

• 科学论坛 •

DOI: 10.3724/BNSFC-2024.12.12.0001

高阶关系建模方法、应用及展望

郑慧君 刘硕 周逸龙 蔡梦思 冯家伟 何雨琪 吕欣*

国防科技大学 系统工程学院,长沙 410073

[摘要] 近年来,大数据技术为网络科学提供了重要的数据支撑,推动了复杂系统中高阶关系建模与分析方法的发展,为揭示复杂系统内在机制提供了新的途径,展现出重要的应用前景。聚焦系统要素间关系研究,本文从高阶关系的基本概念切入,首先介绍高阶交互关系和高阶依赖关系的定义,然后对基于单纯复形、超图、模体和高阶马尔可夫过程的高阶关系建模方法进行全面总结和描述。进一步地,通过梳理在社会、生物和工程物理等领域的前沿应用,全面论述高阶关系挖掘在现实复杂系统研究中的应用现状。最后,从建模方法和实践应用两个维度分析了高阶关系研究存在的挑战,并展望了未来研究方向。

[关键词] 高阶关系;高阶建模;复杂系统;复杂网络

1 高阶关系研究概述

在大数据时代,物联网技术的广泛应用推动了数据采集和生成模式的革新。各个主体(企业、政府机构、个人用户等)通过多种渠道(包括传感器、摄像头、智能手机等)不断生成、存储和处理数据,导致数据的规模和生成速度持续攀升^[1,2]。积累的海量数据不仅为复杂系统研究提供了全新的视角,也为揭示系统内部的潜在联系和复杂交互提供了坚实的数据支撑。

复杂系统由大量相互作用、相互依赖的要素组成,这些要素通过各种类型的交互作用建立连接,如社会系统中个体的友邻关系^[3],交通系统中受多种因素影响的移动轨迹^[4,5],天气系统中不同空间点位的气象关联^[6,7],军事系统中相互依赖的指控链路^[8]等。相较于简单系统,复杂系统并非其组成部分的简单叠加,其通常具备不确定性、非线性、适应性、涌现性等特性,传统线性科学理论难以对其展开全面深入的理解与认知^[9,10]。

网络科学通过使用图形和网络来表示相互作用,被广泛应用于描述现实复杂系统,成为复杂系统建模的典型范式之一。传统网络建模方法大多是基于节点之间

的直接连接关系,在本质上局限于对成对交互关系的分析。事实上,仅用成对交互来表征复杂系统,往往只能实现对现实的一种近似。对于绝大多数系统而言,若考虑多个要素或个体间的相互作用,其表征能力将更加完备。Rosvall等^[11]通过在交通、电子邮件等多个数据集上的对比分析发现,忽略二阶马尔可夫动力学的影响会导致社区划分、信息传播等过程中出现显著偏差;Benson等^[12]分析了来自生物学、医学、社会学等多个领域的数据,结果显示高阶结构模式在同类系统中表现出一致性特征。这些实证研究证明高阶关系能够有效捕捉复杂系统中更多潜在信息,更准确地刻画复杂系统中信息流动和功能整合的机制,从而为系统的理解与优化提供重要支撑。

大数据背景下复杂系统中高阶关系研究存在新的挑战。在理论研究层面,应深入分析高阶交互关系和高阶依赖关系的特征,重点探讨不同高阶关系的建模差异。在应用研究层面,需将这些新方法应用于社会、生物和工程物理等领域,以评估其在不同复杂系统中的有效性和适用性。

收稿日期:2024-12-12;修回日期:2025-06-23

*通信作者,Email:xin.lu.lab@outlook.com

本文受到国家自然科学基金青年科学基金项目(A类)(72025405)、国家自然科学基金创新研究群体项目(72421002)、国家自然科学基金青年科学基金项目(C类)(72301285,72401289)和湖南省科学基金项目(2025JJ60447)的资助。

引用格式: 郑慧君,刘硕,周逸龙,等.高阶关系建模方法、应用及展望.中国科学基金,2025,39(5):817-828.

Zheng HJ,Liu S,Zhou YL,et al. Modelling methods,applications and perspectives on higher-order relationships. Bulletin of National Natural Science Foundation of China,2025,39(5):817-828.(in Chinese)

2 高阶关系的概念与类型

高阶关系(higher-order relationship)是指在复杂系统中,要素或节点间的交互或依赖关系超越传统的成对交互(即一对—关系),而涉及多方之间的复杂关联。根据节点间的作用方式,高阶关系可分为高阶交互(higher-order interaction)关系和高阶依赖(higher-order dependency)关系。高阶交互强调三个及以上节点作为整体同时作用所产生的影响,而高阶依赖描述了系统当前状态受到历史上多个时间点状态共同影响的复杂模式。

2.1 高阶交互关系

高阶交互关系是指在一个系统或网络中,三个及以上节点之间存在的复杂相互作用(如各种类型的关联、互动和信息传递等)。对于网络 $G = (V, I)$, $V = \{v_0, v_1, \dots, v_{n-1}\}$ 表示节点集; $I = \{I_0, I_1, \dots, I_q, \dots, I_{p-1}\}$ 表示节点间相互作用的集合,共 p

项。其中, $I_q = \{i_0, i_1, \dots, i_{k-1}\}$ 表示第 q 项的高阶交互是一个包括 k 个节点的 $k-1$ 阶交互关系($k \geq 3$)。在高阶交互关系中,多个节点同时参与到某一过程或事件中,它们的互动不仅受到彼此之间的直接影响,还可能受到其他节点的间接影响,从而形成更为复杂和多层次的交互关系。图1A展示了多个基因的协同作用对疾病产生的影响;图1B展示了大脑皮层神经元间的交互关系,刻画了神经活动所依赖的结构基础。

2.2 高阶依赖关系

高阶依赖关系是指在序列数据或网络路径中,当前节点后续状态或行为发生的概率不仅与当前节点的状态或行为有关,还受到前序一个或多个节点状态或行为的影响。对于具有时序特征的网络 $G = (V, \Theta)$, $\Theta = \{\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{n-1}\}$ 表示 n 个相互独立序列的集合,其中 $\theta_m = (v_0 \rightarrow v_1 \rightarrow \dots \rightarrow v_{l_m})$ 表示一个存在于网络 G 中包括 $l_m + 1$ 个节点,长度为 l_m 的序列。且对于序列

