

基于异构图中多层次图结构的级联图卷积网络*

宋凌云¹, 刘至臻¹, 张 炀², 李战怀¹, 尚学群¹

¹(西北工业大学 计算机学院, 陕西 西安 710129)

²(河南城建学院 计算机与数据科学学院, 河南 平顶山 467041)

通信作者: 宋凌云, E-mail: lysong@nwpu.edu.cn; 尚学群, E-mail: shang@nwpu.edu.cn



摘 要: 异构图是一种具有多种类型节点或边的图, 也称异构信息网络, 其常被用来建模现实世界中具有丰富特征和关联模式的系统. 异构节点间的链接预测是网络分析领域的一个基本任务. 近年来, 异构图神经网络技术的发展极大地促进了链接预测任务的进步, 其通常将此任务当作节点间的特征相似性分析或基于成对节点特征的二分类问题. 然而, 现有的异构图神经网络技术在进行节点特征表示学习时, 往往仅关注相邻节点间的关联或基于元路径的结构信息. 这使得其不仅难以捕捉异构图中固有的环结构所蕴含的语义信息, 也忽视了不同层次的结构信息之间的互补性. 为解决上述问题, 设计一种基于多层次图结构的级联图卷积网络 CGCN-MGS, 其由基于邻居、元路径和环 3 种不同层次图结构的图神经网络组成, 能从多层次特征中挖掘出丰富、互补的信息, 提高所学节点特征对节点语义和结构信息的表征能力. 多个基准数据集上的实验结果表明, CGCN-MGS 在异构图的链接预测任务上能够取得目前最优的性能结果.

关键词: 异构图神经网络; 链接预测; 元路径; 环结构

中图法分类号: TP18

中文引用格式: 宋凌云, 刘至臻, 张炀, 李战怀, 尚学群. 基于异构图中多层次图结构的级联图卷积网络. 软件学报. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7051.htm>

英文引用格式: Song LY, Liu ZZ, Zhang Y, Li ZH, Shang XQ. Cascade Graph Convolution Network Based on Multi-level Graph Structures in Heterogeneous Graph. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7051.htm>

Cascade Graph Convolution Network Based on Multi-level Graph Structures in Heterogeneous Graph

SONG Ling-Yun¹, LIU Zhi-Zhen¹, ZHANG Yang², LI Zhan-Huai¹, SHANG Xue-Qun¹

¹(School of Computer Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China)

²(School of Computer and Data Science, Henan University of Urban Construction, Pingdingshan 467041, China)

Abstract: A heterogeneous graph is a graph with multiple types of nodes and edges, also known as a heterogeneous information network, which is often used to model systems with rich features and association patterns in the real world. Link prediction between heterogeneous nodes is a fundamental task in network analysis. In recent years, the development of heterogeneous graph neural network (HGNN) has greatly advanced the task of link prediction, which is usually regarded as a feature similarity analysis between nodes or a binary classification problem based on paired node features. However, when learning node feature representations, existing HGNNs usually only focus on the associations between adjacent nodes or the meta-path-based structural information. This not only makes these HGNNs difficult to capture the semantic information of the ring structure inherent in heterogeneous graphs but also ignores the complementarity of structural information at different levels. To solve the above issues, this study proposes a cascade graph convolution network based on multi-level graph structures (CGCN-MGS), which is composed of graph neural networks based on three graph structures of different levels: neighboring, meta-path, and ring structures. CGCN-MGS can mine rich and complementary information from multi-level features

* 基金项目: 国家自然科学基金 (62102321); 中央高校基本科研专项基金 (D5000230095); 国家重点研发计划 (2020AAA0108504)

收稿时间: 2022-09-21; 修改时间: 2023-04-03, 2023-08-03; 采用时间: 2023-09-03; jos 在线出版时间: 2024-01-24

and improve the representation ability of the learned node features on the semantics and structure information of nodes. Experimental results on several benchmark datasets show that CGCN-MGS can achieve state-of-the-art performance on the link prediction of heterogeneous graphs.

Key words: heterogeneous graph neural network (HGNN); link prediction; meta-path; ring structure

现实世界中很多数据和系统(如论文引用和推荐系统)都可以表示为异构图(heterogeneous graph),其往往蕴涵丰富的信息,包括和不同类型节点相关的非结构化属性信息,以及不同类型节点之间复杂的结构关系,例如树型和环形结构.异构图中节点间的链接预测是网络分析领域中一个重要的研究方向,吸引了大批研究人员的注意力,他们往往将此链接预测任务转换为节点间特征的相似性分析或基于成对节点特征的二分类问题,故节点的特征表示能否准确表征节点的语义和结构信息对链接预测的结果有重大影响.

近年来,由于图神经网络(graph neural network, GNN)在图的表示学习方面表现突出,故目前最先进的链接预测方法主要是基于GNN构建的,例如GraphSAGE^[1]、GAT^[2]、R-GCN^[3]等.然而,大部分图卷积神经网络都假设输入的是节点和边的类型单一的同构图,这使得它们还难以用于包含多种类型节点和边的异构图.异构图中节点间的边/关系类型呈现出复杂、多样的特点,不仅包含同构图中常用的邻接关系^[4],还包含由节点间多种关系复合而成的高阶关系,如多跳关系路径^[5].这些不同的关系类别往往表征着不同层次的语义信息,例如,邻接关系表征图中邻居节点间的直接交互信息,而高阶关系往往表征图中节点间的间接复合交互信息.在学习节点的嵌入表达时,现有的异构图神经网络^[6,7]大多利用元路径^[8]来捕获图中节点间复杂的高阶关联(KGAT)^[5]结构信息,虽然在性能上取得了不少进步,但还存在以下两个问题.

(1) 它们在学习节点特征表达时忽视了元路径两端节点间的关系.这使得它们学到的节点特征难以有效保留节点间复杂的结构信息,从而导致节点特征难以充分表征节点的语义.例如,图1中 Q 表示问题节点, K 表示知识点节点.图中不同颜色的边表示不同类型的关系,例如蓝色的边表示问题和知识点之间的考查关系,绿色的边代表问题之间的相似关系,橙红色的边代表知识点之间的学习依赖关系.图1中的元路径 $K-Q-K$ 仅能表征“两个知识点(例如 K_1 和 K_2)被同一个问题所考查(例如 Q_2)”,但还难以表征“知识点之间(例如 K_1 和 K_2)的学习依赖关系”,以及“具有学习依赖关系的两个知识点被同一个问题考查”.

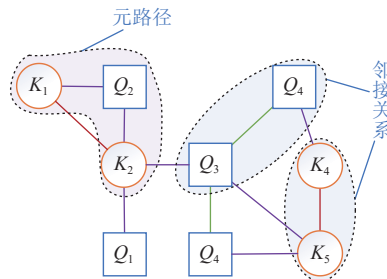


图1 由问题、知识点和多种关系组成的异构图示例

(2) 它们大多仅利用单个关系类型的结构信息来捕捉节点的语义,而忽视了描述不同层次关系的结构信息之间的互补性.这导致现有方法通常仅能从对应的结构信息中提炼出某种特定的语义信息,而难以从不同的语义层次综合地捕捉图中节点的复杂语义.例如,细粒度的语义信息“具有学习依赖关系的两个知识点被同一个问题考查”需要综合考虑知识点 K_1 和 K_2 之间的邻接信息(即学习依赖关系)和元路径 $K_1-Q_2-K_2$ 信息才能得到.

为了解决上述问题,我们提出了一种基于多层次图结构的级联图卷积网络(cascade graph convolution network based on multi-level graph structures, CGCN-MGS),该网络将异构图中邻居节点间的邻接结构、元路径结构和基于元路径的环结构同时纳入到节点的表示学习中,其中基于元路径的环结构是一个由元路径以及元路径两端节点间关系组成的无向循环图(cycle graph)^[9,10].在CGCN-MGS中,我们分别针对上述3种不同的图结构,设计了3个不同的图卷积神经网络来捕捉相应结构的语义信息,并用级联的方式将它们集成到一个网络架构中,以从多层次的

特征信息中挖掘出丰富、互补的信息. 综上所述, 我们的工作主要有如下 3 方面的贡献.

(1) 我们提出了一个面向异构图表示学习的级联图神经网络架构, 其通过 3 个面向不同层次图结构 (即邻接结构、元路径结构和基于元路径的环结构) 的图神经网络之间的级联学习和推理, 不仅有助于在节点表达中保留异构图中节点的多层次结构和语义信息, 而且有利于不同层次节点表达的学习和融合, 从而增强节点表达对节点复杂语义和结构的表征能力.

(2) 我们设计了一个面向环结构的图卷积神经网络, 该网络针对基于元路径构建的环结构, 通过使用一种新的环编码器, 将元路径两端节点间的关联结构引入到了图节点的特征学习中, 并能够根据节点在环中的重要性进行环节点信息聚合, 这有助于捕捉元路径结构难以表征的细粒度语义信息.

(3) 我们在几个基准实验数据集上做了大量实验来评估 CGCN-MGS 在异构图链接预测任务上的有效性. 实验结果表明, CGCN-MGS 在所有实验数据集上的性能结果都超过了竞争的基准方法.

本文第 1 节介绍异构图神经网络的相关方法和研究现状. 第 2 节详细介绍基于多层次图结构的级联图卷积网络 CGCN-MGS. 第 3 节通过实验验证 CGCN-MGS 的有效性. 第 4 节总结全文.

1 相关工作

本工作的目的是利用图神经网络学习异构图中节点的特征表达, 并基于特征表达进行异构节点间的链接预测. 因此, 本节将详细阐述与本工作密切相关的图神经网络和链接预测两方面的研究进展.

1.1 图神经网络

图神经网络 (graph neural network, GNN) 的目的是将神经网络引入图的表示学习框架中, 利用神经网络强大的表示学习能力将图中的节点映射到低维向量空间, 并同时保留图中节点的语义和结构信息, 从而促进节点分类^[4,11,12]和链接预测^[13,14]等下游任务的进步. 图神经网络背后的基本原理认为图中每个节点都是由其自身的特征和邻居节点决定的. 基于此原理, 现已衍生出两类图神经网络: 基于谱的和基于空间的图卷积神经网络^[1].

