



基于增强图神经网络和对比学习的复杂网络节点分类

徐培玲¹, 王玉², 谭艳丽³

(1. 山西经贸职业学院电子信息系, 山西 太原 030024;

2. 中北大学信息与通信工程学院, 山西 太原 030051;

3. 太原工业学院电子工程系, 山西 太原 030000)

摘 要: 复杂网络节点分类大多基于图神经网络学习节点表示而实现, 图神经网络通过邻域聚合对复杂网络局部结构信息进行编码。然而, 图神经网络的过平滑问题导致复杂网络节点分类性能受限。基于此, 提出一种基于增强图神经网络和对比学习的复杂网络节点分类方法。该方法不仅为邻域节点引入注意力来区分各邻居节点的重要性, 而且采用局部邻域重叠度和全局邻域重叠度构造边的特征, 从而扩大节点表示的信息量。最后, 引入对比学习对神经网络进行训练, 从而利用网络全局节点分类先验信息对节点表示进行联合优化。在 Cora、Citeseer、PubMed 和 Chameleon 公开网络数据集上进行了实验, 结果表明, 相较于其他先进方法, 所提方法的节点分类性能更好, 并通过消融实验验证了所提方法的有效性。

关键词: 网络节点分类; 复杂网络; 图神经网络; 图注意力网络; 对比学习

中图分类号: TP393

文献标志码: A

doi: 10.11959/j.issn.1000-0801.2025128

Node classification of complex network based on enhanced graph neural network and contrastive learning

XU Peiling¹, WANG Yu², TAN Yanli³

1. Department of Electronic Information, Shanxi Institute of Economics and Business, Taiyuan 030024, China

2. School of Information and Communication Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China

3. Department of Electronic Engineering, Taiyuan Institute of Technology, Taiyuan 030000, China

Abstract: Node classification methods of complex network are mostly realized based on node representation learned by the graph neural network, the graph neural network encodes local structure information of complex networks through neighborhood aggregation. However, the over-smoothing problem of the graph neural network limits the node classification performance of complex network. In view of this problem, a node classification method of complex networks based on enhanced graph neural networks and contrastive learning was proposed. In the proposed

收稿日期: 2024-12-22; 修回日期: 2025-03-21

基金项目: 教育部产学合作协同育人项目 (No.220606517245903)

Foundation Item: The Ministry of Education's Industry-University Cooperation and Synergistic Education Project (No. 220606517245903)



method, not only the attention was introduced to the neighborhood nodes, in order to differentiate the importance of each neighbor node, but also the feature of each edge was constructed with combination of the local neighborhood overlap and the global neighborhood overlap, so as to expand the information of the node representation. Finally, contrastive learning was introduced to train the neural networks, so that the network's global node priori information was utilized to jointly optimize the node representation. Experiments were performed on Cora, Citeseer, PubMed and Chameleon public network datasets. The results demonstrate that compared to the other advanced methods, the proposed method achieves better node classification performance, moreover, the effectiveness of the proposed method is verified through ablation study.

Key words: network node classification, complex network, graph neural network, graph attention network, contrastive learning

0 引言

图神经网络 (graph neural network, GNN)^[1] 是一种学习图结构数据的神经网络, 在社交网络^[2]、生物网络^[3]和推荐系统^[4]等领域得到了广泛的应用。GNN的目标是利用神经网络学习目标节点的邻域结构信息, 得到目标节点在网络中的表示, 再执行后续节点分类或连接预测任务。目前, 基于GNN的节点表示学习能高效地捕捉节点的邻域结构信息, 但过平滑问题导致多数GNN为浅层网络, 这限制了基于GNN的节点表示性能^[5-6]。

学者针对GNN的不足进行了探讨, 提出了一系列改进方案。文献[7]引入门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU) 捕获全局上下文语义, 增加注意力机制捕获关键局部信息, 从而增强了GNN对关键特征信息的提取能力。文献[8]利用信息熵捕获目标节点在图中的全局信息, 从而为节点产生更全面的节点表示。文献[9]利用随机游走策略动态捕获目标节点的邻域上下文, 以防止噪声节点对邻域聚合的干扰, 该方法有效提高了网络节点的分类准确率。文献[10]为GNN设计了一种残差注意力增广机制, 该机制为节点特征增加权重评估, 以防止GNN的过平滑问题。综合分析以上方法, 当前基于GNN的节点表示学习尚存在以下3个关键问题亟待

解决。

(1) GNN主要关注于节点特征, 忽略了错综复杂的边所包含的信息。

(2) 传统GNN将所有节点视为同等重要, 未区分不同节点对节点分类任务的重要性差别。

(3) GNN邻域聚合仅捕获了网络的局部结构信息, 无法获取网络的全局信息, 而复杂网络的全局信息包含了一些高价值数据。

为改善基于GNN的复杂网络节点分类性能, 本文提出一种结合注意力节点特征、注意力边特征和对比学习^[11]的增强图神经网络 (contrastive learning enhanced graph neural network, ConEGNN)。利用ConEGNN捕获更具表达力、更具判别力的节点表示, 进而提高复杂网络节点分类的性能。与传统GNN相比, ConEGNN的不同之处主要有以下两点。

(1) ConEGNN构造了边的特征, 并引入注意力来区分各条边的重要性。

(2) ConEGNN采用对比学习机制对节点表示进行联合优化。

ConEGNN通过上述方法结合了节点的邻域信息、边信息和先验分类信息, 以期提高节点嵌入的表达力。

1 相关研究

GNN逐层地堆叠聚合目标节点邻域内的节

点信息,可提取包含局部邻域结构信息的节点表示。文献[12]提出图卷积网络(graph convolutional network, GCN)模型,该模型通过卷积运算对邻域内节点特征进行聚合,能够充分利用节点的局部结构信息。然而,GCN在邻域聚合过程中将所有节点视为同等重要,导致节点表示的表达力和判别力受限。在此基础上,图注意力网络(graph attention network, GAT)^[13]被提出,其核心思想是计算邻域内各节点的注意力系数,以确定邻居节点对目标节点的重要性,进而提高节点表示的表达力。文献[14]进一步提出了多尺度GAT模型,从邻居距离角度对注意力进行进一步细化。上述方法通过注意力机制增强了节点表示的表达力,但过多的卷积层数会产生邻域爆炸问题。邻域采样是避免出现邻域爆炸问题的有效方法,它主要分为3类:节点采样,如GraphSAGE^[15]、PinSAGE^[16];层采样,如FastGCN^[17];子图采样,如GraphSAINT^[18]。尽管邻域采样能改善GCN邻域聚合的扩展能力,但邻域采样的计算复杂度和空间复杂度极高。

