Análisis del Autobahn

por Iván Felipe Ayala Rengifo

28 de febrero de 2023

Resumen

El documento a continuación tiene como objetivo identificar las propiedades de un Autobahn, definiéndolo de manera concisa y utilizando las propiedades dadas por el paper de investigación. Además, se hará un análisis de gráficas presentadas en el anteriormente mencionado artículo para evaluar posibles isomorfismos y demás propiedades de los grafos.

1. Definiciones Importantes:

1.0.1. Grupo.

Para poder hacer el análisis descrito anteriormente de la mejor manera posible, es importante tener claridad en el concepto mismo de "Grupo". En términos simples, un Grupo es aquel conjunto de elementos regidos por una operación de grupo que cumpla con los siguientes criterios:

- El conjunto de elementos debe ser un conjunto no vacío.
- La operación del conjunto debe arrojar un resultado interno de ese conjunto.
- La operación debe ser asociativa.
- La operación debe contar con un elemento neutro.
- La operación debe contar con un elemento inverso.

1.1. Grafos.

Un grafo Γ es una estructura gráfica denotada de la siguiente manera:

$$\Gamma = (V, E)$$

- Donde V representa los vértices del grafo y E representa las aristas entre los vértices.
- V representa un conjunto finito de vértices.
- E es el conjunto de pares no ordenados de vértices. Es decir, la unión y relación mediante una arista de dos vértices.

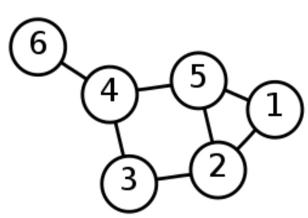

Figura 1. Ejemplo de un Grafo.

1.2. Isomorfismos.

El isomorfismo es una cualidad que comparten dos grafos/grupos. Se dice que, dos grafos Γ_1 y Γ_2 son **isomorfos** si existe una correspondencia Θ que sea 1-1, preservando la estructura del grafo gracias a la persistencia de vértices y aristas.

$$\Theta : \Gamma_1 \rightarrow \Gamma_2$$

$$\text{Si a adj b, entonces } \Theta(\text{a}) \text{ adj } \Theta(\text{b})$$

De igual manera, se dice que dos grupos G y H son isomorfos si existe esa misma correspondencia 1-1. Por otro lado, cuando un conjunto es isomorfo consigo mismo, se le llama a esa correspondencia una **permutación** en dicho conjunto.

Este fenómeno permite la existencia del llamado **Grupo Simétrico**, el cual representa el conjunto de todas las permutaciones.

Por último, se entiende como **Grupo de AUTOMORFISMOS** de un grafo Γ= (V, E) como el conjunto de todas las permutaciones en Γque no alteran la estructura del grafo.

2. Análisis del Paper de Autobahn

2.1. ¿Qué es un Autobahn? ¿Para qué sirve?

La existencia del Autobahn se justifica en el deseo de expandir las redes neuronales y su compatibilidad de manera gráfica. Muchas de las redes neuronales planteadas como grafos cuentan con serios problemas de origen matemático como la dificultad de cumplir con requisitos de isomorfismos y automorfismos. Se han realizado iteraciones variadas para dar con redes neuronales eficientes a un nivel matemático a partir de grafos, pero generalmente flaquean en algún área u otra. El **Autobahn** se introduce como un tipo de grafo que define redes neuronales equivariantes, es decir que mantienen las simetrías del grafo, a partir del uso del **Grupo de Automorfismos**. De hecho, su mismo nombre indica que es una red neuronal meramente basada en automorfismos. No solo utiliza esta propiedad para dar solución al problema de los isomorfismos en las redes neuronales, sino que pretende ser usado para el estudio de fármacos y elementos de naturaleza similar.

2.2. ¿Por qué los autores proponen utilizar los Automorfismos de Grafos para reflejar las simetrías internas de un Grafo?

Los automorfismos preservan cierta simetría presente de manera interna en los grafos. Como tal, el Autobahn tiene interés en que el isomorfismo se presente de esta forma para preservar la equivalencia que muchos otros modelos de redes neuronales no tienen en cuenta para realizar el proceso de computación correspondiente, sin pérdida de adyacencia entre sus vértices.

2.3. Análisis de Gráficas

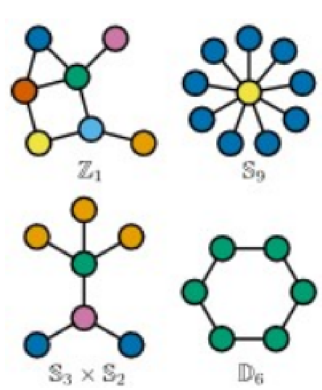

Figura 2. Grafos presuntamente automorfos con otros grupos.

En la Figura superior se pueden observar 4 estructuras de grafos, y cada una de ellas cuenta con una leyenda en su parte inferior que es indicativo del grupo con el que forman el automorfismo. Para medidas prácticas, se referirá a cada pareja (entiéndase como pareja a cada grafo con su grupo) como Conjunto 1, Conjunto 2, Conjunto 3 y Conjunto 4. Cada pareja tiene asignado a un conjunto en orden de izquierda a derecha y de arriba a abajo.

