《Graph Transformer Networks》

《图转换网络》

**摘要：**

1. **本文的背景：**当前，大多数GNN存在一个局限性：只能处理同构图。然而，生活中大多数应用场景都是异构的，传统的GNN并不能处理这种关系，虽然有些做法是忽略这些节点和边的类型，将它们看成是同构图来进行处理，但这会丧失了原图中的一些信息。此外，现有的一些处理异构图的方法是采用**元路径**，即手工将异构图转化为由元路径定义的同构图，然后再使用传统的GNN方法进行处理，但这种手工设计元路径的方式费时又费力。因此，为了解决上述问题，本文作者提出了一种以端到端的方式学习异构图上节点表示的新型框架。
2. **本文的贡献：**提出了一种新型的图神经网络框架GTN——Graph Transformer Network，通过识别有用的元路径和多跳连接来学习图上的有效节点表示；表明图的生成是可解释的，GTN模型能够提供用于预测的有效元路径。
3. **主要创新点：**采用了端到端的方式对异构图问题进行处理，避免了人工设计；利用了多卷积通道的方式并行考虑了多种类型的元路径。
4. **实验结果：**实验有力证明了GTN模型学习到的节点表示的有效性，在与异构图的所有三个基准节点数据分类问题中额外使用领域知识的最新方法相比，GTN取得了最佳性能。

**同构图与异构图：**

同构图：仅具有一种类型的节点和边的标准图。

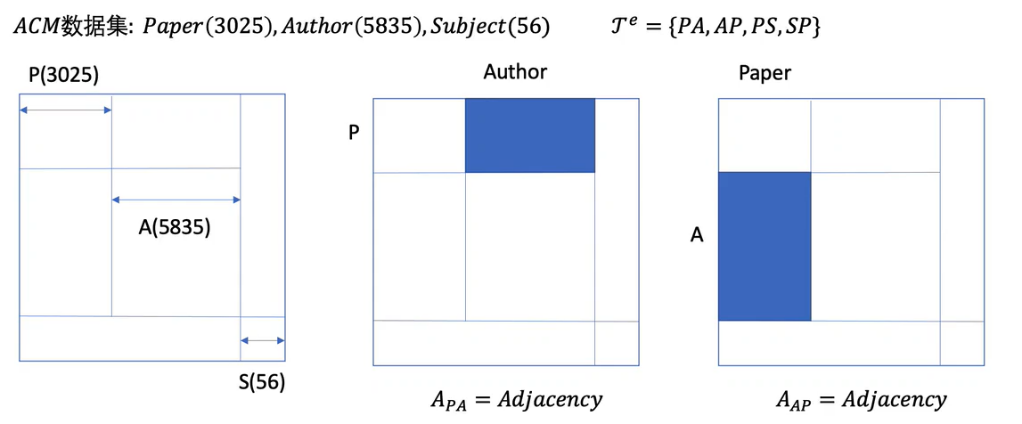
异构图：具有多种类型的节点和边的标准图。例如，引用网络具有多种类型的节点（如作者、论文、会议）和由它们之间的关系定义的边（如作者—论文、论文—会议）。

