

## 引文格式:

朱喜珍, 张齐齐, 赵中英. 生成式图自监督学习综述 [J]. 集成技术, 2025, 14(4): 71-86.

Zhu XZ, Zhang QQ, Zhao ZY. A survey of generative graph self-supervised learning [J]. Journal of Integration Technology, 2025, 14(4): 71-86.

## 生成式图自监督学习综述

朱喜珍 张齐齐 赵中英\*

(山东科技大学 计算机科学与工程学院 青岛 266590)

**摘要** 生成式图自监督学习旨在利用图自身信息, 通过设计预测任务或结构/特征重构任务生成监督信号, 进而在结构和特征上生成与原始图数据相似的新图。该方法能有效解决数据稀缺或标签不足等挑战, 引起了研究者的广泛关注。该领域虽然取得了显著进展, 但仍缺乏系统性的梳理和归纳。为此, 本文总结归纳了近年来生成式图自监督学习的研究成果。首先, 本文介绍了生成式图自监督学习的背景知识, 并提供了形式化定义; 其次, 梳理了生成式图自监督学习中的图自编码器, 并对图掩码自编码器进行了归类和分析; 再次, 本文汇总了常用的数据集和评价指标。最后, 探讨了当前生成式图自监督学习面临的挑战, 并展望了未来研究方向。

**关键词** 图自监督学习; 生成式方法; 图神经网络; 图表示学习

中图分类号 TP183 文献标志码 A doi: 10.12146/j.issn.2095-3135.20241217001

CSTR: 32239.14.j.issn.2095-3135.20241217001

## A Survey of Generative Graph Self-Supervised Learning

ZHU Xizhen ZHANG Qiqi ZHAO Zhongying\*

(College of Computer Science and Engineering, Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266590, China)

\*Corresponding Author: zzysuin@163.com

**Abstract** Generative graph self-supervised learning is designed to harness the inherent information within graphs by crafting predictive tasks or structure/feature reconstruction tasks to produce supervisory signals. This process results in the generation of new graphs that closely mimic the original graph data in both structure and features. Thus, it has shown superior performance in addressing challenges such as data scarcity or insufficient labeling, attracting widespread attention from researchers. Despite significant progress in this field, there is still a lack of systematic organization and summarization. To this end, this paper aims to make a comparative study on the research achievements of generative graph self-supervised learning in recent years. It first introduces relevant background knowledge and provides formal definitions. Subsequently, it sorts out graph autoencoders in generative graph self-supervised learning and categorizes and analyzes graph mask

收稿日期: 2024-12-17 修回日期: 2025-02-10

基金项目: 国家自然科学基金项目 (62272263, 62072288); 山东省自然科学基金项目 (ZR2024MF034, ZR2022MF268)。

作者简介: 朱喜珍, 本科生, 研究方向为图自监督学习; 张齐齐, 博士研究生, 研究方向为图自监督学习、图神经网络; 赵中英 (通讯作者), 教授, 研究方向为图自监督学习、图神经网络、推荐算法、人工智能, E-mail: zzysuin@163.com。

autoencoders. In addition, this paper compiles commonly used datasets and evaluation metrics. Finally, it discusses the current challenges faced by generative graph self-supervised learning and offers prospects for future research directions.

**Keywords** graph self-supervised learning; generative method; graph neural networks; graph representation learning

**Funding** This work is supported by National Natural Science Foundation of China (62272263, 62072288), Natural Science Foundation of Shandong Province (ZR2024MF034, ZR2022MF268)

## 1 引言

图是一种由节点和边构成的数据结构，能有效捕捉并建模复杂的关系网络，被广泛应用于社交网络分析<sup>[1]</sup>、知识图谱构建<sup>[2]</sup>、生物信息学研究<sup>[3]</sup>和交通运输规划<sup>[4]</sup>等多个领域。因此，有效地分析和挖掘图数据中潜藏的丰富语义已成为解决实际问题的关键任务。图监督学习是一种处理图数据的有效方法，然而，此类方法通常依赖大量的标记数据<sup>[5]</sup>。在现实世界中，标记数据往往非常稀缺，且获取成本极高，因此大大限制了图监督学习的应用<sup>[6]</sup>。

为解决上述问题，图自监督学习应运而生。该方法不依赖人工标记数据，而是通过深入挖掘数据的内在结构生成监督信号，从而学习图中节点表示<sup>[7]</sup>。这为图学习领域开辟了新的研究方向，并取得了显著的研究进展<sup>[8]</sup>。图自监督学习方法主要分为“对比式”和“生成式”两类<sup>[7]</sup>。近年来，“对比式”方法在图数据领域获得了广泛应用。该方法通过最小化相似样本在表示空间中的距离，同时最大化不相似样本间的距离，有效提升了表示学习的性能。然而，“对比式”方法亦存在局限性，如负样本采样的复杂性高和对图增强策略高度依赖等，这些因素限制了对比式图自监督学习的性能和应用<sup>[9]</sup>。

生成式图自监督学习因克服上述困难备受关

注，成为近年来的研究热点。该方法通过设计预测任务或结构/特征重构任务，从图中提取监督信号，生成与原图在结构和特征上相似的新图，从而学习图的潜在表示<sup>[9]</sup>。现有的生成式图自监督学习已被广泛应用于图数据、自然语言处理和计算机视觉等领域<sup>[6]</sup>。

生成式图自监督学习在图学习领域虽然已展现出巨大潜力，但现有文献中尚缺乏对该类方法的系统性综述，特别是对不同方法间联系与差异的深入分析。本文旨在全面梳理生成式图自监督学习，帮助读者迅速了解该领域的最新学术思想和动态。具体而言，本文将深入剖析当前主流的图生成式学习方法，全面分析其技术优势与局限性。此外，本文还将梳理生成式学习在多样化任务中的应用实例，为未来研究提供清晰的指引。希望通过这些深入分析，帮助研究人员更好地理解生成式方法在图自监督学习中的独特价值。

## 2 相关概念

图可表示为  $G=(V,E)$ ，其中， $V=\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$  为节点的集合， $v_i \in V$  为一个节点； $E=\{e_{ij} | v_i, v_j \in V\}$  为边(关系)的集合， $e_{ij}=(v_i, v_j) \in E$  为连接节点  $v_i$  和  $v_j$  的边。节点  $v$  的邻居为  $N(v)=\{u \in V | (v, u) \in E\}$ 。图可以分为以下几类。

(1) 有向图/无向图：有向图是由一组顶点和

一组有方向的边组成的图, 其中每条边都有唯一的起点和终点, 从一个顶点指向另一个顶点的方向。无向图是有向图的一个特例, 其中每条边连接两个顶点, 不区分这两个顶点的先后顺序。

(2) 同质图/异质图: 同质图指由同一种类型的节点和边组成的图。异质图指由两种及以上的节点和边组成图。

(3) 超图: 是图的一种推广, 一条边可以连接任意数量的顶点。

(4) 动态图: 动态图是随着时间变化的图, 节点和边在不同的时间点可能发生变化。

图神经网络 (graph neural network, GNN)<sup>[10-12]</sup> 是一种用于处理图数据的深度学习方法, 利用图的拓扑结构和节点间的关系, 迭代聚合来自邻居节点的特征信息, 并在传播过程中将聚合的邻居信息与当前中心节点的特征表示进行融合, 进而学习有效的特征信息, 已成功应用于节点分类<sup>[13]</sup>、节点聚类<sup>[14]</sup>和链接预测<sup>[15]</sup>等复杂网络任务中, 在处理大规模图数据和提取图特征等方面展示出了巨大潜能。图神经网络通常可堆叠多个传播层, 这些层由信息聚合和表示更新组成。GNN 的学习过程可表示如下:

$$n_v^{(l)} = \text{Agg}(\{h_u^{(l)} | \forall u \in N(v)\}) \quad (1)$$

$$h_v^{(l+1)} = \text{Upd}(h_v^{(l)}, n_v^{(l)}) \quad (2)$$

其中,  $n_v^{(l)}$  为节点  $v$  在  $l$  层的聚合结果;  $h_u^{(l)}$  为节点  $u$  在  $l$  层的表示;  $\text{Agg}$  和  $\text{Upd}$  分别为信息聚合和表示更新函数。

