



EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

INFORMATIKAI KAR

INFORMÁCIÓS RENDSZEREK

TANSZÉK

Általánosított Euler-diagramok automatikus elrendezése

Témavezető:

Dr. Molnár Bálint

habilitált egyetemi docens

Szerző:

Sarkadi-Nagy Bence

programtervező informatikus MSc

Budapest, 2020

Az eredeti szakdolgozati / diplomamunka témabejelentő helye.

Tartalomjegyzék

1. Absztrakt	2
2. Elméleti alapok	3
2.1. A dolgozat felépítése	3
2.2. Probléma	4
2.2.1. Alapdefiníciók	4
2.2.2. Gráfok ábrázolása	7
2.2.3. Hipergráfok és halmazrendszerek ábrázolása	8
2.2.4. Euler-diagramok vizualizációja	11
2.2.5. Problémaleírás	15
2.3. Megoldás	16
2.3.1. Optimalizáció	16
2.3.2. Függvényapproximáció	21
2.3.3. Mesterséges neurális hálóok	21
2.3.4. Gráf konvolúciós neurális hálózatok	24
2.3.5. Hipergráf konvolúciós neurális hálózatok	25
3. Saját eredmények	27
3.1. Vizsgált módszerek	27
3.1.1. Euler-diagram reprezentáció	27
3.1.2. Optimalizációs módszerek	30
3.1.3. Inicializációs módszerek	33
3.1.4. Heurisztikák	36
3.2. Összefoglalás	43
3.3. Mérések és következtetések	44
Irodalomjegyzék	45

1. fejezet

Absztrakt

A hipergráfok gyakran alkalmazott matematikai eszközök az informatika számos területén, így a szemantikus web, bioinformatika, szenzorhálózatok, adatbázisrendszerek, szociális hálózatok, gépi látás és egyéb területek számos megoldása épül rájuk. Ezen feladatok vizsgálata során különösen hasznos lehet a hipergráfok, illetve halmazrendszerek vizualizációja. Vizualizáció során egyszerre merül fel igény a mögöttes struktúra tökéletes leképezésére, a könnyű értelmezhetőségre (így esztétikai metrikákra), az általános alkalmazhatóságra, gyors futásidőre, és - ezzel összefüggésben - a megjeleníthető adathalmaz méretének maximalizálására is, továbbá gyakran felmerül a dinamikus környezet - akár a struktúra, akár Mint látható, ez egy feletébb összetett problémát eredményez, amely megoldására számos módszer született már a szakterületi irodalomban, azonban ezek gyakran szenvednek egy - vagy több - tervezési elv sérülésétől, így egyik sem terjedt el a gyakorlatban. Jelen dolgozatban különböző optimalizációs módszerek, illetve heurisztikák teljesítményét vizsgáljuk a fenti szempontok alapján, különös tekintettel az általános alkalmazhatóságra és a szemantikailag helyes leképezésre.

2. fejezet

Elméleti alapok

2.1. A dolgozat felépítése

Segítendő a szövegben való tájékozódást, ebben az alfejezetben részletezem a dolgozat felépítését. A szöveg két fő fejezetre bontható, amelyek előtt egy rövid összefoglaló (Absztrakt), után pedig egy összefoglaló fejezet (Összefoglalás) található. Az első (Elméleti alapok című) fejezetben először megadom a probléma leírásához, illetve megértéséhez szükséges definíciókat és fogalmakat, majd a tágabb és szűkebb problématerület irodalmi áttekintésére kerül sor, a probléma pontos megfogalmazásával lezárva. Az első fejezet második felében a megoldás során alkalmazott módszereket elméleti alapjait tekintem át. A második fejezet (Saját eredmények) az általam vizsgált különböző megoldási módszerek teljesítményét vizsgálja különböző paraméterek mellett, illetve az ezekből levont következtetésekre is itt térek ki.

A mérések során alkalmazott szoftver rövid leírása a függelékben található.

Megjegyzés. *A dolgozatban szereplő egyes szakszavak (néha egész szakterületek) egyáltalán nem, vagy nem elég hangsúlyosan szerepelnek a magyar szakirodalomban ahhoz, hogy elterjedt fordításuk legyen. Ezekben az esetekben - további figyelmeztetés nélkül - az angol nyelvű megfelelőjüket fogom használni. Népszerű, szinonimaként használt szakkifejezéseket igyekszem per jellel elválasztva felsorolni.*

2.2. Probléma

2.2.1. Alapdefiníciók

Ahhoz, hogy megértsük a megoldandó problémát, számos fogalmat át kell tekintünk először.

Gráfok

A gráf (variációi) alapvető fontosságú adattípus(ok) a modern informatikai megoldások során. Definíálásuk nem csak a dolgozat későbbi részeiben felbukkanó algoritmusok miatt fontos, hanem a - gyakran a gráfok általánosításának tekintett - hipergráfok mélyebb megértését is elősegítik.

1. Definíció. ***Írányítatlan gráfnak** nevezünk egy olyan, rendezett $G = (V, E)$ párt, ahol V egy nem-üres halmaz, E pedig egy olyan multihalmaz, amely a V elemeiből képzett kételemű halmazokat tartalmaz. Formálisan $E \subseteq \{\{u, v\} | u, v \in V\}$. A V halmazt **csúcsalmaznak** is szokás nevezni, elemeit **csúcsoknak**, míg E -t az **élhalmaz**, elemeit pedig **él** névvel illetjük. Az élek által tartalmazott elemeket az adott él **végpontjainak** hívjuk. Két csúcs **szomszédos**, ha van olyan él G -ben, amely őket tartalmazza, míg egy csúcs **izolált**, ha egyetlen élnek sem végpontja. A $G' = (V', E')$, $V' \subseteq V$, $E' \subseteq E$ a $G = (V, E)$ gráf **részgráfja**.*

2. Definíció. *Egy nem-üres halmaz, V , és az elemeiből képzett kételemű rendezett párokat tartalmazó A multihalmazból képzett rendezett $D = (V, A)$ párt **írányított gráfnak** hívjuk. Az irányítatlan gráfok nómenklatúrája itt is érvényes, azonban az élek rendezett párjában az első elemet speciálisan **kiindulópontnak**, a másodikat pedig **végpontnak** is szokás nevezni. Azt mondjuk, hogy egy $(u, v) \in A$ él az u csúcsnak egy **kimenő éle**, v -nek egy **bemenő éle**. **Forrásnak** nevezzük azt a csúcsot, amelynek nincsenek bemenő élei, **nyelőnek** azt, aminek nincsenek kimenő élei.*

3. Definíció. *Az $e_i, e_j \in E, i \neq j$ éleket **párhuzamos éleknek** nevezzük, ha $e_i = e_j$. **Hurokélnak** egy olyan élet nevezünk, amely $\{v, v\}$ vagy (v, v) formájú, azaz a két végpontja azonos.*

4. Definíció. Az $v \in V$ él **fokszámát** d -vel jelöljük, és $d = |\{e | e \in E \wedge v \in e\}|$. A G gráf **k -reguláris**, ha minden csúcsának fokszáma k . Irányított gráf esetében megkülönbéztetjük a **befokszámot** és a **kifokszámot**.

5. Definíció. **Egyszerű gráf** egy olyan irányítatlan gráf, amelyben sem párhuzamos, sem hurokélek nincsenek jelen.

6. Definíció. **Páros gráfnak** hívunk egy $G = (V, E)$ gráfot, ha $V = A \cup B$, $A \cap B = \emptyset$ és sem A -n, sem B -n belül nem fut él. Jelölése: $G = (A, B)$ vagy $G = (A, B, E)$.

7. Definíció. Irányított gráf esetén élek egy $(u_1, v_1), \dots, (u_k, v_k)$ sorozatát **sétának** nevezzük, ha $v_i = u_{i+1}$, $i = 1 \dots k - 1$. Irányítatlan gráfok esetén analóg módon definiáljuk a fogalmat, azonban eltekintünk a csúcsok élen belüli sorrendjétől. Ha a séta semelyik két éle nem tartalmazza ugyanazt a csúcsot, akkor a sétát **útnak** mondjuk. Ha az út kezdőpontja megegyezik a végpontjával, akkor az egy **kör**. Két csúcs **távolsága** a köztük lévő legrövidebb útban szereplő élek száma, ha ilyen nincs, akkor végtelen. Egy v csúcs **elérhető** az s csúcsból, ha a távolsága nem végtelen tőle. **Összefüggőnek** mondott egy gráf (vagy részgráf), ha abban minden csúcs elérhető mindegyik másiktól, míg egy **összefüggő komponens** a vizsgált gráf csúcsainak egy olyan részhalmaza, amely összefüggő, de nem bővíthető úgy, hogy az maradjon.

Megjegyzés. Irányítatlan gráfokban az elérhetőség ekvivalens az összefüggőséggel, így lineáris időben megkapható. (A lineáris futásidő elérhető irányított gráfokra is.)

8. Definíció. K_n -nel jelöljük az n csúcsú egyszerű gráfot, amelyben minden csúcspár között fut él, az ilyen gráfok neve **teljes gráf**. Mikor csak egy részgráfra igaz ez a tulajdonság, akkor azt **teljes részgráfnak** vagy **klikknek** mondjuk.