**相关定义：**

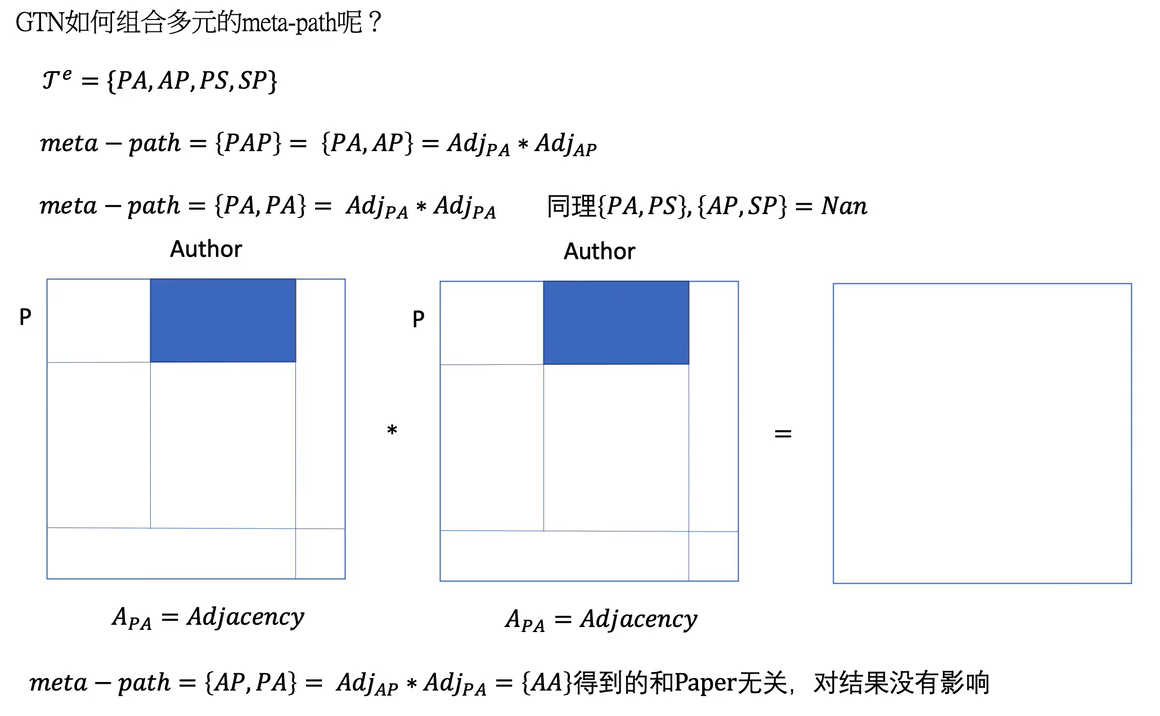
1. 图表示为，其中代表节点的集合，代表可观测的边的集合。
2. 和分别表示节点的种类和边的种类集合。
3. 异构图表示为邻接矩阵的集合，其中，代表其中一个邻接矩阵（为节点的数目），而则代表节点到节点存在第类型的边。此外，也可以写成张量形式。
4. 节点的特征矩阵定义为，其中表示节点特征的维度。
5. 元路径用来表示，它在异构图上由一些异构边连接而成，即：