生成式学习属于自监督学习范式, 通过学习数据的潜在分布生成新样本。与判别式学习<sup>[16]</sup>不同, 生成式学习着重捕捉数据的整体分布, 从而生成与训练数据相似的新样本。这一方法被广泛应用于图像生成<sup>[17]</sup>和文本生成<sup>[18]</sup>等任务, 并在处理数据稀缺、标签缺失或生成型任务时展现出卓越的性能。在图学习领域, 生成式图自监督学习同样表现出显著优势。生成式图自监督学习主要

分为图自回归模型和图自编码器两大类。图自回归模型通常依赖特定的顺序 (如节点或边的排列顺序) 进行建模, 但由于图的非欧几里得结构, 这种对顺序的依赖性往往限制了模型的性能提升, 因此导致图自回归模型在实际应用中的表现受限。相比之下, 图自编码器基于编码-解码框架, 能高效学习图数据的潜在表示。图自编码器的核心在于编码器将图的节点映射到一个低维的表示空间, 而解码器则利用这些低维表示重建图的结构或节点特征。例如, 图自编码器方法<sup>[19]</sup>通过编码器生成节点的低维向量表示, 然后解码器利用这些表示重构原始图的拓扑结构。

下游任务: 图表示学习的性能通常需要通过下游任务进行评测, 而这些下游任务主要分为 3 类: 节点级任务<sup>[13]</sup>、边级任务<sup>[20]</sup>和图级任务<sup>[21]</sup>。

(1) 节点级任务: 该类任务的核心在于预测节点的某种属性, 其中最典型的任务是节点分类。在这个任务中, 假定每个节点对应一个标签。常见的做法是将节点的表示作为输入, 利用部分已标记的节点训练出一个分类器, 以预测其他节点的标签。

(2) 边级任务: 该类任务关注如何利用节点对的信息推测边的某些特性。链接预测是常见的任务, 旨在判断两个给定的节点间是否存在连接, 通常的做法是将节点对的表示输入到一个二分类模型中, 训练模型预测边是否存在。

(3) 图级任务: 该类任务涉及对多个图的数据集进行操作, 其中每个图都被赋予一个标签。这些任务的目标是预测每个图的类别。最典型的任务是图分类, 其方法是训练一个模型, 将整个图的表示作为输入, 以预测图的标签。为得到图级表示, 通常利用聚合函数汇总图中所有节点的表示。

### 3 图自回归模型

图自回归模型是一种生成式方法, 用于描述

图结构数据的动态变化，其中每个节点的值依赖其自身在先前时间步的值和其邻居节点的值<sup>[22]</sup>。该方法通过组合先前时刻的随机变量预测后续时刻的随机变量。自回归模型在图生成建模中被广泛应用。例如，You 等<sup>[23]</sup>提出了基于深度自回归模型生成现实中图的方法 (generating realistic graphs with deep auto-regressive models, GraphRNN)，利用深度自回归方法生成真实的图

结构，将图的生成过程分解为一系列节点和边的生成。这些节点和边的生成过程依赖当前已生成的图结构。GraphRNN 的目标是最大化图生成序列的概率，其结构可看作分层模型，其框架如图 1 所示。图级循环神经网络维护图的状态并生成新节点，而边级循环神经网络则根据当前的图状态生成新边。

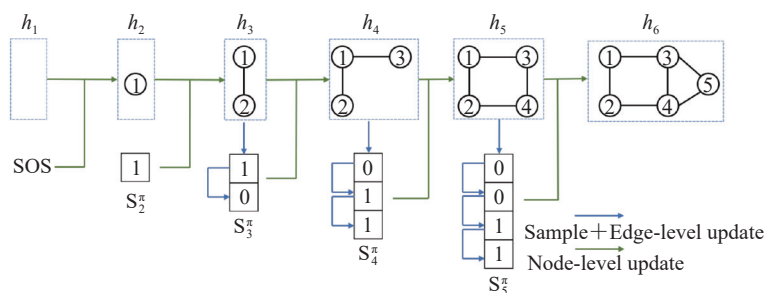


图 1 GraphRNN 的框架<sup>[23]</sup>

Fig. 1 The framework of GraphRNN<sup>[23]</sup>

MRNN<sup>[24]</sup>和 GCPN<sup>[25]</sup>代表图自回归模型在分子领域的两种方法，均通过优化特定领域的奖励函数生成分子图。MRNN 是一种针对序列数据建模的神经网络结构，通过在不同分辨率上处理数据捕捉时间序列的长期依赖关系。GCPN 基于图卷积网络和强化学习，提升了对图结构的建模能力。近年来，生成式预训练转换器的概念被引入图自回归模型领域。例如，Hu 等<sup>[26]</sup>提出的 GPT-GNN 模型，通过迭代地对图执行节点和边的重建，推动了生成式图自监督学习的发展。

图自回归模型虽然在捕捉上下文依赖关系方面表现出色，但大多数图结构没有固定的生成顺序，因此，图自回归模型的有效性在许多实际应用中受到一定限制<sup>[9]</sup>。

## 4 图自编码器

传统的图自编码器主要由编码器和解码器两

部分组成<sup>[19]</sup>。编码器的作用是捕捉图中的节点信息，并将其映射到低维表示空间，获得节点的嵌入向量。解码器利用学习到的低维表示重建原始图的拓扑结构或节点特征。对传统的图自编码器的研究可追溯到 Kipf 等<sup>[19]</sup>提出的图自编码器 (graph autoencoders, GAE) 和变分图自编码器 (variational graph autoencoders, VGAE)。图自编码器将图卷积网络作为编码器，以学习节点的低维表示；解码器则通过编码器获得的节点表示进行点积操作，重建原始图的邻接矩阵，以预测边的存在概率。VGAE 是 GAE 的变体，引入了变分推理框架，通过将节点表示建模为高斯分布，有效捕捉了图中节点表示的潜在不确定性。

基于上述早期工作，研究人员进一步提出了多种改进方法。例如，Li 等<sup>[27]</sup>基于变分图自动编码器和最大化互信息提出的 VGAE-MI 提高了节点嵌入在复杂图上的区分性和信息保留能力。Garcia-Duran 等<sup>[28]</sup>提出的基于嵌入传播的图表

示学习 (learning graph representations with embedding propagation, EP) 不仅重建了邻接矩阵, 还通过引入均方误差重构了节点特征, 减轻了因输入数据破坏导致的性能下降问题。该方法在节点特征丰富、图结构简单的场景中表现出色, 但在复杂图结构上的效果不尽如人意。Pan 等<sup>[29]</sup>基于 VGAE 和自回归机制提出了 ARVGA, 显著提升了图结构生成的质量。为更好地学习图中结构和特征信息, MGAE、GALA 和 GATE 等<sup>[30-33]</sup>方法同时重构了节点和边。Tang 等<sup>[34]</sup>提出了 NWR-GAE, 通过联合建模节点度和邻居特征分布, 不仅关注了局部邻域关系, 还提升了对全局图结构的理解能力。图自编码器的框架如图 2 所示。

研究表明<sup>[35-36]</sup>, 传统的图自编码器在链路预

测任务中表现优异, 但在节点分类和图分类等其他下游任务上的效果有限, 而且易出现平凡解和过拟合问题。图自监督学习方法的深入见解和新方向<sup>[37]</sup> (self-supervised learning on graphs: deep insights and new directions, SelfTask) 的研究进一步验证了这一点, 即传统图自编码器在这些任务中往往难以获得可泛化的判别性表征, 而引入与下游任务紧密关联的自监督目标后, 模型性能显著提升。这说明, 传统以重构邻接矩阵为核心的重构目标, 在处理结构与语义高度耦合的任务时缺乏足够的监督约束, 容易诱导模型学习出同质化的节点嵌入, 并在特征维度较低或数据含噪的场景下出现过拟合, 从而限制了其在多任务和复杂图场景中的应用潜力。

