

面向节点分类的多层异质图神经网络^{*}

于朋健, 李 享, 齐建鹏, 于彦伟, 董军宇

(中国海洋大学 信息科学与工程学部, 山东 青岛 266100)

通信作者: 于彦伟, E-mail: yuyanwei@ouc.edu.cn



摘 要: 近年来, 由于异质图卷积网络能够有效学习异质网络语义信息, 逐渐成为网络节点分类的主流算法, 但仍面临诸多挑战: 现有的大多数工作主要集中在普通异质网络上, 即假设两个节点之间只有一种类型的边, 忽略了多层异质网络中多类型节点间的多重关系, 以及没有显式地探索不同关系对各类节点表征的影响. 此外, 图神经网络的过平滑问题也限制了现有模型仅能捕获低阶的局部信息, 几乎无法学习网络的全局相关信息. 为了应对这些挑战, 提出了一种面向节点分类的多层异质图神经网络 (multiplex heterogeneous graph neural network, MHGNN). 具体来说, MHGNN 首先学习各类节点在不同关系下的局部初始表征, 再显式地探索不同关系下的表征的重要性以及有效融合不同关系下各类型节点的表征, 从而捕获多层异质网络中不同交互关系的差异性. 其次, 基于微观经济学中的替代品和互补品概念, 构造了考虑全局相似性特征的替代品和互补品矩阵, 并通过图神经网络进行信息聚合, 以更好地捕获不同关系下各类节点之间的高阶全局语义信息. 最后, 通过对比学习协调局部和全局两个视图中学到的差异性和相似性表征并融合获得最终节点表征. 在 6 个真实数据集上的广泛实验评估证明所提的 MHGNN 在节点分类任务上的各项评估指标都显著优于最新模型.

关键词: 图表示学习; 多层异质网络; 图卷积网络; 节点分类; 对比学习

中图法分类号: TP18

中文引用格式: 于朋健, 李享, 齐建鹏, 于彦伟, 董军宇. 面向节点分类的多层异质图神经网络. 软件学报, 2026, 37(2): 716-731. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7440.htm>

英文引用格式: Yu PJ, Li X, Qi JP, Yu YW, Dong JY. Multiplex Heterogeneous Graph Neural Network for Node Classification. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2026, 37(2): 716-731 (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7440.htm>

Multiplex Heterogeneous Graph Neural Network for Node Classification

YU Peng-Jian, LI Xiang, QI Jian-Peng, YU Yan-Wei, DONG Jun-Yu

(Faculty of Information Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100, China)

Abstract: In recent years, heterogeneous graph convolutional networks have emerged as a mainstream approach for node classification due to their ability to effectively capture semantic information in heterogeneous networks. However, several challenges remain. Most existing studies focus on general heterogeneous networks, where only a single type of edge is assumed between any two nodes. This simplification overlooks the multiple relationships that exist among multi-type nodes in multiplex heterogeneous networks and fails to explicitly explore the impact of different relations on the representations of various node types. Moreover, the over-smoothing issue inherent in graph neural networks limits these models to capturing only low-order local information, making it difficult to learn global correlation patterns in the network. To address these challenges, this study proposes a multiplex heterogeneous graph neural network (MHGNN) designed for node classification. The proposed MHGNN first learns local initial representations of each node type under different relational contexts. It then explicitly models the importance of each relation and effectively integrates the representations of different node types across multiple relations, thus capturing the relational diversity within multiplex heterogeneous networks. In addition, drawing inspiration from the microeconomic concepts of substitutes and complements, the study constructs substitute and complement matrices that encode global

* 基金项目: 国家自然科学基金 (62176243, 61773331, 41927805)

收稿时间: 2024-06-25; 修改时间: 2024-10-12; 采用时间: 2025-03-25; jos 在线出版时间: 2025-11-20

CNKI 网络首发时间: 2025-11-21

similarity features. These matrices are incorporated into the model via graph neural aggregation to enhance the learning of higher-order global semantic information across different node types. Finally, contrastive learning is employed to reconcile and fuse the distinct yet complementary representations learned from both local and global views, yielding the final node embeddings. Extensive experiments conducted on six real-world datasets demonstrate that the proposed MHGNN significantly outperforms state-of-the-art models across various evaluation metrics for node classification.

Key words: graph representation learning; multiplex heterogeneous network; graph convolutional network (GCN); node classification; contrastive learning

近年来,图神经网络(graph neural network, GNN)受到了研究者的广泛关注, GNN 能够将复杂网络嵌入到低维向量空间中,同时保持节点在网络拓扑结构和内在属性上的临近性.从链路预测^[1-3]、节点分类^[4-6]到推荐系统^[7-9],基于 GNN 的图表示学习方法已成功应用于电子商务^[10,11]、社交媒体平台^[12]和广告^[13,14]等诸多领域.

节点分类是图机器学习领域重要的下游任务之一,目的是利用已标注节点学习网络语义信息,生成节点特征表示,识别未标注节点的类别.例如,在引文网络中,节点表示文献,节点之间的连接表示文献引用关系,通过学习文献和引用关系,生成文献的特征表示,预测文献的研究主题.图神经网络节点分类方法主要分为同质网络方法和异质网络方法,其中,同质网络仅包含一种节点类型,且节点间也仅存在一种类型的连接关系,如引文网络中文献间的引用关系、协作网络中学者间的合作关系和社交网络中用户间的关注关系等;而异质网络包含多种类型的节点和关系,这些关系分别揭示了不同的语义信息.例如,在异质引文网络中,除了文献间的引用关系外,还包括学者与文献间的写作关系、期刊与文献间的发表关系等.

虽然现有的基于图表征学习的节点分类方法已经取得了不错的效果,但这些方法大多是同质网络表征学习方法^[1,12,15-17],近期的一些研究普遍关注到了异质网络^[18].在对含有多种类型节点和多种类型边的异质网络进行表征学习方法中,元路径是一种被大量使用的工具,基于元路径的方法可以有效地捕获各种类型的交互关系,从而充分利用异质网络中丰富的语义信息,例如 metapath2vec^[19]、MAGNN^[20]和 HetGNN^[21]等.尽管现有的基于异质图表征学习的节点分类方法取得了不错的效果,但这些工作通常只针对具有单一视图的异质网络.真实世界中的网络往往更加复杂,在相同的两个节点之间也可能存在多种类型的交互关系,并且节点还包含更为丰富的属性信息,这就构成了多层异质网络.例如,在电子商务网络中,存在两种类型的节点(即用户和商品),并且相同的用户商品节点对之间存在多种关系(例如点击、购买、添加到购物车或收藏等).该类多层异质网络中多种类型节点之间的连接关系也具有多样性,从而产生具有多种不同视图的网络.现有的大部分异质网络表示学习方法无法直接套用到多层异质图表示学习中,因为这些方法无法充分地利用网络中节点间的多重交互关系.因此,本文针对现有的多层异质网络表示学习方法展开了研究,例如 FAME^[13]、DualHGCN^[6]和 BPHGNN^[22]等,它们都考虑了节点间的多重关系并进行建模.然而,虽然上述模型能够学习多层异质网络节点嵌入表征并进行有效的节点分类任务,但仍然存在一些关键问题需要解决.

(1) 现有的大多数多层异质图神经网络模型在考虑多种关系时,通常先聚合关系的重要性再学习单一表征,忽略了不同关系表征的重要性.例如,近期提出的 BPHGNN^[22]和 MHGNN^[23]都是先去学习不同关系的重要性,然后根据这些重要性融合得到单一的节点表征,这忽视了不同关系下的节点表征的重要性.另外,对不同关系的重要性的学习可能并不容易,因此先获得不同关系下的节点表征再去学习表征的重要性具有更好的可操作性和解释性.

(2) 现有的大多数方法都采用统一的框架学习节点的表征,而忽略了异质节点在不同关系间融合的差异性.由于多层异质网络中包含不同类型的节点,且这些节点在特征上是有所区别的,采用统一的框架学习这些节点的表征可能会导致重要的节点个性化信息丢失.例如,在电子商务网络中商品的特征是静态的,这些商品本身的特征信息一般不会随时间改变.相比之下,用户的特征是动态的,因为用户的兴趣偏好可能随时间、场景等因素的变化而发生改变.因此对不同类型的节点采用差异化的表征融合方式是必要的,可以更好地保留节点的个性化特征信息,获得更准确的特征嵌入,从而提升节点分类任务的性能.

(3) 现有的方法都没有充分的捕获多层异质网络中高阶的、全局的语义信息.由于 GNN 的过平滑问题会限制 GNN 模型堆叠更多信息聚合层,现有的大部分方法通常采用较少的 GNN 层数来捕获节点的邻域信息,即这些

模型只能聚合低阶局部信息而无法捕获高阶全局信息. 然而在多层异质网络中, 一些高阶信息具有重要意义, 例如在电子商务网络中, 同一用户产生交互的两个商品之间并没有二阶联系, 但它们实际上属于同类型商品, 存在一些相似的特征, 因此, 在特征表示上也具有相似性, 而这样的相似性则需要模型利用网络中的高阶全局语义信息来捕获. 相关的论证在文献 [16,24] 中也有涉及.