9. Definíció. **Topologikus sorrendként** ismert a $D = (V, A)$ irányított gráf csúcsainak egy olyan sorrendje, ahol kisebb sorszámú csúcsból csak nagyobb sorszámúba megy él. A topologikus sorrend megléte ekvivalens azzal, hogy az adott gráfban nincsen kör, így az ilyet **körmentes gráfnak** nevezzük.

10. Definíció. Egy $G = (V, E)$ irányítatlan gráf **line graphja** alatt az $L(G) = (E, \{\{e_i, e_j\} | v \in V \wedge v \in e_i \wedge v \in e_j, i \neq j\})$ gráfot értjük.

Halmazrendszerek és hipergráfok

Mint az absztraktban is említettem, halmazalapú adatrepresentációkkal, így hipergráfokkal és halmazrendszerekkel az informatika számos területén találkozhatunk. Az egyes problématerületek - sőt gyakran egy problématerületet vizsgáló különböző szakcikkék - azonban egymással konkuráló definíciókat alkalmaznak. Gyakran a halmazrendszerek szinonímájának tekintik a fogalmat, míg például - a szakterület egyik alapművének számító - Hypergraphs c. [1] kötet mind az általunk használt - mindjárt megismertetett - definícióhoz, mind a halmazrendszer alapúhoz képest megszorításokat vezet be.

11. Definíció. A H halmaz **hatványhalmaza** $\mathcal{P}(H) = \{x | x \subseteq H\}$, azaz a H halmaz összes részhalmazainak halmaza.

12. Definíció. A H halmaz fölötti \mathcal{F} **halmazrendszert** $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{P}(H)$ -ként definiáljuk.

13. Definíció. Ebben a dolgozatban **irányítatlan hipergráf** vagy egyszerűen hipergráf alatt egy olyan, rendezett $H = (V, E)$ párt értünk, ahol V a **(hiper)csúcsok** nem-üres halmaza, míg E , a **hiperélek** halmaza, egy olyan multihalmaz, amelynek az elemei $\mathcal{P}(V) \setminus \emptyset$ -ből kerülnek ki.

Megjegyzés. A hipergráf, úgy is ismertek, mint a gráfok általánosításai, ahol minden hiperél pontosan 2 elemet tartalmaz, azaz 2-reguláris. Egyrészt ez jól láthatóan függ a választott gráf-, és hipergráfdefinícióktól. Az itt használt definíciók alapján hipergráfok nem tartalmazhatnak hurokéleket, viszont párhuzamos éleket igen, így nem tökéletes általánosításai az irányítatlan gráfoknak, viszont irányítatlan egyszerű gráfoknak már igen.

Megjegyzés. Egy másik felmerülő kérdés a hipergráfok kapcsán a hiperutak, más szóval a tranzitivitás fogalma a hiperélek között. A szakirodalomban erre is több, azonban jobban elkülönülő definíció létezik. Az itt bemutatott eredmények nem építenek a tranzitív relációra, így tetszőleges definíció tételezhető fel.

Gráf- és hipergráf-adatszerkezetek

Gráfok gépi kezelésére köztes gráfrepresentációkra, gráfadatszerkezetekre van szükség. Leggyakrabban az adjacencia mátrix, az incidencia mátrix, az éllista és a

ritka reprezentációk általános osztálya használatos. Mivel a megoldások során csak az első kettőt alkalmazzuk, ezért a többi itt nem is definiáljuk.

14. Definíció. A $G = (V, E)$ gráf **adjacencia mátrixa** alatt azt a $|V| \times |V|$ méretű A_G mátrixot értjük, amelyben $a_{ij} = 1$, ha $\{v_i, v_j\} \in E$ és 0 egyébként.

15. Definíció. A $G = (V, E)$ gráf **incidencia mátrixa** alatt azt a $|V| \times |E|$ méretű I_G mátrixot értjük, amelyben $i_{jk} = 1$, ha $v_j \in e_k$ és 0 egyébként.

16. Definíció. A $H = (V, E)$ hipergráf **incidencia mátrixát** ugyanúgy definiáljuk, ahogy a gráfokon definált megfelelőjét.

Megjegyzés. Hipergráfok esetében az adjacencia mátrix nem értelmezett.

17. Definíció. A $H = (V, E)$ hipergráf **line/intersection graphja** az $L(H) = (E, \{\{e_i, e_j\} | v \in V \wedge e_i \cap e_j \neq \emptyset, i \neq j\})$ képlettel kapott egyszerű gráfot fedi. Jól látható, hogy ez általánosítja a gráfok esetében alkalmazott definíciónak.

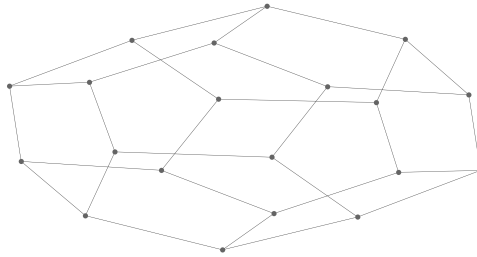
18. Definíció. A $H = (V, E_H)$ hipergráf **bipartite incidence structure-e** alatt azt a $G = (A, B, E_G)$ páros gráfot értjük, amelyben $A = V, B = E_H$ és $E_G = \{\{u, v\} | u \in V, v \in E_H, u \in v\}$.

19. Definíció. Egy irányítatlan $H = (V_H, E_H)$ hipergráf **(szuper)duálisa** az a $G = (V_G, E_G)$ egyszerű gráf, amelyben $V_G = \{X | X \subseteq E_H \wedge \exists v \in V_H : ((\forall e \in X : v \in e) \wedge (\forall e \notin X : v \notin e))\}$ és $E_G = \{\{X, Y\} | X, Y \subseteq E_H, X \neq Y \wedge \exists v \in V_H : (v \in X \wedge v \in Y)\}$

Megjegyzés. Figyeljük meg, hogy a szuperduálisban szereplő csúcsok száma exponenciális az eredeti csúcshalmaz tekintetében!

2.2.2. Gráfok ábrázolása

Mivel a gráfok gyakran használt, és könnyen konceptualizálható modellek, ezért a számítógépes vizsgálat mellett gyakran előnyös a felhasználó számára vizualizálni őket. Gráfok reprezentálhatók halmazokként vagy numerikusan (erre később látni fogunk példát), azonban ember-gép közreműködések során a leggyakrabban olyan képként szokás ábrázolni őket, melyeken a csúcsok köröknek, az őket összekötő élek pedig egyenes (egyes esetekben akár görbe) vonalaknak felelnek meg.



2.1. ábra. Egyszerű gráf képi ábrázolása

Gyakorlatban különösen fontos tulajdonságnak bizonyult - a könnyű értelmezhetőség szempontjából -, hogy egy adott gráf kirajzolható-e anélkül, hogy bármely két éle metszené egymást. A gráfelmélet egy ismert tétele, hogy nem minden gráf rajzolható síkba. A **Fáry-Wagner** tétel továbbá kimondja, hogy minden olyan gráf, ami görbe vonalak használatával síkbarajzolható, az egyenes vonalak esetén is síkbarajzolható marad.

Annak ellenére, hogy a reprezentáció aránylag egységes, rengeteg módszer létezik a konkrét csúcelrendezési feladat megoldására (ami természetesen implikál egy teljes gráfkirajzolást is). Ezen módszerek aztán csoportosíthatók, így ismerünk egyszerű konstruktív szabályokon (például köríven vagy rácson való elhelyezésen) alapulókat[2, 3, 4], a Laplace-mátrix sajátvektorait használó spektrális elrendezéseket[5] és - jellemzően - rúgóként kezelt élek és elektronokként tekintett csúcsok egyensúlyi állapotát kereső erőalapú (force-directed) módszereket[6, 7]. A mi szempontunkból ezutóbbi lesz a legfontosabb, azon belül is Fruchterman és Reingold megoldása[8]. Természetesen a korábbiak nem mindig különülnek el teljesen, előfordul, hogy több kategóriába is sorolható egyazon algoritmus[9].

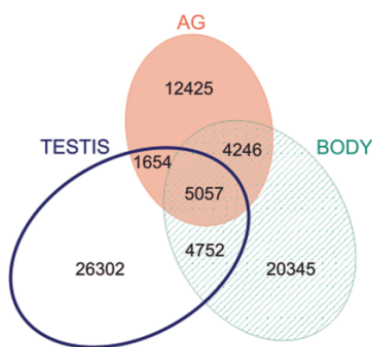
2.2.3. Hipergráfok és halmazrendszerek ábrázolása

Gráfokhoz hasonlóan hipergráfok (és/vagy halmazrendszerek) esetén is hasznos a felhasználó által értelmezhető ábrázolásuk, azonban - a gráfoktól eltérő módon - a vizuális reprezentációjuk már egyáltalán nem egységes. A szakirodalom számos különböző módszert tart nyilván, melyeket Alsallakh és társai foglaltak össze[10]. Ugyan a legtöbb cikk hasonló struktúrákat alkalmaz, kis variációk is könnyen összemossák a kialakított kategóriákat, úgyhogy itt inkább csak a gyakran alkalmazott ábrázolási megoldásokra térek ki.

