

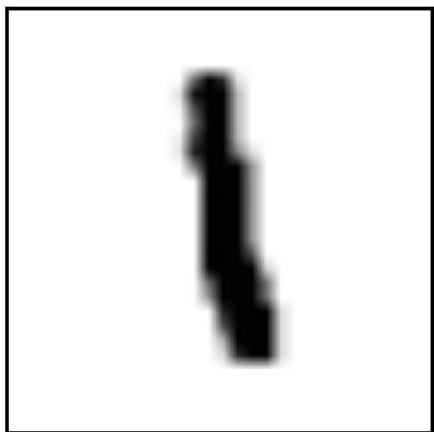


中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

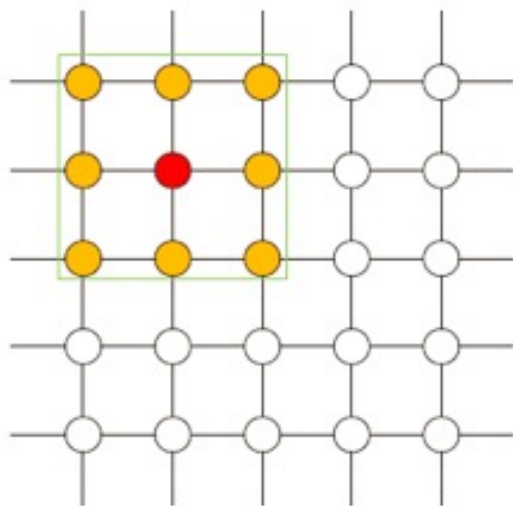
图神经网络



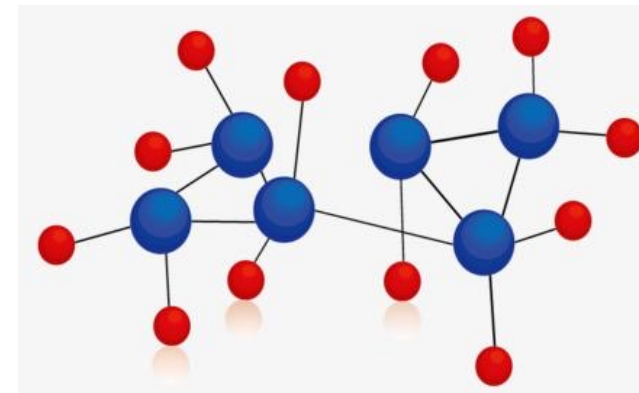
欧式空间与非欧式空间数据



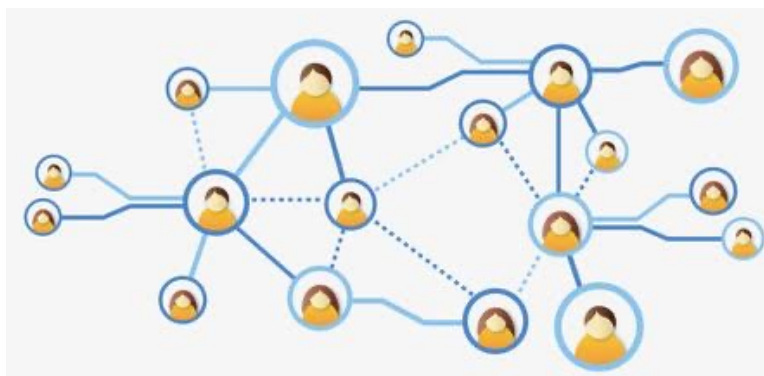
手写数字图片



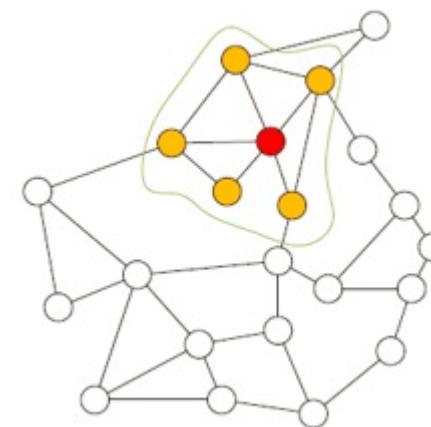
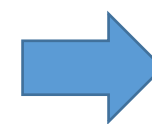
交通网络



