估网络的脆弱性、探索网络拓扑的演化过程，并最终实现对城市基础设施网络的高效规划和管理。随着AI技术的不断发展，特别是诸如ChatGPT等大型语言模型技术的出现，使得AI在城市复杂网络研究方面具备了更大的潜力。因此，结合AI的城市复杂网络研究，可以从多个视角来探索单一网络和多层耦合网络，包括分析城市复杂网络的拓扑特性、研究节点的动力学行为、探究网络拓扑的演化过程、识别相变现象以及评估网络的脆弱性等方面，从而

更全面地提升对城市基础设施网络的运行与规划的理解和优化水平。

生态网络描述了生物群落内各物种之间的相互作用，这种作用涉及捕食、寄生以及合作等多种形式。在研究这一领域时，利用AI技术探索生态网络的多样性、复杂性和动态性将成为一个新的研究方向。我们认为，AI的运用将极大促进我们对生态网络机制的理解、模拟预测的准确性以及生态系统的优化控制。在机制理解方面，在深化对生态网络交互关系和演化机制的理解时，可以采用卷积神经网络和递归神经网络等深度学习技术来揭示生物群落中复杂的交互模式，并探讨物种是如何通过直接和间接的途径实现共同演化[70]。在模拟预测方面，通过联合利用深度学习模型和动力学理论模型[71]，我们可以模拟和预测生态网络的演变和物种间的互动，揭露哪些物种形成了强连接或弱连接，以及这些连接如何影响网络的稳定性和演化[72]。这不仅有助于我们预测未来生态网络的状态，还能深入理解物种之间的关联模式。在优化控制方面，深度强化学习可帮助我们寻找并应用最优的生态管理策略，维持生物多样性，实现生态系统的长期稳定。通过科学的策略，我们可以更为有效地保护生物群落，促进生物多样性的可持续发展。

生物网络则描述了生物系统内包括基因、蛋白质、细胞和分子在内的各类实体，及其相互之间的复杂关系，如化学反应和各种生物学相互作用。通过深入研究生物网络，我们能够捕捉到更为丰富和多样的生物过程（如生物分子的合成与分解）和交互动态，这将为我们揭示生物系统的组织和功能提供更为深刻的见解。在机制理解方面，卷积神经网络、图神经网络和其他深度学习技术的进一步发展和应用，将使我们能够更为精确和深入地揭示生物网络结构和功能之间的复杂关系[73]。特别是，表征学习为我们提供了一种全新的方法来捕获和解释这些关系，它通过将生物实体或网络结构映射到低维向量，来编码其中蕴含的丰富信息[74]。利用更为丰富和精确的生物学数据和已知知识，我们将能够深化对生物实体间复杂且精细的功能联系和调控机制的研究，从而更为全面地理解生物体的生物学机制和生物过程。在模拟预测方面，通过融合深度学习和动力学模型，我们能够更为准确地模拟生物网络中的动态过程和网络演化。这不仅可以帮助我们预测未来生物网络的结构[75]以及未知的生物实体功能[76]，还有助于我们发现和理解网络中潜在的生物



学规律和模式。在优化控制方面,强化学习和其他前沿优化技术的发展将使我们能够更为精准地调控生物网络中的各种参数和变量,为生物医学领域带来革命性的改变,推动更为有效和个性化的治疗方法和药物设计的发展[77]。

与其他类型网络不同,社交网络不受地理位置的约束,构建了一种跨越地域界限的虚拟网络。为深入理解和管理不同类型的社交网络,例如社交媒体网络、学术社交网络以及兴趣社交网络,我们需要在机制理解、模拟预测,以及优化控制的层面上采用多样化的AI技术。首先,在理解社交网络机制方面,我们可以采用深度学习方法来获取网络中的多维信息和表征,揭示其背后的社交机制和动力学规律[78]。其次,在模拟预测方面,可以利用流行学习[20]和其它先进的机器学习方法对社交网络中的非线性、高动态性和竞争性特征[79][80][81][82]进行精确建模和预测。再次,在优化控制的角度,通过深度强化学习技术和先进的优化算法,我们可以发现并增强社交网络的鲁棒性,实现对网络的高效管理和控制。例如,可以通过对关键节点的优化控制来改善网络的结构和性能,减少网络中的脆弱性和风险[28]。随着AI技术的不断发展,我们可以创新知识和AI协同驱动的研究方法,将已有的知识嵌入到AI模型中,以提升模型的可靠性和完备性。这将有助于我们更全面、更准确地理解、推演和优化复杂社交网络,深化对社交网络表征、网络拓扑生成、节点动力学、结构演化、网络鲁棒性等多个方面的研究。

