

文章编号:1008-1542(2021)01-0048-12

异构网络表示学习方法综述

王建霞,刘梦琳,许云峰,张 妍

(河北科技大学信息科学与工程学院,河北石家庄 050018)

摘要:现实生活中存在的网络大多是包含多种类型节点和边的异构网络,比同构网络融合了更多信息且包含更丰富的语义信息。异构网络表示学习拥有强大的建模能力,可以有效解决异构网络的异质性,并将异构网络中丰富的结构和语义信息嵌入到低维节点表示中,以便于下游任务应用。通过对当前国内外异构网络表示学习方法进行归纳分析,综述了异构网络表示学习方法的研究现状,对比了各类别模型之间的特点,介绍了异构网络表示学习的相关应用,并对异构网络表示学习方法的发展趋势进行了总结与展望,提出今后可在以下方面进行深入探讨:1)避免预先定义元路径,应充分释放模型的自动学习能力;2)设计适用于动态和大规模网络的异构网络表示学习方法。

关键词: 计算机神经网络;异构网络;表示学习;图神经网络;建模能力

中图分类号: TP311.13 **文献标识码:** A **doi:** 10.7535/hbkj.2021yx01007

Review on heterogeneous network representation learning method

WANG Jianxia, LIU Menglin, XU Yunfeng, ZHANG Yan

(School of Information Science and Engineering, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang, Hebei 050018, China)

Abstract: Most of the real-life networks are heterogeneous networks that contain multiple types of nodes and edges, and heterogeneous networks integrate more information and contain richer semantic information than homogeneous networks. Heterogeneous network representation learning to have powerful modeling capabilities, enables to solve the heterogeneity of heterogeneous networks effectively, and to embed the rich structure information and semantic information of heterogeneous networks into low-dimensional node representations to facilitate downstream task applications. Through sorting out and classifying the current heterogeneous network representation learning methods at home and abroad, reviewed the current research status of heterogeneous network representation learning methods, compared the characteristics of each category model, introduced the related applications of heterogeneous network representation learning, and summarized and prospected the development trend of heterogeneous network representation learning methods. It is proposed that in-depth discussion can be carried out in the following aspects in future: First, avoid predefined meta-paths and fully release the automatic learning capabilities of the model; Second, design heterogeneous network representation learning method suitable for dynamic and large-scale networks.

Keywords: computer neural network; heterogeneous network; representation learning; graph neural network; modeling capabilities

收稿日期:2020-10-02;修回日期:2020-10-27;责任编辑:王淑霞

基金项目:中国留学基金委地方合作项目(201808130283);中国教育部人工智能协同育人项目(201801003011);河北科技大学校立课题(82/1182108)

第一作者简介:王建霞(1970—),女,河北临城人,教授,硕士,主要从事网络与数据库、图像处理方面的研究。

通讯作者:许云峰副教授。E-mail: hbkj_xyf@hebust.edu.cn

王建霞,刘梦琳,许云峰,等.异构网络表示学习方法综述[J].河北科技大学学报,2021,42(1):48-59.

WANG Jianxia, LIU Menglin, XU Yunfeng, et al. Review on heterogeneous network representation learning method[J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2021, 42(1): 48-59.

现实世界的数据集大多是以图形或网络等数据结构表示,其中对象及其之间的关系分别由节点和边来体现。例如社交网络^[1-2]、物理系统^[3]、交通网络^[4-5]、引文网络^[6-7]、推荐系统^[8-9]、知识图^[10]等。网络中的节点拥有丰富的属性信息(如图像、文本等),形成典型的复杂信息网络。基于复杂信息网络的普遍存在性,对信息网络进行研究和分析具有很高的应用价值。信息网络属于不规则的非欧几里德数据,如何有效地提取信息成为值得研究的课题。近些年来,网络表示学习在结构特征提取方面显示出强大的潜力。如图 1 所示,网络表示学习方法从复杂的信息网络中学习每个实体的特征信息,将其表示为低维稠密的实数向量,以应用于下游机器的学习任务^[11]。

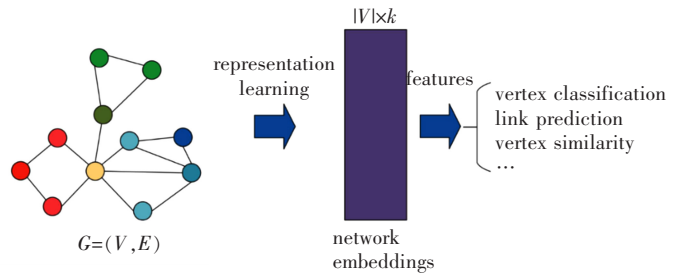


图 1 网络表示学习流程图^[12]

Fig.1 Flow chart of network representation learning^[12]

目前大多数网络表示学习方法都集中在同构网络上,只考虑一种节点对象和一种连接关系,忽略了网络的异质性。然而,现实生活中存在更多的是包含多种类型的节点以及边的异构网络。相比同构网络,异构网络融合了更多信息且包含更丰富的语义信息。若直接将异构网络当作同构网络去处理,很容易造成信息的丢失,影响下游任务的效果,所以近年来越来越多针对异构网络的表示学习方法被设计出来。CHANG 等^[13]设计了一个深度表示学习模型以捕捉网络中异质数据之间的复杂交互。FU 等^[14]利用神经网络模型捕获了异构网络中丰富的关系语义学习节点的表示。

当前,包含不同类型的节点和连接关系的异构网络的表示学习综述相对较少。周慧等^[15]介绍了基于网络结构的异构网络嵌入方法,但缺少对图神经网络方法的介绍。本文系统地介绍了异构网络表示学习相关方法的模型,分为基于网络结构的嵌入方法和图神经网络方法 2 大类,并细分为 4 个小类别,分别是基于随机游走方法、基于一阶/二阶相似度方法、基于图注意力网络方法和基于图卷积网络方法,对比了各模型的优缺点和应用场景。同时,还整理了开源实现的表示学习模型以及常用的数据集供研究者参考。异构网络表示学习方法分类如图 2 所示。

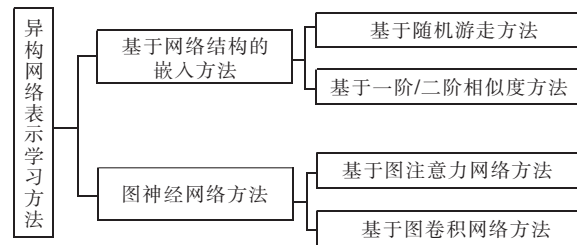


图 2 异构网络表示学习方法类别

Fig.2 Classification of heterogeneous network representation learning methods

1 异构网络表示学习的基本定义

异构网络表示学习公式中常见符号及其含义如表 1 所示。

定义 1 异构信息网络(HIN,简称异构网络)^[16]