为了应对上述挑战, 本文提出了一种多层异质图神经网络模型——MHGNN (multiplex heterogeneous graph neural network), 用于节点分类任务. 具体而言, 为了学习不同关系表征的重要性及不同类型节点的差异化特征, 本文设计了关系子图表征学习模块和多关系局部信息聚合模块, 用于捕捉节点在不同关系下的初始表征, 并显式地探索与融合这些关系的表征. 接着, 针对多层异质网络中不同类型的节点, 采用差异化的表征融合策略, 以保留各类节点的个性化特征信息. 此外, 为了捕获高阶全局语义信息, 本文设计了高阶全局语义信息聚合模块, 通过构建替代品和互补品矩阵, 学习多层异质网络中的高阶全局语义, 在一定程度上缓解了 GNN 模型中的过平滑问题. 最后, 本文引入对比学习机制, 协调局部和全局两个视图中的节点表征, 并融合得到最终的节点表征. 节点分类实验在 6 个真实数据集上的评估结果表明, MHGNN 在多个指标上显著优于最新的基线方法.

本文的主要贡献总结如下.

(1) 本文提出了一种用于节点分类的多层异质图神经网络 MHGNN, 它可以捕获不同关系下节点表征的重要性, 并有效地融合多关系表征来获取节点表征.

(2) MHGNN 针对不同类型的节点采用差异化的表征融合方式, 使得模型可以更好地捕获不同类型节点的个性化特征信息, 并融合替代品和互补品矩阵, 有效地捕获了多层异质网络中的高阶全局语义信息.

(3) 通过在 6 个真实数据集上的综合实验评估, 结果表明, 所提的 MHGNN 模型显著优于最新方法, 在 Macro-F1 和 Micro-F1 指标上分别取得了 3.57% 和 5% 的平均提升.

1 相关工作

作为当前最热门的研究方向之一, GNN 能够充分利用图网络中丰富的语义信息和结构信息, 学习节点表征并应用到下游任务中, 如节点分类、链路预测等问题. 根据网络类型的不同, 可将现有的图神经网络节点分类方法分为同质图神经网络方法、异质图神经网络方法以及多层异质图神经网络方法.

- 同质图神经网络方法. 同质图神经网络方法从同质网络中学习节点的低维特征嵌入, 应用于节点分类任务. DeepWalk^[25]算法在同质网络中进行随机游走生成随机游走路径, 并利用 skip-gram 算法得到节点的低维特征嵌入. node2vec^[2]算法则对 DeepWalk 算法的随机游走方法进行了改进, 将 DFS 和 BFS 的思想引入到随机游走路径的生成过程中, 从而提升了节点分类的效果. 随着 GNN 的发展, 其在图表征学习中展现出了优异的性能, 基于 GNN 的图表征学习方法也被更多的研究者们提出. 图卷积网络 (graph convolutional network, GCN)^[26]通过卷积运算将邻居特征合并到中心节点特征中. 图注意力网络 (graph attention network, GAT)^[27]在 GNN 中引入了注意力机制, 使得中心节点在聚合邻居信息时, 可以自适应地学习不同邻居节点的重要性. SGC^[28]是图卷积网络的简化版本, 它在 GCN 传播机制中舍弃了非线性变换和训练参数, 只采用高阶邻接矩阵和属性矩阵的乘积, 从而在保留性能的同时简化了 GCN 的结构, 减少了参数量, 提升了模型计算效率. AM-GCN^[29]同时考虑拓扑空间和特征空间, 并通过注意力机制融合这两部分空间, 从同质网络中学习丰富的语义信息, 在节点分类任务上取得了较为优秀的性能. 然而, 这些方法没有考虑网络的异质性, 因此很难直接应用于包含不同类型的节点和边的异质网络.

- 异质图神经网络方法. 异质图神经网络方法是近年来重要的研究方向之一, 重点关注异质网络结构建模和关系语义提取. 异质网络包含不同类型的节点和边, 交互信息复杂多样, 融入异质结构特征有利于捕获丰富的节点特征以提升下游任务效果. 基于元路径的异质图神经网络方法是一类常见的方法, 并且大都表现出了优异的性能. 例如 metapath2vec^[19]基于元路径进行随机游走, 用于获取异质图中的随机游走路径, 并利用 skip-gram 算法获得节点表征. 不同于之前需要手动设置元路径的方法, GTN^[30]可以自适应学习各种元路径的重要性, 从而更高效地利用元路径信息学习节点表征. 随着 GNN 的发展, 一些异质图神经网络模型通过改进相关的 GNN 模型, 使其具有捕

获异质节点和边的能力. HetGNN^[21]联合编码图拓扑和上下文异质性进行节点表征学习. NARS^[31]首先生成关系子图, 通过子图上的一维卷积学习节点嵌入, 然后聚合多个关系子图上学习到的节点嵌入. Fu 等人^[32]执行元路径内和元路径间信息聚合, 提取基于元路径的关系上下文来获取节点嵌入. 此外, 还有一些研究试图放宽异质图元路径构建的要求, 例如 HGT^[33]提出将自注意力机制融合到消息传递机制中, 以对异质节点之间的动态依赖关系进行建模. HPN^[7]通过将元路径中的节点映射到语义空间来消除语义混淆, 然后聚合不同元路径下的节点嵌入以获得最终的节点表示, 从而有效地提升了节点分类效果. 近期的研究 RMR^[34], 创新性地采用保留-掩码-重建机制, 避免了高成本的元路径构建, 通过轻量化的关系子图操作有效捕获节点异质信息, 在保持图拓扑完整性的同时实现了高效的自监督学习. AGS-GNN^[35]提出了属性引导的双通道采样框架, 通过特征相似性与多样性采样策略, 结合次模性优化实现了自适应的子图构建. 然而, 上述异质图神经网络模型都不能有效地学习多层异质网络中节点间的多重信息, 难以直接应用在多层异质网络的节点表征学习中.

- 多层异质图神经网络方法. 现实世界的图通常是多层异质的, 即两个节点之间可能存在多重交互关系, 而一般的异质图神经网络方法一般只考虑节点间的单一关系, 难以直接应用到多层异质网络中. 为了应对这一挑战, 研究者们提出了多层异质图神经网络方法, 将不同类型的节点和多重关系(边)投影到潜在语义特征空间中. 例如, MNE^[36]通过将低层网络嵌入与高层网络嵌入相融合的方法来获得节点表征. GATNE^[35,37]通过在多层异质网络中进行随机游走获得基础节点嵌入、边嵌入以及属性嵌入, 并通过它们获得最终的节点表征. 在互信息最大化方案的推动下, DMGI^[8]被提出作为一种无监督学习方法, 旨在最小化关系感知节点表示之间的差异. 此外, 一些研究者们提出了自动捕获元路径的多层异质图神经网络方法, 例如 FAME^[10]采用谱图变换自动捕获各类元路径, 采用随机投影的方法加速表示学习效率. MHGNN^[23]是一种较新的多层异质图神经网络方法, 它通过自适应学习多层异质网络中各种关系感知的元路径的重要性来获得节点表征. 元路径的本质是一条路径, 它是针对一般异质网络的一种工具, 元路径很大程度上会影响节点表征的学习, 因此直接使用元路径并不容易捕获多层异质网络中各类型节点之间的多重关系特征. BPHGNN^[22]通过构造基础行为模式来替代元路径, 从而有效地利用多层网络结构来学习节点表征.

- 对比学习. 对比学习通过比较正样本对和负样本对来学习数据表征, 其核心思想是对比包含相关性依赖的样本分布与不包含相关性依赖的分布, 并通过测量潜在空间中的损失来优化模型, 对比学习已成为无监督图表示学习和自监督学习的重要组成部分. 例如, DGI^[38]利用信息最大化原理, 将局部补丁和全局摘要构建为正样本对进行对比. GMI^[39]进一步引入节点特征和拓扑结构, 通过对比中心节点及其局部邻域来提升表征学习. DMGI^[8]针对异质网络中每个单一视角, 将原始网络与扰动网络进行对比学习, 并设计共识正则化来引导不同 meta-path 的融合. TopoGCL^[40]则通过引入拓扑不变性与扩展持久性, 从多分辨率层次挖掘图的高阶子结构特征, 解决了传统图对比学习忽略拓扑结构信息的缺陷. 此外, Hassani 等人^[41]提出了一种自监督方法, 通过对比不同结构视图来学习节点级和图级表征, 但该方法未能有效捕捉跨多视图的高阶信息.

不同于已有的多层异质图神经网络方法, 本文提出的面向节点分类的多层异质图神经网络方法可以学习不同类型节点的个性化特征信息, 捕获节点间多重关系及其表征的重要性, 并通过替代品和互补品矩阵捕获高阶全局语义信息, 一定程度上缓解了 GNN 的过平滑问题.

