



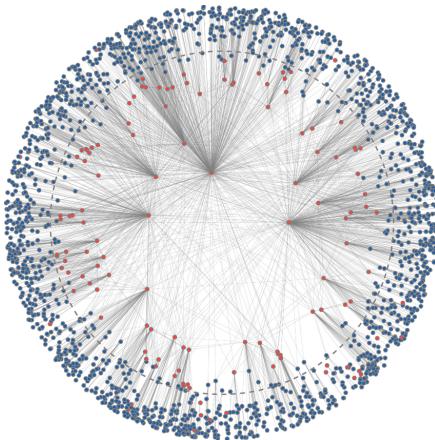
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
ΔΠΜΣ Επιστήμη Δεδομένων και Μηχανική Μάθηση

Συνδυάζοντας Γεωμετρία και Μάθηση: Υπερβολικές Εμφυτεύσεις Γραφημάτων με GNNs

Διπλωματική Εργασία

του

ΧΟΝΤΖΑΚΗ Π. ΔΙΟΝΥΣΙΟΥ



Επιβλέπων: Συμεών Παπαβασιλείου

Καθηγητής, Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2025



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
ΔΠΜΣ Επιστήμη Δεδομένων και Μηχανική Μάθηση

Συνδυάζοντας Γεωμετρία και Μάθηση: Υπερβολικές Εμφυτεύσεις Γραφημάτων με GNNs

Διπλωματική Εργασία

του

ΧΟΝΤΖΑΚΗ Π. ΔΙΟΝΥΣΙΟΥ

Επιβλέπων: Συμεών Παπαβασιλείου
Καθηγητής, Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 1η Ιουλίου 2025.

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

.....
Συμεών Παπαβασιλείου
Καθηγητής, Ε.Μ.Π.

.....
Γεώργιος Ματσόπουλος
Καθηγητής, Ε.Μ.Π.

.....
Ελένη Στάη
Επίκουρη Καθηγήτρια, Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2025



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
ΔΠΜΣ Επιστήμη Δεδομένων και Μηχανική Μάθηση

Copyright © -- All rights reserved. Με την επιφύλαξη παντός δικαιώματος.
Διονύσιος Χοντζάκης, 2025.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα.

Το περιεχόμενο αυτής της εργασίας δεν απηχεί απαραίτητα τις απόψεις της Σχολής, του Επιβλέποντα, ή της επιτροπής που την ενέκρινε.

ΔΗΛΩΣΗ ΜΗ ΛΟΓΟΚΛΟΠΗΣ ΚΑΙ ΑΝΑΛΗΨΗΣ ΠΡΟΣΩΠΙΚΗΣ ΕΥΘΥΝΗΣ

Με πλήρη επίγνωση των συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων, δηλώνω ενυπογράφως ότι είμαι αποκλειστικός συγγραφέας της παρούσας Πτυχιακής Εργασίας, για την ολοκλήρωση της οποίας κάθε βοήθεια είναι πλήρως αναγνωρισμένη και αναφέρεται λεπτομερώς στην εργασία αυτή. Έχω αναφέρει πλήρως και με σαφείς αναφορές, όλες τις πηγές χρήσης δεδομένων, απόψεων, θέσεων και προτάσεων, ιδεών και λεκτικών αναφορών, είτε κατά κυριολεξία είτε βάσει επιστημονικής παράφρασης. Αναλαμβάνω την προσωπική και ατομική ευθύνη ότι σε περίπτωση αποτυχίας στην υλοποίηση των ανωτέρω δηλωθέντων στοιχείων, είμαι υπόλογος έναντι λογοκλοπής, γεγονός που σημαίνει αποτυχία στην Πτυχιακή μου Εργασία και κατά συνέπεια αποτυχία απόκτησης του Τίτλου Σπουδών, πέραν των λοιπών συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων. Δηλώνω, συνεπώς, ότι αυτή η Πτυχιακή Εργασία προετοιμάστηκε και ολοκληρώθηκε από εμένα προσωπικά και αποκλειστικά και ότι, αναλαμβάνω πλήρως όλες τις συνέπειες του νόμου στην περίπτωση κατά την οποία αποδειχθεί, διαχρονικά, ότι η εργασία αυτή ή τμήμα της δεν μου ανήκει διότι είναι προϊόν λογοκλοπής άλλης πνευματικής ιδιοκτησίας.

(Υπογραφή)

.....
Διονύσιος Χοντζάκης

1 Ιουλίου 2025

Περίληψη

Τα γραφήματα αποτελούν Μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να αποδώσουν μια εννοιολογική σύνδεση μεταξύ οντοτήτων. Σε αυτά τα μοντέλα, οι οντότητες αναπαριστώνται από κόμβους και οι συνδέσεις μεταξύ τους από ακμές. Στον τομέα της Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων, η ανάλυση των γραφημάτων αποσκοπεί, πρωτίστως, στην ανάδειξη όμοιων κόμβων και δευτερευόντως στην δημιουργία κοινοτήτων από όμοιους κόμβους, οι οποίοι επικοινωνούν μεταξύ τους, διαδικασία γνωστή ως Εντοπισμός Κοινοτήτων. Η αναπαράσταση γραφημάτων σε Υπερβολικούς Χώρους εμπλουτίζει την πληροφορία που αυτά φέρουν. Αυτό συμβαίνει γιατί η Υπερβολική Γεωμετρία χαρακτηρίζει καλύτερα τη Γεωμετρία των γραφημάτων με ιεραρχική δομή. Σε τέτοιους Χώρους, η ομοιότητα μεταξύ κόμβων μεταφράζεται σε υπερβολική απόσταση και ως εκ τούτου η οργάνωση τους σε κοινότητες αποκτά χωρική διάσταση.

Το πρόβλημα λοιπόν που τίθεται είναι πως ένα δίκτυο μπορεί να εμφυτευθεί σε Υπερβολικό Χώρο. Αυτο επιτυχάνεται μέσω πολλών μεθόδων, συμπεριλαμβανομένης της γνωστής μεθόδου HyperMap. Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η δημιουργία μιας νέας μεθόδου εμφύτευσης γραφημάτων, με χρήση Μηχανικής Μάθησης, η οποία να προσεγγίζει την εμφύτευση που παράγεται από τη HyperMap. Σε αυτά τα πλαίσια χρησιμοποιήθηκαν μοντέλα Νευρωνικών Δικτύων Γραφημάτων σε συνθετικά δεδομένα γραφημάτων. Εμφυτεύθηκαν γραφήματα 100, ή και περισσότερων, κόμβων, και η ποιότητα εμφύτευσης συγκρίθηκε με αυτή της HyperMap. Επιπλέον διερευνήθηκε η απόδοση του μοντέλου κατα την αύξηση του μεγέθους των γραφημάτων.

Λέξεις Κλειδιά

Γραφήματα, Ανάλυση Κοινωνικών Δικτύων, Εμφύτευση Γραφημάτων, Μηχανική Μάθηση, HyperMap, Υπερβολικοί Χώροι, Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων

Abstract

Graphs are Mathematical models used to represent conceptual connections between entities. In these models, entities are represented by nodes and the connections between them by edges. In the domain of Social Network Analysis, the analysis of these models primarily aims to highlight similar nodes and secondly to create communities of similar nodes that communicate, a process known as Community Detection. Representing graphs in Hyperbolic Spaces enriches the information they carry. This is because Hyperbolic Geometry better characterizes the Geometry of graphs with a hierarchical structure. In such Spaces, the similarity between nodes is translated in hyperbolic distance, which adds a spatial dimension in the community organization.

The problem at hand is how a network can be embedded into Hyperbolic Space. This can be achieved through various methods, including the well-known HyperMap approach. The aim of the present work was to develop a new graph embedding method using Machine Learning that approximates the embedding produced by HyperMap. Within this context, Graph Neural Network models were employed on synthetic graph data. Graphs with 100 or more nodes were embedded, and the embedding quality was compared with that of HyperMap. Additionally, the performance of the model was investigated as the size of the graphs increased.

Keywords

Graphs, Social Network Analysis, Graph Embedding, Machine Learning, HyperMap, Hyperbolic Spaces, Graph Neural Networks

στονς γονείς μου

Ευχαριστίες

Θα ήθελα καταρχήν να ευχαριστήσω τον καθηγητή κ. Βασίλειο Καρυώτη για την επίβλεψη αυτής της διπλωματικής εργασίας και για την ευκαιρία που μου έδωσε να την εκπονήσω στο εργαστήριο Διαχείρισης και Βέλτιστου Σχεδιασμού Δικτύων Τηλεματικής. Επίσης ευχαριστώ ιδιαίτερα τον κ. Συμεών Παπαβασιλείου για την καθοδήγησή του και την εξαιρετική συνεργασία που είχαμε. Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου για την καθοδήγηση και την ηθική συμπαράσταση που μου προσέφεραν όλα αυτά τα χρόνια.

Αθήνα, Ιούλιος 2025

Διονύσιος Χοντζάκης

Περιεχόμενα

Περίληψη	1
Abstract	3
Ευχαριστίες	7
Συντομογραφίες	13
Πρόλογος	21
1 Εισαγωγή	23
1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής	24
1.2 Οργάνωση της εργασίας	25
I Θεωρητικό Μέρος	27
2 Θεωρητικό υπόβαθρο	29
2.1 Θεωρία Γραφημάτων	29
2.1.1 Βασικοί ορισμοί Θεωρίας Γραφημάτων	29
2.1.2 Παραδείγματα γραφημάτων	31
2.2 Ανάλυση Σύνθετων Δικτύων	33
2.2.1 Μετρικές Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων	33
2.2.2 Κατηγορίες Σύνθετων Δικτύων	35
2.3 Υπερβολική Γεωμετρία Γραφημάτων	38
2.3.1 Στοιχεία Διαφορικής Γεωμετρίας	38
2.3.2 Διάκριση Κατηγοριών Γεωμετρίας	41
2.3.3 Μοντέλο Poincaré	42
2.3.4 Ομοιότητα της Υπερβολικής Γεωμετρίας και της Γεωμετρίας Γραφημάτων	42
2.3.5 Αναπαράσταση Scale - Free Γραφημάτων μέσω Υπερβολικής Γεωμετρίας	43
2.4 Διάκριση Μεθόδων Εμφύτευσης	44
2.4.1 Μέθοδοι Εκμάθησης Πολλαπλοτήτων	44
2.4.2 Μέθοδοι Πιθανοφάνειας	45
2.4.3 Υβριδικές Μέθοδοι	45
2.5 Popularity versus Similarity Optimization Μέθοδος	45
2.5.1 Ανάλυση Παραμέτρων	46
2.5.2 Αλγόριθμος της Μεθόδου PSO	46

2.5.3	Γενικευμένη Μέθοδος Popularity versus Similarity Optimization	47
2.5.4	External Popularity versus Similarity Optimization Μέθοδος	48
2.6	Μέθοδος HyperMap	49
2.6.1	Ανεξαρτησία Συντεταγμένων	49
2.6.2	Τοπικές και Καθολικές Πιθανότητες Συνδέσεων	49
2.6.3	Τοπικές και Καθολικές Συναρτήσεις Πιθανοφάνειας	50
2.6.4	Διαδικασία Εμφύτευσης	51
2.6.5	Αλγόριθμος Εμφύτευσης HyperMap	51
2.7	Μηχανική Μάθηση	52
2.7.1	Είδη Μηχανικής Μάθησης	52
2.7.2	Εκπαίδευση	54
2.7.3	Νευρωνικά Δίκτυα	55
2.7.4	Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων	59
II	Πρακτικό Μέρος	63
3	Ανάλυση και σχεδίαση	65
3.1	Συγκέντρωση Δεδομένων	65
3.1.1	Μέθοδος Παραγωγής Συνθετικών Γραφημάτων Barabasi-Albert	65
3.1.2	Υπολογισμός Παραμέτρων	65
3.1.3	Κατανομές Γωνιακών Συντεταγμένων και Υπερβολικών Αποστάσεων .	67
3.2	Αρχικοποίηση Εφαρμογών	69
3.2.1	Optimizer και πλήθος εποχών	69
3.2.2	Βήμα Μάθησης	70
3.2.3	Διάκριση Μοντέλων	71
3.2.4	Συνάρτηση Κόστους	73
4	Αναλυτικά Αποτελέσματα	75
4.1	Πειράματα γραφημάτων μεγέθους 100	75
4.1.1	Ανάλυση των γωνιακών συντεταγμένων	75
4.1.2	Ανάλυση των υπερβολικών αποστάσεων	77
4.2	Πειράματα γραφημάτων μεγαλυτέρου μεγέθους	79
4.2.1	Ανάλυση των γωνιακών συντεταγμένων	79
4.2.2	Ανάλυση των υπερβολικών αποστάσεων	81
III	Επίλογος	83
5	Επίλογος	85
5.1	Ανασκόπηση	85
5.2	Συμπεράσματα	85
5.3	Μελλοντικές Επεκτάσεις	86

References	91
Απόδοση ξενόγλωσσων όρων	93

Συντομογραφίες

βλπ

βλέπε

κ.ο.κ

και ούτω καθεξής

π.χ.

παραδείγματος χάριν

Κατάλογος σχημάτων

2.1	Παράδειγμα γραφήματος και πίνακα Γειτνίασης	31
2.2	Παράδειγμα εμβαρούς γραφήματος και πίνακα Βαρών	32
2.3	Παράδειγμα κατευθυνόμενου γραφήματος και πίνακα Γειτνίασης	32
2.4	Παράδειγμα δένδρου και πίνακα Γειτνίασης	33

Κατάλογος Εικόνων

1.1	Παράδειγμα μοντελοποίησης ενός πραγματικού δικτύου (Facebook) σε γράφημα. Πηγή: [1]	23
2.1	Παράδειγμα συσταδοποίησης ενός γραφήματος στις επιμέρους κοινότητές του. Πηγή: [2]	35
2.2	Παραδείγματα σύνθετων δικτύων μαζί με τις κατανομές των κόμβων τους.	37
2.3	Σχηματική αναπράσταση τριών επιπέδων. Από αριστερά προς τα δεξιά παρουσιάζεται ένα Ευκλειδείο, ένα Υπερβολικό και ένα Ελλειπτικό επίπεδο. Πηγή: [3]	41
2.4	Το Αξίωμα της Παραλληλίας για τις τρεις Γεωμετρίες. Πηγή: [4]	41
2.5	Σχηματική αναπράσταση της Υπερβολικής Επιφάνειας \mathbb{H}^2 . Για μία δεδομένη ευθεία (μπλε χρώμα) παρουσιάζονται και οι παράλληλες, προς αυτήν, ευθείες (μαύρο χρώμα). Πηγή: [5]	42
2.6	Σχηματική απεικόνιση της Επιβλεπόμενης Μάθησης. Πηγή: [6]	53
2.7	Σχηματική απεικόνιση της Μη-Επιβλεπόμενης Μάθησης. Πηγή: [7]	53
2.8	Σχηματική απεικόνιση της Αυτο-Ενισχυόμενης Μάθησης. Πηγή: [7]	54
2.9	Σχηματική απεικόνιση ενός Perceptron. Πηγή: [8]	55
2.10	Παράδειγμα αρχιτεκτονικής ενός Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων. Πηγή: [9]	57
3.1	Η κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων των συνθετικών γραφημάτων με τη μέθοδο HyperMap.	68
3.2	Η κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων των συνθετικών γραφημάτων με τη μέθοδο HyperMap.	69
3.3	Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων και των υπερβολικών αποστάσεων που παράχθηκαν από τα μοντέλα CONV_16_8, CONV_16_8_4 και GAT_16_4.	73
4.1	Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων.	75
4.2	Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγέθους 100.	76
4.3	Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων.	77
4.4	Οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγέθους 100.	78
4.5	Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων. Με κόκκινη διακεκομμένη γραμμή παρουσιάζεται ο μέσος όρος απόκλισης για τα γραφήματα μεγέθους 100.	79
4.6	Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγαλύτερου μεγέθους.	80

4.7	Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων. Η κόκκινη διακεκομένη γραμμή αναφέρεται στο μέσο όρο των αποκλίσεων των κατανομών των υπερβολικών συντεταγμένων για τις εμφυτεύσεις των γρα- φημάτων μεγέθους 100.	81
4.8	Οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων για τα πειράματα των γραφημά- των μεγαλύτερου μεγέθους.	81

Κατάλογος πινάκων

2.1	Διαχωρισμός των κατηγοριών της Γεωμετρίας.	41
3.1	Στατιστικές ιδιότητες των συνθετικών γραφημάτων.	67
3.2	Αποτελέσματα ανάλυσης των πειραμάτων για τους διαφορετικούς optimizer καθώς και για τις διαφορετικές τιμές του πλήθος των εποχών.	70
3.3	Αποτελέσματα των πειραμάτων για την αναζήτηση του βελτίστου learning rate.	71
3.4	Η αρχιτεκτονική κάθε μοντέλου όσον αφορά το πλήθος κρυφών επιπέδων και το πλήθος νευρώνων σε καθένα από αυτά.	71
3.5	Επιδόσεις των μοντέλων πάνω στα συνθετικά γραφήματα 9, 10, 12.	72

Πρόλογος

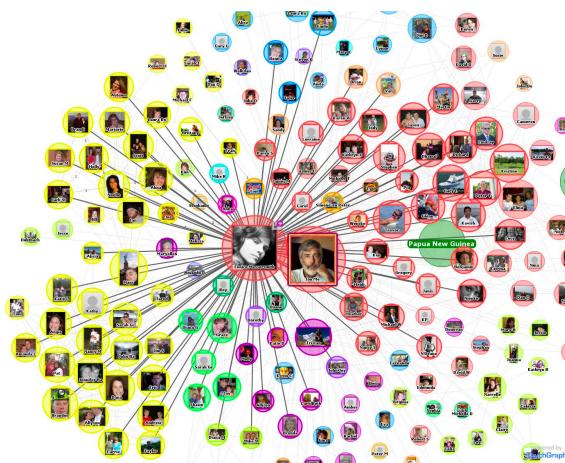
Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο πλαίσιο του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών «Επιστήμη Δεδομένων και Μηχανική Μάθηση» της Σχολής ΗΜΜΥ του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου. Η εργασία πραγματοποιήθηκε στο Εργαστήριο Διαχείρισης και Βέλτιστου Σχεδιασμού Δικτύων Τηλεματικής (Network Management & Optimal Design Laboratory) του ΕΜΠ.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Ζούμε σε μια εποχή όπου το ψηφιακό αποτύπωμα κάθε ανθρώπου είναι μεγαλύτερο από οποιαδήποτε άλλη χρονική στιγμή. Από την εδραίωση των Κοινωνικών Μέσων (Social Media) στις ζωές των ανθρώπων, μέχρι την επανάσταση της Τεχνητής Νοημοσύνης (Artificial Intelligence) και την ανάγκη αυτών των μοντέλων για δεδομένα, η ψηφιακή πληροφορία και η επεξεργασία αυτής γίνεται από τα σημαντικότερα ζητήματα έρευνας για τους σημερινούς ερευνητές.

Η ανάπτυξη των γραφημάτων, ως Μαθηματικά μοντέλα, μας δίνει τη δυνατότητα να αποτυπώσουμε το νόημα της σύνδεσης μεταξύ δεδομένων. Για παράδειγμα, οι χρήστες των Κοινωνικών Δικτύων, αποτελούν οντότητες που οι άλλες μέθοδοι διαχείρισης και αποθήκευσης δεδομένων, δεν μας επιτρέπουν να αποδώσουμε την έννοια της σχέσης μεταξύ τους. Συνεπώς, για κάθε σύστημα για το οποίο υπάρχει η ανάγκη να ορίσουμε την έννοια της σύνδεσης μεταξύ των οντοτήτων, η χρήση των γραφημάτων είναι η καταλληλότερη μέθοδος ανάλυσης. Μερικά σχετικά παραδείγματα είναι η μοντελοποίηση των χρηστών των Κοινωνικών Μέσων (όπως το Facebook), η δόμη του Ίντερνετ και συγκεκριμένα η πλοήγηση μεταξύ των Ιστοσελίδων, καθώς και η σύσταση των μορίων στη Βιολογία (δεσμοί μεταξύ ατόμων).



Εικόνα 1.1: Παράδειγμα μοντελοποίησης ενός πραγματικού δικτύου (Facebook) σε γράφημα. Πηγή: [1]

Μέσα από την ανάλυση αυτών των σύνθετων μοντέλων, έχουν προκύψει πέντε κυρίαρχες κατηγορίες. Αυτές ορίζονται ως Κανονικά, Τυχαία, Τυχαία Γεωμετρικά, Small-World και scale-free γραφήματα [11]. Πολλά από τα γραφήματα τα οποία μοντελοποιούν τα προβλήματα που

πηγάζουν από την καθημερινότητα και την κοινωνία ανήκουν στην κατηγορία των scale-free. Το σημαντικότερο χαρακτηριστικό αυτών των γραφημάτων είναι ο διαχωρισμός κάποιων λίγων οντοτήτων ως πολύ σημαντικές/ισχυρές, ενώ πολλών ως μη σημαντικές/ανίσχυρες. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η δομή του Instagram, όπου οι λογαριασμοί των διασήμων έχουν πάρα πολλούς ακόλουθους, ενώ ο υπόλοιπος κόσμος, όντας λιγότερος γνωστός, έχει αισθητά λιγότερους. Αυτή η δομή των scale-free γράφων καλείται Ιεραρχική.

Ένας βασικός στόχος στον τομέα της Ανάλυσης των Κοινωνικών Δικτύων είναι η ανάδειξη μικρών ομάδων, που οι οντότητες που ζουν εντός τους επικοινωνούν μεταξύ τους με μεγαλύτερη συχνότητα από ότι με οντότητες εκτός της ομάδας τους. Αυτή η διαδικασία είναι γνωστή ως Εντοπισμός Κοινοτήτων και ήδη προσφέρει εφαρμογές στην καθημερινότητά μας. Ειδικότερα, μέσω αυτής καθιστάται ικανή η σύσταση ταινιών σε χρήστες πλατφορμών όπως το Netflix ή η σύσταση τραγουδιών στο Spotify.

1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής

Η εξέλιξη του τομέα της Μηχανικής Μάθησης παράγει όλο και πιο σύνθετα μοντέλα, τα οποία απαιτούν όλο και μεγαλύτερο όγκο δεδομένων για την εκπαίδευσή τους. Ταυτόχρονα, όμως, προκύπτει και μια σημαντική αύξηση στον απαιτούμενο χρόνο εκπαίδευσης αυτών των μοντέλων. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως "Η Κατάρα της Διαστατικότητας" (Curse of Dimensionality) [12]. Συνεπώς, προκύπτει μια ανάγκη για σταθεροποίηση αυτού του χρόνου εκπαίδευσης, πρόβλημα το οποίο, έρχεται να λύσει η διαδικασία εμφύτευσης δεδομένων. Η συγκεκριμένη διαδικασία λαμβάνει δεδομένα στην πραγματική τους διάσταση και τα εμφυτεύει σε έναν χώρο χαμηλότερης διάστασης (latent space), ώστε να είναι πολύ πιο εύκολα διαχειρίσιμα από τα μοντέλα. Στόχος είναι η παραγόμενη πληροφορία που θα προκύψει να είναι όσο το δυνατόν πιο "συμπυκνωμένη" αλλά ταυτόχρονα να διατηρεί και όσο το δυνατόν περισσότερη πληροφορία. Αυτή η διαδικασία συμπεριλαμβάνει και τα δεδομένα γραφημάτων. Ως εκ τούτου, η εμφύτευση δεδομένων γραφημάτων δεν αφορά σε αχαρτογράφητα νερά για τον τομέα της Μηχανικής Μάθησης. Υπάρχουν διάφοροι αλγόριθμοι που υλοποιούν αυτές τις εμφυτεύσεις. Ειδικότερα, σε επίπεδο κόμβου, οι αλγόριθμοι DeepWalk [13], Node2Vec [14] είναι από τους πιο διαδεδομένους. Αντίστοιχα, σε επίπεδο γραφήματος, τα Βαθιά Νευρωνικά Δίκτυα είτε με Μηχανισμό Προσοχής, είτε με Συνελικτικά Επίπεδα παρέχουν πλούσιες, σε πληροφορία, αναπαραστάσεις.

Ο τομέας της Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων χρησιμοποιεί κατά κόρον δεδομένα γραφημάτων για τη μοντελοποίηση και ανάλυση πραγματικών δικτύων. Ένας από τους βασικότερους στόχους είναι διάκριση μικρών ομάδων επικοινωνίας μεταξύ οντοτήτων, οι οποίες καλούνται Κοινότητες. Κόμβοι με κοινά χαρακτηριστικά ή κόμβοι που επικοινωνούν με μεγάλη συχνότητα τοποθετούνται μαζί στην ίδια Κοινότητα. Είναι πλέον γνωστό, πως αυτή η διαδικασία γίνεται πιο αποτελεσματικά όταν τα γραφήματα έχουν εμφυτευτεί πρώτα σε χώρους που χαρακτηρίζονται από μια Υπερβολική Γεωμετρία, γιατί τότε η ομοιότητα μεταξύ κόμβων μεταφράζεται σε απόσταση στον Υπερβολικό Χώρο. Υπάρχουν διάφοροι αλγόριθμοι που αναλαμβάνουν να υλοποιήσουν αυτή την εμφύτευση. Μια τέτοια μέθοδος, και αυτή που θα χρησιμοποιηθεί σε αυτή την εργασία, είναι η HyperMap.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η εμφύτευση δεδομένων γραφημάτων για την αξιοποίησή

τους από μοντέλα Μηχανικής Μάθησης είναι μια ευρέως διαδεδομένη διαδικασία. Αντίθετα, η χρήση τεχνικών Μηχανικής Μάθησης για την παραγωγή πιο πλούσιων εμφυτεύσεων δεν χρήζει ίδιας σημασίας. Συνεπώς, η βασική ιδέα για αυτή την εργασία είναι η ανάλυση της δεύτερης διαδικασίας και η διερεύνηση της απόδοσής της. Συγκεκριμένα, θα χρησιμοποιηθούν μοντέλα Μηχανικής Μάθησης για την εμφύτευση συνθετικών δεδομένων γραφημάτων σε Υπερβολικούς Χώρους, με σκοπό να προσεγγιστεί η λειτουργία της HyperMap. Τα πειράματα θα διεξαχθούν σε δύο στάδια. Αρχικά, τα πρώτα πειράματα θα αφορούν γραφήματα 100 κόμβων και στόχος αυτών θα είναι η σύγκριση των παραγόμενων εμφυτεύσεων με αυτές της HyperMap, ενώ, από τα πειράματα που θα γίνουν σε συνθετικά γραφήματα μεγαλύτερου μεγέθους, θα εξεταστεί η συμπεριφορά της απόδοσης των Νευρωνικών Δικτύων που να σχετίζεται με το μέγεθος των γραφημάτων.

1.2 Οργάνωση της εργασίας

Η εργασία αυτή είναι οργανωμένη σε 5 κεφάλαια: Στο κεφάλαιο 2 δίνεται το θεωρητικό υπόβαθρο. Αρχικά, θα αναφερθούν οι απαραίτητοι ορισμοί της Θεωρίας Γραφημάτων, ώστε ο αναγνώστης να εξοικειωθεί με το απαραίτητο λεξιλόγιο, αλλά και μερικά παραδείγματα γραφημάτων. Στη συνέχεια, αναλύονται οι βασικές κατηγορίες Σύνθετων Δικτύων μέσω μετρικών από τον τομέα της Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων. Έπειτα, γίνεται η σύνδεση μεταξύ Υπερβολικής Γεωμετρίας και Γεωμετρίας Γραφημάτων, όπου σκοπός είναι να φανεί η δομική σύνδεση μεταξύ αυτών των δύο. Ακολουθεί μια ανασκόπηση των κύριων κατηγοριών μεθόδων εμφύτευσης και μια πιο λεπτομερής ανάλυση των μεθόδων PSO, E-PSO και HyperMap. Το τελευταίο κομμάτι είναι να αναλυθούν και οι τεχνικές της Μηχανικής Μάθησης που θα χρησιμοποιηθούν στην συνέχεια της εργασίας. Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζεται η διαδικασία συλλογής δεδομένων και η οργάνωση των εφαρμογών. Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται η διεξαγωγή των εφαρμογών για τα γραφήματα όλων των μεγεθών. Τέλος, στο Κεφάλαιο 5 γίνεται μια ανασκόπηση, παρουσιάζονται τα συμπεράσματα και οι μελλοντικές επεκτάσεις αυτής της εργασίας.

Μέρος Ι

Θεωρητικό Μέρος

Κεφάλαιο 2

Θεωρητικό υπόβαθρο

Το κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται αναλυτικά το θεωρητικό υπόβαθρο που σχετίζεται με το βασικό αντικείμενο της εργασίας. Ειδικότερα θα παρουσιαστούν στοιχεία της Θεωρίας Γραφημάτων και της Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων, Διαφορικής Γεωμετρίας Καμπυλών και Επιφανειών, και τέλος της Μηχανικής Μάθησης.

2.1 Θεωρία Γραφημάτων

2.1.1 Βασικοί ορισμοί Θεωρίας Γραφημάτων

Ορισμός 2.1. (*Γράφημα*) Καλούμε γράφημα κάθε διατεταγμένο ζεύγος $G = (V, E)$ όπου V είναι ένα πεπερασμένο σύνολο και E είναι ένα σύνολο υποσυνόλων του V , το καθένα εκ των οποίων έχει δύο στοιχεία του. Καλούμε τα στοιχεία του V κορυφές (ή κόμβους) του G και τα στοιχεία του E ακμές (ή συνδέσεις) του G . Για κάθε ακμή $e = \{v, u\} \in E$, καλούμε τις κορυφές v και u άκρα της e και λέμε ότι οι κορυφές v και u είναι συνδεδεμένες στο G .

