

基于多视图表示学习的语义感知异质图注意力网络

王静红, 吴芝冰, 王熙照, 李昊康

引用本文

王静红, 吴芝冰, 王熙照, 李昊康. 基于多视图表示学习的语义感知异质图注意力网络[J]. 计算机科学, 2025, 52(6): 167-178.

WANG Jinghong, WU Zhibing, WANG Xizhao, LI Haokang. [Semantic-aware Heterogeneous Graph Attention Network Based on Multi-view Representation Learning](#) [J]. Computer Science, 2025, 52(6): 167-178.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

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

[基于自适应图自编码器的离群点检测方法](#)

Outlier Detection Method Based on Adaptive Graph Autoencoder

计算机科学, 2025, 52(6): 129-138. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240500092>

[自适应建模网络动力学的动态链路预测方法](#)

Dynamic Link Prediction Method for Adaptively Modeling Network Dynamics

计算机科学, 2025, 52(6): 118-128. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240400033>

[结合开发者依赖的图神经网络缺陷预测方法](#)

Graph Neural Network Defect Prediction Method Combined with Developer Dependencies

计算机科学, 2025, 52(6): 52-57. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240700119>

[基于超图卷积和多角度拓扑细化的骨骼行为识别方法](#)

Hypergraph Convolutional Network with Multi-perspective Topology Refinement for Skeleton-based Action Recognition

计算机科学, 2025, 52(5): 220-226. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240600125>

[基于特征网络对比学习的图协同过滤模型研究](#)

Study on Graph Collaborative Filtering Model Based on FeatureNet Contrastive Learning

计算机科学, 2025, 52(5): 139-148. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240200078>

基于多视图表示学习的语义感知异质图注意力网络

王静红^{1,2,3} 吴芝冰¹ 王熙照⁴ 李昊康⁵

1 河北师范大学计算机与网络空间安全学院 石家庄 050024

2 河北省网络与信息安全重点实验室 石家庄 050024

3 供应链大数据分析与安全河北省工程研究中心 石家庄 050024

4 深圳大学计算机与软件学院 广东 深圳 518060

5 河北工程技术学院人工智能与大数据学院 石家庄 050091

摘要 近年来,图神经网络因能够高效处理异质图中的复杂结构和丰富语义信息而受到了广泛的关注。学习异质图的低维节点嵌入,同时为节点分类、节点聚类等下游任务保留异质结构和语义,是一个关键且具有挑战性的问题。现有研究主要基于元路径来设计模型,但这种方法至少存在两方面的局限性:1)合适元路径的选择通常需要专家知识或额外的标注信息;2)该方法限制了模型按预定义的模式学习,从而难以充分捕获网络的复杂性。针对这些问题,提出了一种多视图和语义感知的异质图注意力网络(Multi-view and Semantic-aware Heterogeneous Graph Attention Network,MS-HGANN)。该网络无需人工设计元路径,即可融合节点和关系中的丰富语义信息。MS-HGANN主要包括3个部分:特征映射、二阶特定视图自我图融合和语义感知。特征映射将特征映射到统一的节点特征空间;二阶特定视图自我图融合设计了特定关系的编码器和节点注意力学习节点在局部结构上的表示;语义感知设计了两种相互协调的注意力机制来评估节点和关系的重要性,从而得到最终的节点表示。在3个公开数据集上进行实验,结果表明,所提模型在节点分类和聚类任务上达到了先进水平。

关键词:图神经网络;异质图;图表示学习;异质图嵌入;异质网络

中图分类号 TP391

Semantic-aware Heterogeneous Graph Attention Network Based on Multi-view Representation Learning

WANG Jinghong^{1,2,3}, WU Zhibing¹, WANG Xizhao⁴ and LI Haokang⁵

1 College of Computer and Cyber Security, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China

2 Hebei Provincial Key Laboratory of Network and Information Security, Shijiazhuang 050024, China

3 Hebei Provincial Engineering Research Center for Supply Chain Big Data Analytics & Data Security, Shijiazhuang 050024, China

4 Department of Computer Science and Software Engineering, Shenzhen University, Shenzhen, Guangdong 518060, China

5 Artificial Intelligence and Big Data College of Hebei University of Engineering and Technology, Shijiazhuang 050091, China

Abstract In recent years, graph neural networks have received widespread attention for their ability to efficiently process complex structures and rich semantic information in heterogeneous graphs. Learning low-dimensional node embeddings of heterogeneous graphs while preserving the heterogeneous structure and semantics for downstream tasks such as node classification and node clustering is a critical and challenging problem. Existing studies mainly design models based on meta-paths, but this approach faces at least two limitations. 1) The selection of suitable meta-paths usually requires expert knowledge or additional labelling information. 2) The approach restricts the model from learning by predefined patterns, which makes it difficult to adequately capture the complexity of the network. To address these issues, a multi-view and semantic-aware heterogeneous graph attention network (MS-HGANN) is proposed to merge nodes and relationships without manually designing meta-paths with the MS-HGANN consists of three main components: feature mapping, second-order view-specific self-graph fusion, and semantic aware. Feature mapping maps features to a uniform node feature space. Second-order view-specific self-graph fusion designs relationship-specific encoders and node attention to learn node representations on local structures. Semantic aware designs two coordinated attention mechanisms to evaluate the importance of nodes and relationships to obtain the final node representations. Experimental results

到稿日期:2024-06-04 返修日期:2025-01-13

基金项目:河北省自然科学基金(F2024205028, F2021205014);河北省高等学校科学技术研究项(ZD2022139)

This work was supported by the Natural Science Foundation of Hebei Province(F2024205028, F2021205014) and Science and Technology Project of Hebei Education Department(ZD2022139).

通信作者:王静红(wangjinghong@126.com)

on three publicly available datasets show that the proposed model is state-of-the-art for node classification and clustering tasks.

Keywords Graph neural networks, Heterogeneous graphs, Graph representation learning, Heterogeneous graph embedding, Heterogeneous networks

异质图(Heterogeneous Graphs, HGs)又称异质信息网络(Heterogeneous Informations, HINs),是一种由多种类型的实体和关系组成的图^[1],如引文网络^[2-4]、社交网络^[5-6]、推荐系统^[7-8]、生物信息学和化学^[9-10]、交通网络^[11-12]等。由于异质图的普遍性,异质图表示学习已成为图分析任务的关键,其中包括节点分类、图分类、节点聚类、推荐等。IMDB网络是异质图的一个典型例子,简单来说,它由3类节点和2类关系组成,其结构详见图1(a)。从该网络中可以发现两个关键的依赖关系,即元路径和网络模式,两者都代表了节点之间的相互联系。这些异质性凸显了异质图中丰富的结构和语义信息,给传统的图表示学习方法带来了挑战。

对此,学者们开发了一系列异质图嵌入技术来解决这些问题。目前的异质图神经网络大致分为两类:1)基于元路径的方法^[13-16];2)基于网络模式的方法^[17-19]。基于元路径的方法利用这些路径来捕捉节点之间的语义关系。最近的方法包括HAN^[20],MAGNN^[21]和MV-HetGNN^[22],在一些异质图分析中已接近最先进的性能。然而,它们在现实生活中的实际应用具有挑战性,因为这需要特定领域的知识来手动设计元路径。此外,这些方法限制了HGNNs^[23]遵循预定义的

模式捕捉局部信息,从而限制了它们学习异质图全部复杂性的能力。相反,基于网络模式的模型可直接在异质图上执行信息传输和信息融合,而无需元路径。例如,Simple-HGN^[23]建立在图注意力网络(Graph Attention Network, GAT)^[24]的基础上,通过拼接节点和边的特征向量并将其输入图注意力网络中,在考虑边类型的同时解决了图的异质问题。另外,CoNR^[25]提出了一种学习节点和关系的协作表示法,使它们能够协同发挥作用。虽然上述模型超越了基于元路径模型的性能并达到了最先进的性能,但最近的研究^[26]表明,具有扩展元路径的单层模型比具有较短路径的多层模型性能更好。这表明,加入邻近注意力和多层模型非但不会简化,反而会增加模型的复杂性,限制其表达能力。受相关研究^[22-23,26]的启发,本文采用多视图表示学习(Multi-view Representation Learning, MvRL)^[27]进行异质图嵌入。借鉴网络模式的方法,定义了一个二阶特定视图自我图,将其用作表征学习的局部节点结构。MvRL的核心思想与异质图的丰富语义非常吻合,它将每个连接视为不同的视图。例如,图1(b)给出了2个二阶特定视图自我图,每个图都被视为一个视图,从而简化了异质图中复杂的局部结构,而无需使用元路径。

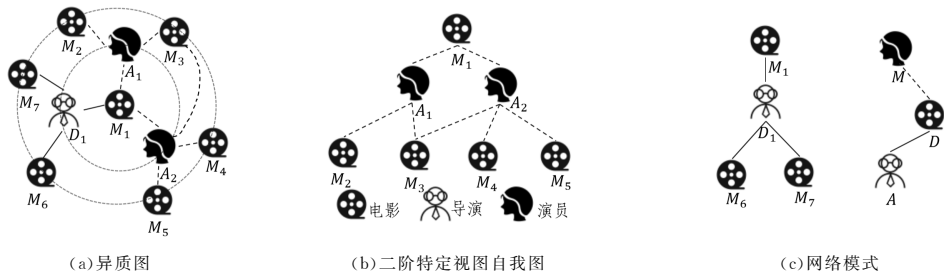


图1 IMDB网络示例

Fig. 1 Example of IMDB network

因此,本文提出了MS-HGANN,它由特征映射、二阶特定视图自我图融合和语义感知3部分组成。首先,MS-HGANN针对不同的节点和关系类型使用不同的映射函数,将各种节点和关系属性统一到一个统一的空间中。然后,它将完整的异质图分解成多个特定视图下的二阶自我图,每个二阶特定视图自我图都保留了各自视图的完整局部结构。二阶特定视图自我图融合利用特定关系编码器和特定关系节点注意力来学习目标节点不同关系下的低维向量表示。这有助于以自下而上的方式为异质节点之间的关系和结构建模,并在多视图层面融合信息。最后,语义感知利用两种相互协调的注意力机制和多视图融合来学习最终节点表征。这两类注意力通过权衡系数进行平衡,共同决定每个视图的重要性,同时纳入节点和关系的语义。

