

序（俞士纶，Philip S. Yu）：

图是建模关联结构的基本工具，也是广泛存在的数据形式。从最开始使用图论算法进行图基本理论研究，到逐步将这些理论研究应用在现实任务上，并衍生出更为复杂的图算法，人类对图及其算法的研究有着悠久的历史。图机器学习是将机器学习方法应用于图结构数据的技术，一直是人工智能的重要研究方向。特别是，随着深度学习的兴起，如何用神经网络处理图数据成为人工智能的焦点。以图神经网络为代表的图机器学习也成为近些年人工智能的热点技术，并广泛应用于电商推荐、金融风控和科学智能等领域。

随着图机器学习在学术界深入研究和工业界广泛应用，世界各地高校陆续开始开设图机器学习类课程。虽然图机器学习相关的专著很多，但是适合教学的教材在世界范围内仍然很少。一方面，图机器学习内容庞杂，而且仍在快速发展；另一方面，编写好教材要比写专著难得多。本书在编写图机器学习教材方面做了很好的实践，主要具备下面三个方面的特点。

- 系统性和完整性。本书从图的基础表示与特征工程出发，循序渐进地展开至图嵌入、图神经网络及最新研究前沿，形成了完整的知识体系。内容布局环环相扣，梳理出图机器学习的发展脉络。
- 基础性和先进性。书中既注重打牢基础，详细介绍基本原理和经典方法，又紧扣学科前沿，系统呈现异质图、谱图学习和图基础模型等新方向。读者可借助此书夯实理论根基，同时了解未来发展的趋势与机遇。
- 理论性和实践性。在理论阐释之外，本书结合推荐系统、金融风控、生命科学、电路设计等典型案例，展示了图机器学习的广阔应用前景。同时，配合平台与模型的实现讲解，帮助读者贯通原理、方法与落地应用。

本书作者在图机器学习领域深耕多年，提出了一系列具有奠基意义的算法。作为我最早来自中国大陆的访问学者，石川教授自 2010 年起便与我保持着紧密合作。他在异质图分析方面贡献卓著，对该领域的发展起到了重要推动作用。王啸与杨成在相关方向发表了多篇高被引论文，已成长为图学习领域极具潜力的青年学者；张志强成功将图学习技术应用于金融风控等真实场景，具备丰富的实践经验。他们创立的图机器学习与挖掘实验室（GAMMA Lab）在图机器学习领域具有较大影响力，为该领域的发展做出了贡献。

本书系统总结了图机器学习领域的核心理论与应用实践，既可作为学术界与工业界的实践指南，亦可为本科生、研究生的专业教材。期待它成为连接学术探索与产业创新的桥梁，让更多读者在图机器学习的世界中收获知识、启迪思考，共同推动这一前沿领域的发展与突破。

Graphs are fundamental tools for modeling relational structures and a ubiquitous form of data. From the initial use of graph theory algorithms for basic theoretical research on graphs to the gradual application of these theoretical studies to real-world tasks and the development of more complex graph algorithms, humans have a long history of researching graphs and their algorithms. Graph machine learning, which involves applying machine learning methods to graph-structured data, has always been an important research direction in artificial intelligence. In particular, with the rise of deep learning, how to process graph data using neural networks has become a focal point in AI. Graph machine learning, represented by graph neural networks, has emerged as a hot topic in artificial intelligence in recent years and is widely applied in areas such as e-commerce recommendations, financial risk control, and scientific intelligence.

With the in-depth research on graph machine learning in academia and its widespread application in industry, universities around the world have gradually begun to offer courses on graph machine learning. Although there are many specialized books on graph machine learning, textbooks suitable for teaching are still scarce worldwide. On the one hand, the content of graph machine learning is vast and still rapidly evolving; on the other hand, writing a good textbook is much more challenging than writing a monograph. This book represents an excellent practice in compiling a textbook on graph machine learning, with the following three key features:

1. **Systematicness and Comprehensiveness:** Starting from the basic representation and feature engineering of graphs, this book progressively expands to graph embedding, graph neural networks, and the latest research frontiers, forming a complete knowledge system. The content is structured in a coherent manner, outlining the development trajectory of graph machine learning.