Δεδομένου ενός γραφήματος G , χρησιμοποιούμε τους συμβολισμούς $V(G)$ και $E(G)$ για το σύνολο κορυφών και το σύνολο ακμών του αντίστοιχα. Επίσης ορίζουμε $n(G) = |V(G)|$ και $m(G) = |E(G)|$. Καλούμε το $n(G)$ μέγεθος του γραφήματος G .

Ορισμός 2.2. (*Πίνακας Γειτνίασης*) Μπορούμε να αναπαραστήσουμε ένα γράφημα με τη βοήθεια ενός πίνακα. Συγκεκριμένα, το γράφημα G με $V(G) = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ μπορεί να αναπαρασταθεί με τη βοήθεια ενός $n \times n$ πίνακα $A = [a_{ij}]_{(i,j) \in [n]^2}$ όπου

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \{u_i, u_j\} \in E(G) \\ 0 & \{u_i, u_j\} \notin E(G) \end{cases}$$

Καλούμε κάθε τέτοιο πίνακα, *Πίνακα Γειτνίασης* (*Adjacency Matrix*) του G .

Ορισμός 2.3. (*Μη-Κατευθυνόμενο Γράφημα*) Έστω ένα γράφημα G για το οποίο οι ακμές δεν έχουν προσανατολισμό, δηλαδή ισχύει πως $\{u, v\} = \{v, u\}$, $\forall \{u, v\} \in E$. Αυτό το γράφημα καλείται *Μη-Κατευθυνόμενο*.

Αντίθετα, ένα γράφημα G όπου οι ακμές έχουν προσανατολισμό, δηλαδή $\{u, v\} \neq \{v, u\}$, καλείται *Κατευθυνόμενο*.

Ορισμός 2.4. (*Γειτονιά*) Έστω G ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα και έστω $S \subseteq V(G)$. Καλούμε γειτονιά του S στο G το σύνολο $N_G(S) = \{u \in V(G) \setminus S \mid \exists v \in S : \{v, u\} \in E(G)\}$, δηλ. το σύνολο όλων των κορυφών του G που είναι συνδεδεμένες με την v και δεν ανήκουν στο S . Αν $v \in V(G)$, ορίζουμε $N_G(v) = N_G(\{v\})$. Αν για μια κορυφή $x \in V(G)$ ισχύει ότι $N_G(x) = \emptyset$ τότε λέμε ότι x είναι απομονωμένη κορυφή.

Έστω G ένα κατευθυνόμενο γράφημα και $u \in V(G)$. Καλούμε εσω-γειτονιά (*In-Neighbourhood*) του κόμβου u το σύνολο $N^-(u) = \{v \in V(G) : \{v, u\} \in E(G)\}$. Αντίστοιχα ορίζεται και η εξω-γειτονιά (*Out-Neighbourhood*) του κόμβου u το σύνολο $N^+(u) = \{v \in V(G) : \{u, v\} \in E(G)\}$.

Ορισμός 2.5. (*Εμβαρές Γράφημα*) Ένα γράφημα G καλείται εμβαρές, αν σε κάθε ακμή του έχει ανατεθεί ένας αριθμός $w : E \rightarrow \mathbb{R}$. Αυτός ο αριθμός καλείται βάρος της ακμής.

Σε ένα εμβαρές γράφημα, ο πίνακας Γειτνίασης αντικαθίσταται από τον πίνακα των Βαρών: $W = [w_{ij}]_{(i,j) \in E}$

Σημείωση 1. Αν ένα γράφημα έχει θηλιές (ακμές της μορφής $\{u, u\}$) ή αν το σύνολο των ακμών περιέχει πολλαπλές φορές το ίδιο στοιχείο, τότε αυτό λέγεται πολυγράφημα.

Ορισμός 2.6. (*Ενεπίπεδο Γράφημα*) Ένα ενεπίπεδο πολυγράφημα είναι ένα ζεύγος $\Gamma = (V, A)$ από πεπερασμένα σύνολα που ικανοποιούν τις εξής ιδιότητες:

- Κάθε στοιχείο u του V είναι ένα σημείο του \mathbb{R}^2 και το καλούμε κορυφή του Γ .
- Κάθε στοιχείο e του A είναι υποσύνολο του \mathbb{R}^2 , ομοιομορφικό με το ανοικτό διάστημα $(0, 1)$. Τα σημεία που αποτελούν το σύνορο δε μιας ακμής e καλούνται άκρα της e και είναι στοιχεία του V .
- Διαφορετικές ακμές έχουν κενή τομή.
- $V \cap (\bigcup_{e \in A} e) = \emptyset$.

Ορισμός 2.7. (*Βαθμός Κόμβου*) Έστω ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα G . Ως βαθμός του κόμβου $u \in V$ ορίζεται η ποσότητα: $\deg(u) = |N_G(u)|$.

Αντίστοιχα, σε ένα κατευθυνόμενο γράφημα G ορίζεται ως εσωτερικός βαθμός του κόμβου $u \in V$ η ποσότητα $\deg^{in}(u) = \sum_{j=1}^N a_{ji}$ και ως εξωτερικός βαθμός $\deg^{out}(u) = \sum_{j=1}^N a_{uj}$

Ορισμός 2.8. (*Πίνακας Βαθμών*) Σε ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα G ορίζεται ως πίνακας βαθμών, ο διαγώνιος πίνακας D , όπου $D_{ii} = |N_G(u_i)|$

Ορισμός 2.9. (*Λαπλασιανός Πίνακας*) Ο Λαπλασιανός πίνακας ενός μη-κατευθυνόμενου γραφήματος G ορίζεται ως $L = D - A$ όπου D είναι ο πίνακας βαθμών και A ο πίνακας γειτνίασης του G .

Μπορεί να οριστεί και ο κανονικοποιημένος Λαπλασιανός Πίνακας του G ως $\tilde{L} = I_N - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ ο οποίος είναι θετικά ημι-ορισμένος.

Ορισμός 2.10. (*Μονοπάτι*) Για κάθε $r \geq 1$, το σύνολο

$$P_r = (\{v_1, \dots, v_r\}, \{\{v_1, v_2\}, \dots, \{v_{r-1}, v_r\}\})$$

καλείται μονοπάτι και οι κορυφές v_1 και v_r καλούνται άκρα του ενώ οι υπόλοιπες κορυφές καλούνται εσωτερικές κορυφές του. Επίσης καλούμε ένα μονοπάτι με άκρα x και y (x, y -μονοπάτι). Το μήκος ενός μονοπατιού είναι το πλήθος των ακμών του.

Ορισμός 2.11. (Απόσταση) Έστω ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα G και $u, v \in V$ δύο κόμβοι του. Η απόσταση μεταξύ των κόμβων u και v ορίζεται ως το μήκος του ελάχιστου μονοπατιού από τον u στον v και συμβολίζεται ως $d(u, v)$. Επιπλέον ισχύει ότι $d(u, v) = d(v, u)$

Στην περίπτωση που το G είναι κατευθυνόμενο γράφημα, ως απόσταση μεταξύ των u και v ορίζεται το μήκος του ελάχιστου κατευθυνόμενου μονοπατιού.

Στην περίπτωση που το G είναι εμβαρές γράφημα, ως απόσταση μεταξύ των u και v ορίζεται το άθροισμα των βαρών των ακμών που ανήκουν στο ελάχιστο μονοπάτι μεταξύ τους.

Ορισμός 2.12. (Κύκλος) Για κάθε $r \geq 3$, το σύνολο

$$C_r = (\{v_1, \dots, v_r\}, \{\{v_1, v_2\}, \dots, \{v_{r-1}, v_r\}, \{v_r, v_1\}\})$$

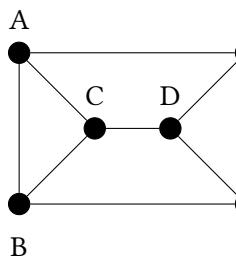
καλείται κύκλος. Το μήκος ενός κύκλου είναι το πλήθος των ακμών του.

Ορισμός 2.13. (Συνεκτικότητα) Ένα γράφημα G καλείται συνεκτικό (ή απλά συνεκτικό) όταν για κάθε ζεύγος κορυφών του $x, y \in V(G)$ υπάρχει (x, y) -μονοπάτι.

Ορισμός 2.14. (Δέντρο) Ένα γράφημα G που δεν περιέχει κύκλους καλείται δάσος. Αν επιπλέον είναι συνεκτικό, τότε καλείται δένδρο. Οι κόμβοι βαθμού το πολύ 1 καλούνται φύλλα του δέντρου (ή του δάσους).

2.1.2 Παραδείγματα γραφημάτων

Παράδειγμα 1^o



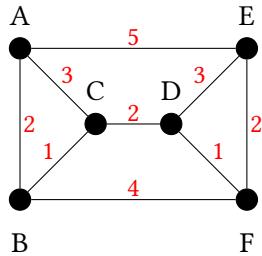
(α') Γράφημα G .

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(β') Πίνακας Γειτνίασης του G .

Σχήμα 2.1: Παράδειγμα γραφήματος και πίνακα Γειτνίασης

Στο σχήμα 2.1 παρουσιάζεται ένα γράφημα έξι κόμβων, μαζί με τον πίνακα Γειτνίασής του. Το σύνολο των κόμβων είναι το σύνολο $V = \{A, B, C, D, E, F\}$ και το σύνολο των ακμών είναι το σύνολο $E(G) = \{\{A, B\}, \{A, C\}, \{B, C\}, \{C, D\}, \{A, E\}, \{B, F\}, \{D, E\}, \{D, F\}, \{E, F\}\}$. Το γράφημα είναι μη-κατευθυνόμενο, αφού ο A είναι συμμετρικός και επίσης δεν υπάρχουν βάρη στις ακμές. Επιπλέον, ο βαθμός κάθε κόμβου είναι 3. Συνοψίζοντας, το G είναι ένα ομογενές, μη-κατευθυνόμενο γράφημα και οι ακμές δεν φέρουν βάρη.

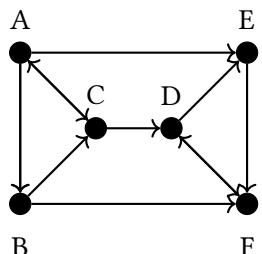
Παράδειγμα 2^o(α') Γράφημα G με βάρη.

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 3 & 0 & 5 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 4 \\ 3 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 3 & 1 \\ 5 & 0 & 0 & 3 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 0 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

(β') Πίνακας Βαρών του G .

Σχήμα 2.2: Παράδειγμα εμβαρούς γραφήματος και πίνακα Βαρών

Στο σχήμα 2.2 παρουσιάζεται ένα γράφημα έξι κόμβων με βάρη στις ακμές, καθώς και ο πίνακας Γειτνίασής του. Το σύνολο των κόμβων είναι $V = \{A, B, C, D, E, F\}$ και το σύνολο των ακμών είναι $E(G) = \{\{A, B\}, \{A, C\}, \{B, C\}, \{C, D\}, \{A, E\}, \{B, F\}, \{D, E\}, \{D, F\}, \{E, F\}\}$ με τα αντίστοιχα βάρη $\{2, 3, 1, 2, 5, 4, 3, 1, 2\}$. Το γράφημα είναι μη-κατευθυνόμενο, αφού ο A είναι συμμετρικός, αλλά πλέον οι ακμές φέρουν βάρη. Επιπλέον, ο βαθμός κάθε κόμβου είναι 3. Συνοψίζοντας, το G είναι ένα ομογενές, μη-κατευθυνόμενο γράφημα με βάρη στις ακμές.

Παράδειγμα 3^o(α') Κατευθυνόμενος Γράφημα G .

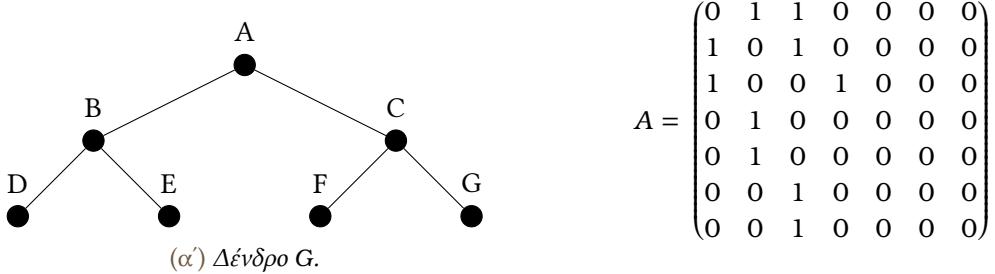
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(β') Πίνακας Γειτνίασης του G .

Σχήμα 2.3: Παράδειγμα κατευθυνόμενου γραφήματος και πίνακα Γειτνίασης

Στο σχήμα 2.3 φαίνεται ένα κατευθυνόμενο γράφημα 6 κορυφών. Η κατεύθυνση των ακμών φαίνεται και στο γράφημα αλλά και στον πίνακα Γειτνίασης του σχήματος (β') μιας και ο πίνακας δεν είναι συμμετρικός. Όσον αφορά τους βαθμούς των κόμβων, ενδεικτικά, έχουμε $\deg^{\text{in}}(A) = 1$, $\deg^{\text{out}}(A) = 3$, $\deg^{\text{in}}(C) = 2$, $\deg^{\text{out}}(C) = 2$. Συνοψίζοντας, το G είναι ένα ομογενές, κατευθυνόμενο γράφημα χωρίς βάρη.

Παράδειγμα 4^o



Σχήμα 2.4: Παράδειγμα δένδρου και πίνακα Γειτνίασης

Στο σχήμα 2.4 παρουσιάζεται ένα δένδρο επτά κόμβων, καθώς και ο πίνακας Γειτνίασης του. Το σύνολο των κόμβων είναι $V = \{A, B, C, D, E, F, G\}$ και το σύνολο των ακμών είναι $E(G) = \{\{A, B\}, \{A, C\}, \{B, D\}, \{B, E\}, \{C, F\}, \{C, G\}\}$. Επιπλέον, αυτό το γράφημα είναι ένα δένδρο αφού είναι συνεκτικό και δεν περιέχει κύκλο. Ο ρυθμός διακλάδωσης είναι σταθερός και ίσος με 2 για κάθε κόμβο, άρα αυτό είναι ένα 2-δικό δένδρο. Η κορυφή του είναι ο κόμβος A , ενώ οι κόμβοι D, E, F, G αποτελούν τα φύλλα του δένδρου.

2.2 Ανάλυση Σύνθετων Δικτύων

Ο τομέας της Ανάλυσης Σύνθετων Δικτύων [11] έχει στόχο την μοντελοποίηση πραγματικών κοινωνικών δικτύων και στη συνέχεια, την ανάλυση τους μέσω μαθηματικών εργαλείων. Αυτός ο στόχος έχει ως καταλληλότερη βάση τη Θεωρία Γραφημάτων.

Η μοντελοποίηση των δικτύων μέσω γραφημάτων, δημιουργεί πέντε βασικές κλάσεις δικτύων. Ειδικότερα έχουμε τα Κανονικά, τα Τυχαία, τα Τυχαία Γεωμετρικά, τα Scale-Free και τα Small-World δίκτυα. Αν και η παρούσα εργασία εστιάζει κυρίως σε scale-free δίκτυα, θα γίνει μια αναφορά σε όλα. Όσον αφορά τα ποιοτικά χαρακτηριστικά αυτών των κλάσεων, θα εξεταστεί η κατανομή των βαθμών των κόμβων, ο συντελεστής ομαδοποίησης, το μέσο μήκος μονοπατιού και η έννοια της κεντρικότητας.

2.2.1 Μετρικές Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων

Αρχικά, θα οριστούν οι μετρικές που χρησιμοποιούνται στον τομέα της Ανάλυσης των Κοινωνικών Δικτύων, οι οποίες και θα αποτελέσουν τα εργαλεία για τον διαχωρισμό των πέντε κλάσεων δικτύων.

Πρώτα θα αναλυθεί ο Συντελεστής Συσταδοποίησης (Clustering Coefficient). Αυτός ο συντελεστής, σε τοπικό επίπεδο, δίνει την πιθανότητα σύνδεσης δύο γειτόνων ενός κόμβου, ενώ, σε καθολικό επίπεδο, εξηγεί κατά πόσο οι κόμβοι ενός γραφήματος τείνουν να συνδέονται μεταξύ τους.

Ορισμός 2.15. (*Τοπικός Συντελεστής Συσταδοποίησης*) Για κάθε κόμβο $u_i \in V(G)$ ορίζεται ο *Τοπικός Συντελεστής Συσταδοποίησης* (*Local Clustering Coefficient*) ως :

$$C_i = \frac{|e_{jk}|}{k_i(k_i - 1)} : u_j, u_k \in N_G(u_i), e_{jk} \in E(G) \quad (2.1)$$

Ορισμός 2.16. (*Καθολικός Συντελεστής Συσταδοποίησης*) Για ένα μη-κατευθυνόμενο γράφημα G ορίζεται ο *Καθολικός Συντελεστής Συσταδοποίησης* (*Global Clustering Coefficient*) από τη σχέση:

$$C = \frac{\sum_{i,j,k} A_{ij} A_{jk} A_{ki}}{\frac{1}{2} \sum_i k_i} \quad (2.2)$$

Οι Κεντρικότητες είναι μια κατηγορία μετρικών που ποσοτικοποιούν την "σημαντικότητα" ή την "επιρροή" των κόμβων ενός γραφήματος. Υπάρχουν διάφορες μετρικές κεντρικότητας, που εντός των υπολογισμών τους αναδεικνύουν διαφορετικούς κόμβους ως "σημαντικούς". Οι τρεις κύριες είναι οι εξής: η Κεντρικότητα Βαθμού, η Κεντρικότητα Ενδιαμεσικότητας και η Κεντρικότητα Εγγύτητας.

Ορισμός 2.17. (*Κεντρικότητα Βαθμού*) Για κάθε κόμβο $u_i \in V(G)$ ορίζεται η *Κεντρικότητα Βαθμού* (*Degree Centrality*) ως:

$$C_D(k) = \sum_i a_{ik} \quad (2.3)$$

όπου a_{ij} είναι το i, j στοιχείο του πίνακα Γειτνίασης.

Ορισμός 2.18. (*Κεντρικότητα Ενδιαμεσικότητας*) Για κάθε κόμβο $u \in V(G)$ ορίζεται η *Κεντρικότητα Ενδιαμεσικότητας* (*Betweenness Centrality*) ως:

$$C_B(u) = \sum_{s \neq u \neq t} \frac{\sigma_{st}(u)}{\sigma_{st}} \quad (2.4)$$

όπου σ_{st} είναι το πλήθος των ελαχίστων μονοπατιών από τον κόμβο s στον t και $\sigma_{st}(u)$ είναι το πλήθος των ελαχίστων μονοπατιών από τον κόμβο s στον t που διέρχονται από τον u .

Ορισμός 2.19. (*Κεντρικότητα Εγγύτητας*) Για κάθε κόμβο $u \in V(G)$ ορίζεται η *Κεντρικότητα Εγγύτητας* (*Closeness Centrality*) ως:

$$C_C(u) = \frac{1}{\sum_v d(u, v)} \quad (2.5)$$

όπου $d(u, v)$ είναι το μήκος του ελάχιστου μονοπατιού μεταξύ των κόμβων u και v .

Εντοπισμός Κοινοτήτων

Στα Κοινωνικά Δίκτυα, παρατηρείται πως οι κόμβοι τείνουν να σχηματίζουν πολλές μικρές ομάδες επικοινωνίας, συνεπώς, κατά την ανάλυση τέτοιων δικτύων, στόχος είναι ο εντοπισμός τέτοιων ομάδων. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται "Εντοπισμός Κοινοτήτων" (Community Detection) ή *Συσταδοποίηση Δικτύου* (Network Clustering). Ωστόσο, δεν υπάρχει ένας καθολικός ορισμός που να επεξηγεί τι εστί κοινότητα. Ο διαισθητικός ορισμός είναι πως οι κόμβοι που αλληλεπιδρούν πολύ συχνά μεταξύ τους ή οι κόμβοι που μοιράζονται κοινά χαρακτηριστικά θα πρέπει να βρίσκονται στην ίδια κοινότητα.



Εικόνα 2.1: Παράδειγμα συσταδοποίησης ενός γραφήματος στις επιμέρους κοινότητές του. Πηγή: [2]

Παρόλο που υπάρχουν διάφοροι αλγόριθμοι υπολογισμού κοινοτήτων, κοινό στοιχείο όλων είναι η άντληση πληροφορίας από τις ακμές των κόμβων. Αυτοί οι αλγόριθμοι χωρίζονται σε τέσσερεις κατηγορίες. Αρχικά, υπάρχουν οι Κόμβο-κεντρικοί (Node-centric) αλγόριθμοι, που λειτουργούν πάνω σε χαρακτηριστικά κόμβων. Η δεύτερη κατηγορία είναι οι Ομαδο-κεντρικοί (Group-centric), οι οποίοι ασχολούνται με τις συνδέσεις εντός των κοινοτήτων. Στη συνέχεια, είναι οι Δικτυο-κεντρικοί (Network-centric), όπου μετά από αλλεπάλληλες διασπάσεις του δικτύου προκύπτουν οι κοινότητες. Τέλος, υπάρχουν και οι Ιεραρχικο-κεντρικοί (Hierarchy-centric) αλγόριθμοι που σχηματίζουν κοινότητες, οι οποίες χαρακτηρίζονται από μια ιεραρχική δομή. Σε κάθε περίπτωση, για τον σχηματισμό των Κοινοτήτων, χρησιμοποιούνται μετρικές της Ανάλυσης Κοινωνικών Δικτύων για να εντοπίσουν συσχετίσεις μεταξύ κόμβων.

2.2.2 Κατηγορίες Σύνθετων Δικτύων

Κανονικά Δίκτυα

Τα γραφήματα που μοντελοποιούν τα Κανονικά Δίκτυα (Regular Graphs) λέγονται πλέγματα. Σε αυτά, κάθε κόμβος έχει τον ίδιο πλήθος συνδέσεων, δίνοντας έτσι μια σταθερή κατανομή για τον βαθμό των κόμβων. Ταυτόχρονα, αυτή η κρυσταλλική δομή δίνει και τον μεγαλύτερο συντελεστή ομαδοποίησης από όλες τις κλάσεις των Κοινωνικών Δικτύων. Αυτά τα δίκτυα, αν και συμπαγή, παρέχουν το χειρότερο πλαίσιο για την πλοιήγηση εντός τους. Συγκεκριμένα, παρόλο που κάθε κόμβος συνδέεται με όλους τους διπλανούς κόμβους στο πλέγμα, δεν διαθέτει συνδέσεις με πιο απομακρυσμένους κόμβους, αυξάνοντας έτσι το μέσο μήκος μονοπατιού. Τέλος, σε αυτά τα δίκτυα, όλες οι τεχνικές υπολογισμού της κεντρικότητας κόμβου αποτυγχάνουν να διαλέξουν ένα αρκετά μικρό υποσύνολο κόμβων το οποίο να χαρακτηρίσουν ως "σημαντικό".

Τυχαία Δίκτυα

Τα Τυχαία Δίκτυα (Random Graphs) είναι ικανότερα για τη μοντελοποίηση πραγματικών Κοινωνικών Δικτύων από τα Κανονικά. Αυτό συμβαίνει καθώς οι συνδέσεις μεταξύ κόμβων γίνονται με τυχαίο τρόπο, αλλά με την ίδια πιθανότητα ανεξάρτητα επιλεγμένου ζεύγους, παράγοντας μιας κατανομή βαθμών κόμβων κοντά στην κατανομή Poisson. Η τυχαιότητα μεταξύ των συνδέσεων των κόμβων μειώνει τον συντελεστή ομαδοποίησης, δίνοντας κατ' αυτόν τον τρόπο μια πιο αραιή μορφή στο δίκτυο. Ταυτόχρονα μειώνει σημαντικά το μέσο μήκος μονοπατιού, καθιστώντας αυτά τα δίκτυα ιδιαίτερα αποτελεσματικά για πλοιήγηση εντός τους. Επιπλέον,

οι τεχνικές υπολογισμού μπορούν να αποφανθούν για ένα σύνολο κόμβων, το οποίο αυτές θα χαρακτηρίσουν ως σημαντικό. Να σημειωθεί ότι, η τυχαιότητα που χαρακτηρίζει τα συγκεκριμένα δίκτυα, ωθεί αυτές τις τεχνικές να μη συμφωνούν στο ίδιο σύνολο.

Τυχαία Γεωμετρικά Δίκτυα

Τα Τυχαία Γεωμετρικά Δίκτυα είναι μια εξαιρετικά χρήσιμη κατηγορία δικτύων που μπορούν να μοντελοποιήσουν πραγματικά Κοινωνικά Δίκτυα, όταν η έννοια της απόστασης επηρεάζει τις σχέσεις των οντοτήτων. Για παράδειγμα, αν θέλουμε να μοντελοποιήσουμε τις συνδέσεις κινητών συσκευών σε ένα ασύρματο δίκτυο Wi-Fi, τότε, δεν γίνεται να υπάρξουν συνδέσεις μεταξύ συσκευών που απέχουν απόσταση μεγαλύτερη από την εμβέλεια της πηγής. Αυτή η ιδέα είναι ενσωματωμένη σε όλα τα ποιοτικά χαρακτηριστικά αυτών των δικτύων. Η κατανομή των κόμβων παρομοιάζεται από μια ομοιόμορφη κατανομή και το μέσο μήκος μονοπατιού είναι σχετικά χαμηλό, καθιστώντας τα αποδοτικά για πλοήγηση στο πλαίσιο τους. Τέλος, οι τεχνικές υπολογισμού σημαντικών κόμβων καταλήγουν σε κοινά σύνολα κόμβων που χαρακτηρίζουν ως σημαντικά. Βέβαια, όλα τα παραπάνω αποτελέσματα εξαρτώνται από την απόσταση μεταξύ των κόμβων, καθώς αυτή είναι που ορίζει αν θα υπάρξει η σύνδεση μεταξύ δύο κόμβων ή όχι.

Για να παραχθούν τέτοια δίκτυα, κόμβοι τοποθετούνται τυχαία στο τετράγωνο εμβαδού ένα ($[0, 1] \times [0, 1]$) και οι συνδέσεις μεταξύ τους γίνονται με κριτήριο την ακτίνα R , όπου αν δύο κόμβοι απέχουν απόσταση μικρότερη από την ακτίνα τότε συνδέονται.

Scale-Free Δίκτυα

Τα Scale-Free δίκτυα, είναι μια οριακή κατάσταση των Τυχαίων Δικτύων, όπου η κατανομή των βαθμών των κόμβων ακολουθεί Εκθετική κατανομή. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι πως πολλοί κόμβοι έχουν μικρό βαθμό, ενώ πολύ λίγοι έχουν εξαιρετικά μεγάλο βαθμό. Συνεπώς, αυτά είναι τα δίκτυα που πολύ εύκολα μπορούν να απαντήσουν στην ερώτηση "Ποιός είναι ο πιο δημοφιλής". Επιπλέον, είναι τα πιο ικανά δίκτυα για πλοήγηση μιας και η δομή τους χαρακτηρίζεται από τον μικρότερο δυνατό συντελεστή ομαδοποίησης και ταυτόχρονα το μικρότερο μέσο μήκος μονοπατιού. Τέλος, όλες οι τεχνικές υπολογισμού κεντρικότητας συμφωνούν πλήρως στην ανάδειξη "σημαντικών" κόμβων.

Αυτά τα δίκτυα παράγονται μέσα από τον κανόνα της Προτιμησιακής Σύνδεσης (Preferential Attachment) και της Αύξησης (Growth). Κατά τον κανόνα της Προτιμησιακής Σύνδεσης, όσο περισσότερες συνδέσεις έχει ήδη ένας κόμβος, τόσο πιο πιθανό είναι να δεχτεί νέες συνδέσεις. Επιπλέον, σύμφωνα με τον κανόνα της Αύξησης, το δίκτυο αυξάνεται σταδιακά με την προσθήκη νέων κόμβων με την πάροδο του χρόνου. Συνολικά, για να παραχθεί ένα scale-free δίκτυο, η διαδικασία ξεκινάει από ένα κενό γράφημα και σταδιακά προσθέτει κόμβους. Κατά την προσθήκη κάθε κόμβου, η δημιουργία των συνδέσεων γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε ο καινούριος κόμβος να συνδέται, με μεγαλύτερη πιθανότητα, προς κόμβους που έχουν ήδη πολλές συνδέσεις.

Small World Δίκτυα

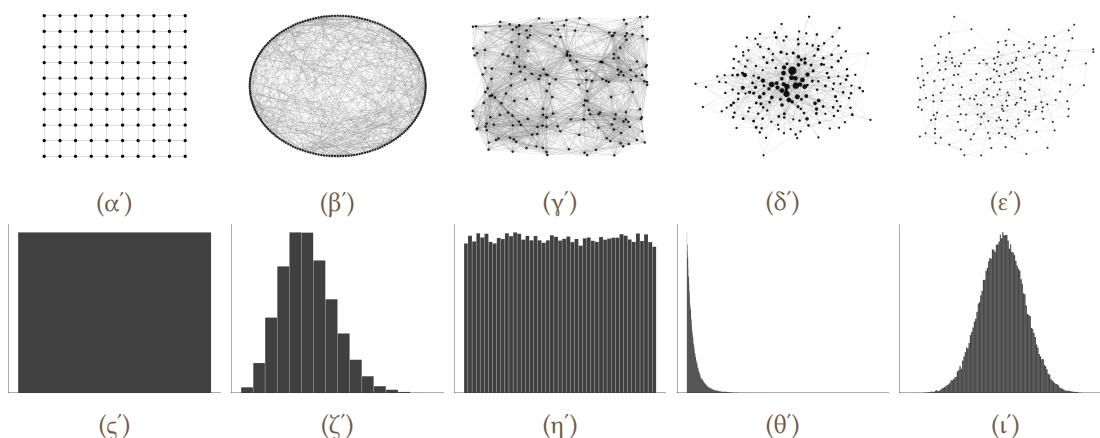
Τα Small World Δίκτυα είναι μια ενδιάμεση κατάσταση από τα Κανονικά και τα Τυχαία. Το χαρακτηριστικό τους είναι πως οι περισσότεροι κόμβοι παρόλο που δεν συνδέονται με-

ταξύ τους, μπορούν να επικοινωνήσουν μέσω λίγων βημάτων. Αυτά τα δίκτυα είναι το πρότυπο μοντελοποίησης των ανθρωπίνων σχέσεων και της μετάδοσης ιών μέσω επιδημιολογικών μοντέλων. Όλα τα ποιοτικά τους χαρακτηριστικά βρίσκονται, όπως και τα ίδια, μεταξύ των Κανονικών και των Τυχαίων Δικτύων. Συνεπώς, το μέσο μήκος μονοπατιού είναι σχετικά μικρό, ενώ ο δείκτης συσταδοποίησης είναι σχετικά υψηλός. Επιπλέον, η κατανομή των βαθμών των κόμβων προσεγγίζει μια Κανονική κατανομή, καθώς οι κόμβοι έχουν παραπλήσιους βαθμούς. Τέλος, και οι τεχνικές υπολογισμού κεντρικότητας συμφωνούν ως προς τους "σημαντικούς" κόμβους, αλλά όχι στον βαθμό που γίνεται στα Scale-Free δίκτυα.

