

异质图表征学习综述^{*}

李亚聪¹, 刘皓冰¹, 蒋若冰¹, 刘 聰², 朱燕民³



¹(中国海洋大学 计算机科学与技术学院, 山东 青岛 266003)

²(山东理工大学 计算机科学与技术学院, 山东 淄博 255049)

³(上海交通大学 计算机科学与工程系, 上海 200240)

通信作者: 刘皓冰, E-mail: haobingliu@ouc.edu.cn; 蒋若冰, E-mail: jrb@ouc.edu.cn

摘要: 异质图因其能够反映现实世界中实体及其复杂多样的关系,而在诸多领域中扮演着至关重要的角色。异质图表征学习技术,旨在将图中的信息有效地映射到低维空间中,以便捕获和利用节点间深层的语义关联,进而支持节点分类、聚类等下游分析任务。深入调研异质图表征学习的最新研究进展,涵盖方法论和应用实践。首先对异质图的基本概念进行形式化定义,并讨论异质图表征学习的挑战。此外,从浅层模型和深度模型两个角度,系统地回顾当前主流的异质图表征学习方法,特别是深度模型,从异质图转换的视角出发进行分类并分析,进而对多种方法的优势、局限和适用场景进行详尽分析,旨在为读者提供一个全面的研究视角。此外,还介绍异质图表征学习研究中常用的数据集和工具,并探讨其在现实世界中的典型应用。最后,总结主要贡献,并对异质图表征学习领域的未来研究方向展望。本综述旨在为研究者提供一个关于异质图表征学习领域的全面认识,为未来的研究和应用奠定坚实的基础。

关键词: 异质图; 图表征学习; 图神经网络; 深度学习; 数据挖掘

中图法分类号: TP18

中文引用格式: 李亚聪, 刘皓冰, 蒋若冰, 刘聪, 朱燕民. 异质图表征学习综述. 软件学报. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7319.htm>

英文引用格式: Li YC, Liu HB, Jiang RB, Liu C, Zhu YM. Survey on Heterogeneous Graph Representation Learning. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7319.htm>

Survey on Heterogeneous Graph Representation Learning

LI Ya-Cong¹, LIU Hao-Bing¹, JIANG Ruo-Bing¹, LIU Cong², ZHU Yan-Min³

¹(School of Computer Science and Technology, Ocean University of China, Qingdao 266003, China)

²(School of Computer Science and Technology, Shandong University of Technology, Zibo 255049, China)

³(Department of Computer Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: Heterogeneous graphs, which can effectively capture the complex and diverse relationships between entities in the real world, play a crucial role in many domains. Heterogeneous graph representation learning aims to map the information in graphs into a low-dimensional space, so as to capture the deep semantic associations between nodes and support downstream tasks such as node classification and clustering. This study presents a comprehensive review of the latest research progress in heterogeneous graph representation learning, covering both methodological advancements and real-world applications. It first formally defines the concept of heterogeneous graphs and discusses the key challenges in heterogeneous graph representation learning. From the perspectives of shallow models and deep models. It then systematically reviews the mainstream methods for heterogeneous graph representation learning, with a particular focus on deep models. Especially for deep models, they are categorized and analyzed from the perspective of heterogeneous graph transformation. The strengths, limitations, and application scenarios of various methods are thoroughly analyzed, aiming to provide

* 基金项目: 国家自然科学基金 (62302469); 山东省自然科学基金 (ZR2023QF100, ZR2022QF050); 山东省泰山学者工程专项基金 (tsqn201909109); 山东省自然科学基金优秀青年基金 (ZR2021YQ45); 山东省高等学校青创科技计划创新团队项目 (2021KJ031)

收稿时间: 2024-04-25; 修改时间: 2024-07-24, 2024-09-22; 采用时间: 2024-10-31; jos 在线出版时间: 2025-03-12

readers with a holistic research perspective. Furthermore, the commonly used datasets and tools in the field of heterogeneous graph representation learning are introduced, and their applications in the real world are discussed. Finally, the main contributions of this study are summarized and the outlook on the future research directions in this area is presented. This study intends to offer researchers a comprehensive understanding of the field of heterogeneous graph representation learning, laying a solid foundation for future research and application.

Key words: heterogeneous graph; graph representation learning; graph neural network (GNN); deep learning; data mining

随着社交网络、生物信息学、电子商务等行业的飞速发展,图数据已经成为描绘复杂关系和交互的关键。这些图数据不仅规模庞大,而且在结构上呈现出高度的复杂性,常见的形式是由多种类型的节点和边构成的异质图。异质图的研究,因其能够综合多维度信息并揭示深层次的关联性,而成为数据科学领域的热点^[1]。以学术网络为例,它是一个包含作者、论文、会议等多种实体以及它们之间丰富交互的复杂系统。这些交互不仅反映了作者与论文之间的创作关系,还可能揭示了会议的研究趋势和学术影响力。异质图的深度挖掘,为研究者提供了一种强大的手段,以更全面地理解和分析现实世界的复杂网络,这一点在网络安全^[2,3]、推荐系统^[4-6]等领域的应用中得到充分体现。

图表征学习技术^[7,8],通过将图中节点转化为低维度向量,已成为图分析领域^[9]的核心技术,为节点分类^[10]、链接预测^[11]等一系列下游任务提供了输入。相较于同构图,异质图以其在捕获现实世界中复杂关系方面的卓越表达力而脱颖而出。然而,传统技术多建立在同构图假设之上,它们在处理异质图时往往难以有效处理不同类型的节点和不同类型的边。为应对这一问题,研究者们转向了异质图表征学习领域^[12],致力于探索能够深入挖掘异质图的结构及语义信息的新型方法。在早期的异质图表征学习研究中,研究者们通常采用基于网络结构^[13-15]的浅层方法,通过随机游走等方式捕获异质图的结构信息。随着深度学习的兴起,研究者们开始探索如何利用深度模型^[16-20]来精细地捕获异质图的深层次信息。许多异质图表征学习方法^[21-23]已经成功应用于处理现实图数据,包括用在推荐系统^[6]、健康监护信息系统^[24]等。

表1 展示了本文与该领域其他综述文献的对比。

表1 本文与其他异质图表征学习综述文献的对比

文献	基础概念定义	深度模型的分 类角度	方法介绍	方法的前沿性	数据集与工具	现实场景的 应用	挑战和未来 展望
Ammar 等人 ^[25]	仅定义3个基 本概念	依据使用的技 术	分析每类方法优缺点, 无模型图	仅包含2022年 及以前的方法	无	3个应用场景	提出3条挑战和 3个未来方向
Bing等人 ^[26]	常用概念定义	依据使用的神 经网络架构	分析每类方法优缺点	仅包含2022年 及以前的方法	介绍了评价指 标和数据集	4个应用场景	提出5条挑战
Wang等人 ^[12]	常用概念定义	依据使用信息 的角度	分析每类方法优缺点	仅包含2021年 及以前的方法	介绍了数据集 和工具	4个应用场景	提出3条挑战和 6个未来方向
石川等人 ^[27]	常用概念定义	依据使用的神 经网络架构	分析每类方法优缺点	仅包含2020年 及以前的方法	无	3个应用场景	提出2条挑战和 4个未来方向
本文	常用概念定义, 依 据异质图转 形式化定义元 素图和关 系子图	依据异质图转 换的视角, 充 分考虑异质性 的处理	分析每类方法优缺点, 并且针对每一类方法 概况出基本设计思想 并辅以示意图进行展 示	包含大量2023、 2024年的最新 方法	介绍了评价指 标、数据集和 工具, 提供典 型方法的代码 示	8个应用场景, 并且追踪了 这些场景中 最新的发展 动态	提出4条挑 战, 并结合前 沿研究给了5个未 来研究方向

尽管异质图表征学习已经取得显著进展,但还没有针对该领域的中文综述,来系统性地分析和讨论这一领域的
方法及其在现实世界中的应用。石川等人^[27]对异质信息网络进行了综述,但其只使用少量篇幅介绍异质图表征,
且只涵盖2020年及以前的方法。一些英文文献^[12,25,26]对异质图表征学习技术的发展状况进行了概述,但这些综述
往往简单地根据方法所使用的深度神经网络^[28]种类、是否使用监督信息等进行分类。例如,Wang等人^[12]关注深度
模型是有监督或者无监督。Bing等人^[26]更关注异质图表征学习模型使用的深度学习网络,如自编码器、卷积神
经网络等。类似地,Ammar等人^[25]从基于编码器—解码器和基于消息传递两个角度来划分异质图表征学习。这些

分类方法都忽略了对图异质性的处理, 而这正是异质图的核心特征。此外, Zhao 等人^[29]从邻居跳数、聚合次数等多个角度划分异质图表征学习方法, 但其工作重心是提供一个设计平台, 他们只对少量异质图表征学习方法做了介绍。另外, 上述综述^[12,25,26]只包括 2022 年及以前的工作, 而异质图表征学习方法发展迅速, 需要新的综述追踪最新的动态。

本文的主要贡献如下。

- 囊括了近几年提出的最新方法, 并从浅层到深层详尽介绍了这些方法的原理, 并逐一剖析了异质图表征学习方法的优劣。
- 提出了基于异质图转换方式对深度模型进行分类, 此分类方式有助于读者更深入地理解图异质性处理机制。
- 详尽介绍了该领域在现实场景中的最新应用, 包括电子商务、网络安全和生物医药等多个领域, 有助于读者全面了解该技术在实际应用中的发展现状和未来趋势。
- 指出了异质图表征学习领域的主要挑战, 并结合前沿研究展望了该领域未来的研究方向, 为未来的研究指出了可能的方向。

本文的组织结构如图 1 所示。第 1 节介绍异质图领域的基础知识, 并指出异质图表征学习面临的挑战。第 2 节介绍异质图表征学习的浅层模型。第 3–5 节将从基于异质图转换的方法分类细致介绍深度异质图表征学习的发展现状。第 6 节介绍异质图表征学习过程中常用的数据集和工具等。第 7 节将介绍异质图表征学习在现实场景中的应用。最后, 第 8 节将对全文进行总结, 并展望未来的发展方向。

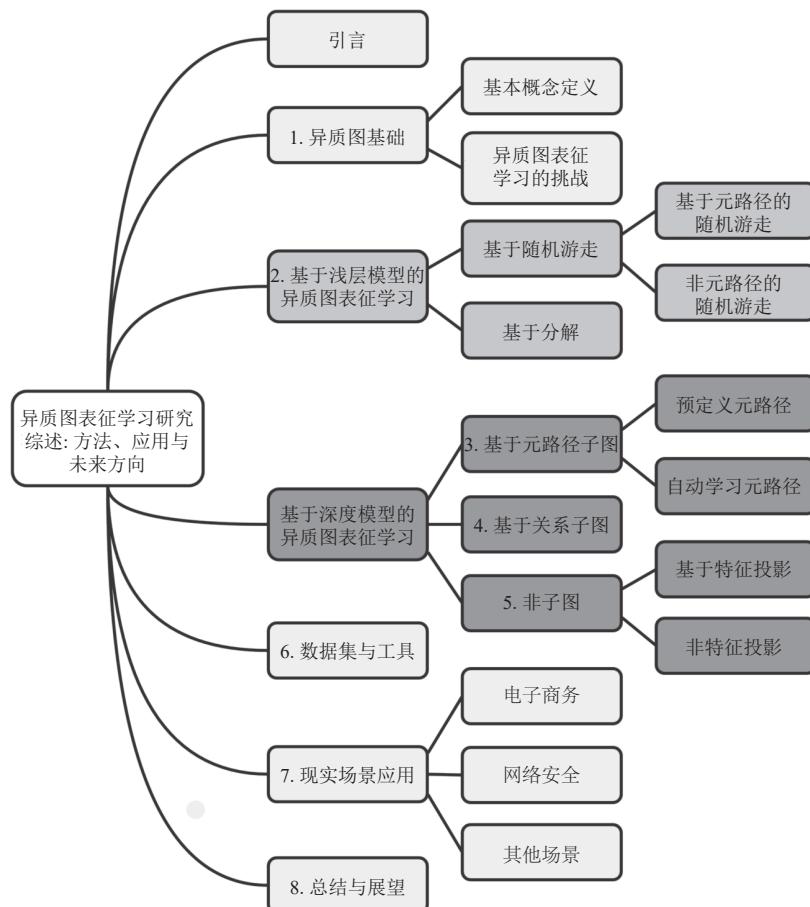


图 1 本文的组织结构

1 异质图基础

本节将首先介绍异质图及其相关的基本概念，并进一步指出异质图表征学习方向面临的挑战。表 2 总结了本文使用的符号。

表 2 符号和解释

符号	解释	符号	解释
d	表征的维度	M	元路径
v_i	节点 i	m	元路径实例
x_i	节点 i 的属性	W	权重矩阵
e_{ij}	节点 i 和节点 j 之间的边	h_i	节点 i 的表征
V, E	图的节点/边集合	N_i	节点 i 的邻居节点集合
O, R	图的节点类型/边类型集合	σ	Sigmoid 函数
A	邻接矩阵	—	—

1.1 基本概念定义

为了更好地描述异质图表征学习模型，本节中给出了异质图及其相关概念的定义。图 2 是一个异质图实例，图 2(a) 是一个异质的学术图，包含作者、论文、会议和关键词 3 种类型的节点以及撰写、发表和包含 3 种类型的边。图 2(b) 是该学术图的网络模式。图 2(c) 是该学术图中的 3 条元路径。图 2(d) 是该学术图的一个元图。

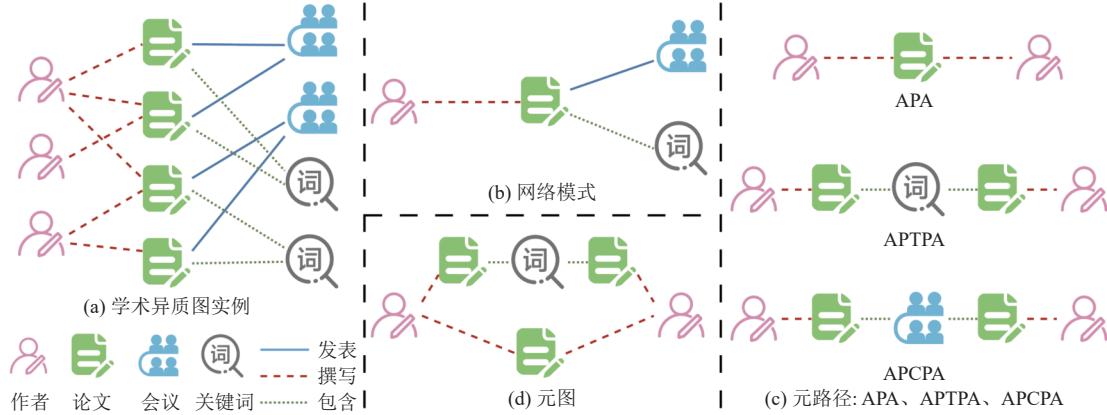


图 2 异质图实例

定义 1(异质图). 异质图定义为一个图 $G = (V, E, \phi, \psi)$ ，其中 V 和 E 分别表示节点集合和边集合。节点 $v \in V$ 和边 $e = \langle v, v' \rangle \in E$ 的映射函数分别为 $\phi(v) : V \rightarrow O$ 和 $\psi(e) : E \rightarrow R$ 。其中， O 和 R 分别表示节点类型和边类型，且 $|O| + |R| > 2$ 。

图 2(a) 是一个异质图的实例，在该实例中，包含 4 种节点类型：论文、作者、会议和关键词。不同节点类型之间的链接有着不同的含义。例如，作者和论文间的链接表示撰写的关系，会议和论文间的链接表示发表的关系。

定义 2(网络模式). 网络模式 $S = (O, R)$ 是异质图 $G = (V, E, \phi, \psi)$ 的元模式，其中 $\phi(v) : V \rightarrow O$ 是节点类型映射， $\psi : E \rightarrow R$ 是边类型映射。具体而言，网络模式是定义在节点类型集合 O 上的有向图，其边由关系集合 R 上的关系定义。

定义 3(元路径). 元路径^[30] M 是基于网络模式 S 的，表示为 $M = O_1 \xrightarrow{R_1} O_2 \xrightarrow{R_2} \dots \xrightarrow{R_l} O_{l+1}$ (简化为 $O_1 O_2 \dots O_{l+1}$)，其中节点类型 $O_1, O_2, \dots, O_{l+1} \in O$ ，边类型 $R_1, R_2, \dots, R_l \in R$ 。

例如图 2(c)，元路径“APA”表示两个作者合著一篇文章，元路径“APTPA”则表示论文拥有共同的关键词，而元路径“APCPA”则表示论文同属一个会议。元路径可以很好地描述实体之间的关系，因此选择合适的元路径，聚合通

过元路径相连的高阶邻居, 更有利于捕获节点的邻域信息.

定义 4(元图). 元图^[31,32]可以被视为一个有向无环图(DAG), 由多条具有公共节点的元路径组成. 形式上, 元图定义为 $T = (V_T, E_T)$, 其中 V_T 是节点的集合, E_T 是边的集合. 对于任意 $v \in V_T$, 其节点类型满足 $\phi(v) \in O$; 对于任意边 $e \in E_T$, 其边类型满足 $\psi(e) \in R$. 显然, 元路径可被看作是元图的一个特例.

图 2(d) 可以被视作是一个学术网络的元图, 它是由元路径“APA”和元路径“APTPA”组成, 可以捕获更复杂的语义.

定义 5(元路径子图). 给定一个异质图 $G = (V, E, \phi, \psi)$ 和一个元路径 $M = O_1 \xrightarrow{R_1} O_2 \xrightarrow{R_2} \dots \xrightarrow{R_l} O_{l+1}$, 节点 v 的元路径子图定义为以 v 为中心的局部子图 $G_v^M = (V_v^M, E_v^M)$, 其中边 $(v_1, v_2) \in E_v^M$ 当且仅当它属于原图中从 v 开始的元路径 M 的一个实例. 请注意, 元路径的中间节点可以像 Fu 等人^[33]的定义一样被保留和使用, 也可以像 Guan 等人^[34]的定义一样不被使用, 即只保留元路径的端点.

图 3 中, 异质图可以根据不同的元路径得到相应的元路径子图, 基于元路径 APA 的子图可以表示作者合作论文的关系, 基于元路径 PSP 的子图可以表示具有相同主题的论文之间的关系.

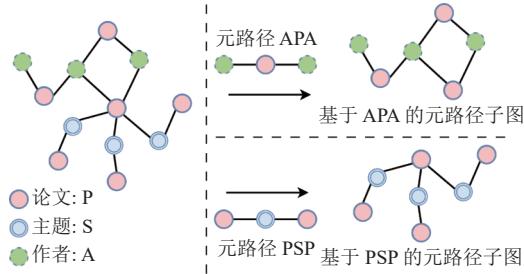


图 3 元路径子图实例: 根据元路径 APA 和元路径 PSP, 从原始异质图中划分出不同的元路径子图

定义 6(关系子图). 形式上, 关系子图 G_r 可以定义为 $G_r = (V', E_r)$, 它是异质图 $G = (V, E, \phi, \psi)$ 的一个子图, $V' \subseteq V$ 且 $E_r \subseteq E$ 是 G 中所有边类型为 $r \in R$ 的边构成的集合. 其中 $E_r = \{e \in E \mid \psi(e) = r\}$ 且 $V' = \{v, v' \mid \exists e = \langle v, v' \rangle \in E_r\}$.