本文的主要贡献包括以下3方面:

1)提出了一种新的MS-HGANN模型,包括特征映射、二阶特定视图自我图融合和语义感知3个步骤,避免了预定义

的元路径。

2)定义了二阶特定视图自我图并设计了3个候选编码器,简化了异质节点的局部结构,从而有效融合信息。

3)在语义感知模块中提出了节点感知和关系感知两种相互协调的注意力,并设计了多视图融合来对其进行整合,以高效和有效地捕捉异质图中的丰富语义和复杂结构。

1 相关工作

1.1 图神经网络

图神经网络(Graph Neural Network, GNN)是专门为学习图数据结构的表示而设计的。图神经网络的基本思想是每个节点的嵌入都可以用其邻居的特征来表示。基于这一思想,图神经网络可分为两类:基于频谱的方法和基于空间的方法。基于频谱的图神经网络的主要思想是利用图信号处理、代数和频谱图论对图进行卷积运算,从而分析和处理图上的信号。基于谱图的图神经网络包括ChebNet^[28],GCN^[4]和

CayleyNets^[29],其通过计算图拉普拉斯的极值分解来执行卷积操作^[4,30-31]。然而,上述模型由于需要输入整个图进行卷积运算,因此特征向量的计算成本较高,效率低且泛化能力差。现在,许多基于空域的方法被提出来解决这一问题。基于空域的图神经网络的主要思想是直接利用空域中的图结构来计算节点的表示,而无需转换到谱域空间。首先,GraphSAGE^[32]提出了基于空域的图神经网络的一般框架,利用融合函数来学习节点的邻域信息,从而有效地生成节点嵌入。此后,研究者们又提出了许多基于空域的图神经网络的变体。其中,图注意力网络在图表示学习中尤为流行,因为它通过注意力机制学习邻近节点的重要性来融合节点特征,在节点分类和聚类任务中非常高效。CGNN^[33]是另一种非常流行的图神经网络,它通过对节点表征的导数与时间之间的关系建模,实现了连续动态节点表征的学习。空域图神经网络因其高效、鲁棒性能和可泛化性而广受欢迎。然而,上述模型主要是针对同质图设计的,没有考虑异质图中的异质性和丰富语义,因此无法直接应用于异质图。

1.2 异质图神经网络

异质图神经网络模型是为了学习异质图中多样化的节点特征和语义信息而开发的。目前异质图表示学习的方法根据元路径的使用情况大致分为两类:基于元路径的方法^[13-16]和基于网络模式的方法^[17-19]。

元路径是多种关系和节点的序列,对于捕捉异质图中的高阶信息至关重要。例如,Metapath2vec采用基于元路径的随机游走来构建异质邻域,并使用 skip-gram 模型进行节点表示学习。HIN2vec^[14]参与多个预测训练任务,以掌握异质图节点和元路径中的丰富语义。一些研究人员旨在通过元路径将图神经网络推广到异质图嵌入中。HAN^[20]采用节点级和语义级注意力机制来结合节点特征。但是,它只关注元路径的两端节点,忽略了中间节点。MAGNN^[21]引入了各种元路径编码器,旨在对整个路径的信息进行编码,而不是只关注端点的节点信息。MV-ACM^[16]和 HeCo^[34]分别侧重于基于元路径的邻域信息融合和异质图中的对比学习。尽管这些方法很有潜力,但基于元路径的方法在定义元路径时受到专家知识的限制,这在现实世界的许多场景中都是一个阻碍。为解决这一问题,GTN^[35]被设计用于自动选择元路径,它采用图转换层来推导出软元路径。然而,它依赖矩阵乘法来提取元路径,需要穷举所有节点上的元路径实例,从而产生了高计算要求和特征异质性问题。

此外,一些研究侧重于直接学习异质图中的节点特征,而不使用元路径。例如,R-GCNs^[36]将中心节点的邻近节点按其关系分为不同的组,并针对每种关系采用特定的变换将所有邻近节点映射到统一的向量空间。HetGNN^[37]使用重启策略随机行走,使用固定大小的邻居,并根据关系将采样的邻居分组。受文本分析中转换器有效性的启发,HGT^[17]设计了一种异质关注机制,可根据涉及的节点和边的类型自动计算注意力分数。Simple-HGN^[23]将边类型和节点特征串联起来并输入关注机制,是一种基

于图注意力网络的简单而高效的方法。

然而,最近的研究^[24]表示,具有更长元路径的更简单的单层模型似乎优于具有更短路径的更复杂的多层模型,还指出了加入邻居注意力和多层模型可能会使模型复杂化,从而降低模型的有效性。为此,本文提出了MS-HGANN模型,其不仅为信息传递定义了二阶特定视图自我图,简化了节点的局部结构,还能高效地融合异质图中的异质信息。

2 基本定义

本章将介绍一些与异质图相关的重要术语。本文使用的重要术语如表1所列。

表1 重要符号及其含义

Table 1 Important symbols and their meanings

| 符号 | 解释 |
|--------------------|---|
| \mathcal{V} | 异质图中的节点集 |
| \mathcal{A} | 异质图中的节点类型集 |
| \mathcal{E} | 异质图中的边集 |
| \mathcal{R} | 异质图中的边/关系类型集 |
| \mathcal{G} | 异质图 $\mathcal{G}=(\mathcal{V},\mathcal{E},\mathcal{A},\mathcal{R})$ |
| r | 一种关系 $r\in\mathcal{R}$ |
| \mathcal{G}_v^r | 二阶特定视图自我图 |
| \mathcal{N}_i^r | 节点 i 关于关系 r 的邻居 |
| \mathbf{x} | 原始节点特征向量 |
| α | 标准化注意力权重 |
| $\mathbf{h}_{v,r}$ | 节点 v 在关系 r 中的嵌入 |
| $ \cdot $ | 集合的基数 |
| \parallel | 向量拼接 |

定义1(异质图^[1]) 异质图 $\mathcal{G}=(\mathcal{V},\mathcal{E},\mathcal{A},\mathcal{R})$ 有不同类型的节点和边,其中 \mathcal{V} 是节点集, \mathcal{E} 是边集, $\phi:\mathcal{V}\rightarrow\mathcal{A}$ 表示节点类型映射函数, $\psi:\mathcal{E}\rightarrow\mathcal{R}$ 表示边类型映射函数, \mathcal{A} 和 \mathcal{R} 分别表示节点类型集和边类型集, $|\mathcal{A}|+|\mathcal{R}|\geq 2$ 。图1(a)给出了异质图的一个例子,从中可以发现异质图具有不同的节点和关系。

定义2(网络模式^[1]) 异质图 $\mathcal{G}=(\mathcal{V},\mathcal{E},\mathcal{A},\mathcal{R})$ 中,网络模式被定义为包含异质图中所有类型的节点和边的最小的子图。如图1(c)所示,IMDB中的网络模式包括3种类型的节点和2种类型的边。

定义3(异质图嵌入^[26]) 异质图嵌入的目标是学习节点在异质图低维空间中的嵌入。在数学上,异质图嵌入是学习一个函数 $f:\mathcal{V}\rightarrow\mathcal{R}^d$,将每个节点投影到 d 维欧几里得空间中,其中 $d\ll|\mathcal{V}|$ 。

定义4(二阶特定视图自我图) 给定关系 r 和目标节点 v ,二阶特定视图自我图表示为 \mathcal{G}_v^r ,它由关系 r 连接的二阶的邻居构成二阶特定视图自我图。图1(b)给出了两个例子,从图中不难发现每个例子中只有一种关系的边和最大为二阶邻居。

3 MS-HGANN 模型

本章将介绍专为异质图嵌入而设计的MS-HGANN。如图2和图3所示,MS-HGANN包含3个主要步骤。首先,如图2(a)所示,该模型将不同语义空间的每个节点和关系表征映射到一个统一的维度中。其次,如图2(b)所示,该模型将

每个语义关系视为一个视图,采用特定关系编码器为目标节点的二阶邻域生成嵌入。然后,将特定关系的节点注意力用于创建二阶特定视图自我图嵌入。最后,如图 2(c)所示,

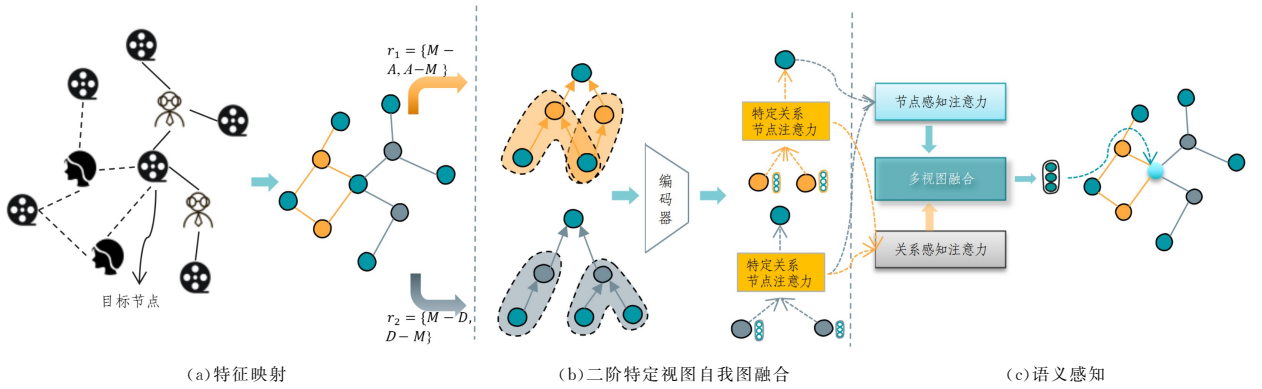


图 2 MS-HGANN 框架

Fig. 2 Framework of MS-HGANN

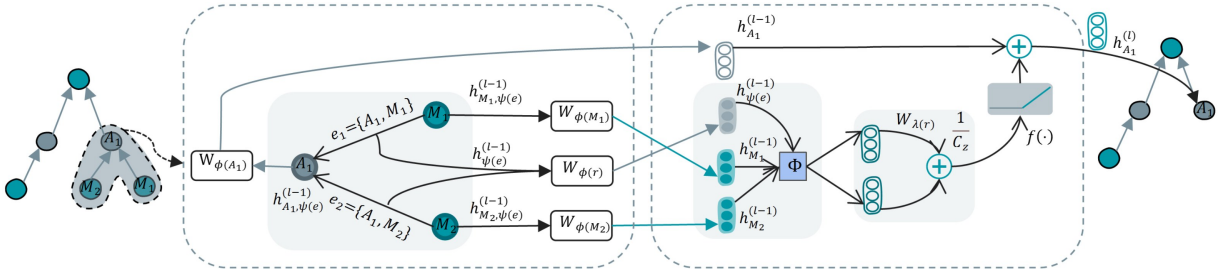


图 3 特定关系编码器的信息融合过程

Fig. 3 Information aggregation progress by relation-specific encoder

3.1 特征映射

异质图包含不同类型的节点和关系。为此,在将特征向量输入 MS-HGANN 之前,设计了一个线性变换矩阵,根据节点表示的类型将其投影到相同的特征空间中。对于节点 $i \in \mathcal{A}$ 以及对应的节点类型 $\phi(i) \in \mathcal{A}$,有:

$$\mathbf{x}'_i = \sigma(\mathbf{W}_{\phi(i)} \cdot \mathbf{x}_i) \quad (1)$$

其中, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{d_{\phi(i)}}$ 是节点的原始特征向量,通过矩阵转换操作将它映射为 $\mathbf{x}'_i \in \mathbb{R}^d$; $\mathbf{W}_{\phi(i)} \in \mathbb{R}^{d \times d_{\phi(i)}}$ 是线性转换矩阵; $\sigma(\cdot)$ 是 ReLU 激活函数。通过特定类型的投影操作,节点特征被转换为相同的维度,并且可以直接输入到模型的下一个组件中。

3.2 二阶特定视图自我图融合

异质图的结构在本质上是复杂的并且具有丰富的语义。由图 1(a)可观察到,电影节点 M_1 的局部结构是相互关联且错综复杂的。二阶特定视图自我图融合模块旨在对不同语义的局部结构进行建模,并在解决异质性问题时有效地融合信息。为了保留图的结构和丰富语义,同时简化异质图嵌入的学习过程,本文定义了二阶特定视图自我图,将原始图分解为多个子图。这种方法解构了异质图的多重语义。此外,本文方法比仅考虑直接邻居信息的方法保留了更全面的局部结构。给定关系 r 和目标节点 i ,二阶特定视图自我图 G_i^r 保持原始的 2 跳结构,其中任意之间的关系节点是 r 。如图 1(b)所示,电影节点 M_1 被分解为两种不同关系的子图。接下来,由特定于关系的编码器从每个视图的 2 跳邻域和关系表示中

语义感知模块整合了节点感知和关系感知关注机制,用于将这些嵌入融合到最终的节点表示中,从而有效地获得通用节点嵌入。

学习节点表示。最后,由特定关系节点注意力来结合 M_1 节点的邻域信息。

3.2.1 特定关系的编码器

图 3 详细给出了二阶特定视图自我图编码器所涉及的步骤。首先使用特定类型的矩阵变换操作将节点 z 、邻居节点 u 和关系 r 投影到各自的隐藏空间中。

$$\mathbf{h}_z^{(l-1)} = \mathbf{W}_{\phi(z)}^{(l)} \cdot \mathbf{h}_z^{(l-1)} \quad (2)$$

$$\mathbf{h}_u^{(l-1)} = \mathbf{W}_{\phi(u)}^{(l)} \cdot \mathbf{h}_u^{(l-1)} \quad (3)$$

$$\mathbf{h}_r^{(l-1)} = \mathbf{W}_r^{(l)} \cdot \mathbf{h}_r^{(l-1)} \quad (4)$$

其中, $\mathbf{W}_{\phi(z)}^{(l)}$, $\mathbf{W}_{\phi(u)}^{(l)}$ 和 $\mathbf{W}_r^{(l)}$ 是在 l 层中特定关系的转换矩阵;等式左边的 $\mathbf{h}_z^{(l-1)}$, $\mathbf{h}_u^{(l-1)}$ 和 $\mathbf{h}_r^{(l-1)}$ 是转换后的特征向量。初始时设置 $\mathbf{h}_z^{(0)} = \mathbf{x}'_z$ 和 $\mathbf{h}_u^{(0)} = \mathbf{x}'_u$ 。初始的关系向量 $\mathbf{h}_r^{(0)}$ 采用独热编码的方式,将对应类型的位置设置为 1。经过上述操作后,所有节点和关系都按照不同的关系投影到对应的空间中,解决了节点和边的异质性,有利于特征的融合。

为了有效地从二阶特定视图自我图中学习节点表示,需要一种异质方法,因此采用了特定于关系的编码器。图 2(b)给出了二阶特定视图自我图的两个示例。假设节点 z 是目标节点 i 的 1 跳邻居,关系为 $r = \psi(e)$,关系编码器融合节点 z 与其邻居信息之间的信息,更新第 l 层的节点表示。对特征的编码采用如下计算式:

$$\mathbf{h}_{z,r}^{(l)} = \sigma(f(\{\mathbf{h}_z^{(l-1)}, \mathbf{v}_u \in N_z^c\}, \mathbf{h}_r^{(l-1)})) + \mathbf{h}_z^{(l-1)} \quad (5)$$

其中, $\mathbf{h}_{z,r}^{(l)}$ 是第 l 层具有关系 r 的节点 z 的编码隐向量,由节点 z 的向量表示 $\mathbf{h}_z^{(l-1)}$ 及其关系为 r 的邻居节点 u 的向量表示

$\mathbf{h}_u^{(l-1)}$ 计算得出; $\sigma(\cdot)$ 是 ReLU 激活函数; o 是 dropout 层; $f(\cdot)$ 是融合每个邻居信息的融合函数。首先设计了均值函数和线性函数,定义分别如下:

$$\begin{aligned} f(\{\mathbf{h}_u^{(l-1)}, v_u \in N_z^r\}, \mathbf{h}_r^{(l)}) &= \text{MEAN}(\{\mathbf{h}_u^{(l-1)}, v_u \in N_z^{p(e)}\}, \\ &\quad \mathbf{h}_r^{(l)}) \\ &= \frac{1}{2|N_z^r|} \sum_{v_j \in N_z^r} (\mathbf{h}_u^{(l-1)} + \mathbf{h}_r^{(l)}) \end{aligned} \quad (6)$$

$$f(\{\mathbf{h}_u^{(l-1)}, v_u \in N_z^r\}, \mathbf{h}_r^{(l)}) = \mathbf{W}_l \cdot \text{MEAN}(\{\mathbf{h}_u^{(l-1)}, v_u \in N_z^r\}, \mathbf{h}_r^{(l)}) \quad (7)$$

均值函数计算每种邻域的向量的元素平均值,而线性函数通过添加线性变换来扩展均值函数。均值函数和线性函数有一定的作用,但它们融合异质图中富含的语义和结构信息的能力有限。

为了应对这一挑战,本文引入了 TransE^[38] 技术,使用知识图谱技术来设计节点和边之间的融合函数。节点 z 与其邻居节点(见图 2(b)中的灰色区域)之间的融合过程如图 3 所示。TransE 是为解决关系数据问题而提出的算法,关系三元组 (s, r, t) 的核心思想是通过不断学习,使 $s+r$ 尽可能等于 t 。关系函数和特定于关系的编码器的计算式如下:

$$\Phi(\mathbf{h}_s, \mathbf{h}_r) = \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_r \quad (8)$$

$$\begin{aligned} f(\{\mathbf{h}_u^{(l-1)}, v_u \in N_z^r\}, \mathbf{h}_r^{(l)}) &= \sum_{v_u \in N_z^r} \frac{1}{C_z} \mathbf{W}_r \Phi(\mathbf{h}_u^{(l-1)}, \mathbf{h}_r^{(l)}) \\ &= \sum_{v_u \in N_z^r} \frac{1}{C_z} \mathbf{W}_r (\mathbf{h}_u^{(l-1)} + \mathbf{h}_r^{(l)}) \\ &= \sum_{v_u \in N_z^r} \frac{1}{|N_z^r|} \mathbf{W}_r (\mathbf{h}_u^{(l-1)} + \mathbf{h}_r^{(l)}) \end{aligned} \quad (9)$$

其中, \mathbf{h}_s 和 \mathbf{h}_r 分别是节点的特征向量和关系向量; $\Phi(\cdot)$ 是映射函数; \mathbf{W}_r 表示特定关系的参数矩阵; C_z 是归一化项,在 MS-HGANN 模型中 $C_z = |N_z^r|$ 。另外,随着关系的增加,会出现超参数的问题,因为矩阵 \mathbf{W}_r 与关系 r 相关。对此,使用两个对角矩阵来简化它。两个对角矩阵可表示为:

$$\mathbf{W}_r = \begin{cases} \mathbf{W}_O, & r \in R^+ \\ \mathbf{W}_I, & r \in R^- \end{cases} \quad (10)$$

其中, R^+ 和 R^- 表示两组相反的关系。例如,如果 $R^+ = \{direct, act\}$, 那么 $R^- = \{direct-by, act-by\}$ 。式(11)是关系特定编码器的最终数学表达式。

$$\mathbf{h}_{z,r}^{(l)} = \begin{cases} o(\sigma(\sum_{v_u \in N_z^r} \frac{1}{|N_z^r|} \mathbf{W}_O (\mathbf{h}_u^{(l-1)} + \mathbf{h}_r^{(l)}) + \mathbf{h}_z^{(l-1)})), & r \in R^+ \\ o(\sigma(\sum_{v_u \in N_z^r} \frac{1}{|N_z^r|} \mathbf{W}_I (\mathbf{h}_u^{(l-1)} + \mathbf{h}_r^{(l)}) + \mathbf{h}_z^{(l-1)})), & r \in R^- \end{cases} \quad (11)$$