Η παραγωγή τους γίνεται μέσα από το μοντέλο Watts-Strogatz. Αυτό ξεκινάει από ένα Κανονικό κυκλικό γράφημα, όπου κάθε κόμβος συνδέεται με τους k κοντινότερους γείτονες του. Σε αυτό το γράφημα επανασυνδέονται (rewiring) τυχαία κάποιες ακμές με πιθανότητα p. Το p ρυθμίζει το "πόσο τυχαίο" γίνεται το δίκτυο. Έτσι για p = 0 παράγεται Κανονικό Δίκτυο, για p = 1 παράγεται Τυχαίο Δίτυο ενώ για τιμές 0 < p < 1 παράγεται Small World Δίκτυο.

Παραδείγματα Σύνθετων Δικτύων

Στα επόμενα διαγράμματα, παρουσιάζονται μερικά παραδείγματα γραφημάτων για τις πέντε αυτές κατηγορίες δικτύων, αλλά και η κατανομή των βαθμών τους.



Εικόνα 2.2: Παραδείγματα σύνθετων δικτύων μαζί με τις κατανομές των κόμβων τους.

Στην εικόνα 2.2 παρουσιάζεται ένα παράδειγμα από κάθε κατηγορία Σύνθετων Δικτύων, μαζί με τις αντίστοιχες κατανομές των βαθμών των κόμβων. Στο διάγραμμα (α') παρατηρούμε ένα Κανονικό δίκτυο σε μορφή πλέγματος. Αυτό αποτελείται από 100 κόμβους και καθένας έχει βαθμό 4. Η κατανομή του βαθμού κόμβων του, που εμφανίζεται στο διάγραμμα (ξ') είναι μια κατανομή δ-Dirac. Τα διαγράμματα (β') και (ζ') αφορούν ένα παράδειγμα Τυχαίου δικτύου με 200 κόμβους. Η κατανομή του βαθμού των κόμβων προσεγγίζει μια Poisson Κατανομή. Τα διαγράμματα (γ')-(η') προκύπτουν από παράδειγμα ενός Τυχαίου Γεωμετρικού δικτύου με 200 κόμβους. Παρατηρούμε την ισχύ της ακτίνας σύνδεσης, όσον αφορά τις συνδέσεις. Στις περιοχές όπου οι κόμβοι βρίσκονται κοντά, δημιουργούν κλειστές μεταξύ τους ομάδες. Η κατανομή του βαθμού των κόμβων για τέτοια γραφήματα προσεγγίζει Ομοιόμορφη κατανομή. Τα επόμενα δύο διαγράμματα ((δ')-(ι')) αντλούν πληροφορία από Scale-Free δίκτυο. Ειδικότερα στο (δ'), το μέγεθος των κόμβων είναι ανάλογο του βαθμού του κόμβου. Έτσι γίνεται και εύκολα αντιληπτή η ιδιό-

τητα της δημοφιλίας. Η κατανομή του βαθμού του κόμβου, για τέτοια γραφήματα, προσεγγίζει μια Εκθετική Κατανομή. Τέλος, παρουσιάζονται και ένα Small-World δίκτυο. Είναι σημαντικό, να παρατηρηθεί η ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ των Κανονικών και των Τυχαίων. Η κατανομή του βαθμού των κόμβων προσεγγίζει μια Κανονική Κατανομή

2.3 Υπερβολική Γεωμετρία Γραφημάτων

Έχει παρατηρηθεί πως πολλοί τομείς των θετικών επιστημών βρίσκουν λύση σε φαινομενικά δυσεπίλυτα προβλήματα, μόλις αναγνωρίσουν την γεωμετρία του χώρου στον οποίο υπάρχει το πρόβλημα. Μερικά παραδείγματα είναι ανάλυση της Θεωρίας της Σχετικότητας, όπου η βαρύτητα μεταφράζεται σαν μια καμπυλωμένη Γεωμετρία [15]. Σε αυτή την ενότητα θα αναλυθεί πρωτίστως τι ορίζεται ως Υπερβολική Γεωμετρία αλλά και γιατί αυτή καταλήγει να είναι το πιο ταιριαστό περιβάλλον για ορισμένα γραφήματα. Πρώτα απ' όλα όμως, θα αναλυθούν κάποια μαθηματικά εργαλεία της Διαφορικής Γεωμετρίας απαραίτητα γι' αυτό το κομμάτι.

2.3.1 Στοιχεία Διαφορικής Γεωμετρίας

Για να γίνει ο διαχωρισμός της Γεωμετρίας στις τρεις κύριες κατηγορίες της, θα πρέπει πρώτα να οριστεί η έννοια της καμπύλοτητας. Ουσιαστικά, ως καμπυλότητα ορίζεται η απόκλιση μιας καμπύλης από μια ευθεία ή η απόκλιση μιας επιφάνειας από μια επίπεδη επιφάνεια. Ακολουθούν οι απαραίτητοι μαθηματικοί ορισμοί [16]:

Στοιχεία Καμπυλών

Ορισμός 2.20. (*Παραμετροποιημένη Καμπύλη*): Μια παραμετροποιημένη καμπύλη στον χώρο είναι μια συνεχής απεικόνιση $a : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ όπου $\subseteq \mathbb{R}$ είναι διάστημα.

Ορισμός 2.21. (*Κανονική Καμπύλη*): Μια καμπύλη $a(t)$ στον χώρο λέγεται κανονική αν και μόνο αν είναι διαφορίσιμη σε κάθε σημείο του πεδίου ορισμού της. Συγκεκριμένα ισχύει ότι $a'(t) \neq 0 \forall t \in I$.

Ορισμός 2.22. (*Παράγωγος*): Η παράγωγος μιας καμπύλης $a : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι η ποσότητα

$$a'(t) = (a'_1(t), a'_2(t), \dots, a'_n(t)) \quad (2.6)$$

Αυτή η ποσότητα ονομάζεται και εφαπτόμενο διάνυσμα ή διάνυσμα ταχύτητας της καμπύλης.

Ορισμός 2.23. (*Ταχύτητα, Επιτάχυνση*) Το μήκος αυτού του διανύσματος ονομάζεται μέτρο της ταχύτητας και ορίζεται ως:

$$u(t) = \|a'(t)\| = (a'_1(t)^2, a'_2(t)^2, \dots, a'_n(t)^2)^{1/2} \quad (2.7)$$

Αντίστοιχα, αν και η a' είναι διαφορίσιμη, τότε η δεύτερη παράγωγος

$$a''(t) = (a''_1(t), a''_2(t), \dots, a''_n(t)) \quad (2.8)$$

που ονομάζεται επιτάχυνση της a στο σημείο t .

Ορισμός 2.24. (Καμπύλη Μοναδιαίας Ταχύτητας): Μια καμπύλη $\beta : J \rightarrow \mathbb{R}^n$ με $\|\beta'(t)\| = 1 \forall t \in J$ ονομάζεται καμπύλη μοναδιαίας ταχύτητας.

Έστω $\gamma(t)$, $t \in I$ μια καμπύλη μοναδιαίας ταχύτητας και $T(t)$ το εφαπτόμενο διάνυσμα της γ στο σημείο $\gamma(t)$. Επειδή το μήκος του $T(t) = \gamma'(t)$ είναι σταθερά 1, η παράγωγος $T'(t) = \gamma''(t)$ δείχνει την αλλαγή της διεύθυνσης του διανύσματος $T(t)$.

Ορισμός 2.25. (Καμπυλότητα): Το μήκος του διανύσματος $T'(t)$ συμβολίζεται με

$$k(t) = \|T'(t)\| \quad (2.9)$$

και ονομάζεται καμπυλότητα της γ στο $\gamma(t)$

Στοιχεία Επιφανειών

Ορισμός 2.26. (Σημειακό Διαφορικό) Αν S_1, S_2 είναι κανονικές επιφάνειες και $f : S_1 \rightarrow S_2$ διαφορίσιμη απεικόνιση στο $p \in S_1$, καλούμε (σημειακό) διαφορικό της f στο p (*differential off at p*) την απεικόνιση

$$d_p f \equiv T_p f : T_p S_1 \rightarrow T_{f(p)} S_2 : w \mapsto d_p f(w) := (f \circ a)'(0), \quad (2.10)$$

όπου $a : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow S_1$ διαφορίσιμη καμπύλη με $a(0) = p$ και $a'(0) = w$.

Ορισμός 2.27. (Απεικόνιση Gauss): Θεωρούμε μια προσανατολισμένη επιφάνεια S και τον προσανατολισμό της $N : S \rightarrow \mathbb{R}^3$. Επειδή κάθε $N(p)$ είναι μοναδιαίο διάνυσμα, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η N είναι απεικόνιση της μορφής

$$N : S \rightarrow S^2 \quad (2.11)$$

Η απεικόνιση 2.27 καλείται απεικόνιση Gauss (Gaussmap) της S .

Θεώρημα 2.1. Η απεικόνιση Gauss είναι διαφορίσιμη.

Εφ' όσον η N είναι διαφορίσιμη, ορίζεται και το διαφορικό της

$$d_p N : T_p S \rightarrow T_{N(p)} S^2 \quad (2.12)$$

σε κάθε σημείο $p \in S$. Ο εφαπτόμενος χώρος $T_p S$ είναι ο (μοναδικός) 2-διάστατος υπόχωρος του \mathbb{R}^3 , που είναι κάθετος στο διάνυσμα $N(p)$. Από το άλλο μέρος, από κατασκευή, και ο εφαπτόμενος χώρος $T_{N(p)} S^2$ είναι 2-διάστατος υπόχωρος του \mathbb{R}^3 , και είναι κάθετος στο διάνυσμα θέσης (ακτίνα) του σημείου $N(p) \in S^2$. Επομένως οι χώροι $T_p S$ και $T_{N(p)} S^2$ είναι δύο επίπεδα παράλληλα μεταξύ τους (ως κάθετα προς το $N(p)$) και έχουν κοινό σημείο το 0, άρα συμπίπτουν, δηλαδή

$$T_p S = T_{N(p)} S^2 \quad (2.13)$$

οπότε η 2.12 μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι απεικόνιση της μορφής

$$d_p N : T_p S \rightarrow T_p S \quad (2.14)$$

Το προηγούμενο διαφορικό ουσιαστικά εκφράζει τον τρόπο μεταβολής του N , επομένως, κατά κάποιον τρόπο, περιγράφει το "σχήμα" της επιφάνειας.

Ορισμός 2.28. (*Αντίθετη Απεικόνιση*) Η αντίθετη της απεικόνισης 2.14, δηλαδή ο τελεστής

$$-d_p N : T_p S \rightarrow T_p S \quad (2.15)$$

καλείται τελεστής σχήματος της S στο p (*shape operator*).

Έστω τώρα μια παραμέτρηση (U, r, W) της S με $p \in W$. Για να υπολογίσουμε τις εικόνες των $w \in T_p S$ μέσω της $d_p N$, αρκεί να βρούμε τις εικόνες των βασικών διανυσμάτων $r_u(q), r_v(q)$, όπου $q := r^{-1}(p)$. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε τις καμπύλες $\alpha = r \circ \bar{\alpha}$ και $\beta = r \circ \bar{\beta}$, όπου

$$\bar{\alpha}(t) = (u_0 + t, v_0), \quad \bar{\beta}(t) = (u_0, v_0 + t)$$

αντιστοίχως, με $(u_0, v_0) := q$. Επομένως, από τον Ορισμό 2.26 του διαφορικού έχουμε:

$$\begin{aligned} d_p N(r_u(q)) &= d_p N(\alpha'(0)) = (N \circ \alpha)'(0) \\ &= (N \circ r \circ \bar{\alpha})'(0) = [D(N \circ r \circ \bar{\alpha})(0)](1) \\ &= [D(N \circ r)(q)](\bar{\alpha}'(0)) = [D(N \circ r)(q)](e1) \\ &= \left. \frac{\partial(N \circ r)}{\partial u} \right|_q \end{aligned}$$

Ανάλογα βρίσκουμε ότι

$$d_p N(r_v(q)) = \left. \frac{\partial(N \circ r)}{\partial v} \right|_q$$

Συμβολικά θέτουμε

$$\boxed{N_u(q) := \left. \frac{\partial(N \circ r)}{\partial u} \right|_q, \quad N_v(q) := \left. \frac{\partial(N \circ r)}{\partial v} \right|_q} \quad (2.16)$$

οπότε, τελικά,

$$\boxed{d_p N(r_u(q)) = N_u(q), \quad d_p N(r_v(q)) = N_v(q)} \quad (2.17)$$

Θεώρημα 2.2. Ο τελεστής σχήματος είναι αυτοσυζυγής (ή συμμετρικός) (*self-adjoint*), δηλαδή, για οποιαδήποτε διανύσματα $w_1, w_2 \in T_p S$, ισχύει η σχέση

$$\langle -d_p N(w_1), w_2 \rangle = \langle w_1, -d_p N(w_2) \rangle$$

Σύμφωνα με την γενική θεωρία των αυτοσυζυγών τελεστών, υπάρχει μια ορθοκανονική βάση $\{w_1, w_2\}$ του $T_p S$, τέτοια ώστε

$$-d_p N(w_1) = k_1 w_1, \quad -d_p N(w_2) = k_2 w_2 \quad (2.18)$$

με $k_1 \geq k_2$. Προφανώς τα w_1, w_2 είναι ιδιοδιανύσματα του $-d_p N$ και k_1, k_2 οι αντίστοιχες ιδιοτιμές. Επομένως, ο πίνακας του $-d_p N$, ως προς την ορθοκανονική βάση $\{w_1, w_2\}$ είναι

$$\begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

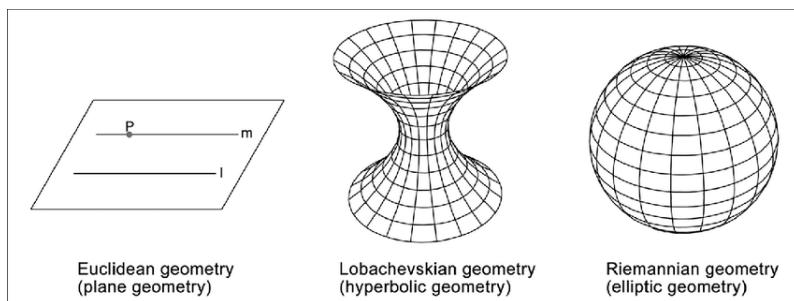
Ορισμός 2.29. (*Καμπυλότητα Gauss*) Οι ιδιοτιμές k_1, k_2 καλούνται κύριες καμπυλότητες της S στο p (*principal curvatures*), ενώ οι κατευθύνσεις που προσδιορίζονται από τα ιδιοδιανύσματα w_1, w_2

καλούνται κύριες κατευθύνσεις της S στο p (*principal directions*). Ιδιαιτέρως, καλείται καμπυλότητα Gauss της S στο p (*Gaussian curvature*) η ποσότητα

$$K(p) := k_1 k_2 \quad (2.20)$$

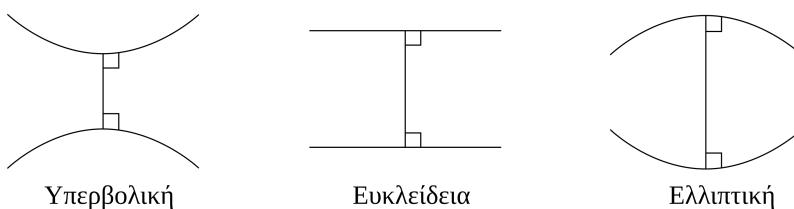
2.3.2 Διάκριση Κατηγοριών Γεωμετρίας

Ο διαχωρισμός της Γεωμετρίας στις επιμέρους κατηγορίες της γίνεται πάνω στο πρόσημο της καμπυλότητας Gauss 2.29. Αν μια επιφάνεια έχει μηδενική καμπυλότητα, τότε αυτή ανήκει στην κατηγορία των Ευκλείδειων Γεωμετριών και ονομάζεται επίπεδη. Στη συνέχεια, οι επιφάνειες με θετική καμπυλότητα ανήκουν στην κατηγορία των Ελλειπτικών Γεωμετριών, ενώ αυτές με αρνητική καμπυλότητα ανήκουν στην κατηγορία των Υπερβολικών Γεωμετριών.



Εικόνα 2.3: Σχηματική αναπράσταση τριών επιπέδων. Από αριστερά προς τα δεξιά παρουσιάζεται ένα Ευκλείδειο, ένα Υπερβολικό και ένα Ελλειπτικό επίπεδο. Πηγή: [3]

Πέρα από τη διαφορετική καμπυλότητα που ορίζεται σε κάθε επιφάνεια, υπάρχει και μια άλλη ποιοτική διαφορά που στηρίζεται στο Αξίωμα Παραλληλίας του Ευκλείδη. Σε μια Ευκλείδεια Γεωμετρία, δεδομένης μιας ευθείας και ενός σημείου εκτός αυτής, το αξίωμα ορίζει πως διέρχεται το πολύ μία ευθεία από το σημείο που να είναι παράλληλη στην πρώτη. Στις Υπερβολικές Γεωμετρίες κάτι τέτοιο δεν ισχύει. Στις Υπερβολικές, για μία ευθεία και ένα σημείο εκτός της, υπάρχουν άπειρες παράλληλες ευθείες ως προς την πρώτη που διέρχονται από το σημείο.



Εικόνα 2.4: Το Αξίωμα της Παραλληλίας για τις τρεις Γεωμετρίες. Πηγή: [4]

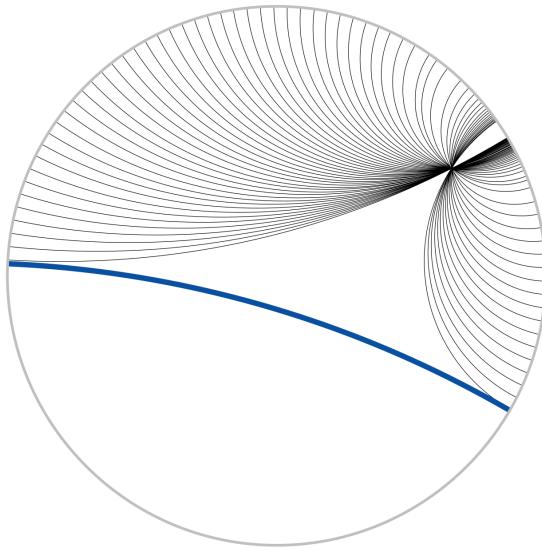
Αυτές οι διαφορές συνοψίζονται στον επόμενο πίνακα.

Πίνακας 2.1: Διαχωρισμός των κατηγοριών της Γεωμετρίας.

Ιδιότητα	Ευκλείδεια	Ελλειπτική	Υπερβολική
Καμπυλότητα K	0	> 0	< 0
Παράλληλες Ευθείες	1	0	∞

2.3.3 Μοντέλο Poincaré

Υπάρχουν διαφορετικά, ισοδύναμα, μοντέλα Υπερβολικών Χώρων όπου καθένα από αυτά εστιάζει σε διαφορετικές ιδιότητες αυτών των χώρων. Ένα πολύ διαδεδομένο μοντέλο, και αυτό που θα αποτελέσει βασικό εργαλείο γι' αυτή την εργασία, είναι το μοντέλο Poincaré. Σε αυτό το μοντέλο, όλη η δισδιάστατη άπειρη Υπερβολική Επιφάνεια \mathbb{H}^2 παρουσιάζεται εντός ενός Ευκλείδειου δίσκου ακτίνας 1. Αυτή η Υπερβολική επιφάνεια έχει σταθερή αρνητική καμπυλότητα ίση με -1. Το σύνορο του δίσκου είναι ένας κύκλος (\mathbb{S}^1), που αποτελείται από σημεία που δεν βρίσκονται στην υπερβολική επιφάνεια, και είναι απείρως μακριά. Αυτό το σύνορο καλείται σύνορο στο άπειρο και συμβολίζεται με $\partial\mathbb{H}^2$. Τέλος, σε αυτό το μοντέλο οι γεωδαισιακές γραμμές που ορίζουν την απόσταση μεταξύ δύο σημείων είναι διάμετροι κύκλων και κυκλικά τόξα από Ευκλείδειους κύκλους που τέμνουν το σύνορο κάθετα.



Εικόνα 2.5: Σχηματική αναπράσταση της Υπερβολικής Επιφάνειας \mathbb{H}^2 . Για μία δεδομένη ευθεία (μπλε χρώμα) παρουσιάζονται και οι παράλληλες, προς αυτήν, ευθείες (μαύρο χρώμα). Πηγή: [5]

2.3.4 Ομοιότητα της Υπερβολικής Γεωμετρίας και της Γεωμετρίας Γραφημάτων

Αρχικά θα παρουσιάστει ο ορισμός της ισομετρικής εμφύτευσης καθώς θα χρειαστεί στη πορεία.

Ορισμός 2.30. Αν $f : M \rightarrow N$ είναι μία απεικόνιση από έναν μετρικό χώρο M σε έναν άλλο μετρικό χώρο N , τότε η f είναι ισομετρική εμφύτευση αν για κάθε ζευγάρι σημείων $x, y \in M$ ισχύει ότι:

$$d_N(f(x), f(y)) = d_M(x, y) \quad (2.21)$$

Η Υπερβολική Γεωμετρία είναι η πιο ταιριαστή για τη Γεωμετρία Γραφημάτων [17]. Η μεγάλη διαφορά μιας Ευκλείδειας και μιας Υπερβολικής Γεωμετρίας είναι πως η δεύτερη είναι "μεγαλύτερη". Αν θεωρηθεί ένας δίσκος πάνω σε μια επιφάνεια με μηδενική καμπυλότητα, δηλαδη μια Ευκλείδεια Γεωμετρία, είναι γνωστό πως το εμβαδόν αυτού του δίσκου προκύπτει ως

συνάρτηση της ακτίνας του από τη σχέση:

$$A(r) = \pi r^2 \quad (2.22)$$

Άρα, η επιφάνεια ενός δίσκου αυξάνεται τετραγωνικά σε σχέση με την ακτίνα του. Αντίστοιχα, η περίμετρος του δίσκου δίνεται από τη σχέση:

$$L(r) = 2 \pi r \quad (2.23)$$

Αντίθετα, στην \mathbb{H}^2 επιφάνεια με καμπυλότητα ζ , η επιφάνεια του δίσκου προκύπτει από την σχέση:

$$A(r) = 2 \pi [\sinh(\zeta r) - 1] \quad (2.24)$$

όπου αυτή η ποσότητα αυξάνεται με ρυθμό $e^{\zeta r}$. Αντίστοιχα, ο ίδιος ρυθμός αύξησης ισχύει και για στην περίμετρο του δίσκου αφού αυτή δίνεται από τη σχέση:

$$L(r) = 2 \pi \sinh(\zeta r) \quad (2.25)$$

Για να αποδειχθεί τελικά πως αυτή η Γεωμετρία είναι αυτή που χαρακτηρίζει και τη Γεωμετρία των γραφημάτων, θα αναλυθεί τώρα η δεύτερη για να φανούν οι ομοιότητες. Ας θεωρηθούν τα δέντρα με παράγοντα διακλάδωσης b , τα λεγόμενα b -αδικά δέντρα. Σε αυτό το μοντέλο, η επιφάνεια του δίσκου με ακτίνα r ορίζεται ως το πλήθος των κόμβων που απέχουν από την κορυφή ακριβώς r βήματα και το πλήθος των κόμβων που ζουν σε αυτόν τον δίσκο προκύπτει από τη σχέση:

$$A(r) = [(b+1)b^r - 2] / (b-1) \quad (2.26)$$

Αντίστοιχα, η περίμετρος του δίσκου ορίζεται ως το πλήθος των κόμβων που απέχουν μεταξύ τους το πολύ r βήματα. Συνεπώς, η περιμέτρος προκύπτει από τη σχέση:

$$L(r) = (b+1)b^{r-1} \quad (2.27)$$

Και οι δύο ποσότητες αυξάνονται εκθετικά ως προς το r .

Από την μια πλευρά βρίσκεται ο Υπερβολικός Χώρος \mathbb{H}_{ζ}^2 , και από την άλλη ο Χώρος των b -αδικών δέντρων. Είναι εμφανές πως γι' αυτές τις δομές, η περίμετρος και η επιφάνεια του δίσκου αυξάνονται με ρυθμό $e^{\zeta r}$ αν θεωρηθεί $\zeta = \ln(b)$. Με αυτόν τον τρόπο προκύπτουν ισομετρικές εμφυτεύσεις, βλπ 2.30, από τον Χώρο των δέντρων, στον Υπερβολικό Χώρο. Μια τέτοια διαδικασία δεν μπορεί να υλοποιηθεί σε έναν χώρο Ευκλείδειας Γεωμετρίας καθώς, σε αυτόν, χρειάζεται εκθετικά περισσότερος "χώρος".

2.3.5 Αναπαράσταση Scale - Free Γραφημάτων μέσω Υπερβολικής Γεωμετρίας

Η ανάλυση Scale - Free γράφων έχει ως στόχο την ομαδοποίηση κόμβων σε κατηγορίες ανάλογα την ομοιότητα τους. Για παράδειγμα, για ένα χρήστη κοινωνικών μέσων που έχει δημιουργήσει κάποιες συνδέσεις, π.χ. φίλοι στο Facebook, προκύπτει η ανάγκη να του προταθούν καινούργια προφίλ για να αυξήσει τις συνδέσεις του. Αντίστοιχα, στα συστήματα σύστασης, όπου ένας χρήστης έχει παρακολουθήσει κάποιες ταινίες και αναζητά την επόμενη, πρέπει να

γίνει μια ομαδοποίηση στον κόσμο των ταινιών ώστε να του προταθεί με επιτυχία μια καινούρια. Αυτή η ικανότητα ομαδοποίησης εκφράζεται πλήρως από χώρους με Υπερβολική Γεωμετρία.

Το πρόβλημα της ομαδοποίησης κόμβων ονομάζεται και ταξινόμηση. Σε γενικές γραμμές, αυτό σημαίνει πως μπορούν να χωριστούν οι κόμβοι σε σύνολα, καθένα από τα οποία θα υποδιαιρείται σε περαιτέρω υποσύνολα κ.ο.κ. Αυτός ο διαχωρισμός προσεγγίζεται από b-δικά δέντρα που διατηρούν αυτή την ιεραρχική δομή. Όπως αναλύθηκε και στην προηγούμενη ενότητα, κάθε τι που προσεγγίζεται από b-αδικά δέντρα, έχει αρνητική καμπυλότητα μιας και το εκφράζει μια Υπερβολική Γεωμετρία.

Μέσα σε αυτές τις ιεραρχικές δομές, η απόσταση μεταξύ των κόμβων είναι μια προσέγγιση για την ομοιότητα των κόμβων. Έτσι, δημιουργείται η ανάγκη να κατασκευαστεί ένας τρόπος κατά τον οποίο η ομοιότητα των κόμβων θα μεταφράζεται στην απόσταση τους στον Υπερβολικό Χώρο. Η διαδικασία που κάνει αυτή τη μετάφραση είναι η εξής:

Ας θεωρηθεί ένας κόμβος από ένα γράφημα και ας αναπαρασταθεί ως ένα σημείο στο Ευκλείδειο επίπεδο \mathbb{R}^2 . Με κέντρο αυτό το σημείο, θα θεωρηθεί ένας Ευκλείδιος δίσκος που εντός αυτού βρίσκεται το σύνολο των χαρακτηριστικών αυτού του κόμβου. Οπότε, όσο μεγαλύτερη είναι η αλληλοεπικάλυψη δύο τέτοιων δίσκων στο Ευκλείδειο επίπεδο, τόσο μεγαλύτερη είναι η ομοιότητα μεταξύ δύο κόμβων. Αυτή η αλληλοεπικάλυψη, όμως, μεταφέρεται και στον Υπερβολικό Χώρο, ως απόσταση με τέτοιο τρόπο, ώστε όσο πιο όμοιοι είναι δύο κόμβοι, τόσο μικρότερη να είναι η υπερβολική τους απόσταση. Έστω ότι οι δύο δίσκοι του Ευκλείδειου Επιπέδου είχαν ακτίνες r, r' . Αν υπάρχει σταθερά C τέτοια ώστε:

$$\frac{1}{C} \leq \frac{r}{r'} \leq C \quad (2.28)$$

και η Ευκλείδεια απόσταση των κέντρων να φράσσεται από την ποσότητα Cr , τότε υπάρχει σταθερά C' στον Υπερβολικό Χώρο που φράσει την υπερβολική απόσταση των κόμβων, με εξάρτηση μόνο από το C . Δηλαδή, η υπερβολική απόσταση των κόμβων δεν εξαρτάται ούτε από τη θέση τους στο Ευκλείδειο επίπεδο, ούτε από τις ακτίνες των δίσκων. Συνεπώς, οι αποστάσεις μεταξύ κόμβων, σύμφωνα με τα χαρακτηριστικά τους, μπορούν να απεικονιστούν σε αποστάσεις στον Υπερβολικό Χώρο.

