

毕业设计(论文)开题报告

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 课题名称 | 面向复杂工程产品的大规模图网络优化技术 | | |
| 副标题 |  | | |
| 学 院 | 软件学院 | | |
| 专 业 | 软件工程 | | |
| 学生姓名 | 吴渭 | 学 号 | 1951574 |
|  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 2023 | 年 | 3 | 月 | 14 | 日 |

1. 毕业设计（论文）课题背景（含文献综述）

1.1复杂工艺产品的形状表征

基于CAE（计算机辅助工程）[1]和CAD（计算机辅助设计）的有限元分析是一种常用的工程设计和分析方法，它利用计算机模拟技术对复杂结构的工程产品进行分析和优化。该方法首先通过CAD软件对工程产品进行建模和设计，然后使用CAE软件对模型进行网格划分，并根据材料性质、边界条件和载荷等因素设置有限元模型，最终对模型进行求解，得到应力、应变、位移等工程参数，从而进行设计和优化。

但随着工程问题逐渐复杂化，传统的基于有限元法与有限体积法的传统 CAE 仿真方法越来越难以满足工程实践过程中对于效率与质量兼顾的要求，因此将深度学习与工程仿真相结合已经成为了进一步提高工 程产品研发效率的重要发展方向之一。工程仿真模型通常基于一些理论假设和经验公式建立，并运用数值方法进行模拟，在面向复杂场景时往往计算速度较慢且模型精度不佳；而深度学习可以通过学习大量数据来训练模型，提高模型的精度和预测能力，并提高仿真速度。

工程实践中使用的 CAE 数据一般为三维数据，而目前针对三维形状的表达识别任务，主要基于以下四种数据类型：体素（Voxel）、点云（Point Cloud）、多视图（Multi-View）、网格（Mesh）。

* + 1. 基于体素的方法

基于体素的方法将三维空间划分为小的体素（立方体），并将每个体素视为一个数据点，然后使用卷积神经网络（CNN）等深度学习模型对其进行处理。相较于点云和网格数据，体素数据的处理相对更为直观简单。体素数据可以较为容易地进行前处理和后处理，同时在三维物体的表示中不需要考虑拓扑关系，更易于进行深度学习模型的建模和优化。

Wu 等人提出的 3DShapeNets[3]将深度图数据转化为体素数据，而后在体素数据上基于三维卷积神经网络进行分类与检索。但体素数据缺乏几何信息，难以捕捉到物体的几何形状和细节信息，且受限于分辨率和物体形状，在面对高分辨率的不规则数据时，要耗费大量额外的计算和存储开销。

* + 1. 基于点云的方法

点云是由一系列离散的点组成的三维空间中的数据结构，与基于网格或体素的深度学习方法不同，点云数据没有固定的拓扑结构和坐标系统。因此，基于点云的深度学习方法需要处理点云数据的不规则性和不完整性，并将点云数据转换为可以输入深度学习模型的特征表示。Qi 等人提出了 PointNet[4]，对点云数据进行全局特征提取，即不考虑点云中点之间的关系，而是对每个点单独提取特征。PointNet的全局特征提取方法不受点云中点的排列顺序的影响，具有旋转不变性和置换不变性。但该算法仅考虑了每个点的局部信息，对点云中点之间的关系没有进行建模，因此在处理一些具有结构信息的点云任务时可能效果不佳。其次，PointNet算法的性能也受限于对点云的采样和预处理方式

* + 1. 基于多视图的方法

基于多视图的深度学习方法主要是利用多张不同视角的图像来进行建模和识别，可以有效地利用图像中不同角度提供的信息，从而提高模型的准确性。Su 等人提出了多视图卷积神经网络 MVCNN[5]，基于卷积神经网络（CNN）并使用多个二维视角作为输入。该方法使用不同的视角来生成不同的图像，然后使用每个图像的CNN模块提取特征，最后将这些特征融合在一起进行分类或回归等任务。但基于多视图的方法依赖于手工设计的多视角投影方式，针对不同的采样方法，面临着对齐和配准问题，需要大量的人工干预和计算资源。

* + 1. 基于网格的方法

三维网格数据是顶点、边和面的无序集合，相较于其他的数据类型，它能提供准确的几何结构信息，同时也具有良好的可视化效果。此外，网格还支持自适应表示，能够通过模型特征动态地调整局部分辨率，以获得更好的拟合效果。但是，在处理复杂的几何形状时，需要使用更高阶的网格结构，这会导致更多的计算和存储开销；并且，由于传统的卷积神经网络（GNN）仅适用于规则的欧氏空间，而难以推广到不规则的网格空间中[6]，故基于网格表示的深度学习方法在工程问题并未受到太多重视。