2 相关定义

本节首先介绍本文所涉及的基本概念定义, 然后给出多层异质网络中节点分类问题的形式化描述. 表 1 中包含了本文所使用的符号及其含义.

首先, 本文定义一个基础网络 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, 其中, $\mathcal{V}$ 表示节点集, $\mathcal{E}$ 表示边集, 代表节点间的连接.

定义 1 (异质信息网络). 给定一个图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}; \varphi, \psi; \mathcal{O}, \mathcal{R})$, 其中, $\mathcal{V}$ 表示节点集, $\mathcal{E}$ 表示边集, φ 表示节点类型映射函数, ψ 表示关系类型映射函数, $\mathcal{O}$ 和 $\mathcal{R}$ 分别表示节点类型集和边类型集. 当节点类型数量 $|\mathcal{O}| > 1$ 或边的类型数量 $|\mathcal{R}| > 1$ 时, 称为异质信息网络, 反之称为同质信息网络.

表 1 主要符号及其定义

符号	定义
G	网络图
$\mathcal{V}, \mathcal{E}$	G 节点、边集合
$\mathcal{O}, \mathcal{R}$	G 节点、边类型的集合
$\mathbf{X}$	G 节点属性矩阵
G_r	关系子图
$\mathbf{A}_r$	关系子图 G_r 的邻接矩阵
$\mathbf{A}_S, \mathbf{A}_C$	替代品矩阵、互补品矩阵
$\mathbf{H}_r, \mathbf{H}_{UV}, \mathbf{H}_{SC}, \mathbf{H}_R$	节点的隐藏表征
$\mathbf{H}$	节点嵌入
d	嵌入维度
n, m	节点数量、属性数量
β_r	关系子图 r 表征的可学习权重
$\mathbf{W}^{(l)}, \mathbf{W}_c^{(l)}, \mathbf{W}_s^{(l)}$	第 l 层可学习的权重矩阵

定义 2 (属性多层异质网络). 给定一个图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathbf{X}; \varphi, \psi; \mathcal{O}, \mathcal{R})$, 其中, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 表示节点集 $\mathcal{V}$ 中所有节点的属性集, n 和 m 分别表示节点数量和属性数量. 考虑到节点和边的异质性, 将节点类型和边类型映射函数定义为 $\varphi: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{O}$ 和 $\psi: \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{R}$, 其中, $\mathcal{O}$ 和 $\mathcal{R}$ 分别表示节点类型和边类型的集合, 节点 $i \in \mathcal{V}$ 和边 $e \in \mathcal{E}$ 分别属于 $\mathcal{O}$ 和 $\mathcal{R}$ 中的某一种类型. 此外, 考虑到边的复用性 ($|\mathcal{O}| + |\mathcal{R}| > 2$), 同一对节点对之间可以存在多种类型的边.

• 问题 (属性多层异质网络的节点分类任务). 给定一个属性多层异质网络 G 以及部分节点的类别标签 $\mathbf{Y}$, 本文研究目标是学习一个映射函数 $f: \mathbf{v} \rightarrow h_v$ ($h_v \in \mathbb{R}^d, d \ll |\mathcal{V}|$) 和一个分类器 $C: h_v \rightarrow y_v$ ($y_v \in \mathbf{Y}$), 对于任意一个无标签节点 $v \in \mathcal{V}$, 可学习获得一个最大概率的类别标签 y_v .

3 多层异质图神经网络

本节将详细介绍 MHGNN 方法, 其整体架构如图 1 所示.

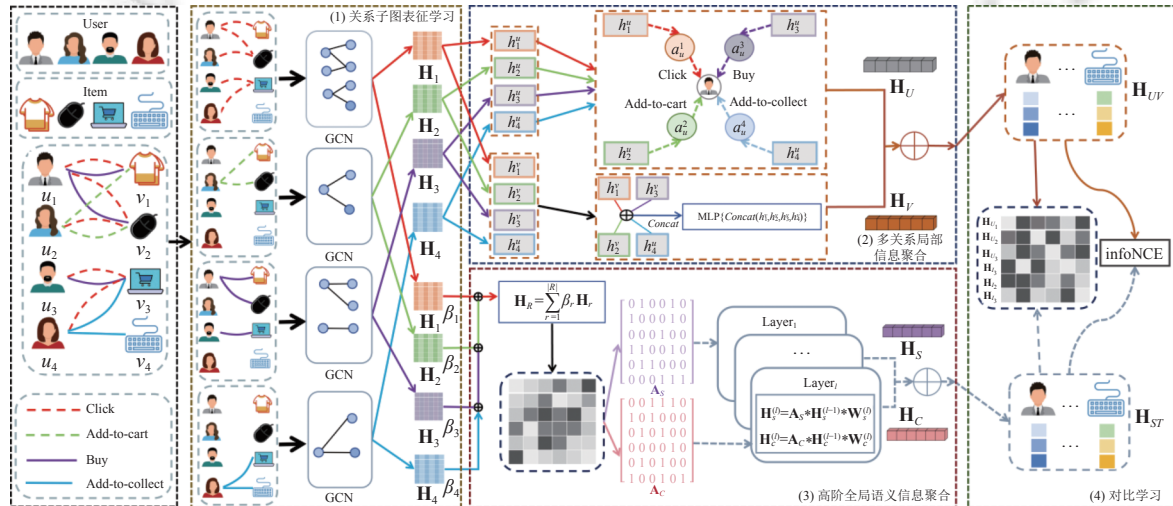


图 1 MHGNN 模型总体框架图

MHGNN 由 4 个关键模块组成: 关系子图表征学习、多关系局部信息聚合、高阶全局语义信息聚合、对比学习. 首先, 根据网络中包含的不同关系, 关系子图表征学习将多层异质图解耦为多个同质和二部图网络, 再通过

GCN 获得每个关系子图下的初始节点表征. 其次, 多关系局部信息聚合显式地探索不同关系下节点表征的重要性并采用差异化的方式有效地融合不同类型节点的表征. 然后, 高阶全局语义信息聚合通过互补品和替代品矩阵, 捕获了不同类型节点之间的高阶全局相似性语义信息, 一定程度上缓解了 GNN 模型的过平滑问题. 最后, 通过对比学习协调局部和全局两个视图中学习到的节点差异性和相似性特征, 聚合获得最终节点表征.

3.1 关系子图表征学习

根据第 2 节中的定义, 属性多层异质网络中存在不同类型的节点和边, 每种类型的边对节点表征有不同的作用和影响. 首先, 模型解耦多层异质图中节点间的不同关系类型生成多个关系子图, 并将生成的子图表示为 $\{G_r | r = 1, 2, \dots, |R|\}$, 与之相应的邻接矩阵表示为 $\{\mathbf{A}_r | r = 1, 2, \dots, |R|\}$. 其次, 模型学习每个关系子图下的节点嵌入表示.

对于第 r 个关系子图 G_r , 通过 GCN 的多层消息传播公式可以获得:

$$\mathbf{H}_r^{(1)} = \sigma(\hat{\mathbf{A}}_r * \mathbf{X} * \mathbf{W}_r^{(1)}) \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_r^{(l)} = \sigma(\hat{\mathbf{A}}_r * \mathbf{H}_r^{(l-1)} * \mathbf{W}_r^{(l)}) \quad (2)$$

其中, $*$ 表示卷积; $\hat{\mathbf{A}}_r = \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}} \times (\mathbf{A}_r + \mathbf{I}_r) \times \mathbf{D}_r^{-\frac{1}{2}}$ 是具有自连接的归一化邻接矩阵, $\mathbf{D}_r \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 表示第 r 种关系下的度矩阵, $\mathbf{I}_r \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 表示单位矩阵; $\mathbf{H}_r^{(l)} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 是第 l 层卷积中第 r 种关系下的节点嵌入, 其中, d 表示嵌入维度; $\mathbf{W}_r^{(l)}$ 和 σ 分别是可训练参数和非线性激活函数. 为了确保局部邻居节点对生成的节点嵌入贡献更大, 模型使用函数 $f(\cdot)$ 来融合所有层的节点嵌入:

$$\mathbf{H}_r = f(\mathbf{H}_r^{(l)}) \quad (3)$$

其中, $l = [0, 1, \dots, L]$, 函数 $f(\cdot)$ 为串联操作. $\mathbf{H}_r = \mathbf{H}_r^U + \mathbf{H}_r^V$, 表示在第 r 种关系下的所有节点嵌入, 由用户嵌入矩阵 $\mathbf{H}_r^U$ 和商品嵌入矩阵 $\mathbf{H}_r^V$ 组成.

3.2 多关系局部信息聚合

通过显式地探索不同关系下节点表征的重要性, 并采用差异化的方式融合这些表征, 模型能够充分捕获多层异质网络中不同交互关系的差异性特征. 模型将不同类型的节点表征做区分处理, 因为不同类型的节点的特征本质上是不同的. 通过个性化特征区分不同类型的节点并分别学习它们的节点表征, 可以更好地捕获这些节点的特征信息, 从而提升节点分类任务的性能.