2.4 Διάκριση Μεθόδων Εμφύτευσης

Η ερευνητική κοινότητα, αντιλαμβανόμενη τη σημαντικότητα της εμφύτευσης γράφων σε υπερβολικούς χώρους, έχει αναπτύξει διάφορες μεθόδους εμφύτευσης. Καθεμιά από αυτές στηρίζεται σε διαφορετικά εργαλεία για να επιτεύξει τον σκοπό της, όμως σύμφωνα με τους Jiang Hao, Lixia Li Yuanyuan Zeng, Jiajun Fan και Lijuan Shen [18] οι κύριες κατηγορίες είναι οι εξής τρεις: οι Μέθοδοι Εκμάθησης Πολλαπλοτήτων, οι Μέθοδοι Πιθανοφάνειας, οι Υβριδικές Μέθοδοι.

2.4.1 Μέθοδοι Εκμάθησης Πολλαπλοτήτων

Η πρώτη κατηγορία απαρτίζεται από τις μεθόδους εκμάθησης πολλαπλοτήτων (manifold learning). Αυτές στηρίζονται σε data-driven προσεγγίσεις που αποσκοπούν στη Λαπλασιανή

παραγοντοποίηση του πίνακα Γειτνίασης, αξιοποιώντας τη φασματική πληροφορία του γράφου. Συγκεκριμένα, υπολογίζονται οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του Λαπλασιανού πίνακα (ή παρολλαγών του), με στόχο την εξαγωγή μίας χαμηλότερης διάστασης αναπαράστασης του γράφου. Με αυτόν τον τρόπο, επιτυγχάνεται η εμφύτευση (embedding) του γράφου σε έναν υπερβολικό χώρο, ο οποίος είναι ιδιαίτερα κατάλληλος για τη μοντελοποίηση ιεραρχικών και σύνθετων τοπολογιών, όπως αυτές που εμφανίζονται συχνά σε πραγματικά δίκτυα.

Αυτή η φασματική προσέγγιση επιφέρει εξαιρετική απόδοση εμφύτευσης (embedding efficiency), καθώς η διαδικασία είναι σχετικά απλή και υπολογιστικά αποδοτική. Ωστόσο, παρουσιάζει μειονεκτήματα σε ότι αφορά την ακρίβεια της εμφύτευσης (embedding performance), καθώς δεν λαμβάνει πάντα υπόψη της τις μη γραμμικές και τοπικές δομικές ιδιότητες του γράφου με την ίδια ακρίβεια που το κάνουν πιο περίπλοκες μέθοδοι.

Σε αυτή τη κατηγορία ανήκουν μέθοδοι όπως LaBNE [19] και ncMCE [20].

2.4.2 Μέθοδοι Πιθανοφάνειας

Στη δεύτερη κατηγορία ανήκουν τα μοντέλα που για να επιτύχουν την εμφύτευση, μεγιστοποιούν μια συνάρτηση πιθανοφάνειας. Οι συντεταγμένες των κόμβων επιλέγονται, και δεν προκύπτουν, με γνώμονα τη συνάρτηση που πρέπει να μεγιστοποιηθεί. Σε αυτή την κατηγορία, επιτυγχάνεται υψηλή απόδοση κατά την εμφύτευση, όμως η πολυπλοκότητα αυτών των μεθόδων είναι επίσης πολύ υψηλή. Συνεπώς αυτές οι μέθοδοι είναι αποτρεπτικές σε μεγάλους όγκους δεδομένων μιας και ο χρόνος εκτέλεσής τους εκτοξεύεται.

Σε αυτή τη κατηγορία ανήκουν μέθοδοι όπως Mercator [21] και HyperMap [22], η οποία θα αναλυθεί πιο αναλυτικά στη πορεία.

2.4.3 Υβριδικές Μέθοδοι

Η τελευταία κατηγορία είναι ένας συνδυασμός των προηγούμενων δυο ώστε να διατηρηθεί η υψηλή ακρίβεια εμφύτευσης, αλλά και να μειωθεί, όσο γίνεται, η υπολογιστική πολυπλοκότητά τους.

Κάποιες τέτοιες μέθοδοι είναι οι Hydra [23], L-Hydra [24], MpDHE [18] και Hgena [25].

2.5 Popularity versus Similarity Optimization Μέθοδος

Η μέθοδος Popularity versus Similarity Optimization (PSO) είναι μια διαδικασία παραγωγής συνθετικών γραφημάτων που αναπτύχθηκε από τους Fragkiskos Papadopoulos, Maksim Kitsak, M. Ángeles Serrano, Marián Boguñá και Dmitri Krioukov [26]. Η κεντρική ιδέα αυτής της μεθόδου στηρίζεται στην ιδιότητα της Ομοιοφιλίας [27, 28]. Συγκεκριμένα, όμοιοι κόμβοι τείνουν να συνδεθούν μεταξύ τους αν δεν είναι διάσημοι. Αυτή η ιδιότητα παρουσιάζεται πολύ συχνά στα κοινωνικά δίκτυα. Για παράδειγμα, ένα παλιό προφίλ σε κάποιο κοινωνικό δίκτυο έχει μεγαλύτερες πιθανότητες να προσελκύσει συνδέσεις και κατ' επέκταση να γίνει διάσημο, από ένα καινούριο.

2.5.1 Ανάλυση Παραμέτρων

Η μέθοδος PSO δέχεται τέσσερις παραμέτρους, τις $\beta \in (0, 1]$, $m > 0$, $T \geq 0$, $\zeta > 0$. Θα παρουσιαστεί η ανάλυσή τους.

Παράμετρος β

Η παράμετρος β ορίζει τον εκθέτη της κατανομής Γάμμα που ακολουθεί ο βαθμός των κόμβων στο γράφημα σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\gamma = 1 + 1/\beta \geq 2 \quad (2.29)$$

Παράμετρος m

Η παράμετρος m είναι το μέσο πλήθος προϋπαρχόντων κόμβων όπου ένας καινούριος κόμβος θα συνδεθεί. Συνεπώς, αυτή η παράμετρος ελέγχει και το μέσο βαθμό των κόμβων από τη σχέση

$$\bar{k} = 2m \quad (2.30)$$

Παράμετρος T

Η παράμετρος T , που ονομάζεται θερμοκρασία, ελέγχει το μέσο συντελεστή συσταδοποίησης, \bar{c} , του γραφήματος όπως παρουσιάζεται στην εργασία [29].

Παράμετρος ζ

Η τελευταία παράμετρος, ζ , ορίζεται μέσα από το συντελεστή καμπυλότητας της Υπερβολικής Επιφάνειας στην οποία εκτελείται η μέθοδος. Ειδικότερα, αυτή ορίζεται από τη σχέση:

$$\zeta = \sqrt{-K} \quad (2.31)$$

όπου K είναι ο συντελεστής καμπυλότητας. Η τελευταία παράμετρος δεν επηρεάζει τη διαδικασία παραγωγής του γραφήματος, οπότε χαρακτηρίζεται και ως "χαζή" παράμετρος και ορίζεται αυθαίρετα ως 1.

2.5.2 Αλγόριθμος της Μεθόδου PSO

Έχοντας ορίσει όλες τις παραμέτρους της μεθόδου, η PSO παράγει ένα Scale-Free γράφημα μέχρι t κόμβους σύμφωνα με τον παρακάτω ορισμό.

Ο αλγόριθμος παραγωγής γραφήματος PSO

- (1) Αρχικά το γράφημα είναι άδειο.
- (2) Ορισμός συντεταγμένων και ανανέωση:
 - (α') Τη στιγμή $i = 1, 2, \dots, t$ νέος κόμβος προστίθεται στην Υπερβολική Επιφάνεια με πολικές συντεταγμένες (r_i, θ_i) , όπου η ακτινική συντεταγμένη ορίζεται ως $r_i = \frac{2}{\zeta} \ln(i)$ και η γωνιακή συντεταγμένη θ_i λαμβάνεται τυχαία από ομοιόμορφη κατανομή στο $[0, 2\pi]$
 - (β') Κάθε υπάρχων κόμβος $j = 1, 2, \dots, i-1$ μετακινείται αυξάνοντας την ακτινή του συντεταγμένη ως εξής $r_j(i) = \beta r_j + (1 - \beta) r_i$
- (3) Κατασκευή ακμών: Ο κόμβος i συνδέεται με κάθε υπάρχων κόμβο $j = 1, 2, \dots, i-1$ με διαφορετική πιθανότητα $p_{ij} \equiv p(x_{ij})$ που δίνεται από τη σχέση:

$$p(x_{ij}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta}{2T}(x_{ij} - R_i)}} \quad (2.32)$$

Στην τελευταία έκφραση η υπερβολική απόσταση ορίζεται ως:

$$x_{ij} = \frac{1}{\zeta} \operatorname{arccosh}(\cosh(\tilde{r}_i) \cosh(\tilde{r}_j) - \sinh(\tilde{r}_i) \sinh(\tilde{r}_j) \cos(\theta_{ij})), \quad (2.33)$$

όπου $\theta_{ij} = \pi - |\pi - |\theta_i - \theta_j||$.

Η μεταβλητή R_i προκύπτει από την συνθήκη ότι το αναμενόμενο πλήθος κόμβων με το οποίο πρέπει να συνδεθεί ο κόμβος i είναι m . Οπότε ισχύει η σχέση:

$$R_i = r_i - \frac{2}{\zeta} \ln \left(\frac{2T}{\sin(T\pi)} \frac{I_i}{m} \right) \quad (2.34)$$

και

$$I_i = \frac{1}{1-\beta} (1 - i^{(1-\beta)}) \quad (2.35)$$

2.5.3 Γενικευμένη Μέθοδος Popularity versus Similarity Optimization

Οι συνδέσεις μεταξύ καινούριων κόμβων με παλιούς ονομάζονται εξωτερικές συνδέσεις. Στα πραγματικά δίκτυα, παρατηρούνται καινούργιες συνδέσεις με συγκεκριμένο ρυθμό, είτε μεταξύ παλαιών και καινούργιων κόμβων, είτε μεταξύ παλαιών μόνο. Η μέθοδος PSO μπορεί να επεκταθεί και να διαχειριστεί αυτές τις συνδέσεις με την προσθήκη ενός ακόμα βήματος.

Αλγόριθμος της Γενικευμένης Μεθόδου PSO

Η επέκταση του αλγορίθμου στη γενικευμένη PSO

- (4) Σε κάθε στιγμή i , διάλεξε ένα τυχαίο ζευγάρι μη-συνδεδεμένων κόμβων $k, l < i$ και συνδέσει το με πιθανότητα

$$p(x_{kl}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta}{2T}(x_{kl-R_i})}} \quad (2.36)$$

επαναλαμβάνοντας αυτήν τη διαδικασία μέχρι να σχηματιστούν $L > 0$ εσωτερικές συνδέσεις.

Επεκτείνοντας την PSO μέθοδο στη γενικευμένη της μορφή, ο μέσος βαθμός κόμβου πλέον ορίζεται ως:

$$\bar{k} = 2(m + L) \quad (2.37)$$

Η επιπλέον παράμετρος L ορίζει τον ρυθμό με τον οποίο εμφανίζονται οι εσωτερικές συνδέσεις, ενώ παράμετρος m ορίζει τον ρυθμό εμφάνισης των εξωτερικών συνδέσεων.

2.5.4 External Popularity versus Similarity Optimization Μέθοδος

Η μέθοδος HyperMap που θα συζητηθεί αργότερα, έχει σαν στόχο να υλοποιήσει την αντίστροφη διαδικασία από αυτή της γενικευμένης PSO. Δηλαδή, έχοντας ένα γράφημα, η μέθοδος HyperMap προσπαθεί να το εμφυτεύσει σε έναν Υπερβολικό Χώρο με τέτοιο τρόπο ώστε η εμφύτευση να προσεγγίζει την γενικευμένη PSO. Συγκεκριμένα αναζητούνται γωνιακές και ακτινικές συντεταγμένες για κάθε κόμβο, που να μεγιστοποιούν την πιθανότητα το εμφυτευμένο γράφημα να έχει προκύψει από την γενικευμένη PSO μέθοδο.

Οστόσο προκύπτουν δύο προβλήματα από αυτή τη προσπάθεια. Πρώτον, έχοντας μια στατική εικόνα του γραφήματος είναι αδύνατον να διαχωριστούν οι εσωτερικές από τις εξωτερικές συνδέσεις των κόμβων, και δεύτερον, δεν είναι εφικτή η γνώση που αφορά την σειρά εμφάνισης των κόμβων. Η ανάγκη να προσπελαστούν αυτά τα δύο προβλήματα, οδήγησαν σε μια παραλλαγή της PSO μεθόδου, την E-PSO.

Ανάλυση εξωτερικών και εσωτερικών συνδέσεων

Η E-PSO μέθοδος είναι αντίστοιχη της γενικευμένης PSO αλλά χρησιμοποιεί μόνο εξωτερικές συνδέσεις. Έτσι, σε αυτό το πλαίσιο, αντί κάθε κόμβος κατά τη στιγμή της γέννησης του να συνδεθεί με $m = \frac{\bar{k}}{2}$ κόμβους, τώρα συνδέεται με

$$\bar{m}_i(t) = m + \bar{L}_i(t) \quad (2.38)$$

Η παράμετρος $\bar{L}_i(t)$ είναι το αναμενόμενο πλήθος συνδέσεων που θα σχηματίσει ο κόμβος i τη στιγμή t , με τους υπάρχοντες κόμβους $j < i$ και υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\bar{L}_i(t) = \int_i^t \tilde{\Pi}(i, j, t) dj \approx \frac{2L(1-\beta)}{(1-t^{-(1-\beta)})^2(2\beta-1)} \times \left[\left(\frac{t}{i}\right)^{2\beta-1} - 1 \right] \left[1 - t^{-(1-\beta)} \right] \quad (2.39)$$

όπου

$$\tilde{\Pi}(i, j, t) = \int_i^t \Pi(i, j, l) dl \approx \frac{2L(1-\beta)^2}{(1-t^{-(1-\beta)})^2(2\beta-1)} (\dot{j})^{-\beta} (t^{2\beta-1} - i^{2\beta-1}) \quad (2.40)$$

και

$$\Pi(i, j, l) = 2L \frac{e^{-\frac{\zeta}{2}(r_i(l)+r_j(l))}}{\int_1^l \int_1^l e^{-\frac{\zeta}{2}(r_i(l)+r_j(l))} dldj} = 2L \frac{l^{2\beta-2}(\dot{j})^{-\beta}}{I_l^2} \quad (2.41)$$

Συνοψίζοντας, η μέθοδος E-PSO αποτελείται από πέντε παραμέτρους, L , m , β , T , ζ και κατασκευάζει έναν καινούριο scale-free γράφο μέχρι t κόμβους, ακολουθώντας ακριβώς τους υπολογισμούς της απλής PSO μεθόδου, με τη μόνη διαφορά ότι η ποσότητα R_i υπολογίζεται ως εξής:

$$R_i = r_i - \frac{2}{\zeta} \ln \left(\frac{2T}{\sin(T\pi)} \frac{I_i}{\bar{m}_i(t)} \right) \quad (2.42)$$

2.6 Μέθοδος HyperMap

Η μέθοδος HyperMap είναι η κύρια μέθοδος εμφύτευσης γραφημάτων σε Υπερβολικούς Χώρους αυτής της εργασίας. Αυτή προσπαθεί να εμφυτεύσει κάθε γράφημα που της δίνεται σε έναν Υπερβολικό Χώρο μεγιστοποιώντας την πιθανότητα το εμφυτευμένο γράφημα να προκύπτει από την E-PSO μέθοδο. Προκειμένου να επιτύχει κάτι τέτοιο, η HyperMap παράγει τις εμφυτεύσεις βελτιστοποιώντας τις αποστάσεις των κόμβων στον Υπερβολικό Χώρο.

2.6.1 Ανεξαρτησία Συντεταγμένων

Κατά την ανάλυση της μεθόδου PSO αναφέρθηκε πως οι κόμβοι λαμβάνουν τυχαία γωνιακή συντεταγμένη από Ομοιόμορφη κατανομή. Συνεπώς η συνάρτηση πυκνότητας για τις γωνιακές συντεταγμένες είναι η:

$$\rho(\vartheta) = \frac{1}{2\pi} \quad (2.43)$$

Σύμφωνα την βιβλιογραφία προκύπτει η συνάρτηση πυκνότητας για τις ακτινικές συντεταγμένες ως:

$$f_t(r) = \frac{\zeta}{2\beta} e^{\frac{\zeta}{2\beta}(r-r_t)} = \frac{\zeta(\gamma-1)}{2} e^{\frac{\zeta(\gamma-1)}{2}(r-r_t)} \quad (2.44)$$

όπου $r_t = \frac{2}{\zeta} \log(t)$

Οι ακτινικές και γωνιακές συντεταγμένες στη μέθοδο E-PSO είναι ανεξάρτητες μεταβλητές. Οπότε, δοθέντος των $\rho(\vartheta)$ και $f_t(r)$ λαμβάνουμε την από κοινού συνάρτηση πυκνότητας τους:

$$\text{Prob}(\{r_i(t), \vartheta_i\} | \gamma, \zeta) = \frac{1}{(2\pi)^t} \prod_{i=1}^t f_t(r_i(t)) \quad (2.45)$$

2.6.2 Τοπικές και Καθολικές Πιθανότητες Συνδέσεων

Αν θεωρηθεί πως ένα γράφημα έχει αναπτυχθεί μέχρι t κόμβους με τη μέθοδο E-PSO, τότε η καθολική πιθανότητα σύνδεσης $\tilde{p}(x(t))$ είναι η πιθανότητα σύνδεσης δύο οποιωνδήποτε κόμβων σε υπερβολική απόσταση $x(t)$ και ορίζεται ως:

$$\begin{aligned}\tilde{p}(x(t)) &= \frac{1}{t - i_{\min} + 1} \sum_{i=i_{\min}}^t \frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta}{2T}(x(t) - R_t + \Delta_i(t))}} \\ &\approx \frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta}{2T}(x(t) - R_t)}}\end{aligned}\quad (2.46)$$

όπου $i_{\min} = \max(2, te^{\frac{\zeta x(t)}{4(1-\beta)}})$, $\Delta_i(t) = \frac{2}{\zeta} \log((\frac{t}{i})^{2\beta-1} \frac{mI_i}{\bar{m}_i(t)I_t})$, η μεταβλητή R_t δίνεται από την σχέση 2.42, η $\bar{m}_i(t)$ δίνεται από τη σχέση 2.38 και η I_i από την 2.35

Η $\tilde{p}(x(t))$ της σχέσης 2.46 λέγεται καθολική καθώς υπολογίζεται σε όλα τα ζευγάρια κόμβων που τη στιγμή t απέχουν απόσταση $x(t)$. Αντίθετα, η $p(x_{ij})$ της σχέσης 2.32 καλείται τοπική καθώς υπολογίζεται για ένα συγκεκριμένο ζευγάρι i, j που η υπερβολική του απόσταση είναι x_{ij} κατά τη στιγμή της γέννησης του κόμβου i .

2.6.3 Τοπικές και Καθολικές Συναρτήσεις Πιθανοφάνειας

Αν θεωρηθεί ένα γράφημα που έχει αναπτυχθεί με τη μέθοδο E-PSO μέχρι t κόμβους σύμφωνα με τις παραμέτρους m, L, γ, T, ζ και πίνακα Γειτνίασης A με $a_{ij} \in A$, τότε ορίζεται η συνάρτηση πιθανοφάνειας $\mathcal{L}_1 = \mathcal{L}(\{r_i(t), \partial_i\} | a_{ij}, m, L, \gamma, T, \zeta)$. Αυτή ορίζει την πιθανότητα ο κόμβος i να λάβει συντεταγμένες $\{r_i(t), \partial_i\}$, δεδομένων των a_{ij} και m, L, γ, T, ζ . Χρησιμοποιώντας τον κανόνα Bayes η συνάρτηση \mathcal{L}_1 μετασχηματίζεται σε:

$$\mathcal{L}_1 = \frac{\text{Prob}(\{r_i(t), \partial_i\} | \gamma, \zeta) \mathcal{L}_2}{\mathcal{L}_3} \quad (2.47)$$

όπου η $\text{Prob}(\{r_i(t), \partial_i\})$ δίνεται από τη σχέση 2.45. Η συνάρτηση πιθανοφάνειας $\mathcal{L}_2 \equiv \mathcal{L}(a_{ij} | \{r_i(t), \partial_i\}, m, L, \gamma, T, \zeta)$ δίνει την πιθανότητα το δίκτυο να έχει ως πίνακα Γειτνίασης τον A , δεδομένων των $\{r_i(t), \partial_i\}$ και των m, L, γ, T, ζ . Υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\mathcal{L}_2 = \prod_{1 \leq j \leq i \leq t} \tilde{p}(x_{ij}(t))^{a_{ij}} (1 - \tilde{p}(x_{ij}(t)))^{1-a_{ij}} \quad (2.48)$$

Τέλος, η συνάρτηση πιθανοφάνειας $\mathcal{L}_3 \equiv \mathcal{L}(a_{ij} | m, L, \gamma, T, \zeta)$, που είναι ανεξάρτητη των $\{r_i(t), \partial_i\}$ δίνει την πιθανότητα η μέθοδος E-PSO με τις δοθείσες παραμέτρους να έχει δημιουργήσει το γράφημα με πίνακα Γειτνίασης A .

Οι συναρτήσεις πιθανοφάνειας των σχέσεων 2.47 και 2.48 αποκαλούνται Καθολικές Συναρτήσεις Πιθανοφάνειας, καθώς ο υπολογισμός τους γίνεται πάνω σε όλο το γράφημα που έχει αναπτυχθεί μέχρι τη στιγμή t .

Σε αντίθεση με τις Καθολικές Συναρτήσεις Πιθανοφάνειας, ο υπολογισμός των Τοπικών, ορίζεται για κάθε ζευγάρι κόμβων ξεχωριστά, όσο αναπτύσσεται το γράφημα. Πλέον, οι κόμβοι ονομάζονται ανάλογα με τη σειρά εμφάνισης τους στη διαδικασία εμφύτευσης. Συγκεκριμένα, κάθε κόμβος $i \leq t$, κατά τη στιγμή εμφάνισης του, λαμβάνει ακτινική συντεταγμένη σύμφωνα με τη σχέση:

$$r_i = \frac{2}{\zeta} \log(i) \quad (2.49)$$

Ορίζεται η συνάρτηση πιθανοφάνειας $\mathcal{L}_1^i \equiv \mathcal{L}(\partial_i | r_i, \{r_j(i), \partial_j\}, a_{ij}, m, L, \gamma, T, \zeta)_{j < i}$ που δίνει την πιθανότητα ο κόμβος i να λάβει γωνιακή συντεταγμένη ∂_i δοθέντων της ακτινικής συντε-

ταγμένης του r_i , των συντεταγμένων των παλαιότερων κόμβων $\{r_j(i), \vartheta_j\}_{j < i}$ και των παραμέτρων m, L, γ, T, ζ . Χρησιμοποιώντας τον κανόνα του Bayes προκύπτει η σχέση:

$$\mathcal{L}_1^i = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathcal{L}_2^i}{\mathcal{L}_3^i} \quad (2.50)$$

όπου η συνάρτηση $\mathcal{L}_2^i \equiv \mathcal{L}(a_{ij}|r_i, \vartheta_i, \{r_j(i), \vartheta_j\}_{j < i}, m, L, \gamma, T, \zeta)_{j < i}$ ορίζει την πιθανότητα να έχουμε τις συνδέσεις a_{ij} , $i < j$ του πίνακα Γειτνίασης, αν η γωνιακή συντεταγμένη του κόμβου i είναι η τιμή ϑ_i δεδομένων της ακτινικής συντεταγμένης του, των συντεταγμένων των προηγούμενων κόμβων και των παραμέτρων του μοντέλου. Η συνάρτηση πιθανοφάνειας $\mathcal{L}_3^i \equiv \mathcal{L}(a_{ij}|r_i, \{r_j(i), \vartheta_j\}_{j < i}, m, L, \gamma, T, \zeta)_{j < i}$ είναι ανεξάρτητη του ϑ_i , και ορίζει την πιθανότητα ο κόμβος i να έχει τις συνδέσεις a_{ij} , $i < j$ δεδομένων των περιορισμών. Ο υπολογισμός της \mathcal{L}_2^i γίνεται σύμφωνα με τη σχέση:

$$\mathcal{L}_2^i = \prod_{1 \leq j \leq i} p(x_{ij})^{a_{ij}} (1 - p(x_{ij}))^{1-a_{ij}} \quad (2.51)$$

2.6.4 Διαδικασία Εμφύτευσης

Αρχικά, ο Υπερβολικός Χώρος είναι κενός και σταδιακά προστίθενται κόμβοι σε αυτόν. Αφού γίνει μια φθίνουσα κατάταξη μεταξύ των κόμβων σύμφωνα με τον βαθμό τους, τους προσδίδεται η καινούρια τους αρίθμηση. Ο κόμβος εν ονόματι $i = 1$ θα είναι αυτός με το μεγαλύτερο βαθμό, ο $i = 2$ θα είναι ο επόμενος κ.ο.κ. Σε κάθε βήμα της μεθόδου $i = 1, 2, \dots, t$, εισάγεται ο κόμβος με το αντίστοιχο όνομα στον Υπερβολικό Χώρο με ακτινική συντεταγμένη σύμφωνα με τη σχέση 2.49. Στη συνέχεια, καθένας από τους προϋπάρχοντες κόμβους $j = 1, 2, \dots, i$ λαμβάνεται μια αύξηση στην δική τους ακτινή συντεταγμένη σύμφωνα με την σχέση:

$$r_j(i) = \beta r_j + (1 - \beta) r_i \quad (2.52)$$

ώστε να διατηρηθεί η έννοια της δημοφιλίας. Έπειτα προσδίδεται στον κόμβο i και η γωνιακή του συντεταγμένη, η οποία προκύπτει από την μεγιστοποίηση της συνάρτησης 2.51, όπου οι εκφράσεις $p(x_{ij})$ υπολογίζονται σύμφωνα με την εξίσωση 2.32. Η μεγιστοποίηση της \mathcal{L}_2^i μας διαφυλάσσει και την έννοια της ομοιότητας μεταξύ των κόμβων. Εξαίρεση από την τελευταία διαδικασία αποτελεί ο πρώτος κόμβος $i = 1$, όπου κατά τη στιγμή της εμφύτευσής του, δεν υπάρχουν άλλοι κόμβοι στον Υπερβολικό Χώρο, οπότε του προσδίδεται μια τυχαία γωνιακή συντεταγμένη από το διάστημα $[0, 2\pi]$, επιλεγμένη από την Ομοιόμορφη κατανομή.

2.6.5 Αλγόριθμος Εμφύτευσης HyperMap

Η μέθοδος HyperMap δέχεται ένα γράφημα, καθώς και τις τέσσερις παραμέτρους T, β, L, m και υλοποιεί την εμφύτευση αυτού σύμφωνα με τον εξής αλγόριθμο.

Ο αλγόριθμος εμφύτευσης HyperMap

1. Ταξινόμησε τους βαθμούς των κόμβων σε φθίνουσα σειρά $k_1 > k_2 > \dots > k_t$ με αυθαίρετη επιλογή στις ισοβαθμίες.
2. Ονόμασε τον κόμβο i , $i = 1, 2, \dots, t$, αυτόν με βαθμό k_i .
3. Ο κόμβος $i = 1$ γεννιέται και του αποδίδεται ακτινική συντεταγμένη $r_1 = 0$ και τυχαία γωνιακή συντεταγμένη $\theta_1 \in [0, 2\pi)$.
4. Επανάλαβε για $i = 2, 3, \dots, t$:
 - (α') Ο κόμβος i γεννιέται και του προσδίδεται ακτινική συντεταγμένη $r_i = \frac{2}{\zeta} \log(i)$.
 - (β') Αύξησε την ακτινική συντεταγμένη κάθε υπάρχοντος κόμβου $j < i$ σύμφωνα με την εξίσωση $r_j(i) = \beta r_j + (1 - \beta) r_i$.
 - (γ') Δώσε στον κόμβο i την γωνιακή συντεταγμένη θ_i που μεγιστοποιεί την συνάρτηση L_2^i , όπως ορίστηκε στην εξίσωση [2.51](#)
5. Τέλος επανάληψης.

2.7 Μηχανική Μάθηση

Για τη διεξαγωγή των πειραμάτων της εργασίας θα χρησιμοποιηθούν διάφορα μοντέλα Μηχανικής Μάθησης. Δεδομένου ότι η εργασία περιστρέφεται γύρω από δεδομένα γράφων, κρίθηκε σημαντικό αυτά τα μοντέλα να είναι Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων, μιας και αυτά ταιριάζουν περισσότερο στον σκοπό της. Πιο αναλυτικά, πρόκειται για Νευρωνικά Δίκτυα προσανατολισμένα να αντλούν την επιπλέον πληροφορία που κωδικοποιεί αυτό το είδος δεδομένων. Θα αναλύθουν αρχικά τα είδη της Μηχανικής Μάθησης και στη συνέχεια τα Νευρωνικά Δίκτυα. Θα επισημανθούν οι διαφορές μεταξύ τους και πως τα τελευταία και θιστόνται καταλληλότερα για το πλαίσιο αυτής της εργασίας.

