**课题名称：**基于Transformer的图分类研究

**课题性质：**？？？

**课题来源：**科研

**课题类型：**？？？

**课题归属：**？？？

**是否卓越课题：**否

**毕业设计起讫时间：**2022.01.15-2022.05.01

**毕业设计工作地点：**东南大学九龙湖校区校内

**课题具体任务：**

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。

**课题难易程度及作为毕业设计（论文）选题的可行性：**

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。

**已具备的条件（经费、设备及指导人）和存在的困难：**

1. 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。
2. 该课题具有一定的创新性，但Transformer已经具有比较多的理论基础, 具有一定的可供参考的论文资料, 因此学生可以通过阅读文献解决设计与实现过程中遇到的问题。

**教学要求与工作计划：**

1）2022.01.15-2022.02.15。指导学生关于Transformer和图神经网络的相关知识。

2）2022.02.15-2022.03.01。辅导学生完成模型的初步调研与设计。

3）2022.03.01-2022.03.20。学生自主完成模型的详细设计以及实验。

4）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。

**备注：**

无

题名：基于Transformer的图分类研究

简介：图分类是机器学习和数据挖掘中被广泛研究的问题，并在计算机视觉，生物科学、神经科学等领域具有广泛的应用。例如，给定一个蛋白质的分子图，判断这个蛋白质是否是非酶的。给定一个化合物，判断化合物是诱变剂还是非诱变剂。近年来，图神经网络(GNNs)被广泛用于解决图分类问题。大多数的图神经网络模型采用迭代邻域聚合的方案来更新节点表示，但是在这个过程中却忽略了从图的拓扑结构域中产生的特征。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，本次毕设课题希望提出一种基于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。

需求：对于与图分类任务，现有的方法通常对图的节点表示应用一些置换不变读出函数来生成整个图的表示。常见的读出函数将每个图视为一组顶点表示，因此会忽略顶点之间的交互，即图的结构信息。由于图结构与特征信息结合带来的透明性不足，图的拓扑结构信息是否被编码到生成的图表示中还不清楚。因此，在本课题中，我们希望提出一种新的基于Transformer的图分类模型。该模型会学习编码图的拓扑结构信息，将图的结构信息有效编码到模型中用于分类使用。

参考与指导：

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.