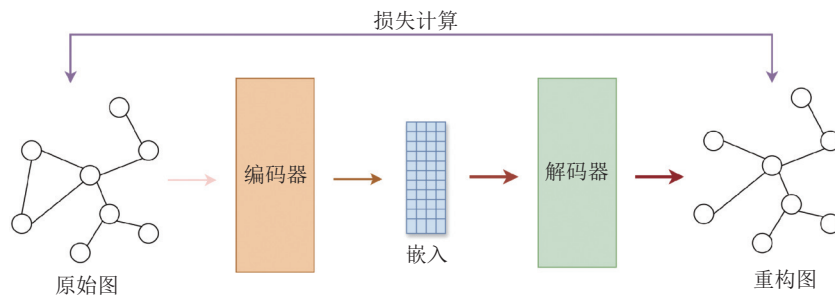


图 2 图自编码器框架

Fig. 2 The framework of graph autoencoder

对本节介绍的主流方法进行综合分析比较, 如表 1 所示。

## 5 图掩码自编码器

为解决图自编码器造成的过拟合和平凡解等问题<sup>[9]</sup>, 研究人员进一步提出了图掩码自编码器<sup>[9, 38]</sup>。图掩码自编码器在多种下游任务中展现出卓越性能, 成为近年来研究的热点。为系统梳理相关进展, 本节设计了一个统一的框架, 如图 3 所示。该框架主要从两个维度展开: 掩码目标和掩码方式。在每一维度下, 框架进一步细分为多个具体类别。

### 5.1 掩码目标

根据掩码目标, 图掩码自编码器可进一步划分为对节点掩码、对边掩码、同时对节点和边掩码及其他掩码策略。不同类型的掩码目标如图 4 所示。

节点的掩码指生成式图自监督学习对图中部分节点进行掩码<sup>[9, 38]</sup>。最早的研究可以追溯到 Hou 等<sup>[9]</sup>提出的自监督图掩码自编码器 (self-supervised masked graph autoencoders, GraphMAE), 该方法对节点进行掩码, 将掩码后的图输入编码器, 以生成节点嵌入。随后, 对学到的嵌入表示执行二次掩码操作, 并输入到基于图卷积网络 (graph convolutional network, GCN)

表1 图自编码器方法比较

Table 1 The comparison of graph autoencoder

重构方法	方法	核心	优点	缺点
边重构	GAE <sup>[19]</sup>	最原始的编码-解码	学习潜在表示	过拟合, 泛化能力不足
	VGAE <sup>[19]</sup>	利用变分推断节点的潜在表示	在数据集上表现稳定	图分类任务表现不好
	VGAE-MI <sup>[27]</sup>	利用互信息捕捉更丰富的表示, 并使用对抗训练框架	在复杂图上增强了节点嵌入的区分性和信息保留能力	鲁棒性不好
	ARVGA <sup>[29]</sup>	利用自回归方法重建	避免数据损坏	只在图结构简单时表现较好
节点重构	EP <sup>[28]</sup>	利用均方误差恢复节点特征	复杂图结构表现好	计算成本高, 方法时间复杂度高
	SelfTask <sup>[37]</sup>	利用图中的结构信息、节点属性以及任务特定的标签信息设计自监督任务	在低标注数据场景下显著提升节点分类性能	不适用于标签稀缺或大规模图数据场景
节点与边重构	MGAE <sup>[30]</sup>	通过联合优化学习	处理复杂图特征	训练复杂度高
	GALA <sup>[31]</sup>	引入图自注意力机制	在异构图和稀疏图中的表现更佳	过拟合问题
	GATE <sup>[32]</sup>	用 Transformer 架构	能捕获全局信息	训练开销大、时间长
	DLR-GAE <sup>[33]</sup>	通过共享低秩因子矩阵联合建模语义图和拓扑图信息	泛化能力增强	语义图构造困难
其他重构方法	NWR-GAE <sup>[34]</sup>	联合预测节点度和邻居特征分布	适合处理节点度差异大的图	计算复杂度高

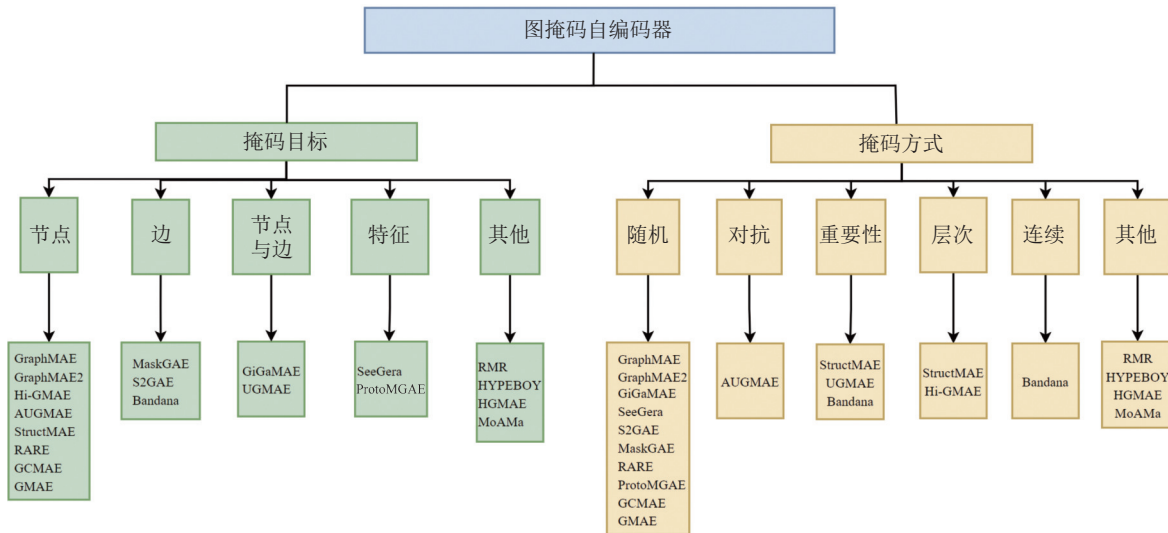


图3 图掩码自编码器分类框架

Fig. 3 The classification framework for graph masked autoencoder

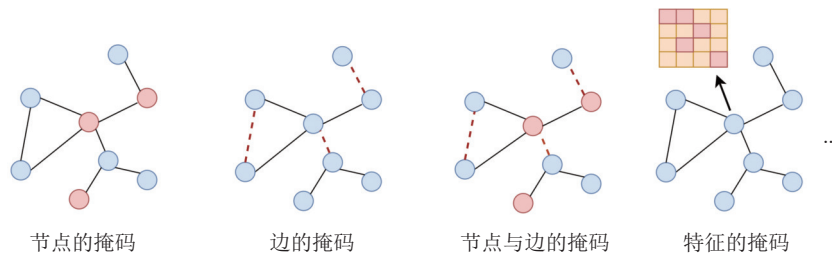


图4 掩码目标

Fig. 4 The objectives of mask

的解码器中, 以重构被掩码的节点特征。该方法通过计算重构节点与原始节点的损失, 进一步优化方法参数。GraphMAE 在节点分类任务上展现出优越的性能, Zhang 等<sup>[39]</sup>的研究表明节点掩码对提升下游任务的性能具有重要作用。与之不同的是, Tu 等<sup>[38]</sup>提出的 RARE 通过随机掩码部分节点生成两个互补掩码图。该方法在原始数据空间和潜在特征空间中均进行掩码和重建操作, 通过预测被掩码节点的潜在特征和利用高阶样本相关性指导模型训练, 增强自监督信号的准确性。