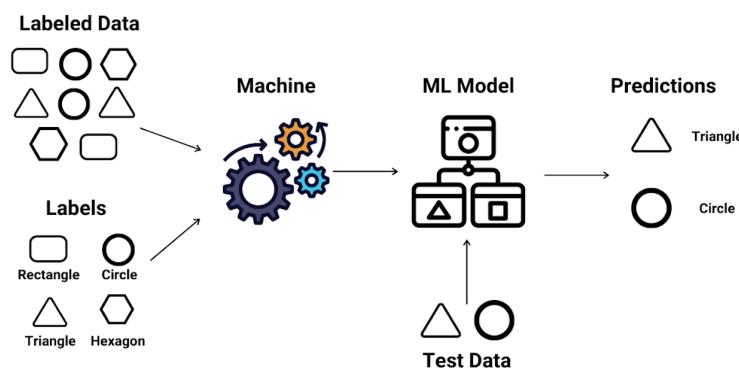
Η Μηχανική Μάθηση είναι ένα σχετικά νέο πεδίο στην Επιστήμη Υπολογιστών, με ραγδαία ανάπτυξη πάρα ταύτα, γεγονός που οφείλεται στη τρομερή αύξηση των διαθέσιμων δεδομένων [\[30\]](#) και ταυτόχρονα στην ανάπτυξη υπολογιστικών μηχανημάτων που μπορούν να υποστηρίξουν την υλοποίηση υπολογισμών πάνω σε αυτά. Η τροφοδοσία των μοντέλων της Μηχανικής Μάθησης με μεγάλο πλήθος δεδομένων, τα καθιστά ικανά να ανακαλύψουν μοτίβα και να προσεγγίσουν τη επίλυση δύσκολων και πολύπλοκων προβλημάτων. Συμπερασματικά αποτελεί ένα πεδίο, που προσφέρει λύσεις σε προβλήματα των οποίων μια αλγορίθμική προσέγγιση της λύσης τους δεν είναι ξεκάθαρη.

2.7.1 Είδη Μηχανικής Μάθησης

Επιβλεπόμενη Μάθηση

Το πρώτο είδος της Μηχανικής Μάθησης είναι η Επιβλεπόμενη Μάθηση (Supervised Learning). Σε αυτό, τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται είναι επιγεγραμμένα. Αυτό σημαίνει

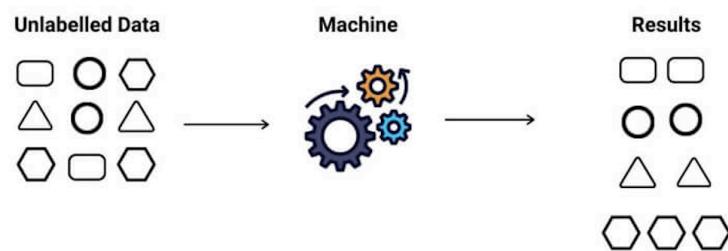
πως αν, π.χ., υπάρχουν δεδομένα εικόνων είναι ταυτόχρονα γνωστό το τι δείχνει κάθε εικόνα και μπορεί να γίνει χρήση αυτής της πληροφορίας για τον προσανατολισμό των μοντέλων στο κομμάτι της εκπαίδευσης. Σε αυτό το είδος Μάθησης δύο είναι οι πιθανοί στόχοι. Ο πρώτος στόχος είναι η Ταξινόμηση (Classification). Κατά την Ταξινόμηση, στόχος είναι η κατηγοριοποίηση δεδομένων σε διακριτές μεταξύ τους κατηγορίες σύμφωνα με την επιγραφή τους. Χαρακτηριστικό είναι το παράδειγμα της Ταξινόμησης εικόνων μεταξύ σκύλων και γατών. Ο δεύτερος στόχος ονομάζεται Παλινδρόμηση (Regression). Η διαφορά της Παλινδρόμησης με την Ταξινόμηση, είναι πως στη δεύτερη, η έξοδος δεν αποτελείται από διακριτές κατηγορίες, τις κλάσεις, αλλά από ένα συνεχές πεδίο τιμών. Επομένως, το μοντέλο δεν καλείται να επιλέξει μία από τις κλάσεις, αλλά να παράξει την έξοδο.



Εικόνα 2.6: Σχηματική απεικόνιση της Επιβλεπόμενης Μάθησης. Πηγή: [6]

Μη-Επιβλεπόμενη Μάθηση

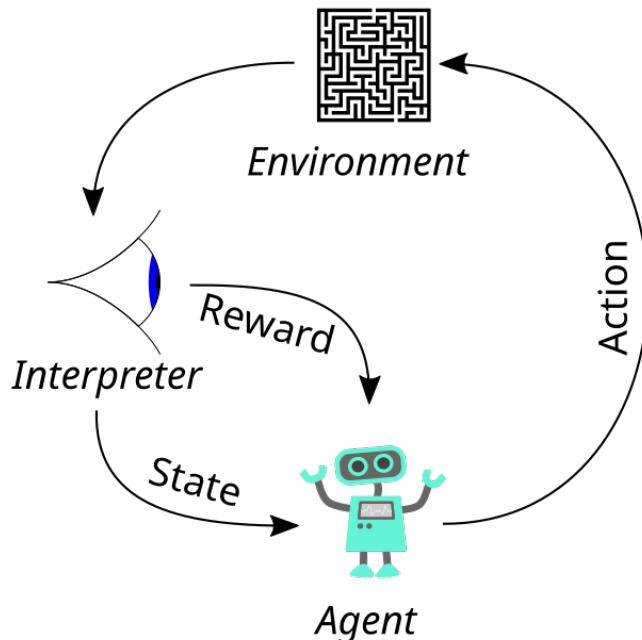
Το δεύτερο είδος αποκαλείται Μη-Επιβλεπόμενη Μάθηση (Unsupervised Learning) και σε αντιδιαστολή με το πρώτο, τα δεδομένα δεν είναι επιγεγραμμένα. Σε αυτή τη κατηγορία, το μοντέλο καλείται χωρίς καμία ανθρώπινη επέμβαση να ανακαλύψει συσχετίσεις μεταξύ των δεδομένων. Μετά την επιτυχή ανακάλυψη αυτών των συσχετίσεων, λαμβάνει σειρά η ομαδοποίηση των δεδομένων. Στόχος είναι τα αντικείμενα εντός μιας ομάδας να μοιάζουν όσο το δυνατόν περισσότερο, αλλά και κάθε αντικείμενο να διαφέρει όσο το δυνατόν περισσότερο από τα αντικείμενα των άλλων ομάδων. Αυτή η διαδικασία καλείται Συσταδοποίηση (Clustering).



Εικόνα 2.7: Σχηματική απεικόνιση της Μη-Επιβλεπόμενης Μάθησης. Πηγή: [7]

Αυτό-Ενισχυόμενη Μάθηση

Το τελευταίο είδος καλείται Αυτό-Ενισχυόμενη Μάθηση (Reinforcement Learning). Σε αυτό το είδος, το σύστημα αλληλεπιδρά με το περιβάλλον και ανάλογα με τις δράσεις του, λαμβάνει είτε μία ανταμοιβή είτε μία ποινή. Οπότε, μέσω αυτής της διαδικασίας, το μοντέλο ανακαλύπτει τον βέλτιστο τρόπο εξερεύνησης του περιβάλλοντος. Οπότε, κατ' αυτόν τον τρόπο, αν η διαδικασία ανταμοιβής ή ποινής είναι ορθά ορισμένη (αυτή είναι η μοναδική ανθρώπινη παρέμβαση), τότε η βέλτιστη διαδρομή του συστήματος θα είναι και η λύση στο εκάστοτε πρόβλημα.



Εικόνα 2.8: Σχηματική απεικόνιση της Αυτό-Ενισχυόμενης Μάθησης. Πηγή: [7]

2.7.2 Εκπαίδευση

Η αρχιτεκτονική κάθε μοντέλου Μηχανικής Μάθησης επηρεάζει σε πολύ μεγάλο βαθμό την απόδοσή του σε κάθε εκτέλεση του εκάστοτε μοντέλου. Αρχιτεκτονικές με πολλά κρυφά στρώματα τείνουν να έχουν καλύτερη απόδοση όταν τα δεδομένα αποτελούνται από εικόνες, καθώς κάθε στρώμα έχει την ικανότητα να εστιάσει στα διαφορετικά χαρακτηριστικά της εικόνας αυτής. Αντίθετα, όταν τα δεδομένα είναι πιο "απλά", π.χ. δεδομένα που αναπαρίστανται από διανύσματα, τότε πιο ρηχές αρχιτεκτονικές αποδίδουν καλύτερα. Σε κάθε περίπτωση, η εκπαίδευση των μοντέλων είναι το κρίσιμο στάδιο που επιτρέπει στα μοντέλα να αντλήσουν πληροφορία από τα δεδομένα.

Η εκπαίδευση των μοντέλων Μηχανικής Μάθησης χαρακτηρίζεται από μια συνάρτηση, την Συνάρτηση Κόστους (Loss Function). Όσον αφορά την Επιβλεπόμενη Μάθηση, κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, τα μοντέλα λαμβάνουν δεδομένα και παράγουν μια έξοδο. Η Συνάρτηση Κόστους υπολογίζει την απόκλιση της παραγόμενης εξόδου από την πραγματική. Στόχος της εκπαίδευσης είναι να ανακαλύψει τα κατάλληλα βάρη για τα μοντέλα, ώστε κάθε παραγόμενη εξόδος να απέχει όσο το δυνατόν λιγότερο από την πραγματική. Αυτό γίνεται μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας, όπου στην αρχή τα βάρη των μοντέλων είναι τυχαία και άρα παράγουν

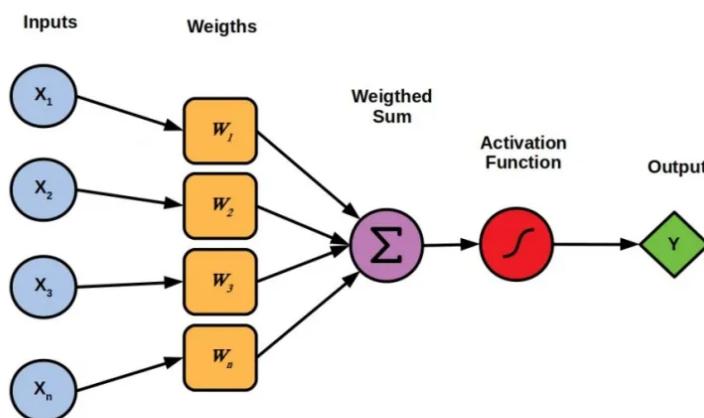
τυχαίες εξόδους. Το πλήθος των επαναλήψεων καλείται πλήθος εποχών και, κατ' επέκταση, κάθε επανάληψη καλείται εποχή. Η απόκλιση της πραγματικής με την παραγόμενη έξοδο ορίζει μια κατεύθυνση προσαρμογής των βαρών. Η διαδικασία ορισμού αυτής της κατεύθυνσης γίνεται από τον optimizer, καθώς υπάρχουν διάφοροι τρόποι που αυτή μπορεί να οριστεί. Πάνω σε αυτή την κατεύθυνση ορίζεται και το βήμα μάθησης (learning rate), το οποίο ορίζει την έκταση των αλλαγών πάνω στα βάρη. Η επαναληπτική αυτή διαδικασία καταλήγει σε τιμές βαρών που ελαχιστοποιούν την Συνάρτηση Κόστους. Είναι ιδιαίτερα σημαντικό, όμως, αυτή η ελαχιστοποίηση να μην επηρεάζει την προβλεπτική ικανότητα των μοντέλων, δηλαδή την απόδοση τους σε καινούρια δεδομένα. Γι' αυτό το λόγο, συνήθως, η εκπαίδευση δεν συνεχίζεται μέχρι την ελαχιστοποίηση της Συνάρτησης Κόστους, αλλά ελαφρώς νωρίτερα.

Στην Μη-Επιβλεπόμενη Μάθηση, υπάρχει πάλι η Συνάρτηση Κόστους αλλά δεν υπολογίζει απόκλιση παραγόμενης και πραγματικής εξόδου, μιας και δεν υπάρχουν επιγεγραμμένα δεδομένα. Σε αυτή τη Μάθηση, η έξοδος είναι πιο αυθαίρετη και άρα η Συνάρτηση Κόστους, που είναι ορισμένη μέσω του προβλήματος, μοντελοποιεί κάποιο ποιοτικό χαρακτηριστικό του προβλήματος. Η υπόλοιπη διαδικασία παραμένει ίδια.

Στην Αυτό-Ενισχυόμενη Μάθηση, η διαδικασία εκπαίδευσης είναι η επανάληψη του ίδιου πειράματος πολλαπλές φορές με σκοπό να ανακαλυφθεί η βέλτιστη λύση στον ελάχιστο αριθμό βημάτων.

2.7.3 Νευρωνικά Δίκτυα

Τα Νευρωνικά Δίκτυα έχουν ως πηγή έμπνευσής τους τον βιολογικό νευρώνα. Αυτός δέχεται ένα αρχικό ερέθισμα στον ανθρώπινο οργανισμό το οποίο τον ενεργοποιεί, ή όχι, με αποτέλεσμα να μεταφερθεί αυτό το μήνυμα όταν υπάρχει ενεργοποίηση. Από εκεί συνεχίζει το μοντέλο McCulloch-Pitts που παρομοιάζει τους νευρώνες με λογικές πύλες που είναι ενεργοποιημένες, ή όχι, αν το ερέθισμά τους (είσοδος) ξεπεράσει ένα συγκεκριμένο κατώφλι.



Εικόνα 2.9: Σχηματική απεικόνιση ενός Perceptron. Πηγή: [8]

Μοντέλο Perceptron

Η παρομοίωση του μοντέλου McCulloch-Pitts, μοντελοποιείται από το Perceptron 2.9. Ειδικότερα, έχουμε ένα πλήθος εισόδων, συναπτικών βαρών και μίας πόλωσης τα οποία δημιουργούν την συνολική διέγερση. Τέλος, υπάρχει και μια συνάρτηση ενεργοποίησης που δέχεται, ως είσοδο, την συνολική διέγερση και ελέγχει αν εν τέλει θα υπάρξει ενεργοποίηση του νευρώνα ή όχι. Η μαθηματική μοντελοποίηση είναι η εξής:

Το Μοντέλο Perceptron

- Κατάσταση νευρώνα $\begin{cases} y = 0 & , \text{αδρανής νευρώνας} \\ y = 1 & , \text{ενεργοποιημένος νευρώνας} \end{cases}$
- Είσοδοι: x_1, x_2, \dots, x_n
- Συναπτικά Βάρη: w_1, w_2, \dots, w_n
- Πόλωση: w_0
- Συνολική Διέγερση: $u = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_nx_n$
- Συνάρτηση Ενεργοποίησης: $y = f(u) \in \{0, 1\}$

Πινακική Μορφή: $y = f(\tilde{W}^T X)$,

$$\text{όπου } \tilde{W}^T = [w_0, \ w_1, \ w_2, \ \dots, \ w_n] \text{ και } X^T = [1, \ x_1, \ x_2, \ \dots, \ x_n]$$

Έχει οριστεί πως η συνάρτηση ενεργοποίησης λαμβάνει τιμές στο σύνολο $\{0, 1\}$, όμως αυτό δεν είναι περιοριστικό και εξαρτάται πλήρως από το πρόβλημα. Επιπλέον, είναι σύνηθες ο ορισμός της πόλωσης να είναι $w_0 = 1$.

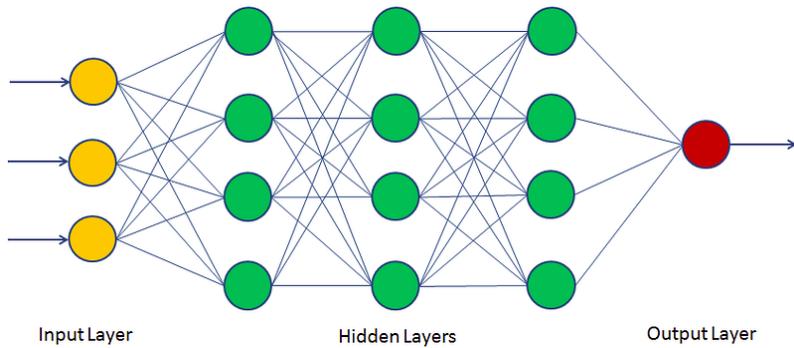
Πρότυπο καλείται κάθε στοιχείο από το σύνολο των δεδομένων. Η έξοδος του νευρώνα μας δίνει αυτόματα την κλάση που ανήκει κάθε πρότυπο. Έτσι, κάθε πρότυπο που δίνεται ως είσοδος στον νευρώνα και οδηγεί, μέσω του συνόλου των υπολογισμών, σε έξοδο 0, θα ταξινομείται στην κλάση 0. Αντίστοιχα, τα πρότυπα που παράγουν έξοδο 1 θα ανήκουν στην κλάση 1. Σχηματικά, προκύπτει μια επιφάνεια διάστασης $n - 1$ (n είναι το πλήθος των χαρακτηριστικών κάθε προτύπου) που αν σχεδιαστούν τα πρότυπα στον Ευκλείδειο χώρο \mathbb{R}^n , αυτά που ανήκουν στην τάξη 0 θα βρίσκονται κάτω από αυτή την επιφάνεια, ενώ αυτά της τάξης 1 θα βρίσκονται από πάνω.

Μοντέλο Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων

Η γραμμική φύση του μοντέλου Perceptron, η οποία προσφέρει λύση μόνο σε γραμμικά προβλήματα (προβλήματα όπου η διαχωριστική επιφάνεια είναι επίπεδη), δεν επαρκεί για την επίλυση κάθε προβλήματος. Ειδικότερα, σε πολλά προβλήματα προκύπτει η ανάγκη για πιο σύνθετη διαχωριστική επιφάνεια. Σε αυτό το πρόβλημα δίνει λύση το μοντέλο Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων (Multi-Layer Perceptron).

Η δομή του μοντέλου Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων αποτελείται από ένα στρώμα εισόδου, κρυφά στρώματα και ένα στρώμα εξόδου. Το στρώμα εισόδου αποτελείται από n το πλήθος

νευρώνες Perceptron που καθένας από τους οποίους λαμβάνει ως είσοδο όλες τις εισόδους x_i . Σύμφωνα με τον τρόπο που αναλύθηκε πριν, κάθε νευρώνας που ανήκει στο στρώμα εισόδου παράγει μια έξοδο που τροφοδοτείται σε κάθε νευρώνα του πρώτου κρυφού στρώματος. Αντίστοιχα, κάθε νευρώνας του πρώτου κρυφού στρώματος, παράγει μια έξοδο που μεταφέρεται σε κάθε νευρώνα του δεύτερου κρυφού στρώματος κ.ο.κ μέχρι να καταλήξει η πληροφορία στο στρώμα εξόδου. Το πλήθος των νευρώνων σε κάθε κρυφό στρώμα μπορεί να διαφέρει. Γι' αυτόν τον λόγο, παράγονται και οι έννοιες του πλάτους και του βάθους. Πλάτος είναι το μέγιστο πλήθος νευρώνων από τα κρυφά επίπεδα, ενώ βάθος είναι το πλήθος των κρυφών επιπέδων. Τέλος, στο στρώμα εξόδου υπάρχουν m το πλήθος νευρώνες Perceptron όπου η έξοδος καθενός αποτελεί μια από τις έξόδους. Μια τέτοια δομή θα παρουσιαστεί στο επόμενο διάγραμμα.



Εικόνα 2.10: Παράδειγμα αρχιτεκτονικής ενός Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων. Πηγή: [9]

Η δομή που παρουσιάζεται στην εικόνα 2.10, απεικονίζει ένα Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων. Αυτό ορίζεται από το στρώμα εισόδου με τρεις νευρώνες, οι οποίοι είναι υπεύθυνοι να αναλύσουν τη πληροφορία που θα λάβουν από τα δεδομένα. Στη συνέχεια, η παραγόμενη έξοδος του στρώματος εισόδου μεταφέρεται στα κρυφά επίπεδα. Στην παρούσα αρχιτεκτονική υπάρχουν τρία κρυφά επίπεδα, από τα οποία το καθένα έχει τέσσερις νευρώνες. Μετά τη διαδοχική μετατροπή των παραγόμενων έξοδων σε εισόδους του επόμενου στρώματος, η πληροφορία καταλήγει στο στρώμα εξόδου. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, αυτό χαρακτηρίζεται από έναν νευρώνα.

Η διαδικασία που αναφέρθηκε προηγουμένως, όπου η πληροφορία μεταφέρεται από στρώμα σε στρώμα με αφετηρία το στρώμα εισόδου και τέλμα το στρώμα εξόδου, παρουσιάζεται μέσω του μαθηματικού της ορισμού.

Το Μοντέλο Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων

Για ένα σύνολο δεδομένων X όπου $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_p^{(k)})$ ο αλγόριθμος του Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων είναι ο εξής:

$$\begin{aligned} h_i^{(1)} &= f^{(1)}\left(\sum_j w_{ij}^{(1)} x_j + b_i^{(1)}\right) \\ h_i^{(2)} &= f^{(2)}\left(\sum_j w_{ij}^{(2)} h_j^{(1)} + b_i^{(2)}\right) \\ &\vdots \\ h_i^{(n-1)} &= f^{(n-1)}\left(\sum_j w_{ij}^{(n-1)} h_j^{(n-2)} + b_i^{(n-1)}\right) \\ y_i &= f^{(n)}\left(\sum_j w_{ij}^{(n)} h_j^{(n-1)} + b_i^{(n)}\right) \end{aligned}$$

Με $f^{(l)}$ ορίζεται η συνάρτηση ενεργοποίησης του επιπέδου l , καθώς είναι πιθανό κάθε επίπεδο να έχει διαφορετική συνάρτηση ενεργοποίησης. Επιπλέον, κάθε επίπεδο μπορεί να έχει τη δική του πόλωση $b^{(l)}$.

Στον κορμό ανάλυσης του Perceptron και του Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων έχουν αναφερθεί οι συναρτήσεις ενεργοποίησης. Αυτές χωρίζονται σε γραμμικές, ή μη, ανάλογα με τον τύπο τους. Ενδεικτικά θα ορίσουμε μερικές από αυτές.

- Βηματική: $f(x) = \begin{cases} -1 & x \leq 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$
- Σιγμοειδής: $f(x) = \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
- Υπερβολική Εφαπτομένη: $f(x) = \tanh(x) = \frac{2}{1+e^{-2x}} - 1$
- ReLU: $f(x) = \max(0, x)$
- Softplus: $f(x) = \log(1 + e^x)$

Έχοντας ορίσει το δομικό συστατικό, το Perceptron, και την γενίκευση του, το MLP, είναι πλέον δυνατόν να οριστούν τα Νευρωνικά Δίκτυα. Ουσιαστικά, αυτά είναι MLP αλλά με πιο περίπλοκες δομές. Για παράδειγμα, σε ένα Νευρωνικό Δίκτυο μπορεί να απονισάζουν συνδέσεις μεταξύ νευρώνων που βρίσκονται σε γειτονικά στρώματα ή να έχουν προστεθεί συνδέσεις μεταξύ νευρώνων που να μην βρίσκονται σε γειτονικά στρώματα. Αντίστοιχα, μπορούν να γίνουν επιλογές πάνω στην ύπαρξη πόλωσης ή όχι.

Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα

Η ανάγκη για επίλυση όλο και πιο σύνθετων προβλημάτων οδηγεί σε όλο και μεγαλύτερες αρχιτεκτονικές Νευρωνικών Δικτύων. Αυτή η μεγέθυνση των Νευρωνικών Δικτύων, αν και τα καθιστά εξαιρετικά ικανά, δημιουργεί ένα σημαντικό πρόβλημα. Ειδικότερα, όσο αυξάνεται το πλήθος των νευρώνων, τόσο αυξάνεται ο χρόνος εκπαίδευσης του δικτύου και το απαιτούμενο

πλήθος δεδομένων εκπαίδευσης. Συνεπώς, πρέπει να οδηγηθούμε σε μια πιο έξυπνη αντιμετώπιση γι' αυτά τα περίπλοκα προβλήματα. Αυτή την αντιμετώπιση προσφέρουν τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα (Convolutional Neural Networks ή CNNs).

Τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα, σύμφωνα με το [31], είναι μοντέλα Μηχανικής Μάθησης που περιλαμβάνουν το επίπεδο της συνέλιξης. Αυτό το επίπεδο έρχεται να μειώσει το πλήθος των παραμέτρων του μοντέλου και κατ' επέκταση να λύσει το προαναφερθέν πρόβλημα. Το επίπεδο της συνέλιξης λειτουργεί πάνω σε δεδομένα με Ευκλείδεια δομή. Αυτή η δομή εμφανίζεται σε δεδομένα εικόνων, για παράδειγμα, όπου η διάταξη των εικονοστοιχείων δομείται σε ένα πίνακα δύο διαστάσεων. Το συνελικτικό επίπεδο χρησιμοποιεί φίλτρα που μετακινούνται πάνω σε όλο τον πίνακα της εισόδου και υλοποιούν συνέλιξεις (προσθέσεις ή/και πολλαπλασιασμού). Με αυτόν τον τρόπο παράγουν έναν νέο πίνακα (συνήθως μικρότερης διάστασης), ο οποίος έχει συγκεντρώσει πληροφορία για τα τοπικά χαρακτηριστικά της εικόνας εστιάζοντας ταυτόχρονα στα διαφορετικά σημεία της.

2.7.4 Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων

Τα δεδομένα γραφημάτων, όμως, δεν έχουν Ευκλείδεια δομή. Ως εκ τούτου, πρέπει να προκύψει μια γενίκευση των Συνελικτικών Νευρωνικών Δικτύων που να συμπεριλαμβάνει και τέτοιου είδους δεδομένα. Τα Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων (Graph Neural Networks ή GNNs) είναι η εξέλιξη αυτών. Στόχος τους είναι η εκμάθηση μιας συνάρτησης που θα συνδυάζει τόσο τη πληροφορία από τα χαρακτηριστικά κάθε κόμβου όσο και τη προσφερόμενη πληροφορία από τους γειτονικούς κόμβους και θα παράγει εν τέλει μια καινούρια αναπαράσταση.

Η ανάλυση της δομής αυτών των μοντέλων αλλά και οι αρχιτεκτονικές που θα χρησιμοποιήθουν σε αυτή την εργασία, θα αποτελέσουν το επόμενο κομμάτι της εργασίας. Στόχος είναι να διαλευκανθεί ο τρόπος που αυτά τα μοντέλα καταφέρνουν να εκμαιεύσουν πληροφορία από αυτά τα δεδομένα.

Η κατηγοριοποίηση των Νευρωνικών Δικτύων Γραφημάτων γίνεται σε τέσσερις βασικές κατηγορίες, όπως αναφέρεται και στο [32]. Ειδικότερα έχουμε τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων, Δίκτυα Γραφημάτων με Προσοχή, Χωρικά-Χρονικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων και μερικές Υβριδικές μεθόδους.

Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων

Τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων (Graph Convolutional Neural Networks ή GCNs) υλοποιούν την πράξη της συνέλιξης σε επίπεδο γραφήματος. Αυτό σημαίνει πως προσπαθούν να συνδυάσουν τα χαρακτηριστικά ενός κόμβου με την πληροφορία που φέρουν οι γειτονικοί του κόμβοι. Τα μοντέλα αυτά υποδιαιρούνται σε φασματικά (spectral) και χωρικά (spatial). Καθώς το πλήθος των γειτόνων από κόμβο σε κόμβο μπορεί να διαφέρει, τα φασματικά GCNs χρησιμοποιούν το μετασχηματισμό Fourier και μετασχηματίζουν την πληροφορία εισόδου σε συχνότητα. Κατά αυτόν τον τρόπο υλοποιούν και την πράξη της συνέλιξης. Στην εργασία χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο GCN, που ανήκει στη κατηγορία των φασματικών μοντέλων. Ειδικότερα, για ένα σήμα εισόδου $x \in \mathbb{R}^d$ και ένα συνελικτικό φίλτρο $g \in \mathbb{R}^d$, η πράξη της

συνέλιξης δίνεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} x *_G g &= F^{-1}(F(x) \odot F(g)) \\ &= U(U^T x \odot U^T g) \\ &= U\hat{g}U^T x \end{aligned} \quad (2.53)$$

όπου $*_G$ δηλώνει την πράξη της συνέλιξης σε γραφήματα, η συνάρτηση $F(x) = U^T x$ δηλώνει τον μετασχηματισμό Fourier για γραφήματα, με $F^{-1}(F(x)) = U F(x)$ δηλώνεται ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier για γραφήματα, με \odot δηλώνεται το γινόμενο Hadamard και με $\hat{g} = diag(U^T g)$.

Αντίθετα, τα χωρικά GCNs υλοποιούν την πράξη της συνέλιξης πάνω στην πληροφορία που προσφέρουν οι γείτονες ενός κόμβου για να λάβουν μια πιο πλούσια αναπαράσταση. Το πρόβλημα με το διαφορετικό πλήθος των γειτόνων εμφανίζεται και σε αυτά τα μοντέλα. Προκειμένου να ξεπεραστεί αυτό, χρησιμοποιούνται τεχνικές δειγματοληψίας που ορίζουν το πλήθος και ποιοί γείτονες θα συμπεριληφθούν σε κάθε πράξη. Στο πλαίσιο της εργασίας, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο GraphSAGE [33]. Αυτό το μοντέλο, σταθεροποιεί ένα πλήθος γειτόνων για κάθε κόμβο, ενώ η δειγματοληψία ορίζει το ποιοί γείτονές θα συμπεριληφθούν. Η πράξη της συνέλιξης γίνεται σύμφωνα με την εξής σχέση:

$$X_{u_i}^{(t)} = \sigma\left(W^{(t)} g^{(t)}(X_i^{(t-1)}, \{X_j^{(t-1)}, \forall j \in S_{N(u_i)}\})\right) \quad (2.54)$$

όπου ο $W^{(t)}$ είναι ο πίνακας βαρών που εκπαιδεύεται και η $g^{(t)}$ είναι η συνάρτηση συνάθροισης στο t επίπεδο αντίστοιχα. Επιπλέον, η σ είναι μια μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης και το σύνολο $S_{N(u_i)}$ είναι ένα τυχαίο δείγμα από το σύνολο των γειτόνων του κόμβου u_i .

