Autobahn

Tomás Felipe Garzón Gómez - 1001200959

February 2023

Introducción

De acuerdo a el articulo ”Automorphism-based Graph Neural Nets” escrito por Erik H. Thiede, Wenda Zhou y Risi Kondor se respondieron las siguientes preguntas propuestas por el docente.

¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?

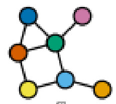
Primero que todo Autobahn hace referencia a Automorphism-based Neural Networks, dando sentido a que Autobahn es un método que se basa en la construcción de redes neuronales en grafos. Haciendo uso de dos principales criterios denominados ”narrowing” y ”promotion” que le dan sentido a la estructura. Principalmente los autores usan esta técnica en grafos moleculares.

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

Se debe entender que una simetria en terminos de los autores se toma como una permutación. Sin embargo, para que se reflejen todas las simetrias de un grafo a partir de sus automorfismos es necesario hablar de todas las permutaciones que hacen parte del grupo symetrico (x). Ahora bien, al momento de dividir el grafo en grafos locales (narrowing) siempre que la información perteneciente al grafo no se haya perdido, se procede a hacer convolutions equivariant. Permitiendo así la transferencia de información entre grafos locales.

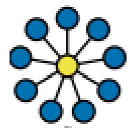
Pruebe los isomorfismos sugeridos por la (Figura 2.1 panel a)

La siguiente imagen hace referencia al grupo enteros módulo 1.



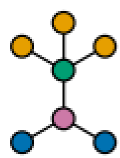
$\mathbb{Z}_1$

A partir de la anterior imagen se infiere que el isomorfo perteneciente al Grupo Z_1 es en si mismo y por lo tanto ya que este grupo solo con tiene un elemento que sí es un isomorfo.



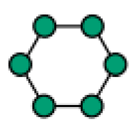
$\mathbb{S}_9$

Se tiene que en este grupo en específico existe una funcion θ tal que envia los elementos de S_9 a S_9, tal que está función tiene la cualidad de que es uno a uno y que para todo elemento de está función pertenece a S_9. Dandole así, la obviedad de que en sí es un isomorfo.



$\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$

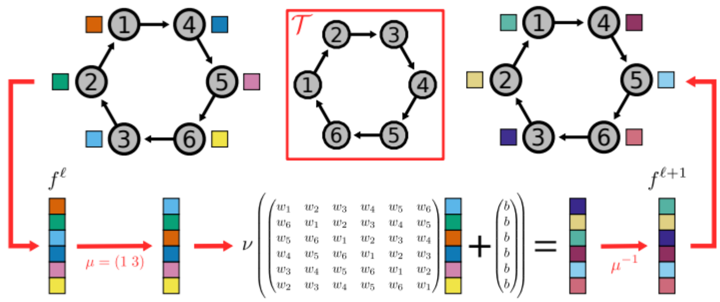
Para entender este, al menos desde mi perspectiva. Se tiene que saber los elementos pertenecientes a ambos grupos, tanto como para S_2, que cuenta con 2 elementos y para S_3 que cuenta con 6 elementos. Entonces podriamos decir que este grafo hace alusión a una unión entre ambos. Aunque siendo estrictos, se está haciendo uso de solo algunas permutaciones. Dandonos a entender que podría ser un isomorfismo, aunque no sé sabe de cuáles o sobre cuáles permutaciones.



$\mathbb{D}_6$

Una transposición es la permutación entre los elementos, que en este caso corresponde al grupo D_6. Sin embargo no es cualquier transposición porque para que sea un isomorfismo debe tener en cuenta la cantidad de vertices y ejes. Lo cual hace, haciendo obvio el isomorfismo.

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



(b)

La figura B, nos muestra que a partir del procedimiento (1), que definen como encontrar μ, luego aplicar $A_G^{\mu} = A_T$. Hay que tener en cuenta que el automorfismo es perteneciente a A no a T, es decir que a partir de el automorfismo de A con la transpuesta es posible obtener $f^{l-1} = T_{\mu}(f^{l-1})$. Siendo más acertados es posible decir que a apartir de está igualdad se nos da el output original, siendo este f^{l}.