其中，表示第条边的类型。

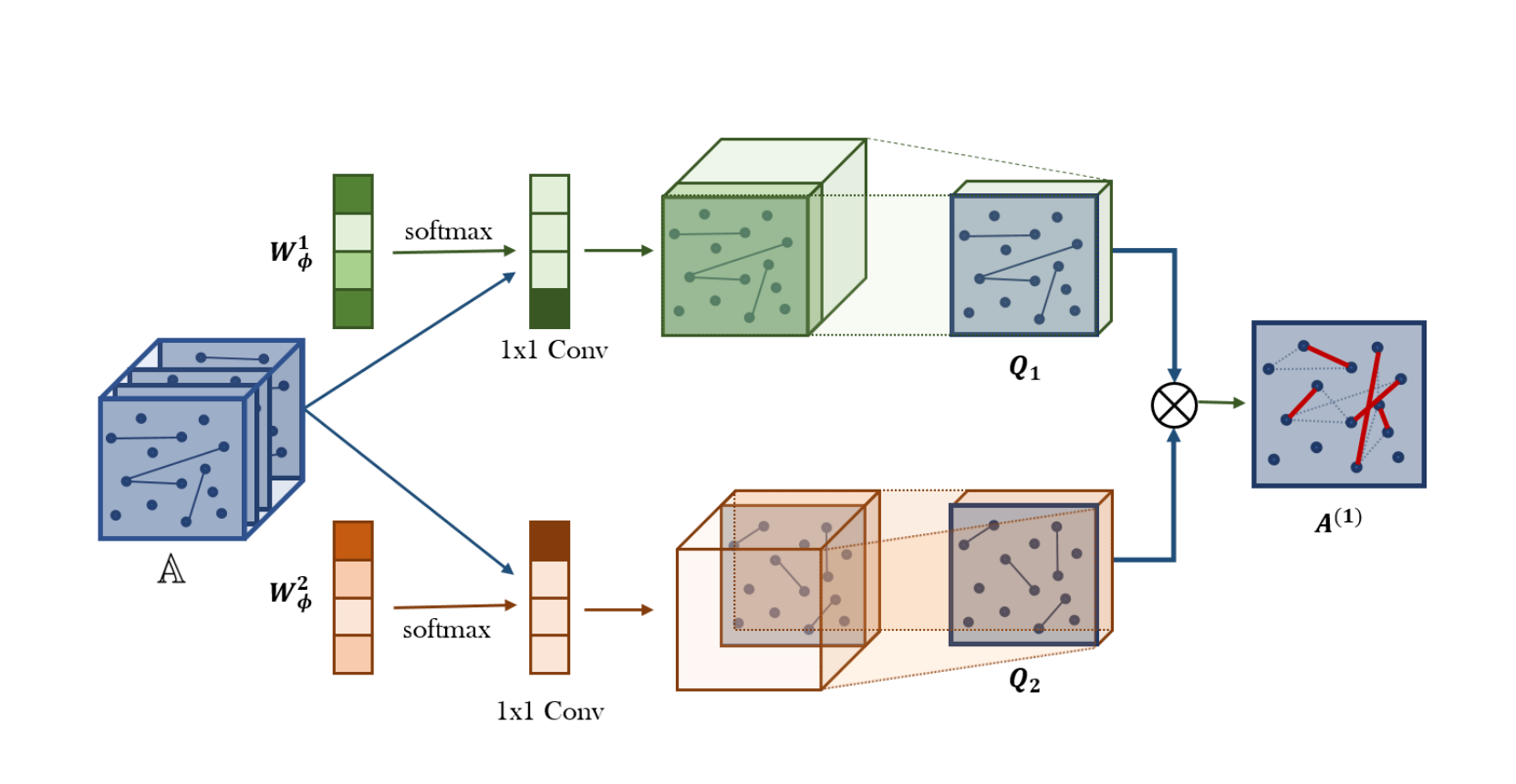
1. 元路径（复合关系为）的邻接矩阵可通过邻接矩阵的乘法来得到：



**如何组合多元的元路径：**



**元路径的生成实现：**



上图表示的是GT(Graph Transformer)层，它首先从张量（每一片代表一种边类型）中用权重参数来重新选择邻接矩阵（即边类型），而权重参数分配的方式可以理解成对进行卷积。注意，卷积后的两个矩阵是两个不同的图结构，表示为和。然后，我们再将这两个矩阵组合成新的图结构（即运用矩阵乘法）：