Δίκτυα Γραφημάτων με Προσοχή

Μεταξύ του συνόλου των γειτονικών κόμβων, είναι αναμενόμενο, κάποιοι γείτονες να προσφέρουν περισσότερη πληροφορία από κάποιους άλλους. Ο μηχανισμός της προσοχής (attention mechanism) επιτρέπει στο μοντέλο να κατηγοριοποιεί τους γείτονες σύμφωνα με την πληροφορία που προσφέρουν και να εστιάζει σε αυτούς με τη μέγιστη προσφορά. Αυτή είναι η ιδέα πίσω από τα Δίκτυα Γραφημάτων με Προσοχή (Graph Attention Networks). Στο πλαίσιο της εργασίας χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο GAT [34], που προσδίδει σε διαφορετικούς γείτονες ένα βάρος το οποίο σηματοδοτεί την ποιότητα της πληροφορίας που προσφέρουν. Αυτό γίνεται μέσω της σχέσης:

$$X_i^{(t)} = \sigma\left(\sum_{j \in N(u_i)} a(X_i^{(t-1)}, X_j^{(t-1)}) W^{(t-1)} X_j^{(t-1)}\right) \quad (2.55)$$

όπου $a(\cdot)$ είναι ο μηχανισμός προσοχής και $X_i^{(t)}$ είναι η κρυφή κατάσταση του κόμβου u_i στο επίπεδο t .

Χωρικά-Χρονικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων

Τα Χωρικά-Χρονικά Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων (Spatial-Temporal Graph Neural Networks) είναι μια άλλη κατηγορία των Νευρωνικών Δικτύων Γραφημάτων που χρησιμοποιούνται όταν ο χαρακτήρας των γράφων είναι δυναμικός και όχι στατικός. Συγκεκριμένα, αυτά τα μοντέλα προσπαθούν να αντλήσουν πληροφορία όταν οι είσοδοι από τα δεδομένα είναι χρονικά εξαρτημένοι και οι συνδεδεμένοι κόμβοι είναι αλληλοεξαρτώμενοι. Τότε, πρέπει πρώτα να εκμαιευτούν οι χωρικές ιδιότητες των δεδομένων και στη συνέχεια να αναζητηθεί η χρονική τους συσχέτιση. Η πρώτη διαδικασία γίνεται μέσω της συνέλιξης διάχυσης (diffusion convolution) και η δεύτερη μέσω GRU (Gated Recurrent Units).

Μέρος II

Πρακτικό Μέρος

Κεφάλαιο 3

Ανάλυση και σχεδίαση

\sum το κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η προετοιμασία των εφαρμογών. Συγκεκριμένα, θα αναλυθεί η διαδικασία παραγωγής συνθετικών δεδομένων καθώς και η βελτιστοποίηση του περιβάλλοντος για τη Μηχανική Μάθηση (επιλογή Optimizer, βήματος μάθησης, πλήθος εποχών και αρχιτεκτονικής μοντέλου).

3.1 Συγκέντρωση Δεδομένων

3.1.1 Μέθοδος Παραγωγής Συνθετικών Γραφημάτων Barabasi-Albert

Για τις επόμενες προσπάθειες χρησιμοποιήθηκαν συνθετικά Scale Free γραφήματα, φτιαγμένα με την μέθοδο Barabasi - Albert από τη βιβλιοθήκη NetworkX [35]. Αυτή η διαδικασία ξεκινάει από ένα κενό γράφημα και προσθέτει έναν έναν κόμβους μέχρι να εισαχθούν n το πλήθος από αυτούς. Ειδικότερα, όταν προστίθεται ένας κόμβος, δημιουργεί m συνδέσεις με προτίμηση προς τους κόμβους με τον μεγαλύτερο βαθμό. Με αυτόν τον τρόπο καταλήγει η κατανομή των κόμβων να ακολουθεί κατανομή Γάμμα: $f(x; \gamma) = x^{-\gamma}$.

Συνολικά, δημιουργήθηκαν 20 συνθετικά γραφήματα με την παραπάνω διαδικασία. Όλα έχουν 100 κόμβους και για τον δείκτη των ακμών έχουμε τιμές από 7 έως 33. Αυτό σημαίνει πως οι γράφοι είναι ολοένα και πιο πυκνοί, μιας και κάθε προστιθέμενος κόμβος συνδέεται με ολοένα και περισσότερους κόμβους. Για τη συνέχεια της εργασίας επιλέχθηκε η ονομασία κάθε γραφήματος σύμφωνα με την τιμή της παραμέτρου m .

3.1.2 Υπολογισμός Παραμέτρων

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η μέθοδος HyperMap απαιτεί κατά την εκκίνηση της, τις τιμές για τις παραμέτρους T , β , L , m του γραφήματος που καλείται να εμφυτεύσει. Έτσι, το επόμενο βήμα είναι να υπολογιστούν για κάθε γράφημα αυτές οι τιμές.

Θερμοκρασία T

Η θερμοκρασία T υπολογίστηκε εμμέσως από τον μέσο συντελεστή συσταδοποίησης του γραφήματος. Αφού υπολογίσουμε τον συντελεστή συσταδοποίησης κάθε κόμβου, έπειτα έχουμε την δυνατότητα να ορίσουμε τον μέσο συντελεστή συσταδοποίησης ως τον μέσο όρο των επιμέρους συντελεστών. Αυτός ο δείκτης λαμβάνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$ και όσο πιο κοντά είναι στην τιμή 1 τόσο πιο συνεκτικό είναι το υπό εξέταση γράφημα. Η παραμέτρος της θερμοκρασίας

όμως λειτουργεί αντίθετα, μιας και όσο απομακρυνόμαστε από την τιμή 0 και προσεγγίζουμε την τιμή 1, τότε μειώνεται και η συνεκτικότητα του γραφήματος. Γι' αυτόν τον λόγο ορίσαμε την παράμετρο της θερμοκρασίας μέσω του γραμμικού μετασχηματισμού $f(x) = 1 - x$.

Παράμετρος β

Βρέθηκε η κατανομή Γάμμα που περιγράφει καλύτερα την κατανομή των βαθμών των κόμβων και λήφθηκε ο εκθέτη αυτής. Έτσι, σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, η παράμετρος β προκύπτει από την εξίσωση:

$$\beta = \frac{1}{\gamma - 1} \quad (3.1)$$

Παράμετρος m

Η παράμετρος m προκύπτει από ιστορικά δεδομένα κατά την εξέλιξη του γραφήματος. Ειδικότερα, αυτή η παράμετρος ορίζεται ως το μέσο πλήθος συνδέσεων των κόμβων κατά την εισαγωγή τους στον γράφο. Βέβαια, στην περίπτωση που δεν υπάρχουν τέτοια ιστορικά δεδομένα, αυτή η παράμετρος λαμβάνει την τιμή του ελάχιστου βαθμού κόμβου. Καθώς ο τρόπος παραγωγής γραφημάτων που ακολουθήθηκε δεν προσφέρει τα απαιτούμενα ιστορικά δεδομένα, η παράμετρος m ορίστικε με τον δεύτερο τρόπο.

Παράμετρος L

Τελευταίος θα είναι ο υπολογισμός του μέσου βαθμού των κόμβων:

$$\bar{k} = \frac{1}{|G|} \sum_{u \in G} \deg(u) \quad (3.2)$$

Αυτός προκύπτει ως ο μέσος όρος των επιμέρους βαθμών. Έτσι, γνωρίζοντας τόσο την παράμετρο m καθώς όσο και τον μέσο βαθμό κόμβων \bar{k} , η τελευταία παράμετρος L ορίζεται από τη σχέση

$$L = \frac{\bar{k} - 2m}{2} \quad (3.3)$$

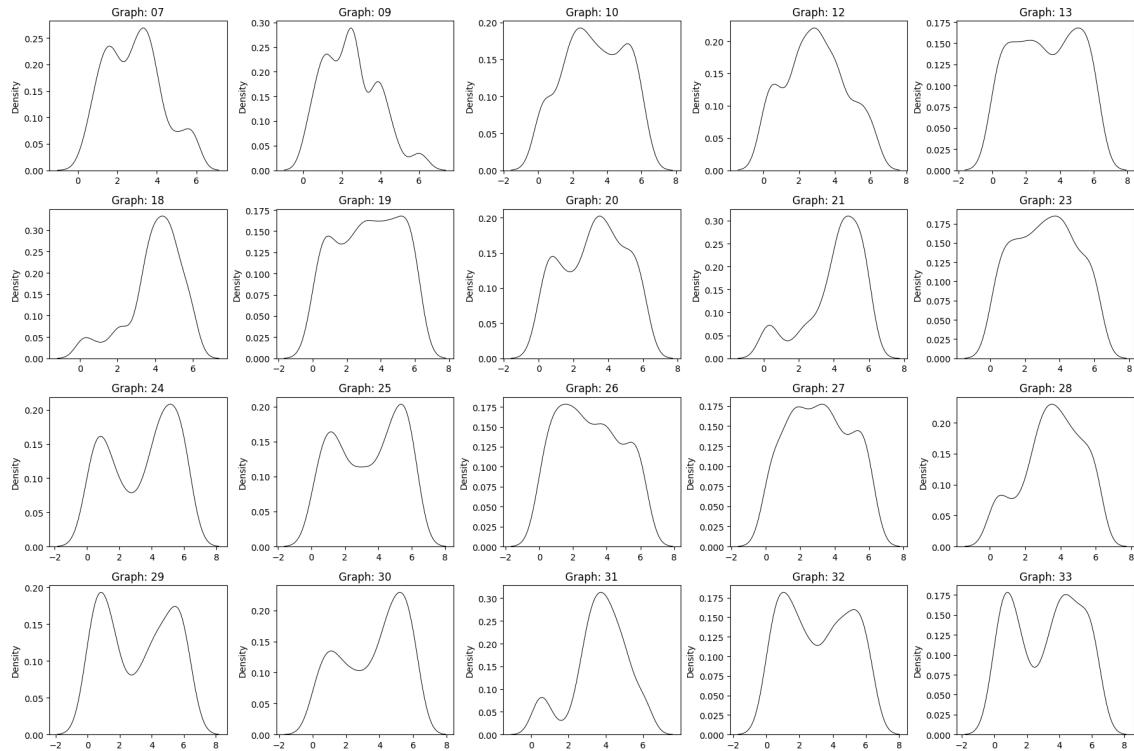
Παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα οι τιμές των παραμέτρων που υπολογίστηκαν όπως αναφέρθηκαν προηγουμένως.

Πίνακας 3.1: Στατιστικές ιδιότητες των συνθετικών γραφημάτων.

Γράφημα	Θερμοκρασία	γ	L	m
07	0.9	3.3	1.5	5
09	0.8	3.6	1.2	7
10	0.8	3.5	4.0	5
12	0.8	4.8	5.6	5
13	0.8	5.5	3.3	8
18	0.7	3.4	5.8	9
19	0.7	4.3	2.4	13
20	0.7	3.9	10.0	6
21	0.7	4.0	4.6	12
23	0.6	3.9	1.7	16
24	0.6	3.6	0.2	18
25	0.6	4.0	9.8	9
26	0.6	3.7	1.2	18
27	0.6	4.0	4.7	15
28	0.6	3.5	1.2	19
29	0.6	3.6	16.6	4
30	0.5	3.7	18.0	3
31	0.6	3.8	7.4	14
32	0.5	3.6	8.8	13
33	0.5	3.8	16.1	6

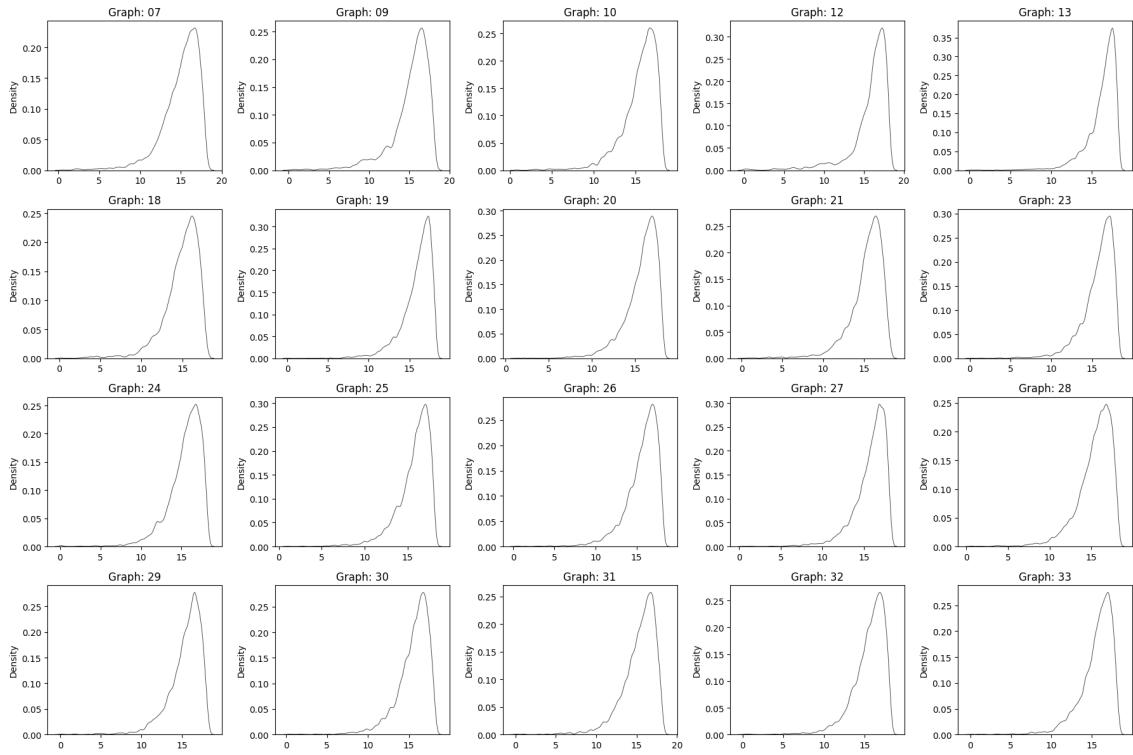
3.1.3 Κατανομές Γωνιακών Συντεταγμένων και Υπερβολικών Αποστάσεων

Για να γίνει η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων των πειραμάτων, ήταν απαραίτητη η εμφύτευση κάθε συνθετικού γραφήματος με τη μέθοδο HyperMap. Έτσι, αποκτήθηκαν οι γωνιακές και ακτινικές συντεταγμένες κάθε κόμβου. Όπως αναφέρθηκε και στον ορισμό της μεθόδου HyperMap, ο υπολογισμός των ακτινικών συντεταγμένων είναι ντετερμινιστικός μιας και εξαρτάται πλήρως από τον βαθμό κάθε κόμβου. Συνεπώς είναι πιο σημαντικό να αναζητηθούν οι γωνιακές συντεταγμένες των κόμβων. Παρουσιάζεται ακολούθως η κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων κάθε γραφήματος, όπως αυτές υπολογίστηκαν από τη μέθοδο HyperMap.



Εικόνα 3.1: Η κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων των συνθετικών γραφημάτων με τη μέθοδο HyperMap.

Ταυτόχρονα, η μέθοδος HyperMap για να προσεγγίσει την E-PSO μέθοδο, όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία, βελτιστοποιεί τις αποστάσεις μεταξύ κόμβων στον υπερβολικό χώρο. Οπότε κρίνεται αναγκαίο να συγκριθούν οι υπερβολικές αποστάσεις των εφαρμογών αυτής της εργασίας με αυτές της μεθόδου HyperMap. Στην επόμενη εικόνα θα παρουσιαστούν οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων της μεθόδου HyperMap. Κάθε κατανομή δίνει το πλήθος των ζευγαριών κόμβων για κάθε τιμή υπερβολικής απόστασης.



Εικόνα 3.2: Η κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων των συνθετικών γραφημάτων με τη μέθοδο HyperMap.

3.2 Αρχικοποίηση Εφαρμογών

3.2.1 Optimizer και πλήθος εποχών

Το αρχικό βήμα για να οριστεί το πλαίσιο στο οποίο θα γίνονται οι εφαρμογές, είναι να οριστεί το πλήθος των εποχών αλλά και ο optimizer. Ετσι, επιλέχθηκε να εμφυτευτεί ένα γράφημα με ένα συγκεκριμένο μοντέλο για διαφορετικό πλήθος εποχών, αλλά και διαφορετικών optimizers, ώστε να επιλεχθεί ο βέλτιστος συνδυασμός.

Η αξιολόγηση κάθε πειράματος γίνεται πάνω στην απόκλιση Kullback–Leibler αλλά και στην απόσταση Wasserstein μεταξύ των κατανομών των γωνιακών συντεταγμένων της μεθόδου HyperMap και αυτής που προέκυψε από το μοντέλο.

Επιλέχθηκε το πρώτο γράφημα για τη συγκεκριμένη διαδικασία και το μοντέλο GAT_16_4. Οι υπό εξέταση optimizers είναι οι Adam και Adagrad και το πλήθος των εποχών είναι 10, 20, 30, 40, 50, 60.

Τα αποτελέσματα αυτής της διαδικασίας παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα.

Πίνακας 3.2: Αποτελέσματα ανάλυσης των πειραμάτων για τους διαφορετικούς optimizer καθώς και για τις διαφορετικές τιμές του πλήθος των εποχών.

Optimizer	# Εποχών	KL Divergence	Wasserstein Distance
Adam	10	1.389	0.005
	20	1.633	0.003
	30	1.638	0.003
	40	1.757	0.002
	50	1.830	0.002
	60	1.841	0.002
Adagrad	10	1.484	0.004
	20	1.424	0.005
	30	1.481	0.005
	40	1.485	0.005
	50	1.491	0.005
	60	1.504	0.005

Σύμφωνα με την βιβλιογραφία [36, 37, 38], μεταξύ των KL Divergence και Wasserstein Distance, η δεύτερη είναι πιο αξιόπιστη καθώς συνυπολογίζει διαφορές στον φορέα κάθε κατανομής (σε αντίθεση με την KL Divergence), όπως επίσης είναι συμμετρική και υπακούει στην τριγωνική ανισότητα. Αντίθετα, η KL Divergence χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της απόκλισης μιας κατανομής από μια ground truth κατανομή. Αν θεωρηθούν δύο κατανομές P, Q τότε μπορεί να παρακαμφθεί το πρόβλημα της μη-συμμετρίας της KL Divergence, υπολογίζοντας την εξής ποσότητα:

$$\text{Συμμετρική Απόκλιση KL} = \frac{KL(P||Q) + KL(Q||P)}{2} \quad (3.4)$$

όπου $KL(P||Q) = \sum_{x \in X} P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)}$.

Αντίστοιχα, η απόσταση Wasserstein ορίζεται ως

$$W_2(P||Q) = \inf_{\pi} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|P(i) - Q(\pi(i))\|^{1/2} \right) \quad (3.5)$$

δηλαδή η infimum ποσότητα πάνω σε όλες τις μεταθέσεις π .

Συνεπώς, λαμβάνοντας υπ' όψην τα παραπάνω, αλλά και την αύξηση της υπολογιστικής πολυπλοκότητας όσο αυξάνονται οι εποχές για την εκπαίδευση, προκύπτει ως βέλτιστος συνδυασμός ο Adam και οι 40 εποχές.

3.2.2 Βήμα Μάθησης

Στη συνέχεια πρέπει να δοκιμαστούν διαφορετικές τιμές για το βήμα μάθησης, ούτως ώστε να επιλεχθεί το βέλτιστο. Για τον συνδυασμό εποχών και optimizer που επιλέχθηκε προηγουμένως, επαναλήφθηκε το πείραμα 4 φορές με διαφορετική τιμή learning rate. Οι υπο εξέταση τιμές είναι 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001. Θα χρησιμοποιηθεί πάλι η Kullback-Leibler απόκλιση και η Wasserstein απόσταση για να ποσοτικοποιηθούν τα αποτελέσματα. Αυτά φαίνονται στον ακόλουθο πίνακα.

Πίνακας 3.3: Αποτελέσματα των πειραμάτων για την αναζήτηση του βελτίστου learning rate.

Learning Rate	KL Divergence	Wasserstein Distance
0.1	1.819	0.004
0.01	1.756	0.003
0.001	1.938	0.003
0.0001	1.934	0.003

To learning rate επηρεάζει τον ρυθμό με τον οποίο αλλάζουν τα βάρη του Νευρωνικού Δικτύου που εκπαιδεύεται. Επομένως, όσο μειώνεται αυτή η τιμή, τόσο μικρότερες μεταβολές θα γίνονται στα βάρη του μοντέλου. Αυτό φαίνεται και στον πίνακα των τιμών 3.3. Η Wasserstein απόσταση μειώνεται αλλά αυτές οι αλλαγές είναι ανεπαίσθητες. Αντίθετα, η απόκλιση KL παρουσιάζει αύξηση κατά την μείωση του learning rate, δείχνοντας πως το μοντέλο δεν προλαβαίνει να προσαρμοστεί αρκετά γρήγορα στα δεδομένα. Συνεπώς, θα επιλεχθεί η τιμή **0.01**.

3.2.3 Διάκριση Μοντέλων

Για τις επόμενες προσπάθειες θα χρησιμοποιηθούν 9 μοντέλα μηχανικής μάθησης. Ειδικότερα, πρόκειται για Graph Neural Networks, δηλαδή μοντέλα προσανατολισμένα για προβλήματα με γραφήματα. Η διαφορά τους είναι ότι η αρχιτεκτονική κάθε επιπέδου είναι διαμορφωμένη έτσι ώστε να συλλέγει πληροφορίες για τους κόμβους του γραφήματος. Κάποια μοντέλα εστιάζουν στους γείτονες κάθε κόμβου, ενώ άλλα εστιάζουν στις ακμές του κάθε κόμβου και το πώς μπορούν να αντλήσουν πληροφορία από αυτές. Στην προκειμένη περίπτωση επιλέχθηκαν τρία είδη: Graph Convolutional Networks, SAGE, GAT. Σε κάθε είδος χρησιμοποιήθηκε διαφορετικό πλήθος νευρώνων και κρυφών επιπέδων. Τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν είναι τα εξής:

Πίνακας 3.4: Η αρχιτεκτονική κάθε μοντέλου όσον αφορά το πλήθος κρυφών επιπέδων και το πλήθος νευρώνων σε καθένα από αυτά.

Μοντέλο	Πλήθος Νευρώνων			
	Κρυφό Επίπεδο 1	Κρυφό Επίπεδο 2	Κρυφό Επίπεδο 3	Στρώμα Εξόδου
CONV_16_4	16	4	-	
CONV_16_8	16	8	-	
CONV_16_4_4	16	4	4	
CONV_16_8_4	16	8	4	
CONV_32_16_8	32	16	8	
SAGE_16_4	16	4	-	1
SAGE_16_8	16	8	-	
GAT_16_4	16	4	-	
GAT_16_8	16	8	-	

Στόχος του πειράματος σε αυτό το στάδιο, είναι η πρόβλεψη των γωνιακών συντεταγμένων κάθε κόμβου μέσω εκπαίδευσης και η προσέγγιση της μεθόδου HyperMap.

Στον ορισμό των μοντέλων Μηχανικής Μάθησης ορίστηκαν 9 μοντέλα, τα οποία έχουν διαφορετικές αρχιτεκτονικές. Αυτές οι διαφορές εμφανίζονται στο διαφορετικό πλήθος επιπέδων, διαφορετικό πλήθος νευρώνων ανά επίπεδο, μέχρι και στο διαφορετικό είδος συνελικτικών

στρωμάτων. Αυτό το κομμάτι της ανάλυσης, αποσκοπεί στο να διαπιστωθεί εάν υπάρχει σημαντική διαφορά μεταξύ των μοντέλων στην προβλεπτική τους ικανότητα, και στην περίπτωση που υπάρχει διαφορά, να οριστεί ποιο είναι το βέλτιστο μοντέλο.

Διατρέχθηκε λοιπόν μια επαναληπτική διαδικασία για κάθε μια από τις αρχιτεκτονικές, όπου κάθε μοντέλο θα εκπαιδευτεί και θα παράξει γωνιακές συντεταγμένες για τρία γραφήματα. Ειδικότερα, γι' αυτό το πείραμα θα χρησιμοποιηθούν τα γραφήματα 9, 10, 12. Με αυτόν τον τρόπο θα διεξαχθούν συμπεράσματα για να αποφανθούμε αν κάποιο μοντέλο είναι συστηματικά καλύτερο από τα υπόλοιπα. Όπως και πριν, η ποιότητα κάθε εμφύτευσης θα κριθεί πάνω στην απόκλιση Kullback-Leibler καθώς και στην απόσταση Wasserstein.

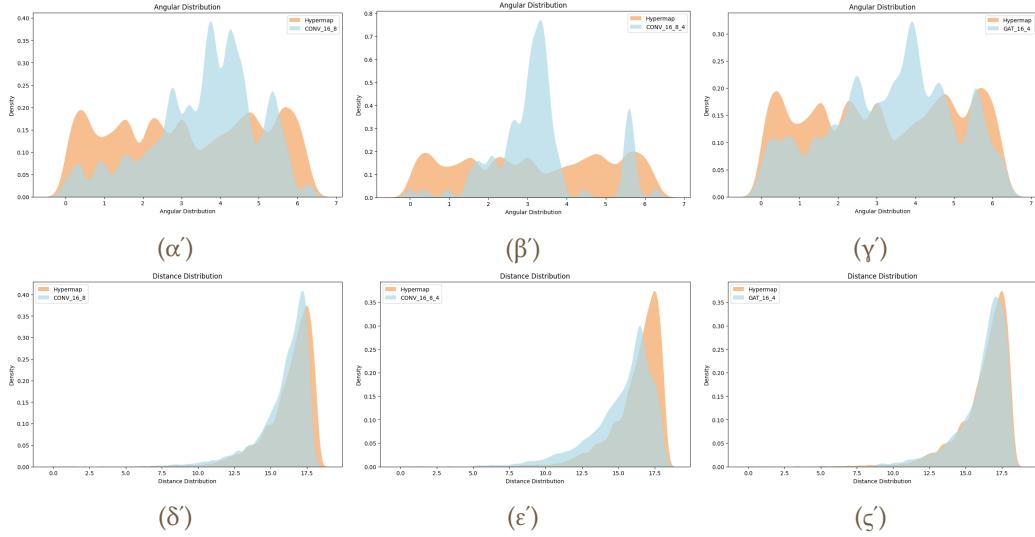
Τα αποτελέσματα φαίνονται στον επόμενο πίνακα.

Πίνακας 3.5: Επιδόσεις των μοντέλων πάνω στα συνθετικά γραφήματα 9, 10, 12.

Αρχιτεκτονική	Γράφημα	KL Divergence	Wasserstein Distance	M.O. KL	M.O. W
CONV_16_4	9	2.110	0.005		
	10	1.603	0.003	1.758	0.0046
	12	1.562	0.006		
CONV_16_8	9	1.988	0.005		
	10	1.512	0.004	1.708	0.0046
	12	1.625	0.005		
CONV_16_4_4	9	1.978	0.005		
	10	1.914	0.005	1.875	0.0046
	12	1.733	0.004		
CONV_16_8_4	9	1.857	0.005		
	10	1.534	0.003	1.736	0.0055
	12	1.818	0.004		
CONV_32_16_8	9	1.777	0.004		
	10	1.786	0.004	1.766	0.004
	12	1.737	0.004		
SAGE_16_4	9	2.053	0.003		
	10	2.042	0.003	1.918	0.004
	12	1.662	0.006		
SAGE_16_8	9	1.646	0.004		
	10	2.027	0.002	1.839	0.003
	12	1.845	0.003		
GAT_16_4	9	2.057	0.007		
	10	1.470	0.004	1.725	0.0053
	12	1.650	0.005		
GAT_16_8	9	2.682	0.004		
	10	2.168	0.007	2.152	0.0053
	12	1.607	0.005		

Φαίνεται πως όλες οι αρχιτεκτονικές παρουσιάζουν παρόμοια αποτελέσματα, έχοντας εξαιρετικά μικρές τιμές στην Wasserstein απόσταση και καλές τιμές για την απόκλιση Kullback-Leibler. Μπορούν να ξεχωρίσουν τρία μοντέλα ως καλύτερα, τα CONV_16_8, CONV_16_8_4 και GAT_16_4, τα οποία χαρακτηρίζονται από τις μικρότερες τιμές στην απόκλιση KL. Για να διακριθεί καλύτερα εαν κάποιο μοντέλο υπερέχει των άλλων, θα παρουσιαστεί η κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων καθώς και η κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων των μοντέλων

χρησιμοποιώντας ένα καινούριο συνθετικό γράφημα, το υπ' αριθμόν 13.



Εικόνα 3.3: Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων και των υπερβολικών αποστάσεων που παράχθηκαν από τα μοντέλα CONV_16_8, CONV_16_8_4 και GAT_16_4.

Τα σχήματα (α') , (β') , (γ') αφορούν την κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων των μοντέλων, CONV_16_8, CONV_16_8_4 και GAT_16_4. Αντίστοιχα, τα σχήματα (δ') , (ϵ') , (ζ') παρουσιάζουν την κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων μεταξύ των κόμβων. Σε κάθε σχήμα, με πορτοκαλί χρώμα η κατανομή που προκύπτει από τη μέθοδο HyperMap, ενώ με μπλε χρώμα η κατανομή που προκύπτει από το μοντέλο εκπαίδευσης. Καθιστάται εμφανές πως το μοντέλο GAT_16_4 ($\beta\pi(\gamma')$ και (ζ')) προσεγγίζει την κατανομή των γωνιακών συντεταγμένων καλύτερα από τα άλλα δύο, ενώ παράλληλα προσεγγίζει σχεδόν τέλεια την κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων.