2. **Foundational and Advanced Content:** The book emphasizes building a solid foundation by detailing basic principles and classical methods, while also staying closely aligned with the cutting edge of the discipline. It systematically presents new directions such as heterogeneous graphs, spectral graph learning, and graph foundation models. Readers can use this book to strengthen their theoretical foundation while gaining insights into future trends and opportunities.

3. **Theoretical and Practical Balance:** Beyond theoretical explanations, the book showcases the broad application prospects of graph machine learning through typical cases in recommendation systems, financial risk control, life sciences, and circuit design. Additionally, it provides explanations of platform and model implementations to help readers integrate principles,

methods, and practical applications.

The authors of this book have been deeply engaged in the field of graph machine learning for many years and have proposed a series of foundational algorithms. As one of my earliest visiting scholars from mainland China, Professor Shi Chuan has maintained a close collaboration with me since 2010. He has made outstanding contributions to heterogeneous graph analysis and has played a significant role in advancing the field. Wang Xiao and Yang Cheng have published multiple highly cited papers in related directions and have grown into promising young scholars in the field of graph learning. Zhang Zhiqiang has successfully applied graph learning technologies to real-world scenarios such as financial risk control, possessing rich practical experience. The GAMMA Lab they established has significant influence in the field of graph machine learning and has contributed to its development.

This book systematically summarizes the core theories and practical applications of graph machine learning. It can serve as a practical guide for both academia and industry, as well as a professional textbook for undergraduate and graduate students. It is hoped that this book will become a bridge connecting academic exploration and industrial innovation, enabling more readers to gain knowledge and inspiration in the world of graph machine learning and collectively promote the development and breakthroughs in this cutting-edge field.

内容简介：

本书系统介绍了图机器学习的基础理论、典型模型与应用实践。本书首先介绍了图的基本概念、表示方法与特征构造技术；随后从图嵌入模型出发，深入介绍了图神经网络的主要架构与变体；接着概述图机器学习前沿进展，并详细介绍异质图、谱图、可信图和图基础模型等前沿方向；此外，介绍了图机器学习在推荐系统、金融风控、生命科学、电路设计等领域的典型应用，并涵盖了开发平台与应用实践等相关内容。

本书适合计算机科学、人工智能、数据科学等相关专业的学生和学者阅读，也适合相关应用领域的算法工程师参考使用。

前言：

图作为一种表达复杂关系结构的重要数据形式，具有广泛应用价值。传统基于欧式空间的机器学习难以应对图数据的高阶依赖与复杂结构。因此，面向图数据的图机器学习方法应运而生，并迅速成为研究热点。特别是，将深度学习应用于图数据而产生的图神经网络在建模图结构数据方面表现出显著优势，近些年已经成为人工智能的核心技术，并广泛应用于推荐系统、风控安全、药物研发等领域。

笔者于 22 年开设《图机器学习》研究生课程，一直苦于没有合适的教材。虽然以图神经网络为代表的图机器学习是研究和应用热点，学术专著有不少，但是国内外相关的教材很少。由于一直专注于图机器学习相关研究，因此也萌生了写一本《图机器学习》教材的想法，既是对研究工作的总结整理，也是对该方向的系统梳理；但同时也深知教材与专著有巨大差异，写一本好教材比专著要难得的多。经过两年的酝酿，一年的写作，近一年的校对出版，本书才顺利出版。这部凝结了笔者在相关方向近 20 年的研究和思考的教材，希望能够对该方向研究有促进，对相关课程建设有帮助。

本书系统全面介绍图机器学习的基本原理、核心算法与典型应用，帮助读者建立完善的图机器学习知识体系与实践能力。本书由基础篇、进阶篇与应用篇三部分组成，既涵盖了图机器学习的主要内容，又循序渐进，满足读者的不同需要。本书主要内容如下：

