UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE BOGOTA

MATEMATICAS DISCRETAS II
Francisco Albeiro Gomez Jaramillo

Sergio Alejandro Nova Pérez
Ingeniería de Sistemas y computación
Facultad Ingeniería

Autobahn: Automorphism-based Graph Neural Nets

Sergio Alejandro Nova Pérez

February 2023

1 Preguntas

1. ¿ Qué es una Autobahn y para qué sirve?
2. ¿Por qué los autores proponen utilizar los automorfismos de grafos para reflejar las simetrías internas de un grafo?
3. Pruebe los isomorfismos sugeridos por la (Figura 2.1 panel a)
4. Explique en que consiste la Figura 2.1 panel b. ¿Cuál es su relación con el grupo de automorfismos de D_6?

¿ Qué es una Autobahn y para qué sirve?

El modelo de red neuronal denominado "Autobahn" se basa en el concepto de automorfismos y se utiliza como una alternativa a las redes neuronales convencionales. Una de las ventajas principales de Autobahn es su eficiencia matemática, ya que es más rápido y tiene un menor costo computacional. Además, es eficiente en términos de uso de memoria y presenta una estructura intuitivamente atractiva.

Un aspecto destacado de Autobahn es su capacidad para respetar las simetrías de la red cuando se realizan permutaciones de nodos. Esto significa que la estructura y el funcionamiento de la red se mantienen invariantes ante la reordenación de los nodos.

Otra característica importante de Autobahn es su capacidad para garantizar la invariabilidad del isomorfismo. Esto implica que las propiedades estructurales de la red neuronal se mantienen constantes, independientemente de cómo se representen los datos o las características.

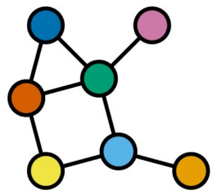
El uso principal de Autobahn se centra en la construcción de Redes Neuronales de Pasos de Mensajes (MPNN), donde se aprovecha su eficiencia y capacidad para preservar simetrías y propiedades estructurales. Estas redes son utilizadas en diversos campos, como el procesamiento de lenguaje natural, la visión por computadora y otros problemas de aprendizaje automático.

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

Debido a la presencia de automorfismos no triviales en el grafo, no es necesario verificar su simetría, ya que el grupo de automorfismos representa todas las permutaciones en el conjunto de vértices que preservan la estructura del grafo, es decir, el grupo simétrico. Como resultado, se pueden aplicar las capas completamente conectadas sin preocupación.

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

Figure 1: 2.1 panel a



$\mathbb{Z}_1$

Para comprobar el isomorfismo de este grado se construye el grupo de automorfismos denotado como Auto G_1. Ahora, le vamos a asignar cualquier definido por los siguientes elementos 1, 2, 3, 4, 5, 6. Para conservar la adyacencia de G_1 se tendrá la permutación neutra $\mathrm{g}_0 = (1)$. De tal manera que Auto G_1

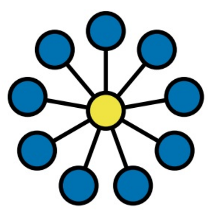
$\circ$	g_0
g_0	g_0

Donde se puede verificar que:

$$\begin{aligned} \mathrm{h} = \mathrm{g}_1 &\rightarrow z_1 \\ \mathrm{g}_a &\rightarrow a \end{aligned}$$

El cual es un isomorfismo empleado para notar la simetría para todo grupo cíclico y su forma canónica. Finalmente, se tiene que Auto G_1 y Z_1 son isomorfos.

Figure 2: 2.2 panel a



$\mathbb{S}_9$

Esta demostración se puede realizar gracias al teorema de Cayley el cual afirma que todo grupo es isomorfo a un subgrupo de un grupo simétrico.
Sea G un grupo finito con n elementos. Vamos a considerar al conjunto S_n de todas las permutaciones de los elementos de G. Luego definimos una función.

$$\mathrm{f}: \mathrm{G} \rightarrow S_n \;\; por \;\; f_g(x) = \forall gx \in G_{yx} \in G$$

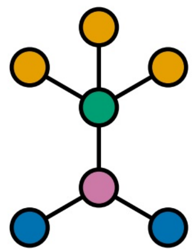
f toma cada elemento *g(y)* y lo mapea en la permutación de S correspondiente a cada x bajo el producto de *g*.

$$\text{Sea } g{,}h \in G \quad tal \;\; que \quad f_g = f_h \quad entonces \;\; g_x = g_h \; \forall G$$

Evidenciamos que f es un homomorfismo de G en S , o visto de otra forma, $f_g h = f_g$ compuesta de f_h $\forall g, h \in G$
La permutación de $f_g h$ en S se define como f(gh)(x)= ghx $=\mathrm{f}_g(\mathrm{hx}) = \mathrm{f}_g$ compuesta de $\mathrm{f}_h \forall x \in G$.
Dado que f es un homomorfismo 1 - 1 de G en S , su imagen es un subgrupo de S el cual es isomorfo a G.

Ahora, sea el grafo de un conjunto $G_{\in}$ 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9 en el cual las permutaciones no involucrarán al 0 para conservar su adyacencia, permutando los nodos del 1-9 para obtener un total de 9! posibles permutaciones. Finalmente, por el teorema de Cayley, el grafo anterior es isomorfo a un subgrupo de S_9, siendo S_9 un subgrupo de orden 9! .En otras palabras, por el teorema de Cayley se demuestra que Auto $G_{\in}$ es isomorfo a S_9.

