Autobahan

Juliana Parra Caro

May 2023

1 ¿Qué es un autobahan y para qué sirve?

El artículo "Autobahn: Automorphism-based Graph Neural Nets" presenta una nueva familia de redes neuronales para el aprendizaje de grafos llamada Autobahn. Esta red utiliza grupos de automorfismos de subgrafos para realizar convoluciones localmente equivariantes en grafos.
La idea es que los grupos de automorfismos de los subgrafos brindan información sobre las simetrías locales del grafo, lo que se puede utilizar para realizar operaciones de convolución que tengan en cuenta la simetría local de cada subgrafo. Autobahn se puede utilizar para realizar tareas de aprendizaje de grafos como lo son la clasifi- cación y predicción de las propiedades 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 sí mismos 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 distintos, correspon- dientes a las rotaciones de 0, 90, 180 y 270 grados. Al utilizar los automorfismos para diseñar las convoluciones 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 sólo necesita aprender los pesos para un conjunto reducido de vértices que son representativos de cada órbita de automorfismos.
Además, utilizar los automorfismos de grafos también permite que la red sea equivariante a las transformaciones que preservan la estructura del grafo, lo que puede ser útil en muchas apli- caciones de procesamiento de grafos, como el reconocimiento de patrones y la clasificación de grafos.

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

El primer grafo describe el grupo cíclico de orden 1 y su estructura simétrica. De manera similar al grupo Z1, cada elemento en este grupo tiene una órbita única, lo que significa que no es posible realizar permutaciones que preserven la simetría interna del grafo. Además, dado que los grafos con la misma órbita tienen el mismo color, en este grafo todos los vértices son de diferentes colores, lo que sugiere que no hay vértices equivalentes que puedan ser intercambiados mediante simetrías.
Z1:
El segundo grafo describe un grupo simétrico de nueve elementos, que corresponde a un grafo con nueve nodos. En un grafo simétrico de nueve nodos, todas las posibles permutaciones serían igual al factorial de sus órbitas similares, que son los vértices del primero al noveno, pintados de color azul. Estos vértices se pueden permutar de 9! maneras distintas mientras se mantiene la simetría interna del grafo.
S3xS2:
El tercer grafo describe el producto de dos grafos simétricos: uno con dos elementos y otro con tres elementos. En cuanto al grupo de simetrías del grafo resultante, podemos observar que los primeros vértices pintados de naranja permanecen en la misma órbita y pueden ser permutados sin que se pierda la estructura simétrica del grafo, al igual que los vértices inferiores pintados de azul. El grupo de simetría S2 tiene 2! permutaciones y el grupo de simetría S3 tiene 3! permutaciones, lo que significa que la totalidad de permutaciones distintas del grafo es de 12.
D6:
El grupo diedral D6 consta de 12 elementos que incluyen todas las rotaciones y reflexiones posi- bles. La simetría del sistema se puede representar mediante los ejes de simetría de un hexágono que tiene características similares. Todos los nodos del grafo pertenecen a la misma órbita del grupo automorfismo, lo que significa que los elementos del grafo pueden ser rotados en cualquier dirección y también pueden ser reflejados en cualquier eje de simetría del hexágono sin que se pierdan las condiciones de su naturaleza simétrica.

4 Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D6?

En el artículo, se describe que la figura de la neurona fue creada aplicando el Algoritmo 1 a un grafo dirigido cíclico. Según el artículo, el proceso de concordancia solo puede realizarse hasta un elemento en el grupo de automorfismos del grafo, específicamente el grupo cíclico de orden seis, C6.
La configuración simplificada en la que la capa opera en un solo canal de características de los nodos indica que la transformación no altera la topología real del grafo y es invariante en cuanto a las permutaciones realizadas. En otras palabras, cuando se construye C6 que opera con datos gráficos, es importante preservar las simetrías naturales de los grafos de entrada bajo permutación.
En este ejemplo, la red neuronal se gira y se realiza la convolución de la matriz de adyacencia en la información de sus neuronas o elementos, sin que la naturaleza del grafo cambie. Después de aplicar la convolución, la activación de entrada recupera las capas de convolución estándar utilizadas y muestra el isomorfismo del grafo. En otras palabras, la convolución aplicada a la matriz de adyacencia preserva las características del grafo original y nos permite ver que el resultado final sigue siendo isomórfico al grafo original.
El grafo C6 mostrado en la figura 2.b es isomorfo a D6, lo que significa que los automorfismos de D6 corresponden a la estructura de C6. Además, D6 tiene un subgrupo normal de orden 6 que es cíclico y que también se puede encontrar en C6. Esto se debe a que los dos grafos tienen la misma estructura subyacente y, por lo tanto, comparten las mismas propiedades y subgrupos.