如果用具体的数学公式进行表示，则表达如下：

1）选择的可以表示为：

其中，表示异构图邻接矩阵的集合，表示权重参数。

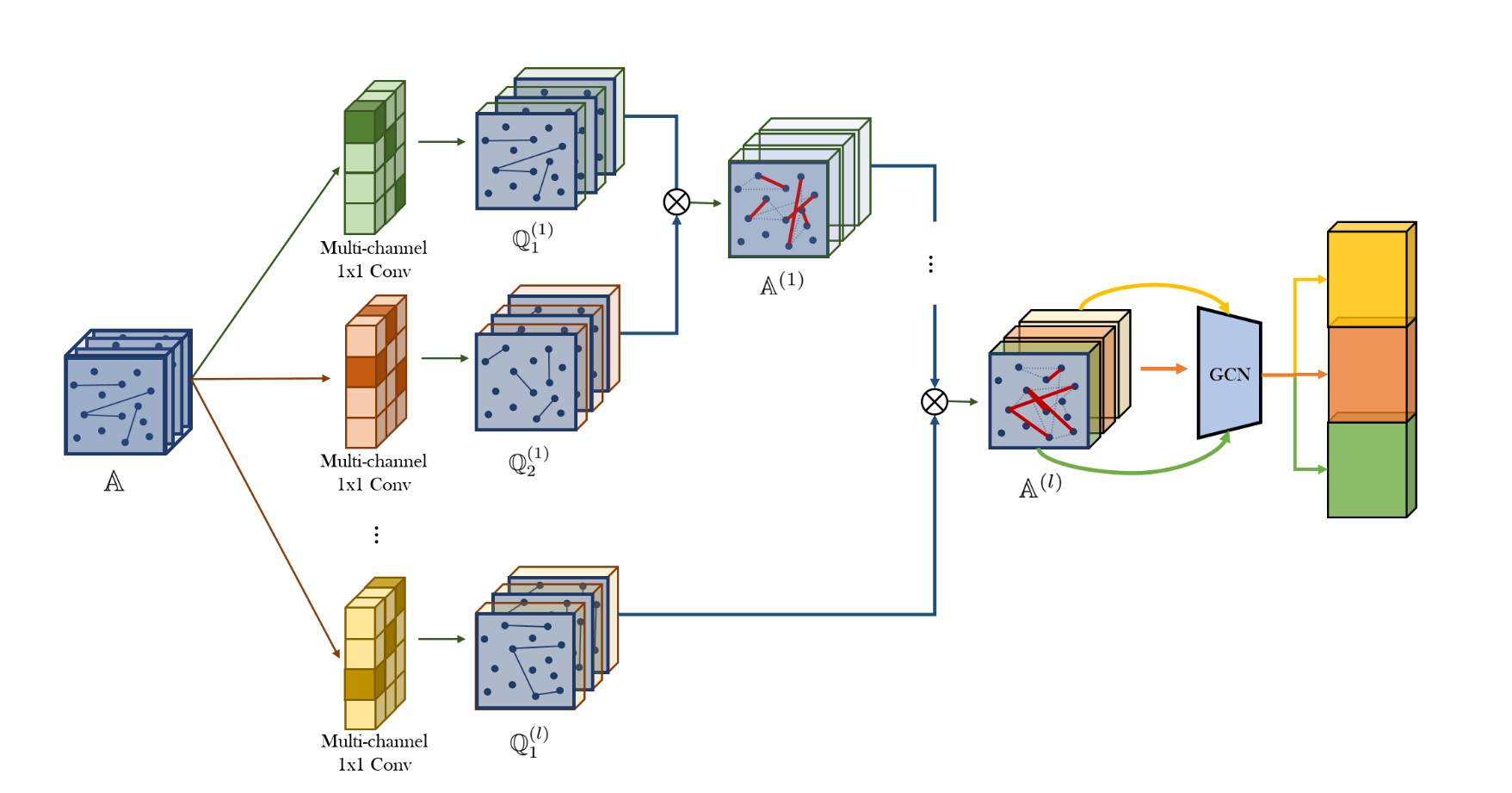
2）每一个可进一步表示成：

其中，是边的类型集合，是边第种类型在第层的权重。

3）举例，如上图所示：

假设，则。若，（已经进行过归一化），则：

4）如果不是仅分两个，而是更多个，则最后得到的结果可表示为：



因此，个GT层的堆叠可以学习长度为的元路径图结构，如上图所示的GTN结构。但这种构造存在一个问题——添加GT层总是在增加元路径的长度，并不允许原始边的出现。而在某些应用中，长元路径和短元路径都很重要。

因此，为了学习包含原始边的短元路径和长元路径，我们将单位矩阵包含在了中，即。更简单来说，在利用了这个技巧后我们能够使学习到任意长度的元路径，且最高为，即将个GT层进行堆叠。

**Graph Transformer Networks：**

为了同时考虑多种类型的元路径，我们可以将上图中卷积的输出通道设为，于是这些GT层就能产生一组元路径，即中间邻接矩阵和变成了邻接张量和。（实验表明通过多个不同的图结构学习不同的节点表示是有益的。）