异构网络定义为 $g = \{V, \epsilon, A, R, \varphi, \phi, \psi\}$, 式中: V 表示网络中所有节点的集合; ϵ 表示网络中连接关系集合; A 表示节点类型集合; R 表示连接关系类型集合。其中, $\varphi: V \times V \rightarrow \epsilon, \phi: V \rightarrow A, \psi: \epsilon \rightarrow R$ 分别表示关系映射、节点类型映射和连接关系类型映射,并且满足 $|A| + |R| > 2$ 。

如图 3 a)和图 3 b)所示,异构网络(IMDB 数据集)由多种类型的对象(演员(A)、电影(M)、导演(D))和关系(电影(M)与导演(D)之间的拍摄关系,演员(A)与电影(M)之间的角色扮演关系)组成。在异构网络中,2 个对象可以通过不同的语义路径

表 1 常用符号及其含义

Tab.1 Commonly used notations

符号	含义
g	网络或图
V	网络中节点的集合
ϵ	网络中边的集合
v	节点 v
P	元路径
$P(v, j)$	连接节点 v 和 j 的元路径实例
x_v^A	类型为 A 的节点 v 的原始特征向量
\mathcal{N}_v^P	节点 v 的基于元路径的邻居
W	权重矩阵
h'_v	映射后的节点 v 的特征向量
\odot	Element-wise multiplication
α, β	标准化注意力权重
$\sigma(\cdot)$	sigmoid 激活函数
\parallel	向量拼接

进行连接,这种连接方式称为元路径。

定义2 元路径(Meta-path)^[17]

元路径定义为 $P:V_1 \xrightarrow{R_1} V_2 \xrightarrow{R_2} \dots \xrightarrow{R_l} V_{l+1}$ (缩写为 $(A_1 A_2 \dots A_{l+1})$) 形式的路径,描述了在节点类型 V_1 和 V_{l+1} 之间的一个组合关系 $R=R_1 \circ R_2 \circ \dots \circ R_l$,其中 \circ 表示组合操作符关系。

如图3c)所示,通过多条元路径(例如, moive-actor-moive(MAM)和 movie-director-movie(MDM))连接2部电影。不同的元路径揭示不同的语义,MAM表示共同角色关系,而MDM则表示他们由同一导演制作。给定一条元路径P,每个节点都有一组基于元路径的邻居,可以在异构网络中揭示多种结构信息和丰富的语义信息。

定义3 基于元路径的邻居(Meta-path based neighbors)

在异构网络中给定一个节点 v 和一条元路径 P ,将节点 v 基于元路径的邻居 N_v^P 定义为通过元路径 P 与节点 v 连接的一组节点,节点的邻居包括自己。

以图3d)为例,给定元路径 MAM, M_1 基于元路径的邻居包括 M_1 (自己), M_2 和 M_3 。类似地, M_1 的基于元路径 MDM 的邻居包括 M_1 和 M_2 。

定义4 网络表示学习^[18]

给定一个网络 $g = \{V, \epsilon\}$,其中 V 表示网络 g 中的节点集; ϵ 表示网络 G 中的边集。目标是为网络中的节点 $v \in V$ (或边、子图等)学习一映射关系 $f: v \rightarrow r_v \in R^d$,其中 r_v 是为节点 v 学得的低维稠密向量, $d \ll |V|$,转换函数 f 用于捕获定义在原网络中的相似度信息。

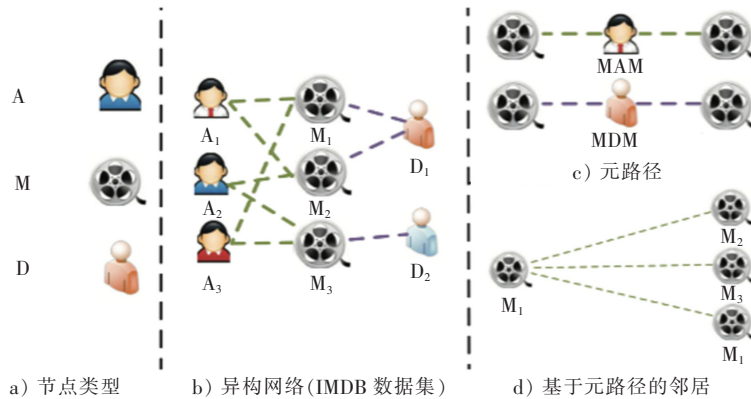


图3 异构网络(以IMDB数据集为例)的说明示例图^[19]

Fig.3 An illustrative example of a heterogeneous network(IMDB Dataset)^[19]

2 异构网络表示学习方法介绍

异构网络表示学习方法是将异构网络中丰富的结构信息和语义信息嵌入到低维节点表示中,便于下游任务应用。随着深度学习的兴起,图神经网络(GNN)成为近年来异构网络表示学习领域中的热门研究方向。与基于网络结构的嵌入方法相比,图神经网络方法通过聚合节点自身属性信息以及邻居节点信息得到节点的嵌入表示。

2.1 基于网络结构的嵌入方法

基于网络结构的嵌入方法单纯利用网络中拓扑结构的相似性生成节点嵌入向量,根据获取相似性方式的不同,分为基于随机游走方法和基于一阶/二阶相似度方法,各模型的主要特点如表2所示。

表 2 基于网络结构的嵌入方法的综合比较

Tab.2 Comprehensive comparison of embedded network structure-based embedding methods

类别	研究者	算法模型	监督	算法特点	应用
	DONG 等 ^[20]	metapath2vec	NO	使用基于元路径的随机游走和 skim-gram 的方式解决异质性问题,但只考虑单条元路径	分类/聚类/ 链接预测/推荐
基于随机 游走方法	SHI 等 ^[21]	HERec	NO	使用对称的元路径来有效提取网络结构特征,但未考虑任意元路径下节点的嵌入表示	推荐
	FU 等 ^[14]	HIN2Vec	Yes	将节点和节点间的关系简化成二分类问题,但未考虑嵌入数据的稀疏表示	分类/聚类/ 链接预测/推荐
	TANG 等 ^[22]	PTE	Yes	使用改进的 LINE 算法学习文本数据表示,但未考虑文本中单词的顺序	文本分类
基于一阶/ 二阶相似 度方法	SHI 等 ^[23]	AspEm	NO	通过将输入的异构网络分解为多个方面(aspects)来捕获异构网络的不兼容性,但未对不同程度的不兼容性进行建模	方面挖掘
	SHI 等 ^[24]	HEER	NO	针对不同类型的边使用不同的度量空间来表示,但未考虑更复杂的网络结构信息	知识图中的 关系预测