1.2基于图神经网络的大规模图优化技术

现有的基于深度学习技术的复杂工艺产品仿真场景中，往往使用图神经网络对高维数据进行建模。GNN将图中的节点和边视作输入信号，对其进行特征提取和表示学习，以便进行下游任务，如节点分类、图分类、链路预测等。相较于传统的深度学习方法，GNN模型在处理图数据时能够保留图的拓扑结构和节点间的关系信息，从而更适合于处理图结构数。Thomas等人提出的GCN（Graph Convolutional Networks）[6]将卷积的思想融入图神经网络，通过对图拉普拉斯矩阵的特征分解得到图傅里叶变换的基函数，继而将空域中不规则的图表示转换为谱域中规则的特征向量的线性组合，以此实现对图神经网络的卷积操作，从而进行后续的特征提取与聚合任务。然而，传统的图神经网络在进行数据训练与预测时，依赖于全局的图邻接矩阵和特征矩阵，并以此进行图的特征分解。由于图的特征分解的时间复杂度近似于，在图节点数上千万的大型图中将耗费大量的计算时间和存储资源。为此，大量的工作聚焦于大型图的局部采样算法，用局部的特征采样来代替全局的特征表征，以期优化大型图训练任务的时间和空间复杂度。近年提出的采样算法按照采样层次，大致可分为节点采样、分层采样与子图采样三类[7]。

1.2.1 节点采样算法

节点采样算法往往从局部节点出发，按一定的采样策略，向邻域节点进行扩展，在降低图神经网络训练复杂度的同时，保留了图的局部结构信息。常见的节点采样算法有两种：Metropolis-Hastings采样算法和随机游走采样算法。Metropolis-Hastings采样算法是一种基于马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）的采样方法[8]，其思想是通过不断迭代，从一个节点移动到另一个节点，最终得到节点采样结果。随机游走采样算法则是一种基于随机游走的采样方法，其思想是从一个起始节点开始，沿着边随机游走，最终得到节点采样。

Hamilton等人提出的GraphSAGE[9]算法在图卷积神经网络的基础上，采用了随机游走的采样优化算法。GragpSAGE在每一轮迭代周期中，不断从当前节点出发，向周边的邻域节点扩展，并聚合形成邻域的特征表示。GraphSAGE算法能够较为准确地提取图中的局部特征信息，且因为无需对全局的拉普拉斯矩阵进行特征分解，该算法能够有效地推广到无监督学习中，并对未见节点进行训练，适用于图结构复杂且容易变化的应用场景，如社交网络。但逐层扩展的采样策略意味着采样节点数的指数级增长，在迭代次数较深时容易引起指数爆炸，进而影响训练效率。为此，VR-GCN (Chen et al, 2018d)[10]提出了一种基于控制变量的估计器。通过维护历轮迭代周期中采样节点的历史嵌入，来保持接受野的小范围，同时减小节点抽样的方差 。然而，该算法要求存储历史隐藏嵌入，将消耗大量的额外内存，这在大型图的训练中是得不偿失的。

1.2.2 分层采样算法

分层采样算法将节点划分为不同的层级，每一层级采样一部分节点作为下一层级的输入，并利用采样得到的节点信息进行模型训练。Chen等提出的FastGCN[11]基于图卷积神经网络和分层采样的思想。FastGCN通过节点的度数对其进行分层，在每层采样固定数量的节点，由此避免了领域扩展的问题。此外，FastGCN采用了对归一化邻接矩阵权重的重要性采样，对权重分布进行修正，使得每个邻接矩阵元素被采样的概率与其权重成正比，从而有效减小采样方差，提高模型性能。但是，由于FastGCN独立地对每一层进行采样，它无法捕获层之间的相关性，从而导致性能下降。为了更好地捕获层间相关性，ASGCN (Huang等人，2018)[12]提出了一种自适应分层采样策略。其中，下层的采样概率取决于上层的采样概率。ASGCN为了获得更好的层间相关性，仅从被采样节点的邻居中对节点进行抽样，而FastGCN利用所有节点之间的重要性抽样。

