

NAHGNN: 邻域感知异构图神经网络

李 强, 郑 唯, 陈 明, 谭兴义, 马 华

(湖南师范大学信息科学与工程学院, 湖南长沙 410081)

摘 要: 异构图广泛存在于社交网络、推荐系统和生物网络等复杂场景中。基于元路径的异构图神经网络通过定义高阶语义路径对跨类型间接关系进行显式建模, 以提升复杂关系建模能力。但现有研究或未加区分地使用指定长度内所有的元路径特征, 随着元路径长度的增加, 所生成特征的数量呈指数上升, 造成语义信息的冗余; 或受限于高阶聚合导致的过平滑现象, 造成边缘信息的丢失。为解决这些问题, 本文提出了一种异构图神经网络模型 (Neighborhood Aware Heterogeneous Graph Neural Network, NAHGNN), 从邻域感知的角度切入, 通过任务解耦, 将特征生成分为两个步骤: 关联元路径生成和邻域感知特征聚合。首先, 关联元路径生成模块利用起始节点与结束节点均是目标节点类型的关联元路径特征, 学习目标节点间丰富的语义信息。其次, 从目标节点的邻域感知方式出发, 设计了一个简单高效的邻域感知特征聚合模块, 对关联元路径中忽略的邻域信息进行提取。最后, 为了拟合相应邻域感知方式的语义表示, 避免邻域感知特征间相互影响, 设计了一个带掩码的语义融合模块, 融合不同特征间的语义信息。在 DBLP、ACM、IMDB 和 Freebase 四个公开异构图数据集上与六种主流异构图神经网络基线进行实验对比。结果表明, NAHGNN 在节点分类任务中 Micro-F1 提升幅度为 0.63~12.50 个百分点, 训练时间与 GPU 内存消耗显著下降, 并展现出良好的可解释性。

关键词: 异构图; 注意力机制; 异构图神经网络; 元路径; 图表示学习

基金项目: 国家自然科学基金 (No.62477009); 湖南省自然科学基金 (No.2023JJ30411); 湖南省重大科技创新平台项目 (No.2024JC1003); 湖南省科技计划 (No.2021GK5014)

中图分类号: TP391

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112(2025)11-4142-15

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20250420

NAHGNN: Neighborhood Aware Heterogeneous Graph Neural Network

LI Qiang, ZHENG Wei, CHEN Ming, TAN Xing-yi, MA Hua

(College of Information Science and Engineering, Hunan Normal University, Changsha, Hunan 410081, China)

Abstract: Heterogeneous graphs are widely present in complex scenarios such as social networks, recommendation systems, and biological networks. Meta-path-based heterogeneous graph neural networks (HGNNs) explicitly model cross-type indirect relationships via high-order semantic paths, enhancing the ability to capture complex dependencies. However, existing studies either use all meta-path features within a specified length without distinction, leading to redundancy in semantic information as the number of generated features rises exponentially with the increase of the meta-paths length, or suffer from over-smoothing caused by high-order aggregation, resulting in the loss of edge information. To address these issues, this paper proposes a neighborhood aware heterogeneous graph neural network (NAHGNN). From the perspective of neighborhood awareness and through task decoupling, the feature generation is divided into two steps: associative meta-path generation and neighborhood-aware feature aggregation. Firstly, an associative meta-path generation module learns rich semantic information between target nodes by leveraging associative meta-path features that both start and end nodes are of the target type. Secondly, a simple and efficient neighborhood-aware feature aggregation module is designed based on the neighborhood-aware modalities of target nodes to extract neglected neighborhood information in associative meta-paths. Finally, to fit the semantic representations of corresponding neighborhood-aware modalities and avoid mutual interference between neighborhood-aware features, a semantic fusion module with a band mask is designed to integrate semantic information across different features. Experimental comparisons are conducted with six mainstream heterogeneous graph neural network baselines on four public heterogeneous graph datasets (DBLP, ACM, IMDB, and Freebase). The results show that

NAHGNN achieves a Micro-F1 improvement of 0.63 to 12.50 percentage points in node classification tasks, significantly reduces training time and GPU memory consumption, and exhibits favorable interpretability.

Key words: heterogeneous graph; attention mechanism; heterogeneous graph neural networks; meta-path; graph representation learning

Foundation Item(s): National Natural Science Foundation of China (No.62477009); Natural Science Foundation of Hunan Province (No.2023JJ30411); Major Science and Technology Innovation Platform Project of Hunan Province (No.2024JC1003); Key Research and Development Program of Hunan Province (No.2021GK5014)

1 引言

图结构作为复杂系统的基础表示形式,广泛存在于社交网络、交通网络和生物医药等实际场景.然而,伴随大数据时代的到来,数据的复杂性与多样性日益增加,传统同构图数据仅支持单一类型的节点和边,难以对真实场景中多模态实体及其多样化关系进行刻画.异构图(Heterogeneous Graph, HG)通过引入类型感知的建模机制,使其能够对复杂系统中所存在的关联结构进行精准表达,从而为下游任务提供更具细粒度的关系表征能力.

图神经网络(Graph Neural Networks, GNNs)作为图数据挖掘的重要一环,被广泛应用于复杂系统的表征工作. GNNs通过消息传递的方式,动态更新节点嵌入,实现复杂邻域信息的提取与整合,极大地丰富了图数据的表示能力^[1].早期研究主要运用于同构图.为适配现实数据的复杂性,异构图神经网络(Heterogeneous Graph Neural Networks, HGNNs)应运而生. HGNNs旨在通过学习不同类型节点及其关联关系,实现异构图数据中各语义信息的有效建模,显著提升了异构图表示学习模型的性能表现^[2,3].这一优势使其在自然语言处理^[4-6]、生物信息学^[7-9]、推荐系统^[10-12]等领域具有广泛应用前景.

现有HGNNs根据处理语义的方式不同,分为基于元路径的方法和无元路径方法.无元路径HGNNs通过指定聚合操作,如图注意力机制,鼓励各类型节点根据彼此的重要程度来聚合信息.但是,这些方法受限于高阶聚合导致的过平滑问题,要么因选择较少的聚合层数,而导致高阶语义的缺失;要么因叠加多层,而导致节点的边缘信息丢失,进而恶化模型性能.同时,由于需要考虑邻域中所有的节点信息,不可避免地产生额外的计算开销,进而造成训练成本的上升.

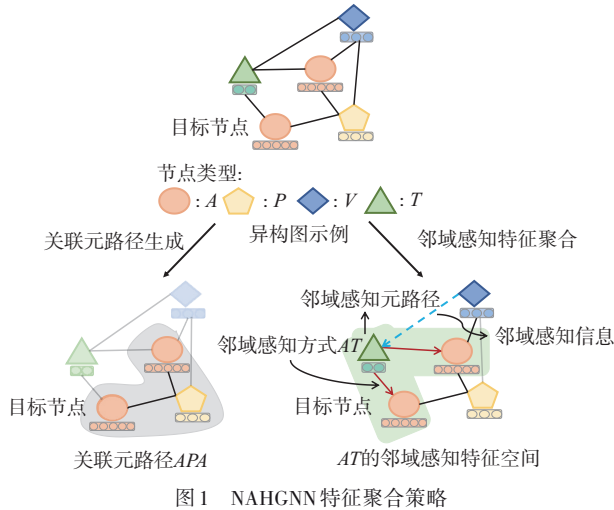
基于元路径的HGNNs以元路径^[13]为指导,通过预定义的高阶语义路径对跨类型间接关系进行显式建模.具体而言,每个节点以元路径的方式聚合指定邻域信息,生成的元路径特征具有特定的结构语义,并通过语义融合层实现元路径语义特征间聚合,输出节点的一般表示.通过元路径的指导, HGNNs能够有效地缓解高阶聚合引发的过平滑问题.

一些方法^[14-16]通过手动设计元路径的方式对异构图中的语义进行提取,这一过程不仅耗时费力,还依赖于专家知识的密集度,导致模型的泛用性受限. MECCH^[14]和SEHGNN^[17]通过改进特征聚合策略,自适应地捕捉节点间的语义关联,在一定程度上减少了对人工设计元路径的依赖,提升了模型在不同异构图上的迁移能力.

然而,现有基于元路径的HGNNs仍存在以下问题.(1)不加区分地使用所有元路径特征. SEHGNN^[17]通过生成元路径长度内所有特征,利用长短元路径实现边缘信息补全,但随着元路径长度的增加,所生成特征的数量呈指数上升,不仅造成了语义上的冗余,还会因无关或冲突信息的引入而损害模型的整体性能,同时增加了计算成本.(2)不加限制地采用高阶聚合策略. MECCH^[14]通过元路径上下文充分考虑了中间节点嵌入,并通过高阶聚合实现异构语义建模,但忽略了高阶聚合产生的过平滑问题,导致边缘节点信息的丢失.

针对现有方法存在的语义冗余及过平滑导致边缘信息丢失的问题,本文提出一种异构图神经网络(Neighborhood Aware Heterogeneous Graph Neural Network, NAHGNN),主张从邻域感知的角度切入,将目标节点间的远程关联语义建模与近程邻域信息捕捉进行解耦,并通过带掩码的注意力机制进行高效融合,从而更有效地学习异构图节点语义表征.首先,如图1所示,为避免语义冗余,NAHGNN将异构图表示学习任务分解为两个子任务:其一,通过关联元路径学习目标节点间的长程和核心语义关联;其二,邻域感知特征聚合,从邻域感知方式的角度出发,通过目标节点的异类型直接邻点构建邻域感知特征,实现目标节点局部邻域信息的捕捉.这里,邻域感知方式是指获取目标节点与其直接相邻的不同类型节点之间语义信息的途径. NAHGNN以目标节点类型及其邻居节点类型的联合来定义邻域感知方式.每种不同邻域节点类型对应着一种邻域感知方式,即邻域感知方式表达为(目标节点类型,邻域节点异类型).以图1的目标节点类型A及其邻居节点类型T为例,邻域感知方式为(A, T),简称AT.然后通过结合关联元路径特征与邻域感知特征,从异构图中学习节点语义表征.其次,为解决高阶聚合产生过平滑而导致的边缘信息丢失问题,提出了关联元路

邻域语义融合方法,通过注意力权重自适应地聚合邻域感知特征,实现长路径邻域信息补全的同时,拟合各邻域感知方式的语义表示.最后,为避免邻域感知特征间相互影响而引入噪声,在关联元路径邻域语义融合中设计了一个掩码矩阵,进一步提高了模型性能.本文在四个广泛使用的异构图数据集上进行了充分实验.结果表明,NAHGNN在提高训练效率的同时,性能得分都优于基线模型.