对比学习通过比较样本对来学习数据的表示,能有效解决图数据学习任务中标注数据短缺和图结构复杂的问题^[19]。深度图信息(deep graph infomax, DGI)^[20]使用对比学习来最大化全局图表示与局部节点表示的互信息,以提高节点嵌入的表达力。DGI的核心思想是通过对比学习捕捉图的全局结构信息,但其主要关注节点级别的表示,未充分利用图的边特征。文献[21]使用对比学习实现数据增广,进而增强会话兴趣的区分性,尽管该方法利用对比学习缓解了图结构复杂性问题,但它依赖于特定指标对节点原始属性进行度量来区分正负样本,导致该方法缺乏普适性。

2 预备知识

2.1 复杂网络节点分类问题

假设 $G=(V,E)$ 为一个无向无权图,其中 V 为节点集, E 为边集,从 G 提取的二值邻接矩阵表示为 $A \in (0,1)^{|V| \times |V|}$,如果节点 u 和 v 之间存在连接,那么 $A_{u,v}=1$;否则, $A_{u,v}=0$ 。假设 G 的节点总数为 N ,边总数为 M 。复杂网络节点分类问题的目标是为目标节点 v 分配一个类标签。

2.2 GNN消息传递

ConEGNN通过消息传递机制聚合网络各层的邻居节点信息。ConEGNN采用GCN^[22]的消息传递机制,网络各层的聚合操作可表示为:

$$\mathbf{h}^{(l+1)} = \sigma \left((\mathbf{D} + \mathbf{I})^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{A} + \mathbf{I}) (\mathbf{D} + \mathbf{I})^{-\frac{1}{2}} \mathbf{h}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)} \right) \quad (1)$$

其中, $\mathbf{h}^{(l)} \in \mathbb{R}^{n \times d(l)}$ 为第 l 层特征,输入层特征为目标节点的特征向量, n 为第 l 层的节点数, $d(l)$ 表示第 l 层的特征维度, $\mathbf{W}^{(l)} \in \mathbb{R}^{d(l) \times d(l+1)}$ 为第 l 层的可训练参数矩阵, $\mathbf{D}$ 为邻接矩阵 $\mathbf{A}$ 的度矩阵, $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 表示为每个节点增加自循环的单位矩阵, $\sigma()$ 为非线性激活函数。

3 基于ConEGNN的节点分类方法

ConEGNN模型通过堆叠聚合网络多层节点特征和边特征来获得节点表示,此过程也称“邻域聚合”。ConEGNN模型的总体框架如图1所示,它由特征提取与变换、注意力邻域聚合和分类器共3部分构成。其中,特征提取与变换模块提取输入图中边特征与节点特征,再将维度不同的特征向量映射到统一的高维空间内。注意力邻域聚合模块逐层地对邻域内节点特征与边特征进行堆叠聚合,此过程采用边注意力和节点注意力来区分不同边和不同节点的重要性。分类器模块采用平坦层将二维节点表示展开成一维向量,再经过全连接层和softmax函数输出预测的分类概率分布。

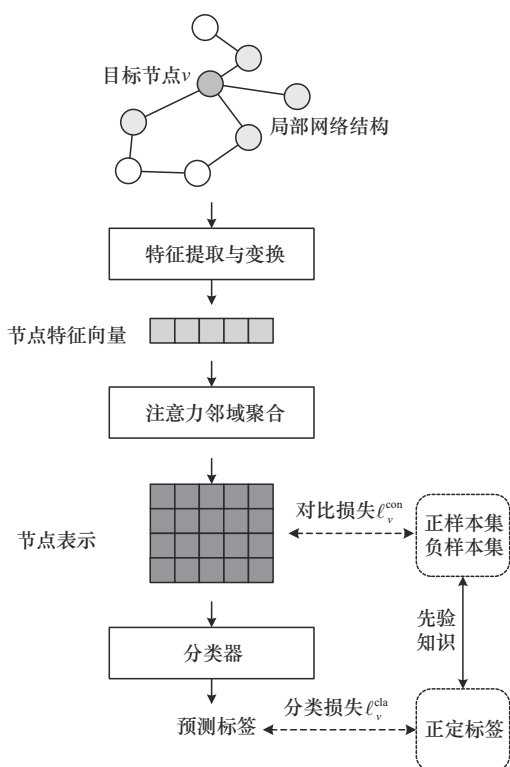


图1 ConEGNN模型的总体框架

3.1 特征提取与变换

在 Cora、Citeseer 和 Chameleon 等公开网络数据集中, 节点特征通常为词袋模型表示或由文本处理技术^[23]提取的特征向量, 但未提供边的特征。为此, 本文采用局部邻域重叠度和全局邻域重叠度构造边的特征。局部邻域重叠度评估了两个节点在小范围内的相关性, 全局邻域重叠度评估了两个节点在大范围内的相关性。

由于 Jaccard 系数能直观反映节点间的局部结构相似性, 被广泛应用于图数据分析中, 且它的计算复杂度较低, 适合大规模图数据分析。因此, 本文采用 Jaccard 系数度量节点的局部邻域重叠度。局部邻域重叠度定义为两个连接节点间的公共邻居节点 Jaccard 系数, 可表示为:

$$e_{v,u}^{LO} = \frac{|N(v) \cap N(u)|}{|N(v) \cup N(u)|} \quad (2)$$

其中, $N(v)$ 和 $N(u)$ 分别表示节点 v 和 u 的邻居节点集。

Katz 指数^[24]不仅考虑直接邻居, 还考虑多跳路径上的间接关系, 能全面反映节点间的全局相关性, 因此, 本文采用 Katz 指数度量节点的全局邻域重叠度。全局邻域重叠度定义为两个节点间不同路径长度对的 Katz 指数, 图结构的 Katz 指数属于矩阵级数求和运算, 计算方法为:

$$e_{v,u}^{GO} = \sum_{k=1}^{\infty} \beta^k A_{v,u}^k = (I - \beta A_{v,u})^{-1} - I \quad (3)$$