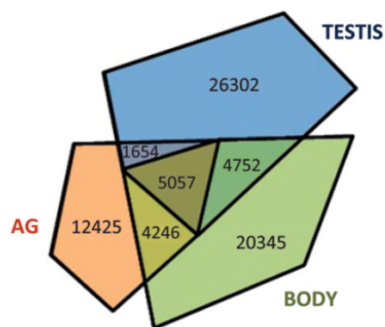
A legtöbb cikk régióalapú módszereket alkalmaz, ahol az egyes halmazok a sík részterületeivel vannak reprezentálva, míg a régiók elkülönítése jellemzően színkódolással történik[11, 12, 13] (az ebben a fejezetben bevezetett Euler-diagramok is ebbe a kategóriába tartoznak). Egy másik népszerű eszköz a gráfszerű leírás. Egyes módszerek egy adott halmazt színkódolt görbékkel írnak le, amelyek akkor tartalmazznak egy adott csúcsot, ha átmennek azon[14]. Elképzelhető továbbá a szuperduális használata is, amely végső soron tökéletesen reprezentál egy hipergráfot, azonban a tartalmazás reláció nehezebben felismerhető válik tőle. A bipartite incidence structure használata esetén ez a probléma már nem merül fel, viszont - Skiena kivételével, aki mindössze megemlíti az alkalmazhatóságát[15] - nem találtam olyan cikket, amely ne csak építene a struktúrára. Természetesen mátrixokkal (pl. incidencia mátrix segítségével) is ábrázolható egy hipergráf. Különböző aggregációt használó algoritmusok még előfordulnak, amelyek leginkább méretarányos diagramok vagy felhasználói interakció bevezetésével operálnak[16, 17], habár ezek nem különösebben elterjedtek. Ennek ellenére Chapmanék empirikus értékelése szerint az általuk használt aggregációs módszer könnyebben és jobban értelmezhető volt, mint a népszerűbb, Euler-diagramokon alapuló megoldások[16]. Előfordul továbbá, hogy információt ikonokkal írnak le, speciálisan a régióalapú megoldásoknál glyphnek nevezzük, mikor az egyes metszetek fölötti ikon(ok) méretével vagy számával jelezzük azok elemeinek számát. Mint a gráfok esetében, itt is előfordulnak tovább hibrid módszerek.

Ebben a dolgozatban egy specifikus, régióalapú ábrázolási mód, az Euler-diagram vizsgálatát tűztem ki célul. Az Euler-diagram kirajzolását célzó algoritmusok az úgynevezett Euler Diagram Generation Problem (EDGP) megoldásai. Ahogy a neve is mutatja, a szóban forgó ábrázolási módot még maga Leonhard Euler vezette be a XVIII. században, azonban mindmáig előszeretettel használatos. Ahogy Baron írja[18], Euler mindössze példákon mutatta be, illetve alkalmazta módszerét, nem definálta konkrétan. Ezek alapján - a hipergráfokhoz mintájára - Euler-diagramokra is többféle definíció létezik, melyek mind megegyeznek abban, hogy az egyes halmazok/hiperélek zárt görbékkel reprezentáltak, melyek metszetei közös halmazelemeket feltételeznek, míg diszjunkt esetben azok hiányát. Egyes definíciók az alaphalmaz elemeit/hipercsúcsokat is elhelyezik az ábrán, így létrejöhetnek olyan metszetek is a vizualizáció során, melyek valójából üresek, de az értelmezés során ez mégsem okoz

gondot. Gyakori kérdés, hogy a zárt görbék körök, ellipszisek vagy tetszőleges formájúak lehetnek-e, hogy szükségszerűen konvexek-e, illetve az egyes halmazok több, azonos címkével ellátott görbével is reprezentálhatók-e. A következőkben definiálom, hogy ebben a dolgozatban milyen értelmezést használok, azonban - az előzőeknek megfelelően - egyéb források ettől eltérhetnek.



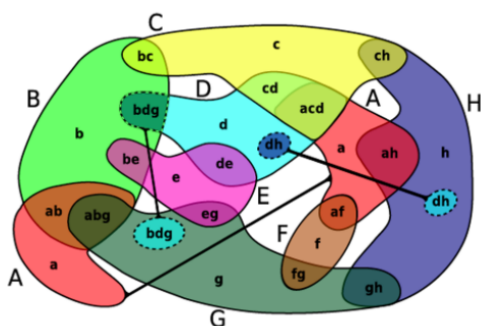
(a) Ellipszisalapú Euler-diagram[11]



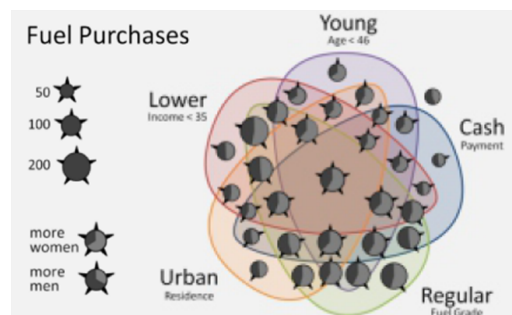
(b) Poligon alapú Euler-diagram[12]

2.2. ábra. Egyszerű Euler-diagramok

20. Definíció. A továbbiakban a $H = (V, E)$ hipergráfot reprezentáló **egyszerű Euler-diagram** alatt egy olyan ábrát értünk, amelyben minden $e \in E$ halmaz egyetlen zárt görbére képződik le, mely azokat, és csak azokat a hipercsúcsokat tartalmazza, melyek az adott e hiperélnek is elemei. Azon hipercsúcsok, melyek egyetlen hiperélben sem szerepelnek, az összes görbén kívül kell megjelenjenek. Az egyes görbék címkével (esetünkben színekkel) rendelkeznek.



(a) Általánosított Euler-diagram[13]



(b) Hibrid Euler-diagram glyphekkel[19]

2.3. ábra. Euler-diagram variánsok

21. Definíció. *Általánosított Euler-diagramként fogom nevezni azt az egyszerű Euler-diagramot, mely egy hiperélt több, azonos címkével ellátott zárt görbére is leképezhető.*

2.2.4. Euler-diagramok vizualizációja

Síkbarajzolhatóság

Gráfok esetében láthattuk, hogy felmerül a síkbarajzolhatóság kérdése. Egy hipergráf akkor síkbarajzolható, ha a kirajzolása során nem jön létre olyan régió, amely üres halmazt reprezentál. Amennyiben egyszer Euler-diagramokkal, így zárt, a végpontokat (jelen esetben hipercsúcsokat) tartalmazó görbékkel reprezentáljuk az éleket, akkor rögtön láthatjuk, hogy ezeknek tartalmazniuk kell legalább egy görbét is, amely közvetlenül összeköti a végpontokat. Ebből már észrevehetjük, hogy nem minden hipergráf rajzolható síkba egyszerű Euler-diagramokkal.

Verroust és Viaud bebizonyította[20], hogy az általuk használt Euler-diagram definíció 8 halmazig megőrzi a síkbarajzolhatósági tulajdonságot. Simonetto és Auber egy másik struktúrát vizsgált[13], ami megfelel az itt általánosított Euler-diagramként definiált fogalomnak (ők Euler representationnek nevezik), melyről levezették, hogy alkalmas tetszőleges hipergráf síkbarajzolására, görbéknek kizárólag szemantikailag helyes metszeteinek létrehozása mellett. A szuperduális felhasználásával pontos leírása is adható annak, hogy mikor nem rajzolható ki egy hipergráf egyszerű Euler-diagramok használatával[13, 20]. (Megjegyzendő, hogy a Sunibetto cikk intersection graphnak nevezi a szuperduálist, miközben az egy másik struktúrát jelöl, de a leírásból, illetve a példákból levezethető, hogy valójából felcserélték a kettőt.)

Esztétikai mértékek

Természetesen egy adott diagram síkbarajzolása nem feltétlenül szükséges ahhoz, hogy az ábra helyesen képezze le a mögöttes struktúrát (halmazrendszert vagy hipergráfot), azonban minenképpen megkönnyíti az emberi értelmezést. Egy adott ábra ilyen tulajdonságait esztétikai tulajdonságoknak nevezzük, ha pedig számszerűsíthetők (és adott rajtuk egy teljes rendezés), akkor esztétikai metrikáknak hívjuk.

Esztétikai metrikák definiálhatók magukon a görbéken, a görbék metszetein, a csúcsok eloszlásán, az ábra színezésén, továbbá - gyakorlatilag - az ábrán megjelenő bármely aspektus fölött [21, 22, 23].

Az EDGP során felmerülő két leggyakrabban vizsgált [16, 21, 22, 24, 25] esztétikai tulajdonság, az úgynevezett well-formed és well-matched tulajdonságok.