3.2.2 特定关系的节点注意力

除了通过特定关系编码器融合目标节点 i 的 2 跳邻域信息外,1 跳邻域信息更重要,因为它们和目标节点 i 的关系更近。受图注意力网络启发,本文采用特定于关系的节点注意力来融合由相同关系连接的邻域。采用图注意力机制来融合邻居的表示,其计算式如下:

$$\mathbf{s}_{i,z}^{r,(l)} = \sigma([\mathbf{W}_{\phi(i),r} \mathbf{h}_i^{(l-1)} \parallel \mathbf{W}_{\phi(z),r} \mathbf{h}_{z,r}^{(l)}] \cdot \mathbf{a}_z^{(l)\top}) \quad (12)$$

$$\alpha_{i,z}^{r,(l)} = \frac{\exp(\mathbf{s}_{i,z}^{r,(e),(l)})}{\sum_{z \in N_i^r} \exp(\mathbf{s}_{i,z}^{r,(e),(l)})}$$

$$= \frac{\exp(\sigma([\mathbf{W}_{\phi(i),r} \mathbf{h}_i^{(l-1)} \parallel \mathbf{W}_{\phi(z),r} \mathbf{h}_{z,r}^{(l)}] \cdot \mathbf{a}_z^{(l)\top}))}{\sum_{z \in N_i^r} \exp(\sigma([\mathbf{W}_{\phi(i),r} \mathbf{h}_i^{(l-1)} \parallel \mathbf{W}_{\phi(z),r} \mathbf{h}_{z,r}^{(l)}] \cdot \mathbf{a}_z^{(l)\top}))} \quad (13)$$

$$\mathbf{h}_{i,r}^{(l)} = \sum_{j \in N_i^r} \alpha_{i,z}^{r,(l)} \cdot \mathbf{h}_i^{(l-1)} \quad (14)$$

其中, $\mathbf{s}_{i,z}^{r,(l)}$ 表示目标节点 i 对邻居节点 z 的重要性,然后通过式(13)对其进行标准化; $\sigma(\cdot)$ 是 LeakyReLU 激活函数。计算出所有节点 $z \in N_i^r$ 的归一化权重 $\alpha_{i,z}^{r,(l)}$ 后,使用式(14)对其进行计算,以获得二阶特定视图自我图的目标节点表示。

3.3 语义感知

通常,异质图中的每个节点由许多不同类型的边连接,但二阶特定视图自我图融合模块只能捕获与每个视图相对应的语义,因此必须设计一种方法来融合多个视图的节点嵌入,以获得更全面的节点嵌入。现有的方法通常对所有类型的节点表示使用节点级注意力,但这种方法忽略了语义的重要性。为此,设计了两种互补的注意力机制,旨在评估每个节点和关系的贡献,同时考虑节点感知和关系感知的注意力权重。

3.3.1 节点感知注意力

将二阶特定视图自我图中的目标节点编码为向量表示后,使用节点感知注意力对不同视图中的节点表示进行加权求和。也就是说,通过图注意力层学习不同节点向量表示的重要性,最后将它们求和。使用节点 i 的每个子图中的节点嵌入作为上下文信息,使用 $l-1$ 层节点 i 和二阶特定视图自我图融合模块输出的节点表示来定义节点感知注意力。

$$\alpha_{i,r,n}^{(l)} = \frac{\exp(\sigma([\text{Norm}(\mathbf{W}_{\phi(i),r}^{(l-1)} \mathbf{h}_i^{(l-1)}) \parallel \text{Norm}(\mathbf{h}_{i,r}^{(l)})] \cdot \mathbf{a}_n^{(l)\top}))}{\sum_{r \in R_i} \exp(\sigma([\text{Norm}(\mathbf{W}_{\phi(i),r}^{(l-1)} \mathbf{h}_i^{(l-1)}) \parallel \text{Norm}(\mathbf{h}_{i,r}^{(l)})] \cdot \mathbf{a}_n^{(l)\top}))} \quad (15)$$

其中, $\mathbf{a}_n^{(l)}$ 是可学习的参数化节点感知注意力向量; $\alpha_{i,r,n}^{(l)}$ 表示节点感知注意力权重系数; $\sigma(\cdot)$ 是 LeakyReLU 激活函数; $\text{Norm}(\cdot)$ 表示 L2 归一化。

3.3.2 关系感知注意力

关系感知注意力旨在学习目标节点的不同关系向量的权重。对于每一层,为每个关系 $r \in R$ 分配一个可学习向量 $\mathbf{w}_r^{(l)} \in R^d$, 然后计算关系感知注意力权重,计算式如下:

$$\alpha_{i,r}^{(l)} = \frac{\exp(\sigma(\mathbf{w}_r^{(l)} \cdot \mathbf{h}_i^{(l)\top}))}{\sum_{j \in R_i} \exp(\sigma(\mathbf{w}_j^{(l)} \cdot \mathbf{h}_j^{(l)\top}))} \quad (16)$$

其中, $\alpha_{i,r}^{(l)}$ 表示关系感知权重; R_i 是目标节点 v_i 的关系; $\sigma(\cdot)$ 为 LeakyReLU 激活函数。

3.3.3 多视图融合

获得了上述两种注意力权重后,本文设计了多视图融合来对其进行整合。权重因子 λ 用于衡量这种融合注意力机制的重要性,计算式如下:

$$\alpha_{i,r}^{(l)} = \lambda \alpha_{i,r,n}^{(l)} + (1-\lambda) \cdot \alpha_{i,r}^{(l)} \quad (17)$$

之后,对每个节点的关系向量进行加权融合,并将多头注意力上学习到的全部向量拼接起来。受 Simple-HGN 的启发,本文方法引入了用于消息传递的残差连接并采用了 L2 正则化,这有助于减小节点度的影响。

$$\hat{\mathbf{h}}_i^{(D)} = \left\| \sum_{k=1}^K \left(\sum_{r \in R_i} \alpha_{(i,r)}^{(D)} \cdot \mathbf{h}_{(i,r)}^{(D)} \right) \right\| \quad (18)$$

$$\mathbf{h}_i^{(D)} = \text{Norm}(\sigma(\hat{\mathbf{h}}_i^{(D)} + \mathbf{h}_i^{(D-1)})) \quad (19)$$

其中, $\mathbf{h}_i^{(D)}$ 表示学习后的节点 i 的嵌入, $\|$ 是向量拼接操作; $\sigma(\cdot)$ 是 GELU 函数; $\text{Norm}(\cdot)$ 表示 L2 归一化函数。

3.4 优化

在获得模型最后一层的输出后,可以将学习到的节点嵌入 $\mathbf{h}_i = \mathbf{h}_i^{(L)}$, 应用于各种下游任务并设计各种损失函数。MS-HGANN 可以使用半监督和无监督学习策略进行端到端训练。

对于半监督学习,以节点分类任务为例。算法 1 概述了 MS-HGANN 模型针对此任务的训练过程。对于模型优化,采用交叉熵损失函数,其形式化表示为:

$$L = - \sum_{i \in V_{\text{label}}} \mathbf{y}_i \cdot \log \hat{\mathbf{y}}_i \quad (20)$$

其中, V_{label} 是标记节点的集合; \mathbf{y}_i 是节点 i 的真实值; $\hat{\mathbf{y}}_i$ 是节点 i 的预测概率。

在不使用节点标签的任务中,如链路预测中,MS-HGANN 的损失函数采用二元交叉熵损失。该方法采用负采样策略,用配对节点的表示作为输入。

$$L = - \sum_{(v,u) \in \Omega} \log \sigma(\mathbf{h}_v^{\top} \mathbf{h}_u) - \sum_{(v',u') \in \Omega^-} \log \sigma(\mathbf{h}_{v'}^{\top} \mathbf{h}_{u'}) \quad (21)$$

其中, $\sigma(\cdot)$ 表示 sigmoid 函数; Ω 和 Ω^- 分别是正负节点对的集合。

算法 1 MS-HGANN 半监督训练过程

输入: 异质图 $G=(V, E, V, R)$, 层数 L , 权重系数 λ , 目标节点类型 t , 注意力头 K

输出: 目标节点的表示

```

1. for 节点类型  $A \in \mathcal{A}$  do
2. 特征映射:  $\mathbf{x}_i^t \leftarrow \text{ReLU}(\mathbf{W}_{\psi(i)} \cdot \mathbf{x}_i)$ ;
    $\mathbf{x}_{\psi(e)}^t \leftarrow \text{ReLU}(\mathbf{W}_{\psi(e)} \cdot \mathbf{x}_{\psi(e)})$ ;
3. end
4. for  $l=1, \dots, L$  do
5.   for  $i \in \mathcal{V}$  do
6.     for  $k=1, \dots, K$  do
7.       for  $r \in R_i$  do
8.         for  $z \in N_i^r$  do
9.           特定关系转换:  $\mathbf{h}_v^{(l-1)} \leftarrow \mathbf{W}_{\psi(v)}^{(l-1)} \mathbf{h}_{v, \psi(v)}^{(l-1)}$ ;  $\mathbf{h}_{\psi(e)}^{(l-1)} \leftarrow \mathbf{W}_{\psi(e)}^{(l-1)} \mathbf{h}_{\psi(e)}^{(l-1)}$ ;
            $\mathbf{h}_{\psi(e)}^{(l-1)}$ ;
10.          特定关系编码:
            $\mathbf{h}_{z,r}^{(l)} \leftarrow \sigma(\mathbf{h}_z^{(l-1)} + \text{ReLU}(\{f(\{\mathbf{h}_j^{(l-1)}, v_j \in N_z^r\}, \mathbf{h}_{\psi(e)}^t)\}))$ 
11.          计算特定关系节点注意力:  $\alpha_{(i,z)}^l$ ;
12.          end
13.          计算节点感知注意力:  $\alpha_{(i,r),n}^l$ ;
14.          计算关系感知注意力:  $\alpha_{(i,r),r}^l$ ;
15.          多视图融合:  $\alpha_{(i,r)}^l \leftarrow \lambda \alpha_{(i,r),n}^l + (1-\lambda) \cdot \alpha_{(i,r),r}^l$ ;
16.          end
17.          融合关系的隐藏状态:
            $\tilde{\mathbf{h}}_i^l \leftarrow \sum_{r \in R_i} (\alpha_{(i,r)}^l \cdot \mathbf{h}_{(i,r)}^l)$ ;
18.          end
19.          多头注意力:  $\hat{\mathbf{h}}_i^l \leftarrow \left\| \sum_{k=1}^K \tilde{\mathbf{h}}_i^l \right\|$ ;

```

20. 计算目标节点在 1 层的隐藏状态:

$$\mathbf{h}_i^1 \leftarrow \text{Norm}(\sigma(\hat{\mathbf{h}}_i^1 + \mathbf{h}_i^{(1-1)}));$$

21. end

22. end

23. 解码目标节点: $\hat{\mathbf{y}}_i \leftarrow f(\mathbf{h}_i^1)$, $\forall i \in V_i$;

24. 计算交叉熵损失: $L \leftarrow \sum_{i \in V_{\text{label}}} \mathbf{y}_i \cdot \log \hat{\mathbf{y}}_i$;

25. return $\mathbf{z}_i \leftarrow \mathbf{h}_i^1$, $\forall i \in \mathcal{V}$.

