



東南大學

# 本科毕业设计（论文）开题报告

毕业设计                      基于 Transformer 的图分类研  
(论文) 题目                      究

---

学      号:	71118415
姓      名:	叶宏庭
学      院:	软件学院
专      业:	软件工程
指导教师:	孔佑勇
开题日期:	2022 年 2 月 15 日

### 一、选题背景和意义：

图数据 (graph data) 广泛地存在于我们的生活中，用于表示复合对象元素之间的复杂关系。例如社交网络，引文网络，生物化学网络，交通网络等。不同于结构规则的欧式数据，图数据的结构复杂，蕴含着丰富的信息。近年来，对图数据的研究是学术界的一个热点。图上的研究问题包括节点分类，图分类，链路预测等，本课题主要关注图分类问题。给定一组图，图分类的目标是学习图和对应该类别标签的映射关系，并预测未知图的类别标签。图分类是一个重要的数据挖掘任务，可以应用在很多领域，例如化学信息学中，通过对分子图进行分类来判断化合物分子的诱变性、毒性、抗癌活性等；生物信息学中，通过蛋白质网络分类判断蛋白质是不是酶，是不是具有对某种疾病的治疗能力。从这个角度来看，图分类研究具有非常重要的意义。

近年来，由于图结构的强大表现力，用机器学习方法分析图的研究越来越受到重视。图神经网络 (GNN) 是一类基于深度学习的处理图域信息的方法。由于其较好的性能和可解释性，GNN 最近已成为一种广泛应用的图分析方法。

Transformer 是现代深度学习技术体系中一股强大的力量。Transformer 的应用十分广泛，它在语言理解、图像处理等诸多领域中都产生了巨大的影响。因此，在过去的几年中，自然而然地有大量的研究工作致力于对该模型进行基础性的改进。这种广泛的研究兴趣也催生了对更加高效的 Transformer 模型变体的研究。

因此，将 Transformer 模型用于图分类研究上，也一定会有很好的预期效果。

### 二、课题关键问题及难点：

本课题涉及到在 CV 和 NLP 领域中的 Transformer 迁移到图分类任务中的设计与实现。对于没有深度学习基础尤其是没有图神经网络基础的学生来说是比较困难的，需要学生对深度学习模型的设计与实现有比较浓厚的兴趣和自学能力。因此，该课题对于学生来说具有一定的难度和很好的锻炼能力。

虽然该课题内容学生在本科的学习和教学内容中可能没有接触过，但是深度学习包括 Transformer 等知识已经是研究生企业中应用非常广泛的内容了。通过日常对深度学习的了解以及从本科学习过的课程或者是 SRTP 的项目中都可以获得一定的基础。且 Transformer 在处理各类任务的相关知识也比较成熟，因此，虽然课题具有一定的难度，但是实现可行性也是非常充分的。

注：开题报告可单独装订，但在院（系）范围内，封面和装订格式必须统一。

### 三、文献综述（或调研报告）：

目前来看，图分类的研究方法主要包含基于图核的方法、基于图匹配的方法以及基于图深度学习的方法。三种方法又可以分为两大类。第一类是基于相似度计算的图分类方法，此类图分类方法是通过成对图相似度的计算对图进行分类，包括图核方法和图匹配方法。其中，图核方法计算图的相似度时主要是依据图核的定义，是常见的传统图分类方法。过去的很多年中已经有多种基于图核的分类方法被提出，它们都存在一个思想是将图分解成某种子结构，通过对比不同图上的这种子结构来计算图的相似度再进一步进行图分类。基于图匹配方法的图分类方法，在计算图之间的相似度分数时则是通过考虑一些跨图的因素，在由分数进而对图分类。早期的图分类问题关注点主要在于图核方法，然而这种方法缺乏灵活性且通常计算开销较大，图的特征提取过程和图的分类是彼此独立进行的，因此无法在具体任务中进行良好的优化。第二类是基于图神经网络的图分类方法。近年来，随着深度学习在图像、文本等领域的成功，研究人员开始更多地关注用深度学习方法建模图数据。基于深度学习的图数据建模方法也逐渐被应用于图分类问题。尽管近期已有大量的基于图神经网络的方法应用于图分类任务，但这个领域仍然存在许多问题和挑战，例如领域内不同模型的实验设置不同导致的复现困难；有些模型在特定数据集上表现较好，但模型泛化能力有限；此外，图分类任务中对图结构信息的利用也是一个挑战。