首先, 以电子商务网络为例, 设用户 u 在关系 r 下的语义融合系数为 a_u^r , 其中不仅需要考虑用户 u 的第 r 个关系在所有关系中所占的比例, 还需要考虑不同关系的重要性, 如下所示:

$$a_u^r = \frac{\exp(w_m \times n_u^r)}{\sum_{m=1}^R \exp(w_m \times n_u^m)} \quad (4)$$

其中, w_m 是关系 r 的强度权重, 这对于所有用户来说是相同的, 模型可以自适应地学习; n_u^r 表示用户 u 在关系 r 下的关联次数.

根据已经得到的关系 r 下的嵌入矩阵 $\mathbf{H}_r^U$ 和 $\mathbf{H}_r^V$, 用户 u 和商品 v 的嵌入分别表示为 h_u^r 和 h_v^r , 随后将合并所有关系下的节点表征. 对用户 u 而言, 利用第 r 个关系的语义融合系数 a_u^r , 模型可以自适应地融合不同交互关系产生的差异性特征, 生成用户 u 的最终节点表征:

$$h_u^{(l)} = \sigma \left\{ \mathbf{W}^{(l)} \left(\sum_{r=1}^R a_u^r \times h_{u,r}^{(l-1)} \right) + b^{(l)} \right\} \quad (5)$$

其中, $\mathbf{W}^{(l)}$ 和 $b^{(l)}$ 是神经网络的权重和偏置, $h_{u,r}^{(0)} = h_u^r$.

然而, 商品在多种关系下的融合与用户不同, 由于商品的特征是静态的, 因此可以采用串联操作将商品 v 在不同关系下的表示组合起来:

$$h_v^{(l)} = g \left\{ \text{Concat} \left(h_{v,r}^{(l-1)} \right) \right\} \quad (6)$$

其中, $r = [1, 2, \dots, R]$, $h_{v,r}^{(0)} = h_r^v$, $g(\cdot)$ 是多层感知器 (multi-layer perceptron, MLP), *Concat* 表示向量之间的串联操作. 通过简单直观的串联操作, 可以使商品节点包含不同关系下的综合信息, 从而有效地融合商品节点在不同关系下的表征, 获得更加丰富的商品表征.

最后将用户表征 $h_u^{(l)}$ 和商品表征 $h_v^{(l)}$ 进行串联, 得到融合后的节点表征 $\mathbf{H}_{uv}^{(l)} = \text{Concat}(h_u^{(l)}, h_v^{(l)})$, 将图卷积最后一层 $\mathbf{H}_{uv}^{(l)} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 的输出作为最终的节点表征 $\mathbf{H}_{UV}$.

3.3 高阶全局语义信息聚合

本文基于微观经济学中替代品和互补品的概念, 引入了一种替代品和互补品关系, 通过构建替代品和互补品矩阵来表达节点之间在不同关系下的替代和互补关系语义. 以电子商务网络为例, 在点击关系下, 用户通常进行商品的横向比较, 考虑商品之间的替代关系, 例如不同品牌电脑之间的替代品语义. 而在添加到购物车或购买关系下, 用户更关注商品的互补关系, 例如电脑与配件如鼠标、键盘之间的互补品语义. 此外, 这种替代品和互补品的语义关系不仅局限于电子商务网络, 也适用于其他普通的异质网络, 例如在引文网络中, 文献间也有着替代品和互补品语义, 研究者通常会引用与其研究主题相似的文献作为替代品, 同时引用补充性的文献作为互补品, 从而丰富和扩展文献的视角. 本文将原本网络拓扑中需要多跳连接才能捕获的高阶信息, 现在通过构建替代品和互补品矩阵直接建立了联系, 再通过 GCN 进行信息传播, 能够有效捕获不同关系下节点间的全局相似性信息. 即使两个节点在网络拓扑中相距很远, 如果它们具有相似的属性特征, 那么它们在高阶全局语义信息聚合中的联系就越强.

首先, 将得到的各个关系子图表征 $\mathbf{H}_r$ 进行加权求和得到融合后的多关系图表征 $\mathbf{H}_R$:

$$\mathbf{H}_R = \sum_{r=1}^{|R|} \beta_r \times \mathbf{H}_r \quad (7)$$

其中, 权重 β_r 表示各关系子图表征的重要性, 权重集 $\{\beta_r | r = 1, 2, \dots, |R|\}$ 设置为可训练参数.

其次, 通过得到的表征矩阵 $\mathbf{H}_R$ 计算节点间的相似度, 从而构造替代品矩阵 $\mathbf{A}_S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 和互补品矩阵 $\mathbf{A}_C \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 如下所示:

$$\mathbf{A}_S = \begin{cases} 1, & \cos_sim \geq \delta \\ 0, & \cos_sim < \delta \end{cases} \quad (8)$$

$$\mathbf{A}_C = \begin{cases} 1, & \alpha_1 \leq \cos_sim \leq \alpha_2 \\ 0, & \cos_sim < \alpha_1 \text{ or } \cos_sim > \alpha_2 \end{cases} \quad (9)$$

其中, $\cos_sim$ 表示基于余弦相似度计算的节点相似度, 其数值越大代表节点间的相似度越高; δ 、 α_1 、 α_2 表示相似度阈值.

通过对真实数据集的观察, 发现在替代关系下, 节点之间的相似性通常较高, 因此, 本文利用公式 (8) 构建了替代品矩阵 $\mathbf{A}_S$, 其中, 当 $\cos_sim \geq \delta$ 时, 相应的元素值设为 1, 表示节点间存在替代关系; 反之设为 0. 而在互补关系下, 节点间的相似度则通常处于一定的区间内, 既不会非常高也不会非常低. 因此, 本文利用公式 (9) 构建了互补品矩阵 $\mathbf{A}_C$, 其中, 当 $\alpha_1 \leq \cos_sim \leq \alpha_2$ 时, 相应的元素值设为 1, 表示节点间存在互补关系; 反之设为 0.

然后, 将 $\mathbf{A}_S$ 和 $\mathbf{A}_C$ 矩阵输入到 GCN 中进行卷积运算, 以矩阵 $\mathbf{A}_C$ 为例, 卷积运算采用简化 GCN^[11] 的思想, 即不使用非线性激活函数:

$$\mathbf{H}_c^{(1)} = \mathbf{A}_C * \mathbf{X} * \mathbf{W}_c^{(1)} \quad (10)$$

其中, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 是节点属性矩阵, $\mathbf{W}_c^{(1)} \in \mathbb{R}^{m \times d}$ 是可学习的权重, $\mathbf{H}_c^{(1)}$ 表示商品间互补品关系嵌入矩阵. 为了捕获深层次的全局语义信息, 可将其扩展到 l 层:

$$\mathbf{H}_c^{(l)} = \mathbf{A}_C * \mathbf{H}_c^{(l-1)} * \mathbf{W}_c^{(l)} \quad (11)$$

然后融合所有信息传播层的输出, 获得融合后的高阶全局语义信息节点表征 $\mathbf{H}_C \in \mathbb{R}^{n \times d}$:

$$\mathbf{H}_C = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbf{H}_c^{(i)} \quad (12)$$

类似地, 可以获得替代品关系表征 $\mathbf{H}_s = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbf{H}_s^{(i)} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbf{A}_s * \mathbf{X} * \mathbf{W}_s^{(i)}$. 最后将互补品关系表征矩阵 $\mathbf{H}_c$ 和替代品关系表征矩阵 $\mathbf{H}_s$ 进行串联, 得到融合后的节点表征 $\mathbf{H}_{sc} = \text{Concat}(\mathbf{H}_s, \mathbf{H}_c)$.

3.4 对比学习

对比学习在各种图学习任务中展示了其优越性. 受此启发, 本文使用对比学习协调局部和全局两个视图中学到的差异性特征和相似性特征, 来增强模型的表征学习能力, 从而最大限度地提高跨不同视图学习的节点表示的一致性, 捕获节点之间的复杂关系, 从而得到更有效的节点嵌入, 提高节点分类任务的效果.

对比学习模块中, 在不同视图将相同节点的表征视为正样本对, 不同节点的表征视为负样本对. 对差异性和相似性视图节点表征 $\mathbf{H}_{uv}$ 和 $\mathbf{H}_{sc}$ 使用 InfoNCE^[42] 得到下面的跨视图对比损失:

$$\mathcal{L}_{cl} = - \sum_{i \in V} \log \frac{\exp(s(\mathbf{H}_{uv,i}, \mathbf{H}_{sc,i})/\tau)}{\sum_{j \in V} \exp(s(\mathbf{H}_{uv,j}, \mathbf{H}_{sc,j})/\tau)} \quad (13)$$

其中, $\mathbf{H}_{uv,i}$ 和 $\mathbf{H}_{sc,i}$ 表示第 i 个节点差异性节点表征和相似性节点表征; $s(\cdot, \cdot)$ 表示余弦相似度函数; τ 是可调节的温度系数超参数, 用于调整 Softmax 的尺度. 对比学习使得局部和全局两个视图相互协作监督, 从而增强节点表征学习. 最后, 模型聚合多关系局部信息和高阶全局语义信息, 通过平均池化操作获得最终的节点表示 $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times d}$:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}_{uv} + \mathbf{H}_{sc}) \quad (14)$$

这种加权方法能简单有效地平衡不同关系的重要性, 增强模型对节点特征的表达能力, 同时保持对全局语义信息的敏感性, 从而使节点表示更具鲁棒性.

