

基于结构关系建模的自监督图表示学习^{*}

秦者云¹, 卢宪凯¹, 聂秀山², 尹义龙¹

¹(山东大学 软件学院, 山东 济南 250101)

²(山东建筑大学 计算机科学与技术学院, 山东 济南 250101)

通信作者: 卢宪凯, E-mail: carrierlxk@gmail.com; 尹义龙, E-mail: ylyin@sdu.edu.cn



摘 要: 研究目标是从未标记的图数据中学习健壮的图表示. 开发了一种结构关系建模 (structural relation modeling, SRM) 框架, 用于自监督图表示学习, 缓解了由未标记数据和图拓扑不平衡引起的固有限制. 首先, 与大多数现有方法专注于局部结构或节点嵌入不同, 通过在统一框架内对节点、子图和整个图之间的复杂关系 (即局部-全局关系和节点相关性) 进行建模来捕捉图结构. 这有助于更好地理解图的拓扑结构, 并利用结构自监督信号. 其次, 引入了一种基于分区的子图采样机制, 通过小批量训练缓解了由图拓扑不平衡引起的过度聚合和拓扑衰减. 该机制确保更均匀的信息传播. 第三, 施加了一种节点正则化策略, 以提高训练的稳定性 and 效率, 产生更精确的图表示. 对 12 个公共数据集进行的节点和图分类的广泛实验证明了所提方法的有效性和普适性.

关键词: 自监督图表示学习; 图拓扑不平衡; 结构关系建模; 图结构; 子图

中图法分类号: TP18

中文引用格式: 秦者云, 卢宪凯, 聂秀山, 尹义龙. 基于结构关系建模的自监督图表示学习. 软件学报, 2026, 37(2): 700–715. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7439.htm>

英文引用格式: Qin ZY, Lu XK, Nie XS, Yin YL. Self-supervised Graph Representation Learning via Structural Relation Modeling. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2026, 37(2): 700–715 (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7439.htm>

Self-supervised Graph Representation Learning via Structural Relation Modeling

QIN Zhe-Yun¹, LU Xian-Kai¹, NIE Xiu-Shan², YIN Yi-Long¹

¹(School of Software, Shandong University, Jinan 250101, China)

²(School of Computer Science and Technology, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China)

Abstract: This study aims to learn robust graph representations from unlabeled graph data. A novel framework, termed structural relation modeling (SRM), is proposed for self-supervised graph representation learning to alleviate inherent limitations caused by unlabeled data and graph topological imbalances. First, rather than focusing solely on local structures or node embeddings as in most existing methods, this study models complex structural relations, such as local-global relations and node correlations, among nodes, subgraphs, and entire graphs within a unified framework to better capture graph topology and utilize structural self-supervision. Second, a partition-based subgraph sampling mechanism is introduced to mitigate over-aggregation and topological decay induced by graph topological imbalance, enabling more uniform information propagation through mini-batch training. Third, a node regularization strategy is applied to improve training stability and efficiency, resulting in more accurate structural representations. Extensive experiments on node and graph classification across 12 public datasets demonstrate the effectiveness and generalizability of the proposed method.

Key words: self-supervised graph representation learning; graph topological imbalance; structural relation modeling (SRM); graph structure; subgraph

* 基金项目: 国家自然科学基金 (U23A20389, 62176139, 62106128, 62176141)

收稿时间: 2024-03-13; 修改时间: 2024-08-02; 采用时间: 2025-03-25; jos 在线出版时间: 2025-11-05

CNKI 网络首发时间: 2025-11-06

鉴于图结构数据在交通网络、生物网络、社交网络等诸多领域的广泛应用^[1,2], 关于图结构数据的表示学习, 尤其是节点和边的表示学习, 已经引起了人们越来越多的关注^[3,4]. 然而, 在实际应用中, 依赖特定任务的图数据标注通常是一项耗时、劳动密集型且难以获取的工作. 这种对标签的强烈依赖所带来的挑战, 促使了众多研究致力于探索自监督图表示学习的可能性. 它依赖于图结构本身的内在结构信息, 通过设计各种策略来捕捉和利用节点和边之间的关系, 从而在无需外部标签的情况下, 实现图数据的表示学习. 这种方法不仅降低了对标签的依赖, 也提高了图表示学习的效率和准确性.

尽管自监督学习方法在图表示学习领域展现出了潜力, 但其仍面临一个根本性的限制, 即相较于监督学习中的明确标注标签, 自监督信号往往显得较为微弱. 这种固有的约束揭示了自监督学习方法的本质局限. 在图表示学习的研究背景下, 还需深刻认识到节点在非欧几里得空间内的不规则分布特性. 这种分布通常表现为复杂、不对称且不均匀, 被称为图拓扑不平衡^[5]. 在实际应用中, 由于数据的有限可用性和标记成本等现实约束, 不平衡图拓扑的问题难以避免. 在图神经网络 (graph neural network, GNN) 的框架内, 节点的不均匀分布对信息传播的均匀性产生了显著影响, 进而对 GNN 的整体性能造成了有害影响^[6]. 这种不均匀信息传播带来的问题主要体现在两个方面: (1) 过度聚合: 在节点密度较高的区域, 存在过度聚合的现象. 这意味着有价值的监督信号可能会与大量无关信息混杂在一起, 被聚合到同一个向量中, 导致信息失真. (2) 拓扑衰减: 在节点分布稀疏的区域, 随着拓扑距离的增加, 重要节点的贡献逐渐减小, 即发生所谓的拓扑衰减现象. 这导致关键信息在传播过程中逐渐丢失, 影响了 GNN 的准确性.

为了应对上述挑战, 本文提出了一种结构关系建模框架 SRM (structural relation modeling), 旨在精确地捕捉不同图粒度 (图、子图和节点) 之间的关系, 特别是局部-全局关系和节点相关性. (1) 局部-全局关系: SRM 通过基于边信息将图划分为具有相同节点数的分区, 使得具有相似特征的节点聚集在一起, 减少了有价值信息与无关数据的混杂, 从而有效缓解过度聚合问题. 同时, 这种划分方式确保低密度节点位于同一分区内, 有助于防止重要节点之间距离过大, 促进了节点间信息流动的有效性, 并缓解了拓扑衰减现象. 此外, 通过并行学习子图特征, SRM 进一步强化了信息的均匀传播. SRM 不仅关注局部 (基于分区的子图) 结构的建模, 也考虑到全局 (整个图) 结构, 旨在深入理解局部关系如何对全局结构产生贡献. 通过挖掘局部和全局结构间潜在的互补性, 实现了更为精准的表示. 在训练过程中, 通过从同一图中采样不同子图以创建训练批次, SRM 能够捕捉子图间的可分性, 并在全局图中识别出独特的局部结构特征. (2) 节点相关性: SRM 对生成框架内的节点平滑性、连通性和稀疏性施加了约束, 以确保重构节点的合理性和有效性. 这一措施有助于识别关键节点, 同时最小化噪声和冗余边的影响. 综上所述, 如图 1 所示, SRM 通过在图、子图和节点之间建立相互关联的结构关系模型, 有效地捕捉和模拟了它们之间的固有约束, 这包括图和子图之间的局部-全局关系 (包括子图之间的可分性), 以及节点之间的相关性.

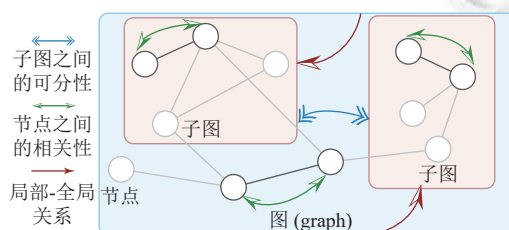


图 1 图、子图和节点之间的相互作用关系

在实践操作中, 对于给定的输入图, 本文提出的方法首要步骤是捕捉具有意义的局部结构信息. 随后, 利用一种创新的基于分区的子图采样机制, 构建子图训练批次. 具体来说, 本文采取节点分区策略, 旨在确保分区内的节点间具有较强的连通性, 同时运用多跳邻域信息, 以捕捉那些虽距离较远但实则相关的节点间的长期依赖关系. 基于这些分区, 本文进一步执行多跳子图采样操作. 此外, 为了增强子图以及整个图中学习到的表示, 本文

引入了节点扰动^[7]机制. 最终, 通过采用一种包含横向连接的重建方案, 本文能够同时建模子图批次和整个图, 从而有效地保留图的结构信息 (图 1). 在模型训练阶段, 本文还实施了节点正则化, 包括平滑性、连通性和稀疏性约束, 旨在维护重构节点间的一致性. 同时, 这些约束也有助于缓解节点扰动对图的局部几何特征可能产生的负面影响.

综上所述, 本文的主要贡献体现在以下几个方面.

(1) 开发了一种名为 SRM 的自监督结构关系建模框架, 该框架能够精确地保留图的复杂性并构建其结构粒度. 本文的模型源于图表示学习的固有结构特性, 设计简洁而新颖.