基于谱的图神经网络往往在图的傅里叶域内进行卷积以学习节点的特征. 例如, Bruna 等人^[15]首次提出将图信号映射到傅里叶域 (即频域) 后, 使用图拉普拉斯矩阵进行图卷积. 但是该方法运算量和参数量都非常大, 且每次卷积都需要图中所有节点的参与. 针对参数量大的问题, Defferrar 等人^[16]利用切比雪夫多项式对卷积核做近似处理, 在图傅里叶域内过滤节点特征, 大大减少了模型的参数量. 为了解决前述模型的训练必须在整图上进行的问题, Kipf 等人^[4]提出了基于图中节点的一阶邻接关系的谱卷积方法. 由于此类图神经网络往往要求输入的图数据是整个图, 并且卷积核参数训练依赖于具体图结构拉普拉斯矩阵, 因此这类方法的可扩展性和泛化能力较差. 基于空间的图卷积网络则是模拟 CNN 对图像数据的卷积操作, 通过直接在图域中聚合节点本身的特征和邻居节点的特征来学习节点的特征表达^[17]. 例如, Hamilton 等人^[1]提出通过局部邻居节点的采样策略来进行邻居节点信息的融合, 这提升了此类图神经网络对训练时期不可见数据的泛化能力. Veličković 等人^[2]在邻居信息的聚合过程中引入了节点级的注意力机制, 其根据邻居节点对目标节点的不同重要性给邻居节点赋予了不同的权重. 虽然它们取得了不错的性能, 但上述工作均假设输入的图数据仅包含一种类型的节点和边, 还无法用于结构复杂的异构图.

为了解决上述问题, 一些学者提出了异构图神经网络. 例如, Schlichtkrull 等人^[3]提出了一个面向异构图的关系图卷积网络, 其通过不同的网络参数分别编码包含不同类型边的图结构信息. Dan 等人^[18]认为不同类型的关联结果对节点特征的影响不同, 因此提出使用注意力机制自适应地聚合不同类型的关联结构信息. Zhang 等人^[19]提出首先利用随机漫游和重启策略来筛选用于图卷积的强相关邻居节点, 然后再通过注意力机制聚合异构邻居的特征信息. Peng 等人^[20]通过强化学习采样邻居节点, 再基于这些邻居实现信息聚合. 然而, 这些方法大多基于邻接关系进行, 没有考虑异构图中节点间的高阶关联结构, 难以完整捕捉图中蕴含的复杂语义信息. 为了解决这个问题, 现有研究通常利用元路径^[8]来抽取异构图中表示特定复合语义的结构信息, 并将其嵌入到节点的特征表达中. 例如, Dong 等人^[21]提出利用基于元路径的随机漫步来构建节点的邻域结构, 并利用此结构进行基于异构语言模型的节点特征学习. Fu 等人^[22]提出了一种基于元路径的异构图表示学习方法 HIN2Vec, 其利用一组特定元路径来捕捉

异构图中节点间多样的复杂关系结构和语义信息. Shi 等人^[23]提出利用元路径将异构图转换为同构图, 再使用 DeepWalk 算法^[24]学习图中节点的特征表达. Wang 等人^[6]提出利用多个元路径将一个异构图转换为同构图, 并使用图注意力机制来聚合和目标节点相关的邻居和元路径信息. 上述方法忽视了元路径中间节点的内容, 这不利于捕捉到元路径所蕴涵的完整复杂语义信息. 为此, Fu 等人^[7]在 HAN^[6]的基础上作了改进, 加入了对元路径的中间节点内容的考虑. 贾霄生等人^[25]提出了一种将互信息和元路径相融合的无监督异构图表示学习方法. Shao 等人^[26]提出了一个基于元路径的多视角学习的异构图神经网络, 通过多种视角下不同网络结构的编码和融合, 提高所学节点特征对异构图复杂结构和语义的表征能力. 虽然现有方法取得了不错的结果, 但它们大多仅使用单一类型的结构信息 (例如元路径^[6,7,21-23]或邻接结构^[3,18-20]), 忽视了异构图中不同层次结构所蕴含语义信息的互补性. 此外, 现有方法还忽视了异构图中本就存在的基于元路径的环结构. 相比之下, 我们的方法 CGCN-MGS 通过网络级联架构同时将 3 种不同层次的图结构信息, 即邻接结构, 元路径结构和基于元路径的环结构, 纳入到图节点的表示学习中. 在 CGCN-MGS 中, 不同层次结构的语义信息可以互相补充和融合, 有利于提高所学节点特征对异构图中复杂结构和语义的表征能力. 和现有图网络级联架构^[27]简单地将某个低层次图的信息粗化为一个指引节点不同, CGCN-MGS 将针对不同层次结构信息的图卷积网络级联, 将前面图卷积网络输出的节点特征送入其后的图卷积网络, 有助于利用不同层次结构提取的语义信息来丰富图节点最终的特征表达.

1.2 链接预测

现有的传统链接预测方法可分为无监督和有监督两类^[28]. 无监督的链接预测方法通常根据网络拓扑结构的特征计算潜在边的得分, 它可以进一步细分为基于相似性的方法和基于概率的方法. 基于相似性的方法是根据每一对节点间的相似性得分来判断它们之间是否有链接. 相似性得分的计算方法主要有公共邻居节点^[29]、Jaccard 系数^[30]和优先连接^[31]等. 基于概率的方法^[32,33]是根据给定的网络优化目标函数, 构建由多个参数组成的概率模型, 再根据条件概率评估节点间存在链接的可能性.

有监督的链接预测方法通常利用节点间链接的监督信息, 学习一个能将图结构信息嵌入图节点特征的图神经网络, 其链接预测结果取决于所学节点特征能否充分表征图中丰富的结构信息. Tang 等人^[34]通过将节点间的一阶和二阶邻居信息嵌入节点的特征来提高大规模网络中节点间链接预测的准确性. Fu 等人^[35]通过将图中节点间的分层局部和全局拓扑结构信息嵌入节点的特征表达来增强链接预测的性能. Zhao 等人^[36]提出了一种基于元路径图映射的节点特征学习方法, 其通过向节点特征中同时嵌入由多种不同元路径映射得到的图结构信息, 提高了节点特征对图结构信息的表征能力, 从而改善了节点间链接预测的结果. 上述方法大多忽视了图中不同层次结构所蕴含语义信息之间的互补性, 这使得它们学到的节点特征难以充分保留异构图节点间复杂的网络结构信息, 抑制了节点间链接预测的准确性. 相比之下, 本文所提的 CGCN-MGS 通过多层网络级联架构, 可以有效将邻接、元路径和基于元路径的环 3 种不同的结构信息嵌入到节点的特征表达中, 这提高了节点表达对图结构信息的表征能力, 从而有助于提高链接预测的性能.

2 基于多层次图结构的级联图卷积网络 CGCN-MGS

2.1 符号和术语

给定一个包含多种类型节点和关系的异构图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathcal{T}_v, \mathcal{T}_e, \mathcal{W})$, 其中 \mathcal{V} 表示节点的集合, \mathcal{E} 表示边的集合, \mathcal{W} 表示每条边的权重, $\mathcal{T}_v, \mathcal{T}_e$ 分别表示节点类型和边类型的集合. 当 $|\mathcal{T}_v| + |\mathcal{T}_e| > 2$ 时, \mathcal{G} 为异构图. 图 \mathcal{G} 中所有节点的特征矩阵记为 $H = \{H_t, t \in \mathcal{T}_v\}$, 其中 $H_t = [\mathbf{h}_{t_1}, \mathbf{h}_{t_2}, \dots, \mathbf{h}_{t_{|V_t|}}] \in \mathbb{R}^{|V_t| \times d_t}$ 表示 t 类型的节点特征矩阵, $|V_t|$ 和 d_t 分别表示 t 类型节点的数目和特征维度. 我们的任务是学习异构图中不同类型节点 u 和 v 组成的节点对到实数 $p \in [0, 1]$ 的映射函数, 即 $f: (u, v) \rightarrow p$, 其中 p 值的大小代表 u 和 v 间存在链接的可能性.

2.2 模型描述

本节将详细介绍本文提出的基于多层次图结构的级联图卷积神经网络, 即 CGCN-MGS, 该网络同时将邻接结构、元路径结构和基于元路径的环结构纳入到了图卷积过程中. CGCN-MGS 是一个由 3 个模块组成的级联网络:

1) 基于异构邻接结构的图卷积, 该模块通过对目标节点周围各种不同类型的邻居节点分别进行特征信息聚合, 来捕捉目标节点周围多样的邻接语义. 2) 基于元路径结构的图卷积, 该模块通过在由不同元路径结构组成的子图上进行图卷积, 来捕捉节点间的复合关系所蕴涵的丰富语义. 3) 基于元路径的环结构的图卷积, 该模块首先利用多种不同元路径的环结构从异构图中抽取子图, 然后在这些子图上分别进行图卷积, 来捕捉这些环结构所蕴涵的复杂语义.

本文中, 我们用上标 (1)、(2)、(3) 来区分不同子网络 I、II、III 中的变量, 用下标来区分子网络中输入的不同异构图或图中的不同节点. 以 $h_{1,v}^{(1)}$ 为例, 它表示子网络 I 中, 节点 v 在编号为 1 的子图 $\mathcal{G}_1^{(1)}$ 中的特征表达.

具体地, 给定一个包含 $|\mathcal{V}|$ 个节点的异构图 \mathcal{G} , CGCN-MGS 首先通过模块 I, 分别对由各种不同类型邻居节点构成的不同邻接结构子图进行图卷积, 然后将节点 v 基于各个子图学到的特征信息聚合在一起, 得到节点 v 基于邻接结构信息的特征表达 $h_v^{(1)}$. 然后, 将异构图 \mathcal{G} 和模块 I 学到的节点特征送入模块 II, 进行基于特定元路径结构的节点特征学习. 模块 II 首先利用不同的元路径, 从 \mathcal{G} 中抽取包含不同元路径结构的子图, 然后对这些子图分别进行图卷积, 将各个元路径特有的结构和语义信息嵌入到节点 v 的特征表达中, 所得节点特征记为 $h_v^{(2)}$. 最后, 将各节点的特征 $h_v^{(2)}$ 送入模块 III, 作为图 \mathcal{G} 中各节点在模块 III 中的初始特征表达. 在模块 III 中, 我们首先用基于元路径的环结构从 \mathcal{G} 中抽取不同的子图. 然后, 在这些环结构子图上分别进行图卷积, 将异构图中的环结构信息嵌入到节点的特征表达中, 得到的节点特征记为 $h_v^{(3)}$.