边的掩码指生成式图自监督学习方法对图中部分边进行掩码<sup>[40]</sup>。由于 GraphMAE 在链路预测任务中的性能不尽如人意, 因此, 为生成泛化性的节点表示, Li 等<sup>[40]</sup>提出了掩码图自动编码器 (masked graph autoencoder, MaskGAE)。该方法对边进行掩码, 并细化了掩码目标, 将边划分为有向边和无向边。此外, MaskGAE 将生成的嵌入分别输入结构解码器和度解码器, 用于预测掩码边的存在性和节点度的个数, 通过最小化链路预测损失和度回归损失, 有效提升了模型在下游任务中的性能。

节点与边的掩码指生成式图自监督学习对图中部分节点和边同时掩码<sup>[41]</sup>。Shi 等<sup>[41]</sup>的研究表明, 单一掩码策略 (节点掩码或边掩码) 的跨任务能力有限。因此, 为适配不同下游任务, 模型通常需要额外的调整或训练, 这不仅耗费大量时间, 还增加了经济成本。为解决这一问题, Shi 等<sup>[41]</sup>提出了 GiGaMAE, 同时对节点和边进行掩码。GiGaMAE 通过重构包含图结构和特征信息的潜在嵌入学习节点表示。该方法将图信息映射到同质的潜在空间中进行重构, 将基于随机游走和主成分分析学到的嵌入作为重构目标。此外, 该方法还引入了一种基于互信息重构损失, 能有效重构多个目标, 并区分单个目标的专有信息和多个目标的共有信息。

特征的掩码指生成式图自监督学习对图中特

征进行掩码<sup>[42]</sup>。Li 等<sup>[42]</sup>提出的 SeeGera 不仅掩码节点和边, 还掩码了节点的部分特征。该方法基于图变分自编码器, 其独特性在于使用节点嵌入的内积预测边的存在概率, 并重建被掩码的图结构。与之前的方法相比, SeeGera 显著增强了对特征缺失的图的处理能力, 同时还表现出更强的泛化能力。

其他掩码指生成式图自监督学习对图中节点或边进行掩码外的其他掩码<sup>[43-44]</sup>。Tian 等<sup>[43]</sup>提出了异构图掩码自编码器 (heterogeneous graph masked autoencoders, HGMAE), 通过对每条元路径对应的邻接矩阵进行掩码, 破坏节点间的短程语义连接。此外, HGMAE 还根据训练轮次动态调整属性掩码率, 实现由易到难的渐进式学习。为更好地捕捉异质图中不同节点的结构角色和影响力, HGMAE 还引入了位置特征预测算法, 不仅对元路径和目标节点进行重建, 还学习节点的位置信息。元路径虽然能有效提取异质信息网络中的高阶语义关系, 但其应用受到对领域知识的依赖和将异质图转换为同质图所需的高计算成本的限制。针对此问题, Duan 等<sup>[44]</sup>提出了 RMR, 通过保留目标掩码节点的信息, 将异质图分解为关系子图, 并随机掩码目标节点, 从而建立自监督信号, 摆脱了对元路径的依赖。与传统方法相比, RMR 方法具有计算复杂度低和无须对图拓扑结构进行大幅调整等优点, 在中大规模异质图上的性能表现更好。

## 5.2 掩码方式

根据掩码方式, 图掩码自编码器又可分为随机掩码、对抗掩码、基于重要性掩码、层次掩码、连续掩码和其他类掩码。

随机掩码: 对图的结构或特征进行无差别掩盖<sup>[45]</sup>。这种掩码方式在图掩码自编码器研究的早期阶段被广泛应用, 但具体实现方式不同。例如, GraphMAE 对编码后的嵌入表示再次执行随机掩码操作, 而 Hou 等<sup>[45]</sup>提出的 GraphMAE2 则

在编码后的图嵌入表示上采用多视角随机掩码操作，通过共享掩码实现特征正则化和重建目标，在大规模图上的性能表现显著提升。然而，随机掩码忽略了易样本和难样本的不平衡分布，可能导致嵌入表示的部分维度崩溃，进而导致方法的性能降低。

**对抗掩码：**引入对抗训练进行掩码<sup>[46]</sup>。为解决上述问题，Wang 等<sup>[46]</sup>提出了 AUG-MAE，通过引入对抗训练机制改进掩码方式。AUG-MAE 利用基于图神经网络的掩码生成器，动态生成每个节点的掩码概率，同时通过“由易到难”的训练策略，使该方法能更有效地学习难样本的特征。此外，该方法还从理论上分析了图掩码自编码器的有效性，并从对齐性和均匀性的角度将图生成式学习与图对比学习进行了统一。虽然用对抗训练方法提升了 AUG-MAE 在下游任务中的性能，但 AUG-MAE 训练过程复杂且时间成本较高。

**基于重要性掩码：**考虑节点或边的重要性进行有差别的掩码<sup>[47]</sup>。为降低训练复杂度和提升掩码策略的针对性，Liu 等<sup>[47]</sup>提出了 StructMAE，利用节点重要性评估优化掩码方式。StructMAE 引入了两种重要性评估方法：一种是 PageRank<sup>[48]</sup>，通过分析节点在网络中的连接程度和位置，为每个节点分配重要性分数，节点的度越高、位置越关键，分数也越高；另一种方法是可学习方法，通过动态捕捉图的结构信息和评估每个节点的重要性进行掩码。评分网络通过对节点特征的调制因子进行加权，随着 StructMAE 的训练不断更新节点的重要性分数。基于重要性掩码的设计框架如图 5 所示。

**层次掩码：**针对图的不同尺度进行掩码<sup>[49]</sup>。Liu 等<sup>[49]</sup>提出的 Hi-GMAE 通过引入多尺度掩码恢复策略，解决了随机掩码可能导致的某些子图完全被遮盖的问题。具体而言，Hi-GMAE 在每轮训练中随机选择部分被掩码的节点进行恢复，并逐渐减少恢复比例，使其能逐步适应学习的难

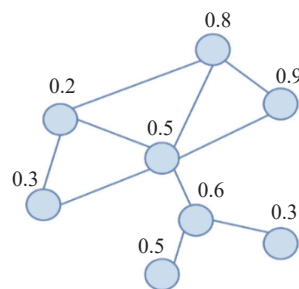


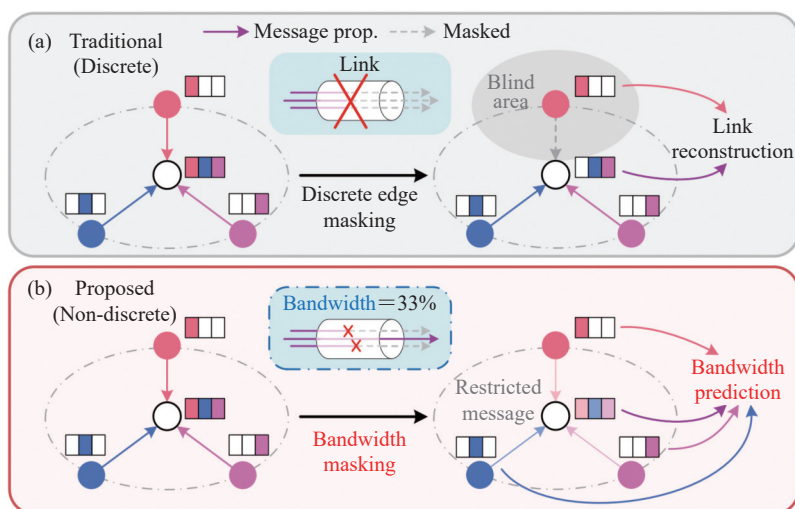
图 5 基于重要性掩码的设计框架

Fig. 5 Importance mask-based design framework

度。这有效提高了 Hi-GMAE 的学习效率，避免了随机掩码可能导致的信息丢失，在下游任务中展现出卓越性能。

**连续掩码：**对图中的边进行连续掩码<sup>[50]</sup>。与上述二元掩码方法不同，Zhao 等<sup>[50]</sup>提出了 Bandana，将编码器中的消息传播机制类比为电信网络中的节点传输。该方法在每个传播步骤中对传输中的消息量进行随机限制，并通过掩盖每条边的部分信息模拟带宽限制。与传统的二元掩码方式不同，Bandana 将掩码方式拓展为连续变量，并以预测权重为重建目标。由于不同邻居的重要性不同，因此 Bandana 根据邻居的重要性分配了不同权重。这一设计在保留完整图拓扑结构和保证信息流通的同时，显著提升了深度图神经网络的预训练效果，在多个数据集上表现优异。基于连续掩码的设计框架如图 6 所示。