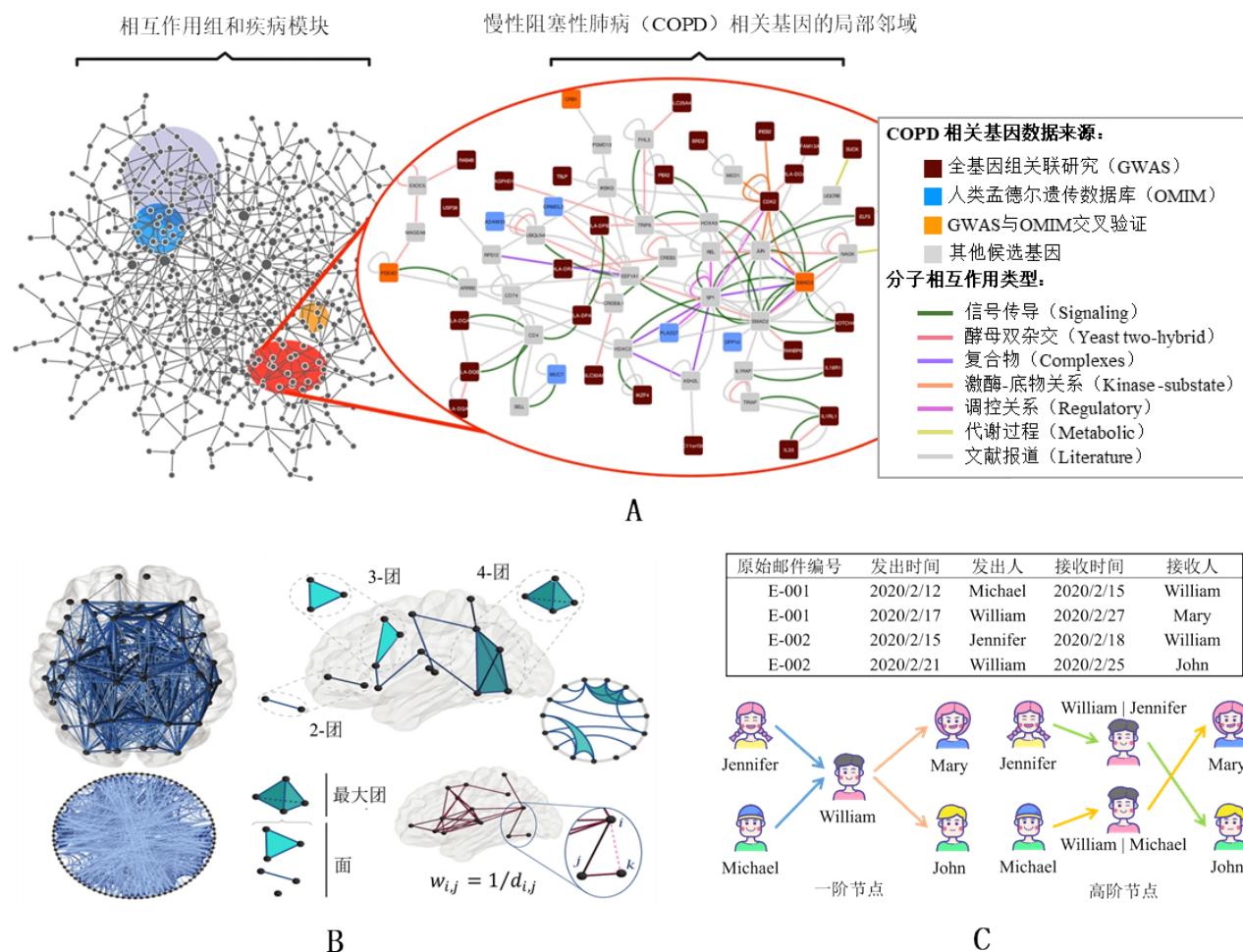


图1 复杂系统中的不同高阶关系:A. 多个基因对疾病的协同作用^[13];B. 大脑皮层神经元间的交互关系^[14];C. 邮件转发序列
Fig.1 Different Higher-order Relationships in Complex Systems;A. Synergistic Effects of Multiple Genes on Disease^[13]; B. Interaction Relationships between Neurons in the Cerebral Cortex^[14]; C. Email Forwarding Sequences

θ_m , 其节点 v_i 后续状态或行为的 k 阶依赖关系与前序 $v_{i-(k-1)}, \dots, v_{i-2}, v_{i-1}, v_i$ 个节点有关, 路径转移概率记为 $P(v_{i+1} \mid v_{i-(k-1)} \rightarrow \dots \rightarrow v_{i-1} \rightarrow v_i)$ 。高阶依赖关系能反映序列数据中的多层次间接依赖, 模拟真实系统的行为。如图1C所示, 邮件转发序列中前序邮件来源会影响后续的转发行为。

3 高阶关系的建模方法

在过去的20余年中, 随着ER随机图模型、WS小世界网络模型和BA无标度网络模型等的提出, 网络科学被广泛应用于描述现实复杂系统, 成为复杂系统建模的典型范式之一。传统网络建模方法大多是基于节点之间的直接连接关系, 在本质上局限于成对交互关系的分析^[15]。而实际上一个节点可能经常以非线性方式受到多个其他节点的影响, 并且这种高阶作用不能分解为成对交互^[16-18]。目前, 高阶关系的建模方法因关系类型不同而存在区别: 高阶交互关系通常采用单纯复形(simplicial complexes)、超图(hypergraphs)或模体(motifs)等高阶结构建模; 高阶依赖关系则主要基于高阶马尔可夫过程(higher-order Markov processes), 也可使用时序模体等方法。

3.1 高阶交互关系建模

3.1.1 基于单纯复形的高阶关系建模

单纯形是几何学中的一个概念, 指在 n 维欧几里得空间中的一个凸包, 它由 $n+1$ 个不共面的顶点和它们之间所有边、面、体组成。对 d -单纯形 s 来说, 其由 $d+1$ 个相互作用的节点构成, 记为 $s = [\text{node}_0, \text{node}_1, \dots, \text{node}_d]$ 。 d -单纯形 s 的面是指该单纯形 s 的子集 s' , 即 $s' \subset s$ 。图2展示了不同维数的单纯形结构, 单节点结构为0-单纯形, 两个节点形成的连边为1-单纯形, 三个节点组成的三角形结构为2-单纯形, 以此类推^[19]。

单纯复形是由0-单纯形(点)、1-单纯形(线段)、2-单纯形(三角形)等 d -单纯形构成的集合, 其中每个 d -单纯形表示 $d+1$ 个要素间的高阶相互作用, 且要求该相互作用的所有低维子关系(即任意子集构成的单纯形)必须

包含在该单纯复形中。具体来说, 单纯复形 $K = (V, S)$ 具有组合闭包性质, 即满足如下两个条件: (1)如果单纯形属于单纯复形, 则单纯形的任意面也包含在单纯复形中, 即 $s \in K$, 那么 $s' \in K$; (2)给定一个单纯复形中的两个单纯形, 则它们的交点属于单纯复形, 或者它们的交点为零, 即 $s', s'' \in K$, 则 $s' \cap s'' \in K$ 或 $s' \cap s'' = \emptyset$ 。

在基于单纯复形的高阶关系建模中, 系统要素表示为单纯复形中的顶点, 要素间的连接表示为1-单纯形, 真实系统中存在的环路或多重连接等高阶关系表示为 d -单纯形 ($d \geq 2$), 最后输出所有要素、连接和高阶关系的单纯复形表示结果^[20]。其中, 复杂系统的单纯复形可以表示为 $K = (V, S)$, 其中 V 表示节点集, S 表示 n 个单纯形的集合, 记为 $S = \{s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}\}$ 。以社交网络为例阐述单纯复形的构建过程。假设存在6个用户, 其中用户A、B、C、D之间形成紧密的朋友圈, 任意两人、三人、四人都有直接的社交互动; 用户E、F之间存在直接的双向互动。该社交网络被建模为如图2D所示的单纯复形, 其节点集 $V = \{A, B, C, D, E, F\}$ 包含所有用户, 单纯形集合 S 涵盖所有观察到的群体互动结构及其子结构, 包括了6个0-单纯形、7个1-单纯形、4个2-单纯形和1个3-单纯形。然而在建模过程中, 随着单纯形维度 d 的增加, 系统需要验证的组合闭包条件呈指数级增长, 因此在实际应用中通常需要权衡计算复杂度与建模精度, 选择合适的建模阶数。

近年来, 单纯复形的神经网络建模方法逐渐受到关注, 研究者提出了若干面向单纯形数据处理的神经网络架构。Bodnar等^[21]将消息传递神经网络拓展至单纯复形, 并引入单纯魏斯费勒—莱曼着色过程, 利用上下邻域关系进行特征聚合, 显著增强了对非同构结构的区分能力。此外, 广义单纯注意力网络采用掩码自注意力机制, 动态学习不同阶单纯形间的交互权重, 进一步提升了模型的表达能力^[22]。为提高计算效率, 二进制单纯卷积神经网络结合加权二进制符号传播, 优化了单纯卷积运算^[23]。

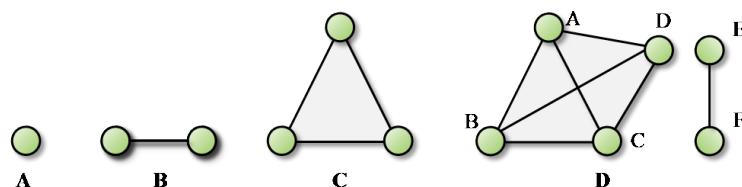


图2 单纯形和单纯复形示意图; A. 0-单纯形; B. 1-单纯形; C. 2-单纯形; D. 单纯复形示例

Fig.2 Schematic Diagrams of Simplices and Simplicial Complex; A. 0-simplex; B. 1-simplex; C. 2-simplex; D. Example of Simplicial Complex

3.1.2 基于超图的高阶关系建模

超图是图论中一种比传统图更灵活的数据结构,它允许超边(又称广义边)连接多个顶点,而不仅限于两个顶点之间的关系。即超图中的每条超边是一个节点的集合,表示多个节点之间的相互作用。一个由 n 个节点集组成的超边 e_H 可记为 $e_H = [v_1, \dots, v_n]$ 。如图3所示,2-超边是由两个节点组成的集合,表示系统中两个要素之间的相互作用;3-超边是由三个节点组成的集合,表示系统中三个要素之间的高阶相互作用,以此类推。

