

Automorphism-based Graph Neural Nets

Cristian Choís Amaya

14 de febrero de 2023

1. ¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?

Un Autobahn es un tipo de red neuronal de grafos, caracterizado por usar técnicas como descomposición y convolución en subgrafos, tiene como función el mejorar la eficiencia de las redes neuronales de grafos, así como para estandarizar la comparación y evaluación de estas redes neuronales. Estos Autobahn tienen una gran variedad de aplicaciones como la química computacional o el procesamiento de lenguajes.

2. ¿Por qué los autores proponen utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo?

Los autores sugieren esto debido a que los automorfismos son transformaciones biyectivas del grafo que conservan su estructura (los vértices y aristas mantienen las mismas conexiones al usar un automorfismo), por lo que al reflejar las simetrías internas del grafo usando un automorfismo, se reduce la complejidad del análisis de este, además de que permite comprender de mejor manera la estructura de este.

3. ¿Explique en qué consiste la Figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D_6 ?

La figura 2b muestra un ejemplo de una neurona construida a partir de un grafo cíclico, esta neurona es construida mediante un algoritmo que toma en cuenta el grupo de automorfismos del grafo buscando la permutación que maximice la similitud entre entradas y salidas de la neurona, dando que esta neurona sea invariante bajo ese grupo de automorfismos, por lo que la figura 2b trata de retratar el uso de los automorfismos de grafos para simplificar la comprensión de los modelos basados en grafos.