

内 容 提 要

本书致力于介绍图神经网络的基本概念和算法、研究前沿以及广泛和新兴的应用，涵盖图神经网络的广泛主题，从基础到前沿，从方法到应用，涉及从方法论到应用场景方方面面的内容。全书分为四部分：第一部分介绍图神经网络的基本概念；第二部分讨论图神经网络成熟的方法；第三部分介绍图神经网络典型的前沿领域；第四部分描述可能对图神经网络未来研究比较重要和有前途的方法与应用的进展情况。

本书适合高年级本科生和研究生、博士后研究人员、讲师以及行业从业者阅读与参考。

推荐语（按姓氏拼音排序）

图神经网络是对深度学习的重要拓展和延伸。本书由知名学者编著，全面、系统地介绍了该领域的基础问题、前沿算法和应用场景。编者对章节之间的逻辑关系给出了清晰的梳理和导读，对初入该领域和具有一定基础的读者均具有重要的学习和参考价值。

——陈恩红

中国科学技术大学大数据学院执行院长

图神经网络是当前 AI 领域的重要前沿方向之一，在学术界和工业界都得到广泛的关注和应用。本书由相关领域的知名专家编撰而成，系统性地总结了图神经网络领域的关键技术，内容涵盖了图神经网络的基础方法和前沿应用。2021 年英文书出版时我就关注到这本书，现在很高兴看到中文版即将出版。对于国内研究和应用图神经网络的专业人士和初学者来说，本书是一本不可多得的参考书。

——崔斌

北京大学教授

图神经网络是机器学习非常热门的领域之一。本书是非常好的学习资源，内容涵盖图表征学习的广泛主题和应用。

——Jure Leskovec

斯坦福大学副教授

图神经网络已经成为图数据分析处理的基本工具。本书全面介绍了图神经网络的基础和研究前沿，可作为有关科研人员、开发者和师生的重要参考书。

——李飞飞

阿里巴巴集团副总裁，IEEE 会员

图神经网络作为一种新兴技术，近年来受到学术界和工业界的广泛关注。本书由工作在此领域前沿的杰出学者编撰，内容涵盖了图神经网络的基础概念、经典技术、应用领域以及与产业结合的进展。受益于作者在该领域的深厚积累，本书为图神经网络研究人员提供了全局视角，既适合对此领域感兴趣的初学者，其模块化的结构也适合对该领域有一定积累的学者针对某一内容进行深入研究。

——林学民

上海交通大学讲席教授，欧洲科学院院士，IEEE 会员，AAIA 会员

图神经网络是一个快速发展的领域。本书涉及图神经网络的概念、基础和应用，非常适合对此领域感兴趣的读者阅读。

——刘欢

亚利桑那州立大学教授，ACM 会员，IEEE 会员

图神经网络把深度学习和图结构融合起来，是机器学习领域过去几年重要的理论发展之一，在金融科技、搜索推荐、生物医药等领域有着广泛和重要的应用。本书由该领域的知名专家编撰，是研究人员、学生和业界实践者学习图神经网络的一本参考图书。

——漆远

复旦大学浩清教授、博导，AI³研究院院长，前阿里巴巴副总裁及蚂蚁集团首席 AI 科学家

图机器学习是当前机器学习领域热门的研究方向之一。本书针对图神经网络的基础、发展、前沿以及应用进行全面且细致的介绍，是图神经网络领域值得深入学习的佳作。

——陶大程

京东探索研究院院长，京东集团高级副总裁，澳大利亚科学院院士

图神经网络是一种新兴的机器学习模型，已在科学和工业界掀起风暴。现在正是加入这一行动的时机——这本书无论对新人还是经验丰富的从业者都是很好的资源！书中的内容由这一领域的专家团队精心撰写而成。

——Petar Veličković

DeepMind 高级研究科学家

图神经网络是一类基于深度学习的处理图结构数据的方法，在推荐系统、计算机视觉、生物制药等众多科学领域展现出了卓越的性能。本书由该领域的知名学者倾力打造，从图神经网络的理论基础出发，着重介绍了图神经网络的研究前沿和新兴应用。图神经网络方兴未艾，本书内容厚重，是从事该领域研究的科研人员和学生不可多得的参考书。

——文继荣

中国人民大学教授，信息学院院长，高瓴人工智能学院执行院长

图神经网络是一个具有巨大潜力的研究方向，近年来受到广泛关注。本书作者都是该领域的知名学者，具有学术界和工业界的丰富实践经验。他们通过这本书从概念、算法到应用全面地介绍了图神经网络的相关技术。强烈推荐对这个领域感兴趣的学生、工程师与研究人员阅读！

——谢幸

微软亚洲研究院首席研究员，CCF 会士，IEEE 会员

图深度学习近年来已经被广泛应用到很多人工智能的研究领域，并取得了空前的成功。本书全面总结了图神经网络的算法和理论基础，广泛介绍了各种图神经网络的前沿研究方向，并精选了 10 个图神经网络广泛应用的行业。这是一本经典的深度学习教科书！

——熊辉

香港科技大学（广州）讲座教授，AAAS 会员，IEEE 会员

图神经网络是机器学习、数据科学、数据挖掘领域新兴的发展方向。本书作者都是这个领域的知名科学家，他们全面探讨了图神经网络权威和最新的理论基础、算法设计和实践案例。这是一本不可多得的好书，我强烈推荐！

——杨强

香港科技大学讲座教授，AAAI、ACM 等学会会员，加拿大皇家科学院、加拿大工程院院士

深度学习时代，图计算与神经网络天然地结合到一起。图神经网络为人工智能的发展注入了新动力，同时也成为热门的领域之一，在工业界得到广泛应用。本书对图神经网络的基础、前沿技术以及应用做了全面讲解，是图神经网络的研究者以及实践者不可多得的参考资料。

——叶杰平

密歇根大学终身教授，IEEE 会员

本书全面、详细地介绍了图神经网络，为在大型图数据上更深一步研究及探寻快而准的方法提供了不可缺少的基础和方向。

——于旭 (Jeffrey Xu Yu)

香港中文大学教授

本书是当前介绍图神经网络方面非常全面的书籍之一，由该领域的知名学者编撰，是不可多得的参考和学习资料。

——俞士纶

伊利诺伊大学芝加哥分校讲席教授，ACM 会员，IEEE 会员

本书由领域专家团队编撰，对图神经网络的基础理论进行了详细介绍，对不同主题进行了广泛覆盖。通过本书，读者可以一览图神经网络全貌、快速开展前沿研究或将之落地于实际应用。