2.1.1 基于随机游走方法

metapath2vec 模型是 DONG 等^[20]在 2017 年提出的一种用于异构网络的节点嵌入方法。该方法使用基于元路径的随机游走策略,从异构网络获取每个顶点的异构邻居。即给定一条元路径 P ,第 i 步的转移概率为

$$p(v^{i+1} | v_i, P) = \begin{cases} \frac{1}{|N_{t+1}(v_i)|}, & (v^{i+1}, v_i) \in \epsilon, \phi(v^{i+1}) = t + 1, \\ 0, & (v^{i+1}, v_i) \in \epsilon, \phi(v^{i+1}) \neq t + 1, \\ 0, & (v^{i+1}, v_i) \notin \epsilon, \end{cases} \quad (1)$$

式中: $v_i \in V_t, V_t$ 表示网络中类型为 t 的节点集合; $N_{t+1}(v_i)$ 表示顶点 v_i 的 $t+1$ 类型的邻居节点集合, $t, t+1 \in A$ 。在不区分节点类型的前提下,使用 skip-gram 模型学习异构网络中的节点表示。此外,DONG 等^[20]对 skip-gram 进行改进,改进后的模型 metapath2vec++使不同类型的节点在输出层被区分开。

metapath2vec 模型使用基于元路径随机游走和 skim-gram 的方式解决了异构网络的异质性问题,提供了异构网络表示学习研究的基本思路。

HERec 模型^[21]利用一种类型约束策略过滤节点序列,捕获异构网络中反映的复杂语义。通过一些对称的元路径将异构网络变成同构网络,然后在同构网络中根据 node2vec 方法^[25]优化以下目标函数,学习单条元路径下节点的嵌入如式(2)所示:

$$\max_f \sum_{v \in V} \log Pr(N_v^P | f(v)), \quad (2)$$

式中: f 是将节点映射到低维特征空间上的函数; N_v^P 表示在给定一条元路径的情况下节点 v 的邻居。最后融合各条元路径的信息得到最终的节点表示。

不同于 metapath2vec 和 HERec,按照给定元路径模式游走的方式,HIN2Vec 模型^[17]完全随机选择游走节点,只要节点有连接均可游走。HIN2Vec 模型采用基于随机游走和负采样的方法生成符合目标关系的点边序列。如图 4 所示,假设随机游走得到序列 P_1, P_2, A_1, P_3, A_1 ,目标关系包含元路径长度不大于 2 的所有关系,那么对于节点 P_1 ,可以产生训练数据

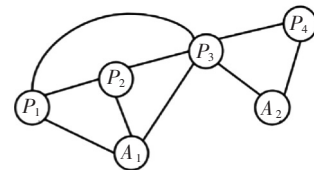


图 4 论文-作者异构网络^[17]
Fig.4 A paper-author heterogeneous network^[17]

$(P_1, P_2, P-P)$ 和 $(P_1, A_1, P-P-A)$ 。然后 HIN2Vec 模型将节点和节点间的关系简化成二分类问题,即给定 2 个节点 x, y , 通过预测节点之间是否存在确定的关系 r , 将分类问题作为优化目标学习节点表示。

metapath2vec, HERec 和 HIN2Vec 是异构网络表示学习的 3 个早期工作,为之后的工作提供参考。HU 等^[26]设计了一种通过结合基于元路径上下文的三向神经交互模型(MCRec)。该模型通过使用基于优先级的采样技术选择高质量的节点序列构建基于元路径的上下文,并利用共同注意力机制相互改善基于元路径的上下文和节点表示。

LU 等^[27]提出了一种可感知关系结构的异构网络嵌入模型(RHINE),包含 2 种与结构相关的度量,这些度量将异类关系区分为 2 类:从属关系(AR)和交互关系(IR)且专门为处理 AR 和 IR 量身定制了不同模型,可以更好地捕获网络的结构和语义。

在网络表示学习中,负采样是一项重要操作。通过提高负采样的效率,找到有代表的负样本,可以大大提高模型的性能。为了找到有代表性的负样本,HU 等^[28]将图对抗网络^[29](GAN)引入到异构网络表示学习中,提出了一种新的用于异构网络嵌入的框架(HeGAN)。HeGAN 根据关系类型使用 GAN 生成更具代表性的负样本。研究表明,无论是在分类、聚类还是链接预测任务中,HeGAN 方法显著优于 metapath2vec 方法和 HIN2Vec 方法^[28]。

2.1.2 基于一阶/二阶相似度方法

TANG 等^[22]在 LINE 算法^[30]的基础上进行改进,提出了一种半监督的文本数据表示学习方法,即预测文本嵌入(PTE)。PTE 模型首先将异构网络分解为一组二部图网络,然后通过捕获二部图网络的二阶相似度学习节点的嵌入表示。PTE 模型的目标函数为

$$O = \sum_{r \in R} \sum_{(u,v) \in \epsilon^r} \omega_{uv}^r \log \frac{\exp(\mathbf{e}_u^T \mathbf{e}_v)}{\sum_{u' \in V_t} \exp(\mathbf{e}_{u'}^T \mathbf{e}_v)}, \quad (3)$$

式中: ω_{uv}^r 表示节点对 (u, v) 间类型为 r 的边所对应的权重系数; $u \in V_t, v \in V_{t+1}, V_t$ 和 V_{t+1} 是不同类型的 2 个不相交的顶点集合, $t, t+1 \in A$; \mathbf{e}_u 表示节点 u 的嵌入表示。

SHI 等^[23]发现之前很多算法都是把不同类型的节点映射到同一低维空间中,容易造成信息丢失,故提出一种新的嵌入式学习框架(AspEm),通过对异构网络进行多个方面的划分,实现了在避免信息丢失的情况下,获得高质量的节点嵌入表示,如图 5 所示。图 5 a)图例可以分解成图 5 b)中 2 个方面的子图。AspEm 还设计有一个不兼容信息的度量方法,为嵌入学习选取合适的方面。给定一个方面 a ,目标函数为

$$O^a = - \sum_{r \in R^a} \frac{1}{\Omega^r} \sum_{u \in V_{O(r)}} \omega_{uv}^{(r)} \log \frac{\exp(\mathbf{e}_{u,a}^T \mathbf{e}_{v,a})}{\sum_{u' \in V_{\phi(u)}} \exp(\mathbf{e}_{u',a}^T \mathbf{e}_{v,a})}, \quad (4)$$

式中: R^a 是方面 a 下的边集合; $\Omega^r = \sum_{u,v} \omega_{uv}^{(r)}$; $V_{O(r)} \in V$,表示传出类型为 r 的边的所有节点集合; $\phi(u) \in A, \mathbf{e}_{u,a}$ 是节点 u 在特定方面 a 下的嵌入表示。该模型进一步将不同方面子图通过 skip-gram 模型分别进行训练,最后将同一节点来自不同方面子图的向量表示整合在一起,得到最终的节点表示。

AspEm 方法虽然独立地获取了不同方面的信息,但是完全禁止了跨方面的联合学习。SHI 等^[24]对 AspEm 方法进行改进,提出 HEER 算法。HEER 算法允许不兼容的信息在联合学习过程中进行不同程度的协作。HEER 算法的基本思想:在节点表示的基础上建立边的表示,并且为不同类型的边采用不同的度量空间,通过结合边的表示和不同的度量空间,学习异构网络节点和边的嵌入表示。

