

图神经网络

白铂^{1*}, 刘玉婷², 马驰骋^{3,4}, 王光辉^{5*}, 闫桂英^{3,4*}, 闫凯⁵, 张明⁵,
周志恒^{3,4}

1. 华为技术有限公司 2012 实验室理论研究部, 香港;
2. 北京交通大学理学院, 北京 100044;
3. 中国科学院数学与系统科学研究院, 北京 100190;
4. 中国科学院大学数学科学学院, 北京 100049;
5. 山东大学数学学院, 济南 250100

E-mail: baibo8@huawei.com, ytliu@bjtu.edu.cn, macc@amss.ac.cn, ghwang@sdu.edu.cn, yangy@amss.ac.cn, yankaimutd@163.com, 157979059@qq.com, zhouzhiheng@amss.ac.cn

收稿日期: 2019-05-16; 接受日期: 2019-08-07; 网络出版日期: 2020-02-24; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 11631014 和 11871311) 和中央高校基本科研业务费 (批准号: 2018JBM320) 资助项目

摘要 近年来, 随着海量数据的涌现, 可以表示对象之间复杂关系的图结构数据越来越受到重视并给已有的算法带来了极大的挑战. 图神经网络作为可以揭示深层拓扑信息的模型, 已开始广泛应用于诸多领域, 如通信、生命科学和经济金融等. 本文对近几年来提出的图神经网络模型和应用进行综述, 主要分为以下几类: 基于空间方法的图神经网络模型、基于谱方法的图神经网络模型和基于生成方法的图神经网络模型等, 并提出可供未来进一步研究的问题.

关键词 图结构数据 图神经网络 空间方法 谱方法 图自编码器 图对抗生成网络 图循环神经网络

MSC (2010) 主题分类 68T99, 97M10

1 引言

图是对对象及其相互关系的一种简洁抽象的直观数学表达. 具有相互关系的数据—图结构数据在众多领域普遍存在, 并得到广泛应用. 随着大量数据的涌现, 传统的图算法在解决一些深层次的重要问题, 如节点分类和链路预测等方面有很大的局限性. 图神经网络模型考虑了输入数据的规模、异质性和深层拓扑信息等, 在挖掘深层次有效拓扑信息、提取数据的关键复杂特征和实现对海量数据的快速处理等方面, 例如, 预测化学分子的特性^[1]、文本的关系提取^[2,3]、图形图像的结构推理^[4,5]、社交网络的链路预测和节点聚类^[6]、缺失信息的网络补全^[7]和药物的相互作用预测^[8], 显示了令人信服的可靠性能.

英文引用格式: Bai B, Liu Y T, Ma C C, et al. Graph neural network (in Chinese). Sci Sin Math, 2020, 50: 367–384, doi: 10.1360/N012019-00133

图神经网络的概念最早于 2005 年由 Gori 等^[9] 提出, 他借鉴神经网络领域的研究成果, 设计了一种用于处理图结构数据的模型. 2009 年, Scarselli 等^[10] 对此模型进行了详细阐述. 此后, 陆续有关于图神经网络的新模型及应用研究被提出. 近年来, 随着对图结构数据研究兴趣的不断增加, 图神经网络研究论文数量呈现出快速上涨的趋势, 图神经网络的研究方向和应用领域都得到了很大的拓展.

目前已有一些文献对图神经网络进行了综述. 文献 [11] 对图结构数据和流形数据领域的深度学习方法进行综述, 侧重于将所述各种方法置于一个称为几何深度学习的统一框架之内; 文献 [12] 将图神经网络方法分为三类: 半监督学习、无监督学习和最新进展, 并根据发展历史对各种方法进行介绍、分析和对比; 文献 [13] 介绍了图神经网络原始模型、变体和一般框架, 并将图神经网络的应用划分为结构场景、非结构场景和其他场景; 文献 [14] 提出了一种新的图神经网络分类方法, 重点介绍了图卷积网络, 并总结了图神经网络方法在不同学习任务中的开源代码和基准.

本文将图神经网络模型的理论及应用进行综述, 并讨论未来的方向和挑战性问题. 与其他综述文献的不同之处在于, 我们给出新的分类标准, 并且介绍图神经网络丰富的应用成果. 本文具体结构如下: 首先介绍三类主要的图神经网络模型, 分别是基于空间方法的图神经网络、基于谱方法的图神经网络和基于生成方法的图神经网络等; 然后介绍模型在节点分类、链路预测和图生成等方面的应用; 最后提出未来的研究方向.

2 模型及分类

目前有许多用于处理图结构输入的神经网络模型. 按照其结构与功能, 大致可以分为三类: 第一类是基于空间方法的图神经网络模型, 第二类是基于谱方法的图神经网络模型, 第三类是图生成模型. 表 1 列出了常用的模型.

2.1 基于空间方法的图神经网络模型

基于空间方法的图神经网络关键思想是利用图上的信息传播机制, 即节点状态不断更新, 每一时刻更新都使用了上一时刻相邻节点状态信息.

2005 年, Gori 等^[9] 提出了一种新的神经网络模型—图神经网络模型, 我们称为图神经网络 (graph neural network, GoriGNN), 它可以处理图结构数据输入, 这一模型也是基于空间方法的图神经网络模型的开创性工作. 该模型相关概念介绍如下: 设输入的图结构数据为 $G = (V, E, L_V, L_E)$, 其中

- 节点集 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$;
- 边集 $E = \{(i, j) \mid \text{如果 } v_i \text{ 与 } v_j \text{ 有边连}\}$, 这里 $(i, j) = (j, i)$;
- l_{v_i} : v_i 的特征向量, 简记为 l_i ;

表 1 模型分类

分类	模型
空间方法	GoriGNN ^[9,10] 、LGNN ^[15] 、GGS-NN ^[16] 、GPNN ^[17] 、GGT-NN ^[18] 、FGNN ^[19]
谱方法	SpectralGCN ^[20] 、ChebNets ^[21] 、GCN ^[22] 、CayleyNets ^[23]
图生成	基于自编码器: SDNE ^[24] 、VGAE ^[25] 、DVNE ^[26] 基于生成对抗网络: GraphGAN ^[27] 、MolGAN ^[28] 、GraphSGAN ^[29] 其他生成方法: GraphRNN ^[30] 、DGNN ^[31]

- $l_{\text{ne}(i)}$: 节点 v_i 邻接的所有节点的特征向量构成的集合;
- $l_{(i,j)}$: 边 (i,j) 的特征向量;
- $l_{\text{co}(i)}$: 节点 v_i 关联的所有边的特征向量构成的集合;
- $L_V = \{l_1, l_2, \dots, l_n\}$;
- $L_E = \{l_{(i,j)} \mid (i,j) \in E\}$.

对于图结构数据 G , 基于空间方法的图神经网络模型由动态图 $G^t = (V, E, L_V, L_E, X^t)$ 构成, 其中

- $t = 1, 2, \dots, T$ 为时刻 (层);
- $x_i^{(t)}$: 节点 v_i 在 t 时刻的状态;
- $x_{\text{ne}(i)}^{(t)}$: 在 t 时刻, 与节点 v_i 邻接的所有节点的状态构成的集合;
- $X^t = \{x_1^{(t)}, x_2^{(t)}, \dots, x_n^{(t)}\}$.

每个节点在 t 时刻的状态依赖于 $t - 1$ 时刻的图 G^{t-1} , 具体表达式如下:

$$x_i^{(t)} = f_w(l_i, l_{\text{co}(i)}, x_{\text{ne}(i)}^{(t-1)}, l_{\text{ne}(i)}), \tag{2.1}$$

其中 f_w 是含参数 w 的函数. 节点状态不断更新直到稳定. 具体过程如图 1 所示.

