

Autobahn: Automorphism-based Graph Neural Nets

David Alexander Rativa Gutierrez

Febrero 27 2023

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

Autobahn consiste en un modelo de red neuronal basado en Automorfismos. Se utilizan como una alternativa a las redes convencionales, ya que matemáticamente son más rápidas, tienen un menor costo computacional, son eficientes en memoria, intuitivamente más atractivas, respetan la simetría de la red bajo la permutación de sus nodos, y aseguran la Invariabilidad al Isomorfismo. Se utilizan principalmente para construir *Redes Neuronales de Paso de Mensajes (MPNN)*.

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

Por que si se comprueba que los Automorfismos del grafo son No Triviales, entonces no hay necesidad de comprobar la simetría (el grupo de Automorfismos es el conjunto de todas las permutaciones en V que mantiene la estructura del grafo, es decir, es el grupo simétrico) y por ende, se puede ejecutar tranquilamente las capas completamente conectadas.

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

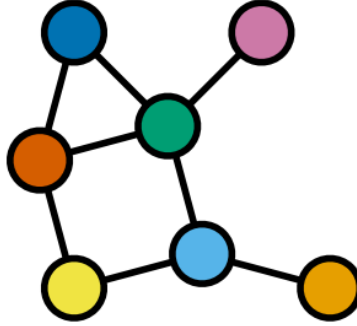


Figura 1: Grafo asociado a \mathbb{Z}_1

Para comprobar el isomorfismo de este grafo se construye el grupo de automorfismos denotado como $\text{Auto} \{ \mathcal{G}_1 \}$. Ahora, le vamos a asignar cualquier elemento definido por los siguientes elementos 1,2,3,4,5,6. Para conservar la adyacencia de $\{ \mathcal{G}_1 \}$ se tendrá la permutación neutra $g_0 = (1)$. De tal manera que $\text{Auto} \{ \mathcal{G}_1 \}$

$$\begin{array}{c|c} \circ & g_0 \\ \hline g_0 & g_0 \end{array}$$

Donde se puede comprobar que

$$\begin{aligned} h : \mathcal{G}_1 &\longrightarrow \mathbb{Z}_1 \\ g_a &\longrightarrow a \end{aligned}$$

El cual es un isomorfismo empleado para notar la simetría para todo grupo cíclico y su forma canónica.

Finalmente, se tiene que $\text{Auto } \{\mathcal{G}_1\}$ y \mathbb{Z}_1 son isomorfos.

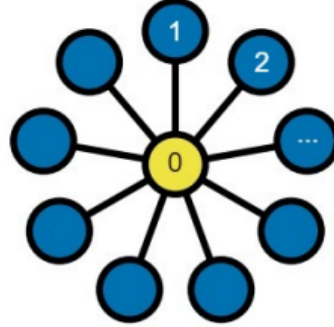


Figura 2: Grafo asociado a \mathbb{S}_1

Esta demostración se puede realizar gracias al Teorema de Cayley el cual afirma que todo grupo es isomorfo a un subgrupo de un grupo simétrico.

Sea G un grupo finito con n elementos. Vamos a considerar el conjunto S_n de todas las permutaciones de los elementos de G . Luego, definimos una función

$$f : G \longrightarrow S_n \text{ por } f_g(x) = gx \forall x \in G. \quad (1)$$

f toma cada elemento $g(y)$ y lo mapea en la permutación de S correspondiente a cada x bajo el producto de g .

$$\text{Sea } g, h \in G \text{ tal que } f_g = f_h \text{ entonces } gx = hx \forall x \in G.$$

Evidenciamos que f es un homomorfismo de G en S , o visto de otra forma, $f_g h = f_g$ compuesta de $f_h \forall g, h \in G$.

La permutación de $f_g h$ en S se define como $f(gh)(x) = ghx = f_g(hx) = f_g$ compuesta de $f_h \forall x \in G$.

Dado que f es un homomorfismo 1-1 de G en S , su imagen es un subgrupo de S el cual es isomorfo a G .

Ahora, sea el grafo de un conjunto $\{\mathcal{G}_\in\}$ $0,1,2,3,4,5,6,7,8,9$ en el cual las permutaciones no involucrarán al cero para conservar su adyacencia, permutando los nodos del 1 al 9 para obtener un total de $9!$ posibles permutaciones. Finalmente, por el teorema de Cayley, el grafo anterior es isomorfo a un subgrupo de S_9 , siendo S_9 un grupo de orden $9!$. En otras palabras, por el teorema de Cayley se demuestra que $\text{Auto } \{\mathcal{G}_\in\}$ es isomorfo a S_9 .

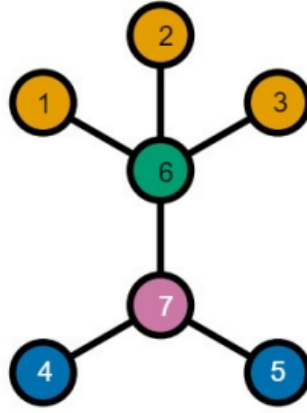


Figura 3: Grafo asociado a $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$

Teniéndose \mathbb{S}_3 de orden $3!$ bajo la composición

$$\mathbb{S}_3 = \{e, \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}\} \quad (2)$$

Teniéndose, además \mathbb{S}_2 de orden $2!$

$$\mathbb{S}_2 = \{e, (45)\} \quad (3)$$

De tal manera que el producto cartesiano de $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$ sea

$$\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2 = \{e, \mathbb{S}_3 - e, \mathbb{S}_2 - e, (12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

donde $\mathbb{S}_3 - e$ y \mathbb{S}_2 es el resultado de combinar los respectivos conjuntos 1 y 2 con el elemento neutro e , deduciendo los duplicados del mismo y resultando así en un conjunto de orden 12.