——张成奇

悉尼科技大学副校长，人工智能杰出教授

推荐序

图神经网络（Graph Neural Network, GNN）是近年来在传统深层神经网络基础上发展起来的一个新领域，也可以称之为图上的深度学习。20 世纪末，基于传统人工神经网络的深度学习迅猛发展，深刻影响了各个学科，并促使基于数据驱动的第二代人工智能的崛起。尽管深度学习在处理大数据上表现出许多优势，但它仅能有效地处理欧氏空间的数据（如图像）和时序结构的数据（如文本），应用范围很有限。一方面，大量的实际问题，如社交网络、生物网络和推荐系统等都不满足欧氏空间或时序结构的条件，需要用更一般的图结构加以表示。另一方面，虽然深度学习可以处理图像、语音和文本等，并取得了不错的效果，但这些媒体均属分层递阶（hierarchical）结构，无论是欧氏空间还是时序结构都难给予充分的描述。以图像为例，在像素级上图像可以看成是一个欧氏空间，但在其他视觉单元上，如局部区块、部件和物体等层次上并不满足欧氏空间的条件，如缺乏传递性或（和）对称性等。单纯的欧氏空间表示无法利用这些非欧氏空间的结构信息，因此也需要进一步考虑和探索图的表示形式。其他像语音与文本等时序结构的数据的处理也存在类似问题。综上所述，由于“图”（包括有环与无环、有向与无向等）具有丰富的结构，图神经网络将图论和深度学习紧密地融合在一起，充分利用结构信息，有望克服传统深度神经网络学习带来的局限性。可见，探索与发展图神经网络是必然的趋势，这也是它成为近年来在机器学习中发展最快和影响最深的研究领域的一个原因。

《图神经网络：基础、前沿与应用》一书系统地介绍了图神经网络的各个方面，从基础理论到前沿问题，从模型算法到实际应用。全书分四部分，共 27 章。

第一部分 引言：机器学习的效率不仅取决于算法，还取决于数据在特征空间中的表示方法。好的表示方法应该由数据中提取的最少和最有效的特征组成，并能通过机器学习自动获取，这就是所谓的“表示学习”（也称表征学习）。图表征学习的目标除给图中的节点指派一个低维的向量表征以外，还要求尽量保留图的结构，这是它和传统深度学习中的表征学习的重大差别。这一部分系统介绍了基于深度学习的表征学习与图表征学习的各种方法，其中包括传统和现代的图表征学习以及图神经网络等。

第二部分 基础：这一部分系统讨论了以下几个重要的基础问题。由于图神经网络本质上是深度学习在图中的应用，因此不可避免地具有深度学习带来的许多根本性缺陷，即在表达能力、可扩展性、可解释性和对抗鲁棒性等方面存在的缺陷。不过由于图神经网络与传统神经网络处理的对象有很大的不同，因此面临的挑战也有很大的区别，许多问题需要重新思考和研究。以表达能力为例，在传统神经网络中，我们已经证明前向神经网络可以近似任何感兴趣的函数，但这个结论不适用于图神经网络，因为我们通常假设传统神经网络（深度学习）所处理的数据具有空间或者时间的位移不变性。图神经网络所处理的数据更为复杂，不满足空间或时间的位移不变性，仅具有排列的不变性，即处理的结果与图中节点的处理顺序无关，因此图神经网络的表达能力需要重新定义与探索。尽管可扩展性、可解释性和对抗鲁棒性等同时存在于深度学习和图神经网络之中，但由于图神经网络中具有更复杂的结构信息，因此可扩展性、可解释性和对抗鲁棒性等问题变得更为复杂和困难。

不过与此同时，由于有更多的结构信息可以利用，解决图神经网络中的这些问题则有更多可供选择的手段，因此有可能解决得更好。总之，图神经网络给我们带来挑战的同时也带来更多的机遇。

第三部分 前沿：这一部分系统介绍了图分类、链接预测、图生成、图转换、图匹配、图结构学习、动态图神经网络、异质图神经网络、自动机器学习和自监督学习中模型和算法的发展现状、存在的问题以及未来发展的方向。

第四部分 广泛和新兴的应用：这一部分讨论图神经网络在现代推荐系统、计算机视觉、自然语言处理、程序分析、软件挖掘、药物开发中生物医学知识图谱挖掘、蛋白质功能和相互作用的预测以及异常检测和智慧城市中的应用。这一部分包括应用图神经网络的方法、已达到的效果、存在的问题以及未来的发展方向等。

这是一本内容丰富、全面和深入介绍图神经网络的书籍，对于所有需要了解这个领域或掌握这种方法与工具的科学家的、工程师和学生都是一部很好的参考书。对人工智能来说，图神经网络有可能是将概率学习与符号推理结合起来的一种工具，有可能成为将数据驱动与知识驱动结合起来的一座桥梁，有望推动第三代人工智能的顺利发展。

张钹

清华大学教授，中国科学院院士

前言

近年来，图神经网络（GNN）取得了快速、令人难以置信的进展。图神经网络又称为图深度学习、图表征学习（图表示学习）或几何深度学习，是机器学习特别是深度学习领域增长最快的研究课题。图论和深度学习交叉领域的这波研究浪潮也影响了其他科学领域，包括推荐系统、计算机视觉、自然语言处理、归纳逻辑编程、程序合成、软件挖掘、自动规划、网络安全和智能交通等。

尽管图神经网络已经取得令人瞩目的成就，但我们在将其应用于其他领域时仍面临着许多挑战，包括从方法的理论理解到实际系统中的可扩展性和可解释性，从方法的合理性到应用中的经验表现，等等。然而，随着图神经网络的快速发展，要获得图神经网络发展的全局视角是非常具有挑战性的。因此，我们感到迫切需要弥合上述差距，并就这一快速增长但具有挑战性的主题编写一本全面的书，这可以使广大读者受益，包括高年级本科生和研究生、博士后研究人员、讲师及相关的从业人员。

本书涵盖图神经网络的广泛主题，从基础到前沿，从方法到应用，涉及从方法论到应用场景方方面面的内容。我们致力于介绍图神经网络的基本概念和算法、研究前沿以及广泛和新兴的应用。

在线资源

如果读者希望进一步获得关于本书的相关资源，请访问网站 <https://graph-neural-networks.github.io>。该网站提供本书的中英文预览版、讲座信息以及勘误等，此外还提供与图神经网络有关的公开可用的材料和资源引用。

写给教师的建议

本书可作为低年级研究生课程的教辅或参考资料。虽然本书主要是为具有计算机科学背景的学生编写的，但是也适合对概率、统计、图论、线性代数和机器学习技术（如深度学习）有基本了解的学生参考。如果学生已经掌握本书某些章节的知识，那么在教学的过程中可以跳过这些章节或作为家庭作业帮助他们复习。例如，如果学生已经学过深度学习课程，那么可以跳过第 1 章。教师也可以选择将第 1 章～第 3 章合并到一起，作为背景介绍课程的内容。

如果课程更注重图神经网络的基础和理论，那么可以选择重点介绍第 4 章～第 8 章，第 19 章～第 27 章可用于展示应用、动机和限制。关于第 4 章～第 8 章和第 19 章～第 27 章如何相互关联，请参考每章末尾的编者注。如果课程更注重研究前沿，那么可以将第 9 章～第 18 章作为组织课程的支点。例如，教师可以将本书用于高年级研究生课程，要求学生搜索并介绍每个不同研究前沿的最新研究论文，还可以要求他们根据第 19 章～第 27 章描述的应用以及我们提供的材料建立他们自己的课程项目。

