

# 基于关系嵌入的异质图神经网络链接预测模型

龙伟<sup>1,2</sup>, 张明蓝<sup>1,2</sup>, 韩敏<sup>1,2</sup>

(1. 西南交通大学 计算机与人工智能学院, 成都 610031;

2. 制造业产业链协同与信息化支撑技术四川省重点实验室, 成都 610031)

**摘要:** 异质图链接预测任务是一个具有挑战的任务; 通过异质图神经网络可以学习异质图节点的节点表示, 并基于链接端点的节点表示进行链接预测; 基于元路径的异质图神经网络往往不能兼顾效率和性能, 而传统的基于关系的异质图模型难以处理复杂的关系抑或不能充分学习异质图中的类型信息, 因此提出了一种简单、轻量的基于关系嵌入的异质图神经网络链接预测模型 LightREGNN; 使用可学习的关系嵌入表征图中的异质类型信息, 并采用 TTPP 模型结构从而缓解模型退化问题; 还采用了跳跃链接, L2 归一化等方法进一步提升模型性能; 通过可靠的实验表明, 提出的 LightREGNN 在异质图链接预测任务上相较于经典的基于节点表示的异质图链接预测模型有着更好的表现; 平衡了模型的效率和性能, 能够成为异质图链接预测任务上一个合适的候选模型。

**关键词:** 图神经网络; 链接预测; 异质图; 异质网络; 关系嵌入

## Heterogeneous Graph Neural Network Link Prediction Model Based on Relational Embedding

LONG Wei<sup>1,2</sup>, ZHANG Minglan<sup>1,2</sup>, HAN Min<sup>1,2</sup>

(1. School of Computing and Artificial Intelligence, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China;

2. Manufacturing Industry Chains Collaboration and Information Support Technology Key Laboratory of  
Sichuan Province, Chengdu 610031, China)

**Abstract:** It is a challenge for predicting heterogeneous graph links. Heterogeneous graph neural networks (HGNNs) are used to learn the representations of heterogeneous graph nodes, and to predict links based on the representations of the nodes at the endpoints of those links. However, HGNNs based on meta paths often cannot adequately balance efficiency and performance, and traditional relation-based heterogeneous graph models are difficult to process complex relations or to fully learn and leverage the type information embedded in heterogeneous graphs. To address these limitations, a simple light-weight HGNN link prediction model LightREGNN based on relation embedding is proposed, which utilizes learnable relationship to embed heterogeneous type information in representation graph. The TTPP model is used to effectively alleviates the model degradation. Moreover, the model incorporates innovative strategies such as jumping links and L2 normalization to further enhance its performance. Reliable experiment shows that the proposed LightREGNN has notable advantages over the classical heterogeneous graph models in the link prediction of heterogeneous graphs balancing the efficiency and performance of the model, making it a suitable candidate for heterogeneous graph with an emphasis on link prediction tasks.

**Keywords:** graph neural networks; link prediction; heterogeneous graphs; heterogeneous network; relation Embedding

## 0 引言

链接预测是图挖掘的一项基本任务, 其目的是依据

已观察到的图预测节点之间缺失或者潜在的链接。链接预测在推荐系统、知识图、社交网络和生物信息学等诸多领域都有应用<sup>[1-7]</sup>。图神经网络 (GNN, graph neural

收稿日期: 2023-12-07; 修回日期: 2024-02-04。

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2023YFB3308600)。

作者简介: 龙伟(1999-), 男, 硕士研究生。

通讯作者: 韩敏(1970-), 女, 博士, 教授, 博士生导师。

引用格式: 龙伟, 张明蓝, 韩敏. 基于关系嵌入的异质图神经网络链接预测模型[J]. 计算机测量与控制, 2025, 33(3): 30

network) 是一种通过聚合图中领域信息以学习节点和边缘表示的深度学习模型。GNN 在各种图数据挖掘任务 (包括节点分类、链路预测和图分类) 中取得优异的表现, 是当前分析图数据的最佳选择。

根据在建模过程中是否考虑图中的节点类型和边类型, 可以将图分为同质图和异质图。针对异质图的链接预测任务是一个更具有挑战的任务, 因为其需要关注到不同节点类型和边类型的所组成的复杂结构信息。而且, 将针对同质图的图神经网络应用于异质图数据集上并不能取得令人满意的效果。因此研究人员提出了多种异构图神经网络用来解决异质图中的链接预测问题。这些异质图模型大致可以分为两类: 一类是基于元路径的异质图模型, 另一类是基于关系的异质图模型<sup>[8-15]</sup>。基于元路径的模型需要人工定义或者学习元路径从而保证信息的传输效率。但是人工定义往往需要更加专业的先验知识, 通过模型学习元路径又往往带来更大的计算开销。当前基于关系的模型同样存在自身的缺陷。以 RGCN<sup>[11]</sup> (Relational Graph Convolutional Network) 为代表的基于关系的异质图模型, 通常需要对不同的关系构建不同的模块分别进行处理。当关系的复杂度会影响其模型的复杂度, 进而导致当关系较为复杂时, 该类模型效率较低。