(2) 在图中实现了两种关系挖掘方案. 首先, 设计了基本分区的子图采样机制, 用于构建训练批次, 使得模型能够克服图拓扑不平衡的限制, 并学习局部-全局关系以及结构保存的子图间的可分性. 其次, 本文引入了节点正则化策略, 通过合理挖掘节点相关性关系的平滑性、连通性和稀疏性, 生成紧凑而可靠的图表示.

(3) 通过在 12 个相关数据集上进行实验, 展示了本文方法在节点和图分类任务上的显著性能. 在这些下游任务中, 本文的模型性能甚至超越了专门的任务特定的全监督模型. 这些深入的实证结果充分验证了本文系统设计的有效性和优越性.

1 相关工作

1.1 自监督图学习

自监督图学习方法主要分为对比式和生成式两大类.

在对比式方法中, 互信息 (mutual information, MI) 最大化是常见的策略. 众多研究通过从子图中生成负样本来估计样本对之间的 MI 最大化^[8]. 例如, Sub-graph Contrast^[9]通过破坏提取的子图结构并应用对比学习来生成负样本. GCC^[10]则将来自不同图的子图视为负样本, 以学习通用的图结构表示. 此外, 基于扰动的增强策略 (如属性屏蔽、节点置换或边扰动) 也被广泛应用于推动该领域的进步. GraphCL^[11]和 GRACE^[12]通过扰动生成子图的两个视图, 将相应节点视为正样本, 其他节点视为负样本. 然而, 一些方法试图通过设计自适应增强策略 (如 AutoGCL^[13]和 DGCL^[14,15]) 来消除手动设计的需要, 但这些方法通常假设提取的子图能够充分捕捉全局图知识, 这在实际情况中并不总是成立.

生成式方法是将自监督代理任务制定为从特征和结构两个角度进行图数据重建. 图自动编码器 (GAE)^[16]作为无监督学习模型的代表, 致力于重建图结构. 后续方法大多沿用类似模式, 结合结构重建^[17]或结构-特征重建的组合^[18,19]. 另有一些方法则直接舍弃结构信息, 通过重建节点特征来恢复图信息, 例如 EP^[20]和 GraphMAE^[21]. 尽管生成式方法尚未占据主导地位, 但其简单性和通用性为未来的研究提供了广泛的潜力. GraphMAE2^[22]通过对重构的特征添加正则化进一步拓展了遮挡-重建范式. GMAE^[23]通过一个空间匹配模块增强语义捕捉能力. HiG-MAE^[24]使用层次化策略对不同粒度的图结构进行遮挡. 本文提出了一种生成式方法的探索, 重点关注建模不同图粒度之间的复杂结构关系, 更好地捕捉和理解图数据的错综复杂性.

1.2 图不平衡学习

图不平衡问题主要可以划分为图类别不平衡和图拓扑不平衡两类, 当前的大部分研究工作主要聚焦于前者. 图类别不平衡主要表现为模型在推断多数类别时表现出显著的优势, 而对于少数类别的识别能力则相对较弱. 为了应对这一问题, 现有的解决方案主要集中在数据和权重两个方向. 一方面, 通过采样或增加数据的方式, 构建具有平衡类别数量的数据集; 另一方面, 根据类别的数量差异, 对不同类别的样本权重进行调整. 然而, 这些方法缺乏对图拓扑结构的深入理解, 因此无法直接解决图拓扑不平衡的问题.

相较于对图类别不平衡的广泛研究, 图拓扑不平衡问题的探讨仍显不足. ReNode^[5]将图拓扑不平衡学习作为图特定不平衡学习的一个关键主题, 并遵循了经典加权方法的范式. 随后, PASTEL^[6]通过标签重新分布的策略, 尝试缓解图拓扑不平衡问题. 然而, 这些方法聚焦于节点结构的分析, 缺乏对更全面拓扑关系的考虑.

1.3 图结构学习

图结构学习^[25]旨在学习一个优化的图结构, 以提升表示学习的鲁棒性^[26]或图表示质量^[27,28]. 现有的结构学习研究工作利用了图的不同粒度(节点、子图和图)之间的内在交互关系. 这些关系在外部表现为节点之间的依赖关系^[21]、子图之间的相关性和可分性^[29], 以及子图和图之间的局部-全局关系^[30]. 先前的研究经验一致表明, 有效地建模这些内在关系对于促进图表示学习具有至关重要的作用. 然而, 现有的工作对结构关系的理解往往仅聚焦于部分粒度之间的交互关系, 而忽视了整体结构的复杂性. 因此, 本文旨在从更为全面和深入的视角出发, 充分学习不同粒度之间的结构关系, 以期学习出更为紧凑、更具区分性的图结构.

2 方法描述

本节详细阐述基于结构关系建模的自监督图表示方法, 其核心思想在于利用图中固有的多粒度关系, 在无需监督的情况下学习稳健的特征表示, 从而增进对图结构的深入理解. 这一方法的展开首先始于对所提出框架的概述. 随后, 将深入探讨指导结构关系建模的技术细节.

设 $A \in R^{N \times N}$ 是图 $G = (V, E)$ 的邻接矩阵, 其中 $N = |V|$ 表示节点总数. $X \in R^{N \times F}$ 则为图 G 的节点特征矩阵. 如图 2 所示, 本文采用具有横向联系的局部分支和全局分支分别捕获局部子图结构特征和全局图结构特征. 这两个分支共享编码器和解码器结构, 但不共享权重, 通过节点扰动和节点正则化技术提升所学特征的质量. 特别值得注意的是, 局部分支基于所提出的采样机制, 能够从同一输入图中独立采样多个子图进行批量训练, 并最终将各批次的结果汇总为最终输出.

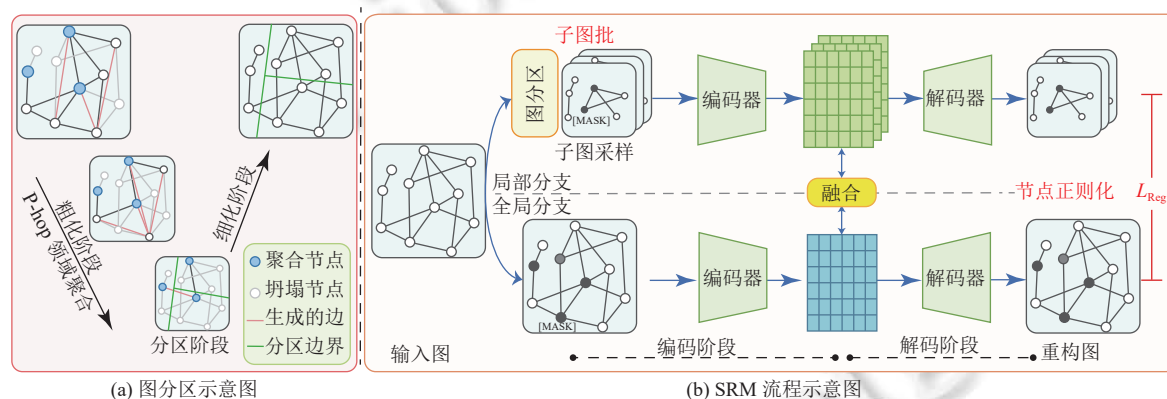


图 2 结构关系建模 SRM 框架图

2.1 基于分区的子图采样

为了全面捕获图数据的语义完整的局部结构, 本文提出了基于分区的四阶段子图采样机制, 包括粗化、分区、细化和采样. 该机制的核心目标在于使节点的采样概率趋于收敛, 从而更有效地应对稠密和稀疏节点部分的复杂组合.

2.1.1 粗化阶段

本文首先通过迭代构建一系列粗图 $G_l = (V_l, E_l)$, $l < L$ 开始, 这些粗图的大小均小于原始图 $G_0 = G$ (即 $|V_l| > |V_{l+1}|$). 每个后续的粗图 G_{l+1} 都是基于前一个粗图 G_l 构建的, 通过折叠语义和拓扑上相似节点间的边来实现. 由于输入的图是无向的, 节点的相似性被用作边的权重, 可以更精确地衡量节点间的关系.

为了实现平衡折叠, 本文进一步采用了智能的策略, 即通过学习从具有不同跳数或搜索深度的节点局部领域中聚合丰富的特征信息. 这一方法不仅确保了节点间相似性的准确计算, 还可以更加精细地捕获图数据的局部结构信息, 而且为后续阶段的分区和采样奠定了坚实的基础.

$$T = \sum_{p=0}^P \theta_p (AD^{-1})^p \quad (1)$$

其中, T 是列随机的广义聚合矩阵, P 是要聚合的邻居的跳数. $\theta_p = e^{-t^p} / p!$ 是权重系数, 其中 t 是运行时间^[28], 并严格满足条件: $\sum_{p=0}^P \theta_p = 1$, $\theta_p \in [0, 1]$. 邻接矩阵 A 是从粗图 G_l 导出的, 而度矩阵 D 是节点度的对角矩阵, 其元素 D_{ii} 表示节点 i 的度, 即 $D_{ii} = \sum_{j=1}^N A_{ij}$.