写给读者的建议

本书旨在涵盖图神经网络领域的广泛主题，包括背景、理论基础、方法论、研究前沿和应用等。因此，本书可作为一本综合性的手册，供学生、研究人员和专业人士等读者使用。在阅读之前，您应该对与统计学、机器学习和图论相关的概念和术语有一定了解。我们在第 1 章～第 8 章提供并引用了一些基础知识的背景。您最好也有深度学习相关的知识和一些编程经验，以便轻松阅读本书的大部分章节。尤其是，您应该能够阅读伪代码并理解图结构。

本书内容是模块化的，对于每一章，您都可以根据自己的兴趣和需要有选择性地学习。对于那些想要深入了解图神经网络的各种技术和理论的读者，可以选择从第 4 章～第 8 章开始阅读；对于那些想进一步深入研究和推进相关领域的读者，请阅读第 9 章～第 18 章中感兴趣的内容，这些章提供了关于最新研究问题、开放问题和研究前沿的全面知识；对于那些想使用图神经网络来造福特定领域的读者，或者想寻找有趣的应用以验证特定的图神经网络技术的读者，请阅读第 19 章～第 27 章。

致谢

在过去的几年里，许多有天赋的研究人员进入图机器学习领域并做出开创性贡献。我们非常幸运能够讨论这些挑战和机遇，并经常与他们中的许多人在这一激动人心的领域就丰富多样的研究课题进行合作。我们非常感谢来自京东、IBM 研究院、清华大学、西蒙弗雷泽大学、埃默里大学和其他地方的这些合作者或同事，他们鼓励我们创作这样一本全面涵盖图神经网络各种主题的书，以指导感兴趣的初学者，并促进这一领域的学术研究人员和从业人员进步。

如果没有许多人的贡献，这本书是不可能完成的。我们要感谢那些为检查全书数学符号的一致性以及为本书的编著提供反馈的人。他们是来自埃默里大学的凌辰和王诗雨，以及来自清华大学的何玥、张子威和刘昊昕。我们要特别感谢来自 IBM Thomas J. Watson Research Center 的郭晓洁博士，她慷慨地为我们提供了帮助，并对许多章节提供了非常有价值的反馈。

我们也要感谢那些允许我们转载他们出版物中的图片、数字或数据的人。

最后，我们要感谢我们的家人，在我们编撰这本书的这段不寻常的时间里，感谢他们的爱、耐心和支持。

编者简介



吴凌飞博士 毕业于美国公立常春藤盟校之一的威廉与玛丽学院计算机系。他的主要研究方向是机器学习、表征学习和自然语言处理的有机结合，在图神经网络及其应用方面有深入研究。目前他是 Pinterest 公司主管知识图谱和内容理解的研发工程经理(EM)。在此之前，他是京东硅谷研究中心的首席科学家，带领一支由 30 多名机器学习/自然语言处理方面的科学家和软件工程师组成的团队，构建智能电子商务个性化系统。他目前著有图神经网络方面的图书一本，在顶级会议或期刊上发表 100 多篇论文，谷歌学术引用将近 3000 次。他主持开发的 Graph4NLP 软件包自 2021 年中发布以来收获 1500 多颗标星，180 多个分支，深受学术界和工业界欢迎。他曾是 IBM Thomas J. Watson Research Center 的高级研究员，并领导 10 多名研究科学家开发前沿的图神经网络方法和系统，3 次获得 IBM 杰出技术贡献奖。他是 40 多项美国专利的共同发明人，凭借其专利的高商业价值，共获得 8 项 IBM 发明成果奖，并被任命为 IBM 2020 级发明大师。他带领团队获得两个 2022 年 AAAI 人工智能创新应用奖（全球共 8 个），以及 IEEE ICC'19、DLGMA'20、DLG'19 等多个会议或研讨会的最佳论文奖和最佳学生论文奖。他的研究被全球众多中英文媒体广泛报道，包括 Nature News、Yahoo News、AP News、PR Newswire、The Time Weekly、VentureBeat、新智元、机器之心、AI 科技评论等。他是 KDD、AAAI、IEEE BigData 会议组委会委员，并开创和担任全球图深度学习研讨会（与 AAAI20-22 和 KDD20-22 等联合举办）与图深度学习自然语言处理研讨会（与 ICLR22 和 NAACL22 等联合举办）的联合主席。他同时担任 IEEE 影响因子最高期刊之一 *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 和 ACM SIGKDD 旗舰期刊 *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data* 的副主编，并定期担任主要的 AI/ML/NLP 会议如 KDD、EMNLP、IJCAI、AAAI 等的 SPC/AC。



崔鹏博士 清华大学计算机系终身副教授。他于 2010 年在清华大学获得博士学位。他的研究兴趣包括数据挖掘、机器学习和多媒体分析，擅长网络表示学习、因果推理和稳定学习、社会动力学建模和用户行为建模等。他热衷于推动因果推理和机器学习的融合发展，解决当今人工智能技术的基本问题，包括可解释性、稳定性和公平性问题。他被公认为 ACM 的杰出科学家、CCF 的杰出成员和 IEEE 的高级会员。他在机器学习和数据挖掘领域的著名会议和期刊上发表了 100 多篇论文。他是网络嵌入领域被引用最多的几位作者之一。他提出的一些网络嵌入算法在学术界和工业界产生了重大影响。他的研究获得了 IEEE 多媒体最佳部门论文奖、IEEE ICDM 2015 最佳学生论文奖、IEEE ICME 2014 最佳论文奖、ACM MM12 大挑战多模态奖、MMM13 最佳论文奖，并分别入选 2014 年和 2016 年的 KDD 最佳专刊。他曾任 CIKM2019 和 MMM2020 的 PC 联合主席，ICML、KDD、WWW、IJCAI、AAAI 等会议的 SPC 或领域主席，*IEEE TKDE*（2017—）、*IEEE TBD*（2019—）、*ACM TIST*（2018—）和 *ACM TOMM*（2016—）等期刊的副主编。他在 2015 年获得 ACM 中国新星奖，在 2018 年获得 CCF-IEEE CS 青年科学家奖。