图 4 可以被视作关系子图的生成过程, 将异质图按照 4 种边类型拆分为 4 个特定边类型的子图.

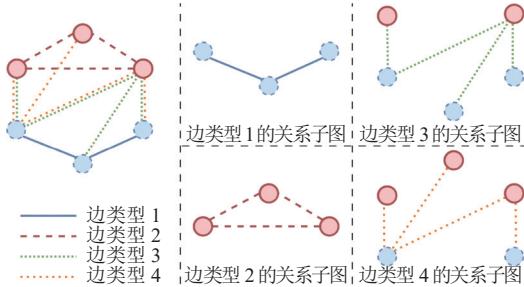


图 4 关系子图: 根据边类型将异质图拆分为单一边类型的子图

定义 7(异质图表征学习). 异质图表征学习是指从给定的异质图 $G = (V, E, \phi, \psi)$ 中学习节点的低维向量表示, 使得这些表征能够有效地捕捉异质图中的语义信息和结构信息. 具体地, 异质图表征学习通过映射函数将节点投影到低维空间 $f: V \rightarrow \mathbb{R}^d$, 其中 $d \ll |V|$, 使得学习到的节点向量表示能够最大程度保留异质图中的结构和语义信息, 并可以作为节点分类、节点聚类和链接预测等下游任务的输入.

1.2 异质图表征学习的技术挑战

图 5 按照本文所提出的分类方法, 对异质图表征学习领域近些年来的代表性方法作出总结. 随着异质图表征学习技术的不断演进, 研究者们在解决传统难题的同时也面临着一系列新的技术挑战. 这些挑战涉及异质性、预定元路径、多源信息以及数据缺失等方面, 为异质图表征学习领域的进一步发展提出了新的问题和机遇.

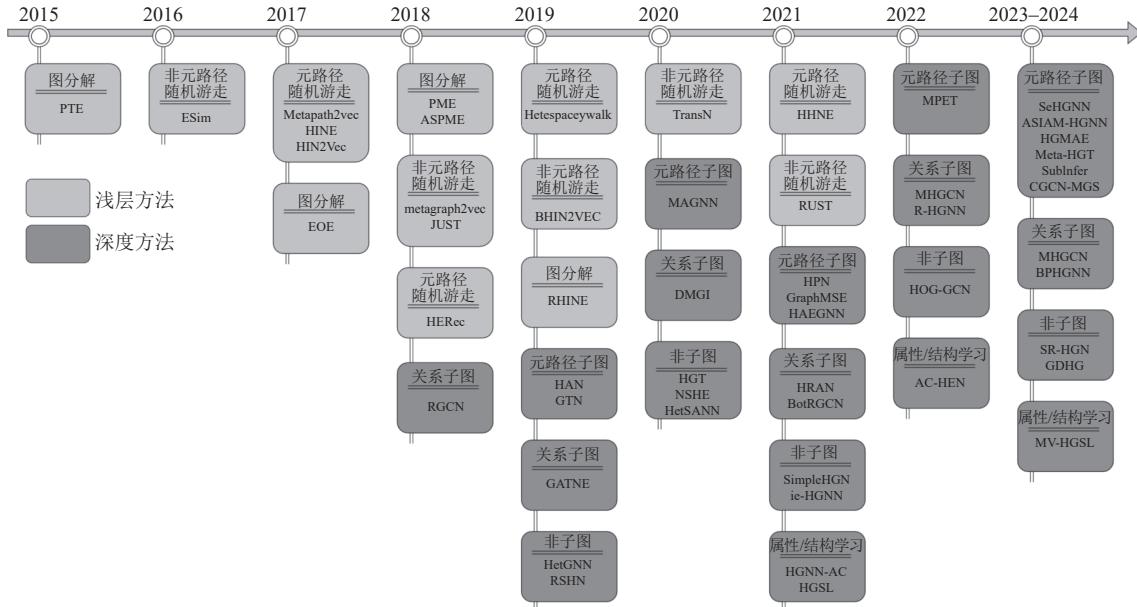


图 5 异质图表征学习代表性方法的时间轴

(1) 异质性挑战: 异质图表征学习所面临的首要挑战在于如何有效处理异质性. 传统图表征学习方法^[35–37]通常是针对同构图的, 难以充分捕获异质图中不同类型节点和边之间的复杂关联. 异质图包含多种节点和边类型, 其连接关系涵盖了丰富的语义信息. 因此, 设计表征学习方法以充分利用异质图所蕴含的丰富语义信息, 成为当前迫切需要解决的问题.

(2) 元路径预定义挑战: 目前的异质图表征学习方法大多基于元路径捕获信息^[10,14,17,19], 但这些元路径往往需要提前定义. 虽然基于元路径的方法能够方便提取语义信息, 但是手动预定义元路径需要丰富的领域知识, 而且缺乏泛用性. 如何自动搜寻恰当的元路径进行聚合, 以更灵活地适应不同异质图的特点, 是需要着重解决的问题.

(3) 多源异质信息挑战: 融合多源异质信息是异质图表征学习领域中的一项重要挑战, 因为实际场景中的异质图通常包含来自不同领域的多源异质数据^[16,38,39], 如文本、图像、数值、视频等. 处理这些多源异质信息并将其有效融合到图表征学习模型中, 既要保留各种信息的特征, 又要避免信息冗余和丢失, 是一个具有挑战性的任务.

(4) 数据缺失挑战: 在异质图表征学习中, 数据缺失^[40,41]是一个普遍存在的问题. 由于节点类型的不同, 信息获取的难度也有所差异. 例如, 用户节点类型可能因为隐私保护或数据收集限制而缺失属性, 这会导致关键语义信息的遗漏, 进而影响图的结构完整性和不同类型节点间的有效关联. 因此, 如何有效应对和处理数据缺失问题, 以提升异质图表征学习的质量和可靠性, 是一个需要关注的问题.

这些挑战凸显了在异质图表征学习领域中, 面对不断变化的数据特性和应用需求所带来的复杂性. 已有一些研究者针对上述挑战展开了研究并取得了一定的成果. 例如, MV-HGSL^[42]和 HGSL^[43]将图结构学习引入到图表征学习过程中, 通过计算节点相似度来构造相似度图, 与异构图进行融合, 进而优化图结构. GTN^[44]将元路径视为不同边类型对应邻接矩阵的乘积, 并通过软选择的方式自动选择权重更高的元路径. HetGNN^[16]通过对节点不同类型的特征采用不同类型的编码方式, 以考虑多源异质信息. 尽管这些方法在解决上述问题上取得了一定成功, 但仍然存在一些尚未解决的问题. 因此, 研究者们需要不断积极地探索新的理论和方法, 以推动该领域迈向更深层次的突破.

可以将异质图表征学习的方法分为基于浅层模型的方法和基于深度模型的方法, 并根据模型处理异质性的方法做更细致的分类. 接下来本文将首先对基于浅层模型的异质图表征学习做详细介绍和分析.

2 基于浅层模型的异质图表征学习

在学习图表征的过程中,一个主要的目标是保留图的结构信息,尤其在异质图中,含有不同类型的节点和边,图结构中含有丰富的语义信息。浅层表征学习方法不使用深度神经网络,通常只采用相对简单的技术来生成节点的低维表示,并保留图的拓扑结构。相比于深层方法,浅层方法通常不需要复杂的迭代训练过程,计算成本较低,并且通常更容易解释。本节将从基于随机游走和基于分解的浅层方法两个角度介绍异质图表征学习的浅层模型。本文从高水平会议和期刊中选择高引用量的典型方法,为读者介绍并分析它们的特征和优缺点,方法概览如表3所示。

表3 浅层异质图表征学习方法总结

分类	方法	发表年份	会议/期刊
基于元路径的随机游走	metapath2vec ^[10]	2017	SIGKDD
	HINE ^[14]	2017	DASFAA
	HeteSpaceyWalk ^[45]	2019	CIKM
	HIN2Vec ^[46]	2017	CIKM
	HERec ^[6]	2018	TKDE
	HHNE ^[47]	2021	TKDD
非元路径的随机游走	ESim ^[48]	2016	ARXIV
	BHIN2VEC ^[49]	2019	CIKM
	TransN ^[50]	2020	ICDE
	MetaGraph2Vec ^[13]	2018	PAKDD
基于图分解的浅层模型	JUST ^[51]	2018	CIKM
	PTE ^[52]	2015	SIGKDD
	PME ^[15]	2018	SIGKDD
	EOE ^[53]	2017	WSDM
	Asperm ^[54]	2018	SDM
	RHINE ^[55]	2019	AAAI

2.1 基于随机游走的浅层异质图表征学习

基于随机游走的浅层异质图模型整体架构如图6所示,图6(a)是原始异质图,图6(b)是在异质图上执行随机游走,获得节点序列,可以选择结构指导随机游走,例如元路径,图6(c)是根据随机游走获得的节点序列训练异质图 Skip-gram 模型,学习节点表征。这类方法通过模拟随机游走来捕获图的拓扑结构,在图中生成节点序列。这些序列反映了图的局部连接模式,并且隐含了节点间的高阶依赖关系。这些序列作为训练数据用于训练 Skip-gram^[56]等模型,用于学习节点表征。在异质图中,研究者们^[10,14,45–47]常选择元路径来指导随机游走。为了捕获更特殊的语义,一些研究者^[13,49–51]也会选择采用元图等特殊结构来指导随机游走。

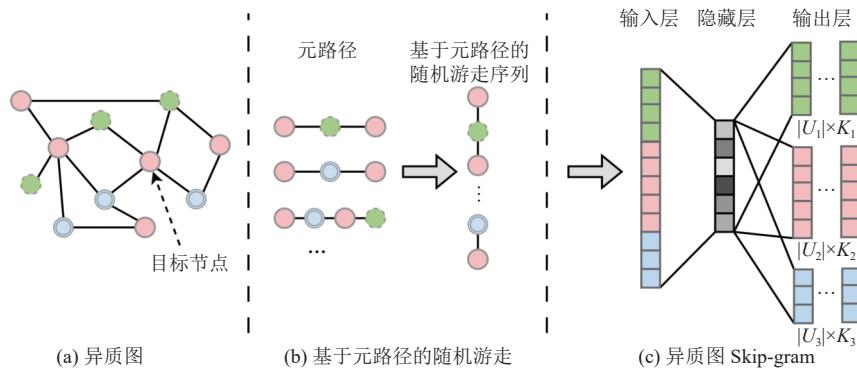


图6 基于随机游走的异质图模型图

2.1.1 基于元路径的随机游走

元路径描述了图中不同类型节点之间的连接模式,可以帮助捕获更丰富的语义信息. 基于元路径的随机游走会按照预定义的元路径,在元路径中进行随机游走,生成反映图结构的节点序列.

最经典的基于元路径的随机游走方法是 metapath2vec^[10], 它通过元路径指导的随机游走来生成节点序列, 并利用这些序列来学习节点的向量, 它将 Skip-gram 进行改进, 使其可以适应异质图结构, 保持目标节点和其基于随机游走的邻居之间的邻近性:

$$\arg \max_{\theta} \sum_{v \in V} \sum_{t \in T_V} \sum_{c_t \in N_t(v)} \log p(c_t | v; \theta) \quad (1)$$

其中, V 是图中所有节点的集合, T_V 是目标节点类型的集合, $N_t(v)$ 是节点 v 的上下文节点集合, θ 是模型的参数. $p(c_t | v; \theta)$ 是在给定节点 v 的条件下观察到上下文节点 c_t 的条件概率.

除此之外, 还有一些各具特色的经典工作. HINE^[14]考虑节点的局部语义和全局语义, 通过随机游走获得的节点序列监督表征学习过程, 通过马尔可夫随机场传播全局语义, 进而丰富嵌入向量. HIN2Vec^[46]通过考虑节点对之间可能存在的多种关系来学习节点表征. 它不仅学习节点的表征, 还学习元路径的表征, 并预测节点对之间是否存在某种类型的关系. HeteSpaceyWalk^[45]考虑了高阶马尔可夫链性质, 提出了一个异质空间的随机游走, 以平衡节点期望分布. HERec^[6]在使用基于元路径的随机游走的同时, 引入矩阵分解技术对目标进行预测. HHNE^[47]尝试在双曲空间内进行异质图表征学习, 在双曲空间内执行基于元路径的随机游走, 随后使用双曲距离来衡量节点之间的相似性. ESim^[48]定义了由顶点 v 经过元路径 M 到顶点 u 的条件概率, 并根据元路径实例的概率来学习节点表征. 节点 v 在节点 u 的条件下, 通过元路径 M 达到的概率 $P(r(v | u, M))$ 可以表示为:

$$P(r(v | u, M)) = \frac{\exp(f(u, v, M))}{\sum_{v_0 \in V} \exp(f(u, v_0, M))} \quad (2)$$

2.1.2 非元路径的随机游走

尽管元路径在捕获异质图语义时发挥了重要作用, 但是由于其结构较为简单, 无法捕获更加复杂的语义信息, 一些研究者^[13,49,50,51]选择使用其他结构信息来引导随机游走. BHIN2VEC^[49]提出了偏置随机游走生成器, 通过随机矩阵来决定下一个采样类型, 并且提出扩展的 Skip-gram 模型用来平衡关系类型. TransN^[50]将异质图拆分为多个视图, 在使用随机游走序列捕获单视图内信息的同时, 提出一种跨视图算法来传播视图之间的信息.

一项经典的工作是 MetaGraph2Vec^[13], 作者认为基于元路径的方法只有一小部分路径可以和元路匹配, 会导致上下文节点稀疏, 而使用结构更为复杂的元图来引导随机游走可以捕获更高阶的语义信息. 给定基于元图的随机游走序列 v_1, v_2, \dots, v_L , 窗口大小设置为 w , 通过最大化上下文节点出现的概率来学习表征, 其中 $\Phi(\cdot)$ 是节点嵌入方程:

$$\min_{\phi} -\log P(\{v_{i-w}, \dots, v_{i+w}\} \setminus v_i \mid \Phi(v_i)) \quad (3)$$

其中, 上下文节点出现的概率定义为:

$$P(\{v_{i-w}, \dots, v_{i+w}\} \setminus v_i \mid \Phi(v_i)) = \prod_{\substack{j=i-w \\ j \neq i}}^{i+w} P(v_j \mid \Phi(v_i)) \quad (4)$$

另一项经典的工作是 JUST^[51], 作者指出基于元路径的随机游走需要预定义元路径, 这需要丰富的相关领域知识, 并且往往需要进行拓展运算. 为了解决这个问题, 作者放弃使用元路径, 提出了基于跳跃和停留的随机游走方案. 在随机游走的每一步都有两种选择, 跳跃到目标类型 q 或者停留在当前类型, 作者通过概率来平衡进行这两种选择, 当执行跳跃时, 作者通过均匀采样的策略来得到目标类型 q , 可以保证不同类型的节点采样均衡. RUST^[57]对 JUST 进行了改进, 通过圆方程来控制采样过程. 具体地, 使用两个超参数 $a \in [0, 1]$ 和 $b \in [0, 1]$ 来构成单位圆, 令 $a^2 + b^2 = 1$, 其中 a 控制一个区域内的采样, 而 b 控制向其他区域采样.

2.2 基于分解的浅层异质图表征学习

基于分解的浅层异质图表征学习方法直接从图的结构出发, 对图的边类型等结构信息进行拆分来简化图结构, 以便学习节点的表征. 这类方法不依赖于生成随机游走序列的过程, 可以避免随机游走可能引入的噪声和计算开销.

一项经典的工作是 PTE^[52], 它通过将文本网络划分为词-词网络、词-标签网络和词-文档网络来学习异质文本网络的表征, 并根据 3 个网络来优化整体模型.

$$P = P_{ww} + P_{wd} + P_{wl} \quad (5)$$

其中, P_{ww} 、 P_{wd} 和 P_{wl} 分别是 3 个网络的目标函数, 可以通过负采样等技术获得. 类似地, PME^[15]根据边类型将异质图分解为多个子图, 并使用针对特定边类型的投影嵌入矩阵将每个子图投影到特定的语义空间中, 学习到一个距离度量的同时保留一阶和二阶相似性, 为节点和边分别引入不同的空间从而避免了现有度量方法的缺点.

除了根据边类型拆分, 还有一些方法通过特殊手段分解图结构. 耦合异质图 (coupled heterogeneous graphs) 由子图组成, 每个子图各拥有一种节点类型, EOE^[53]将耦合异质图中的边分为图内链接 (intra-graph links) 和跨图链接 (inter-graph links). 图内链接连接相同类型的两个节点, 跨图链接连接不同类型的两个节点, 也就是两个子图中的节点. EOE 在处理耦合异质图时, 认为被同一条边连接的节点更相似, 而没有被边连接的两个节点不相似, 并且每个子图都通过两个子图中间的边向另一个子图传递信息, 以此捕获图的异质性. ASPEM^[54]设计了一种基于统计的方法, 根据非负性、单调性和凸性等性质将异质图划分为不同层次, 然后分别学习单个层次的表征, 通过拼接获得节点表征. RHINE^[55]通过一个基于度的度量 $D(r)$ 来将不同节点类型的关系划分为隶属关系和交互关系, 并根据关系特性分别建模. $D(r)$ 定义如下:

$$D(r) = \frac{\max[\bar{d}_{t_u}, \bar{d}_{t_v}]}{\min[\bar{d}_{t_u}, \bar{d}_{t_v}]} \quad (6)$$

其中, \bar{d}_{t_u} 是节点类型 t_u 的平均度, \bar{d}_{t_v} 是节点类型 t_v 的平均度.

3 基于元路径子图的深度模型

浅层方法通常局限于捕获图的线性结构和浅层关系, 利用深度学习可以学习复杂的图结构和节点间丰富交互. 接下来将介绍异质图表征学习的深度模型. 具体而言, 各模型采用不同的策略对异质图进行分解或者转换, 以有效地捕获异质节点和边的语义信息. 本文将其分为 3 类: 基于元路径子图的方法、基于关系子图的方法, 以及非子图的方法. 它们分别通过特定的方式来处理异质性质, 从而更好地处理异质信息. 本文还将在第 6 节的最后介绍这 3 类方法之外的其他特色模型, 这些模型往往处理结构、属性或者标签缺失的异质图结构. 本节将深入研究基于元路径子图的深度异质图表征学习方法, 将其分为预先定义元路径和自动学习元路径的方法, 并具体探讨不同方法的原理、优势和局限性.

在异质图表征学习领域中, 基于元路径的异质图表征学习方法成为研究的焦点之一. 给定一个元路径, 异质图中每个节点都形成了一个基于该元路径的邻居集合. 这个集合承载着丰富的语义和异质图结构的多样性, 为我们揭示了异质图中的不同结构信息. 元路径作为描述节点间语义关系的有效工具, 被广泛应用于捕获异质图中复杂的节点关联. 基于元路径子图的方法概览如表 4 所示.

