

目录

CONTENTS

第 1 章 绪论	/1
1.1 简介	/2
1.2 图深度学习的动机	/2
1.3 本书所涵盖的内容	/4
1.4 本书所面向的读者	/6
1.5 图特征学习的简要发展史	/7
1.5.1 图特征选择	/8
1.5.2 图表示学习	/9
1.6 小结	/10
1.7 拓展阅读	/11

第 1 篇 基础理论

第 2 章 图论基础	/15
2.1 图的表示	/16
2.2 图的性质	/17
2.2.1 度	/17
2.2.2 连通度	/18
2.2.3 中心性	/21
2.3 谱图论	/23
2.3.1 拉普拉斯矩阵	/24

2.3.2	拉普拉斯矩阵的特征值和特征向量	/25
2.4	图信号处理	/26
2.4.1	图傅里叶变换	/27
2.5	复杂图	/30
2.5.1	异质图	/30
2.5.2	二分图	/31
2.5.3	多维图	/31
2.5.4	符号图	/32
2.5.5	超图	/33
2.5.6	动态图	/33
2.6	图的计算任务	/34
2.6.1	侧重于节点的任务	/35
2.6.2	侧重于图的任务	/36
2.7	小结	/37
2.8	拓展阅读	/37
第 3 章	深度学习基础	/39
3.1	深度前馈神经网络	/41
3.1.1	网络结构	/41
3.1.2	激活函数	/43
3.1.3	输出层和损失函数	/45
3.2	卷积神经网络	/47
3.2.1	卷积操作和卷积层	/47
3.2.2	参数共享	/50
3.2.3	实际操作中的卷积层	/50
3.2.4	非线性激活层	/52
3.2.5	池化层	/52
3.2.6	卷积神经网络总体框架	/53
3.3	循环神经网络	/54
3.3.1	传统循环神经网络的网络结构	/55
3.3.2	长短期记忆网络	/56

3.3.3 门控循环单元	/58
3.4 自编码器	/59
3.4.1 欠完备自编码器	/60
3.4.2 正则化自编码器	/60
3.5 深度神经网络的训练	/61
3.5.1 梯度下降训练法	/61
3.5.2 反向传播	/62
3.5.3 预防过拟合	/65
3.6 小结	/65
3.7 拓展阅读	/66

第 2 篇 模型方法

第 4 章 图嵌入	/69
4.1 简单图的图嵌入	/71
4.1.1 保留节点共现	/71
4.1.2 保留结构角色	/80
4.1.3 保留节点状态	/83
4.1.4 保留社区结构	/84
4.2 复杂图的图嵌入	/86
4.2.1 异质图嵌入	/87
4.2.2 二分图嵌入	/89
4.2.3 多维图嵌入	/90
4.2.4 符号图嵌入	/91
4.2.5 超图嵌入	/93
4.2.6 动态图嵌入	/95
4.3 小结	/96
4.4 拓展阅读	/97

第 5 章 图神经网络	/99
5.1 GNN 基本框架	/102
5.1.1 侧重于节点的任务的 GNN 框架	/102
5.1.2 侧重于图的任务的 GNN 框架	/103
5.2 图滤波器	/104
5.2.1 基于谱的图滤波器	/104
5.2.2 基于空间的图滤波器	/114
5.3 图池化	/120
5.3.1 平面图池化	/120
5.3.2 层次图池化	/121
5.1 图卷积神经网络的参数学习	/125
5.4.1 节点分类中的参数学习	/126
5.4.2 图分类中的参数学习	/126
5.5 小结	/127
5.6 拓展阅读	/128
第 6 章 图神经网络的鲁棒性	/129
6.1 简介	/130
6.2 图对抗攻击	/130
6.2.1 图对抗攻击的分类	/131
6.2.2 白盒攻击	/132
6.2.3 灰盒攻击	/135
6.2.4 黑盒攻击	/139
6.3 图对抗防御	/142
6.3.1 图对抗训练	/142
6.3.2 图净化	/144
6.3.3 图注意力机制	/144
6.3.4 图结构学习	/148
6.4 小结	/149
6.5 拓展阅读	/149