**其他类掩码<sup>[51-52]</sup>：**除了同质图外，在超图领域，Kim 等<sup>[51]</sup>提出了 HypeBoy，进一步扩展了图掩码自编码器的应用范围。HypeBoy 的核心算法包括超边填充任务、增强节点特征学习和超边增强策略。在超边填充任务中，HypeBoy 通过恢复被遮盖的超边信息，学习节点和超边的深层次表示，不仅预测了节点间的关系，还捕捉了节点特征与超边特征间的内在联系。此外，Hypeboy 提出了基于增强的节点特征学习，并结合邻域信息与节点属性，进一步优化节点表示。对于 AUG-MAE 方法中提到的节点表示崩溃问题，

图 6 基于连续掩码的设计框架<sup>[50]</sup>Fig. 6 Continuous mask-based design framework<sup>[50]</sup>

Hypeboy 通过采用不同的投影头, 从对齐性和均匀性角度出发, 有效地缓解了该问题。该方法在多个超图基准数据集上展现出卓越性能, 同时计算复杂度较低, 能有效保留图的拓扑结构。在分子领域, Inae 等<sup>[52]</sup>提出了 MoAMa, 通过引入基团感知的属性掩码策略, 增强模型对分子图中长程依赖与基团间相互作用的学习能力。MoAMa 采用 BRICS 算法将分子图分解为不相交的基团, 并随机选择部分基团进行掩码, 将其所有节点的属性替换为特殊掩码标记。该算法促使模型学习跨基团特征传递机制, 同时强化基团内部的局部结构建模。此外, MoAMa 结合基于 Tanimoto 相似度的辅助损失函数, 通过对齐图的潜在表示, 提升模型泛化能力。实验结果表明, MoAMa 在多个分子分类与回归任务中优于现有预训练方法。

各类图掩码自编码器的比较如表 2 所示。

最后, 本文对图自回归模型、图自编码器、图掩码自编码器进行了一个系统梳理, 如图 7 所示。

## 6 常用数据集与评价指标

### 6.1 常用数据集

根据不同的应用场景将生成式图自监督学习

数据集分为引文网络、社交网络和分子网络等数据集, 如表 3 所示, 具体包括数据集的图数、节点数、边数、特征维度、类别和链接。

#### 6.1.1 引文网络数据集

(1) Cora 是一个文献引用网络数据集。其中, 节点表示学术论文, 边表示论文间的引用关系。每篇论文属于 7 个预定义类别之一, 节点属性信息由论文的词袋表示。

(2) CiteSeer 是一个学术引用网络数据集, 包含约 3 327 个节点和 4 732 条边。其中, 节点表示学术论文, 边表示引用关系。节点属性信息由词袋向量表示, 每篇论文根据主题划分到 6 个类别之一。

(3) ACM 是一个学术网络数据集, 包含大量与计算机科学相关的学术论文数据。其中, 节点表示学术论文, 边表示论文间的引用关系。节点属性信息通过词袋向量从论文的摘要中提取。该数据集中的节点被分类为不同领域, 如机器学习、信息检索和人工智能等。

(4) PubMed 是来自生物医学领域的文献引用网络数据集, 包含约 19 717 个节点和 44 338 条边。其中, 节点表示生物医学领域的论文, 边表示它们之间的引用关系。节点属性信息通过文

表 2 各类图掩码自编码器的比较

Table 2 The comparison of various mask graph autoencoders

方法	掩码目标	掩码方法	核心思想
GraphMAE <sup>[9]</sup>	节点	随机掩码	节点掩码且对嵌入再次掩码
MaskGAE <sup>[40]</sup>	有向边/无向边	随机掩码	把生成的嵌入分别输入结构解码器和度解码器进行重建
GiGaMAE <sup>[41]</sup>	节点和边	随机掩码	将图信息映射到同质的潜在空间中进行重构
SeeGera <sup>[42]</sup>	特征和边	随机掩码	利用节点嵌入的内积预测边的存在概率, 重建被掩码的图结构
HGMAE <sup>[43]</sup>	元路径和节点	基于重要性掩码	利用元路径掩码节点和位置特征预测策略
RMR <sup>[44]</sup>	边	随机掩码	将异质图分解为关系子图, 随机掩码目标节点
GraphMAE2 <sup>[45]</sup>	节点	随机掩码	基于 GraphMAE 进行多视角掩码, 用一个共享解码器解码
AUG-MAE <sup>[46]</sup>	节点	对抗掩码	使用对抗掩码和由易到难的训练策略
StructMAE <sup>[47]</sup>	节点	层次掩码	利用 PageRank 算法和自适应掩码进行处理
Hi-GMAE <sup>[49]</sup>	节点	层次掩码	设计了由粗粒度到细粒度的编码器和解码器, 进行逐步掩码解码
Bandana <sup>[50]</sup>	离散边	离散掩码	为 GNN 的每一层生成不同的掩码带宽, 计算所有重建损失的总和
HypeBoy <sup>[51]</sup>	边	随机掩码	采用超边填充任务、增强的节点特征学习和超边增广策略
MoAMa <sup>[52]</sup>	其他	基因感知的属性掩码	采用 BRICS 算法将分子图分解为不相交的基因, 并随机选择部分基因进行掩码
S2GAE <sup>[53]</sup>	边	随机掩码	把解码器每一层得到的嵌入分别进行掩码
UGMAE <sup>[54]</sup>	节点和边	基于重要性掩码	设计了基于引导的相似性模块, 以捕获高级语义知识(动量编码器)
GCMaE <sup>[55]</sup>	节点	随机掩码	联合图掩码自编码器和对比学习, 融合局部与全局信息
GMaE <sup>[56]</sup>	节点	随机掩码	采用掩码节点特征和非对称 Transformer 设计, 提升了 Transformer 在图任务上的表现
ProtoMGAE <sup>[57]</sup>	特征	随机掩码	通过节点特征掩码、对比学习和原型聚类一致性的联合优化, 从全局结构-簇结构-局部邻居多尺度学习