然后，在个GT层堆栈之后，我们再将应用于元路径张量的每个通道上，并将多个节点的表示拼接起来。因此，最后生成的嵌入向量可以表示为：

其中，表示拼接操作，表示通道数量，表示张量的第个通道，是的度矩阵，是训练权重矩阵，表示特征矩阵。

**实验及结果：**

本论文通过实验和分析回答了以下研究问题：

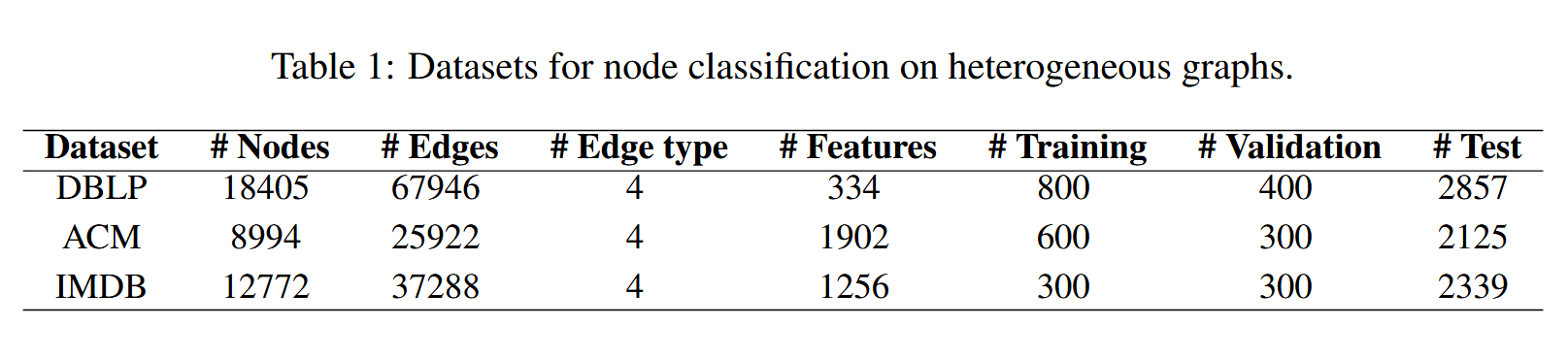
Q1. GTN生成的新图结构对学习节点表示是否有效？

Q2. GTN能否根据数据集自适应地产生可变长度的元路径？

Q3. 如何从GTN生成的邻接矩阵来解释每个元路径的重要性？

数据集：

实验使用了两个文献网络数据集DBLP和ACM，以及一个电影数据集IMDB。 而表1中显示了实验中使用的异构图的统计信息。

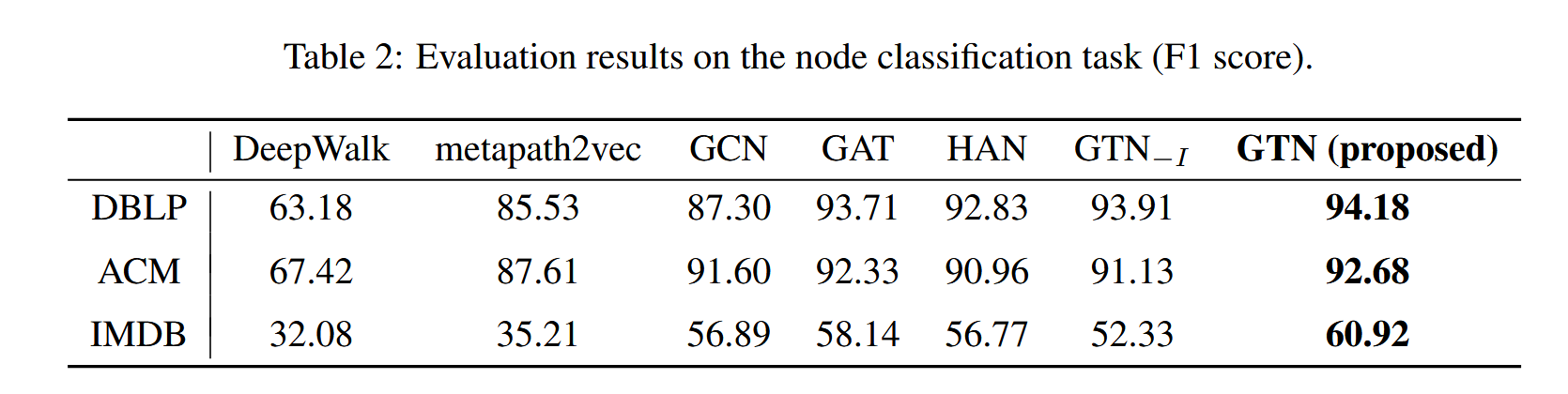


**说明：**DBLP中包含三种类型的节点（论文P，作者A，会议C），四种类型的边（PA、AP、PC、CP），并以作者的研究领域作为标签label。ACM中包含三种类型的节点（论文P，作者A，主题S），四种类型的边（PA、AP、PS、SP），并以文章类别作为标签label。而在IMDB中包含三种类型的节点（电影M，演员A和导演D），以电影的流派作为标签label。

实现细节：

我们将所有方法的嵌入维度设置为64，以便进行公平比较。使用Adam优化器并分别选择超参数（例如学习率，权重衰减等），以便每个基线方法产生其最佳性能。对于基于随机游走的模型，每个节点的游走长度设置为100，并进行1000 次迭代，窗口大小设置为5，包含7个负样本。而对于GCN、GAT和HAN，参数分别使用验证集进行优化。最后，对于本文的模型GTN，我们对DBLP和IMDB 数据集使用了三个GT层，对ACM数据集使用两个GT层。此外，我们用常量值对每个GT层中卷积的参数进行初始化。