最近 simple-HGN<sup>[15]</sup> 进一步探索了同质图模型在异质图上的应用, 并提出了异质图基准 (HGB)。simple-HGN 使用一个关系嵌入编码边的类型从而将异质图问题转为一个同质图问题, 其使用关系嵌入与 GAT 结合以学习异质图中各个节点不同边类型不同邻居的重要性。但是 simple-HGN 的消融实验证明关系嵌入并没有取得令人期待的作用。关系嵌入对于模型最终效果提升不大, 这显然说明 simple-HGN 并没有学习到更多的异质类型信息。为充分挖掘关系嵌入对于异质信息的表达能力, 本文对 simple-HGN 进行了消融实验, 在 simple-HGN 的公式中去掉了节点特征部分, 仅仅通过关系嵌入学习邻居节点重要性。发现其相较于 simple-HGN 在链接预测任务上有更好的表现。这说明仅仅通过关系嵌入就能够有效的学习异质图中的类型信息。

此外, AIR (Adaptive Initial Residual)<sup>[16]</sup> 提供了一个认知 GNN 模型的新视角, 其将一个 GNN 层卷积操作分解为两个独立的操作, 传播 (P, Propagation) 和转换 (T, Transformation)。AIR 基于该视角将 GNN 的架构初步分为 TTPP、PPTT、PTPT3 种类型。在同质图链接预测任务上, GNAE<sup>[17]</sup> (Graph Normalized AutoEncoder) 使用基于 APPNP 的 TTPP 结构取得了 SOTA (State of the Art) 的效果, 在与链接预测的高度相关的推荐任务上基于 TTPP 结构的 LightGCN 同样

有着不错的表现, 这说明 TTPP 架构在链接预测有着其优势。

受 simple-HGN 和 GNAE 的启发, 本文旨在基于关系嵌入构建一个针对异质图链接预测任务的 TTPP 结构异质图神经模型。具体而言本文提出了一种简单、轻量级的基于关系嵌入的链接预测模型即 LightREGNN。LightREGNN 主要有以下几个创新点: (1) 利用关系嵌入学习异质信息; (2) 使用密集连接来各层 GNN 之间的信息; (3) 对节点嵌入进行归一化处理, 从而降低孤立节点的影响; (4) 使用 TTPP 结构能够有效控制 T 操作过多带来的模型退化问题。

## 1 异质图链接预测相关工作

最开始研究人员使用启发式方法解决链接预测问题。比如基于相似的节点更容易链接起来同质性机制<sup>[18]</sup>。这些启发式方法都是从节点连通性进行考虑的。共邻指数 (CN, common neighbors) 的评分取决于的共同邻居的数量。Adamić-Adar 指数 (AA) 认为度越大的邻居节点对目标节点的贡献越小<sup>[19]</sup>。启发式方法在定义之初便对数据知识进行强行假设, 这也就导致启发式方法并不能很好的处理现实世界中多种多样的链接预测数据集。此外, 启发式方法并不能有效利用图中节点特征或者边特征。

基于图神经网络的链接预测方法是新一代链接预测方法。图神经网络作为一种针对非欧几里得空间数据的新颖的神经网络, 在图数据挖掘领域取得了显著的成效。图神经网络通过在链接问题时有两种解决思路, 第一种思路是通过学习到链接的两个端点的表示送入一个解码器中从而进行判断链接是否存在<sup>[20]</sup>。第二种策略是通过提取目标链接周围的子图, 并对子图的特征进行分类进而判断链接是否存在如 SEAL<sup>[21]</sup>、Walkpool<sup>[22]</sup>、MV-HRE<sup>[23]</sup> 等模型。当前, 第二种链接预测方法尽管在部分数据集中表现良好, 但是其往往带来更大的时间开销。为了能够在比较小的资源开销下取得比较好的效果, 有必要对第一种链接预测方法进行更多的探索。第一种方法的性能往往取决于编码节点表示的图神经网络部分。

