Autobahn

Luis Daniel Sanchez Molina

February 2023

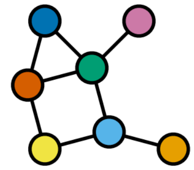
1 ¿Qué es una Autobahn y para qué sirve?

Autobahn: Automorphism-based Neural Networks o en español, redes neuronales basadas en automorfismos, son una nueva familia de grafos de redes neuronales que tienen como objetivo primordial diseñar redes nuronales que puedan entender las propiedades de las moléculas orgánicas pequeñas, con la precisión suficiente para hacer una contribución significativa al descubrimiento de fármacos y al diseño de materiales.

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, ya que, permiten aprovechar directamente el grupo de automorfismos de subgrafos para construir neuronas flexibles y eficientes, además, el grupo simétrico se ha utilizado con éxito para construir permutaciones de redes equivariantes para tareas de aprendizaje definidas en conjuntos y para grafos de redes neuronales

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



$\mathbb{Z}_1$

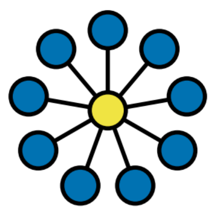
El grupo de automorfismos para la figura mostrada anteriormente corresponde a lo siguiente:

$$Aut(G) = \{\ id\}$$

Ya que es imposible encontrar otro automorfismo que no cambie la estructura inicial del grafo, solo ajustando uno de los nodos. Ahora bien, para el grupo de automorfismos de Z_1 tenemos que:

$$Aut(Z_1) = \{\ 0\}$$

Podemos observar que el grafo mencionado al inicio es isomorfo a Z_1 ya que comparten una relación bastante obvia en cuanto 0 y la identidad, donde ambas hacen referencia a que son el elemento neutro, es decir, que no cambia el estado de un objeto.



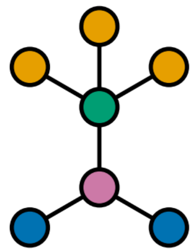
$\mathbb{S}_9$

En este grafo tenemos un nodo estático con 9 conexiones idenpendientes de otros nodos, la 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.

$$Aut(S_9) = \{\ 9!\}$$

El grupo S_9 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_3	...	Per_n
θ	G_0	G_1	G_2	G_3	...	G_n

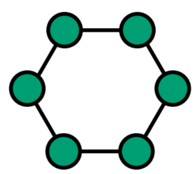


$\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_2$

En este grafo podemos dividirlo en dos partes con posibles permutaciones, por un lado tenemos 3! y por el otro lado tenemos 2!, sin embargo tenemos dos puntos fijos, lo cual nos permite intercambiarlos para generar otra posible permutación. Si vemos el grupo S_3S_2 cumple estas mismas condiciones puesto que sería la combinatoria de las permutaciones posibles con 3! y 2!, nuevamente podríamos realizar una relación que nos permita afirmar este isomorfismo.

x	x_0	x_1	x_2	x_3	...	x_n
θ	G_0Per_0	G_1Per_1	G_2Per_2	G_3Per_3	...	G_nPer_n

Siendo G_nPer_n El grafo con la permutación del mismo en la combinatoria.



$\mathbb{D}_6$

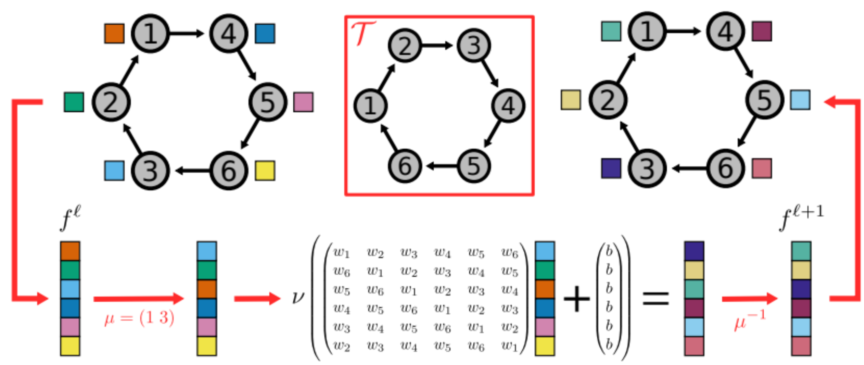
Las posibles tranformaciones para este grafo son:

X	1	2	3	4	5	6
θ (x_2)	2	3	4	5	6	1
θ (x_3)	3	4	5	6	1	2
θ (x_4)	4	5	6	1	2	3
θ (x_5)	5	6	1	2	3	4
θ (x_6)	6	1	2	3	4	5
θ (x_7)	5	4	3	2	1	6
θ (x_8)	4	3	2	1	6	5
θ (x_9)	3	2	1	6	5	4
θ (x_{10})	2	1	6	5	4	3
θ (x_{11})	1	6	5	4	3	2
θ (x_{12})	6	5	4	3	2	1

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 R1, R2, R3, R4, R5, R6, F1, F2, F3, F4, F4, F5, F6 (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_2	...	x_6	x_7	...	x_{12}
θ	R_1	R_2	...	R_6	R_7	...	R_{12}

4 Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D_6?



(b)

Esta figura consiste en la transformación de un grafo cíclico hexagonal C6 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 D6 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 C6 como un subgrupo de D6 debido a que cuenta con las condiciones necesarias para serlo.