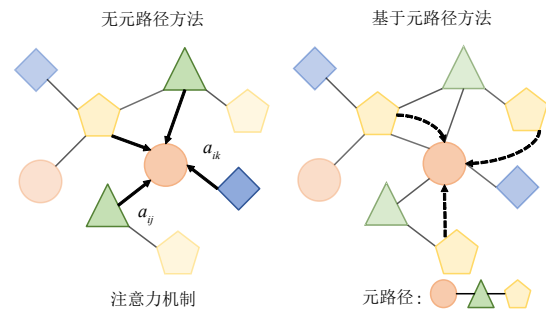


2 相关工作

对于同构图,GNNs被广泛应用于图结构学习,旨在从图中捕获复杂结构信息并保存到节点嵌入中.GCN(Graph Convolutional Network)^[18]通过逐层采样的方式对节点邻居的信息进行特征的聚合.GraphSAGE^[19]通过邻居采样策略和邻居聚合函数,使GCN拓展成归纳学习任务,对于未知的节点具有很好的泛化作用.GAT(Graph Attention Network)^[20]通过引入注意力机制来鼓励节点考虑邻居节点的重要性.受益于GNNs在同构图上的成果,近些年HGNNs得到快速的发展.HGNNs模型设计主要在于异构信息的建模(异质性).根据利用异质性的方式,可以将HGNNs分为两类,即无元路径HGNNs与基于元路径的HGNNs.如图2所示,左图为基于注意力机制的方式,右图为元路径方式.

2.1 无元路径异构图神经网络

无元路径HGNNs通过模型自身的学习机制,对异构图中节点之间的复杂关系进行提取.RSHN^[21]针对邻域中不同类型的节点特征和隐式结构消息,设计了一个特定于关系的图卷积结构.HGT^[13]通过为不同关系的邻接矩阵设计可训练的权重参数,结合注意力机制生成不同类型节点的特征.HGB^[22]通过可训练的权重矩阵学习类型嵌入,并通过残差连接对GAT进行增强.MGNN^[23]设计了一种卷积信号处理模块来捕获关系内



和跨关系之间的复杂动态信息.HALO^[24]设计了一个关系感知能量函数,通过优化关系间的相关兼容性来解决节点类型间的不匹配问题.HGRN^[25]通过生成不同跳数下节点的邻域表征,结合注意力机制自适应地聚合来自多跳邻居的节点信息.HINormer^[15]借助注意力机制构建局部结构编码器和异构关系编码器,实现异构图中节点的结构与语义信息的提取.

2.2 基于元路径的异构图神经网络

基于元路径的HGNNs通过元路径作为指导,从异构图节点邻域中捕获特定的高质量语义信息.RGCN^[16]首先提出应针对不同类型的节点分别进行邻域聚合,通过多个编码器对类型嵌入进行编码.HetGNN^[26]通过对1-跳邻域进行指定策略的随机游走,采样多个同构子图输出节点特征,输入到图神经网络架构中学习节点嵌入.HAN^[27]通过元路径生成指定的几个同构子图,输入到注意力模块中,通过节点间重要性聚合节点信息.MAGNN^[5]将1-跳邻域中的元路径推广到所有节点类型,考虑了中间节点的嵌入信息.MECCH^[14]定义了多个可训练的卷积图编码器对异构图中节点的局部信息进行提取,并通过多通道机制稳定模型性能.Meta-HGT^[10]对元路径进行拓展,构建元路径超图来提取图中潜在的语义信息,并通过类型依赖注意聚合模块来聚合节点和超边特征.HetReGAT-FC^[28]通过手动设计的元路径作为指导,将异构图注意力网络学习到的拓扑信息作为节点嵌入,结合注意力机制完成属性的补全.SEHGNN^[17]采用均值聚合的方式生成1-跳邻域内的所有元路径特征,高效地对高阶元路径的语义信息进行建模,并通过语义融合模块对元路径之间信息进行融合.HOAE^[29]设计了一种基于异构属性的增强策略,对邻域中的异构信息及高阶异构属性进行学习.MECCH^[14]通过元路径上下文生成指定范围的子图特征,考虑了中间节点的特征信息,并通过卷积融合模块.

3 本文方法

3.1 整体框架

在异构图中,元路径通常包含丰富的结构和语义

信息,这引发许多 HGNNs 关注各类型节点间的聚合方式来生成高质量的元路径特征. 受限于元路径特征聚合特性,其数量会随着元路径长度的增加呈指数增长,导致 HAN^[27]这类 HGNNs 算力开销巨大. 相比于枚举所有元路径邻域中各节点间贡献度,SEHGNN^[17]通过均值聚合的方式,采用邻接矩阵乘法对指定跳数内所有元路径特征进行高效生成. 然而,元路径实例间语义信息并非彼此独立,不加区分地使用跳数内所有的元路径特征,忽略了元路径特征的语义重叠问题,导致高阶语义信息无法被有效提取,从而制约模型性能. 并且,这一现象会随着元路径长度的增加而愈加严重.

为解决上述问题,NAHGNN 的框架设计主要包括三部分:关联元路径生成、邻域感知特征聚合与关联元路径邻域语义融合. 如图 3 所示,首先,不同于 SEHGNN,NAHGNN 从邻域感知的角度切入,通过任务解耦,将特征的生成分为两步,关联元路径生成和邻域感知特征聚合. 关联元路径生成通过起始节点与结束节点均是目标节点类型的关联元路径特征,实现目标节点间关联语义信息的提取. 邻域感知特征聚合,从邻域感知方式出发,以目标节点的异类型直接邻点构建邻域感知特征,实现目标节点局部邻域信息的捕捉. 其次,在关联元路径邻域语义融合模块中,为了拟合相应邻域感知方式的语义表示,避免邻域感知特征间相互影响,设计了一个带掩码的语义融合模块. 该模块通过注意力机制,鼓励关联元路径特征根据注意力权重补全邻域信息的同时,拟合相应邻域感知方式的语义表示. 接下来,本文将详细介绍各个组件的实现细节. 为统一涉及的符号定义和避免歧义,表 1 列出了全文常用符号及其含义.

表 1 符号表

符号	定义
Q	以目标节点开始和结束的关联元路径
K	关联元路径特征数量
M^P	所生成的关联元路径特征
\hat{A}_{c_1, c_2}	节点类型 c_1 与 c_2 的归一化邻接矩阵
X^t	目标节点原始特征
V_{aware}	邻域感知节点类型集合 $\{v_1, v_2, \dots, v_c\}$
M_{aware}	邻域感知元路径特征集合
ϕ_{v_c}	邻域感知节点 v_c 的邻域感知信息特征空间
\mathcal{N}_{v_c}	邻域感知节点 v_c 的邻域
Φ_{NE}	邻域感知信息特征空间集合
Z^{v_c}	邻域感知节点 v_c 所聚合的邻域感知特征
C	邻域感知特征数量
γ	可学习的权重参数
Mask_{NE}	遮蔽邻域感知特征间注意力的掩码矩阵
M_{As}	关联元路径特征集合
Z_{NE}	邻域感知特征集合 $\{Z^{v_1}, Z^{v_2}, \dots, Z^{v_c}\}$

3.2 关联元路径生成

遵循 SEHGNN 的设计,NAHGNN 使用均值聚合的方式来生成元路径特征. 不同的是,NAHGNN 只选择起始节点和结束节点都是目标节点类型的元路径作为关联元路径. 如图 3①所示, M^{APA} 表示从目标节点类型 A 经过节点类型 P 回到目标节点类型 A 的元路径特征. 通过这种方式,NAHGNN 将异构图中目标节点间的关系描述在一个关联元路径集合 $\Phi = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_N\}$ 中,具体过程如下:

$$M^Q = \text{MLP}_Q(\hat{A}_{t, c_1} \hat{A}_{c_1, c_2} \dots \hat{A}_{c_{l-1}, t} X^t) \quad (1)$$

其中, $Q = tc_1c_2 \dots c_{l-1}t$ 表示 l -hop 关联元路径, t 表示目标节点类型, $X^t \in \mathbb{R}^{|V^t| \times d'}$ 表示目标节点类型所有节点的初始特征, $|V^t|$ 表示节点数量, d' 表示特征维度. 通过归一化邻接矩阵 \hat{A} 矩阵乘法的形式对关联元路径特征进行均值聚合. 值得注意的是,各关联元路径特征的原始特征维度相同,这表示他们处在相同的语义空间中,共同描述目标节点之间的关联信息. NAHGNN 为每一个关联元路径 Q 都设计了专门的特征映射模块 MLP_Q ,旨在保留各关联元路径语义独立性的同时,将稀疏的原始特征空间映射到紧凑的语义空间中.