为了有效学习到异质图的节点表示, 需要使用异质图神经网络。一般而言, 异质图神经网络通常是通过两种方式学习异质信息。第一种方式是通过基于元路径来学习异质信息。HAN 通过手动挑选的元路径选择邻居并丢掉中间节点从而将异质图问题变为多个同质图问题进行处理<sup>[8]</sup>。MAGNN 则是在 HAN 的基础上进一步考虑到了元路径上的中间节点<sup>[9]</sup>。GTN 通过模型基于边类型去学习元路径, 之后利用 GCN 获得图中节点表

示<sup>[10]</sup>。MV-HRE<sup>[23]</sup>通过融合元路径信息、社区上下文、邻域子图上下文这几个视图的信息从而在异质图链接预测任务上取得了很好的效果，但是这也意味更多的资源开销。就目前而言，基于元路径的 HGNN 在性能和效率方面并不能做到很好的平衡。

另外一种方式即基于关系的 HGNNs。基于关系的 HGNN 主要是通过对比类型赋予权重从而对同质图模型进行拓展。RGCN 通过边缘类型对图进行分组，在多种关系的子图下对学习到节点的多个特征，并通过注意力的方式进行特征聚合。HGT 通过考虑关系类型的 Transformer 编码器学习每个边的权重，从而通过边权重和和邻居节点对目标节点特征进行更新<sup>[13]</sup>。simple-HGN 在 GAT 基础上通过加入可学习的关系嵌入从而拓展 GAT 对异质信息的学习能力，并在当时取得 SO-TA 的效果<sup>[15]</sup>。但是在 simple-HGN 的消融实验中可以看到关系嵌入并没有在最后的结构中起到比较大的作用，这说明基于关系嵌入的异质图模型上仍然有着较大的探索空间。因此有必要就关系嵌入在异质图上链接预测任务上的应用做更多的尝试。基于该想法本文提出一种轻量的基于关系嵌入的异质图链接预测模型，并在多个数据集上取得了比较优秀的效果。

## 2 异质图链接预测相关理论

### 2.1 异质图的定义

异质图可用  $G = \{V, E, \phi, \psi\}$  表示，其中  $V$  代表结点的集合，而  $E$  代表边的集合。节点  $v$  的类型由  $\phi(v)$  表示，边  $e$  的类型由  $\psi(e)$  表示。节点类型的集合可由  $T_v = \{\phi(v) : \forall v \in V\}$  表示，边类型的集合由  $T_e = \{\psi(e) : \forall e \in E\}$  表示。如果图中  $|T_v| = |T_e| = 1$ ，那么该图即为同质图。

### 2.2 构建链接预测问题

对于一个已观察到的图  $G^\circ = \{V, E^\circ, \phi, \psi\}$ ，式中  $V^\circ$  和  $E^\circ$  分别代表当前观察到的节点的集合和边集合。观察到的边集合仅仅只是图中真实链接集合  $E^*$  的一个子集。假设有  $E^*$  候选集为其中元素是并没有在  $E^\circ$  出现过的缺失链接。 $E^*$  候选集分为真链接（在  $E^*$  中出现过）和假链接（不在  $E^*$ ）。链接预测的任务就是基于  $G$ 。（ $G^\circ \subset G$ ）训练一个分类器（ $\Pi: V \times V \rightarrow \{\text{True}, \text{False}\}$ ），能够对  $E^*$  中的缺失链接进行准确的分类。

### 2.3 GCN 与 APPNP

图卷积网络（GCN）作为图神经网络（GNN）的一个基础模型，已经在多个领域显示出其强大的性能和潜力。具体来说，GCN 模型通过一种特殊的层次化结构，在图数据上实现深度学习算法。它的核心思想是在图结构数据上推广传统的卷积神经网络（CNN）的概

念。GCN 模型中的每个节点都能够学习到自己的属性信息以及邻居的结构信息。这种学习方式是通过不断地聚合邻居节点的信息来实现的，每一次迭代都会将周围节点的信息通过特定的加权和聚合方式，结合节点自身的特征，得到节点更新后的表征。GCN 模型的更新公式为公式（1）：

$$H^{(l+1)} = \sigma(\tilde{A}H^{(l)}W^{(l)}) \quad (1)$$

式中， $\tilde{A} = \hat{D}^{-1/2} \hat{A} \hat{D}^{-1/2}$  是归一化后的邻接矩阵，这种归一化处理是为了平衡不同节点的度（即连接的数量），从而使得网络训练更加稳定。 $\hat{A} = A + I$  是添加自循环后的邻接矩阵。 $W^{(l)} \in R^{d_{in}^{(l)} \times d_{out}^{(l)}}$  是可学习的权重参数。 $H^l$  是第  $l$  层的输入，相应的  $H^{(l+1)}$  是第  $(l+1)$  层的输入。一般而言 GNN 中上一层的输出即是下一层的输入。第一层的输入  $H^{(0)} = X$  即节点特征。 $\sigma$  非线性激活函数。