3.2.4 Συνάρτηση Κόστους

Η Συνάρτηση Κόστους (Loss Function) είναι, όπως αναλήθηκε και στο θεωρητικό πλαίσιο της Μηχανικής Μάθησης, το κομμάτι του μοντέλου που κατευθύνει το στάδιο της εκπαίδευσης. Οι αλλαγές πάνω στα βάρη του μοντέλου είναι προσανατολισμένες από αυτή τη συνάρτηση. Συνεπώς, η επιλογή της κατάλληλης Συνάρτησης Κόστους είναι υψίστης σημασίας για την απόδοση οποιουδήποτε μοντέλου.

Η Συνάρτηση Κόστους που επιλέχθηκε είναι εμπνευσμένη από την μέθοδο HyperMap ώστε να προσεγγιστεί η διαδικασία εμφύτευσής της. Αναλυτικότερα, η μέθοδος HyperMap στηρίζει πλήρως την ποιότητα της εμφύτευσης που παράγει, στην κατάλληλη επιλογή γωνιακών συντεταγμένων. Αυτή η επιλογή γίνεται μέσω της μεγιστοποίησης της συνάρτησης 2.51. Κατά την κατασκευή της Συνάρτησης Κόστους για τα μοντέλα της Μηχανικής Μάθησης, έγινε χρήση της μεθόδου Αρνητικής Λογαριθμικής Πιθανοφάνειας μετατρέποντας την L_2^i στην

$$-\log(\mathcal{L}_2^i) = - \sum_{1 \leq j < i} [a_{ij} \log p(x_{ij}) + (1 - a_{ij}) \log (1 - p(x_{ij}))] \quad (3.6)$$

ώστε να μετατραπεί σε φθίνουσα συνάρτηση. Κατ' αυτόν τον τρόπο, η διαδικασία παραγωγής

γωνιακών συντεταγμένων από τα μοντέλα ακολουθεί τη διαδικασία της μεθόδου HyperMap.

Κεφάλαιο 4

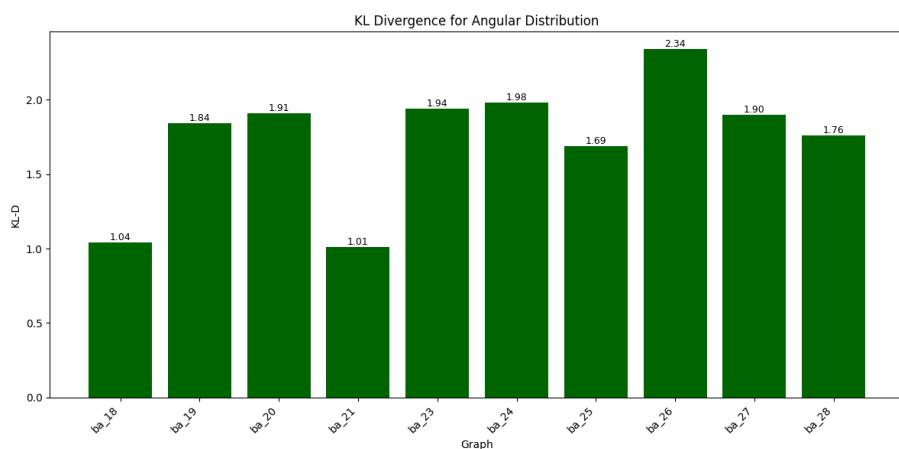
Αναλυτικά Αποτελέσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα αναλυθούν τα πειράματα που διεξήχθησαν στο πλαίσιο αυτής της εργασίας. Στην προηγούμενη ενότητα, έγιναν διάφορα πειράματα για να επιλεχθούν οι βέλτιστες συνθήκες για τα επόμενα πειράματα. Συγκεκριμένα, έγινε η επιλογή του Adam optimizer με 40 εποχές, ως learning rate ορίστηκε η τιμή 0.01 και η GAT_16_4 για αρχιτεκτονική. Σ' αυτήν την ενότητα θα αναζητηθούν οι συντεταγμένες των υπόλοιπων γραφημάτων στον Υπερβολικό Χώρο και θα αξιολογηθούν μέσω της απόκλισης Kullback–Leibler αλλά και μέσω των διαγραμμάτων που αφορούν τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων και των υπερβολικών αποστάσεων.

4.1 Πειράματα γραφημάτων μεγέθους 100

Εκπαιδεύτηκε το μοντέλο GAT_16_4 πάνω στα γραφήματα 18, 19, 20, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 28 ώστε να ληφθούν οι συντεταγμένες των κόμβων στον Υπερβολικό Χώρο. Στο επόμενο διαγραμμα παρουσιάζονται οι αποκλίσεις Kullback–Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων.

4.1.1 Ανάλυση των γωνιακών συντεταγμένων

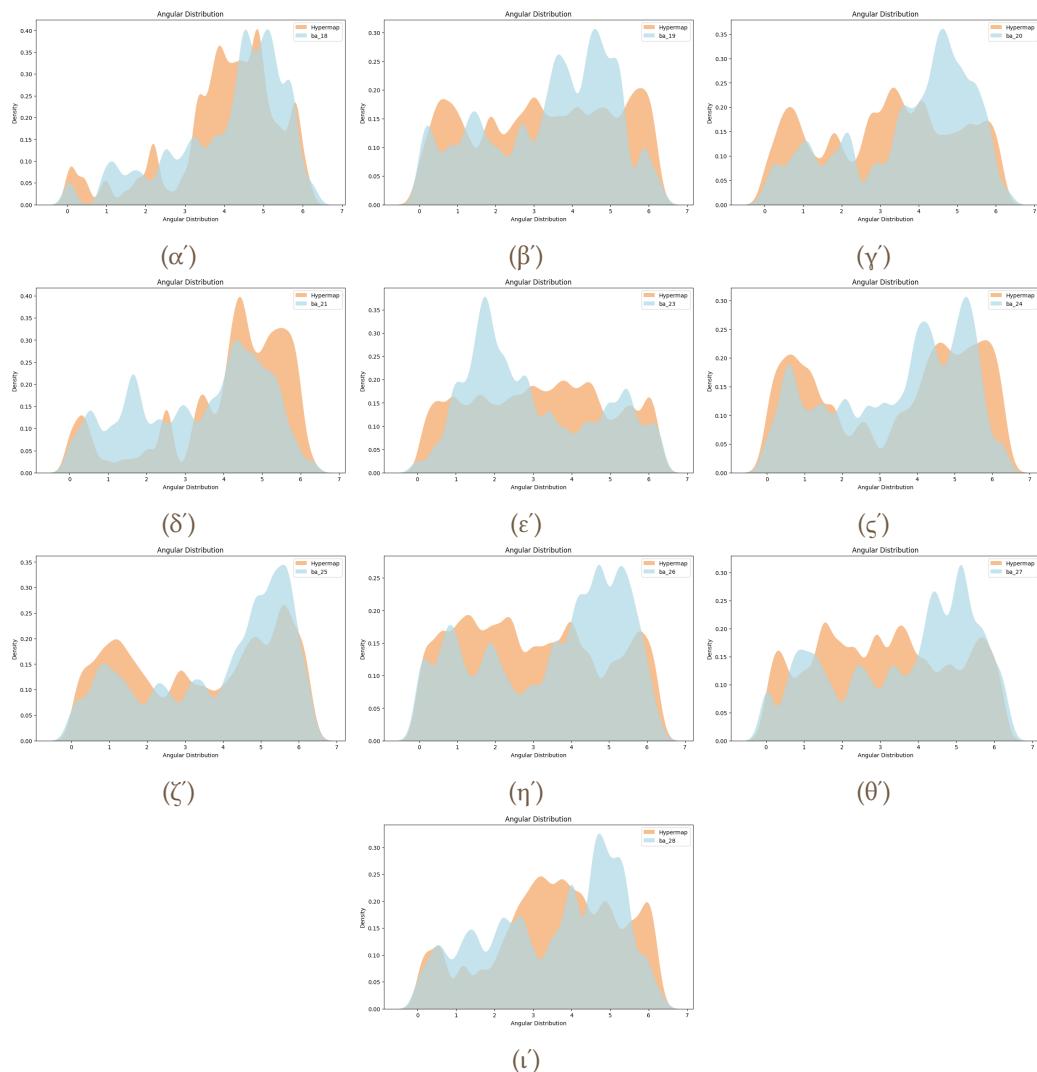


Εικόνα 4.1: Απόκλιση Kullback–Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων.

Η ανάλυση θα ξεκινήσει με τις αποκλίσεις Kullback–Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων. Όπως αναφέρθηκε και στο Θεωρητικό Υπόβαθρο, η μέθοδος HyperMap δεν

λειτουργεί πάνω στην βελτιστοποίηση των γωνιακών συντεταγμένων, αλλά στην ελαχιστοποίηση των υπερβολικών αποστάσεων. Επιπλέον, κατά το πρώτο βήμα της μεθόδου, ο κόμβος εν ονόματι 1 λαμβάνει τυχαία γωνιακή συντεταγμένη από Ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[0, 2\pi)$. Συνεπώς, η επανάληψη της εμφύτευσης ενός γραφήματος παράγει διαφορετικές γωνιακές συντεταγμένες για κάθε κόμβο. Αυτό το στοιχείο που παραμένει σταθερό σε όλες τις επαναλήψεις είναι τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της εμφύτευσης. Επεξηγηματικά, αυτά είναι οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων και οι Κοινότητες που δημιουργούνται. Μέσω της απόκλισης KL των κατανομών των γωνιακών συντεταγμένων είναι εμφανές πως οι μεταξύ τους κατανομές δεν απέχουν πολύ αλλά θα πρέπει να γίνει περαιτέρω ανάλυση.

Στην εικόνα 4.2, παρουσιάζονται οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων σε σύγκριση με αυτές της μεθόδου HyperMap.

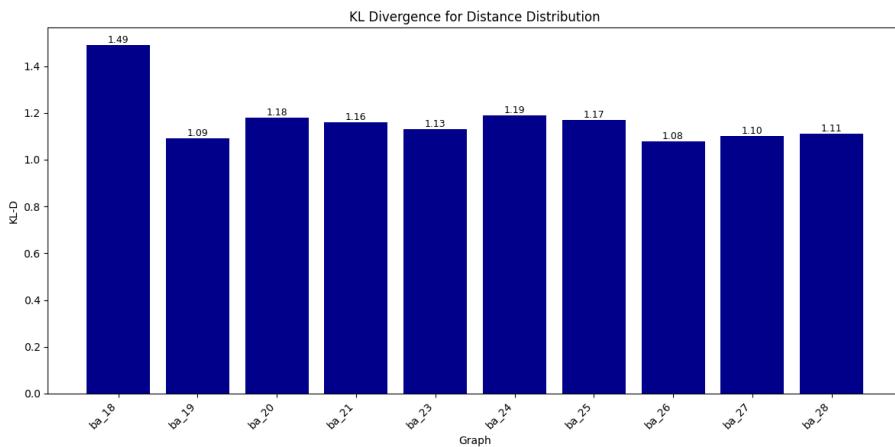


Εικόνα 4.2: Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγέθους 100.

Αναλύοντας τα παραπάνω διαγράμματα, προκύπτει το συμπέρασμα πως το μοντέλο καταφέρνει να αναπαράξει τα ίδια σχεδόν ποιοτικά χαρακτηριστικά με τη μέθοδο HyperMap. Τα ποιοτικά χαρακτηριστικά που πρέπει να διατηρηθούν είναι τόσο το πλήθος των κορυφών, όσο

και οι αποστάσεις μεταξύ των κορυφών της ίδιας κατανομής. Η σχετική θέση μεταξύ των κορυφών διαφορετικών κατανομών (δηλαδή η παραγόμενη από το μοντέλο και αυτή της HyperMap) δεν είναι σημαντική λόγω της παρατήρησης που επισημάνθηκε προηγουμένως. Το πλήθος των κορυφών αποτυπώνει το πλήθος των Κοινοτήτων στο γράφημα. Παρατηρώντας τα διαγράμματα λοιπόν, γίνεται αντιληπτή μια σύνεπεια μεταξύ του μοντέλου και της HyperMap, ενδεικτικό πως και οι δύο μέθοδοι αναγνωρίζουν το ίδιο πλήθος Κοινοτήτων. Επίσης, οι αποστάσεις μεταξύ των κορυφών, μεταφράζονται σε υπερβολικές αποστάσεις μεταξύ των Κοινοτήτων στον Υπερβολικό Χώρο. Έτσι, όσο πιο μακριά βρίσκονται δύο κορυφές, τόσο πιο βέβαιη είναι η μέθοδος για την διαφοροποίηση μεταξύ των Κοινοτήτων, καθώς αναγνωρίζει πολύ μικρότερη ομοιότητα μεταξύ των επιμέρους κόμβων. Εδώ, φαίνεται να υπάρχει μια μικρή διαφοροποίηση μεταξύ των μεθόδων σε κάποια γραφήματα. Στα γραφήματα, όπου η μέθοδος HyperMap αναγνωρίζει εμφανώς διακριτές Κοινότητες και διαφοροποιεί πολύ τους κόμβους εντός Κοινότητας με αυτούς εκτός της Κοινότητας, το μοντέλο φαίνεται να συμφωνεί και να τις αναπαράγει (βλπ (α'), (δ'), (ζ'), (ζ'')). Αντίθετα, στα γραφήματα όπου η HyperMap δεν αναγνωρίζει εμφανώς διακριτές Κοινότητες, το μοντέλο διαφοροποιείται και σχηματίζει δικές του Κοινότητες. Αυτό φαίνεται στα διαγράμματα όπου η HyperMap κατανέμει τους κόμβους μέσω μιας κατανομής που προσεγγίζει αυτήν της Ομοιόμορφης και άρα δεν εμφανίζει υψηλές κορυφές, ενώ το μοντέλο δημιουργεί δικές του κορυφές (βλπ (β'), (ε'), (η'), (θ')).

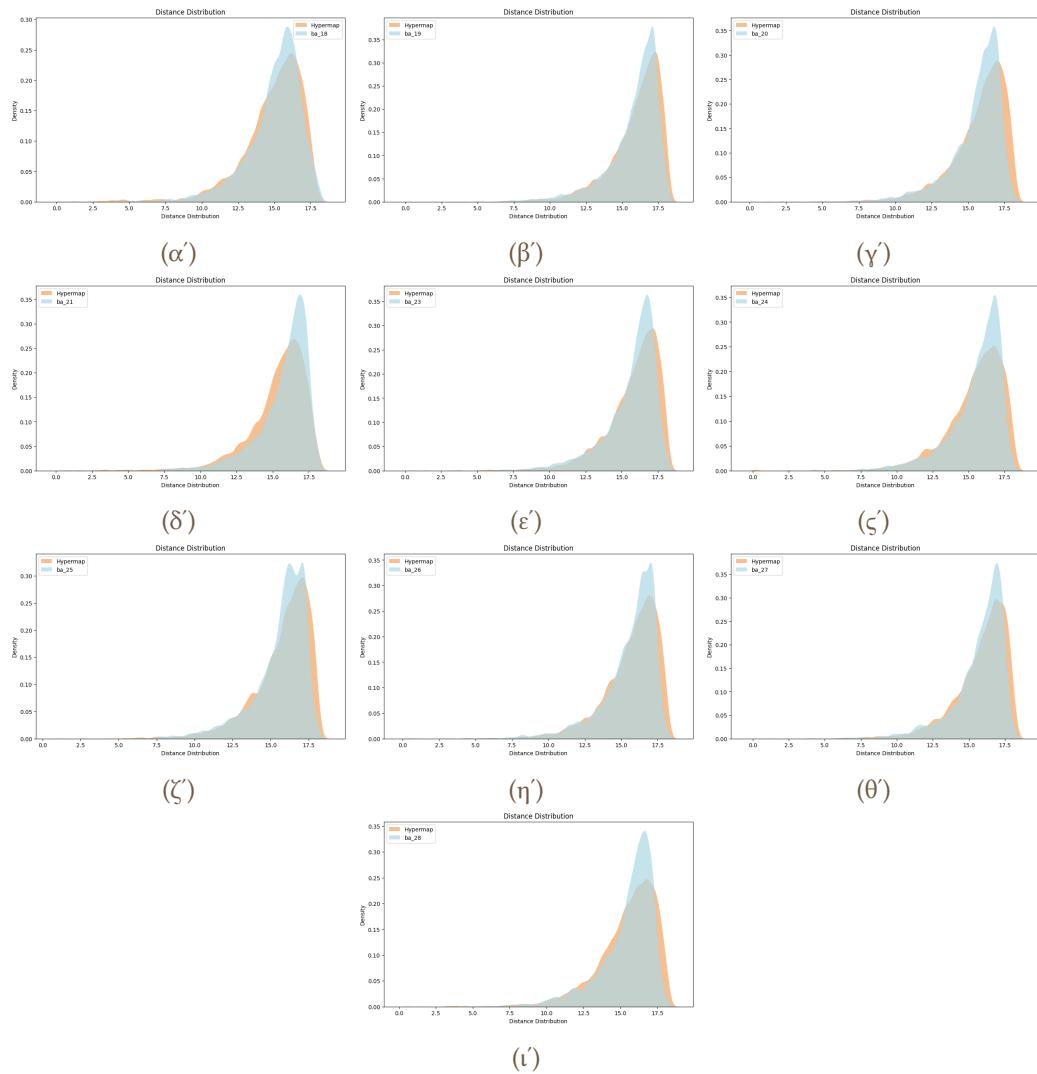
4.1.2 Ανάλυση των υπερβολικών αποστάσεων



Εικόνα 4.3: Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων.

Περνώντας στην κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων, η ανάλυση θα ξεκινήσει και πάλι από τις αποκλίσεις της Kullback-Leibler. Υπενθυμίζουμε πως η ονομασία των γραφημάτων αναφέρεται στην παράμετρο δημιουργίας ακμών κατά τη μέθοδο Barabasi-Albert. Κατά την αύξηση αυτού του δείκτη δεν προκύπτει κάποια τάση στην απόδοση του μοντέλου. Πιο συγκεκριμένα, από το γράφημα 19 που έχει τον δεύτερο μικρότερο δείκτη, και άρα είναι το δεύτερο πιο αραιό γράφημα από το σύνολο, προς τα γράφημα 28, που είναι το πιο πυκνό, οι αποκλίσεις κυμαίνονται στις ίδιες περίπου τιμές. Εξαίρεση αποτελεί το γράφημα 18, το οποίο είναι το πιο αραιό, όπου εκεί όντως εμφανίζεται μια μεγαλύτερη απόκλιση. Συνεπώς, μπορεί να γίνει ο ισχυρισμός πως η απόδοση του μοντέλου δεν εξαρτάται από την πυκνότητα του γραφήματος.

Στα επόμενα διαγράμματα, παρουσιάζονται οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων από την εμφύτευση που παρήγαγε το μοντέλο σε αντιδιαστολή με αυτές της μεθόδου HyperMap για κάθε γράφημα.



Εικόνα 4.4: Οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγέθους 100.

Σε καθένα από τα παραπάνω διαγράμματα, παρουσιάζεται η κατανομή των υπερβολικών αποστάσεων που παρήχθησαν από το μοντέλο (μπλε κατανομή), σε αντιδιαστολή με αυτή της μεθόδου HyperMap (πορτοκαλί κατανομή). Αρχικά, παρατηρείται μια μεγάλη συσχέτιση μεταξύ των κατανομών, κάτι που είναι ενθαρρυντικό πως οι εμφυτεύσεις που παράγονται από το μοντέλο είναι παραπλήσιες της μεθόδου HyperMap. Αυτό το γεγονός που ζεχωρίζει σε κάθε διάγραμμα είναι ότι οι κατανομές που παρήχθησαν από το μοντέλο παρουσιάζουν υψηλότερες κορυφές στο δεξί μέρος. Αυτό σημαίνει δηλαδή ότι το μοντέλο παράγει εμφυτεύσεις κατά τις οποίες τα περισσότερα ζευγάρια χαρακτηρίζονται από τις μεγαλύτερες υπερβολικές αποστάσεις. Αυτή η παρατήρηση είναι ωστόσο αποθαρρυντική για την απόδοση του μοντέλου, μιας και ο στόχος είναι η ελαχιστοποίηση αυτών των αποστάσεων.

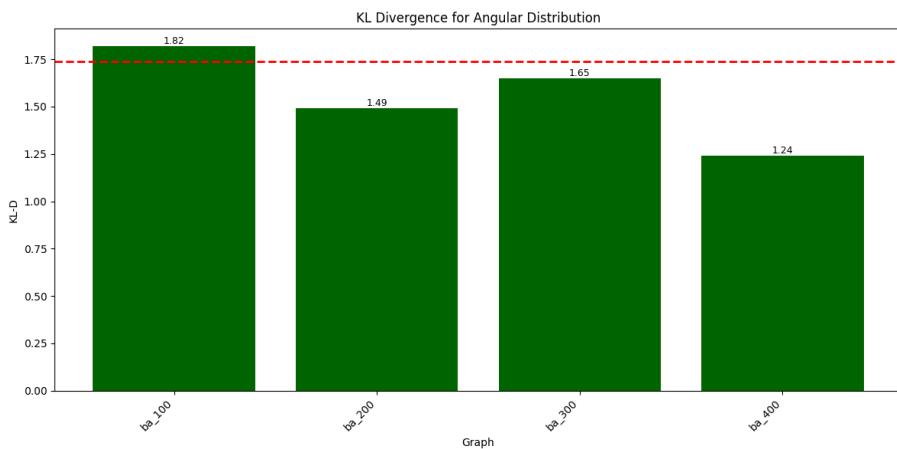
Η ελαχιστοποίηση των υπερβολικών αποστάσεων δεν αποτελεί απλά μια προσέγγιση που

τυγχάνει να χαρακτηρίζει τη μέθοδο HyperMap. Είναι βασικό χαρακτηριστικό των εμφυτεύσεων σε Υπερβολικούς Χώρους για την ανάδειξη της ιδιότητας της Ομοιότητας. Συνεπώς, κατά την παραγωγή μεγαλύτερων υπερβολικών αποστάσεων, το μοντέλο εκφράζει και μια αδυναμία στη μέθοδο να αναγνωρίσει ομοιότητες μεταξύ κόμβων συγκριτικά με την μέθοδο HyperMap.

4.2 Πειράματα γραφημάτων μεγαλυτέρου μεγέθους

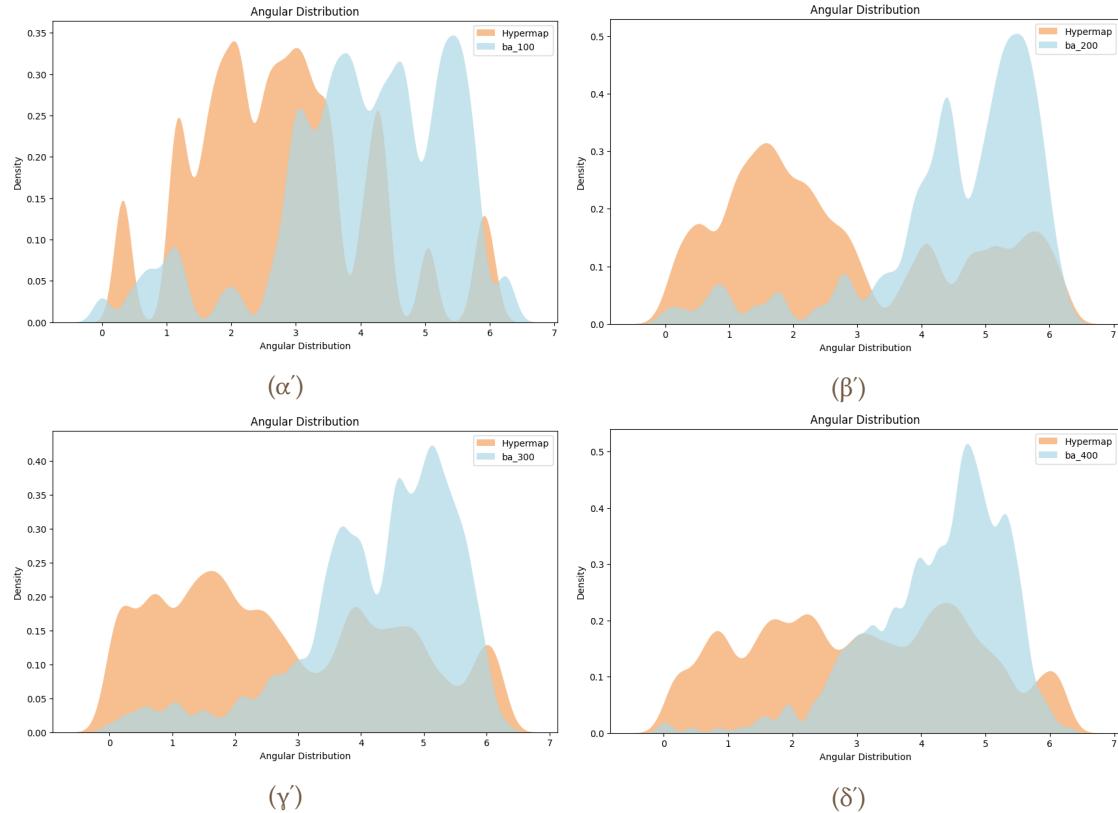
Όλα τα προηγούμενα πειράματα έγιναν πάνω σε δεδομένα γραφημάτων με 100 κόμβους. Θέλοντας να διερευνηθεί η απόδοση του μοντέλου GAT_16_4 σε συνάρτηση με το μέγεθος των γραφημάτων, δημιουργήθηκαν τέσσερα καινούργια γραφήματα με πλήθος κόμβων 100, 200, 300, 400. Θα επαναληφθεί η εκπαίδευση του μοντέλου πάνω σε αυτά και θα ελεγχθεί η ύπαρξη ή όχι μιας τάσης στην απόδοση.

4.2.1 Ανάλυση των γωνιακών συντεταγμένων



Εικόνα 4.5: Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων. Με κόκκινη διακεκομένη γραμμή παρουσιάζεται ο μέσος όρος απόκλισης για τα γραφήματα μεγέθους 100.

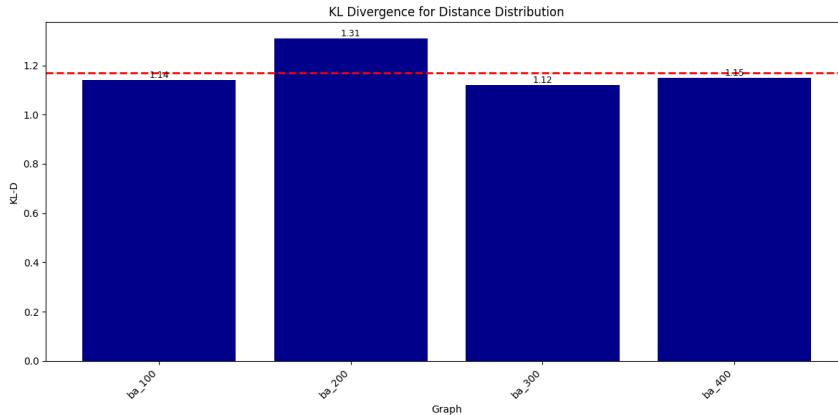
Στο παραπάνω διάγραμμα παρουσιάζονται οι αποκλίσεις Kullback-Leibler για τις κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων από τις εμφυτεύσεις που παρήγαγε το μοντέλο για τα γραφήματα μεγαλύτερου μεγέθους. Αρχικά, δεν μπορεί να ανιχνευτεί κάποια τάση στην απόδοση του μοντέλου που να βασίζεται στο μέγεθος των γραφημάτων. Οι αποκλίσεις δείχνουν μια πτωτική τάση αλλά αυτή δεν φαίνεται να είναι σταθερή. Αυτό γίνεται αντιληπτό, όταν συγκριθούν οι αποκλίσεις των γραφημάτων μεγέθους 200, 300, 400 με αυτή του γραφήματος μεγέθους 100 αλλά και με τον μέσο όρον των αποκλίσεων των προηγούμενων κατανομών 4.1. Το γεγονός ότι η απόκλιση των κατανομών είναι σταθερά χαμηλότερη, αναδεικνύει μια μεγαλύτερη ταύτιση μεταξύ των κατανομών των γωνιακών συντεταγμένων μεταξύ της HyperMap και του μοντέλου. Συνεπώς, αυτή η ταύτιση μεταφέρεται και στον διαχωρισμό των Κοινοτήτων. Βέβαια, γι' αυτήν την ανάλυση θα πρέπει να παρουσιαστούν οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων για κάθε εμφύτευση.



Εικόνα 4.6: Οι κατανομές των γωνιακών συντεταγμένων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγαλύτερου μεγέθους.