### 参 考 文 献

- [1] Erdős P, Rényi A. On the evolution of random graphs[J]. *Publ. math. inst. hung. acad. sci.* 1960 Jan;5(1):17-60.
- [2] Cohen R, Ben-Avraham D, Havlin S. Percolation critical exponents in scale-free networks[J]. *Physical Review E.* 2002 Sep 17;66(3):036113.
- [3] Cohen R, Erez K, Ben-Avraham D, Havlin S. Breakdown of the internet under intentional attack[J]. *Physical review letters.* 2001 Apr 16;86(16):3682.
- [4] Cohen R, Havlin S, Ben-Avraham D. Efficient immunization strategies for computer networks and populations[J]. *Physical review letters.* 2003 Dec 9;91(24):247901.
- [5] Schwartz N, Cohen R, Ben-Avraham D, Barabási AL, Havlin S. Percolation in directed scale-free networks[J]. *Physical Review E.* 2002 Jul 26;66(1):015104.
- [6] Ising E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*[J]. 1925 Feb;31(1):253-8.
- [7] Onsager L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition[J]. *Physical Review.* 1944 Feb 1;65(3-4):117.
- [8] Prigogine I, Lefever R. Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. II[J]. *The Journal of Chemical Physics.* 1968 Feb 15;48(4):1695-700.
- [9] Haken H. Cooperative phenomena in systems far from thermal equilibrium and in nonphysical systems[J]. *Reviews of modern physics.* 1975 Jan 1;47(1):67.
- [10] Parisi G. Infinite number of order parameters for spin-glasses[J]. *Physical Review Letters.* 1979 Dec 3;43(23):1754.
- [11] Barabási AL, Albert R. Emergence of scaling in random networks[J]. *Science.* 1999 Oct 15;286(5439):509-12.
- [12] Watts DJ, Strogatz SH. Collective dynamics of ‘small-world’ networks[J]. *Nature.* 1998 Jun;393(6684):440-2.
- [13] Song C, Havlin S, Makse HA. Self-similarity of complex networks[J]. *Nature.* 2005 Jan 27;433(7024):392-5.
- [14] Song C, Havlin S, Makse HA. Origins of fractality in the growth of complex networks[J]. *Nature physics.* 2006 Apr;2(4):275-81.
- [15] Motter AE. Cascade control and defense in complex networks[J]. *Physical Review Letters.* 2004 Aug 26;93(9):098701.
- [16] Girvan M, Newman ME. Community structure in social and biological networks[J]. *Proceedings of the national academy of sciences.* 2002 Jun 11;99(12):7821-6.
- [17] Bianconi G, Barabási AL. Bose-Einstein condensation in complex networks[J]. *Physical review letters.* 2001 Jun 11;86(24):5632.
- [18] Papadopoulos F, Kitsak M, Serrano M Á, et al. Popularity versus similarity in growing networks[J]. *Nature.* 2012, 489(7417): 537-540.
- [19] Benson A R, Gleich D F, Leskovec J. Higher-order organization of complex networks[J]. *Science.* 2016, 353(6295): 163-166.
- [20] Muscoloni A, Thomas J M, Ciucci S, et al. Machine learning meets complex networks via coalescent embedding in the hyperbolic space[J]. *Nature communications.* 2017, 8(1): 1615.
- [21] Chami I, Ying Z, Ré C, et al. Hyperbolic graph convolutional neural networks[J]. *Advances in neural information processing systems.* 2019, 32.
- [22] Gao T T, Yan G. Autonomous inference of complex network dynamics from incomplete and noisy data[J]. *Nature Computational Science.* 2022, 2(3): 160-168.
- [23] Prasse B, Van Mieghem P. Predicting network dynamics without requiring the knowledge of the interaction graph[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences.* 2022, 119(44): e2205517119.
- [24] Murphy C, Laurence E, Allard A. Deep learning of contagion dynamics on complex networks[J]. *Nature Communications.* 2021, 12(1): 4720.
- [25] Vlachas P R, Arampatzis G, Uhler C, et al. Multiscale simulations of complex systems by learning their effective dynamics[J]. *Nature Machine Intelligence.* 2022, 4(4): 359-366.
- [26] Vespignani A. Modelling dynamical processes in complex socio-technical systems[J]. *Nature physics.* 2012, 8(1): 32-39.
- [27] Gao J, Liu Y Y, D'souza R M, et al. Target control of