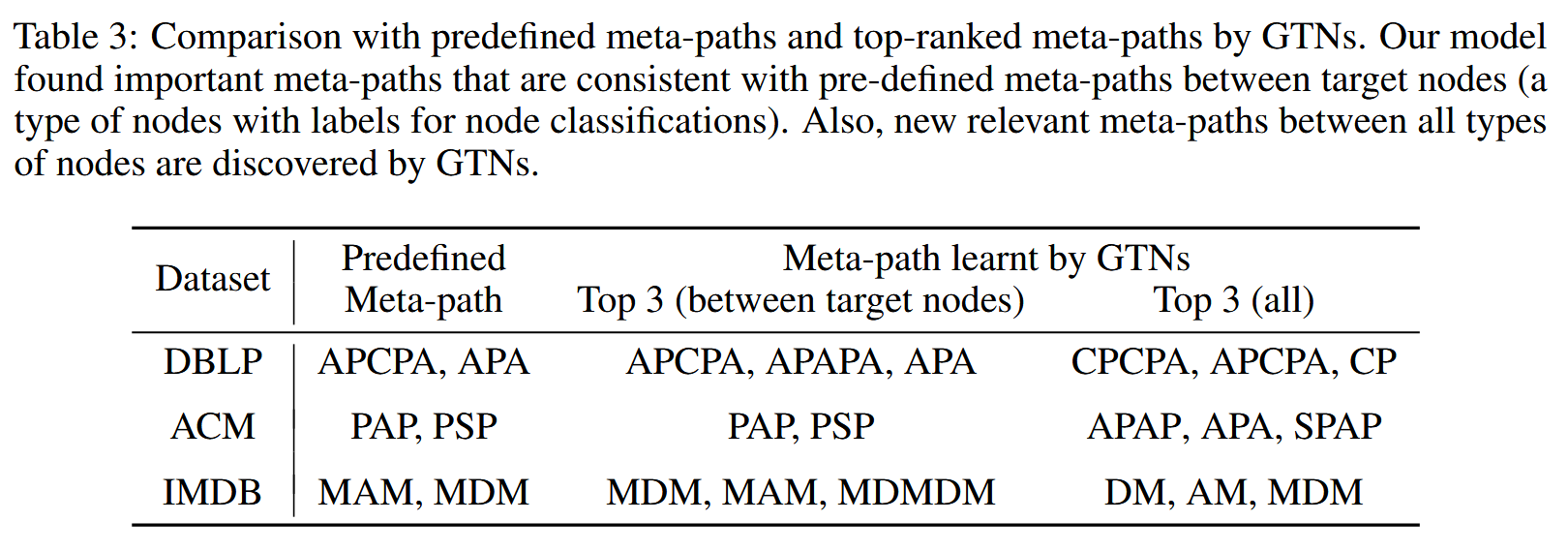
节点分类结果：



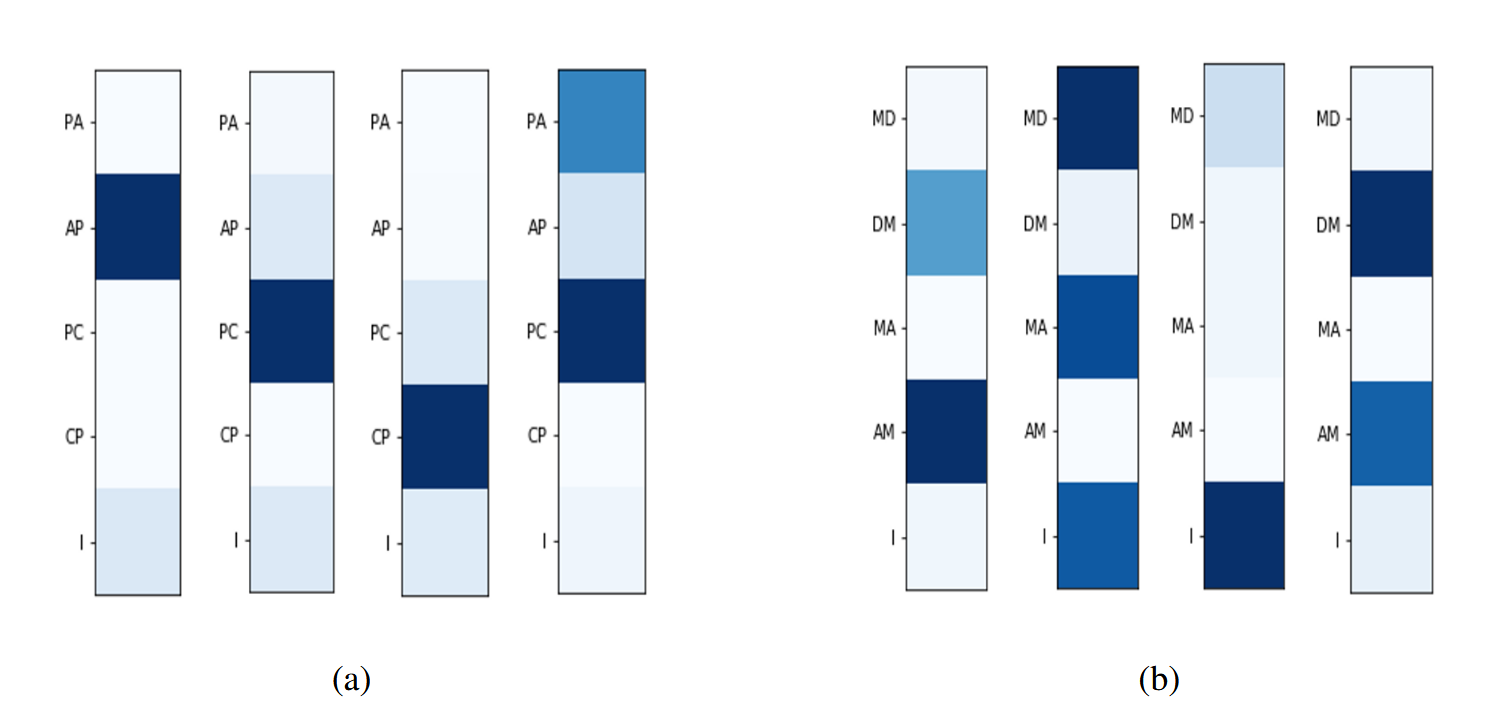
如上表2所示，它显示了GTN和其他节点分类基线的性能。通过分析实验结果，我们能够回答问题Q1和Q2。可以发现，**相对于所有网络嵌入方法和图神经网络方法，GTN模型在所有数据集上都实现了最好的性能。**此外，表示候选邻接矩阵中没有，而从结果中我们可以看出其性能比包含的要差，这证明了添加单位阵的有效性。

可解释性：

作者经过公式推导得出，一条meta-path（元路径）的贡献度能通过进行获取。



如表3所示，它展示了文献中广泛使用的预定义meta-paths，以及GTN学习的具有高注意力分数的meta-paths。可以看到GTN发现了不在预定义元路径集中的重要元路径。例如，在DBLP数据集中，GTN将CPCPA列为最重要的元路径，而这并不包含在预定义的元路径集中。【作者的研究领域（用于预测的标签）与作者发表的地点有关是很有意义的。】**由此我们可以认为，GTN的可解释性通过元路径上的注意力得分为节点分类提供了有效的信息。**