第 7 章 可扩展图神经网络	/151
7.1 简介	/152
7.2 逐点采样法	/155
7.3 逐层采样法	/158
7.4 子图采样法	/162
7.5 小结	/164
7.6 拓展阅读	/164
第 8 章 复杂图神经网络	/165
8.1 简介	/166
8.2 异质图神经网络	/166
8.3 二分图神经网络	/167
8.4 多维图神经网络	/168
8.5 符号图神经网络	/170
8.6 超图神经网络	/173
8.7 动态图神经网络	/174
8.8 小结	/175
8.9 拓展阅读	/175
第 9 章 图上的其他深度模型	/177
9.1 图上的自编码器	/178
9.2 图上的循环神经网络	/180
9.3 图上的变分自编码器	/182
9.3.1 用于节点表示学习的变分自编码器	/183
9.3.2 用于图生成的变分自编码器	/184
9.3.3 编码器: 推论模型	/185
9.3.4 解码器: 生成模型	/185
9.3.5 重建的损失函数	/186
9.4 图上的生成对抗网络	/187
9.4.1 用于节点表示学习的生成对抗网络	/188
9.4.2 用于图生成的生成对抗网络	/189

9.5 小结	/190
9.6 拓展阅读	/191

第 3 篇 实际应用

第 10 章 自然语言处理中的图神经网络	/195
10.1 简介	/196
10.2 语义角色标注	/196
10.3 神经机器翻译	/199
10.4 关系抽取	/199
10.5 问答系统	/200
10.5.1 多跳问答任务	/201
10.5.2 Entity-GCN	/202
10.6 图到序列学习	/203
10.7 知识图谱中的图神经网络	/205
10.7.1 知识图谱中的图滤波	/205
10.7.2 知识图谱到简单图的转换	/207
10.7.3 知识图谱补全	/208
10.8 小结	/208
10.9 拓展阅读	/209
第 11 章 计算机视觉中的图神经网络	/211
11.1 视觉问答	/212
11.1.1 图像表示为图	/213
11.1.2 图像和问题表示为图	/214
11.2 基于骨架的动作识别	/215
11.3 图像分类	/217
11.3.1 零样本图像分类	/218
11.3.2 少样本图像分类	/219
11.3.3 多标签图像分类	/220

11.4	点云学习	/221
11.5	小结	/222
11.6	拓展阅读	/222
第 12 章 数据挖掘中的图神经网络		/223
12.1	简介	/224
12.2	万维网数据挖掘	/224
12.2.1	社交网络分析	/224
12.2.2	推荐系统	/227
12.3	城市数据挖掘	/231
12.3.1	交通预测	/231
12.3.2	空气质量预测	/233
12.4	网络安全数据挖掘	/233
12.4.1	恶意账户检测	/233
12.4.2	虚假新闻检测	/235
12.5	小结	/236
12.2	拓展阅读	/236
第 13 章 生物化学和医疗健康中的图神经网络		237
13.1	药物开发与发现	/238
13.1.1	分子表示学习	/238
13.1.2	蛋白质相互作用界面预测	/239
13.1.3	药物-靶标结合亲和力预测	/241
13.2	药物相似性整合	/242
13.3	复方药物副作用预测	/244
13.4	疾病预测	/246
13.5	小结	/247
13.6	拓展阅读	/247

第 4 篇 前沿进展

第 14 章 图神经网络的高级方法	/251
14.1 简介	/252
14.2 深层图神经网络	/252
14.2.1 Jumping Knowledge	/254
14.2.2 DropEdge	/255
14.2.3 PairNorm	/255
14.3 通过自监督学习探索未标记数据	/255
14.3.1 侧重于节点的任务	/256
14.3.2 侧重于图的任务	/258
14.4 图神经网络的表达能力	/259
14.4.1 WL 测试	/260
14.4.2 表达能力	/261
14.5 小结	/262
14.6 拓展阅读	/262
第 15 章 图神经网络的高级应用	/263
15.1 图的组合优化	/264
15.2 学习程序表示	/266
15.3 物理中相互作用的动力系统推断	/267
15.4 小结	/268
15.5 拓展阅读	/268
参考文献	/269
索引	/297