- 
- complex networks[J]. *Nature communications*, 2014, 5(1): 5415.
- [28] Fan C, Zeng L, Sun Y, et al. Finding key players in complex networks through deep reinforcement learning[J]. *Nature machine intelligence*, 2020, 2(6): 317-324.
- [29] Fan C, Shen M, Nussinov Z, et al. Searching for spin glass ground states through deep reinforcement learning[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 725.
- [30] Cranmer M, Sanchez G A, Battaglia P, et al. Discovering symbolic models from deep learning with inductive biases[C]. *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2020;33:17429-42.
- [31] SUN F, LIU Y, WANG J X, et al. Symbolic physics learner: Discovering governing equations via Monte Carlo tree search[DB/OL]. <https://arxiv.org/abs/2205.13134>, 2022 May 26.
- [32] Shi H, Ding J, Cao Y, et al. Learning Symbolic Models for Graph-structured Physical Mechanism[C]// In *The Eleventh International Conference on Learning Representations*. 2023 Feb 1.
- [33] Shandilya SG, Timme M. Inferring network topology from complex dynamics. *New Journal of Physics*. 2011 Jan 5;13(1):013004.
- [34] Wang S, Herzog ED, Kiss IZ, Schwartz WJ, Bloch G, Sebek M, Granados-Fuentes D, Wang L, Li JS. Inferring dynamic topology for decoding spatiotemporal structures in complex heterogeneous networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2018 Sep 11;115(37):9300-5.
- [35] Wang H, Ma C, Chen H S, et al. Full reconstruction of simplicial complexes from binary contagion and Ising data[J]. *Nature communications*. 2022 Jun 1;13(1):3043.
- [36] Samtoro A, Battiston F, Petri G, et al. Higher-order organization of multivariate time series[J]. *Nature Physics*. 2023 Jan 2:1-9.
- [37] Yuan Y, Alabdulkareem A, Pentland AS. An interpretable approach for social network formation among heterogeneous agents. *Nature communications*. 2018 Nov 8;9(1):4704.
- [38] Trivedi R, Yang J, Zha H. Graphopt: Learning optimization models of graph formation. In *International Conference on Machine Learning 2020 Nov 21 (pp. 9603-9613)*. PMLR.
- [39] Zhou T. Progresses and challenges in link prediction[J]. *Iscience*. 2021 Nov 19;24(11):103217.
- [40] Pineda J, Midtvedt B, Bachimanchi H, et al. Geometric deep learning reveals the spatiotemporal features of microscopic motion[J]. *Nature Machine Intelligence*. 2023 Jan;5(1):71-82.
- [41] Martin T, Hofman JM, Sharma A, Anderson A, Watts DJ. Exploring limits to prediction in complex social systems. In *Proceedings of the 25th international conference on world wide web 2016 Apr 11 (pp. 683-694)*.
- [42] Scarpino SV, Petri G. On the predictability of infectious disease outbreaks. *Nature communications*. 2019 Feb 22;10(1):898.
- [43] Wang T, Wang XW, Lee-Sarwar KA, Litonjua AA, Weiss ST, Sun Y, Maslov S, Liu YY. Predicting metabolomic profiles from microbial composition through neural ordinary differential equations. *Nature Machine Intelligence*. 2023 Mar;5(3):284-93.
- [44] Bury T M, Sujith R I, Pavithran I, et al. Deep learning for early warning signals of tipping points[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2021 Sep 28;118(39):e2106140118.
- [45] Menck P J, Heitzig J, Marwan N, et al. How basin stability complements the linear-stability paradigm[J]. *Nature physics*. 2013 Feb;9(2):89-92.
- [46] Gao J, Barzel B, Barabási A L. Universal resilience patterns in complex networks[J]. *Nature*. 2016 Feb 18;530(7590):307-312.
- [47] Liu Y Y, Slotine J J, Barabási A L. Controllability of complex networks[J]. *Nature*. 2011 May 12;473(7346):167-173.
- [48] Zhang L, Han J, Wang H, et al. Deep potential molecular dynamics: a scalable model with the accuracy of quantum mechanics[J]. *Physical review letters*. 2018 Apr 4;120(14):143001.
- [49] Floryan D, Graham MD. Data-driven discovery of intrinsic dynamics. *Nature Machine Intelligence*. 2022 Dec;4(12):1113-20.
- [50] LI R, WANG H, LI Y. Learning Slow and Fast System Dynamics via Automatic Separation of Time Scales[C]// In *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining 2023*.
- [51] Sanchez-Gonzalez A, Godwin J, Pfaff T, Ying R, Leskovec J, Battaglia P. Learning to simulate complex physics with graph networks. In *International conference on machine learning 2020 Nov 21 (pp. 8459-8468)*. PMLR.
- [52] Qiaofeng Li, Tianyi Wang, Vwani Roychowdhury, and M. K. Jawed. Metalearning Generalizable Dynamics from Trajectories. *Phys. Rev. Lett.* 131, 067301. 2023.
- [53] Huang Z, Sun Y, Wang W. Generalizing Graph ODE for Learning Complex System Dynamics across Environments. In *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining 2023 Aug 6 (pp. 798-809)*.
- [54] D'Souza RM, di Bernardo M, Liu YY. Controlling complex networks with complex nodes. *Nature Reviews Physics*. 2023 Apr;5(4):250-62.
- [55] Baggio G, Bassett DS, Pasqualetti F. Data-driven control of complex networks. *Nature communications*. 2021 Mar 3;12(1):1429.
- [56] Meiron E, Maron H, Mannor S, Chechik G. Controlling graph dynamics with reinforcement learning and graph neural networks. In *International Conference on Machine Learning 2021 Jul 1 (pp. 7565-7577)*. PMLR.
- [57] Yang S, Nachum O, Du Y, et al. Foundation models for decision making: Problems, methods, and opportunities[DB/OL]. *arXiv preprint arXiv:2303.04129*. 2023 Mar 7.
- [58] Ingraham J, Garg V, Barzilay R, Jaakkola T. Generative models for graph-based protein design. *Advances in neural information processing systems*. 2019;32.
- [59] Lutz ID, Wang S, Norn C, Courbet A, Borst AJ, Zhao YT,