22. Definíció. *Egy adott Euler-diagram esetén **kontúr/contour** névvel illetjük az egy címkéhez (vagy hiperélhez/halmazhoz) tartozó különböző zárt görbék összességét. **Minimális régiónak/minimal regionnek** hívjuk a görbék egymás által létrehozott legkisebb síkpartícióit, míg **alaprégió/basic region** alatt azon minimális régiók halmazát értjük, melyek ugyanazon görbék részei. Egy **zóna/zone** az alaprégiók egy olyan halmaza, amelyek azonos címkével rendelkeznek.*

A well-formed tulajdonság hat kritériumból tevődik össze, bár néha csak az első ötöt használják:

1. Minden görbe egyszerű, azaz nem metszi önmagát - WFC1
2. Nincs két görbe, amelynek közös határolószakasza van. (Az elfajuló, pontbeli találkozást nem vesszük hozzá - WFC2
3. Nincs olyan pont, ahol három görbe érintkezik - WFC3
4. Ha két görbe érintkezik, akkor metszik egymást - WFC4
5. Minden zóna összefüggő, azaz egyetlen minimális régióból áll - WFC5
6. Nem rendelkezik két görbe azonos címkével - WFC6

A well-matched tulajdonság az alábbi négy tulajdonság együttes meglétét fedi:

1. Egy Euler-diagram well-matched a zónák szintjén, ha nem tartalmaz üres zónákat. - WMP1
2. Egy Euler-diagram well-matched a görbék szintjén, ha a halmazok közti részhalmaz, metszet és diszjunkció relációk megfelelnek az adott halmazokat reprezentáló görbék tartalmazás, átfedés és diszjunkció tulajdonságának. - WMP2
3. Egy Euler-diagram well-matched a minimális régiók szintjén, ha well-matched a zónák szintjén, és csak összefüggő zónákat tartalmaz. - WMP3
4. Egy Euler-diagram well-matched a kontúrok szintjén, ha a halmazok közti részhalmaz, metszet és diszjunkció relációk megfelelnek az adott halmazokat

reprezentáló kontúrok tartalmazás, átfedés és diszjunkció tulajdonságának. - WMP4

Szintúgy széles körben vizsgált tulajdonság az area-proportionality, avagy méretarányosság[26, 27, 28, 29], amely azt mondja ki, hogy minden régió (bizonyos definíciók szerint az univerzumot reprezentáló kivételével) mérete úgy aránylik az ilyenek összegéhez, mint az ω súlyfüggvényük azok összegéhez. Leggyakrabban a régió által tartalmazott elemek számát alkalmazzuk súlyfüggvényként. Hibamértékek segítségével könnyen metrika is előállítható a tulajdonságból.

Egyes szerzők a régiók színezését is hasonlóan fontosnak ismerik el, mint az elhelyezkedésüket[30, 31].

Annak ellenére, hogy több esztétikai metrika és tulajdonság is széles körben alkalmazott, nagyon kevés empirikus tapasztalatunk van arról, hogy ezek ténylegesen befolyásolják-e egy ábra értelmezhetőségét. Fish és társai kis mintán vizsgálták[32] a well-formed tulajdonságnak az ábrák megértésére vonatkozó hatását. Az ő eredményeik alapján a WFC2 megsértése akár segítheti is egy ábra értelmezését, míg a WFC1 és WFC4 egyidejű, illetve a WFC3 vagy WFC4 önálló megsértése is rontja azt. Blake és társai[25] arra az eredményre jutottak, hogy az egyes görbék orientációja nincs hatással az emberi percepciójukra. Blake-ék, egy másik cikkükben[33], a szimmetrikus alakzatokat azonosították a legkönnyebben megérthetőként, így különösen a kör alakú reprezentációt javasolják. Chapman és társai empirikus módon arra az eredményre jutottak[16], hogy a well-matched tulajdonság fontosabb, mint a well-formed.

Euler-diagramok generálása

Még úgy is, hogy az Euler-diagramok mindössze részterületét képezik a halmazábrázolási módszereknek, a szakirodalomban rengeteg különböző eljárás található, melyek gyakran nem is tekinthetők ugyanannak a szűken vett probléma megoldásának. Az alkalmazott Euler-diagram definíció, a vizsgált probléma mérete, az alkalmazott esztétikai tulajdonságok és metrikák, illetve ezek erős vagy gyenge megkövetelése mind-mind új variánsait hozzák létre a - összefoglaló néven EDGP-nek nevezett - problémának.

A halmazábrázolási terület legátfogóbb összegzését Alsallakh és társai adták[10], melyben számos EDGP megoldás összehasonlítását is adták (lásd az első táblázatot a cikkükben). Itt számos szempont alapján kategorizálják az egyes módszereket. Elsősorban megkülönböztetik a tetszőleges relációk ábrázolására alkalmas, illetve az ebben a tekintetben korlátozott megoldásokat. Ettől nem függetlenül megadják, hogy milyen alakzatokkal reprezentál egy halmazt az adott módszer (kör, poligon vagy ellipszis), a cikkből azonban sajnos kimaradt, hogy ismert Bézier-görbe alapú megoldás is[23]. Másik szempontként hozzák fel a teljesített esztétikai tulajdonságokat, mint a *well-formed*, *well-matched*, *area-proportional*, szimmetrikus görbe tulajdonságokat és vizsgálják, hogy létrejönnek-e üres minimális régiók (az univerzumon kívül). Az általuk adott táblázat alapján továbbá azt tételezhetjük fel, hogy az egyes módszerek vagy három, vagy tetszőleges számú halmazra alkalmazhatók. Megfigyelhető, hogy ezutóbbi az alapján válik el, hogy az Euler-diagramok egy speciális esetét, a Venn-diagramokat vizsgálja-e egy adott cikk vagy az általános problémát. Amiről ezek alapján nem kapunk képet, hogy egyes módszerek csak 8 halmazig alkalmazhatók[20], mivel ezek fölött már ismertek olyan példák[13, 20, 34], amelyek nem síkbarajzolhatók egyes Euler-diagram definíciók szerint. (A cikkben nem említett, de hasznos kiemelni, hogy egyes algoritmusok csak már meglévő diagramok esztétikai javítását szolgálják[21] vagy emberi beavatkozást igényelnek[35].)

A dolgozat későbbi részeiben legfontosabbnak Flower, Rodgers és Mutton munkájára[23] fog bizonyulni, akik sztochasztikus optimalizációs módszereket, illetve metaheurisztikákat alkalmaztak Bézier-görbékkel reprezentált Euler-diagramokra, és akikkel részben hasonló megközelítést választottunk. Érdekes még megemlíteni Stapleton és társainak munkáját[34], amelyben induktív módon generálnak *well-formed* euler diagramokat, mikor ez lehetséges, a többi esetben pedig a *well-formed* kritériumok megsértésével, a görbék önmetszésével érik el, hogy továbbra is szemantikailag helyes ábrát generáljanak. Különösen érdemes megfigyelni, hogy az általánosság ilyen szintű eléréséhez a duális gráf egy módosított verzióját használják, ami exponenciális futásidőt eredményez.

2.2.5. Problémaleírás

Láthattuk, hogy az EDGP egy összetett probléma, amely magában foglalja a konkrét ábrázolási mód (Euler-diagram definíció), a vizsgált esztétikai metrikák, az elfogadható futásidő és a megoldható problémaméret meghatározását is. Különösen fontos kitérni arra is, hogy egy adott probléma vizsgálata során nem feltétlenül egyféle szempont szeretnénk ábrázolási módot választani, elképzelhető például, hogy ugyanúgy szeretnénk az előforduló klasztereket vizsgálni, mint a leghosszabb utakat, melyek másféle elrendezést tételeznek fel.

Az általam kitűzött célt az egyetemen folyó egyik kutatás igényei szerint tűztem ki, ahol adatbázisrendszerek redundanciáját csökkentjük hipergráfmodellek segítségével. Az itt folyó napi munka során egy olyan eszközre támadt szükség, amely - a jelenleg elérhető programokkal szemben - képes több tucat élel és akár több száz csúcsal bíró hipergráfot többféle esztétikai metrika szerint is kirajzolni, akár hosszabb futási idő (órák) és/vagy egyszeri, kifejezetten hosszú (napok, hetek) tanulási idő után. Különösképp megnehezíti a feladatot, hogy Alsallakh és társai - a halmazábrázolási módszereket áttekintő cikkükben[10] - az Euler-diagramokat mindössze 10-20 halmazig tartják alkalmazhatónak. A tématerület bonyolultságának és mélységének megfelelően a dolgozat különböző módszerek vizsgálatáról szól, a végső eszközt még nem hivatott létrehozni.

Mint láthattuk, az általános megoldhatóság érdekében emberi beavatkozás, korlát nélküli paraméterter (például Bézier görbék kontrollpontjai[23]) vagy exponenciális futásidő[34] lehet szükséges. Mivel tetszőleges esztétikai metrika fölött az optimalizáció, így a legjobb Euler-diagram megtalálása is NP-nehéz, ezért ez egyáltalán nem meglepő. A megoldásom alapjaként választott Flower cikkel[23] szemben, az általam használt, bonyolultabb problémater (mind a hipergráf méretében, egy adott halmazt reprezentáló zárt görbék számában és ebből kifolyólag a költségfüggvényként alkalmazott heurisztikák nem-folytonos jellegében) felveti a diagram modell egyszerűsítésének igényét, illetve újabb heurisztikák kidolgozásának szükségességét is.

2.3. Megoldás

2.3.1. Optimalizáció

A matematikai optimalizáció célja egy adott $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ valós értékű függvény globális minimum- vagy maximumhelyének megtalálása, ahol X tetszőleges halmaz lehet. Mivel az f függvény negáltja segítségével maximalizációs problémák minimalizációs problémákká vezethetők vissza (vagy fordítva), ezért a kettő feladatot azonosnak tekintjük. A továbbiakban - mikor nem jelzem az ellenkezőjét - minimalizálási problémát tételezek fel.

