Julián D. Osorio Carrillo juosorioca@unal.edu.co

Asignación 03

Autobahn: Automorphism-based Graph Neural Nets

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

Autobahn es un modelo de red neuronal para el procesamiento de información en grafos; en particular se sirve de las estructuras de simetrías que ciertos grafos puedan poseer.
En principio, dado que los grafos pueden tener múltiples representaciones equivalentes, es necesario asegurarse de que una red neuronal pueda reconocer y aprender independiente de estas equivalencias. Para lograr esto, las redes neuronales pueden adoptar el modelo Autobahn. Téngase un grafo $\mathcal{G}_a$ de orden n que es isomorfo a un grafo $\mathcal{G}_b$, lo que implica que cada vértice de $\mathcal{G}_a$ se puede asignar a otro vértice $\mathcal{G}_b$ tales que se conserva la estructura del grafo; de modo que existe un automorfismo que permite transformar de $\mathcal{G}_a$ a $\mathcal{G}_b$, dicha operación correspondería a una permutación $p \in \mathbb{S}_n$, para $\mathbb{S}_n$ el grupo de automorfismos para grafos $\mathcal{G}_i$ de n vértices (Grupo de Simetría de orden $n!$). En el modelo Autobahn, se asigna una grado plantilla $\mathcal{T}$ y a cada grafo de entrada en la red neuronal se le aplica un automorfismo $\mu \in Auto\{\mathcal{T}\} \subseteq \mathbb{S}_n$ de modo que se encaje con $\mathcal{T}$ y es a partir de este grafo que se empieza a aplicar convolución entre cada una de las capas de la red; que ahora serán equivariantes, pues las transformaciones de los nodos, son operaciones (permutación) simétricas en el mismo espacio $\mathbb{S}_n$.
Al aprovechar la estructura de simetría en los grafos y utilizar transformaciones de automorfismo, estas redes neuronales pueden mejorar la eficiencia y precisión de la red en cuestión, en relación a modelos previamente propuestos que no trataban a los nodos y capas de la red como equivariancias bajo una operación del grupo de automorfismos determinada, si no como tuplas de nodos de orden k, que resultaba en la consideración de la acción del grupo simétrico $\mathbb{S}_n$ a un tensor de orden k; de modo que la complejidad aumentaba conforme el numero de vértices del grafo entrante aumentaba.

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

Las simetrías en los grafos son comunes y significativas. Muchos grafos en la vida real, como las moléculas (caso de estudio particular del articulo) y las redes sociales, tienen simetrías que son inherentes a sus estructuras. Los automorfismos de un grafo son transformaciones que nos permiten por medio de una sola operación obtener otro grafo que preserva las relaciones entre los nodos y las aristas; un grafo isomorfo al grafo original. En otras palabras, obtenemos simetrías dentro de un mismo espacio $\mathbb{S}_n$ para grafos de orden n.
En la tarea de aprendizaje de grafos, es importante tener en cuenta estas simetrías internas, ya que reflejan la redundancia de información en el grafo y pueden ser útiles para reducir la complejidad del modelo y mejorar la eficiencia del entrenamiento. Al utilizar los automorfismos como operaciones equivariantes, el modelo puede aprender de manera más efectiva las características de los nodos y las relaciones entre ellos.
De modo que los autores proponen utilizar una técnica basada en los automorfismos del grafo para diseñar un modelo de redes neuronales para grafos que tenga en cuenta estas simetrías internas.

3. Pruebe los isomorfismos sugeridos.

a.

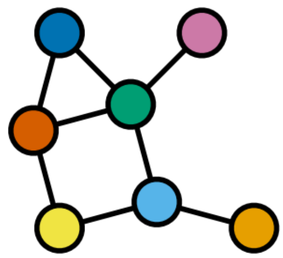

Figura 1: Grafo asociado a $\mathbb{Z}_1$.

Un grupo cíclico es un grupo que puede ser generado por un solo elemento g, es decir, existe un elemento generador único en el grupo que, al ser operado repetidamente por la operación del grupo, genera todos los demás elementos del grupo.
Los grupos canónicos de orden n al que son isomorfos todos los grupos cíclicos con n elementos, se denotan $\mathbb{Z}_n = \{0, 1, \cdots, n-1\}$ bajo la operación de adición modulo n, $+ = (a+b) mod n = (a\ mod n + b\ mod n)\ mod n$, con $e = 0$ elemento neutro y generador.