其中, β 为折减系数, k 为路径长度。

ConEGNN 在邻域聚合过程中考虑了节点特征和边特征, 但节点特征与边特征位于不同的特征空间。为兼容不同的特征空间, 同时提高 ConEGNN 捕捉网络中隐含的综合复杂模式的能力, 本文通过线性变换和非线性变换将网络所有原始节点特征和边特征映射到统一的高维空间。映射方法为:

$$h^{HD} = \sigma^{(0)}(XW^{(0)} + b^{(0)}) \quad (4)$$

其中, X 表示原始节点特征或边特征, $W^{(0)}$ 为线性变换的权重矩阵, $b^{(0)}$ 为线性变换的偏置, $\sigma^{(0)}$ 为非线性激活函数。节点特征与边特征变换如图 2 所示。

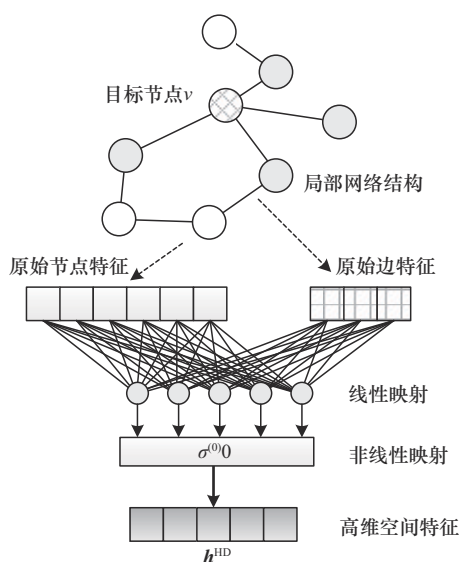


图2 节点特征与边特征变换

3.2 注意力邻域聚合

ConEGNN 在邻域聚合过程中, 为不同邻居节点和边分配不同的权重。对目标节点 v 第 l 层邻居信息的聚合可表示为^[12-13]:

$$\begin{cases} \mathbf{h}_v^{(0)} = \mathbf{h}_v^{\text{HD}} \\ \mathbf{h}_v^{(l)} = \sigma \left(\sum_{u \in \mathcal{N}(v)} a_{v,u}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)} \right) \\ \mathbf{H}_v = \mathbf{h}_v^L \end{cases} \quad (5)$$

其中, $\mathbf{h}_v^{(0)}$ 为节点 v 在第 0 层的表示, 即节点 v 原始特征映射后的高维特征, $a_{v,u}^{(l)}$ 表示节点 v 第 l 层邻居节点 u 的注意力系数, $\mathbf{W}^{(l)}$ 为第 l 层的权重矩阵, $\mathbf{h}_u^{(l-1)}$ 为节点 u 在第 $(l-1)$ 层的表示, L 为聚合的网络总层数, $\mathbf{H}_v$ 表示节点 v 的最终节点表示。

注意力系数的计算流程^[13]如图 3 所示。首先, 将目标节点 v 、邻居节点 u 和两者间边特征进行加权融合, 再与前一层的注意力系数相乘后得到两个节点间的相关性 $s_{v,u}^{(l)}$ 。 $s_{v,u}^{(l)}$ 传入 LeakyReLU 激活层进行非线性变换, 得到的结果通过 softmax 函数计算最终的注意力系数 $a_{v,u}^{(l)}$ 。

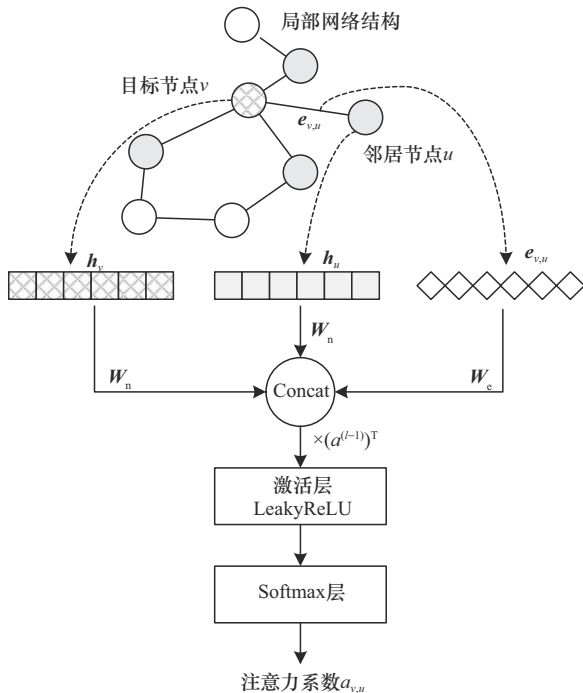


图3 注意力系数的计算流程^[13]

注意力系数 $a_{v,u}^{(l)}$ 的计算方法为:

$$a_{v,u}^{(l)} = \text{softmax} \left(s_{v,u}^{(l)} \right) = \frac{\exp \left(s_{v,u}^{(l)} \right)}{\sum_{k \in \mathcal{N}(v)} \exp \left(s_{v,k}^{(l)} \right)} \quad (6)$$

其中, $s_{v,u}^{(l)}$ 表示节点 v 与第 l 层节点 u 之间的相关性。

节点间相关性的计算方法为:

$$s_{v,u}^{(l)} = \text{LeakyReLU} \left(\left(a^{(l-1)} \right)^T \left(\mathbf{W}_n^{(l)} \mathbf{h}_v^{(l-1)} \parallel \mathbf{W}_n^{(l)} \mathbf{h}_u^{(l-1)} \parallel \mathbf{W}_e^{(l)} \mathbf{e}_{v,u} \right) \right) \quad (7)$$

其中, “ $\parallel$ ” 表示特征拼接操作, $a^{(l-1)}$ 为第 $l-1$ 层的注意力系数, $\mathbf{W}_n^{(l)}$ 和 $\mathbf{W}_e^{(l)}$ 分别为第 l 层的节点权重和边权重, $\mathbf{e}_{v,u}$ 为节点 v 和 u 之间的边特征。由于全局邻域重叠度不需要两个节点间存在直接连接, 因此节点 v 和远距离邻居节点 u 之间 $\mathbf{e}_{v,u}$ 也应大于 0。

3.3 分类器

复杂网络节点分类属于多分类问题。ConEGNN 的分类器网络结构如图 4 所示。分类器由平坦层和全连接层构成, 平坦层将二维特征展开成一维特征向量, 全连接层对提取的特征进行整合, 最终通过 softmax 函数输出分类结果。