GoriGNN 存在的长期依赖问题 (节点特征难以对多次更新后的状态产生影响) 使得深层结构的学习变得困难. 2010 年, Bandinelli 等^[15] 提出了分层图神经网络 (layered graph neural network, LGNN),

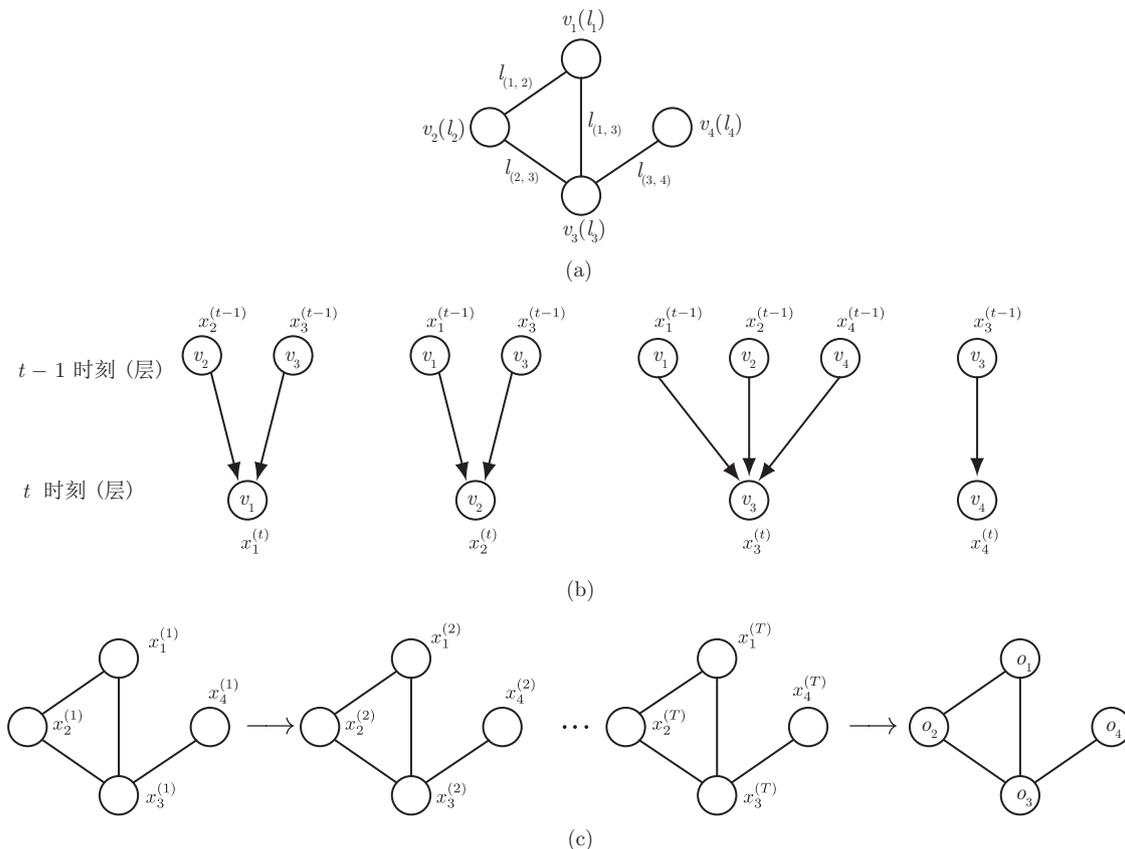


图 1 (a) 输入的图结构数据 G ; (b) $t - 1$ 时刻 (层) 到 t 时刻 (层) 每个节点迭代示意图; (c) 迭代过程, 其中 o_i 是第 i 个节点迭代结束的输出

如图 2 所示, 其由级联 GoriGNN 实现: 每一层的输入由原始数据和级联中前一层计算得到的状态信息提供. 实验证明, 当处理深层结构时, LGNN 中实现的渐进式学习能够在一定程度下解决长期依赖问题.

2016 年, Li 等^[16] 提出了门图序列神经网络 (gated graph sequence neural network, GGS-NN), 如图 3 所示, 此扩展在信息传播过程中使用门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU)^[16, 32] 改善信息在图结构中的长期传播. Li 等的主要贡献是给出了输出序列的图神经网络模型. 图上的许多问题需要输出序列, 像图上路径问题和图节点枚举问题等.

一些场景中, 需要在图中长距离传播信息. 对于这个问题, 2018 年, Liao 等^[17] 提出了图划分神经网络 (graph parsing neural network, GPNN), 它是 GoriGNN 的扩展, 可以快速处理大规模图. GPNN

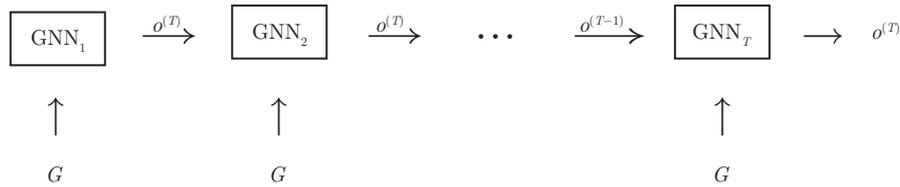


图 2 LGNN 的整体框架. 其中 GNN_i 是第 i 层的图神经网络, $o^{(i)}$ 为第 i 层的输出, 经过处理之后作为下一层的输入, 并且每层图的拓扑结构都与图 G 相同

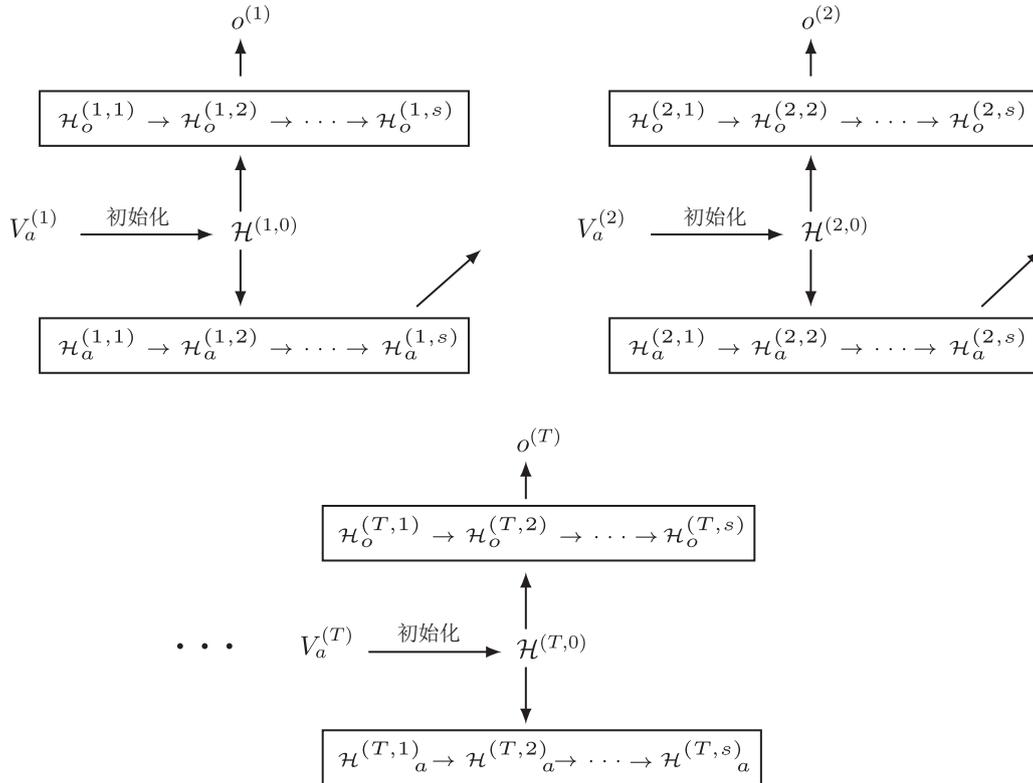


图 3 GGS-NN 的整体框架. $V_a^{(t)}$ 表示与问题有关的节点注释矩阵, $\mathcal{H}^{(t,0)}$ 表示第 t 层隐表示, $\mathcal{H}_a^{(t,j)}$ 和 $\mathcal{H}_o^{(t,k)}$ 分别表示将第 t 层隐表示输入产生注释和输出的 GG-NN 中第 j 和 k 迭代步骤的隐表示, $o^{(t)}$ 表示第 t 层输出, 模型共迭代 T 层

在小子图中节点之间的局部传播信息与子图之间的全局传播信息之间进行交替. 实验表明, GPNN 在半监督节点分类任务中表现较好, 能够很好地处理非常大的图形, 可以实现与 GoriGNN 相似的性能, 传播步骤更少.

除此之外, 2017 年 Johnson^[18] 提出了门图变换神经网络 (gated graph transformer neural network, GGT-NN), 利用图结构数据作为一种中间表示. GGT-NN 模型与之前的方法相比, GGT-NN 可以处理非结构化的输入, 该网络的中间状态完全是基于图结构的, 该模型能够解决几乎所有 bAbI 任务^[33], 在规则发现任务上也具有不错的效果. 2017 年, Krleža 和 Fertalj^[19] 提出了模糊图神经网络 (fuzzy graph neural network, FGNN), 该模型基于循环神经网络 (recurrent neural network, RNN)^[34] 结合模糊规则的方法进行图匹配. FGNN 的优势是降低了复杂性, 不需要图预处理, 以及学习速度快, 可以快速创建. 其主要目的是, 提供可用于各种商业产品的快速构建、快速使用的神经网络.

近年来, 图神经网络模型发展迅速, 各类模型在图结构数据上表现优异. 2018 年, Hamrick 等^[35] 强调关系归纳偏置和模型的组合泛化能力是人工智能领域应当关注的重点, 随后提出了“图网络 (graph network)” 框架, 将所有基于空间方法的图神经网络模型统一在其框架下. 该框架的基本构成单元是“图网络 - 块” (graph network-block), 每个块的输入和输出都是一个图, 包含了三个更新函数 ϕ^e 、 ϕ^v 和 ϕ^u 与三个累积函数 $\rho^{e \rightarrow v}$ 、 $\rho^{e \rightarrow u}$ 和 $\rho^{v \rightarrow u}$, 输入层的节点与边通过不同的函数更新到输出层. 这使得经典的图神经网络模型很容易在图网络框架中得到扩展, 例如, 前文中的 GoriGNN 模型, 即在图网络 - 块中仅对顶点状态进行更新, 并且该框架的关系归纳偏置提供了很好的组合泛化性能.