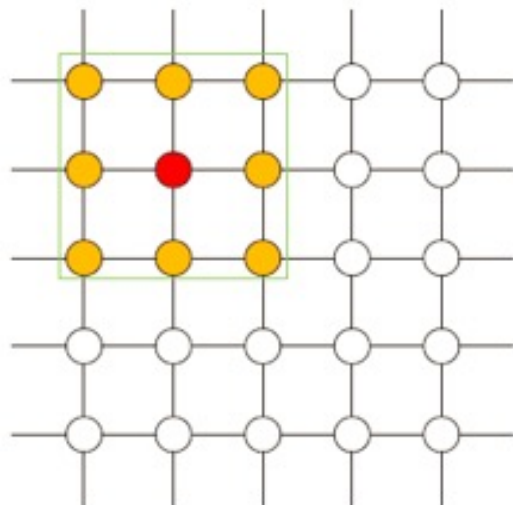
化学分子



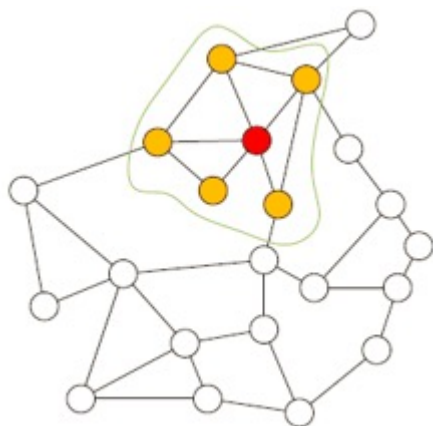
社交网络



为什么要研究图神经网络?



