

图对比学习研究进展

吴国栋,吴贞畅,王雪妮,胡全兴,秦辉

(安徽农业大学信息与人工智能学院,合肥 230036)
E-mail:8978850@qq.com

摘要:图对比学习可以提取无标注数据自身信息作为自监督信号指导模型训练,并帮助缓解图神经网络对标签数据的依赖及结构不公平等问题,已成为图神经网络领域的研究热点.本文从数据增广方式、样本对构造、对比学习粒度3个方面对现有图对比学习研究进行了深入探讨,分析了已有不同图对比学习研究方法各自的优点与不足.在此基础上,指出了现有图对比学习研究存在的问题,并提出了自适应图对比学习、上下文图对比学习、动态图对比学习、超图对比学习、因果推断图对比学习、无负样本图对比学习及基于大语言模型的图对比学习等未来图对比学习的研究方向.

关键词:图对比学习;研究进展;数据增广;样本对;对比粒度

中图分类号:TP391

文献标识码:A

文章编号:1000-1220(2025)01-0044-11

Graph Contrastive Learning Research Progress

WU Guodong, WU Zhenchang, WANG Xueni, HU Quanxing, QIN Hui

(School of Information and Artificial Intelligence, Anhui Agricultural University, Hefei 230036, China)

Abstract: Graph Contrastive Learning (GCL) can extract the self-information of unlabeled data as a self-supervised signal to guide model training, and help alleviate the dependence on labeled data and structural unfairness of Graph Neural Network. It has become a research hotspot in the field of Graph Neural Network. This paper delves into the existing research on GCL from three aspects: data augmentation methods, sample pair construction, and contrastive learning granularity. It analyzes the advantages and disadvantages of different existing GCL methods. On this basis, the existing problems in GCL research were pointed out, and future research directions for GCL were proposed, including Adaptive GCL, Context GCL, Dynamic GCL, Hypergraph Contrastive Learning, Causal Inference GCL, Non-negative sample GCL, and GCL based on Large Language Models.

Keywords: graph contrastive learning; research progress; data augmentation; sample pairs; comparison granularity

0 引言

受对比学习在计算机视觉、自然语言处理等领域中研究成果的启发,研究者们致力于将对比学习技术应用于图表示学习任务上,以更好地学习图表示、节点表示.

对比学习的思想为将样本和与其相似的样本(正样本)、不相似的样本(负样本)进行对比,通过设计的模型和对比损失,将相似样本表征在嵌入空间上拉近,不相似样本表征在嵌入空间上推远,以达到类似聚类的效果.

图神经网络是一种深度学习的技术,可以有效地处理结构化数据,被广泛地应用于搜索、推荐、自然语言处理等重要领域.但现实世界中的图数据往往缺少标签,对大量的图数据进行标注需要消耗昂贵的精力和资源,因此有监督的训练方式已经无法满足图领域的需求.图对比学习是对比学习在图上的实现,作为自监督方式的一种,与依赖数据标签的有监督学习模型相比,图对比学习可以并有效地缓解图中缺少数据标签及结构不公平等问题,并学习到迁移能力更强的知识.近

年来图对比学习被广泛应用并取得了诸多成果,如在图神经网络推荐领域中,其被用于缓解数据稀疏、噪声干扰、长尾分布等问题以提高推荐效果,如文献[1]中使用图对比学习缓解社交推荐中用户及物品的稀疏问题,文献[2]中使用图对比学习缓解知识图谱推荐中物品—实体间数据噪声和稀疏性问题.文献[3]中使用图对比学习缓解传统基于GNN的协同过滤模型缺少监督信号的问题,并提高模型捕获用户高阶依赖关系的能力,以提高推荐质量.文献[4,5]中将图对比学习结合信息瓶颈理论(Information Bottleneck)以消除推荐中存在的噪声,并最大化GNN捕获与推荐任务相关信息的能力.

本文按照图对比学习主要构成部分将现有图对比学习研究分为数据增广方式的图对比学习研究、样本对构造的图对比学习研究及不同对比学习粒度的图对比学习研究.数据增广方式的图对比学习研究重点在探索如何为不同类型的图数据生成更好的对比视图,现有数据增广方式可分为3种:基于结构变换、基于语义信息及基于深度学习的数据增广方式.样本对构造方式的图对比学习研究重点在探索如何筛选并构造

收稿日期:2023-11-27 收修改稿日期:2023-12-22 基金项目:国家自然科学基金项目(31671589)资助;安徽省自然科学基金项目(210805MF209)资助;安徽省科技重大专项项目(202103b06020013)资助;安徽省高校自然科学研究项目(YJS20210235)资助. 作者简介:吴国栋,男,1972年生,博士,副教授,CCF会员,研究方向为深度学习、推荐系统和智能商务;吴贞畅,男,1998年生,硕士研究生,研究方向为深度学习、图对比学习推荐等;王雪妮,女,1996年生,硕士研究生,研究方向为深度学习、用户多行为推荐等;胡全兴,男,1999年生,硕士研究生,研究方向为深度学习、区块链等;秦辉,男,1999年生,硕士研究生,研究方向为深度学习、超图神经网络推荐等.

可以为模型带来更多收益的样本对,其研究内容从硬负样本、假负样本及正样本 3 方面展开.不同对比粒度的图对比学习研究重点在探索如何根据下游任务在节点—节点、节点—图及图—图对比粒度上做出选择.

1 图对比学习

图对比学习利用给定的大量无标注图数据对编码器(图神经网络)进行训练,旨在编码出能够更好地保留图数据特性的图、节点表示,并缓解模型对标签数据的依赖问题.

现有图对比学习研究中大多沿用了以前对比学习的双塔式结构.文献[6]中提出的节点级图对比学习通用框架,如图 1 所示.首先对输入图(G)进行数据增广,得到两个对比视图 G_1 、 G_2 ,通过编码器处理之后得到两个对比视图下每个节点的嵌入.两个对比视图中的同一个节点构成正样本对,与其它节点构成负样本对,通过最大化正样本对之间的一致性和负样本对之间的差异性为模型训练提供自监督信号.

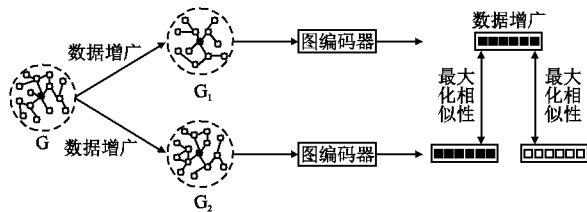


图 1 图对比学习框架

Fig. 1 Framework of graph contrastive learning

一个好的图对比学习模型应该兼顾一致性和均匀性.一致性是指图对比学习学习到的正样本样本嵌入在投影空间上较为相近.但是只关注一致性会导致所有节点学习到的嵌入表示坍塌到常量级别,即模型坍塌.因此图对比学习中引入负样本对模型进行限制,这时图对比学习模型就需要兼顾均匀性,即所有节点嵌入在投影空间上尽可能均匀分布,以更多地保留节点的个性化信息.而 InfoNCE 函数会尽可能地在节点嵌入的一致性和均匀性之间找到折中方案,这与图对比学习的理念十分契合,因此被广泛用为图对比学习损失函数,InfoNCE 函数如公式(1)所示:

$$L_i = -\log \left(\frac{\exp(S(z_i, z_i^+)/\tau)}{\sum_{j=0}^k \exp(S(z_i, z_j)/\tau)} \right) \quad (1)$$

其中 $S(*)$ 为相似度计算函数, τ 为温度超参数.

2 图对比学习主要研究

通过对已有图对比学习研究文献进行深入分析,本文认为图对比学习当前研究工作主要从数据增广方式、样本对构造方式及不同对比粒度 3 个方面展开,具体如图 2 所示.