GCN 的每个节点在每一层只能接受到其一阶邻居的信息。为了让每个节点能够受到更远邻居的影响，通常可以堆叠多层 GCN 层，这样通过多次迭代，节点能够接收到更广泛的邻域信息。但是，这样的设计也带来了所谓的“过平滑”问题，当节点收集太多层的邻居信息时，不同节点的特征表示可能会变得越来越相似，从而导致模型性能下降。

AIR 提出可以将 GCN 卷积操作分为传播（ $P$ ）和变换（ $T$ ）两个独立的操作，如公式（2）（3）所示：

$$\text{Propagation} \sim (H) = P(H) = \tilde{A}H \quad (2)$$

$$\text{Transformation} \sim (H) = T(H) = \sigma(HW) \quad (3)$$

AIR<sup>[16]</sup>中根据图神经网络中（ $T, P$ ）的组织方式分为 3 种结构分别是 PTPT, PPTT, 和 TTPP。PTPT 中  $P$  和  $T$  操作是纠缠在一起的，每做一次  $P$  就要做一次  $T$  操作。而 PPTT, 和 TTPP 中  $P$  和  $T$  操作是分离的。AIR 中的指出过多的  $T$  的是导致深度 GNNs 性能下降的主要原因。

GCN 是一种典型的 PTPT 结构的 GNN 模型。GCN 中每层中先做一次  $P$  操作和再做了一次  $T$  操作，可以表示为如下公式（4）：

$$\text{Graph Convolution} \sim (H) = T(P(H)) \quad (4)$$

APPNP 是一种典型的 TTPP 结构的图神经网络，其在链接预测任务上结合 L2 归一化可以表现优秀的性能<sup>[25,12]</sup>。APPNP 通常使用简单的 MLP 作为  $T$  操作，在此之后再对输出的  $H$  做多次的  $P$  操作。其  $P$  操作的更新公式为公式（5）：

$$H^{(l+1)} = (1 - \alpha) \tilde{A}H^{(l)} + \alpha H^{(0)} \quad (5)$$

$\alpha$  是控制  $P$  中保留初始节点特征的概率。

### 2.4 GAT 与 simple-HGN

GAT<sup>[26]</sup>同样是图神经网络领域的一个经典模型。

GAT和只能适用于直推式学习场景的GCN不同,能够支持归纳式学习。传统的图神经网络(GNN)通常会赋予邻居节点均等的重要性,然而GAT认为不同的邻居对于中心节点的影响力是不同的,并通过注意力机制来学习这种差异化的重要性。GAT的核心在于引入了一个注意力函数,用于计算节点间的权重。这个权重不仅取决于相邻节点的特征,而且还取决于节点本身的特征。在GAT中,节点 $j$ 对节点 $i$ 的权重,即注意力系数 $\alpha_{ij}$ ,是通过一个共享的注意力机制来学习的,该机制由可训练的权重矩阵 $W$ 和注意力向量 $a$ 组成。

所以GAT通过注意力函数学习到不同边 $\langle i, j \rangle$ 的权重 $\alpha_{ij}$ ,进而所有的邻居节点进行加权求和从而对图中节点特征进行更新。GAT中节点 $j$ 对节点 $i$ 的权重公式为得到权重后的节点特征更新公式为:(这里为简单起见,这里以及后面的权重计算公式均省略了层标 $(l)$ )。公式(6)为权重计算公式,公式(7)为消息聚合公式:

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(W h_i \parallel W] h_j)]\}}{\sum_{k \in N_i} \exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(W h_i \parallel W] h_k)]\}} \quad (6)$$

$$h'_i = \sigma\left(\sum_{j \in N_i} \alpha_{ij} W h_j\right) \quad (7)$$

式中, $N_i$ 代表节点 $i$ 的邻居节点。 $a$ 和 $W$ 是可学习权重。这种机制允许网络动态地调整不同邻居节点特征的权重,使得模型能更好地捕捉图结构中的重要信息。此外,GAT还引入了多头注意力机制以增强模型的能力。通过并行地运行多个注意力机制,每个机制关注不同的信息,然后将这些信息聚合起来,以提供更丰富的节点表示。在实际应用中,这可以通过并行地运算不同的线性变换和相应的注意力机制来实现,最后将得到的多个头的输出拼接起来或者取平均,从而得到节点的最终特征表示。