4 实验

4.1 数据集

本文使用 3 个不同的现实世界异质图数据集来评估 MS-HGANN 的性能。3 个数据集的基本统计数据如表 2 所列。

1) ACM^[34]。从 ACM 数据集中提取了 4 025 篇论文、7 167 位作者和 60 个主题作为实验的数据集。在本文实验中,使用论文作为目标节点,论文包括 3 个研究领域:数据库、数据挖掘和无线通信。

2) DBLP^[21]。从 DBLP 数据集中提取了 14 528 篇论文、4 057 位作者、7 723 个术语和 20 个场景作为实验的数据集。在实验中,使用作者作为目标节点,作者被分为 4 个研究领域:数据库、数据挖掘、信息检索和机器学习。

3) IMDB^[21]。从 IMDB 数据集中提取了 5 257 位演员、2 081 位导演和 4 278 部电影作为实验的数据集。在实验中,使用电影作为目标节点,电影分为 3 类:动作、喜剧和戏剧。

表 2 数据集的统计信息

Table 2 Dataset statistics

| Dataset | nodes | Edge |
|---------|-------------------|------------|
| ACM | Paper(P)=4 025 | P-S=4 025 |
| | Author(A)=7 167 | P-A=13 407 |
| | Subject(S)=60 | |
| DBLP | Paper(P)=14 528 | A-P=19 645 |
| | Author(A)=4 057 | P-T=85 810 |
| | Term(T)=7 723 | P-C=14 328 |
| | Conference(C)=20 | |
| IMDB | Actor(A)=5 257 | M-D=4 278 |
| | Director(D)=2 081 | M-A=12 828 |
| | Movie(M)=4 278 | |

4.2 基准实验

将 MS-HGANN 与一些基线模型进行比较,以验证本文模型的有效性。本文选择了 2 种同质图嵌入算法(GCN^[4]和 GAT^[24]), 4 种基于手动元路径的异质图嵌入算法(Metapath2vec^[13], HAN^[20], MAGNN^[21]和 GTN^[34]), 1 种基于自动元路径的异质图嵌入算法(HGT^[17])以及 1 种基于网络模式的异质图嵌入算法(Simple-HGN^[23])。

Metapath2Vec: 通过将由元路径引导的随机游走输入 skip-gram 模型来生成节点表示。

GCN: 将传统欧几里得数据的卷积运算扩展到图数据结构,专为同质图而设计。

GAT: 将注意力机制扩展到图数据结构中,并设计了屏蔽自注意力层和带有注意力的特征融合,以实现更有效的信息融合。

HAN: 利用注意力机制学习元路径提取的同类型节点的

特征表示,最后融合不同的注意力生成最终的节点特征表示。

HGT:针对不同类型的节点和边设计了一种新颖的注意力机制,使其能够学习节点和边的异质性。

MAGNN:引入了各种元路径编码器,旨在对整个元路径中的信息进行编码。

GTN:设计了图转换器层来增强图神经网络的表达能力并实现元路径的自动发现。

Simple-HGN:将边类型和节点特征拼接起来,输入到注意力机制中来计算节点特征的权重。

4.3 实验设置

为了保证实验的有效性和公平性,对于同质图模型 GAT 和 GCN,首先对异质图进行预处理以符合节点维度的要求,然后将预处理后的图输入模型。本文没有固定节点维度和注意力头数,而是在 {32, 64, 128, 256, 512} 中选择,注意力头数在 1 到 8 之间,选择最佳参数设置。所有模型都使用 Adam 优化器进行了实验;学习率在 {0.000 1, 0.000 5, 0.001, 0.005, 0.01} 中选择,最终选择最佳的参数。对于 metapath2vec,设置负样本数为 5、窗口大小为 5、节点行走数为 40、行走长度为 100。对于本文模型,设置了注意力头数为 6、epoch 为 200、超参数 layer 为 2 和 λ 为 0.1 用于 ACM, layer 为 2 和 λ 为 0.5 用于 DBLP 数据集, layer 为 3 和 λ 为 0.3 用于 IMDB 数据集。

4.4 节点分类

在对所有模型进行节点分类实验之前,将模型训练集分为 20%, 40%, 60% 和 80%,并将目标节点嵌入向量输入线性支持向量机分类器进行实验。最后,使用 Macro-F1 和 Micro-F1 指标对分类结果进行评估,以评价模型性能。表 3 列出了 10 次运行的平均结果。在所有模型中,最优和次优分类性能分别用粗体和下划线表示。与基于元路径的方法(如 Metapath2vec, HAN, HGT, MAGNN 和 GTN)相比,MS-HGANN 的性能提高了 3%~6%。这表明基于元路径的方法在一定程度上限制了模型的性能,而 MS-HGANN 通过使用二阶特定视图自我图的结构,能够更有效地捕捉异质图的复杂语义,从而提升模型的表现。特别值得注意的是,与最佳基线 Simple-HGN 相比,MS-HGANN 在 ACM 和 DBLP 数据集上有显著的性能提升,提升幅度在 1%~4% 之间。此外,在 IMDB 数据集上,MS-HGANN 的表现不如最佳基准模型 Simple-HGN。原因可能是节点特征已经包含在节点和关系信息中,而 MS-HGANN 在特定关系编码器中学习节点和关系的表示时引入了更多的噪声。有趣的是,同质图神经网络(如 GCN 和 GAT)在异质图上也表现出了很强的性能,有时甚至超过了一些异质图神经网络模型。这可以归因于本文将 GCN 和 GAT 应用于转换后的异质图,而不是使用元路径的子图,这有助于保留更丰富的语义信息。

表 3 节点分类实验结果

Table 3 Experimental results of node classification

| Dataset | Metrics | Train | Metapath2vec | GCN | GAT | HAN | HGT | MAGNN | GTN | Simple-HGN | MS-HGANN |
|---------|----------|-------|--------------|-------|--------------|-------|--------------|-------|-------|--------------|--------------|
| ACM | Macro-F1 | 20% | 83.69 | 90.97 | 90.89 | 90.38 | 90.98 | 90.41 | 91.01 | <u>92.27</u> | 94.12 |
| | | 40% | 84.28 | 91.56 | 91.65 | 90.92 | 92.90 | 91.03 | 91.95 | <u>92.66</u> | 95.63 |
| | | 60% | 85.22 | 91.45 | 91.96 | 91.08 | 93.71 | 91.12 | 92.01 | <u>93.32</u> | 95.52 |
| | | 80% | 87.21 | 92.05 | 92.13 | 91.26 | 94.29 | 92.32 | 92.12 | <u>93.72</u> | 96.61 |
| | Micro-F1 | 20% | 82.96 | 90.89 | 90.89 | 90.45 | 91.11 | 91.42 | 90.87 | <u>91.92</u> | 94.07 |
| | | 40% | 84.02 | 91.29 | 91.78 | 90.67 | 93.05 | 92.76 | 91.12 | <u>92.89</u> | 95.34 |
| | | 60% | 85.21 | 91.97 | 91.67 | 91.09 | 93.77 | 92.26 | 92.20 | <u>93.37</u> | 95.53 |
| | | 80% | 87.02 | 92.03 | 92.08 | 91.36 | 94.23 | 92.43 | 92.91 | <u>93.49</u> | 96.52 |
| DBLP | Macro-F1 | 20% | 88.46 | 88.70 | 90.31 | 92.12 | 91.86 | 93.03 | 93.23 | <u>93.58</u> | 94.67 |
| | | 40% | 89.94 | 89.67 | 91.88 | 92.67 | 92.79 | 93.24 | 93.78 | <u>93.96</u> | 94.78 |
| | | 60% | 90.51 | 91.02 | 91.23 | 92.86 | 93.08 | 93.53 | 93.89 | <u>93.89</u> | 95.23 |
| | | 80% | 90.87 | 91.17 | 92.86 | 92.80 | <u>94.68</u> | 93.82 | 94.07 | <u>94.25</u> | 96.24 |
| | Micro-F1 | 20% | 89.03 | 89.89 | 90.78 | 92.60 | 92.55 | 93.51 | 93.97 | <u>94.23</u> | 95.13 |
| | | 40% | 90.37 | 90.13 | 91.23 | 93.17 | 93.38 | 93.71 | 94.23 | <u>93.81</u> | 95.21 |
| | | 60% | 90.91 | 90.78 | 91.73 | 93.29 | 93.61 | 94.01 | 94.89 | <u>94.67</u> | 95.34 |
| | | 80% | 91.27 | 91.39 | 92.29 | 93.47 | <u>95.12</u> | 94.17 | 94.98 | <u>94.59</u> | 96.28 |
| IMDB | Macro-F1 | 20% | 46.05 | 60.31 | <u>60.98</u> | 58.28 | 55.33 | 59.48 | 60.45 | 60.65 | 62.34 |
| | | 40% | 47.59 | 61.04 | 61.25 | 57.69 | 58.84 | 59.79 | 61.36 | <u>61.89</u> | 65.73 |
| | | 60% | 48.21 | 61.34 | 61.98 | 62.76 | 60.60 | 60.02 | 62.74 | <u>66.74</u> | 66.78 |
| | | 80% | 49.99 | 61.62 | 62.27 | 63.78 | 61.76 | 61.20 | 62.20 | 67.51 | <u>66.76</u> |
| | Micro-F1 | 20% | 47.22 | 60.18 | 62.28 | 60.33 | 61.39 | 59.27 | 61.78 | 64.87 | <u>62.32</u> |
| | | 40% | 48.17 | 61.26 | 62.63 | 60.54 | 62.98 | 59.92 | 63.89 | <u>65.86</u> | 65.91 |
| | | 60% | 49.87 | 61.56 | 63.06 | 62.89 | 62.64 | 62.14 | 64.23 | 69.19 | <u>67.01</u> |
| | | 80% | 50.49 | 61.67 | 63.21 | 64.12 | 63.61 | 64.87 | 65.12 | 70.21 | <u>66.74</u> |