2.1 数据增广方式的图对比学习

数据增广最重要的原则是不从根本上改变数据或图中节点的标识,以避免对下游任务造成影响.不合适的数据增广方式对于图数据可能会产生很大的负面影响,如在化学分子类型数据集所构建的图神经网络中,边代表分子的化学键,而化学键的变动会极大的改变分子的属性甚至使其失去有效性,

因此在该类数据集上,以边的随机删除或添加作为数据增广方式显然是不合适的.同理,对于其它类型图数据而言,也不

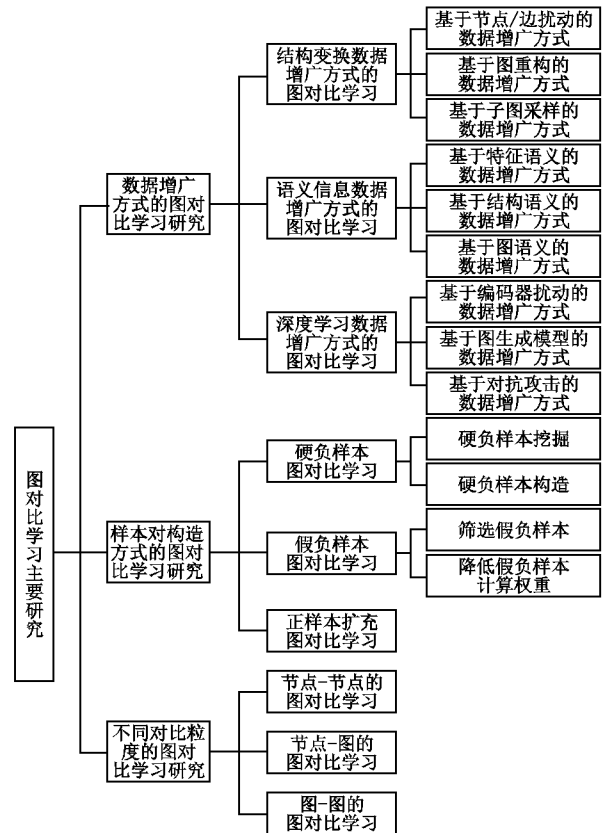


图 2 图对比学习主要研究

Fig. 2 Research on graph contrastive learning

是所有数据增广方式都能够为模型带来增益.且不同数据增广方式的组合也会为模型带来不一样的效果,如 Zhu Y 等^[7]中通过观察实验结果得出生成稀疏视图的拓扑增强对图对比学习效果的提升最大,且从拓扑结构和特征级别混合的数据增广会进一步提升其效果.主要不同的图数据增广方式有:基于结构、基于语义信息和基于深度学习的数据增广方式.

2.1.1 结构变换数据增广方式的图对比学习

1) 基于节点/边扰动的数据增广方式

基于节点/边扰动的数据增广方式在图对比学习研究领域较为常见,如 Jiang F 等^[8]在原始图数据上分别以删除用户社交关系和物品关联生成两个对比视图.

You Y 等^[9]通过实验证明通过混合多种数据增广方式可以提高图对比学习的有效性.作者还对一些被较为广泛使用的数据增广方式进行了探索,其主要研究成果如下:1) 通过组合不同数据增广方式,确实会带来更多收益.当对比视图中的两个视图均为通过数据增广方式所生成时,会比原图和单个生成的视图构造的对比视图带来更多收益;2) 边扰动有益于社交类网络,但是会损害生物分子类型网络.在社交类网络中,边的变化并不会引起节点属性的太大改变,而生物分子数据的“语义”对单个边的变化会更加敏感;3) 在较密集的图中使用属性遮蔽可以获得更好的效果.因为在高密度图神经网络中,GNN 可以根据节点的上下文信息对其缺失信息进行重建;4) 节点删除和子图,一般都会为图数据集带来收益.

文献[10]提出了4种将GAT(Graph Attention Network)融入到节点/边遮蔽中的策略:1)最大注意力遮蔽.将具有最大注意力得分的节点/边进行遮蔽,可以生成具有最大差异性的增强视图;2)最小注意力遮蔽.将具有最小注意力得分的节点/边进行遮蔽,可以产生具有最小差异性的增强视图;3)随机遮蔽的节点/边;4)将节点/边的注意力得分作为其被遮蔽的概率.作者在分子属性预测领域中对提出的几种数据增广方式进行对比实验,结果表明最大注意力遮蔽效果始终最佳,并通过分析得出结论最大注意力遮蔽提高了模型从较大差异的视图中区分出正负样本的能力,从而为模型带来了更多的收益.文献[11]则在基于边丢失/添加的基础上生成对比方式,随后引入InfoMin作为知道原则反向优化边丢失/添加的过程,实现模型在捕获与下游任务相关信息的同时,在两个对比视图间共享最少信息.

应用图对比学习时也可针对当前领域中存在的问题制定数据增广方式,如为了缓解图神经网络推荐领域中的度偏差问题,Wu等^[12]中以边丢失作为数据增广方式时,有意的减少高阶节点的影响.文献[13]也针对该问题提出了一种新的学习范式SCL.SCL引入了一种新的数据增广方式:节点复制(Node Replication,NR),其核心思想为,将当前节点的交互以概率 ρ 替换为相似节点对应的交互.

为了缓解由手工预定义的数据增广方式带来的不便,Zhu等^[14]提出了一种具有自适应能力的图对比学习GCA.GCA采用基于节点级别和拓扑(边)级别联合的方式对图进行数据增广,通过计算边和节点特征维度的重要性,以较大的概率对不重要的边和节点进行删除或屏蔽,这种方式可以节省大量人工资源.

2)基于图重构的数据增广方式

为缓解大多数数据增广方式(如节点/边扰动、用户聚类)无法有效地保留图数据原有语义结构的问题,文献[15]中提出LightGCL模型使用奇异值分解的方式对图数据进行重构,以保留图中全局协同信号.LightGCL利用公式(2)对图邻接矩阵进行奇异值分解.

$$A = USV^T \quad (2)$$

其中矩阵 S 中保存邻接矩阵 A 的奇异值,矩阵 U 、 V 分别为矩阵 S 的行列正交矩阵,LightGCL通过保留矩阵 S 最大的前 q 个奇异值得到一个新的矩阵 S_q 并通过公式(3)得到重构图的邻接矩阵 \hat{A} .

$$\hat{A} = U_q S_q V_q^T \quad (3)$$

其中 U_q 、 V_q 分别包含了矩阵 U 、 V 的前 q 列,通过邻接矩阵 \hat{A} 构造出一个新图,与原图构成对比视图,最后在LightGCL融入了文献[16]中提出的随机奇异值分解算法以缓解其在大型图上使用时带来的计算量负担.

3)基于子图采样的数据增广方式

子图采样也是一种常见的图结构转换的数据增广方式,如文献[17]基于广度优先搜索的方式进行子图采样并作为对比视图.文献[18]在锚节点的 r -中心网络中进行随机游走,采样出两个子图作为对比视图.文献[19]将全局的邻接矩阵转换为扩散矩阵,并将扩散矩阵作为邻接矩阵构建一个对比视图.随后在两个视图中对相同的节点进行子图采样,得到两个子图作为同一批训练的对比视图,并利用构造的对比

任务最大化两个视图之间的互信息.

基于图结构变换的数据增广方式会破坏图中原本的结构信息,甚至会造成重要信息的丢失,因此该类型数据增广方式的泛化能力较低.虽然文献[14]在GCA模型中提出了具有自适应性的数据增广方式,但是边/节点丢失的方式无法充分发挥各领域图中数据的特性(如社交关系、捆绑关系等),因此GCA的适用范围任然十分有限.

2.1.2 语义信息数据增广方式的图对比学习

1)基于特征语义信息的数据增广方式

Yu等^[20]在SimGCL模型中,通过在节点原始表征中添加均匀噪声的方式,生成两个对比视图,以降低模型复杂程度.对于给定的节点 i 及其 d 维表征,通过公式(4)进行表征级增广:

$$e'_i = e_i + \Delta'_i, e''_i = e_i + \Delta''_i \quad (4)$$

Δ'_i, Δ''_i 为噪声向量,其限制条件为:① $\|\Delta\|_2 = \epsilon$, ϵ 为超球面的半径;② $\Delta = \bar{\Delta} \odot \text{sign}(e_i)$, $\bar{\Delta} \in \mathbb{R}^d \sim U(0,1)$.通过这种方式,增强表征可以保留原始表征的大部分信息和一些方差.为了进一步降低模型计算量,作者在文献[21]中以SimGCL为基础,进一步提出了XSimGCL模型,通过共享推荐任务和对比任务的正/反向传播通道,大大减少了模型的计算负担.

文献[22]则利用Dropout层多次对节点嵌入进行处理,得到两个具有差异性的节点表征,并将其用于构造对比任务,通过避免图结构上的扰动来降低图对比学习模型的复杂程度.

