

**本科毕业设计（论文）任务书**

|  |  |
| --- | --- |
| 毕业设计 | 基于Transformer的图分类研究 |
| （论文）题目 | 基于Transformer的图分类研究 |

|  |  |
| --- | --- |
| 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 |
| 发任务书日期： | 2022.1.6 |

毕业设计（论文）任务的内容和要求

（包括任务内容、原始条件及数据、技术要求、工作要求等）

**任务内容（不少于100字）**

该毕设需要设计并实现一个基于Transformer的图分类模型。

1. 学生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。
2. 学生需学习深度学习（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。
3. 学生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，学生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。
4. 学生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。
5. 学生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。
6. 学生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。

**原始条件及数据**

1. 该课题采用的数据集为目前开源的多个图分类研究相关数据集。(包括NCI1、NCI109、Open Graph Benchmark等)
2. 该课题主要涉及到计算机显卡的设备，而目前计算机学院影像实验室已经具备多台可供学生使用的GPU实验主机，故设备条件已达成。该课题的GPU以及Transformer的相关知识，将由我（孔佑勇）进行相关辅导。

**技术要求**

1. 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。
2. 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。

**工作要求**

1. 学生具有积极主动的学习态度，能够主动去学习有关机器学习，深度学习等相关内容，并且能够对学习掌握各种图神经网络的理论知识。
2. 学生要具有较强的实践能力，对于学习的理论知识，能够采用代码实现，数据集练习等方式，来进行有意义的实践，加强对图神经网络的理解与应用。

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

附：普适工作要求：（如针对本课题另有特别规定的工作要求，请填于上面空白栏）

1、在深刻领会任务内容及要求的基础上，通过查阅文献资料、调查研究和方案论证，写出开题报告。然后开展实验研究、理论研究、设计、研制、开发以及数据处理、分析总结、资料整理等与任务书要求相应的工作，并撰写成毕业论文或设计说明书，独立地完成毕业设计的各项任务；

2、查找有关专业文献（10篇以上）；

3、毕业论文或设计说明书需符合规范化要求，即：由中外文题名、目录、中外文摘要、引言（前言）、正文、结论、谢辞、参考文献和附录组成，中文摘要在400汉字左右，外文摘要在250个实词左右，中文题名字数一般不超过20个，设计说明书、论文或软件说明书的总字数在1.5~2万汉字（文、管等学科可根据具体情况，另行规定总字数，报教务处备案）。

学生应提交的软硬件的名称、内容及主要的技术指标（可按以下类型选择填写）：**注：此处若提出了软硬件要求，学生最后需要提交相应的软硬件验收表。**

þ计算机软件：

\_能够准确运行的图分类代码一份\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

□图纸（名称、图幅、张数）：

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

□电路板：

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_□机电装置：

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_□新材料、新制剂：

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_□结构模型：

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_□其它：

应提交的其它文档：

1、开题报告一份

2、与设计（论文）相关的英文资料译文一份（中文字数>5000字，并附保留阅读痕迹的资料原文）

参考文献（至少五篇，含供学生翻译的英文资料，按规范开列）：

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.

**毕业设计（论文）进度安排**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 起止日期 | 工作内容 | 备 注 |
| 2022.01.15-2022.02.15 | 学生学习关于Transformer和图神经网络的相关知识 |  |
| 2022.02.15-2022.03.01 | 学生完成模型的初步调研与设计 |  |
| 2022.03.01-2022.03.20 | 学生自主完成模型的详细设计以及实验 |  |
| 2022.03.20-2022.04.25 | 学生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 |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

注：只需按阶段作出安排，更细的安排应由学生自己在开题报告中作出。