2.2 图神经网络方法

近年来,随着图神经网络(GNN)的兴起,以图卷积网络(graph convolutional network)和图注意力网络(graph attention network)为代表的图神经网络被广泛应用于异构网络表示学习中。与同构网络不同,异构网络通常需要考虑不同关系下邻居信息的差异。因此,异构图神经网络方法通常采用层次聚合的方式,即节

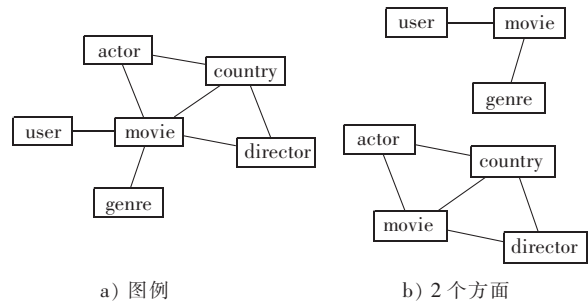


图 5 HIN 的图例和 2 个方面^[23]

Fig.5 Schema and two aspects of HIN^[23]

点级别的聚合以及语义级别的聚合。图神经网络方法的主要特点如表 3 所示。

表 3 图神经网络方法的综合比较

Tab.3 Comprehensive comparison of graph neural network methods

类别	研究工作	算法模型	节点级别聚合	语义级别聚合	特点	应用
基于图注意力网络方法	WANG ^[19] 等	HAN	注意力机制	注意力机制	融入节点属性信息与注意力机制,但未考虑元路径内部结构	节点分类/聚类
	ZHANG ^[31] 等	HetGNN	LSTM	注意力机制	同时考虑异构网络的结构信息及每个节点的异构内容信息	节点分类/聚类/链接预测/推荐
	FU 等 ^[32]	MAGNN	注意力机制	注意力机制	使用注意力机制将元路径内部的节点信息纳入考虑,但需人为定义元路径	
基于图卷积网络方法	YUN 等 ^[33]	GTNs	GCN	拼接	不需预先定义元路径,可以为给定的数据集自适应地学习到合适长度的元路径	节点分类

2.2.1 基于图注意力网络方法

近年来,深度学习引入了注意力机制,注意力机制的潜力在各个领域得到了充分证明。WANG 等^[19]首次将注意力机制引入异构图神经网络中研究,并提出一种基于层次注意力的异构图神经网络模型(HAN)。HAN 模型嵌入架构如图 6 所示,总体包括 2 部分:1)将所有类型的节点投影到统一的特征空间中,并通过节点级别注意力学习基于元路径的邻居节点的权重;2)利用语义级别注意力学习每条元路径的权重,并通过相应的聚合操作得到最终的节点表示。

HAN 节点级别的聚合:如图 6 a)所示,节点级注意力旨在学习给定元路径下不同邻居节点的重要性,然后通过加权平均学习节点在某条元路径下的表示。

$$\alpha_{vj}^P = att_{node}(\mathbf{h}'_v, \mathbf{h}'_j; P), \quad (5)$$

$$\mathbf{z}_v^P = \sigma\left(\sum_{j \in N_v^P} \alpha_{vj}^P \mathbf{h}'_j\right), \quad (6)$$

式中: α_{vj}^P 代表节点 v 在元路径 P 下的邻居节点 j 的重要性; att_{node} 代表执行节点级注意力的深度神经网络; \mathbf{h}'_v 代表映射后的节点 v 的特征向量; \mathbf{z}_v^P 代表节点 v 在元路径 P 下的表示。

HAN 语义级别的聚合(如图 6 b)所示):

$$(\beta_{P_0}, \beta_{P_1}, \dots, \beta_{P_M}) = att_{sem}(\mathbf{Z}_{P_0}, \mathbf{Z}_{P_1}, \dots, \mathbf{Z}_{P_M}), \quad (7)$$

$$\mathbf{Z} = \sum_{v=1}^M \beta_{P_v} \cdot \mathbf{Z}_{P_v}, \quad (8)$$

式中: $(\beta_{P_0}, \beta_{P_1}, \dots, \beta_{P_M})$ 代表各条元路径的重要性; att_{sem} 表示执行语义级注意力的深度神经网络; \mathbf{Z} 代表最终的节点表示, \mathbf{Z} 融合了节点多个方面的表示,可以更加全面地对节点进行描述。

ZHANG 等^[31]发现很少有网络可以同时考虑异构网络的结构信息以及每个节点的异构内容信息,故提出一种异构图神经网络模型(HetGNN)解决此问题。HetGNN 首先引入带有重启策略的随机游走方法为每个节点(见图 7 中节点 a)采样固定长度的异构邻居,然后利用节点异构内容编码器编码节点的异构内容,从而得到节点的初始嵌入表示。

HetGNN 节点级别的聚合:与 HAN 不同,HetGNN 采用 LSTM 作为聚合器聚合某种关系下的节点邻居并更新节点表示。

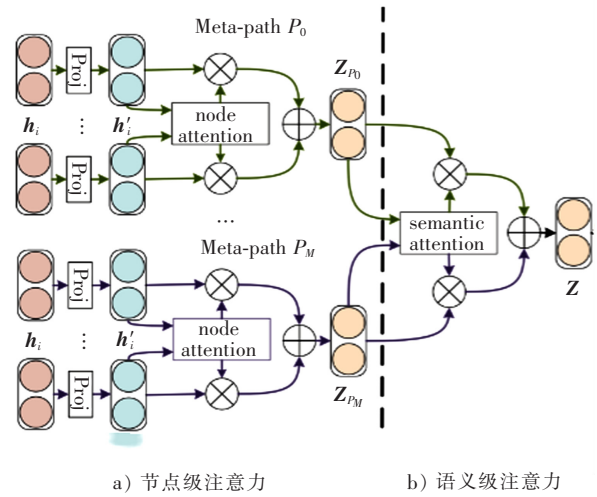
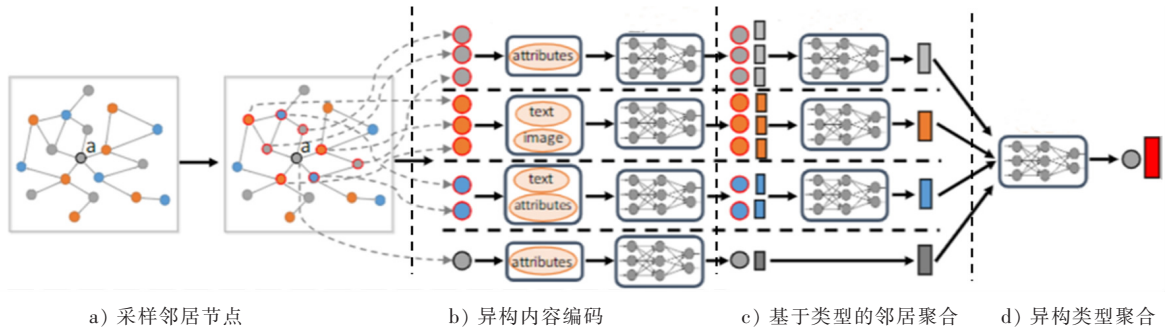