Shen X等^[23]提出的NCLA模型,通过多头注意力机制学习到不同视图下各个边的权重系数,并将其融入到节点嵌入的学习过程中,生成不同节点表征,并用于对比损失的计算.

上述文献均是通过对节点嵌入做扰动构造对比视图,但相比之下NCLA模型则更充分地利用了图数据的结构性这一特点,不同对比视图下的节点嵌入也具有较高的真实性.

2)基于结构语义信息的数据增广方式

图数据中多种类型的节点和边之间存在着丰富的语义信息,因此需要选择更加能够保留语义信息的数据增广方式来提高模型训练效果,如文献[24,25]直接使用元路径或结合网络模式构造对比视图.文献[26]则采用元路径和用户行为序列来构建对比视图,通过元路径保留异构图中的语义关系.但是使用元路径无法有效地提取高阶结构,并且从源节点出发,元路径可以到达的节点数量通常很大,因此Jiang X等^[27]提出使用元图缓解上述问题,将原图中剔除锚节点构成的节点序列作为正样本,负样本对则使用上一批次训练中构造的正样本队列,并对其进行动态更新.该文中还利用节点关系帮助构建图对比学习任务,将图中锚节点存在的关系与其他关系(可能并存在于该图中)之间构成负样本对.Yang等^[28]提出的HMG-CR模型,为了解决元路径只能建模出用户单一行为模式的缺点,提出以超元路径构建对比视图.超元路径是指定两个端点之间多条元路径的组合,元路径和超元路径的示例如图3所示.

HMG-CR在使用超元路径构造超元图时,依次增加超元路径中元路径的数量,如第1超元路径为用户直接购买物品,第2超元路径包含用户直接购买和用户查看后再购买两种元

路径,因此所构造的第 2 超元图中包含第 1 超元图中的行为模式. 为了避免 GNN 编码器在每个超元图上进行学习时,将不同行为模式进行融合,HMG-CR 在前后两个视图间进行对比学习,最大化两个视图之间的差异性,以捕获不同行为模式之间的差异.

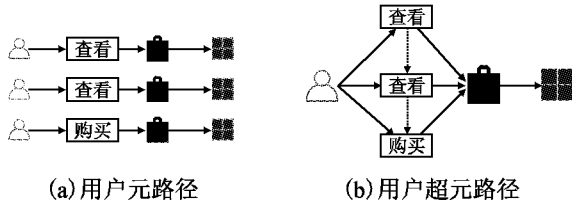


图 3 元路径及超元路径示例图

Fig. 3 Example diagram of meta-path and hyper meta-path

HMG-CR 中利用超元路径保留高阶语义信息,但需要对不同图数据及不同交互类型设计元路径及超元路径,在一定程度上影响模型的泛化能力提高模型的复杂度,Chen Z 等^[29]提出的模型 PASCAL 则通过图 4 中预定义的 5 种基序保留节点在图中的高阶语义信息,具有较高的泛化能力.

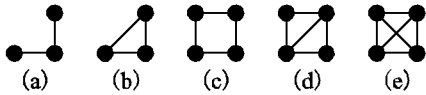


图 4 网络基序示例图

Fig. 4 Example diagram of network motif

PASCAL 通过筛选出锚节点所有基序为其采样子图,利用子图聚合器将其融入到构造出的两个对比视图中,采用子图聚合的方式代替传统邻居聚合的方式,以保留高阶语义信息.

3) 基于图语义信息的数据增广方式

图对比学习在推荐领域中还能够利用社交关系、捆绑关系、知识图谱等语义信息构造对比视图,如文献[30]中则利用用户—物品会话数据分别构建出用户—物品交互二部图及超图,并将其作为对比视图,以实现不同视角下同一物品信息表示的互补,进一步提高学习到的物品表征准确度. 文献[31]利用用户—物品—捆绑之间的语义关系将图数据划分为两个视图:1) Bundle-View. 通过用户、捆绑及两者之间的交互构造的 U-B Graph;2) Item-View. 该视图有两个图结构,分别是用户—物品交互图和物品—捆绑的所属关系图. 文献[32]通过对用户—物品交互图及用户社交网络进行数据增广得到朋友视图、偏好视图以及共享视图,经过三元训练得到伪标签并用于构造对比学习任务所需要的正负样本对. 文献[33]在知识感知推荐中根据用户—物品—实体 3 种类型数据将图划分为:全局视图、协同视图(用户—物品交互图)和语义视图(物品—实体关系图),并在这 3 个视图上构造图对比学习任务. 文献[34]中提出的 CML 根据用户的多种行为类型构造出相应的用户—物品交互图,并将其作为对比视图. 文献[35]利用商品图和会话图之间的互补信息,从会话数据中导出这两类子图作为对比视图.

Xie 等^[36]提出对比跨领域推荐框架 CCDR,通过引入图对比学习,旨在以自监督的训练方式解决跨领域推荐中目标

域存在的数据稀疏和流行度偏差问题. CCDR 将物品的各个属性分离出来作为节点融入图的构造,并使用两层 GAT 学习所有节点表征,将其用于对比学习任务的构造. CCDR 中分别设计了一个域内对比学习任务和 3 个域间对比学习任务,域

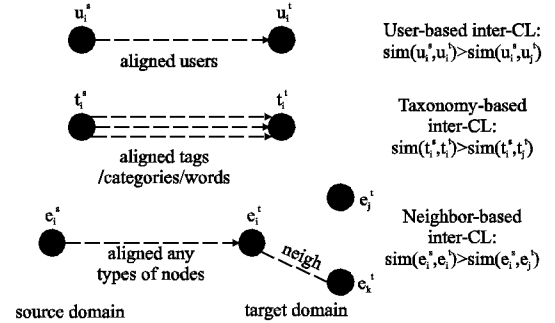


图 5 CCDR 域间对比学习示意图

Fig. 5 Schematic of CCDR inter-domain contrastive learning 域内对比学习任务作用于目标域内用户节点之上. 3 个域间对比学习任务分别作用在两个域之间不同类型节点之上,具体如图 5 所示,分别为基于用户的域间对比学习、基于分类的域间对比学习和基于邻居的域间对比学习.

2.1.3 深度学习数据增广方式的图对比学习

1) 基于编码器差异的数据增广方式

现有研究成果中也有诸多采用深度学习的模型或算法为图对比学习生成对比视图,如 Li Haifeng 等^[37]提出的 iGCL 模型中通过采用两个不同的图神经网络对数据进行编码以构造节点表征具有差异性的对比视图. 文献[38]中则通过对编码器进行扰动来生成不同的节点表征,并用于图对比学习任务,以缓解传统数据增广方式需要耗费大量精力的不足. 文献[39]中提出一个双层优化框架(Joint Augmentation Optimization, JOAO)实现自动、自适应地选择数据增广方案,此外作者还提出了一种增强感知投影头机制,该机制将通过不同的投影头输出特征,对应于每个训练步骤中选择的不同增强方式.

2) 基于图生成模型的数据增广方式

文献[40]中将一些选定的数据增广方式作为先验知识,并提出一个可学习先验的图生成模型框架,结合使用 InfoMin 和 InfoBN 指导图生成模型进行先验学习,并将其用于生成对比视图,一定程度上提高了图对比学习的自适应性和可推广性.

3) 基于对抗性攻击的数据增广方式

文献[41]将图灰盒攻击融入图对比学习,以提高模型的鲁棒性. 在对抗层面该模型利用梯度信息指导边的删除和添加. 首先通过随机特征遮蔽生成两个不同的视图,进行前后向传播计算出各个边的梯度值并删除图中梯度值最小的边子集. 边的添加从集合 S^+ 中选取, S^+ 为边 (u, v) 的集合,其中 v 为锚节点, u 是某些节点 $v'(v \neq v')$ 的 l -hop 内邻居节点,但不是节点 v 的 l -hop 内邻居节点. 在添加边时首先以权重 $1/|S^+|$ 将候选集后所有边添加到图中,并计算各个边的梯度值,只保留 S^+ 中梯度值最高的边.