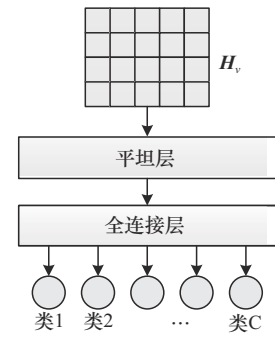


图4 ConEGNN 的分类器网络结构

二维特征图 $\mathbf{H}_v$ 经过平坦层被展开成一维特征向量 $\mathbf{Z}_v$, $\mathbf{Z}_v$ 经过全连接层和 softmax 函数得到输入节点属于各分类的概率, 可表示为:

$$\mathbf{y}_v = \text{softmax} \left(\mathbf{W}_c \mathbf{Z}_v + \mathbf{b}_c \right) \quad (8)$$

其中, $\mathbf{y}_v$ 为节点 v 的预测概率分布, $\mathbf{W}_c$ 为全连接层的权重矩阵, $\mathbf{b}_c$ 为全连接层的偏置, softmax()



表示 softmax 函数。

采用交叉熵损失作为节点分类的损失函数。节点 v 的交叉熵可表示为：

$$\ell_v^{\text{cla}} = - \sum_{c=1}^C \left[1(t_v=c) \lg(y_{v,c}) \right] \quad (9)$$

其中，独热编码向量 t_v 为节点 v 的真实标签分布， C 为总分类数， $y_{v,c}$ 为节点 v 属于分类 c 的预测概率， $1(t_v=c)$ 为指示函数，表示节点 v 是否属于分类 c ，若属于，则为 1；若不属于，则为 0。

3.4 基于对比学习的网络训练方法

ConEGNN 的注意力邻域聚合过程主要考虑网络的局部结构信息，而局部信息在分类不平衡、异配网络和含噪声网络上的泛化效果不佳。因此，本文通过对比学习来利用复杂网络的先验分类信息，在训练 ConEGNN 的过程中，利用对比学习拉近同类节点表示，推远异类节点表示。对比学习能提高 ConEGNN 对复杂网络中结构和数据差异的鲁棒性，有助于在聚合有限邻域信息的情况下训练出性能更好的 ConEGNN 模型。对比学习的关键是确定训练的正负样本，本文将同类的节点表示作为正样本，其他类的节点表示作为负样本。假设节点 v 的正样本集和负样本集分别为 O_v 和 Q_v 。对比损失可定义为：

$$\ell_v^{\text{con}} = -\lg \sum_{u \in O_v} \frac{\exp(\text{sim}(H_v, H_u))}{\sum_{j \in \{O_v \cup Q_v\}} \exp(\text{sim}(H_v, H_j))} \quad (10)$$

其中， $\text{sim}()$ 表示余弦相似性。

最终，总目标函数定义为：

$$\ell_{\text{Total}} = \frac{1}{N_{\text{tr}}} \sum_{v=1}^{N_{\text{tr}}} \left[\lambda \cdot \ell_v^{\text{cla}} + (1-\lambda) \cdot \ell_v^{\text{con}} \right] \quad (11)$$

其中， λ 为分类损失与对比损失之间的平衡系数， N_{tr} 为样本总数。

ConEGNN 训练的总体流程如算法 1 所示。ConEGNN 在训练阶段通过反向传播对总目标函数进行优化，得到 ConEGNN 的超参数集 Θ ，在测试阶段，将待分类节点 v 输入 ConEGNN(Θ)，

得到节点 v 的类标签。训练 ConEGNN 需要一个训练集，记为 D_{train} ， D_{train} 包含的节点集为 V_{train} ，节点对应的正定类标签集记为 Y_{train} 。 V_{train} 各节点依次经过特征变换、注意力邻域聚合和分类器预测节点属于各分类的概率，将预测分类与正定分类进行比较，计算总损失 ℓ_{Total} 。在反向传播中通过优化总损失来搜索 ConEGNN 的超参数，最终得到最佳的 ConEGNN 超参数集 Θ 。

算法 1 ConEGNN 训练的总体流程

输入 训练节点集 V_{train} ，正定类标签集 Y_{train} ，训练轮数 epoch

输出 ConEGNN 超参数集 Θ

For each e from 1 to epoch do

/*生成节点表示*/

使用式 (2)、式 (3)、式 (4) 提取节点 $v \in V_{\text{train}}$ 特征向量 h^{HD}

使用式 (5) 对 v 进行注意力邻域聚合，得到 H_v

/*节点分类*/

将 H_v 传入分类器，得到节点 v 的分类和分类损失

/*对比学习*/

使用式 (10) 计算节点 v 的对比损失

/*计算当前总损失*/

使用式 (11) 计算当前总损失

进行反向传播，使用 Adam 优化 ConEGNN 超参数

End for

4 实验与结果分析

4.1 实验数据

本文从公开数据集中选取 3 个同配图和 1 个异配图作为实验数据集。同配图 Cora、Citeseer 和 PubMed 均为引用网络，其节点代表学术论文，节点原始特征为独热编码向量，向量每个元素表

示相应单词在文献中是否出现, 边代表论文间的引用关系, 节点类标签为论文类别。异配图 Chameleon 为网络数据集, 其节点代表网页, 节点原始特征为文本处理技术提取的特征向量, 边代表网页间的超链接, 节点类标签为网页主题类别。4 个实验数据集的统计信息见表 1。每个数据集按 7:1:2 随机划分为训练集、验证集和测试集。

表 1 4 个实验数据集的统计信息

实验数据集	节点数	边数	特征数	分类数
Cora	2 708	10 556	1 433	7
Citeseer	3 327	9 104	3 703	6
PubMed	19 717	88 648	5 414	3
Chameleon	2 277	36 101	2 325	5

4.2 性能评价标准与对比方法

为评估本文所提方法的性能, 采用 3 个广泛应用的指标评估节点分类性能, 分别为平均分类准确率 Acc、F-Score 和受试者工作特征曲线 (receiver operating characteristic curve, ROC) 下面积 (area under curve, AUC)。Acc 表示模型正确预测的样本占总样本的比例, 它能直观反映模型的整体分类性能, 但对类不平衡数据的敏感性不足。Acc 计算方法为:

$$\text{Acc} = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{TP} + \text{TN} + \text{FP} + \text{FN}} \times 100\% \quad (12)$$