裴健博士 杜克大学电子与计算机工程系教授，数据科学、大数据、数据挖掘和数据库系统等领域的知名领先研究人员。他擅长为新型数据密集型应用开发有效和高效的数据分析技术，并将研究成果转化为产品和商业实践。他是加拿大皇家学会（加拿大国家科学院）、加拿大工程院、ACM 和 IEEE 的会员。他还是数据挖掘、数据库系统和信息检索方面被引用最多的几位作者之一。自 2000 年以来，他已经出版一本教科书、两本专著，并在众多极具影响力的会议和期刊上发表了 300 多篇研究论文，这些论文被广泛引用。他研究的算法已在工业界的生产中以及流行的开源软件套件中被广泛采用。他还在许多学术组织和活动中表现出杰出的专业领导能力。他在 2013—2016 年担任 *IEEE Transactions of Knowledge and Data Engineering* (TKDE) 主编，在 2017—2021 年担任 ACM 的 Knowledge Discovery in Data 专委会 (SIGKDD) 主席，并担任许多顶级会议的总联合主席或程序委员会联合主席。他是企业数据战略、医疗信息学、网络安全智能、计算金融和智能零售等方面的顾问和教练。他获得了许多著名的奖项，包括 ACM SIGKDD 创新奖（2017 年）、ACM SIGKDD 服务奖（2015 年）、IEEE ICDM 研究贡献奖（2014 年）、不列颠哥伦比亚省创新委员会青年创新者奖（2005 年）、NSERC 2008 年 Discovery Accelerator Supplements Award（全加拿大共 100 个获奖者）、IBM Faculty 奖（2006 年）、KDD 最佳应用论文奖（2008 年）、ICDE 最具影响力论文奖（2018 年）、PAKDD 最佳论文奖（2014 年）、PAKDD 最具影响力论文奖（2009 年）以及 IEEE 杰出论文奖（2007 年）等。



赵亮博士 埃默里大学计算科学系助理教授。他曾在乔治梅森大学信息科学与技术系和计算机科学系担任助理教授。他于 2016 年从弗吉尼亚理工大学计算机科学系获得博士学位。他的研究兴趣包括数据挖掘、人工智能和机器学习，特别是时空和网络数据挖掘、图深度学习、非凸优化、模型并行、事件预测和可解释机器学习等方向。他在 2020 年获得亚马逊公司颁发的机器学习研究奖，以表彰他对分布式图神经网络的研究。基于在空间网络的深度学习方面的研究，他于 2020 年获得美国国家科学基金会杰出青年教授奖；基于在生物分子的深度生成模型方面的研究，他于 2019 年获得杰弗里信托奖。他在第 19 届 IEEE 国际数据挖掘会议 (ICDM 2019) 上获得最佳论文奖，他还在第 27 届国际万维网大会 (WWW 2021) 上因深度生成模型获得最佳论文奖提名。基于在时空数据挖掘方面的研究，他于 2016 年被微软搜索评选为数据挖掘领域二十大新星之一。他还是 2017 年弗吉尼亚理工大学计算机科学系的优秀博士生。因为在空间数据深度学习方面的研究，他被计算社区联盟 (CCC) 授予“2021 年计算创新研究员导师”称号。他在 KDD、TKDE、ICDM、ICLR、*Proceedings of the IEEE*、ACM Computing Surveys、TKDD、IJCAI、AAAI 和 WWW 等顶级会议或期刊上发表了大量研究论文，并长期组织 SIGSPATIAL、KDD、ICDM 和 CIKM 等许多顶级会议，担任出版主席、海报主席和会议主席等。

撰稿人名单 (按姓氏拼音排序)

Miltiadis Allamanis

Microsoft Research, Cambridge, UK

Yu Chen

Facebook AI, Menlo Park, CA, USA

Yunfei Chu

Alibaba Group, Hangzhou, China

Peng Cui

Tsinghua University, Beijing, China

Tyler Derr

Vanderbilt University, Nashville, TN, USA

Keyu Duan

Texas A&M University, College Station, TX, USA

Qizhang Feng

Texas A&M University, College Station, TX, USA

Stephan Günnemann

Technical University of Munich, München, Germany

Xiaojie Guo

IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York, USA

Yu Hou

Weill Cornell Medicine, New York City, New York, USA

Xia Hu

Texas A&M University, College Station, TX, USA

Junzhou Huang

University of Texas at Arlington, Arlington, TX, United States

Shouling Ji

Zhejiang University, Hangzhou, China

Wei Jin

Michigan State University, East Lansing, MI, USA

Anowarul Kabir

George Mason University, Fairfax, VA, USA

Seyed Mehran Kazemi

Borealis AI, Montreal, Canada

Jure Leskovec

Stanford University, Stanford, CA, USA

Juncheng Li

Zhejiang University, Hangzhou, China

Jiacheng Li

Zhejiang University, Hangzhou, China

Pan Li

Purdue University, Lafayette, IN, USA

Yanhua Li

Worcester Polytechnic Institute, Worcester, MA, USA

Renjie Liao

University of Toronto, Toronto, Canada

Xiang Ling

Zhejiang University, Hangzhou, China

Bang Liu

University of Montreal, Montreal, Canada

Ninghao Liu

Texas A&M University, College Station, TX, USA

Zirui Liu

Texas A&M University, College Station, TX, USA

Hehuan Ma

University of Texas at Arlington, College Station, TX, USA

Collin McMillan

University of Notre Dame, Notre Dame, IN, USA

Christopher Morris

Polytechnique Montréal, Montréal, Canada

Zongshen Mu

Zhejiang University, Hangzhou, China

Menghai Pan

Worcester Polytechnic Institute, Worcester, MA, USA

Jian Pei

Simon Fraser University, British Columbia, Canada

Yu Rong

Tencent AI Lab, Shenzhen, China

Amarda Shehu

George Mason University, Fairfax, VA, USA

Kai Shen

Zhejiang University, Hangzhou, China

Chuan Shi

Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing, China

Le Song

Mohamed bin Zayed University of Artificial Intelligence, Abu Dhabi, United Arab Emirates

Chang Su

Weill Cornell Medicine, New York City, New York, USA

Jian Tang

Mila-Quebec AI Institute, HEC Montreal, Canada

Siliang Tang

Zhejiang University, Hangzhou, China

Fei Wang

Weill Cornell Medicine, New York City, New York, USA

Shen Wang

University of Illinois at Chicago, Chicago, IL, USA

Shiyu Wang

Emory University, Atlanta, GA, USA

Xiao Wang

Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing, China

Yu Wang

Vanderbilt University, Nashville, TN, USA

Chunming Wu

Zhejiang University, Hangzhou, China

Lingfei Wu

Pinterest, San Francisco, CA, USA

Hongxia Yang

Alibaba Group, Hangzhou, China

Jiangchao Yao

Alibaba Group, Hangzhou, China

Philip S. Yu

University of Illinois at Chicago, Chicago, IL, USA

Muhan Zhang

Peking University, Beijing, China

Wenqiao Zhang

Zhejiang University, Hangzhou, China

Liang Zhao

Emory University, Atlanta, GA, USA

Chang Zhou

Alibaba Group, Hangzhou, China

Kaixiong Zhou

Texas A&M University, TX, USA

Xun Zhou

University of Iowa, Iowa City, IA, USA

术语

图的基本概念

图：一个图由一个节点集合和一个边集合组成。其中，节点集合中的节点代表实体，边集合中的边代表实体之间的关系。节点和边构成图的拓扑结构。除图结构以外，节点、边和（或）整个图都可以与丰富的信息相关联，这些信息被表征为节点/边/图的特征（又称为属性或内容）。