simple-HGN为了使GAT能够学习到异质图上的类型信息,simple-HGN在GAT的基础上引入了边类型信息,从而拓展了GAT处理异质图的能力。simple-HGN将边类型也叫关系类型 $\psi(e) \in T_e$ 嵌入为一个 $d_i$ 维的向量 $r_{\psi(e)}^{(l)}$ ,之后将 $r_{\psi(e)}^{(l)}$ 融合到GAT的注意力计算公式中,从而得到考虑边类型的边权重 $\hat{\alpha}_{ij}$ 。simple-HGN具体注意力计算公式为公式(8):

$$\hat{\alpha}_{ij} = \frac{\exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(W h_i \parallel W h_j \parallel W r_{\psi(\langle i, j \rangle)})]\}}{\sum_{k \in N_i} \exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(W h_i \parallel W h_k \parallel W r_{\psi(\langle i, k \rangle)})]\}} \quad (8)$$

式中, $\psi(\langle i, j \rangle)$ 代表边 $\langle i, j \rangle$ 的边类型, $W r(l)$ 是可学习参数。

### 3 LightREGNN 模型

为了挖掘基于关系嵌入的异质图神经网络在异质图链接预测任务上的潜力,本文设计了一个简单轻量的异质图神经网络链接预测模型LightREGNN。通过对模型结构的精简和参数的优化,LightREGNN不仅减少了计算复杂度,还在链接预测任务上的表现超越了simple-HGN。

#### 3.1 LightREGNN 模型架构

LightREGNN基于架构。在操作中,仅仅使用了一层全连接层,之后没有使用激活函数。单次的操作是基于边类型嵌入的注意力计算公式计算边权重,之后基于边权重做邻居节点的加权求和。将操作重复做多次后即可完成节点特征的传播。在每层操作中的邻居节点加权求和过程中会做DropEdge操作。在完成多次操作后,使用密集连接将操作输出的节点特征和每次操作输出的节点特征均做归一化进行向量拼接,从而得到用于链接预测的节点嵌入。最后,本文将节点嵌入送入内积或者DistMult解码器中获得链接评分。LightREGNN模型整体架构如图1所示。

#### 3.2 基于关系嵌入的消息传递

LightREGNN的边权重计算公式,是基于边类型嵌入计算的,而GAT是基于源节点和目标节点特征计算。公式(9)为基于关系嵌入的边权重参数计算公式,公式(10)为节点特征更新公式:

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(r_{\psi(\langle i, j \rangle)})]\}}{\sum_{k \in N_i} \exp\{\text{LeakyReLU}[a^T(r_{\psi(\langle i, k \rangle)})]\}} \quad (9)$$

$$h'_i = \sum_{j \in N_i} \alpha_{ij} W h_j \quad (10)$$

式中, $N_i$ 代表节点 $i$ 的邻居节点, $a$ 是可学习权重, $\alpha_{ij}$ 代表边 $\langle i, j \rangle$ 的权重。

#### 3.3 归一化

$L_2$ 归一化在图神经网络中已经被证明能够有效抵抗图神经网络过平滑问题并且可以防止孤立节点学习嵌入特征接近零,从而优化链接预测模型的效果<sup>[17,27]</sup>。 $L_2$ 归一化公式如公式(11):

$$o_i = s \frac{h_i^{(L)}}{\|h_i^{(L)}\|} \quad (11)$$

每层输出的节点特征经过 $L_2$ 归一化后得到 $o_i$ 是经过拼接到最后节点嵌入。 $s$ 是可以设置的缩放参数。

#### 3.4 DropEdge

DropEdge<sup>[28]</sup>能够有效地缓解图神经网络模型的过拟合和过平滑问题。在每个epoch中,本文使用DropEdge随机使一定比例的边失活,从而提升模型效果。DropEdge可以表示为公式(12):