3.3 邻域感知特征聚合

在异构图表征学习中,目标节点的邻域信息是表征学习的关键因素. 然而,随着元路径长度的增加,目标节点邻域中边缘节点信息会呈现弱化趋势. 这是消息传递机制引发的过平滑问题导致的. 以数据集 ACM^[22]中两个元路径 APV 和 $APTVPV$ 为例,与 APV 相比, $APTVPV$ 中边缘节点 V 对于目标节点 A 的贡献会随着元路径长度的增加而逐渐趋于相似. 因此,NAHGNN 将与目标节点相邻的异类型节点作为邻域感知节点,通过邻域感知元路径及其邻域感知信息实现目标节点邻域信息的捕捉.

在元路径中, 0 -hop 元路径是节点本身, 1 -hop 元路径表示与节点直接相连的邻域语义信息. 因此为拟合相应邻域感知方式的语义表示,NAHGNN 采用与目标节点直接相邻的 1 -hop 元路径作为邻域感知元路径,其中每种邻域感知节点类型都对应着一种邻域感知方式,旨在捕捉与目标节点直接相邻的语义信息. 与关联元路径一致,采用均值聚合的方式进行生成,并通过基于 MLP(Multi-Layer Perceptron)的特征投影模块将不同维度的元路径特征映射到统一的语义空间中:

$$V_{\text{aware}} = \{v_1, v_2, \dots, v_c\}, v \in \mathcal{N}_t \quad (2)$$

$$M_{\text{aware}} = \{M^{v_1}, M^{v_2}, \dots, M^{v_c}\} \quad (3)$$

$$M^{v_c} = \text{MLP}_{t, v_c}(\hat{A}_{t, v_c} X^{v_c}) \quad (4)$$

其中, \mathcal{N}_t 表示与目标节点相邻的所有节点类型集合,

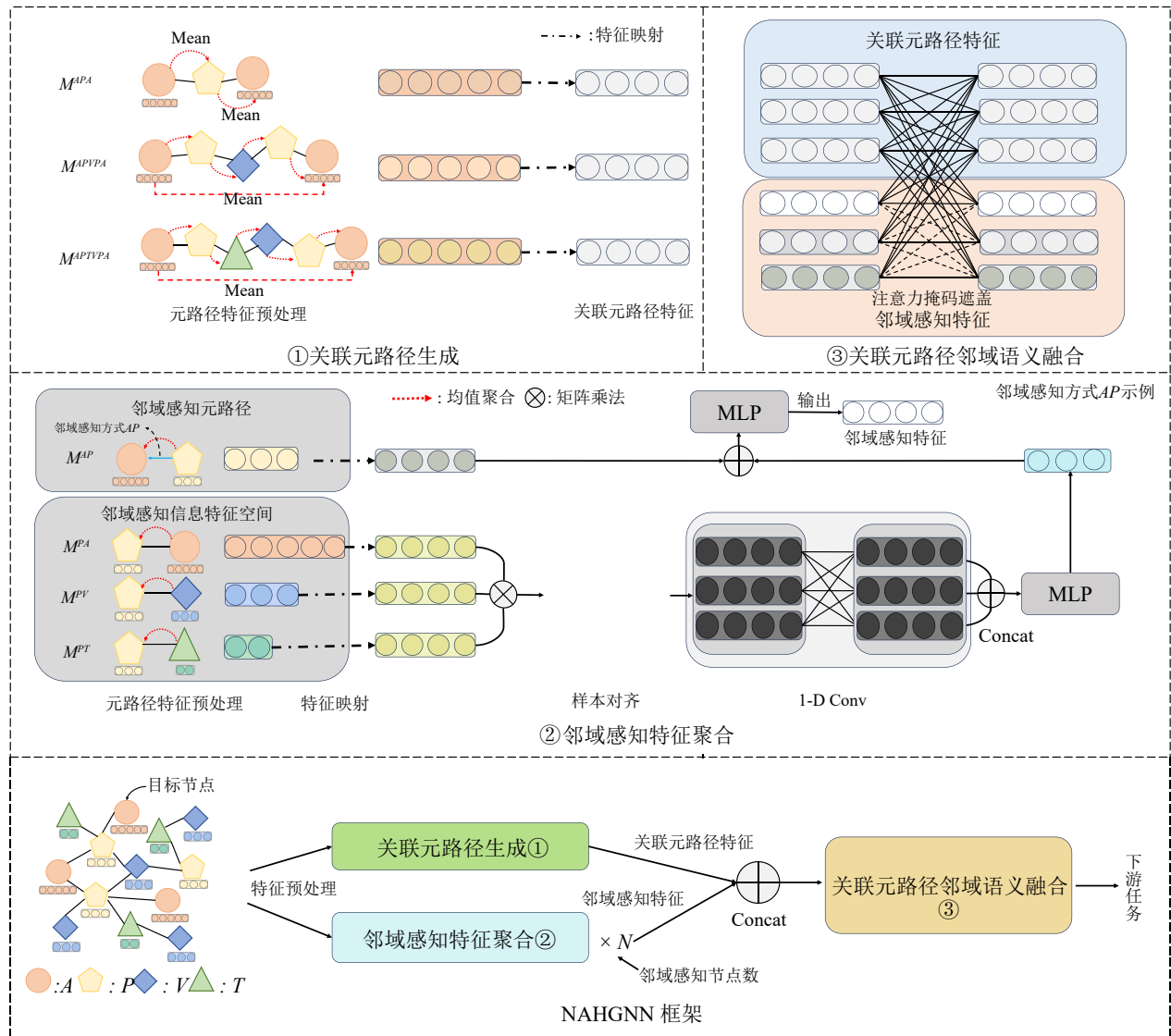


图3 NAHGNN整体框架

V_{aware} 表示邻域感知节点类型集合, M_{aware} 表示邻域感知元路径特征集合. 在异构图中, 元路径表示起始节点类型与结束节点类型间特定的语义信息, 因此 NAHGNN 为每个元路径都设计了专门的特征映射函数, 以便于在后续的训练中更好地将原始语义特征映射到统一的语义空间.

考虑到元路径数量随长度呈指数增加, 为避免邻域感知信息中产生冗余信息, 同时保持元路径特征间彼此的差异性. NAHGNN 通过各邻域感知节点 1-hop 元路径集合构建邻域感知信息特征:

$$\Phi_{\text{NE}} = \{\phi_{v_1}, \phi_{v_2}, \dots, \phi_{v_c}\} \quad (5)$$

$$\phi_{v_c} = \{\hat{A}_{v_c, i} X^i\}_{i \in \mathcal{N}_{v_c}} \quad (6)$$

其中, $\phi_{v_c} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times N \times d^c}$ 表示邻域感知节点 v_c 的所有

1-hop 元路径特征集合, N 表示邻域感知信息中元路径特征的数量, d^c 表示类型为 v_c 的节点特征维度. Φ_{NE} 记录了各个邻域感知元路径的邻域感知信息, 邻域感知信息 ϕ_{v_c} 中元路径特征的数量取决于与 v_c 直接相邻的节点类型. 如图 3(2) 所示, 邻域感知元路径特征 M^{AP} (由节点 P 指向节点 A) 的邻域感知信息为 $\{M^{PA}, M^{PT}, M^{PV}\}$. 通过邻域感知信息生成策略, NAHGNN 有效避免了关联元路径生成时, 因丢弃中间节点嵌入而导致的信息损失.

邻域感知信息虽对特定邻域感知方式下目标节点的邻域信息进行提取, 但仍存在语义空间差异和特征稀疏问题. 因此, NAHGNN 采用基于 MLP 的特征投影模块将不同维度的元路径特征映射到统一的语义空间中, 为后续提取相应邻域感知方式的语义表示提供保

证.同时,针对邻域感知元路径及其邻域感知信息特征间所存在的样本对齐问题,NAHGNN采用邻接矩阵作为指导,通过矩阵乘法的形式实现邻域感知信息特征的样本对齐:

$$\varphi'_{v_c} = \left\{ \hat{A}_{t,v_c} \cdot \text{MLP}_{v_c}(\varphi_{v_c}) \right\} \quad (7)$$

其中, $\hat{A}_{t,v_c} \in \mathbb{R}^{|V^t| \times |V^{v_c}|}$ 表示目标节点 t 和邻域感知节点 v_c 的归一化邻接矩阵. 通过式(7),NAHGNN在有效强化对应邻域感知方式结构语义的同时,保证了邻域感知信息中不同元路径特征间语义的差异性和邻域感知方式的一致性.

对于拟合各邻域感知方式的语义表示,NAHGNN采用一维卷积对邻域感知信息中不同的元路径特征进行语义融合,通过多尺度感知,自适应地学习语义空间中各特征的影响. 本文未使用注意力机制,而采用邻域感知节点的 1-hop 元路径集合作为邻域感知信息的特征空间,其特征数量较少. 同时,考虑到邻域感知信息由同一邻域感知节点出发,一维卷积能够有效捕捉这种局部依赖关系,从而学习到更精细的语义表示.

一维卷积后,NAHGNN采用分层特征融合策略. 首先对一维卷积提取的感知特征进行线性变换,利用全连接层生成邻域感知信息的通用表示;随后通过特征拼接操作将其与感知元路径特征进行融合增强;最终通过全连接层映射至语义空间,输出具有特定邻域感知方式的细粒度语义表征:

$$Z^{v_c} = \text{MLP} \left(M^{v_c} \parallel \text{MLP} \left(\text{Conv}(\varphi'_{v_c}) \right) \right) \quad (8)$$

其中, Z^{v_c} 的特征维度与关联元路径特征 M^Q 相同,保证了特征间语义的对齐,以便完成后续任务.

与SEHGNN的对比案例. 图4展示了元路径长度为4时,NAHGNN通过邻域感知方式聚合元路径特征的过程. 首先,通过关联元路径特征生成,聚合起始节点类型与结束节点类型都为目标节点A的元路径特征,得到关联元路径特征 M^{APA} 和 M^{ATA} ,实现目标节点间关联语义信息的提取. 其次,通过邻域感知特征聚合,邻域感知节点集合 $\{P, V, T\}$ 定义了三种邻域感知方式 $\{AP, AV, AT\}$,从邻域感知方式的角度出发,聚合邻域感知元路径及其相应感知信息,构建出邻域感知特征,实现目标节点局部邻域信息的捕捉. SEHGNN则生成元路径长度内所有特征,利用长短元路径实现边缘信息补充. 通过对比与SEHGNN间的特征差异,NAHGNN有效实现特征层面的冗余度降低.