子图：子图也是图，子图的节点集合和边集合是源图的子集。

中心度：中心度用来度量图中节点的重要性。中心度的基本假设是，如果许多其他重要的节点也连接到该节点，则认为该节点是重要的。常见的中心度度量包括度数中心度、特征向量中心度、间隔性中心度和接近性中心度。

邻域：一个节点的邻域一般是指与该节点相近的其他节点的集合。例如，一个节点的 k 阶邻域也叫 k 步邻域，这个节点的 k 阶邻域内的所有节点与该节点之间的最短路径距离都不大于 k 。

社群：社群是指一组内部连接密集但外部连接却不太密集的节点。

图抽样：图抽样是一种从源图中挑选节点和（或）边的子集的技术。图抽样可用于在大规模图上训练机器学习模型，同时防止发生严重的可扩展性问题。

异质图：如果一个图的节点和（或）边类型不同，那么称这个图为异质图。异质图的典型代表是知识图谱，知识图谱中的边可以是不同的类型。

超图：超图是对图的扩展，超图中的一条边可以连接任意数量的节点。

随机图：随机图通常旨在对所观察图生成的图的概率分布进行建模。目前最基本、研究最透彻的随机图模型名为 Erdős-Rényi，该模型假定节点集合是固定的，此外每条边都相同并且是独立生成的。

动态图：当一个图的数据至少有一个组成部分随时间发生变化，比如增加或删除节点、增加或删除边等，如果边的权重或节点的属性也发生变化，则称这个图为动态图，否则称其为静态图。

图机器学习

谱图论：谱图论旨在分析与图有关的矩阵，如邻接矩阵或拉普拉斯矩阵，使用的是线性代数工具，如研究矩阵的特征值和特征向量。

图信号处理：图信号处理（Graph Signal Processing, GSP）旨在开发工具以处理定义在图上的信号。图信号是数据样本的有限集合，图中的每个节点都有一个样本。

节点级任务：节点级任务是指与图中单个节点相关的机器学习任务。节点级任务的典型代表是节点分类和节点回归。

边级任务：边级任务是指与图中一对节点相关的机器学习任务。边级任务的典型代表

是链接预测。

图级任务：图级任务是指与整个图相关的机器学习任务。图级任务的典型代表是图分类和图属性预测。

直推式学习和归纳式学习：直推式学习是指在训练期间观察目标实例，如节点或边（尽管目标实例的标签仍是未知的），归纳式学习旨在学习可泛化到未观察到的实例的模型。

图神经网络

网络嵌入：网络嵌入旨在将图中的每个节点表征为一个低维向量，以便在嵌入向量中保留有用的信息，比如图结构和图的一些属性。网络嵌入又称为图嵌入和节点表征学习。

图神经网络：图神经网络是指能够在图数据上工作的任何神经网络。

图卷积网络：图卷积网络通常是指由 Kipf 和 Welling (Kipf and Welling, 2017a) 提出的特定图神经网络。在某些文献中，图卷积网络偶尔会被用作图神经网络的同义词。

消息传递：消息传递是图神经网络的框架之一，其中的关键步骤是根据每个神经网络层的图结构在不同节点之间传递消息。采用最为广泛的表述为消息传递神经网络，也就是仅在直接连接的节点之间传递消息 (Gilmer et al, 2017)。在某些文献中，消息传递函数也称为图滤波器或图卷积。

读出：读出 (readout) 是指对各个节点的信息进行总结，以形成更高层次的信息，如形成子图/超图或获得整个图的表征。在某些文献中，读出也称为池化 (pooling) 或图粗粒化 (graph coarsening)。

图对抗攻击：图对抗攻击旨在通过操纵图结构和（或）节点表征以产生最坏情况下的扰动，从而使得一些模型的性能下降。图对抗攻击可以根据攻击者的目标、能力及其所能够获得的知识进行分类。

鲁棒性验证：鲁棒性验证旨在提供形式化的保证，使得即使根据某个扰动模型进行扰动，GNN 的预测也不受影响。

主要符号

数、数组和矩阵

x	标量
\mathbf{x}	向量
\mathbf{X}	矩阵
\mathbf{I}	单位矩阵
\mathbb{R}	实数集
\mathbb{C}	复数集
\mathbb{Z}	整数集
\mathbb{R}^n	n 维的实数向量集合
$\mathbb{R}^{m \times n}$	m 行 n 列的实数矩阵集合
$[a, b]$	包含 a 和 b 的实数区间
$[a, b)$	包含 a 但不包含 b 的实数区间
x_i	向量 \mathbf{x} 中索引为 i 的元素
$X_{i,j}$	矩阵 \mathbf{X} 中行索引为 i 、列索引为 j 的元素

图

\mathcal{G}	图
\mathcal{E}	边集合
\mathcal{V}	节点（顶点）集合
\mathbf{A}	邻接矩阵
\mathbf{L}	拉普拉斯矩阵
\mathbf{D}	对角矩阵
$\mathcal{G} \cong \mathcal{H}$	图 \mathcal{G} 和图 \mathcal{H} 的同构关系
$\mathcal{H} \subseteq \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 是图 \mathcal{G} 的一个子图
$\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 是图 \mathcal{G} 的一个真子图
$\mathcal{H} \cup \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 和图 \mathcal{G} 的并集
$\mathcal{H} \cap \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 和图 \mathcal{G} 的交集
$\mathcal{H} + \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 和图 \mathcal{G} 的并查集
$\mathcal{H} \times \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 和图 \mathcal{G} 的笛卡儿积
$\mathcal{H} \vee \mathcal{G}$	图 \mathcal{H} 和图 \mathcal{G} 的连接

基本操作

\mathbf{X}^T	矩阵 \mathbf{X} 的转置
$\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y}$ 或 \mathbf{XY}	矩阵 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 的点积
$\mathbf{X} \odot \mathbf{Y}$	矩阵 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 的阿达马积
$\det(\mathbf{X})$	矩阵 \mathbf{X} 的行列式
x_p	x 的 p 范数 (也叫 l_p 范数)
\cup	并集
\cap	交集
\subseteq	子集
\subset	真子集
$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$	矢量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 的内积

函数

$f: \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{B}$	定义域为 \mathbb{A} 、值域为 \mathbb{B} 的函数
$\frac{dy}{dx}$	y 关于 x 的导数
$\frac{\partial y}{\partial x}$	y 关于 x 的偏导数
$\nabla_x y$	y 关于 x 的梯度
$\nabla_X y$	y 关于 X 求导后的张量
$\nabla^2 f(x)$	函数 f 在点 x 处的黑塞矩阵
$\int f(x) dx$	x 整个域上的定积分
$\int_S f(x) dx$	集合 S 上关于 x 的定积分
$f(x; \theta)$	由 θ 参数化的关于 x 的函数
$f * g$	函数 f 和 g 的卷积