公式 (1) 旨在反映 P 跳邻域节点的影响, 并对特征和边的噪声进行平滑处理. 这一特性在后续的细化阶段和重构过程中显得尤为重要^[29]. 基于局部语义和结构信息, 节点 (u, v) 之间的相似性 $s_{u,v}$ 可以计算如下.

$$s_{u,v} = X_u^T (A_{u,v}, \lambda T_{u,v}) X_v \quad (2)$$

其中, λ 作为平滑参数, 用于调整局部结构特征的影响. 经过 L 次粗化迭代, 本文得到了最小的粗化图 G_L . 具体粗化和采样过程如算法 1、2 所示.

算法 1. 图粗化阶段伪代码.

输入: 原始图 $G_0 = \mathcal{G}$; 最大迭代次数 L ; 粗化后图的预期节点数 N_{stop} ;

输出: 一系列规模逐渐减小的图 $G_1, G_2, \dots, G_L$.

1. 初始化迭代层次 $l = 0$
2. 当 $l < L$ 且 $|V_l| > N_{\text{stop}}$ 时:
 3. (不变量: 对所有 $l \geq 0$, 有 $|V_{l+1}| \leq |V_l|$)
 4. 初始化空集 M_l 作为 G_l 的匹配集
 5. 遍历图 G_l 中的所有节点:
 6. 如果节点 $u \in V_l$ 未被匹配或访问:
 7. 如果节点 u 存在 1-跳邻居:
 8. 使用公式 (2) 找到与节点 u 最相似的节点 $v \in V_l$
 9. 将 (u, v) 添加到匹配集 M_l 中
 10. 标记节点 u 和 v 为已匹配
 11. 否则
 12. 标记节点 u 为已匹配
 13. 收缩图 G_l 以创建 $G_{l+1} : G_{l+1} \leftarrow \text{ContractGraph}(G_l, M_l)$
 14. $l \leftarrow l + 1$
15. 函数 $\text{ContractGraph}(G_l, M_l)$:
 16. 初始化空图 G_{l+1}
 17. 对于匹配集 M_l 中的每一对 (u, v) :
 18. 在 G_{l+1} 中创建一个新节点 w , 代表合并后的节点 u 和 v
 19. 对于节点 u 或 v 在 G_l 中的每一个邻居 x :
 20. 在 G_{l+1} 中添加边 (w, x)
 21. 更新 G_{l+1} 中边 (w, x) 的权重为 G_l 中边 (u, x) 和 (v, x) 权重之和
 22. 对于图 G_l 中的每一个未匹配节点 u :
 23. 将节点 u 及其边复制到 G_{l+1} 中
 24. 返回图 G_{l+1}

算法 2. 子图采样阶段伪代码.

输入: 输入图分区集合: $\{(\bar{V}_1, \bar{E}_1), \dots, (\bar{V}_C, \bar{E}_C)\}$, 其中每个分区包含节点集 $\bar{V}_i$ 和边集 $\bar{E}_i$; 分区数量 K ; 跳数限制 H ; 分区相似度矩阵 P ; 分区邻接矩阵 $\bar{A}$;

输出: 子图邻接矩阵 A_{sub} ; 子图节点特征矩阵 X_{sub} .

1. 初始化已选分区集合 $S \leftarrow \emptyset$
2. 随机选择分区 s 作为起始分区, 并将其加入 S
3. 初始化索引队列 $idx \leftarrow \emptyset$, 并将 $(s, 0)$ 压入 idx
4. 当 idx 非空且 $|S| < K$ 时, 执行以下步骤:
 5. 从 idx 中弹出一个元素 (u, hop)
 6. 遍历基于 $\bar{A}$ 与 u 相邻的每个分区 p
 7. 如果 p 不在 S 中且 $\text{hop} < H$:
 8. 根据相似度 $P[u, p]$ 选择 p :
 9. 将 p 加入 S
 10. 如果 $|S| \geq K$:
 11. 跳出循环
 12. 如果 $\text{hop} < H$:
 13. 将 $(p, \text{hop} + 1)$ 压入 idx
14. 初始化 E_{idx} 和 N_{idx} 为零矩阵
15. 遍历 idx 中所有元素对 (s, t)
16. 遍历分区 s 和 t 中的所有节点对 (v_{si}, v_{tj}) , 将 $E_{idx}(v_{si}, v_{tj})$ 设为 1
17. 遍历 idx 中的每个分区 c 及其节点 v_{ci} , 将 $N_{idx}(v_{ci})$ 设为 1
18. 计算聚合矩阵 $A_{\text{agg}} \leftarrow A + \lambda T$
19. 计算子图邻接矩阵 $A_{\text{sub}} \leftarrow A_{\text{agg}} \odot E_{idx}$
20. 计算子图节点特征矩阵 $X_{\text{sub}} \leftarrow X \odot N_{idx}$
21. 返回 A_{sub} 和 X_{sub}

2.1.2 分区阶段和细化阶段

在分区阶段, 本文利用分区边界将最粗的图 G_L 划分为若干个相互平衡的独占群组, 确保每个群组包含原始图 G_0 中大约 $1/C$ 的节点. 而在细化阶段, 则通过贪婪图生长算法以及边界 Kernighan-Lin^[31], 将粗图 G_L 的分区结果有效地投影回原始图 G_0 的层次结构中.

2.1.3 采样阶段

在完成了分区和细化步骤后, 图 G 被成功地分割为 C 个分区, 其表示形式如下:

$$G = [\bar{G}_1, \dots, \bar{G}_C] = \{[\bar{V}_1, \bar{E}_1], \dots, [\bar{V}_C, \bar{E}_C]\} \quad (3)$$

其中, 每个分区 $\bar{G}_c$ 仅包含属于分区 $\bar{V}_c$ 的节点 (即 $|\bar{V}_c| = N/C$) 和第 c 个分区中的边 $\bar{E}_c$. 值得注意的是, 图 G 中的任何节点均归属于且仅归属于一个分区.

此外, 为了更好地表示图 G 的结构特性, 其邻接矩阵被重新构造为 C^2 个子矩阵的集合, 具体形式如下:

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} \bar{A}_{11} & \dots & \bar{A}_{1C} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{A}_{C1} & \dots & \bar{A}_{CC} \end{bmatrix} \quad (4)$$

其中, 每个对角子矩阵 $\bar{A}_{CC} \in R^{|\bar{V}_c| \times |\bar{V}_c|}$ 反映了分区 $\bar{G}_c$ 内部的边连接情况, 而 $\bar{A}_{sc}$ 则描述了分区 $\bar{G}_s$ 与分区 $\bar{G}_c$ 之间的

边连通性. 这种表示方式不仅保留了图 G 的局部结构信息, 还揭示了不同分区之间的交互关系.

本文利用分区间的连通性, 通过子图采样器 S 基于多跳信息对分区进行固定大小为 K 的采样. 采样过程始于随机选择一个分区作为起始点, 随后依据相似性度量 (如公式 (2) 所示) 自内而外地采样其多跳邻域内的分区, 直至达到预定的采样数量 K . 所选分区的索引集可表示为:

$$\begin{cases} idx = S(\bar{A}, K) \\ E_{idx}(v_{si}, v_{tj}) = 1, \forall v_{si} \in \bar{V}_s, v_{tj} \in \bar{V}_t \\ N_{idx}(v_{ci}) = 1, \forall v_{ci} \in \bar{V}_c, c \in idx \end{cases} \quad (5)$$

其中, 边采样矩阵 $N_{idx} \in \{0, 1\}^{N \times N}$, $(s, t) \in idx \times idx$, 节点采样矩阵 $N_{idx} \in \{0, 1\}^N$ 初始化为全零矩阵, 对于采样分区内的节点, 其对应位置的元素设为 1; 对于未采样分区内的节点, 保持为 0.

值得注意的是, 只有当两个分区均被用于生成子图时, 它们之间的连通性才得以保留; 否则, 这些连接将被忽略. 因此, 根据邻接矩阵 A_{sub} 和节点特征矩阵 X_{sub} , 可以构建完整的子图:

$$\begin{cases} A_{agg} = A + \lambda T \\ A_{sub} = A_{agg} \odot E_{idx} \\ X_{sub} = X \odot N_{idx} \end{cases} \quad (6)$$

其中, T 是 A 的聚合矩阵 (详见公式 (1)), λ 是超参数, $\odot$ 表示逐元素相乘.