23. Definíció. Az f függvényt számos módon nevezik; minimalizálási problémák esetén **költség-/veszteségfüggvényként** vagy **objektívfüggvényként**, míg maximalizálási problémák esetében **utility** vagy **fitness functionként** ismerjük. Egyes szakterületeken (mint fizikában) egyéb nevek is ismertek. Ha az f függvény a $g_i, i \in \mathbb{N}_0$ függvények átlagaként áll elő, akkor költségfüggvénynek hívjuk, a g_i függvényeket pedig veszteségfüggvényeknek.

24. Definíció. Egy optimalizálási algoritmus paramétereit **hiperparamétereknek** nevezzük.

Általánosságban beszélve az optimalizálási probléma NP-nehéz, azonban a költségfüggvényre tett megszorításokkal ez feloldható. A kidolgozott algoritmusok ezért különösen fontos, hogy milyen megszorítások mellett operálnak.

Gradiensalapú optimalizáció

Gradiens-, illetve deriváltalapú algoritmusok vagy a deriváltfüggvényt (Hesse-mátrixot) vagy a pontbeli (parciális) deriváltat alkalmazzák. Bár szigorúan véve az első- és másodikderivált-próba is ide tartozik, a gyakorlatban a vizsgált függvény pontos képlete jellemzően nem ismert, illetve a paraméterek és a lokális szélsőértékek nagy száma is ellehetetleníti ezt a féle megoldást. Ezzel szemben iteratív módszereket szokás használni, melyek egy megadott - általában véletlenszerű - kiindulópontból egy lokális minimumponthoz konvergálnak. Amennyiben a függvény konvex vagy a kiindulópont kellőképpen közel volt a globális minimumhoz, akkor a kapott lo-

kális minimumhely globálisan is az lesz, azonban ez általában nem garantált. Az előzőeknek megfelelően sokszor elvárt tulajdonság a folytonos deriválhatóság is.

A gyakorlatban használt legtöbb iteratív algoritmus a gradiens leszálláson alapszik. Gradiens leszállás során egy tetszőleges θ_0 kiindulópontot választunk, majd a $\theta_{i+1} = \theta_i - \alpha * \nabla f(\theta_i)$ szabály alapján kiválasztjuk a következő vizsgálandó pontot, ahol α egy hiperparaméter. Az iteráció addig folytatódik, míg a megállási feltétel (például felső korlát az iterációk számára, a lépésköz nagyságára vagy a gradiensre egy normájára) nem teljesül. Fontos tulajdonsága ennek az algoritmusnak, hogy túl nagyra megválasztva α -t átugorhatunk minimumhelyeket, míg túl kicsire állításával a keresési időt növeljük meg. Számos módszer született ennek a hiányosságnak az áthidalására, így egyes variációk az iterációk számának növekedésének függvényében csökkentik α -t vagy eltérő kiindulópontokból indítják újra a keresést. Bizonyos feltételek mellett az algoritmus garantáltan egy lokális minimumhelyhez konvergál[36].

A gradiensalapú módszerekkel rokon jegyeket mutat a - nem feltétlenül differenciálható, de konvex függvények esetében alkalmazható - szubgradiensmódszer, illetve az általánosabban használható, lokális keresésen alapuló hegymászó algoritmus.

Sztochasztikus algoritmusok

Összefoglaló néven **sztochasztikus algoritmus** névvel illetjük azokat a módszereket, amelyek futásuk során valószínűségi változókat alkalmaznak. Ez a megközelítés gyakran használt, mikor a költségfüggvény nem alkalmas direkt optimalizációra, viszont megelégszünk közelítő megoldásokkal is. Szintúgy előnyös, mikor a keresési térben számos, globális minimumértékhez közel álló pont létezik. A gradiens leszállás során látott véletlen kezdőpont kiválasztását inputnak tekintjük, így az algoritmus alapverzióját nem tekintjük sztochasztikusnak, viszont - mint számos egyéb determinisztikus (nem sztochasztikus) algoritmusnak - vannak sztochasztikus variánsai. Ennek megfelelően fontos kiemelni, hogy az egyes optimalizációs módszereknek általában több variánsa is létezhet, melyek esetenként összemoszák a kategóriákat. Ennek a fejezetnek a további részében át fogjuk tekinteni azokat az algoritmusokat, amelyeknek szükséges az ismerete a továbbiakban, azonban néhol pont az itt bemutatott alapverziótól való eltérés lesz különösen érdekes.

A legismertebb ilyen variáns az úgynevezett **sztochasztikus gradiens leszáll-**

lás (SGD). Mikor az f költségfüggvény több f_i veszteségfüggvény átlagaként jön létre, azaz $f(x) = 1/n * \sum_{i=1}^n f_i(x)$ (például gépi tanulás során több mintaelemen alkalmazva ugyanazt a veszteségfüggvényt), akkor előfordul, hogy a gradiens leszállás során a mai számítógépek kapacitásához képest túl sok parciális deriváltat kéne kiértékelni. Az SGD ez úgy kerüli el, hogy a veszteségfüggvényeket egyesével értékeli ki, mindegyik kiértékelés után módosítva a paramétereket. Láthatóan ez nem ekvivalens a teljes költségfüggvény gradiensének használatával (csak közelíti azt), továbbá nagyban függ a kiértékelés sorrendjétől is, ezért a veszteségfüggvények sorrendje a kiértékelés során randomizált. Néha szintúgy SGD-nek nevezik a mini-batch gradient descent módszert, ami annyiban tér el az SGD-től, hogy a paraméterek módosítása során egyszerre k darab veszteségfüggvény átlagát használjuk, ahol k egy hiperparaméter.

Természetben lejátszódó folyamatok számos esetben optimalizációs módszerként is tekinthetők. Az ilyen adaptált optimalizációs technikákat összefoglaló néven **biológiailag inspirált** algoritmusoknak nevezzük. A természeti rendszerek komplexitásából fakadó modellezési bizonytalanság feloldását sokszor a sztochaszticitás bevezetésével érjük el, így - gyakorlatban - a legtöbb biológiailag inspirált optimalizációs algoritmus egyben sztochasztikus algoritmus is.

Egy ilyen, természet ihlette algoritmus, a természetes szelekción alapuló **genetikus algoritmus** (GA)[37, 38]. A módszer mögötti megfontolás, hogy egy populáció életciklusa a új egyedek születéséből/halálából, az egyedek szaporodásából (így genetikai keveredéséből), illetve mutációkból tevődik össze, ahol a párosodás a gének előnyös jellegének f függvénye. Az algoritmus célja, hogy ezt az f fitness függvényt *maximalizálja*, az életképes egyedek kombinációjával, illetve kis perturbációkkal.

1. Algoritmus Genetikus algoritmus

Function GA(*populationSize*, *parentNumber*, *mutationRate*)

- 1: $t = 0$
 - 2: $population_t = \text{generateFeasibleSolutions}(populationSize)$
 - 3: $values = \text{evaluateFitness}(population_t)$
 - 4: $bestFitness, bestPosition = \text{updateBest}(values, \infty, population_t, bestPosition)$
-

```

5: while megállási feltétel nem teljesült do
6:    $parents = \text{selectFitnessProportionally}(population_t, values, parentNumber)$ 
7:    $children = \text{recombine}(parents)$ 
8:    $population_t = \text{deleteLast}(population_t, values, |children|)$ 
9:    $population_{t+1} = population_t \cup children$ 
10:   $population_{t+1} = \text{mutate}(population_{t+1}, mutationRate)$ 
11:   $values = \text{evaluateFitness}(population_{t+1})$ 
12:   $bestFitness = \text{updateBest}(values, bestFitness, population_{t+1}, bestPosition)$ 
13:   $t = t + 1$ 
14: end while
15: return  $bestFitness, bestPosition$ 

```

Itt a $generateFeasibleSolutions(n)$ n darab megengedett megoldást generál, $evaluateFitness(population)$ kiértékeli az egyes egyedek fitness értékeit, $updateBest(newValues, oldBest, newPositions, oldPosition)$ az új értékek és pozíciók, illetve a korábbi legjobbak segítségével kiválasztja a legjobbat (maximumot és maximumhelyet), $selectFitnessProportionally(population, fitnessValues, num)$ a fitness értékek által implikált valószínűségi eloszlás szerint kiválaszt num darab egyedet, $recombine(population)$ két elemenként egy új egyedet hoz létre, amely a szülei génállományán alapszik, $deleteLast(population, fitnessValues, num)$ törli a num darab legrosszabb fitness értékkel bíró egyedet a populációból, $mutate(population, mutationRate)$ pedig a $mutationRate$ arányában megváltoztatja az egyedek génállományát. A megállási feltétel gyakran iterációs felső korlát vagy alsó korlát a legjobb fitness értékre.

A **particle swarm optimization** (PSO) egy másik biológiailag inspirált algoritmus, amely analóg módon működik egyes rajként együtt dolgozó állat- és rovarfajokkal[38, 39, 40]. A módszer alapelve, hogy különböző, részecskének nevezett, entitások pozícióiban értékeljük ki az f költségfüggvényt. A részecskék haladási iránnyal és sebességgel rendelkeznek, amelyet minden iterációban úgy frissítünk, hogy - véletlenszerű mértékben - figyelembe vesszük magát az irányt/sebességet és a részecske által, illetve a globálisan talált eddigi legjobb pozíciót/értéket.

