Matemáticas Discretas II - Entrega "Autobahn: Automorphism-based Graph Neural Nets"

Fernando Novoa Salazar, Universidad Nacional de Colombia

2 de marzo de 2023

Respecto al siguiente artículo:
https://ehthiede.github.io/pdfs/autobahn.pdf
Responder las siguientes preguntas.

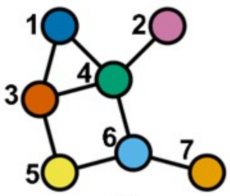
1. ¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?
   Una Autobahn es un tipo de red neuronal de grafos que aprovecha las simetrías de un grafo para mejorar su representación y lograr un mejor rendimiento en las tareas de aprendizaje basadas en estas estructuras. Específicamente, las Autobahn usan el grupo de automorfismos de un grafo para definir una arquitectura de red neuronal equivariante ante permutaciones, que puede capturar mejor las simetrías del grafo.

   Las Autobahn se han mostrado prometedores en varias aplicaciones, incluida la clasificación de nodos, la clasificación de grafos y la predicción de propiedades moleculares. Al aprovechar las simetrías de un grafo, las Autobahn pueden mejorar la representación del grafo y lograr un mejor rendimiento en estas tareas en comparación con las arquitecturas de redes neuronales de grafos tradicionales.

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 muchos grafos tienen simetrías internas, que pueden ser explotadas para mejorar la representación de los nodos y aristas del grafo y así mejorar el rendimiento en tareas de aprendizaje basadas en grafos.

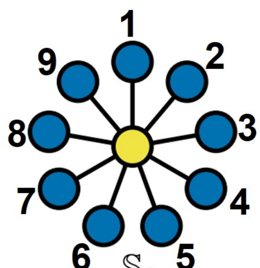
   Los automorfismos de un grafo son las transformaciones que mantienen inalterada la estructura del grafo, lo que significa que las simetrías internas del grafo están codificadas en su grupo de automorfismos. Al utilizar los automorfismos de un grafo para definir una arquitectura de red neuronal, se puede construir una red que sea simétrica respecto a los automorfismos del grafo, lo que significa que la red es capaz de procesar de manera eficiente y efectiva la información en el grafo que está relacionada con estas simetrías internas.

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



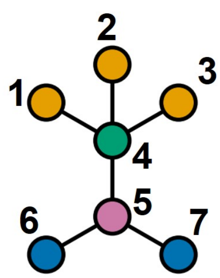
$\mathbb{Z}_1$

Este grafo representa el grupo cíclico de orden 1 (1)(2)(3)(4)(5)(6)(7) dado que igual que en el grupo de 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 óribta tienen el mismo color", en este caso, vemos que todos los vértices tienen color diferente, lo cual nos indica que no hay vértices que sean equivalente entre sí bajo la acción de algún grupo de simetría.



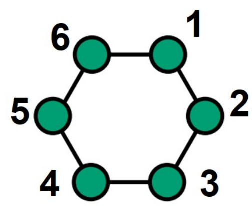
$\mathbb{S}_9$

El grupo S_9 es el grupo simétrico de 9 elementos, consiste 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.



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

El grupoo $S_3 \times S_2$ 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_4 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, tenemos el mismo panorama: por un lado tenemos los elementos 1,2,3 que pertenecen a la misma óribta y se pueden permutar sin perder la simetría interna del grafo; sucede lo mismo con los vértices 6 y 7, que se pueden permutar sin problema. Estas posibles permutaciones son las mismas que tendríamos con $S_3 \times S_2$.



$\mathbb{D}_6$

En el caso del grupo diedral D_6 se tienen 12 elementos que son las posibles rotaciones 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 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 respecto a cualquier eje de simetría de reflexión, sin perder la simetría ni las relaciones iniciales.

4. Explique en qué 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.