4.5 节点聚类

将所有模型输出的节点表示输入 K-Means 算法以生成聚类。K-Means 算法中的聚类数目设置为相应节点类型的数目,即 ACM 为 3, DBLP 为 4, IMDB 为 3。使用 NMI 和 ARI 来综合评价聚类效果,其中 NMI 是聚类结果与真实标签之间信息共享程度的度量,ARI 是两个聚类结果之间相似程度的度量。以 20% 的训练分割进行了 10 次聚类,然后对结果求

平均值。实验结果如表 4 所列,尽管在节点聚类方面存在固有的挑战,但 MS-HGANN 仍然超越了所有基线模型。与最佳基线相比,MS-HGANN 的节点聚类能力提升了 1%~3%。MS-HGANN 在学习节点间错综复杂的语义和关系互联方面的能力是其性能提升的重要原因。这些发现表明,MS-HGANN 能够通过二阶视图特定的自我图结构有效地学习节点的异构信息,而无需元路径。

表 4 节点聚类实验结果

Table 4 Experimental results of node clustering

| Dataset | Metrics | Metapath2vec | GCN | GAT | HAN | HGT | MAGNN | GTN | Simple-HGN | MS-HGANN |
|---------|---------|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|--------------|--------------|--------------|
| ACM | ARI | 63.28 | 20.82 | 64.48 | 73.63 | 79.26 | 74.34 | 78.14 | <u>81.38</u> | 82.78 |
| | NMI | 64.78 | 34.07 | 65.49 | 68.92 | 74.11 | 71.89 | 75.69 | <u>76.93</u> | 78.76 |
| DBLP | ARI | 74.18 | 76.67 | 80.95 | 83.13 | 83.91 | 83.81 | 86.42 | <u>87.76</u> | 89.67 |
| | NMI | 78.11 | 67.91 | 75.09 | 77.27 | 78.26 | 85.54 | 82.54 | 82.60 | 84.98 |
| IMDB | ARI | 20.22 | 17.23 | 21.78 | 21.53 | 21.51 | 21.58 | <u>26.92</u> | 26.59 | 29.97 |
| | NMI | 20.89 | 17.86 | 21.28 | 20.32 | 18.53 | 20.74 | 19.66 | <u>23.54</u> | 26.32 |

4.6 消融实验

在消融实验中,使用 20% 的数据集进行训练。图 4 给出了不同 MS-HGANN 变体在节点分类和节点聚类实验中 10 次实验的平均结果。

MS-HGANN w/o R.:MS-HGANN 的变体模型,它将特定关系编码器替换为平均编码器。

MS-HGANN w/o N.:MS-HGANN 的变体模型,它将特定关系节点注意力替换为线性层。

MS-HGANN w/o Nw.:MS-HGANN 的变体模型,它将

节点感知注意力替换为线性层。

MS-HGANN w/o Rw.:MS-HGANN 的变体模型,它将关系感知注意力替换为线性层。

如图 4 所示,每个附加层都对模型的性能做出了积极贡献。值得注意的是,特定关系编码器和特定关系节点注意力在影响 MS-HGANN 性能方面发挥了重要作用,这表明本文设计的二阶特定视图自我图融合模块非常有效。此外,研究结果表明,在语义感知模块中使用关系感知注意力优于节点感知注意力,这更加凸显了关系信息的有效性。

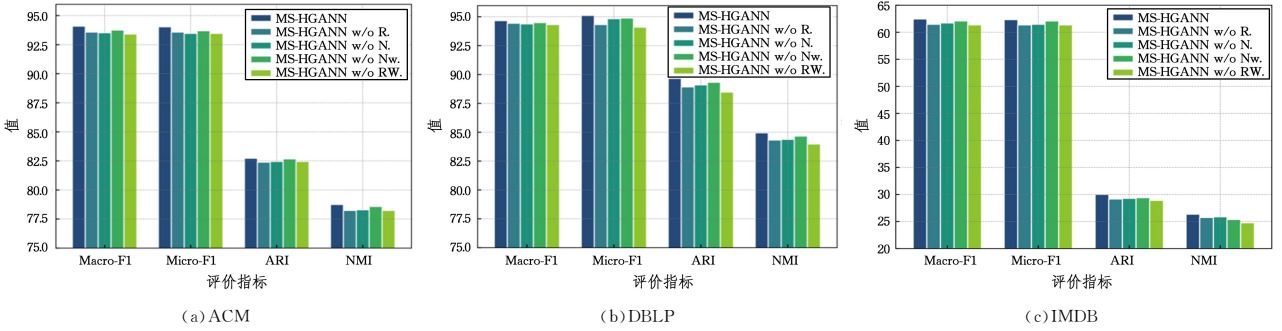


图 4 消融实验结果

Fig. 4 Ablation experimental results

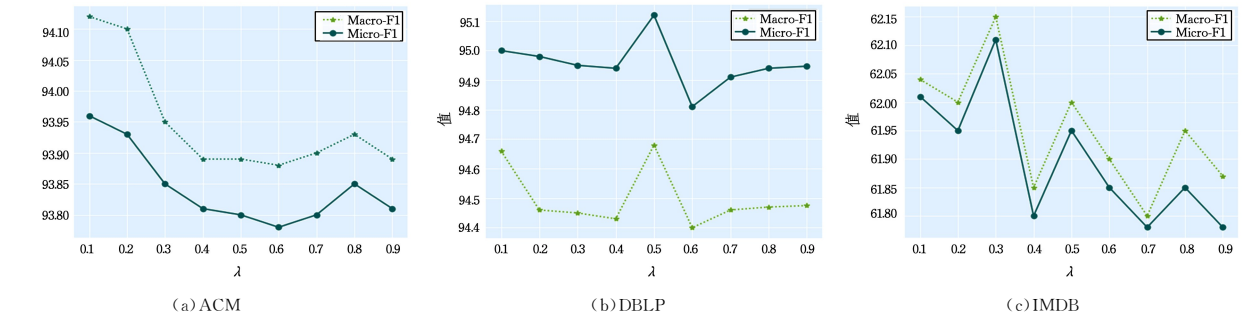
4.7 参数敏感性分析

本节将进行实验来检验 3 个关键参数对实验结果的影响。为简单起见,使用 Macro-F1 或 Micro-F1 评估节点分类实验,使用 NMI 评估节点聚类实验,并使用 20% 的数据集在 3 个数据集上进行训练。

首先研究参数 λ 对式(17)的影响。改变参数 λ 后产生的影响如图 5 所示。正如第 3.3 节所述, λ 值越大,节点感知注意力的权重越大。实验结果表明,不同数据集的最佳 λ 设置各不相同,当 λ 超过 0.5 时,模型在 3 个数据集上的性能都开始下降。由此可以推断,关系感知注意力能比节点感知注意

力更好地学习异质图的结构和语义信息。

其次,在 3 个数据集上进行了节点分类和节点聚类实验,节点维度设置为 6 个不同的值 {16, 32, 64, 128, 256, 512}。实验结果如图 6 所示,从中可以看出,在 ACM 和 DBLP 数据集上,本文模型明显优于对比模型。值得注意的是,即使节点维度变得非常大,本文模型的性能也未降低甚至有所提升。相反,在 IMDB 数据集上,多数基线模型的维度超过 256 或 512 时,其性能就开始急剧下降,这可能是由于从节点表示中学习到太多噪声。在 IMDB 数据集的分类实验中,本文模型不如最佳模型,这值得我们深思。