基于超图的高阶模型^[24]借助超边结构,能够将网络中多个顶点同时相关联,从而更好地表示现实世界中的复杂关系和连接。与单纯复形的建模方法不同,超图是一种一般化的关系描述工具,它不限定于特定的拓扑结构,但这一泛化描述也增加了处理实际问题的复杂度^[25]。如图3D所示,复杂系统的超图可以表示为 $G_H = (V, E_H)$,其中 V 表示节点集, E_H 表示 m 个超边的集合,记为 $E_H = \{e_H^{(1)}, e_H^{(2)}, \dots, e_H^{(m)}\}$ 。

超图理论与深度学习的交叉融合为复杂系统的高阶交互建模提供了新的研究范式。研究者提出了多种基于两步消息传递机制的超图神经网络^[26-28]:首先将节点特征传递到对应超边以学习超边嵌入,继而将学习得到的超边嵌入回传至节点,完成节点表示学习。然而,随着网络深度增加,这类方法易受节点表示过度平滑的影响,导致高阶结构信息丢失。为此,近期研究引入基于多头注意力机制的全局建模框架,通过显式捕捉节点与超边之间的长程依赖关系,有效提升了深层超图神经网络的表征能力^[29]。此外,Heydaribeni等^[30]通过超图神经网络对复杂约束关系进行建模,并采用分布式和并行训练架构,有效提升了算法的可扩展性和计算效率,为多学科科学与工程领域的复杂系统建模提供了新的方法。

3.1.3 基于模体的高阶关系建模

模体是网络中一种由简单的两节点或多节点连接模式构成的结构,它在网络中以一定的模式重复出现,通常具有特定结构或功能。如果 $G = (V, E)$ 和

$G' = (V', E')$ 表示两个图,其中 V' 和 V 分别表示网络 G' 和 G 中的节点, E' 和 E 分别表示网络 G' 和 G 中的连边,且有 $V' \subseteq V$ 且 $E' \subseteq E \cap (V' \times V')$,则图 G' 是图 G 的子图,记为 $G' \subseteq G$ 。当子图 G' 在特定网络 G 中的出现频率 $|G'|$ 高于阈值 T 时,该子图称为网络中的一种模体。

在基于模体的高阶关系建模研究中,最开始对两节点模体展开了研究,并逐步对更复杂的三节点、四节点模体等进行了探索。其中,三节点模体因其能够捕捉到复杂网络中的特定结构和动态特征,并相对于简单的两节点模体和复杂的四节点模体具有适中的复杂性和可分析性,因此在复杂网络中得到了广泛关注和深入研究。常见的三节点有向模体包括13种,具体连接形式如图4所示。网络中相同模体的聚集反映了网络的组织模式,如三角形模体(图4中的M₁~M₇)是社交网络研究的关键^[31];前馈环路(图4中的M₅)已被证明是理解转录调节网络的基础^[32];开放的双向楔形(图4中的M₁₃)是探索大脑结构中枢的关键^[33];两跳路径(图4中的M₈~M₁₃)对于理解空中交通模式至关重要^[11]。基于模体的高阶关系建模过程的关键步骤在于有效计算网络中模体的数量,并识别出优势模体^[34,35]。

模体作为网络高阶结构的基本单元,其与神经网络的融合有效捕捉了网络中更深层的结构特征,从而提升了下游任务的性能。早期基于模体的深度特征学习模型将模体特征与自动编码器结合,分析了不同模体类型对预测任务的影响^[36]。基于模体的图注意力网络通过引入基于模体的混合信息矩阵,改进了图注意力系数的生成机制,使模型能够有效捕捉高阶结构特征^[37]。在特定领域中,基于模体的服务推荐图注意力网络专门针对二分图,开发了模体邻接矩阵生成算法,并融合基于模体的注意力机制与协同过滤方法,显著提升了服务推荐性能^[38]。基于模体的局部—全局自学习框架,以生物学代谢相互作用为基础,通过层次化建模有效揭示了意外药物相互作用的可解释性机制^[39]。

3.2 高阶依赖关系建模

高阶依赖关系的建模主要基于高阶马尔可夫过程的理论框架。高阶马尔可夫过程是指在随机过程理论中,

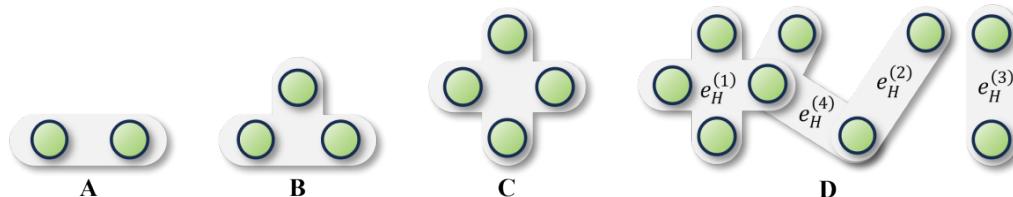


图3 超边和超图示意图:A. 2-超边;B. 3-超边;C. 4-超边;D. 超图示例

Fig.3 Schematic Diagrams of Hyperedges and Hypergraph: A. 2-hyperedge; B. 3-hyperedge; C. 4-hyperedge; D. Example of Hypergraph

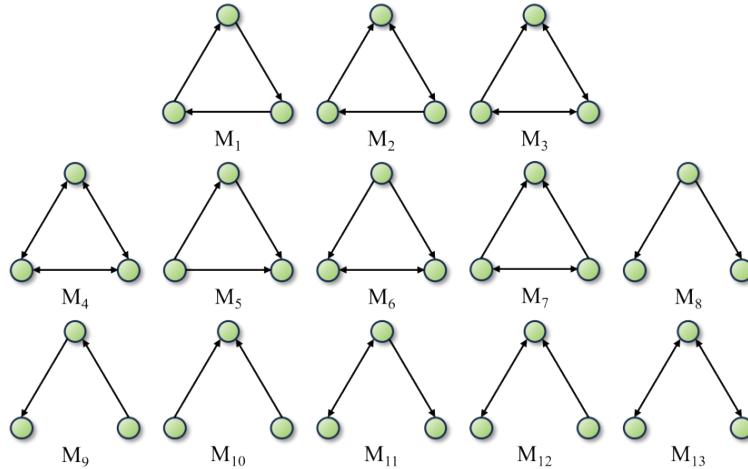


图4 常见的三节点有向模体
Fig.4 Common Three-node Directed Motifs

考虑多个过去状态的相互依赖性,结合当前状态和一定数量的历史状态信息,以概率方法确定未来状态的数学模型。一阶马尔可夫过程假设节点 v_i 转移到节点 v_{i+1} 的概率只与节点 v_i 和 v_{i+1} 有关,与其他节点无关,节点的转移概率满足 $P(v_{i+1} | v_0 \rightarrow \dots \rightarrow v_i) = P(v_{i+1} | v_i)$ 。二阶马尔可夫过程假设节点间的关联关系不仅与最近邻的两个节点有关,而且受到前序节点 v_{i-1} 的影响,节点的转移概率满足 $P(v_{i+1} | v_0 \rightarrow \dots \rightarrow v_i) = P(v_{i+1} | v_{i-1} \rightarrow v_i)$ 。 k 阶马尔可夫过程假设相邻节点间的关联关系受前序 k 个节点的影响,节点的转移概率满足 $P(v_{i+1} | v_0 \rightarrow \dots \rightarrow v_i) = P(v_{i+1} | v_{i-(k-1)} \rightarrow \dots \rightarrow v_i)$ 。