除上述内容外,其它领域针对图数据增广的研究成果也可考虑用于图对比学习领域内. 如 Han X 等^[42]针对以往图数

据增广方式只考虑图内的节点和边的现象提出 G -Mixup, 通过处理不同图实例得到增广图. G -Mixup 使用阶梯函数对两个不同类别图的集合 $G = \{G_1, G_2, \dots, G_k\}$, $H = \{H_1, H_2, \dots,$

$H_k\}$ 分别估计出其 Graphon, 将两个 Graphons 及其标签进行线性插值得到一个混合 Graphon, 对该混合 Graphon 进行采样, 得出一个新的图集合 $I = \{I_1, I_2, \dots, I_k\}$ 作为额外的训练数据.

表1 数据增广方式的图对比学习主要研究

Table 1 Research on graph contrastive learning with data augmentation methods

类别	方法	主要文献	优点	缺点
基于结构变换的数据增广方式	基于节点/边扰动的数据增广方式	[8]、[9]、[10]、[11]、[12]、[13]、[14]	可以生成较为稀疏的图结构, 有助于提升图对比学习效果	可能会破坏图结构中重要属性, 导致学习到的节点表示与真实值差异过大
	基于图重构的数据增广方式	[15]	提升模型有效性	通用性低下
	基于子图采样的数据增广方式	[17]、[18]、[19]	缓解模型计算量负担	通用性低下
基于语义信息的数据增广方式	基于特征语义的数据增广方式	[20]、[21]、[22]、[23]		
	基于结构语义的数据增广方式	[24]、[25]、[26]、[27]、[28]、[29]	利用图数据中多种语义关系提高模型的有效性	模型较为复杂
	基于图语义的数据增广方式	[30]、[31]、[32]、[33]、[34]、[35]、[36]		
基于深度学习的数据增广方式	基于编码器扰动的数据增广方式	[37]、[38]、[39]		
	基于图生成模型的数据增广方式	[40]	在一定程度上提升数据增广方式的自适应能力	模型较为复杂, 计算量较大
	基于对抗性攻击的数据增广方式	[41]		

表1 归纳了有关数据增广方式的图对比学习主要研究, 并对主要优缺点方面进行了总结.

2.2 样本对构造的图对比学习研究

针对样本对的图对比学习研究工作主要以硬负样本、假负样本及正样本扩充几方面展开, 但大部分研究工作聚焦在负样本对的构造上, 以期能够为模型带来更多、更有效的收益.

2.2.1 硬负样本图对比学习

1) 硬负样本挖掘

在构造负样本对时, 大多模型简单地把正样本对外的所有节点视为负样本, 这种方式默认所有负样本对图对比学习目标的贡献值是相等的, 但这显然是不成立的, 当所选取的负样本节点本身与锚节点具有很大的差异性时, 模型可以很轻易地将其与锚节点进行区分, 此时模型不能够得到有效的训练.

Robinson 等^[43]认为, 与度量学习一样, 图对比学习受益于硬负样本, 并提出了两个准则用于指导硬负样本的挖掘: 1) 负节点的标签应该与锚节点标签不同; 2) 最有用的负样本是那些当前嵌入被认为与锚节点相似的负样本. 此类负节点可以提供显著的梯度信息, 以供模型训练期间使用. 为了确保自监督训练中准则1)的条件成立, 该文中通过为节点生成伪标签帮助模型筛选出真正的负样本. 然后通过计算出负节点和锚节点之间的相似度, 依照准则2)筛选出其中的硬负样本. Zhang L 等^[44]在进行常识性问答研究时, 利用硬负样本与正样本难以区分的这一特性, 直接将训练时模型选择的错误答案作为硬负样本, 但这一方案的通用性极其低下的, 不具有可转移性.

文献[45]中提出的 AUGCL 模型利用节点间亲和力进行硬负样本挖掘, AUGCL 将锚节点的负样本候选集通过聚类划分为两个不同的子集, 将与锚节点足够相似的节点标签设为1, 其余节点标签为0, 并利用 Deep Gambler (DG)^[46]方法

计算每个负样本节点和两个子集间的亲和力不确定值, 为难以区分的节点赋予较大的不确定值, 将得到的亲和力不确定矩阵作为负样本节点的权重矩阵, 使硬负样本能够发挥更重要的作用.

2) 硬负样本构造

与上述挖掘硬负样本的研究不同, 一些文献旨在通过某种手段(如多样本混合)为锚节点生成高硬度的负样本节点, 提升图对比学习的效果, 如文献[47]通过 Mixup 方法, 提取部分正样本节点的表征融入到负样本节点表征中, 生成硬负样本节点表征. 同样使用混合思想构造硬负样本节点的研究还有文献[48], 该文中提出的 M-Mix 通过公式(5)对到的节点嵌入分别在原始空间和投影空间上进行融合, 为锚节点生成硬度更高的负样本节点.

$$\hat{z}_i = \lambda_1 z_1 + \lambda_2 z_2 + \dots + \lambda_N z_N = \sum_j \lambda_j z_j, s. t. \sum_i \lambda_i = 1 \quad (5)$$

其中 Z_i 代表节点 i 的表征, 原始空间和投影空间上混合节点的权重分别通过公式(6)、公式(7)计算出, 为了降低 M-Mix 为模型带来的计算负担, 在混合时只考虑锚节点的邻居节点.

$$\lambda_i = \frac{\exp(H(z_i, z_j))}{\sum_k \exp(H(z_i, z_k))}, s. t. 0 < k < = N \quad (6)$$

$$\lambda_j = \frac{\exp(H(z_i^T p_m, z_j^T p_n))}{\sum_k \exp(z_i^T p_m, z_k^T p_n)}, s. t. 0 < = j < = N \quad (7)$$

其中 p_m, p_n 是两个可学习的权重参数, M-Mix 通过对引入常量 C 对公式(6)进行优化, 并对投影后空间上计算式设计一个新的任务, 以降低学习混合硬负样本节点时节点自身所带来的影响, 具体分别如公式(8)、公式(9)所示:

$$\lambda_j = \frac{(1 - C) \exp(H(z_i, z_j))}{\sum_k \exp(H(z_i, z_k))}, s. t. 0 < = j < = N, j \neq i \quad (8)$$

$$L_{Div} = -\frac{1}{N} \sum_T \left(\frac{z_i^T p_m}{\|z_i^T p_m\|_2} - \frac{z_i^T p_n}{\|z_i^T p_n\|_2} \right)^2 = 2 \cdot \frac{(z_i^T p_m)^T (z_i^T p_n)}{\|z_i^T p_m\|_2 \|z_i^T p_n\|_2} - 2 \quad (9)$$

Zhu 等^[49]将图结构考虑进硬负样本采样的筛选中,从结构相似度的角度对负样本的硬度进行探索,弥补语义级别表征不足以计算每个负样本硬度的缺点.通过引入结构感知度量 $s(i, j, p)$,用于计算表征给定语义视图 p 下的负样本节点 v_i 到锚节点 v_j 的距离,这个距离可以被视为负样本节点 v_i 的硬度.根据计算出的硬度指标对节点进行排序,然后选择前 T 个负样本,形成语义视图 p 下的候选列表.通过创建的凸线性组合将其合成 M 个新的硬负样本节点,其中 M 远小于 $|V|$ (异构图节点的数量).随后 Zhu 等^[50]将上述基于结构感知的硬负样本挖掘方法用于异构图领域提出 STENCIL 模型. STENCIL 通过元路径将异构图划分为各个子图,并在各个子图中基于图结构进行硬负样本构造,以提升图对比学习模型效果.

2.2.2 假负样本图对比学习

1) 筛选假负样本

图对比学习中存在着假负样本的问题,假负样本就是被错标为负样本的与锚节点相似度高正样本.使用假负样本构造假负样本对,会导致原本相似的节点嵌入,在映射空间上被推远,降低模型学习节点准确表征的能力.为缓解假负样本对模型带来的负面影响,文献[19]中在数据预处理阶段计算出所有节点之间的相似度,将生成视图中锚节点及其一定量的相似节点视为正样本,通过提前筛选以减少假负样本的数量.

但是文献[19]中在筛选假负样本的时候,没有充分考虑到图数据的结构性,Zhang 等^[51]提出的 FD4GCL 模型则同时考虑了节点的属性相似度和结构相似度. FD4GCL 提出只有当节点的属性相似度和结构相似度均大于阈值时,才可以被定为假负样本.由于模型训练过程是动态变化的,因此 FD4GCL 通过公式(10)计算节点属性相似度阈值.

$$\alpha + (0.9 - \alpha) \frac{t}{T} \quad (10)$$

其中 α 为超参数, t 代表当前训练批次, T 表示训练的总批次.结构上,计算节点 v_j 对于节点 v_i 的 PageRank 分数,并将其作为两者结构相似度.对于结构阈值,由于图结构在训练过程不会改变,因此将其设定为超参数 β .

