

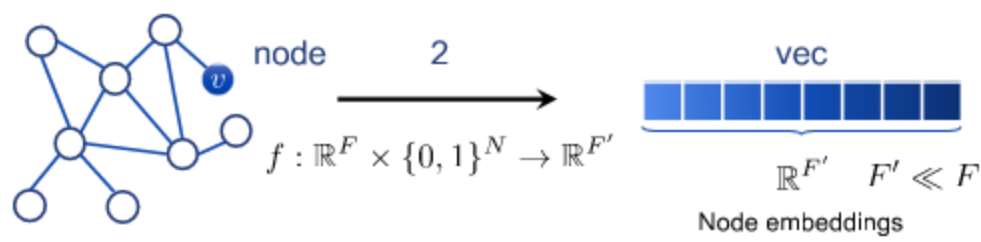
深度图对比学习--找到了一个非常棒的博客，读了之后受益匪浅

来自于博客 <https://sxkdz.github.io/research/GraphCL/>， 侵权

自监督学习（SSL）已被广泛研究，以缓解深度模型的标签稀缺问题。最近的 SSL 技术正在围绕对比学习（CL）的中心主题进行融合，该主题旨在最大限度地提高输入数据的多个视图下表示的一致性。

Self-Supervised Learning Revisited

深度图表示学习旨在学习对节点结构和属性进行编码的低维密集向量，从而实现对图结构数据的高效特征学习。



Taxonomy of Self-Supervised Learning

自我监督学习方法通常分为两条发展路线：生成/预测方法和对比方法。

Generative/predictive	Contrastive
Loss measured in the output space	Loss measured in the latent space
Examples: angle prediction, autoencoders	Examples: contrastive predictive coding, deep infomax

- 生成/预测方法通常以监督方式训练模型，其中标签是从数据中自行生成的。
- 对比学习，又名实例歧视，需要数据-数据对，并对正负对进行区分。

Graph Contrastive Learning

与视觉表示学习不同，传统的网络嵌入工作本质上遵循一种对比范式，这种范式起源于

skip gram 模型。

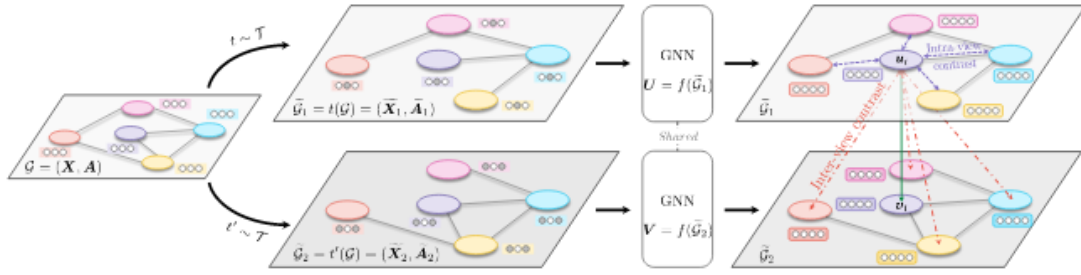
现代 GNN 采用更强大的编码器，通过聚集来自邻域的信息来学习表示。然而，基于 GNN 的对比学习方法还处于起步阶段。越来越多的图形 CL 文献研究了不同的对比体系结构和数据扩充技术。

Graph Contrastive modes

对比模式定义了将哪些嵌入拉到一起或将其推开。主流工作包括两种模式：全局-局部和局部-局部对比学习。

- Global-local contrastive learning: DGI [Veličković et al., 2019] and MVGRL [Hassani and Khasahmadi, 2020] maximize the agreement between node- and graph-level representations. The global-contrastive mode can be seen as a proxy of the local-local mode, but the graph readout function should be injective [Xu et al., 2019] to distill enough information from node-level embeddings.
- Local-local contrastive learning: Follow-up work GCC [Qiu et al., 2020], GRACE [Zhu et al., 2020], and GraphCL [You et al., 2020] eschew the need of an injective readout function and directly maximize the agreement of node embeddings (or subgraph-level representations) across two augmented views.