为了实现这种高阶依赖关系的建模,需要对传统的节点表示方法进行扩展。在基于高阶马尔可夫过程的网络表示中,节点不再是简单的实体标识,而是包含历史路径信息的复合状态。具体地,每个节点不仅包含当前所处实体节点的信息,还具有对前序节点的记忆特性。这种扩展表示使得一个节点能够同时编码多个实体的序列信息,从而支持高阶转移概率的计算和高阶依赖关系的表示。以图1C中的邮件转发数据为例,William经常接收来自Jennifer和Michael的邮件,但William会将来自Jennifer的邮件转发给John,而来自Michael的邮件会转发给Mary。传统一阶关系无法有效描述此行为,然而二阶依赖关系可以准确刻画这一现象,满足 $P(\text{John} | \text{Jennifer}, \text{William}) = 1$,

$$P(\text{John} | \text{Michael}, \text{William}) = 0.$$

基于高阶马尔可夫过程的建模过程的核心在于识别序列数据中的潜在高阶依赖关系,并将其转化为网络表示。为了充分考虑实际系统的高阶依赖性,许多建模框架被提出,如二阶马尔可夫网络模型^[11,40]、 k 阶聚合网络模型^[41]、稀疏记忆网络模型^[42]、多阶图形模型^[43]、BuildHON模型^[44]、BuildHON+模型^[45]、生成多阶模型^[46]等。

3.3 高阶关系建模方法的比较与分析

高阶关系建模方法的比较总结如表1所示。单纯复形具有严格的组合结构(包含所有子单纯形),为拓扑数学和精确结构分析提供了重要的理论工具。然而,这种表征方法在高维空间面临显著的计算挑战,随着维度的增加,子单纯形的组合数量呈指数级增长,导致计算复杂度急剧上升,严重制约了其在大规模复杂系统建模中的实际应用可行性。超图借助高阶集合关系,能够灵活表征系统中多个主体间的复杂关联,并且能够对异质主体的交互(如电商中的用户—商品关系)进行有效建模。其具有良好的可扩展性,但其建模效果高度依赖超边的定义,超边定义的复杂性和主观性可能影响模型的准确性和通用性。模体通过局部拓扑模式匹配实现对网络结构的数学表征,且结合特定领域知识能够有效识别系统中的功能子结构。其识别方法具有一定的灵活性,但

表1 高阶关系建模方法比较
Table 1 Comparison of Higher-order Relationships Modeling Methods

特点	单纯复形	超图	模体	高阶马尔可夫过程
数学表征能力	严格组合结构	灵活的高阶集合关系	局部拓扑模式匹配	时序依赖的随机过程
主要适用场景	拓扑数学和精确结构分析	异质实体交互	功能子结构识别	时序依赖系统建模
扩展性	高维扩展受组合爆炸限制	可扩展但依赖超边定义	需预设模体库	阶数增加导致参数呈指数增长

通常需要预设模体库,这在一定程度上限制了其在不同场景中的通用性和适用性。高阶马尔可夫过程以时序依赖的随机过程为数学基础,能够捕捉系统中更复杂的时序相关性,进而对具有长期依赖特征的动态系统进行有效建模。其建模方法具有较强的表达能力,但随着马尔可夫阶数的增加,模型参数呈指数级增长,这在一定程度上限制了模型的可扩展性。

4 高阶关系的实践应用

高阶关系建模作为复杂系统研究的重要理论工具,正展现出广泛的应用价值。同时,随着大数据与人工智能技术的快速发展,多领域复杂系统场景的数据采集能力显著提升,这既推动了高阶建模方法的创新需求,也为理论验证提供了丰富的实证基础。高阶关系建模方法目前在社会、生物和工程物理系统等领域得到了广泛应用。

4.1 社会系统

社会系统中的群体合作与互动行为具有重要研究价值。传统基于成对交互的建模方法难以充分刻画群体行为的复杂性,而通过建模群体成员间的高阶交互特征,构建基于高阶关系的动力学模型,能够更准确地描述多主体合作行为和社会互动等复杂社会现象的演化规律。如Park等^[47]提出了一种研究模体数量变化的模体动力学方法,证明了非循环结构模体与系统规模的相关性显著高于循环结构模体,并应用该方法揭示了大学新生之间友谊的形成过程。Sarker等^[48]基于单纯复形的方法重新定义了群体同质性的概念,提出了 k -单纯形同质性这一新的测量方法,并通过实证数据集验证了该方法在识别节点元数据对预测群体互动有用性方面的

有效性。Iacopini等^[49]从群体动力学的角度分析了学龄前儿童和大学新生两个群体中的互动,研究表明虽然群体在年龄、环境、互动形式等方面存在差异,但在群体规模、互动持续时间分布、群体转变、群体形成和解散现象上两个群体动态特征是一致的,并基于此规律提出了一个动态超图模型。Alvarez-Rodriguez等^[50]研究了具有高阶互动的社会系统中公共物品博弈的演化动态,证明了均匀超图上的博弈与混合极限下的复制动力学相对应,并基于该理论对科技协作数据进行实证分析。Wang等^[51]提出了一种将原始时序互动数据构建为时序超图网络的方法,其具体构建流程如图5所示,首先将数据表征为具有特定持续时间的超边,继而按预定义的时间窗口聚合为时序超图。该研究的结果表明,与静态超图网络相比,时序超图网络可以促进合作,这一发现说明基于成对或静态互动的传统网络可能低估了互动对促进合作的影响。此外,在科学协作网络中,可以对学者间的协同发表模式、跨领域研究群体的交叉合作等高阶关系进行建模,从而揭示学者合作的特征规律及合作关系的演化机制,深入理解科学协作活动的内在规律^[52-56]。Patania等^[57]通过单纯复形分析发现,arXiv学科间合作规模分布差异显著,但作者合作数量分布相似,且普遍存在强封闭性,表明知识流动具有高阶集群特征。李佳旭等^[58]基于引文大数据构建了基于路径引用的二阶网络,并提出信息熵指标量化高阶引文关系。此外,Baccini等^[25]利用加权单纯复形建模科学合作数据,通过高阶谱熵揭示了9279个三角形结构蕴含的交互信息。Gebhart等^[59]进一步发现,代数拓扑方法可检测传统网络指标无法捕捉的知识网络高阶结构快速增长现象。

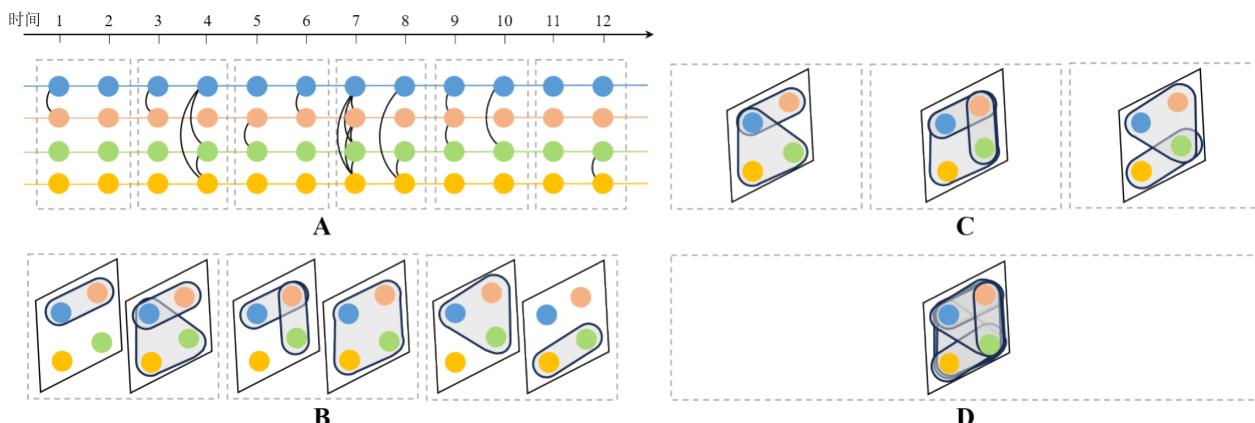


图5 四人社交合作的时序超图网络构建:A. 四人的社会互动情况;B. 根据高阶交互的时间尺度($\Delta t = 2$)形成超边;C. $t = 4$ 的时间尺度下超边聚合形成多个时序超图;D. 时序超网络聚合成静态超网络

Fig.5 Construction of Temporal Hypergraph Network for Four-person Social Collaboration:A. Social Interaction among the Four Persons; B. Formation of Hyperedges Based on the Time Scale of Higher-order Interaction ($\Delta t = 2$); C. Aggregation of Hyperedges at the Time Scale of $t = 4$ to Form Multiple Temporal Hypergraphs; D. Aggregation of Temporal Hypergraphs into a Static Hypergraph

