Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería

Matemáticas Discretas ii

Taller 3

Autor:
Juan Carlos Garavito Higuera

Profesor:
Francisco Albeiro Gomez Jaramillo

Febrero 2023

¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?

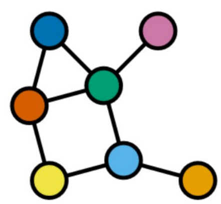
Automorphism-based graph neural networks (*Autobahn*) es un framework para construir redes neuronales con grafos de procesamiento de información. Para esto se basan en las simetrías que los grafos utilizados pueden tener. Las redes neuronales pueden mejorar su eficiencia y la precisión de las redes conectadas al utilizar la estructura simétrica del grafo y usar transformaciones automórficas en comparación con los modelos disponibles anteriormente a este framework, los cuales aumentaban su complejidad según el incremento de vértices en los grafos.

¿Por qué se propone utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo?

Al utilizar los automorfismos de un grafo en la construcción de una red neuronal para grafos, se puede explotar la simetría del grafo para mejorar el aprendizaje y obtener mejores resultados. En particular, la utilización de los automorfismos permite reducir el costo computacional y mejorar la precisión del aprendizaje, ya que se puede aprovechar la información redundante generada por las simetrías del grafo para reducir la cantidad de cálculos necesarios.
Además, la utilización de los automorfismos en la construcción de una red neuronal permite que el modelo sea más robusto frente a las variaciones en la estructura del grafo, ya que los automorfismos permiten que el modelo aprenda de las simetrías del grafo, en lugar de tener que aprender de forma separada para cada variación posible en la estructura.

Pruebe los isomorfismos sugeridos.

- a)
  Por la manera en que este se nos presenta, la única permutación que no altera la estructura



$\mathbb{Z}_1$

del grafo sería la identidad de este, puesto que no se cambia ningun vértice y con cualquier otra transformación se rompe esta regla isomórfica.

$\circ$	id
id	id

Por esta tabla podemos definirlo como el grupo:

$$G \;=\; \{id\}$$

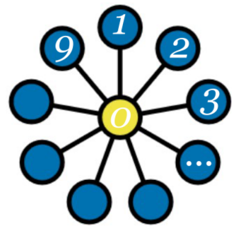
Siendo este un grupo cíclico de orden cero debido a que el elemento identidad me envía al mismo elemento identidad, en este caso se hace la relación con:

$$Z_1 \;=\; \{0\}$$

$+$	0
0	0

Haciendo muy sencillo encontrar una relación que las compare entre 0 e identidad, haciendolas isomorfas.

- b)



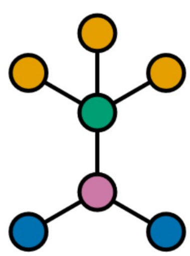
$\mathbb{S}_9$

Para este grafo tenemos un nodo estático con 9 conexiones idenpendientes de otros nodos, las permutación más basica en la que podemos pensar es en la identidad, dejar el grafo tal cual como se presenta, por otra parte debido a la singularidad de cada conexión la cantidad de posibles permutaciones sería de 9!. En cualquier otra fuera de esta el grafo perdería su estructura original. Entonces G sería un grupo de todas estas permutaciones posibles. El grupo S9 es definido como el grupo de simetría de todas las permutaciones posibles con 9 elementos. Esto nos hace muy sencillo realizar nuevamente una relación entre el grafo en cuestión y el grupo mencionado de la siguiente forma:

x	id	Per_1	Per_2	...	Per_n
θ	G_0	G_1	G_2	...	G_n

Siendo G los grafos posibles y Per las permutaciones posibles, además de n ser la cantidad de tanto grafos como permutaciones posibles de 9 elementos.

- c)



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

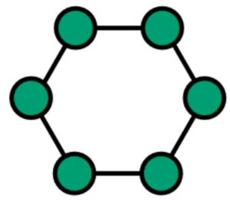
Para este grafo tenemos un caso similar al anterior tenemos dos partes del grafo con posibles permutaciones, en un lado de 2, y en el otro de 3 elementos siendo así 2! y 3!, sin embargo como no tenemos un único elemento estático sino 2 no podemos hacer transformaciones de estos sin cambiar las conexiones y formas del grafo, de esta manera tenemos cada grafo con sus posibles permutaciones incluyendo la combinatoria por el producto cartesiano de las permutaciones, incluyendo la identidad. Si vemos el grupo $S_3 \times S_2$ cumple estas mismas condiciones puesto que sería la comnbinatoria de laas permutaciones posibles con 3! y 2!, nuevamente podríamos realizar una relación que nos permita afirmar este isomorfismo. Esta se vería de la siguiente manera:

x	x_0	x_1	x_2	...	x_n
θ	G_0Per_0	G_0Per_1	G_0Per_2	...	G_nPer_n

Siendo G_nPer_n El grafo con la permutación del mismo en la combinatoria y $\S_n$ para el análogo representado por el grupo $S_3 \times S_2$.