图 6 HAN 模型嵌入架构^[19]

Fig.6 Embedding framework of HAN model^[19]

图7 HetGNN 整体框架^[31]Fig.7 Overall architecture of HetGNN^[31]

$$f_2^t(v) = \frac{\sum_{v' \in N_t(v)} [\overrightarrow{\text{LSTM}}\{f_1(v')\} \oplus \overleftarrow{\text{LSTM}}\{f_1(v')\}]}{|N_t(v)|}, \quad (9)$$

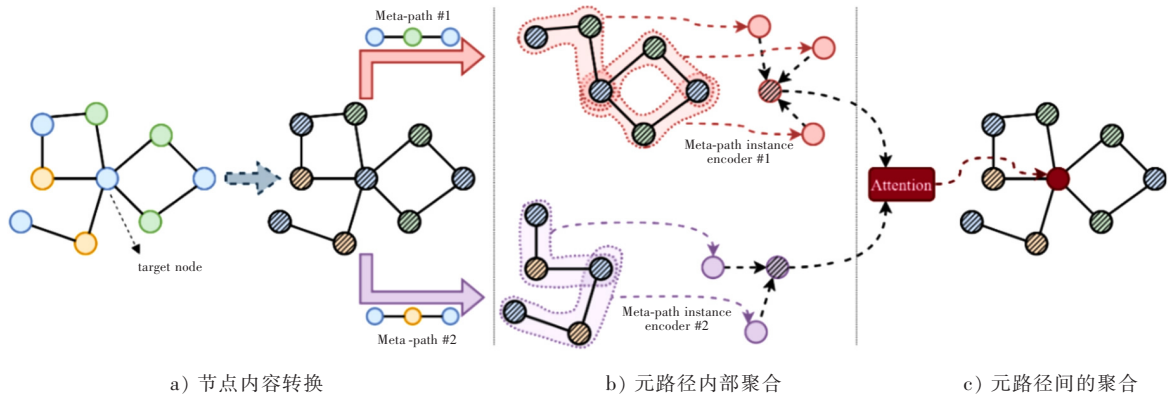
式中： $N_t(v)$ 是节点 v 在特定关系 t 下的邻居集合； $f_1(v')$ 是邻居节点 v' 的初始表示； $f_2^t(v)$ 是节点 v 聚合了特定关系 t 下邻居信息的表示。

HetGNN 语义级别的聚合：

$$\boldsymbol{\varepsilon}_v = \alpha^{v \cdot v} f_1(v) + \sum_{t \in A} \alpha^{v \cdot t} f_2^t(v), \quad (10)$$

式中： $\boldsymbol{\varepsilon}_v$ 是融合多个语义下节点 v 的表示； $\alpha^{v \cdot *}$ 表示不同嵌入的重要性，* 表示 v 或 t 。

目前大多基于元路径的表示学习方法舍弃了元路径内部的节点信息，只考虑元路径的起始节点和末尾节点，造成信息丢失。为了解决上述问题，FU 等^[32]提出了 MAGNN 模型，MAGNN 模型框架如图 8 所示。首先将异构网络的节点属性信息映射到同一个隐层的向量空间，然后使用注意力机制将元路径内部的语义信息纳入考虑，最后使用注意力机制聚合多条元路径信息得到最终的节点表示。

图8 MAGNN 模型框架^[32]Fig.8 Architecture of MAGNN model^[32]

MAGNN 节点级别的聚合：MAGNN 将元路径实例中所有节点的特征纳入考虑。

$$\mathbf{h}_{P(v,j)} = f_\theta(P(v,j)) = f_\theta(\mathbf{h}'_v \mathbf{h}'_j \{ \mathbf{h}'_t \mid \forall t \in \{m^{P(v,j)}\} \}), \quad (11)$$

$$\mathbf{h}_v^P = \sigma \left(\sum_{j \in N_v^P} \alpha_{vj}^P \cdot \mathbf{h}_{P(v,j)} \right), \quad (12)$$

式中： $\mathbf{h}_{P(v,j)}$ 表示将元路径实例 $P(v,j)$ 中所有节点的特征转换后的特征向量； $m^{P(v,j)}$ 表示 $P(v,j)$ 的内部节点； α_{vj}^P 表示元路径实例 $\mathbf{h}_{P(v,j)}$ 对节点 v 的重要性； \mathbf{h}_v^P 表示节点 v 中隐含的一种语义信息。

给出映射后的特征向量 \mathbf{h}'_v 以及一组元路径 $P_A = \{P_1, P_2, \dots, P_M\}$ ，元路径内部聚合为目标节点 v 生成 M 个针对特定元路径的向量表示，记为 $\{\mathbf{h}_v^{P_1}, \mathbf{h}_v^{P_2}, \dots, \mathbf{h}_v^{P_M}\}$ 。

MAGNN 语义级别的聚合：元路径间的聚合即语义级别的聚合，目的是组合所有元路径包含的语义信息。如式(14)所示，MAGNN 使用线性转换和一层非线性函数，将节点嵌入映射到所需维度的向量空间。

$$\mathbf{h}_v^{PA} = \sum_{P \in P_A} \beta_P \cdot \mathbf{h}_v^P, \quad (13)$$

$$\mathbf{h}_v = \sigma(\mathbf{W}_o \cdot \mathbf{h}_v^{PA}), \quad (14)$$

式中: β_P 表示各条元路径的重要性; \mathbf{h}_v^{PA} 代表类型为 A 的节点的最终表示; \mathbf{W}_o 代表线性转换的权重矩阵。

MAGNN 和其他模型在链接预测任务中的性能见表 4。由表 4 可知,MAGNN 的性能大大优于其他模型,其中最强大的基础模型是 metapath2vec,而 MAGNN 比 metapath2vec 得分更高,表明考虑单条元路径是欠佳的。在 GNN 基准中,HAN 获得最佳结果,因为 HAN 考虑了网络的异质性并结合多条元路径。MAGNN 与 HAN 相比改进了约 6%,结果表明元路径的内部信息对节点嵌入至关重要。

表 4 针对链接预测任务的 Last.fm 数据集的实验结果^[32]

Tab.4 Experiment results of Last.fm dataset for the link prediction task^[32]

		单位:%						
数据集	Metrics	metapath2vec	HERec	GCN	GAT	GATNE	HAN	MAGNN
Last.fm	AUC	92.20	91.52	90.97	92.36	89.21	93.40	98.91
	AP	90.11	89.47	91.65	91.55	88.86	92.44	98.93

