



# 异构图神经网络 (HGNNs)

作者: Calvin

QQ: 179209347

Mail: 179209347@qq.com

# 介绍

## 笔记简介:

- 面向对象: 深度学习初学者
- 依赖课程: **线性代数, 统计概率**, 优化理论, 图论, 离散数学, 微积分, 信息论

## 知乎专栏:

<https://zhuanlan.zhihu.com/p/693738275>

## Github & Gitee 地址:

[https://github.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep\\_learning](https://github.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning)

[https://gitee.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep\\_learning](https://gitee.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning)

## \* 版权声明:

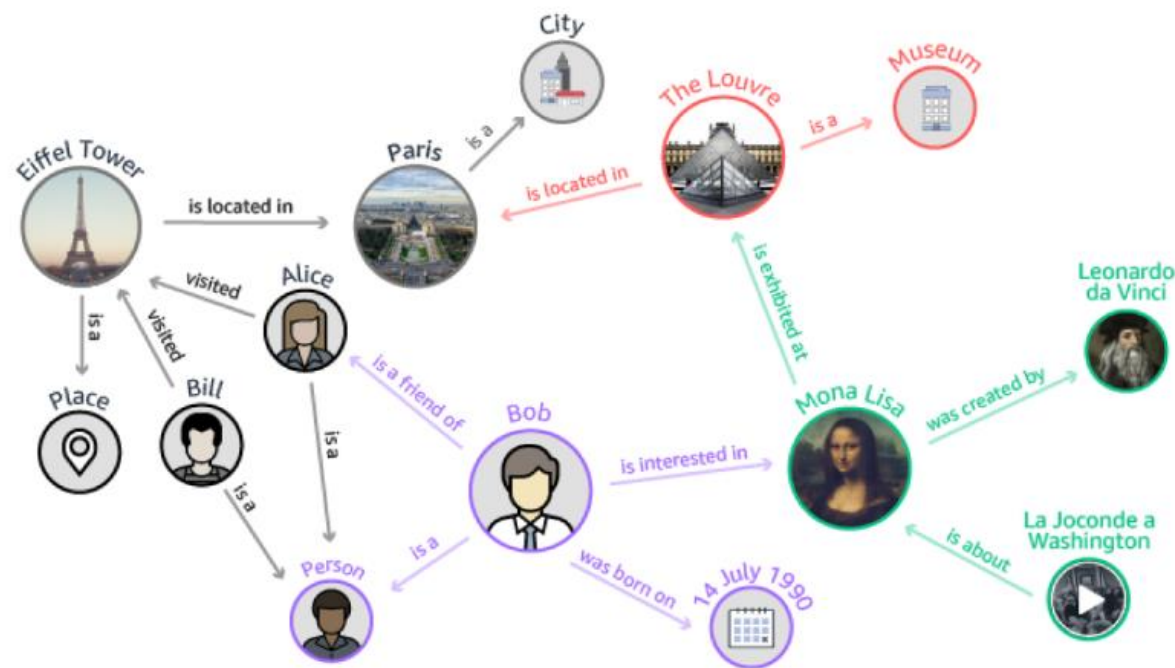
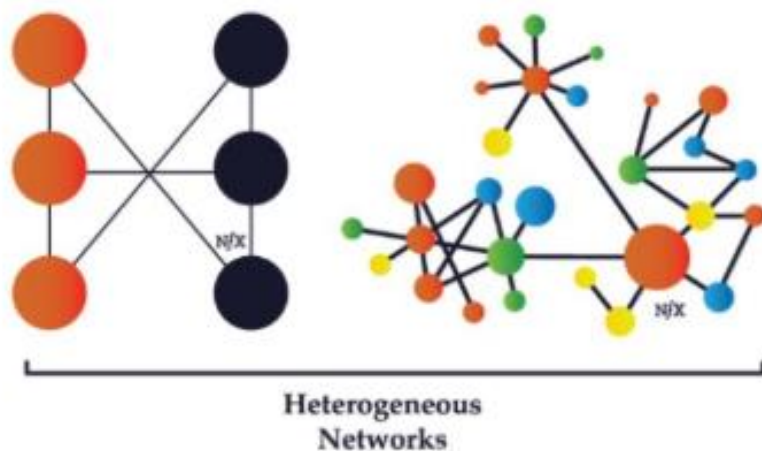
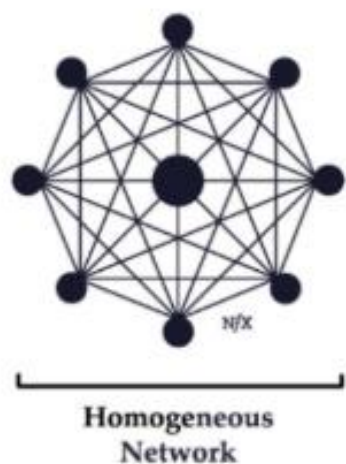
- 仅限用于个人学习
- 禁止用于任何商业用途