自 2017 年 6 月谷歌发布论文《Attention is All You Need》后，Transformer 模型架构为 NLP 领域的研究带来了很大的飞跃。目前来看，Transformer 已经成为自然语言处理领域的主流模型，基于 Transformer 的预训练语言模型更是成为主流。随着时间的推移，Transformer 还开始了向其他领域的跨界。得益于深度学习的发展，Transformer 在计算机视觉（CV）和音频处理等许多人工智能领域也取得了很多卓越的成果，成功地引来了学界和业界研究人员的关注目光。更是在 2021 年的 OGB-LSC 竞赛中，来自 MSRA 机器学习组的研究员和实习生们直接使用 Transformer 模型对分子图数据进行处理，并力压 DeepMind、百度、阿里巴巴蚂蚁金服等强劲对手，取得第一名的佳绩。在大连理工大学，普林斯顿大学，北京大学及微软亚洲研究院最新的论文《Do Transformers Really Perform Bad for Graph Representation?》中，研究人员们证明了 Transformer 实际上是表达能力更强的图神经网络，并且主流的图神经网络模型（GCN，GIN，GraphSage）可以看作是 Transformer 的特例。将 Transformer 成功应用于图数据的关键难点在于如何补回 Transformer 模型的自注意力层丢失掉的图结构信息，不同于序列数据（NLP，Speech）或网格数据（CV），图的结构信息是图数据特有的属性，且对图的性质预测起着重要的作用。将 Transformer 模型应用到图数据时，其最主要的运算集中在自注意力层计算节点特征之间的相关性作为注意力机制的权重。对于图数据来说，衡量节点之间相关性的因素并不仅仅取决于节点特征，还包括了节点自身在图结构中的重要性（如社交网络中的名人节点），节点之间的空间关系（如六度空间理论）以及节点之间连边的特征（如边的距离、边的流量等）。

#### 参考文献：

- [1] Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[J]. arXiv preprint arXiv:1609.02907, 2016.
- [2] Veličković P, Cucurull G, Casanova A, et al. Graph attention networks[J]. arXiv preprint arXiv:1710.10903, 2017.
- [3] Xu K, Hu W, Leskovec J, et al. How powerful are graph neural networks?[J]. arXiv preprint arXiv:1810.00826, 2018.
- [4] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need[C]//Advances in neural information processing systems. 2017: 5998-6008.

- [5] Ying C, Cai T, Luo S, et al. Do Transformers Really Perform Bad for Graph Representation?[J]. arXiv preprint arXiv:2106.05234, 2021.
- [6] Yun S, Jeong M, Kim R, et al. Graph transformer networks[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2019, 32: 11983–11993.
- [7] Mialon G, Chen D, Selosse M, et al. GraphiT: Encoding Graph Structure in Transformers[J]. arXiv preprint arXiv:2106.05667, 2021.

#### 四、方案（设计方案、或研究方案、研制方案）论证：

该毕设需要设计并实现一个基于 Transformer 的图分类模型。

第一，需学习数据结构里图论（Graph）的相关知识，深刻理解图结构数据的特点，掌握“图”的基本表示形式，如邻接矩阵等。

第二，需学习深度学习（Deep Learning）的相关概念以及图神经网络（Graph Neural Network）的相关知识及最新进展，并深入理解深度学习的一些基本流程，如反向传播，梯度下降等。

第三，需要针对图结构数据的特点，设计并实现一个用于解决图分类任务的模型。不同于图像等欧几里得域的数据，图具有不规则性，且现实世界中的很多图数据都具有两个属性，即图的拓扑结构和图中每一个节点的特征。为了解决现有的图分类模型没有充分利用图的拓扑结构信息的问题，为此需要提出一种基于图 Transformer 的图分类模型，旨在充分利用图的节点属性和拓扑结构信息建立图分类模型，更好地完成图分类任务。

第四，需要指出现有的图神经网络在解决图分类任务中的不足之处，针对现有的问题指明 Transformer 在解决图分类问题的优势之处。

第五，需要将设计与实现的基于 Transformer 的图分类模型与现在的主流图分类模型（图卷积网络（GCN），图注意力网络（GAT），图同构网络（GIN）等）进行比较，表明所提出方法的优越性。

第六，需要将该模型的设计、实现、实验、调优过程整理成文，记录此次毕设的全部过程。

#### 五、进度安排：

2022. 01. 15-2022. 02. 15 学习关于 Transformer 和图神经网络的相关知识

2022. 02. 15-2022. 03. 01 完成模型的初步调研与设计

2022. 03. 01-2022. 03. 20 自主完成模型的详细设计以及实验

2022. 03. 20-2022. 04. 25 自主完成模型的对比实验, 参数实验, 消融实验以及参数调优, 完成论文的撰写