通过这种方法生成的子图不仅具有强大的内部连通性, 还能有效地从相邻节点中聚合信息. 在子图样本中聚合更大邻域的信息, 使得本文能够捕获更复杂的图属性, 同时保留局部结构, 以便学习子图之间的判别关系. 在提出的基于分区的子图采样机制中, 本文对其 4 个阶段的时间复杂度进行了评估. 具体来说, 粗化阶段的时间复杂度为 $O(|V| \log |V|)$, 这主要由节点合并的层次聚类过程决定; 分区阶段使用贪心图增长算法, 其时间复杂度为 $O(|V| \times |E|)$, 这取决于图中节点和边的数量; 细化阶段使用边界 Kernighan-Lin 算法进行微调, 其时间复杂度为 $O(|V|^2)$; 采样阶段的时间复杂度为 $O(C^2)$, 其中 C 为分区数量, 且 $C \ll |V|$, 因此该阶段的时间开销相对较小.

值得注意的是, 虽然贪心图增长算法和边界 Kernighan-Lin 算法在采样机制中有所应用, 但它们并不参与后续的训练和测试过程的反向传播. 在训练和测试时, 只需将分区结果加载到 GPU 内存中, 用于采样阶段以及随后的前向传播和反向传播过程. 这避免了在每次迭代中都重复执行这些耗时的分区和细化算法, 从而显著降低了总体时间开销. 同时, 为了确保比较的公平性, SRM 采用了较浅的网络结构, 减轻了额外的计算负担.

2.2 局部和全局分支融合

为了全面建模局部与全局信息, 本文设计了局部和全局分支来分别处理子图批次和图的建模. 为了保持结构的完整性, 并使解码器能够把握局部与全局特征间的关联, 本文引入横向连接^[31]整合这两个分支的信息:

$$\begin{cases} F = w_f \cdot \text{Cat}(X_{sub}^{inp}, X_{who}^{inp}) \\ X_{sub}^{out} = X_{sub}^{inp} + F \\ X_{who}^{out} = X_{who}^{inp} + \text{mean}(F_{batch}) \end{cases} \quad (7)$$

其中, X_{sub}^{inp} 、 X_{who}^{inp} 、 X_{sub}^{out} 和 X_{who}^{out} 分别表示生成的子图和整个图的输入和输出节点特征. F 是融合特征, $\text{mean}(F_{batch})$ 是训练批次中融合特征的平均值. w_f 是可学习的参数, $\text{Cat}(\cdot, \cdot)$ 表示向量拼接操作, 用于将不同来源的特征合并成一个统一的特征向量. 基于此, 模型能够同时考虑局部和全局信息, 从而提高了结构保持的能力.

2.3 节点正则化

在提升图表示质量的同时, 引入节点扰动会不可避免地改变输入图中原有节点的局部依赖关系, 进而在重构过程中引入显著的结构波动性. 为应对此挑战, 本文提出了一种节点正则化方法. 该方法通过引入由节点平滑性、连通性和稀疏性导出的新监督信号, 旨在提取有意义的结构信息并增强模型的稳定性.

平滑性技术在众多应用中发挥着关键作用, 尤其是在恢复原始信号^[3]方面. 然而, 大多数现有方法都建立在在相

邻节点具有相似特征的假设之上^[24,32,33], 忽略了全局节点特征相似性在知识传递过程中的重要性. 为了减轻节点扰动导致的性能波动, 本文致力于连续迭代中生成的全局特征保持相似, 以确保模型权重在训练过程中不会过快变化. 具体来说, 由于 $i-1$ 次迭代将学到的全局特征知识 Z 传递给 i 次迭代, 本文的目标是最小化 Z^i 和 Z^{i-1} 之间的距离:

$$L_{\text{Smooth}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \|Z_j^i - Z_j^{i-1}\|^2 + \frac{1}{N^2} \text{tr}(Z^T L Z) \quad (8)$$

其中, N 是节点数, $\text{tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹, $L = D - A$ 是与图邻接矩阵相关联的拉普拉斯矩阵, 其中 D 是度矩阵, $D_{ii} = \sum_j A_{ij}$, T 表示转置. 除了考虑知识传递的平滑性 (第 1 项) 之外, 本文还使用 Dirichlet 能量^[32] (第 2 项) 增强相邻节点之间的依赖关系.

此外, 为进一步提升图的整体连通性并维持其稀疏性^[24], 本文在框架中引入了连通性和稀疏性约束:

$$L_{\text{CS}} = \frac{-\mathbf{1}^T}{N} \log(A\mathbf{1}) + \frac{\gamma}{N^2} \|A\|_F^2 \quad (9)$$

其中, $\mathbf{1}$ 表示全 1 向量, $\|\cdot\|_F$ 表示矩阵的 Frobenius 范数, γ 是一个非负值, 用于控制稀疏性. 第 1 项通过对数障碍惩罚来避免形成断开的图, 而第 2 项则通过对大度数进行惩罚来控制稀疏性.

最终, 节点正则化被定义为上述损失的总和, 即:

$$L_{\text{Reg}} = \alpha L_{\text{Smooth}} + \beta L_{\text{CS}} \quad (10)$$

其中, α 和 β 是超参数, 用于平衡平滑性、连通性和稀疏性在正则化过程中的贡献.

公式 (10) 引入了平滑性、连通性和稀疏性这 3 个正则化目标. 具体来说, 平滑性目标旨在确保在连续迭代过程中, 生成的全局特征保持相似, 从而避免模型权重过快变化导致的性能波动. 具体来说, 我们通过最小化相邻节点特征之间的变化量来实现平滑性. 这一目标函数的作用在于促进节点间特征的一致性, 使得在信息传播过程中, 相似节点能够保持相似的特征表示, 从而增强模型的鲁棒性. 连通性目标函数的设计主要关注图的整体结构, 确保学习到的节点嵌入能够反映图的连通性信息. 在图结构数据中, 连通性是一个重要的全局属性, 它决定了图中节点之间的可达性和路径. 通过强制连通性, 我们确保模型能够学习到能够反映图整体结构的节点嵌入, 从而增强模型在全局图任务 (如图分类) 中的性能. 连通性目标函数有助于捕捉图中的长距离依赖关系, 使得模型能够更好地理解图的宏观结构特征. 稀疏性目标函数的设计旨在避免模型学习到过于稠密的节点嵌入, 这有助于减少计算复杂度并提高模型的泛化能力. 在图表示学习中, 如果节点嵌入过于稠密, 可能会引入不必要的噪声和冗余信息, 导致模型对未见数据的预测能力下降. 通过引入稀疏性约束, 我们鼓励模型学习到简洁且信息量丰富的节点嵌入, 从而提高模型的有效性和效率. 此外, 稀疏性还有助于揭示图数据中潜在的重要结构特征, 如社区结构等.

3 实验分析

为了全面评估本文所学图表示的有效性, 本文将提出的方法应用于节点分类和图分类两种图学习任务. 与当前先进方法相比, 本文模型在多个数据集上均展现出卓越的性能. 为进一步剖析模型的工作机制, 本文深入探讨了模型中多重关系建模、正则化、采样策略、子图大小和屏蔽比例对图结构学习的影响.

3.1 实验设置

本文方法的整体训练流程如图 2 所示. 为模拟节点扰动, 本文在子图和全图层面随机屏蔽了一定比例的节点特征, 并借助缩放余弦损失^[21]及特定的节点正则化策略重建图结构. 在采样阶段, 输入图被划分为约 100 个等份, 子图大小则依据采样过程中的跳数来确定. 为确保比较的公正性, 本文在节点分类任务中采用 GAT^[34]作为自动编码器的主干, 在图分类任务中选择 GIN^[35]作为主干. 不同数据集的具体网络参数设置如表 1 和表 2 所示.