Figure 3: 2.3 panel a



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

Teniéndose a S_3 de orden 3! bajo la composición

$$S_2 = \{e, (1\ 2), (2\ 3), (1\ 3), (1\ 2\ 3), (1\ 3\ 2)\}$$

Teniéndose además S_2 de orden 2!

$$S_2=\{e, (45) \}$$

De tal manera que el producto cartesiano de $S_3 \times S_2$ sea

$$S_3 \times S_2 = \{e, S_3 - e, S_2 - e, (12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

Donde $S_3 - eyS_2$ es el resultado de combinar los respectivos conjuntos 1 y 2 con el elemento neutro e, deduciendo los duplicados del mismo y resultando así en un conjunto de orden 12.

Tomando $\{G_3\}$ se construye el respectivo grupo de permutaciones en notación cíclica. Allí se incluye la permutación identidad y se consideran las posibles permutaciones que conservan la adyacencia de los nodos 1 - 3 con el nodo 6, de la misma forma, se consideran los nodos 4 - 5 con el nodo 7 para después considerar las combinaciones entre estas permutaciones, ya que de otra manera perdería la adyacencia de los primeros 3 nodos. De tal manera que podemos definir el automorfismo de este grafo como

$$\text{Auto}\ \{\ G_3\ \} = \{\ e(45),(12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

De tal manera que

$$S_3 - e = \{ (1\ 2), (2\ 3), (1\ 3), (1\ 2\ 3), (1\ 3\ 2)\}$$

$$S_2 - e = \{ (4\ 5)\}$$

Obteniendo así:

$$\text{Auto}\ \{\ G_3\ \} = \{\ e, S_3 - e, S_2 - e,(12)(45), (23)(45), (13)(45), (123)(45), (132)(45)\}$$

Cumpliendo así la definición de :

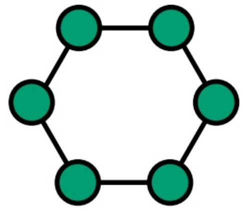
$$id(G_3)\colon\ G_3 \rightarrow S_3 \times S_2$$

$$g \rightarrow g$$

Donde la función identidad es una función biyectiva tal que $id(g_1 * g_2) = id(g_1) * id(g_2), ergo, Auto\{G_3\}$ *y* $S_3 \times S_2$ *son isomorfos.*

El grafo anterior corresponde a un grupo diedral D_6 de un poligono regular formado por rotaciones y reflexiones de poligonos de n lados.
Este grupo de simetría pertenece a un hexágono regular. Contiene 12 elementos y se representa de la siguiente manera:

Figure 4: 2.4 panel a



$\mathbb{D}_6$

$D_6 = \{$ r1,r2,r3,r4,r5,r6,r7,r8,r9,r10,r11,r12$\}$

donde r1 es la rotación neutra, r2 a r6 son rotaciones en π / 3 radianes girando entorno al centro del polígono.
De manera similar, de r7 a r12 se representan las reflexiones en los ejes del hexágono.
Construyendo la tabla de Cayley quedaría de la siguiente manera

$\circ$	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10	r11	r12
r1	r1	r2	r3	r4	r5	r6	r7	r8	r9	r10	r11	r12
r2	r2	r3	r4	r5	r6	r1	r12	r7	r8	r9	r10	r11
r3	r3	r4	r5	r6	r1	r2	r11	r12	r7	r8	r9	r10
r4	r4	r5	r6	r1	r2	r3	r10	r11	r12	r7	r8	r9
r5	r11	r6	r1	r2	r3	r4	r9	r10	r11	r12	r7	r8
r6	r6	r1	r2	r3	r4	r5	r8	r9	r10	r11	r12	r7
r7	r7	r11	r10	r9	r8	r7	r6	r6	r5	r4	r3	r2
r8	r8	r12	r11	r10	r9	r2	r1	r1	r6	r5	r4	r3
r9	r9	r7	r12	r11	r10	r3	r2	r2	r1	r6	r5	r4
r10	r10	r8	r7	r12	r11	r4	r3	r8	r2	r1	r6	r5
r11	r11	r9	r8	r7	r12	r5	r4	r8	r3	r2	r1	r6
r12	r12	r10	r9	r8	r7	r6	r5	r8	r4	r3	r2	r1

Tabla 1 : Tabla de Cayley del grupo diedral del hexágono

Obteniendo así las siguientes permutaciones:
r1 : [1,2,3,4,5,6], *r2* : [2,3,4,5,6,1], *r3* : [3,4,5,6,1,2], *r4* : [4,5,6,1,2,3], *r5* : [5,6,1,2,3,4], *r6* : [6,1,2,3,4,5], *r7* : [6,5,4,3,2,1], *r8* : [5,4,3,2,1,6], *r9* : [4,3,2,1,6,5], *r10* : [3,2,1,6,5,4], *r11* : [2,1,6,5,4,3], *r12* : [1,6,5,4,3,2]

Realizando las operaciones del automorfismo

Auto $[G_4] = \{$ r1,r2,r3,r4,r5,r6,r7,r8,r9,r10,r11,r12$\}$

Por lo que se tiene que

$id(G_1) : \ G_3 \rightarrow D_6$

$\mathrm{r} \rightarrow r$

Dado que la función identidad es un isomorfismo, de tal manera que Auto G_1 y D_6 son isomorfos.

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

La estructura de una neurona análoga construida con simetría de grafos cíclicos se muestra en la figura 2b. En esta figura, se puede observar el emparejamiento que se puede realizar mediante una permutación cíclica. Esta estructura tiene una relación con el grafo D_6, que corresponde al grupo diedral, el cual representa la simetría de un polígono regular con seis nodos conectados de manera consecutiva. El grafo D_6 incluye tanto rotaciones como reflexiones, lo cual concuerda con la estructura base presentada en el ejemplo.