2.3 模块 I: 基于异构邻接结构的图卷积

如图 2 所示 (图中不同类型的节点用不同的形状区分, 节点间不同类型的边用不同的颜色区分), 对于异构图 \mathcal{G} 中的电影节点 v (阴影节点), 其周围有不同类型的邻居节点, 它们往往蕴涵不同方面的语义信息, 从不同的关系角度 (例如执导和参演) 描述 v 的属性. 然而, 主流基于空间的图卷积方法在学习节点 v 的特征表达时, 大多忽视了不同类型邻居节点语义的差异性, 直接将所有类型的邻居节点混在一起进行信息聚合, 这不利于从不同类别的邻居节点中准确地提取出特定的语义信息, 且忽视了不同类型邻居对 v 的不同影响.

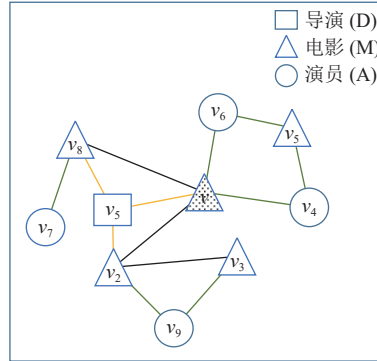


图 2 异构图示例

为了解决上述问题, 如图 3 所示, CGCN-MGS 首先执行基于异构邻接结构的图卷积, 其先从 v 的不同类型邻居节点子图中提取出特定的语义信息, 再将来自不同类型邻居的语义信息自适应地聚合起来, 从而实现 v 的特征表达学习.

具体地, 给定一个异构图 \mathcal{G} , 本模块在学习目标节点 v 的特征表达时, 首先从 \mathcal{G} 中获取目标节点 v 的一跳邻居集合 $N(v) = \{v_2, v_5, v_8, v_6, v_4\}$, 并按照 $N(v)$ 中节点的类别分别从图 \mathcal{G} 中抽取 n 个一跳邻居子图 (例如 $\mathcal{G}_1^{(1)}$), 每个子图仅包含 v 的一种邻居节点. 然后, 在各个抽取出的子图上分别使用图卷积算法 GCN^[4], 将 v 的邻居节点的信息聚合至 v , 得到特征表达 $h_{i,v}^{(1)}$ ($1 \leq i \leq n$). 最后, 本模块利用公式 (2) 将各个子图卷积学到的节点特征 $h_{i,v}^{(1)}$ 融合成一个向量, 得到节点 v 的特征表达 $h_v^{(1)}$.

$$\mathbf{h}_v^{(1)} = \sum_{i=1}^n \alpha_{i,v}^{(1)} \mathbf{h}_{i,v}^{(1)} \quad (1)$$

其中, 权值 $\alpha_{i,v}^{(1)}$ 表示不同类别邻居子图语义信息的权重, 其计算过程可形式化为:

$$\alpha_{i,v}^{(1)} = \frac{\exp\{\sigma(u^T [\mathbf{h}_{i,v}^{(1)} \oplus \mathbf{h}_v^{(0)}])\}}{\sum_{i=1}^n \exp\{\sigma(u^T [\mathbf{h}_{i,v}^{(1)} \oplus \mathbf{h}_v^{(0)}])\}} \quad (2)$$

其中, $\mathbf{h}_v^{(0)}$ 表示节点 v 在送入模块 I 之前的初始特征表达. $u \in \mathbb{R}^{2d \times 1}$ 是可学习的参数向量, 和 $\sigma(\cdot)$ 表示 Leaky ReLU 函数^[37]. 对图 \mathcal{G} 中所有 $|\mathcal{V}|$ 个节点进行如上运算, 可获得图 \mathcal{G} 的特征矩阵, 记为 $\mathbf{Z}^{(1)} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times d}$.

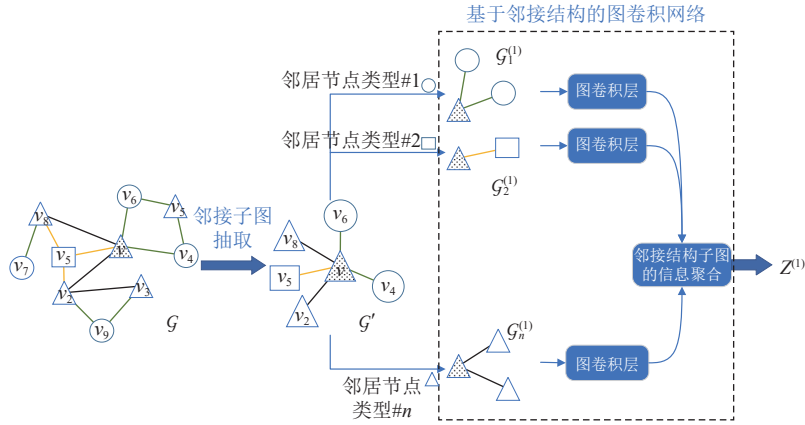


图3 基于异构邻接结构的图卷积框架示例 (为了便于展示, 仅以 v 为目标节点)

2.4 模块 II: 基于元路径结构的图卷积

模块 I 在学习图中节点的嵌入表达时, 提取了异构图中基本的邻接结构信息. 然而, 在异构图中, 节点间除直接的邻接关系外, 还存在更为复杂的高阶关系, 即元路径. 这些元路径往往是由节点间的邻接关系复合而成, 蕴涵着相比邻接关系更为丰富的语义信息, 例如 D-M-A-M-D 表示一个演员 (Actor) 参与了两个导演 (Director) 执导的两部电影 (Movie). 因此, 需基于邻接结构信息, 进一步捕捉元路径结构信息.

为了解决上述问题, 我们设计了一个基于元路径结构的图卷积模块, 该模块的框架如图 4 所示, 其输入是图 \mathcal{G} 以及学到的节点特征矩阵 $\mathbf{Z}^{(1)}$. 如图 4 所示, 此模块包括如下两个部件.

1) 基于元路径的子图构建. 以节点 v 的特征学习为例, 我们先用以节点 v 为端点的 n 条元路径, 从图 \mathcal{G} 中抽取子图 \mathcal{G}' . 然后, 利用不同的元路径结构 (例如, M-A-M), 将 \mathcal{G}' 再次分割成 n 个子图 $\mathcal{G}_i^{(2)}, i \in [1, n]$, 每个子图仅包含一种元路径结构, 蕴涵不同的特定语义信息.

2) 元路径引导的图卷积网络. 元路径结构往往承载了丰富的语义信息, 其是否能被嵌入到节点的特征表达中, 对节点的分类和节点间的链接预测任务至关重要. 然而, 基于元路径的图卷积方法大多只考虑了元路径两端节点的信息^[6], 而忽视了元路径中间节点的信息, 造成局部图结构和语义的信息缺失, 从而降低了所学节点特征的语义和结构表征能力. 因此, 在学习节点 v 的特征表达时, 有必要将 v 基于元路径的邻居节点 (即元路径上除了 v 以外的其他节点) 的信息都纳入到 v 的特征表达中.

为此, 我们设计了一种元路径引导的图卷积方法, 其按照元路径上其他节点与 v 距离的远近, 通过多个步骤分层地聚合元路径上 v 的邻居信息. 具体地, 如图 4 所示, 当给定第 n 条元路径 M-A-M 时, 可以确定对应的子图 $\mathcal{G}_n^{(2)}$, 为了便于展示, 仅以 v 为目标节点, 以元路径 A-M-M (元路径#1) 和 M-A-M (元路径# n) 为示例元路径. 以图 4 中元路径实例 ($v-v_6-v_5$) 为例, 将 v 的二阶邻居 v_5 (节点类型为 M) 的特征聚合至其对应的一阶邻居 v_6 (节点类型为

A), 得到 v_6 的临时特征. 在图 $\mathcal{G}_n^{(2)}$ 中, 由于 v 的二阶邻居 v_5 通过不同的路径分别与它的两个一阶邻居 (即 v_4 和 v_6) 链接, 因此 v_5 的信息应该同时沿着两条不同的路径聚合到不同的一阶邻居节点 v_4 和 v_6 . 也就是说, 当某个二阶邻居节点在多条同类元路径中时, 它的信息需要经过多次聚合, 分别传递至其对应的所有一阶邻居.

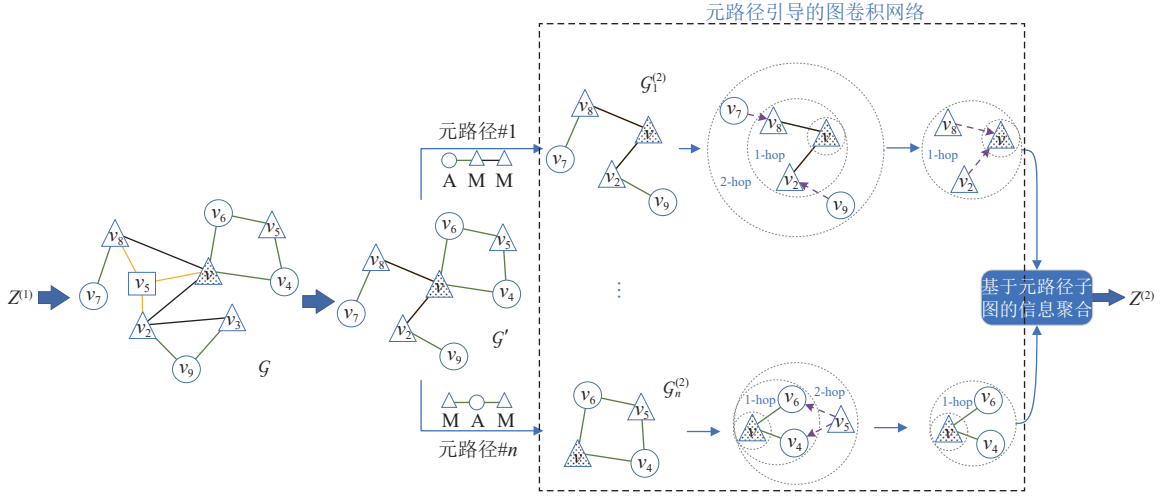


图 4 基于元路径结构的图卷积框架

之后, 将元路径上 v 的所有一阶邻居的临时特征信息聚合至节点 v , 作为节点 v 在 $\mathcal{G}_n^{(2)}$ 中的特征表达. 通过这种方式将第 n 条元路径 (M-A-M) 的语义信息嵌入到了节点 v 的特征表达 $\mathbf{h}_{n,v}^{(2)}$ 中. 同理, 我们可以得到节点 v 分别在 i 个子图中的表示 $\mathbf{h}_{i,v}^{(2)}, i \in [1, n]$. 最后, 通过注意力机制聚合这些节点特征表达, 得到节点 v 在模块 II 的输出, 也即 v 的特征表达 $\mathbf{h}_v^{(2)}$, 其计算过程可表示为:

$$\mathbf{h}_v^{(2)} = \sum_{i=1}^n \alpha_{i,v}^{(2)} \mathbf{h}_{i,v}^{(2)} \quad (3)$$

$$\alpha_{i,v}^{(2)} = \frac{\exp\{\sigma(u^T[\mathbf{h}_{i,v}^{(2)} \oplus \mathbf{h}_v^{(1)}])\}}{\sum_{i=1}^n \exp\{\sigma(u^T[\mathbf{h}_{i,v}^{(2)} \oplus \mathbf{h}_v^{(1)}])\}} \quad (4)$$