表 4 基于元路径子图的深度方法总结

分类	方法	发表年份	会议/期刊
预先定义元路径	HAN ^[17]	2019	WWW
	HPN ^[19]	2021	TKDE
	MAGNN ^[58]	2020	WWW
	SeHGNN ^[59]	2023	AAAI
	HGMAE ^[60]	2023	AAAI

表 4 基于元路径子图的深度方法总结(续)

分类	方法	发表年份	会议/期刊
预先定义元路径	HAEGNN ^[61]	2021	TKDE
	SubInfer ^[62]	2024	AAAI
	HetGPT ^[63]	2024	WWW
	CGCN-MGS ^[64]	2024	软件学报
	Meta-HGT ^[65]	2023	Neural Networks
自动学习元路径	MPET ^[66]	2022	计算机科学与探索
	GTN ^[44]	2019	NIPS
	GraphMSE ^[67]	2021	AAAI
	ASIAM ^[68]	2023	Computing and Informatics

3.1 预先定义元路径

3.1.1 基本思想

在异质图表征学习领域中, 预先定义元路径方法是一种常用的策略, 它依赖于领域专家或先验知识来手动定义元路径, 有效地捕获到异质图中不同类型节点之间的复杂关联。首先需要根据具体的异质图结构和任务需求, 定义不同类型的元路径。例如, 对于一个学术网络, 可以定义包含作者-论文-作者、作者-论文-会议-论文-作者等不同类型的元路径。每种元路径代表了不同类型的节点序列, 可以捕获不同层次的关系信息。

预定义元路径的方法整体架构如图 7 所示, 图 7(a) 为根据相关领域知识人工定义元路径, 图 7(b) 为在每个元路径子图内进行聚合, 图 7(c) 为将每个元路径子图的聚合结果再次聚合, 通常使用注意力考虑不同元路径的重要性。这类方法首先人工定义一些元路径, 随后在每种预定义的元路径子图内执行一次聚合操作, 将元路径内节点之间的信息整合起来, 捕获微观层面的信息。随后, 它们往往还会执行一次宏观层面的聚合, 例如在元路径子图间执行聚合操作, 以捕获不同元路径蕴含的丰富语义, 这些聚合操作往往是注意力网络, 有利于衡量不同元路径的贡献。

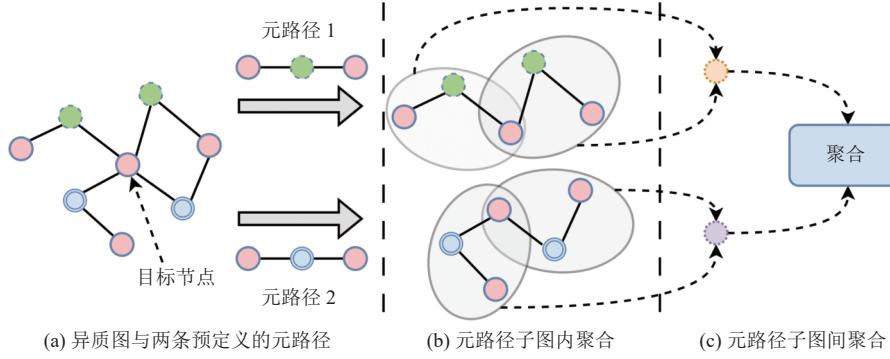


图 7 预定义元路径的异质图模型图

3.1.2 方法分析

HAN^[17]是基于元路径子图的一个代表方法, 它将聚合过程分为节点级注意力和语义级注意力, 模型结构如图 8 所示。图 8(a) 为节点级注意力, 用于聚合基于元路径的邻居。图 8(b) 为语义级注意力, 用于学习不同元路径的重要性。图 8(c) 为预测层, 使用学习到的表征做预测, 并根据标签来更新模型。节点级注意力可以通过自注意力机制来学习元路径上节点对之间的重要性。

$$\alpha_{ij}^M = \frac{\exp(\sigma(a_M^\top \cdot [h_i' \| h_j']))}{\sum_{n \in N_i^M} \exp(\sigma(a_M^\top \cdot [h_i' \| h_n']))} \quad (7)$$

其中, α_{ij}^M 表示指定的元路径 M 中, 节点对 i 和 j 之间的权重, 其中节点 i 和 j 都是元路径实例的端点. 通过对节点 i 的基于元路径的邻居进行加权聚合, 即可得到节点 i 基于元路径 M 的节点表征:

$$z_i^M = \sigma \left(\sum_{j \in N_i^M} \alpha_{ij}^M \cdot h_j \right) \quad (8)$$

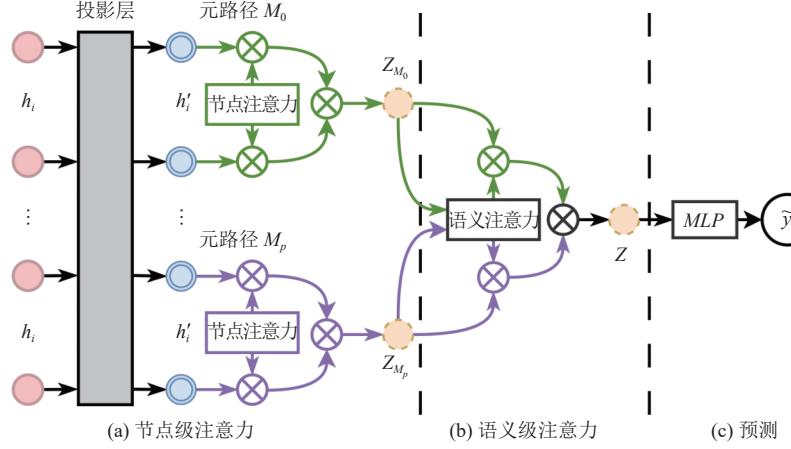


图 8 HAN 模型图^[17]

给定一组元路径 $\{M_0, M_1, \dots, M_p\}$, 将节点特征输入节点级注意力后, 我们可以获得 P 个特定语义的节点表征 $\{Z_{M_0}, Z_{M_1}, \dots, Z_{M_p}\}$. 异质图中的每个节点都蕴含着多种类型的语义信息, 基于语义的节点表征仅能从一个特定角度呈现节点的特征. 为了学习更加全面的节点表征, 需要综合考虑元路径所揭示的多样化语义. HAN 提出使用语义级注意力来自动学习不同元路径的重要性:

$$w_{M_i} = \frac{1}{|V|} \sum_{i \in V} q^\top \cdot \tanh(W \cdot z_i^M + b) \quad (9)$$

其中, q 为语义级注意力向量, W 为权重矩阵, b 为偏置向量. 随后使用 *Softmax* 函数对每个元路径的重要性 w_{M_i} 进行归一化, 即可得到元路径 m 的权重 β_{M_i} , 随后使用语义级聚合对学习到的表示进行加权聚合, 就可以得到最终表征 Z .

$$Z = \sum_{i=1}^P \beta_{M_i} \cdot Z_{M_i} \quad (10)$$

HAN 将图神经网络和注意力机制引入异质图表征学习领域, 利用节点级注意力和语义级注意力分别学习节点和元路径的重要性, 同时考虑图的结构信息和属性信息, 为异质图表征学习领域的发展提供了一条可选择的道路, 但该方法仅聚合元路径的端点, 会忽略掉中间节点的信息, 造成信息的遗漏. 此外, 一些方法^[19, 58–61, 69]也通过在元路径内执行聚合等操作来提取语义信息. HPN^[19]通过理论分析证明了异质神经网络和基于多元路径的随机游走本质上是等价的, 并指出 HAN 等异质图神经网络的语义混淆现象, 即随着模型深度的增长, 学习到的节点表征变得不可区分, 导致异质神经网络的性能下降. 为了减轻语义混淆, HPN 对 HAN 进行了改进, 设计了语义传播机制和语义融合机制, 通过在聚合函数中添加节点的初始特征来考虑节点的局部语义, 从而缓解语义混淆现象.

$$Z^{M,k} = (1 - \gamma) \cdot W^M \cdot Z^{M,k-1} + \gamma \cdot H^M \quad (11)$$

其中, H^M 表示元路径 M 下的节点特征投影到语义空间, $Z^{M,k}$ 表示通过第 k 层语义传播机制学习的基于元路径 M 的节点表征, γ 是表示权重的一个标量. 随后进行与 HAN 一样的融合机制来学习不同元路径的权重, 并进行加权融合, 得到最终表征.

受 HAN 的启发, MAGNN^[58]认为当使用元路径结构来捕获异质信息时, 元路径内的所有节点都具有丰富的语义信息. 于是 MAGNN 提出了均值编码器和关系旋转编码器等多种元路径实例编码器, 用于聚合元路径上的所有节点, 而不是仅聚合末端节点, 解决了 HAN 会遗漏元路径中间节点信息的问题, 实现了更加全面的信息聚合. 元

路径内聚合函数 f_θ 可以是均值编码器、线性编码器和关系旋转编码器等元路径实例编码器.

然而不同的元路径间会有重复的部分, MAGNN 在聚合所有元路径实例时重复聚合部分节点, 产生额外运算, 消耗大量计算资源. 此外上述基于元路径子图的表征学习方法大多将聚合过程分为元路径内聚合和元路径间聚合, 并分别使用注意力机制, 带来了大量的计算复杂性, 占用大量计算资源. 最近, SeHGNN^[59]指出在元路径内聚合时使用注意力是不必要的, 并提出使用简单的均值聚合来进行元路径内聚合并不会影响效果, 这种聚合方式避免了在元路径内大量使用注意力, 在不影响性能的情况下极大地提升了计算效率. 此外, SeHGNN 将元路径表示为矩阵相乘的形式, 并使用邻接矩阵乘法计算每个节点对目标的贡献:

$$X_M = \hat{A}_{c,c_1} \hat{A}_{c_1,c_2} \dots \hat{A}_{c_{l-1},c_l} X^{c_l} \quad (12)$$

其中, $M = cc_1c_2\dots c_l$ 表示为一条元路径, \hat{A}_{c_{l-1},c_l} 是节点类型 c_{l-1} 和 c_l 之间邻接矩阵的归一化. 使用邻接矩阵的形式计算元路径可以避免大量的重复运算, 例如元路径 PAP 可以看做元路径 PPAP 的子集, 在计算时可以先计算出 X^{PAP} , 随后令 $X^{\text{PPAP}} = \hat{A}_{\text{pp}} X^{\text{PAP}}$. 类似地, MECCCH^[33]也指出元路径内聚合的注意力机制是不必要的, 此外, MECCCH 还创新地提出了元路径上下文的结构, 从目标节点出发, 沿着元路径构建局部子图, 该结构可以有效地解决 HAN 遗漏中间节点以及 MAGNN 重复聚合节点的问题.

最近, HGMAE^[60]将异质图表征学习与生成式自监督学习结合, 提出了用于异质图的掩码自编码器, 利用元路径屏蔽和属性屏蔽来屏蔽输入, 并利用基于元路径的边重建等多种策略训练模型. SubInfer^[62]指现有方法所需要的开销较大, 作者提出使用元路径来推导语义图, 进而将异质图拆分为多个子图以少计算开销. MAN^[70]利用 Bi-LSTM 捕获节点的内容特征, 并设计了一个基于元路径的邻居聚合器来聚合邻域, 随后使用注意力机制聚合各元路径实例的表征. Meta-HGT^[65]根据给定的元路径构建超图, 在超边内和超边间分别执行聚合操作, 利用注意力机制考虑不同超边的贡献. MPET^[66]定义了一种新型元路径, 将边类型信息引入到元路径中, 并进行元路径内和元路径间两次聚合. 虽然元路径在捕获异质信息时起到了关键的作用, 但最近一些研究^[61]指出通过元图可以捕获更多的语义信息. 例如元路径 APCPA 要求两个作者只要在同一个会议中发表论文就认为他们相关, 而元图 APA(C)PA 则在此基础上要求两位作者与同一第三作者合作才认为他们相关. 于是 HAEGNN^[61]提出同时利用元路径和元图来捕获节点之间的结构信息, 并提出了基于节点相似性的语义结构实例 (SemSim) 来表示两个节点之间的相似性, 并将 SemSim 作为邻接矩阵, 通过 GCN 卷积来增强节点属性, 以此获得初步表征, 随后采用注意力机制等方式获得节点, 极大程度地保留了异质结构信息. CGCN-MGS^[64]不仅在元路径上使用图卷积聚合, 还在原始图的一阶邻域以及基于元路径的环上都进行图卷积聚合, 充分捕获多层次的结构信息. HetGPT^[63]在使用元路径捕获全局信息的同时, 也使用注意力机制聚合邻域中不同类型节点的信息, HetGPT 还创新性地在表征学习的过程中使用“pre-train, prompt”框架, 使用虚拟类提示和异质特征提示来优化节点分类任务的性能.

3.1.3 方法总结

将异质图拆分为元路径子图, 可以大幅降低异质图的复杂度, 该类方法通过预定义不同类型的元路径, 可以捕获到异质图中丰富的信息, 包括不同类型节点之间的关系以及多层次的语义信息, 有助于提高节点表征的质量. 此外, 相对于全局图表征学习方法, 预定义元路径方法只考虑了部分节点之间的关系, 减少了计算复杂度. 但预定义元路径需要领域专业知识, 这对于涉及多领域知识或新兴领域的研究者可能是一项艰巨的任务. 其次, 预定义元路径可能受到主观因素的影响, 导致模型在某些场景下的泛化能力受到挑战.

3.2 自动学习元路径

3.2.1 基本思想

预定义元路径的方法都通过将异质图拆分成元路径子图来提取异质信息, 模型的性能很大程度上取决于选取的元路径. 随着异质图的复杂性增加, 手动定义元路径的方式变得不够灵活, 无法充分适应异质图的变化. HGT^[71]指出了预定义元路径的缺点, 但它没有自动学习元路径, 而是利用神经网络结构的性质来融合高阶异质邻域信息, 自动学习隐式元路径的重要性. 自动学习元路径的方法目前还并不成熟, 一种可能的做法是将元路径表示为边类型矩阵的乘法, 但其往往需要列举大量邻接矩阵, 通过 Softmax 等方法计算权重并选择元路径.

3.2.2 方法分析

自动学习元路径的一项经典工作是 GTN^[44], 它将元路径视作元路径上边类型矩阵相乘. 给定边类型序列 (r_1, r_2, \dots, r_l) , 元路径 M 的邻接矩阵 A_M 定义为由邻接矩阵的乘法得到.

$$A_M = A_{r_l} \dots A_{r_2} A_{r_1} \quad (13)$$

例如, 元路径“作者-论文-会议”(APC) 可以表示为 $A \xrightarrow{\text{AP}} P \xrightarrow{\text{PC}} C$, 即通过对 A_{AP} 和 P_{PC} 进行乘法运算生成的邻接矩阵 A_{APC} . 随 GTN 通过对候选的邻接矩阵进行软选择, 相当于对邻接矩阵分配权重, 实现自动学习有用的元路径:

$$Q = F(A; W_\phi) = \phi(A; \text{Softmax}(W_\phi)) \quad (14)$$

其中, ϕ 是一个卷积层, W_ϕ 是它的一个参数, Q 是软选择获得的邻接矩阵. 任意一个长度为 l 的元路径的邻接矩阵可以通过如下公式计算:

$$A_M = \left(\sum_{r_1 \in R} \alpha_{r_1}^{(1)} A_{r_1} \right) \left(\sum_{r_2 \in R} \alpha_{r_2}^{(2)} A_{r_2} \right) \dots \left(\sum_{r_l \in R} \alpha_{r_l}^{(l)} A_{r_l} \right) \quad (15)$$

其中, R 表示边类型的集合, $\alpha_{r_i}^{(l)}$ 表示边类型 r_i 的权重. A_M 可以被视为所有长度为 l 的元路径邻接矩阵的加权和, 所以当堆叠 l 个 GT 层时, GTN 可以学习任意长度为 l 的元路径结构. 但该方法计算量过大, 且 simpleGCN^[72]通过实验指出, 在相同的数据集上进行实验时, GTN 要比 GAT 多消耗 400 倍的时间和 120 倍的内存, 但平均得分没有显著差异.

受 GTN 的启发, GraphMSE^[67]提出了更加简单的元路径选择方案, 他们首先指出 GTN^[44]元路径方案的弊端, 由于需要通过邻接矩阵相乘的方式表示元路径, GTN 需要从所有节点开始列举所有元路径实例, 其次, GTN 的邻接矩阵隐含的要求所有节点都要在同一个特征空间内, 然而异质图中不同类型的节点往往在不同的特征空间中. GraphMSE 指出只需要选择约 20% 的节点即可获得良好的泛化性能, 其次也无需列举所有元路径实例, 而是通过广度优先搜索进行抽样, 并通过研究发现通过抽样的效果可能比枚举所有元路径更好. 最近 ASIAM^[68]提出采用随机游走的方式进行元路径选择, 在与目标节点类型相同的每个节点上都执行多次随机游走, 采样多个元路径实例, 然后根据概率选取前 k 个元路径实例, 但这种传统方式的效果无法得到保证, 并且需要经过大量的随机游走, 会产生额外的资源消耗.

3.2.3 方法总结

尽管自动学习元路径的方法已经取得了初步的成功, 但这个领域仍然存在着巨大的挑战和广阔的研究空间. 自动化方法需要进一步优化以减少计算资源的消耗, 并提高在不同异质图上的泛化能力. 此外, 随着图结构的日趋复杂和多样化, 如何设计出既高效又能捕获到复杂图结构特征的自动元路径学习方法, 将是未来研究的一个关键方向.

4 基于关系子图的深度模型

基于元路径子图的方法大多只考虑节点异质, 没有考虑到边异质, 这样会丢失边类型信息, 影响表征效果. 在异质图中不同关系类型的重要程度是不同的, 例如用户与商品之间的关系可能是点击或者购买, 而购买更能代表用户对商品的喜爱程度. 一些方法^[18,20,73–75]放弃了使用元路径提取语义信息, 它们将异质图分解成多个关系子图来处理图的异质性, 每个关系子图代表一种关系类型, 本文将这类方法命名为基于关系子图的方法, 本节将详细介绍这类方法, 并细致分析其优缺点. 基于关系子图的方法概览如表 5 所示.