3.4 关联元路径邻域语义融合

通过关联元路径生成,得到关联元路径 $Q = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_K\}$ 及其特征嵌入 $M_{A_s} = \{M^{Q_1}, M^{Q_2}, \dots, M^{Q_K}\}$. 通过邻域感知特征聚合,得到邻域感知特征 $Z_{NE} =$

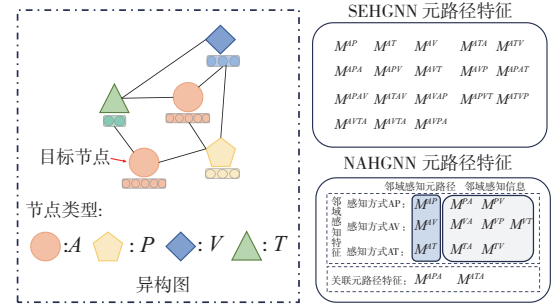


图4 元路径长度为4的元路径特征对比

$\{Z^{v_1}, Z^{v_2}, \dots, Z^{v_c}\}$. 最直观的策略之一是将邻域感知特征作为补充信息直接拼接在各个关联元路径特征上,输入到语义融合模块中,输出最终表示. 然而每个关联元路径都表示着目标节点间特定的关联信息,且各关联元路径中目标节点的邻域信息存在差异. 而注意力机制通过注意力分数自适应地调整特征之间的权重,使得特征能够捕获到对自己重要的信息. 因此,NAHGNN采用基于注意力的语义融合,使得各模块元路径特征能够根据注意权重自适应地聚合邻域感知特征. 首先,通过拼接前两个模块的输出,得到总的特征空间表示 $H = \{M^{Q_1}, M^{Q_2}, \dots, M^{Q_K}, Z^{v_1}, Z^{v_2}, \dots, Z^{v_c}\}$,为便于描述,简称为 $H = \{h_1, h_2, \dots, h_{K+c}\}$. 因此元路径特征间注意力分数的计算过程表示如下:

$$q_i = \text{Linear}_Q(h_i), \quad k_i = \text{Linear}_K(h_i), \quad (9)$$

$$v_i = \text{Linear}_V(h_i)$$

$$\alpha(h_i, h_{K+1}) = \frac{\exp(q_i \cdot k_{K+1}^T)}{\sum_{j \in [1, K+c]} \exp(q_i \cdot k_j^T)} \quad (10)$$

其中,线性层参数为各语义特征共享. 当 $i \leq K$ 时, $\alpha(h_i, h_{K+1})$ 表示关联元路径特征 M^{Q_i} 与邻域感知特征 Z^{v_1} 的注意力分数. 通过这种方式,可以得到特征间的注意力分数矩阵 A_{att} .

邻域感知特征的目的是拟合各个邻域感知方式的语义表示. 然而,由于注意力权重计算,各邻域感知特征间存在直接信息交互,导致各感知方式语义空间因其特征间的高度相关性而引入噪声. 因此,为避免邻域感知特征间相互影响,本文通过一个由0和1组成的掩码矩阵 $\text{Mask}_{NE} \in \mathbb{R}^{(K+c) \times (K+c)}$ 对邻域感知特征间的注意力分数进行遮盖:

$$A'_{att} = \text{att_drop}(A_{att}) \odot \text{Mask}_{NE} \quad (11)$$

其中, $\text{att_drop}(A_{att})$ 表示 Dropout 层,通过丢弃权重较低的特征抵抗过拟合和过平滑的问题.

在异构图表征学习中,除通过注意力分数聚合的语义信息外,各个模块本身的特征也同样重要. 因此,NAHGNN训练了一个可学习的权重参数 $\gamma \in [0, 1]$ 加权

输出节点表示:

$$H = \gamma A'_{\text{att}} V + (1 - \gamma) H \quad (12)$$

3.5 训练

由于节点嵌入包含多个语义特征,在送入到下游任务(如节点分类)之前,需将其拼接作为节点的最终嵌入输入到分类器中:

$$Y_{\text{pre}} = \sigma \left(\left\|_{i \in [1, K+c]}^{K+C} h_i \right\| \right) \quad (13)$$

其中, $Y_{\text{pre}} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times L}$ 表示目标节点的预测类别, L 表示目标节点标签数.

随后,将分类器输出的预测结果与真实标签一起送入到损失函数中,通过反向传播优化模型参数:

$$\min \text{loss} = \mathcal{L}(Y, Y_{\text{pre}}) \quad (14)$$

其中, \mathcal{L} 为 CrossEntropyLoss 或 BCELoss. 模型伪代码如算法 1 所示.

4 实验

首先介绍数据集,基线和训练细节等实验设置,然后通过大量实验尝试回答以下 5 个研究问题,以全面评估 NAHGNN.

研究问题 1: NAHGNN 对比现有 HGNNs 性能提升如何?

研究问题 2: NAHGNN 对比现有 HGNNs 效率是否有提升?

研究问题 3: NAHGNN 各模块如何影响性能?

研究问题 4: NAHGNN 抵抗过平滑的表现如何?

研究问题 5: NAHGNN 表征学习质量如何?

4.1 数据集

本节通过四个不同领域的真实异构图数据集对 NAHGNN 模型的性能进行全面的实验与分析,数据集具体描述如下.

DBLP^[22] 是一个计算机科学数据库子集,由 26 128 个节点和 239 566 条边组成. 包含 4 种节点类型: author(A), paper(P), term(T) 和 venue(V), 以及对应的 6 种关系. 其中, author 是目标节点, 包含 4 种类别.

ACM^[22] 是一个引文数据集,由 10 942 个节点和 547 872 条边组成. 包含 4 种节点类型: paper(P), author(A), subject(S) 和 term(T), 以及对应的 8 种关系. 其中, paper 是目标节点, 包含 3 种类别.

IMDB^[22] 是一个影视数据集,由 21 420 个节点和 86 642 条边组成. 包含 4 种节点类型: movie(M), director(D), actor(A) 和 keyword(K), 以及对应的 6 种关系. 其中, movie 是目标节点, 包含 5 种类别.

Freebase^[22] 是一个知识图谱,由 180 098 个节点和 1 057 688 条边组成, 含 8 种节点类型及其对应的 36 种关系. 其中, book(0) 是目标节点, 包含 7 种类别.

算法 1 NAHGNN forward propagation

输入: 异构图 $\mathcal{G}=(\mathcal{V}, \mathcal{E})$, 关联元路径集合 $\Phi = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_N\}$, 邻域感知节点类型集合 $\mathbb{V}_{\text{aware}} = \{v_1, v_2, \dots, v_c\}$, 节点特征 $\{X^v, \forall v \in \mathcal{V}\}$, 归一化邻接矩阵 $\{\hat{A}_{s,e}, \forall s, \forall e \in \mathcal{V}\}$.

输出: 目标节点嵌入 H

1. FOR epoch:EPOCH DO

2. FOR $Q \in \Phi$ DO

3. 计算关联元路径特征 $M^Q = \text{MLP}_Q(\hat{A}_{t,c_1} \hat{A}_{c_1,c_2} \dots \hat{A}_{c_{i-1},t} X^t)$, $Q = t c_1 c_2 \dots c_{i-1} t$

4. END FOR

5. FOR $v \in \mathbb{V}_{\text{aware}}$ DO

6. 计算邻域感知元路径特征 $M^v = \text{MLP}_{L,v}(\hat{A}_{L,v} X^v)$

7. FOR $i \in \mathcal{N}_v^c$ DO

8. 聚合邻域感知信息 $\phi'_v = \{\hat{A}_{L,v} \cdot \text{MLP}_{v,i}(\hat{A}_{v,i} X^i)\}$

9. END FOR

10. 邻域感知信息语义融合特征 $Z^{v'} = \text{MLP}(\text{Conv}(\phi'_v))$

11. 邻域感知特征 $Z^v = \text{MLP}(M^v \| Z^{v'})$

12. END FOR

13. 拼接得到总特征空间 $H = \{h_1, h_2, \dots, h_{K+c}\}$

14. FOR $h_i \in H$ DO

15. FOR $h_j \in H$ DO

16. 计算注意力分数 $\alpha(h_i, h_j) = \frac{\exp(q_i \cdot k_j^T)}{\sum_{j \in [1, K+c]} \exp(q_i \cdot k_j^T)}$

17. END FOR

18. END FOR

19. 遮盖 X_{NE} 之间的注意力分数 $A'_{\text{att}} = \text{att_drop}(A_{\text{att}}) \odot \text{Mask}_{\text{NE}}$

20. 注意力残差连接得到最终嵌入 $H = \gamma A'_{\text{att}} V + (1 - \gamma) H$

21. $Y_{\text{pre}} = \sigma \left(\left\|_{i \in [1, K+c]}^{K+C} h_i \right\| \right)$

22. 计算损失函数 $\text{loss} = \mathcal{L}(Y, Y_{\text{pre}})$, 反向传播优化模型参数

23. END FOR

24. 返回 H

4.2 基线与训练细节

为验证 NAHGNN 的有效性,在上述四种数据集上分别将 NAHGNN 与最先进的 HGNNs 进行比较,其中包括三个基于元路径和三个无元路径的基线方法. 具体描述如下.

HGT^[13]: 依赖元关系对异构图进行建模,通过为不同的节点和边类型设计专门的权重矩阵来衡量彼此之间的重要性.

