前言

Tutorial 内容涵盖从 AI 入门到科研基础,带领你从零开始独立完成科研任务,全面体验完整的科研流程。实验室拥有多样化的研究方向,一定能找到符合你兴趣的领域。 (近期组内的研究主力在于大模型时代下的图学习)现有的研究方向已在实验室内打下了坚实的基础,并配备丰富的计算资源。此外,老师和学长学姐们会随时提供答疑和指导。加入实验室没有年级和专业的限制,任何人都可以参与♀♀♀♀

本科生科研主要培养目标,你将收获以下内容:

- 1. 了解人工智能基础知识,读懂前沿算法代码,学会运用前沿技术解决问题
- 2. 掌握科研基本流程,锻炼严谨的科研思维,熟练运用各类科研工具和文献技巧
- 3. 探索创新性 Idea 并实现,在人工智能顶级会议上发表论文,参与国内外学术会议交流学习
- 4. 转换科研项目成果(国家级大创),斩获各种竞赛奖项,大厂名组访问实习

本次培训时长大约为一个月,希望能在培训任务的指引下,带领你掌握以下内容:

- 深度学习/机器学习的基本原理:数据集,模型,训练原理等;重点掌握图机器 学习方向的热点研究领域;
- 图机器学习:了解图机器学习的基本原理和当前热门的研究方向,能够实现简单、基本的图学习任务训练及测试 Pipeline (节点分类、链路预测等...)
- 代码基本功:对 Python、PyTorch、PyG 有基本的了解,清楚 Anaconda 的作用,能使用 Linux 系统的远程服务器进行深度学习任务;能在给出 GitHub 仓库的情况下,根据论文内容跑通代码;能对已有代码进行改进;
- 科研基础:了解什么是 arXiv、Overleaf、如何进行文献管理和阅读 (Zotero)、如何做文献笔记和论文调研报告;
- 基本的 PPT 制作技能:可以考虑使用 Powerpoint,或者 LaTeX 的 Beamer 包完成汇报 PPT 的制作

入门培训内容(主要考核是否对科研有兴趣,愿意投入)

- 1. 深度学习的基本原理和代码功底(两周左右):
 - 参考<u>李宏毅的机器学习课程</u>,学习机器学习、深度学习的基本原理:只需学习 P1-5, P7-8, P12-16, P18-19, P30-31,其余课程目前不用学习。
 - 参考<u>斯坦福CS224W</u>,学习图机器学习的基本原理:只需学习 1. Introduction, 2. Node embeddings, 3. Graph neural networks, 4. A general perspective on GNNs, 6. Theory of GNNs, 14. Graph Transformers, 15. Scaling to large graphs,其余暂时不用学习。
 - 代码能力:
 - 搭建本地代码开发环境,强烈推荐使用 VSCode + Anaconda 对 Python 虚拟环境进行管理,可以参考配置教程。
 - 如果对Python语言没有太多了解,可以先学习Python基础教程,也可以学习https://cs231n.github.io/python-numpy-tutorial/和Jupyter Notebook教程。对Linux不熟练的,学习Linux基础教程。对Git不熟悉的,学习一小时Git教程。
 - PyTorch 是基于 Python 实现深度学习的最常用工具包,建议在掌握深度学习的基本原理,听(看)完了李宏毅老师(斯坦福大学 slides)课程的基础上,学习PyTorch官方文档给出的教程和几个 示例。同时,强烈推荐学习小土堆的教程(如果想快点上手,重点推荐这个教程)。
 - PyG 是 PyTorch 专为图学习所开发的工具包,重点在于掌握基本功能,推荐学习PyTorch Geometric 教程(不断更新中) 知 <u>乎 (zhihu.com)</u>
 - 在有了上述深度学习原理和代码基础的前提下,对图机器学习的代码进行深入学习:图神经网络(GNN)最简单全面原理与代码实现_gnn基本原理-CSDN博客(重点关注节点分类的代码实现,教程中的模型示例为 GCN,对应论文:ICLR'17 GCN,经由 PyG 封装前的原始代码:PyTorch-GCN),同时强烈建议完成斯坦福CS224W课程对应的 Colab,参考答案:CS224W-Colab。
 - 对LaTeX不熟悉的同学请学习LaTeX基础教程。
- 2. 科研基础(1天左右):通过网络搜索
 - 了解什么是 arXiv、什么是 Overleaf;
 - 了解如何进行文献管理和阅读、如何做文献笔记和论文调研报告;
 - 了解 PapersWithCode, Google Scholar, Zotero;
 - 了解 BibTeX,知道参考文献的几种写法和格式;
 - 了解计算机领域发表学术论文的会议和期刊评级机制 CCF-A/B/C(区别于传统的 SCI 分区)CCF推荐国际学术刊物目录-中国计算机学会,重点关注以下分类:网络与信息安全、数据库/数据挖掘/内容检索、人工智能、交叉/综合/新兴。