概率论

$p(a)$	变量 a 的概率分布
$p(b a)$	给定变量 a , 变量 b 的条件概率分布
$a \perp b$	随机变量 a 和 b 是独立的
$a \perp b c$	给定变量 c , 变量 a 和 b 有条件地独立
$a \sim p$	随机变量 a 具有分布 p
$\mathbb{E}_{a \sim p}[f(a)]$	$f(a)$ 相对于变量 a 在分布 p 下的期望
$\mathcal{N}(x; \mu, \Sigma)$	均值为 μ 、协方差为 Σ 的 x 上的高斯分布

资源与支持

本书由异步社区出品，社区（<https://www.epubit.com>）为您提供相关资源和后续服务。

配套资源

本书提供如下资源：

- 图书参考文献电子版；
- 书中彩图；
- 图书学习思维导图。

您可以扫码右侧二维码并发送“59872”添加异步助手为好友获取以上配套资源。

如果您是教师，希望获得教学配套资源，请在社区本书页面中直接联系本书的责任编辑。



提交勘误

作者、译者和编辑尽最大努力来确保书中内容的准确性，但难免会存在疏漏。欢迎您将发现的问题反馈给我们，帮助我们提升图书的质量。

当您发现错误时，请登录异步社区，按书名搜索，进入本书页面，单击“提交勘误”，输入错误信息，单击“提交”按钮即可，如下图所示。本书的作者和编辑会对您提交的错误信息进行审核，确认并接受后，您将获赠异步社区的 100 积分。积分可用于在异步社区兑换优惠券、样书或奖品。

A screenshot of a web form titled "提交勘误" (Submit勘误). The form has three tabs: "详细信息" (Detailed Information), "写书评" (Write a Review), and "提交勘误" (Submit勘误), with the third tab being active. Below the tabs, there are three input fields: "页码:" (Page Number), "页内位置 (行数):" (Position within page (Line Number)), and "勘误印次:" (勘误印次). Below these fields is a large text area for inputting the error details, with a rich text editor toolbar above it containing icons for bold, italic, underline, and other formatting options. At the bottom right of the text area, there is a "字数统计" (Word Count) label. At the bottom right of the form, there is a red "提交" (Submit) button.

扫码关注本书

扫描下方二维码，您将会在异步社区微信服务号中看到本书信息及相关的服务提示。

与我们联系

我们的联系邮箱是 contact@epubit.com.cn。

如果您对本书有任何疑问或建议，请您发邮件给我们，并在邮件标题中注明本书书名，以便我们更高效地做出反馈。

如果您有兴趣出版图书、录制教学视频，或者参与图书翻译、技术审校等工作，可以发邮件给我们；有意出版图书的作者也可以到异步社区投稿（直接访问 www.epubit.com/contribute 即可）。

如果您所在的学校、培训机构或企业想批量购买本书或异步社区出版的其他图书，也可以发邮件给我们。

如果您在网上发现有针对异步社区出品图书的各种形式的盗版行为，包括对图书全部或部分内容的非授权传播，请您将怀疑有侵权行为的链接通过邮件发送给我们。您的这一举动是对作者权益的保护，也是我们持续为您提供有价值的内容的动力之源。

关于异步社区和异步图书

“异步社区”是人民邮电出版社旗下 IT 专业图书社区，致力于出版精品 IT 图书和相关学习产品，为作译者提供优质出版服务。异步社区创办于 2015 年 8 月，提供大量精品 IT 图书和电子书，以及高品质技术文章和视频课程。更多详情请访问异步社区官网 <https://www.epubit.com>。

“异步图书”是由异步社区编辑团队策划出版的精品 IT 图书的品牌，依托于人民邮电出版社几十年的计算机图书出版积累和专业编辑团队，相关图书在封面上印有异步图书的 LOGO。异步图书的出版领域包括软件开发、大数据、人工智能、测试、前端、网络技术 etc。



异步社区



微信服务号

目录

第一部分 引言

第 1 章 表征学习	2	图表征学习	13
1.1 导读	2	2.3.2 带有侧面信息的图表征学习	15
1.2 不同领域的表征学习	3	2.3.3 保留高级信息的图表征学习	15
1.2.1 用于图像处理的表征学习	3	2.4 图神经网络	16
1.2.2 用于语音识别的表征学习	5	2.5 小结	17
1.2.3 用于自然语言处理的表征学习	7	第 3 章 图神经网络	18
1.2.4 用于网络分析的表征学习	8	3.1 导读	18
1.3 小结	9	3.2 图神经网络概述	19
第 2 章 图表征学习	11	3.2.1 图神经网络基础	19
2.1 导读	11	3.2.2 图神经网络前沿	20
2.2 传统图嵌入方法	12	3.2.3 图神经网络应用	22
2.3 现代图嵌入方法	13	3.2.4 本书组织结构	23
2.3.1 保留图结构和属性的		3.3 小结	24

第二部分 基础

第 4 章 用于节点分类的图神经网络	28	5.2 图表征学习和问题的提出	47
4.1 背景和问题定义	28	5.3 强大的消息传递图神经网络	49
4.2 有监督的图神经网络	29	5.3.1 用于集合的神经网络	49
4.2.1 图神经网络的一般框架	29	5.3.2 消息传递图神经网络	50
4.2.2 图卷积网络	30	5.3.3 MP-GNN 的表达能力	51
4.2.3 图注意力网络	32	5.3.4 具有 1-WL 测试能力的 MP-GNN	53
4.2.4 消息传递神经网络	33	5.4 比 1-WL 测试更强大的 图神经网络架构	54
4.2.5 连续图神经网络	33	5.4.1 MP-GNN 的局限性	54
4.2.6 多尺度谱图卷积网络	35	5.4.2 注入随机属性	56
4.3 无监督的图神经网络	37	5.4.3 注入确定性距离属性	61
4.3.1 变分图自编码器	37	5.4.4 建立高阶图神经网络	65
4.3.2 深度图信息最大化	39	5.5 小结	69
4.4 过平滑问题	41	第 6 章 图神经网络的可扩展性	71
4.5 小结	42	6.1 导读	71
第 5 章 图神经网络的表达能力	44		
5.1 导读	44		