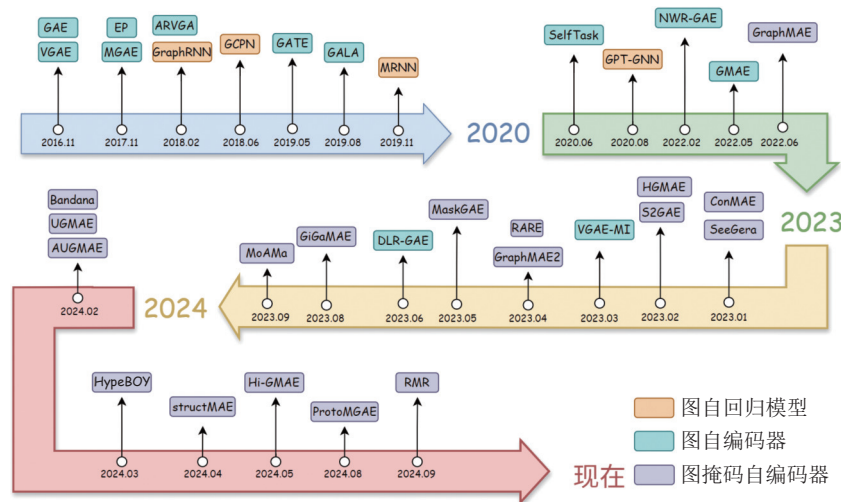


图 7 生成式图自监督学习的发展脉络

Fig. 7 Evolution of generative graph self-supervised learning

本分析的 TF-IDF 提取。所有节点被分为 3 个类别, 分别代表不同的生物医学研究领域。

(5) WikiCS 是来源于维基百科的引用网络数据集。其中, 节点表示维基百科页面, 边表示页

表 3 常用数据集及其介绍

Table 3 Commonly used datasets and descriptions

类型	数据集	图数	节点数	边数	特征维度	类别	链接
引文网络	Cora	1	2 708	5 429	1 433	7	<a href="https://github.com/kimiyoung/planetoid">https://github.com/kimiyoung/planetoid</a>
	CiteSeer	1	3 327	4 732	3 703	6	<a href="http://www.cs.umd.edu/~sen/lbc-proj/data/citeseer.tgz">http://www.cs.umd.edu/~sen/lbc-proj/data/citeseer.tgz</a>
	ACM	1	3 025	19 138	6 474	3	<a href="https://dl.acm.org/">https://dl.acm.org/</a>
	PubMed	1	19 717	44 338	500	3	<a href="https://opendatalab.com/OpenDataLab/Pubmed">https://opendatalab.com/OpenDataLab/Pubmed</a>
	WikiCS	1	11 701	216 123	300	10	<a href="https://github.com/pmernyei/wiki-cs-dataset">https://github.com/pmernyei/wiki-cs-dataset</a>
社交网络	Reddit	1	232 965	11 606 919	602	41	<a href="https://opendatalab.com/OpenDataLab/Reddit">https://opendatalab.com/OpenDataLab/Reddit</a>
	COLLAB	500	74.49	2 457.78		2	<a href="https://paperswithcode.com/dataset/collab">https://paperswithcode.com/dataset/collab</a>
	IMDB-B	1 000	19.77	96.53		2	<a href="https://opendatalab.org.cn/OpenDataLab/IMDB-BINARY">https://opendatalab.org.cn/OpenDataLab/IMDB-BINARY</a>
	IMDB-M	1 500	13.00	65.94		3	
	DBLP	1	4 894 081	45 564 149			<a href="https://modelscope.cn/datasets/OmniData/DBLP">https://modelscope.cn/datasets/OmniData/DBLP</a>
	BlogCatalog	1	5 196	171 743	8 189	39	<a href="https://opendatalab.com/OpenDataLab/BlogCatalog">https://opendatalab.com/OpenDataLab/BlogCatalog</a>
	CoauthorCS	1	18 333	81 894	6 805	15	<a href="https://kddcup2016.azurewebsites.net/">https://kddcup2016.azurewebsites.net/</a>
分子网络	MUTAG	188	17.93	19.79	7	2	<a href="https://opendatalab.com/OpenDataLab/MUTAG">https://opendatalab.com/OpenDataLab/MUTAG</a>
	PROTEINS	1 113	39.06	72.82	4	2	<a href="https://opendatalab.com/OpenDataLab/PROTEINS/">https://opendatalab.com/OpenDataLab/PROTEINS/</a>
	D&D	1 178	284.32	715.66	82	2	<a href="https://github.com/gusye1234/LightGCN-PyTorch/tree/master/data/yelp2018">https://github.com/gusye1234/LightGCN-PyTorch/tree/master/data/yelp2018</a>
	PTC	344	25.5		19	2	
	NCI-1	4 110	29.87	32.30	37	2	<a href="https://github.com/TrustAGI-Lab/graph_datasets">https://github.com/TrustAGI-Lab/graph_datasets</a>

面间的链接引用关系。节点的属性信息通过页面文本特征提取生成, 类别表示页面的主题分类, 如社会科学、历史等。该数据集被广泛用于图表示学习任务, 特别是在节点分类、社区发现等下游任务中, 具有重要参考价值。

### 6.1.2 社交网络数据集

(1) **Reddit** 是一个社交网络数据集, 包含用户间的互动和内容参与信息。该数据集由 **Reddit** 平台上的用户及其评论、投票和帖子等社交活动构成。其中, 节点表示用户, 边表示用户间的互动关系或共同参与的内容。用户的属性信息通常包括他们的活动历史、关注的主题和参与的讨论等。每个用户根据其活动偏好和参与的主题被分为不同的类别, 如技术、娱乐和健康等。

(2) **COLLAB** 是一个学术合作网络数据集, 包含科研人员间的合作信息。该数据集由科学家及其合作论文构成。其中, 节点表示科研人员,

边表示科研人员间的合作关系 (共著论文)。此外, 作者的属性信息通常包括其研究领域和学术贡献等。每个作者根据其研究方向被分为不同的类别, 如物理学、化学和计算机科学等。

(3) **IMDB-B** 是电影行业中的一个合作网络数据集, 包含演员间的共演关系。该数据集由电影中的演员及其合作关系构成。其中, 节点表示演员, 边表示演员间的共演关系。演员的属性信息通常基于其出演的电影和角色类型等。每个演员根据其出演的电影类型或行业角色被分为不同的类别, 如动作片演员和喜剧片演员等。

(4) **IMDB-M** 是一个多模态电影合作网络数据集, 涵盖电影、演员和导演等多类实体, 包含丰富的信息。该数据集由电影及其相关演员和导演等构成。其中, 节点表示电影和人员 (如演员和导演), 边表示这些节点间的合作关系。节点的属性信息包括电影的类别、导演和演员的历史

等。每个电影或演员根据其类型或领域被分为不同的类别，如动作电影和科幻电影等。

(5) DBLP 是计算机科学领域的一个学术文献网络数据集，包含作者与论文的关联信息。该数据集由计算机科学领域的研究人员及其合作关系构成。其中，节点表示作者，边表示他们之间的合作关系(共著关系)。此外，作者的属性信息通常从其发表论文的文本中提取。每个作者根据其研究方向分为不同的类别，如数据库、计算机视觉和机器学习等。

(6) BlogCatalog 是一个社交网络数据集，包含博客作者之间的关注和互动信息。该数据集由博客作者及其关注关系构成。其中，节点表示博客作者，边表示博客作者间的关注关系。博客作者的属性信息通常包括其博客内容和兴趣领域等。每个博客作者根据其博客主题或兴趣分为不同的类别，如技术博客、旅行博客和生活方式博客等。

(7) CoauthorCS 是一个基于学术合作关系的计算机科学领域数据集，主要包含计算机科学领域的作者及其合作信息。其中，节点表示计算机科学领域的研究人员，边表示两位作者在同一篇论文中的共著关系。节点的属性信息来源于作者发表论文的文本特征，每个作者被归类为不同的计算机科学研究方向，以便用于节点分类和关系预测等任务。

### 6.1.3 分子网络数据集

(1) MUTAG 是一个分子图数据集，包含 188 个化学分子，每个分子代表一个图。其中，节点表示原子，边表示化学键。每个分子都有一个二进制标签，表示它是否具有某种特定的毒性(主要是对大肠杆菌的毒性)。该数据集用于研究图神经网络在分子毒性预测中的应用，尤其是二分类任务。

(2) PROTEINS 是一个来自生物学的蛋白质分子图数据集，共有 1 113 个蛋白质分子。每个分子表示为一个图。其中，节点表示氨基酸残

基，边表示氨基酸间的相互作用。每个蛋白质分子被标注为酶类蛋白或非酶类蛋白，构成一个二分类任务。这个数据集不仅用于图分类任务，还广泛应用于生物信息学中的蛋白质功能预测和分子性质预测。

(3) D&D 是一个用于药物设计的化学分子图数据集。该数据集包含 1 178 个分子图，每个分子图由节点(表示原子)和边(表示化学键)构成。每个分子具有一个二进制标签，表示是否具有某种特定的药理学属性，如是否能抑制某种酶或与某种蛋白质结合。D&D 数据集主要用于药物发现领域的图分类任务，通过学习分子的结构和功能，帮助筛选和设计药物。

