Matemáticas discretas II

Melissa Forero Narváez

27 de febrero de 2023

Autobahn

1. ¿Que es una Autobahn y para que sirve?

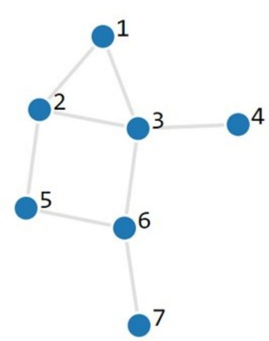
Una red neuronal basada en automorfismos es un tipo de diseño de red neuronal que utiliza las simetrias internas de un grafo para procesar de manera mas eficiente datos de entrada. En una Autobahn, se descompone el grafo en una colección de subgrafos y se aplican convoluciones locales que son invariantes a los grupos de automorfismos de cada subgrafo.

Las aplicaciones de este tipo de redes neuronales tienen alcance en campos donde se manejan datos estructurados y se requiere un modelo que pueda captar la información asociadad al grafo. Esta arquitectura de red neuronal es útil en el descubrimiento de nuevos fármacos y en el diseño de nuevos materiales gracias al aprendizaje preciso de las propiedades de moléculas orgánicas. También en áreas como la computación visual y el procesamiento de lenguaje natural.

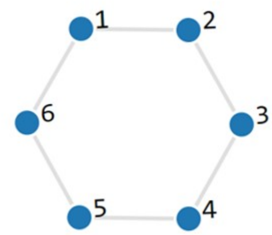
2. ¿Por qué los autores proponen utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo?

Los automorfismos de un grafo son biyecciones del conjunto de vértices que mantienen la estructura del grafo, por esta razón un automorfismo es una simetría interna del grafo que es su propia inversa ya que si se aplica el automorfismo a un vértice del grafo, y luego se aplica el mismo automorfismo al resultado, se obtiene el vértice original. Además, este automorfismo preserva la estructura del grafo, es decir, no altera la forma en que los vértices están conectados entre sí. Los autores afirman que hacer uso de esta propiedad permite superar problemas como los que presentan las MPPNs (Message Passing Neural Networks) para reconocer subestructuras.

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



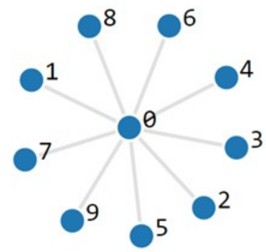
El grupo de automorfismos del grafo 1 solo contiene un elemento, pues no existe una función biyectiva que preserve las relaciones de adyacencia entre los vértices a excepción de la identidad. Por otro lado, el grupo de enteros módulo 1 es un grupo cíclico de orden 1, que contiene un solo elemento. Por lo tanto, el grafo 1 al no tener simetrías internas, excepto la identidad, es isomorfo al grupo Z1, ya que ambos tienen la misma estructura trivial y un único elemento.



El grupo diedral D6 está compuesto por 12 elementos, que son las rotaciones y las reflexiones que dejan fijo al hexágono regular. Se puede asignar a cada elemento del grupo D6 una permutación de los vértices del grafo así:

- R0: corresponde a la identidad, que deja fijo cada vértice del grafo.
- R1: corresponde a la permutación (v1 v2 v3 v4 v5 v6), que rota los vértices un lugar en sentido antihorario.
- R2: corresponde a la permutación (v1 v3 v5 v2 v4 v6), que rota los vértices dos lugares en sentido antihorario.
- R3: corresponde a la permutación (v1 v4 v2 v5 v3 v6), que rota los vértices tres lugares en sentido antihorario.
- R4: corresponde a la permutación (v1 v5 v4 v3 v2 v6), que rota los vértices cuatro lugares en sentido antihorario.
- R5: corresponde a la permutación (v1 v6 v5 v4 v3 v2), que rota los vértices cinco lugares en sentido antihorario.
- F0: corresponde a la permutación (v1 v6)(v2 v5)(v3 v4), que refleja el grafo a lo largo del eje vertical que pasa por el centro.
- F1: corresponde a la permutación (v1 v5)(v2 v6), que refleja el grafo a lo largo de la línea que conecta el centro con el vértice 1.
- F2: corresponde a la permutación (v1 v4)(v3 v6)(v2 v5), que refleja el grafo a lo largo de la línea que conecta el centro con el vértice 2.
- F3: corresponde a la permutación (v1 v3)(v4 v6), que refleja el grafo a lo largo de la línea que conecta el centro con el vértice 3.
- F4: corresponde a la permutación (v1 v2)(v3 v5)(v4 v6), que refleja el grafo a lo largo de la línea que conecta el centro con el vértice 4.
- F5: corresponde a la permutación (v1 v4 v2)(v3 v5 v6), que rota el grafo en sentido horario alrededor del centro.

Entonces se establece una correspondencia biyectiva entre los elementos del grupo D6 y las simetrías del grafo hexagonal, lo que permite concluir que el grafo es isomorfo al grupo diedral D6.



Para el grafo "estrella", hay una simetría para cada permutación de los 9 vértices conectados al vértice

central. Esto se debe a que cualquier permutación de los vértices se puede lograr rotando el grafo. Por lo tanto, el número de simetrías de un grafo de 10 vértices en forma de estrella es igual al número de permutaciones de 9 elementos, que es igual a: $9! = 362880$
Cada permutación en S9 se puede escribir como una composición de estas permutaciones, que corresponden a las operaciones del grafo. Por lo tanto, se puede ver que ue existe una biyección entre los elementos del grafo y los elementos del grupo de permutaciones S9, lo que implica que el grafo y el grupo son isomorfos.

4. Explique en que consiste la figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos D6?
La figura muestra una neurona construida a partir de un grafo cíclico de entrada, se calcula el grupo de automorfismos que corresponde al grupo cíclico de orden 6. La capa de neuronas construida mediante este algoritmo se compone de varias neuronas, cada una de las cuales está asignada a un conjunto de vértices del grafo. La relacion entre los grupos D6 y C6 se basa en que ambos tienen el mismo generador: la rotación de 60 grados, entonces C6 es un subgrupo de D6 que contiene solo las rotaciones del hexágono.