$$G^m = (V, M \odot E) \quad (12)$$

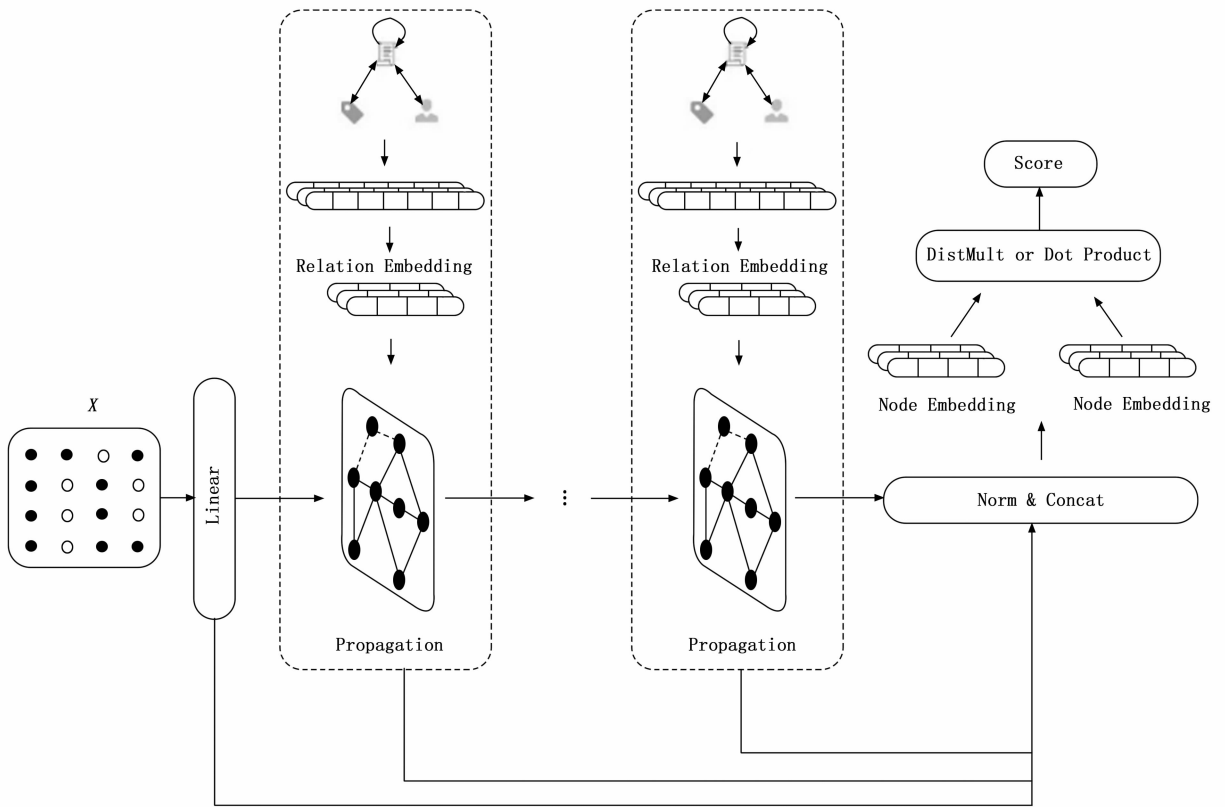


图 1 LightREGNN 模型框架图

其中： $M \in \{0, 1\}^{|E|}$  是边  $E$  的掩蔽向量， $G^m$  表示经过 DropEdge 数据增强后训练图。

### 4 实验与分析

本文基于 HGB 提供的异质图基准对 LightREGNN 进行测试，对 LightREGNN 的链接预测性能进行了对比实验。

#### 4.1 数据集

测试使用的数据集为 LastFM 数据集和的 PubMed。LastFM 是一个在线音乐网站，这里使用的 HetRec2011<sup>[29]</sup> 整理的子集。PubMed 是一个生物医学文献库，这里用的是 HNE<sup>[30]</sup> 整理的子集。下表是两个数据集的详细情况。

表 1 数据集的统计详情

	Nodes	Node Types	Edges	EdgeTypes	TargetLink
LastFM	20,612	3	141,521	3	user-artist
PubMed	63,109	4	244,986	10	disease-disease

在实验中，将 81% 的边作为训练集，9% 的边作为验证集，10% 作为测试集。对于测试集中的负边，本文既做了全图的随机采样又做了 2 跳邻居的采样。测试集中正边和负边的比例为 1:1。由于节点特征的预处理

方式不同会导致性能的差异。本文统一只使用目标节点类型的特征，而将使用独热向量代替其他节点特征。

#### 4.2 实验设置

由于链接预测任务可以认为是针对边的二分类任务。因此，本文使用 ROC-AUC 作为评估指标。实验取十次运行平均值作为最终结果。为了公平测试模型的性能，本文基于 HGB 的链接预测代码构建测试环境，保留了 HGB 有关数据处理与模型训练部分的代码，仅仅将模型替换为本文提出的 LightREGNN 模型，使用二元交叉熵作为模型的损失函数。

经过多次实验并调整模型参数，本文最终设置学习率 0.0005，DropEdge 为 0.4，训练迭代次数 epoch 为 40，BatchSize 为 8192。在模型的操作模块，设置全连接层层数为一层，在操作模块中在 LastFM 数据使用了 7 次操作，在 PubMed 数据集上使用了 5 次操作。

#### 4.3 实验结果

在经过反复测试训练后，得到了本文模型与基准模型在链接预测任务上的性能表现，详情见表 2。从实验中可以观察到本文提出的 LightREGNN 在 LastFM 和 PubMed 数据集上均取得了更好的效果。LightREGNN 相较于之前的最优的基于节点嵌入的链接预测模型 simple-HGN 至少提升了 1 个百分点。有趣的是 Light-