3.5 模型学习

根据节点分类任务的特点和要求, 本文采用半监督的学习范式来训练 MHGNN, 使用反向传播和梯度下降通过最小化交叉熵损失来优化模型参数.

$$\mathcal{L}_{nc} = - \sum_{i \in V_{ids}} Y_i \times \ln(C \times \mathbf{H}_i) \quad (15)$$

其中, V_{ids} 是具有标签的节点索引集, Y_i 是第 i 个节点的标签, C 是节点分类器参数. 模型在标签信息的指引下基于反向传播和梯度下降训练模型中的参数, 最终得到网络中的节点表征并预测节点标签.

最后, 将半监督学习损失与对比学习损失相结合, 共同优化模型:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{nc} + \gamma \times \mathcal{L}_{cl} \quad (16)$$

其中, γ 是用于调整对比学习重要性的超参数. MHGNN 框架的具体算法如算法 1 所示.

算法 1. MHGNN 框架.

输入: 图 G , 特征矩阵 $\mathbf{X}$, 嵌入维度 d , 卷积层数 l ;

输出: 节点嵌入 $\mathbf{H}$. /*用于下游的节点分类任务*/

1. 将属性多层异质网络解耦为同质网络和二部网络, 得到邻接矩阵 $\{\mathbf{A}_r | r = 1, 2, \dots, |R|\}$
 2. 学习各个子图下的节点表征: $\mathbf{H}_r^{(0)} = \sigma(\hat{\mathbf{A}}_r * \mathbf{H}_r^{(l-1)} * \mathbf{W}_r^{(0)})$
 3. $\mathbf{H}_r = f(\mathbf{H}_r^{(0)})$ ($\mathbf{H}_r$ 由用户嵌入矩阵 $\mathbf{H}_r^u$ 和商品嵌入矩阵 $\mathbf{H}_r^v$ 组成) /* f 表示串联操作 */
 4. 使用公式 (4) 计算语义融合系数 a_u^r
 5. for $i = 1$ to l do
 6. 使用公式 (5)、公式 (6) 分别计算 $h_u^{(i)}$ 和 $h_v^{(i)}$
 7. end for
 8. $\mathbf{H}_{uv} = f(h_u^{(l)}, h_v^{(l)})$ /*串联操作*/
-

9. 使用公式 (7) 计算新的组合表征 $\mathbf{H}_r$
10. 使用公式 (8)、公式 (9) 分别构建替代品矩阵 $\mathbf{A}_s$ 和互补品矩阵 $\mathbf{A}_c$
11. for $i = 1$ to l do
12. 计算 $\mathbf{H}_c^{(i)} = \mathbf{A}_c * \mathbf{H}_c^{(i-1)} * \mathbf{W}_c^{(i)}$ /*同理 $\mathbf{H}_s^{(i)}$ */
13. end for
14. $\mathbf{H}_c = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \mathbf{H}_c^{(i)}$ /*同理 $\mathbf{H}_s$ */
15. $\mathbf{H}_{sc} = f(\mathbf{H}_s, \mathbf{H}_c)$ /*串联操作*/
16. 使用公式 (13) 计算 $\mathcal{L}_{cl}$
17. $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{H}_{uv} + \mathbf{H}_{sc})$
18. 反向传播和梯度下降训练模型参数
19. Return $\mathbf{H}$ /*得到网络的节点表示并预测出其标签*/
20. 输出

4 实 验

4.1 数据集

本文在实验评估中使用了 6 个公开的真实数据集, 包括 3 个普通异质网络数据集和 3 个多层异质网络数据集, 数据集的数据特征如表 2 所示. 下面具体介绍这 6 个数据集.

表 2 数据集统计

数据集	节点数量	边数量	节点类型数	边类型数	特征数量	多层网络
DBLP	7305	19816	3	4	334	×
AMiner	58068	118939	3	3	4	×
IMDB	12772	18644	3	2	1256	×
Taobao	21318	41676	2	4	19	√
Alibaba	15218	27036	2	3	—	√
Alibaba-L	22649	45734	2	3	18	√

(1) DBLP^[43]. 包含 4328 篇论文 (P)、2957 位作者 (A) 和 20 个会议 (C), 其中, 作者分为 4 个领域: 数据库、数据挖掘、机器学习和信息检索, 节点特征分别是与论文、作者和会议相关的术语. 本文使用作者标签作为节点分类中的类标签.

(2) AMiner^[23]. 引文网络, 包含 3 类节点: 作者、论文和会议. 本文使用论文的领域标签作为节点分类中的类标签.

(3) IMDB^[30]. 包含 3 种类型的节点: 电影、演员和导演. 本文使用电影的类型标签作为节点分类中的类标签.

(4) Taobao^[23]. 包括用户和商品节点之间的 4 种关系 (即购买、点击、添加到收藏夹和添加到购物车). 本文使用商品的标签作为节点分类中的类标签.

(5) Alibaba^[6]. 包含用户和商品节点之间 3 种类型的边 (点击、查询、购买). 本文使用商品的标签作为节点分类中的类标签.

(6) Alibaba-L^[6]. 包括用户和商品节点之间的 3 种类型的边 (点击、查询、购买), 该数据集是 Alibaba 数据集的扩充版. Alibaba-L 中用户具有国家、性别和搜索日志等属性, 商品具有类别、价格、搜索次数、访问次数、购买日志等属性, 相比于 Alibaba 数据集包括更多数量的节点和边. 本文使用商品标签作为节点分类中的类标签.

4.2 基线方法

本文将 MHGNN 与以下 16 个图表示学习基线进行比较. 这些基线主要分为 3 类.

(1) 同质网络嵌入方法

- node2vec^[2]: 一种网络嵌入方法, 通过采样有偏随机游走来学习节点表征.
- RandNE^[34]: 一种基于高斯随机投影的网络嵌入方法, 保留了节点之间的高阶邻近度.
- FastRP^[44]: 使用稀疏随机投影的 RandNE 扩展.
- SGC^[28]: GCN 的简化版本, 它只使用高阶邻接矩阵和属性矩阵的乘积, 没有非线性变换.
- AM-GCN^[29]: 同时考虑拓扑空间和特征空间中的特征聚合, 并通过注意力机制将它们融合.

(2) 异质网络嵌入方法

- R-GCN^[45]: 考虑了不同边类型对节点的影响, 并使用权重共享和系数约束.
- MAGNN^[32]: 通过使用预定义的元路径, 利用元路径内和元路径间信息聚合来获取最终的节点表征.
- GTN^[30]: 可以自适应地学习各种元路径的重要性, 而不需要手动设置元路径.
- HGTM^[46]: 利用不同类型节点和超边之间的信息传递能力来学习高阶语义信息.
- SR-RSC^[47]: 针对属性异质网络图表征学习, 打破了当前图表征研究中预设元路径和非全局节点学习的限制.

(3) 多层异质网络嵌入方法

- MNE^[34]: 通过结合高维公共嵌入和低维分层嵌入获得最终节点嵌入.
- GATNE^[35]: 通过在每种类型的边上随机游走来学习基本节点嵌入、边嵌入和属性嵌入, 然后使用它们来获得最终的节点嵌入.
- DMGI^[8]: 通过最大化每个关系中局部和全局信息之间的互信息来学习多重异质网络中节点的特征表示.
- FAME^[13]: 一种基于随机投影的 AMHEN 网络嵌入, 使用谱图变换来捕获元路径, 并通过随机投影显著提高效率.
- DualHGNN^[6]: 通过超图卷积实现了多重二部网络中节点表征学习.
- MHGCN^[23]: 通过自适应学习多重异质图网络中各种元路径的重要性来获取节点表征.
- BPHGNN^[22]: 一种较新的多重异质图神经网络方法, 通过构造基础行为模式来代替元路径, 从而更有效地利用多重网络结构来学习节点表征.

4.3 实验设置与评估指标

本文基于 PyTorch 框架实现 MHGNN, 每个实验都重复 10 次并取平均值作为最后实验结果. 在 MHGNN 中 GCN 信息聚合层数设置为 2, 超参数 τ 设置为 0.1, 并在 {0.01, 0.05, 0.001, 0.005, 0.0001, 0.0005} 中调整学习率大小, 对比学习中的超参数 γ 设置为 0.01, 20% 的数据作为训练集, 40% 作为验证集, 40% 作为测试集. 所有基线方法在实验中都使用他们发布的源代码和论文中推荐的参数, 以确保达到预期的效果.

