

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	用于智慧城市市的 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			