其中, $\mathbf{h}_{i,v}^{(2)}$ 表示节点 v 基于第 i 个元路径的图卷积得到的特征表达, $\alpha_{i,v}^{(2)}$ 表示 $\mathbf{h}_{i,v}^{(2)}$ 的权重. 对图 \mathcal{G} 中的所有节点进行如上运算, 可获得图 \mathcal{G} 中所有节点经过模块 II 学到的特征表达, 记为 $\mathbf{Z}^{(2)} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times d}$.

为了提高运算效率, 我们不在各个节点的元路径子图上分别进行图卷积, 而是在图 \mathcal{G} 上同时通过不同的元路径, 更新元路径上节点的特征表达. 具体地, 以图 5 所示的元路径最右端节点的特征更新为例, 我们首先依据元路径中多种不同的边类型 (节点间的边可以根据其两端节点类型的不同划分为不同的边类型) ①和②, 抽取对应的子图 \mathcal{G}_1 和子图 \mathcal{G}_2 . 之后, 先基于 \mathcal{G}_1 中进行图卷积, 保持①中圆形类型节点的特征不变, 仅更新三角类型节点的特征, 并将其用于 \mathcal{G}_2 中对应节点的特征更新. 最后, 通过基于 \mathcal{G}_2 的图卷积, 学习②中最右端三角类型节点的特征.



图 5 元路径的聚合示例

2.5 模块 III: 基于元路径的环结构的图卷积

虽然模块 II 能够利用元路径捕捉高阶关系结构所蕴含特定语义, 但它忽视了元路径两端节点间本就可能存在的关系结构, 故导致其无法捕捉更细粒度的语义信息. 例如, 元路径 M-A-M 能传达“一个演员出演了两部电影”的语义信息, 但还无法表达“一个演员出演了两部风格相似的电影”或“一个演员同年度出演了两部电影”这样更丰

富的语义信息,此时两端电影类型的节点间的关系分别为“风格相似”和“拍摄年份相同”。

为此,考虑到元路径两端节点间的关系,我们提出了一种基于元路径的环结构的图卷积,其中基于元路径的环结构由模块 II 所用元路径以及元路径两端节点间的关系组成的无向循环图 (cycle graph)^[9,10]。如图 6 所示,模块 III 主要包括以下两个部件。

(1) 元路径引导的环结构子图构建。以节点 v 为例,利用模块 II 中所用元路径的端节点在图 \mathcal{G} 中的关系,从图 \mathcal{G} 中抽取出的环结构子图 \mathcal{G}' 。然后,利用不同的环结构,将 \mathcal{G}' 再次分割成 n 个子图 $\mathcal{G}_i^{(3)}, i \in [1, n]$, 每个子图仅包含一种类型元路径引导的环结构,蕴涵特定的细粒度语义信息。

(2) 环结构子图的卷积网络。针对环结构子图 \mathcal{G}' 中第 i 种环结构 $\mathcal{G}_i^{(3)}$, 环结构子图的卷积过程包括以下两个步骤。

(i) 基于环编码器的环特征学习。为了编码环结构所蕴含的语义信息,我们设置了一种基于节点重要性的环编码器。由于环是一个循环结构,没有明确的节点顺序,故我们采用加权平均的方式聚合环结构中节点的信息。由于图中节点的重要性往往与它的度正相关^[38],因此,我们依据节点在异构图中的度来计算其重要性。具体地,环编码器计算第 i 个环结构特征 $\mathbf{r}_i^{(3)}$ 的过程,可以形式化为:

$$\mathbf{r}_i^{(3)} = \text{Sigmoid} \left(\mathbf{b} + \frac{1}{c} \sum_{j \in R(i)} \mathbf{W} \mathbf{h}_j^{(2)} \right) \quad (5)$$

$$c = \sum_{j \in R(i)} \text{degree}(j) \quad (6)$$

其中, $\mathbf{r}_i^{(3)}$ 表示编号为 i 的环的特征向量, \mathbf{W} 表示参数矩阵, \mathbf{b} 表示偏置, 函数 $\text{degree}(i)$ 表示获取编号为 i 的节点的度, $R(i)$ 为编号为 i 的环内所有节点的集合。

(ii) 环卷积,目的是将环特征信息聚合到节点特征。具体地,首先针对图 \mathcal{G} 中的每个节点 v , 将其所在的每个环都分别抽象为一个环节点 v_r , 并将 v_r 与 v 相连,从而得到一个新的环节点图 \mathcal{G}_r 。然后,为了将环结构信息嵌入节点的特征表达中,我们通过 \mathcal{G}_r 中环节点特征的聚合,来实现节点 v 特征表达的更新,环特征聚合过程描述如下,如图 7 所示。

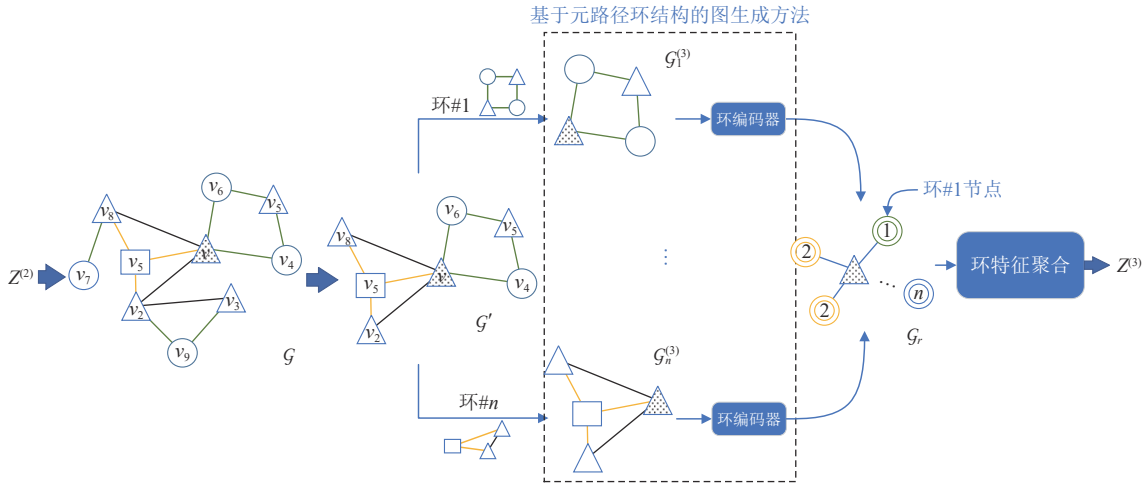


图 6 基于元路径的环结构的图卷积框架

图 7 中,针对 \mathcal{G}_r 中不同类型的环节点,我们在不同的支路中分别聚合不同类型的环节点特征。具体地,在每个支路中,我们通过 GCN 聚合同类环节点的特征信息至节点 v 。之后,通过注意力机制,将不同支路中节点 v 的特征进行聚合,得到 v 在模块 III 的特征表达 $\mathbf{h}_v^{(3)}$ 。假设节点 v 可能存在于 n 类环中,则环特征聚合过程可形式化为:

$$\mathbf{h}_v^{(3)} = \sum_{i=1}^n \alpha_{i,v}^{(3)} \mathbf{h}_{i,v}^{(3)} \quad (7)$$

$$\alpha_{i,v}^{(3)} = \frac{\exp\{\sigma(u^T [h_{i,v}^{(3)} \oplus h_v^{(2)}])\}}{\sum_{i=1}^n \exp\{\sigma(u^T [h_{i,v}^{(3)} \oplus h_v^{(2)}])\}} \quad (8)$$

其中, $h_{i,v}^{(3)}$ 表示第 i 个支路中 GCN 输出的节点 v 的特征表达, $\alpha_{i,v}^{(3)}$ 表示 $h_{i,v}^{(3)}$ 的权重, $h_v^{(2)}$ 表示模块 II 输出的节点 v 的特征表达. 图 \mathcal{G} 中的所有节点经由模块 III 学到的特征表达记为 $Z^{(3)} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times d}$.

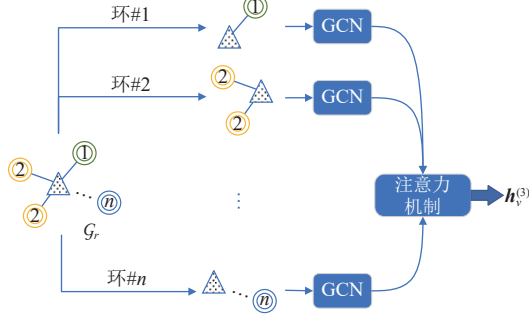


图 7 环特征聚合框架

综上, 通过级联网络结构, CGCN-MGS 首先模块 I 将节点间的邻接结构信息嵌入到节点的特征表达, 得到图 \mathcal{G} 的特征矩阵 $Z^{(1)}$. 然后, 将 $Z^{(1)}$ 输入模块 II, 将表达特定语义的元路径结构信息嵌入到节点的特征表达, 得到特征矩阵 $Z^{(2)}$; 最后, 在 $Z^{(2)}$ 的基础上, 利用模块 III 将基于元路径的环结构的信息嵌入节点的特征表达, 得到特征矩阵 $Z^{(3)}$, 其将用于图中节点间的链接预测. 链接预测的细节描述参见第 3.2 节.