但这种通过计算节点之间相似性筛选假负样本的方式,无疑会大大增加计算工作量,尤其是在大型图上应用时.

文献[52]基于语义的角度出发,提出一种原型图对比学习(PGCL)方法,将语义相似的节点聚类到一起,聚类的中心作为该组节点的原型,当给定一个锚节点时,其它集群中的节点作为负样本.基于正、负样本原型之间的距离对负样本进行权重赋值,使中等原型距离的负样本获得相对较大的权重,以确保正、负样本之间的语义差异,帮助缓解假负样本问题.

文献[53]中提出了两种方法:ProGCL-权重和 ProGCL-mix,用于判定负样本是否为真的概率. ProGCL-权重通过公式(11)计算出负样本的硬度和为真的概率:

$$w(i, k) = \frac{p(c_i | s_k) s_{ik}}{N - 1 \sum_{j \neq i} [p(c_i | s_k) s_{jk}]} \quad (11)$$

其中 S_{ik} 是锚节点 u_i 及其负样本 v_k 之间的相似度, $p(c_i | s_{ij})$ 表示 v_j 相对于锚节点 u_i 为真负的概率. ProGCL-mix 通过公式(11)度量出的硬度值最高的 N 个负样本,并从中随机选择两个节点 v_p, v_q ,通过公式(12)合成更多的负样本 \tilde{u}_k ($k \in [1, m]$):

$$\tilde{u}_k = \alpha_k v_p + (1 - \alpha_k) v_q \quad (12)$$

其中 α_k 通过公式(13)计算得到.

$$\alpha_k = \frac{p(c_i | s_{ip})}{p(c_i | s_{ip}) + p(c_i | s_{iq})} \quad (13)$$

2) 降低假负样本计算权重

文献[54]中则假设负样本中假负样本占比为 τ^+ ,则真正的负样本占比为 $1 - \tau^+$,并通过训练学习到 τ 最真实的值,最后利用公式(14)进一步衡量负样本对分值,以降低假负样本所带来的影响.

$$g(u, i, \{i_l\}_{l=1}^L) = \frac{1}{1 - \tau^+} \left(\frac{1}{L} \sum_{l=1}^L e^{\phi(u, i_l)} - \tau^+ e^{\phi(u, i_l)} \right) \quad (14)$$

其中 u 表用户 u , i 表示项目 i , i_l 表示用户没有交互过的负样本, L 表示用户 u 的负样本数量.括号中第 2 项为用户 u 的正分值.

2.2.3 正样本扩充图对比学习

现存图对比学习大部分研究成果中,在构造样本对时只考虑单个正样本及多个负样本,虽然通过挖掘硬负样本等方式可以提升负样本为模型带来的作用,却忽略了正样本的作用.为了缓解这一问题,文献[55]中通过随机采样的方式为锚节点提供多个正样本,以保证学习到的节点表征分布均匀性的同时,提高其对齐性.文献[56]中提出的 MSCL 模型,同样采取随机采样的方式获取多个正样本,同时对损失函数中添加权重系数,以权衡不同图数据中正负样本的重要性,提高正样本利用率.文献[23]中提出的 NCLA 模型则是简单地将锚节点的邻居节点均视为正样本. MSCL 和 NCLA 虽然提高了正样本的利用率,但在选取正样本时都忽略了用户交互噪声、负样本节点等问题,会在一定程度上降低学习到的节点表征的准确度.

与文献[23,55]及文献[56]在锚节点以外的节点中提取正样本的方式不同, Lin 等^[57]提出的 NCL 模型则是在学习节点嵌入的过程中构造多个正样本对. NCL 同时将结构和语义上的相邻关系融入该构建过程中.结构上,节点的初始嵌入及其各偶数层嵌入构成正样本对,与其它节点的初始嵌入作为负样本.语义上, NCL 对节点的嵌入进行聚类,类簇的中心作为该类簇中所有节点的原型,节点自身原型为正样本,其他原型则为负样本.

表 2 归纳了样本对构造方式的图对比学习主要研究,并对主要优缺点方面进行了总结.

2.3 不同对比粒度的图对比学习研究

2.3.1 节点—节点的图对比学习

图对比学习可以根据下游任务的粒度不同,选择合适的对比级别,当下游任务粒度为节点级别时,为了保留和下游任务最大的相关信息,对比级别大多选择在节点粒度上.如在图对比学习推荐领域中,由于下游任务要学习节点表征,因此大都选择节点—节点的对比粒度.如文献[58]为微视频数据多种模态信息(文本、图像、声音)都设计出一个二分图,通过边

丢失和不同模态特征遮蔽生成对比视图,并采用对比损失 InfoNCE 最大化锚节点与正样本之间的一致性,及最小化与负

样本节点之间的一致性.采用这种对比粒度的主要目的是为了通过图对比学习探索出不同模态之间的相关性.

表2 样本对构造方式的图对比学习主要研究

Table 2 Research on graph comparison learning with sample pair construction methods

类别	方法	主要文献	优点	缺点
硬负样本主要研究	硬负样本挖掘	[43]、[44]、[45]	通过硬负样本利用率以提升模型性能	计算量较大
	硬负样本构造	[47]、[48]、[49]、[50]	可以构造出硬度更高的负样本帮助模型进行训练	计算量较大
缓解假负样本问题主要研究	筛选假负样本	[19]、[52]、[53]	降低假负样本对模型训练时的影响,提高模型性能	与硬负样本挖掘在一定程度上有冲突
正样本扩充主要研究	降低假负样本计算权重	[54]		
	/	[23]、[55]、[56]、[57]	提高正样本利用率	模型计算量较大

文献[59]通过不同辅助信息(用户间社交信息、物品间关联关系)的组合构建两个对比视图,利用两个视图中节点构造对比学习任务,以最大化不同视角下节点的互信息,从而获得更高质量的节点嵌入.

2.3.2 图—图的图对比学习

文献[9]中提出的 GraphCL 模型是一个典型的全局—全局对比模型,通过最大化两个对比视图之间的一致性来学习图的表示,以捕获图数据中的高度异构信息. GraphCL 在图神经网络训练过程中,随机采样一小批 N 个图并通过图对比学习处理,得到 $2N$ 个增广图和相应的对比损失,通过公式(15)计算第 n 个图的对比损失.

$$L_n = -\log \frac{\exp(\text{sim}(z_{n,i}, z_{n,j})/\tau)}{\sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\text{sim}(z_{n,i}, z_{n',i})/\tau)} \quad (15)$$

其中 $z_{n,i}$ 、 $z_{n,j}$ 为同一批次中第 n 个图的两个数据增广图的表征, $\text{sim}(\ast)$ 为余弦相似度计算函数, τ 为温度系数. 其模型结构如图 6 所示.

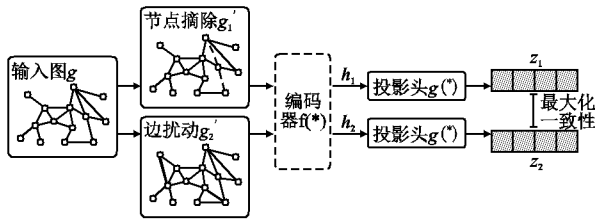


图6 GraphCL 模型结构图

Fig. 6 Architecture of model GraphCL

文献[18]提出的 GCC 模型,通过设定最大长度,得到锚节点的 r -中心网络,随后通过随机游走得到关于该节点的子图结构,并编码出各个子图的图级表示.同一锚节点的两个子图构成正样本对,与其它子图构成负样本对,通过这种图—图对比粒度提高图神经网络编码器捕获图结构特征的能力.其模型结构如图 7 所示.