表 5 基于关系子图的深度方法总结

方法	发表年份	会议/期刊	方法	发表年份	会议/期刊
DMGI ^[75]	2020	AAAI	RGT ^[76]	2022	AAAI
RGCN ^[73]	2018	ESWC	BotRGCN ^[77]	2021	ASONAM
MHGCR ^[18]	2022	SIGKDD	RioGNN ^[78]	2021	TOIS
BPHGNN ^[74]	2023	SIGKDD	R-HGNN ^[79]	2022	TKDE
GTANE ^[20]	2019	SIGKDD	HRAN ^[80]	2021	TNNLS

4.1 基本思想

基于关系子图的模型整体架构如图 9 所示, 图 9(a) 为原始异质图。图 9(b) 是根据关系类型将异质图拆分为关系子图, 并在每个关系子图内聚合邻域信息。图 9(c) 为每种关系类型分配或者学习一个权重, 聚合不同关系子图, 获得节点表征。这类方法通常根据关系类型, 将异质图拆分为关系子图, 每个关系子图中仅含义一种关系类型。它们往往在关系子图内进行一次聚合操作, 聚合邻居信息, 随后为每种关系类型分配或者学习一个权重, 根据权重聚合不同关系子图, 获得节点表征。

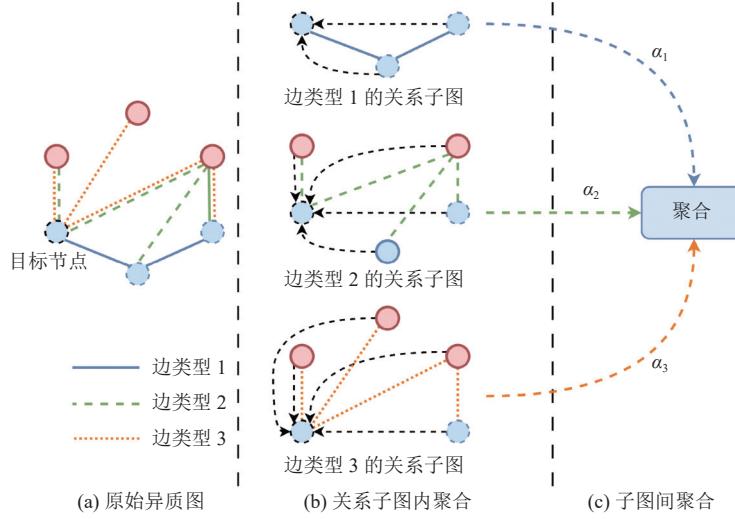


图 9 基于关系子图的异质图模型图

4.2 方法分析

R-HGNN^[79]指出大多数异质图表征学习方法都遵循节点表征的传播机制, 没有显示利用不同关系的影响。他们提出根据关系类型将异质图分解为多个关系子图, 特别地, R-HGNN 还在关系子图中添加了反向关系 r^{-1} , 可以允许节点对之间相互传播信息。随后在关系子图上执行卷积操作, 聚合邻域信息并添加残差连接, 用于考虑节点本身的属性, 最后使用注意力机制考虑不同关系类型的贡献, 聚合各关系子图。类似地, HRAN^[80]也将聚合过程分为两次, 首先根据基于关系的路径划分邻域, 使用 GCN 进行实体级聚合, 随后使用注意力机制聚合不同关系类型的表征, 称为关系级聚合。DMGI^[75]为每个关系类型设计一个特定的节点编码器, 用于学习关系类型特定的节点嵌入矩阵, 随后再通过平均池化等操作聚合不同关系类型的节点嵌入矩阵。RioGNN^[78]引入强化学习, 在每个关系内选择与目标节点最相似邻居集, 并对每个关系内的邻居进行聚合, 随后聚合不同关系类型的表征结果。RGT^[76]将异质图拆分为不同关系子图, 并提出关系 Transformer 来聚合每个关系子图的信息, 随后使用语义注意力网络来融合跨关系的节点表示, 考虑不同关系类型的贡献。

基于关系子图的一项经典工作是 RGCN^[73], 它根据不同的边类型设计不同的转换函数, 相当于将原图按照边类型拆分成子图, 基于 GCN 学习节点表征, 分别对邻居节点进行线性转换和聚合, 并添加一个残差连接以防止过平滑现象, 聚合函数如下:

$$h_i^{(k+1)} = \sigma \left(\sum_{r \in \mathcal{R}} \sum_{j \in N_i^r} \frac{1}{c_{i,r}} W_r^{(k)} h_j^{(k)} + W_0^{(k)} h_i^{(k)} \right) \quad (16)$$

其中, k 表示网络层数, N_i^r 表示节点 i 在边类型 r 中的邻居节点集合, $c_{i,r}$ 是一个根据特定问题确定的归一化常数, 可以通过学习获得或事先选择。同时, 为了防止因图中关系增加而导致参数量增加, 进而导致稀有关系的过拟合问

题, RGCN 还引入了基础分解和块对角分解来解决这个问题, 基础分解方式如下:

$$W_r^{(k)} = \sum_{b=1}^B a_{rb}^{(k)} V_b^{(k)} \quad (17)$$

将 $W_r^{(k)}$ 视作基础变换 $V_b^{(k)}$ 与系数 $a_{rb}^{(k)}$ 的线性组合, 使其只依赖于 r . 块对角分解方式如下:

$$W_r^{(k)} = \oplus_{b=1}^B Q_{br}^{(k)} \quad (18)$$

其中, \oplus 表示矩阵直接和, 将 $W_r^{(k)}$ 表示为一组低维矩阵 $Q_{br}^{(k)}$ 的和. 通过这两种分解方式, RGCN 减少了所需参数数量, 实现了对模型效率的提升. 此外, RGCN 为不同边类型设计不同转换函数的操作充分考虑了边类型信息, 解决了基于元路径子图的方法忽略边类型信息的问题. 受 RGCN 的启发, BotRGCN^[7] 在推特机器人检测任务中, 将异质图中的关系类型分为 *following* 和 *follower*, 并提出了 BotRGCN 模型, 将 RGCN 应用到异质图中学习节点表征.

另一项基于关系子图的经典工作是 MHGCN^[18], 该方法根据不同的边类型将图拆分为多个子图, 然后为每个子图的邻接矩阵学习权重, 并加权聚合得到总邻接矩阵, 虽然该方法没有直接在关系子图内进行聚合, 但其利用邻接矩阵来捕获子图内的结构信息. 随后将总邻接矩阵和节点属性送入多层 GCN 中用于学习节点表征. 随后, 为了更充分地捕获行为信息, MHGCN 的作者对模型进行了改进, 提出了 BPHGNN^[74]. 该方法首先仍是根据边类型将原图拆分为多个关系子图, 与 MHGCN 不同的是, 作者没有直接加权聚合各邻接矩阵, 而是设计了一个基本行为模式矩阵, 通过按位逻辑 AND 的方法生成行为模式矩阵, 用于更精确地捕获行为模式. 随后从深度和广度两个方向描述行为模式, 并引入对比学习来优化模型. 这些方法通过按照边类型拆解异质图, 避免了手动定义元路径, 并且可以考虑不同边类型的影响, 但其在拆分关系子图时, 仅考虑结构信息用于构建邻接矩阵, 不能很好地利用邻居节点的语义信息, 并且模型缺乏泛化能力.

目前的方法主要针对特定的网络进行设计, 而现实世界中的网络是复杂多样的, 针对这一情况, GATNE^[20] 形式化了多属性异质网络的表征学习问题, 并提出了一个统一的框架来解决该问题. 模型如图 10 所示, 其中 GATNE 分为 GATNE-T 和 GATNE-I, 其中 GATNE-I 考虑了结构信息和节点属性, 具有泛化能力. 通过节点属性生成初始基础嵌入和边嵌入, 并聚合特定边类型的邻居获得边嵌入. 对基础嵌入、边嵌入和节点属性进行结合获得节点表征. 归纳式 GATNE 将表征分为基础嵌入和边嵌入. 边嵌入通过将图按照边类型拆分, 并聚合节点的特定边类型的邻居获得, 这样做不仅可以考虑边类型的影响, 同时还利用了邻居节点的属性信息:

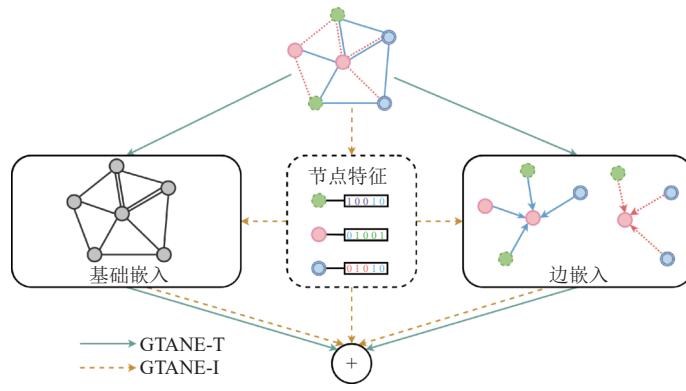


图 10 GATNE 模型图^[20]

$$u_{i,r}^{(k)} = \text{aggregator}\left(\{u_{j,r}^{(k-1)}, \forall v_j \in N_{i,r}\}\right) \quad (19)$$

其中, k 表示网络层数, $\text{aggregator}()$ 表示聚合函数. 随后将节点不同边类型邻居聚合到的嵌入拼接起来, 得到节点 i 的边嵌入 U_i , 并引入注意力机制来为不同边类型学习到一个权重 $a_{i,r}$. 总体表征的计算公式如下:

$$v_{i,r} = h_z(x_i) + \alpha_r W_r^\top U_i a_{i,r} + \beta_r D_z^\top x_i \quad (20)$$

其中, α_r 和 β_r 是系数, D_z 是对应节点类型 z 的特征转换矩阵, h_z 是一个参数化函数. 每个节点的初始边嵌入和基础嵌入都以函数的形式生成, 可以通过对模型的训练得到函数, 以节点的属性作为函数的输入, 这样做可以通过学习到的函数来对未知的图结构进行处理, 提升了模型的泛化能力, 有效地解决了上述几种模型无法处理未知图结构的问题.

4.3 方法总结

基于关系子图的方法通过将异质图拆分为关系子图来处理图的异质性, 这类方法避免了手动定义元路径的挑战, 并且可以充分考虑到不同关系类型对表征学习过程的影响. 但是将异质图按边类型拆分成关系子图可能导致信息丢失. 在原始异质图中, 不同类型的节点和边之间存在复杂的关系和交互. 拆分后, 某些关键的跨边类型的信息可能会被忽略, 从而影响表征的质量, 例如作者写的文章发表在会议上, 虽然作者和会议没有直接相连的边, 但该会议可以一定程度上反映文章的类型, 并反映出作者的研究方向. 并且异质图的边类型可能很多, 尤其在真实世界的应用中, 异构图往往包含多个不同的边类型. 将图拆分为多个子图并对每个子图进行表征学习可能会导致计算复杂度的显著增加. 如何在考虑边类型信息的同时也能捕获节点高阶异质邻居的信息是一项值得研究的问题.

在本文定义的关系子图中, 边的类型是关键因素, 关系子图由异质图中所有特定边类型 r 的边组成. MHGCN、BPHGNN 等基于关系子图的工作为不同边类型的关系子图学习不同权重, 考虑了不同交互行为的权重. RGCN 等还为不同边类型设计了不同转换函数, 充分考虑边类型的信息. 然而, 元路径方法的设计初衷是通过一系列节点类型序列捕捉图中的语义信息, 主要关注节点类型的序列, 而往往忽略边类型信息. 例如, HAN 和 MAGNN 在聚合邻居时, 仅关注节点类型, 不区分边类型. 因此, 元路径方法和关系子图方法在设计思路和应用场景上存在明显差异, 直接将元路径方法应用于关系子图可能无法充分发挥其设计优势, 反之亦然.

5 非子图的深度模型

为了便于处理图的异质性, 基于元路径子图的方法和基于关系子图的方法都通过将异质图进行拆解来处理异质信息, 但是这些拆分方法都会不可避免地丢失大量异质信息. 本节将介绍非子图的方法, 这些方法直接考虑整个异质图的结构, 而不是依赖于元路径或关系子图. 这种方法的优势在于可以更全面地捕获异质图中节点和边的复杂关系, 提高对图结构的建模能力. 基于非子图和其他异质图方法的概览如表 6 所示.

表 6 非子图与其他异质图表征学习方法总结

分类	方法	发表年份	会议/期刊
基于特征投影的非子图方法	HetSANN ^[81]	2020	AAAI
	NSHE ^[82]	2020	IJCAI
	HGT ^[71]	2020	WWW
	SR-HGN ^[83]	2023	ESWA
	ie-HGCN ^[84]	2021	TKDE
非特征投影的非子图方法	RSHN ^[85]	2019	ICDM
	Simple-HGN ^[72]	2017	SIGKDD
	HetGNN ^[16]	2019	SIGKDD
	HOG-GCN ^[86]	2022	AAAI
其他异质图表征学习方法	MV-HGSL ^[42]	2023	软件学报
	HGSL ^[43]	2021	AAAI
	HGNN-AC ^[41]	2021	WWW
	AC-HEN ^[40]	2022	KBS
	SHGP ^[87]	2022	NIPS

5.1 基于特征投影的异质图表征学习

5.1.1 基本思想

为了在不拆分异质图的前提下处理异质信息, 大多数方法^[71,81-85]采用线性变换的方式将异质节点或边投影到相同的语义空间, 然后执行聚合操作, 其中少量方法对异质边进行投影, 而对异质节点进行投影更为常见。基于特征投影的方法整体架构如图 11 所示, 为每种类型的节点学习一个投影矩阵, 将特征值投影到相同的语义空间, 随后使用多层 GCN 聚合一阶以及高阶邻居。不同类型的节点在不同的语义空间内, 这类方法首先学习一个转换矩阵, 将不同类型的节点投影到同一特征空间内, 随后使用 GCN 等模型进行邻域聚合。

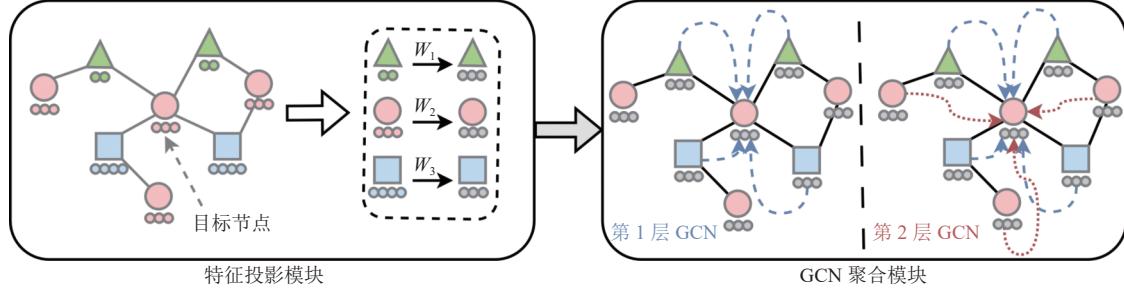


图 11 基于特征投影的异质图模型图

5.1.2 方法分析

HetSANN^[81]对不同类型的一阶邻居使用不同的转换矩阵, 将节点属性投影到目标节点所在的特征空间中, 并引入注意力机制学习每条边的权重, 最后加权聚合获得最终表征。但是由于该方法是在原始图上进行聚合, 顶点 i 无法在一层内传播到顶点 j , 需要执行多层聚合, 这会导致过平滑现象, 于是该方法额外引用了残差机制来保留节点语义。NSHE^[82]认为两个具有链接的节点是相似的, 于是将不同类型的节点属性映射到同一特征空间, 然后利用 GCN 聚合邻域信息, 通过负采样计算出成对损失。随后其通过预测网络模式实例是否存在异质图中来计算出模式损失, 将两个损失联合优化模型。HGT^[71]同样根据不同的节点类型进行线性投影到相同的空间, 随后使用三元组来计算节点对之间的相互注意力, 同时添加一个基于边类型的矩阵用于考虑不同边类型的影响, 这使得相同的节点对也可以通过不同的边类型学习到不同的语义。最近, SR-HGN^[83]提出同时感知语义和关系的模型, 首先将不同类型的节点投影到相同特征空间, 随后设计了节点级聚合和类型级聚合两次聚合, 特别地, 在类型级聚合过程中, SR-HGN 同时考虑异质节点和边的影响, 通过注意力机制捕获不同类型节点和边的异质性。

以往的许多方法都将聚合过程划分为对象级聚合和类型级聚合, 并在两次聚合过程都使用注意力机制, ie-HGCN^[84]指出在对象级聚合的过程中使用注意力机制是不必要的, 会消耗许多计算资源。邻接矩阵可以展示节点之间的连接关系, 重要的节点往往与多个节点相连, 足以表示节点之间的贡献度。于是 ie-HGNN 先将所有类型的节点投影到相同的特征空间, 然后通过矩阵乘法的形式利用邻接矩阵来聚合邻居节点, 用来作为对象级聚合的结果。

常见的特征投影方法大多是对节点投影, 而 RSHN^[85]则创新性地引入了线图的概念, 对边嵌入进行投影, 模型如图 12 所示, (1) 在图上进行随机游走构建粗化的线图, (2) 以粗化的线图为输入, 使用卷积模块学习不同类型的边嵌入, (3) 以原始的异质图和边嵌入为输入, 将边嵌入进行投影到节点空间, 通过消息传递层学习节点嵌入, (4) 预测层用于分类任务, 并根据损失来优化模型。具体地, 该方法先在原始图上进行随机游走, 并统计随机游走过程中节点出现的频率作为粗线图的权重, 依照边类型将原始图转换为粗线图。接下来在粗线图中, 对不同节点, 也就是对应原图中的不同边类型进行加权聚合, 即可学习到边类型特征的表示。请注意, 通过如上方式获取的表示可以考虑到不同边类型之间的影响, 因为通过随机游走, 两个边类型共同出现的频率可以反映出它们之间的关系。随后将边类型的表示投影到节点的特征空间, 并与其相邻节点表示相乘得到消息 p , 随后通过如下的聚合方式来聚合

节点表示和消息 p .

$$v^{(k+1)} = \sigma(W_0^{(k)} v^{(k)} + W_1^{(k)} p_v^{(k+1)}) \quad (21)$$

其中, $v^{(k+1)}$ 是节点 v 在第 k 层的表征, σ 激活函数, $W_0^{(k)}$ 和 $W_1^{(k)}$ 是学习到的权重矩阵.

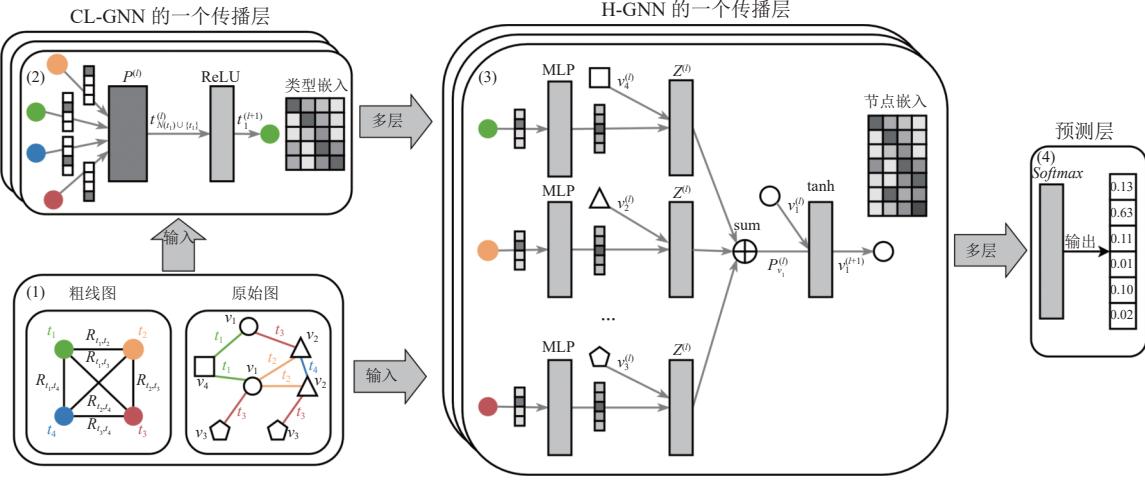


图 12 RSHN 模型图 [85]

5.2 非特征投影的异质图表征学习

不同类型的特征值差异可能会很大, 用一个统一的方法对其进行特征映射可能会丢失信息, 尤其是当原始特征空间非常丰富时. 为了解决这一问题, 研究者们开发了不依赖于特征投影的技术, 而是通过采用特殊的聚合策略来保留异质图中的丰富信息. 这些方法直接在原始异质图上操作, 利用图结构的丰富性来学习节点表征, 捕获到异质图的复杂性和多样性.

simpleHGN^[72]在特征预处理阶段, 只选择保留一种类型节点的特征值, 随后为每个边类型学习一个表示, 充分考虑到了边异质的情况, 但是抛弃多种类型节点的特征值会丢失很多有用信息. 而 HetGNN^[16]在处理异质特征信息时, 考虑到一个节点可以有文本、图片等多种特征, 该方法选择对不同类型的特征值分别编码, 然后通过 LSTM^[88]进行聚合得到一个节点的特征表示, 由 LSTM 将特征值输入到相同维度. 随后通过类内聚合和类间注意力来考虑不同节点类型的影响. GDHG^[89]认为节点对之间的权重是由两个节点的类型决定的, 设计了节点级注意力机制来考虑不同类型节点的影响, 并提出了适用于异质图的门控注意力机制, 在充分捕获邻域信息的同时减轻过拟合现象. HOG-GCN^[86]设计了一个同质度矩阵, 用于描述两个节点属于同一类的程度, 将可学习的同质性度矩阵纳入图卷积框架中, 以自动改变传播权值.