HINormer^[15]: 通过局部结构编码器和异构关系编码器捕获异构图中节点间的结构信息与异构关系,并通过注意力机制学习编码器中的节点表示.

HGB^[22]: 通过可训练的权重矩阵学习类型的嵌入,并通过残差连接对原有的 GAT 进行增强,有效地利用

了异构图中不同节点的类型信息.

HAN^[27]:通过元路径生成了指定的几个同构子图,然后通过GAT分别对子图进行节点级聚合和语义级聚合来提取异构图信息.

SEHGNN^[17]:通过均值聚合的方式,生成指定元路径长度中所有的元路径特征,并通过一个类似transformer的语义融合模块融合语义信息.

MECCH^[14]:通过元路径上下文对异构图中的节点进行特征聚合,生成指定感知邻域的子图特征,考虑了中间节点的特征信息的同时,减少了节点信息的重复运算,并通过卷积融合模块生成节点表示.

基线HGB、HINormer和SEHGNN都采用HGB标准来划分数据集.早于HGB发表的HAN和HGT,以及MECCH的划分标准与其他基线都不同.为统一标准进行比较,本文采用HGB标准来划分数据集.HGB标准按训练集、验证集和测试集的形式对数据集进行统一划分,其占比分别为24%、6%和70%.其中,训练集与验证集的比例为4:1(24%:6%).

对于DBLP和ACM,其数据的语义结构较为复杂,为反映出学术合作关系的复杂性和多样性,选择关联元路径长度Length=6.对于IMDB和Freebase数据集,其语义关系相对较为直接,典型关联路径较短,因此选择关联元路径长度Length=4.关联元路径的嵌入维度为512.邻域感知元路径及其邻域感知信息中各个元路径特征的嵌入维度设置为512.邻域感知信息卷积融合后的嵌入维度设置为256.感知信息映射后的嵌入维度设置为256.邻域感知特征映射后的维度与关联元路径的嵌入维度相同.Dropout rate设置为0.5,通过这种方式,模型可以有效地减轻过拟合的风险.通过Adam优化器训练100个epoch,训练早期退出参数patience设置为50.

本文采用各基线原文中最优参数配置,HGB标准

数据集的实验结果作为最终性能表示.为进行公平比较,NAHGNN未采取任何增强方式,不使用类似标签传播进行数据增强.NAHGNN和基线使用PyTorch框架实现,并在NVIDIA-A100-80G GPU上进行实验.

4.3 节点分类

为回答问题1,本文评估了NAHGNN与基线在统一的四个数据集(DBLP、ACM、IMDB和Freebase)上节点分类任务的模型性能,分别给出了每个模型的Micro-F1和Macro-F1得分作为评价指标.所有得分均为五次单独训练的平均值和标准差.

如表2所示,其中加粗数据为最优结果,下划线数据为次优结果.NAHGNN在所有数据集上均取得了最优性能.相比HAN,NAHGNN的Micro-F1得分,在IMDB数据集上提升了4.38个百分点,ACM数据集上提升了4.13个百分点,DBLP数据集上提升了3.75个百分点,Freebase数据集上提升了12.55个百分点.相比SEHGNN,NAHGNN的Micro-F1得分,在IMDB数据集上提升了0.83个百分点,Freebase数据集上提升了2.24个百分点,ACM数据集上提升了1.08个百分点,DBLP数据集上提升了0.63个百分点,同时性能更加稳定.因为并非所有元路径特征都对下游任务有益,而SEHGNN简单地使用元路径长度内所有的元路径特征,导致特征空间中语义信息的冗余,不可避免地引入了噪声.同时,随着元路径长度的增加,目标节点聚合到的边缘信息会因为过平滑而难以区分,导致高阶语义信息难以从其他语义信息中受益,从而恶化模型性能.而NAHGNN受益于关联元路径和邻域感知特征的设计,通过关联元路径对目标节点之间的关系进行建模,并通过邻域感知特征提取目标节点周围的邻域信息,从而有效地缓解了过多元路径特征导致的语义冗余和边缘信息过平滑导致的特征丢失,因此性能更佳.

表2 NAHGNN与基线模型在节点分类上的性能(平均F1得分±标准差)

单位:%

Datasets	Metrics	Metapath-free Methods			Metapath-based Methods			Ours
		HGT	HGB	HINormer	HAN	SEHGNN	MECCH	NAHGNN
DBLP	Micro-F1	93.55±0.21	94.37±0.19	94.94±0.21	92.12±0.58	95.24±0.13	<u>95.33±0.23</u>	95.87±0.08
	Macro-F1	93.11±0.19	94.05±0.23	94.57±0.23	91.72±0.47	94.86±0.14	<u>94.94±0.36</u>	95.50±0.09
ACM	Micro-F1	91.15±0.67	93.31±0.49	93.91±0.53	90.82±0.41	93.87±0.50	<u>94.17±0.42</u>	94.95±0.19
	Macro-F1	91.22±0.70	93.47±0.51	94.13±0.46	90.92±0.43	93.95±0.48	<u>94.22±0.40</u>	94.99±0.19
IMDB	Micro-F1	67.20±0.57	67.29±0.29	67.83±0.34	64.66±0.56	<u>68.21±0.32</u>	68.12±0.61	69.04±0.25
	Macro-F1	63.00±1.19	63.77±0.43	64.65±0.53	57.81±0.91	<u>66.63±0.34</u>	66.59±0.52	67.21±0.26
Freebase	Micro-F1	60.51±1.16	<u>66.29±0.45</u>	65.60±1.02	54.77±1.40	65.08±0.66	64.88±0.93	67.32±0.44
	Macro-F1	29.28±2.52	47.72±1.48	<u>52.73±1.35</u>	21.31±1.68	51.87±0.86	52.25±1.61	53.12±0.65

4.4 训练效率

为回答问题2,探究NAHGNN对比现有HGNNs的训练效率表现.本文选取模型训练时间和GPU内存消

耗作为评价指标,在DBLP和ACM数据集上对NAHGNN的训练效率进行评估.

如表3所示,其中加粗数据为最优结果,下划线数据

表3 在ACM和DBLP上的训练效率比较

Dataset	Model	Time/(s/epoch)	GPU Memory/GB
ACM	HGT	12.147	13.12
	HAN	0.376	4.72
	SEHGNN	<u>0.196</u>	<u>1.71</u>
	MECCH	0.615	4.92
	NAHGNN	0.114	1.02
DBLP	HGT	3.574	8.31
	HAN	0.331	2.89
	SEHGNN	<u>0.091</u>	<u>0.86</u>
	MECCH	0.491	3.43
	NAHGNN	0.060	0.40

为次优结果. NAHGNN在训练效率上相较先前工作更加有效. 与HAN相比, NAHGNN通过均值聚合的方式, 生成元路径初始特征, 这个过程可以通过预处理来完成. 而HAN需要通过注意力聚合的方式生成元路径特征, 大大降低了训练效率. MECCH与HAN相似, 元路径特征的聚合过程需要在训练中完成. 相比SEHGNN不加区分地使用指定长度内所有的元路径特征, NAHGNN通过关联元路径和邻域感知特征有效地避免了语义信息的冗余, 在训练效率上明显优于SEHGNN. 值得注意的是, HGT在两个数据集上都花费了大量的计算资源, 说明考虑邻域中所有节点的关系会导致训练成本急剧上升. 以上实验结果表明, NAHGNN在性能上优于基线HGNNs的同时, 保证了优秀的训练效率.

4.5 复杂度分析

为进一步回答问题2, 并验证所提方法与先前工作相比更加简单高效, 本文将对NAHGNN的时间复杂度进行分析. 同时为便于后续分析, 本文假设异构图中目标节点的数量为 N , 元路径长度为 L , 节点邻域中边的类型数为 R , 模型各层嵌入统一为 D .

NAHGNN总体时间复杂度主要由三个模块共同组成, 具体如下:

(1) 关联元路径生成. 该模块通过均值聚合的方式生成元路径特征, 由于特征聚合操作可以通过预处理阶段完成, 并且关联元路径的定义要求起始节点和结束节点都是目标节点, 因此关联元路径生成的复杂度仅为特征映射所需的时间复杂度, 表示为 $O(NR^{L-1}D)$.

(2) 邻域感知特征聚合. 由于邻域感知元路径及其邻域感知信息都采用均值聚合的方式生成, 因此与关联元路径相同, 都可以在预处理阶段完成. 同时, 由于NAHGNN采用邻域感知节的1-hop元路径集合作为邻域感知元路径对应邻域感知信息的特征空间, 因此邻域感知特征聚合的总复杂度可以表示为 $O(NRD^2 +$

$NR^2D)$. 其中, $O(NRD^2)$ 为各个邻域感知方式邻域感知信息语义融合的总复杂度.

(3) 关联元路径邻域语义融合. 由于使用注意力机制来衡量元路径特征间彼此的重要程度, 因此该模块的复杂度可以表示为 $O(N(R^{L-1}+R)^2D+N(R^{L-1}+R)D^2)$.

通过以上三个模块的复杂度分析, 得出NAHGNN的总复杂度为 $O(N(R^{2(L-1)}+R^{L-1})D+NR^{L-1}D^2)$. 通过分析, SEHGNN的复杂度为 $O(NR^{2L}D+NR^L D^2)$, NAHGNN的复杂度远小于SEHGNN.

为进一步验证上述复杂度分析所得到的结论, 将NAHGNN与基线HGNNs在ACM数据集上进行对比. 结果如图5所示. 横坐标为模型每轮所需的训练时间, 纵坐标为Micro-F1得分. NAHGNN在所有模型中取得了最优性能, 与SEHGNN相比, NAHGNN在训练时间上快了42.1%, Micro-F1得分提高了1.08个百分点. 与HAN相比, NAHGNN节约了11倍的训练时间, Micro-F1得分提高了4.13个百分点.