Así pues, $\mathbb{Z}_1$ o grupo ciclico trivial:

$+$	0
0	0

Ahora, para el grafo 1, se construye el grupo de automorfismos $Auto\{\mathcal{G}_1\}$. Sin perdida de generalidad, podemos asignar a cualquier orden definido por $\{\ 1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Para conservar la adyacencia de $\mathcal{G}_1$, se tiene únicamente la permutación neutra $g_0 = (1)$, en notación cíclica.
Así pues, $Auto\{\mathcal{G}_1\}$:

$\circ$	g_0
g_0	g_0

De modo que se define.

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

Que es un isomorfismo empleado para notar la simetría entre todo grupo cíclico y su forma canónica, por lo que $Auto\{\mathcal{G}_1\}$ y $\mathbb{Z}_1$ son isomorfos.

b.

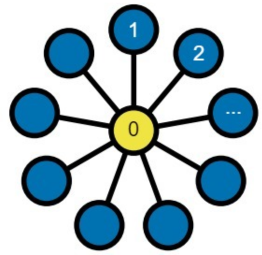

Figura 2: Grafo asociado a $\mathbb{S}_9$.

Teorema 1. *Teorema de Cayley: Todo grupo es isomorfo a un subgrupo de un grupo simétrico. Si el grupo es finito y tiene orden n, entonces es isomorfo a un subgrupo de $\mathbb{S}_n$.*

Demostración. Sea G un grupo finito con n elementos. Consideremos el conjunto S_n de todas las permutaciones de los elementos de G.
Ahora, definimos una función $f : G \longrightarrow \mathbb{S}_n por f_g(x) = gx$ para todo $g \in G$ y $x \in G$. Es decir, f toma cada elemento gy mapea en la permutación de $\mathbb{S}$ correspondiente a cada x bajo el producto de g.
Donde, f es inyectiva. Sea $g, h \in G$, tal que $f_g = f_h$ entonces $gx = hx$ para todo$x \in G$, ergo, $g = h$.
f es un homomorfismo de G en $\mathbb{S}$, es decir, $f_{gh} = f_g \circ f_h$ para todo $g, h \in G$. Donde $f_g \circ f_h = f_g(f_h(x)) = f_g(hx) = ghx$. Por otro lado, la permutación f_{gh} en S se define como $f(gh)(x) = ghx = f_g(hx) = f_g \circ f_h$, para todo $x \in G$.
Como f es un homomorfismo 1-1 de G en $\mathbb{S}$, su imagen es un subgrupo de $\mathbb{S}$ que es isomorfo a G. Por lo tanto, todo grupo finito G es isomorfo a un subgrupo de un grupo simétrico. $\square$

Tomando el grafo 2 como un conjunto $\mathcal{G}_{\in}\{0, 1, \cdots, 9\}$ y en donde permutaciones automorfas, para conservar adyacencia, dejaran el nodo 0 estático, permutando los nodos $1 - 9$, para un total de 9! posibles permutaciones, así pues, $Auto[\mathcal{G}_{\in}]$ es un grupo de orden 9!.
Por *teorema de Cayley* es isomorfo a un subgrupo de $\mathbb{S}_9$, siendo $\mathbb{S}_9$ un grupo de orden 9!, el único sugrupo de $\mathbb{S}_9$ que es posible de orden 9! es $\mathbb{S}_9$.
De modo que por *teorema de Cayley* $Auto[\mathcal{G}_{\in}]$ es isomorfo a $\mathbb{S}_9$.

c.

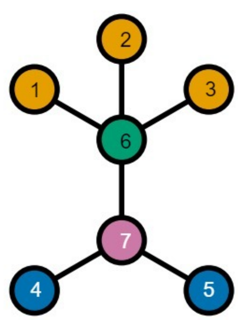

Figura 3: Grafo asociado a $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$.

Téngase $\mathbb{S}_3$ de orden 3!, grupo simétrico de permutaciones (notación ciclica) bajo composición:

$$\mathbb{S}_2 = \{e, (1\ 2), (2\ 3), (1\ 3), (1\ 2\ 3), (1\ 3\ 2)\} \tag{1}$$

Ahora $\mathbb{S}_2$ de orden 2!, tomando nodos $4, 5$ para diferenciar del grupo 1:

$$\mathbb{S}_2 = \{e, (4\ 5)\} \tag{2}$$

Tales que el producto cartesiano $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$.

$$\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2 = \{e, \mathbb{S}_3 - e, \mathbb{S}_2 - e, (1\ 2)(4\ 5), (2\ 3)(4\ 5), (1\ 3)(4\ 5), (1\ 2\ 3)(4\ 5), (1\ 3\ 2)(4\ 5)\}$$

Donde $\mathbb{S}_3 - e$ y $\mathbb{S}_2 - e$ es el resultado de combinar (sin importar el orden) los respectivos conjuntos 1 y 2 con el elemento neutro e, deduciendo los duplicados de este mismo; resultando en un conjunto de orden 12 después de eliminar demas duplicados.