2. Algoritmus Particle swarm initialization

Function InitializePSO($S, lowerBounds, upperBounds$)

```

1:  $bestPosition_{global} = \infty$ 
2: for  $i = 1 \dots S$  do
3:    $bestPosition_i = particlePosition_i \sim U(lowerBounds, upperBounds)$ 
4:    $velocityRange = |upperBounds - lowerBounds|$ 
5:    $velocity_i \sim U(-velocityRange, velocityRange)$ 
6:   if  $f(bestPosition_i) < f(bestPosition_{global})$  then
7:      $bestPosition_{global} = bestPosition_i$ 
8:   end if
9: end for
10: return  $bestPosition_{global}, particlePosition_{1\dots S}, bestPosition_{1\dots S}, velocity_{1\dots S}$ 

```

3. Algoritmus Particle swarm optimization

Function PSO($S, w, c_1, c_2, lowerBounds, upperBounds$)

```

1:  $bestPosition_{global}, particlePosition_{1\dots S}, bestPosition_{1\dots S}, velocity_{1\dots S} =$   

    $InitializePSO(S, lowerBounds, upperBounds)$ 
2: while megállási feltétel nem teljesült do
3:   for  $i = 1 \dots S$  do
4:      $random_1, random_2 \sim U([0, 1]^{dim(lowerBounds)})$ 
5:      $velocity_i = w * velocity_i + c_1 * random_1 * (bestPosition_i - particlePosition_i) +$   

        $c_2 * random_2 * (bestPosition_{global} - particlePosition_i)$ 
6:      $particlePosition_i = particlePosition_i + velocity_i$    néha  $\dots + \alpha * velocity_i$ 
7:     if  $f(particlePosition_i) < f(bestPosition_i)$  then
8:        $bestPosition_i = particlePosition_i$ 
9:     if  $f(bestPosition_i) < f(bestPosition_{global})$  then
10:       $bestPosition_{global} = bestPosition_i$ 
11:    end if
12:  end if
13: end for
14: end while
15: return  $f(bestPosition_{global}), bestPosition_{global}$ 

```

Ahogy látható algoritmus hiperparaméterek segítségével adja meg a részecskék számát, illetve a módosítási szabály egyes tagjainak súlyát.

Egyéb optimalizációs módszerek

Természetesen az áttekintett kategóriákat nem merítettük ki, számos további algoritmus és variáns áttekintésére a dolgozat keretei között nincsen lehetőség, illetve számos további megszorítás és függvényosztály is ismert, amelyekre létezik optimalizációs algoritmus, mint például lineáris egyenlőtlenségrendszerek vagy diszkrét halmazok esetén.

2.3.2. Függvényapproximáció

A numerikus analízis - így például az optimalizáció - számos területén merül fel a (jellemzően valós értékű) matematikai függvények használatának az igénye. Mikor a vizsgált függvény túl komplex, nem mindenhol kiértékelhető, esetleg nem rendelkezik az elvárt tulajdonságokkal, akkor függvények egy meghatározott részhalmazából kiválaszthatunk egy rá legjobban illeszkedőt. Ezt az eljárást - mint az ezt vizsgáló szakterületet - **függvényapproximációnak** nevezzük. Mikor meghatározott pontokban várjuk csak el a legjobb illeszkedést, akkor görbék illesztéséről beszélünk.

Legyen $f = (f_1 \dots f_n)^\top$, $w \in \mathcal{R}^n$, ahol $f_i, i = 1 \dots n$ tetszőleges függvény lehet. Ekkor az $f(x, w)$ **linear function approximatornek** nevezzük, ha az lineáris súlyok w vektorában (bár nem feltétlenül az az x inputban), azaz $f(x, w) = w_1 * f_1(x) + \dots + w_n * f_n(x)$. Mikor az f függvény nem teljesíti a linearitási feltételt, akkor **nonlinear function approximatorról** beszélünk.

2.3.3. Mesterséges neurális hálók

Az egyik legismertebb és legszélesebb körben alkalmazott nem-lineáris függvényapproximátorok a **mesterséges neurális hálók** (artificial neural network - ANN). Hasonlóan a biológiailag inspirált algoritmusokhoz, ezek olyan számítási rendszerek, amelyek biológiai folyamatokat, speciálisan az emberi - illetve állati - agyban működő neuronokat, és azok működését modellezzik. Egy ANN legkönnyebben irányított gráfként képzelhető el, amelyben (**mesterséges**) **neuronok** alkotják a valós

számokkal címkézett csúcsokat, míg a köztük létező, súllyal rendelkező kapcsolatok (szinapszisok) az éleket. A csúcsok címkéjét **biasnek** hívjuk, az éleket **weightnek**. A weight és a bias értékek közösen adják ki a neurális hálózat paramétereit. Az így kapott gráf számítási rendszerként fogható fel, amennyiben az egyes csúcsok műveleteket reprezentálnak. A forrás-csúcsoknak közvetlenül beadhatók a rendszer bemenetei, míg az összes többi csúcs egy újabb értéket számít ki, melyek a nyelő csúcsokban értelmezhetők végeredményként. A források kivételével az egyes csúcsok az $x_v = \sigma(w_n \cdot x_n + b_v)$ képlet alapján számítják ki az értéküket, ahol x_v a v csúcs új értéke (nem címkéje), w_n a bemenő élek súlyainak (weight) vektora, x_n ezen élek kiindulópontjainak értéke, b_v a v csúcs címkéje/biase, a σ függvény pedig egy - jellemzően nem-lineáris - aktiválási függvény.

Architektúra

A számítási gráf csúcsait általában a forrásoktól való távolságuk alapján partitionálni szokás, ahol strukturálisan az egyes rétegek általában minden csúcsukban azonos módon viselkednek. Az egyes partíciókat **rétegeknek** nevezzük, és számos előnyös tulajdonsággal bírnak. Egyrészt a különböző rétegek szemantikailag egyre magasabb szintű absztrakciókat reprezentálnak, másrészt rétegen belül párhuzamosan is kiszámíthatók. Mivel a rétegek minden csúcsukban hasonlóan épülnek fel, ezért gyakran megkülönböztetünk speciális célú rétegeket. Ilyen az időkomponenssel bíró adatok kezelésére kifejlesztett rekurrens/visszacsatolt réteg, a lokális információkat összegző konvolúciós réteg vagy az általánosabb, teljesen összekötött réteg. A rétegekből (vagy anélkül) kialakított számítási gráfot a neurális hálózat architektúrájának is szokás nevezni.

Amennyiben a rétegek szekvenciálisan egymásra épülnek (azaz általában), akkor az egyes rétegek weight és bias értékeit könnyebben kezelhető mátrix alakban is felírhatjuk. Jelöljük az i -edik réteget $H^{(i)}$ -vel, a rákövetkezőt $H^{(i+1)}$ -gyel, az adott rétegben található csúcsok számát pedig $|H^{(j)}|$ -vel. Ekkor az i -edik rétegből az $i+1$ -edikbe menő élek súlyai egy $W^{(i)} \in \mathcal{R}^{|H^{(i)}| \times |H^{(i+1)}|}$ mátrixban tárolhatók, amelyben - értelemszerűen - a sorok jelentik az élek kiindulópontját, az oszlopok pedig a végpontját. Egy $B^{(i)} \in \mathcal{R}^{|H^{(i)}|}$ bias vektor is kialakítható, amely a csúcsok címkéjét tartalmazza. Ezek felhasználásával egy réteg kimenetének kiszámítása a

$H^{(i+1)} = \sigma(H^{(i)} * W^{(i)} + B^{(i)})$ egyenletre redukálódik, ahol a σ függvény az elemenként alkalmazott aktiválási függvényt jelöli, a többi művelet pedig mátrixműveleteket. Ebben a formában a bemenetet a nulladik réteg kimenetének tekintjük. Egyes speciális rétegek ettől a számítási módtól néha kis mértékben eltérnek (például konvolúciót alkalmaznak mátrix szorzás helyett).

Tanulás

Neurális hálózatok architektúrája leggyakrabban emberi munkával készül el. Van példa arra is, hogy jól működő (a célnak megfelelő pontosságú eredményt adó) neurális hálózatok paramétereit is emberi erővel vagy egyszerű konstruktív szabályokkal állítanak be, azonban ezek a megoldások szélsőséges esetekben, kis méretű hálózatokon szoktak működni. A paraméterek automatikus konfigurálását szokás a hálózat tanításának nevezni, míg az erre alkalmazott algoritmus paramétereit hiperparaméternek. Számos ilyen algoritmus létezik, azonban manapság a sztochasztikus gradiens leszállás variánsait szokás használni. Az SGD-alapú tanulás során véletlenszerű módon inicializáljuk a paramétereket, ami után a tényleges tanulás a kimenetre alkalmazott költségfüggvény segítségével történik, melynek függvényében módosítjuk a hibás (rossz eredményre jutó) paramétereket. Különösen nehéz értékelni, hogy egy rossz kimenethez egy adott paraméter mennyire járult hozzá, azonban itt nem térünk ki az erre alkalmazott módszerekre. A tanításnak lehetnek másodlagos követelményei is, mint például a kapott paraméterek komplexitásának (értékskálájának) csökkentése. Fontos kiemelni, hogy nem mentesek a gradiensalapú megoldások a problémáktól (kezdvé a paraméter/kimenet hozzárendelési problémától, a szükségszerűen differenciálható költségfüggvényen át, a deriválhatósági szempontból megfelelő inicializálási módszerekig bezárólag), és egyáltalán nem csak ilyen tanulóalgoritmusok léteznek. Evolúciós algoritmusok hatásfokát a neurális hálózatok tanításának kontextusában már számos szerző vizsgálta, illetve javította [41, 42]. Bár ígéretes eredményeket érhetők el genetikai algoritmusokkal, és nem is szükséges hozzá, hogy deriválható költségfüggvényt alkalmazzunk, de - egyelőre - ez a módszer nem terjedt el széles körben, azonban - neuroevolúció néven - virágzó szakterületté nőtte ki magát a problémakör.