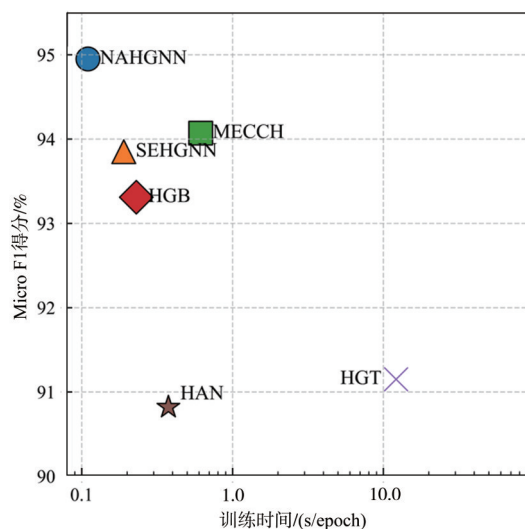


图5 在ACM上的训练时间和Micro-F1得分

4.6 消融实验

为回答问题3, 探究NAHGNN中各模块如何影响模型性能, 本文在四个异构图数据集分别将NAHGNN与以下模型的变体进行比较:

(1) NAHGNN-MA: 不使用掩码矩阵遮盖邻域感知特征间的注意分数.

(2) NAHGNN-WF: 使用类似HAN加权求和的方式来替代注意力机制进行关联元路径邻域语义融合.

(3) NAHGNN-NE: 不使用邻域感知特征, 这意味着只使用关联元路径特征作为模型的输入.

(4) NAHGNN-AM: 不使用关联元路径特征, 这意味着只使用邻域感知特征作为模型的输入.

表 4 在四个数据集上节点分类的消融实验

单位:%

Model	DBLP		ACM		IMDB		Freebase	
	Micro-F1	Macro-F1	Micro-F1	Macro-F1	Micro-F1	Macro-F1	Micro-F1	Macro-F1
NAHGNN-AM	84.24±0.76	83.62±0.82	91.12±0.22	91.23±0.20	64.81±0.31	62.79±0.25	60.64±0.7	44.53±1.34
NAHGNN-WF	95.05±0.16	94.73±0.17	95.15±0.24	95.19±0.24	67.00±0.56	65.42±0.40	63.98±0.59	47.22±0.77
NAHGNN-NE	95.34±0.28	95.02±0.76	94.35±0.70	94.37±0.70	68.31±0.36	66.68±0.34	64.15±0.45	50.31±0.69
NAHGNN-MA	<u>95.45±0.35</u>	<u>95.08±0.36</u>	94.41±0.20	94.43±0.20	<u>68.48±0.42</u>	<u>66.76±0.37</u>	<u>65.28±0.55</u>	<u>52.56±0.76</u>
NAHGNN	95.87±0.08	95.50±0.09	<u>94.95±0.19</u>	<u>94.99±0.19</u>	69.04±0.25	67.21±0.26	67.32±0.44	53.12±0.65

实验结果如表4所示,其中加粗数据为最优结果,下划线数据为次优结果. 从中有以下观察结果.

NAHGNN-NE在各数据集上的结果表明,关联元路径特征具有显著的语义质量,仅通过关联元路径特征就能够很好地对异构图中的语义信息进行建模. 同时也证明了SEHGNN使用元路径长度内所有的元路径特征会导致语义的冗余,恶化模型性能.

对比NAHGNN-NE和NAHGNN实验结果可以发现,关联元路径特征虽然很好地对目标节点之间的语义信息进行了提取,但由于缺乏目标节点的边缘邻域信息,导致最终得分方差较大,结果次优. 同时表明邻域感知特征能够对目标节点边缘邻域信息进行有效建模,使得关联元路径特征能够从中受益,提升模型性能. 因此邻域感知特征的设计是必要的.

NAHGNN-WF和NAHGNN实验结果差异表明,通过注意力机制自适应地聚合重要特征比类似HAN加权求和的方式更加有效. 表明邻域感知特征与关联元路径间的重要性权重存在显著差异. 虽然NAHGNN-WF在ACM数据集上的性能略高于NAHGNN,但是在其他两个数据集上的表现并不乐观. 原因可能是ACM数据集语义差异较小,NAHGNN基础模块已提取有效信息,加权求和足以适配其需求.

通过对比NAHGNN-MA和NAHGNN在各数据集上的结果表明,遮盖邻域感知特征间注意力分数能够有效拟合特定邻域感知方式的语义表示,提升了模型性能. 同时避免了邻域感知特征间相互影响而引入噪声. 因此,掩码矩阵的设计是合理的.

4.7 注意力分数

为进一步回答问题3,本文提取语义融合中各个模块特征的注意力分数作为重要性考量. 在ACM数据集上,对NAHGNN各个模块所聚合的特征进行重要性分析.

如图6所示,在训练初始阶段,各模块特征重要性呈均匀分布,并不能反映模块特征间的重要性关系. 在训练结束阶段输出的关联元路径重要性分布中,邻域感知方式PA和PC的邻域感知特征NE_PA和NE_PC贡

献了近50%的特征权重,这表明关联元路径特征能够有效地从邻域感知特征中学习目标节点的邻域信息,并从中受益. 值得注意的是,关联元路径特征PPPCP和PAPCP在重要性分布中表现出较高的权重. 从可解释性出发,关联元路径特征PPPCP表示通过会议将不同论文相连接的复杂关系,描述了哪些会议是连接不同论文的关键节点,以及哪些领域的论文在同一会议上频繁出现,侧面反映了不同的学术社区及其对应的研究领域. 关联元路径特征PAPCP反映了两篇论文如果都与同一位作者和同一个会议相关联,那么它们可能具有相似的主题或研究领域. 同时从重要性分布中可以观察到邻域感知特征NE_PC相较NE_PA展现出更高的重要性,这是因为会议通常围绕当前学术领域的热点问题和前沿趋势展开,揭示了未来学术研究的可能趋势和方向.

图7的实验结果表明,在不遮蔽邻域感知特征间注意力的情况下,邻域感知特征间重要性分布趋于相似,且邻域感知特征的重要度贡献接近90%. 这一现象表明邻域感知特征间彼此影响,难以从关联元路径特征中受益. 这是由于邻域感知特征聚合了目标节点直接相邻的邻域信息,各邻域感知特征间彼此具有很高的关联度.

为有效缓解消息传递导致的过平滑问题,使得邻域感知特征能够从关联元路径中受益,本文采用掩码矩阵的方式,通过遮蔽邻域感知特征间的重要性分数,促使邻域感知特征通过关联元路径的方式关注到目标节点特定的语义信息,实现核心关联语义信息的补全. 使用掩码后,各邻域感知特征的重要性分布如图8所示. 可以明显观察到,在遮蔽邻域感知特征间注意力分数的情况下,不同邻域感知特征展现出不一样的重要性分布. 从可解释性出发,对于邻域感知特征NE_PC,关联元路径PPPCP和PPCP展现出很高的重要性. 而对于邻域感知特征NE_PA,关联元路径PAPCP和PAP则展现出更高的重要性. 这说明掩码矩阵有效地解决了各邻域感知特征的重要性分布趋于相似的问题,使得各邻域感知特征能够从不同的关联元路径特征中学