# 异构图神经网络 ( Heterogeneous Graph Neural Networks )

异构图神经网络 (Heterogeneous Graph Neural Networks) 是一种用于处理异构图数据的深度学习模型。在异构图中，节点和边可以属于不同的类型，这使得传统的图神经网络模型难以直接应用于这种复杂的图结构。

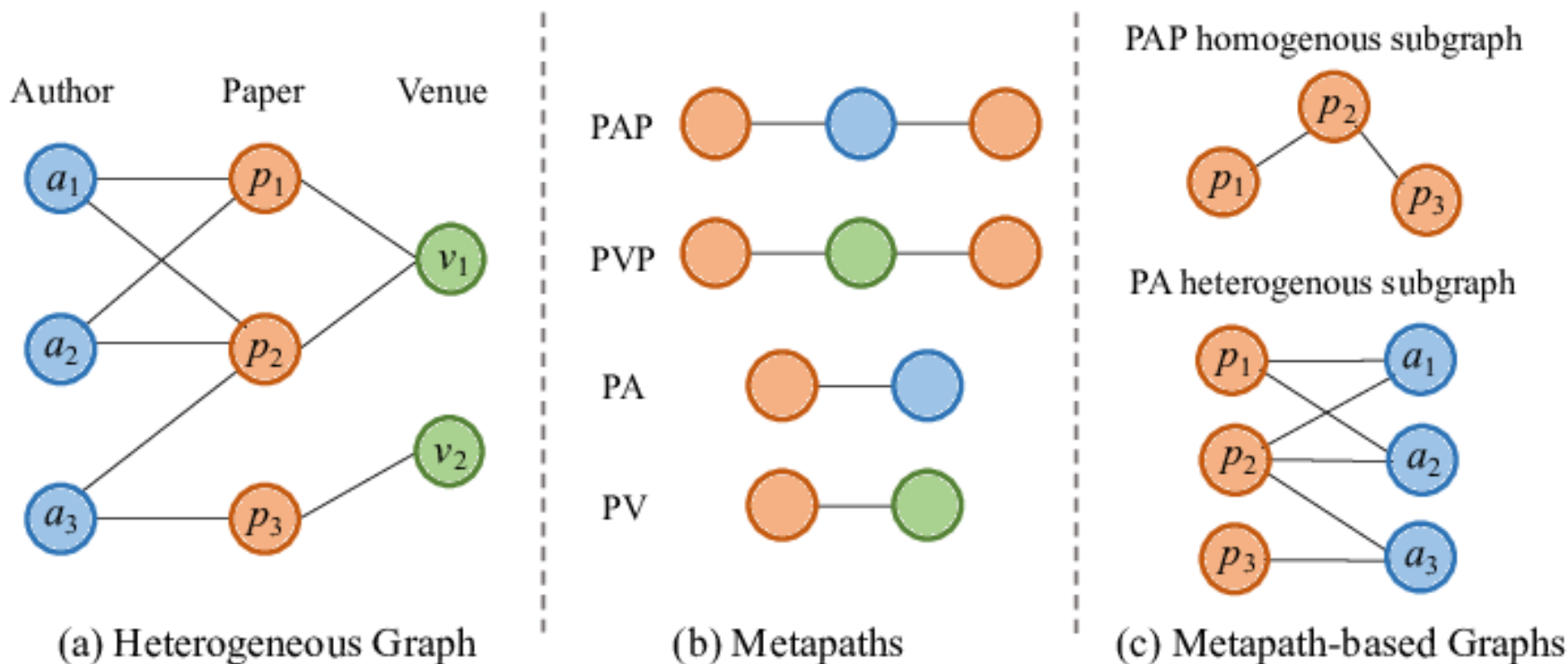
异构图神经网络旨在有效地学习和表示这种复杂的异构图数据。它们通常包括多个不同类型的节点和边，每种类型的节点和边可能具有不同的特征和语义含义。异构图神经网络的设计考虑了这种多样性，并提供了一种灵活的方式来处理不同类型的节点和边。