2.2 基于谱方法的图神经网络模型

谱方法是图卷积神经网络的重要分支. 不同于空间方法, 谱方法的产生以图 Laplace 矩阵为重要工具, 并不显式地利用图上的信息传播机制.

设带权无向图 G 的邻接矩阵为 \mathbf{A} , 矩阵第 i 行第 j 列元素 $\mathbf{A}(i, j)$ 是边 (i, j) 的权重, 度矩阵 \mathbf{D} 定义为

$$\mathbf{D}(i, i) = \sum_{j=1}^n \mathbf{A}(i, j),$$

图 G 的对称归一化 Laplace 矩阵

$$\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}},$$

其中 \mathbf{I} 是单位矩阵. 一维信号 (关于时间 t 的实值函数) $f(t)$ 的 Fourier 变换为关于频率 ξ 的函数

$$\hat{f}(\xi) = \langle f, e^{2\pi i \xi t} \rangle,$$

其中 ξ 表示频率, 复指数 $e^{2\pi i \xi t}$ 为 Laplace 算子 Δ 的特征函数. 类比关于时间 t 的一维信号, 我们称定义在图 G 节点集 V 上的实值函数为图信号, 可用向量 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), \dots, \mathbf{x}(n))$ 表示, 其中 $\mathbf{x}(i)$ 表示图信号在节点 v_i 的取值. 图 Laplace 矩阵 \mathbf{L} 的特征分解为 $\mathbf{L} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}^T$, 其中矩阵 \mathbf{U} 的第 l 列是特征向量 \mathbf{u}_l , 矩阵 $\mathbf{\Lambda}$ 上对角线元素 $\mathbf{\Lambda}(l, l)$ 是对应的特征值 λ_l . 图信号 \mathbf{x} 的 Fourier 变换为

$$\hat{\mathbf{x}}(\lambda_l) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{u}_l \rangle = \sum_{i=1}^n \mathbf{x}(i) \mathbf{u}_l(i), \quad (2.2)$$

逆变换为

$$\mathbf{x}(i) = \sum_{l=1}^n \hat{\mathbf{x}}(\lambda_l) \mathbf{u}_l(i), \quad (2.3)$$

其中 $\mathbf{u}_l(i)$ 是向量 \mathbf{u}_l 的第 i 个分量.

类比信号处理领域时域的卷积等于信号在频域乘积的 Fourier 逆变换, 类似地可以定义图卷积

$$(\mathbf{x} *_{\mathcal{G}} \mathbf{y})(i) = \sum_{l=1}^n \hat{\mathbf{x}}(\lambda_l) \hat{\mathbf{y}}(\lambda_l) \mathbf{u}_l(i), \quad (2.4)$$

其中 $*_{\mathcal{G}}$ 表示图卷积. 对图信号 \mathbf{x} 使用过滤器 \mathbf{y} 进行频域过滤可表示为

$$\mathbf{x} *_{\mathcal{G}} \mathbf{y} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}(\lambda_1) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \hat{\mathbf{y}}(\lambda_n) \end{bmatrix} \mathbf{U}^T \mathbf{x}. \quad (2.5)$$

Bruna 等^[20] 提出了首个基于谱方法的图卷积神经网络模型, 称为谱图卷积网络 (spectral graph convolutional network, SpectralGCN), 模型中包含数个谱卷积层, 输入为 $n \times d_p$ 的节点属性矩阵 \mathbf{X}_p , 输出为 $n \times d_{p+1}$ 的节点属性矩阵 \mathbf{X}_{p+1} :

$$\mathbf{X}_{p+1}(:, j) = \sigma \left(\sum_{i=1}^{d_p} \mathbf{V} \begin{bmatrix} (\boldsymbol{\theta}_i^j)(1) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & (\boldsymbol{\theta}_i^j)(n) \end{bmatrix} \mathbf{V}^T \mathbf{X}_p(:, i) \right), \quad \forall j = 1, \dots, d_{p+1}, \quad (2.6)$$

其中 $\mathbf{X}_p(:, i)$ 和 $\mathbf{X}_{p+1}(:, j)$ 分别表示第 i 个输入图信号和第 j 个输出图信号, $\boldsymbol{\theta}$ 是待学习的过滤器参数向量, \mathbf{V} 的列向量是 \mathbf{L} 的特征向量, σ 是激活函数. 模型使用 r 阶近似特征分解使每层的参数数量减少到 $O(1)$, 并且对于具有适当聚类结构的图, 过滤器的局部性也得以满足, 美中不足的是计算复杂度仍是 $O(n^2)$.

以上述 SpectralGCN 模型为基础, Defferrard 等^[21] 提出了一种在卷积层中使用 K 次多项式过滤器的模型 ChebNets, 模型中频域的 K 次多项式过滤器表示为

$$\hat{\mathbf{y}}(\lambda_l) = \sum_{k=1}^K \theta_k \lambda_l^k.$$

频域 K 次多项式过滤器在节点域表现为聚合 K 阶邻域^[36,37], 因此具有良好可控的局部性, 并且过滤器参数数量也控制到了 $O(K) = O(1)$. 为进一步降低计算复杂性, 模型使用 Chebyshev 多项式 T_k 近似计算图卷积^[21]. 最终卷积层写为

$$\mathbf{X}_{p+1}(:, j) = \sigma \left(\sum_{i=1}^{d_p} \sum_{k=0}^{K-1} (\boldsymbol{\theta}_i^j)(k+1) T_k(\mathbf{L}) \mathbf{X}_p(:, i) \right), \quad \forall j = 1, \dots, d_{p+1}, \quad (2.7)$$

其中 $\boldsymbol{\theta}_i^j$ 是从输入的第 i 个信号到输出的第 j 个信号的 K 维过滤器参数向量. 模型中还使用了一个基于多层级聚类方法^[38] 的图最大池化运算以利用图数据的层级结构^[21].

作为上述 ChebNets 的简化, Kipf 和 Welling^[22] 提出了图卷积网络 (graph convolutional network, GCN). 这个模型将 Chebyshev 多项式截短为一次, 即在 (2.7) 中令 $K = 2$, 并且设置

$$(\boldsymbol{\theta}_i^j)_1 = -(\boldsymbol{\theta}_i^j)_2 = \boldsymbol{\theta}_i^j.$$

为了数值稳定性, 对邻接矩阵 \mathbf{A} 进行了调整得到 $\tilde{\mathbf{A}}$, 由此得到简化的卷积层

$$\mathbf{X}_{p+1} = \sigma(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}_p \Theta_p), \quad (2.8)$$

Θ_p 是 $d_{p+1} \times d_p$ 的参数矩阵, $\tilde{\mathbf{D}}$ 是由调整后的邻接矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 得到的度矩阵. 在图的半监督节点分类任务的设定下, 最后一个卷积层输出节点表示, 之后输入一个 softmax 分类器^[39], 网络训练的目标是最小化有标签节点的交叉熵损失^[40].

Levie 等^[23] 在 ChebNets 的基础上, 提出了一种新的基于谱方法的图卷积网络模型 CayleyNets, 其基于 Cayley 多项式构建新型谱卷积过滤器. Cayley 多项式是复系数的 r 次实函数:

$$g_{c,h}(\lambda) = c_0 + 2\text{Re} \left\{ \sum_{j=1}^r c_j (h\lambda - i)^j (h\lambda + i)^{-j} \right\}.$$

Cayley 过滤器是定义在实信号 \mathbf{f} 上的谱过滤器:

$$\mathbf{G}\mathbf{f} = g_{c,h}(\Delta)\mathbf{f} = c_0\mathbf{f} + 2\text{Re} \left\{ \sum_{j=1}^r c_j (h\Delta - i\mathbf{I})^j (h\Delta + i\mathbf{I})^{-j} \mathbf{f} \right\},$$

其中 \mathbf{c} 和 h 是待训练参数.

Cayley 过滤器具有良好的分析性质: 任意光滑谱过滤器都可以表示为 Cayley 多项式, 低次过滤器具有良好的空间局部性. 相比使用 Chebyshev 多项式的 ChebNets, CayleyNets 同样保证局部性和线性复杂度. 另外, h 作为谱缩放系数还能够在训练期间自适应调整, 以检测所需的重要窄频段. 实验表明, 在具有社团结构的图上, CayleyNets 具有明显更好的表现.