- Dosey A, Cao L, Xu J, Leaf EM, Treichel C. Top-down design of protein architectures with reinforcement learning. *Science*. 2023 Apr 14;380(6642):266-73.
- [60] Lee JS, Kim J, Kim PM. Score-based generative modeling for de novo protein design. *Nature Computational Science*. 2023 May 4:1-1.
- [61] Zheng Y, Lin Y, Zhao L, et al. Spatial planning of urban communities via deep reinforcement learning[J]. *Nature Computational Science*. 2023 Sep 11:1-5.
- [62] Zheng Y, Su H, Ding J, Jin D, Li Y. Road Planning for Slums via Deep Reinforcement Learning. In *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining 2023 Aug 6* (pp. 5695–5706).
- [63] Xue J, Jiang N, Liang S, et al. Quantifying the spatial homogeneity of urban road networks via graph neural networks[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2022, 4(3): 246-257.
- [64] Saberi, M., Hamedmoghadam, H., Ashfaq, M. et al. A simple contagion process describes spreading of traffic jams in urban networks[J]. *Nat Commun* 11, 1616 (2020).
- [65] Lei W, Alves L G A, Amaral L A N. Forecasting the evolution of fast-changing transportation networks using machine learning[J]. *Nature communications*, 2022, 13(1): 4252.
- [66] Mao J, Cao L, Gao C, et al. Detecting Vulnerable Nodes in Urban Infrastructure Interdependent Network[C]. *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. 2023: 4617-4627.
- [67] Yang Y, Nishikawa T, Motter A E. Small vulnerable sets determine large network cascades in power grids[J]. *Science*, 2017, 358(6365): eaan3184.
- [68] Danziger M M, Barabási A L. Recovery coupling in multilayer networks[J]. *Nature communications*, 2022, 13(1): 955.
- [69] De Domenico M. More is different in real-world multilayer networks[J]. *Nature Physics*, 2023: 1-16.
- [70] Guimarães, P., Pires, M., Jordano, P. et al. Indirect effects drive coevolution in mutualistic networks[J]. *Nature* 550, 511–514 (2017).
- [71] Rohr R P, Saavedra S, Bascompte J. On the structural stability of mutualistic systems[J]. *Science*, 2014, 345(6195): 1253497.
- [72] Olesen J M, Bascompte J, Dupont Y L, et al. The modularity of pollination networks[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2007, 104(50): 19891-19896.
- [73] Torng W, Altman R B. High precision protein functional site detection using 3D convolutional neural networks[J]. *Bioinformatics*, 2019, 35(9): 1503-1512.
- [74] Bepler, T. & Berger, B. Learning protein sequence embeddings using information from structure. In *International Conference on Learning Representations* (2019).
- [75] Senior A W, Evans R, Jumper J, et al. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning[J]. *Nature*, 2020, 577(7792): 706-710.
- [76] Gerstein M. How representative are the known structures of the proteins in a complete genome? A comprehensive structural census[J]. *Folding and Design*, 1998, 3(6): 497-512.
- [77] Lutz I D, Wang S, Norn C, et al. Top-down design of protein architectures with reinforcement learning[J]. *Science*, 2023, 380(6642): 266-273.
- [78] Peng, Hao, et al. Neural embeddings of scholarly periodicals reveal complex disciplinary organizations[J]. *Science Advances* 7.17 (2021): eabb9004.
- [79] Danziger, Michael M., et al. Dynamic interdependence and competition in multilayer networks[J]. *Nature Physics* 15.2 (2019): 178-185.
- [80] Hu, Jiliang, et al. Emergent phases of ecological diversity and dynamics mapped in microcosms[J]. *Science* 378.6615 (2022): 85-89.
- [81] May, Robert M. *Stability and complexity in model ecosystems*[M]. Vol. 1. Princeton university press, 2019.
- [82] Yang Y, Nishikawa T, Motter A E. Small vulnerable sets determine large network cascades in power grids[J]. *Science*, 2017, 358(6365): eaan3184.