2.3.1. Análisis del Conjunto 1

Los elementos del Conjunto 1 son los siguientes:
$\Gamma = \{[A,B],[A,C],[C,B],[C,E],[B,D],[E,D],[B,F],[D,G]\}$ *ver Figura 3
Z_1 = Todos los números de módulo 1 = $\{0\}$

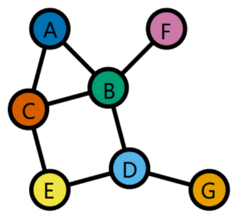

Figura 3. Grafo del Conjunto 1.

Siendo que el Conjunto de Z_1 tiene únicamente un elemento, solo se da una permutación posible, la cual es precisamente dejar el grafo inalterado. Por lo tanto, se denota que cualquier grafo que cumpla con las mismas exactas características que el original, como por ejemplo, cantidad de vértices y estructura, cumplirá con ser isomorfo.

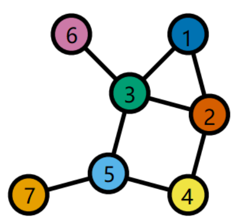

Figura 4. Grafo Isomorfo al Grafo mostrado en la Figura 3

A pesar de que se nota obvia la relación entre ambos grafos, no está de más terminar por trazar la matriz de adyacencia de ambos grafos para determinar que, en efecto, son isomorfos.

	A	B	C	D	E	F	G
A	0	1	1	0	0	0	0
B	1	0	1	1	0	1	0
C	1	1	0	0	1	0	0
D	0	1	0	0	1	0	1
E	0	0	1	1	0	0	0
F	0	1	0	0	0	0	0
G	0	0	0	1	0	0	0

Figura 5. Matriz de Adyacencia de Γ

	1	3	2	5	4	6	7
1	0	1	1	0	0	0	0
2	1	0	1	1	0	1	0
3	1	1	0	0	1	0	0
5	0	1	0	0	1	0	1
4	0	0	1	1	0	0	0
6	0	1	0	0	0	0	0
7	0	0	0	1	0	0	0

Figura 6. Matriz de Adyacencia del Isomorfismo de Γ

2.3.2. Análisis del Conjunto 3

El Conjunto 3 tiene una permutación entre los grupos simétricos S_2 x S_3. Teniendo aquello en cuenta, podemos asignar las siguientes variables de las posibles permutaciones entre ambos grupos, denominadas de la siguiente manera:

$$S_2 = \{x, y\}$$

$$S_3 = \{u, v, w\}$$

A	[x,y][u,v,w]
B	[y,x][u,v,w]
C	[x,y][u,w,v]
D	[y,x][u,w,v]
E	[x,y][v,u,w]
F	[y,x][v,u,w]
G	[x,y][v,w,u]
H	[y,x][v,w,u]
I	[x,y][w,u,v]
J	[y,x][w,u,v]
K	[x,y][w,v,u]
L	[y,x][w,v,u]

Figura 7. Permutaciones de S_2 x S_3

Teniendo al conjunto de S_2 x S_3 como las permutaciones marcadas de A a L, se puede formar una tabla de grupos de la siguiente manera:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
A	A	B	C	D	E	F	I	J	G	H	K	L
B	B	A	D	C	F	E	J	I	H	G	L	K
C	C	D	A	B	I	J	E	F	K	L	G	H
D	D	C	B	A	J	I	F	E	L	K	H	G
E	E	F	G	H	A	B	K	L	C	D	I	J
F	F	E	H	G	B	A	L	K	D	C	J	I
G	G	H	E	F	K	L	A	B	I	J	C	D
H	H	G	F	E	L	K	B	A	J	I	D	C
I	I	J	K	L	C	D	G	H	A	B	E	F
J	J	I	L	K	D	C	H	G	B	A	F	E
K	K	L	I	J	G	H	C	D	E	F	A	B
L	L	K	J	I	H	G	D	C	F	E	B	A

Figura 8. Tabla de Grupo de S_2 x S_3

Viendo ya la Tabla del producto entre ambos grupos simétricos, no hace falta reparar en mucho cuidado para darse cuenta de que no tiene el arreglo ideal que uno puede imaginarse en una tabla de operaciones de grupo.

Y es que, en efecto, la tabla superior NO constituye un grupo ya que no cumple asociatividad, lo cual era de esperarse con una conmutatividad tan dispareja. Sin embargo, es importante notar que, de hecho, el conjunto conserva una característica importante de un grupo y esa es su producto interno. Ningún elemento dentro de la tabla es ajeno a los elementos operadores, con lo cual aún se puede establecer una correspondencia entre vértices, aristas y adyacencias con el grafo correspondiente al conjunto 3, determinando la tabla anterior como los automorfismos isomorfos al grafo.