2.3 基于生成方法的图神经网络模型

对应于深度学习领域的自编码器 (autoencoder, AE)^[41] 和生成式对抗网络 (generative adversarial network, GAN)^[42] 模型, 针对图生成任务的图神经网络模型可分为基于自编码器的图神经网络和基于生成式对抗网络的图神经网络. 另外, 一类使用循环神经网络处理图生成任务的图神经网络模型也可归入生成方法.

2.3.1 基于自编码器的图神经网络

AE 及其变体广泛用于无监督学习, 在图神经网络研究的过程中, 基于 AE 的图生成模型日渐增多. 基于 AE 的图神经网络其基本思想源自稀疏自编码器 (sparse autoencoder, SAE)^[43], SAE 采用如下 L_2 重构损失:

$$\begin{aligned} \min_{\theta} \mathcal{L}_2 &= \sum_{i=1}^N \|P(i, :) - \hat{P}(i, :)\|_2, \\ \hat{P}(i, :) &= \mathcal{G}(h_i), \quad h_i = \mathcal{F}(P(i,)), \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中 P 和 \hat{P} 分别为转移矩阵和重构矩阵; $h_i \in \mathbb{R}^d$ 为节点 v_i 的低维表示; \mathcal{F} 和 \mathcal{G} 分别为编码器和解码器; $d \ll N$, 这里 d 为隐藏变量的维数, N 为节点个数; θ 为参数.

借鉴 SAE 的思想, Wang 等^[24] 提出了结构深度网络嵌入 (structural deep network embedding, SDNE) 模型, (2.9) 对应于节点的二阶相似性, 即如果两个节点具有相似的一阶邻居, 则它们具有相似

的表示. 但在 (2.9) 的基础上作出了如下修改:

$$\min_{\theta} \mathcal{L}_2 = \sum_{i=1}^N \|(\mathbf{A}(i, \cdot) - G(h_i)) \odot b_i\|_2, \quad (2.10)$$

当 $\mathbf{A}(i, j) = 0$ 时, $b_{ij} = 1$; 否则, $b_{ij} = \beta > 1$, β 是超参数. 对于一阶近似度, 使用监督学习的方法学习, 其损失函数如下:

$$\mathcal{L}_1 = \sum_{i,j=1}^N \mathbf{A}(i, j) \|h_i - h_j\|_2^2. \quad (2.11)$$

最终得到 SDNE 的损失函数如下:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_2 + \alpha \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_{\text{reg}}, \quad (2.12)$$

其中 \mathcal{L}_{reg} 为正则项. SDNE 的整体框架如图 4.

变分自编码器 (variational autoencoder, VAE)^[44] 广泛地用于无监督学习, 适用于学习没有监督信息的图节点表示. Kipf 和 Welling^[25] 提出了变分图自编码器 (variational graph autoencoder, VGAE), 率先将 VAE 推广到图上. 其解码为

$$p(\mathbf{A} | H) = \prod_{i,j=1}^N \sigma(h_i h_j^T), \quad (2.13)$$

其中 h_i 由 Gauss 后验分布 $q(h_i | M, \mathbf{E}) = N(h_i | M(i, \cdot), \text{diag}(\mathbf{E}(i, \cdot)))$ 得到. 通过 GCN^[22] 得到如下编码器的均值和方差矩阵:

$$M = \text{GCN}_M(F^V, \mathbf{A}), \quad \log \mathbf{E} = \text{GCN}_E(F^V, \mathbf{A}), \quad (2.14)$$

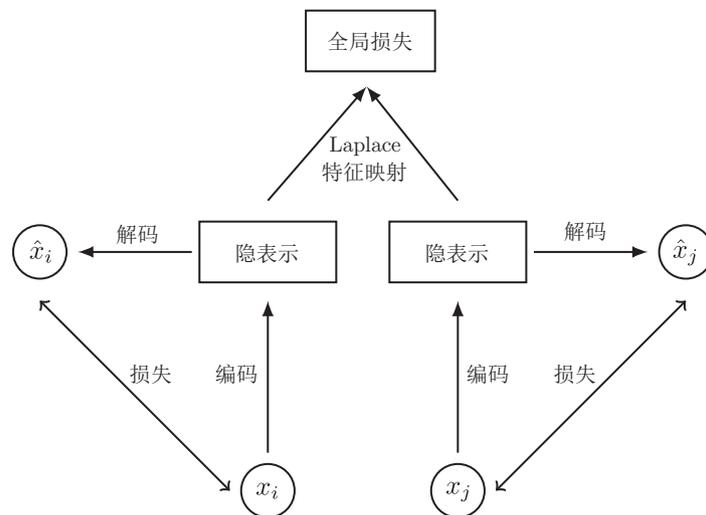


图 4 SDNE 的整体框架. 输入数据 x_i 和 x_j , 编码之后得到隐表示, 再通过解码输出 \hat{x}_i 和 \hat{x}_j . 损失函数分为两部分: (1) 隐表示经过 Laplace 特征映射之后的全局损失; (2) \hat{x} 与 x 之间的重构损失

VGAE 的生成模型为

$$p(\mathbf{A} | H) = \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^N p(\mathbf{A}(i, j) | h_i, h_j), \tag{2.15}$$

$$p(\mathbf{A}(i, j) = 1 | h_i, h_j) = \sigma(h_i^T h_j),$$

其中 $\mathbf{A}(i, j)$ 是邻接矩阵 \mathbf{A} 的元素, $\sigma(\cdot)$ 是逻辑 sigmoid 函数. 通过最小化如下式来学习参数:

$$\ell = E_{q(H | F^V, \mathbf{A})}[\log p(\mathbf{A} | H)] - KL[q(H | F^V, \mathbf{A}) \| p(H)]. \tag{2.16}$$

该模型的时间复杂度为 $O(N^2)$.

受到 SDNE [24] 的启发, Zhu 等 [26] 提出了深度变分网络 (deep variational network embedding, DVNE), 仍通过将每个节点表示为 Gauss 分布、但用 Wasserstein 距离替代之前的 KL 散度来衡量节点相似性. 其损失函数 $\ell = \ell_1 + \alpha\ell_2$, 其中

$$\ell_1 = \sum_{(i,j,k) \in D} (E_{ij}^2 + \exp(-E_{ik})), \tag{2.17}$$

$$\ell_2 = \inf_{q(Z|P)} E_{p(P)} E_{q(Z|P)} \|P \odot (P - G(Z))\|_2^2, \tag{2.18}$$

这里 $E_{ij} = W_2(h_j || h_i)$ 是 h_i 与 h_j 间的 Wasserstein 距离, $D = \{(i, j, k) | j \in N(i), k \notin N(i)\}$ 是对应于二阶近似损失的三元组集合, P 是转移矩阵, Z 由 H 采样得到. DVNE 的框架如图 5.

2.3.2 基于生成式对抗网络的图神经网络

GAN 的模型由 Goodfellow 等 [42] 在 2014 年提出. GAN 由两部分构成: 生成模型 G_θ 和判别模型 D_ϕ . 生成模型用于学习一个从先验数据分布到新数据点的映射; 判别模型的作用是判断样例是真实存在的还是由生成模型 G_θ 所生成的. G_θ 的目的是生成可以欺骗判别器的样例, D_ϕ 试图正确区分样本.

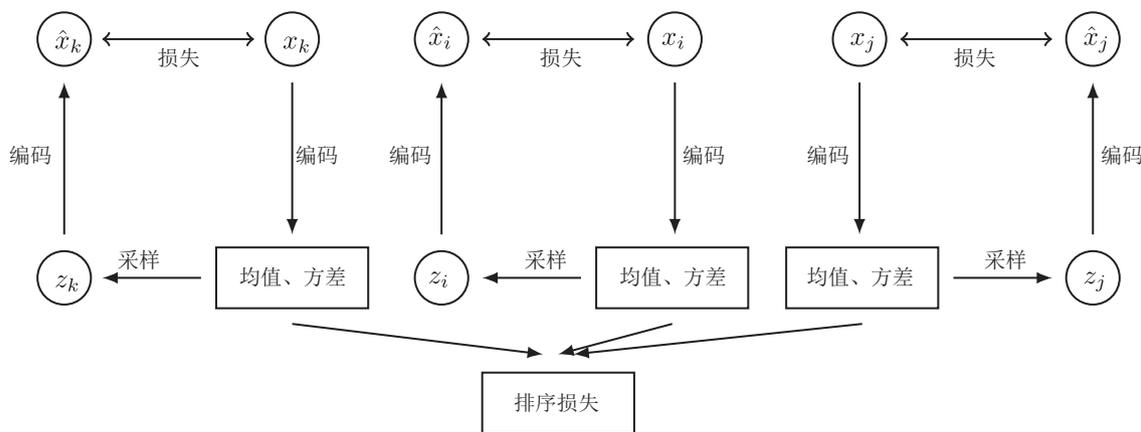


图 5 DVNE 的整体框架. 输入数据 x_i, x_j 和 x_k , 编码之后得到均值和方差, 再通过采样得到隐表示 z_i, z_j 和 z_k , 最后解码输出 \hat{x}_i, \hat{x}_j 和 \hat{x}_k . 损失函数分为两部分: (1) 均值与方差产生的排序损失; (2) x 与 \hat{x} 之间的重构损失

优化目标为 $\min_{\theta} \max_{\phi} E_{x \sim p_{\text{data}}(x)}[\log D_{\phi}(x)] + E_{z \sim p_z(z)}[\log(1 - D_{\phi}(G_{\theta}(z)))]$, 其中 z 表示随机抽取的噪声, p_{data} 表示真实数据服从的分布, p_z 表示噪声服从的分布. 下面展示几种基于 GAN 的实例.