4.2 生物系统

在生物系统的研究中,基于高阶关系的建模方法展现出广阔的应用前景,已成功应用于蛋白质相互作用网络分析、基因—疾病关联建模和脑网络功能解析等关键领域,为揭示生物系统的复杂调控机制提供了新的理论工具和分析框架。Estrada和Rossi^[60]通过将蛋白质相互作用网络建模为单纯复形,扩展了传统节点中心性的概念,并利用这些中心性指标,探讨了一种检测细胞PPI网络中重要蛋白质的方法,揭示了不同层次的中心性测量在识别这些重要蛋白质方面的不同能力。Rossi等^[61]对人类基因疾病相互作用网络进行高阶关系分析,得到与白血病、结肠癌和耳聋等疾病相关的致病基因。Krieg等^[62]利用Xu等^[44]提出的高阶网络框架,从913 475例2型糖尿病患者的数据中生成了一组疾病轨迹高阶网络,研究了最高阶依赖关系对网络熵的影响,并讨论了转移概率分布、链路预测、节点排序和网络聚类问题。Sporns和Kötter^[63]基于神经解剖学数据研究了大脑网络的构建以及神经功能实现的组成和拓扑结构,发现各种真实大脑网络中的功能模体数量非常高,而结构模体数量相对较低,说明高度进化的神经架构能在最大限度内实现各项功能并支持信息的高效整合。Giusti等^[64]利用单纯复形对脑网络中的高阶交互关系进行建模,为建模和测量神经现象开辟了新的可能性。Sizemore等^[14]通过挖掘脑网络中的高阶关系,研究了密集连接节点组的局部计算和互动模式的并行处理,对大脑功能复杂性提供了更加详尽的见解。Peng等^[65]通过分析人类颞叶皮层手术样本中2~3层锥体神经元的多神经元膜片钳记录,发现其网络模体结构的时空分布显著区别于随机网络,揭示了高阶网络结构在皮质计算中的关键作用。Gu等^[66]使用超图表示法表征了脑网络中三类不同的超边(簇、桥和星),揭示了这三种超边的具体拓扑结构和功能实现。如图6所示,Battiston等^[67]基于磁共振扩散成像和功能磁共振成像构建了结构和功能双层网络,通过识别双层网络中的模体结构,深入分析了大脑结构和功能之

间的多层交互,揭示了这些高阶相互作用在静息状态下维持人脑功能协调中的关键作用。

4.3 工程物理系统

在工程物理系统(如电力系统、交通系统等)中的应用研究,主要聚焦于基于高阶结构的系统可靠性优化与多要素耦合下的动态扩散预测。在电力系统可靠性研究中,当前实证分析的主要思路是通过识别电网中的高阶拓扑结构,以更全面地捕捉节点间的高阶关联特性,进而提升系统可靠性。如Abedijaberi等^[68]通过分析欧洲电网的局部结构,揭示了定向攻击下网络鲁棒性与特定网络模体的关联性。Andelković等^[69]提出基于代数拓扑的方法,通过识别网络中的高阶结构,精确定位可能引发级联故障的关键节点,为防范电网潜在风险提供了新思路。Li等^[70]聚焦虚假数据注入攻击问题,创新性地结合子图分区策略和超图模型,设计了针对大型电网的可靠性检测方法。在路网和航运网络的研究中,研究者们通过挖掘时空高阶特征建立了更精确的传播预测模型。图7展示了Luo等^[71]提出的用于交通预测的有向超图注意力框架,该框架采用有向超图建模路网空间关系,结合有向超图卷积与注意力机制,显著提升了交通预测精度。Tao等^[72]开发了HoNVis的可视化分析框架实现高阶网络的分析,以全球航运网络物种入侵为实例,通过该框架的节点排序和聚类算法,快速识别重要港口并追踪生物入侵的过程。在该可视化分析框架的基础上,Saebi等^[73]进一步扩展研究的范畴,基于全球船舶航行模式、水生环境条件和生物地理信息构建了外来入侵物种传播风险的预测模型,并通过识别出的高阶依赖关系构建的物种流高阶网络评估预测结果,有效提高了传播预测的准确性。此后,Saebi等^[74]还利用该高阶网络分析框架和数据挖掘技术评估、可视化和预测北极内非本地物种的扩散活动。

5 高阶关系研究的挑战与展望

5.1 当前挑战

本文系统梳理了高阶关系的基本概念、建模方法及

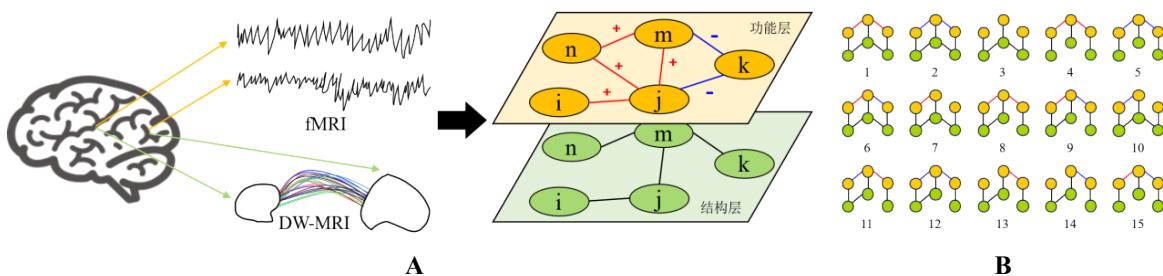
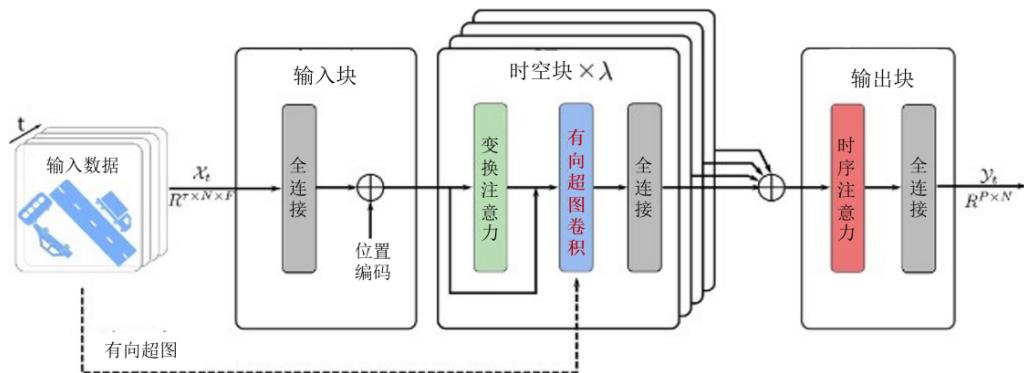


图6 基于模体方法的多层次大脑网络分析:A. 多层次大脑网络的测量;B. 实验中 $t = 15$ 的多层次三元组示例

Fig.6 Analysis of Multi-layer Brain Networks Based on the Motif Method; A. Measurement of Multi-layer Brain Networks; B. Example of Multi-layer Triples with $t = 15$ in the Experiment

图7 基于有向超图注意力机制的交通数据建模架构^[71]Fig.7 Traffic Data Modeling Architecture Based on Directed Hypergraph Attention Mechanism^[71]

其在多领域中的应用,展示了其在社会、生物和工程物理等复杂系统研究中的重要价值。高阶关系建模通过单纯复形、超图、模体等结构,深入刻画了多主体间的复杂交互与依赖关系,并在揭示社会群体演化规律、神经功能连接及物理系统可靠性优化方面取得了一系列成果。这些研究表明,高阶关系规律在现实复杂系统中真实存在,且将高阶建模方法与传统研究手段相结合,能够更好地解决实际问题,推动相关领域的理论发展与应用。尽管取得了诸多进展,高阶关系在建模方法和实践应用中仍存在一些待解决的问题,研究建议与路线如图

8所示。

5.1.1 建模方法挑战

首先,在网络演化过程中识别与推断重要高阶关系存在技术瓶颈。对于科学引文网络、合作网络等结构化数据,虽然可以直接从数据中识别高阶关系模式(如共同引用三角、多作者合作等),但关键挑战在于甄别哪些高阶关系模式对系统功能具有显著影响。而在脑网络等复杂功能系统中,高阶关系往往不能直接观测,需要通过统计推断等方法进行挖掘。为识别网络数据中潜在重要的高阶关系,Li等^[75]提出了一种基于假设检验和

