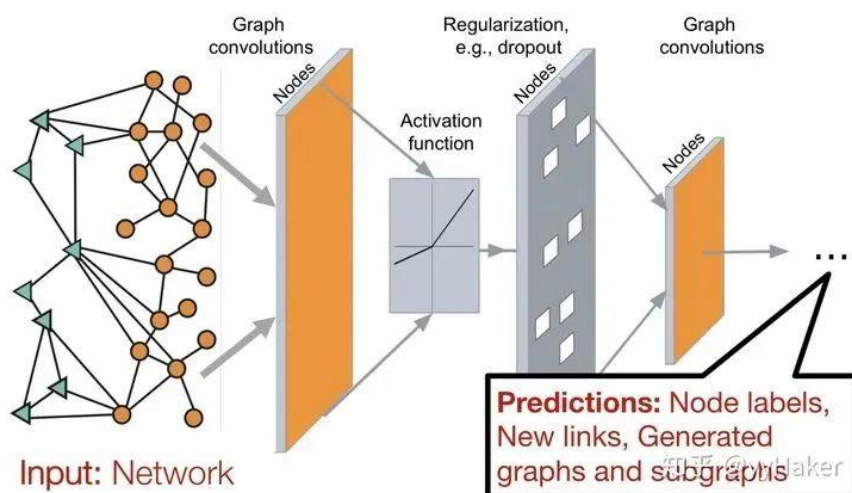


图神经网络 GNN

Graph Neural Network

图神经网络（GNN）是指使用神经网络来学习图结构数据，提取和发掘图结构数据中的特征和模式，满足聚类、分类、预测、分割、生成等图学习任务需求的算法总称。最早是在 2005 年由 Gori 等人第一次提出 GNN 概念，用 RNN 来处理无向图、有向图、标签图和循环图等。Bruna 等人提出将 CNN 应用到图上，通过对卷积算子巧妙的转换，提出了图卷积网络（Graph Convolutional Network, GCN），并衍生了许多变体。

然而现实世界中并不是所有的事物都可以表示成一个序列或者一个网格，例如社交网络、知识图谱、复杂的文件系统等，也就是说很多事物都是非结构化的。相比于简单的文本和图像，这种网络类型的非结构化的数据非常复杂。这些问题促使了图神经网络的出现与发展。



相比较于神经网络最基本的网络结构全连接层（MLP），特征矩阵乘以权重矩阵，图神经网络多了一个邻接矩阵。一个比较常见的图神经网络的应用模式如下：输入是一个图，经过多层图卷积等各种操作以及激活函数，最终得到各个节点的表示，以便于进行节点分类、链接预测、图与子图的生成等等任务。

几年来图神经网络 GNN 的研究热情日益高涨，图神经网络已经成为各大深度学习顶会的研究热点。GNN 处理非结构化数据时的出色能力使其在网络数据分析、推荐系统、物理建模、自然语言处理和图上的组合优化问题方面都取得了新的突破。