**内容概述：**

1. COFs高阶网络构造
   1. 针对COFs构造了三个层次的周期图结构——原子周期图、原子簇周期图、底层网络（同样为周期图）
   2. 写好了读取基础的cif文件并构建三种图的代码
   3. 随机抽取了十几个COF验证最后构建出来的结果是否正确

**具体内容：**

1. COFs高阶网络构造
   1. 三个层次的周期图结构设计方案以及意图

主要目标：现有的基于原子层面的周期图来预测COFs或MOFs的属性存在一定的缺陷，COFs属性预测是一个图嵌入的问题，采用cgcnn处理原子层面的周期图最后得到整体结构的特征是通过一个简单的readout函数。对于COFs或MOFs一类材料，他们的底层网络中所蕴含的整体上的几何特征并没有得到充分的利用，以往的实验已经说明了COFs或MOFs的几何特征和化学组成成分对于气体吸附属性都有很大的影响。

原子层面的周期图将原子作为周期图中的点，化学键作为边，并且为每一个边增加一个offset属性来存储目标节点所处晶格的偏移量。（由于晶格外原子与晶格内原子可以形成化学键）通过在原子层面的周期图上进行消息传递，能够提取到和化学组成成分相关的特征。

当采用某种规则去搜索COF中的反应位点，并拆开反应位点，剩余的部分分别缩合为一个超级节点，并且将任意两个超级节点中包含相同的原子连一条边，我们就可以得到一个粗粒度的周期图。每个超级节点的初始特征是其包含的所有节点的特征聚合后的结果，我们可以认为每个超级节点的初始特征向量包含了自身相关的化学组成成分的特征。然后我们可以对这个粗粒度的周期图进行**两次消息传递**，使每个超级节点能够提取到一个小范围的化学组成成分特征。

通过在原子层面的周期图进行消息传递和粗粒度图进行消息传递，现在每一个超级节点上能够提取到与小范围内化学组成成分相关的特征。现在我们还需要提取COFs的几何特征，这个我们可以进一步对粗粒度的周期图进行简化就可以得到底层网络了。通过将粗粒度的周期图中所有出度为2的点转换为一条边，最后我们就可以得到底层网络了。由于第二步在粗粒度的周期图上进行了消息传递，所以简化后得到的底层网络上的节点的初始特征已经包含了被转化为边的超级节点的特征。底层网络是用来表示COFs整体空间结构的周期图，我们在底层网络上进行消息传递，由于底层网络中的节点数往往是少量的，我们可以通过一个简单的readout得到COFs的表示。

通过提取上述三种图的信息，COFs最终的表示或许即包含了化学组成成分信息又包含了几何特征。在各类目标属性预测的下游任务中或许可以取得更好的效果。

下周任务：

1. 继续验证得到的三种图结构的正确性，再试试其他数据库中的结构
2. 做一个实验，对cgcnn得到的表示再cat一下几何描述符，看看对于气体吸附任务会不会又性能提升。
3. 需要对cgcnn代码进行更改，因为后续将之传入节点的坐标，所以边的计算将会是实时的。