2.6 复杂度分析

为了清楚地展示 CGCN-MGS 模型的复杂度, 我们分别估计了模块 I (基于异构邻接结构的图卷积)、模块 II (基于元路径结构的图卷积)、模块 III (基于元路径的环结构的图卷积) 这 4 部分的计算复杂度.

假设在异构信息网络 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathcal{T}_v, \mathcal{T}_e, \mathcal{W})$ 中, 节点的初始特征长度为 $d, t \in \mathcal{T}_v$. 假设图 \mathcal{G} 中存在 n_p 类元路径和 m_p 个元路径实例、 n_r 类环和 m_r 个环实例. 为了清晰地说明模型的复杂度, 我们假设每个元路径实例的长度为 l_m , 每个环实例中的节点个数为 l_r .

在模块 I 中, 我们首先使用 GCN^[4] 聚合相同类别的邻居信息, 然后使用注意力机制聚合不同类别邻居的信息. 具体地, 在 CGCN-MGS 使用 GCN 聚合同类型邻居节点信息时, 计算复杂度为 $O\left(\sum_{t \in \mathcal{T}_e} |\mathcal{E}_t| \times d_t \times d\right)$. 在 CGCN-MGS 基于注意力机制聚合不同类别邻居的信息时, 由于计算注意力向量 $u \in \mathbb{R}^{2d \times 1}$ 所需的复杂度为 $O(2d)$, 故当图中共有 $|\mathcal{T}_v|$ 类节点时, 计算复杂度为 $O(|\mathcal{T}_v| \times 2d)$. 综上, 模块 I 的计算复杂度为 $O\left(\sum_{t \in \mathcal{T}_e} |\mathcal{E}_t| \times d_t \times d\right) + O(|\mathcal{T}_v| \times 2d)$.

在模块 II 中, 我们首先提取元路径内部的信息并聚合同类元路径的信息, 之后使用注意力机制聚合不同类别元路径的信息. 在聚合一类元路径的内部信息时, 要利用 GCN 进行 $(l_m - 1)$ 次图卷积计算. 因为图中共有 n_p 类元路径, 所以需要计算 $n_p \times (l_m - 1)$ 次图卷积. 由于此模块中节点的输入和输出特征维度均为 d , 故其卷积部分的计算复杂度为 $O\left((n_p \times (l_m - 1)) \times \left(\sum_{t \in \mathcal{T}_e} |\mathcal{E}_t| \times d^2\right)\right)$. 注意力聚合部分的复杂度计算方法与模块 I 类似, 因此模块 II 的计算复杂度为 $O\left((n_p \times (l_m - 1)) \times \left(\sum_{t \in \mathcal{T}_e} |\mathcal{E}_t| \times d^2\right)\right) + O(n_p \times 2d)$.

模块 III 中的复杂度计算共有 5 个步骤: ① 遍历全图, 找出所有的环. 在寻找环时, 需要遍历环中每条边类型对应的所有边. 为了便于理解, 我们假设图中每类边的个数均为 $\frac{|\mathcal{E}|}{|\mathcal{T}_e|}$, 因此这部分的计算复杂度为 $O\left(l_r \times \frac{|\mathcal{E}|}{|\mathcal{T}_e|}\right)$.

② 将环抽象为环节点, 生成具备环节点和原图节点的环节点图. 环节点图中包含 m_r 个环节点和 $m_r \times l_r$ 个原图节点, 因此计算复杂度为 $O(m_r + m_r \times l_r)$. ③ 基于环编码器的环特征学习. 此步骤包括节点度的计算和环节点特征计算. 为计算节点的度, 我们遍历所有的边, 即 (源节点, 目标节点), 在遍历时计数对应源节点和目标节点的度, 因此节点度的计算复杂度为 $O(|\mathcal{E}|)$. 然后, 我们根据节点的度和特征表达计算环节点的特征, 此时需要遍历每个环中的各个节点, 因此特征计算的复杂度为 $O(l_r \times m_r)$, 故此步骤的计算复杂度为 $O(|\mathcal{E}|) + O(l_r \times m_r)$. ④ 使用环卷积将环特征信息聚合到节点特征, 此步骤包括多个不同类型环节点的信息聚合和基于注意力的图节点特征聚合. 其中, m_r 个环节点信息通过 GCN 聚合的复杂度为 $O(m_r \times l_r \times d^2)$; 基于注意力的 n_r 种节点特征聚合的复杂度计算与模块 I 类似, 为 $O(n_r \times |\mathcal{T}_{\mathcal{V}}| \times 2d)$. 因此, 模块 III 的计算复杂度为 $O\left(l_r \times \frac{|\mathcal{E}|}{|\mathcal{T}_{\mathcal{E}}|}\right) + O(m_r + m_r \times l_r) + O(|\mathcal{E}|) + O(l_r \times m_r) + O(m_r \times l_r \times d^2) + O(n_r \times |\mathcal{T}_{\mathcal{V}}| \times 2d)$.

3 实验

在本节中, 我们首先在几个基准数据集上对比了 CGCN-MGS 和其他图表示学习方法在链接预测任务上的性能结果, 然后通过消融性分析评估了 CGCN-MGS 的几个核心模块的有效性.

3.1 数据集

为了评估 CGCN-MGS 的性能, 我们使用了 3 个不同的数据集, 其中包括课程领域的自建数据集: 跨模态数学测试数据集 (cross-media math test data, CMTD)、公开数据集: IMDB^[39] 和 LastFM^[40], 它们的详细介绍如下.

(1) CMTD: 该数据集内的题目和知识点信息均来自蚂蚁学习网络平台 (<http://k12.mayi173.com>), 该平台将国内课程领域常见的考试题目按照学科和知识点分类. 我们从该平台上收集了小学数学课程中的 5852 道考试题目, 以及这些题目所考查的 151 个知识点信息. 在本数据集中, 每个题目都同时包含一条问题文本和一个图像集合, 并且每个题目可能同时考查多个知识点. 一个来自小学数学课程的跨模态问题如图 8 所示. 它考查的知识点包括“圆柱的定义”和“圆形的周长”.

例题: 如图, 绕轴旋转一周, 求得到的几何体的体积为()?

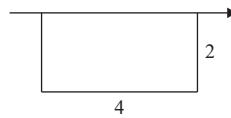


图 8 跨模态问题示例

利用 CMTD 中存在的多种不同类型的数据对象和关联, 我们可以构建出实验所用的异构图 \mathcal{G} , 图中包含题目节点 v_q , 知识点节点 v_k , 以及节点间不同类型的边. 例如, 题目节点之间的边 e_{qq} 、题目和知识点节点之间的边 e_{qk} , 以及知识点节点之间的边 e_{kk} . 边 e_{qk} 基于数据集中已有的题目和知识点间考查关系构建, 边 e_{qq} 通过跨模态题目 q_1 和 q_2 间的相似度构建, 边 e_{kk} 通过知识点 k_1 和 k_2 间的相似度构建. 具体地, 对于边 e_{qq} 的构建, 当且仅当两个跨模态题目中的问题描述之间的相似度和图像之间的相似度都大于阈值时, 认为题目节点 q_1 和 q_2 之间有边. 对于边 e_{kk} 的构建, 当且仅当知识点特征向量之间的相似度大于阈值时, 认为知识点 k_1 和 k_2 之间有边. 利用上述方法, 可构建出包含两种类型节点, 3 种类型边的异构图, 其具体统计信息如表 1 所示.

表 1 CMTD 异构图的统计信息

成分	类型	数量
节点	跨模态问题	5852
	知识点	151
边	问题-问题	26960
	知识点-知识点	236
	问题-知识点	5852

(2) IMDB^[39]: 该数据集由国外视频网站 IMDB (<https://www.imdb.com>) 提供, 其中包含 4875 部电影, 每部电影对应 1 个导演和 3 个主演. 利用 IMDB 中的多种类型的数据对象和关联, 我们可以得到一个包含 3 种类型节点和两种类型边的异构图. 另外, 为了使 IMDB 异构图适用于 CGCN-MGS, 我们依据电影的类型和上映年份是否相同, 为电影节点之间添加了边. 通过上述处理后构建出的异构图详细信息如表 2 所示.

(3) LastFM^[40]: 该数据集中的数据收集自一个音乐在线网站 Last.fm (<https://www.last.fm>). 它包含用户, 艺术家和标签 3 种类型的节点, 其中用户与用户之间存在好友关系, 每位用户关注喜欢的艺术家, 并给他们打标签. 利用这些关联, 可以构建出一个包含 3 类节点和 3 类边的异构图, 其数据统计信息如表 3 所示.

表 2 IMDB 异构图的统计信息

成分	类型	数量
节点	电影	4875
	导演	2385
	演员	6106
边	电影-导演	4875
	电影-演员	14625
	电影-电影	46537

表 3 LastFM 异构图的统计信息

成分	类型	数量
节点	用户	1892
	艺术家	17632
	标签	11496
边	用户-用户	25434
	艺术家-用户	92834
	艺术家-标签	186479

3.2 实现细节

我们的方法基于深度学习工具库 PyTorch-dgl^[41]实现, 所有的实验均在 GPU 服务器上进行, 该服务器有 4 个型号为 Intel 6254 的 CPU 以及 4 个型号为 RTX 2080Ti 的 GPU. 我们按照 70%, 10%, 20% 的比例, 将实验数据集中需要预测的边划分为训练集、验证集和测试集. 在训练和测试阶段, 将通过 CGCN-MGS 学得节点特征表示用于节点间的链接预测. 使用 Adam (adaptive moment estimation) 对模型求解, 学习率设置为 0.01, β_1 , β_2 , ε 这 3 个参数设置为默认值, 分别为 0.9, 0.999 和 $1E-8$. 异构图中两个节点之间存在边的概率记为 $y_{u,v}$, 其计算过程可表示为:

$$y_{u,v} = \phi(\mathbf{h}_u^T \cdot \mathbf{h}_v) \quad (9)$$

其中, $\mathbf{h}_u = \mathbf{h}_u^{(3)}$ 和 $\mathbf{h}_v = \mathbf{h}_v^{(3)}$ 分别表示节点 u 和 v 的特征向量, 符号 \cdot 表示两个向量之间的点积运算, 和 $\phi(\cdot)$ 表示激活函数 *Sigmoid*. 在本实验中, 我们基于间隔损失函数设计了用于链接预测任务的目标函数, 其可形式化为:

$$\mathcal{L} = \sum_{v_i \sim P_n(v), i=1, \dots, k} \max(0, 1 - y_{u,v} + y_{u,v_i}) \quad (10)$$

其中, $P_n(v)$ 表示一个任意的噪声分布, $v_i \sim P_n(v)$ 表示遵循 $P_n(v)$ 分布的第 i 个负采样节点 v_i , k 表示对节点 v 负采样^[42] 的次数, y_{u,v_i} 表示节点 u 和负采样节点 v_i 间存在边的概率.