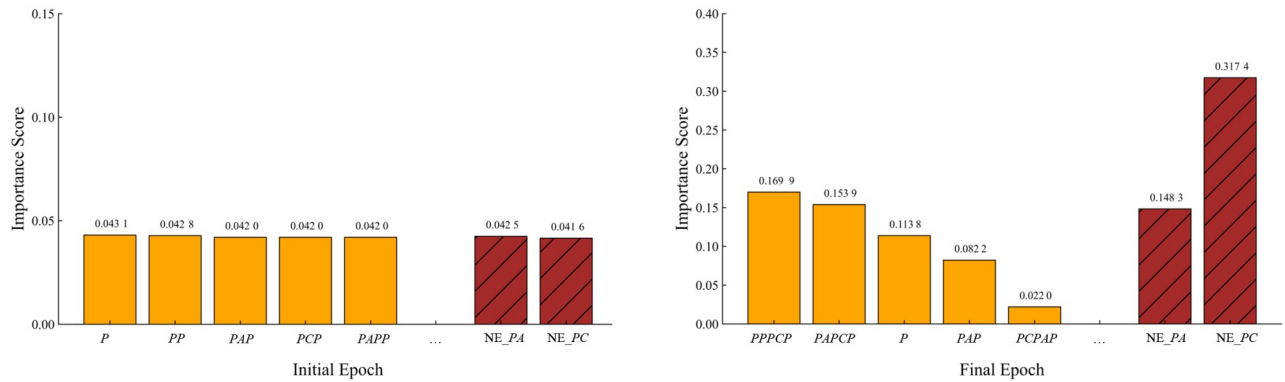


图6 在训练不同阶段关联元路径特征的重要性分布

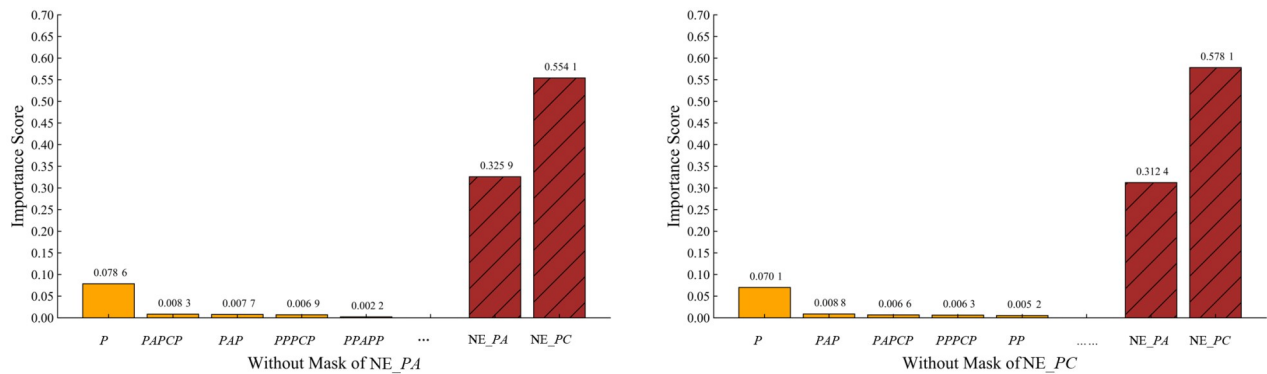


图7 无掩码下邻域感知特征的重要性分布

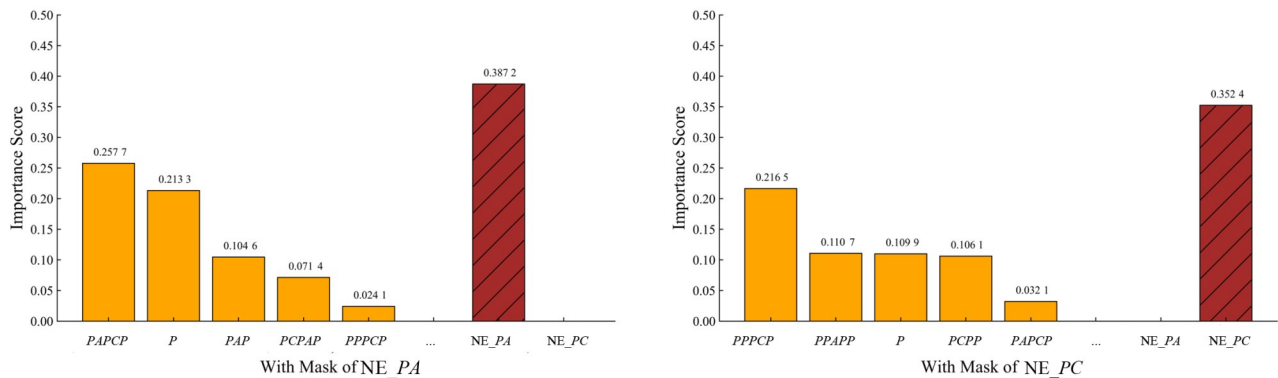


图8 掩码下邻域感知特征的重要性分布

习到了特定的邻域感知信息,并通过注意力机制有效地拟合对应邻域感知方式的语义表示.通过上述实验分析,有效地验证了NAHGNN各个模块设计的合理性.

4.8 超参数优化研究

为回答问题4,探究NAHGNN应对过平滑时模型的性能表现,本文选取DBLP作为实验数据集,深入分析了元路径长度对模型性能的影响,并设计了一系列

实验来验证不同元路径长度下,模型在节点分类任务上的性能表现.

在NAHGNN中,元路径长度意味着离目标节点最远的间隔长度,决定了元路径感知的最大距离及各关联元路径中语义特征的聚合数量.由于关联元路径自身特性,对于DBLP数据集,奇数长度 L 所聚合的语义信息与偶数长度 $L-1$ 的语义信息一致.因此,本文只讨论偶数长度Length与Micro-F1得分之间的关系.

实验结果如图9所示.当Length=2时,过短的元路径长度,关联元路径难以对异构图中目标节点间的关系进行准确的建模,导致性能表现不佳,得分较低.随着元路径长度的增加, Micro-F1 得分趋于稳定,在Length=6时,模型取得最佳性能.从图9可以观察到,随着元路径长度的继续增加, SEHGNN 与 MECCH 性能显著下降.这是由于受消息传递机制的影响,目标节点邻域中的边缘信息因过平滑而难以区分.而NAHGNN受益于邻域感知特征的设计,通过语义融合模块,实现边缘邻域信息的补全,因此性能更加稳定.充分验证了所提出的方法在缓解过平滑现象方面具有显著效果.同时与SEHGNN相比,NAHGNN的实验结果方差更小,性能更佳,说明贪婪地聚合指定长度内所有的元路径特征不仅会造成语义上的冗余,还会因为无关或冲突信息的引入而恶化模型性能.

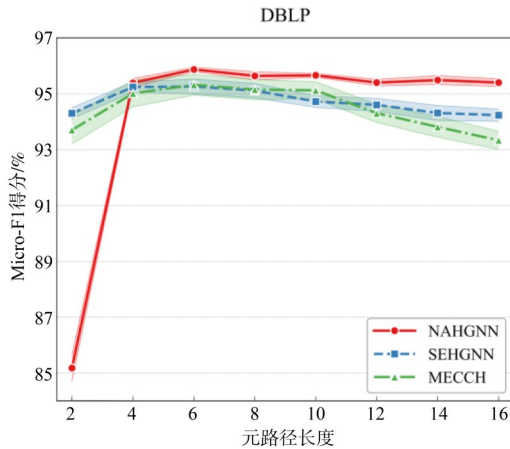


图9 不同元路径长度的 Micro-F1 得分

本文还对比了在不同元路径长度下,所需 GPU 内存与训练时间的变化情况.如图10和图11所示,随着元路径长度的增加,与NAHGNN相比,SEHGNN与MECCH所需计算资源上升更快,训练更久.这是由于SEHGNN和MECCH的聚合策略决定的. SEHGNN通过聚合目标节点指定元路径长度内所有语义特征,学习目标节点嵌入. MECCH依赖动态更新的隐藏层特征编码元路径上下文,需在每个训练 epoch 重复执行上下文构建与聚合,导致海量重复计算,且随元路径长度增加所需计算资源会进一步扩大.而NAHGNN通过关联元路径及邻域感知特征,实现元路径特征间解耦,有效降低了训练所需的计算资源,提升了训练质量.

为探究邻域感知信息聚合跳数对NAHGNN的影响,本文在DBLP数据集上对不同聚合跳数下NAHGNN的模型性能进行分析.实验结果如图12所示. NAHGNN在聚合跳数为1时取得最佳性能,并随着聚合跳数的增加, Micro-F1 得分呈下降趋势,同时 GPU 内

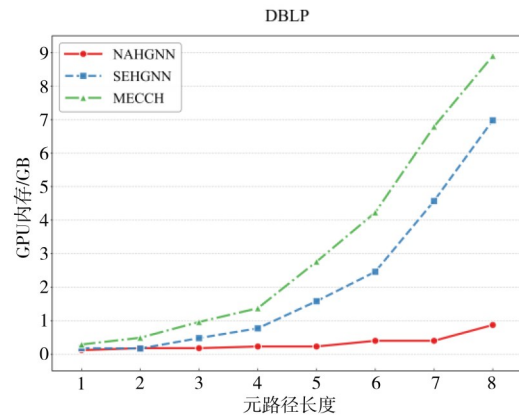


图10 不同元路径长度的 GPU 内存消耗

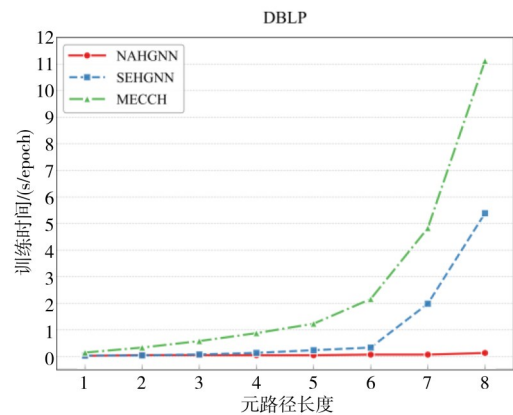


图11 不同元路径长度的时间消耗

存显著上升.表明过长的聚合跳数不仅导致邻域感知信息特征空间的语义冗余,降低模型性能,而且由于指数增加的特征数量导致计算成本升高.

4.9 可视化验证

为回答问题5,选取DBLP作为实验数据集,对四个基于元路径的异构图神经网络所输出的节点特征进行可视化验证对比.具体实验细节如下:首先,选取所有目标节点作为候选节点;其次,将模型进入分类器前对应的节点嵌入信息作为T-SNE^[30]的输入,输出节点在2-D空间中的表示;最后,进行可视化展示.如图13所示,其中颜色与节点的类别一一对应.通过对比,可以清晰地观察到NAHGNN输出的结果更具竞争力.其中,HAN由于只考虑同构子图,忽略了中间节点的特征信息,导致学习到的节点嵌入特征在各类别间的边界区域难以区分. MECCH虽然充分考虑了目标节点邻域中中间节点的嵌入信息,但受限于高阶聚合引发的过平滑问题,导致边缘节点信息难以有效聚合,使得聚合的节点嵌入特征无法从中受益,结果欠佳. SEHGNN通过均值聚合的方式,高效地生成指定元路径长度内所有的元路径特征,虽然聚合了丰富的语义信息,但过多的元路径特征不仅会造成语义上的