Ahora, tomando $\mathcal{G}_3$ bajo la convención de nodos mostrada en 3, se construye el grupo de permutaciones en notación cíclica respectivo. Primeramente se incluye la permutación identidad (elemento neutro), luego se consideran las posibles permutaciones que conserven la adyacencia de los nodos $1-3$ con el nodo 6, de misma manera los nodos $4-5$ con el nodo 7, para luego considerar las posibles combinaciones entre estas permutaciones que separan el grafo en dos piezas unidad por el 'puente de nodos' $6-7$. Lo anterior debido a que no es posible permutar los nodos $1-3$ con los nodos $4-5$, pues se perdería la adyacencia de alguno de los primeros 3 nodos al solo existir 2 asignaciones posibles al otro 'lado'.

$$\begin{aligned} Aut[\mathcal{G}_3] = \{e,& \\ &(1\ 2), (2\ 3), (1\ 3), (1\ 2\ 3), (1\ 3\ 2), \\ &(4\ 5), \\ &(1\ 2)(4\ 5), (2\ 3)(4\ 5), (1\ 3)(4\ 5), (1\ 2\ 3)(4\ 5), (1\ 3\ 2)(4\ 5)\} \end{aligned}$$

Notese como,

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

De modo que,

$$Aut[\mathcal{G}_3] = \{e, \mathbb{S}_3 - e, \mathbb{S}_2 - e, (1\ 2)(4\ 5), (2\ 3)(4\ 5), (1\ 3)(4\ 5), (1\ 2\ 3)(4\ 5), (1\ 3\ 2)(4\ 5)\}$$

Por lo que se define se define,

$$\begin{aligned} id(\mathcal{G}_3) : \mathcal{G}_3 &\longrightarrow \mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2 \\ g &\longrightarrow g \end{aligned}$$

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

d.

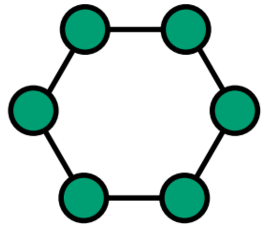

Figura 4: Grafo asociado a $\mathbb{D}_6$.

Un grupo diedral $\mathbb{D}_n$es el grupo de simetría de un polígono regular, incluyendo tanto rotaciones y reflexiones del polígono de n lados.
El grupo diedral $\mathbb{D}_6$ es un grupo de simetría de un hexágono regular. Tiene 12 elementos y se representa como

$$\mathbb{D}_6 = \{r0, r1, r2, r3, r4, r5, s0, s1, s2, s3, s4, s5\}$$

Donde $r0$ es la rotación neutra, $r1$ a $r5$ son rotaciones en ángulos de a 60 grados $(360/n)$ alrededor del centro del polígono, y $s0$ a $s5$ son reflexiones en los ejes del hexágono.
La tabla de Cayley para $\mathbb{D}_6$.

Ahora, para el grafo $\mathcal{G}_4$ de la figura 4, es posible obtener las siguientes permutaciones:

```
r0 : [1, 2, 3, 4, 5, 6]
r1 : [2, 3, 4, 5, 6, 1]
r2 : [3, 4, 5, 6, 1, 2]
r3 : [4, 5, 6, 1, 2, 3]
r4 : [5, 6, 1, 2, 3, 4]
r5 : [6, 1, 2, 3, 4, 5]
s0 : [6, 5, 4, 3, 2, 1]
s1 : [5, 4, 3, 2, 1, 6]
s2 : [4, 3, 2, 1, 6, 5]
s3 : [3, 2, 1, 6, 5, 4]
s4 : [2, 1, 6, 5, 4, 3]
s5 : [1, 6, 5, 4, 3, 2]
```

Figura 5: Captura de las permutaciones adyacentes $\mathcal{G}_4$.