其中, TP 为真正样本数, TN 为真负样本数, FP 为假正样本数, FN 为假负样本数。

F-Score 表示分类精度和召回率的调和均值, 它能平衡精确率和召回率, 对类不平衡数据的敏感性较高, 其计算式为:

$$\text{F-Score} = \frac{2 \times \text{Pre} \times \text{Rec}}{\text{Pre} + \text{Rec}} \quad (13)$$

其中, Pre 和 Rec 分别为分类精度和分类召回率。

Pre 和 Rec 的计算式为:

$$\begin{cases} \text{Pre} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}} \times 100\% \\ \text{Rec} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \times 100\% \end{cases} \quad (14)$$

AUC 定义为 ROC 下与坐标轴围成的面积, 用于衡量模型在不同阈值下的整体分类性能。

本文选择近两年内基于改进 GNN 的节点分类方法作对比, 分别为 RAAGNN^[10]、GOGNN^[25]、Wacml^[26]和 GraphSR^[27]。

- RAAGNN: 采用残差注意力增广机制为节点特征进行权重评估, 以防止 GNN 的过平滑问题。该方法采用与本文 ConEGNN 相同的网络层数, 学习率为 0.01, 隐藏单元数为 16。
- GOGNN: 设计了基于分布对齐的过采样方法, 在预处理阶段合成少量节点来克服 GNN 邻域聚合过程中部分关键节点的支配性。该方法的学习率为 0.01, 隐藏单元数为 64, Dropout 率为 0.5。
- Wacml: 对次节点加权并结合异常连接对齐损失, 以防止在 GNN 邻域聚合过程中偏向于较大的分类。该方法的学习率为 0.01, 隐藏单元数为 16, Dropout 率为 0.5。
- GraphSR: 采用强化学习选择模块解决 GNN 聚合过程中的分类不平衡问题。该方法的学习率为 0.01, 隐藏单元数为 64, Dropout 率为 0.5。

4.3 参数设置

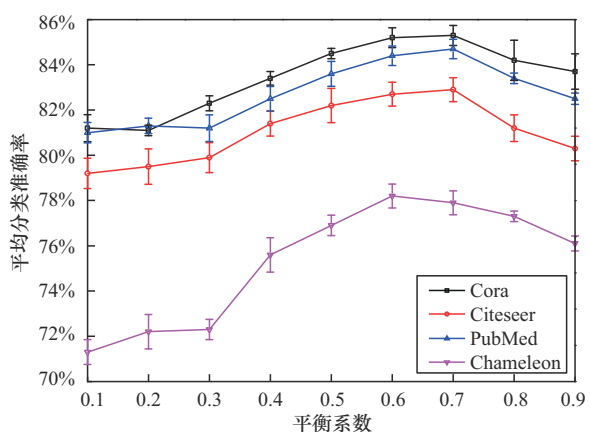
实验使用 Intel Xeon Silver 4210 处理器, 内存为 32 GB, 显卡为 Nvidia Titan Xp, 显存为 12 GB; 基于 PyTorch 深度学习框架实现所有模型; 使用 Adam 优化器训练 ConEGNN 模型, 在数据集 Cora、Citeseer 和 PubMed 上的 epoch 数均为 60, 在数据集 Chameleon 上的 epoch 数为 200。ConEGNN 模型的隐藏单元尺寸为 16, 隐藏单元数为 64, Dropout 率设为 0.5, 学习率为 0.01。Cora、Citeseer 和 PubMed 的 Batch 大小为 32, 数据集 Chameleon 的 Batch 大小为 64。非线性激活函数 σ 采用 ReLU 函数, 折减系数 β 为 0.8。



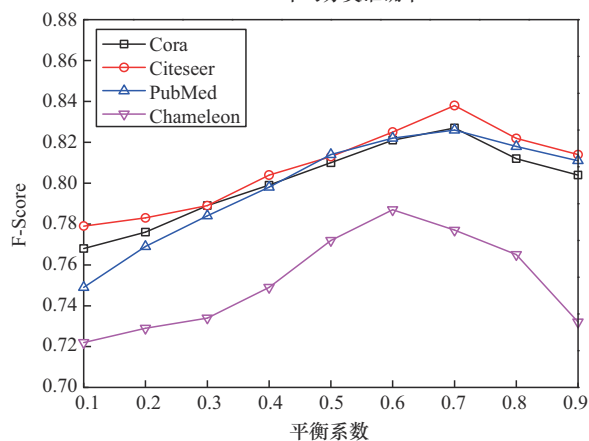
平衡系数参数实验结果如图5所示。平衡系数 λ 表明分类损失与对比损失对节点表示的支配度。为分析平衡系数对ConEGNN分类性能的影响,实验将ConEGNN层数固定为8,在 λ 取不同值时独立地训练和测试ConEGNN,每组参数下独立运行10次,计算每组参数的平均值作为最终结果,得到ConEGNN在各数据集上的节点平均分类准确率,结果如图5(a)所示。从图5(a)可以看出,随着 λ 的提高,4个数据集的平均分类准确率均呈现明显的升高趋势。数据集Cora、Citeseer和PubMed在 $\lambda=0.7$ 时分类准确率达到最佳,而数据集Chameleon在 $\lambda=0.6$ 时达到最佳。这说明,分类损失对ConEGNN的重要性略高于对比损失,但随着 λ 的进一步提高,ConEGNN的平均分类准确率逐渐下降,其原因是分类损失权重过高,对比损失权重过低,此时所聚合邻域信息的判别力有限,导致平均分类准确率下降。综合比较图5(b)和图5(c),F-Score和AUC展现出与平均分类准确率的一致性。综合考虑,下文在各数据集上将 λ 设为平均分类准确率最佳的值,即数据集Cora、Citeseer和PubMed的 λ 为0.7,数据集Chameleon的 λ 为0.6。

网络层数实验结果如图6所示。GNN层数表明ConEGNN聚合邻域的网络层数,为分析GNN层数对ConEGNN分类性能的影响,将ConEGNN层数分别设为2、4、8和16,在不同层数时独立地训练和测试ConEGNN。每组参数独立运行10次,计算每组参数的平均值作为最终结果,得到ConEGNN在各数据集上的节点平均分类准确率,结果如图6(a)所示。从图6(a)可以看出,在网络层数从2增加到8的过程中,ConEGNN在各数据集上的平均分类准确率提高明显,但在层数从8增至16的过程中,平均分类准确率提高较有限。由此可以推理出,当GNN层数等于8时,ConEGNN聚合的邻域信息已足够,更高