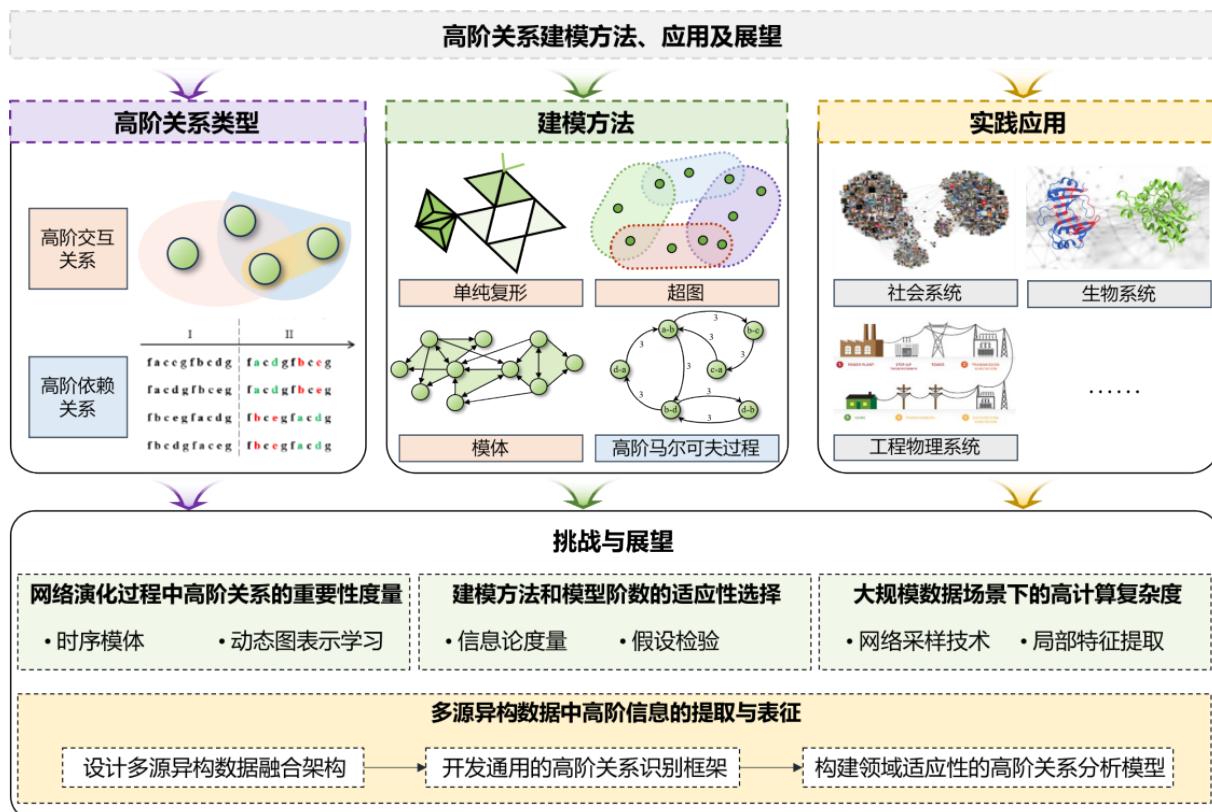


图8 高阶关系建模与应用研究框架

Fig.8 The Research Framework for Higher-order Relationships Modelling and Applications

马尔可夫链蒙特卡罗的高阶依赖关系挖掘方法,用于识别真实系统中的重要高阶依赖。Lyu等^[76]借鉴图像识别领域中尺度结构学习的思想,采用子图采样和非负矩阵分解方法挖掘网络数据中的潜在模体结构信息。然而,这些研究均假设网络拓扑结构在时间维度上保持静态不变。实际上,许多复杂系统的拓扑结构会随时间动态演化,如大脑静息态网络和气候系统等。因此,如何在网络演化过程中有效识别和度量高阶关系的重要性,是亟待解决的问题。

其次,高阶关系的建模过程需要合理选择建模方法和模型阶数。在建模方法选择方面,不同的高阶关系建模方法具有不同的理论基础和适用范围(详见3.3节)。在模型阶数确定方面,阶数过低可能无法有效捕获数据中的关键高阶信息,而阶数过高则会显著增加计算复杂度,同时可能引入噪声干扰。在现有研究中,Zhang等^[77]以脑网络中的同步过程为例,证明了高阶相互作用的效果高度依赖于表示方式;即高阶交互关系会不断破坏单纯复形中的同步但倾向于在超图中稳定同步。Eriksson等^[78]系统研究了随机游走模型在超图上的应用,并深入分析了不同表示方式与随机游走模型的组合如何影响多层次社区识别。尽管现有研究探讨了高阶关系建模方法的选择和模型阶数的确定问题,但大多侧重于方法间的效果对比,而缺乏对建模方法理论依据和决策准则的深入分析。建立从数据特征到建模策略的映射准则,设计阶数自适应确定算法,仍是高阶关系建模中的核心挑战之一。

最后,高阶关系建模在大规模数据场景下面临显著的计算挑战。随着数据采集技术的快速发展,现实网络规模不断扩大,节点和高阶关系数量的爆炸式增长给建模过程带来了计算复杂度、存储空间和处理时间等多重问题。目前已有较多工作通过并行化、提前剪枝、动态扩展树等方法来提升算法效率^[79,80],但这些方法没有充分考虑网络数据的稀疏性、局部性等结构特征,因此,亟需针对大规模网络数据中的特殊性质,设计专门的高阶关系估计与推断算法,在保证模型精度的前提下显著降低计算复杂度。

5.1.2 实践应用挑战

高阶关系的应用研究主要聚焦在社会、生物和工程物理等领域。不同领域的数据往往包含丰富的结构特征,需要采用合适的方法对其中潜在的高阶模式进行挖掘与表征。社会系统中,个体的认知风格差异、合作偏好等异质性特征以及直接互惠、间接互惠等行为机制是影响群体互动和合作的关键因素。如何通过社交网络行为数据、问卷调查数据等多源数据有效量化这些因

素,进而识别潜在的高阶结构特征是实证研究的一大挑战。在生物系统的实证研究中,蛋白质相互作用网络、基因调控回路和脑功能网络等研究都需要整合结构生物学数据、神经影像数据等,并在考虑蛋白质复合物形成的细胞周期依赖性、神经元空间分布的区域异质性等时空因素基础上,系统提取高阶结构特征,进而阐明其对生物学功能或疾病表型的调控机制。这需要深度融合生物信息学、网络科学和机器学习等跨学科方法,是生物系统实证研究面临的重大挑战。在工程物理领域,基于高阶关系建模的系统可靠性优化和动态扩散预测等研究,需要在理论建模的同时兼顾物理约束与成本效益等实际因素,体现理论与实践的紧密结合。基于上述现状,当前高阶关系实证研究面临的关键挑战在于如何开发能够高效处理多源异构数据的高阶关系挖掘方法,以从领域特异性数据中提取可解释的高阶模式,从而揭示系统功能规律,并最终推动其实际应用落地。

5.2 未来展望

未来研究需要从方法论创新和应用实践两个维度应对上述挑战。在建模方法层面,第一,针对网络演化过程中高阶关系重要性度量问题,需要引入时序模体、高阶信息的动态图表示学习等多种方法,以捕捉高阶结构的时序演化特征并量化其功能影响。第二,针对高阶关系建模方法和模型阶数确定问题,需综合考虑领域数据的异质性、稀疏性和系统复杂度等因素,通过量化分析模型阶数增加的信息增益、假设检验的统计显著性,构建理论指导框架,以实现不同系统中高阶关系的自适应建模与模型阶数选择。第三,针对大规模数据场景下高阶关系建模的高计算复杂度问题,需结合网络采样技术、典型局部结构识别与提取等方法,通过降维和去噪确定系统中不同尺度下的关键结构特征,从而在保证模型精度的前提下显著提升计算效率。在应用实践层面,可考虑结合图神经网络、张量分解等方法设计多源异构数据融合架构,开发通用的高阶关系识别框架,选择社交网络、生物医学网络、电网等典型场景,结合领域知识,构建领域适应性的高阶关系分析模型,实现从理论方法向实际问题的有效转化。

参 考 文 献

- [1] 刘涛雄,李若菲,戎珂. 基于生成场景的数据确权理论与分级授权. 管理世界,2023,39(2):22—39.
Liu TX,Li RF,Rong K. The theory of data rights and the hierarchical authorization based on data generation scenarios. Management World, 2023,39(2):22—39. (in Chinese)
- [2] 江松. 以人工智能技术赋能管理科学高质量发展. 中国科学基金, 2024,38(5):732.