Adicionalmente la tabla de Cayley de tales permutaciones bajo la composición:

```
[['r0' 'r1' 'r2' 'r3' 'r4' 'r5' 's0' 's1' 's2' 's3' 's4' 's5']
 ['r1' 'r2' 'r3' 'r4' 'r5' 'r0' 's5' 's0' 's1' 's2' 's3' 's4']
 ['r2' 'r3' 'r4' 'r5' 'r0' 'r1' 's4' 's5' 's0' 's1' 's2' 's3']
 ['r3' 'r4' 'r5' 'r0' 'r1' 'r2' 's3' 's4' 's5' 's0' 's1' 's2']
 ['r4' 'r5' 'r0' 'r1' 'r2' 'r3' 's2' 's3' 's4' 's5' 's0' 's1']
 ['r5' 'r0' 'r1' 'r2' 'r3' 'r4' 's1' 's2' 's3' 's4' 's5' 's0']
 ['s0' 's1' 's2' 's3' 's4' 's5' 'r0' 'r1' 'r2' 'r3' 'r4' 'r5']
 ['s1' 's2' 's3' 's4' 's5' 's0' 'r5' 'r0' 'r1' 'r2' 'r3' 'r4']
 ['s2' 's3' 's4' 's5' 's0' 's1' 'r4' 'r5' 'r0' 'r1' 'r2' 'r3']
 ['s3' 's4' 's5' 's0' 's1' 's2' 'r3' 'r4' 'r5' 'r0' 'r1' 'r2']
 ['s4' 's5' 's0' 's1' 's2' 's3' 'r2' 'r3' 'r4' 'r5' 'r0' 'r1']
 ['s5' 's0' 's1' 's2' 's3' 's4' 'r1' 'r2' 'r3' 'r4' 'r5' 'r0']]
```

Figura 6: Captura de las permutaciones adyacentes $\mathcal{G}_4$.

Tanto las permutaciones como la tabla de Cayley se obtuvieron usando el código generador para polinomios de grado n, con $n = 6$. Dicho código esta disponible en `https://github.com/Juosorioca420/DiscretasII/blob/main/Grupo_Diedral.ipynb`
Así pues, siendo las permutaciones adyacentes operaciones de automorfismo,

$$Auto[\mathcal{G}_4] = \{r0, r1, r2, r3, r4, r5, s0, s1, s2, s3, s4, s5\}$$

Finalmente

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

Analogo a lo visto en el punto anterior, la función identidad es un isomorfismo, de modo que, $Auto\{\mathcal{G}_4\}$ y $\mathbb{D}_6$ son isomorfos.

4. Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b.

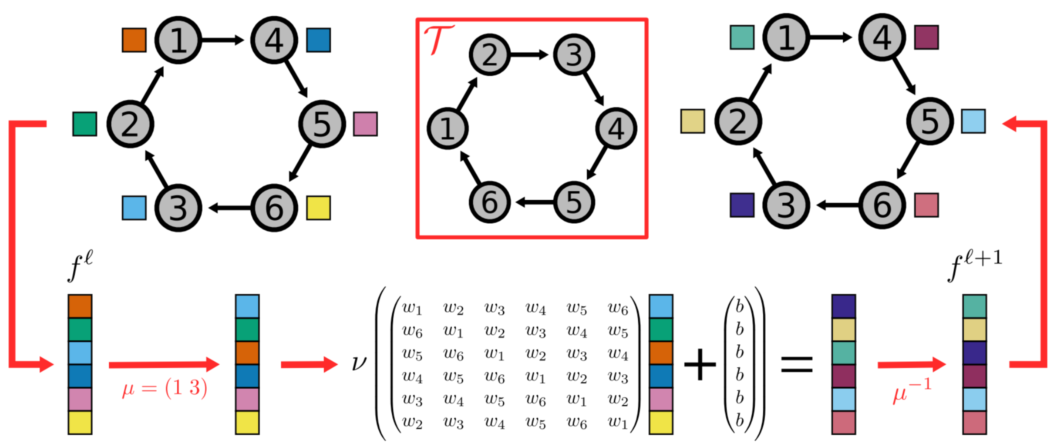

Figura 7: Figura 2.1 panel b.

La imagen explica gráficamente el funcionamiento interno de una neurona basada en automorfismos. En principio al recibir la activación $f^{\ell-1}$ asociado a un grafo particular $\mathcal{G}$, se aplica un automorfismo $\mu \in \mathbb{S}_n$,

tales que el grafo entrante 'encaje' con la plantilla definida $\mathcal{T}$ para todo grafo de orden n. Como las *Autobahn* son redes CNN, a partir de la activación inicial las neuronas empezaran a convoluciónar bajo la matriz de permutaciones de $Aut[\mathcal{T}]$, enmarcada dentro de la equivariancia v, es decir, los automorfismos de $Aut[\mathcal{T}]$ se entienden como funciones simétricas en un mismo espacio de simetría $\mathbb{S}_n$; al que se le suman también un sesgo b determinado para cada neurona.
Finalmente se aplica el automorfismso inverso μ^{-1}, para mapear el resultado en el orden original (al que se le ha aplicado alguna permutación) del grafo de entrada. Lo importante es que el funcionamiento interno de la red maneje un mismo 'orden' determinado por $\mathcal{T}$, que es isomorfo a $\mathcal{G}$, lo que hace del algoritmo computacionalmente más sencillo y eficiente.