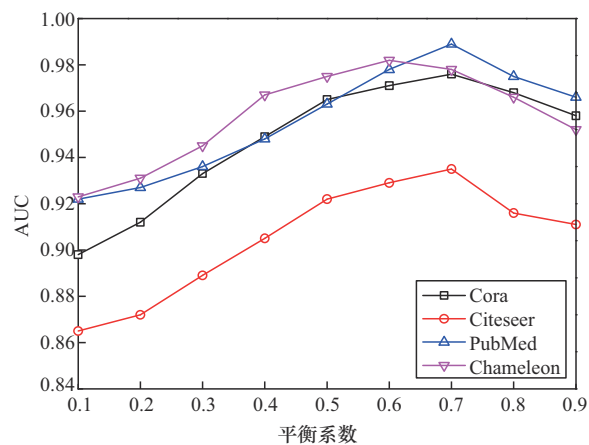
阶邻域信息为节点平均分类准确率带来的增益较小,却大幅增加了ConEGNN的运行时间。综合比较图6(b)和图6(c),F-Score和AUC展现出与平均分类准确率的一致性。综合考虑,将ConEGNN的网络层数设为8。



(a) 平均分类准确率



(b) F-Score



(c) AUC

图5 平衡系数参数实验结果

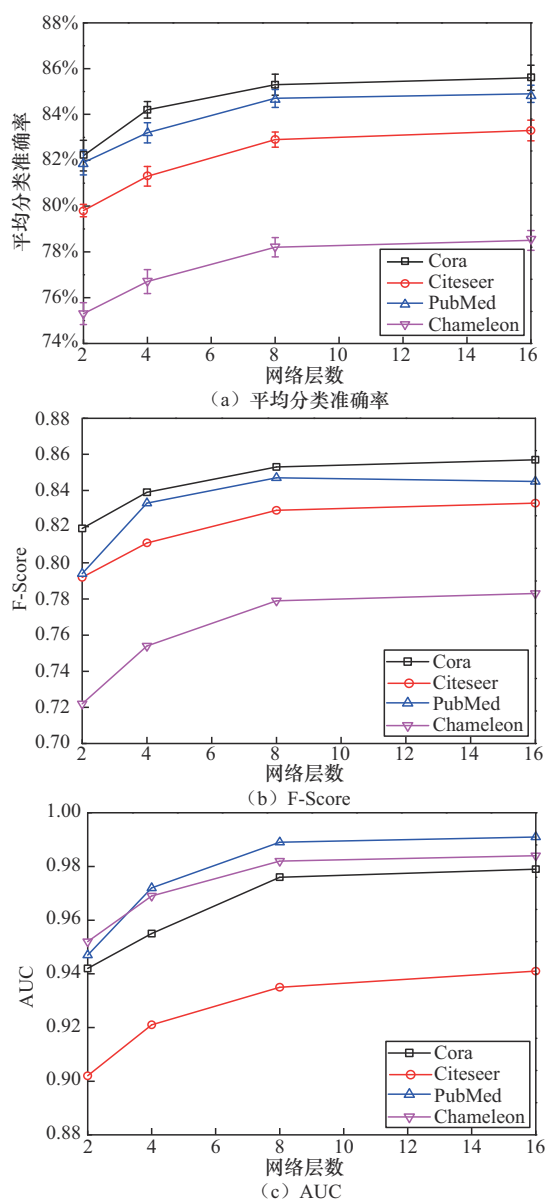


图6 网络层数实验结果

4.4 对比实验

网络节点分类对比实验结果如图7所示。每个方法在各数据集上独立运行10次，计算10次结果的平均值作为最终结果。图7给出了各方法在数据集Cora、Citeseer、PubMed和Chameleon上的节点分类结果。由图7(a)可知，ConEGNN在数据集Cora和PubMed上的平均分类准确率略高于4种对比方法，但在Citeseer和Chameleon数据集上的平均分类准确率的优势较大。由图7(b)可知，ConEGNN在Cora

数据集上的F-Score略高于4种对比方法，但在数据集Citeseer、PubMed和Chameleon上的F-Score优势较大。由图7(c)可知，ConEGNN在数据集Cora和PubMed上的AUC略高于4种对比方法，但在数据集Citeseer和Chameleon上的AUC优势较大。实验结果表明，ConEGNN优于其他基于改进GNN的网络节点分类方法。究其原因，ConEGNN在邻域聚合过程中结合了注意力节点特征提取和注意力边特征提取。此外，ConEGNN采用对比学习对节点表示进行联合优化，在训练过程中引入了全局分类信息，进一步增强了节点表示的判别力。

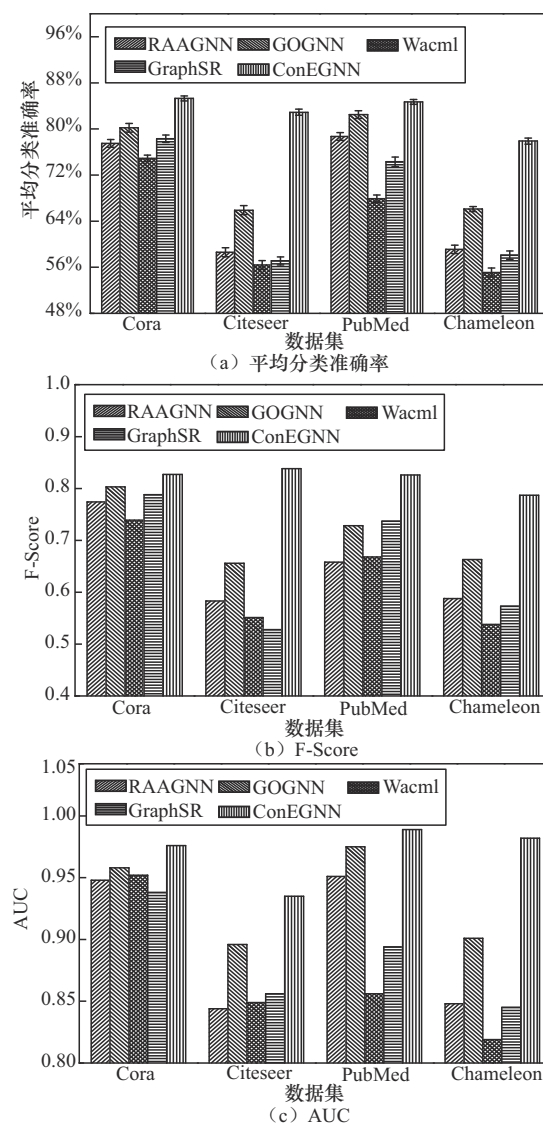


图7 网络节点分类对比实验结果



4.5 消融实验

为进一步评估 ConEGNN 的有效性, 本文建立了消融实验。消融实验由原始 GNN、ConEGNN 和两个 ConEGNN 变体 (ConEGNN_1 和 ConEGNN_2) 构成。ConEGNN_1 为 ConEGNN 去除注意力边信

