Tarea Autobahn - Matemáticas Discretas 2

Sebastián Ortiz González
Universidad Nacional de Colombia
seortizg@unal.edu.co
Bogotá, Colombia

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

   Es una estructura para la construcción de grafos de redes neuronales.

   Autobahn se puede utilizar para realizar tareas de aprendizaje de grafos como lo son la clasificación y predicción de las propiedades de grafos moleculares.

   Según los autores, Autobahn tiene un rendimiento comparable o mejor que otros modelos de aprendizaje de grafos de última generación en estas tareas, lo que sugiere que puede ser un enfoque prometedor para el aprendizaje de grafos en general.

   En resumen, Autobahn es una técnica avanzada de procesamiento de grafos que puede mejorar el rendimiento de las redes neuronales en tareas que involucran estructuras de grafos.

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

   Los autores proponen utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo, porque las simetrías son una propiedad fundamental de los grafos y pueden ser utilizadas para reducir el espacio de búsqueda de soluciones en problemas relacionados con grafos.

   Un automorfismo de un grafo es una función que mapea los vértices del grafo a si mismo de tal manera que preserva la estructura del grafo. En otras palabras, es una función que conserva las simetrías del grafo. Por ejemplo, un cuadrado tiene cuatro automorfismos distinto, correspondientes a las rotaciones de 0,90,180 y 270.

   Al utilizar los automorfismos para diseñar las convulsiones en una red neuronal en grafos, se puede aprovechar esta simetría interna para reducir la cantidad de parámetros que deben ser aprendidos por la red. En lugar de aprender los mismos pesos para cada vértice del grafo, la red solo necesita aprender los pesos para un conjunto reducido de vértice que son representativos de cada órbita de automorfismos.

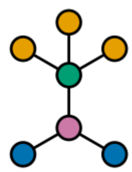
3. **Pruebe los isomorfismos sugeridos por la (Figura 2.1 panel a)**

$\mathbb{Z}_1$

a) Este grafo representa el grupo cíclico de orden 1(1)(2)(4)(5)(6)(7) dado que igual que en el grupo z_1 (que es la clase de equivalencia de 0 mod 1 donde el único elemento es 0) solo hay un elemento, no hay posibles permutaciones que conserven la simetría interna del grafo. Por esta misma razón, como lo dice la lectura "los grafos con la misma órbita tiene el mismo color", en este caso vemos que todos los vértices tienen color diferente, lo cual nos indica que no hay vértices que sean equivalentes entre sí bajo la acción del algún grupo de simetría

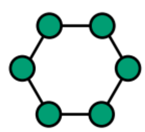
$\mathbb{S}_9$

b) El grupo s_9 es el grupo simétrico de 9 elementos, consisten en el grupo de todas las posibles permutaciones de 9 elementos, es decir 9!=362880 permutaciones, de la misma forma en el grafo representado, los vértices 1-9 pertenecen a la misma órbita por lo cual se pueden permutar de 9! formas diferentes



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

c) El grupo $S_3 \times S_2$ es el producto de los grupos simétricos de dos y tres elementos, el grupo S_2 consta de 2! permutaciones que son la identidad y la única transposición posible. Mientras el grupo S_3 consta de 3|=6 permutaciones posibles, por lo cual el producto de este grupo consta de 12 posibles permutaciones. Si miramos, por otra parte, el grupo de simetrías del grafo, nos plantea el mismo panorama, por un lado tenemos los elementos 1,2,3 que pertenecen a la misma órbita y se pueden permutar sin perder la simetría interna del grafo, sucede lo mismo con los vértices 6,7 que se pueden permutar sin problemas, estas posibles permutaciones son las mismas permutaciones que tendríamos con $S_3 \times S_2$



$\mathbb{D}_6$

d) En el caso del grupo D_6, Sideral 6 se tiene 12 elementos que son las posibles rotaciones y reflexiones de los elementos, en este caso no hay permutaciones individuales y reflexiones de los elementos, en este caso no hay permutaciones individuales de elementos dado que se perdería la simetría del sistema, por esta razón y para la mayor facilidad de entendimiento el grupo D_6 normalmente se representa con los ejes de simetría de un hexágono donde se tienen las mismas características, se pueden rotar los elementos en cualquier sentido y también se pueden reflejar los elementos respecto a cualquier eje de simetría de reflexión del hexágono y no se va a perder la simetría ni las relaciones iniciales.

4. **Explique en que consiste la Figura** 2,1 **panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D_6?**

El proceso de la figura 2.1b consiste en que se ingresa un grafo como entrada, luego se le aplica el algoritmo 1 de la sección 3.1 para construir una neurona basada en automorfismos, y luego el resultado lo establecemos como un nuevo grafo, el cual representa a la estructura que la entrada tiene.

La figura 2.1b relacionada con el grupo D6 en cuanto a la forma de su estructura, específicamente en la conexión de sus nodos, con la única diferencia de que D6 aunque también se puede representar como un hexágono, puede recorrerse de forma horaria y antihoraria, mientras que en la figura 2.1b se puede recorrer únicamente en una dirección al ser un grafo dirigido.