6.2	引言	72	7.4	图神经网络解释的评估	101
6.3	抽样范式	72	7.4.1	基准数据集	101
6.3.1	节点级抽样	74	7.4.2	评价指标	103
6.3.2	层级抽样	76	7.5	未来的方向	103
6.3.3	图级抽样	79	第 8 章 图神经网络的对抗鲁棒性	105	
6.4	大规模图神经网络在 推荐系统中的应用	82	8.1	动机	105
6.4.1	物品-物品推荐	82	8.2	图神经网络的局限性： 对抗性样本	107
6.4.2	用户-物品推荐	83	8.2.1	对抗性攻击的分类	107
6.5	未来的方向	84	8.2.2	扰动的影响和一些启示	110
第 7 章 图神经网络的可解释性	86		8.2.3	讨论和未来的方向	112
7.1	背景：深度模型的可解释性	86	8.3	可证明的鲁棒性： 图神经网络的认证	113
7.1.1	可解释性和解释的定义	86	8.3.1	特定模型的认证	113
7.1.2	解释的价值	87	8.3.2	模型无关的认证	115
7.1.3	传统的解释方法	88	8.3.3	高级认证和讨论	116
7.1.4	机遇与挑战	90	8.4	提高图神经网络的鲁棒性	117
7.2	图神经网络的解释方法	90	8.4.1	改进图	117
7.2.1	背景	91	8.4.2	改进训练过程	118
7.2.2	基于近似的解释	92	8.4.3	改进图神经网络的架构	120
7.2.3	基于相关性传播的解释	95	8.4.4	讨论和未来的方向	121
7.2.4	基于扰动的解释	96	8.5	从鲁棒性的角度进行 适当评估	122
7.2.5	生成式解释	97	8.6	小结	124
7.3	图神经网络的可解释模型	97			
7.3.1	基于 GNN 的注意力模型	98			
7.3.2	图上的解耦化表征学习	100			

第三部分 前 沿

第 9 章	图分类	128	图分类中的局限性	135	
9.1	导读	128	9.5	图神经网络在图分类中的应用	137
9.2	用于图分类的图神经网络： 典型工作和现代架构	129	9.6	基准数据集	137
9.2.1	空间方法	129	9.7	小结	138
9.2.2	频谱方法	132	第 10 章	链接预测	139
9.3	池化层：从节点级输出 学习图级输出	133	10.1	导读	139
9.3.1	基于注意力的池化层	134	10.2	传统的链接预测方法	140
9.3.2	基于聚类的池化层	134	10.2.1	启发式方法	140
9.3.3	其他池化层	134	10.2.2	潜在特征方法	143
9.4	图神经网络和高阶层在		10.2.3	基于内容的方法	145
			10.3	基于 GNN 的链接预测方法	145
			10.3.1	基于节点的方法	145

10.3.2 基于子图的方法	147	第 13 章 图匹配	197
10.3.3 比较基于节点的方法和 基于子图的方法	150	13.1 导读	197
10.4 链接预测的理论	151	13.2 图匹配学习	198
10.4.1 γ -衰减启发式理论	151	13.2.1 问题的定义	199
10.4.2 贴标签技巧	155	13.2.2 基于深度学习的 图匹配模型	200
10.5 未来的方向	158	13.2.3 基于 GNN 的图匹配模型	201
10.5.1 加速基于子图的方法	158	13.3 图相似性学习	205
10.5.2 设计更强大的贴标签技巧	159	13.3.1 问题的定义	205
10.5.3 了解何时使用独热特征	159	13.3.2 图-图回归任务	206
第 11 章 图生成	160	13.3.3 图-图分类任务	209
11.1 导读	160	13.4 小结	210
11.2 经典的图生成模型	160	第 14 章 图结构学习	211
11.2.1 Erdős-Rényi 模型	161	14.1 导读	211
11.2.2 随机块模型	162	14.2 传统的图结构学习	212
11.3 深度图生成模型	163	14.2.1 无监督图结构学习	212
11.3.1 表征图	163	14.2.2 有监督图结构学习	214
11.3.2 变分自编码器方法	164	14.3 图神经网络的图结构学习	215
11.3.3 深度自回归方法	168	14.3.1 图结构和表征的联合学习	216
11.3.4 生成对抗网络方法	174	14.3.2 与其他问题的联系	225
11.4 小结	178	14.4 未来的方向	226
第 12 章 图转换	179	14.4.1 鲁棒的图结构学习	226
12.1 图转换问题的形式化	179	14.4.2 可扩展的图结构学习	226
12.2 节点级转换	180	14.4.3 异质图的图结构学习	227
12.2.1 节点级转换的定义	180	14.5 小结	227
12.2.2 交互网络	180	第 15 章 动态图神经网络	228
12.2.3 时空卷积循环神经网络	181	15.1 导读	228
12.3 边级转换	182	15.2 背景和表示法	229
12.3.1 边级转换的定义	182	15.2.1 图神经网络	229
12.3.2 图转换生成对抗网络	183	15.2.2 序列模型	230
12.3.3 多尺度图转换网络	184	15.2.3 编码器-解码器框架和 模型训练	233
12.3.4 图转换策略网络	185	15.3 动态图的类型	233
12.4 节点-边共转换	186	15.3.1 离散型与连续型	234
12.4.1 节点-边共转换的定义	186	15.3.2 演变类型	235
12.4.2 基于编辑的节点-边共转换	190	15.3.3 预测问题、内插法和 外推法	235
12.5 其他基于图的转换	193	15.4 用图神经网络对动态图 进行建模	236
12.5.1 序列到图的转换	193	15.4.1 将动态图转换为静态图	236
12.5.2 图到序列的转换	194		
12.5.3 上下文到图的转换	195		
12.6 小结	196		

15.4.2	用于 DTDG 的图神经网络·····	238	17.2.1	架构搜索空间·····	266
15.4.3	用于 CTDG 的图神经网络·····	240	17.2.2	训练超参数搜索空间·····	268
15.5	应用·····	242	17.2.3	高效的搜索空间·····	269
15.5.1	基于骨架的人类活动识别·····	243	17.3	搜索算法·····	269
15.5.2	交通预测·····	244	17.3.1	随机搜索·····	269
15.5.3	时序知识图谱补全·····	245	17.3.2	进化搜索·····	270
15.6	小结·····	247	17.3.3	基于强化学习的搜索·····	270
第 16 章	异质图神经网络·····	248	17.3.4	可微搜索·····	271
16.1	HGNN 简介·····	248	17.3.5	高效的表现评估·····	272
16.1.1	HG 的基本概念·····	249	17.4	未来的方向·····	273
16.1.2	异质性给 HG 嵌入 带来的独特挑战·····	250	第 18 章	自监督学习·····	275
16.1.3	对 HG 嵌入最新发展的 简要概述·····	251	18.1	导读·····	275
16.2	浅层模型·····	251	18.2	自监督学习概述·····	276
16.2.1	基于分解的方法·····	252	18.3	将 SSL 应用于图神经网络： 对训练策略、损失函数和 代理任务进行分类·····	277
16.2.2	基于随机游走的方法·····	253	18.3.1	训练策略·····	278
16.3	深度模型·····	254	18.3.2	损失函数·····	281
16.3.1	基于消息传递的方法·····	254	18.3.3	代理任务·····	283
16.3.2	基于编码器-解码器的方法·····	257	18.4	节点级代理任务·····	283
16.3.3	基于对抗的方法·····	257	18.4.1	基于结构的节点级 代理任务·····	284
16.4	回顾·····	259	18.4.2	基于特征的节点级 代理任务·····	285
16.5	未来的方向·····	259	18.4.3	混合代理任务·····	285
16.5.1	结构和属性保存·····	259	18.5	图级代理任务·····	287
16.5.2	更深入的探索·····	260	18.5.1	基于结构的图级代理任务·····	287
16.5.3	可靠性·····	260	18.5.2	基于特征的图级代理任务·····	291
16.5.4	应用·····	261	18.5.3	混合代理任务·····	291
第 17 章	自动机器学习·····	262	18.6	节点-图级代理任务·····	293
17.1	背景·····	262	18.7	讨论·····	294
17.1.1	AutoGNN 的表示法·····	264	18.8	小结·····	295
17.1.2	AutoGNN 的问题定义·····	264			
17.1.3	AutoGNN 的挑战·····	265			
17.2	搜索空间·····	265			