息和对比损失后的版本, ConEGNN_2 为 ConEGNN 去除对比损失后的版本。每个方法在各数据集上独立运行 10 次, 计算 10 次结果的平均值作为最终结果, 网络节点分类消融实验结果如图 8 所示。图 8 给出了在数据集 Cora、Citeseer、PubMed 和 Chameleon 上的消融实验结果。由图 8 (a) 可知, 原始 GNN 在各数据集上的平均分类准确率均最低, ConEGNN_1 在邻域聚合过程中引入了节点注意力机制, 有效提高了平均分类准确率。ConEGNN_2 在邻域聚合过程中结合了注意力节点信息和注意力边信息, 进一步提高了所聚合邻域信息的丰富性。ConEGNN 在训练阶段引入对比损失, 通过节点类标签的先验知识对神经网络进行联合优化, 进一步提高了节点表示的判别力。图 8 (b) 与图 8 (c) 的结果与图 8 (a) 相似。综合而言, 图 8 的结果验证了本文对 GNN 改进的有效性。

5 结束语

本文提出一种结合注意力节点特征、注意力边特征和对比学习的图神经网络 ConEGNN, 利用 ConEGNN 捕获更全面的节点表示, 进而提高复杂网络节点分类的性能。一方面, ConEGNN 模型为浅层网络, 因此避免了邻域爆炸问题; 另一方面, 在 ConEGNN 模型训练过程中采用对比学习机制对节点表示进行联合优化, 为节点表示增加了全局分类的先验知识, 进而增强了节点表示的表达力和判别力。经过广泛的实验验证, ConEGNN 在不同级别的复杂网络上均表现良好, 其性能优于近期报告的同类方法。

由于引入了局部邻域重叠度、全局邻域重叠度和对比学习机制, ConEGNN 的运算复杂度高于传统 GNN, 此外, ConEGNN 局部邻域聚合的网络层数为 8, 进一步提高了运算复杂度。因此, 未来将探索 ConEGNN 在更大规模复杂网络上是否表现良好。

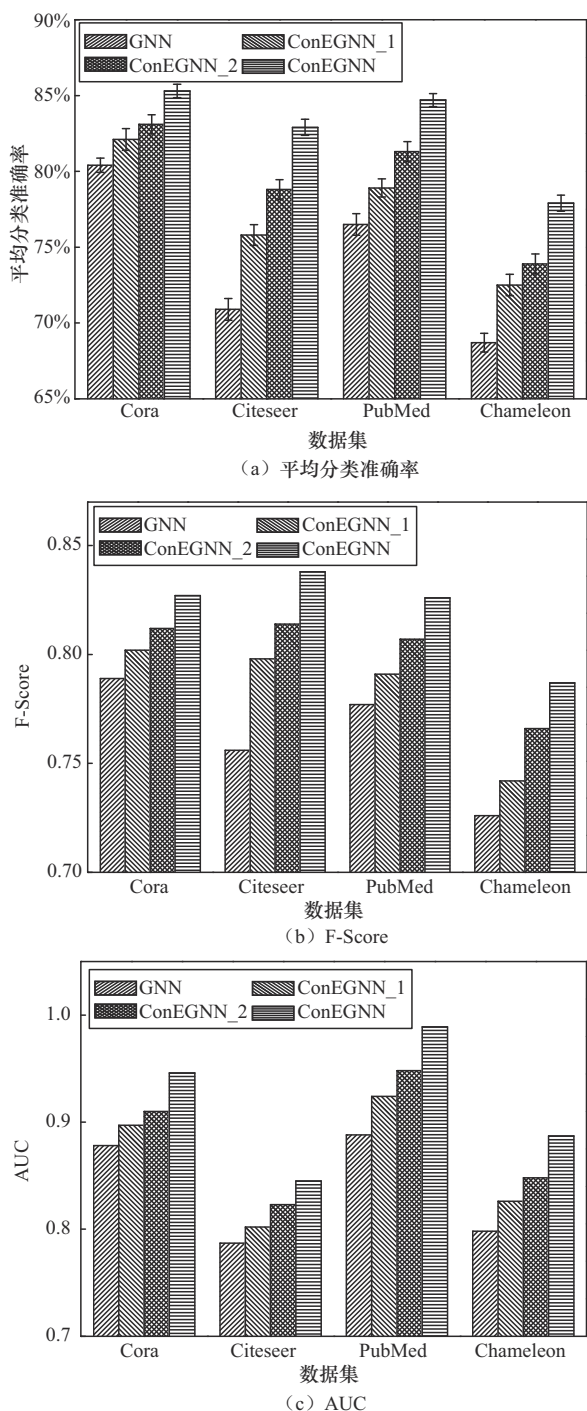


图8 网络节点分类消融实验结果

参考文献:

