Autobahn

Cristhian Alejandro Alarcón Florido

May 2023

1 ¿Qué es un autobahn y para que sirve?

Autobahn son redes neuronales basadas en el automorfismo de grafos, es decir utilizando la red neuronal, se fragmenta un grafo en caminos y ciclos manteniendo la invarianza de permutaciones incluso después de aplicar convolución; tiene como objetivo aprender las propiedades de pequeñas molecúlas orgánicas lo suficientemente apropiado para hacer un contribución significante en los medicamenteos y el diseño de materiales, también apunta a secuencias de objetivos creídas importantes al identificarlas a través de la clase de isomorfismo del subgrafo correspondiente.

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

El grupo de automorfismos de un grafo me permite encontrar todas las simetrías del mismo, es decir, las permutaciones de vértices que preservan las estructuras y relaciones del grafo. Esto me permite agrupar vértices que desempeñan funciones similares en términos de relaciones, lo que a su vez reduce la complejidad computacional de las redes neuronales basadas en grafos. En otras palabras, puedo simplificar el grafo conservando su esencia fundamental para facilitar su procesamiento computacional.

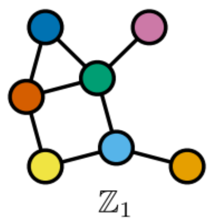

Figure 1: Isomorfismo 1
Este grafo representa el grupo cíclico de orden 1 (1)(2)(3)(4)(5)(6)(7), ya que al igual que en el grupo Z1 (que es la clase de equivalencia de 0 modulo 1, donde el único elemento es 0), solo hay un elemento y no existen permutaciones posibles que conserven la simetría interna del grafo. Debido a esta misma razón, según se menciona en el texto, ”los grafos con la misma órbita tienen el mismo color”. En este caso, observamos que todos los vértices tienen un color diferente, lo cual indica que no hay vértices que sean equivalentes entre sí bajo la acción de algún grupo de simetría.

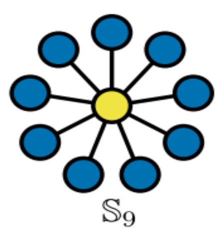

Figure 2: Isomorfismo 2
El grupo S_9 es el grupo simétrico de 9 elementos, que incluye todas las posibles permutaciones de esos 9 elementos. En otras palabras, tiene 9! (362,880) permutaciones distintas. De manera similar, en el grafo representado, los vértices 1 al 9 pertenecen a la misma órbita, lo que significa que se pueden permutar de 9! formas diferentes.

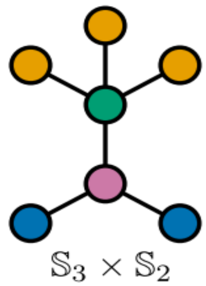

Figure 3: Isomorfismo 3

El grupo S_3xS_2 es el resultado de combinar los grupos simétricos de dos y tres elementos. El grupo S2 consta de 2! (2) permutaciones, que son la identidad y la única transposición posible. Mientras tanto, el grupo S3 consta de 3! (6) permutaciones posibles. Por lo tanto, el producto de estos dos grupos resulta en 12 posibles permutaciones. Si observamos el grupo de simetrías del grafo, encontramos un panorama similar. Por un lado, los vértices 1, 2 y 3 pertenecen a la misma órbita y se pueden permutar sin perder la simetría interna del grafo. Lo mismo ocurre con los vértices 6 y 7, que también se pueden permutar sin problemas. Estas permutaciones posibles son las mismas que obtendríamos con el grupo S_3xS_2.

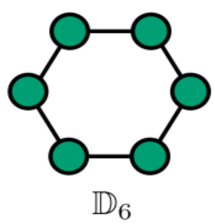

Figure 4: Isomorfismo 4

En el grupo D_6, que es el grupo diedral de 6 elementos, hay 12 elementos que representan las posibles rotaciones y reflexiones de los elementos. En este caso, no existen permutaciones individuales de los elementos, ya que ello resultaría en la pérdida de la simetría del sistema. Por esta razón, y para facilitar su comprensión, el grupo D6 se representa comúnmente mediante los ejes de simetría de un hexágono, que comparten las mismas características. En este contexto, los elementos pueden rotarse en cualquier dirección y también pueden reflejarse en relación a cualquier eje de simetría o reflexión del hexágono, sin que se pierda la simetría ni las relaciones iniciales.

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

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 representa la implementación del algoritmo 1 para crear una neurona basada en los automorfismos de un grafo, que en este caso es un grafo cíclico dirigido. En el gráfico, se observa que se utiliza la activación relacionada al grafo como entrada. Luego, se emplea una matriz plantilla y se realiza una operación con la matriz de pesos, a la cual se suma la constante b. Como resultado, se obtiene la matriz de entrada simplificada como salida. Sin embargo, debido a la simetría del grupo diedral de 6 elementos, en este caso no es posible simplificarla aún más.