- d)

  En este caso nos encontramos con un grafo con una forma similar a un hexágono regular, a este



$\mathbb{D}_6$

le podemos aplicar 12 transformaciones de las cuales 6 son rotaciones en intervalos de 60 grados incluyendo la rotación de 0 grados, siendo esta la identidad. Las restantes son reflexiones de estas rotaciones:

x_0	1	2	3	4	5	6	(0°)
x_1	2	3	4	5	6	1	(60°)
x_2	3	4	5	6	1	2	(120°)
x_3	4	5	6	1	2	3	(180°)
x_4	5	6	1	2	3	4	(240°)
x_5	6	1	2	3	4	5	(300°)
y_0	5	4	3	2	1	6	
y_1	4	3	2	1	6	5	
y_2	3	2	1	6	5	4	
y_3	2	1	6	5	4	3	
y_4	1	6	5	4	3	2	
y_5	6	5	4	3	2	1	

En base a estas permutaciones podemos realizar una tabla de cayley de 12 elementos por 12 elementos con la composición como operación natural, se podría ver de la siguiente manera:

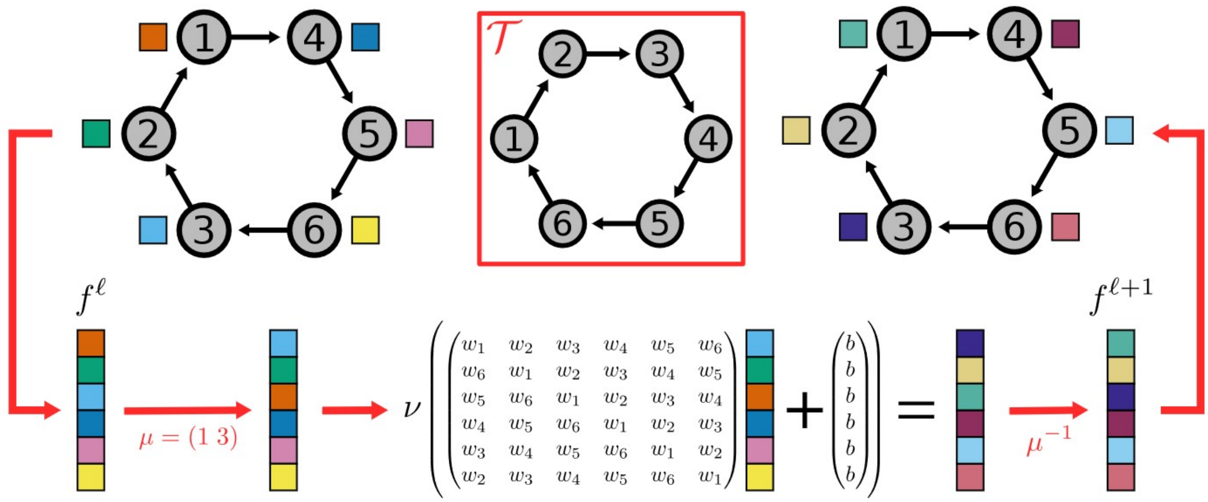
$\circ$	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
x_0	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
x_1	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_0	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_0
x_2	x_2	x_3	x_4	x_5	x_0	x_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_0	y_1
x_3	x_3	x_4	x_5	x_0	x_1	x_2	y_3	y_4	y_5	y_0	y_1	y_2
x_4	x_4	x_5	x_0	x_1	x_2	x_3	y_4	y_5	y_0	y_1	y_2	y_3
x_5	x_5	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	y_5	y_0	y_1	y_2	y_3	y_4
y_0	y_0	y_5	y_4	y_3	y_2	y_1	x_0	x_5	x_4	x_3	x_2	x_1
y_1	y_1	y_0	y_5	y_4	y_3	y_2	x_1	x_0	x_5	x_4	x_3	x_2
y_2	y_2	y_1	y_0	y_5	y_4	y_3	x_2	x_1	x_0	x_5	x_4	x_3
y_3	y_3	y_2	y_1	y_0	y_5	y_4	x_3	x_2	x_1	x_0	x_5	x_4
y_4	y_4	y_3	y_2	y_1	y_0	y_5	x_4	x_3	x_2	x_1	x_0	x_5
y_5	y_5	y_4	y_3	y_2	y_1	y_0	x_5	x_4	x_3	x_2	x_1	x_0

Esto está explicado de manera más extensa en el siguiente documento: https://tinyurl.com/2vhfhpe6

El grupo a comparar es D_6 que es el grupo diedral o de simetría de un polígono regular, en este caso sería de un hexágono regular que también cuenta con 6 rotaciones y 6 reflexiones las cuales llamaremos $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, F_1, F_2, F_3, F_4, F_4, F_5, F_6$ (siendo F_n las reflexiones y R_n las rotaciones las cuales serán análogas al grupo anteriormente mostrado, por lo que se puede determinar una relación que las asocie:

x	x_0	...	x_6	x_7	...	x_{12}
θ	R_0	...	R_6	F_7	...	F_{12}

Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b



(b)

Esta figura consiste en la transformación de un grafo cíclico hexagonal C_6 en una neurona aplicando el algoritmo propuesto por los autores además haciendo uso del reconocimiento de automorfismos para la coincidencia total en estos procesos de transformación del grupo cíclico, de manera simplificada expresa el proceso de aplicación del framework Autobahn del cual texto nos habla. También se puede notar que el grafo hexagonal es un grupo cíclico por lo que está dirigido y al final se llega al mismo punto de partida, sin embargo, contiene similitudes con el grupo D_6 por su forma y conexiones, también se le pueden aplicar transformaciones rotativas como las del grupo diedral de orden 6, sin embargo por la forma en que las conexiones entre nosdos están dadas, no se pueden realizar reflexiones, quedando así con las 6 permutaciones rotativas, de esta manera también podemos considerar a C_6 como un subgrupo de D_6 debido a que cuenta con las condiciones necesarias para serlo.