Micro-F1 和 Macro-F1 是分类问题中常见且重要的评价指标, 主要基于混淆矩阵计算查准率和查全率, 然后分别通过微平均和宏平均的方式综合考虑分类结果, 本文选用 Micro-F1 和 Macro-F1 作为节点分类任务的评价指标.

4.4 实验结果分析

本文首先分析所提出的 MHGNN 模型和基线方法在节点分类任务上的评估结果, 如表 3 和表 4 所示, 其中, 最好的结果用粗体标注, 次好的结果用下划线标注. 表 3 展示的是所有方法在多层异质网络数据集上的评估结果, 表 4 展示的是所有方法在普通异质网络数据集上的评估结果. 两个表格中分割线的上半部分列举的是无监督的节点分类方法, 下半部分是半监督的节点分类方法.

根据实验结果所示, MHGNN 在 Macro-F1 和 Micro-F1 指标上均显著优于基线方法, MHGNN 在 6 个数据集上的 Macro-F1 和 Micro-F1 指标分别取得了 3.57% 和 5% 的平均提升, 其中, 在 3 个多层异质网络上的 Macro-F1

和 Micro-*F1* 指标分别取得了 2.51% 和 5.13% 的平均提升. 需要强调的是, 在 Taobao 的数据集上, 与 2023 年提出的 KDD 的基线方法 BPHGNN 相比, 模型在 Macro-*F1* 和 Micro-*F1* 指标上的平均提升分别达到了 3.60% 和 8.95%.

表 3 不同方法在 3 个多层异质网络数据集上的节点分类性能比较数据

方法	Taobao		Alibaba-L		Alibaba	
	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>
node2vec	0.2387	0.3347	0.3098	0.3378	0.2356	0.2432
RandNE	0.2972	0.3481	0.3031	0.3492	0.3114	0.2987
R-GCN	0.2653	0.3781	0.3332	0.3535	0.2728	0.2834
FastRP	0.2916	0.3822	0.3263	0.3517	0.3012	0.3208
DMGI	0.3091	0.3962	0.3135	0.3233	0.2514	0.2787
MNE	0.2899	0.3957	0.3424	0.4295	0.2528	0.2834
GATNE	0.2891	0.3964	0.3493	0.3834	0.2701	0.3008
DualHGNN	0.3155	0.4016	0.4323	0.4632	0.3400	0.3433
FAME	0.3128	0.4036	0.3607	0.4535	0.2422	0.2677
GTN	0.2796	0.3862	0.3694	0.4527	0.4226	0.4567
SGC	0.2786	0.3661	0.3243	0.3835	0.2528	0.2674
AM-GCN	0.2937	0.3499	0.3281	0.3364	0.4278	0.4756
HGTN	0.3182	0.4023	0.3811	0.4821	0.3936	0.4522
MHGNN	0.3163	0.4133	0.4121	0.4936	0.4269	0.4711
MAGNN	0.3058	0.3556	0.3454	0.3851	0.4056	0.4439
SR-RSC	0.2947	0.3965	0.3625	0.4533	0.4133	0.4328
BPHGNN	<u>0.3198</u>	<u>0.4201</u>	<u>0.4531</u>	<u>0.5098</u>	<u>0.4827</u>	<u>0.5213</u>
MHGNN	0.3313	0.4577	0.4621	0.5189	0.4920	0.5455

表 4 不同方法在 3 个普通异质网络数据集上的节点分类性能比较数据

方法	AMiner		IMDB		DBLP	
	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>	Macro- <i>F1</i>	Micro- <i>F1</i>
node2vec	0.5221	0.5322	0.3613	0.3822	0.8681	0.8794
RandNE	0.6412	0.6723	0.3737	0.3923	0.8375	0.8523
R-GCN	0.6651	0.6872	0.5442	0.5712	0.8212	0.8319
FastRP	0.6501	0.6903	0.3631	0.3818	0.8413	0.8433
DMGI	0.4722	0.6232	0.5486	0.5442	0.8305	0.8409
GATNE	OOT	OOT	0.3691	0.3334	0.8332	0.8394
MNE	0.6431	0.6867	0.3746	0.3822	0.8561	0.8607
FAME	0.7224	0.7282	0.5931	0.5942	0.8901	0.8932
SGC	0.5161	0.5853	0.4893	0.5632	0.8517	0.8543
AM-GCN	0.7012	0.7113	0.6101	0.6402	0.8558	0.8636
MAGNN	<u>0.7513</u>	0.7503	0.6143	0.6157	0.8721	0.8837
HGTN	0.6824	0.6955	0.6348	0.6339	0.8624	0.8732
SR-RSC	0.7031	0.7402	0.6293	0.6305	0.8896	<u>0.9031</u>
BPHGNN	0.7412	<u>0.7511</u>	<u>0.7131</u>	<u>0.7310</u>	<u>0.8905</u>	0.8993
MHGNN	0.7720	0.7821	0.7691	0.7889	0.9125	0.9178

模型取得性能提升的主要原因有: 首先, 从总体而言, MHGNN 对不同类型节点的表征采用不同的学习方式, 显式地探索不同关系下的节点表征的重要性并有效地融合这些表征, 从而能够充分地捕获多层异质网络中复杂的交互关系. 其次, 从最新的基线方法对比而言, BPHGNN 先学习不同关系的重要性再融合得到单一的节点表征, 这忽视了不同关系下的节点表征的重要性, 而 MHGNN 能够显式地探索进行更有效的融合节点表征. 最后, 从具体的数据集而言, Taobao 数据集中边的种类更丰富, 包含 4 种关系的边, MHGNN 可以有效地融合不同关系下各类节点的表征, 得到更好的节点嵌入, 从而大幅度提升了节点分类的效果.

根据表4中的实验结果, MHGNN 不仅在多层异质网络中表现优异, 在具有多类型节点 (即 IMDB、DBLP 和 AMiner) 的普通异质网络上也显著优于基线方法, 在 3 个数据集上的 Macro-F1 和 Micro-F1 指标分别取得了 4.52% 和 4.87% 的平均提升, 其中, 在 IMDB 数据集上的 Macro-F1 和 Micro-F1 指标上分别取得了 7.85% 和 8.98% 的最大提升. 这些普通异质网络数据集不包含多层异质结构, 但 MHGNN 依然可以取得最好的效果, 这是因为: 第一, MHGNN 针对不同类型的节点选择了不同的表征学习方式, 例如: 对 IMDB 数据集而言, MHGNN 将作者类型的节点进行多关系表征聚合, 而对论文和地点类型的节点采用了串联操作进行聚合; 第二, MHGNN 利用包含全局相似性特征的替代品和互补品矩阵, 更好地捕获了各类型节点之间的高阶全局语义信息, 这对于节点分类任务非常重要, 但被以前大部分的异质网络表征方法忽略了.

值得注意的是, 本文聚焦于多层异质图上的节点分类任务. 我们提出的 MHGNN 模型不仅对多种类型的关系子图进行建模, 还从局部和全局视角捕捉用户偏好, 学习不同关系的重要性. 此外, 模型融合了商品之间的互补与替代关系, 从而生成鲁棒且高质量的节点表征. 这些表征不仅适用于节点分类任务, 还能应用于链路预测和推荐任务, 有效捕捉多层异质图中的复杂交互关系, 发挥 MHGNN 在多种图任务上的泛化能力.

4.5 消融分析

为了验证模型每个模块的有效性, 本文设置了 MHGNN 的 3 种变体模型进行实验, 分别是: MHGNN-D 删除了多关系局部信息聚合, MHGNN-S 删除了高阶全局语义信息聚合, MHGNN-C 删除了对比学习, 并直接对 $\mathbf{H}_{UV}$ 、 $\mathbf{H}_{SC}$ 表征执行平均池化以获得最终的节点表示. 图2展示了在 4 个数据集上的节点分类实验评估结果, 其中, 两个多层异质网络数据集 (Taobao、Alibaba) 使用右纵坐标轴, 两个普通异质网络数据集 (DBLP、IMDB) 使用左纵坐标轴.

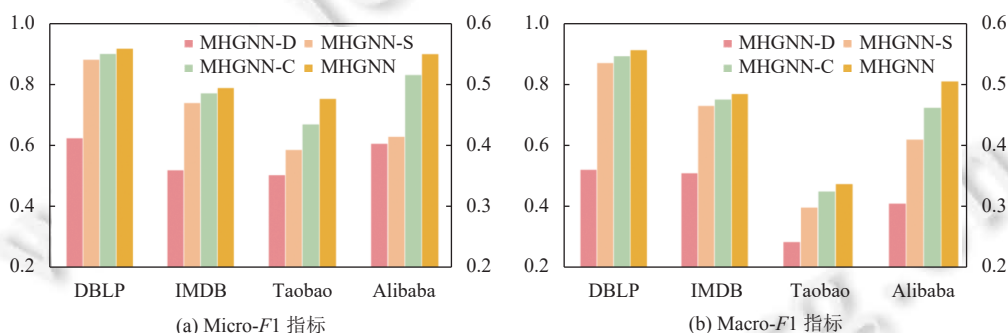


图2 4 个数据集上的消融实验结果

根据消融实验结果, 我们可以得出以下结论.