Euclidean Structure Data



Non Euclidean Structure Data

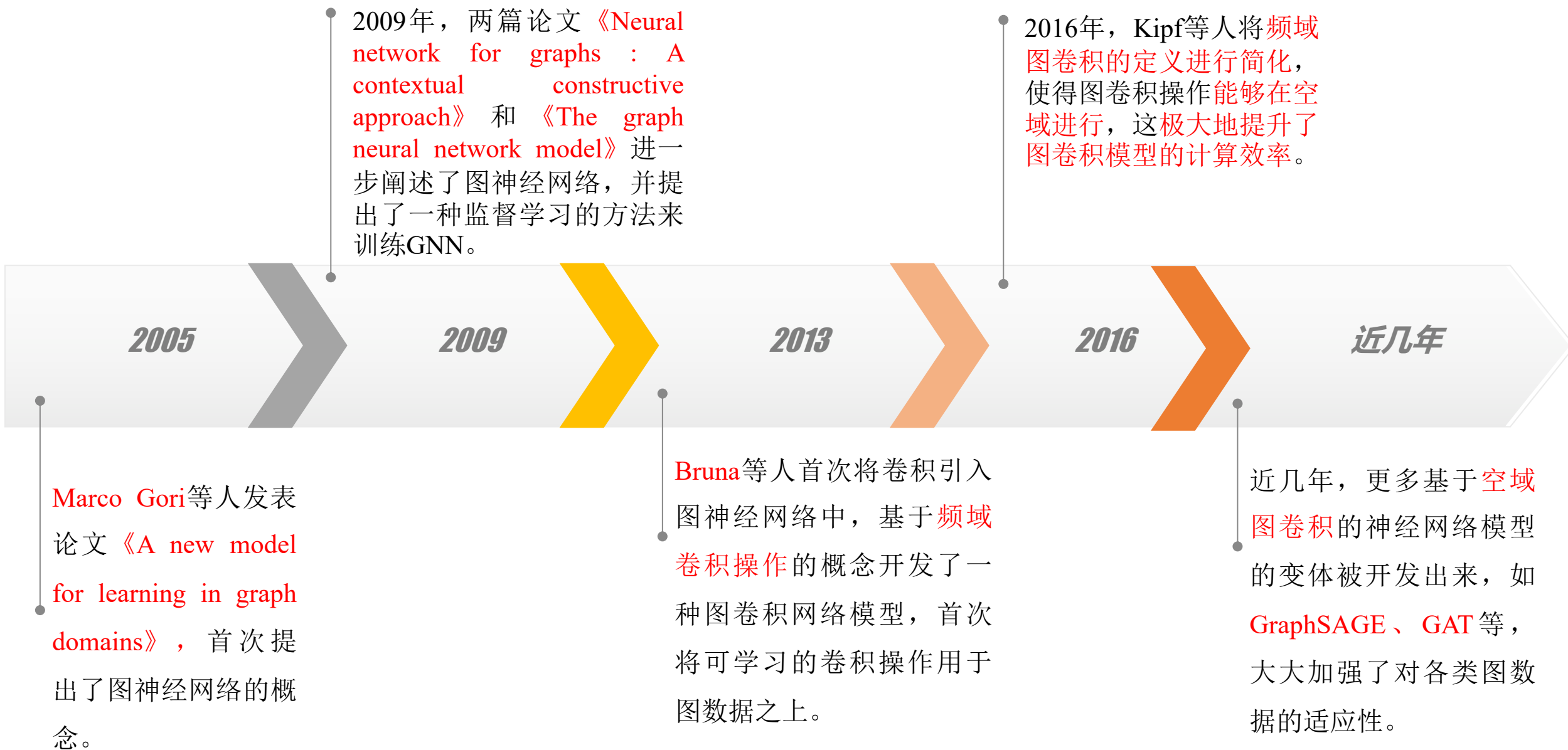
传统的神经网络无法处理非欧式结构的数据，例如：

卷积神经网络在非欧式结构的数据上无法保持平移不变性。通俗理解就是，在拓扑图中每个顶点的相邻顶点数目都有可能不同，因此无法使用一个同样尺寸的卷积核来进行卷积运算。

然而，实际场景中又希望在这样的数据结构（拓扑图）上有效地提取特征以适配任务目标。图神经网络（GNN）成为了研究的热点。

图神经网络(Graph Neural Networks)是一种可将图数据和神经网络相结合，在图数据上面借助神经网络提取特征的能力来进行计算处理的模型。

图神经网络的发展历程



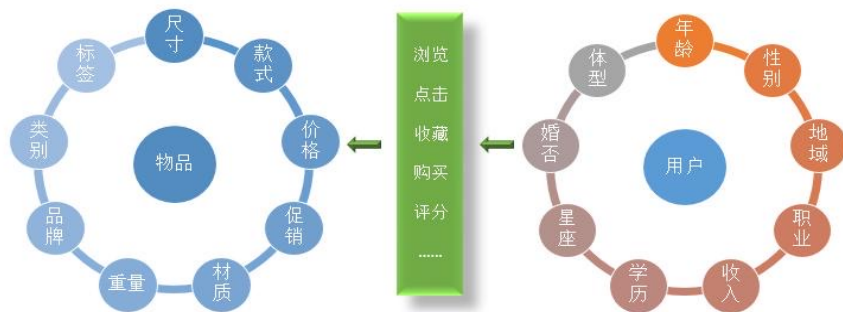
相关任务

➤ 节点层面（Node Level）的任务

节点层面的任务主要包括分类任务和回归任务。节点层面的任务有很多，学术上使用较多对论文引用网络中的论文节点进行分类，工业界在线社交网络中**用户标签的分类**、**恶意账户检测**等。

➤ 边层面（Link Level）的任务

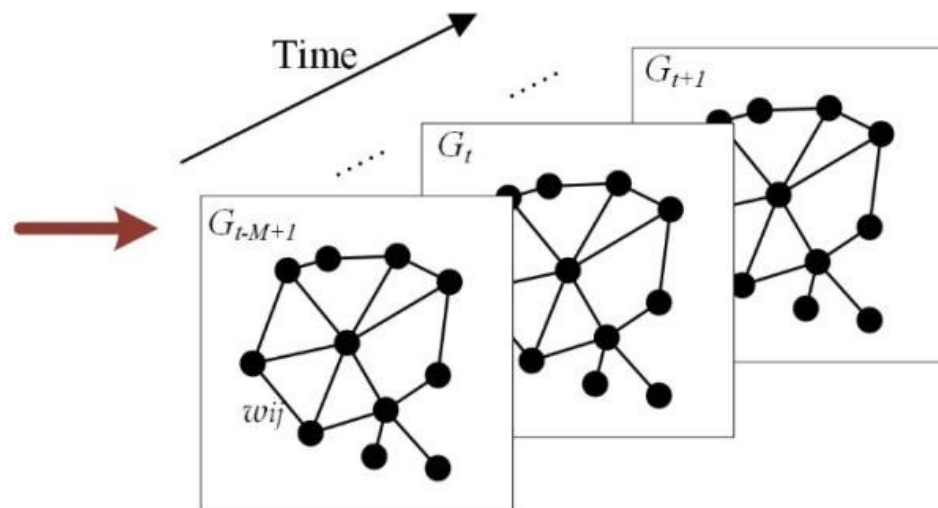
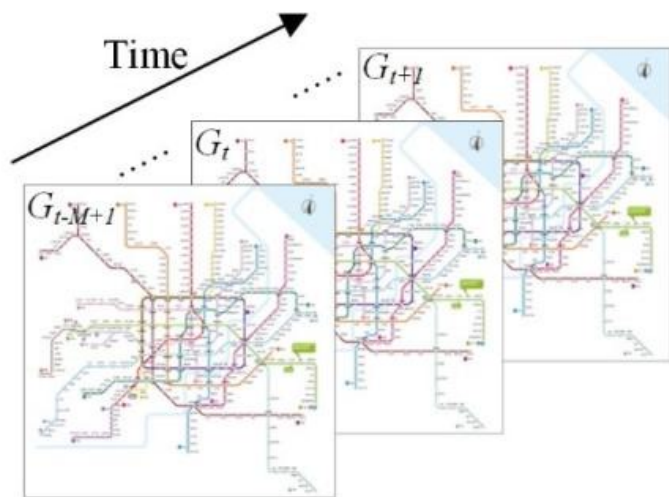
边层面的任务主要包括边的分类和预测任务。边的分类是指对边的某种性质进行预测；边预测是指给定的两个节点之间是否会构成边。目前，边层面的任务主要集中在**推荐业务**中。