图对抗生成网络 (graph generative adversarial network, GraphGAN) [27] 将 GAN 用于图表示学习, 生成器 G 用来拟合真实的连通性分布, 并生成最倾向于与输入节点相连接的节点. 判别器 D 的目的就是判别节点对 (v, v_c) 的连通性, 输出一个数值来表示节点 v 与节点 v_c 之间存在边的可能性. 其中, 任何判别模型都可以用作具体的判别器的实现. 生成器的优化要采用策略梯度方法进行, 在生成器的具体实现过程中, 提出基于图的 softmax 方法. GraphGAN 具有很好的启发作用, 但也有不足之处: (1) 文章设计的生成器无法作用在有权图上; (2) GraphGAN 的实验效果作用于节点分类任务中相较于其他的基准线算法虽然有提升, 但是效果确实还是不够好.

De Cao 和 Kipf [28] 提出的 MolGAN 模型用于生成小规模分子图. 除生成器与判别器外, MolGAN 模型中还有一个反馈函数, 用于对数据集与生成的样本进行打分, 例如, 判断生成的分子在水中的溶解度有多大.

GraphSGAN [29] 在应对半监督学习问题方面有着不错的效果. GraphSGAN 既适用于有向图, 也适用于无向图. 其核心思想是利用 GAN 来估计子图密度, 在密度间隙生成节点. 在 GraphSGAN 中用分类器替代 GAN 中的判别器. 生成器的输入为 Gauss 噪声.

2.3.3 其他生成模型

图循环神经网络 (graph recurrent neural network, GraphRNN) 是 You 等 [30] 提出的一种图生成模型. 模型使用两个循环神经网络. 其中一个用以生成新的节点, 另一个以自回归的方式为新加入的节点添加边. 模型的转换模块 f_{trans} 和输出模块 f_{out} 基于循环神经网络构建. \mathcal{P}_{θ_i} 是由 θ_i 参数化的概率分布. 用空图状态 h' 对图状态 h_i 进行初始化. 状态更新过程为

$$h_i = f_{\text{trans}}(h_{i-1}, S_i^{\pi}), \quad (2.19)$$

$$\theta_{i+1} = f_{\text{out}}(h_i), \quad (2.20)$$

$$S_{i+1}^{\pi} \sim \mathcal{P}_{\theta_{i+1}}, \quad (2.21)$$

(2.19) 更新图状态, (2.21) 对节点 i 的边连接采样, 返回边连接序列 $S^{\pi} = (S_1^{\pi}, \dots, S_i^{\pi})$, 其中 $h_i \in \mathbb{R}^d$ 编码到目前为止图的状态, S_{i-1}^{π} 为生成的第 $i-1$ 节点编码邻居, θ_i 指定下一个节点邻接向量的分布, $\mathcal{P}_{\theta_{i+1}}$ 可以是二维向量上的任意分布.

Ma 等 [31] 提出的动态图神经网络 (dynamic graph neural network, DGNN) 用时间感知长短期记忆 (long short-term memory, LSTM) [45] 在动态图中学习节点表示. 每当添加一条新的边, DGNN 使用 LSTM 更新两相邻节点及其邻域表示. 时间感知 LSTM 能够良好建模边形成的顺序, 从而在很多应用中取得好的效果.

3 应用

图神经网络的应用类型主要有节点分类、链路预测和图生成, 如表 2. 这些应用与许多领域相关, 从计算机科学和社会科学到计算生物学和生物化学等. 传统的机器学习算法和图嵌入算法在解决以上问题时, 它们通过将图结构数据映射到更简单的表示 [10] 来解决问题. 然而, 在预处理阶段可能丢失图

表 2 应用分类

分类	应用
节点分类	子图匹配、突变检测、网页排序 ^[10] 、团定位、二级蛋白质结构预测 ^[15] 网络垃圾邮件分类 ^[46] 、bAbI、规则发现 ^[16, 18] 、文本挖掘 ^[47, 48] 目标定位 ^[49] 、图像分类 ^[50] 、规则发现 ^[18] 、引文网络 ^[17, 22] 、疾病预测 ^[51] Euclid 问题、文本分类 ^[21] 、知识图谱分类 ^[22] 、社团探测 ^[23] 、矩阵补全 ^[23, 52] 组合优化 (TSP 问题、SAT 问题) ^[53-56] 、相近二进制码检测 ^[57] 、交通预测 ^[58]
链路预测	引文网络 ^[59, 60] 、信息传播预测 ^[6] 、超图链路预测 ^[61]
图生成	小规模图生成 ^[62] 、化学分子图自动生成 ^[63] 社交网络、2D- 网格图、蛋白质结构预测 ^[30] 、生成特定化学特性的分子 ^[28]

结构本身的拓扑信息, 影响最终的预测结果. 图神经网络则是直接处理图结构数据, 并且在迭代的过程中始终利用了图本身的拓扑信息, 因此较之前的方法取得了更好的结果.

3.1 节点分类

节点分类主要分为两种: 监督节点分类和半监督节点分类.

监督节点分类问题是, 给定一些图, 图中节点具有特征和真实值, 从这些图中学习出一个节点分类模型. 对于新的图, 模型能将图中的节点分类. 半监督节点分类问题是, 给定一个图, 图中的节点具有特征但只有小部分节点具有真实值, 从这个图学习出一个节点分类模型, 对图中其余的节点进行分类. 节点分类是图神经网络的主要应用之一.

监督节点分类中, GoriGNN^[10] 模型可处理图论中的子图匹配问题, 这是图论中的一个 NP- 难问题: 对于给定的两个图 G 和 H , 其中 $|H| \leq |G|$, 需要确定图 G 中是否包含与 H 同构的子图. 对于给定的图 H , 随机生成一些包含图 H 的图 G 用于训练模型. 对于 7 个节点的图 H 和 15 个节点的图 G , 模型给出了 100% 的准确率^[64]. 通过 GoriGNN 学习出的子图匹配模型, 只需要 100 多秒就可以得出结果, 其在化学和生物学上都可以发挥出重要的作用. 文献 [10] 还解决了生物化学中的突变检测问题, 由于生物化学中的数据量大, 例如, 一个蛋白质分子就包含成千上万个氨基酸, 需要从蛋白质分子上检测出突变的氨基酸十分困难. 文献 [10] 给出了一个利用蛋白质分子结构和蛋白质分子本身的化学性质作为训练数据得到的模型, 能有效地检测出分子上突变的氨基酸, 模型在文献 [65] 中的数据集中准确率高达 95%. 与此同时, 文献 [10] 还给出了一个基于网页内容的网页排序算法, 相比较于 Google 的 PageRank 算法, 该算法在用户检索关键词时, 排名靠前的网页会与关键词更加相关. LGNN^[15] 模型可用于解决图论中的团定位问题, 文献 [15] 给出了一个高效的模型, 模型训练过程与子图匹配类似, 训练样本包含 1,000 个随机生成的图, 图节点规模为 15, 每个图都包含 5 个节点的团, 在测试集上模型准确率高达 90%. 针对二级蛋白质结构预测问题, 文献 [15] 给出了一个有效的算法, 并在文献 [66] 中的数据集中进行实验. 蛋白质二级结构的信息是非常重要的, 因为它可以直接用于生物学和化学, 或者间接地用于三级结构的预测. 三级结构则定义了氨基酸的三维组织. 在训练预测模型的过程中, 采用了 20 维的氨基酸的特征向量, 模型准确率为 60%, 并且模型复杂度不高. 文献 [46] 是图神经网络在计算机科学中的一个应用, 训练了一个网络垃圾邮件分类的模型. 文献 [46] 利用了文献 [15] 中的多层图神经网络的方法, 结合无监督学习算法 PM-GraphSOM 和传统深度神经网络, 给出了一个分类准确率达 93% 的模型, 使用的数据集为 WEBSpAM-UK2006. GG-NN^[16] 和 GG-TNN^[18] 都在 bAbI 任务和规则发现任务上取得了良好的效果, 这些任务都是在没有先验知识的基础上去发现词汇之间的关系

和语句之间的规则等。

除此之外, 图神经网络还在其他的监督节点分类问题中被广泛地应用. 不仅给出了一些 NP- 难问题的近似算法, 如 TSP 问题^[55] 和 SAT 问题^[56] 等, 还在其他领域有许多重要的应用, 如文本挖掘^[47, 48]、目标定位^[49]、图像分类^[50]、规则发现^[18]、引文网络^[17] 和疾病预测^[51] 等. 这充分说明图神经网络对于解决监督节点分类问题是一个行之有效的方法, 并且已经被广泛地应用在各个领域之中.

