

Ejercicio introducción a las GNNs

Implementación de GIN



Introducción

Graph Isomorphism Network (GIN), un tipo de GNN que es particularmente eficaz para tareas que implican analizar la estructura de un grafo. Se presentó en el artículo «How Powerful Are Graph Neural Networks?» de Xu et al., 2019. GIN está diseñada para abordar las limitaciones de expresividad de las arquitecturas GNN anteriores buscando ser igual de potente que el kernel de Weisfeiler-Lehman (WL).

Objetivo

En este ejercicio implementaremos una GNN con tres capas GIN. Las capas GIN implementan la siguiente función de actualización para cada nodo.

$$z_u^l = MLP_{\theta}^l \left((1 + \varepsilon^l) \odot z_u^{l-1} + \sum_{v \in N(u)} z_v^{l-1} \right)$$

- ε es un parámetro que se debe aprender durante el entrenamiento
- \odot Es la multiplicación punto a punto o el producto de Hadamard.