尽管非子图的异质图表征学习方法直接在原图上进行操作, 能够更好地捕获图中的复杂关系和多样性, 但直接在原始图上操作通常涉及复杂的邻居聚合和信息传播机制, 例如 HetGNN, 这可能导致计算成本很高, 特别是对于大规模图数据. 同时, 这些方法可能需要将整个图结构和相关特征加载到内存中, 对于具有大量节点和边的图来说, 将会占用大量内存. 如何寻找一个简洁高效的聚合方式, 同时可以充分捕获异质图中丰富的信息, 是急需解决的问题.

5.3 其他异质图模型

现有的异质图表征学习方法往往默认图结构的完整性, 因为他们往往通过聚合邻域信息来获得嵌入, 如果图中存在噪声边则会错误地聚合噪声, 进而影响表征的质量. 然而现实世界的异质图往往受到数据噪声或缺失的影响, 这可能来自数据收集过程中的误差、不完整性或不准确性等因素. 为了解决这个问题, MV-HGSL^[42]将图结构

学习和对比学习引入到异质图表征学习中, 该方法计算给定元路径下各节点的相似度用来构造相似度图, 相似度图可以表示节点之间的相似性, 而元路径图可以保留图的结构信息, 作者通过最大化元路径图与相似度图间的互信息来实现无监督学习, 指导图结构的优化. 类似地, HGSL^[43]通过计算节点之间的余弦相似度来生成特征相似度图, 随后特征相似度图通过图结构进行传播可以生成特征传播图, 再使用 metapath2vec^[10]来获得语义嵌入, 生产语义图. 随后将学习到的图结构进一步融合为一个异质图, 以学习到更完整的图结构.

图表征学习的过程中, 除了需要利用图的结构信息外, 还需要节点的属性. 然而很多情况下节点没有属性, 或者无法获取节点属性, 例如敏感的个人信息. 异质图有多种类型的节点, 且往往很难获取所有节点的属性, 这将会影响基于图神经网络的模型性能. 之前的方法往往采用手动的方法来补全属性, 这显然是不可靠的, 对此, HGNN-AC^[41]提出了基于拓扑结构的补全方法. 首先对常用的多个元路径进行随机游走获得更全面的节点序列, 然后将这些序列输入到 Skip-gram^[56]模型中学习初步的节点表征. 随后对无属性节点的一阶邻居使用注意力机制, 学习节点对之间的贡献度, 将邻居节点的表征加权聚合, 即可作为目标节点的属性. 通过这种方式获得的节点属性充分考虑了邻域信息和节点贡献, 具有较高的可信度. AC-HEN^[40]指出 HGNN-AC 使用一阶邻居进行属性聚合, 而高阶邻居可以作为一阶邻居的补充, 于是该方法使用 GCN 来聚合一阶邻居, 同时使用一种基于注意力的高阶聚合方式来补全缺失属性, 相较于 HGNN-AC, 该方法使用了更全面的信息来补全缺失的属性, 但也消耗了更多的计算资源.

除了利用完整的图结构和节点属性来学习表征之外, 图表征学习的过程往往还需要标签来监督模型的训练. 尽管半监督的异质图表征学习模型取得了显著成果, 但他们依赖高质量的标签进行监督, 但在现实世界中标签通常是难以获取的. 为此, SHGP^[87]提出了一种自监督的表征学习方法, 它将模型划分为异质神经网络模块和标签传播模块, 其中标签传播模块通过结构聚类产生伪标签, 并将伪标签作为监督信号用于指导异质神经网络模块的训练, 通过计算预测标签和伪标签的交叉熵作为模型的损失来更新模型, 实现了无标签的自监督训练过程. 这里的异质神经网络模块可以被实例化为任意基于注意力机制的异质图神经网络的表征学习模型, 例如 HAN、ie-HGCN 等.

6 数据集与常用工具

在异质图表征学习领域, 高质量的数据集是基础, 而强大的开源工具则是支撑该领域快速发展的重要推动力. 本节总结了异质图表征学习的常用开源工具、数据集和评价指标等, 分别进行了详细的介绍, 并给出这些工具的链接, 方便读者使用.

6.1 数据集

在异质图表征学习领域, 数据集对于开发和评估算法至关重要. 本节将介绍几个核心的异质图数据集, 包括学术网络、电影网络和商业网络等. 本节将这些数据集的节点类型、边类型和数据规模等都做了详细的统计, 如表 7 所示. 相比于其他综述直接介绍原始数据集, 我们从实验的需求出发, 主要介绍预处理后的、现有异质图模型在实验中常用的数据集.

DBLP: 是一个计算机科学领域的文献数据库, 主要反映作者、论文和发表场合之间的关系. 表 7 中为 MAGNN^[58]处理后的数据信息, 原始数据集可以通过 <http://dblp.uni-trier.de> 获取.

ACM: 是一个与 DBLP 相似的学术网络, 主要反映作者和论文之间的关系. 表 7 中为 HAN^[17]处理后的数据信息, 原始数据集可以通过 <http://dl.acm.org/> 获取.

Aminer: 也是一个与 DBLP 相似的学术网络, 主要反映作者、论文和发表场合之间的关系. 表 7 中为 MHGCN^[18]处理后的数据信息, 原始数据集可以通过 <https://www.aminer.cn> 获取.

IMDB: 是一个电影评价网络, 主要反映电影的导演、演员关系. 表 7 中为 MAGNN^[58]处理后的数据信息, 原始数据集可以通过 <https://grouplens.org/datasets/movielens/100k/> 获取.

Last.fm: 是一个音乐网络, 主要反应用户收听音乐的信息. 表 7 中为 MAGNN^[58]处理后的数据信息, 原始数据

集可以通过 <https://www.last.fm/> 获取.

Amazon: 是一个电子商务网络, 主要反应用户和产品之间的关系. 表 7 中为 GATNE^[20]处理后的数据信息, 原始数据集可以通过 <http://jmcauley.ucsd.edu/data/amazon> 获取.

Alibaba: 是一个与 Amazon 类似的电子商务网络, 主要反映用户和商品之间的关系. 数据集可以通过 <https://tianchi.aliyun.com/dataset/> 获取.

Ogbn-mag^[90]: 是一个大规模的学术网络, 包含 4 种类型的节点: 作者、论文、机构和研究领域. 数据集可以通过 <https://ogb.stanford.edu/docs/nodeprop/#ogbn-mag> 获取.

Ogbl-biokg^[91]: 是一个生物医学网络, 包含 5 种类型的节点: 疾病、蛋白质、药物、副作用和蛋白质功能. 数据集可以通过 <https://ogb.stanford.edu/docs/linkprop/#ogbl-biokg> 获取.

MAG240M^[92]: 是一个大规模的学术网络, 拥有超过 2 亿个节点和 17 亿条边, 该数据集包含 3 种类型的节点: 作者、论文和机构. 数据集可以通过 <https://ogb.stanford.edu/docs/lsc/mag240m/> 获取.

除此之外, OGB 也提供了很多同质图、有向图数据集, 例如 Ogbn-proteins、Ogbn-arxiv 等, 可以用于节点分类、链路预测和图属性预测等多种任务. 数据集可以通过 https://ogb.stanford.edu/docs/dataset_overview 获取.

表 7 不同数据集的节点类型、边类型

数据集	节点类型	节点数量	边类型	边数量
DBLP	作者 (A), 论文 (P), 术语 (T), 场合 (V)	26128	A-P, P-T, P-V	119783
ACM	作者 (A), 论文 (P), 主题 (S)	8916	A-P, P-S	12769
Aminer	作者 (A), 论文 (P), 场合 (V)	58068	A-P, P-C, P-P	118939
IMDB	电影 (M), 演员 (A), 导演 (D)	11616	M-D, M-A	17106
Last.fm	用户(U), 艺术家(A), 标签(T)	20612	U-U, U-A, A-T	128804
Amazon	产品(P)	10166	共同浏览, 共同购买	148865
Alibaba	用户(U), 商品(I)	41991048	点击, 收藏, 加入购物车, 购买	571892183
Ogbn-mag	作者 (A), 论文 (P), 机构 (I), 研究领域 (F)	1939743	A-I, A-P, P-P, P-F	21111007
Ogbl-biokg	疾病 (D), 蛋白质 (P), 药物 (M), 副作用 (E), 蛋白质功能 (F)	93773	51种边	5088434
MAG240M	作者 (A), 论文 (P), 机构 (I)	244160499	A-I, A-P, P-P	1728364232

6.2 开源工具

表 8 总结了主流异质图表征学习方法的实现地址, 以便读者进行深入的复现工作. 此外, 开源工具包可以为研究人员和开发者提供构建和分析复杂网络的强大工具. 然而现存的许多开源工具如 OpenNE 等都是为同构图而设计的, 很难适应异质图的复杂结构, 为此, 本文总结了几个常用的适用于异质图的开源工.

PyTorch Geometric: PyTorch Geometric 是基于 PyTorch 的图神经网络库, 支持异质图并提供了大量的预定义图卷积算法, 易于实验和扩展, 同时提供了处理原始图数据的工具, 包括常见的数据集下载和处理功能. 该工具可以通过 https://github.com/pyg-team/pytorch_geometric 获取.

Deep Graph Library (DGL): DGL 支持多个深度学习框架, 包括 PyTorch、MXNet 和 TensorFlow, 它优化了图的批处理操作, 使得在单个批次中处理多个图成为可能, 提高了计算效率, 同时支持对多种类型节点和边的处理. 该工具可以通过 <https://github.com/dmlc/dgl> 获取.

OpenHINE: 是一个针对异质信息网络的开源包, 它提供了许多主流异质图表征学习模型的实现, 例如 HAN、metapath2vec、HIN2vec 等, 同时给出了部分数据集下主流方法性能对比. 该工具可以通过 <https://github.com/BUPT-GAMMA/OpenHINE> 获取.

OpenHGNN^[93]: 是一个基于 DGL 和 PyTorch 的异质图神经网络开源工具包, 它是在 OpenHINE 基础上的改进, 有更好的可扩展性和更高的效率, 并支持 HPN、ie-HGCN 等新兴方法的实现. 该工具可以通过 <https://github.com/BUPT-GAMMA/OpenHGNN> 获取.

表 8 异质图表征学习方法 URL 总结

分类	编程语言	方法	URL
基于随机游走的浅层模型	C++	ESim	https://github.com/shangjingbo1226/ESim
		Java	https://github.com/daokunzhang/MetaGraph2Vec
		metapath2vec	https://ericdongyx.github.io/metapath2vec/m2v.html
	Python	BHIN2VEC	https://github.com/sh0416/BHIN2VEC
		HIN2VEC	https://github.com/csiesheep/hin2vec
		HERec	https://github.com/librahu/HERec
		JUST	https://github.com/eXascaleInfolab/JUST
基于图分解的浅层模型	C++	PTE	https://github.com/mnq/PTE
		Aspem	https://github.com/ysyushi/aspem
	Python	RHINE	https://github.com/rootlu/RHINE
基于元路径子图的深度模型	Python	HAN	https://github.com/Jhy1993/HAN
		MAGNN	https://github.com/cynricfu/MAGNN
		SeHGNN	https://github.com/ICT-GIMLab/SeHGNN
		GraphMSE	https://github.com/pkuliyi2015/GraphMSE
		GTN	https://github.com/seongjunyun/Graph_Transformer_Networks
基于关系子图的深度模型	Python	DMGI	https://github.com/pcy1302/DMGI
		GATNE	https://github.com/THUDM/GATNE
		MHGNCN	https://github.com/NSSJSS/MHGNCN
		BPHGNN	https://github.com/FuChF/BPHGNN-23
		RGCN	https://github.com/MichSchli/RelationPrediction
非子图的深度模型	Python	HetSANN	https://github.com/didi/hetsann
		NSHE	https://github.com/AndyJZhao/NSHE
		ie-HGCN	https://github.com/kepsail/ie-HGCN
		RSHN	https://github.com/CheriseZhu/RSHN
		HetGNN	https://github.com/chuxuzhang/KDD2019_HetGNN
属性/结构学习的深度模型	Python	HGSL	https://github.com/AndyJZhao/HGSL
		HGNN-AC	https://github.com/jindi-tju/HGNN-AC
		AC-HEN	https://github.com/Code-husky/AC-HEN

6.3 评估指标

本节将介绍几个常用的性能评估指标, 包括 $F1$ 分数、调整兰德指数 (ARI)^[94] 和归一化互信息 (NMI)^[95] 等。这些指标广泛应用于分类、聚类、链接预测和推荐系统等任务, 用以衡量模型预测性能。

在节点聚类任务中, 调整兰德指数 (ARI) 和归一化互信息 (NMI) 是常用的指标。其中 ARI 考虑了所有元素对的两两组合, 并根据它们在预测聚类和真实聚类中是否一致来评分。 ARI 的值范围在 -1 到 1 之间, 1 表示聚类结果与真实数据完美匹配, 0 表示结果与随机聚类相当, 负值表示性能低于随机聚类。 ARI 的公式为:

$$ARI = \frac{RI - F(RI)}{\max(RI) - F(RI)} \quad (22)$$

其中, RI 是兰德指数, 一个没有经过标准化的度量, 它测量两个聚类分配是一致性。 $F(RI)$ 是在随机情况下预期的兰德指数的值。 NMI 用于度量两个聚类结果的一致性, 它基于互信息的概念, 但进行了标准化处理。 NMI 的值范围通常是从 0 到 1, 值越高说明互信息越多, 即模型效果更好。 NMI 的公式为:

$$NMI(U, V) = \frac{2 \times I(U; V)}{H(U) + H(V)} \quad (23)$$

其中, $I(U; V)$ 是聚类 U 和聚类 V 之间的互信息, 函数 $H(U)$ 表示 U 的熵。

在节点分类任务中, 研究者们常用宏平均 $F1$ 分数 ($Macro-F1$) 和微平均 $F1$ 分数 ($Micro-F1$)^[96] 来衡量分类任务的效果。 $Macro-F1$ 计算了所有类别的 $F1$ 分数的平均值, 而 $Micro-F1$ 则是先计算所有类别的总体精确率和召回率, 然后再计算 $F1$ 分数。 $Macro-F1$ 和 $Micro-F1$ 分数的取值范围都是从 0 到 1, 值越高说明分类任务的效果越好,

其中, 0 表示最差的性能, 1 表示最佳的性能. 他们的公式分别为:

$$\text{Macro-F1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F1_i \quad (24)$$

$$\text{Micro-F1} = \frac{2 \times P \cdot R}{P + R} \quad (25)$$

其中, N 是类别的数量. $F1_i$ 是第 i 个类别的 $F1$ 分数, P 是总体精确率, R 是总体召回率.

在链接预测任务中, 常用受试者工作特征曲线下面积 ($ROC-AUC$)^[97] 和精确率召回率曲线下面积 ($PR-AUC$)^[98] 来衡量预测任务的效果. $ROC-AUC$ 的值介于 0 和 1 之间, 代表了模型在区分正类和负类样本方面的能力, 值越高表明模型的性能越好, 公式如下:

$$ROC-AUC = \frac{n' + 0.5n''}{n} \quad (26)$$

其中, n 是正负样本对的总数, n' 是模型正确预测的正负样本对的数量, n'' 是得分相同的正负样本对的数量. $PR-AUC$ 的值域同样在 0 到 1 之间, 值越高表示模型的性能越好. 它反映了模型在不同阈值下的精确率和召回率的权衡, 公式如下:

$$PR-AUC = \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})y_i \quad (27)$$

其中, n 是样本总数, x_i 是第 i 个样本的召回率, y_i 是第 i 个样本的精确率.

表征学习的结果也常被用于现实场景的应用中, 其中最常见的一项应用是推荐系统. 在推荐系统中, 研究者们常用归一化折损累积增益 ($NDCG$)^[99] 和命中率 (HR) 来衡量推荐任务的性能. $NDCG$ 的值介于 0 和 1 之间, 考虑了推荐列表中项目的相关性和排序, 越高表明效果越好. 公式如下:

$$NDCG@K = \frac{1}{|users|} \sum_{i=1}^{|users|} \frac{1}{\log_2(p_i + 1)} \quad (28)$$

其中, $|users|$ 是测试集中的用户数量, p_i 是第 i 个用户的目标链接在前 K 个推荐结果中的位置. HR 是推荐系统中另一个常用的指标, 表示预测正确的概率, 即在给定的推荐列表中, 是否包含了用户真实喜欢的项目. HR 的值介于 0 和 1 之间, 值越高, 说明推荐系统的性能越好, 公式如下:

$$HR@K = \frac{|hits@K|}{|users|} \quad (29)$$

其中, $|hits@K|$ 是在前 K 个推荐结果中命中目标链接的次数, $|users|$ 是测试集中的用户数量.

7 现实场景中的异质图表征学习应用

异质图表征学习方法不仅在数据挖掘领域得到了广泛应用, 还在商务领域、网络安全领域和医学领域等多个实际场景中展现了卓越的应用潜力. 本节将深入探讨异质图表征学习在这些领域的具体应用情况, 并介绍了异质图表征学习近两年的最新应用场景, 有助于读者全面了解异质图在现实应用的发展现状和未来趋势. 表 9 展示了对异质图表征学习应用的总结.