# 异构图神经网络 (HGNNs)

异构图神经网络通常会考虑以下几个关键方面：

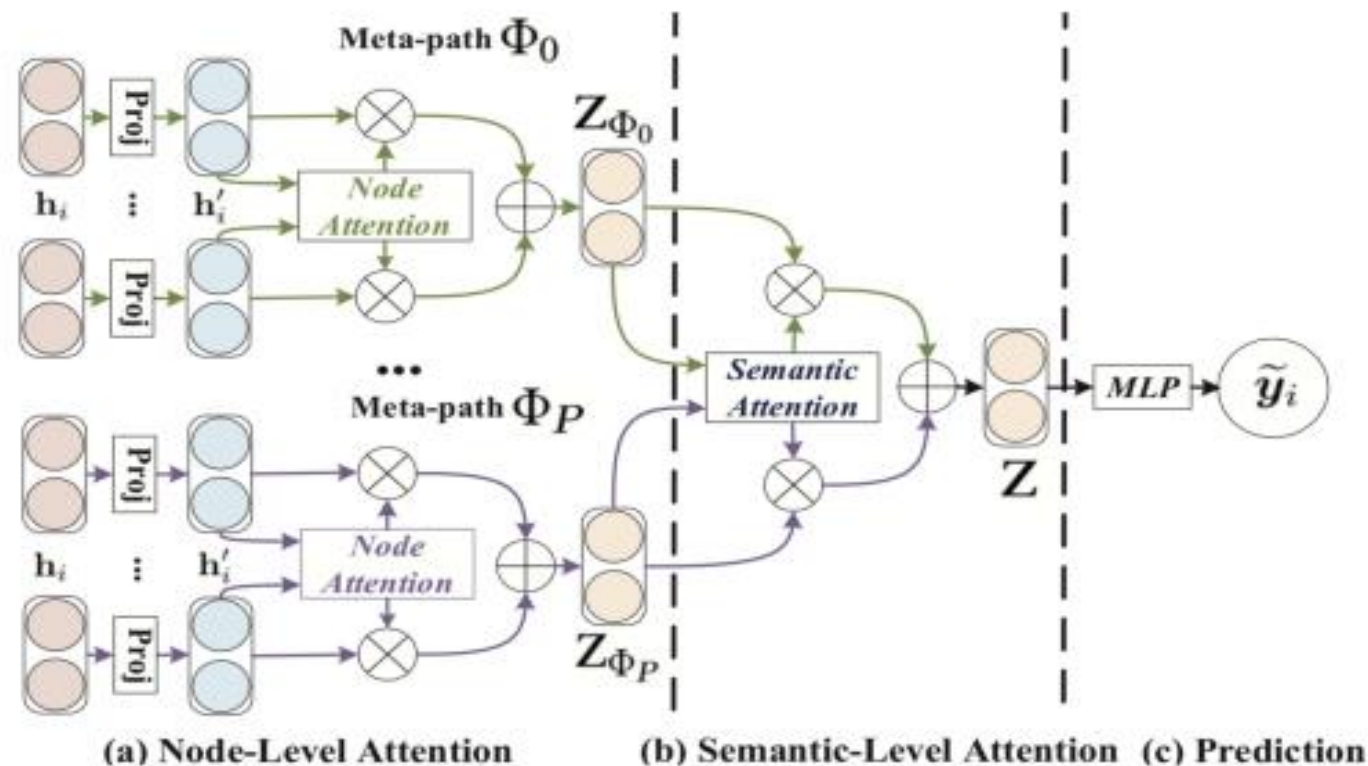
- 1.异构图结构建模：** 有效地捕捉不同类型节点和边之间的复杂关系，包括节点之间的连接、不同类型节点之间的连接以及节点与边之间的连接。
- 2.跨类型信息传播：** 设计有效的信息传播机制，使得不同类型的节点可以相互影响并共同学习表示。
- 3.异构图神经网络层：** 设计适用于异构图的神经网络层，以便有效地学习节点和边的表示，并在整个图上执行复杂的推理任务。