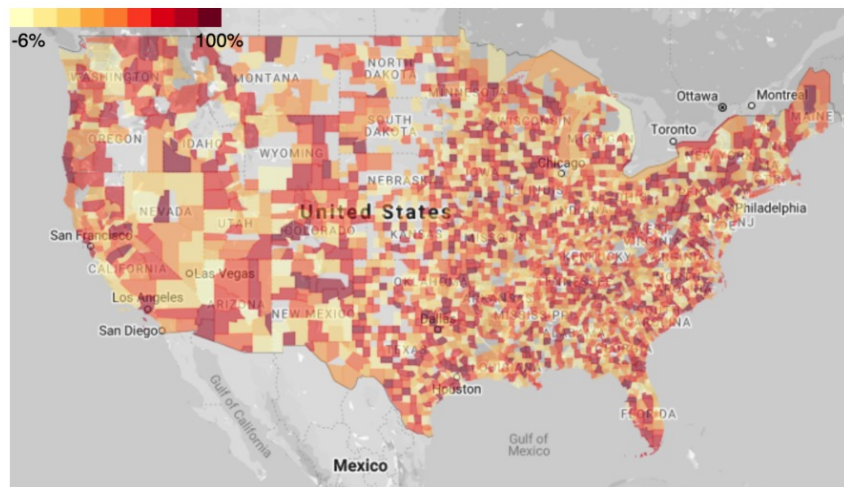
➤ 图层面（Graph Level）的任务

图层面的任务不依赖于某个节点或者某条边的属性，而是从图的整体结构出发，实现分类、表示和生成等任务。目前，图层面的任务主要应用在自然科学研究领域，比如对**药物分子的分类**、**酶的分类**等。

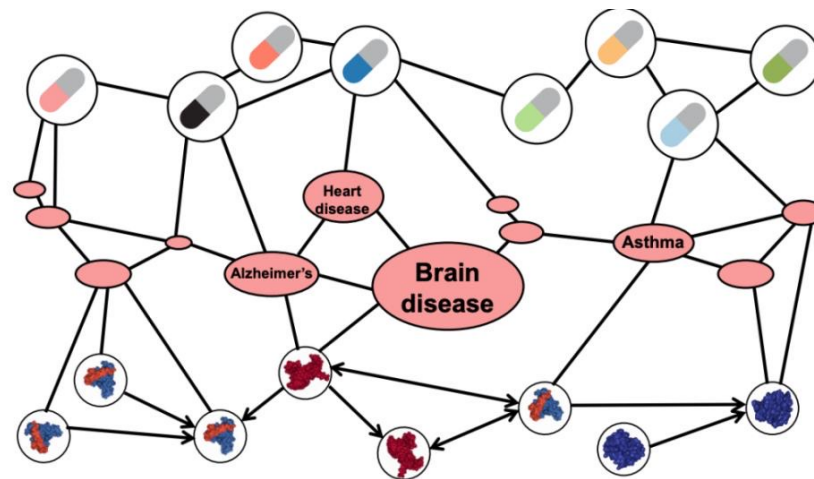
GNN的发展趋势



交通预测



传染病预测



药物生成