表 9 异质图表征学习应用总结

分类	方法	发表年份	会议/期刊
电子商务	PDGCN ^[100]	2023	TKDD
	IntentGC ^[101]	2017	SIGKDD
	MHGCR ^[18]	2022	SIGKDD
	BPHGNN ^[74]	2023	SIGKDD
	MEIRec ^[102]	2019	SIGKDD
	GTANE ^[20]	2019	SIGKDD

表 9 异质图表征学习应用总结(续)

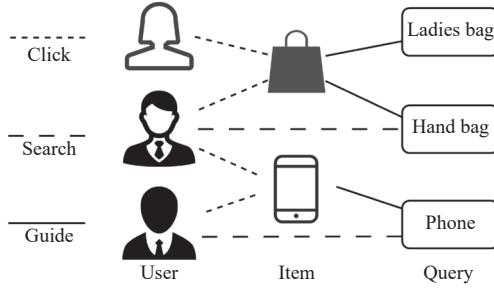
分类	方法	发表年份	会议/期刊
电子商务	HACUD ^[103]	2019	AAAI
	GAS ^[104]	2019	CIKM
	FedHGNN ^[105]	2024	WWW
生物医药	TIGER ^[106]	2024	AAAI
	HeteroMed ^[107]	2018	CIKM
	HSGNN ^[108]	2020	BigData
	LGIBG ^[109]	2021	TOMM
	PLPIHS ^[110]	2017	Sci Rep
网络安全	HGM ^[111]	2020	AIM
	Vendor2Vec ^[112]	2019	WWW
	MatchGNet ^[113]	2019	IJCAI
	HinDroid ^[114]	2017	SIGKDD
	Player2Vec ^[115]	2019	CIKM
	GEM ^[23]	2018	CIKM
	Scorpion ^[116]	2018	SIGKDD
其他	HeteroSGT ^[117]	2024	WWW
	HVGAE ^[118]	2019	ICDM
	ie-HGCN ^[84]	2023	TKDE
	AND ^[119]	2020	AAAI
	ECHO-GL ^[120]	2024	AAAI
	ESCC ^[121]	2024	AAAI
	JEF-HM ^[122]	2024	AAAI

7.1 电子商务中的异质图表征学习

电子商务领域作为一个充满复杂关系的异质网络,例如亚马逊平台、淘宝平台等,他们通常包括用户、商品、评价等异质节点和购买、收藏等异质边。异质图表征学习方法可以用于提高推荐系统效果^[20,74,100–102]、欺诈检测等任务^[103,104]。

商品推荐是电子商务平台中最广泛的应用之一,在商品推荐任务中,数据通常被建模为不同类型的节点和边,例如用户、商品和用户对商品的查询、点击和购买等。如何捕获对象之间的异质信息用于更好地表示节点,是实现精准推荐的关键所在。PDGCN^[100]提出了动态异质图卷积网络,将用户的交互序列建模为3个动态异质图,通过邻居池化和卷积操作捕获结构信息,并通过自注意力机制捕获时间信息。IntentGC^[101]采用图卷积网络,通过利用显式偏好和异质关系,借助神经模型在非线性意义上自动学习不同关系的重要性,并在阿里巴巴数据集上验证了推荐的有效性。MEIRec^[102]将用户意图表示为搜索框中的默认查询,并将意图推荐问题转化为查询推荐问题,如图13所示。该模型提出了一种新颖的元路径引导的意图推荐方法,通过元路径引导的异质图神经网络学习意图推荐中对象的表征。GATNE^[20]通过将异质图按照边类型拆解为关系子图来学习异质信息,并提出归纳式模型用于多种场景的推荐任务。FedHGNN^[105]创新性地将联邦学习的技术应用到异质图表征学习中,客户端会在本地训练模型,并将嵌入和梯度上传到服务器进行聚合,在学习表征用于推荐的同时还可以保护用户的隐私。

除了用于商品推荐外,异质图表征学习技术也广泛用于电子商务平台的欺诈检测, HACUD^[103]提出了一种基于分层注意力机制的支付宝套现用户检测模型。该模型通过利用基于元路径的邻居,增强了对象的特征表示。通过分析支付宝用户与套现相关的信息, HACUD 能够高效地检测潜在的欺诈行为,为支付平台提供了强有力的安全支持。GAS^[104]集成了异质图和同构图来捕获评论的本地上下文和全局上下文,并提出了一种基于图卷积网络的大规模反垃圾邮件方法,用于检测闲鱼的垃圾邮件广告。

图 13 异质图表征学习在商务推荐的应用^[102]

7.2 生物医药中的异质图表征学习

随着医学领域的发展,人们越来越重视对医疗信息的分析和使用,许多医疗信息可以使用异质图建模。例如电子健康记录(electronic health records, EHR)可以记录患者的医疗情况,有助于提高疾病诊断准确率。Hetero-Med^[107]充分利用EHR,使用异质图对病人的数据进行异构图建模并开展研究,利用基于元路径的方法来捕获数据中的语义关系用于诊断疾病。类似地,HSGNN^[108]也使用元路径来处理EHR的异质性,根据元路径下节点的相似度将异质图分解为多个同构图,并提出了一个端到端的图神经网络来进行诊断预测。HGM^[111]通过将不同类型的节点投影到相同的特征空间来处理EHR的异质性,并使用异质Skip-gram来优化模型,将学习到的表征用于诊断预测任务。

除了广泛应用于EHR外,异质图表征学习还在其他医学领发挥着重要作用。LGIBG^[109]利用多源异质信息建模异质行为图进行健康预测,作者不仅考虑节点异质,还将边嵌入纳入表征学习的过程中,并使用自注意力考虑时间信息。PLPIHS^[110]使用HeteSim度量来计算异质网络中每个lncRNA-蛋白质对的相关性得分,充分考虑了网络的特征和拓扑结构。药物之间的不良相互作用可能会造成严重的医疗风险,为了预测药物之间的相互作用,TIGER^[106]将Transformer^[123]中自注意力机制更改为关系感知的注意力机制,并同时从图级和节点级双通道进行表示学习。

7.3 网络安全中的异质图表征学习

在当今数字化时代,网络安全问题日益凸显,对于保护个人隐私、企业机密以及国家信息安全至关重要。异质图表征学习通过在异质网络中学习节点的低维表示,能够更全面地捕获不同类型节点之间的关联和特征,为网络安全问题的解决提供了一种创新性的方法。

MatchGNet^[113]在检测异常软件时,将进程、文件等实体建模为异质图,并提出分层注意力图神经网络编码器用于学习异质图的表征,最后通过计算未知软件和良性软件的相似度来判断其是否为异常软件。Vendor2Vec^[112]利用属性异质网络打击网络空间的毒品交易,该模型用附加的互补属性信息在节点中引导基于元路径的随机游走以进行路径实例采样。HinDroid^[114]将Android应用程序、API及不同的连接关系建模为异质图,并利用元路径来聚合邻居信息,用于检测Android恶意软件。GEM^[23]受到连接子图方法的启发,根据攻击者的两个基本弱点,综合异质图信息的表征,用于检测支付宝恶意账户。Player2Vec^[115]引用了归因异质信息网络,将网络投影到多个视图并使用图卷积神经网络和注意力机制来进行聚合获得表征,可以用于分析地下论坛,识别关键用户,如图14所示。Scorpion^[116]通过建模不同类型的实体,例如文件、存档、机器、API等以及它们之间丰富的语义关系,将其表示为一个异质图,然后使用基于元图的方法来学习节点表征,应用于恶意软件检测任务中,并成功纳入Comodo Antivirus产品的扫描工具中。HeteroSGT^[117]使用异质图表征学习检测假新闻,将新闻、实体和主题建模为异质图,并以新闻节点为中心进行随机游走构建子图,用于学习新闻节点的表征,进而检测新闻是否属于假新闻。

7.4 其他领域中的异质图表征学习

在学术领域,研究者之间的合作关系网络通常涉及多个异质节点,如作者、论文、学科、研究机构等。异质图

表征学习被用于学习学术网络^[84,87,118,119]的表征,以进行推荐、共同作者识别等任务,进而推动学术研究的协同与创新.HVGAE^[118]使用异质变分图自动编码器学习网络中研究论文和数据集的表示,然后根据学习到的表示计算查询与数据集候选的相关性,用于数据集推荐任务.AND^[119]提出了一种新颖的生成对抗框架来判断两篇论文是否是同一作者.

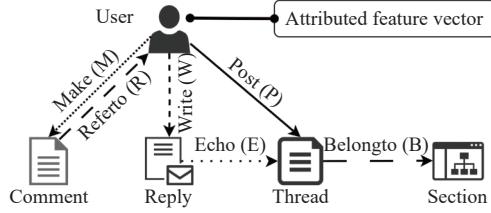


图 14 异质图表征学习在网络安全的应用^[115]

最近,异质图表征学习还被应用到其他多个应用领域.例如,ECHO-GL^[120]利用财报会议(earnings calls)的语义信息构建异质图,使用线性投影解决节点的异质性,并利用多头注意力机制聚合邻域信息,随后利用随机微分方程计算业绩发布电话会之后的某个时间的股票表征,进而进行股票走势预测.HHN^[124]在处理跨模态的人脸检索问题时,将图片和视频视为两种模态的数据,并利用异质哈希网络将异质数据的特征投影到相同的特征空间,同时作者指出,只要特征提取得当,HHN可以应用于更多种模态数据的任务中.ECSS^[121]将异质图表征学习应用到会话语音合成领域,将文本、音频、说话人、情感等视作异质节点,并提出基于异质图的情感编码器来捕获情绪信息.JEF-HM^[122]将异质图表征学习应到事件因果抽取任务中,将事件、论元等异质节点建模为异质图,并使用关系图注意力网络(R-GAT)^[125]来捕获权重信息.

8 总结与未来展望

本文深度剖析了异质图表征学习领域的最新研究进展、技术方法及其应用,详细介绍了该领域的数据集和工具,明确指出了该领域所面临的挑战.同时,系统综述了目前流行的异质图表征学习算法,并从异质图转换的视角出发,分析各模型如何处理数据的异质性,为读者呈现了一个全新的视角.虽然异质图表征学习已经取得显著的进展,但该领域还有若干关键性的难题尚待克服.基于该领域的前沿工作,本文指出异质图表征学习领域的未来工作应关注以下几个关键方向.

(1) 自动学习元结构^[126–129]:现有的异质图表征学习方法依赖于手工设计元路径、元图等元结构进行聚合,过程需要丰富的领域知识.一些方法尝试使用神经架构搜索(NAS)技术,通过自动化搜索最优的结构.GEMS^[126]和DiffMG^[127]尝试使用NAS搜索元结构,但其要么搜索成本过高,要么性能不稳定.为了解决这些问题PMMM^[128]和PCMM^[129]提出将元多重图作为元结构,并取得了显著性能提升.未来的工作可以继续优化算法,设计更加高效的元结构搜索空间,进一步降低搜索成本并提高搜索稳定性.

(2) 提高模型可解释性^[130,131]:尽管现有的异质图表征学习方法取得了一定进展,但他们往往没有良好的可解释性.异质图包含多种类型的节点和边,其内在的复杂性使得从这些图中学习到的知识难以用简单的规则或直观的模式来表达.因此,未来的工作需要关注如何设计可解释的图神经网络架构,让模型在捕获复杂图结构信息的同时,也能够输出易于理解的决策过程,以及结合领域知识,将人类可理解的概念和规则融入图神经网络,提高模型的可解释性.

(3) 多源异质信息融合^[16,132]:异质图数据往往包含多种类型的节点和边信息,如社交关系、语义特征、时间序列等.如何有效地融合这些异质信息源,是异质图表征学习的一大挑战.未来的研究可以关注多源异质信息的融合技术,将文本、图像和视频等不同形式的信息整合到统一的图表征中,充分利用多种信息源的互补性,并建专门的神经网络组件来高效地整合异质性信息,挖掘隐藏在多源数据中的复杂关联.

(4) 结合大语言模型^[133–135]:异质图表征学习专注于从丰富多样的图结构中学习到有效的节点表征,这些图结

构由不同类型的节点和边构成,能够反映出现实世界中复杂的交互.而大语言模型 (LLM) 则在理解和生成自然语言方面表现出色. CasLMN^[135]尝试在时序异构图中引入 LMM 提取的外部知识,为表征学习提供辅助信息,并取得了优秀的性能.结合 LLM 的语言理解能力和异质图表征学习的关系挖掘能力,有望使 LLM 能够更好地理解实体之间的复杂关系,进而可以处理更多样的数据分析任务.

(5) 动态异质图表征学习:现有的异质图表征学习方法主要针对静态异质图,而现实场景中存在许多动态异质图,未来的研究需要更多地关注动态异质图,以应对复杂多变的异质图结构.一些研究^[136-138]只更新跟随时间变化的节点,用来考虑时间维度的影响,这类方法往往采用浅层模型,计算效率高,但表达能力有欠缺.还有一些研究^[139-141]使用注意力机制等模型来额外捕获时间的演变信息,但其会消耗很多计算资源.如何结合这两类方法的优点,高效地捕获完整的图结构和时间信息将是未来的一个重要研究方向.

通过深入研究这些问题,本文有望进一步推动异质图表征学习领域的发展.总体而言,本综述为研究者提供了全面了解异质图表征学习领域的入口,为未来的研究和实践奠定了坚实基础.

References:

- [1] Sun YZ, Han JW. Mining heterogeneous information networks: A structural analysis approach. ACM SIGKDD Explorations Newsletter, 2012, 14(2): 20–28. [doi: [10.1145/2481244.2481248](https://doi.org/10.1145/2481244.2481248)]
- [2] Liu FC, Wen Y, Zhang DX, Jiang XH, Xing XY, Meng D. Log2vec: A heterogeneous graph embedding based approach for detecting cyber threats within enterprise. In: Proc. of the 2019 ACM SIGSAC Conf. on Computer and Communications Security. London: ACM, 2019. 1777–1794. [doi: [10.1145/3319535.3363224](https://doi.org/10.1145/3319535.3363224)]
- [3] Zhao J, Yan QB, Liu XD, Li B, Zuo GS. Cyber threat intelligence modeling based on heterogeneous graph convolutional network. In: Proc. of the 23rd Int'l Symp. on Research in Attacks, Intrusions and Defenses. San Sebastian: USENIX, 2020. 241–256.
- [4] Ge Y, Chen SC. Graph convolutional network for recommender systems. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2020, 31(4): 1101–1112 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/5928.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.005928](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.005928)]
- [5] Hu BB, Shi C, Zhao WX, Yu PS. Leveraging meta-path based context for top-N recommendation with a neural co-attention model. In: Proc. of the 24th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. London: ACM, 2018. 1531–1540. [doi: [10.1145/3219819.3219965](https://doi.org/10.1145/3219819.3219965)]
- [6] Shi C, Hu BB, Zhao WX, Yu PS. Heterogeneous information network embedding for recommendation. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2019, 31(2): 357–370. [doi: [10.1109/TKDE.2018.2833443](https://doi.org/10.1109/TKDE.2018.2833443)]
- [7] Cai HY, Zheng VW, Chang KCC. A comprehensive survey of graph embedding: Problems, techniques, and applications. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2018, 30(9): 1616–1637. [doi: [10.1109/TKDE.2018.2807452](https://doi.org/10.1109/TKDE.2018.2807452)]
- [8] Xu MJ. Understanding graph embedding methods and their applications. SIAM Review, 2021, 63(4): 825–853. [doi: [10.1137/20M1386062](https://doi.org/10.1137/20M1386062)]
- [9] Goyal P, Ferrara E. Graph embedding techniques, applications, and performance: A survey. Knowledge-based Systems, 2018, 151: 78–94. [doi: [10.1016/j.knosys.2018.03.022](https://doi.org/10.1016/j.knosys.2018.03.022)]
- [10] Dong YX, Chawla NV, Swami A. metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks. In: Proc. of the 23rd ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Halifax: ACM, 2017. 135–144. [doi: [10.1145/3097983.3098036](https://doi.org/10.1145/3097983.3098036)]
- [11] Kazemi SM, Poole D. SimpLE embedding for link prediction in knowledge graphs. In: Proc. of the 32nd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Montréal: Curran Associates Inc., 2018. 4289–4300.
- [12] Wang X, Bo DY, Shi C, Fan SH, Ye YF, Yu PS. A survey on heterogeneous graph embedding: Methods, techniques, applications and sources. IEEE Trans. on Big Data, 2023, 9(2): 415–436. [doi: [10.1109/TB DATA.2022.3177455](https://doi.org/10.1109/TB DATA.2022.3177455)]
- [13] Zhang DK, Yin J, Zhu XQ, Zhang CQ. MetaGraph2Vec: Complex semantic path augmented heterogeneous network embedding. In: Proc. of the 22nd Pacific-Asia Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Melbourne: Springer, 2018. 196–208. [doi: [10.1007/978-3-319-93037-4_16](https://doi.org/10.1007/978-3-319-93037-4_16)]
- [14] Chen YX, Wang CG. HINE: Heterogeneous information network embedding. In: Proc. of the 22nd Int'l Conf. on Database Systems for Advanced Applications. Suzhou: Springer, 2017. 180–195. [doi: [10.1007/978-3-319-55753-3_12](https://doi.org/10.1007/978-3-319-55753-3_12)]
- [15] Chen HX, Yin HZ, Wang WQ, Wang H, Nguyen QVH, Li X. PME: Projected metric embedding on heterogeneous networks for link prediction. In: Proc. of the 24th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. London: ACM, 2018. 1177–1186. [doi: [10.1145/3219819.3219986](https://doi.org/10.1145/3219819.3219986)]
- [16] Zhang CX, Song DJ, Huang C, Swami A, Chawla NV. Heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l

- Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Anchorage: ACM, 2019. 793–803. [doi: [10.1145/3292500.3330961](https://doi.org/10.1145/3292500.3330961)]
- [17] Wang X, Ji HY, Shi C, Wang B, Ye YF, Cui P, Yu PS. Heterogeneous graph attention network. In: Proc. of the 2019 World Wide Web Conf. San Francisco: ACM, 2019. 2022–2032. [doi: [10.1145/3308558.3313562](https://doi.org/10.1145/3308558.3313562)]
- [18] Yu PY, Fu CF, Yu YW, Huang C, Zhao ZY, Dong JY. Multiplex heterogeneous graph convolutional network. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 2377–2387. [doi: [10.1145/3534678.3539482](https://doi.org/10.1145/3534678.3539482)]
- [19] Ji HY, Wang X, Shi C, Wang B, Yu PS. Heterogeneous graph propagation network. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(1): 521–532. [doi: [10.1109/TKDE.2021.3079239](https://doi.org/10.1109/TKDE.2021.3079239)]
- [20] Cen YK, Zou X, Zhang JW, Yang HX, Zhou JR, Tang J. Representation learning for attributed multiplex heterogeneous network. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Anchorage: ACM, 2019. 1358–1368. [doi: [10.1145/3292500.3330964](https://doi.org/10.1145/3292500.3330964)]
- [21] Wang S, Yu PS. Heterogeneous graph matching networks: Application to unknown malware detection. In: Proc. of the 2019 IEEE Int'l Conf. on Big Data. Los Angeles: IEEE, 2019. 5401–5408. [doi: [10.1109/BigData47090.2019.9006464](https://doi.org/10.1109/BigData47090.2019.9006464)]
- [22] Liang TT, Sheng X, Zhou L, Li YHZ, Gao HH, Yin YY, Chen L. Mobile APP recommendation via heterogeneous graph neural network in edge computing. Applied Soft Computing, 2021, 103: 107162. [doi: [10.1016/j.asoc.2021.107162](https://doi.org/10.1016/j.asoc.2021.107162)]
- [23] Liu ZQ, Chen CC, Yang XX, Zhou J, Li XL, Song L. Heterogeneous graph neural networks for malicious account detection. In: Proc. of the 27th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Torino: ACM, 2018. 2077–2085. [doi: [10.1145/3269206.3272010](https://doi.org/10.1145/3269206.3272010)]
- [24] Pham T, Tao XH, Zhang J, Yong JM. Constructing a knowledge-based heterogeneous information graph for medical health status classification. Health Information Science and Systems, 2020, 8(1): 10. [doi: [10.1007/s13755-020-0100-6](https://doi.org/10.1007/s13755-020-0100-6)]
- [25] Ammar K, Inoubli W, Zghal S, Nguifo EM. Systematic literature review on heterogeneous information networks. 2023. <https://hal.science/hal-04154581>
- [26] Bing R, Yuan G, Zhu M, Meng FR, Ma HF, Qiao SJ. Heterogeneous graph neural networks analysis: A survey of techniques, evaluations and applications. Artificial Intelligence Review, 2023, 56(8): 8003–8042. [doi: [10.1007/s10462-022-10375-2](https://doi.org/10.1007/s10462-022-10375-2)]
- [27] Shi C, Wang RJ, Wang X. Survey on heterogeneous information networks analysis and applications. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2022, 33(2): 598–621 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6357.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.006357](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.006357)]
- [28] Zhao G, Wang QG, Yao F, Zhang YF, Yu G. Survey on large-scale graph neural network systems. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2022, 33(1): 150–170 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6311.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.006311](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.006311)]
- [29] Zhao TY, Yang C, Li YB, Gan Q, Wang ZY, Liang FQ, Shao YX, Wang X, Shi C. Space4HGNN: A novel, modularized and reproducible platform to evaluate heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 45th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Madrid: ACM, 2022. 2776–2789. [doi: [10.1145/3477495.3531720](https://doi.org/10.1145/3477495.3531720)]
- [30] Sun YZ, Han JW, Yan XF, Yu PS, Wu TY. PathSim: Meta path-based top-K similarity search in heterogeneous information networks. Proc. of the VLDB Endowment, 2011, 4(11): 992–1003. [doi: [10.14778/3402707.3402736](https://doi.org/10.14778/3402707.3402736)]
- [31] Zhang WT, Fang Y, Liu ZM, Wu M, Zhang XM. mg2vec: Learning relationship-preserving heterogeneous graph representations via metagraph embedding. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2022, 34(3): 1317–1329. [doi: [10.1109/TKDE.2020.2992500](https://doi.org/10.1109/TKDE.2020.2992500)]
- [32] Huang ZP, Zheng YD, Cheng R, Sun YZ, Mamoulis N, Li X. Meta structure: Computing relevance in large heterogeneous information networks. In: Proc. of the 22nd ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco: ACM, 2016. 1595–1604. [doi: [10.1145/2939672.2939815](https://doi.org/10.1145/2939672.2939815)]
- [33] Fu XY, King I. MECCCH: Metapath context convolution-based heterogeneous graph neural networks. Neural Networks, 2024, 170: 266–275. [doi: [10.1016/j.neunet.2023.11.030](https://doi.org/10.1016/j.neunet.2023.11.030)]
- [34] Guan MY, Cai XJ, Shang JX, Hao F, Liu DJ, Jiao XL, Ni WC. HMSG: Heterogeneous graph neural network based on metapath subgraph learning. Knowledge-based Systems, 2023, 279: 110930. [doi: [10.1016/J.KNOSYS.2023.110930](https://doi.org/10.1016/J.KNOSYS.2023.110930)]
- [35] Bo DY, Wang X, Shi C, Zhu MQ, Lu EM, Cui P. Structural deep clustering network. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 1400–1410. [doi: [10.1145/3366423.3380214](https://doi.org/10.1145/3366423.3380214)]
- [36] Tu WX, Zhou SH, Liu XW, Guo XF, Cai ZP, Zhu E, Cheng KR. Deep fusion clustering network. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 9978–9987. [doi: [10.1609/aaai.v35i11.17198](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i11.17198)]
- [37] Rozemberczki B, Davies R, Sarkar R, Sutton C. GEMSEC: Graph embedding with self clustering. In: Proc. of the 2019 IEEE/ACM Int'l Conf. on Advances in Social Networks Analysis and Mining. Vancouver: IEEE, 2019. 65–72. [doi: [10.1145/3341161.3342890](https://doi.org/10.1145/3341161.3342890)]

- [38] Zhang LL, Xie YX, Luan XD, Zhang X. Multi-source heterogeneous data fusion. In: Proc. of the 2018 Int'l Conf. on Artificial Intelligence and Big Data. Chengdu: IEEE, 2018. 47–51. [doi: [10.1109/ICAIBD.2018.8396165](https://doi.org/10.1109/ICAIBD.2018.8396165)]
- [39] Gao L, Yang H, Wu J, Zhou C, Lu WX, Hu Y. Recommendation with multi-source heterogeneous information. In: Proc. of the 27th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Stockholm: AAAI Press, 2018. 3378–3384.
- [40] Wang K, Yu YW, Huang C, Zhao ZY, Dong JY. Heterogeneous graph neural network for attribute completion. Knowledge-based Systems, 2022, 251: 109171. [doi: [10.1016/j.knosys.2022.109171](https://doi.org/10.1016/j.knosys.2022.109171)]
- [41] Jin D, Huo CY, Liang CD, Yang L. Heterogeneous graph neural network via attribute completion. In: Proc. of the 2021 Web Conf. Ljubljana: ACM, 2021. 391–400. [doi: [10.1145/3442381.3449914](https://doi.org/10.1145/3442381.3449914)]
- [42] Bing R, Yuan G, Meng FR, Wang SZ, Qiao SJ, Wang ZX. Multi-view contrastive enhanced heterogeneous graph structure learning. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2023, 34(10): 4477–4500 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6883.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.006883](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.006883)]
- [43] Zhao JN, Wang X, Shi C, Hu BB, Song GJ, Ye YF. Heterogeneous graph structure learning for graph neural networks. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 4697–4705. [doi: [10.1609/aaai.v35i5.16600](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i5.16600)]
- [44] Yun S, Jeong M, Kim R, Kang J, Kim HJ. Graph Transformer networks. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 1073.
- [45] He Y, Song YQ, Li JX, Ji C, Peng J, Peng H. HeteSpaceyWalk: A heterogeneous spacey random walk for heterogeneous information network embedding. In: Proc. of the 28th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Beijing: ACM, 2019. 639–648. [doi: [10.1145/3357384.3358061](https://doi.org/10.1145/3357384.3358061)]
- [46] Fu TY, Lee WC, Lei Z. HIN2Vec: Explore meta-paths in heterogeneous information networks for representation learning. In: Proc. of the 2017 ACM on Conf. on Information and Knowledge Management. Singapore: ACM, 2017. 1797–1806. [doi: [10.1145/3132847.3132953](https://doi.org/10.1145/3132847.3132953)]
- [47] Zhang YD, Wang X, Liu N, Shi C. Embedding heterogeneous information network in hyperbolic spaces. ACM Trans. on Knowledge Discovery from Data, 2022, 16(2): 35. [doi: [10.1145/3468674](https://doi.org/10.1145/3468674)]
- [48] Shang JB, Qu M, Liu JL, Kaplan LM, Han JW, Peng J. Meta-path guided embedding for similarity search in large-scale heterogeneous information networks. arXiv:1610.09769, 2016.
- [49] Lee S, Park C, Yu H. BHIN2vec: Balancing the type of relation in heterogeneous information network. In: Proc. of the 28th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Beijing: ACM, 2019. 619–628. [doi: [10.1145/3357384.3357893](https://doi.org/10.1145/3357384.3357893)]
- [50] Li ZJ, Zheng WH, Lin XL, Zhao ZY, Wang Z, Wang Y. TransN: Heterogeneous network representation learning by translating node embeddings. In: Proc. of the 36th IEEE Int'l Conf. on Data Engineering. Dallas: IEEE, 2020. 589–600. [doi: [10.1109/ICDE48307.2020.00057](https://doi.org/10.1109/ICDE48307.2020.00057)]
- [51] Hussein R, Yang DQ, Cudré-Mauroux P. Are meta-paths necessary? Revisiting heterogeneous graph embeddings. In: Proc. of the 27th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Torino: ACM, 2018. 437–446. [doi: [10.1145/3269206.3271777](https://doi.org/10.1145/3269206.3271777)]
- [52] Tang J, Qu M, Mei QZ. PTE: Predictive text embedding through large-scale heterogeneous text networks. In: Proc. of the 21st ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Sydney: ACM, 2015. 1165–1174. [doi: [10.1145/2783258.2783307](https://doi.org/10.1145/2783258.2783307)]
- [53] Xu LC, Wei XK, Cao JN, Yu PS. Embedding of embedding (EOE): Joint embedding for coupled heterogeneous networks. In: Proc. of the 10th ACM Int'l Conf. on Web Search and Data Mining. Cambridge: ACM, 2017. 741–749. [doi: [10.1145/3018661.3018723](https://doi.org/10.1145/3018661.3018723)]
- [54] Shi Y, Gui H, Zhu Q, Kaplan L, Han JW. AspEm: Embedding learning by aspects in heterogeneous information networks. In: Proc. of the 2018 SIAM Int'l Conf. on Data Mining. San Diego: SDM, 2018. 144–152. [doi: [10.1137/1.9781611975321.16](https://doi.org/10.1137/1.9781611975321.16)]
- [55] Lu YF, Shi C, Hu LM, Liu ZY. Relation structure-aware heterogeneous information network embedding. In: Proc. of the 33rd AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Honolulu: AAAI, 2019. 4456–4463. [doi: [10.1609/aaai.v33i01.33014456](https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.33014456)]
- [56] Mikolov T, Chen K, Corrado G, Dean J. Efficient estimation of word representations in vector space. In: Proc. of the 1st Int'l Conf. on Learning Representations. Scottsdale, 2013. [doi: [10.48550/arXiv.1301.3781](https://doi.org/10.48550/arXiv.1301.3781)]
- [57] Basher ARMA, Hallam SJ. Leveraging heterogeneous network embedding for metabolic pathway prediction. Bioinformatics, 2021, 37(6): 822–829. [doi: [10.1093/bioinformatics/btaa906](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaa906)]
- [58] Fu XY, Zhang JN, Meng ZQ, King I. MAGNN: Metapath aggregated graph neural network for heterogeneous graph embedding. In: Proc. 2020 of the Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 2331–2341. [doi: [10.1145/3366423.3380297](https://doi.org/10.1145/3366423.3380297)]
- [59] Yang XC, Yan MY, Pan SR, Ye XC, Fan DR. Simple and efficient heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 10816–10824. [doi: [10.1609/aaai.v37i9.26283](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i9.26283)]
- [60] Tian YJ, Dong KW, Zhang CH, Zhang CX, Chawla NV. Heterogeneous graph masked autoencoders. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. 9997–10005. [doi: [10.1609/aaai.v37i8.26192](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i8.26192)]

- [61] Li JX, Peng H, Cao YW, Dou YT, Zhang HK, Yu P, He LF. Higher-order attribute-enhancing heterogeneous graph neural networks. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 35(1): 560–574. [doi: [10.1109/TKDE.2021.3074654](https://doi.org/10.1109/TKDE.2021.3074654)]
- [62] Zhou W, Huang H, Shi RZ, Yin KH, Jin H. An efficient subgraph-inferring framework for large-scale heterogeneous graphs. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 9431–9439. [doi: [10.1609/aaai.v38i8.28797](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i8.28797)]
- [63] Ma YH, Yan N, Li JY, Mortazavi MS, Chawla NV. HetGPT: Harnessing the power of prompt tuning in pre-trained heterogeneous graph neural networks. In: Proc. of the 2024 ACM Web Conf. Singapore: ACM, 2024. 1015–1023. [doi: [10.1145/3589334.3645685](https://doi.org/10.1145/3589334.3645685)]
- [64] Song LY, Liu ZZ, Zhang Y, Li ZH, Shang XQ. Cascade graph convolution network based on multi-level graph structures in heterogeneous graph. *Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software*, 2024, 35(11): 5179–5195 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7051.htm> [doi: [10.13328/j.cnki.jos.007051](https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.007051)]
- [65] Liu J, Song LY, Wang GT, Shang XQ. Meta-HGT: Metapath-aware hypergraph Transformer for heterogeneous information network embedding. *Neural Networks*, 2023, 157: 65–76. [doi: [10.1016/j.neunet.2022.08.028](https://doi.org/10.1016/j.neunet.2022.08.028)]
- [66] Zhang CD, Wang SQ, Liu YF, Zheng S, Sun FZ. Method of heterogeneous graph representation learning using novel meta-path. *Journal of Frontiers of Computer Science & Technology*, 2023, 17(7): 1680–1689 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.3778/j.issn.1673-9418.2202014](https://doi.org/10.3778/j.issn.1673-9418.2202014)]
- [67] Li Y, Jin YL, Song GJ, Zhu ZH, Shi C, Wang YM. GraphMSE: Efficient meta-path selection in semantically aligned feature space for graph neural networks. In: Proc. of the 35th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2021. 4206–4214. [doi: [10.1609/aaai.v35i5.16544](https://doi.org/10.1609/aaai.v35i5.16544)]
- [68] Lou XJ, Liu GJ, Li J. ASIAM-HGNN: Automatic selection and interpretable aggregation of meta-path instances for heterogeneous graph neural network. *Computing and Informatics*, 2023, 42(2): 257–279. [doi: [10.31577/cai_2023_2_257](https://doi.org/10.31577/cai_2023_2_257)]
- [69] Mei GX, Pan L, Liu S. Heterogeneous graph embedding by aggregating meta-path and meta-structure through attention mechanism. *Neurocomputing*, 2022, 468: 276–285. [doi: [10.1016/j.neucom.2021.10.001](https://doi.org/10.1016/j.neucom.2021.10.001)]
- [70] Meng XF, Wen J, Li ZH, Ji HZ. Heterogeneous graph embedding method guided by the multi-attention mechanism. *CAAI Trans. on Intelligent Systems*, 2023, 18(4): 688–698 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.11992/tis.202204006](https://doi.org/10.11992/tis.202204006)]
- [71] Hu ZN, Dong YX, Wang KS, Sun YZ. Heterogeneous graph Transformer. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 2704–2710. [doi: [10.1145/3366423.3380027](https://doi.org/10.1145/3366423.3380027)]
- [72] Lv QS, Ding M, Liu Q, Chen YX, Feng WZ, He SM, Zhou C, Jiang JG, Dong YX, Tang J. Are we really making much progress? Revisiting, benchmarking and refining heterogeneous graph neural networks. In: Proc. of the 27th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2021. 1150–1160. [doi: [10.1145/3447548.3467350](https://doi.org/10.1145/3447548.3467350)]
- [73] Schlichtkrull MS, Kipf TN, Bloem P, van den Berg R, Titov I, Welling M. Modeling relational data with graph convolutional networks. In: Proc. of the 15th Int'l Conf. on the Semantic Web. Heraklion: Springer, 2018. 593–607. [doi: [10.1007/978-3-319-93417-4_38](https://doi.org/10.1007/978-3-319-93417-4_38)]
- [74] Fu CF, Zheng GJ, Huang C, Yu YW, Dong JY. Multiplex heterogeneous graph neural network with behavior pattern modeling. In: Proc. of the 29th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Long Beach: ACM, 2023. 482–494. [doi: [10.1145/3580305.3599441](https://doi.org/10.1145/3580305.3599441)]
- [75] Park C, Kim D, Han JW, Yu H. Unsupervised attributed multiplex network embedding. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 5371–5378. [doi: [10.1609/aaai.v34i04.5985](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i04.5985)]
- [76] Feng SB, Tan ZX, Li R, Luo MN. Heterogeneity-aware twitter bot detection with relational graph Transformers. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022. 3977–3985. [doi: [10.1609/aaai.v36i4.20314](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i4.20314)]
- [77] Feng SB, Wan HR, Wang NN, Luo MN. BotRGCN: Twitter bot detection with relational graph convolutional networks. In: Proc. of the 2021 IEEE/ACM Int'l Conf. on Advances in Social Networks Analysis and Mining. ACM, 2021. 236–239. [doi: [10.1145/3487351.3488336](https://doi.org/10.1145/3487351.3488336)]
- [78] Peng H, Zhang RT, Dou YT, Yang RY, Zhang JY, Yu PS. Reinforced neighborhood selection guided multi-relational graph neural networks. *ACM Trans. on Information Systems (TOIS)*, 2022, 40(4): 69. [doi: [10.1145/3490181](https://doi.org/10.1145/3490181)]
- [79] Yu L, Sun LL, Du BW, Liu CR, Lv WF, Xiong H. Heterogeneous graph representation learning with relation awareness. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 35(6): 5935–5947. [doi: [10.1109/TKDE.2022.3160208](https://doi.org/10.1109/TKDE.2022.3160208)]
- [80] Li ZF, Liu H, Zhang ZL, Liu TT, Xiong NN. Learning knowledge graph embedding with heterogeneous relation attention networks. *IEEE Trans. on Neural Networks and Learning Systems*, 2022, 33(8): 3961–3973. [doi: [10.1109/TNNLS.2021.3055147](https://doi.org/10.1109/TNNLS.2021.3055147)]
- [81] Hong HT, Guo HT, Lin YC, Yang XQ, Li Z, Ye JP. An attention-based graph neural network for heterogeneous structural learning. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 4132–4139. [doi: [10.1609/aaai.v34i04.5833](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i04.5833)]
- [82] Zhao JN, Wang X, Shi C, Liu ZK, Ye YF. Network schema preserving heterogeneous information network embedding. In: Proc. of the 29th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Yokohama: IJCAI, 2020. 1366–1372. [doi: [10.24963/ijcai.2020/190](https://doi.org/10.24963/ijcai.2020/190)]