- Jiang S. Empower the high-quality development of management science with artificial intelligence technology. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2024, 38(5):732. (in Chinese)
- [3] Jia JS, Li YW, Lu X, et al. Triadic embeddedness structure in family networks predicts mobile communication response to a sudden natural disaster. *Nature Communications*, 2021, 12:4286.
- [4] Peftitsi S, Jenelius E, Cats O. Determinants of passengers' metro car choice revealed through automated data sources: A Stockholm case study. *Transportmetrica A: Transport Science*, 2020, 16(3):529—549.
- [5] Zhao JJ, Zhang LT, Ye KJ, et al. GLTC: A metro passenger identification method across AFC data and sparse WiFi data. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, 2022, 23(10):18337—18351.
- [6] Ludescher J, Martin M, Boers N, et al. Network-based forecasting of climate phenomena. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2021, 118(47):e1922872118.
- [7] Walters AP, Tierney JE, Zhu J, et al. Climate system asymmetries drive eccentricity pacing of hydroclimate during the early Eocene greenhouse. *Science Advances*, 2023, 9(31):eadg8022.
- [8] An J, Wu XN. Combat system capability analysis method based on information link search. 2021 International Conference on Electronics, Circuits and Information Engineering (ECIE). Zhengzhou, China. IEEE, 2021:350—356.
- [9] Gerber S, Pospisil L, Navandar M, et al. Low-cost scalable discretization, prediction, and feature selection for complex systems. *Science Advances*, 2020, 6(5):eaaw0961.
- [10] Thompson B, van Opheusden B, Sumers T, et al. Complex cognitive algorithms preserved by selective social learning in experimental populations. *Science*, 2022, 376(6588):95—98.
- [11] Rosvall M, Esquivel AV, Lancichinetti A, et al. Memory in network flows and its effects on spreading dynamics and community detection. *Nature Communications*, 2014, 5:4630.
- [12] Benson AR, Abebe R, Schaub MT, et al. Simplicial closure and higher-order link prediction. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2018, 115(48):E11221—E11230.
- [13] Gomez-Cabrero D, Menche J, Cano I, et al. Systems Medicine: From molecular features and models to the clinic in COPD. *Journal of Translational Medicine*, 2014, 12(S2):S4.
- [14] Sizemore AE, Giusti C, Kahn A, et al. Cliques and cavities in the human connectome. *Journal of Computational Neuroscience*, 2018, 44(1):115—145.
- [15] Boccaletti S, Latora V, Moreno Y, et al. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports*, 2006, 424(4/5):175—308.
- [16] Lambiotte R, Rosvall M, Scholtes I. From networks to optimal higher-order models of complex systems. *Nature Physics*, 2019, 15(4):313—320.
- [17] Battiston F, Cencetti G, Iacopini I, et al. Networks beyond pairwise interactions: Structure and dynamics. *Physics Reports*, 2020, 874:1—92.
- [18] Torres L, Blevins AS, Bassett D, et al. The why, how, and when of representations for complex systems. *SIAM Review*, 2021, 63(3):435—485.
- [19] Cinardi N, Rapisarda A, Bianconi G. Quantum statistics in network geometry with fractional flavor. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2019(10):103403.
- [20] Tocino A, Hernández Serrano D, Hernández-Serrano J, et al. A stochastic simplicial SIS model for complex networks. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2023, 120:107161.
- [21] Bodnar C, Frasca F, Wang Y, et al. Weisfeiler and lehman go topological: Message passing simplicial networks. *International Conference on Machine Learning*. Berkeley: PMLR, 2021:1026—1037.
- [22] Battiloro C, Testa L, Giusti L, et al. Generalized simplicial attention neural networks. *IEEE Transactions on Signal and Information Processing Over Networks*, 2024, 10:833—850.
- [23] Yan Y, Kuruoglu EE. Binarized simplicial convolutional neural networks. *Neural Networks*, 2025, 183:106928.
- [24] Bianconi G. *Higher-order Networks*. Cambridge: Cambridge University Press, 2021.
- [25] Baccini F, Geraci F, Bianconi G. Weighted simplicial complexes and their representation power of higher-order network data and topology. *Physical Review E*, 2022, 106(3):034319.
- [26] Bai S, Zhang FH, Torr PHS. Hypergraph convolution and hypergraph attention. *Pattern Recognition*, 2021, 110:107637.
- [27] Chien E, Pan C, Peng J, et al. You are allset: A multiset function framework for hypergraph neural networks. *arXiv preprint*, 2021, arXiv:210613264. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.13264>.
- [28] Wang P, Yang S, Liu Y, et al. Equivariant hypergraph diffusion neural operators. *arXiv preprint arXiv:220706680*, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2207.06680>.
- [29] Liu ZX, Tang BH, Ye ZY, et al. Hypergraph transformer for semi-supervised classification. 2024 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). Seoul, Republic of Korea. IEEE, 2024:7515—7519.
- [30] Heydaribeni N, Zhan XR, Zhang RS, et al. Distributed constrained combinatorial optimization leveraging hypergraph neural networks. *Nature Machine Intelligence*, 2024, 6(6):664—672.
- [31] Holland PW, Leinhardt S. A method for detecting structure in sociometric data. *Social Networks*, 1977, 76(3):411—432.
- [32] Mangan S, Alon U. Structure and function of the feed-forward loop network motif. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2003, 100(21):11980—11985.
- [33] Honey CJ, Kötter R, Breakspear M, et al. Network structure of cerebral cortex shapes functional connectivity on multiple time scales. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2007, 104(24):10240—10245.
- [34] Liu P, Benson AR, Charikar M. Sampling methods for counting temporal motifs. *Proceedings of the Twelfth ACM International Conference on Web Search and Data Mining*. Melbourne VIC Australia. ACM, 2019:294—302.
- [35] Grasso R, Micale G, Ferro A, et al. MODIT: MOTif DIcovery in temporal networks. *Frontiers in Big Data*, 2022, 4:806014.
- [36] Wang L, Ren J, Xu B, et al. MODEL: Motif-based deep feature learning for link prediction. *IEEE Transactions on Computational Social Systems*, 2020, 7(2):503—516.
- [37] Sheng JF, Zhang YF, Wang B, et al. MGATs: Motif-based graph attention networks. *Mathematics*, 2024, 12(2):293.
- [38] Wang GL, Yu J, Nguyen M, et al. Motif-based graph attentional neural network for web service recommendation. *Knowledge-Based Systems*,