第四部分 广泛和新兴的应用

第 19 章	现代推荐系统中的 图神经网络·····	298	19.1.1	简介·····	298
19.1	图神经网络在推荐系统中的 实践·····	298	19.1.2	预测用户-物品偏好的 经典方法·····	302
			19.1.3	用户-物品推荐系统中的	

物品推荐：二分图的视角·····	302	自然语言处理任务·····	330
19.2 案例研究 1：动态的		21.3 案例研究 1：基于图的	
GNN 学习·····	304	文本聚类 and 匹配·····	332
19.2.1 动态序贯图·····	304	21.3.1 基于图聚类的热点事件	
19.2.2 DSGL·····	304	发现和组织·····	332
19.2.3 模型预测·····	307	21.3.2 使用图分解和卷积进行	
19.2.4 实验和讨论·····	308	长文档匹配·····	333
19.3 案例研究 2：设备-云协作的		21.4 案例研究 2：基于图的	
GNN 学习·····	309	多跳阅读理解·····	335
19.3.1 提议的框架·····	309	21.5 未来的方向·····	338
19.3.2 实验和讨论·····	312	21.6 小结·····	339
19.4 未来的方向·····	313	第 22 章 程序分析中的图神经网络·····	341
第 20 章 计算机视觉中的图神经网络·····	315	22.1 导读·····	341
20.1 导读·····	315	22.2 程序分析中的机器学习·····	342
20.2 将视觉表征为图·····	316	22.3 程序的图表征·····	343
20.2.1 视觉节点表征·····	316	22.4 用于程序图的图神经网络·····	345
20.2.2 视觉边表征·····	317	22.5 案例研究 1：检测变量	
20.3 案例研究 1：图像·····	318	误用缺陷·····	346
20.3.1 物体检测·····	318	22.6 案例研究 2：预测动态类型化	
20.3.2 图像分类·····	319	语言中的类型·····	348
20.4 案例研究 2：视频·····	320	22.7 未来的方向·····	350
20.4.1 视频动作识别·····	320	第 23 章 软件挖掘中的图神经网络·····	352
20.4.2 时序动作定位·····	322	23.1 导读·····	352
20.5 其他相关工作：跨媒体·····	322	23.2 将软件建模为图·····	353
20.5.1 视觉描述·····	322	23.2.1 宏观与微观层面的表征·····	353
20.5.2 视觉问答·····	323	23.2.2 将宏观和微观层面的	
20.5.3 跨媒体检索·····	324	表征结合起来·····	354
20.6 图神经网络在计算机视觉中的		23.3 相关的软件挖掘任务·····	355
前沿问题·····	324	23.4 软件挖掘任务实例：	
20.6.1 用于计算机视觉的		源代码总结·····	357
高级图神经网络·····	325	23.4.1 基于 GNN 的源代码总结	
20.6.2 图神经网络在计算机视觉中的		快速入门·····	357
更广泛应用·····	325	23.4.2 改进的方向·····	363
20.7 小结·····	326	23.5 小结·····	364
第 21 章 自然语言处理中的		第 24 章 药物开发中基于图神经网络的	
 图神经网络·····	327	 生物医学知识图谱挖掘·····	366
21.1 导读·····	327	24.1 导读·····	366
21.2 将文本建模为图·····	329	24.2 现有的生物医学知识图谱·····	367
21.2.1 自然语言处理中的图表征·····	329	24.3 知识图谱的推理·····	369
21.2.2 从图的角度完成		24.3.1 传统的 KG 推理技术·····	370

24.3.2	基于 GNN 的 KG 推理技术	371	26.3.1	图的构建和转换	400
24.4	药物开发中基于 KG 的 假设生成	374	26.3.2	图表征学习	401
24.4.1	基于 KG 的药物再利用的 机器学习框架	374	26.3.3	预测	402
24.4.2	基于 KG 的药物再利用在 COVID-19 中的应用	375	26.4	分类法	403
24.5	未来的方向	376	26.5	案例研究	404
24.5.1	KG 质量控制	376	26.5.1	案例研究 1: 用于恶意账户 检测的图嵌入	404
24.5.2	可扩展的推理	377	26.5.2	案例研究 2: 基于层次注意力 机制的套现用户检测	404
24.5.3	KG 与其他生物医学数据的 结合	378	26.5.3	案例研究 3: 用于恶意 程序检测的注意力异质 图神经网络	405
第 25 章	预测蛋白质功能和 相互作用的图神经网络	383	26.5.4	案例研究 4: 通过图神经网络 学习程序表征和相似性度量的 图匹配框架, 用于检测未知的 恶意程序	406
25.1	从蛋白质的相互作用用到 功能简介	383	26.5.5	案例研究 5: 使用基于注意力的 时间 GCN 进行动态图的 异常检测	408
25.1.1	登上舞台: 蛋白质-蛋白质 相互作用网络	384	26.5.6	案例研究 6: 使用 GAS 进行 垃圾评论检测	408
25.1.2	问题形式化、假设和噪声: 从历史的视角	384	26.6	未来的方向	409
25.1.3	浅层机器学习模型	385	第 27 章	智慧城市中的图神经网络	410
25.1.4	好戏上演: 图神经网络	386	27.1	用于智慧城市中的 图神经网络	410
25.2	三个典型的案例研究	387	27.1.1	导读	410
25.2.1	案例研究 1: 蛋白质-蛋白质和 蛋白质-药物相互作用的 预测	387	27.1.2	图神经网络在智慧城市中的 应用场景	411
25.2.2	案例研究 2: 蛋白质功能和 功能重要的残差的预测	389	27.1.3	将城市系统表征为图	413
25.2.3	案例研究 3: 使用图自编码器 从生物网络的表征中学习 多关系链接预测	391	27.1.4	案例研究 1: 图神经网络在 交通和城市规划中的应用	415
25.3	未来的方向	393	27.1.5	案例研究 2: 图神经网络在 城市事件和异常情况预测中的 应用	417
第 26 章	异常检测中的图神经网络	395	27.1.6	案例研究 3: 图神经网络在 城市人类行为分析中的 应用	417
26.1	导读	395	27.2	未来的方向	419
26.2	基于 GNN 的异常检测的 问题	397	参考文献		420
26.2.1	特定于数据的问题	397			
26.2.2	特定于任务的问题	399			
26.2.3	特定于模型的问题	399			
26.3	流水线	400			