# 异构图神经网络 (HGNNs)

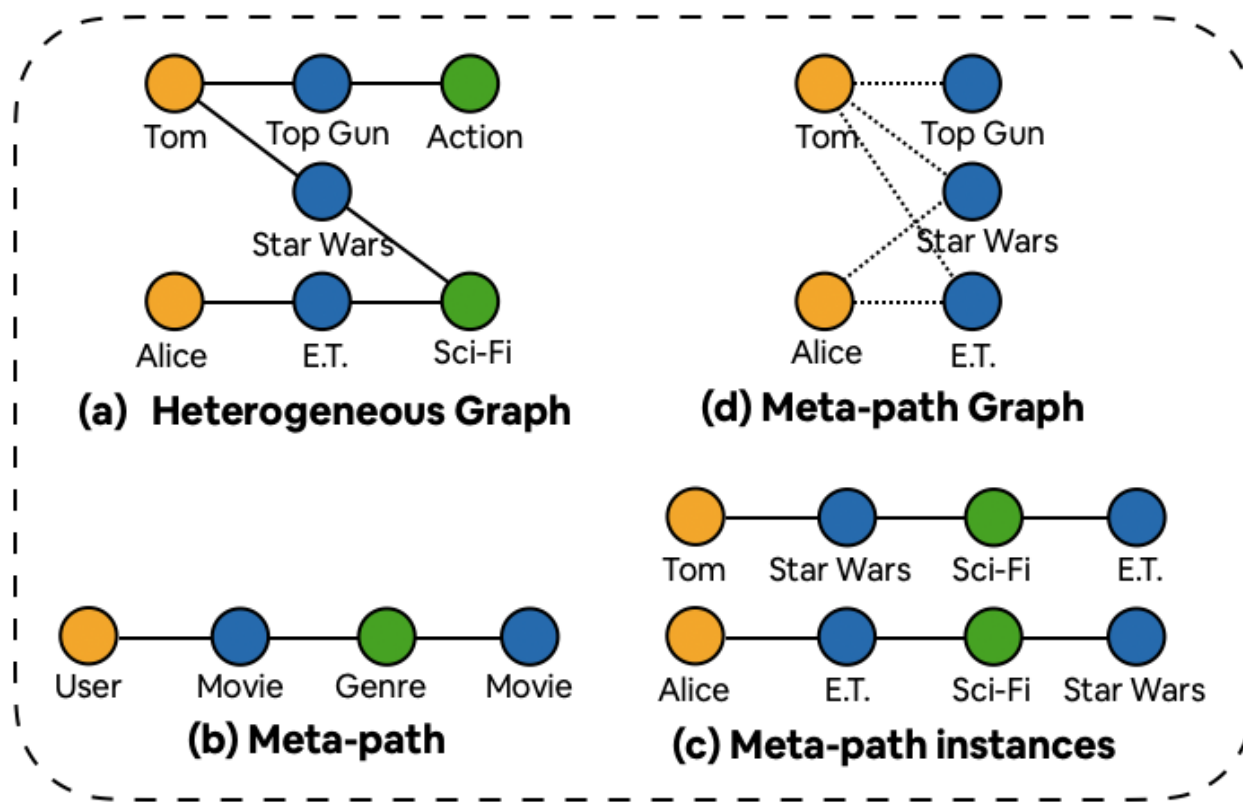
## 异构图神经网络的特点

- 利用 meta-path 将异构信息网络映射到多个同质图中
- 对应不同 meta-path 的多个同质图，采用全局注意力机制
- 在每个同质图中，利用注意力机制整合邻居节点的信息
- 不同的 meta-path 对应不同的语义空间
- 每个语义空间中的节点邻居和信息是不同的
- 节点的最终表示与每个语义空间都相关联