而上图展示了每个GT层的邻接矩阵的注意力分数，(a)为DBLP，(b)为IMDB。从中我们可以发现，与DBLP相比，单位阵在IMDB中有更高的注意力分数。通过给单位阵分配更高的注意力分数，GTN试图坚持更短的元路径，即使在更深的层。**这表明了GTN能根据数据集自适应学习最有效的元路径的能力。**

**结论：**

本文提出了用于学习异构图上节点表示的图变换网络GTN。该方法将一个异构图转换为由任意边类型和任意长度的元路径定义的多个新图，这些元路径的长度不超过Graph Transformer层的数量，同时通过对学习到的元路径图进行卷积学习节点表示。实验表明学习到的图结构能导致更有效的节点表示，在没有任何来自领域知识的预定义元路径的情况下，在异构图上的所有三个基准节点分类任务上取得了最优性能。此外，由于Graph Transformer层可以与现有的GNNs结合，因此GTN框架能够为GNNs开辟新的途径，根据数据和任务来操作卷积实现图结构的优化，而不需要任何人工的努力。

**对本文的感悟：**

本文提出了一个简单却充满创新性且有效的改进，它有效解决了人工设计“元路径”所带来的问题，也再次表明了**端到端学习**的可行性和有效性。而究其原因，我觉得这主要是在于作者们看清了“元路径”设计的本质数学形式，进而提出了“元路径”自学习的设计方案——GTN。