半监督节点分类中, ChebNets 模型^[21] 在 MNIST 数据库上的 Euclid 问题取得了 99.14% 的准确率, 这说明 ChebNets 可以在一般的图结构数据上提取特征, 包括常规的 2D 网格. 同时, ChebNets 还应用在 20NEWS 数据集上进行文本分类, 该应用使用 18,846 个训练数据, 并从语料库中的 93,953 个词里提取 10,000 个常用词, 最终测试准确率为 68%, 击败了需要更多参数的全连接网络. 文献 [22] 给出了一个层数为 1 的图卷积神经网络模型, 并应用在引文网络数据集 Citeseer、Cora 和 Pubmed 上, 其中文档作为节点, 引文链接作为边. 模型分类的准确率为 70.3%、81.5% 和 79%, 比之前的图嵌入模型效果都好. 同时, 模型在知识图谱数据集 NELL 上的分类准确率为 66%, 优于图嵌入模型. 文献 [23] 在 15 个社区的社团探测问题中将 CayleyNets 模型与 ChebNets 模型进行了比较. 两个模型分别在社团探测问题上取得了 95% 和 90% 的准确率, 这说明了 CayleyNets 和 ChebNets 能很好地区分社团. 此外, 在 MNIST 数据库和引文网络数据库 CORA 上, CayleyNets 分别取得了 99.14% 和 87.9% 的测试准确率. 文献 [23] 在推荐系统上应用 CayleyNets 模型, 通过邻接矩阵表示用户和项目图表, 将问题转换为矩阵补全问题, 接下来使用 CayleyNets 模型求解此矩阵补全问题, 进而求解推荐系统问题. 模型在 MovieLens 数据集上测试, 达到了 92.2% 的准确率. 在现代城市, 交通预测对路线规划和流量控制意义重大. 文献 [58] 提出使用时间 - 空间图卷积网络的方法预测道路平均速度, 在 BJER4 数据集上取得优于其他方法的效果. 此外, 还有一些别的半监督节点分类任务可使用图神经网络模型解决, 如矩阵补全^[52]、组合优化^[53, 54] 和相似二进制码检测^[57] 等. 实验说明了图神经网络能有效地解决半监督节点分类任务.

3.2 链路预测

链路预测问题定义为, 给定一些图, 图中的节点和 (或) 边具有特征, 从这些图中学习出一个边预测模型, 对这些图或者新给定的图预测未关联的节点连边的概率. 在现实生活中, 无处不在的网络结构使得链路预测具有非常大的应用背景, 如社交网络中的朋友推荐^[67, 68]、电影推荐^[69], 知识图谱补全^[70] 和代谢网络重构^[71], 以及在生物信息学中的一些其他应用^[72]. 图神经网络模型对于解决链路预测问题同样行之有效.

文献 [59] 提出 NetGAN 模型并将其应用于引文网络数据库 Cora、Citeseer、DBLP、Pubmed 和 Polblogs, 通过将数据库中的文章作为图的节点, 引用关系作为图的边, 构建图结构数据用于训练, 分别得到 84.82%、96.30%、86.61%、93.41% 和 95.51% 的 AUC (area under the curve) 值. 另外, 文献 [59] 还将 NetGAN 与 Adar、DC-SBM、node2vec 和 VGAE 方法进行了比较, 除了在 Cora 和 DBLP 数据库上比其他方法效果差一些外, 其余数据库上效果都是最佳. 同样, 文献 [60] 训练了 Graphite-AE 和 Graphite-VAE 模型用于引文网络数据库 Cora、Citeseer 和 Pubmed, 与 SC、DeepWalk、node2vec、GAE (graph autoencoder) 和 VGAE 作了对比, 实验结果说明 Graphite-VAE 模型在以上 3 个引文网络数据库上都取得最佳性能. 文献 [6] 提出了基于信息传播的 SEAL (learning from Subgraphs, Embeddings and Attributes for Link prediction) 模型, 将其应用在 USAir、NS、PB、Yeast、C.ele、Power、Router 和 E.coli 数据库, 其中 USAir 是美国航空网络数据库, NS 是科学研究人员协作网络数据库, PB 是美

国政治博客网络数据库, Yeast 是酵母中的蛋白质相互作用网络数据库, C.ele 是秀丽隐杆线虫的神经网络数据库, Power 是美国西部电网数据库, Router 是路由器级别因特网数据库, E.coli 是大肠杆菌代谢网络. 文献 [6] 将 SEAL 模型与一些传统的图嵌入模型作了对比, 都取得了最佳的性能, 还说明了 SEAL 模型可以在很多领域中应用. 简单图中的链路预测问题是基本问题, 基于观察到的图结构数据来预测节点之间的新连接. 然而, 许多实际应用需要对节点之间的关系进行建模, 这种关系超出了成对关联, 需要对超图进行链路预测. 文献 [61] 基于图卷积网络提出了神经超链路预测 (neural hyperlink predictor, NHP) 模型, 并且在代谢网络数据库 iAF692、iHN637、iAF1206b、iJO1366 和引文网络数据库 Cora、DBLP 进行了实验. 通过与 SHC、node2vec、CMM 和 PinSage 比较, NHP 在这些数据库上都取得了最好的性能. 这些应用都说明了, 基于图神经网络模型构建的用于解决链路预测问题的方法, 不仅在多个领域中取得成功, 其性能也是前所未有的.

3.3 图生成

图生成任务是通过一组有代表性的图结构数据进行训练来学习生成图结构数据. 基于图神经网络并以生成分子图为动机的图生成模型被逐渐提出, 用于发现新的化学结构. 除此之外, 这些模型还可以用于模拟社交网络和构建知识图谱. 实践证明, 基于图神经网络构建的深度生成图模型比之前的图生成模型性能更优, 效果更好.

文献 [62] 结合图神经网络和变分自编码器提出了 GraphVAE, 将其用于小规模分子图生成, 通过在 QM9 数据库和 ZINC 数据库上进行测试, 实验证明 GraphVAE 较之前的方法具有更高的精度. 文献 [63] 提出了连接树变分自编码器 (junction tree variational autoencoder, JT-VAE), 其生成分子图有两个阶段, 首先在化学子结构上生成树状结构支架, 然后将它们组合成一个带有图结构数据的信息传递网络的分子. 这种方法允许模型逐步扩展分子, 同时保持每一步的化学有效性. 在 ZINC 数据库上的测试结果不仅说明了 JT-VAE 的生成结果好于传统模型, 还说明了 JT-VAE 优于 GraphVAE. GraphRNN^[30] 通过生成节点的邻接向量进而生成邻接矩阵, 通过生成邻接矩阵来生成图结构数据. 模型不仅可以生成节点个数不同的图, 而且生成图的规模较之前方法扩大了 50 倍. 在文献 [30] 中, GraphRNN 被用于各类应用, 如社交网络、2D- 网格图和蛋白质结构预测等. 通过观察生成图的平均节点度数与聚类效果, 实验结果说明了 GraphRNN 性能好于 GraphVAE 和 DeepGMG 等模型. MolGAN^[28] 模型适用于小图的生成, 模型一次性生成离散的图结构, 并且通过强化学习的方法, 促进生成具有特定化学特性的分子, 在 QM9 化学数据库的实验中证明了模型能够产生接近 100% 的有效化合物.

除此之外, 还有许多基于图神经网络的生成模型, 如 NetGAN^[59] 等. 在实际中, 图生成模型不仅可以在社交网络、蛋白质结构预测和化学分子图生成等应用中发挥出重要作用, 还可以将其应用到药物设计、网络结构设计和文本生成等其他领域中. 近年来, 图生成已经成为深度学习中的一个重要的研究方向.