# 异构图神经网络 (HGNNs) - Meta-path

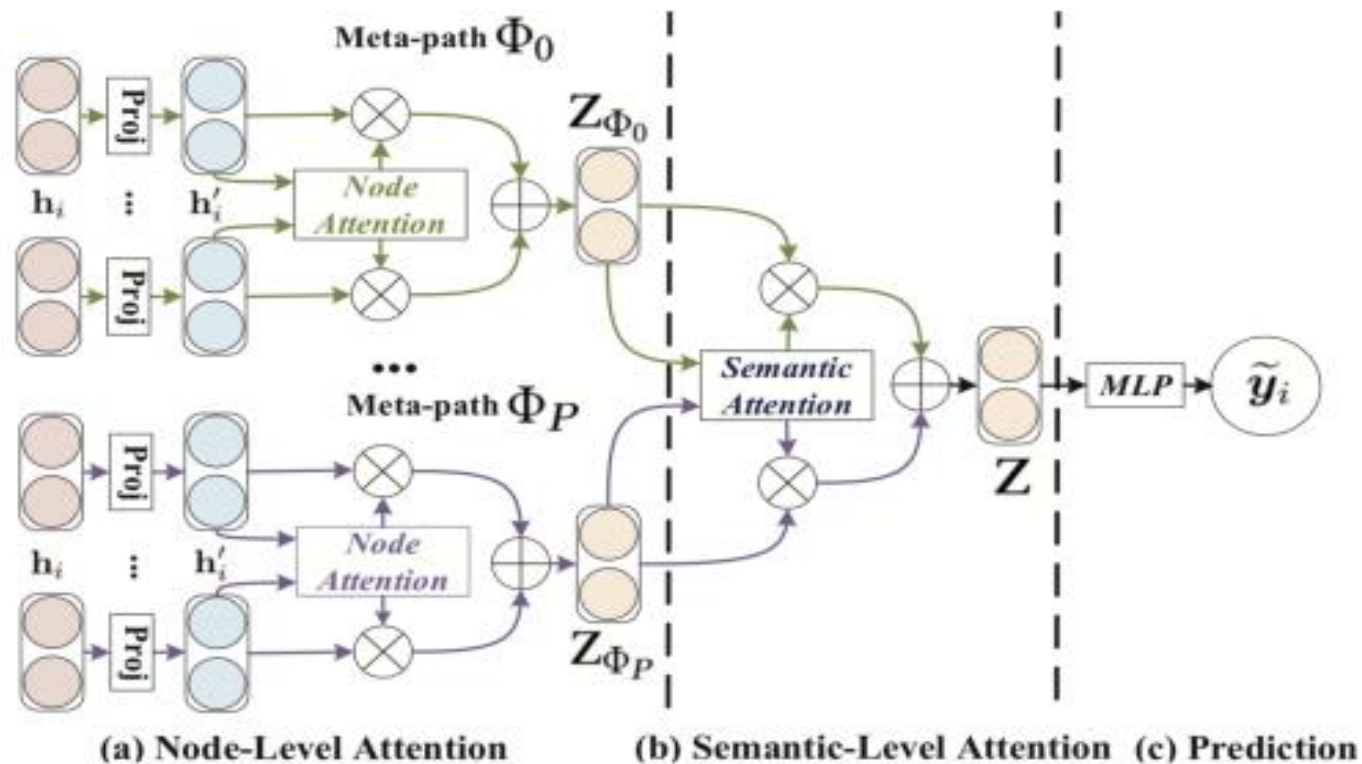
在异构图中，不同类型的节点和边之间可能存在多种复杂的关系。为了有效地处理这种复杂性，HGNNs利用了元路径（meta-path）的概念。元路径是一种定义在异构图上的高阶结构，描述了节点之间的特定类型的关系序列。通过定义不同类型的元路径，可以**捕捉到不同类型节点之间的复杂关系**，从而更好地学习节点表示。