2.2.2 基于图卷积网络方法

大多异构网络表示学习方法都需要预先指定元路径,但需要很强的先验知识,元路径的选择在极大程度上会影响模型的效果。YUN 等^[33]提出了一种能够生成新的图数据结构的图变换网络(GTNs),旨在解决异构网络分析中如何选取合适元路径的问题。

GTNs 模型架构如图 9 所示,GTNs 通过 GT 层将原始图数据 $\mathbf{A} \in R^{N \times N \times |R|}$ 转换成新的图数据 $\mathbf{A}^{(l)} \in R^{N \times N \times C}$,然后在新图数据上进行卷积操作学习有效的节点表示。其中,GT 层可以识别原始图数据中未连接节点之间的有用连接,并生成对任务有用的元路径。

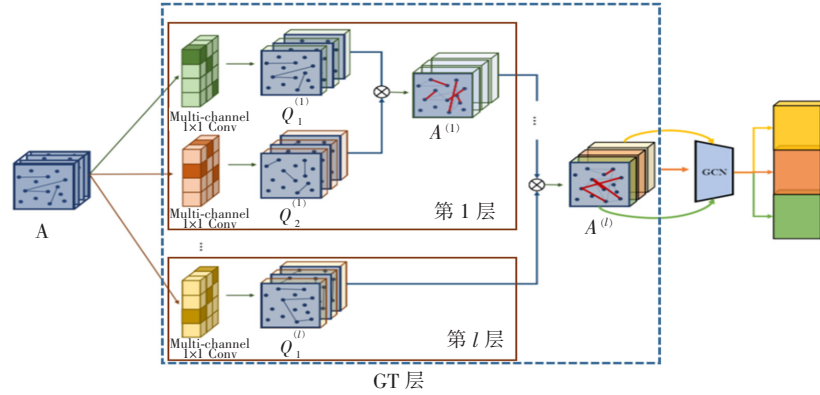


图 9 GTNs 模型架构^[33]

Fig.9 Framework of graph transformer networks (GTNs)^[33]

1) GTNs 节点级别的聚合

GTNs 采用 GCN 的聚合方式,针对第 i 条元路径,通过聚合得到该元路径下的节点表示为 \mathbf{Z}_i :

$$\mathbf{Z}_i = \sigma(\tilde{\mathbf{D}}_i^{-1} \tilde{\mathbf{A}}_i^{(l)} \mathbf{X} \mathbf{W}), \quad (15)$$

式中: $\tilde{\mathbf{A}}_i^{(l)} = \mathbf{A}_i^{(l)} + \mathbf{I}$,代表 $\mathbf{A}^{(l)}$ 第 i 条元路径的邻接矩阵, \mathbf{I} 为单位阵, $\tilde{\mathbf{D}}_i$ 是 $\tilde{\mathbf{A}}_i^{(l)}$ 的度矩阵; \mathbf{W} 是 1×1 卷积中需要训练的权重矩阵; \mathbf{X} 是输入的特征矩阵。

2) GTNs 语义级别的聚合

将多条元路径下的节点表示拼接起来得到最终节点表示 \mathbf{Z} :

$$\mathbf{Z} = \parallel_{i=1}^C \mathbf{Z}_i, \quad (16)$$

其中: \parallel 表示连接操作; C 代表通道数。

预定义的元路径和通过 GTNs 模型学习到的排名最高的元路径之间的比较见表 5。由表 5 可知,GTNs 模型找到了重要的元路径,这些元路径与按领域知识预先定义的元路径一致。此外,GTNs 还发现所有类型节点之间的新的相关元路径。

表5 预定义的元路径和 GTNs 的排名最高的元路径之间的比较^[33]Tab.5 Comparison between predefined meta-paths and top-ranked meta-paths of GTNs^[33]

数据集	预定义的元路径	GTNs 学习到的元路径	
		前三(目标节点之间)	前三(所有节点之间)
DBLP	APCPA, APA	APCPA, APAPA, APA	CPCPA, APCPA, CP
ACM	PAP, PSP	PAP, PSP	APAP, APA, SPAP
IMDB	MAM, MDM	MDM, MAM, MDMDM	DM, AM, MDM

3 应用

3.1 常用数据集

众多测试算法性能的数据集见表6,数据集包括3类,分别是引文网络、社交网络和电影数据。对于每个数据集,表中给出了数据集来源,分别统计了该数据集的边的类型、节点数、边数、标签类别数量,是否含有特征以及元路径,方便研究者选择适合模型的数据集。

表6 常用数据集整理^[19,21]Tab.6 Summary of commonly used data sets^[19,21]

类别	数据集	文献编号	边类型(A-B)	节点A个数	节点B个数	边(A-B)条数	标签	特征	元路径
Citation Net-works	DBLP	[19]	Paper-Author	14 328	4 057	19 645			APA,
			Paper-Conf	14 328	20	14 328	4	YES	APCPA,
	ACM	[19]	Paper-Term	14 327	8 789	88 420			APTPA
			Paper-Author	3,025	5,835	9,744	3	YES	PAP,PSP
Movie Data	IMDB	[19]	Paper-Subject	3,025	56	3,025			
			Movie-Actor	4 780	5 841	14 340	3	YES	MAM,MDM,DMD,AMA,DMAMD,AMDMA
	Douban Movie (Density: 0.63%)	[21]	Movie-Director	4 780	2 269	4 780			
			User-Movie	13 367	12 677	1 068 278			UMU,
			User-User	2 440	2294	4 085			UMDMU, UMAMU,
			User-Group	13 337	2753	570 047	NO	NO	UMTMU, MUM, MAM, MDM, MTM
Social Net-works	Douban Book (Density: 0.27%)	[21]	Movie-Actor	11 718	6 311	33 587			
			Movie-Type	12678	38	27 668			
			User-Book	13 024	22 347	792 026			UBU,
			User-User	12 748	12 748	169 150			BYB,
	Yelp (Density: 0.08%)	[21]	Book-Author	21 907	10 805	21 905	NO	NO	UBABU,
			Book-Publisher	21 773	1 815	21 773			UBPBU,
			Book-Year	21 192	64	21 192			UBYBU,
			User-Business	16 239	14 284	198 397			BUB,BPB
Last.fm	[32]	User-User	1 892	1 892	12 717			UBU,	
		User-User	10 580	10 580	158 590			UBCiBU,	
		User-Compliment	14 411	11	76 875	11	NO	UBCaBU,	
		Business-City	14 267	47	14 267			BUB,	
Last.fm	[32]	Business-Category	14 180	511	40 009			BCiB,	
		User-User	1 892	1 892	12 717			BCaB	
Last.fm	[32]	User-Artist	1 892	17 632	92 834	NO	YES	UU,UAU,	
		Artist-Tag	17 632	1 088	23 253			UATAU,AUA, AUUA,ATA	