图 5 参数 λ 敏感性分析Fig. 5 Sensitivity analysis of parameter λ

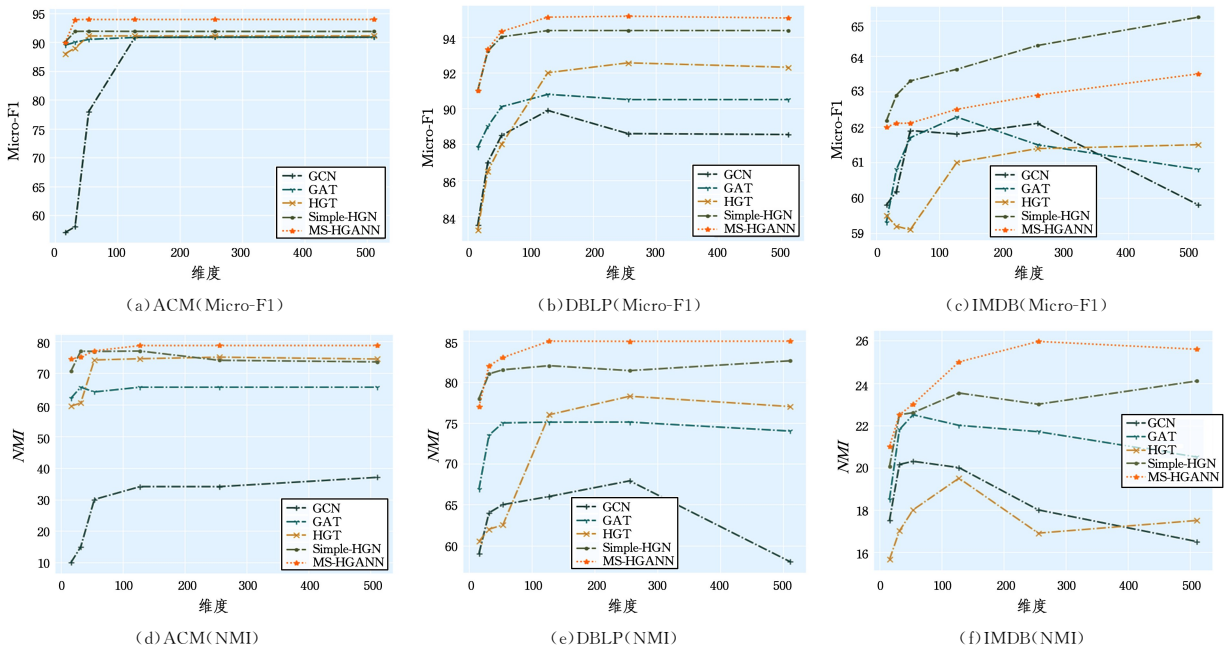


图6 节点维度敏感性分析

Fig. 6 Sensitivity analysis of node dimension

最后,将层数设置为1—7,并分别在3个数据集上进行节点分类和节点聚类实验。图7中的结果显示,增加模型层数后大多数模型的性能会出现先升后降的趋势。相比之下,本文模型在6个实验中的5个实验中都表现较好,在IMDB数据集上的节点聚类任务性能有所下降,这种偏差可归因于异质图的独特属性。本文模型使用消息传递以顺序和分层的方式融合节点的本地信息,这一过程与异质图的异质性和丰富语义有关。例如,在IMDB数据

集中,连接导演和演员节点的唯一路径是 $D \rightarrow M \rightarrow A$ 。为了理解导演之间的合作演员关系,模型需要遍历 $D \rightarrow M \rightarrow A \rightarrow M \rightarrow D$ 的路径,这在大多数图神经网络中至少需要4层。根据实验结果可得出结论:本文模型能够通过信息传递机制有效地收集信息,而且不容易过度平滑。虽然使用更多的层数可以提高性能,但会引起一些小的波动,这表明最佳层数可能会因使用的具体任务和数据集而有所不同。

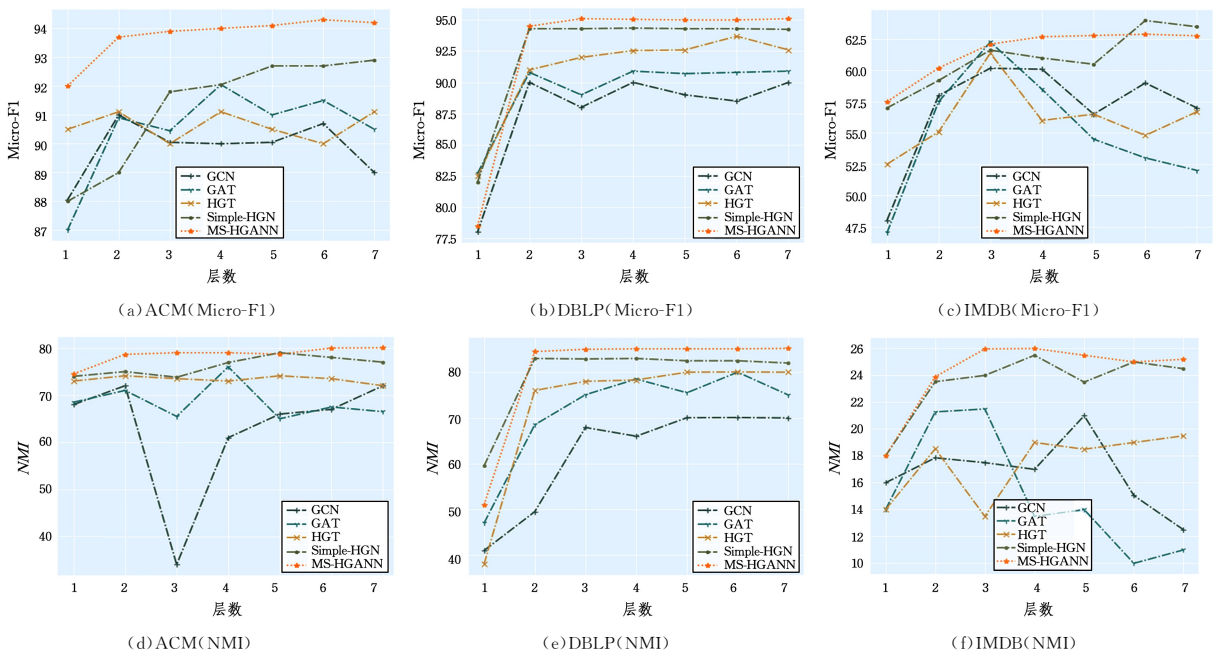


图7 图神经网络的层数敏感性分析

Fig. 7 Layer sensitivity analysis of graph neural network

4.8 可视化

为了更直观地了解本文提出的模型在异质图表示学习上的性能,将MS-HGANN模型与HAN, MAGNN和Simple-

HGN模型在3个不同的数据集上进行了可视化实验。使用t-SNE^[39]将从测试集中提取的节点嵌入投影到二维空间中。实验结果如图8—图10所示,各图神经网络模型的聚类效率

存在显著差异。其中,基于元路径的方法(HAN 和 MAGNN)的聚类效率最低,不同颜色的节点混杂在一起,尤其是在 ACM 和 IMDB 数据集上。此外,虽然 Simple-HGN 可以更准确地对节点进行分类,但相同颜色的节点分布不够紧密。相反,本文提出的模型与其他模型相比具有更优越的节点嵌入效果,它能将同一类型的节点紧密融合在一起,并在不同节点类型之间建立清晰的界限。即使在 IMDB 数据集上,本文模型的节点嵌入效果也是最好的,超过了其他所有模型。

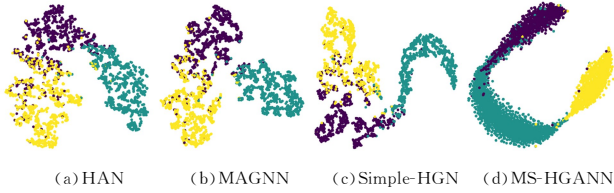


图 8 ACM 数据集上的可视化

Fig. 8 Visualization on ACM dataset

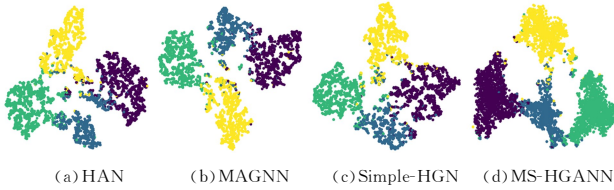


图 9 DBLP 数据集上的可视化

Fig. 9 Visualization on DBLP dataset

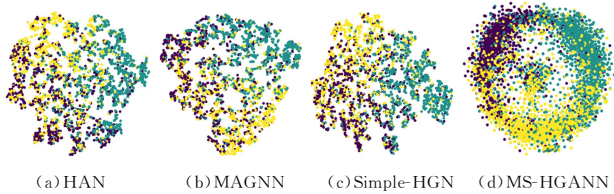


图 10 IMDB 数据集上的可视化

Fig. 10 Visualization on IMDB dataset

4.9 模型复杂度比较

只比较实验的节点分类和聚类效果是片面的,在提高模型有效性的同时,还需要考虑模型的时间和内存消耗。本文在 DBLP 数据上比较了 MS-HGANN 与基线的时间和内存消耗。实验在 Ubuntu 系统上进行,该系统采用 Intel(R) Xeon(R) Silver 4314 CPU @2.40 GHz(32 个物理内核)和英伟达(NVIDIA)GeForce RTX 3080 GPU(10 GB 内存)。观察图 11 可以发现,与同质图模型(如 GAT 和 GCN)相比,异质图模型在内存消耗上明显更多,但性能也有显著提升。

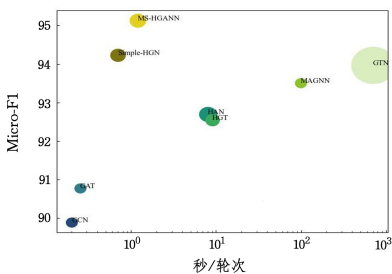


图 11 模型复杂度比较

Fig. 11 Comparison of model complexity

特别地,与使用元路径的模型(如 HAN, HGT, MAGNN 和 GTN)相比,MS-HGNN 在时间和内存消耗方面总体消耗更少,性能更好。尽管与最佳基准模型 Simple-HGN 相比,本文模型在时间和内存消耗上略有增加,但性能提升了约 1%。我们认为这一性能提升是值得的。

结束语 本文定义了二阶特定视图自我图,并提出了一个名为 MS-HGANN 的模型,它只需占用较少内存和时间,就能有效学习异质图中的节点嵌入,而无需元路径。该模型包括 3 个阶段:特征映射、二阶特定视图自我图融合和语义感知。在二阶特定视图自我图中定义了二阶特定视图自我图的概念,并且设计了 3 种候选编码器。受到 TransE 算法的启发,设计了一个特定关系编码器来表示异质图中的一对一的关系。在 3 个真实基准数据集上进行的实验结果表明,MS-HGANN 在节点分类和节点聚类任务中都取得了最先进的性能。此外,还进行了包括超参数敏感性分析、可视化技术和模型复杂性比较在内的全面实验,本文提出的模型在较小内存和较短时间的情况下取得了最佳的性能。在未来的工作中,我们计划进一步探索在 IMDB 数据集上 Simple-HGN 的分类效果比 MS-HGANN 更好的原因。目前,我们有两种猜测,一种是图注意力机制难以学习距离信息,容易出现过拟合;另一种可能是我们设计的两种协调注意力机制存在冗余,不能有效学习图的异质图。我们计划在后续研究中解决这个问题。