2.3.4. Gráf konvolúciós neurális hálózatok

Említés szintjén láttuk, hogy lokális információk összegzésére konvolúciós rétegek alkalmasak. Mivel gráfokon létezik távolságfogalom, ezért elméletben a körökben is alkalmazható ugyanez az elv. A sztenderd konvolúciós hálózat bemenete azonban egy olyan tenzor (azaz, a mi szempontunkból, egy tetszőleges dimenziószámú mátrix), amelyben a lokalitás a tenzoron egyes elemei közti távolságon alapszik. Az általunk látott gráfrepresentációk (incidencia mátrix, adjacencia mátrix stb.) izomorf gráfot ír le akkor is, ha ugyanazt a permutációt alkalmazzuk a sorokra, mint az oszlopokra, tehát a mátrixon belüli közelség irreleváns.

Laplacian

A jelfeldolgozás és gráfmélet határmezsgyéjén fekvő spektrális gráfanalízis területe azonban már évtizedekkel ezelőtt kidolgozott egy olyan, Laplace-mátrixnak (vagy csak Laplaciennek) nevezett - reprezentációt[43], amely sajátértékeiben független a csúcsok sorrendjétől.

25. Definíció. A $G = (V, E)$ gráf **fokszám-mátrixaként** vagy **degree matrixaként** ismerjük azt a $D_G^{|V| \times |V|}$ négyzetes mátrixot, amelyre a diagonális elemeit a $d_{i,i} = \text{degree}(v_i), i = 1, \dots, |V|$ képlet alapján kapjuk, minden egyéb eleme pedig 0.

26. Definíció. A $G = (V, E)$ gráf **szimmetrikusan normalizált Laplace-mátrixa** az $L = \sqrt{\text{inv}(D)} * A * \sqrt{\text{inv}(D)} = I - \sqrt{\text{inv}(D_G)} * A_G * \sqrt{\text{inv}(D_G)}$, ahol D a G gráf degree mátrixa, inv a mátrixinverz függvény, a gyökvonás elemenként értendő, a szorzás mátrixszorzás, az A_G az adjacencia mátrix és I a megfelelő méretű egységmátrix.

Megjegyzés. Egy másik Laplacian-variáns, a random walk (normalized) Laplacian is népszerű, azonban a továbbiakhoz nem szükséges a kettő közti különbséget mélyebben átlátni.

A Laplace-mátrix továbbra sem lesz független a gráf csúcsainak sorrendjétől, azonban egyrészt reflektálja azokat a szerkezetet, másrészt a sajátértéke már független a csúcsok permutációjától.

Számítási szabály

Bár a neurális hálók gráfjellegű adatokra való adaptációjára már korábban is voltak kísérletek[44, 45], napjainkban a - Welling és társa által kidolgozott - Laplace-mátrixon alapuló variáns[46] a leginkább elterjedt. Wellingék azt ismerték fel, hogy a megelőző réteg kimenete egy impulzusmátrixként is felfogható, amin - korábbi eredményekre hagyatkozva[47] - a Laplacian gráfalapú (spektrális) szűrőként funkcionál. Mivel ez a szűrő csak egy adott él környezetének megfelelő impulzusokat összegzi, ezért a számítás során nem az eredeti gráfot használják, hanem aszerint módosítják először, hogy minden csúcs egy hurokéllal rendelkezzen. A neurális rétegekről szóló fejezetben látottaknak megfelelően tudjuk, hogy általában $H^{(i+1)} = \sigma(H^{(i)} * W^{(i)} + B^{(i)})$ szabály segítségével kapható meg egy réteg kimenete. A Welling-féle gráf konvolúciós réteg (GCN) ezzel szemben a $H^{(i+1)} = \sigma(\tilde{L} * H^{(i)} * W^{(i)})$ szabályt alkalmazza, amelyben \tilde{L} jelöli a hurokélekkel ellátott G gráf Laplace-mátrixát, azaz az $\tilde{A} = A_G + I$ adjacencia mátrix segítségével kapott Laplaciant. Mint látjuk, a biasok itt elhagyásra kerülnek, amit viszont azzal ellensúlyozunk, hogy \tilde{L} csak és kizárólag a lokális információk szűri ki.

A GCN-nek különösen alkalmasak gráfcímkezési és klaszterezési problémák megoldására, akár alig néhány réteg használatával is.

2.3.5. Hipergráf konvolúciós neurális hálózatok

Hipergráfok esetén már régóta vizsgált probléma, hogy hogyan lehet úgy általánosítani a gráfokon alkalmazott Laplaciant, hogy az minél több tulajdonságát megőrizze. Régebbi eredmények mindössze a hipergráfok speciális részosztályain voltak képesek ezt megvalósítani[48, 49], azonban egy 2015-ös cikkben[50] sikerült áttörést elérni, és egy általánosan alkalmazható definíciót bevezetni. A konstrukciós módszer bizonyos hiányosságait aztán 2018-ban Chan és társai tárták fel, illetve javították[51].

Ez a két eredmény lehetővé tette, hogy a GCN rétegekhez hasonló megoldásokat defináljunk hipergráfok esetében. Először Feng és társai vetették fel, hogy a hipergráfokon értelmezett Laplace-mátrix alkalmazható GCN-szerű megoldásokra[52], azonban módszerükhöz szükséges egy olyan gráf létrehozása, amelyben minden hiperél

klikként van reprezentálva. Nem sokkal később Yadati és társai több kisebb komplexitású metódust is felvetettek[53], amelyek - az eredményeik alapján - rövidebb tanítási időt igényel, de összemérhető vagy jobb eredményeket érnek el az általuk vizsgált problémán. Az általuk bemutatott módszerek (tudatosan) figyelmen kívül hagyták a feltárt Laplacian-konstruálási hibákat, azonban ez nem okozott problémát sem valós, sem szintetikus adatok esetében. Bandyopadhyay-ék egyszerűen a hipergráf line graph-ján futtatott GCN rétegekkel értek el ígéretes eredményeket[54]. A terület legújabb eredménye Tranék cikke[55], amelyben (általunk nem definiált) irányított hipergráfokra is kiterjesztik a módszert.

Hipergráf Laplacian

Az alábbiakban áttekintjük a hipergráf Laplacian konstrukciós szabályát, ahogy azt az első, Chang-féle cikkben alkalmazták[50].

Adott $H = (V, E)$ hipergráf és $X \in \mathcal{R}^{|V|}$, véletlenszámokat tartalmazó vektor.

1. Minden $e \in E$ hiperél esetén legyen $\{i_e, j_e\} = \operatorname{argmax}_{i, j \in X} (|X_i - X_j|)$, a döntetlenek esetén véletlenszerű választással.
2. Hozzunk létre egy $G_X = (V', E')$ irányítatlan, súlyozott gráfot, amelyben $V' = V$ és $E' = \{\{i_e, j_e\} | e \in E\}$, továbbá $w(\{i_e, j_e\}) = w(e)$. G_X minden v csúcsához adjunk egy hurokélet, amelyre $w(v, v) = \operatorname{degree}(v) - \sum_{e \in E: v \in \{i_e, j_e\}} w(e)$.
3. Jelölje az A_X azt a mátrixot, amit G_X -ből, ha minden sort leosztunk az adott sornak megfelelő csúcs fokszámával.
4. Egyszerű gráfokhoz hasonlóan a szimmetrikusan normalizált hipergráf Laplaciant az $L = (I - \sqrt{\operatorname{inv}(D)}) * A_X * \sqrt{\operatorname{inv}(D)})$ képlet adja, azonban a konvolúciós réteg alkalmazása során A_X helyett az $\tilde{A} = A_X + I$ mátrixot használjuk.