(1) MHGNN-S 删除了高阶全局语义信息聚合, 模型性能下降, 这是因为替代品和互补品矩阵可以捕获节点间的全局相似性特征, 从而有效补充了高阶全局语义信息, 提升了节点分类的性能. MHGNN-D 删除了多关系局部信息聚合, 模型性能显著下降, 这是因为局部信息表征是节点嵌入的本质, 因此有效地融合不同关系下各类型节点的局部信息表征对是否能学习到更加准确的节点表征影响很大, 这在节点分类中起着非常重要的作用.

(2) MHGNN-C 删除了对比学习, 模型性能下降, 这表明对比学习模块可以有效协调模型中局部和全局两个视图的节点表示学习, 从而提高节点分类性能.

(3) 完整的消融实验评估结果验证了每个模块的有效性, 其中, 多关系局部信息聚合是模型中最重要的模块, 它对节点表征学习的影响也是最大的, 其他的两个模块也对节点表征学习有着重要的影响.

4.6 多层异质网络有效性研究

为了进一步验证 MHGNN 在多层异质网络上的有效性, 本文在多层异质网络数据集 Taobao 上变化不同类型边的数量进行进一步的实验, 并将 MHGNN 与最新的几个基线方法进行了比较. 实验中首先保留一种关系 (购买

关系) 来进行节点分类任务, 然后逐渐增加网络中不同类型的边并进行相同的实验 (按照添加到收藏、添加到购物车、点击的顺序).

如图 3 所示, 在保留 Taobao 数据集上的同类型边的情况下, MHGNN 在 Micro-F1 指标上相较于其他基线取得了更好的结果, 而随着边类型的增加, 模型的性能也持续提高, 这表明 MHGNN 可以有效地捕获和融合不同关系下各类型节点的表征, 来帮助提升节点分类的性能. 此外, 与其他多层异质网络表征方法相比, MHGNN 通过替代品和互补品矩阵学习到的高阶全局语义信息也进一步提高了模型的性能.

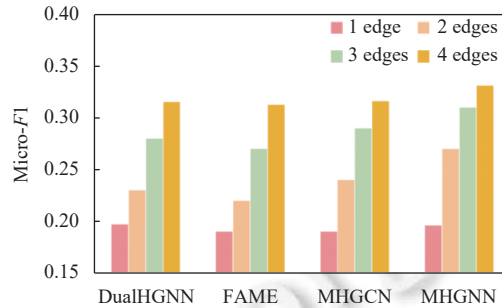


图 3 Taobao 数据集上的节点分类实验结果

4.7 参数敏感性分析

本文研究了 MHGNN 的重要参数, 包括 GCN 信息聚合层数 L 、表征嵌入维度 d 和对比学习协调视图参数 γ . 图 4 展示了 4 个数据集上不同参数设置下的节点分类任务 Macro-F1 指标的评估结果, 其中, 两个多层异质网络数据集 (Taobao、Alibaba) 使用的是右纵坐标轴, 两个普通异质网络数据集 (IMDB、DBLP) 使用的是左纵坐标轴.

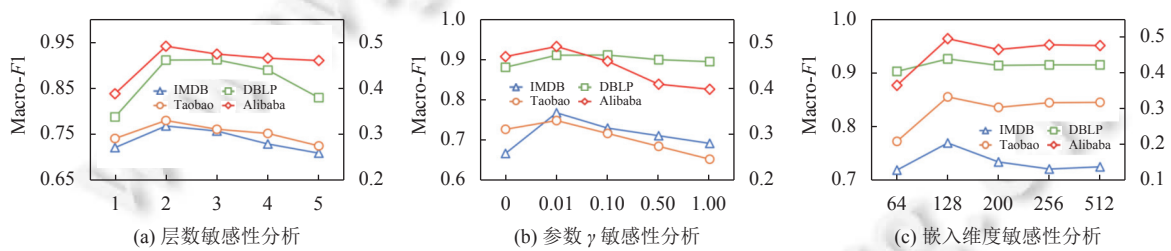


图 4 方法的参数敏感性分析

- 层数 L . 如图 4(a) 所示, MHGNN 的性能随着层数的增加而提高. 当层数超过 2 层时, 模型性能逐步下降, 在 DBLP 数据集上的性能下降尤其明显. 需要强调的是, 本文目的并不是解决 GNN 模型的过平滑问题, 而是提供一种缓解过平滑的方法, 即使层数设置很小 (设置为 2), MHGNN 还可以通过学习全局信息来提高模型节点分类的性能.

- 嵌入维度 d . 如图 4(b) 所示, 随着维度 d 的增加 MHGNN 的性能逐渐上升然后略有下降, 当节点嵌入维度 $d = 128$ 时达到最佳性能. 当 d 较小时, 所有节点的特征被压缩成一个较小的嵌入空间, 因此很难保留节点间的特征相似度. 反之, 较大的维度也会使所有节点嵌入变得扁平, 导致难以区分不同类型的节点.

- 对比学习参数 γ . 根据图 4(c) 展示的实验结果不难发现, 当 γ 落在 0.01 附近时, 模型几乎在所有数据集上都取得了最佳性能. 当 γ 从 0 增加到 0.01 时, 模型在所有数据集上的性能均有所提升, 这表明对比学习可以有效协调模型中两个视图的节点表示学习, 从而提高节点分类性能.

5 总结

本文提出了一种面向节点分类的多层异质图神经网络 MHGNN, 主要由 4 个部分组成: 关系子图表征学习、

多关系局部信息聚合、高阶全局语义信息聚合和对比学习. MHGNN 学习节点在不同关系下的局部信息初始表征, 再显式地探索不同关系下的表征的重要性, 并采用差异化的方式有效地融合不同类型节点的表征, 从而捕获了不同关系下的交互信息. 此外, MHGNN 利用替代品和互补品矩阵来捕获不同关系下的高阶全局语义信息. 最后, 通过对比学习协调局部和全局两个视图的节点表征学习, 从而提高节点分类的性能. 在 6 个真实数据集上的实验结果验证了所提出的 MHGNN 在节点分类任务上的优越性.

References

- [1] Chen HX, Yin HZ, Wang WQ, Wang H, Nguyen QVH, Li X. PME: Projected metric embedding on heterogeneous networks for link prediction. In: Proc. of the 24th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. London: ACM, 2018. 1177–1186. [doi: 10.1145/3219819.3219986]
- [2] Grover A, Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks. In: Proc. of the 22nd ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco: ACM, 2016. 855–864. [doi: 10.1145/2939672.2939754]
- [3] Fan HY, Zhang FB, Wei YX, Li ZY, Zou CQ, Gao Y, Dai QH. Heterogeneous hypergraph variational autoencoder for link prediction. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, 44(8): 4125–4138. [doi: 10.1109/TPAMI.2021.3059313]
- [4] Jing BY, Park C, Tong HH. HDML: High-order deep multiplex infomax. In: Proc. of the 2021 Web Conf. Ljubljana: ACM, 2021. 2414–2424. [doi: 10.1145/3442381.3449971]
- [5] Xia LH, Huang C, Xu Y, Zhao JS, Yin DW, Huang J. Hypergraph contrastive collaborative filtering. In: Proc. of the 45th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Madrid ACM, 2022. 70–79. [doi: 10.1145/3477495.3532058]
- [6] Xue HS, Yang LW, Rajan V, Jiang W, Wei Y, Lin Y. Multiplex bipartite network embedding using dual hypergraph convolutional networks. In: Proc. of the 2021 Web Conf. Ljubljana: ACM, 2021. 1649–1660. [doi: 10.1145/3442381.3449954]
- [7] Ji HY, Wang X, Shi C, Wang B, Yu P. Heterogeneous graph propagation network. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(1): 521–532. [doi: 10.1109/TKDE.2021.3079239]
- [8] Park C, Kim D, Han JW, Yu H. Unsupervised attributed multiplex network embedding. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI Press, 2020. 5371–5378. [doi: 10.1609/aaai.v34i04.5985]
- [9] 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]
- [10] Xia LH, Xu Y, Huang C, Dai P, Bo LF. Graph meta network for multi-behavior recommendation. In: Proc. of the 44th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. ACM, 2021. 757–766. [doi: 10.1145/3404835.3462972]
- [11] Wu F, Souza A, Zhang TY, Fifty C, Yu T, Weinberger K. Simplifying graph convolutional networks. In: Proc. of the 36th Int'l Conf. on Machine Learning. 2019. 6861–6871.
- [12] He L, Chen HX, Wang DX, Jameel S, Yu P, Xu GD. Click-through rate prediction with multi-modal hypergraphs. In: Proc. of the 30th ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. ACM, 2021. 690–699. [doi: 10.1145/3459637.3482327]
- [13] Liu ZJ, Huang C, Yu YW, Fan BD, Dong JY. Fast attributed multiplex heterogeneous network embedding. In: Proc. of the 29th ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. ACM, 2020. 995–1004. [doi: 10.1145/3340531.3411944]
- [14] Ying R, He RN, Chen KF, Eksombatchai P, Hamilton WL, Leskovec J. Graph convolutional neural networks for Web-scale recommender systems. In: Proc. of the 24th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. London: ACM, 2018. 974–983. [doi: 10.1145/3219819.3219890]
- [15] He XN, Deng K, Wang X, Li Y, Zhang YD, Wang M. LightGCN: Simplifying and powering graph convolution network for recommendation. In: Proc. of the 43rd Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. ACM, 2020. 639–648. [doi: 10.1145/3397271.3401063]
- [16] Li WZ, Huang L, Wang CD, Ye YX. StarGAT: Star-shaped hierarchical graph attentional network for heterogeneous network representation learning. In: Proc. of the 2021 IEEE Int'l Conf. on Data Mining (ICDM). Auckland: IEEE, 2021. 1198–1203. [doi: 10.1109/ICDM51629.2021.00144]
- [17] Tang J, Qu M, Wang MZ, Yan J, Mei QZ. LINE: Large-scale information network embedding. In: Proc. of the 24th Int'l Conf. on World Wide Web. Florence: ACM, 2015. 1067–1077. [doi: 10.1145/2736277.2741093]
- [18] Shi C, Wang RJ, Wang X. Survey on heterogeneous information networks analysis and applications. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2022, 33(2): 598–621 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6357.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006357]
- [19] Chen L, Wu L, Hong RC, Zhang K, Wang M. Revisiting graph based collaborative filtering: A linear residual graph convolutional