- 3. 文献阅读(两周左右):这部分主要是为你打下 AI 的研究基础。需要阅读一些相关领域的经典论文,复现其中的一些未来常用的方法论文,并完成一份学习报告,为自己未来在研究生期间的工作打下坚实的基础。
 - 阅读报告的内容包括但不限于:
 - 第一章:概念学习。内容应当简明扼要,主要谈理解(所选择方向的研究动机,基本流程,重要概念),拒绝从网上直接复制粘贴;这部分内容不超过5页,以组内方向之一联邦图学习为例;

联邦图学习:了解联邦图学习的基础概念,为什么有联邦图学习这个需求。辨析联邦图学习的类别、横向和纵向联邦图学习。了解不同联邦图学习基础的训练流程,思考以下问题:客户端本地如何更新?是否有中心服务器?服务器的作用是什么?客户端上传到服务器或者互相通信的内容(模型、特征等..)?

第二章:文献阅读报告(注意,为了避免形式主义的任务式阅读,有个小提醒:该部分的本质是为了提高你深入阅读论文的能力,提高你对方法抽象概念的理解,一些技术细节可以不用钻牛角尖,重点还是论文背景和问题定义、论文动机和贡献解读)。

建议根据不同的研究方向阅读以下给出的全部论文(见本入门培训最后),并在所给文章中按个人喜好挑选 3 篇撰写阅读报告,建议选择较新的文献。

- 阅读报告的内容应包括:论文标题、作者单位、论文背景和问题、论文动机和贡献解读、方案设计详细分析、实验效果及其分析、结论、自己的思考等。
- 撰写阅读报告时可以参考原论文、网络解读(博客、知乎专栏等)、跟进本论文的工作等。(注意:某些较为老旧的论文原文可能在 Introduction 和 Method 部分的写作较为晦涩,经常会出现难以理解的公式、符号等,此时不用灰心,完全可以依靠网络博客、视频等的解读来学习这部分的内容)这部分内容页数不限;
- 注意:重点关注论文的背景、问题、动机、方法部分,实验部分适当取舍阅读,思考部分随意写一点自己真实的想法就可以(没必要上GPT来完成)
- 第三章:代码复现报告。你需要在选择的方向的中挑选任意 2 篇文献(参考 4 给出的文献),根据他们给出的 GitHub 仓库跑通代码,提供跑通训练 pipeline 到 test 的完整流程,并对比其是否和原文中的结果吻合。建议选择最新的文献完成代码复现。

- 第四章:文献 PPT 报告。你需要任意挑选一个方向,挑选其中 2 篇论文(独立于文献阅读报告中的 3 篇论文)做一个PPT对这两篇论文进行展示。阅读和展示考核文献时,你尤其需要思考:本文的创新点在哪里?未来是否还有能继续研究的空间?你的思考是什么?
- 第五章:未来展望(随意写一点真实感悟就好)。你需要在本文的全部内容的基础上,展现你在考核期间学习到的内容、所学内容的自我思考和未来展望,阐述自己在考核期间的心得和收获,并对考核任务的难度、平滑度进行点评和提出建议,同时阐明自己在研究生期间的学习目标和感兴趣的研究方向。

重要提醒:在你看论文的时候,可能会看到一些复杂公式不好理解,容易望而生畏, 这里有一些经验建议:

- 1. 跳过公式,理解算法核心,做概念抽象的理解
- 2. 结合知乎或者优秀帖子看,先用中文和别人嚼碎的,会好接受一点
- 3. 结合代码跑着(断点调试),理解抓住数据 input 和 output,数据在整个 model 是如何流动的(forward)(关注matrix shape)
- 4. 文献调研报告的格式提示(尽量完成就好,也是规范日后学术PPT的标准):
 - 推荐一级标题四号字体,二级标题和正文部分都用小四;
 - 中文一律使用微软雅黑,英文部分使用Times New Roman字体;
 - 图片、表格需要有标题。涉及到参考文献的需要设置交叉引用;
 - 可以使用Word,也可以使用LaTeX,以文档美观、易于阅读为最终目标。提交的报告文件必须是PDF格式;
 - 报告应图文并茂、排版美观;代码部分建议截图,无需粘贴代码,以美观为重。
- 5. PPT格式提示:
 - PPT可以用中文或英文制作;
 - 不允许设置动画,导出为PDF格式;
 - 中文一律使用微软雅黑,英文部分使用Times New Roman字体;
 - 图片、表格需要有标题。涉及到参考文献的需要设置交叉引用;参考文献放在本页PPT的最下方;
 - 可以使用Powerpoint,也可以使用LaTeX,以文档排版美观、易于阅读为最终目标。提交的报告文件必须是PDF格式。