3.2 开源实现

表 7 整理了具有代表性模型的开源实现,供研究者快速学习或复现验证模型效果。

表 7 开源实现的模型总结
Tab.7 Summary of open-source implementation

模 型	来 源	框 架	代码链接	论文链接
metapath2vec	KDD 2017	Tensorflow	https://github.com/apple2373/metapath2vec	https://www3.nd.edu/~dial/publications/dong2017metapath2vec.pdf
HERec	IEEE 2018	Python	https://github.com/librahu/HERec	https://arxiv.org/abs/1711.10730
HIN2Vec	CIKM 2017	Python	https://github.com/csiesheep/HIN2Vec	https://dl.acm.org/doi/10.1145/3132847.3132953
MCRec	KDD 2019	Tensorflow	https://github.com/librahu/MCRec	https://dl.acm.org/doi/abs/10.1145/3219819.3219965
RHINE	AAAI 2018	PyTorch	https://github.com/rootlu/RHINE	https://arxiv.org/abs/1905.08027
HeGAN	KDD 2019	Tensorflow	https://github.com/librahu/HeGAN	https://dl.acm.org/doi/10.1145/3292500.3330970
PTE	KDD 2017	C++	https://github.com/mnqu/PTE	https://arxiv.org/abs/1508.00200v1
AspEm	SIAM 2018	Python	https://github.com/ysyushi/AspEm	https://arxiv.org/abs/1803.01848
HEER	KDD 2018	PyTorch	https://github.com/GentleZhu/HEER	https://arxiv.org/abs/1807.03490
HAN	WWW 2019	Tensorflow	https://github.com/Jhy1993/HAN	https://arxiv.org/pdf/1903.07293.pdf
HetGNN	KDD 2019	PyTorch	https://github.com/chuxuzhang/KDD2019_HetGNN	https://www3.nd.edu/~dial/publications/zhang_2019_heterogeneous.pdf
MAGNN	WWW 2020	PyTorch	https://github.com/cynricfu/MAGNN	https://arxiv.org/pdf/2002.01680.pdf
GTNs	NIPS 2019	PyTorch	https://github.com/seongjunyun/Graph_Transformer_Networks	https://arxiv.org/abs/1911.06455

3.3 实际应用

异构网络表示学习方法可以应用到许多实际任务中,可以宽泛地将应用分为 3 类,即节点分类、节点聚类和链接预测。

1) 节点分类 其大多属于半监督的学习任务,即原始数据中给定某些节点对应的类别,通过学习已有标签的数据信息,从而预测没有标签的节点属于哪一个类别。通常先抽取节点的属性或结构特征为节点生成嵌入信息,然后应用逻辑回归等分类器为对应节点预测标签。节点分类应用领域十分广泛。如,在新闻和推特中,对短文本进行分类,帮助用户找到相关信息^[34];在社交网络中预测部分用户的标签信息;在生物领域中,对蛋白质生物功能进行标记。最近实验数据^[19,31-33]表明,融入属性信息的异构图神经网络模型对节点分类的精度都要高于基础模型 metapath2vec,表明利用异构节点特征的 GNN 架构可以得到更好的嵌入表示,对提高下游任务有很大的帮助。

2) 节点聚类 按照某个特定标准(如距离准则)把一个数据集分割成不同的类或簇,使得同一个簇内的数据对象的相似性尽可能大,同时不在同一个簇中数据对象的差异性也尽可能大。节点聚类算法可以用来为社交网络中的用户自动划分好友分组,为蛋白质网络中的各类蛋白质依照它们之间的联系自动聚类。研究^[32]表明,在节点聚类任务中,node2vec^[22]优于传统的异构模型^[20-21],这是由于 node2vec 作为一种基于随机游走方法,迫使图中靠近的节点在嵌入空间中也靠近^[35],从而对节点的位置信息进行编码,同时这个特性也极大促进了 K-Means 算法的发展。

3) 链接预测 旨在预测网络中丢失的边,或者未来可能会出现出现的边。在生物领域中,由于目前有很多蛋白质人们都不熟悉,因而实验时间和金钱成本高,需要较准确的预测以降低成本。例如文献^[36-40]预测可以发生相互作用的蛋白质,为疾病的发生和大规模的治疗设计提供有价值的见解。链接预测在社交网络也得到广泛应用,例如向用户推荐商品^[41-42]或熟人。由表 4 可知,MAGNN^[32]模型在链接预测方面的效果

最好,这是由于 MAGNN 不仅聚合多条元路径的信息还考虑元路径内部的语义信息。

4 总结与展望

现有的异构网络表示学习方法包括基于随机游走方法、基于一阶/二阶相似度方法、基于图注意力网络方法和基于图卷积网络方法 4 个类别。本文综合比较了方法模型各自的特点,并给出了异构网络表示学习中的经典数据集和常用模型的开源实现项目。

随着社会的不断进步,现实世界网络将变得更加复杂,如何有效聚合网络中丰富的信息辅助表征向量的学习,同时降低模型的复杂度是今后研究的一个方向。基于 GNN 的异构网络表示学习方法需解决以下问题:

1) 避免预先定义元路径。目前大多数异构网络表示学习方法都需要预先人为定义元路径,需要很强的先验知识且耗费很大的人力。最近提出的 GTNs^[33]可以识别原始图数据中未连接节点之间的有用连接,自适应地学习到合适长度的元路径,并且实验表明,在节点分类任务上 GTNs 的效果要优于 HAN 模型。

2) 适应动态网络。真实世界的网络具有动态性,节点以及节点之间复杂的交互信息无时无刻不在更新,而现有的异构网络表示学习方法大都针对静态网络,设计能够高效融合交互信息的动态异构网络表示方法具有很高的实用价值。

3) 适应大规模复杂信息网络。现实世界的网络有上亿节点,如 OAG 数据集^[43]含有 10 亿多个节点和连接关系,而现有的异构网络表示学习方法仅适用于小规模数据网络。因此,设计具有可扩展性的方法也是未来研究的一个方向。

参考文献/References:

- [1] HAMILTON W, YING Z, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. Long Beach: NIPS, 2017: 1024-1034.
- [2] WANG D, 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: ACM, 2016: 1225-1234.
- [3] BATTAGLIA P, PASCANU R, LAI M, et al. Interaction networks for learning about objects, relations and physics[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. Barcelona: NIPS, 2016: 4502-4510.
- [4] LI Yaguang, YU R, SHAHABI C, et al. Diffusion Convolutional Recurrent Neural Network; Data-Driven Traffic Forecasting[EB/OL]. [2018-02-22]. <https://arxiv.org/abs/1707.01926>.
- [5] ZHANG J, SHI X, XIE J, et al. Gaan: Gated Attention Networks for Learning on Large and Spatiotemporal Graphs[EB/OL]. [2018-03-20]. <https://arxiv.org/abs/1803.07294>.
- [6] ATWOOD J, TOWSLEY D. Diffusion-convolutional neural networks[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. Barcelona: NIPS, 2016: 1993-2001.
- [7] BERG R, KIPF T N, WELLING M. Graph Convolutional Matrix Completion[EB/OL]. [2017-10-25]. <https://arxiv.org/abs/1706.02263>.
- [8] LU Y, FANG Y, SHI C. Meta-learning on heterogeneous information networks for cold-start recommendation[C]//Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2020: 1563-1573.
- [9] ZHANG J, SHI X, ZHAO S, et al. Star-gen: Stacked and Reconstructed Graph Convolutional Networks for Recommender Systems[EB/OL]. [2019-05-27]. <https://arxiv.org/abs/1905.13129>.
- [10] SUN Z, DENG Z H, NIE J Y, et al. Rotate: Knowledge Graph Embedding by Relational Rotation in Complex Space[EB/OL]. [2019-02-26]. <https://arxiv.org/abs/1902.10197>.
- [11] 鲁军豪, 许云峰. 信息网络表示学习方法综述[J]. 河北科技大学学报, 2020, 41(2): 133-147.
LU Junhao, XU Yunfeng. A survey of information network representation learning[J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2020, 41(2): 133-147.
- [12] 涂存超, 杨成, 刘知远, 等. 网络表示学习综述[J]. 中国科学: 信息科学, 2017, 47(8): 980-996.
TU Cunchao, YANG Cheng, LIU Zhiyuan, et al. Network representation learning: An overview[J]. Scientia Sinica Informationis, 2017, 47(8): 980-996.
- [13] CHANG S, HAN W, TANG J, et al. Heterogeneous network embedding via deep architectures[C]//Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2015: 119-128.
- [14] FU T, 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. Singapore: ACM, 2017: 1797-1806.
- [15] 周慧, 赵中英, 李超. 面向异质信息网络的表示学习方法研究综述[J]. 计算机科学与探索, 2019, 13(7): 1081-1093.
ZHOU Hui, ZHAO Zhongying, LI Chao. Survey on representation learning methods oriented on heterogeneous information networks[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2019, 13(7): 1081-1093.
- [16] SHI C, LI Y, ZHANG J, et al. A survey of heterogeneous information network analysis[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data

- Engineering, 2016, 29(1): 17-37.
- [17] SUN Y Z, HAN J W, YAN X F, et al. PathSim: Meta path-based top-k similarity search in heterogeneous information networks[J]. Proceedings of the VLDB Endowment, 2011, 4(11): 992-1003.
- [18] ZHANG Daokun, YIN Jie, ZHU Xingquan, et al. Network representation learning: A survey[J]. IEEE Transactions on Big Data, 2017. doi:10.1109/TBDATA.2018.2850013.
- [19] WANG X, JI H, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network[C]//The World Wide Web Conference. Geneva; WWW, 2019: 2022-2032.
- [20] DONG Y, CHAWLA N V, SWAMI A. Metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks[C]//Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2017: 135-144.
- [21] SHI Chuan, HU Binbin, ZHAO W X, et al. Heterogeneous information network embedding for recommendation[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2018, 31(2): 357-370.
- [22] TANG J, QU M, MEI Q. PTE: Predictive text embedding through large-scale heterogeneous text networks[C]//Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2015: 1165-1174.
- [23] SHI Y, GUI H, ZHU Q, et al. AspEm: Embedding learning by aspects in heterogeneous information networks[C]//Proceedings of the 2018 SIAM International Conference on Data Mining. California: SIAM, 2018: 144-152.
- [24] SHI Y, GUI H, GUO F, et al. Easing embedding learning by comprehensive transcription of heterogeneous information networks[C]//Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2018: 2190-2199.
- [25] GROVER A, LESKOVEC J. node2vec: Scalable feature learning for networks[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2016: 855-864.
- [26] HU B, SHI C, ZHAO W X, et al. Leveraging meta-path based context for Top-N recommendation with a neural co-attention model [C]//Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2018: 1531-1540.
- [27] LU Yuanfu, SHI Chuan, HU Linmei, et al. Relation structure-aware heterogeneous information network embedding[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2019. <http://arxiv.org/abs/1905.08027>.
- [28] HU B, FANG Y, SHI C. Adversarial learning on heterogeneous information networks[C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2019: 120-129.
- [29] GOODFELLOW I J, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial networks[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2014, 3: 2672-2680.
- [30] TANG J, QU M, WANG M, et al. LINE: Large-scale information network embedding[C]//Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web. Geneva; WWW, 2015: 1067-1077.
- [31] 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: ACM, 2019: 793-803.
- [32] 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. Geneva: WWW, 2020: 2331-2341.
- [33] YUN S, JEONG M, KIM R, et al. Graph transformer networks[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. Vancouver: NIPS, 2019: 11983-11993.
- [34] HU L, YANG T, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention networks for semi-supervised short text classification[C]//Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP). Hong Kong: EMNLP-IJCNLP, 2019: 4823-4832.
- [35] YOU Jiaxuan, YING R, LESKOVEC J. Position-Aware Graph Neural Networks[EB/OL].[2019-06-13]. <https://arxiv.org/abs/1906.04817>.
- [36] SHOEMAKER B A, PANCHENKO A R. Deciphering protein-protein interactions. Part I. experimental techniques and databases[J]. Plos Computational Biology, 2007, 3(3): e42.
- [37] LI Hang, GONG Xinjun, YU Hua, et al. Deep neural network based predictions of protein interactions using primary sequences[J]. Molecules, 2018, 23(8): 1923.
- [38] ZHANG Zhaopeng, RUAN Jishou, GAO Jianzhao, et al. Predicting essential proteins from protein-protein interactions using order statistics[J]. Journal of Theoretical Biology, 2019, 480: 274-283.
- [39] LOPAMUDRA D, ANIRBAN M. A classification-based approach to prediction of dengue virus and human protein-protein interactions using amino acid composition and conjoint triad features[C]//2019 IEEE Region 10 Symposium (TENSymp). Kolkata: IEEE, 2019: 373-378.
- [40] BELTRAN J C, VALDEZ P, NAVAL P. Predicting protein-protein interactions based on biological information using extreme gradient boosting[C]//2019 IEEE Conference on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology (CIBCB). Siena: IEEE, 2019: 1-6.
- [41] FAN S, ZHU J, HAN X, et al. Metapath-guided heterogeneous graph neural network for intent recommendation[C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2019: 2478-2486.
- [42] FAN W, MA Y, LI Q, et al. Graph neural networks for social recommendation[C]//The World Wide Web Conference. New York: ACM, 2019: 417-426.
- [43] HU Z, DONG Y, WANG K, et al. Heterogeneous graph transformer[C]//Proceedings of the Web Conference. New York: ACM, 2020: 2704-2710.