4 未来研究方向

4.1 动态模型

目前大部分方法停留在静态图模型. 然而, 很多现实中需要处理的问题具有动态的特性, 这类问题对图神经网络有更高的需求. 例如, 在无线网络中, 用户的位置随时间变化, 则基站服务的用户同样随时间变化. 解决这类问题, 我们提出了两种可能性. 一是利用图神经网络的组合泛化能力, 将动

态时间窗处理成离散的静态模型,再基于训练好的静态模型解决问题;二是建模动态图不断变化的特征,支持逐渐更新的模型参数,这个问题目前有一些初步研究,Vinyals等^[73]和Wang等^[74]分别尝试过使用GraphRNN框架解决动态问题。

4.2 可解释性与深层结构

深度学习的黑箱模型一直存在可解释性低的问题。图神经网络中的实体和关系通常对应于人类理解的事物(例如,物理对象及之间的物理作用),因此,图神经网络支持更多可解释的分析和可视化(参见文献[56])。进一步探索图网络行为的可解释性是未来研究的一个重要方向。

在深度学习领域,深层网络结构较为常见。例如,一种在图像分类领域表现出色神经网络残差网络(residual network, ResNet)具有152层(参见文献[75])。但是在图神经网络领域,多数网络不超过三层(参见文献[76])。有实验表明,随着网络层数增加,所有节点的表示趋近相同的值,网络性能下降(参见文献[77])。然而较深层的网络可以提供更大的参数空间和更强的表示能力,深层图神经网络的必要性和可行性及设计是一个有待探索的研究方向。

4.3 图对抗攻防

深度学习的一个重要研究方向是对抗样本攻击及其防御。相关研究表明,现代深度网络非常容易受到对抗样本的攻击(参见文献[78])。这些对抗样本仅有很轻微的扰动,以至于人类视觉系统无法察觉这种扰动,但这样的攻击会导致神经网络完全改变它对图片的分类。这类现象引发了人们在对抗攻击和深度学习安全性领域的研究兴趣。随着深度学习在图上的应用越来越广泛,图对抗攻击日渐引起关注。图对抗攻击对原始图的结构或节点特征进行轻微扰动,以改变网络对特定节点的预测(参见文献[79])。在对抗防御方面,Bayes图卷积网络^[80]通过将观测到的图看作一族含参随机图的实现,提升了神经网络在攻击下的鲁棒性。目前这一领域已有一些研究工作(参见文献[79,81,82]),但仍有待进一步探索。

4.4 可扩展性

在社交网络和推荐系统等场景下,常常需要对大规模的图结构数据进行处理。现有多数图神经网络不能满足要求。其原因包括节点邻域的异质特性使得计算不能批量进行,以及图Laplace矩阵分解困难等(参见文献[14])。目前已有快速采样^[83,84]和子图训练^[85,86]的方法用于提升图神经网络的可扩展性,但图神经网络的可扩展性作为一个重要问题还有待研究。

除了上述提到的几个方向,处理异质图问题的图神经网络和图神经网络结构的组合也是值得探讨的课题。

5 结论

本文对图神经网络这一深度学习模型进行了综述。本文先后介绍了几种重要图神经网络模型:基于空间方法的图神经网络模型、基于谱方法的图神经网络模型和基于生成方法的图神经网络模型,展现了它们在各类问题和任务的应用,并对未来的研究方向进行了分析和展望。

致谢 本文是在马志明院士于2018年9月至10月组织的“图神经网络”研讨班上经马志明院士提议并鼓励开始撰写的。后期,马志明院士、周川副研究员、唐与聪博士亦提出了许多宝贵意见。作者在此表示深深感谢。

参考文献

- 1 Duvenaud D K, Maclaurin D, Iparraguirre J, et al. Convolutional networks on graphs for learning molecular fingerprints. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Montreal: Neural Information Processing Systems Foundation, 2015, 2224–2232
- 2 Miwa M, Bansal M. End-to-end relation extraction using LSTMs on sequences and tree structures. ArXiv:1601.00770, 2016
- 3 Peng N, Poon H, Quirk C, et al. Cross-sentence N -ary relation extraction with graph LSTMs. *Trans Assoc Comput Linguist*, 2017, 5: 101–115
- 4 Garcia V, Bruna J. Few-shot learning with graph neural networks. ArXiv:1711.04043, 2017
- 5 Wang X, Ye Y, Gupta A. Zero-shot recognition via semantic embeddings and knowledge graphs. In: *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. Salt Lake City: IEEE, 2018, 6857–6866
- 6 Zhang M, Chen Y. Link prediction based on graph neural networks. ArXiv:1802.09691, 2018
- 7 Bojchevski A, Günnemann S. Deep Gaussian embedding of graphs: Unsupervised inductive learning via ranking. ArXiv:1707.03815, 2017
- 8 Zitnik M, Agrawal M, Leskovec J. Modeling polypharmacy side effects with graph convolutional networks. *Bioinformatics*, 2018, 34: i457–i466
- 9 Gori M, Monfardini G, Scarselli F. A new model for learning in graph domains. In: *Proceedings of the 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks*. Montreal: IEEE, 2005, 729–734
- 10 Scarselli F, Gori M, Tsoi A C, et al. The graph neural network model. *IEEE Trans Neural Netw*, 2009, 20: 61–80
- 11 Bronstein M M, Bruna J, LeCun Y, et al. Geometric deep learning: Going beyond Euclidean data. *IEEE Signal Process Mag*, 2017, 34: 18–42
- 12 Zhang Z, Cui P, Zhu W. Deep learning on graphs: A survey. ArXiv:1812.04202, 2018
- 13 Zhou J, Cui G, Zhang Z, et al. Graph neural networks: A review of methods and applications. ArXiv:1812.08434, 2018
- 14 Wu Z, Pan S, Chen F, et al. A comprehensive survey on graph neural networks. ArXiv:1901.00596, 2019
- 15 Bandinelli N, Bianchini M, Scarselli F. Learning long-term dependencies using layered graph neural networks. In: *The 2010 International Conference on Neural Networks (IJCNN)*. Barcelona: IEEE, 2010, 1–8
- 16 Li Y, Tarlow D, Brockschmidt M, et al. Gated graph sequence neural networks. ArXiv:1511.05493, 2015
- 17 Liao R, Brockschmidt M, Tarlow D, et al. Graph partition neural networks for semi-supervised classification. ArXiv:1803.06272, 2018
- 18 Johnson D. Learning graphical state transitions. <https://openreview.net/forum?id=HJ0NvFzxl¬eId=HJ0NvFzxl>, 2017
- 19 Krleža D, Fertalj K. Graph matching using hierarchical fuzzy graph neural networks. *IEEE Trans Fuzzy Systems*, 2017, 25: 892–904
- 20 Bruna J, Zaremba W, Szlam A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs. ArXiv:1312.6203, 2013
- 21 Defferrard M, Bresson X, Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Barcelona: Neural Information Processing Systems Foundation, 2016, 3844–3852
- 22 Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. ArXiv:1609.02907, 2016
- 23 Levie R, Monti F, Bresson X, et al. Cayleynets: Graph convolutional neural networks with complex rational spectral filters. ArXiv:1705.07664, 2017
- 24 Wang D, Cui P, Zhu W. Structural deep network embedding. In: *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. New York: ACM, 2016, 1225–1234
- 25 Kipf T N, Welling M. Variational graph auto-encoders. ArXiv:1611.07308, 2016
- 26 Zhu D, Cui P, Wang D, et al. Deep variational network embedding in wasserstein space. In: *Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. New York: ACM, 2018, 2827–2836
- 27 Wang H, Wang J, Wang J, et al. GraphGAN: Graph representation learning with generative adversarial nets. ArXiv:1711.08267, 2017
- 28 De Cao N, Kipf T. MoIGAN: An implicit generative model for small molecular graphs. ArXiv:1805.11973, 2018