表 1 节点分类任务数据集的统计信息和参数设置

类别	设置	直推式			归纳式	
		Cora	Citeseer	PubMed	PPI	Reddit
统计信息	节点数	2 708	3 327	19 717	56 944	232 965
	边数	5 429	4 732	44 338	818 716	11 606 919
	特征维度	1 433	3 703	500	50	602
	节点类别数	7	6	3	121	41
	训练集节点数	140	120	60	44 906	153 757
	验证集节点数	500	500	500	6 514	23 297
	测试集节点数	1 000	1 000	1 000	5 524	55 911
参数设置	随机屏蔽比例	0.5	0.6	0.75	0.5	0.75
	P (公式(1))	3	3	5	5	5
	K (公式(5))	16	15	19	17	20
	λ (公式(6))	0.4	0.3	0.5	0.7	0.7
	$[\alpha, \beta, \gamma]$ (公式(9), (10))	[0.5, 0.5, 0.3]	[0.5, 0.5, 0.4]	[0.5, 0.5, 0.3]	[0.4, 0.6, 0.5]	[0.5, 0.5, 0.5]
	子图批次大小	32	32	64	128	128

表 2 图分类任务数据集的统计信息和参数设置

类别	设置	IMDB-B	IMBD-M	PROTEINS	COLLAB	MUTAG	REDDIT-B	NCI1
统计信息	图数量	1 000	1 500	1 113	5 000	188	2 000	4 110
	图类别数	2	3	2	3	2	2	2
	平均节点数	19.8	13.0	39.1	74.5	17.9	429.7	29.8
参数设置	随机屏蔽比例	0.5	0.5	0.75	0.75	0.8	0.75	0.25
	P (公式(1))	5	5	5	10	5	5	10
	K (公式(5))	10	6	9	8	8	12	8
	λ (公式(6))	0.5	0.3	0.5	0.6	0.4	0.6	0.7
	$[\alpha, \beta, \gamma]$ (公式(9), (10))	[0.4, 0.6, 0.3]	[0.5, 0.5, 0.5]	[0.5, 0.5, 0.3]	[0.5, 0.5, 0.5]	[0.5, 0.5, 0.5]	[0.6, 0.4, 0.3]	[0.6, 0.4, 0.3]
	子图批次大小	16	16	16	16	32	8	8

3.2 节点分类实验

在直推式学习的背景下, 本文使用了 3 个引文网络数据集进行实验研究: Cora^[36]、Citeseer^[37]和 PubMed^[35]. 为了确保实验设置的一致性, 为验证本文方法在归纳式学习中的性能, 本文进一步采用了蛋白质相互作用 (PPI) 数据集^[38], 该数据集包含表示不同人体组织的图. 此外, 为更全面地评估方法的鲁棒性, 本文还引入了一个规模更大的数据集 Reddit^[38], 该数据集聚焦于社交网络, 并包含了 Reddit 帖子的相关信息.

如表 3 所示, 本文所提出的方法在直推式和归纳式任务中均展现出超越所有现有自监督方法的卓越性能. 在众多基线方法中, GraphMAE^[21]作为主要竞争对手, 尽管在生成范式中有所建树, 却忽略了从结构角度对图表示进行建模的重要性. 另一基于对比学习的基线方法 GSC^[7]虽然考虑了局部几何结构, 但其视角相对局限. SRM 性能的提升不仅凸显了建模图表示学习内部关系的重要性, 同时也验证了其必要性. 进一步地, 本文方法利用图内部的多个内在关系作为监督信号, 相较于监督基线方法, 展现出了更为强大的竞争力. 特别地, 在 PPI 和 Reddit 上的结果表明, 本文方法在归纳任务中对未见节点和图的泛化能力尤为突出.

表 3 节点分类实验结果 (%)

模型	直推式			归纳式	
	Cora	Citeseer	PubMed	PPI	Reddit
GCN ^[39]	81.4±0.6	70.3±0.7	76.8±0.6	51.5±0.6	93.3±0.1
GAT ^[40]	83.0±0.7	72.5±0.7	79.0±0.3	97.3±0.2	—

表 3 节点分类实验结果 (%) (续)

模型	直推式			归纳式	
	Cora	Citeseer	PubMed	PPI	Reddit
GraphSAGE ^[41]	79.2±1.5	71.2±0.5	73.1±1.4	51.3±3.2	92.1±1.1
Raw features	56.6±0.4	57.8±0.2	69.1±0.2	42.5±0.3	58.5±0.1
DeepWalk ^[42]	67.2	43.2	65.3	52.9	32.4
GAE ^[16]	71.5±0.4	65.8±0.4	72.1±0.5	—	—
GraphSAGE ^[41]	75.2±1.5	59.4±0.9	70.1±1.4	46.5±0.7	90.8±1.1
GRACE ^[12]	81.9±0.4	71.2±0.5	80.6±0.4	69.7±0.2	94.7±0.0
DGI ^[43]	82.3±0.6	71.8±0.7	76.8±0.6	63.8±0.2	94.0±0.1
BGRL ^[44]	82.7±0.6	71.1±0.8	79.6±0.5	73.6±0.2	94.2±0.0
GMI ^[45]	83.0±0.3	73.0±0.3	79.9±0.2	65.0±0.0	95.0±0.0
GATE ^[18]	83.2±0.6	71.8±0.8	80.9±0.3	—	—
GraphCL ^[11]	83.6±0.5	72.5±0.7	79.8±0.5	65.9±0.6	95.1±0.1
Sub-graph Contrast ^[9]	83.5±0.5	73.2±0.2	81.0±0.1	66.9±0.2	95.2±0.0
InfoGCL ^[46]	83.5±0.3	73.5±0.4	79.1±0.2	—	—
CCA-SSG ^[47]	84.0±0.4	73.1±0.3	81.0±0.4	73.3±0.2	95.1±0.0
GraphMAE ^[21]	84.2±0.4	73.4±0.4	81.1±0.4	74.5±0.3	96.0±0.1
IDGL ^[27]	84.5±0.3	74.1±0.2	—	—	—
GSC ^[7]	84.6±0.1	73.7±0.1	82.1±0.2	69.1±0.3	95.3±0.1
Ours	85.3±0.2	74.1±0.4	82.7±0.2	75.4±0.2	96.5±0.0

3.3 图分类实验

图分类旨在根据图的特性 (如图密度、图结构) 对具有未知标签的图进行类别预测. 为了全面评估本文方法的性能, 我们将其与监督方法、图核方法以及自监督方法进行了对比.

本文选择了 4 个社交网络数据集 (即 IMDB-B、IMDB-M、COLLAB、REDDIT-B) 以及 3 个生物信息学数据集 (即 MUTAG、PROTEINS、NCI1) 作为实验对象. 鉴于社交网络数据集缺乏节点特征, 仅依赖图结构信息, 本文采用度作为输入节点特征. 同时, 由于这些社交网络数据集中不存在节点标签, 本文遵循公共标准^[14]进行公平的性能比较.

结果分析如后文表 4 所示, 本文方法在全部数据集上均超越了主要的竞争生成方法 GraphMAE^[21], 其中在 6 个数据集上名列榜首, 仅在 NCI1 数据集上位居次席. 值得注意的是, DGCL^[14]方法虽然基于 GIN 构建多通道消息传递层, 但其参数复杂度较高. 相较之下, 本文方法专注于挖掘图内部关系, 并开发了一个简洁的框架, 因此避免了复杂的数据增强和网络结构技术, 使得方法更为高效和实用. 此外, 本文方法在几乎所有图核方法上都表现出色, 这进一步证明了学习图粒度之间相互作用的优越性. 尤为令人瞩目的是, 本文方法甚至在性能上超越或比肩监督方法, 这充分表明其学到的表示既有意义又强大, 同时也强调了在图学习任务中推理图结构的重要性. 上述观察结果进一步验证了本文的主要观点, 即通过建模图的粒度并挖掘它们之间的复杂关系, 本文方法能够更有效地识别图中隐藏的判别性信息, 从而在图分类任务中取得优异性能.

3.4 消融实验

为了深入探究核心设计的影响, 本文在多个数据集上实施了节点分类 (即 Cora、PubMed 和 PPI) 和图分类 (即 IMDB-B、MUTAG) 的消融研究. 所有变体均从头开始独立训练, 确保结果的公正性和准确性.

首先探讨了全面探索不同关系的必要性, 并评估了所提出的关系建模策略的有效性. 如表 5 所示, 本文引入了一个不包含节点扰动、局部分支和特定节点正则化的基线模型作为起点. 随后, 通过一系列渐进的实验, 逐步将核心组件添加到基线变体中, 以构建完整的模型. 具体地, 表 5 中的“+局部分支”表示在基线模型的基础上添加了一个局部分支, 该分支专注于对单个子图进行采样而非整个批次. “+特征融合”则在局部和全局分支之间引入了横向

连接,以增强信息的交互与融合.“+子图批”进一步改进了局部分支,通过采样子图批次而非单个子图,提升了模型的泛化能力.“+Mask_{Global/Local}”在全局或局部分支中随机屏蔽节点特征,以增强模型的鲁棒性.最后,“+L_{Reg}”(详见公式(10))通过添加节点正则化项,进一步提升了模型的性能,从而得到了最终的完整模型.