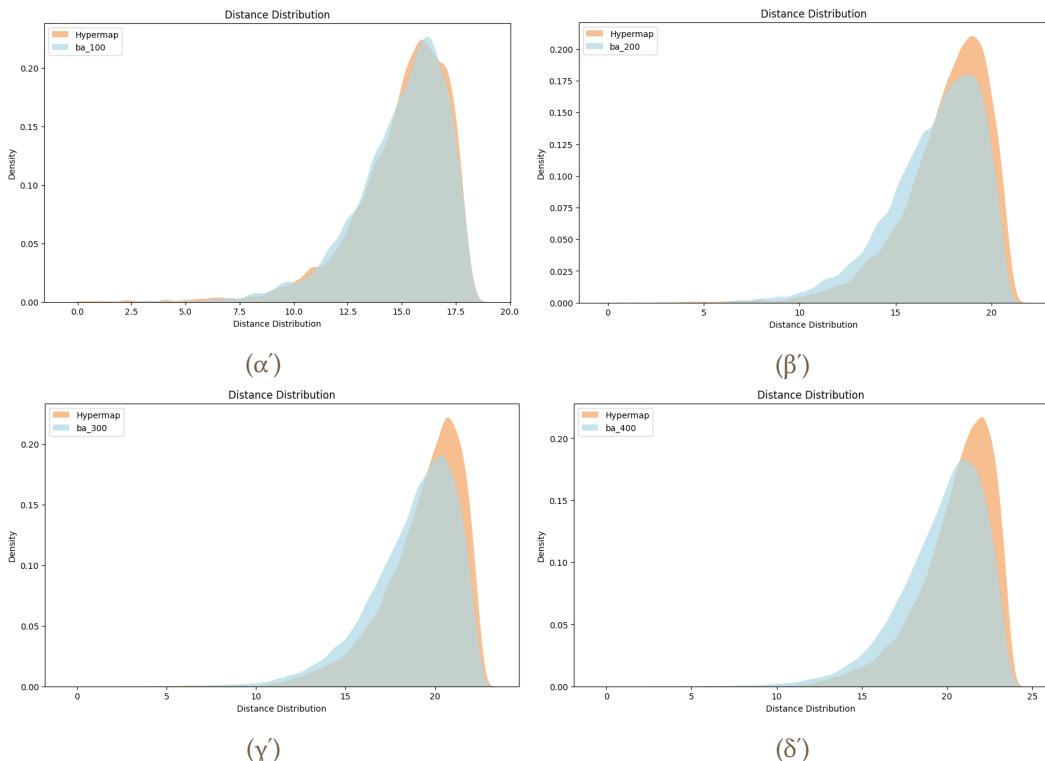
Η παρατήρηση που επικράτησε στην ανάλυση των κατανομών των γωνιακών συντεταγμένων για τα γραφήματα μεγέθους 100 ισχύει και στα γραφήματα μεγαλύτερου μεγέθους. Όταν η μέθοδος HyperMap διακρίνει Κοινότητες, δηλαδή υψηλές κορυφές στο διάγραμμα της κατανομής των γωνιακών συντεταγμένων, τότε και το μοντέλο συμβαδίζει. Αντίθετα, όταν η μέθοδος HyperMap δεν καταλήγει σε διακριτές Κοινότητες, το μοντέλο διαχωρίζεται και αναδεικνύει κάποιες. Για τις παρούσες εμφυτεύσεις, το μοντέλο και η μέθοδος συμφωνούν στις πρώτες δύο ($\beta\lambda\pi$ (α') και (β')) ενώ διαχωρίζονται στις δύο άλλες ($\beta\lambda\pi$ (γ') και (δ')). Ξεκινώντας από την εμφύτευση του γραφήματος μεγέθους 100, φαίνεται να υπάρχει πλήρη ταύτιση στο πλήθος των Κοινοτήτων (7 κορυφές και για τις δύο εμφυτεύσεις). Επιπλέον, και οι δύο μέθοδοι συμφωνούν και στις σχετικές αποστάσεις μεταξύ των Κοινοτήτων. Ειδικότερα, παρουσιάζονται τέσσερις κορυφές και στις δύο μεθόδους οι οποίες τοποθετούνται σχετικά κοντά μεταξύ τους και άλλες δύο κορυφές πιο απομακρυσμένες από τις άλλες. Προχωρώντας στο γράφημα 200, η μέθοδος HyperMap διακρίνει δύο Κοινότητες και τις τοποθετεί μακριά τη μία από την άλλη. Ενώ, το μοντέλο διακρίνει πάλι δύο Κοινότητες καταλλήγει να τις τοποθετεί σε πολύ μικρότερη απόσταση μεταξύ τους. Η ίδια ανάλυση είναι κατάλληλη και την εμφύτευση του γραφήματος μεγέθους 300. Τέλος, για την εμφύτευση του γραφήματος μεγέθους 400, το μοντέλο διακρίνει μια Κοινότητα σε αντίθεση με τη μέθοδο HyperMap που παράγει μια κατανομή η οποία προσεγγίζει την Ομοιόμορφη.

4.2.2 Ανάλυση των υπερβολικών αποστάσεων



Εικόνα 4.7: Απόκλιση Kullback-Leibler για τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων. Η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αναφέρεται στο μέσο όρο των αποκλίσεων των κατανομών των υπερβολικών συντεταγμένων για τις εμφυτεύσεις των γραφημάτων μεγέθους 100.

Η ανάλυση που αφορά τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων θα ξεκινήσει εκ νέου από τις αποκλίσεις Kullback-Leibler. Η πρώτη παρατήρηση είναι ότι όλες οι αποκλίσεις κυμαίνονται κοντά στον μέσο όρο των προηγούμενων εμφυτεύσεων. Η μοναδική διαφοροποίηση που παρατηρείται, είναι στη εμφύτευση του γραφήματος 200, όπου εμφανίζεται μια μεγαλύτερη απόκλιση. Για την καταλληλότερη ανάλυση, όλων των εμφυτεύσεων, θα πρέπει να παρουσιαστούν οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων.



Εικόνα 4.8: Οι κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων για τα πειράματα των γραφημάτων μεγαλύτερου μεγέθους.

Τα διαγράμματα που αφορούν τις κατανομές των υπερβολικών αποστάσεων παρουσιάζουν μια τάση στην απόδοση του μοντέλου που σχετίζεται με το μέγεθος του γραφήματος. Ξεκινώντας από την εμφύτευση του γραφήματος μεγέθους 100, αυτή χαρακτηρίζεται από μια ταύτιση μεταξύ των δύο κατανομών των υπερβολικών αποστάσεων. Πιθανότατα το μοντέλο παράγει ελαφρώς περισσότερα ζευγάρια με μεγάλες υπερβολικές αποστάσεις, αλλά αυτή η διαφορά είναι σχεδόν απαρατήρητη. Όσο αυξάνεται το πλήθος των κόμβων του γραφήματος που καλείται το μοντέλο να εμφυτεύσει, τόσο μειώνεται η κορυφή της κατανομής. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό καθώς έτσι μειώνεται το πλήθος των ζευγαριών που χαρακτηρίζονται από μεγάλες υπερβολικές αποστάσεις. Επιπλέον, η κορυφές των κατανομών που προκύπτουν από το μοντέλο (μπλε χρώμα) είναι ελαφρώς μετατοπισμένες προς τα αριστερά. Το γεγονός αυτό υποδηλώνει και μια μείωση στη μέγιστη παρατηρούμενη υπερβολική απόσταση μεταξύ των ζευγαριών. Συνοψίζοντας την παραπάνω ανάλυση, η μείωση του πλήθους των ζευγαριών των κόμβων που χαρακτηρίζονται από μεγάλες υπερβολικές αποστάσεις είναι ανάλογη του μεγέθους του γραφήματος, ενώ η οριζόντια μετατόπιση της κορυφής, ενώ είναι υπαρκτή, δεν είναι ανάλογη του μεγέθους του γραφήματος.

Μέρος **III**

Επίλογος

Κεφάλαιο 5

Επίλογος

5.1 Ανασκόπηση

Στο πλαίσιο αυτής της εργασίας αναλύθηκε το θεωρητικό πλαίσιο για την εμφύτευση γραφημάτων σε Υπερβολικούς Χώρους. Συγκεκριμένα, παρουσιάστηκαν τα Μαθηματικά εργαλεία για τον διαχωρισμό του κλάδου της Γεωμετρίας στα επιμέρους στοιχεία της. Στη συνέχεια έγινε η συσχέτιση μεταξύ της Υπερβολικής Γεωμετρίας και της Γεωμετρίας των Γραφημάτων αναδυκνείοντας τον λόγο για τον οποίο η πρώτη χαρακτηρίζει πλήρως τη δεύτερη. Επιπλέον, αναλύθηκε η μέθοδος PSO μαζί με τις παραλλαγές της, που αποτελούν τη βάση για τη μέθοδο HyperMap, η οποία θα είναι και ο βασικός πυλώνας των πειραμάτων που διεξύχθησαν σε αυτή την εργασία. Τέλος, έγινε μια ανασκόπηση της Επιστήμης της Μηχανικής Μάθησης και ειδικότερα των Νευρωνικών Δικτύων.

Το πρακτικό κομμάτι αποτελείται από τρεις ενότητες. Αρχικά, συλλέχθηκαν δεδομένα γραφημάτων παραγόμενα με τη μέθοδο Barabasi-Albert. Μετά ακολούθησε η οργάνωση των πειραμάτων της Μηχανικής Μάθησης όπου και οργανώθηκε το πλαίσιο τους. Ειδικότερα, επιλέχθηκε το πλήθος των εποχών, το βήμα μάθησης, η αρχιτεκτονική και ο optimizer. Σύμφωνα με αυτές τις επιλογές, διεξήχθησαν τα βασικά πειράματα της εργασίας. Πρώτα, εξετάστηκε η απόδοση του μοντέλου σε εμφυτεύσεις για γραφήματα μεγέθους 100 κόμβων και στη συνέχεια αυτές συγκρίθηκαν με τις αντίστοιχες της μεθόδου HyperMap. Τα πειράματα αυτά ακολούθησαν από πειράματα για γραφήματα μεγαλύτερου μεγέθους (100, 200, 300, 400 κόμβοι), τα οποία συγκρίθηκαν τόσο με τη μέθοδο HyperMap όσο και με τις επιδόσεις του μοντέλου για τα αρχικά πειράματα. Με αυτόν τον τρόπο έγινε και ο έλεγχος για ύπαρξη τάσης στην απόδοση του μοντέλου σχετικά με το μέγεθος των γραφημάτων.

5.2 Συμπεράσματα

Στα πρώτα πειράματα, αυτά που αφορούσαν τα γραφήματα μεγέθους 100, η ανάλυση έφτασε στο συμπέρασμα πως το μοντέλο προσεγγίζει τη μέθοδο HyperMap επαρκώς καλά. Το πλήθος των Κοινοτήτων αλλά και οι σχετικές αποστάσεις μεταξύ τους βρίσκονται σε συμφωνία με τη HyperMap όταν αυτή διέκρινε εμφανώς διακριτές Κοινότητες. Όταν η HyperMap παρουσιάζει μια πιο απλωμένη κατανομή, και άρα μια αδυναμία συγκρότησης Κοινοτήτων, το μοντέλο διαχωρίζεται και παράγει Κοινότητες. Τέλος, όσον αφορά τις υπερβολικές αποστάσεις, των οποίων η ελαχιστοποίηση είναι και ο βασικός στόχος της HyperMap, το μοντέλο παρήγαγε

κατανομές όπου περισσότερα ζευγάρια κόμβων χαρακτηρίζονταν από μεγάλες υπερβολικές αποστάσεις.

Στα πειράματα που αφορούσαν τις εμφυτεύσεις των γραφημάτων μεγαλύτερου μεγέθους, προέκυψε μια πολύ ενθαρρυντική παρατήρηση. Πιο συγκεκριμένα, κατά την ανάλυση των κατανομών των υπερβολικών αποστάσεων, το πλήθος των ζευγαριών που χαρακτηρίζονται από μεγάλες υπερβολικές αποστάσεις ήταν μικρότερο και αντιστρόφως ανάλογο από το μέγεθος του γραφήματος. Επίσης, η μέγιστη υπερβολική απόσταση εμφανίστηκε μειωμένη συγκριτικά με τη μέθοδο HyperMap. Τέλος, η ανάλυση των κατανομών των γωνιακών συντεταγμένων για τα γραφήματα μεγαλύτερου μεγέθους, έχει τα ίδια χαρακτηριστικά με αυτή για τα γραφήματα μεγέθους 100.

5.3 Μελλοντικές Επεκτάσεις

Μετά το πέρας όλων των πειραμάτων που διεξήχθησαν στο πλαίσιο αυτής της εργασίας, αναγνωρίστηκαν τρεις κύριες κατευθύνσεις που μπορούν να βελτιώσουν ή να επεκτείνουν τη δουλειά που έγινε.

Αρχικά, τα πειράματα έγιναν πάνω σε γραφήματα μεγέθους μέχρι 400 κόμβων. Η επαύξηση των γραφημάτων σε μέγεθος μπορεί να διαλευκάνει την τάση απόδοσης του μοντέλου σε μεγαλύτερο βάθος. Στόχος είναι να δοκιμαστούν γραφήματα μεγέθους μέχρι και 150000 κόμβων, παραδείγματι η δομή του Ίντερνετ, όπως γίνεται και στις ερευνητικές εργασίες που αναφέρονται στη βιβλιογραφία.

Επιπροσθέτως, είναι γεγονός ότι δεδομένα πραγματικών γραφημάτων δεν χρησιμοποιήθηκαν στα πειράματα αυτής της εργασία, αλλά μόνο συνθετικά. Ενδιαφέρον θα έχει ο έλεγχος απόδοσης αυτής της μεθοδολογίας πάνω σε γραφήματα που δεν ανήκουν στην κατηγορία Scale-Free και να αναζητηθούν οι λόγοι που θα διαφοροποιούν, ή όχι, την απόδοση του μοντέλου.

Τέλος, η αρχιτεκτονικές που μελετήθηκαν δεν χαρακτηρίζονται από πολλά στρώματα. Μια διαδικασία εμπλουτισμού των μοντέλων καθιστώντας τα πιο "βαθιά" θα επέφερε γνώση πάνω στην πολυπλοκότητα της εμφύτευσης γραφημάτων σε Υπερβολικούς Χώρους, μιας και είναι γνωστό πως σε πιο πολύπλοκά προβλήματα, το βάθος των μοντέλων αυξάνει και την απόδοση τους.

Βιβλιογραφία

- [1] *Medium*. <https://ai.plainenglish.io/social-network-analysis-social-circles-of-facebook-611877849d59>. Ημερομηνία πρόσβασης: 29-6-2025.
- [2] *GitHub*. <https://github.com/XinyueTan/Social-Network-Analysis-?tab=readme-ov-file>. Ημερομηνία πρόσβασης: 15-5-2025.
- [3] Kang Cao and Yan Zhang. *Urban planning in generalized non-Euclidean space*. *Planning Theory*, 12:335--350, 2013.
- [4] *WikiBooks*. https://en.m.wikibooks.org/wiki/Geometry/Hyperbolic_and_Elliptic_Geometry/. Ημερομηνία πρόσβασης: 13-5-2025.
- [5] *Wikipedia*. https://en.wikipedia.org/wiki/Poincar%C3%A9_disk_model. Ημερομηνία πρόσβασης: 28-6-2025.
- [6] *Medium*. <https://medium.com/@ngneha090/a-guide-to-supervised-learning-f2ddf1018ee0>. Ημερομηνία πρόσβασης: 29-6-2025.
- [7] *SuperAnnotate*. <https://www.superannotate.com/blog/supervised-learning-and-other-machine-learning-tasks>. Ημερομηνία πρόσβασης: 29-6-2025.
- [8] *Linkedin*. <https://www.linkedin.com/pulse/perceptron-the-basic-building-block-neural-networks-ayush-meharkure-p>. Ημερομηνία πρόσβασης: 29-6-2025.
- [9] *Machine Learning Geek*. <https://machinelearninggeek.com/multi-layer-perceptron-neural-network-using-python/>. Ημερομηνία πρόσβασης: 14-5-2025.
- [10] Thomas Bläsius, Tobias Friedrich and Maximilian Katzmann. *Efficiently Approximating Vertex Cover on Scale-Free Networks with Underlying Hyperbolic Geometry*. *Algorithmica*, 85:1--34, 2023.
- [11] Vasileios Karyotis, Eleni Stai and Symeon Papavassiliou. *Evolutionary Dynamics of Complex Communications Networks*. CRC Press, 2013.
- [12] Dehua Peng, Zhipeng Gui and Huayi Wu. *Interpreting the Curse of Dimensionality from Distance Concentration and Manifold Effect*, 2025.
- [13] Bryan Perozzi, Rami Al-Rfou and Steven Skiena. *DeepWalk: online learning of social representations*. *Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*, KDD '14, page 701–710. ACM, 2014.
- [14] Aditya Grover and Jure Leskovec. *node2vec: Scalable Feature Learning for Networks*, 2016.

- [15] Stephen W Hawking and George FR Ellis. *The Large Scale Structure of Space-Time*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 1973.
- [16] Ε. Βασιλείου και Μ. Παπατριανταφύλλου. *Σημειώσεις Διαφορικής Γεωμετρίας Καμπυλών και Επιφανειών*, 2009.
- [17] Dmitri Krioukov, Fragkiskos Papadopoulos, Maksim Kitsak, Amin Vahdat and Marián Boguñá. *Hyperbolic geometry of complex networks*. *Physical Review E*, 82(3), 2010.
- [18] Hao Jiang, Lixia Li, Yuanyuan Zeng, Jiajun Fan and Lijuan Shen. *Low-Complexity Hyperbolic Embedding Schemes for Temporal Complex Networks*. *Sensors*, 22(23), 2022.
- [19] Gregorio Alanis-Lobato, Pablo Mier and Miguel Andrade. *Efficient embedding of complex networks to hyperbolic space via their Laplacian*. *Scientific Reports*, 6:30108, 2016.
- [20] Bianka Kovács and Gergely Palla. *Optimisation of the coalescent hyperbolic embedding of complex networks*. *Scientific Reports*, 11:8350, 2021.
- [21] Guillermo García-Pérez, Antoine Allard, M.Ángeles Serrano and Marián Boguñá. *Mercator: uncovering faithful hyperbolic embeddings of complex networks*, 2019.
- [22] Fragkiskos Papadopoulos, Constantinos Psomas and Dmitri Krioukov. *Network Mapping by Replaying Hyperbolic Growth*. *IEEE/ACM Transactions on Networking*, 23(1):198–211, 2015.
- [23] Martin Keller-Ressel and Stephanie Nargang. *Hydra: A method for strain-minimizing hyperbolic embedding of network- and distance-based data*, 2019.
- [24] Martin Keller-Ressel and Stephanie Nargang. *Strain-Minimizing Hyperbolic Network Embeddings with Landmarks*, 2022.
- [25] Fan Zhou, Ce Li, Xovee Xu, Leyuan Liu and Goce Trajcevski. *HGENA: A Hyperbolic Graph Embedding Approach for Network Alignment*. pages 1–6, 2021.
- [26] Fragkiskos Papadopoulos, Maksim Kitsak, M. Ángeles Serrano, Marián Boguñá and Dmitri Krioukov. *Popularity versus similarity in growing networks*. *Nature*, 489(7417):537–540, 2012.
- [27] Miller Mcpherson, Lynn Smith-Lovin and James Cook. *Birds of a Feather: Homophily in Social Networks*. *Annual Review of Sociology*, 27:415--, 2001.
- [28] Ozgür Simşek and David Jensen. *Navigating networks by using homophily and degree*. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 105:12758--62, 2008.
- [29] S. N. Dorogovtsev. *Lectures on Complex Networks*. Oxford: Oxford University Press, 2010.
- [30] Pedro Domingos. *A Few Useful Things to Know About Machine Learning*. *Commun. ACM*, 55:78–87, 2012.
- [31] Keiron O'Shea and Ryan Nash. *An Introduction to Convolutional Neural Networks*, 2015.

- [32] Jie Zhou, Ganqu Cui, Shengding Hu, Zhengyan Zhang, Cheng Yang, Zhiyuan Liu, Lifeng Wang, Changcheng Li and Maosong Sun. *Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications*, 2021.
- [33] William L. Hamilton, Rex Ying and Jure Leskovec. *Inductive Representation Learning on Large Graphs*, 2018.
- [34] Petar Veličković, Guillem Cucurull, Arantxa Casanova, Adriana Romero, Pietro Liò and Yoshua Bengio. *Graph Attention Networks*, 2018.
- [35] NetworkX. <https://networkx.org/>. Ημερομηνία πρόσβασης: 29-5-2025.
- [36] T.M. Cover and J.A. Thomas. *Elements of Information Theory*. Wiley, 2006.
- [37] Martin Arjovsky, Soumith Chintala and Léon Bottou. *Wasserstein GAN*, 2017.
- [38] Gabriel Peyré and Marco Cuturi. *Computational Optimal Transport*, 2020.
- [39] Muhammad Ali Masood and Rabeeh Ayaz Abbasi. *Using graph embedding and machine learning to identify rebels on twitter*. *Journal of Informetrics*, 15(1):101121, 2021.
- [40] Eleni Stai, Vasileios Karyotis and Symeon Papavassiliou. *A hyperbolic space analytics framework for big network data and their applications*. *IEEE Network*, 30(1):11–17, 2016.
- [41] Octavian Eugen Ganea, Gary Bécigneul and Thomas Hofmann. *Hyperbolic Neural Networks*, 2018.
- [42] Maximilian Nickel and Douwe Kiela. *Poincaré Embeddings for Learning Hierarchical Representations*, 2017.
- [43] Nino Arsov and Georgina Mirceva. *Network Embedding: An Overview*, 2019.
- [44] Mengjia Xu. *Understanding graph embedding methods and their applications*, 2020.
- [45] Vasileios Karyotis, Konstantinos Tsitseklis, Konstantinos Sotiropoulos and Symeon Papavassiliou. *Big Data Clustering via Community Detection and Hyperbolic Network Embedding in IoT Applications*. *Sensors*, 18(4), 2018.
- [46] Wei Peng, Tuomas Varanka, Abdelrahman Mostafa, Henglin Shi and Guoying Zhao. *Hyperbolic Deep Neural Networks: A Survey*, 2021.
- [47] S. He, S. Xiong, Y. Ou, J. Zhang, J. Wang, Y. Huang and Y. Zhang. *An Overview on the Application of Graph Neural Networks in Wireless Networks*, 2021.
- [48] Menglin Yang, Min Zhou, Marcus Kalander, Zengfeng Huang and Irwin King. *Discrete-time Temporal Network Embedding via Implicit Hierarchical Learning in Hyperbolic Space*. *Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, KDD ’21, page 1975–1985. ACM, 2021.

- [49] Eleni Stai, Konstantinos Sotiropoulos, Vasileios Karyotis and Symeon Papavassiliou. *Hyperbolic Embedding for Efficient Computation of Path Centralities and Adaptive Routing in Large-Scale Complex Commodity Networks*. *IEEE Transactions on Network Science and Engineering*, 4(3):140--153, 2017.
- [50] Xiao Wang, Deyu Bo, Chuan Shi, Shaohua Fan, Yanfang Ye and Philip S. Yu. *A Survey on Heterogeneous Graph Embedding: Methods, Techniques, Applications and Sources*, 2020.
- [51] Carlo Cannistraci, Gregorio Alanis-Lobato and Timothy Ravasi. *Minimum curvilinearity to enhance topological prediction of protein interactions by network embedding*. *Bioinformatics (Oxford, England)*, 29:i199--i209, 2013.
- [52] Alessandro Muscoloni, Josephine Thomas, Sara Ciucci, Ginestra Bianconi and Carlo Cannistraci. *Machine learning meets complex networks via coalescent embedding in the hyperbolic space*. *Nature Communications*, 8, 2017.
- [53] Marián Boguñá, Fragkiskos Papadopoulos and Dmitri Krioukov. *Sustaining the Internet with hyperbolic mapping*. *Nature Communications*, 1(1), 2010.
- [54] Konstantinos Tsitseklis, Maria Krommyda, Vasileios Karyotis, Verena Kantere and Symeon Papavassiliou. *Scalable Community Detection for Complex Data Graphs via Hyperbolic Network Embedding and Graph Databases*. *IEEE Transactions on Network Science and Engineering*, 8(2):1269--1282, 2021.
- [55] Joshua B. Tenenbaum, Vinde Silva and John C. Langford. *A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction*. *Science*, 290(5500):2319--2323, 2000.
- [56] Zhilin Yang, William W. Cohen and Ruslan Salakhutdinov. *Revisiting Semi-Supervised Learning with Graph Embeddings*, 2016.
- [57] Anthony Baptista, Rubén J. Sánchez-García, Anaïs Baudot and Ginestra Bianconi. *Zoo Guide to Network Embedding*, 2023.
- [58] Eleni Stai, Konstantinos Sotiropoulos, Vasileios Karyotis and Symeon Papavassiliou. *Hyperbolic Traffic Load Centrality for large-scale complex communications networks*. *2016 23rd International Conference on Telecommunications (ICT)*, pages 1--5, 2016.
- [59] Matteo Bruno, Sandro Ferreira Sousa, Furkan Gursoy, Matteo Serafino, Francesca V. Vianello, Ana Vranić and Marián Boguñá. *Community Detection in the Hyperbolic Space*, 2019.
- [60] Robert Jankowski and Pegah Hozhabrierdi and Marián Boguñá and M. Ángeles Serrano. *Feature-aware ultra-low dimensional reduction of real networks*, 2024.
- [61] Marián Boguñá, Ivan Bonamassa, Manlio De Domenico, Shlomo Havlin, Dmitri Krioukov and M. Ángeles Serrano. *Network geometry*. *Nature Reviews Physics*, 3(2):114–135, 2021.
- [62] Nikolaos Papadis, Eleni Stai and Vasileios Karyotis. *A path-based recommendations approach for online systems via hyperbolic network embedding*. *2017 IEEE Symposium on Computers and Communications (ISCC)*, pages 973--980, 2017.

- [63] Jaspervan der Kolk, M. Ángeles Serrano and Marián Boguñá. *Random graphs and real networks with weak geometric coupling*. *Physical Review Research*, 6(1), 2024.
- [64] Muhua Zheng, Guillermo García-Pérez and Marián Boguñáand M. Ángeles Serrano. *Scaling up real networks by geometric branching growth*, 2020.
- [65] Marián Boguñá, Dmitri Krioukov, Pedro Almagro and M. Ángeles Serrano. *Small worlds and clustering in spatial networks*. *Physical Review Research*, 2(2), 2020.
- [66] Robert Jankowski, Antoine Allard, Marián Boguñá and M.Ángeles Serrano. *The D-Mercator method for the multidimensional hyperbolic embedding of real networks*, 2023.
- [67] Vasileios Karyotis, Konstantinos Tsitsiklis, Konstantinos Sotiropoulos and Symeon Papavassiliou. *Enhancing Community Detection for Big Sensor Data Clustering via Hyperbolic Network Embedding*. *2018 IEEE International Conference on Pervasive Computing and Communications Workshops (PerCom Workshops)*, pages 266--271, 2018.
- [68] Fragkiskos Papadopoulos, Dmitri Krioukov, Marián Boguñá and Amin Vahdat. *Greedy Forwarding in Dynamic Scale-Free Networks Embedded in Hyperbolic Metric Spaces*. *2010 Proceedings IEEE INFOCOM*, pages 1--9. IEEE, 2010.
- [69] Gregorio Alanis-Lobato, Pablo Mier and Miguel Andrade. *Manifold learning and maximum likelihood estimation for hyperbolic network embedding*. *Applied Network Science*, 1, 2016.

Απόδοση ξενόγλωσσων όρων

Απόδοση

Κοινωνικά Μέσα
Τεχνητή Νοημοσύνη
Κατάρα της Διαστατικότητα
χώρος χαμηλότερης διάστασης
Μηχανική Μάθηση
Βαθιά Νευρωνικά Δίκτυα
Γραφήματα
Πίνακας Γειτνίασης
Βεβαρημένο Γράφημα
Τοπικός Συντελεστής Συσταδοποίησης
Καθολικός Συντελεστής Συσταδοποίησης
Κεντρικότητα
Εγγύτητα
Εντοπισμός Κοινοτήτων
Συσταδοποίηση Δικτύου
Κόμβο-κεντρικοί
Όμαδο-κεντρικοί
Δίκτυο-κεντρικοί
Ιεραρχικο-κεντρικοί
Κανονικά Γραφήματα
Τυχαία Γραφήματα
Τυχαία Γεωμετρικά Γραφήματα
Προτιμησιακή Σύνδεση
Αύξηση
Επανασύνδεση
Απεικόνιση Gauss
Τελεστής Σχήματος
Κύριες Καμπυλότητες
Κύριες Κατευθύνσεις
Καμπυλότητα Gauss
Υπερβολικός Χώρος
Εκμάθηση Πολλαπλοτήτων
Απόδοση Εμφύτευσης
Ακρίβεια Εμφύτευσης

Ξενόγλωσσος όρος

Social Media
Artificial Intelligence
Curse of Dimensionality
latent space
Machine Learning
Deep Neural Networks
Graphs
Adjacency Matrix
Weighted Graph
Local Clustering Coefficient
Global Clustering Coefficient
Centrality
Closeness
Community Detection
Network Clustering
Node-centric
Group-centric
Network-centric
Hierarchy-centric
Regular Graphs
Random Graphs
Random Geometric Graphs
Preferential Attachment
Growth
Rewiring
Gaussmap
Shape Operator
Principal Curvatures
Principal Directions
Gaussian Curvature
Hyperbolic Space
Manifold Learning
Embedding Efficiency
Embedding Performance

Πιθανοφάνεια	Likelihood
Επιβλεπόμενη Μάθηση	Supervised Learning
Μη-Επιβλεπόμενη Μάθηση	Unsupervised Learning
Αυτο-Ενισχυόμενη Μάθηση	Reinforcement Learning
Ταξινόμηση	Classification
Πολινδρόμηση	Regression
Συνάρτηση Κόστους	Loss Function
Βήμα Μάθησης	Learning Rate
Βελτιστοποιητής	Optimizer
Νευρωνικά Δίκτυα	Neural Networks
Perceptron Πολλαπλών Επιπέδων	Multi-Layer Perceptron
Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα	Convolutional Neural Networks
Νευρωνικά Δίκτυα Γραφημάτων	Graph Neural Networks
Φασματικό	Spectral
Χωρικό	Spatial
Δειγματοληψία	Sampling
Μηχανισμός Προσοχής	Attention Mechanism
Συνέλιξη Διάχυσης	Diffusion Convolution
Αυτο-Κωδικοποιητής	Auto-Encoder
Απόσταση Wasserstein	Wasserstein Distance
Απόκλιση Kullback-Leibler	Kullback-Leibler Divergence