为了保证对比的公平, 所有的对比方法都采用了相同的负采样策略, 正负样本的比例均为 1:5. CMTD、IMDB、LastFM 这 3 个数据集中, 预测边的类型和使用的元路径、环如后文表 4 所示.

3.3 评价方法与基准模型

3.3.1 评价指标

我们使用链接预测中常用的评价指标 *AUC* 和 *Precision*^[43] 来评估模型的性能, 它们的详细信息如下所示:

(1) *AUC*: 其原理是比较图中存在的边 e 与负采样边 e' 的得分 (即 y_e 和 $y_{e'}$), 如果 e 的得分高于 e' 的得分, 则说明模型效果好. 具体地, 如公式 (11) 所示, 先分别计算出 e 和 e' 的得分, 之后以得分为依据计算 *AUC* 的值. *AUC* 越高, 说明该模型在链接预测任务上的效果越好.

$$AUC = \frac{n' + \frac{1}{2}n''}{n} \quad (11)$$

其中, n 表示 y_e 和 $y_{e'}$ 总共的比较次数, n' 表示满足 $y_e > y_{e'}$ 的边的个数, n'' 表示满足 $y_e = y_{e'}$ 的边的个数.

(2) $\text{Precision}@L$: 根据节点对之间存在边的概率得分, 对图中真实存在的边 e 和负采样边 e' 按降序排序, 保留前 L 个, 若其中真实边 e 的个数为 l , 则 $\text{Precision}@L$ (简记为 $P@L$) 的计算可表示为:

$$P@L = \frac{l}{L} \quad (12)$$

表4 CMTD、IMDB、LastFM 的预测边、元路径、环

数据集	预测边类型	元路径	环	解释
CMTD	Q-K	Q-K-Q K-Q-K	Q-K-Q K-Q-K Q-Q-K-K	Q: 问题 K: 知识点
IMDB	M-A	A-M-A M-A-M D-M-D M-D-M M-D-M-A M-A-M-A	M-A-M M-D-M M-D-M-A M-A-M-A	A: 演员 M: 电影 D: 导演
LastFM	U-A	U-A-U U-A-T-A-U A-U-A A-T-A A-U-U-A	U-A-U	A: 艺术家 U: 用户 T: 标签

3.3.2 基准模型

为了证明本文所提模型 CGCN-MGS 在异构图链接预测任务上的有效性, 我们在实验中将其与现有先进的几个图神经网络在 3 个基准数据集上进行了对比, 对比方法的介绍如下。

GCN^[4]: 经典的图神经网络之一, 它通过不断聚合邻居节点的信息来更新节点特征, 但仅适用于同构图。在我们的实验中, 首先在每个仅包含一种类型边的子图上应用 GCN, 来学习当前子图的节点特征。然后, 将基于所有类型子图学到的节点特征求平均, 得到节点最终的特征表示。

R-GCN^[3]: 它是 GCN 在异构图中的拓展, 其在进行节点特征聚合时, 采用了不同的参数来聚合不同类型边中节点的特征, 从而将图中异构的边信息嵌入到节点特征中, 以更好地捕捉异构图的结构信息。

GraphSAGE^[1]: 它是一个面向同构图的图神经网络模型, 其图卷积计算包含邻居节点采样和节点特征聚合两个模块。在聚合节点特征时, 它与 GCN 的核心思想相同, 但它的特征聚合方式更多样。例如, 和 GCN 仅通过简单的特征相加完成聚合不同, GraphSAGE 提出了多种聚合方式, 包括 max-pooling、LSTM 等。

HAN^[6]: 经典的异构图神经网络模型, 其假设不同类型的边有不同的权值, 且在同一个类型的边中, 不同的邻居节点有不同的权值。为此, 其同时使用了节点级和语义级的注意力, 其中节点级级的注意力用于学习不同类型的邻居节点对中心节点的重要性, 语义级级的注意力用于学习不同元路径的重要性。

MAGNN^[7]: 该模型针对 HAN 中元路径中间节点信息被忽视的问题, 提出了一个基于元路径聚合的图神经网络模型, 该模型利用一个基于关系旋转的元路径编码器, 首先按照元路径中节点的顺序将路径内所有节点的特征聚合至元路径特征, 然后通过基于注意力的元路径的特征聚合学习图节点特征表达。

HetGNN^[19]: 该模型首先利用随机漫游和重启来采样强相关的邻居节点, 然后根据邻居节点内容和图结构的异构性, 设计了一个包含两阶段特征聚合的异构图神经网络, 其图节点的特征学习过程包括节点异构内容的聚合和不同类型邻居节点特征的聚合。

MV-HetGNN^[26]: 该模型是一个基于多视角学习的异构图神经网络, 该网络由特定视角的图编码器和多视角融合网络层组成。该模型证明了多种视角下不同网络结构的编码和融合, 有利于提高所学节点特征对异构图复杂结构和语义的表征能力。

LPMPA^[36]: 该模型是一个基于元路径映射和聚合的链接预测方法, 其首先基于不同元路径将异构图投影到多

个语义图中, 然后将这些异构的语义图结构信息同时嵌入节点对的特征表达. 最后, 将所学节点对的特征送入一个多层感知机网络预测它们之间是否存在链接的概率.

3.4 实验结果与分析

为了评估 CGCN-MGS 的有效性, 我们需要研究并回答如下两个问题.

- RQ1: CGCN-MGS 能否获得相较于其他方法更好的结果?
- RQ2: CGCN-MGS 的 3 个模块是否不可或缺?

RQ1: CGCN-MGS 能否获得相较于其他方法较好的结果?

为了验证这个问题的结果, 我们挑选了 4 种不同类型的图神经网络作为实验中的对比方法, 包括同构图神经网络 GCN 和 GraphSAGE、基于邻接关系的异构图神经网络 R-GCN 和 HetGNN、基于元路径的异构图神经网络 HAN 和 MAGNN、同时考虑了邻接关系和元路径的异构图神经网络 MV-HetGNN 和 LPMPA. 我们将 CGCN-MGS 与这些对比方法在 CMTD, IMDB 和 LastFM 这 3 个数据集上分别进行了性能对比, 实验结果见表 5.

表 5 CGCN-MGS 与基准模型在不同数据集上的实验结果 (%)

Model	CMTD		IMDB		LastFM	
	<i>AUC</i>	<i>P@200</i>	<i>AUC</i>	<i>P@200</i>	<i>AUC</i>	<i>P@200</i>
GCN ^[4]	83.25	55.87	64.69	42.37	74.38	62.67
GraphSAGE ^[1]	71.60	43.00	71.14	64.33	82.28	78.63
R-GCN ^[3]	89.63	69.36	72.55	66.02	84.56	84.62
HetGNN ^[19]	86.30	78.67	75.74	64.67	88.30	77.67
HAN ^[6]	71.05	51.53	71.16	56.63	53.73	25.84
MAGNN ^[7]	65.39	36.77	73.51	65.85	71.83	70.11
MV-HetGNN ^[26]	—	—	—	—	92.80	94.03
LPMPA ^[36]	—	—	80.32	78.68	93.51	93.64
CGCN-MGS	96.44	88.45	81.59	78.75	96.70	96.33

从表 5 中可以看出, 在所有数据集上, 我们提出的模型 CGCN-MGS 在链接预测任务上的 *AUC* 和 *P@200* 值均高于竞争的基准模型. 例如, CGCN-MGS 在 CMTD, IMDB 和 LastFM 数据集上的 *AUC* 分别比同构图神经网络模型 (即 GCN 和 GraphSAGE) 高了至少 13.19%, 10.45% 和 14.42%. 这是因为同构图神经网络往往将图中所有的节点视作相同类型, 忽视了节点的异构性和节点间本就存在的异构关联信息, 导致它们学习的节点嵌入难以表征真实世界中异构节点间的关联, 从而降低了它们在异构图链接预测任务上的准确性.

和目前最好的异构图神经网络模型相比, CGCN-MGS 在 CMTD, IMDB 和 LastFM 数据集上都取得了最高的 *AUC* 和 *P@200* 结果. 例如, 在公开数据集 IMDB 和 LastFM 上, CGCN-MGS 的 *AUC* 值相比目前的异构图神经网络 (例如 HetGNN 和 LPMPA) 提升至少 1.27% 和 3.19%. 这是因为 CGCN-MGS 通过级联架构将异构图中节点间 3 种不同层次的结构 (即邻接结构、元路径结构和环结构) 信息联合嵌入到节点特征中, 这增加了所学节点特征对节点间复杂关联结构的表征能力. 相比之下, 现有的异构图神经网络往往仅考虑了异构节点间的邻接关联 (例如 HetGNN) 或基于元路径的高阶关联 (例如 LPMPA 和 HAN), 忽视了不同层次关联结构所蕴含语义信息的差异和互补性. 此外, 现有方法均忽略了元路径两端节点间的语义关联, 导致其学到的节点特征无法充分表征节点在异构图中的丰富语义和结构信息. 为了解决这个问题, 我们在 CGCN-MGS 中设计了一种新的基于元路径的环编码器, 其能将不同类型元路径两端节点间的关联信息引入到节点的特征学习中, 从而有助于捕捉元路径结构难以表征的细粒度语义信息. 为了更直观地对比各个模型的实验结果, 我们在图 9 中分别展示了所有模型在 3 个实验数据集上 Loss、*AUC* 和 *P@200* 值的变化曲线.

从图 9 中可以看出, 我们的模型 CGCN-MGS 在 3 个数据集上均取得了最低的 Loss 值, 最高的 *AUC* 和 *P@200* 结果. 相比之下, 同构图神经网络 (GCN, GraphSAGE) 并未考虑节点和边之间的异构性, 基于邻接结构的异构图神

神经网络 (R-GCN, HetGNN) 忽视了异构图中本就存在的其他复合关联 (例如元路径), 这使得它们难以捕捉这些关联结构中蕴含的复杂语义信息. 而基于元路径的方法 (HAN, MAGNN) 在学习节点表达时忽视了在元路径两端节点存在关联时, 对环结构 (此时, 元路径首尾相连成为环) 的挖掘和利用. 为此, 我们的方法通过级联架构将邻接信息、元路径信息和基于元路径的环结构信息纳入到图节点的表达学习中, 有利于对异构图中多种层次结构信息进行抽取和融合, 从而提高模型性能.