表 4 图分类实验结果 (%)

模型	IMDB-B	IMBD-M	PROTEINS	COLLAB	MUTAG	REDDIT-B	NCI1
GIN ^[48]	75.1±5.1	52.3±2.8	76.2±2.8	80.2±1.9	89.4±5.6	92.4±2.5	82.7±1.7
DiffPool ^[49]	72.6±3.9	—	75.1±3.5	78.9±2.3	85.0±10.3	92.1±2.6	—
SP ^[50]	55.6±0.2	38.0±0.3	75.1±0.5	—	85.2±2.4	—	73.0±0.2
GK ^[51]	65.9±1.0	43.9±0.4	71.7±0.6	72.8±0.3	81.7±2.1	—	62.3±0.3
WL ^[52]	72.3±3.4	47.0±0.5	72.9±0.6	—	80.7±3.0	68.8±0.4	80.3±0.5
DGK ^[53]	67.0±0.6	44.6±0.5	73.3±0.8	—	87.4±2.7	78.0±0.4	80.3±0.5
MLG ^[54]	66.6±0.3	41.2±0.0	76.1±2.0	—	87.9±1.6	—	80.8±1.3
graph2vec ^[55]	71.1±0.5	50.4±0.9	73.3±2.1	—	83.2±9.3	75.8±1.0	73.2±1.8
InfoGraph ^[56]	73.0±0.9	49.7±0.5	74.4±0.3	70.7±1.1	89.0±1.1	82.5±1.4	76.2±1.1
GraphCL ^[11]	71.1±0.4	48.6±0.7	74.4±0.5	71.4±1.2	86.8±1.3	89.5±0.8	77.9±0.4
JOAO ^[57]	70.2±3.1	49.2±0.8	74.6±0.4	69.5±0.4	87.4±1.0	85.3±1.4	78.1±0.5
GCC ^[10]	72.0	49.4	—	78.9	—	89.8	—
MVGRL ^[58]	74.2±0.7	51.2±0.5	—	—	89.7±1.1	84.5±0.6	—
InfoGCL ^[46]	75.1±0.9	51.4±0.8	—	80.0±1.3	91.2±1.3	—	80.2±0.6
GraphMAE ^[21]	75.5±0.7	51.6±0.5	75.3±0.4	80.3±0.5	88.2±1.3	88.0±0.2	80.4±0.3
DGCL ^[14]	75.9±0.7	51.9±0.4	76.4±0.5	81.2±0.3	92.1±0.8	—	81.9±0.2
Ours	76.2±0.5	52.0±0.5	76.8±0.2	81.3±0.3	92.3±1.1	90.3±0.3	81.2±0.4

表 5 节点分类和图分类实验中关于关系建模的消融实验 (%)

模块	节点分类			图分类	
	Cora	PubMed	PPI	IMDB-B	MUTAG
基线模型	78.6	79.3	70.5	72.5	87.6
+局部分支	81.4	79.4	70.8	74.1	88.5
+特征融合	81.7	80.1	71.2	74.3	88.9
+子图批	84.4	81.0	74.5	75.2	91.7
+Mask _{Global}	84.6	81.1	75.1	75.7	92.0
+Mask _{Local}	84.8	81.3	75.8	75.7	92.1
+L _{Reg}	85.3	82.7	75.4	76.2	92.3

如表 5 所示,局部分支的构建以及局部与全局特征信息的融合(基线模型+局部分支),对局部与全局关系的学习具有显著影响.这一作用主要得益于局部和全局底层结构表示的互补性.特别地,当表 5 中变种模型(即基线模型+局部分支+特征融合+子图批)通过集成训练批次中的子图推理结果时,显著提升了模型的性能.与每次仅采样一个子图的做法相比(基线模型+局部分支),本文提出的子图采样机制确保了图中节点采样概率的均衡性.这种机制允许以一种灵活的方式聚合每个子图训练批次中的有意义局部结构信息,从而增强了模型捕捉复杂关系的能力.

从表 5 可以观察到,节点掩码(包括Mask_{Global}和Mask_{Local})和所提出的节点正则化L_{Reg}均有助于提升性能.这表明在建模节点间相关性关系时,引入节点扰动和节点约束是行之有效的.

综上所述,基于上述对建模单一关系的观察,探索不同图粒度之间复杂关系的必要性及意义凸显.仅考虑单一关系的建模变体在性能上已优于基线模型,而整合了所有 3 种关系的完整模型则实现了最佳性能.更为关键的是,深入理解内在的图关系不仅深化了对图结构的认识,而且对图结构化数据的建模至关重要.

为了深入探究提出的节点正则化中各个术语的效用, 本文进行了详细的检验, 并将结果整理在表 6 中. 鉴于节点约束所涵盖的平滑性、稀疏性和连通性的全面考量, 本文在生成阶段所采用的正则化方法能够有效地利用编码表示重建完整的图结构. 这一过程中, 不仅保留了更多节点间的依赖信息, 而且增强了模型对复杂图结构的理解和描述能力. 此外, 正则化的应用还有助于稳定训练过程, 减小标准差, 从而提升了模型的鲁棒性, 为细致而可靠地解析图结构提供了坚实的基础.

表 6 节点分类和图分类实验中关于正则化的消融实验 (%)

正则化策略	节点分类			图分类	
	Cora	PubMed	PPI	IMDB-B	MUTAG
Ours	85.3±0.2	82.7±0.2	75.4±0.2	76.2±0.5	92.3±1.1
w/o L_{Smooth}	84.7±0.3	82.3±0.2	75.0±0.4	75.8±0.6	91.5±1.4
w/o L_{CS}	85.2±0.3	82.4±0.4	75.3±0.5	75.9±0.8	91.9±1.3
w/o L_{Reg}	84.7±0.4	81.8±0.4	75.1±0.6	75.3±0.9	91.2±1.3

为了评估不同子图采样策略在捕捉局部和全局图信息方面的效能, 本文对比了包括随机游走^[59]和广度优先搜索^[7]在内的多种方法. 实验结果详列于表 7, 显示本文所采用的基于分区的子图采样机制在性能方面相较于其他方法具有显著优势. 这表明该机制在捕捉局部信息方面表现卓越, 并能有效集成子图内的远程邻居信息. 因此, 通过该机制所生成的改进表示有助于更精确地区分不同的子图, 为图数据的深入分析提供了有力的工具.

表 7 节点分类和图分类实验中关于采样策略的消融实验 (%)

采样策略	节点分类			图分类	
	Cora	PubMed	PPI	IMDB-B	MUTAG
基于分区的策略	85.3	82.7	75.4	76.2	92.3
基于随机游走的策略	82.2	80.5	72.8	74.6	90.2
基于广义优先搜索的策略	82.9	81.6	72.9	74.6	90.6

图 3 展示了子图大小对结果的影响的情况. 子图的大小由分区的数量和每个分区的采样大小决定. 对于较小的 MUTAG 和 IMDB-B 数据集, 本文在特定范围内报告了消融实验的结果. 虽然不同图的最优组合有所不同, 但在大多数情况下, 子图大小对模型性能的影响波动较小.

图 4 则展示了随机屏蔽节点特征比例的影响. 虽然不同图的最优掩码比率可能有所差异, 但一般而言, 较高的掩码率有助于提高图表示的质量.

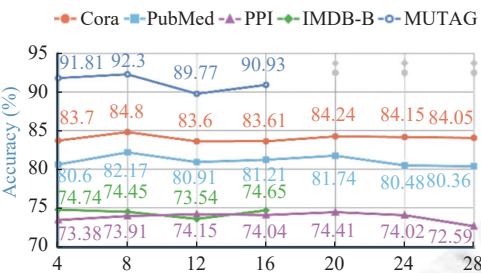


图 3 关于子图大小的消融实验

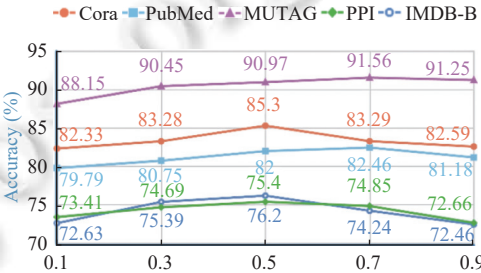
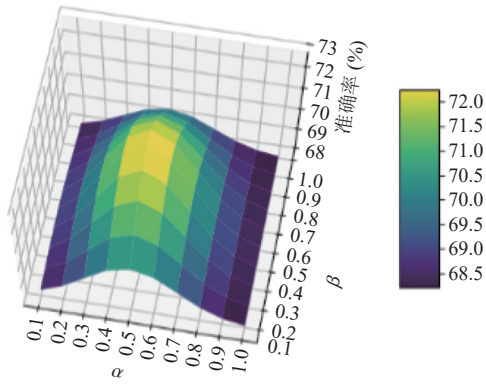
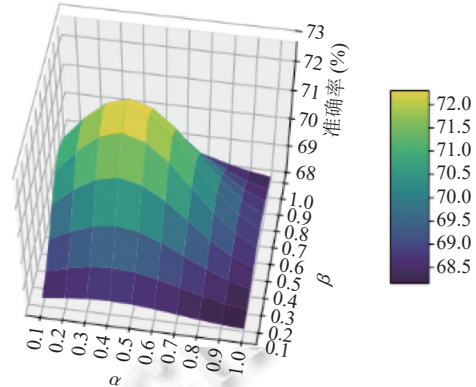


图 4 关于随机屏蔽节点特征比例的消融实验

图 5 和图 6 分别展示了在 Cora 数据集以及 IMDB-B 数据集上关于 α 和 β 的灵敏性分析结果. 模型的性能随着远离最优值而降低, 其他数据集上也展示了相似的结果. 因此, α 和 β 的精确调校对模型性能具有至关重要的影响. 随着这两个参数逐渐偏离其最优值, 模型在捕捉数据特征、区分不同类别或情感倾向方面的能力显著减弱, 进而表现为整体性能的下滑.