(4) PTC 是一个包含 344 个化学分子的毒性预测数据集。每个分子是一个图。其中，节点表示原子，边表示化学键。每个分子有一个二元标签，表示它是否具有突变性(即是否会引起 DNA 突变)。该数据集用于图分类任务，研究者利用图神经网络等技术进行毒性预测，尤其是分子是否会引起生物系统发生癌变或突变等。

## 6.2 评价指标

本文给出了量化方法在某些任务上的能力，即评价指标，具体如下：

(1) 分类准确率  $ACC^{[58]}$  用来衡量正确分类的样本占所有样本的比例，表示如下：

$$ACC = \frac{P_{\text{correct}}}{N_{\text{total}}} \quad (3)$$

其中， $P_{\text{correct}}$  为预测正确的节点数， $N_{\text{total}}$  为总节点数。

(2)  $F_1^{[59]}$  为精确率  $P$  和召回率  $R$  的调和平均，用于衡量方法在分类任务中性能，表示如下：

$$F_1 = 2 \cdot \frac{P \cdot R}{P + R} \quad (4)$$

其中，精确率  $P$  和召回率  $R$  定义如下：

$$P = \frac{TP}{TP + FP} \quad (5)$$

$$R = \frac{TP}{TP + FN} \quad (6)$$

其中, TP 为真正例数, 指方法预测为正类的样本中, 确实是正类的数量; FN 为假负例数, 指实际是正类, 但被方法错误预测为负类的样本数量; FP 为假正例数, 指实际是负类, 但被方法错误预测为正类的样本数量。

(3) AUC<sup>[58]</sup>用于链接预测和图分类任务中, 衡量方法区分正负边或图的能力, 表示如下:

$$AUC = \frac{r_{\text{pos}} - \frac{r_{\text{neg}}}{2}}{N_{\text{pos}} \times N_{\text{neg}}} \quad (7)$$

其中, 正边排名  $r_{\text{pos}}$  为真实存在的边在某方法预测排序中的位置; 负边排名  $r_{\text{neg}}$  为所有不存在的边在排序中的位置; 正边对数  $N_{\text{pos}}$  为所有正边的数量; 负边对数  $N_{\text{neg}}$  为所有负边的数量。

## 7 总结与展望

本文对生成式图自监督学习进行了分类, 并对各类别下的方法进行了比较和分析。总体而言, 在数据稀缺或标签信息不完整的情况下, 生成式图自监督学习利用图自身信息, 通过设计预测任务或结构/特征重构任务生成监督信号, 进而在结构和特征上生成与原始图数据相似的新图, 展现出了显著优势。

最后, 本文给出了生成式图自监督学习的发展时间线, 期望帮助读者更直观地理解该领域的研究脉络和关键进展。从图自回归模型到图自编码器, 再到近年来迅速发展的图掩码自编码器, 本文梳理展示了这一研究方向的演变轨迹和不同方法间的联系。随着信息时代的进步, 生成式方法的准确性和多样性受到更多关注, 同样也面临着新的挑战。生成式图自监督学习的未来研究方向如下。

(1) 更高效的生成式框架设计: 当前的生成式图自监督学习在大规模数据上的效率仍然存在

瓶颈, 如何设计轻量级、高效的生成式框架成为一个重要方向。基于蒸馏技术和课程学习等方法降低计算成本是一个值得探索的方向。

(2) 多模态融合与生成: 未来, 生成式图自监督学习可能结合多模态信息进行表示学习, 通过整合图、文本和图像等多种模态的信息来源, 可以生成更多样化和复杂的图结构。例如, 在推荐系统和社交网络分析等领域, 多模态生成能提供更全面的用户和关系表示。

(3) 评估体系的完善: 目前, 生成式图自监督学习的评估仍然缺乏统一的标准, 重构图的质量往往依赖下游任务的表现进行间接评估。如何构建一套全面且通用的评估体系, 包括多样性、准确性、稳定性和应用相关性等多个维度, 是一个具有挑战性的研究方向。

(4) 增强方法的可解释性与鲁棒性: 随着方法复杂度的提高, 用户对方法可解释性的需求也在增加。未来研究可以探索如何使生成方法的内部机制更透明, 同时提升其在数据噪声、偏差和攻击下的鲁棒性, 这对实际应用中方法的可信性和安全性尤其重要。

## 参考文献

- [1] 胡胜利, 王柳. 融合社交关系和时序特征的图神经网络推荐模型 [J]. 厦门理工学院学报, 2024, 32(5): 51-59.  
Hu SL, Wang L. A graph neural network recommendation model of fusing social relationship and temporal features [J]. Journal of Xiamen University of Technology, 2024, 32(5): 51-59.
- [2] 谢幼如, 陆怡, 彭志扬, 等. 知识图谱赋能高校课程“教-学-评”一体化的探究 [J]. 中国电化教育, 2024, (12): 1-7.  
Xie YR, Lu Y, Peng ZY, et al. Inquiry on the integration of “teaching-learning-evaluating” of college courses empowered by knowledge graph [J]. China Educational Technology, 2024, (12): 1-7.

- [3] 郭文博, 龙伟, 蒋林华, 等. 基于图神经网络的药物相互作用预测方法研究综述 [J]. 现代计算机, 2024, 30(20): 36-40.  
Guo WB, Long W, Jiang LH, et al. A review of prediction methods of drug interaction based on graph neural network [J]. SmartTech Innovations, 2024, 30(20): 36-40.
- [4] 户佐安, 邓锦程, 韩金丽, 等. 图神经网络在交通预测中的应用综述 [J]. 交通运输工程学报, 2023, 23(5): 39-61.  
Hu ZA, Deng JC, Han JL, et al. Review on application of graph neural network in traffic prediction [J]. Journal of Traffic and Transportation Engineering, 2023, 23(5): 39-61.
- [5] Ju W, Fang Z, Gu YY, et al. A comprehensive survey on deep graph representation learning [J]. Neural Networks, 2024, 173: 106207.
- [6] Wu LR, Lin HT, Tan C, et al. Self-supervised learning on graphs: contrastive, generative, or predictive [J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2021, 35(4): 4216-4235.
- [7] Liu X, Zhang FJ, Hou ZY, et al. Self-supervised learning: generative or contrastive [J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2021, 35(1): 857-876.
- [8] 阳帆, 魏宪, 郭杰龙, 等. 基于生成式自监督学习的对抗样本分类算法 [J]. 微电子学与计算机, 2024, 41(2): 11-18.  
Yang F, Wei X, Guo JL, et al. Adversarial example classification algorithm based on generative self-supervised learning [J]. Microelectronics & Computer, 2024, 41(2): 11-18.
- [9] Hou ZY, Liu X, Cen YK, et al. GraphMAE: self-supervised masked graph autoencoders [C] // Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2022: 594-604.
- [10] Jiang B, Zhang ZY, Lin DD, et al. Semi-supervised learning with graph learning-convolutional networks [C] // Proceedings of the 2019 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2019: 11313-11320.
- [11] 朱志国, 李伟玥, 姜盼, 等. 图神经网络会话推荐系统综述 [J]. 计算机工程与应用, 2023, 59(5): 55-69.  
Zhu ZG, Li WY, Jiang P, et al. Survey of graph neural networks in session recommender systems [J]. Computer Engineering and Applications, 2023, 59(5): 55-69.
- [12] 冯兴杰, 生晓宇. 基于图神经网络与深度学习的商品推荐算法 [J]. 计算机应用研究, 2021, 38(12): 3617-3622.  
Feng XJ, Sheng XY. Item recommendation algorithm based on GNN and deep learning [J]. Application Research of Computers, 2021, 38(12): 3617-3622.
- [13] Kong XN, Yu PS, Ding Y, et al. Meta path-based collective classification in heterogeneous information networks [C] // Proceedings of the 21st ACM International Conference on Information and Knowledge Management, 2012: 1567-1571.
- [14] Sun YZ, Norick B, Han JW, et al. PathSelClus: integrating meta-path selection with user-guided object clustering in heterogeneous information networks [J]. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data, 2013, 7(3): 1-23.
- [15] Cao BK, Kong XN, Yu PS. Collective prediction of multiple types of links in heterogeneous information networks [C] // Proceedings of the 2014 IEEE International Conference on Data Mining, 2014: 50-59.
- [16] Jaiswal A, Babu AR, Zadeh MZ, et al. A survey on contrastive self-supervised learning [J]. Technologies, 2020, 9(1): 2.
- [17] 赵树阳, 李建武. 基于生成对抗网络的低秩图像生成方法 [J]. 自动化学报, 2018, 44(5): 829-839.  
Zhao SY, Li JW. Generative adversarial network for generating low-rank images [J]. Acta Automatica Sinica, 2018, 44(5): 829-839.
- [18] 李雪晴, 王石, 王朱君, 等. 自然语言生成综述 [J]. 计算机应用, 2021, 41(5): 1227-1235.  
Li XQ, Wang S, Wang ZJ, et al. Summarization of natural language generation [J]. Journal of Computer Applications, 2021, 41(5): 1227-1235.