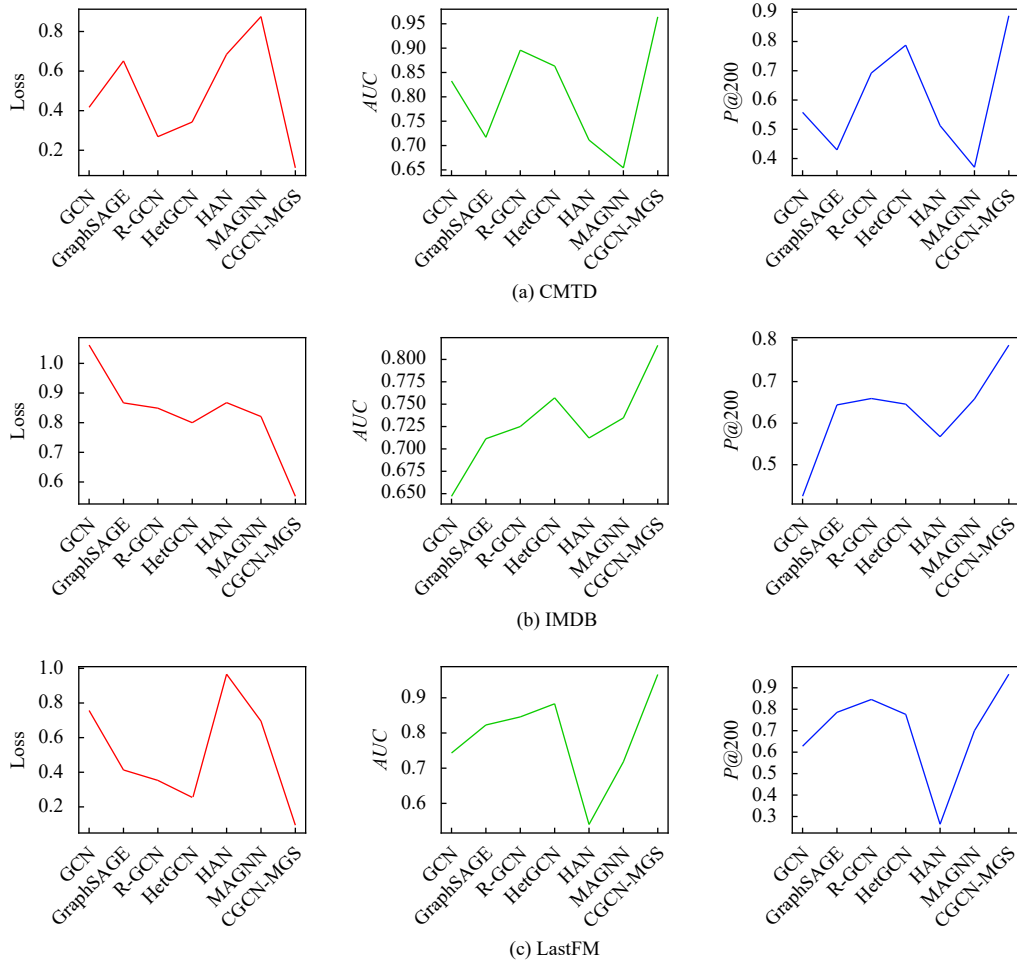


图9 CMTD、IMDB 和 LastFM 这3个数据集上的对比实验结果

RQ2: CGCN-MGS 的3个图卷积模块是否不可或缺?

为了回答该问题, 我们做了大量的消融性分析实验, 通过移除 CGCN-MGS 中不同的卷积模块, 得到了其多个变体模型, 并将这些变体模型和 CGCN-MGS 在 CMTD 数据集上的预测结果进行了对比, 实验结果如表6所示. 此外, 为了更清晰地对比各变体模型的实验结果, 我们在图10中分别展示了所有变体模型在 CMTD 数据集上 Loss、AUC 和 $P@200$ 值的变化曲线.

变体模型 1-3: 通过移除 CGCN-MGS 中的一个模块得到, 其中模块 I 表示基于异构邻接结构的图卷积, 模块 II 表示基于元路径结构的图卷积, 模块 III 表示基于元路径的环结构的图卷积. 目的是证明被移除模块的作用. 变体模型 4-6: 通过移除 CGCN-MGS 中的任意两个模块得到, 目的是测试 CGCN-MGS 仅保留一个模块时的预测结果.

表 6 CGCN-MGS 和变体模型在 CMTD 数据集上的消融性分析实验结果 (%)

变体模型	Model	AUC	P@200
v_1	-w/o 模块 I	93.55	82.75
v_2	-w/o 模块 II	90.61	78.67
v_3	-w/o 模块 III	94.40	85.63
v_4	-w/o 模块 II 和 III	87.95	81.00
v_5	-w/o 模块 I 和 III	90.90	81.50
v_6	-w/o 模块 I 和 II	81.32	58.00
Full	CGCN-MGS	96.44	88.45

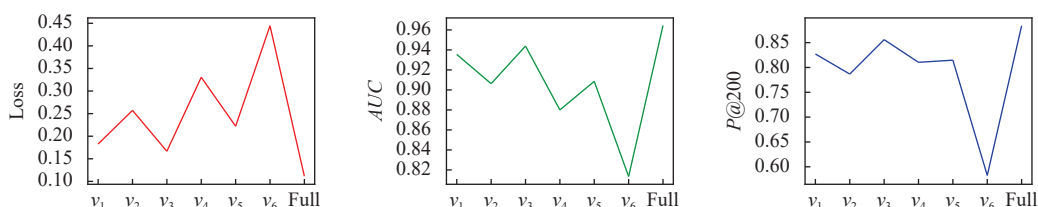


图 10 CGCN-MGS 在 CMTD 数据集上的消融性分析实验结果

从表 6 中可以看出, 和完整模型 CGCN-MGS 相比, 变体模型 1–3 的性能均出现了较大的下降, 其中变体模型 2 的性能是最差的, 这表明模块 II 在链接预测任务中比模块 I 或模块 III 更重要. 这是因为虽然变体模型 2 通过模块 I 和模块 III 能够利用图中的邻接关联和基于元路径的环结构信息学习节点特征, 但却忽视了异构图中蕴含了丰富语义且大量存在的元路径结构, 这弱化了节点特征的语义表征能力, 从而降低了节点间链接预测的准确性. 和 CGCN-MGS 相比, 变体模型 3 的性能下降了 2.04%, 这证明了模块 III 的有效性. 这是因为在移除模块 III 之后, 变体模型 3 忽视了基于元路径的环结构所蕴涵的细粒度语义信息, 降低了其所学特征对异构图结构和语义信息的表征能力.

在变体模型 4–6 中, 变体模型 6 的性能表现是最差的. 具体地, 和变体模型 5 相比, 变体模型 6 的性能下降了 9.58%. 这是因为变体模型 6 所使用的基于元路径的环结构, 虽然比变体模型 5 使用的元路径结构蕴涵更多的细粒度语义信息, 但其在图中出现的频率比元路径结构低. 这使得变体模型 6 在学习节点特征时, 仅关注了环结构中的节点, 而忽视了环结构以外节点的特征更新和学习. 和 CGCN-MGS 相比, 变体模型 4 的性能下降了 8.49%, 其性能下降的原因在于仅关注了图中基本的邻接结构, 而忽视了能够表征复杂语义的元路径和基于元路径的环结构. 这使得变体模型 4 无法有效学习到能够充分表征异构图语义信息的节点特征, 从而阻碍了其在链接预测任务上性能的提升.

4 总 结

针对异构图中节点间的链接预测问题, 本文利用异构图中不同层次的图结构信息, 提出了一种基于多层次图结构的级联图卷积网络, 即 CGCN-MGS. 它将 3 个分别面向邻接结构、元路径结构和环结构的图卷积模块集成到了一个级联神经网络中. 在 CGCN-MGS 中, 上述 3 种不同层次的结构和语义信息通过网络级联可以相互补充和融合, 这有利于提升所学节点特征对异构图中复杂的结构和语义信息的表征能力. 此外, 考虑到不同图结构对节点语义表征的不同影响, CGCN-MGS 将注意力机制引入到了不同层次的图卷积过程, 能够在每个层次的图卷积过程中自适应地调整不同的图结构在节点特征学习过程中的权重. 在多个实验数据集上的结果表明 CGCN-MGS 在链接预测任务上的性能超过了所有的基准方法, 这证明了本文所提的基于多层次图结构的级联图卷积网络在异构图表示学习和链接预测任务上的有效性.