# 异构图神经网络 (HGNNs) - 基本流程

## 基本流程

- 对每种类型的节点进行注意力机制
- 通过不同的路径聚合不同类型的节点信息
- 对不同的聚类也进行注意力机制
- 最后输出预测





# 异构图神经网络 (HGNNs) - 详细计算流程

1. 对于每一个 meta-path 计算其上节点 attention:

$$\mathbf{h}'_i = \mathbf{M}_{\phi_i} \cdot \mathbf{h}_i,$$

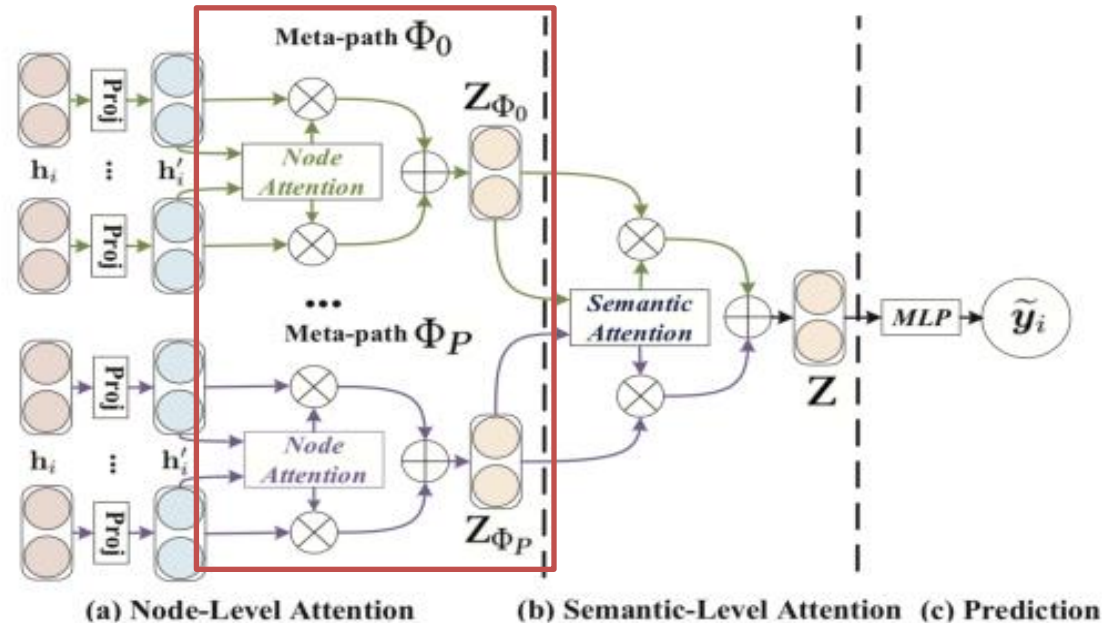
$$e_{ij}^{\Phi} = att_{node}(\mathbf{h}'_i, \mathbf{h}'_j; \Phi)$$

2. 得到该meta-path下的权重分配:

$$\alpha_{ij}^{\Phi} = softmax_j(e_{ij}^{\Phi}) = \frac{\exp(\sigma(\mathbf{a}_{\Phi}^T \cdot [\mathbf{h}'_i \parallel \mathbf{h}'_j]))}{\sum_{k \in \mathcal{N}_i^{\Phi}} \exp(\sigma(\mathbf{a}_{\Phi}^T \cdot [\mathbf{h}'_i \parallel \mathbf{h}'_k]))}$$

3. 聚合当前节点所有邻居特征:

$$\mathbf{z}_i^{\Phi} = \sigma \left( \sum_{j \in \mathcal{N}_i^{\Phi}} \alpha_{ij}^{\Phi} \cdot \mathbf{h}'_j \right) \cdot \mathbf{z}_i^{\Phi} = \prod_{k=1}^K \sigma \left( \sum_{j \in \mathcal{N}_i^{\Phi}} \alpha_{ij}^{\Phi} \cdot \mathbf{h}'_j \right)$$