2.3.3 点—图的图对比学习

Hassani K 等^[19]提出最大化节点表示与另一个视图的图表示之间的一致性,以训练编码器能够学习到更多的有用信息,并通过观察实验结果给出以下结论:1)在图领域中,增加对比视图的数量并不会提高模型效果,而只用一阶邻居和整体图信息这两个视图的时会取得最佳的效果;2)对于图—图的对比和多规模的对比,节点—图的对比效果会更好.在

Hassani K 等的实验中,首先通过 Heat Kernel 或 Personalized PageRank 将全局的邻接矩阵转换为扩散矩阵,以扩散矩阵为邻接矩阵构建一个对比视图.对两个视图中的锚节点进行子

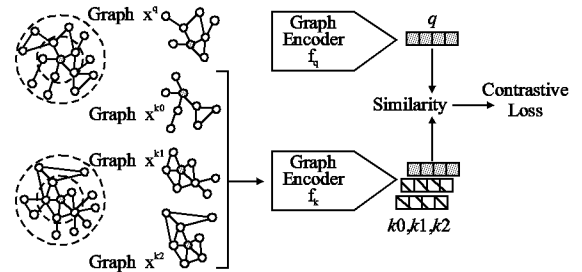


图7 GCC 模型结构图

Fig. 7 Architecture of model GCC

图采样,并作为对比视图.将学习到的锚节点的表征与另一个视图的图表征进行对比,实现最大化两个视图互信息的最大化.其目标损失函数如公式(16)所示:

$$\max_{\theta, \omega, \phi, \psi} \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \left[\frac{1}{|g|} \sum_{i=1}^{|g|} [MI(\vec{h}_i^a, \vec{h}_g^a) + MI(\vec{h}_i^b, \vec{h}_g^b)] \right] \quad (16)$$

其中 h_i^a 和 h_i^b 分别表示节点 i 两个对比视图下的表征, h_g^a 和 h_g^b 为两个对比视图的图表征.

文献[60]中认为经过图神经网络中的若干层卷积,图中节点表示可以看作是节点感受野内子图的编码.最后在图对比学习任务中最大化图表示和每个节点的隐变量之间的互信息,可使图表征学习到图中每个子结构共有的特性.

Zhang Z 等^[61]提出的 LGCL 模型(Line Graph Contrastive Learning)中提取预测链路连接的两个节点的 h -跳子图构成子图,获取子图后将其边转换为线图集中的节点,若子图中两个边共享一个节点则在线图中为对应的两个节点添加边连接,并通过拼接子图中由边连接的两个节点的特征作为线图集中的节点特征.线图中预测链路对应的节点作为正样本,其余节点作为负样本,与子图表征构造图对比学习任务,以调节两个视图中对链路不同表示的信息.

从上述对现有图对比学习研究的归纳可以看出,现有图对比学习研究工作主要以数据增广方式和样本对构造两个方面展开.合适的数据增广方式可以提高图对比学习的效果和模型的抗噪声干扰等能力.在样本对构造方面以硬负样本挖掘和构造为主,旨在为模型带来更多更有效的收益.

3 图对比学习研究存在的主要问题

图对比学习虽在多个领域取得诸多研究成果,但现有图对比学习研究中仍然存在一些不足之处,主要问题有:数据增广方式的自适应问题、硬负样本和假负样本间调节问题、负样本依赖问题、图的动态性问题和复杂度较高问题。

3.1 数据增广方式的自适应问题

虽然现有研究成果中有人提出具有自适应能力的增广方式,但其适应范围非常有限,无法有效地利用不同图数据中的各种属性、结构特征及语义关系来构造对比视图,因此目前大多图对比学习中仍需提前确定好数据增广方式,这会浪费大量的人工精力和资源。

3.2 硬负样本和假负样本间调节问题

通过提高负样本的硬度可以为模型带来更多收益,缓解假负样本问题,可以降低其为模型带来的负面影响。但现有图对比学习研究中仅单一地考虑硬负样本和假负样本问题,甚至两者解决方案存在一定的冲突,如文献[19]为了缓解假负样本问题,将相似的一些节点作为正样本,这种方式可能会降低模型硬负样本挖掘的能力。

3.3 负样本依赖问题

图对比学习中的关键思想在于一致性和均匀性,如果只考虑正样本对之间的一致性,会导致模型最终学习到的节点表征坍塌到同一点上。因此图对比学习依赖大量负样本在提高模型学习效果的同时避免模型陷入坍塌,但构造大量有效负样本及存储需要消耗较高的代价,这也在一定程度上限制了图对比学习的发展空间。

3.4 图的动态性问题

现有图对比学习研究大多基于静态图进行探索,但现实生活中的图数据是会随着时间动态变化的,在推荐系统领域中这一点尤为明显,由于用户的偏好会随着时间的变化而动态变化,用户与物品的交互数据及属性也会随时间一直变动,因此基于静态图的图对比学习研究并不能满足这种动态图表示学习的需求。

3.5 复杂度较高问题

现有图对比学习大多作为辅助任务指导模型训练,为了创建不同的对比视图,模型中可能需要设置不止一个编码器。由于图对比学习采取的双塔式结构,每个节点都要多次计算其嵌入表示,此外还需计算大量正样本对、多个负样本对之间的相似度,这一过程引入的计算时间复杂度为 $O(n) \sim O(n^2)$,对于大型图而言,这无疑是一个很大的负担。

4 图对比学习未来主要研究方向

随着自监督学习在图神经网络领域重要性的提升,图对比学习研究也会在各领域受到越来越多的关注和应用。图对比学习未来的主要研究方向有:大规模图对比学习、自适应图对比学习、上下文图对比学习、动态图对比学习、超图对比学习、因果推断图对比学习、无负样本图对比学习。

4.1 大规模图对比学习

现实世界中图数据往往是非常庞大的(如 Facebook 的社交网络图包含超过 20 亿个节点和 1 万亿条边),且图中顶点

之间具有复杂的依赖关系。像图神经网络中最经典的 GCN 是通过卷积操作,聚合节点的高阶邻层所传递的信息,以提高学习到的节点表征的质量,但是随着卷积层数的增加,所面临的计算规模和存储空间需求都会呈指数级增长,所以如何更好地处理大规模图的训练是图对比学习所面临的挑战之一。

4.2 自适应性图对比学习

如前文 3.1 所述,目前图对比学习数据增广方式的自适应能力依然低下,由于不同图数据所携带的属性和语义关系大不相同,以及使用图对比学习的目的不同,提出一个统一且有效的数据增广方式是不可能的。但可以通过对各个领域(如跨领域推荐、多行为推荐等)研究内容进行归纳整理,提出一个在该领域内具有较高自适应能力和有效性的数据增广方式。

4.3 上下文图对比学习

上下文信息(如时间、地点等)可以帮助模型更加有效地学习节点表征,以推荐领域为例,顾客在早晨点外卖会对早点类食品更感兴趣,游客到了武汉会更有可能会点击推荐列表中黄鹤楼的信息栏,大学生会对高等数学课程更感兴趣等,上下文感知推荐系统通过提取上下文信息来分析用户的反馈,为学习用户表征提供更多有用的信息,因此上下文感知推荐系统比传统推荐系统拥有更高的准确度。通过结合图对比学习,可以提高模型捕获不同类型上下文信息之间的依赖关系,提高学习到的用户表征的准确度。

4.4 动态图对比学习

现实生活中的图神经网络通常是会不断变化的,即节点属性、数量及其相关交互等信息是会随着时间的推移而改变的,例如在电商平台上的用户对物品进行点击、收藏、购买等操作会导致节点间边(交互信息)的增加。而现有的图对比学习绝大多数都基于静态图神经网络,不能考虑到时间上下文信息,难以得到准确的用户及物品表示。

本文针对动态图对比学习数据增广方式提出以下两点建议:1)由于大多动态图神经网络以时间切片内的静态图进行表征学习,若对每个切片内都以全局式数据增广生成对比视图,则会给模型带来非常庞大的计算负担。因此建议在第一个时间切片内采取全局式数据增广,在此后的所有时间切片内,均基于前一个时间切片构造好的对比视图做进一步处理,这种方式可以为模型节省大量资源;2)充分考虑图数据中暗含的各种语义关系(如社交关系、捆绑关系等),按不同语义关系划分出对比视图。

4.5 超图对比学习

超图能够有效地建模出复杂的、高阶的数据之间的相关性,可以更好的表示底层数据之间的关系,且超边具有可以将多模态信息结合在同一结构中的优势。目前超图对比学习研究领域却很少有人涉及,所以基于超图的对比学习研究仍有很大的发展空间。

4.6 因果推断图对比学习

因果推断是根据某一结果发生的条件对因果关系作出刻画的过程,有助于确保模型估计的正确性、增强模型可解释性,基于因果推荐的图对比学习研究,旨在利用因果推断的优势,帮助图对比学习中构造硬负样本节点或缓解假负样本对模型带来的负面影响。

4.7 无负样本图对比学习

现有图对比学习研究中大都通过正负样本构造对比任务,实现最大化节点间互信息的优化目标,但是负样本的存储、构造及负样本对之间相似度的计算都需要消耗较大的代价,Xu D等^[62]在探讨负样本在图对比学习中的作用时指出,负样本并不一定是必须的.在计算机视觉领域中关于对比学习的模型BYOL^[63]、SimSiam^[64]及Barlow Twins^[65]则舍弃了负样本数据,通过对比所构建的两个网络来构建模型.舍弃负样本必须考虑到模型坍塌问题,图对比学习中通过正负样本的相互制约使得模型学习到的节点嵌入分布更均匀,若只有正样本,则可能导致模型学习到的节点嵌入映射在同一点上,导致模型坍塌.因此如何设计出一个高效的无负样本图对比学习模型,也存在着诸多挑战.