2.3.3. Análisis del Conjunto 4

El grafo del conjunto 4 es un hexágono, el cual puede ser marcado de la siguiente manera:

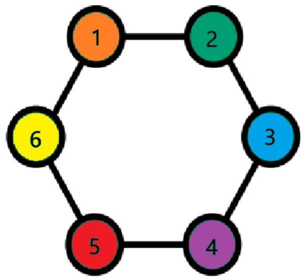

Figura 9. Grafo del Conjunto 4.

Es posible aplicar una serie de rotaciones en sentido de las agujas del reloj para generar transformaciones hasta repetir el elemento identidad, de esta manera:

A (ESTADO ORIGINAL)	1	2	3	4	5	6
B (Rotación de 60°)	6	1	2	3	4	5
C (Rotación de 120°)	5	6	1	2	3	4
D (Rotación de 180°)	4	5	6	1	2	3
E (Rotación de 240°)	3	4	5	6	1	2
F (Rotación de 300°)	2	3	4	5	6	1

Figura 10. Tabla de Rotaciones 1

A pesar de que parezca que a partir de ese punto las transformaciones se repiten, es posible afectar el estado original para ponerlo en modo espejo. Eso no solo genera una nueva transformación, sino que además a dicha transformación se le pueden aplicar las demás rotaciones, tal y como lo ilustra la siguiente tabla y Figura.

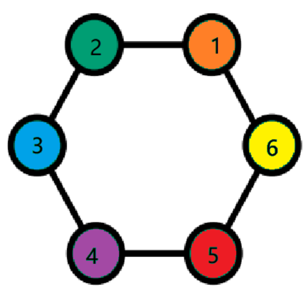

Figura 11. Grafo del Conjunto 4.

G (ESTADO ESPEJO)	4	5	3	2	1	6
H (Rotación de 60°)	6	4	5	3	2	1
I (Rotación de 120°)	1	6	4	5	3	2
J (Rotación de 180°)	2	1	6	4	5	3
K (Rotación de 240°)	3	2	1	6	4	5
L (Rotación de 300°)	5	3	2	1	6	4

Figura 12. Tabla de Rotaciones 2

Entonces, tenemos el siguiente grupo representativo de todas las posibles simetrías del hexágono:

$$G = \{A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K, L\}$$

Al operar los datos en una tabla como se ha hecho anteriormente, se obtienen los siguientes valores:

*	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l
a	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l
b	b	c	d	e	f	a	h	i	j	k	l	g
c	c	d	e	f	a	b	i	j	k	l	g	h
d	d	e	f	a	b	c	j	k	l	g	h	i
e	e	f	a	b	c	d	k	l	g	h	i	j
f	f	a	b	c	d	e	l	g	h	i	j	k
g	g	h	i	j	k	l	a	b	c	d	e	f
h	h	i	j	k	l	g	b	c	d	e	f	a
i	i	j	k	l	g	h	c	d	e	f	a	b
j	j	k	l	g	h	i	d	e	f	a	b	c
k	k	l	g	h	i	j	e	f	a	b	c	d
l	l	g	h	i	j	k	f	a	b	c	d	e

Figura 13. Tabla de Rotaciones y Transformaciones G.

Como se puede apreciar, los datos anteriores corresponden correctamente al conjunto D_6 como las transformaciones del hexágono.

2.4. ¿En qué consiste la siguiente Figura? ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D_6?

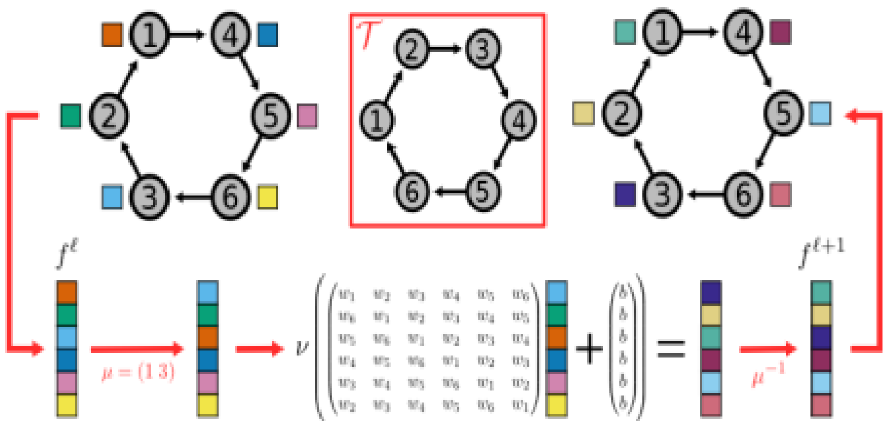

Figura 14. Representación del Funcionamiento de Autobahn.

La anterior figura, en pocas palabras, aplica el funcionamiento del Autobahn en un concepto cíclico. Al igual que con D_6, únicamente puede ser usado en grupos de automorfismos de manera cíclica, siendo incluso el resultado parte de este grupo.

Referencias

Henning Thiede, E. (s.f.). Autobahn. https://ehthiede.github.io/pdfs/autobahn.pdf. https://ehthiede.github.io/pdfs/autobahn.pdf