References:

- [1] Hamilton WL, Ying R, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs. In: Proc. of the 31st Int'l Conf. on Neural

- Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017. 1025–1035.
- [2] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, Romero A, Liò P, Bengio Y. Graph attention networks. In: Proc. of the 6th Int'l Conf. on Learning Representations. Vancouver: OpenReview.net, 2018. 1–12.
 - [3] Schlichtkrull M, Kipf TN, Bloem P, van den Berg R, Titov I, Welling M. Modeling relational data with graph convolutional networks. In: Proc. of the 15th European Semantic Web Conf. Heraklion: Springer, 2018. 593–607. [doi: [10.1007/978-3-319-93417-4_38](https://doi.org/10.1007/978-3-319-93417-4_38)]
 - [4] Kipf TN, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In: Proc. of the 5th Int'l Conf. on Learning Representations. Toulon: OpenReview.net, 2017. 1–14.
 - [5] Wang X, He XN, Cao YX, Liu M, Chua TS. KGAT: Knowledge graph attention network for recommendation. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2019. 950–958. [doi: [10.1145/3292500.3330989](https://doi.org/10.1145/3292500.3330989)]
 - [6] Wang X, Ji HY, Shi C, Wang B, Ye YF, Cui P, Yu PS. Heterogeneous graph attention network. In: Proc. of the 2019 World Wide Web Conf. San Francisco: Association for Computing Machinery, 2019. 2022–2032. [doi: [10.1145/3308558.3313562](https://doi.org/10.1145/3308558.3313562)]
 - [7] Fu XY, Zhang JN, Meng ZQ, King I. MAGNN: Metapath aggregated graph neural network for heterogeneous graph embedding. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: Association for Computing Machinery, 2020. 2331–2341. [doi: [10.1145/3366423.3380297](https://doi.org/10.1145/3366423.3380297)]
 - [8] Sun YZ, Han JW, Yan XF, Yu PS, Wu TY. PathSim: Meta path-based top-K similarity search in heterogeneous information networks. Proc. of the VLDB Endowment, 2011, 4(11): 992–1003. [doi: [10.14778/3402707.3402736](https://doi.org/10.14778/3402707.3402736)]
 - [9] Diestel R. Extremal graph theory. In: Diestel R, ed. Graph Theory. Berlin: Springer, 2017. 173–207. [doi: [10.1007/978-3-662-53622-3_7](https://doi.org/10.1007/978-3-662-53622-3_7)]
 - [10] Shirian A, Guha T. Compact graph architecture for speech emotion recognition. In: Proc. of the 2021 IEEE Int'l Conf. on Acoustics, Speech and Signal Processing. Toronto: IEEE, 2021. 6284–6288. [doi: [10.1109/ICASSP39728.2021.9413876](https://doi.org/10.1109/ICASSP39728.2021.9413876)]
 - [11] Rong Y, Huang WB, Xu TY, Huang JZ. DropEdge: Towards deep graph convolutional networks on node classification. In: Proc. of the 8th Int'l Conf. on Learning Representations. Addis Ababa: OpenReview.net, 2020. 1–17.
 - [12] Abu-El-Haija S, Kapoor A, Perozzi B, Lee J. N-GCN: Multi-scale graph convolution for semi-supervised node classification. In: Proc. of the 35th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence. Tel Aviv: AUAI Press, 2019. 841–851.
 - [13] Zhang MH, Chen YX. Link prediction based on graph neural networks. In: Proc. of the 32nd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Montreal: Curran Associates Inc., 2018. 5165–5175.
 - [14] Chen JY, Wang XK, Xu XH. GC-LSTM: Graph convolution embedded LSTM for dynamic network link prediction. Applied Intelligence, 2022, 52(7): 7513–7528. [doi: [10.1007/s10489-021-02518-9](https://doi.org/10.1007/s10489-021-02518-9)]
 - [15] Bruna J, Zaremba W, Szlam A, LeCun Y. Spectral networks and deep locally connected networks on graphs. In: Proc. of 2nd Int'l Conf. on Learning Representations. Banff: OpenReview.net, 2014. 1–14.
 - [16] Defferrard M, Bresson X, Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering. In: Proc. of the 30th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Barcelona: Curran Associates Inc., 2016. 3844–3852.
 - [17] Wu ZH, Pan SR, Chen FW, Long GD, Zhang CQ, Yu PS. A comprehensive survey on graph neural networks. IEEE Trans. on Neural Networks and Learning Systems, 2021, 32(1): 4–24. [doi: [10.1109/TNNLS.2020.2978386](https://doi.org/10.1109/TNNLS.2020.2978386)]
 - [18] Busbridge D, Sherburn D, Cavallo P, Hammerla NY. Relational graph attention networks. arXiv:1904.05811, 2019.
 - [19] Zhang CX, Song DJ, Huang C, Swami A, Chawla NV. Heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Anchorage: Association for Computing Machinery, 2019. 793–803. [doi: [10.1145/3292500.3330961](https://doi.org/10.1145/3292500.3330961)]
 - [20] Peng H, Zhang RT, Dou YT, Yang RY, Zhang JY, Yu PS. Reinforced neighborhood selection guided multi-relational graph neural networks. ACM Trans. on Information Systems, 2022, 40(4): 69. [doi: [10.1145/3490181](https://doi.org/10.1145/3490181)]
 - [21] Dong YX, Chawla NV, Swami A. Metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks. In: Proc. of the 23rd ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Halifax: Association for Computing Machinery, 2017. 135–144. [doi: [10.1145/3097983.3098036](https://doi.org/10.1145/3097983.3098036)]
 - [22] Fu TY, Lee WC, Lei Z. HIN2Vec: Explore meta-paths in heterogeneous information networks for representation learning. In: Proc. of the 2017 ACM on Conf. on Information and Knowledge Management. Singapore: Association for Computing Machinery, 2017. 1797–1806. [doi: [10.1145/3132847.3132953](https://doi.org/10.1145/3132847.3132953)]
 - [23] Shi C, Hu BB, Zhao WX, Yu PS. Heterogeneous information network embedding for recommendation. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2019, 31(2): 357–370. [doi: [10.1109/TKDE.2018.2833443](https://doi.org/10.1109/TKDE.2018.2833443)]
 - [24] Perozzi B, Al-Rfou R, Skiena S. DeepWalk: Online learning of social representations. In: Proc. of the 20th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2014. 701–710. [doi: [10.1145/2623330.2623732](https://doi.org/10.1145/2623330.2623732)]

- [25] Jia XS, Zhao ZY, Li C, Luan WJ, Liang YQ. Heterogeneous network representation learning method fusing mutual information and multiple meta-paths. *Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software*, 2023, 34(7): 3256–3271 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6535.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006535]
- [26] Shao ZZ, Xu YJ, Wei W, Wang F, Zhang Z, Zhu FD. Heterogeneous graph neural network with multi-view representation learning. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 35(11): 11476–11488. [doi: 10.1109/TKDE.2022.3224193]
- [27] Luo A, Li X, Yang F, Jiao ZC, Cheng H, Lyu SW. Cascade graph neural networks for RGB-D salient object detection. In: *Proc. of 16th European Conf. on Computer Vision*. Glasgow: Springer, 2020. 346–364. [doi: 10.1007/978-3-030-58610-2_21]
- [28] Duan L, Ma S, Aggarwal C, Ma TJ, Huai JP. An ensemble approach to link prediction. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2017, 29(11): 2402–2416. [doi: 10.1109/TKDE.2017.2730207]
- [29] Newman MEJ. Clustering and preferential attachment in growing networks. *Physical Review E*, 2001, 64(2): 025102. [doi: 10.1103/PhysRevE.64.025102]
- [30] Salton G, McGill MJ. *Introduction to Modern Information Retrieval*. New York: McGraw-Hill, 1983. 400–401.
- [31] Barabási AL, Albert R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 1999, 286(5439): 509–512. [doi: 10.1126/science.286.5439.509]
- [32] Heckerman D, Meek C, Koller D. Probabilistic entity-relationship models, PRMs, and plate models. In: Getoor L, Taskar B, eds. *Introduction to Statistical Relational Learning*. New York: MIT Press, 2007. 200–238. [doi: 10.7551/mitpress/7432.003.0009]
- [33] Yu K, Chu W, Yu SP, Tresp V, Xu Z. Stochastic relational models for discriminative link prediction. In: *Proc. of 19th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems*. Vancouver: MIT Press, 2006. 1553–1560.
- [34] Tang J, Qu M, Wang MZ, Zhang M, Yan J, Mei QZ. LINE: Large-scale information network embedding. In: *Proc. of the 24th Int'l Conf. on World Wide Web*. Florence: Association for Computing Machinery, 2015. 1067–1077. [doi: 10.1145/2736277.2741093]
- [35] Fu GJ, Hou CB, Yao X. Learning topological representation for networks via hierarchical sampling. In: *Proc. of the 2019 Int'l Joint Conf. on Neural Networks*. Budapest: IEEE, 2019. 1–8. [doi: 10.1109/IJCNN.2019.8851893]
- [36] Zhao YC, Sun YY, Huang YN, Li LJ, Dong H. Link prediction in heterogeneous networks based on metapath projection and aggregation. *Expert Systems with Applications*, 2023, 227: 120325. [doi: 10.1016/j.eswa.2023.120325]
- [37] Xu J, Li ZS, Du BW, Zhang MM, Liu J. Reluplex made more practical: Leaky ReLU. In: *Proc. of the 2020 IEEE Symp. on Computers and Communications*. Rennes: IEEE, 2020. 1–7. [doi: 10.1109/ISCC50000.2020.9219587]
- [38] Tan YJ, Wu J, Deng HZ. Evaluation method for node importance based on node contraction in complex networks. *Systems Engineering-Theory & Practice*, 2006, 26(11): 79–83, 102 [doi: 10.3321/j.issn:1000-6788.2006.11.011]
- [39] Yueming, ME2MLE, Raja B. IMDB 5000 movie dataset. 2017. <https://www.kaggle.com/datasets/carolzhangdc/imdb-5000-movie-dataset>
- [40] Cantador I, Brusilovsky P, Kuflik T. Second workshop on information heterogeneity and fusion in recommender systems (HetRec2011). In: *Proc. of the 5th ACM Conf. on Recommender Systems*. Chicago: Association for Computing Machinery, 2011. 387–388. [doi: 10.1145/2043932.2044016]
- [41] Welcome to deep graph library tutorials and documentation. 2018. <https://docs.dgl.ai/index.html>
- [42] Xu D. `dmlc/dgl/training-link.rst`. 2021. https://github.com/dmlc/dgl/blob/0.7.x/docs/source/guide_cn/training-link.rst
- [43] Lü LY, Zhou T. Link prediction in complex networks: A survey. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2011, 390(6): 1150–1170. [doi: 10.1016/j.physa.2010.11.027]

附中文参考文献:

- [25] 贾霄生, 赵中英, 李超, 栾文静, 梁永全. 互信息与多条元路径融合的异质网络表示学习方法. *软件学报*, 2023, 34(7): 3256–3271. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6535.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006535]
- [38] 谭跃进, 吴俊, 邓宏钟. 复杂网络中节点重要度评估的节点收缩方法. *系统工程理论与实践*, 2006, 26(11): 79–83, 102. [doi: 10.3321/j.issn:1000-6788.2006.11.011]



宋凌云(1988—), 男, 博士, 副教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为机器学习, 计算机视觉, 数据挖掘.



李战怀(1961—), 男, 博士, 博士生导师, CCF 高级会员, 主要研究领域为大数据管理技术, 海量信息存储系统.



刘至臻(1999—), 女, 硕士生, 主要研究领域为机器学习, 图神经网络.



尚学群(1973—), 女, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 高级会员, 主要研究领域为机器学习, 数据挖掘, 生物信息.



张杨(1998—), 男, 本科, 主要研究领域为机器学习, 数据挖掘.