友情提示:这个不是任务,与其说是考核,不如说是我们更想让你更加深入理解科研的组成部分,明白如何进入到科研的模式中。我们不希望出现为了应付大作业式 GPT 的思考,你的内容可以具体或者天马行空,但不要泛泛而谈。字数、内容都不作为好坏的标准,我们希望能够这个过程让你真正提升的,不仅知识水平,还有自学能力。

- 联邦学习:了解联邦学习背景、概念;了解并辨析横向联邦学习和纵向联邦学习的区别;了解 Global 和 Personalized 联邦学习的区别和联系;了解最基本的联邦学习 baseline:FedAvg,并且跑通一个demo,了解一些常用Framework (FATE、FedML)(了解一下就可以,不用跑)。了解联邦学习中的通信、隐私保护、数据结构等(不是重点)。了解联邦学习中一些常用算法:FedProx、SCAFFOLD、FedBN,了解一些常用改进模型性能的手段:MOON、FedProto、kNN-Per、FCCL。了解组里的通用联邦学习框架。附:联邦学习资源List。
- 如果对其他方向感兴趣,比如:大语言模型时代下的图学习,强烈推荐阅读高质量的综述论文:IJCAl'24 From CUHK、KDD'24 From HKU,同时可以自行发挥,查询相关资料(可以来源于论文、Talk、知乎、微信公众号、bilibili等常见媒介),按对等要求完成。

图学习基础 (无论选择哪一研究方向,以下论文必读)

- 1. ICLR'17 GCN
- 2. NeurlPS'17 GraphSAGE
- 3. ICLR'18 GAT
- 4. ICML'19 SGC
- 5. ICML'20 GCNII

方向一:以数据为中心(Data-centric)的新型图神经网络架构和学习范式

高阶图数据:有向图、符号图、超图等...(二部图、时序图)

数据挑战:

● 数据质量:不平衡、噪音、分布外;

● 数据数量:标注、增强;

数据效率:蒸馏、压缩、选择;

● 数据隐私:遗忘、差分隐私

学习范式:

- 面向大规模数据的可扩展图学习;
- 提升数据效率的主动学习;
- 数据动态更新的持续学习;
- 数据噪音或稀疏环境下的鲁棒图学习等...

无向图:

- 1. ICLR'17 GCN
- 2. **ICLR'18 GAT**

有向图:

- 1. NeurIPS'21 MagNet
- 2. LoG'24 Dir-GNN
- 3. VLDB'24 LightDiC
- 4. ICDE'24 ADPA

符号图:

- 5. AAAI'20 SNEA
- 6. KDD'21 GS-GNN
- 7. WWW'23 RSGNN

超图:

- **8. AAAI'19 HGNN**
- 9. ICLR'22 AllSet
- 10. KDD'24 DPHGNN
- 11. ICLR'24 LightHGNN

方向二:分布式联邦图学习

- 1. AISTATS'17 FedAvg
- 2. NeurIPS'21 FedSage
- 3. AAAI'22 FedProto
- 4. ICML'23 FedPub
- 5. VLDB'23 FedGTA
- 6. ICDE'24 AdaFGL
- 7. IJCAI'24 FedTAD

方向三:注重隐私保护的图遗忘学习

- 1. CCS'22 GraphEraser
- 2. AISTATS'23 Projector
- 3. USENIX'23 GUIDE
- 4. ICLR'23 GNNDelete
- 5. ICLR'23 CGU
- 6. WWW'23 GIF
- 7. AAAI'24 MEGU

方向四:大语言模型时代下的图学习

- 1. ICLR'23 GLEM
- 2. SIGIR'23 G2P2
- 3. SIGIR'24 GraphGPT
- 4. ICLR'24 OFA
- 5. <u>ICLR'24 TAPE</u>
- 6. IJCAI'24 ENGINE
- 7. WWW'24 GraphAdapter
- 8. WWW'24 GraphTranslator