- [1] 肖国庆, 李雪琪, 陈玥丹, 等. 大规模图神经网络研究综述[J]. 计算机学报, 2024, 47(1): 148-171.
XIAO G Q, LI X Q, CHEN Y D, et al. A survey of large-scale graph neural networks[J]. Chinese Journal of Computers, 2024, 47(1): 148-171.
- [2] LIU C, LI Y X, LIN H, et al. GNNRec: gated graph neural network for session-based social recommendation model[J]. Journal of Intelligent Information Systems, 2023, 60(1): 137-156.
- [3] 曹汉童, 陈璟. 融合 Doc2vec 与 GCN 的多类型蛋白质相互作用预测方法[J]. 智能系统学报, 2023, 18(6): 1165-1172.
CAO H T, CHEN J. Prediction of multitype protein interactions combining Doc2vec and GCN[J]. CAAI Transactions on Intelligent Systems, 2023, 18(6): 1165-1172.
- [4] LIU Z W, YANG P L, HAO Q B, et al. Exploring implicit influence for social recommendation based on GNN[J]. Soft Computing, 2024, 28(19): 11001-11014.
- [5] 郑文萍, 葛慧琳, 刘美麟, 等. 融合二连通模体结构信息的节点分类算法[J]. 计算机应用, 2024, 44(5): 1464-1470.
ZHENG W P, GE H L, LIU M L, et al. Node classification algorithm fusing 2-connected motif-structure information[J]. Journal of Computer Applications, 2024, 44(5): 1464-1470.
- [6] 曹磊亮, 谢瑾奎, 郭天晟. 结合残差网络和噪声处理的节点分类模型[J]. 小型微型计算机系统, 2024, 45(6): 1331-1338.
CAO L L, XIE J K, GUO T S. Node classification model combining residual network and noise processing[J]. Journal of Chinese Computer Systems, 2024, 45(6): 1331-1338.
- [7] 郑诚, 倪显虎, 张苏航, 等. 结合 GNN 的信息融合用于归纳式文本分类[J]. 小型微型计算机系统, 2023, 44(6): 1170-1176.
ZHENG C, NI X H, ZHANG S H, et al. Information fusion combined with GNN is used for inductive text classification[J]. Journal of Chinese Computer Systems, 2023, 44(6): 1170-1176.
- [8] ZHANG P L, CHEN J T, CHE C, et al. IEA-GNN: anchor-aware graph neural network fused with information entropy for node classification and link prediction[J]. Information Sciences, 2023, 634: 665-676.
- [9] YONG C, XIAOZHU X, WEI W. Graph convolutional network combined with random walks and graph attention network for node classification[J]. The Journal of China Universities of Posts and Telecommunications, 2024, 31(3): 1-14.
- [10] ABBAS M A, ALI W, SMARANDACHE F, et al. Residual attention augmentation graph neural network for improved node classification[J]. Engineering, Technology & Applied Science Research, 2024, 14(2): 13238-13242.
- [11] 李希, 刘喜平, 李旺才, 等. 对比学习研究综述[J]. 小型微型计算机系统, 2023, 44(4): 787-797.
LI X, LIU X P, LI W C, et al. Survey on contrastive learning research[J]. Journal of Chinese Computer Systems, 2023, 44(4): 787-797.
- [12] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[C]//Proceedings of the 5th International Conference on Learning Representations. London: Computer Science Bibliography, 2017: 1-14.
- [13] XIE F, CHEN J Q, CHEN K J. Extractive text-image summarization with relation-enhanced graph attention network[J]. Journal of Intelligent Information Systems, 2023, 61(2): 325-341.
- [14] LI M, MIAO Z J, LU Y Y. LabanFormer: multi-scale graph attention network and transformer with gated recurrent positional encoding for labanotation generation[J]. Neurocomputing, 2023, 539: 126203.
- [15] HAMILTON W L, YING R, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. Red Hook: Curran Associates Inc., 2017: 1025-1035.
- [16] YING R, HE R N, CHEN K F, et al. Graph convolutional neural networks for web-scale recommender systems[J]. Association for Computing Machinery, 2018, 3(2): 955-964.
- [17] 张陶, 廖彬, 于炯, 等. 图神经网络节点分类任务基准测试及分析[J]. 计算机科学, 2024, 51(4): 132-150.
ZHANG T, LIAO B, YU J, et al. Benchmarking and analysis for graph neural network node classification task[J]. Computer Science, 2024, 51(4): 132-150.
- [18] YIN L H, CHEN W Z, LUO X, et al. Efficient large-scale IoT botnet detection through GraphSAINT-based subgraph sampling and graph isomorphism network[J]. Mathematics, 2024, 12(9): 1315.
- [19] CHEN Y F, ZHU H Q, CHEN Z Y. Multi-DGI: multi-head pooling deep graph infomax for human activity recognition[J]. Mobile Networks and Applications, 2024, 29(3): 647-658.
- [20] 陈娜, 黄金诚, 李平. 结合对比学习的图神经网络防御方法[J]. 计算机科学与探索, 2023, 17(8): 1949-1960.
CHEN N, HUANG J C, LI P. Graph neural network defense combined with contrastive learning[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2023, 17(8): 1949-1960.
- [21] 卢敏, 原子婷. 结合图对比学习的多图神经网络会话推荐方法[J]. 计算机科学, 2024, 51(5): 54-61.
LU M, YUAN Z T. Graph contrast learning based multi-graph neural network for session-based recommendation method[J]. Computer Science, 2024, 51(5): 54-61.
- [22] 吴琳, 许茹玉, 栗兴旺, 等. 基于结构误差的图卷积网络[J]. 计算机应用研究, 2023, 40(1): 155-159.



- WU L, XU R Y, SU X W, et al. Graph convolutional networks based on structural errors[J]. Application Research of Computers, 2023, 40(1):155-159.
- [23] AMBILY PRAMITHA P, ABRAHAM J T. Hybrid classifier for sentiment analysis in Malayalam with modified TF-IDF features[J]. International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing, 2023, 14(5): 2350038.
- [24] 郑文萍, 刘美麟, 杨贵. 一种基于节点稳定性和邻域相似性的社区发现算法[J]. 计算机科学, 2022, 49(9): 83-91.
- ZHENG W P, LIU M L, YANG G. Community detection algorithm based on node stability and neighbor similarity[J]. Computer Science, 2022, 49(9): 83-91.
- [25] XIA R T, ZHANG C X, ZHANG Y, et al. A novel graph oversampling framework for node classification in class-imbalanced graphs[J]. Science China Information Sciences, 2024, 67(6): 162101.
- [26] WANG J F, YANG J Y, Lidun. Wacml: based on graph neural network for imbalanced node classification algorithm[J]. Multimedia Systems, 2024, 30(5): 258.
- [27] ZHOU M T, GONG Z G. GraphSR: a data augmentation algorithm for imbalanced node classification[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2023, 37(4): 4954-4962.

[作者简介]



徐培玲 (1981-), 女, 山西经贸职业学院电子信息系讲师, 主要研究方向为电子信息与通信技术、信息处理及嵌入式系统。



王玉 (1978-), 女, 博士, 中北大学信息与通信工程学院副教授, 主要研究方向为医学图像处理、激光信号处理。



谭艳丽 (1978-), 女, 太原工业学院电子工程系教授, 主要研究方向为深度学习、异常检测。