- network approach. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: ACM, 2020. 27–34. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5330](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5330)]
- [20] Rao X, Chen LS, Liu Y, Shang S, Yao B, Han P. Graph-flashback network for next location recommendation. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 1463–1471. [doi: [10.1145/3534678.3539383](https://doi.org/10.1145/3534678.3539383)]
- [21] Zhang WF, Mao JW, Cao Y, Xu CF. Multiplex graph neural networks for multi-behavior recommendation. In: Proc. of the 29th ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. ACM, 2020. 2313–2316. [doi: [10.1145/3340531.3412119](https://doi.org/10.1145/3340531.3412119)]
- [22] Fu CF, Zheng GJ, Huang C, Yu YW, Dong JY. Multiplex heterogeneous graph neural network with behavior pattern modeling. In: Proc. of the 29th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Long Beach: ACM, 2023. 482–494. [doi: [10.1145/3580305.3599441](https://doi.org/10.1145/3580305.3599441)]
- [23] Yu PY, Fu CF, Yu YW, Huang C, Zhao ZY, Dong JY. Multiplex heterogeneous graph convolutional network. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 2377–2387. [doi: [10.1145/3534678.3539482](https://doi.org/10.1145/3534678.3539482)]
- [24] Liu YX, Jin M, Pan SR, Zhou C, Zheng Y, Xia F, Yu P. Graph self-supervised learning: A survey. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(6): 5879–5900. [doi: [10.1109/TKDE.2022.3172903](https://doi.org/10.1109/TKDE.2022.3172903)]
- [25] 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: ACM, 2014. 701–710. [doi: [10.1145/2623330.2623732](https://doi.org/10.1145/2623330.2623732)]
- [26] Kipf TN, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In: Proc. of the 5th Int'l Conf. on Learning Representations. 2017. 1–14.
- [27] 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. 2018. 1–12.
- [28] Wu YJ, Lian DF, Xu YH, Wu L, Chen EH. Graph convolutional networks with Markov random field reasoning for social spammer detection. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: ACM, 2020. 1054–1061. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5455](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5455)]
- [29] Wang X, Zhu MQ, Bo DY, Cui P, Shi C, Pei J. AM-GCN: Adaptive multi-channel graph convolutional networks. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 1243–1253. [doi: [10.1145/3394486.3403177](https://doi.org/10.1145/3394486.3403177)]
- [30] Yun S, Jeong M, Kim R, Kang J, Kim HJ. Graph Transformer networks. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 1073.
- [31] Zhang HM, Qiu LW, Yi LL, Song YQ. Scalable multiplex network embedding. In: Proc. of the 27th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Stockholm: AAAI Press, 2018. 3082–3088.
- [32] 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: ACM, 2020. 2331–2341. [doi: [10.1145/3366423.3380297](https://doi.org/10.1145/3366423.3380297)]
- [33] Hu ZN, Dong YX, Wang KS, Sun YZ. Heterogeneous graph Transformer. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 2704–2710. [doi: [10.1145/3366423.3380027](https://doi.org/10.1145/3366423.3380027)]
- [34] Duan HR, Xie C, Li LY. Reserving-masking-reconstruction model for self-supervised heterogeneous graph representation. In: Proc. of the 30th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Barcelona: ACM, 2024. 689–700. [doi: [10.1145/3637528.3671719](https://doi.org/10.1145/3637528.3671719)]
- [35] Das SS, Ferdous SM, Halappanavar MM, Serra E, Pothen A. AGS-GNN: Attribute-guided sampling for graph neural networks. In: Proc. of the 30th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Barcelona: ACM, 2024. 538–549. [doi: [10.1145/3637528.3671940](https://doi.org/10.1145/3637528.3671940)]
- [36] Yu LF, Shen JJ, Li JY, Lerer A. Scalable graph neural networks for heterogeneous graphs. arXiv:2011.09679, 2020.
- [37] Cen YK, Zou X, Zhang JW, Yang HX, Zhou JR, Tang J. Representation learning for attributed multiplex heterogeneous network. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Anchorage: ACM, 2019. 1358–1368. [doi: [10.1145/3292500.3330964](https://doi.org/10.1145/3292500.3330964)]
- [38] 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: ACM, 2019. 2022–2032. [doi: [10.1145/3308558.3313562](https://doi.org/10.1145/3308558.3313562)]
- [39] Peng Z, Huang WB, Luo MN, Zheng QH, Rong Y, Xu TY, Huang JZ. Graph representation learning via graphical mutual information maximization. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 259–270. [doi: [10.1145/3366423.3380112](https://doi.org/10.1145/3366423.3380112)]
- [40] Hang JQ, Hong ZQ, Feng XY, Wang G, Yang G, Li F, Song XN, Zhang DS. Paths2Pair: Meta-path based link prediction in billion-scale commercial heterogeneous graphs. In: Proc. of the 30th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Barcelona: ACM, 2024. 5082–5092. [doi: [10.1145/3637528.3671563](https://doi.org/10.1145/3637528.3671563)]
- [41] Hassani K, Khasahmadi AH. Contrastive multi-view representation learning on graphs. In: Proc. of the 37th Int'l Conf. on Machine

- Learning. 2020. 4116–4126.
- [42] Wang X, Lu YF, Shi C, Wang RJ, Cui P, Mou S. Dynamic heterogeneous information network embedding with meta-path based proximity. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2022, 34(3): 1117–1132. [doi: [10.1109/tkde.2020.2993870](https://doi.org/10.1109/tkde.2020.2993870)]
- [43] Zhao JN, Wang X, Shi C, Hu BB, Song GJ, Ye YF. Heterogeneous graph structure learning for graph neural networks. In: *Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence*. ACM, 2021. 4697–4705. [doi: [10.1609/aaai.v35i5.16600](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i5.16600)]
- [44] Chen HC, Sultan SF, Tian YT, Chen MH, Skiena S. Fast and accurate network embeddings via very sparse random projection. In: *Proc. of the 28th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management*. Beijing: ACM, 2019. 399–408. [doi: [10.1145/3357384.3357879](https://doi.org/10.1145/3357384.3357879)]
- [45] 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 Int'l Conf. on the Semantic Web*. 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)]
- [46] Li MR, Zhang Y, Li XY, Zhang YC, Yin BC. Hypergraph Transformer neural networks. *ACM Trans. on Knowledge Discovery from Data*, 2023, 17(5): 63. [doi: [10.1145/3565028](https://doi.org/10.1145/3565028)]
- [47] Zhang R, Zimek A, Schneider-Kamp P. A simple meta-path-free framework for heterogeneous network embedding. In: *Proc. of the 31st ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management*. Atlanta: ACM, 2022. 2600–2609. [doi: [10.1145/3511808.3557223](https://doi.org/10.1145/3511808.3557223)]

附中文参考文献

- [18] 石川, 王睿嘉, 王啸. 异质信息网络分析与应用综述. *软件学报*, 2022, 33(2): 598–621. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6357.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.006357](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.006357)]

作者简介

于朋健, 硕士生, 主要研究领域为数据挖掘, 多层异质图神经网络.

李享, 博士生, CCF 学生会会员, 主要研究领域为数据挖掘, 图神经网络, 推荐系统.

齐建鹏, 博士, CCF 专业会员, 主要研究领域为边缘计算, 边缘智能.

于彦伟, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 杰出会员, 主要研究领域为数据挖掘, 机器学习.

董军宇, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 杰出会员, 主要研究领域为计算机视觉, 机器学习.