



Tarea - Autobahn: Automorphism-based graph neural nets

Karen Tatiana Alvarez Baez

1) ¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?

Una Autobahn es una red neuronal basada en automorfismos que sugiere una alternativa para construir redes neuronales en grafos, y sirve para reconstruir gráficos, especialmente gráficos moleculares. Para esto, la Autobahn toma una plantilla, que corresponde a un gráfico de estrella, como referencia y aplica convoluciones a cada gráfico local que sea isomorfo (en este caso son las permutaciones resultantes al intercambiar las hojas de la estrella) mientras se transfiere la información entre ellos.

Además, tiene otros usos como lo son las redes neuronales del paso de mensajes, donde las plantillas son gráficos estelares, y la aplicación en gráficos de cuadrícula, que resulta en la recuperación de las redes neuronales convolucionales que son orientables.

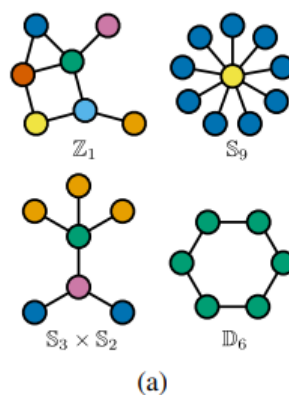
2) ¿Por qué los autores proponen utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo?

Porque cuando se trabaja con moléculas, que es en las que se centra el trabajo, estas dependen de las subestructuras de varios átomos, lo que hace que sea difícil reconocerlas; pero si se considera la simetría de la molécula en sí, se vio que esta es una codificación de su grupo de automorfismos, que resulta ser el grupo que refleja las simetrías internas de las subestructuras de la molécula, por lo que pueden reconocerse más fácilmente.

En otras palabras, sería una forma de encontrar subgrafos, que representan una estructura específica dentro del grafo, teniendo en cuenta las permutaciones posibles, lo cual adicionalmente implica un menor gasto computacional al aplicar esta técnica en gráficos más complejos.

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

En este caso, en la lectura se sugieren los automorfismos de \mathbb{Z}_1 , \mathbb{S}_9 , $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$ y \mathbb{D}_6 , siendo estos isomorfismos sobre sí mismos.



Primero, se puede ver fácilmente que \mathbb{Z}_1 al ser un grupo trivial solo cuenta con el elemento neutro, de modo que al mapear el elemento neutro en sí mismo se va a tener un automorfismo y al realizar la operación, que es la suma de elementos módulo 1, siempre se va a obtener el mismo neutro sin importar la dirección o agrupación en la que se opere.

Luego, para el grupo simétrico \mathbb{S}_9 , se tienen todas las posibles permutaciones de 9 elementos, que tal como se ve en el grafo, suponen todos los posibles intercambios de los nodos azules, que sin importar como varíen, mantienen la estructura inicial del grafo y se pueden representar mediante una función que mapea elementos de \mathbb{S}_9 en otras permutaciones de \mathbb{S}_9 , por ejemplo $f(x)$ como la permutación que multiplica una permutación fija por el elemento de \mathbb{S}_9 , por su conjugado.

Por otro lado, para el producto cartesiano $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$ se tiene una pareja ordenada en la que uno de los elementos es la permutación de tres nodos y el otro es la permutación de dos nodos, los cuales fácilmente podrían mapearse con una función que intercambie dichos elementos tal que $f(x)$ mapea el par (a,b) en (b,a) sobre el mismo grupo $\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$, de modo que la estructura del grafo se preserva y por tanto se tiene un automorfismo.

Finalmente, para el grupo diedral \mathbb{D}_6 , sabemos que se tienen doce elementos que representan las rotaciones y reflexiones de un hexágono, que se pueden ver como todas las posibles permutaciones del grafo que no modifican su estructura, de modo que los nodos no permutan de manera independiente sino en conjunto para preservar la composición inicial. Así, se podría tener una función $f(x)$ que mapea elementos de \mathbb{D}_6 en su inverso, que también se encuentra en \mathbb{D}_6 .

4) Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de \mathbb{D}_6 ?

La figura ilustra el funcionamiento de una neurona en las redes neuronales Autobahn, la cual consiste en la aplicación de un algoritmo en el que primero se busca una permutación dentro del grupo simétrico, tal que al aplicarla en el grafo, se pueda obtener un grafo usado como plantilla, de modo que al hacer convoluciones en el grupo de automorfismos del grafo que se está usando como plantilla, se pueda retornar el orden del grafo original. Así, luego de aplicar el algoritmo se tiene información de los nodos vecinos en cada nodo, que es lo que se propone para optimizar gastos computacionalmente altos al momento de pasar la información por la red neuronal.

Y en este caso tal como se mencionó previamente, las convoluciones se aplican en el grupo de automorfismos de \mathbb{D}_6 , para que al obtener la información de los nodos vecinos no se pierda la estructura original del grupo.