- 基础篇系统介绍图机器学习的基本概念和基础模型，包含第 1-5 章，帮助读者打下坚实的理论与方法基础。第 1 章介绍图的类型、表示方法与基本操作；第 2 章系统讲解节点、边和图级特征的构造与应用；第 3 章则引入图嵌入方法；第 4 章介绍图神经网络的基本结构和经典模型；第 5 章讨论图神经网络在数据、架构和训练三方面的优化策略。
- 进阶篇全面介绍图机器学习的前沿进展，包含 6-10 章，帮助读者把握图机器学习的核心技术与发展趋势。第 6 章总体介绍了图机器学习的前沿方向；第 7 章总结异质图机器学习的基本方法与代表性模型；第 8 章深入讲解谱图理论与频域建模在图机器学习中的应用；第 9 章探讨可信图神经网络的四个核心维度，包括鲁棒性、公平性、分布外泛化与可解释性；第 10 章则系统分

析图基础模型的研究背景、实现路径及其与大模型的融合方式。

- 应用篇介绍图机器学习的平台实现与典型应用，包含 11-15 章，帮助读者应用图机器学习技术解决实际问题。第 11 章介绍图机器学习平台的设计理念，概述主流平台如 DGL 与 GammaGL 的核心特点；第 12 章以典型图模型为例，展示如何在平台中实现节点分类、图分类与链路预测任务；第 13 章讨论图机器学习在推荐系统中的挑战与应用；第 14 章介绍图机器学习在金融风控与内容风控中的典型任务；第 15 章进一步展示图机器学习在科学智能中的应用。

本书由图数据挖掘与机器学习实验室（GAMMA Lab）全体人员共同完成。笔者统筹了本书的撰写和修订工作，杨成、王啸、张志强分别负责了基础篇、进阶篇、应用篇的撰写。除作者外，GAMMA Lab 的很多学生为本书做出了巨大的贡献，我们向所有为撰写本书做出贡献的人表示衷心的感谢。这些人包括：总体协理：翟新龙；第一章：陈宇络、陈博宇、褚祺峙；第二章：翟新龙、赵明宇、郝宇；第三章：邢宇杰、孙华彬、伍斌；第四章：王春辰、俞泽楷、刘巴特；第五章：闫博、李书杰、何讯；第六章：张中健、朱馨妍；第七章：于越、崔善元；第八章：刘洋、郭泽远；第九章：李一博、王秋雨；第十章：周奇民、李鑫；第十一章：刘曜齐、周光煜、陈泽琦；第十二章：刘曜齐、曹文轩、刘洋、包骏飞；第十三章：陈伟杰、刘海博；第十四章：杨成栋、包俊飞；第十五章：刘佳玮、程泓涛、郭枫。

最后感谢我的家人！是你们让我还残存理想！

石川

郑纬民

作为图计算的重要组成部分，图机器学习是学术界研究热点，并得到广泛应用。本书系统全面介绍了图机器学习的基础理论、关键技术和应用实践，具有很好的参考价值。

--郑纬民 中国工程院院士、清华大学教授

方滨兴

作为人工智能核心技术，图机器学习被广泛应用到网络安全领域。本书系统介绍了图机器学习的理论、技术和应用，内容全面、实践丰富，对学术界和工业界具有重要的参考价值。

--方滨兴 中国工程院院士、中国中文信息学会理事长

金海

本书清晰易懂介绍了图机器学习的基础模型、前沿进展和实际应用。本书内容全面系统，非常适合对图计算等相关方向感兴趣的读者阅读。

金海 华中科技大学教授、中国计算机学会副理事长、计算机体系结构专家

程学旗

以图神经网络为代表的图机器学习已成为大数据关联分析的基本手段。本书作者长期从事该方向研究；该书内容全面，实践丰富，能够帮助你系统深入地了解这个具有广阔应用前景的领域。

程学旗 中科院计算所研究员、CCF 大数据专家委员会主任、大数据专家