图5 Cora 数据集上关于 α 和 β 的灵敏性分析图6 IMDB-B 数据集上关于 α 和 β 的灵敏性分析

4 总 结

本文提出了一种自监督图表示学习的结构关系建模 (SRM) 框架,旨在全面探索图粒度之间复杂关系的必要性,并探讨关系建模策略的有效性. SRM 框架的引入旨在克服由弱监督信号和图拓扑不平衡导致的局限性,从而增强图表示学习的性能. 为了有效捕捉图的内部局部结构,本文提出了一种基于分区和多邻邻居信息的子图采样机制. 这种机制能够充分利用图的局部信息,提高模型的判别能力,进而优化图表示的质量. 此外,本文还引入了一种节点正则化技术,以增强模型对扰动的鲁棒性,确保在训练过程中生成的图保持合理和稳定. 通过在多个基准数据集上进行大量实验,本文验证了所提出的方法在自监督图表示学习方面的优越性. 相较于监督和无监督图表示学习方法,本文的方法展现出了更高的性能. 这些实验结果不仅证明了 SRM 框架的有效性,还展示了其在处理复杂图数据方面的潜力. 尽管具有竞争力的性能,当前 SRM 的图分区过程涉及多个步骤,未来的研究将聚焦于探索一种端到端的分区方案,旨在将分区过程与特征表示学习无缝融合,形成一个更加简洁且高效的统一框架. 此外,为了进一步提升 SRM 的普适性和实用性,本文将继续扩展 SRM 对更广泛的图任务的适用性 (如链接预测) 和对更大图数据集的鲁棒性 (如 OGB 数据集).

References

- [1] Zhao WZ, Yuan G, Zhang YM, Qiao SJ, Wang SZ, Zhang L. Multi-view fused spatial-temporal dynamic GCN for urban traffic flow prediction. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2024, 35(4): 1751–1773 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7018.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.007018]
- [2] Ma ZB, Mi Y, Zhang B, Zhang Z, Wu JY, Huang HW, Wang WD. Review on deep learning algorithms for heterogeneous medical image processing. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2023, 34(10): 4870–4915 (in Chinese with English abstract). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6680.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006680]
- [3] Xia F, Sun K, Yu S, Aziz A, Wan LT, Pan SS, Liu H. Graph learning: A survey. IEEE Trans. on Artificial Intelligence, 2021, 2(2): 109–127. [doi: 10.1109/TAI.2021.3076021]
- [4] Zhang ZW, Cui P, Zhu WW. Deep learning on graphs: A survey. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2022, 34(1): 249–270. [doi: 10.1109/TKDE.2020.2981333]
- [5] Chen DL, Lin YK, Zhao GX, Ren XC, Li P, Zhou J, Sun X. Topology-imbalance learning for semi-supervised node classification. In: Proc. of the 34th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. 2021. 29885–29897.
- [6] Sun QY, Li JX, Yuan HN, Fu XC, Peng H, Ji C, Li Q, Yu PS. Position-aware structure learning for graph topology-imbalance by relieving under-reaching and over-squashing. In: Proc. of the 31st ACM Int'l Conf. on Information & Knowledge Management. Atlanta: ACM, 2022. 1848–1857. [doi: 10.1145/3511808.3557419]
- [7] Han YH, Hui L, Jiang HB, Qian JJ, Xie J. Generative subgraph contrast for self-supervised graph representation learning. In: Proc. of the 17th European Conf. on Computer Vision. Tel Aviv: Springer, 2022. 91–107. [doi: 10.1007/978-3-031-20056-4_6]
- [8] Liu YX, Jin M, Pan SR, Zhou C, Zheng Y, Xia F, Yu PS. Graph self-supervised learning: A survey. IEEE Trans. on Knowledge and Data

- Engineering, 2023, 35(6): 5879–5900. [doi: [10.1109/TKDE.2022.3172903](https://doi.org/10.1109/TKDE.2022.3172903)]
- [9] Jiao YZ, Xiong Y, Zhang JW, Zhang Y, Zhang TQ, Zhu YY. Sub-graph contrast for scalable self-supervised graph representation learning. In: Proc. of the 2020 IEEE Int'l Conf. on Data Mining. Sorrento: IEEE, 2020. 222–231. [doi: [10.1109/ICDM50108.2020.00031](https://doi.org/10.1109/ICDM50108.2020.00031)]
 - [10] Qiu JZ, Chen QB, Dong YX, Zhang J, Yang HX, Ding M, Wang KS, Tang J. GCC: Graph contrastive coding for graph neural network pre-training. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 1150–1160. [doi: [10.1145/3394486.3403168](https://doi.org/10.1145/3394486.3403168)]
 - [11] Hafidi H, Ghogho M, Ciblat P, Swami A. Negative sampling strategies for contrastive self-supervised learning of graph representations. Signal Processing, 2022, 190: 108310. [doi: [10.1016/J.SIGPRO.2021.108310](https://doi.org/10.1016/J.SIGPRO.2021.108310)]
 - [12] Zhu YQ, Xu YC, Yu F, Liu Q, Wu S, Wang L. Deep graph contrastive representation learning. arXiv:2006.04131, 2020.
 - [13] Yin YH, Wang QZ, Huang SY, Xiong HY, Zhang X. AutoGCL: Automated graph contrastive learning via learnable view generators. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022: 8892–8900. [doi: [10.1609/aaai.v36i8.20871](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i8.20871)]
 - [14] Li HY, Wang X, Zhang ZW, Yuan ZH, Li H, Zhu WW. Disentangled contrastive learning on graphs. In: Proc. of the 35th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Curran Associates Inc., 2021: 1674.
 - [15] Li HY, Zhang ZW, Wang X, Zhu WW. Disentangled graph contrastive learning with independence promotion. IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(8): 7856–7869. [doi: [10.1109/TKDE.2022.3206875](https://doi.org/10.1109/TKDE.2022.3206875)]
 - [16] Kipf TN, Welling M. Variational graph auto-encoders. arXiv:1611.07308, 2016.
 - [17] Pan SR, Hu RQ, Long GD, Jiang J, Yao LN, Zhang CQ. Adversarially regularized graph autoencoder for graph embedding. In: Proc. of the 27th Int'l Joint Conf. on Artificial Intelligence. Stockholm: ijcai.org, 2018. 2609–2615.
 - [18] Salehi A, Davulcu H. Graph attention auto-encoders. In: Proc. of the 32nd IEEE Int'l Conf. on Tools with Artificial Intelligence. Baltimore: IEEE, 2019. 989–996. [doi: [10.1109/ICTAI50040.2020.00154](https://doi.org/10.1109/ICTAI50040.2020.00154)]
 - [19] Tang MY, Li P, Yang C. Graph auto-encoder via neighborhood wasserstein reconstruction. In: Proc. of the 10th Int'l Conf. on Learning Representations. OpenReview.net, 2022.
 - [20] García-Durán A, Niepert M. Learning graph representations with embedding propagation. In: Proc. of the 31st Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017. 5125–5136.
 - [21] Hou ZY, Liu X, Cen YK, Dong YX, Yang HX, Wang CJ, Tang J. GraphMAE: Self-supervised masked graph autoencoders. In: Proc. of the 28th ACM SIGKDD Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Washington: ACM, 2022. 594–604. [doi: [10.1145/3534678.3539321](https://doi.org/10.1145/3534678.3539321)]
 - [22] Hou ZY, He YF, Cen YK, Liu X, Dong YX, Kharlamov E, Tang J. GraphMAE2: A decoding-enhanced masked self-supervised graph learner. In: Proc. of the 2023 ACM Web Conf. Austin: ACM, 2023. 737–746. [doi: [10.1145/3543507.3583379](https://doi.org/10.1145/3543507.3583379)]
 - [23] Zheng CB, Yang ZC, Lu Y. GMAE: Representation learning on graph via masked graph autoencoders. In: Proc. of the 27th Int'l Conf. on Computer Supported Cooperative Work in Design. Tianjin: IEEE, 2024. 2515–2521. [doi: [10.1109/CSCWD61410.2024.10580417](https://doi.org/10.1109/CSCWD61410.2024.10580417)]
 - [24] Liu C, Yao ZL, Zhan YB, Ma XQ, Tao DP, Wu J, Hu WB, Pan SR, Du B. Hi-GMAE: Hierarchical graph masked autoencoders. arXiv: 2405.10642, 2024.
 - [25] Zhu YQ, Xu WZ, Zhang JH, Liu Q, Wu S, Wang L. Deep graph structure learning for robust representations: A survey. arXiv: 2103.03036, 2021.
 - [26] Jin W, Ma Y, Liu XR, Tang XF, Wang SH, Tang JL. Graph structure learning for robust graph neural networks. In: Proc. of the 26th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining. ACM, 2020. 66–74. [doi: [10.1145/3394486.3403049](https://doi.org/10.1145/3394486.3403049)]
 - [27] Chen Y, Wu LF, Zaki MJ. Iterative deep graph learning for graph neural networks: Better and robust node embeddings. In: Proc. of the 34th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2020: 1620.
 - [28] Sun QY, Li JX, Peng H, Wu J, Fu XC, Ji C, Yu PS. Graph structure learning with variational information bottleneck. In: Proc. of the 36th AAAI Conf. on Artificial Intelligence. AAAI, 2022: 4165–4174. [doi: [10.1609/aaai.v36i4.20335](https://doi.org/10.1609/aaai.v36i4.20335)]
 - [29] Zeng HQ, Zhou HK, Srivastava A, Kannan R, Prasanna VK. GraphSAINT: Graph sampling based inductive learning method. In: Proc. of the 8th Int'l Conf. on Learning Representations. Addis Ababa: OpenReview.net, 2020.
 - [30] Xu MH, Wang H, Ni BB, Guo HY, Tang J. Self-supervised graph-level representation learning with local and global structure. In: Proc. of the 38th Int'l Conf. on Machine Learning. PMLR, 2021. 11548–11558.
 - [31] Chung F. The heat kernel as the pagerank of a graph. Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2007, 104(50): 19735–19740. [doi: [10.1073/pnas.0708838104](https://doi.org/10.1073/pnas.0708838104)]
 - [32] Gasteiger J, Weissenberger S, Günnemann S. Diffusion improves graph learning. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 1197.
 - [33] Karypis G, Kumar V. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. SIAM Journal on Scientific Computing,