4.8 大语言模型图对比学习

大语言模型近期受到学术界和商业界的广泛关注,在现实生活中得到了应用并取得了一定的成果.由于大语言模型本质上是对文本数据的处理,因此需要将图结构等其它形式数据转换成文本形式,才能继续解决下游任务.如现有基于大语言模型的推荐系统^[66],是将用户的一系列操作转换成文本表示提交给大语言模型,从而为用户生成推荐结果.如何更好、更有效地处理好结构化图数据,是大语言模型在图神经网络领域应用所面临的挑战之一.但鉴于大语言模型出色的表现,未来或许可结合图对比学习在图神经网络领域中产出更多成果,如利用大语言模型强大的生成能力帮助图对比学习生成对比视图或硬负样本,或者通过其文本处理能力更好地利用图中包含的文本信息(如节点属性描述、推荐领域中用户对物品的描述信息)等.

5 结束语

本文从数据增广方式、样本对构造、对比学习粒度3个方面对现有图对比学习研究进行了梳理和归纳,指出了现有图对比学习研究中存在的一些缺点,并在最后对图对比学习未来研究方向进行了展望,希望可以为学者的研究和该领域的发展提供一些帮助.图结构数据在现实生活中无处不在,如社交网络、金融网络、生物网络等.图表示学习也已经在推荐系统、社交网络分析等多个领域已经取得诸多成果.但图结构数据中经常存在标签缺失的问题,因此自监督学习方式在图表示学习研究领域变得十分重要.得益于对比学习在计算机视觉领域研究成果的启发,对比学习在图领域中得到快速发展,作为自监督学习方式的一种,图对比学习可以有效的缓解图数据中标签缺失的问题,除此之外在推荐领域中,图对比学习可以有效地缓解推荐领域中数据稀疏、噪声干扰、长尾分布等问题.据目前研究成果可以看出,图对比学习仍有较大的可发展空间.

References:

[1] Zhang Y, Huang J, Li M, et al. Contrastive graph learning for social recommendation[J]. *Frontiers in Physics*, 2022, 10: 830805, doi: 10.3389/fphy.2022.830805.

[2] Yang Y, Huang C, Xia L, et al. Knowledge graph contrastive learning for recommendation[C]//Proceedings of the 45th International

ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2022:1434-1443.

- [3] Xia L, Huang C, Xu Y, et al. Hypergraph contrastive collaborative filtering[C]//Proceedings of the 45th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2022:70-79.
- [4] Wei C, Liang J, Liu D, et al. Contrastive graph structure learning via information bottleneck for recommendation[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2022, 35:20407-20420.
- [5] Suresh S, Li P, Hao C, et al. Adversarial graph augmentation to improve graph contrastive learning[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021, 34:15920-15933, doi: 10.48550/arXiv.2106.05819.
- [6] Zhu Y, Xu Y, Yu F, et al. Deep graph contrastive representation learning[J]. *arXiv preprint arXiv:2006.04131*, 2020, doi: 10.18550/arXiv.2006.04131.
- [7] Zhu Y, Xu Y, Liu Q, et al. An empirical study of graph contrastive learning[J]. *Computer*, doi:10.48550/arXiv.2109.01116.
- [8] Jiang F, Cao Y, Wu H, et al. Social recommendation based on multi-auxiliary information contrastive learning[J]. *Mathematics*, 2022, 10(21):4130, doi:10.3390/math10214130.
- [9] You Y, Chen T, Sui Y, et al. Graph contrastive learning with augmentations[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2020, 33:5812-5823, doi:10.48550/arXiv.2010.13902.
- [10] Liu H, Huang Y, Liu X, et al. Attention-wise masked graph contrastive learning for predicting molecular property[J]. *Briefings in Bioinformatics*, 2022, 23(5), doi:10.1093/bib/bbac303.
- [11] Huang J, Cao Q, Xie R, et al. Adversarial learning data augmentation for graph contrastive learning in recommendation[C]//International Conference on Database Systems for Advanced Applications, Cham: Springer Nature Switzerland, 2023:373-388.
- [12] Wu J, Wang X, Feng F, et al. Self-supervised graph learning for recommendation[C]//Proceedings of the 44th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2021:726-735.
- [13] Yang C, Zou J, Wu J H, et al. Supervised contrastive learning for recommendation[J]. *Knowledge-Based Systems*, 2022, 258:109973, doi:10.1016/j.knosys.2022.109973.
- [14] Zhu Y, Xu Y, Yu F, et al. Graph contrastive learning with adaptive augmentation[C]//Proceedings of the Web Conference, 2021:2069-2080.
- [15] Cai X, Huang C, Xia L, et al. LightGCL:simple yet effective graph contrastive learning for recommendation[C]//11th International Conference on Learning Representations, 2023, doi:10.48550/arXiv.2302.08191.
- [16] Halko N, Martinsson P G, Tropp J A. Finding structure with randomness:probabilistic algorithms for constructing approximate matrix de-compositions[J]. *SIAM Review*, 2011, 53(2):217-288.
- [17] Han Y, Hui L, Jiang H, et al. Generative subgraph contrast for self-supervised graph representation learning[C]//Computer Visio-EC-CV: 17th European Conference, Proceedings, Part XXX, Cham: Springer Nature Switzerland, 2022:91-107.
- [18] Qiu J, Chen Q, Dong Y, et al. Gcc: graph contrastive coding for graph neural network pre-training[C]//Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery

- & Data Mining, 2020; 1150-1160.
- [19] Hassani K, Khasahmadi A H. Contrastive multi-view representation learning on graphs [C]//International Conference on Machine Learning, 2020; 4116-4126.
- [20] Yu J, Yin H, Xia X, et al. Are graph augmentations necessary? simple graph contrastive learning for recommendation [C]//Proceedings of the 45th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2022; 1294-1303.
- [21] Yu J, Xia X, Chen T, et al. XsimGCL: towards extremely simple graph contrastive learning for recommendation [J]. arXiv preprint arXiv:2209.02544, 2022; 1-14.
- [22] Xu Y H, Wang Z H, Wang Z R, et al. SimDCL: dropout-based simple graph contrastive learning for recommendation [J]. Complex & Intelligent Systems, 2023; 1-13, doi:10.1007/s40747-023-00974-z.
- [23] Shen X, Sun D, Pan S, et al. Neighbor contrastive learning on learnable graph augmentation [J]. arXiv preprint arXiv:2301.01404, 2023, doi:10.48550/arXiv.2301.01404.
- [24] Li Y, Qi R. Heterogeneous graph contrastive learning for stance prediction [J]. IEICE Transactions on Information and Systems, 2022, 105(10): 1790-1798.
- [25] Wang X, Liu N, Han H, et al. Self-supervised heterogeneous graph neural network with cocontrastive learning [C]//Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2021; 1726-1736.
- [26] Wu Y, Xie R, Zhu Y, et al. Multi-view multi-behavior contrastive learning in recommendation [C]//International Conference on Database Systems for Advanced Applications, Springer, Cham, 2022; 166-182.
- [27] Jiang X, Lu Y, Fang Y, et al. Contrastive pretraining of gnns on heterogeneous graphs [C]//Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management, 2021; 803-812.
- [28] Yang H, Chen H, Li L, et al. Hyper MetaPath contrastive learning for multi-behavior recommendation [C]//IEEE International Conference on Data Mining (ICDM), 2021; 787-796.
- [29] Chen Z, Peng Y, Yu S, et al. Subgraph adaptive structure-aware graph contrastive learning [J]. Mathematics, 2022, 10(17): 3047, doi:10.3390/math10173047.
- [30] Wang Haosen, Yan Surong, Wu Chunqi, et al. Cross-view temporal graph contrastive learning for session-based recommendation [J]. Knowledge-Based Systems, 2023, 264, doi: 10.1016/j.knosys.2023.110304.
- [31] Ma Y, He Y, Zhang A, et al. CrossCBR: cross-view contrastive learning for bundle recommendation [C]//Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2022; 1233-1241.
- [32] Yu J, Yin H, Gao M, et al. Socially-aware self-supervised tri-training for recommendation [C]//Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2021; 2084-2092.
- [33] Zou D, Wei W, Mao X L, et al. Multi-level cross-view contrastive learning for knowledge-aware recommender system [C]//Proceedings of the 45th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2022; 1358-1368.
- [34] Wei W, Huang C, Xia L, et al. Contrastive meta learning with behavior multiplicity for recommendation [C]//Proceedings of the 15th ACM International Conference on Web Search and Data Mining, 2022; 1120-1128.
- [35] Xia X, Yin H, Yu J, et al. Self-supervised graph cotraining for session-based recommendation [C]//Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management, 2021; 2180-2190.
- [36] Xie R, Liu Q, Wang L, et al. Contrastive cross-domain recommendation in matching [C]//Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2022; 4226-4236.
- [37] Li Haifeng, Cao Jun, Zhu Jiawei, et al. Augmentation-free graph contrastive learning of invariant-discriminative representations [J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2023; 1-11, doi:10.1109/TNNLS.2023.3248871.
- [38] Xia J, Wu L, Chen J, et al. Simgrace: a simple framework for graph contrastive learning without data augmentation [C]//Proceedings of the ACM Web Conference, 2022; 1070-1079.
- [39] You Y, Chen T, Shen Y, et al. Graph contrastive learning automated [C]//International Conference on Machine Learning, 2021; 12121-12132.
- [40] You Y, Chen T, Wang Z, et al. Bringing your own view: graph contrastive learning without prefabricated data augmentations [C]//Proceedings of the 15th ACM International Conference on Web Search and Data Mining, 2022; 1300-1309.
- [41] Jovanovic N, Meng Z, Faber L, et al. Towards robust graph contrastive learning [C]//Workshop on Self-Supervised Learning for the Web (SSL@WWW2021), Workshop on Self-Supervised Learning for the Web, 2021, doi:10.48550/arXiv.2102.13085.
- [42] Han X, Jiang Z, Liu N, et al. G-mixup: graph data augmentation for graph classification [C]//International Conference on Machine Learning, 2022; 8230-8248.
- [43] Robinson J, Chuang C Y, Sra S, et al. Contrastive learning with hard negative samples [C]//International Conference on Learning Representations, 2021, doi:10.48550/arXiv.2010.04592.
- [44] Zhang L, Li R. Ke-gcl: knowledge enhanced graph contrastive learning for commonsense question answering [C]//Findings of the Association for Computational Linguistics, 2022; 76-87.
- [45] Niu C, Pang G, Chen L. Affinity uncertainty-based hard negative mining in graph contrastive learning [J]. arXiv preprint arXiv:2301.13340, 2023, doi:10.48550/arXiv.2301.13340.
- [46] Liu Z, Wang Z, Liang P P, et al. Deep gamblers: learning to abstain with portfolio theory [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2019, 32, doi:10.48550/arXiv.1907.00208.
- [47] YUAN C Q, LIU Y, LIU J W. Graph contrastive learning recommendation algorithm based on mixed sampling [J]. Application Research of Computers, 2023, 40(5): 1346-1351.
- [48] Zhang S, Liu M, Yan J, et al. M-Mix: generating hard negatives via multi-sample mixing for contrastive learning [C]//Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2022; 2461-2470.
- [49] Zhu Y, Xu Y, Cui H, et al. Structure-aware hard negative mining for heterogeneous graph contrastive learning [J]. arXiv preprint arXiv:2108.13886, 2021, doi:10.48550/arXiv.2108.13886.
- [50] Zhu Y, Xu Y, Cui H, et al. Structure-enhanced heterogeneous graph

- contrastive learning [C]//Proceedings of the SIAM International Conference on Data Mining(SDM), Society for Industrial and Applied Mathematics, 2022; 82-90.
- [51] ZHANG B B, WANG L. False negative sample detection for graph contrastive learning [J/OL]. Journal of Taiyuan University of Technology, 2023; 1-13, doi:10.26599/TST.2023.9010043.
- [52] Lin S, Liu C, Zhou P, et al. Prototypical graph contrastive learning [J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2022; 1-12, doi:10.1109/TNNLS.2022.3191086.
- [53] Xia J, Wu L, Wang G, et al. Progl: rethinking hard negative mining in graph contrastive learning [C]//International Conference on Machine Learning, 2022; 24332-24346.
- [54] Liu Z, Ma Y, Ouyang Y, et al. Contrastive learning for recommender system [J]. arXiv preprint arXiv: 2101.01317, 2021, doi: 10.48550/arXiv.2101.01317.
- [55] ZHANG S J, WANG Y F, XIANG W, et al. Nonparametric image clustering based on variational bayesian contrastive network [J]. Pattern Recognition and Artificial Intelligence, 2023, 36 (9): 832-841.
- [56] Tang H, Zhao G, Wu Y, et al. Multisample-based contrastive loss for top-k recommendation [J]. IEEE Transactions on Multimedia, 2021; 339-351, doi:10.1109/TMM.2021.3126146.
- [57] Lin Z, Tian C, Hou Y, et al. Improving graph collaborative filtering with neighborhood-enriched contrastive learning [C]//Proceedings of the ACM Web Conference, 2022; 2320-2329.
- [58] Yi Z, Wang X, Ounis I, et al. Multi-modal graph contrastive learning for micro-video recommendation [C]//Proceedings of the 45th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, 2022; 1807-1811.
- [59] Jiang F, Cao Y, Wu H, et al. Social recommendation based on multi-auxiliary information constrastive learning [J]. Mathematics, 2022, 10(21): 4130, doi:10.3390/math10214130.
- [60] Sun F Y, Hoffman J, Verma V, et al. InfoGraph: unsupervised and semi-supervised graph-level representation learning via mutual information maximization [C]//International Conference on Learning Representations, 2020, doi:10.48550/arXiv.1908.01000.
- [61] Zhang Z, Sun S, Ma G, et al. Line graph contrastive learning for link prediction [J]. Pattern Recognition, 2023, 140: 109537, doi: 10.1016/j.patcog.2023.109537.
- [62] Xu D, Cheng W, Luo D, et al. Infogcl: information-aware graph contrastive learning [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2021, 34: 30414-30425, doi:10.48550/arXiv.2110.15438.
- [63] Grill J B, Strub F, Alché F, et al. Bootstrap your own latent approach to self-supervised learning [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33: 21271-21284, doi:10.48550/arXiv.2006.07733.
- [64] Chen X, He K. Exploring simple siamese representation learning [C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2021; 15750-15758.
- [65] Zbontar J, Jing L, Misra I, et al. Barlow twins: self-supervised learning via redundancy reduction [C]//International Conference on Machine Learning, 2021; 12310-12320.
- [66] Zhang Z, Wang B. Prompt learning for news recommendation [J]. arXiv preprint arXiv: 2304.05263, 2023, doi: 10.48550/arXiv.2304.05263.

附中文参考文献:

- [47] 袁琮淇, 刘渊, 刘静文. 基于混合采样的图对比学习推荐算法 [J]. 计算机应用研究, 2023, 40(5): 1346-1351.
- [51] 张彬彬, 王莉. 基于伪负样本检测的图对比学习框架 [J/OL]. 太原理工大学学报, 2023; 1-13, doi: 10.26599/TST.2023.9010043.
- [55] 张胜杰, 王一飞, 向旺, 等. 基于变分贝叶斯对比网络的非参数图像聚类方法 [J]. 模型识别与人工智能, 2023, 36(9): 832-841.