Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería

Matematicas Discretas

Taller Autobahn

Por:

Juan Esteban Mahecha Trujillo

Profesor:

Francisco Gomez

Febrero 2023

1 ¿Qué es un Autobahn y para qué sirve?

Los Automorphism-based graph neural networks (Autobahn) son un tipo de modelo de redes neuronales que se utilizan para aprender representaciones de grafos y realizar tareas de aprendizaje automático en grafos.

A diferencia de otros modelos de grafos, que tratan a cada nodo como un objeto único y aislado, los Autobahn utilizan la simetría de los grafos para agrupar nodos similares juntos. La idea es que dos nodos que sean idénticos en términos de su vecindario de grafos (es decir, que tengan los mismos vecinos y relaciones) deben tener representaciones similares en el modelo.

Para lograr esto, Los Autobahns utilizan permutaciones de automorfismo, que son transformaciones que mantienen la estructura del grafo pero cambian la identidad de los nodos. Estas permutaciones se aplican a los nodos del grafo para agruparlos en conjuntos que sean simétricos entre sí, y luego se aplican capas de redes neuronales convolucionales a estos conjuntos.

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

La aplicación de los automorfismos de un grafo en la creación de una red neuronal para grafos puede aprovechar la simetría del grafo para mejorar el aprendizaje y obtener resultados superiores. Al utilizar los automorfismos se logra reducir el costo computacional y mejorar la precisión del aprendizaje, ya que se aprovecha la información redundante generada por las simetrías del grafo, disminuyendo así la cantidad de cálculos necesarios. Además, la inclusión de los automorfismos en la construcción de una red neuronal permite que el modelo sea más resistente ante las variaciones en la estructura del grafo, ya que los automorfismos posibilitan que el modelo aprenda de las simetrías del grafo, en vez de tener que aprender de forma separada para cada posible variación en la estructura.

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

- La figura (1),

Por como esta compuesta, no seria posible realizarle ninguna permutacion sin alterar la forma del grafo que no sea la identidad, ya que esta transformación deja todos los vertices en su sitio

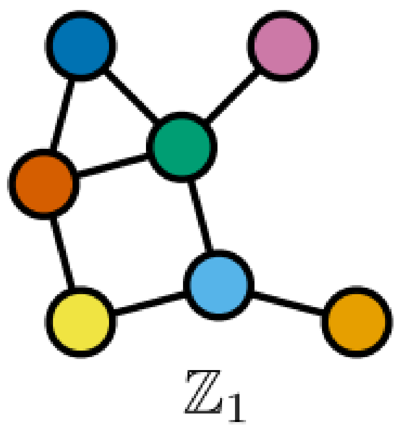


Figure 1:

De lo cual obtenemos la siguiente tabla:

o	id
id	id

Podemos definir el grupo:

$$G = \{id\} \tag{1}$$

Por lo cual tenemos un grupo cíclico de orden cero, ya que el elemento identidad me regresa al mismo elemento identidad, entonces se hace la relación con:

$$Z_1 = \{0\} \tag{2}$$

+	0
0	0

Entonces tenemos una relación que las compare entre la identidad y 0, por lo cual serian isomorfas.

- Figura (2)

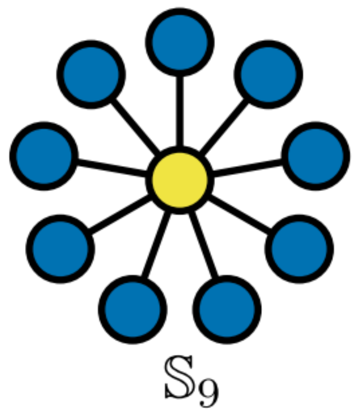


Figure 2:

En esta figura podemos observar un grafo con 10 vértices, con la característica que uno de ellos está conectado a todos los demás, siendo un vértice estático, y el resto de vértices no están conectados entre ellos, lo que los haría independientes. Teniendo en cuenta dichas características, tendríamos como permutaciones posibles la identidad, y una cantidad de permutaciones de 9!, cualquier otra permutación El grupo S9 es definido como el grupo de simetría de todas las permutaciones posibles con 9 elementos.fuera de las dichas cambiaria la estructura del grafo. Por lo que podemos hacer una relacion entre el grafo anterior y el grupo de permutaciones de S9.

x	id	P_1	...	P_n
θ	G_0	G_1	...	G_n

Siendo G los grafos posibles y P las permutaciones posibles, además de n ser la cantidad de tanto grafos como permutaciones posibles de 9 elementos.