参考文献

- [1] SUN Y, HAN J. Mining heterogeneous information networks: a structural analysis approach [J]. ACM SIGKDD Explorations Newsletter, 2013, 14(2): 20-28.
- [2] ATWOOD J, TOWSLEY D. Diffusion-convolutional neural networks [C] // Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: Curran Associates Inc, 2016: 2001-2009.
- [3] ZHAO M, JIA A L. DAHGN: Degree-Aware Heterogeneous Graph Neural Network [J]. Knowledge-Based Systems, 2024, 285: 111355.
- [4] KIPF T, WELLING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks [EB/OL]. (2017-02-09) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1609.02907>.
- [5] WENG L J, ZHANG Q H, LIN Z B, et al. Harnessing heterogeneous social networks for better recommendations: A grey relational analysis approach [J]. Expert Systems with Applications, 2021, 174: 114771.
- [6] WANG D X, CUI P, ZHU W. Structural Deep Network Embedding [C] // Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2016: 1225-1234.
- [7] BERG R, KIPF T N, WELLING M. Graph convolutional matrix completion [EB/OL]. (2017-06-07) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1706.02263>.
- [8] ZHANG J, SHI X, ZHAO S, et al. STAR-GCN: Stacked and Reconstructed Graph Convolutional Networks for Recommender Systems [C] // Proceedings of the Twenty-Eighth International Joint Conference on Artificial Intelligence. Hawaii: AAAI Press,

- 2019;4264-4270.
- [9] FOUT A, BYRD J, SHARIAT B, et al. Protein interface prediction using graph convolutional networks[C]// Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: Curran Associates Inc, 2017; 6533-6542.
- [10] ZITNIK M, AGRAWAL M, LESKOVEC J. Modeling polypharmacy side effects with graph convolutional networks[J]. *Bioinformatics*, 2018, 34(13): i457-i466.
- [11] LI Y, YU R, SHAHABI C, et al. Diffusion convolutional recurrent neural network: data-driven traffic forecasting[EB/OL]. (2017-07-06)[2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1707.01926>.
- [12] ZHANG J, SHI X, XIE J, et al. Gaan: gated attention networks for learning on large and spatiotemporal graphs [EB/OL]. (2018-03-20) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1803.07294>.
- [13] DONG Y, CHAWLA N, SWAMI A, et al. Metapath2vec: scalable representation learning for heterogeneous networks[C]// Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2017; 135-144.
- [14] FU T Y, LEE W C, LEI Z. HIN2Vec: explore meta-paths in heterogeneous information networks for representation learning [C]// Proceedings of the 2017 ACM on Conference on Information and Knowledge Management. New York: Association for Computing Machinery, 2017; 1797-1806.
- [15] ZHANG W, FANG Y, LIU Z, et al. Mg2vec: learning relationship-preserving heterogeneous graph representations via meta-graph embedding [J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2020, 34(3), 1317-1329.
- [16] ZHAO K, BAI T, WU B, et al. Deep adversarial completion for sparse heterogeneous information network embedding[C]// Proceedings of The Web Conference 2020. New York: Association for Computing Machinery, 2020; 508-518.
- [17] HU Z, DONG Y, WANG K, et al. Heterogeneous graph Transformer[C]// Proceedings of The Web Conference 2020. New York: Association for Computing Machinery, 2020; 2704-2710.
- [18] VASHISHTH S, SANYAL S, NITIN V, et al. Composition-based multi-relational graph convolutional networks[EB/OL]. (2019-11-08) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1911.03082>.
- [19] YANG Y, GUAN Z, LI J, et al. Interpretable and efficient heterogeneous graph convolutional network[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 35(2): 1637-1650.
- [20] WANG X, JI H, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network[C]// The World Wide Web Conference. New York: Association for Computing Machinery, 2019; 2022-2032.
- [21] FU X, ZHANG J, MENG Z, et al. MAGNN: metapath aggregated graph neural network for heterogeneous graph embedding [C]// Proceedings of the Web Conference 2020. New York: Association for Computing Machinery, 2020; 2331-2341.
- [22] SHAO Z, XU Y, WEI W, et al. Heterogeneous Graph Neural Network With Multi-View Representation Learning[J]. *IEEE Transactions on Knowledge & Data Engineering*, 2023, 35(11): 11476-11488.
- [23] LV Q, DING M, LIU Q, et al. Are we really making much progress? Revisiting, benchmarking and refining heterogeneous graph neural networks [C]// Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2021; 1150-1160.
- [24] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[EB/OL]. (2017-10-30) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1710.10903>.
- [25] LI W, NI L, WANG J, et al. Collaborative representation learning for nodes and relations via heterogeneous graph neural network[J]. *Knowledge-Based Systems*, 2022, 255: 109673.
- [26] YANG X, YAN M, PAN S, et al. Simple and efficient heterogeneous graph neural network[C]// Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2023; 10816-10824.
- [27] HWANG H J, KIM G H, HONG S, et al. Multi-view representation learning via total correlation objective[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021, 34: 12194-12207.
- [28] TANG S, LI B, YU H. ChebNet: Efficient and stable constructions of deep neural networks with rectified power units using chebyshev approximations [EB/OL]. (2019-11-07) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1911.05467>.
- [29] LEVIE R, MONTI F, BRESSON X, et al. Caylennets: graph convolutional neural networks with complex rational spectral filters[J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2018, 67(1): 97-109.
- [30] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral networks and locally Connected Networks on Graphs[EB/OL]. (2013-12-21) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/1312.6203>.
- [31] DEFFERRARD M, BRESSON X, VANDERGHEYNST P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering[C]// Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: Curran Associates Inc, 2016; 3844-3852.
- [31] CHEN M, WEI Z, HUANG Z, et al. Simple and deep graph convolutional networks[C]// Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning. Online: JMLR. org, 2020; 1725-1735.
- [32] HAMILTON W L, YING Z, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]// Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: Curran Associates. 2017; 1025-1035.
- [33] PANG B, FU Y, REN S, et al. CGNN: traffic classification with graph neural network[EB/OL]. (2021-10-19) [2024-03-11]. <https://arxiv.org/abs/2110.09726>.
- [34] WANG X, LIU N, HAN H, et al. Self-supervised Heterogeneous graph Neural Network with Co-contrastive Learning[C]// Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2021; 1726-1736.
- [35] YUN S, JEONG M, KIM R, et al. Graph transformer networks [C]// Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: Curran Associates Inc, 2019; 11983-11993.
- [36] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks[C]// Euro-

pean Semantic Web Conference. Berlin: Springer-Verlag, 2018: 593-607.

[37] ZHANG C, SONG D, HUANG C, et al. Heterogeneous graph neural network[C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: Association for Computing Machinery, 2019: 793-803.

[38] BORDES A, USUNIER N, GARCIA-DURÁN A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data[C]//Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems-Volume 2. New York: Curran Associates Inc, 2013: 2787-2795.

[39] AN DER MAATEN L, HINTON G. Visualizing data using t-SNE[J]. Journal of Machine Learning Research, 2008, 9: 2579-2605.



WANG Jinghong, born in 1967, Ph.D., professor, is a member of CCF (No. 58341S). Her main research interests include artificial intelligence, pattern recognition, machine learning and data mining.

(责任编辑:何杨)

关于开展 2025 年度计算机安全专委会博士学位论文激励计划 评选的通知

为进一步推动网络安全领域高水平创新人才培养工作,激励网络安全领域的博士研究生潜心钻研、务实创新,按照《计算机安全专委会博士学位论文激励计划遴选办法》的文件要求,专委会决定启动 2025 年度计算机安全专委会优秀博士学位论文激励计划的评选工作。现将具体事项通知如下:

一、参评条件

- 1) 评选范围为 2022 年 6 月 1 日至 2025 年 5 月 30 日期间在中国获得计算机科学与技术学科及相关学科的博士学位论文。
- 2) 参加评选的博士学位论文作者须至少有 1 篇(使用母语写作的)中文期刊。
- 3) 参加评选的博士学位论文未获得过 CCF 及其专业委员会、其他一级学会的博士学位论文激励计划或提名,未同时申请 CCF 及其专业委员会、其他学会同类奖项。
- 4) 参评学生须为 CCF 安全专委会会员。
- 5) 参评论文选题应为网络安全相关领域学科前沿,有重要理论意义或现实意义;在理论或方法上有创新,取得突破性成果,达到国际同类学科先进水平,具有较好的社会效益或应用前景;同时材料翔实,推理严密,文字表达准确,符合学术规范,内容不涉密,可在互联网上公开评审并全文公示。

二、推荐要求

专委会优秀博士学位论文激励计划遴选实行推荐制,以下人员和机构具有推荐资格:

- 1) 具有计算机类学科博士授权的高校或研究机构有推荐资格。每个具有计算机科学与技术一级学科博士授权的单位推荐参评学位论文不超过 2 篇。
- 2) 专委会执行委员,每位专委会委员推荐不超过 1 篇。

三、入选限制

该计划将在 2025 年度评选出原则上不超过 3 篇在网络安全领域做出杰出创新研究工作的博士学位论文入选“CCF 计算机安全专委会博士学位论文激励计划”。同一单位入选论文不超过 2 篇。

四、推荐材料要求及提交流程

- 1) 每篇学位论文需提交电子版论文 1 份。
- 2) 博士学位证明材料。
- 3) 《推荐表》及其对应的证明材料:有关证明材料需整合为一个 pdf 文件。所有推荐材料均以电子版形式提交于 2025 年 6 月 30 日前发送至专委会邮箱 ccfsecurity@163.com,邮件主题请注明“CCF 计算机安全专委会博士学位论文激励计划-姓名-学校”。

五、评选时间计划

受理:2025 年 6 月 30 日 17 点前;格式和资质审查:2025 年 7 月中上旬;初评、终评:2025 年 7 月下旬-2025 年 8 月;公示:评审结果将在 2025 年 9 月进行公示。

据 CCF 微信公众号