- 1998, 20(1): 359–392. [doi: [10.1137/S1064827595287997](https://doi.org/10.1137/S1064827595287997)]
- [34] Belkin M, Niyogi P. Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering. In: Proc. of the 15th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems: Natural and Synthetic. Vancouver: MIT Press, 2001. 585–591.
 - [35] Namata G, London B, Getoor L, Huang B. Query-driven active surveying for collective classification. In: Proc. of the 2012 Workshop on Mining and Learning with Graphs. Edinburgh, 2012.
 - [36] McCallum AK, Nigam K, Rennie J, Seymore K. Automating the construction of Internet portals with machine learning. *Information Retrieval*, 2000, 3(2): 127–163. [doi: [10.1023/A:1009953814988](https://doi.org/10.1023/A:1009953814988)]
 - [37] Sen P, Namata G, Bilgic M, Getoor L, Gallagher B, Eliassi-Rad T. Collective classification in network data. *AI Magazine*, 2008, 29(3): 93–106. [doi: [10.1609/aimag.v29i3.2157](https://doi.org/10.1609/aimag.v29i3.2157)]
 - [38] Zitnik M, Leskovec J. Predicting multicellular function through multi-layer tissue networks. *Bioinformatics*, 2017, 33(14): i190–i198. [doi: [10.1093/bioinformatics/btx252](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx252)]
 - [39] Kipf TN, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In: Proc. of the 5th Int'l Conf. on Learning Representations. Toulon: OpenReview.net, 2017.
 - [40] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, Romero A, Liò P, Bengio Y. Graph attention networks. arXiv:1710.10903, 2017.
 - [41] Hamilton WL, Ying R, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs. In: Proc. of the 31st Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Long Beach: Curran Associates Inc., 2017. 1025–1035.
 - [42] Perozzi B, Al-Rfou R, Skiena S. DeepWalk: Online learning of social representations. In: Proc. of the 20th ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2014. 701–710. [doi: [10.1145/2623330.2623732](https://doi.org/10.1145/2623330.2623732)]
 - [43] Veličković P, Fedus W, Hamilton WL, Liò P, Bengio Y, Hjelm RD. Deep graph infomax. arXiv:1809.10341, 2018.
 - [44] Thakoor S, Tallec C, Azar MG, Azabou M, Dyer EL, Munos R, Veličković P, Valko M. Large-scale representation learning on graphs via bootstrapping. In: Proc. of the 10th Int'l Conf. on Learning Representations. OpenReview.net, 2022.
 - [45] Peng Z, Huang WB, Luo MN, Zheng QH, Rong Y, Xu TY, Huang JZ. Graph representation learning via graphical mutual information maximization. In: Proc. of the 2020 Web Conf. Taipei: ACM, 2020. 259–270. [doi: [10.1145/3366423.3380112](https://doi.org/10.1145/3366423.3380112)]
 - [46] Xu DK, Cheng W, Luo DS, Chen HF, Zhang X. InfoGCL: Information-aware graph contrastive learning. In: Proc. of the 35th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Curran Associates Inc., 2021. 2327.
 - [47] Zhang HR, Wu QT, Yan JC, Wipf D, Yu PS. From canonical correlation analysis to self-supervised graph neural networks. In: Proc. of the 35th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Curran Associates Inc., 2021.
 - [48] Xu K, Hu WH, Leskovec J, Jegelka S. How powerful are graph neural networks? In: Proc. of the 7th Int'l Conf. on Learning Representations. New Orleans: OpenReview.net, 2019.
 - [49] Ying Z, You JX, Morris C, Ren X, Hamilton WL, Leskovec J. Hierarchical graph representation learning with differentiable pooling. In: Proc. of the 32nd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Montréal: Curran Associates Inc., 2018. 4805–4815.
 - [50] Borgwardt KM, Kriegel HP. Shortest-path kernels on graphs. In: Proc. of the 5th IEEE Int'l Conf. on Data Mining. Houston: IEEE, 2005. 8. [doi: [10.1109/ICDM.2005.132](https://doi.org/10.1109/ICDM.2005.132)]
 - [51] Shervashidze N, Vishwanathan SVN, Petri T, Mehlhorn K, Borgwardt KM. Efficient graphlet kernels for large graph comparison. In: Proc. of the 12th Int'l Conf. on Artificial Intelligence and Statistics. Clearwater Beach: JMLR.org, 2009. 488–495.
 - [52] Shervashidze N, Schweitzer P, van Leeuwen EJ, Mehlhorn K, Borgwardt KM. Weisfeiler-lehman graph kernels. *Journal of Machine Learning Research*, 2011, 12: 2539–2561.
 - [53] Yanardag P, Vishwanathan SVN. Deep graph kernels. In: Proc. of the 21st ACM SIGKDD Int'l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining. Sydney: ACM, 2015. 1365–1374. [doi: [10.1145/2783258.2783417](https://doi.org/10.1145/2783258.2783417)]
 - [54] Kondor R, Pan H. The multiscale laplacian graph kernel. In: Proc. of the 30th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Barcelona: Curran Associates Inc., 2016. 2990–2998.
 - [55] Narayanan A, Chandramohan M, Venkatesan R, Chen LH, Liu Y, Jaiswal S. graph2vec: Learning distributed representations of graphs. arXiv:1707.05005, 2017.
 - [56] Sun FY, Hoffmann J, Verma V, Tang J. InfoGraph: Unsupervised and semi-supervised graph-level representation learning via mutual information maximization. In: Proc. of the 8th Int'l Conf. on Learning Representations. Addis Ababa: OpenReview.net, 2020.
 - [57] You YN, Chen TL, Shen Y, Wang ZY. Graph contrastive learning automated. In: Proc. of the 38th Int'l Conf. on Machine Learning. PMLR, 2021. 12121–12132.
 - [58] Hassani K, Ahmadi AHK. Contrastive multi-view representation learning on graphs. In: Proc. of the 37th Int'l Conf. on Machine Learning. PMLR, 2020. 4116–4126.
 - [59] You YN, Chen TL, Sui YD, Chen T, Wang ZY, Shen Y. Graph contrastive learning with augmentations. In: Proc. of the 34th Int'l Conf.

on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2020. 488.

附中文参考文献

- [1] 赵文竹, 袁冠, 张艳梅, 乔少杰, 王森章, 张雷. 多视角融合的时空动态 GCN 城市交通流量预测. 软件学报, 2024, 35(4): 1751–1773. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7018.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.007018]
- [2] 马梓博, 米悦, 张波, 张征, 吴静云, 黄海文, 王文东. 面向异质性医学图像处理的深度学习算法综述. 软件学报, 2023, 34(10): 4870–4915. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/6680.htm> [doi: 10.13328/j.cnki.jos.006680]

作者简介

秦者云, 博士生, 主要研究领域为机器学习, 计算机视觉.

卢宪凯, 博士, 研究员, 主要研究领域为机器学习, 计算机视觉.

聂秀山, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 高级会员, 主要研究领域为人工智能, 智能媒体分析, 计算机视觉.

尹义龙, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 杰出会员, 主要研究领域为机器学习, 数据挖掘.