- Figura (3)

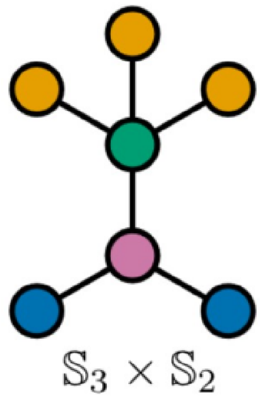


Figure 3:

Para este grafo se tiene un caso similar al anterior, hay dos partes del grafo con posibles permutaciones, un lado con dos elementos y el otro con 3, siendo así de 2! y 3! respectivamente. Sin embargo, como no tenemos un único elemento estático, sino 2, entonces no podemos hacer transformaciones de estos sin cambiar las conexiones y formas del grafo, Por lo tanto, tenemos cada grafo con sus posibles permutaciones incluyendo la combinatoria por el producto cartesiano de las permutaciones, incluyendo la identidad. Podemos observar que el grupo S3 x S2 cumple estas mismas condiciones, ya que al ser la combinatoria del las permutaciones posibles con 3! y 2! se puede realizar una relación que nos permita afirmar este isomorfismo y sería la siguiente:

x	x$_0$	x$_1$	...	x$_n$
θ	G$_0P_0$	G$_1P_1$	...	G$_nP_n$

Siendo Gn Pern El grafo con la permutación del mismo en la combinatoria y §n para el análogo representado por el grupo S3 $\times$ S2.

- Figura (4)

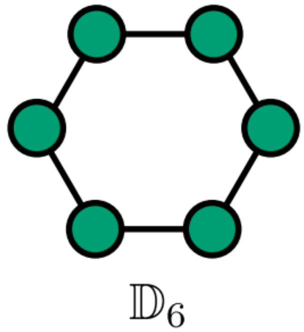


Figure 4:

En este caso nos encontramos con un grafo con una forma similar a un hexágono regular, se le pueden aplicar 12 transformaciones de las cuales 6 son rotaciones en intervalos de 60 grados incluyendo la rotación de 0 grados, siendo esta la identidad. Las restantes son reflexiones de estas rotaciones:

x_0	1	2	3	4	5	6
$\theta\ (x_1)$	2	3	4	5	6	1
$\theta\ (\mathrm{x}_2)$	3	4	5	6	1	2
$\theta\ (\mathrm{x}_3)$	4	5	6	1	2	3
$\theta\ (\mathrm{x}_4)$	5	6	1	2	3	4
$\theta\ (\mathrm{x}_5)$	6	1	2	3	4	5
$\theta\ (\mathrm{y}_0)$	5	4	3	2	1	6
$\theta\ (\mathrm{y}_1)$	4	3	2	1	6	5
$\theta\ (\mathrm{y}_2)$	3	2	1	6	5	4
$\theta\ (\mathrm{y}_3)$	2	1	6	5	4	3
$\theta\ (\mathrm{y}_4)$	1	6	5	4	3	2
$\theta\ (\mathrm{y}_5)$	6	5	4	3	2	1

En base a estas permutaciones podemos realizar una tabla de cayley de 12 elementos por 12 elementos con la composición como operación natural, se puede ver de la siguiente forma:

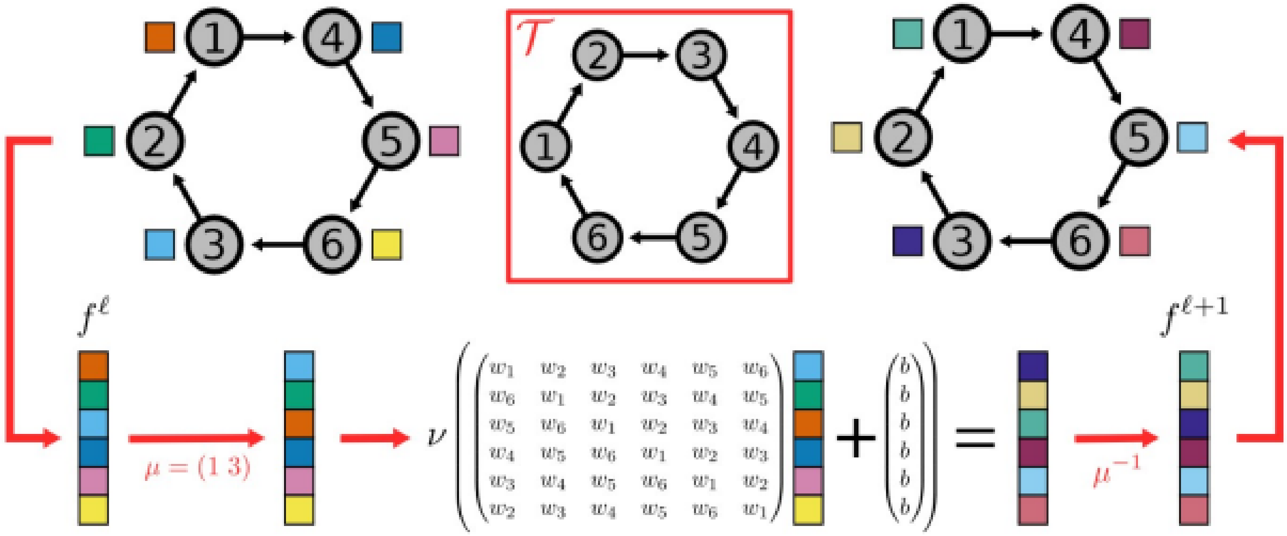
	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
(x_0)	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
(x_1)	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_0
(x_2)	x_2	x_3	x_4	x_5	x_0	x_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_0	y_1
(x_3)	x_3	x_4	x_5	x_0	x_1	x_2	y_3	y_4	y_5	y_0	y_1	y_2
(x_4)	x_4	x_5	x_0	x_1	x_2	x_3	y_4	y_5	y_0	y_1	y_2	y_3
(x_5)	x_5	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	y_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4
(y_0)	y_0	y_5	y_4	y_3	y_2	y_1	x_0	x_5	x_4	x_3	x_2	x_1
(y_1)	y_1	y_0	y_5	y_4	y_3	y_2	x_1	x_0	x_5	x_4	x_3	x_2
(y_2)	y_2	y_1	y_0	y_5	y_4	y_3	x_2	x_1	x_0	x_5	x_4	x_3
(y_3)	y_3	y_2	y_1	y_0	y_5	y_4	x_3	x_2	x_1	x_0	x_5	x_4
(y_4)	y_4	y_3	y_2	y_1	y_0	y_5	x_4	x_3	x_2	x_1	x_0	x_5
(y_5)	y_5	y_4	y_3	y_2	y_1	y_0	x_5	x_4	x_3	x_2	x_1	x_0

Esto está explicado de manera más extensa en el siguiente documento: https://tinyurl.com/2vhfhpe6

El grupo a comparar es D6 que es el grupo diedral o de simetría de un polígono regular, en este caso sería de un hexágono regular que también cuenta con 6 rotaciones y 6 reflexiones las cuales llamaremos R1, R2, R3, R4, R5, R6, F1, F2, F3, F4, F4, F5, F6 (siendo Fn las reflexiones y Rn las rotaciones las cuales serán análogas al grupo anteriormente mostrado, por lo que se puede determinar una relación que las asocie:

x	x_0	...	x_6	x_7	...	x_{12}
θ	R_0	...	R_6	F_7	...	F_{12}

4 Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b



(b)

La figura consiste en la transformación de un grafo cíclico hexagonal C6 en una neurona aplicando el algoritmo propuesto por los autores además haciendo uso del reconocimiento de automorfismos para la coincidencia total en estos procesos de transformación del grupo cíclico, de manera simplificada expresa el proceso de aplicaci´on del framework Autobahn del cual texto nos habla. También se puede notar que el grafo hexagonal es un grupo cíclico por lo que está dirigido y al final se llega al mismo punto de partida, sin embargo, contiene similitudes con el grupo D6 por su forma y conexiones, también se le pueden aplicar transformaciones rotativas como las del grupo diedral de orden 6, sin embargo por la forma en que las conexiones entre nosdos están dadas, no se pueden realizar reflexiones, quedando así con las 6 permutaciones rotativas, de esta manera también podemos considerar a C6 como un subgrupo de D6 debido a que cuenta con las condiciones necesarias para serlo.