Deep Graph Contrastive Learning: GRACE



所提出的 GRACE 框架主要包括两个阶段：数据扩充和对比学习。在每次迭代中，我们首先从一组所有可能的扩充中采样两个扩充函数。对于图上的数据扩充，我们在拓扑和属性级别进行混合扩充，以构建不同的节点上下文。

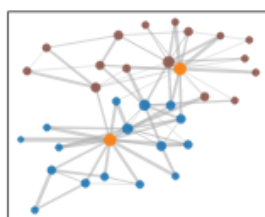
Graph Contrastive Learning with Adaptive Augmentation: GCA

增广是 CL 的关键，但如何在图 CL 中增广图结构数据仍然是一个经验选择。本质上，CL 试图学习对增强方案引起的扰动不敏感的表达[Wu et al., 2020; Xiao et al., 2020]。因此，转换的目的是产生一种不同于输入但也不可察觉的观点，即转换不应从根本上改变其身份[Jovanović et al., 2021]。考虑到节点和边的影响存在差异，我们认为增广应该识别图的重要结构和属性信息，并保留节点身份。

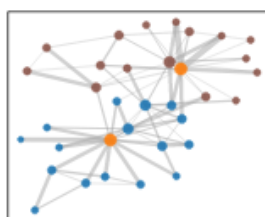
Adaptive Augmentation on Graphs

更具体地说，我们建议通过设置与边缘或属性的中心性分数成反比的移除概率，来保持重要的结构和属性不变，并干扰可能不重要的链接和特征。从摊销的角度来看，我们强调重要的结构和属性，而不是随机破坏的观点。

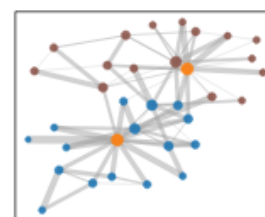
在 GCA 中，我们考虑并评估了三个众所周知的中心性指标：



(a) Degree



(b) Eigenvector



(c) PageRank

Experiments

Datasets

为了进行全面比较，我们使用了五个广泛使用的数据集，包括 Wiki CS、Amazon Computers、Amazon Photo、Coauthor CS 和 Coauthor Physics，来研究转导节点分类的性能。

Dataset	#Nodes	#Edges	#Features	#Classes
Wiki-CS	11,701	216,123	300	10
Amazon-Computers	13,752	245,861	767	10
Amazon-Photo	7,650	119,081	745	8
Coauthor-CS	18,333	81,894	6,805	15
Coauthor-Physics	34,493	247,962	8,415	5

Baseline

- Network embedding methods
 - DeepWalk [[Perozzi et al., 2014](#)]
 - node2vec [[Grover and Leskovec, 2016](#)]
- Unsupervised GNNs
 - Recontraction-based methods
 - GAE, VGAE [[Kipf and Welling, 2016](#)]
 - GraphSAGE [[Hamilton et al., 2017](#)]
 - Contrastive learning methods
 - DGI [[Veličković et al., 2019](#)]
 - GMI [[Peng et al., 2020](#)]
 - MVGRL [[Hassani and Khasahmadi, 2020](#)]
- Supervised GNNs
 - GCN [[Kipf and Welling, 2017](#)]
 - GAT [[Veličković et al., 2018](#)]

Concluding Remarks

图自监督学习（SSL）是一种很有前途的无需人工注释即可学习嵌入的方法。在传统的网络嵌入方法的基础上，图 CL 为图的无监督表示学习建立了一种新的范式。

我们开发了一个新的图 CL 框架 GRACE 及其带有自适应增强的扩展 GCA。这两种方法采用了局部局部对比模式，能够更好地提取节点级表示。

我们还发现，在**结构和属性级别上的扩充方案对图 CL 都是关键的**，并且在扩充过程中应该保留重要的节点/属性，以迫使模型学习图的内在模式。具体来说，在 GCA 中，我们将去除概率设置为与边缘和属性的中心性分数成反比，以反映它们的重要性。

我们提出的方法实现了最先进的性能，并弥合了无监督和有监督学习之间的差距。

尽管已经实现了有希望的性能，但图 CL 的开发仍处于萌芽阶段，但需要对其有原则的理解。

Self conclusion: 对于 GNN 模型，有些场景下表示学习并不能够很好得体现节点、边或者图的特征，也就是 GNN 训练的效果并不是非常好，这个时候可以引入对比学习增强 GNN 的表示能力，通过拉近与正例和远离反例之间的距离，增加了训练样本，这样在理论上训练效果会更好