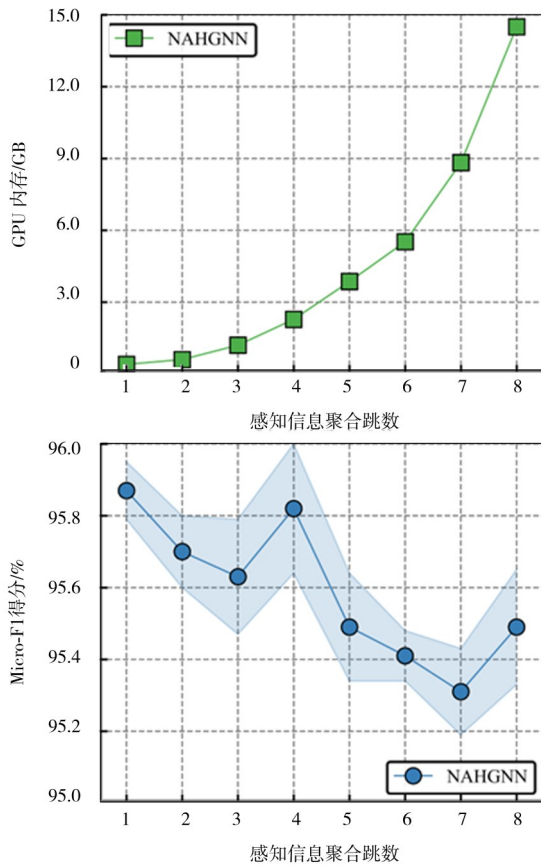


图12 不同聚合跳数下模型的性能表现

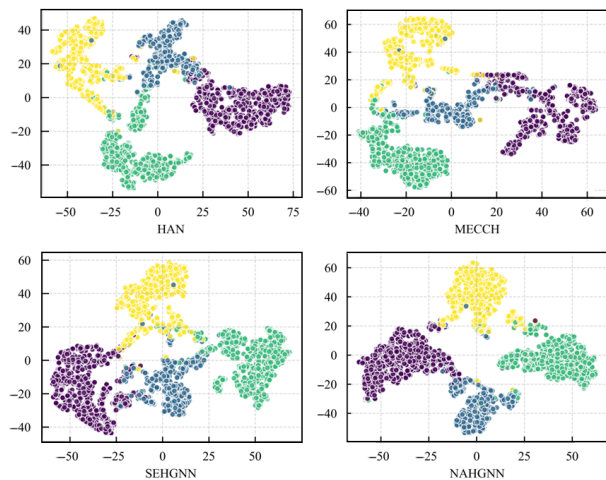


图13 在DBLP上输出节点特征的视觉表示

冗余,还会因为无关或冲突信息的引入而损害模型的整体性能,导致具有相似结构的不同类型节点难以区分. NAHGNN通过关联元路径对目标节点之间的关系进行建模,并通过邻域感知信息对目标节点的类型进行更加准确的判断,有效地缓解了过多元路径特征导

致的语义冗余和边缘信息过平滑导致的特征丢失. 因此各个类别的目标节点嵌入之间距离更远,实验结果更佳.

5 结论

本文针对异构图神经网络中元路径特征存在的语义冗余与边缘信息丢失问题,提出了邻域感知异构图神经网络 NAHGNN,从邻域感知方式的角度出发,设计了一种特征聚合策略,通过关联元路径和邻域感知特征从异构图中学习节点嵌入. 在四个公共异构图数据集上,分别验证了在节点分类任务上的模型性能. 在消融实验及注意力分数实验中,验证了 NAHGNN 各个模块的合理性和有效性.

本文工作主要针对静态图进行表示学习,在未来工作中将尝试从捕捉图结构数据的时序变化出发,通过时序信息与语义信息相结合,对所提出的方法进行优化,使其能够胜任动态异构图表示学习任务. 同时,未来将进一步拓展 Zhang 等人^[31]提出的研究框架,对大语言模型与图神经网络融合场景下的复杂关联特性进行探究.

参考文献

- [1] KHEMANI B, PATIL S, KOTTECHA K, et al. A review of graph neural networks: Concepts, architectures, techniques, challenges, datasets, applications, and future directions[J]. *Journal of Big Data*, 2024, 11(1): 18.
- [2] ANAND V, MAURYA A K. A survey on recommender systems using graph neural network[J]. *ACM Transactions on Information Systems*, 2025, 43(1): 1-49.
- [3] CHEN M, LI H K, PAN Y H, et al. Multi-filter based signed heterogeneous graph convolutional networks for predicting activating/inhibiting drug-target interactions[J]. *Methods*, 2025, 241: 51-58.
- [4] AI W, WEI Y Y, SHAO H E, et al. Edge-enhanced minimum-margin graph attention network for short text classification[J]. *Expert Systems with Applications*, 2024, 251: 124069.
- [5] FU X Y, ZHANG J N, MENG Z Q, et al. MAGNN: Meta-path aggregated graph neural network for heterogeneous graph embedding[C]//*Proceedings of The Web Conference 2020*. New York: ACM, 2020: 2331-2341.
- [6] MAVROMATIS C, KARYPIS G. GNN-RAG: Graph neural retrieval for efficient large language model reasoning on knowledge graphs[C]//*Findings of the Association for Computational Linguistics: ACL 2025*. Stroudsburg: ACL, 2025: 16682-16699.

- [7] SU X R, HU P W, YOU Z H, et al. Dual-channel learning framework for drug-drug interaction prediction via relation-aware heterogeneous graph transformer[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2024, 38(1): 249-256.
- [8] CHANG Y M, CHEN C, HU W B, et al. Megnn: Meta-path extracted graph neural network for heterogeneous graph representation learning[J]. *Knowledge-Based Systems*, 2022, 235: 107611.
- [9] CHEN M, JIANG Y J, LEI X J, et al. Drug-target interactions prediction based on signed heterogeneous graph neural networks[J]. *Chinese Journal of Electronics*, 2024, 33(1): 231-244.
- [10] LIU J, SONG L Y, WANG G T, et al. Meta-HGT: Meta-path-aware HyperGraph Transformer for heterogeneous information network embedding[J]. *Neural Networks*, 2023, 157: 65-76.
- [11] 范伟, 周魏, 文俊浩. 基于异构图的双通道交叉自适应对比学习推荐[J]. *电子学报*, 2023, 51(7): 1929-1938.
FAN W, ZHOU W, WEN J H. Recommendation based on graph heterogeneous using dual channel cross-adaptive contrast learning[J]. *Acta Electronica Sinica*, 2023, 51(7): 1929-1938. (in Chinese)
- [12] WANG B H, CHEN J W, LI C D, et al. Distributionally robust graph-based recommendation system[C]//*Proceedings of the ACM Web Conference 2024*. New York: ACM, 2024: 3777-3788.
- [13] HU Z N, DONG Y X, WANG K S, et al. Heterogeneous graph transformer[C]//*Proceedings of The Web Conference 2020*. New York: ACM, 2020: 2704-2710.
- [14] FU X Y, KING I. MECCH: Metapath context convolution-based heterogeneous graph neural networks[J]. *Neural Networks*, 2024, 170: 266-275.
- [15] MAO Q H, LIU Z M, LIU C H, et al. HINormer: Representation learning on heterogeneous information networks with graph transformer[C]//*Proceedings of the ACM Web Conference 2023*. New York: ACM, 2023: 599-610.
- [16] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks[C]//*The Semantic Web*. Cham: Springer, 2018: 593-607.
- [17] YANG X C, YAN M Y, PAN S R, et al. Simple and efficient heterogeneous graph neural network[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2023, 37(9): 10816-10824.
- [18] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[EB/OL]. (2017-02-22)[2025-10-10]. <https://arXiv.org/abs/1609.02907>.
- [19] HAMILTON W L, YING R, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//*Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. New York: ACM, 2017: 1025-1035.
- [20] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[EB/OL]. (2018-02-04) [2025-10-09]. <https://arxiv.org/abs/1710.10903>.
- [21] ZHU S C, ZHOU C, PAN S R, et al. Relation structure-aware heterogeneous graph neural network[C]//*2019 IEEE International Conference on Data Mining*. Piscataway: IEEE, 2020: 1534-1539.
- [22] LV Q S, 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: ACM, 2021: 1150-1160.
- [23] BUTLER L, PARADA-MAYORGA A, RIBEIRO A. Convolutional learning on multigraphs[J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2023, 71: 933-946.
- [24] AHN H, YANG Y Y, GAN Q, et al. Descent steps of a relation-aware energy produce heterogeneous graph neural networks[EB/OL]. (2022-10-21) [2025-09-30]. <https://arXiv.org/abs/2206.11081>.
- [25] HE L C, BAI L, YANG X, et al. High-order graph attention network[J]. *Information Sciences*, 2023, 630: 222-234.
- [26] ZHANG C X, SONG D J, 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.
- [27] WANG X, JI H Y, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network[C]//*The World Wide Web Conference*. New York: ACM, 2019: 2022-2032.
- [28] LI C, YAN Y Y, FU J H, et al. HetReGAT-FC: Heterogeneous residual graph attention network via feature completion[J]. *Information Sciences*, 2023, 632: 424-438.
- [29] LI C, FU J H, YAN Y Y, et al. Higher order heterogeneous graph neural network based on node attribute en-

hancement[J]. Expert Systems with Applications, 2024, 238: 122404.

- [30] VAN D M L, HINTON G. Visualizing data using t-SNE[J]. Journal of Machine Learning Research, 2008, 9(11): 2579-2605.

- [31] ZHANG Z J, WANG X, ZHOU H C, et al. Can large language models improve the adversarial robustness of graph neural networks?[C]//Proceedings of the 31st ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining V.1. New York: ACM, 2025: 2008-2019.

作者简介



李 强 男,1979年1月出生于江西省新余市. 现为湖南师范大学信息科学与工程学院副教授. 主要研究方向为边缘智能、智能计算.
E-mail: liqiang@hunnu.edu.cn



谭兴义 女,2000年10月出生于广西壮族自治区防城港市. 现为湖南师范大学软件工程专业硕士研究生. 主要研究方向为边缘智能.
E-mail: tanxingyi899@163.com



郑 唯 男,2000年6月出生于江苏省扬州市. 现为湖南师范大学软件工程专业硕士研究生. 主要研究方向为异构图表示学习.
E-mail: zw2945175993@163.com



马 华 男,1979年9月出生于湖南省宁远县. 现为湖南师范大学信息科学与工程学院教授和博士生导师. 主要研究方向为智能计算与服务计算、大数据挖掘.
E-mail: huama@hunnu.edu.cn



陈 明 女,1983年6月出生于湖南省祁阳市. 现为湖南师范大学信息科学与工程学院副教授. 主要研究方向为图机器学习及其应用.
E-mail: chenming@hunnu.edu.cn