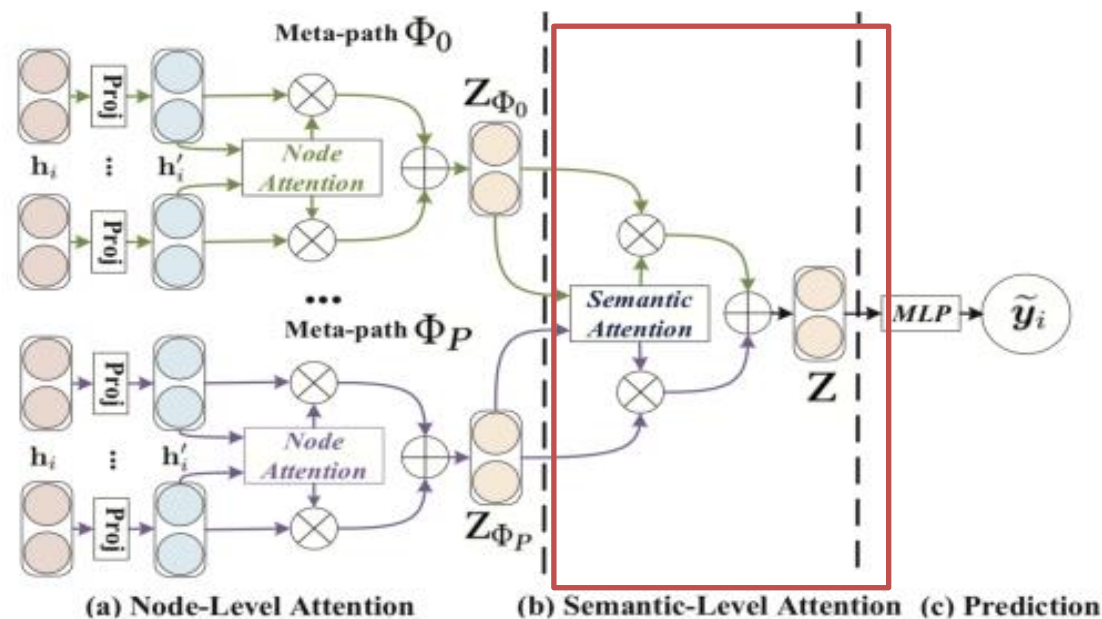
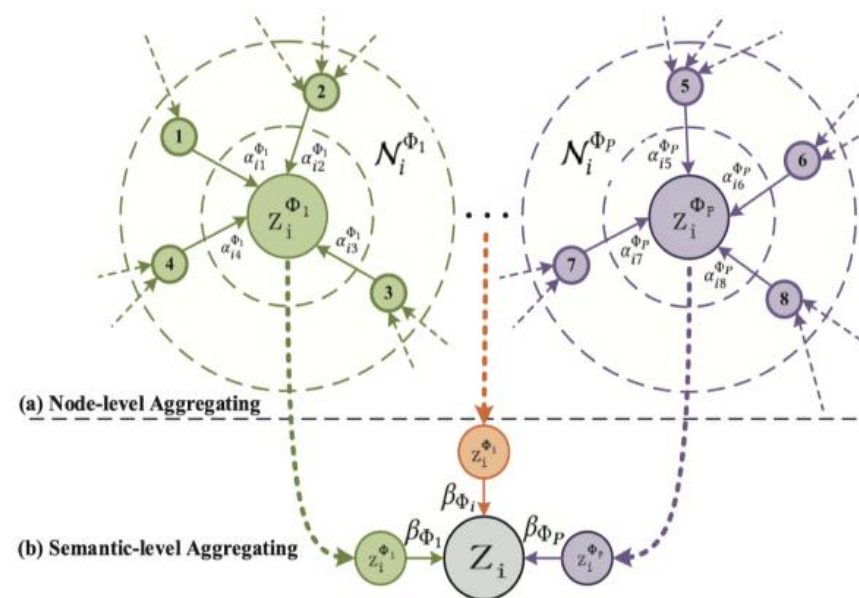


# 异构图神经网络 (HGNNs) - 详细计算流程

4. meta-path权重计算:  $w_{\Phi_p} = \frac{1}{|\mathcal{V}|} \sum_{i \in \mathcal{V}} \mathbf{q}^T \cdot \tanh(\mathbf{W} \cdot \mathbf{z}_i^{\Phi_p} + \mathbf{b})$

5. softmax权重分配:  $\beta_{\Phi_p} = \frac{\exp(w_{\Phi_p})}{\sum_{p=1}^P \exp(w_{\Phi_p})}$

6. 最终结果向量:  $\mathbf{Z} = \sum_{p=1}^P \beta_{\Phi_p} \cdot \mathbf{Z}_{\Phi_p}$





Thank

You