- [19] Kipf TN, Welling M. Variational graph auto-encoders [C] // Proceedings of the Neural Information Processing Systems Workshop on Bayesian Deep Learning, 2016.
- [20] Wang DX, Cui P, Zhu WW. Structural deep network embedding [C] // Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2016: 1225-1234.
- [21] Tzeng RC, Wu SH. Distributed, egocentric representations of graphs for detecting critical structures [C] // Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning, 2019: 6354-6362.
- [22] van den Oord A, Kalchbrenner N, Kavukcuoglu K. Pixel recurrent neural networks [C] // Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning, 2016: 1747-1756.
- [23] You JX, Ying R, Ren X, et al. GraphRNN: generating realistic graphs with deep auto-regressive models [C] // Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning, 2018: 5708-5717.
- [24] Popova M, Shvets M, Oliva J, et al. Molecular-RNN: generating realistic molecular graphs with optimized properties [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 1905.13372, 2019.
- [25] You JX, Liu BW, Ying Z, et al. Graph convolutional policy network for goal-directed molecular graph generation [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2018, 31: 6412-6422.
- [26] Hu ZN, Dong YX, Wang KS, et al. GPT-GNN: generative pre-training of graph neural networks [C] // Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2020: 1857-1867.
- [27] Li DJ, Li D, Lian G. Variational graph autoencoder with adversarial mutual information learning for network representation learning [J]. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data*, 2023, 17(3): 1-18.
- [28] Garcia-Duran A, Niepert M. Learning graph representations with embedding propagation [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017: 5119-5130.
- [29] Pan SR, Hu RQ, Long GD, et al. Adversarially regularized graph autoencoder for graph embedding [C] // Proceedings of the 27th International Joint Conference on Artificial Intelligence, 2018: 2609-2615.
- [30] Wang C, Pan SR, Long GD, et al. MGAE: marginalized graph autoencoder for graph clustering [C] // Proceedings of the 2017 ACM on Conference on Information and Knowledge Management, 2017: 889-898.
- [31] Park J, Lee M, Chang HJ, et al. Symmetric graph convolutional autoencoder for unsupervised graph representation learning [C] // Proceedings of the 2019 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision, 2019: 6519-6528.
- [32] Salehi A, Davulcu H. Graph attention auto-encoders [C] // Proceedings of the 2020 IEEE 32nd International Conference on Tools with Artificial Intelligence, 2020: 989-996.
- [33] Chen ZL, Wu ZH, Wang SP, et al. Dual low-rank graph autoencoder for semantic and topological networks [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2023: 4191-4198.
- [34] Tang MY, Yang C, Li P. Graph auto-encoder via neighborhood wasserstein reconstruction [C] // Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2022: 25-29.
- [35] Velickovic P, Fedus W, Hamilton WL, et al. Deep graph infomax [C] // Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2019: 1-17.
- [36] Hassani K, Khasahmadi AH. Contrastive multi-view representation learning on graphs [C] // Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning, 2020: 4116-4126.
- [37] Jin W, Derr T, Liu HC, et al. Self-supervised learning on graphs: deep insights and new direction [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2006.10141, 2020.
- [38] Tu WX, Liao Q, Zhou SH, et al. RARE: robust masked graph autoencoder [J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2024, 36(10):

- 5340-5353.
- [39] Zhang S, Liu Y, Sun Y, et al. Graph-less neural networks: teaching old MLPs new tricks via distillation [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2110.08727, 2021.
- [40] Li JT, Wu RF, Sun WB, et al. What's behind the mask: understanding masked graph modeling for graph autoencoders [C] // Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2023: 1268-1279.
- [41] Shi YC, Dong YS, Tan QY, et al. GiGaMAE: generalizable graph masked autoencoder via collaborative latent space reconstruction [C] // Proceedings of the 32nd ACM International Conference on Information and Knowledge Management, 2023: 2259-2269.
- [42] Li X, Ye TD, Shan CH, et al. SeeGera: self-supervised semi-implicit graph variational auto-encoders with masking [C] // Proceedings of the ACM Web Conference 2023, 2023: 143-153.
- [43] Tian YJ, Dong KW, Zhang CH, et al. Heterogeneous graph masked autoencoders [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2023: 9997-10005.
- [44] Duan HR, Xie CC, Li LY. Reserving-masking-reconstruction model for self-supervised heterogeneous graph representation [C] // Proceedings of the 30th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2024: 689-700.
- [45] Hou ZY, He YF, Cen YK, et al. GraphMAE2: a decoding-enhanced masked self-supervised graph learner [C] // Proceedings of the ACM Web Conference 2023, 2023: 737-746.
- [46] Wang L, Tao X, Liu Q, et al. Rethinking graph masked autoencoders through alignment and uniformity [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2024: 15528-15536.
- [47] Liu C, Wang YY, Zhan YB, et al. Where to mask: structure-guided masking for graph masked autoencoders [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2404.15806, 2024.
- [48] Franceschet M. PageRank: standing on the shoulders of giants [J]. *Communications of the ACM*, 2011, 54(6): 92-101.
- [49] Liu C, Yao ZL, Zhan YB, et al. Hi-GMAE: hierarchical graph masked autoencoders [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2405.10642, 2024.
- [50] Zhao ZW, Li YH, Zou YX, et al. Masked graph autoencoder with non-discrete bandwidths [C] // Proceedings of the ACM on Web Conference 2024, 2024: 377-388.
- [51] Kim S, Kang S, Bu FC, et al. HypeBoy: generative self-supervised representation learning on hypergraphs [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2404.00638, 2024.
- [52] Inae E, Liu G, Jiang M. Motif-aware attribute masking for molecular graph pre-training [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2309.04589, 2023.
- [53] Tan QY, Liu NH, Huang X, et al. S2GAE: self-supervised graph autoencoders are generalizable learners with graph masking [C] // Proceedings of the Sixteenth ACM International Conference on Web Search and Data Mining, 2023: 787-795.
- [54] Tian YJ, Zhang CX, Kou ZY, et al. UGMAE: a unified framework for graph masked autoencoders [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2402.08023, 2024.
- [55] Wang YX, Yan X, Hu C, et al. Generative and contrastive paradigms are complementary for graph self-supervised learning [C] // Proceedings of the 2024 IEEE 40th International Conference on Data Engineering, 2024: 3364-3378.
- [56] Zhang SX, Chen HX, Yang HR, et al. Graph masked autoencoders with Transformers [Z/OL]. arXiv Preprint, arXiv: 2202.08391, 2022.
- [57] Zheng Y, Jia C. ProtoMGAE: prototype-aware masked graph auto-encoder for graph representation learning [J]. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data*, 2024, 18(6): 1-22.
- [58] Wu SW, Sun F, Zhang WT, et al. Graph neural networks in recommender systems: a survey [J]. *ACM Computing Surveys*, 2022, 55(5): 1-37.
- [59] Zhang S, Tong HH, Xu JJ, et al. Graph convolutional networks: a comprehensive review [J]. *Computational Social Networks*, 2019, 6(1): 1-23.