表2 链接预测性能对比实验结果

	两跳负采样		随机负采样	
	LastFM	PubMed	LastFM	PubMed
RGCN <sup>[11]</sup>	57.21±0.09	78.29±0.18	81.90±0.29	88.32±0.08
MAGNN <sup>[9]</sup>	56.81±0.05	-	76.50±0.21	-
HGT <sup>[13]</sup>	54.99±0.28	80.12±0.93	80.49±0.78	90.29±0.68
GCN <sup>[24]</sup>	59.17±0.31	80.48±0.81	84.71±0.1	86.06±1.23
GAT <sup>[26]</sup>	58.56±0.66	78.05±1.77	83.55±2.11	87.57±1.23
Simple-HGN <sup>[15]</sup>	67.59±0.23	83.39±0.39	91.04±0.22	91.40±0.30
LightREGNN	72.85±0.82	84.20±0.44	92.61±0.31	92.43±0.25

REGNN在LastFM两跳负采样取得了5个百分点的提升。针对此现象,可以对模型在不同类型数据集上的表现做进一步的探索。

#### 4.4 消融实验

从表3中可以看出,无论在负采样两跳邻居情况下还是随机负采样邻居,LightREGNN均取得了最优的评价指标。

表3 LightREGNN 消融实验

	两跳负采样	随机负采样
LightREGNN	72.85±0.82	92.61±0.31
w. o. relational embedding	67.32±0.05	89.27±0.48
w. o. L2 normalization	62.91±0.08	87.05±0.26
w. o. DropEdge	71.19±0.13	92.53±0.32

在消融的3个模块中归一化对于模型的影响最大,在两跳负采样下提升了9.94个百分点,在随机负采样下提升了5.56个百分点。关系嵌入同样对于链接预测性能有所影响,其在两跳和随机采样下分别提升了5.53、3.34个百分点。DropEdge相较于前面两个模型提升稍差,其主要对于两跳负采样有所提升,提升了1.66个百分点,而在随机负采样下几乎没有提示。从实验中可以看出关系嵌入能够学习到一定的异质图信息并有效提升模型的链接预测任务能力。

#### 5 结束语

本文提出了一种轻量有效的异质图链接预测模型LightREGNN。本文仅通过关系嵌入去学习异质图异质信息,并通过EdgeSoftmax分配每个节点的权重,结合L2归一化、密集连接、DropEdge等技术使LightREGNN在异质图链接预测任务上使用更小的模型的数量取得比前面更复杂的模型更好的效果。本文还使用了图神经网络结构分离中和操作,从而缓解模型退化问题。实验表明,基于关系嵌入的异质图模型是处理异质图任务的一种简单且有效的方案,有必要在异质图任务中对关系嵌入进行更多的尝试。首先,基于节点嵌入的链接预测模型相较于基于子图的链接预测模型仍然存

在一定的差距,结合关系类型嵌入与子图分类思路共同完成链接预测任务是可能的探索方向。其次,模型的可解释性是一个重要方向,研究者可以探索模型决策过程中关系嵌入的具体作用。此外,模型的泛化能力也是一个关键点,如何设计能够跨多个领域有效应用的通用链接预测模型,将是一个具有挑战性的任务。最后,随着图数据量的增加,如何在保证效率的同时处理大规模图数据,也是未来研究的一个重点。

#### 参考文献:

- [1] KUMAR A, SINGH S S, SINGH K, et al. Link prediction techniques, applications, and performance: A survey [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2020; 124289.
- [2] KOSASIH E E, BRINTRUP A. A machine learning approach for predicting hidden links in supply chain with graph neural networks [J]. *International Journal of Production Research*, 2021; 1-14.
- [3] 邓霄,徐文君,刘佳宜,等.基于知识表示学习的工业云机器人制造能力服务推荐方法[J].*计算机集成制造系统*, 2023, 29(3): 719-730.
- [4] 方祺娜,许小可.基于异质模体特征的社交网络链路预测[J].*电子科技大学学报*, 2022, 51(2): 274-281.
- [5] 刘晶,唐震,王晓茜,等.基于元学习的设备故障知识图谱构建及推理方法[J].*计算机集成制造系统*, 2023, 29(11): 3600-3613.
- [6] 杨东华,何涛,王宏志,等.面向知识图谱的图嵌入学习研究进展[J].*软件学报*, 2022, 33(9): 3370-3390.
- [7] 康世泽,吉立新,张建朋.一种基于图注意力网络的异质信息网络表示学习框架[J].*电子与信息学报*, 2021, 43(4): 915-922.
- [8] WANG X, JI H, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network [J]. *The world wide web conference*, 2019; 2022-2032.
- [9] FU X, ZHANG J, MENG Z, et al. MAGNN: metapath aggregated graph neural network for heterogeneous graph embedding [J]. 2020.