1.2.3 子图采样算法

子图采样算法的基本思想是从大图中抽样一个子图，将其输入神经网络中处理，以有效降低数据规模。Cluster-GCN (Chiang et al, 2019)[13]首次提出基于高效图聚类算法提取小图聚类。Cluster-GCN在子图层面构建小批量训练，每次迭代时仅从某子图的内部采样节点，从而避免了邻域扩展的问题。此外，作者提出了随机多分区方案，在迭代过程中随机地合并子图，以期捕获子图间的相关性。然而，Cluster-GCN可能会改变数据集的原始分布，并引入一些偏差，且采样质量高度依赖于聚类算法的性能。为此Zeng 提出了GraphSAINT[14]，该模型不使用聚类算法，而是引入了三个子图采样器结构来形成子图，分别是节点采样器、边缘采样器和随机游走采样器。此外，该算法还提出了损失归一化和聚集归一化来消除采样偏差。

1. 毕业设计（论文）方案介绍（主要内容）

2.1 基于图神经网络的学习网格仿真

传统的卷积神经网络难以训练不规则的网格结构，因此不适用于复杂的工艺产品训练场景。本研究将复杂的网络结构建模为高维图数据结构，旨在引入图卷积神经网络，对其进行数据降维和特征聚合。针对汽车模型的CAD模型数据，通过一定的建模策略得到其网格表示，并运用自适应的学习网格模型预测其风阻值。

2.2 面向复杂工艺产品的大规模图优化技术

基于上述物理仿真算法，本研究将进一步探索如何在大型图数据集上优化模型的收敛速度与预测质量。基于图卷积网络的架构，本研究将进一步引入邻域节点采样的策略，迭代地将局部特征进行聚合，同时与节点特征进行融合。此外，通过随机游走采样或重要性采样等方式，避免迭代次数较深时的领域扩展问题，实现图神经网络在大型图上训练的优化问题。

三、毕业设计（论文）的主要参考文献

1. 刘林，张瑞秋主编. 计算机辅助设计[M]. 广州：华南理工大学出版社, 2015: 1-11
2. 王自勤. 计算机辅助工程(CAE)技术及其应用[J]. 贵州工业大学学报：自然科学版, 2001, 30(4): 4.
3. Wu, Z., Song, S., Khosla, A., Yu, F., Zhang, L., Tang, X., and Xiao, J. 3D ShapeNets: A Deep Representation for Volumetric Shapes[J]. In Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2015: 1912–1920.
4. Qi, C. R., Su, H., Mo, K., and Guibas, L. J. PointNet: Deep Learning on Point Sets for 3D Classification and Segmentation[J]. In Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2017: 77–8
5. Qi C R, Su H, Nießner M, et al. Volumetric and multi-view cnns for object classification on 3d data[C]//Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2016: 5648-5656.
6. Kipf T N, Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[J]. arXiv preprint arXiv:1609.02907, 2016.
7. Chen M, Wei Z, Ding B, et al. Scalable graph neural networks via bidirectional propagation[J]. Advances in neural information processing systems, 2020, 33: 14556-14566.
8. Robert C, Casella G, Robert C P, et al. Metropolis–hastings algorithms[J]. Introducing Monte Carlo Methods with R, 2010: 167-197.
9. Hamilton W, Ying Z, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs[J]. Advances in neural information processing systems, 2017, 30.
10. Chen J, Zhu J, Song L. Stochastic training of graph convolutional networks with variance reduction[J]. arXiv preprint arXiv:1710.10568, 2017.
11. Chen J, Ma T, Xiao C. Fastgcn: fast learning with graph convolutional networks via importance sampling[J]. arXiv preprint arXiv:1801.10247, 2018.
12. Huang W, Zhang T, Rong Y, et al. Adaptive sampling towards fast graph representation learning[J]. Advances in neural information processing systems, 2018, 31.
13. Chiang W L, Liu X, Si S, et al. Cluster-gcn: An efficient algorithm for training deep and large graph convolutional networks[C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery & data mining. 2019: 257-266.
14. Zeng H, Zhou H, Srivastava A, et al. Graphsaint: Graph sampling based inductive learning method[J]. arXiv preprint arXiv:1907.04931, 2019.

四、审核意见

|  |
| --- |
| 指导教师审核意见：（针对选题的价值及可行性作出具体评价）  指导教师签名  年 月 日 |
| 专业审核意见：  负责人签名  年 月 日 |