- 2023,269:110512.
- [39] Zhong Y, Li GZ, Yang J, et al. Learning motif-based graphs for drug-drug interaction prediction via local-global self-attention. *Nature Machine Intelligence*, 2024, 6(9):1094—1105.
- [40] Scholtes I, Wider N, Pfitzner R, et al. Causality-driven slow-down and speed-up of diffusion in non-Markovian temporal networks. *Nature Communications*, 2014, 5:5024.
- [41] Scholtes I, Wider N, Garas A. Higher-order aggregate networks in the analysis of temporal networks: Path structures and centralities. *The European Physical Journal B*, 2016, 89(3):61.
- [42] Edler D, Bohlin L, Rosvall M. Mapping higher-order network flows in memory and multilayer networks with infomap. *Algorithms*, 2017, 10(4):112.
- [43] Scholtes I. When is a network a network? Multi-order graphical model selection in pathways and temporal networks. *Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. Halifax NS Canada. ACM, 2017:1037—1046.
- [44] Xu J, Wickramarathne TL, Chawla NV. Representing higher-order dependencies in networks. *Science Advances*, 2016, 2(5):e1600028.
- [45] Saebi M, Xu J, Kaplan LM, et al. Efficient modeling of higher-order dependencies in networks: From algorithm to application for anomaly detection. *EPJ Data Science*, 2020, 9(1):15.
- [46] Gote C, Perri V, Zingg C, et al. Locating community smells in software development processes using higher-order network centralities. *Social Network Analysis and Mining*, 2023, 13(1):129.
- [47] Park Y, Lee MJ, Son SW. Motif dynamics in signed directional complex networks. *Journal of the Korean Physical Society*, 2021, 78(6):535—541.
- [48] Sarker A, Northrup N, Jadbabaie A. Generalizing homophily to simplicial complexes. *Complex Networks and Their Applications XI*. Cham: Springer International Publishing, 2023:311—323.
- [49] Iacopini I, Karsai M, Barrat A. The temporal dynamics of group interactions in higher-order social networks. *Nature Communications*, 2024, 15:7391.
- [50] Alvarez-Rodriguez U, Battiston F, de Arruda GF, et al. Evolutionary dynamics of higher-order interactions in social networks. *Nature Human Behaviour*, 2021, 5(5):586—595.
- [51] Wang X, Zhou L, Tian Z, et al. Temporal higher-order interactions facilitate the evolution of cooperation. *arXiv preprint*, 2023, arXiv:230601300. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.01300>.
- [52] Uzzi B, Mukherjee S, Stringer M, et al. Atypical combinations and scientific impact. *Science*, 2013, 342(6157):468—472.
- [53] Rzhetsky A, Foster JG, Foster IT, et al. Choosing experiments to accelerate collective discovery. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2015, 112(47):14569—14574.
- [54] Acemoglu D, Akcigit U, Kerr WR. Innovation network. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2016, 113(41):11483—11488.
- [55] Christianson NH, Sizemore Blevins A, Bassett DS. Architecture and evolution of semantic networks in mathematics texts. *Proceedings Mathematical, Physical, and Engineering Sciences*, 2020, 476(2239):20190741.
- [56] Dworkin JD, Shinohara RT, Bassett DS. The emergent integrated network structure of scientific research. *PLoS One*, 2019, 14(4):e0216146.
- [57] Patania A, Petri G, Vaccarino F. The shape of collaborations. *EPJ Data Science*, 2017, 6(1):18.
- [58] 李佳旭,蔡梦思,谭索怡,等. 基于引文大数据的高阶网络建模及信息增益比较研究. *系统科学与数学*, 2021, 41(10):2763—2775.
- Li JX, Cai MS, Tan SY, et al. A comparison study of higher-order network modeling and information gain based on big citation data. *Journal of Systems Science and Mathematical Sciences*, 2021, 41(10):2763—2775. (in Chinese)
- [59] Gebhart T, Funk RJ. The emergence of higher-order structure in scientific and technological knowledge networks. *Academy of Management Proceedings*, 2023:12212.
- [60] Estrada E, Ross GJ. Centralities in simplicial complexes. Applications to protein interaction networks. *Journal of Theoretical Biology*, 2018, 438:46—60.
- [61] Rossi R, Ahmed N, Koh E. Interactive higher-order network analysis. *2018 IEEE International Conference on Data Mining Workshops (ICDMW)*. Singapore, Singapore. IEEE, 2018:1441—1446.
- [62] Krieg SJ, Robertson DH, Pradhan MP, et al. Higher-order networks of diabetes comorbidities: Disease trajectories that matter. *2020 IEEE International Conference on Healthcare Informatics (ICHI)*. Oldenburg, Germany. IEEE, 2020:1—11.
- [63] Sporns O, Kötter R. Motifs in brain networks. *PLoS Biology*, 2004, 2(11):e369.
- [64] Giusti C, Ghrist R, Bassett DS. Two's company, three (or more) is a simplex. *Journal of Computational Neuroscience*, 2016, 41(1):1—14.
- [65] Peng YF, Bjelde A, Aceituno PV, et al. Directed and acyclic synaptic connectivity in the human layer 2-3 cortical microcircuit. *Science*, 2024, 384(6693):338—343.
- [66] Gu S, Yang MZ, Medaglia JD, et al. Functional hypergraph uncovers novel covariant structures over neurodevelopment. *Human Brain Mapping*, 2017, 38(8):3823—3835.
- [67] Battiston F, Nicosia V, Chavez M, et al. Multilayer motif analysis of brain networks. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 2017, 27(4):047404.
- [68] Abedijaberi A, Leopold J. Motif-level robustness analysis of power grids. *2018 IEEE International Conference on Data Mining Workshops (ICDMW)*. Singapore, Singapore. IEEE, 2018:276—283.
- [69] Andjelkovic M, Maletic SV, Tomanovic I. Identifiers for structural warnings of malfunction in power grid networks. *Thermal Science*, 2022, 26(6 part B):5043—5051.
- [70] Li XP, Jiao WZ, Han Q, et al. Detection of FDIA in power grid based on hypergraph and attention mechanism. *IEEE Transactions on Smart Grid*, 2025, 16(2):1862—1871.
- [71] Luo XY, Peng JH, Liang J. Directed hypergraph attention network for traffic forecasting. *IET Intelligent Transport Systems*, 2022, 16(1):85—98.
- [72] Tao J, Xu J, Wang CL, et al. HoNVis: Visualizing and exploring higher-order networks. *2017 IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis)*. Seoul, Republic of Korea. IEEE, 2017:1—10.
- [73] Saebi M, Xu J, Grey EK, et al. Higher-order patterns of aquatic species spread through the global shipping network. *PLoS One*, 2020, 15(7):e0220353.

- [74] Saebi M, Xu J, Curasi SR, et al. Network analysis of ballast-mediated species transfer reveals important introduction and dispersal patterns in the Arctic. *Scientific Reports*, 2020, 10: 19558.
- [75] Li JX, Lu X. Measuring the significance of higher-order dependency in networks. *New Journal of Physics*, 2024, 26(3): 033032.
- [76] Lyu H, Kureh YH, Vendrow J, et al. Learning low-rank latent mesoscale structures in networks. *Nature Communications*, 2024, 15: 224.
- [77] Zhang YZ, Lucas M, Battiston F. Higher-order interactions shape collective dynamics differently in hypergraphs and simplicial complexes. *Nature Communications*, 2023, 14: 1605.
- [78] Eriksson A, Edler D, Rojas A, et al. How choosing random-walk model and network representation matters for flow-based community detection in hypergraphs. *Communications Physics*, 2021, 4: 133.
- [79] Lin WQ, Xiao XK, Xie X, et al. Network motif discovery: A GPU approach. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2017, 29(3): 513—528.
- [80] Patra S, Mohapatra A. Application of dynamic expansion tree for finding large network motifs in biological networks. *PeerJ*, 2019, 7: e6917.

Modelling Methods, Applications and Perspectives on Higher-order Relationships

Huijun Zheng Shuo Liu Yilong Zhou Mengsi Cai Jiawei Feng Yuqi He Xin Lu*

College of Systems Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China

Abstract In recent years, big data technologies have provided crucial data support for network science, advancing the development of modeling and analytical methods for higher-order relationships in complex systems, thereby offering new avenues for revealing the underlying mechanisms of complex systems and demonstrating significant application potential. Focusing on the relationships between system elements, this paper begins with the fundamental concepts of higher-order relations by introducing the definitions of higher-order interaction relations and higher-order dependency relations, and then provides a comprehensive summary and description of modeling methods based on simplicial complexes, hypergraphs, motifs and higher-order Markov processes. Furthermore, by examining cutting-edge applications across fields such as social science, biology, and engineering physics, the current status of higher-order relation mining in real complex system studies is demonstrated. Finally, the challenges confronting higher-order relationships research are analyzed from the dual perspectives of modeling methodologies and practical applications, and future research directions are subsequently proposed.

Keywords higher-order relationships; higher-order modelling; complex systems; complex networks

吕 欣 国防科技大学系统工程学院首席专家,教授,博士生导师。长期从事大数据、复杂网络、应急管理等领域研究,主持国家自然科学基金项目、国家科技重大专项等项目。在*Nature*、*PNAS*、*Nature Microbiology*、*Nature Communications*、*National Science Review*等期刊上发表研究论文100余篇,获世界移动大奖(GLOMO Award)、国家级教学成果二等奖、教育部科技进步二等奖、军队科技进步二等奖等奖项。

郑慧君 国防科技大学系统工程学院在读博士生。主要研究方向为大数据挖掘、高阶网络。

(责任编辑 贾祖冰 张强)

* Corresponding Author, Email: xin.lu.lab@outlook.com