- [83] Wang ZH, Yu DH, Li Q, Shen SG, Yao S. SR-HGN: Semantic- and relation-aware heterogeneous graph neural network. *Expert Systems with Applications*, 2023, 224: 119982. [doi: [10.1016/j.eswa.2023.119982](https://doi.org/10.1016/j.eswa.2023.119982)]
- [84] Yang YM, Guan ZY, Li JX, Zhao W, Cui JT, Wang Q. Interpretable and efficient heterogeneous graph convolutional network. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 35(2): 1637–1650. [doi: [10.1109/TKDE.2021.3101356](https://doi.org/10.1109/TKDE.2021.3101356)]
- [85] Zhu SC, Zhou C, Pan SR, Zhu XQ, Wang B. Relation structure-aware heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 2019 IEEE Int'l Conf. on Data Mining. Beijing: IEEE, 2019. 1534–1539. [doi: [10.1109/ICDM.2019.00203](https://doi.org/10.1109/ICDM.2019.00203)]
- [86] Wang T, Jin D, Wang R, He DX, Huang YX. Powerful graph convolutional networks with adaptive propagation mechanism for homophily and heterophily. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022. 4210–4218. [doi: [10.1609/aaai.v36i4.20340](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i4.20340)]
- [87] Yang YM, Guan ZY, Wang Z, Zhao W, Xu C, Lu WG, Huang JB. Self-supervised heterogeneous graph pre-training based on structural clustering. In: Proc. of the 36th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. New Orleans: Curran Associates Inc., 2022. 1234.
- [88] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory. *Neural Computation*, 1997, 9(8): 1735–1780. [doi: [10.1162/neco.1997.9.8.1735](https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735)]
- [89] Jiang YL, Wang QP, Zhang XT, Huang X, Shen Q, Rao JF. Semi-supervised short text classification based on gated double-layer heterogeneous graph attention network. *Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, 2023, 36(7): 602–612 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.16451/j.cnki.issn1003-6059.202307003](https://doi.org/10.16451/j.cnki.issn1003-6059.202307003)]
- [90] Wang KS, Shen ZH, Huang CY, Wu CH, Dong YX, Kanakia A. Microsoft academic graph: When experts are not enough. *Quantitative Science Studies*, 2020, 1(1): 396–413. [doi: [10.1162/qss_a_00021](https://doi.org/10.1162/qss_a_00021)]
- [91] Hu WH, Fey M, Zitnik M, Dong YX, Ren HY, Liu BW, Catasta M, Leskovec J. Open graph benchmark: Datasets for machine learning on graphs. In: Proc. of the 34th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2020. 1855.
- [92] Hu WH, Fey M, Ren HY, Nakata M, Dong YX, Leskovec J. OGB-LSC: A large-scale challenge for machine learning on graphs. In: Proc. of the 1st Neural Information Processing Systems Track on Datasets and Benchmarks. NeurIPS, 2021.
- [93] Han H, Zhao TY, Yang C, Zhang HY, Liu YQ, Wang X, Shi C. OpenHGNN: An open source toolkit for heterogeneous graph neural network. In: Proc. of the 31st ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. Atlanta: ACM, 2022. 3993–3997. [doi: [10.1145/3511808.3557664](https://doi.org/10.1145/3511808.3557664)]
- [94] Hubert L, Arabie P. Comparing partitions. *Journal of Classification*, 1985, 2: 193–218. [doi: [10.1007/BF01908075](https://doi.org/10.1007/BF01908075)]
- [95] Strehl A, Ghosh J. Cluster ensembles—A knowledge reuse framework for combining multiple partitions. *The Journal of Machine Learning Research*, 2002, 3: 583–617. [doi: [10.1162/15324430332189773](https://doi.org/10.1162/15324430332189773)]
- [96] Pillai I, Fumera G, Roli F. Designing multi-label classifiers that maximize F measures: State of the art. *Pattern Recognition*, 2017, 61: 394–404. [doi: [10.1016/j.patcog.2016.08.008](https://doi.org/10.1016/j.patcog.2016.08.008)]
- [97] Hanley JA, McNeil BJ. The meaning and use of the area under a receiver operating characteristic (ROC) curve. *Radiology*, 1982, 143(1): 29–36. [doi: [10.1148/radiology.143.1.7063747](https://doi.org/10.1148/radiology.143.1.7063747)]
- [98] Davis J, Goadrich M. The relationship between precision-recall and ROC curves. In: Proc. of the 23rd Int'l Conf. on Machine Learning. Pittsburgh: ACM, 2006. 233–240. [doi: [10.1145/1143844.1143874](https://doi.org/10.1145/1143844.1143874)]
- [99] Järvelin K, Kekäläinen J. Cumulated gain-based evaluation of ir techniques. *ACM Trans. on Information Systems (TOIS)*, 2002, 20(4): 422–446. [doi: [10.1145/582415.582418](https://doi.org/10.1145/582415.582418)]
- [100] Jing MY, Zhu YM, Xu YN, Liu HB, Zang TZ, Wang CY, Yu JD. Learning shared representations for recommendation with dynamic heterogeneous graph convolutional networks. *ACM Trans. on Knowledge Discovery from Data*, 2023, 17(4): 59. [doi: [10.1145/3565575](https://doi.org/10.1145/3565575)]
- [101] Zhao J, Zhou Z, Guan ZY, Zhao W, Ning W, Qiu G, He XF. IntentGC: A scalable graph convolution framework fusing heterogeneous information for recommendation. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Anchorage: ACM, 2019. 2347–2357. [doi: [10.1145/3292500.3330686](https://doi.org/10.1145/3292500.3330686)]
- [102] Fan SH, Zhu JX, Han XT, Shi C, Hu LM, Ma BY, Li YL. Metapath-guided heterogeneous graph neural network for intent recommendation. In: Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. Anchorage: ACM, 2019. 2478–2486. [doi: [10.1145/3292500.3330673](https://doi.org/10.1145/3292500.3330673)]
- [103] Hu BB, Zhang ZQ, Shi C, Zhou J, Li XL, Qi Y. Cash-out user detection based on attributed heterogeneous information network with a hierarchical attention mechanism. In: Proc. of the 33rd AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Honolulu: AAAI, 2019. 946–953. [doi: [10.1609/aaai.v33i01.3301946](https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.3301946)]
- [104] Li A, Qin Z, Liu RS, Yang YQ, Li D. Spam review detection with graph convolutional networks. In: Proc. of the 28th ACM Int'l Conf.

- on Information and Knowledge Management. Beijing: ACM, 2019. 2703–2711. [doi: [10.1145/3357384.3357820](https://doi.org/10.1145/3357384.3357820)]
- [105] Yan B, Cao Y, Wang HY, Yang WC, Du JP, Shi C. Federated heterogeneous graph neural network for privacy-preserving recommendation. In: Proc. of the 2024 ACM Web Conf. Singapore: ACM, 2024. 3919–3929. [doi: [10.1145/3589334.3645693](https://doi.org/10.1145/3589334.3645693)]
- [106] Su XR, Hu PW, You ZH, Yu PS, Hu L. Dual-channel learning framework for drug-drug interaction prediction via relation-aware heterogeneous graph Transformer. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 249–256. [doi: [10.1609/aaai.v38i1.27777](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i1.27777)]
- [107] Hosseini A, Chen T, Wu WJ, Sun YZ, Sarrafzadeh M. HeteroMed: Heterogeneous information network for medical diagnosis. In: Proc. of the 27th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Torino: ACM, 2018. 763–772. [doi: [10.1145/3269206.3271805](https://doi.org/10.1145/3269206.3271805)]
- [108] Liu Z, Li XH, Peng H, He LF, Yu PS. Heterogeneous similarity graph neural network on electronic health records. In: Proc. of the 2020 IEEE Int'l Conf. on Big Data. Atlanta: IEEE, 2020. 1196–1205. [doi: [10.1109/BigData50022.2020.9377795](https://doi.org/10.1109/BigData50022.2020.9377795)]
- [109] Ma X, Yang XS, Gao JY, Xu CS. Health status prediction with local-global heterogeneous behavior graph. ACM Trans. on Multimedia Computing, Communications, and Applications (TOMM), 2021, 17(4): 129. [doi: [10.1145/3457893](https://doi.org/10.1145/3457893)]
- [110] Xiao Y, Zhang JP, Deng L. Prediction of lncrna-protein interactions using hetesim scores based on heterogeneous networks. Scientific Reports, 2017, 7(1): 3664. [doi: [10.1038/s41598-017-03986-1](https://doi.org/10.1038/s41598-017-03986-1)]
- [111] Wanyan TY, Kang M, Badgeley MA, Johnson KW, De Freitas JK, Chaudhry FF, Vaid A, Zhao S, Miotto R, Nadkarni GN, Wang F, Rousseau J, Azad A, Ding Y, Glicksberg BS. Heterogeneous graph embeddings of electronic health records improve critical care disease predictions. In: Proc. of the 18th Int'l Conf. on Artificial Intelligence in Medicine. Minneapolis: Springer, 2020. 14–25. [doi: [10.1007/978-3-030-59137-3_2](https://doi.org/10.1007/978-3-030-59137-3_2)]
- [112] Zhang YM, Fan YJ, Song W, Hou SF, Ye YF, Li X, Zhao L, Shi C, Wang JB, Xiong Q. Your style your identity: Leveraging writing and photography styles for drug trafficker identification in darknet markets over attributed heterogeneous information network. In: Proc. of the 2019 World Wide Web Conf. San Francisco: ACM, 2019. 3448–3454. [doi: [10.1145/3308558.3313537](https://doi.org/10.1145/3308558.3313537)]
- [113] Wang S, Chen ZZ, Yu X, Li D, Ni JC, Tang LA, Gui JP, Li ZC, Chen HF, Yu PS. Heterogeneous graph matching networks for unknown malware detection. In: Proc. of the 28th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Macao: IJCAI, 2019. 3762–3770. [doi: [10.24963/ijcai.2019/522](https://doi.org/10.24963/ijcai.2019/522)]
- [114] Hou SF, Ye YF, Song YQ, Abdulhayoglu M. HinDroid: An intelligent android malware detection system based on structured heterogeneous information network. In: Proc. of the 23rd ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Halifax: ACM, 2017. 1507–1515. [doi: [10.1145/3097983.3098026](https://doi.org/10.1145/3097983.3098026)]
- [115] Zhang YM, Fan YJ, Ye Yf, Zhao L, Shi C. Key player identification in underground forums over attributed heterogeneous information network embedding framework. In: Proc. of the 28th ACM Int'l Conf. on Information and Knowledge Management. Beijing: ACM, 2019. 549–558. [doi: [10.1145/3357384.3357876](https://doi.org/10.1145/3357384.3357876)]
- [116] Fan YJ, Hou SF, Zhang YM, Ye YF, Abdulhayoglu M. Gotcha-Sly malware! Scorpion a MetaGraph2Vec based malware detection system. In: Proc. of the 24th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. London: ACM, 2018. 253–262. [doi: [10.1145/3219819.3219862](https://doi.org/10.1145/3219819.3219862)]
- [117] Zhang YC, Ma XX, Wu J, Yang J, Fan H. Heterogeneous subgraph Transformer for fake news detection. In: Proc. of the 2024 ACM Web Conf. Singapore: ACM, 2024. 1272–1282. [doi: [10.1145/3589334.3645680](https://doi.org/10.1145/3589334.3645680)]
- [118] Altaf B, Akjuobi U, Yu L, Zhang XL. Dataset recommendation via variational graph autoencoder. In: Proc. of the 2019 IEEE Int'l Conf. on Data Mining. Beijing: IEEE, 2019. 11–20. [doi: [10.1109/ICDM.2019.00011](https://doi.org/10.1109/ICDM.2019.00011)]
- [119] Wang HW, Wang RJ, Wen C, Li SH, Jia YT, Zhang WN, Wang XB. Author name disambiguation on heterogeneous information network with adversarial representation learning. In: Proc. of the 34th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. New York: AAAI, 2020. 238–245. [doi: [10.1609/aaai.v34i01.5356](https://doi.org/10.1609/aaai.v34i01.5356)]
- [120] Liu MP, Zhu MY, Wang XY, Ma GF, Yin JW, Zheng XL. ECHO-GL: Earnings calls-driven heterogeneous graph learning for stock movement prediction. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 13972–13980. [doi: [10.1609/aaai.v38i12.29305](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i12.29305)]
- [121] Liu R, Hu YF, Ren Y, Yin X, Li HZ. Emotion rendering for conversational speech synthesis with heterogeneous graph-based context modeling. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 18698–18706. [doi: [10.1609/aaai.v38i17.29833](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i17.29833)]
- [122] Pu RL, Li Y, Zhao J, Wang SG, Li DY, Liao J, Zheng JX. A joint framework with heterogeneous-relation-aware graph and multi-channel label enhancing strategy for event causality extraction. In: Proc. of the 38th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI, 2024. 18879–18887. [doi: [10.1609/aaai.v38i17.29853](https://doi.org/10.1609/aaai.v38i17.29853)]

- [123] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, Uszkoreit J, Jones L, Gomez AN, Kaiser Ł, Polosukhin I. Attention is all you need. In: Proc. of the 31st Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017. 6000–6010.
- [124] Dong Z, Pei MT. Cross-modality face retrieval based on heterogeneous hashing network. Chinese Journal of Computers, 2019, 42(1): 73–84 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.11897/SP.J.1016.2019.00073](https://doi.org/10.11897/SP.J.1016.2019.00073)]
- [125] Wang K, Shen WZ, Yang YY, Quan XJ, Wang R. Relational graph attention network for aspect-based sentiment analysis. In: Proc. of the 58th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics. ACL, 2020. 3229–3238. [doi: [10.18653/v1/2020.acl-main.295](https://doi.org/10.18653/v1/2020.acl-main.295)]
- [126] Han ZY, Xu FL, Shi JH, Shang Y, Ma HR, Hui P, Li Y. Genetic meta-structure search for recommendation on heterogeneous information network. In: Proc. of the 29th ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. ACM, 2020. 455–464. [doi: [10.1145/3340531.3412015](https://doi.org/10.1145/3340531.3412015)]
- [127] Ding YH, Yao QM, Zhao H, Zhang T. DiffMG: Differentiable meta graph search for heterogeneous graph neural networks. In: Proc. of the 27th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2021. 279–288. [doi: [10.1145/3447548.3467447](https://doi.org/10.1145/3447548.3467447)]
- [128] Li C, Xu H, He K. Differentiable meta multigraph search with partial message propagation on heterogeneous information networks. In: Proc. of the 37th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. Washington: AAAI, 2023. [doi: [10.1609/aaai.v37i7.26026](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i7.26026)]
- [129] Li C, Xu H, He K. Meta-multigraph search: Rethinking meta-structure on heterogeneous information networks. Knowledge-based Systems, 2024, 289: 111524. [doi: [10.1016/j.knosys.2024.111524](https://doi.org/10.1016/j.knosys.2024.111524)]
- [130] Yuan H, Yu HY, Gui SR, Ji SW. Explainability in graph neural networks: A taxonomic survey. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 45(5): 5782–5799. [doi: [10.1109/TPAMI.2022.3204236](https://doi.org/10.1109/TPAMI.2022.3204236)]
- [131] Karval R, Singh KN. Catching silent failures: A machine learning model monitoring and explainability survey. In: Proc. of the 2023 OITS Int'l Conf. on Information Technology. Raipur: IEEE, 2023. 526–532. [doi: [10.1109/OCIT59427.2023.10431343](https://doi.org/10.1109/OCIT59427.2023.10431343)]
- [132] Yu DJ, Wang XL, Xiong Y, Shen XD, Wu RZ, Wang DJ, Zou ZN, Xu GD. MHANER: A multi-source heterogeneous graph attention network for explainable recommendation in online games. ACM Trans. on Intelligent Systems and Technology, 2024, 15(4): 85. [doi: [10.1145/3626243](https://doi.org/10.1145/3626243)]
- [133] Tang JB, Yang YH, Wei W, Shi L, Su LX, Cheng SQ, Yin DW, Huang C. GraphGPT: Graph instruction tuning for large language models. In: Proc. of the 47th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Washington: ACM, 2024. 491–500. [doi: [10.1145/3626772.3657775](https://doi.org/10.1145/3626772.3657775)]
- [134] Liu H, Feng JR, Kong LC, Liang NY, Tao DC, Chen YX, Zhang MH. One for all: Towards training one graph model for all classification tasks. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Learning Representations. Vienna, 2024.
- [135] Wang FY, Zhu GH, Yuan CF, Huang YH. LLM-enhanced cascaded multi-level learning on temporal heterogeneous graphs. In: Proc. of the 47th Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Washington: ACM, 2024. 512–521. [doi: [10.1145/3626772.3657731](https://doi.org/10.1145/3626772.3657731)]
- [136] Wang X, Lu YF, Shi C, Wang RJ, Cui P, Mou S. Dynamic heterogeneous information network embedding with meta-path based proximity. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2022, 34(3): 1117–1132. [doi: [10.1109/TKDE.2020.2993870](https://doi.org/10.1109/TKDE.2020.2993870)]
- [137] Bian RR, Koh YS, Dobbie G, Divoli A. Network embedding and change modeling in dynamic heterogeneous networks. In: Proc. of the 42nd Int'l ACM SIGIR Conf. on Research and Development in Information Retrieval. Paris: ACM, 2019. 861–864. [doi: [10.1145/3331184.3331273](https://doi.org/10.1145/3331184.3331273)]
- [138] Fard AM, Bagheri E, Wang K. Relationship prediction in dynamic heterogeneous information networks. In: Proc. of the 41st European Conf. on Information Retrieval. Cologne: Springer, 2019. 19–34. [doi: [10.1007/978-3-030-15712-8_2](https://doi.org/10.1007/978-3-030-15712-8_2)]
- [139] Yang LW, Xiao ZB, Jiang W, Wei Y, Hu Y, Wang H. Dynamic heterogeneous graph embedding using hierarchical attentions. In: Proc. of the 42nd European Conf. on Information Retrieval. Lisbon: Springer, 2020. 425–432. [doi: [10.1007/978-3-030-45442-5_53](https://doi.org/10.1007/978-3-030-45442-5_53)]
- [140] Xue HS, Yang LW, Jiang W, Wei Y, Hu Y, Lin Y. Modeling dynamic heterogeneous network for link prediction using hierarchical attention with temporal RNN. In: Proc. of the 2020 European Conf. on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Ghent: Springer, 2020. 282–298. [doi: [10.1007/978-3-030-67658-2_17](https://doi.org/10.1007/978-3-030-67658-2_17)]
- [141] Yuan CY, Li JC, Zhou W, Lu YJ, Zhang XD, Hu SL. DyGCN: A dynamic heterogeneous graph convolutional network to learn users' dynamic preferences for information diffusion prediction. In: Proc. of the 2020 European Conf. on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Ghent: Springer, 2020. 347–363. [doi: [10.1007/978-3-030-67664-3_21](https://doi.org/10.1007/978-3-030-67664-3_21)]

附中文参考文献:

- [4] 葛尧, 陈松灿. 面向推荐系统的图卷积网络. 软件学报, 2020, 31(4): 1101–1112. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/5928.htm> [doi: [10.1109/TPAMI.2022.3204236](https://doi.org/10.1109/TPAMI.2022.3204236)]

- [10.13328/j.cnki.jos.005928]
- [27] 石川, 王睿嘉, 王骕. 异质信息网络分析与应用综述. 软件学报, 2022, 33(2): 598–621. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6357.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006357]
- [28] 赵港, 王千阁, 姚烽, 张岩峰, 于戈. 大规模图神经网络系统综述. 软件学报, 2022, 33(1): 150–170. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6311.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006311]
- [42] 邝睿, 袁冠, 孟凡荣, 王森章, 乔少杰, 王志晓. 多视图对比增强的异构图结构学习方法. 软件学报, 2023, 34(10): 4477–4500. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6883.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006883]
- [64] 宋凌云, 刘至臻, 张炀, 李战怀, 尚学群. 基于异构图中多层次图结构的级联图卷积网络. 软件学报, 2024, 35(11): 5179–5195. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7051.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.007051]
- [66] 张程东, 王绍卿, 刘玉芳, 郑顺, 孙福振. 采用新型元路径的异构图表示学习方法. 计算机科学与探索, 2023, 17(7): 1680–1689. [doi: 10.3778/j.issn.1673-9418.2202014]
- [70] 孟祥福, 温晶, 李子函, 纪鸿樟. 多重注意力指导下的异构图嵌入方法. 智能系统学报, 2023, 18(4): 688–698. [doi: 10.11992/tis.202204006]
- [89] 蒋云良, 王青朋, 张雄涛, 黄旭, 申情, 饶佳峰. 基于门控双层异构图注意力网络的半监督短文本分类. 模式识别与人工智能, 2023, 36(7): 602–612. [doi: 10.16451/j.cnki.issn1003-6059.202307003]
- [124] 董震, 裴明涛. 基于异构哈希网络的跨模态人脸检索方法. 计算机学报, 2019, 42(1): 73–84. [doi: 10.11897/SP.J.1016.2019.00073]



李亚聪(2001—), 男, 硕士生, CCF 学生会员, 主要研究领域为图结构数据挖掘.



刘聰(1990—), 男, 博士, 教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为流程挖掘, 业务流程管理, 人工智能.



刘皓冰(1997—), 男, 博士, 讲师, CCF 专业会员, 主要研究领域为数据挖掘, 深度学习.



朱燕民(1980—), 男, 博士, 教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为数据挖掘, 人工智能, 移动计算.



蒋若冰(1988—), 女, 博士, 副教授, CCF 专业会员, 主要研究领域为智能物联网, 移动计算, 无线感知.