Tomando $\{\mathcal{G}_3\}$ se contruye el respectivo grupo de permutaciones en notación cíclica. Allí se incluye la permutación identidad y se consideran las posibles permutaciones que conservan la adyacencia de los nodos 1 - 3 con el nodo 6, de la misma forma, se consideran los nodos 4 - 5 con el nodo 7 para después considerar las combinaciones entre estas permutaciones ya que de otra manera perdería la adyacencia de los primeros 3 nodos. De tal manera que podemos definir el automorfismo de este grafo como

$$\text{Auto } \{\mathcal{G}_3\} = \{e (45), (12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

De tal manera que

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_3 - e &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \right\} \\ \mathbb{S}_2 - e &= \left\{ \begin{pmatrix} 4 & 5 \end{pmatrix} \right\} \end{aligned}$$

Obteniendo así:

$$\text{Aut } [\mathcal{G}_3] = \{e, \mathbb{S}_3 - e, \mathbb{S}_2 - e, (12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

Cumpliendo así la definición de

$$id(\mathcal{G}_3) : \mathcal{G}_3 \longrightarrow \mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$$

$$g \longrightarrow g$$

donde la función identidad es una función biyectiva tal que $id(g_1 * g_2) = id(g_1) * id(g_2)$, ergo, $\text{Auto } \{\mathcal{G}_3\}$ y $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$ son isomorfos.

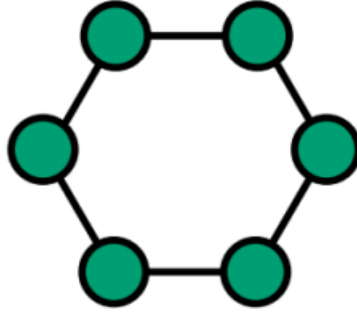


Figura 4: Grafo asociado a \mathbb{D}_6

El grafo presentado a continuación corresponde a un grupo diedral \mathbb{D}_n de un polígono regular formado por rotaciones y reflexiones de polígonos de n lados.

Este grupo de simetría pertenece a un hexágono regular. Contiene 12 elementos y se representan de la siguiente manera:

$$\mathbb{D}_6 = \{r1, r2, r3, r4, r5, r6, r7, r8, r9, r10, r11, r12\}$$

donde $r1$ es la rotación neutra, $r2$ a $r6$ son rotaciones en $\frac{\pi}{3}$ radianes girando en torno al centro del polígono. De manera similar, de $r7$ a $r12$ se representan las reflexiones en los ejes del hexágono.

Construyendo la tabla de Cayley quedaría de la siguiente manera

	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10	r11	r12
r1	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10	r11	r12
r2	r2	r3	r4	r5	r6	r1	r12	r7	r8	r9	r10	r11
r3	r3	r4	r5	r6	r1	r2	r11	r12	r7	r8	r9	r10
r4	r4	r5	r6	r1	r2	r3	r10	r11	r12	r7	r8	r9
r11	r11	r6	r1	r2	r3	r4	r9	r10	r11	r12	r7	r8
r6	r6	r1	r2	r3	r4	r5	r8	r9	r10	r11	r12	r7
r7	r7	r11	r10	r9	r8	r12	r7	r6	r5	r4	r3	r2
r8	r8	r12	r11	r10	r9	r7	r2	r1	r6	r5	r4	r3
r9	r9	r7	r12	r11	r10	r8	r3	r2	r1	r6	r5	r4
r10	r10	r8	r7	r12	r11	r9	r4	r3	r2	r1	r6	r5
r11	r11	r9	r8	r7	r12	r10	r5	r4	r3	r2	r1	r6
r12	r12	r10	r9	r8	r7	r11	r6	r5	r4	r3	r2	r1

Tabla 1: Tabla de Cayley del Grupo Diedral del Hexágono.

Obteniendo así las siguientes permutaciones

$$\begin{aligned} r1 : [1, 2, 3, 4, 5, 6] \quad r2 : [2, 3, 4, 5, 6, 1] \quad r3 : [3, 4, 5, 6, 1, 2] \quad r4 : [4, 5, 6, 1, 2, 3] \quad r5 : [5, 6, 1, 2, 3, 4] \\ r6 : [6, 1, 2, 3, 4, 5] \quad r7 : [6, 5, 4, 3, 2, 1] \quad r8 : [5, 4, 3, 2, 1, 6] \quad r9 : [4, 3, 2, 1, 6, 5] \quad r10 : [3, 2, 1, 6, 5, 4] \\ r11 : [2, 1, 6, 5, 4, 3] \quad r12 : [1, 6, 5, 4, 3, 2] \end{aligned}$$

Realizando las operaciones de automorfismo

$$\text{Auto}[\mathcal{G}_4] = \{r1, r2, r3, r4, r5, r6, r7, r8, r9, r10, r11, r12\}$$

Por lo que se cumple que

$$\begin{aligned} id(\mathcal{G}_4) : \mathcal{G}_3 &\longrightarrow \mathbb{D}_6 \\ r &\longrightarrow r \end{aligned}$$

Dado que la función identidad es un isomorfismo, de tal manera que $\text{Auto}[\mathcal{G}_4]$ y \mathbb{D}_6 son isomorfos.

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

La figura 2b muestra la estructura de una neurona análoga construida con simetría de grafos cíclicos. Allí, se puede apreciar el emparejamiento que puede realizarse en forma de permutación cíclica. Ahora bien, la relación que presenta esta estructura con el grafo D_6 es que ese grafo presentado corresponde al grupo diedral (el grupo de simetría de un polígono regular: seis nodos conectados consecutivamente, que incluye las rotaciones y reflexiones, tal como lo propone la estructura base del ejemplo).