[10] YUN S, JEONG M, KIM R, et al. Graph transformer networks [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2019, 32.

[11] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks [C] // *The Semantic Web: 15th International Conference, ESWC 2018, Heraklion, Crete, Greece, June 3 - 7, 2018, Proceedings 15*. Springer International Publishing, 2018: 593 - 607.

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

[13] HU Z, DONG Y, WANG K, et al. Heterogeneous graph transformer [C] // *Proceedings of the Web Conference 2020*, 2020: 2704 - 2710.

[14] HONG H, GUO H, LIN Y, et al. An attention-based graph neural network for heterogeneous structural learning [C] // *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2020, 34 (4): 4132 - 4139.

[15] LV Q, DING M, LIU Q, et al. Are we really making much progress revisiting, benchmarking and refining heterogeneous graph neural networks [C] // *Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, 2021: 1150 - 1160.

[16] ZHANG W, SHENG Z, YIN Z, et al. Model degradation hinders deep graph neural networks [C] // *Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 2022: 2493 - 2503.

[17] AHN S J, KIM M H. Variational graph normalized autoencoders [C] // *Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management*, 2021: 2827 - 2831.

[18] MCPHERSON M, SMITH-LOVIN L, COOK J M. Birds of a feather: Homophily in social networks [J]. *Annual Review of Sociology*, 2001, 27 (1): 415 - 444.

[19] ADAMIC L A, ADAR E. Friends and neighbors on the web [J]. *Social Networks*, 2003, 25 (3): 211 - 230.

[20] KIPF T N, WELING M. Variational graph auto-encoders [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1611.07308, 2016.

[21] ZHANG M, CHEN Y. Weisfeiler-lehman neural machine for link prediction [C] // *Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 2017: 575 - 583.

[22] PAN L, SHI C, DOKMANIC I. Neural link prediction with walk pooling [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 2110.04375, 2021.

[23] MITRA A, VIJAYAN P, SINGH S R, et al. Revisiting link prediction on heterogeneous graphs with a multi-view perspective [C] // *2022 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM)*, IEEE, 2022: 358 - 367.

[24] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, 30.

[25] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1609.02907, 2016.

[26] GASTEIGER J, BOJCHEVSKI A, GÜNNEMANN S. Predict then propagate: Graph neural networks meet personalized pagerank [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1810.05997, 2018.

[27] VELICKOVIC P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1710.10903, 2017.

[28] RANJAN R, CASTILLO C D, CHELLAPPA R. L2-constrained softmax loss for discriminative face verification [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1703.09507, 2017.

[29] RONG Y, HUANG W, XU T, et al. Dropedge: Towards deep graph convolutional networks on node classification [J]. *ArXiv Preprint ArXiv*: 1907.10903, 2019.

[30] CANTADOR I, BRUSILOVSKY P, KUFLIK T. Second workshop on information heterogeneity and fusion in recommender systems (HetRec2011) [C] // *Proceedings of the Fifth ACM Conference on Recommender Systems*, 2011: 387 - 388.

[31] YANG C, XIAO Y, ZHANG Y, et al. Heterogeneous network representation learning: A unified framework with survey and benchmark [J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2020, 34 (10): 4854 - 4873.

(上接第 19 页)

[16] 余晓霞, 汤宝平, 魏 静, 等. 强背景噪声条件下自适应图卷积神经网络的航空发动机附件机匣故障诊断方法 [J]. *仪器仪表学报*, 2021, 41 (8): 78 - 86.

[17] 楚娜娜, 张曙光, 高艳蕾, 等. 基于 Simscape 模型的航空发动机系统安全性分析方法 [J]. *航空动力学报*, 2021, 36 (4): 885 - 896.

[18] 张 亮, 吴 闯, 唐希浪, 等. 航空发动机故障实体识别方法及应用 [J]. *空军工程大学学报 (自然科学版)*, 2022, 23 (2): 1 - 6.

[19] 黄姗姗, 李志农. 基于高密度小波变换的航空发动机滚动轴承故障诊断方法 [J]. *轴承*, 2023 (2): 19 - 25.

[20] 蔡舒妤, 闫子砚. 基于改进 YOLOv4 的航空发动机小目标损伤检测研究 [J]. *航空动力学报*, 2023, 38 (2): 445 - 452.