- 29 Ding M, Tang J, Zhang J. Semi-supervised learning on graphs with generative adversarial nets. In: Proceedings of the 27th ACM International Conference on Information and Knowledge Management. New York: ACM, 2018, 913–922
- 30 You J, Ying R, Ren X, et al. GraphRNN: Generating realistic graphs with deep auto-regressive models. In: International Conference on Machine Learning. Stockholm: International Machine Learning Society, 2018, 5694–5703
- 31 Ma Y, Guo Z, Ren Z, et al. Streaming graph neural networks. ArXiv:1810.10627, 2018
- 32 Cho K, Merriënboer B, Gulcehre C, et al. Learning phrase representations using RNN encoder-decoder for statistical machine translation. ArXiv:1406.1078, 2014
- 33 Weston J, Bordes A, Chopra S, et al. Towards AI-complete question answering: A set of prerequisite toy tasks. ArXiv:1502.05698, 2015
- 34 Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 1986, 323: 533–536
- 35 Hamrick J B, Allen K R, Bapst V, et al. Relational inductive bias for physical construction in humans and machines. ArXiv:1806.01203, 2018
- 36 Shuman D I, Narang S K, Frossard P, et al. The emerging field of signal processing on graphs: Extending high-dimensional data analysis to networks and other irregular domains. *IEEE Signal Process Mag*, 2013, 30: 83–98
- 37 Shuman D I, Ricaud B, Vandergheynst P. Vertex-frequency analysis on graphs. *Appl Comput Harmon Anal*, 2016, 40: 260–291
- 38 Dhillon I S, Guan Y, Kulis B. Weighted graph cuts without eigenvectors a multilevel approach. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2007, 29: 1944–1957
- 39 Goodfellow I, Bengio Y, Courville A, et al. *Deep Learning, Volume 1*. Cambridge: MIT Press, 2016
- 40 de Boer P T, Kroese D P, Mannor S, et al. A tutorial on the cross-entropy method. *Ann Oper Res*, 2005, 134: 19–67
- 41 Hinton G E, Zemel R S. Autoencoders, minimum description length and helmholtz free energy. In: Proceedings of the 6th International Conference on Neural Information Processing Systems. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 1993, 3–10
- 42 Goodfellow I J, Pouget-Abadie J, Mirza M, et al. Generative adversarial nets. In: Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems, vol. 2. Cambridge: MIT Press, 2014, 2672–2680
- 43 Tian F, Gao B, Cui Q, et al. Learning deep representations for graph clustering. In: Proceedings of the Twenty-Eighth AAAI Conference on Artificial Intelligence. Menlo Park: AAAI Press, 2014, 1293–1299
- 44 Kingma D P, Welling M. Auto-encoding variational Bayes. ArXiv:1312.6114, 2013
- 45 Baytas I M, Xiao C, Zhang X, et al. Patient subtyping via time-aware LSTM networks. In: Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2017, 65–74
- 46 Di Noi L, Hagenbuchner M, Scarselli F, et al. Web spam detection by probability mapping graphsoms and graph neural networks. In: International Conference on Artificial Neural Networks. New York: Springer, 2010, 372–381
- 47 Yong S L, Hagenbuchner M, Tsoi A C, et al. Document mining using graph neural network. In: International Workshop of the Initiative for the Evaluation of XML Retrieval. New York: Springer, 2006, 458–472
- 48 Chau R, Tsoi A C, Hagenbuchner M, et al. A conceptlink graph for text structure mining. In: Proceedings of the Thirty-Second Australasian Conference on Computer Science, vol. 91. Darlinghurst: Australian Computer Society, 2009, 141–150
- 49 Monfardini G, Di Massa V, Scarselli F, et al. Graph neural networks for object localization. In: Proceedings of the 2006 Conference on ECAI 2006: 17th European Conference on Artificial Intelligence August 29–September 1, 2006, Riva del Garda, Italy. Amsterdam: IOS Press, 2006, 665–669
- 50 Di Massa V, Monfardini G, Sarti L, et al. A comparison between recursive neural networks and graph neural networks. In: The 2006 IEEE International Joint Conference on Neural Network Proceedings. Vancouver: IEEE, 2006, 778–785
- 51 Parisot S, Ktena S I, Ferrante E, et al. Disease prediction using graph convolutional networks: Application to autism spectrum disorder and Alzheimer’s disease. *Med Image Anal*, 2018, 48: 117–130
- 52 van den Berg R, Kipf T N, Welling M. Graph convolutional matrix completion. ArXiv:1706.02263, 2017
- 53 Khalil E, Dai H, Zhang Y, et al. Learning combinatorial optimization algorithms over graphs. In: Advances in Neural Information Processing Systems. Long Beach: Neural Information Processing Systems Foundation, 2017, 6348–6358
- 54 Nowak A, Villar S, Bandeira A S, et al. A note on learning algorithms for quadratic assignment with graph neural networks. ArXiv:1706.07450, 2017

- 55 Prates M O, Avelar P H, Lemos H, et al. Learning to solve NP-complete problems—a graph neural network for the decision TSP. ArXiv:1809.02721, 2018
- 56 Selsam D, Lamm M, Bunz B, et al. Learning a sat solver from single-bit supervision. ArXiv:1802.03685, 2018
- 57 Xu X, Liu C, Feng Q, et al. Neural network-based graph embedding for cross-platform binary code similarity detection. In: Proceedings of the 2017 ACM SIGSAC Conference on Computer and Communications Security. New York: ACM, 2017, 363–376
- 58 Yu B, Yin H, Zhu Z. Spatio-temporal graph convolutional networks: A deep learning framework for traffic forecasting. ArXiv:1709.04875, 2017
- 59 Bojchevski A, Shchur O, Zügner D, et al. NetGAN: Generating graphs via random walks. ArXiv:1803.00816, 2018
- 60 Grover A, Zweig A, Ermon S. Graphite: Iterative generative modeling of graphs. ArXiv:1803.10459, 2018
- 61 Yadati N, Nitin V, Nimishakavi M, et al. Link prediction in hypergraphs using graph convolutional networks. <https://openreview.net/forum?id=rzeaZhRqFm>, 2018
- 62 Simonovsky M, Komodakis N. GraphVAE: Towards generation of small graphs using variational autoencoders. In: International Conference on Artificial Neural Networks. New York: Springer, 2018, 412–422
- 63 Jin W, Barzilay R, Jaakkola T. Junction tree variational autoencoder for molecular graph generation. In: International Conference on Machine Learning. Stockholm: International Machine Learning Society, 2018, 2328–2337
- 64 Baskararaja G J R, Manickavasagam M R S. Subgraph matching using graph neural network. *J Intell Learn Syst Appl*, 2012, 4: 274–278
- 65 Srinivasan A, Muggleton S, King R D, et al. Mutagenesis: ILP experiments in a non-determinate biological domain. In: Proceedings of the 4th International Workshop on Inductive Logic Programming. Bonn: ILP, 1994, 217–232
- 66 Pollastri G, McLysaght A. Porter: A new, accurate server for protein secondary structure prediction. *Bioinformatics*, 2005, 21: 1719–1720
- 67 Liben-Nowell D, Kleinberg J. The link-prediction problem for social networks. *J Amer Soc Inf Sci*, 2007, 58: 1019–1031
- 68 Adamic L A, Adar E. Friends and neighbors on the Web. *Soc Networks*, 2003, 25: 211–230
- 69 Koren Y, Bell R, Volinsky C. Matrix factorization techniques for recommender systems. *Computer*, 2009, 8: 30–37
- 70 Nickel M, Murphy K, Tresp V, et al. A review of relational machine learning for knowledge graphs. *Proc IEEE*, 2016, 104: 11–33
- 71 Oyetunde T, Zhang M, Chen Y, et al. BoostGAPFILL: Improving the fidelity of metabolic network reconstructions through integrated constraint and pattern-based methods. *Bioinformatics*, 2016, 33: 608–611
- 72 Lü L, Zhou T. Link prediction in complex networks: A survey. *Phys A*, 2011, 390: 1150–1170
- 73 Vinyals O, Fortunato M, Jaitly N. Pointer networks. In: Advances in Neural Information Processing Systems. Montreal: Neural Information Processing Systems Foundation, 2015, 2692–2700
- 74 Wang T, Liao R, Ba J, et al. NerveNet: Learning structured policy with graph neural networks. <https://openreview.net/forum?id=S1sqHMZCb>, 2018
- 75 He K, Zhang X, Ren S, et al. Deep residual learning for image recognition. In: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Singapore: IEEE, 2016, 770–778
- 76 Zhou J, Cui G, Zhang Z, et al. Graph neural networks: A review of methods and applications. ArXiv:1812.08434, 2018
- 77 Li Q, Han Z, Wu X M. Deeper insights into graph convolutional networks for semi-supervised learning. ArXiv:1801.07606, 2018
- 78 Szegedy C, Zaremba W, Sutskever I, et al. Intriguing properties of neural networks. ArXiv:1312.6199, 2013
- 79 Zügner D, Akbarnejad A, Günnemann S. Adversarial attacks on neural networks for graph data. In: Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2018, 2847–2856
- 80 Zhang Y, Pal S, Coates M, et al. Bayesian graph convolutional neural networks for semi-supervised classification. ArXiv:1811.11103, 2018
- 81 Dai H, Li H, Tian T, et al. Adversarial attack on graph structured data. In: International Conference on Machine Learning. Stockholm: International Machine Learning Society, 2018, 1123–1132
- 82 Sun L, Wang J, Yu P S, et al. Adversarial attack and defense on graph data: A survey. ArXiv:1812.10528, 2018
- 83 Chen J, Zhu J, Song L. Stochastic training of graph convolutional networks with variance reduction. In: International

- Conference on Machine Learning. Stockholm: International Machine Learning Society, 2018, 941–949
- 84 Chen J, Ma T, Xiao C. FastGCN: Fast learning with graph convolutional networks via importance sampling. ArXiv:1801.10247, 2018
- 85 Hamilton W, Ying Z, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs. In: Advances in Neural Information Processing Systems. Long Beach: Neural Information Processing Systems Foundation, 2017, 1024–1034
- 86 Gao H, Wang Z, Ji S. Large-scale learnable graph convolutional networks. In: Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York: ACM, 2018, 1416–1424

Graph neural network

Bo Bai, Yuting Liu, Chicheng Ma, Guanghui Wang, Guiying Yan, Kai Yan, Ming Zhang & Zhiheng Zhou

Abstract In recent years, with the emergence of massive data, graph structure data that can represent complex relationships between objects has received more and more attention and has brought great challenges to existing algorithms. As a deep topology information can be revealed, graph neural network models have been widely used in many fields such as communication, life sciences, and finance. This paper reviews the basic models, algorithms, applications and recent developments of existing graph neural networks in recent years, and proposes problems for further research.

Keywords graph structure data, graph neural networks, spatial method, spectral method, GAE, GraphGAN, GraphRNN

MSC(2010) 68T99, 97M10

doi: 10.1360/N012019-00133