

## 作业7: GNN(2)

- 以下A、B、C三项作业任选其一(10分):
- **A-GNN的Message-passing机制实验分析**
- 不同GNN模型的最关键差别在于Message-passing机制; 请严格控制变量进行实验, 回答问题: **新的GNN模型是否提升了实际任务的性能?**
- 基本要求(9分):自行设计实验, 确定网络超参数, **严格控制变量**, 分析对比**GCN、GAT、GIN**三个模型在**Cora上点分类**的性能差异 (可以直接调用PyG的相关函数和方法);
- 加分(任选, 最多1分): 更多模型(任何其他GNN架构)、更多数据和任务(如图分类)、更多分析(时间、内存效率等)。

# 作业7: GNN(2)

- **B-GNN的Over-smoothing分析**
- Over-Smoothing是现今GNN遇到的最大挑战之一；请进行实际实验，**验证GNN存在Over-Smoothing现象，并验证诸多提出的方法能否实际解决该问题。**
- 可参考论文[<https://arxiv.org/pdf/2303.10993>];
- 基本要求(9分): 自行设计实验，**严格控制变量，验证Over-Smoothing现象的存在，验证以下方法是否减轻了Over-Smoothing**: 正则化(Bath normalization、Dropout), GNN层内与层间的残差链接;
- 加分(任选, 最多1分): 验证更多方法(如基于拓扑的方法 <https://ojs.aaai.org/index.php/AAAI/article/download/5747/5603>)、更多Over-smoothing指标、更多基准模型等。

# 作业7: GNN(2)

- **C-GNN与图Transformer的比较分析:**
- 2021年开始, 领域逐渐关注图Transformer起来; 请进行实验, 验证**图Transformer是否强于GNN模型?**
- 可参考Survey论文[<https://arxiv.org/pdf/2202.08455>]
- 基本要求(9分): 自行设计实验, **严格控制变量**, 在**Cora的点分类和zinc回归**(`torch_geometric.datasets.ZINC`)数据集上对比**GCN与Graphormer模型**(<https://github.com/microsoft/Graphormer>)的**性能和训练效率**(时间和内存占用);
- 加分(任选, 最多1分): 更多的Graph Transformer模型、更多数据集与任务、更多实验分析等。