3. fejezet

Saját eredmények

3.1. Vizsgált módszerek

3.1.1. Euler-diagram reprezentáció

Láthattuk, hogy Euler-diagramok reprezentálhatók Bézier-görbékkel, körökkel, ellipszisekkel és poligonokkal is, azonban bizonyos esztétikai vagy szemantikai kritériumok betartása mellett (lásd well-formed kritériumok) nem minden hipergráf rajzolható ki. A korábbi eredményekkel összhangban ezért itt az Általános megoldás eléréséhez mindenképp egy olyan modell bevezetése szükséges, amely egyszerre képes kezelni az ismert esztétikai metrikákat, így például kompakt módon, egyetlen görbével reprezentálni egy halmazt, azonban mikor ez nem lehetséges, akkor - bár komplexebb diagramok használatával - továbbra is megfelel az elvárt szemantikai követelményeknek. Fogalmi szinten ennek természetesen megfelel az Általánosított Euler-diagram definíció. Ennek a definíciónak a használatával viszont további kérdések merülnek fel. Mivel zárt görbék segítségével írtuk le a fogalmat, ezért kérdéses, hogy magukat a görbéket hogyan ábrázoljuk a memóriában, illetve olyan reprezentációra lenne szükség, ami lehetőleg flexibilis, kevés paraméterrel leírható és tetszőleges számú régióra tud bontani egyetlen görbét, kis számítási igény mellett.

Definíció

Az általam választott reprezentáció csúcsalapú, amelyben az egyes görbéket a hiperéleket alkotó csúcsok részhalmazainak konvex burka adja. Vegyünk minden

csúcs esetén egy háromelemű vektort, amely tartalmazza a csúcs x és y koordinátáit, illetve egy d -vel jelölt értéket, azaz egy $X \in \mathcal{R}^{|V| \times 3}$ mátrixot. Minden e hiperélhez rendeljük egy G_e gráfot, amelynek csúcshalmaza megegyezik a hiperél csúcshalmazával, tetszőleges $u, v, u \neq v$ csúcsa között pedig akkor fut él, ha $distance(u, v) \leq \min(u_d, v_d)$, ahol a $distance$ függvény tetszőleges távolságmérika lehet (én az implementáció során az L^2 normát használom). A G_e gráf összefüggő komponensei particionálják a hiperél elemeit. Az egyes partíciók - melyeket én a hiperél/görbe **szegmenseinek** fogok nevezni - konvex burkát véve a hiperél(et reprezentáló görbe) több zárt poligonra bomlik szét, így általánosított Euler-diagramot reprezentál. A reprezentáció előnye, hogy tetszőleges számú nem-üres komponensre bontható vele mindegyik él, illetve az egyes görbék az általuk tartalmazott csúcsok számával arányos komplexitással bírnak.

Megjegyzés. *A továbbiakban Seg_e -vel jelölöm az e hiperél összes szegmensének halmazát.*

Nem minden esetben előnyös a konvex burok alkalmazása, hiszen egy szegmensben tartalmazott egyetlen csúcs esetén nem jelenne meg az az információ, hogy melyik (ha bármelyik) hiperél tartalmazza azt. A két csúcs esetén előforduló hasonló helyzetben pedig a konvex burok egy egyenest adna, amely feltehetőleg nem látható eléggé. Ebből az okból kifolyólag egy elvárt minimum távolságot, r -et is elvárunk a probléma definiálása során. Egy csúcs esetén konvex burok helyett az r sugarú kört, míg két csúcs esetén a két csúcs körüli r sugarú köröket, és azok konvex burkát együttesen tekintjük a szegmenst tartalmazó görbének, ahol r alatt .

Megjegyzés. *Nem garantált, hogy az elvárt minimális távolság teljesüljön a végső megoldásban, ekkor átfedő görbéket kapunk, amik szemantikai problémákhoz vezethetnek. Az egyetlen valós alternatíva, hogy r -et a konkrét csúcs-távolságok minimumaként definiáljuk, azonban ekkor szintúgy problémákba ütközünk, ha több csúcs is egy pontba esik.*

Megjegyzés. *Az elfajuló esetet, mikor egy egy vagy két csúcsú szegmens egy nagyobb csúcsszámúból úgy alakul ki, hogy a csúcsok egy pontba esnek, nem kezelem külön. Bár ez valószínűleg előnyös lenne, azonban felvet olyan értelmezési kérdéseket, hogy az adott görbe hány csúcsot tartalmaz pontosan, mi a teendő, ha az egyik*

egy él egyedüli eleme és így tovább. Mivel ez az eset alapvetően kevésbé valószínű, ezért ezeknek a kérdéseknek a megválaszolását inkább elkerültem, azonban egy későbbi kutatás célja lehet.

Futásidő és memóriaigény

Figyeljük meg, hogy egy adott gráf tetszőleges csúcsának elhagyásával egy korábban összefüggő komponens előfordulhat, hogy két részre esik, azonban ez nem szükségszerű. Az előző okból kifolyólag minden hiperélre külön kell létrehozunk a G_e gráfot. Az egyes G_e gráfok akár minden e hiperél esetén tartalmazhatják az összes csúcst, ezért feltehetjük, hogy a csúcsszáma megegyezik a hipergráféval. A hiperélenkénti teljes gráf létrehozásának költsége $\mathcal{O}(|E_H| * |V_H|^2)$, ahol a $H = (V_H, E_H)$ hipergráfot vizsgáljuk. Minden $G_e = (V_G, E_G)$ gráf esetén egy bejárást kell lefuttasunk, ami $\mathcal{O}(|V_G| + |E_G|) = \mathcal{O}(|V_G| + |V_G|^2) = \mathcal{O}(|V_G|^2) = \mathcal{O}(|V_H|^2)$ futásidővel bír, azaz a teljes futásidő továbbra is $\mathcal{O}(|E_H| * |V_H|^2)$.

Mivel a csúcsonkénti x és y koordináták, illetve a d távolság alkotja a modellt, ezért a memóriaigény $3 * |V| \in \mathcal{O}(|V|)$.

Megjegyzések

Csúcsok ábrázolása eredetileg nem része az Euler-diagramoknak, azonban a pozíciójuk tartalmazhat információt (esetleg használhatunk glyph-jellegű ikonokat is), így akár átértelmezhetik az ábra szemantikáját (például a létrejöttükkel engedélyezhetjük üres halmazok megjelenítését). Az általam használt módszer alkalmas csúcsok kezelésére, hiszen a modellben mindegyik konkrét pozícióval rendelkezik, viszont konkrétan a görbék határolóegyenesén is elhelyezkedhetnek (hiszen az ő konvex burkokat használjuk görbék leírására). Amennyiben a csúcsok megjelenítése is célunk, akkor érdemes lehet utólagos lépéseket alkalmazni a görbékre (vagy a széleken elhelyezkedő csúcsok pozícióra), de a csúcsok elrejtése is megoldás.

A továbbiakban azt is érdemes lehet megvizsgálni, hogy nem csúcsonkénti, hanem globális vagy hiperélenkénti d értékek használatával mennyire romlik tanulási/optimalizálási idő, illetve az elérhető legjobb költségfüggvény.

3.1.2. Optimalizációs módszerek

A kísérletek során optimalizációs módszerek több kategóriáját hasonlítom össze; a particle swarm optimization (PSO) nevű módszert, illetve a genetikus algoritmus (GA) különböző variánsait. Bár - szigorúan véve - nem optimalizációs módszer, de itt fogom vizsgálni a költségfüggvény neurális hálókkal való közelítését is, amely célból hipergráf konvolúciós hálózatokat (HCNN) próbálok ki.

Particle swarm optimization

Az első algoritmus során van a legegyszerűbb dolgunk, mivel az eredeti - a 2.3.1 fejezet 3. számú pszeudokódjaként bemutatott - módszert egyáltalán nem módosítottam. Amennyiben az Euler-diagramot reprezentáló $X \in \mathcal{R}^{|V| \times 3}$ mátrixot sor- vagy oszlopfolytonosan adjuk meg az eljárásnak, viszont feltételezzük, hogy a költségfüggvény is ilyeneken operál, akkor az eredeti megoldás tökéletesen fedi a mi esetünket is.

Genetikus algoritmus

Emlékezhetünk a 2.3.1 fejezetből, hogy a GA pszeudokódja (lásd 1. pszeudokód) nem teljeskörűen kidolgozott. Bár az egyes lépések - mint szelekció, kereszteződés és mutáció -, meghatározhatók általánosan is, de gyakran inkább problémaspecifikus definíciót alkalmazunk. Mivel a modellben az egyes gének nem függetlenek egymástól - amennyiben egy csúcs x és y koordinátáját nincs értelme külön kezelni -, ezért én olyan módon határoztam meg az algoritmus szóban forgó lépéseit, amik ezt a tulajdonságot figyelembe veszik. Mint látni fogjuk a 3.1.4 fejezetben, a költségfüggvényt alkotó heurisztikák direkt úgy lettek kialakítva, hogy - amelyik esetben ez lehetséges - hiperélenként számítják a költséget, amelyek aggregációjaként számítjuk a globális költségfüggvényt. Ez a számítási mód lehetővé teszi, hogy a GA során akár tetszőleges értékeket, akár hipercsúcsokat vagy hiperéleket tekintsünk a legkisebb értelmes egységnek, amelyet örökölni lehetséges. Ennek megfelelően három különböző GA variánst hoztam létre, melyeket rendre naív GA, csúcsalapú GA és élapú GA névvel fogok illetni.

A születést/halált modellező szelekciós függvényt és a szülők kiválasztását (melyek az eredeti leírásban együttesen *selectFitnessProportionally* néven,

population, *fitnessValues*, *parentNumber* paraméterekkel szerepeltek) két lépésre bontottam.

4. Algoritmus Szelekció

Function selection(*population*, *fitnessValues*, *parentNumber*)

- 1: *worstIndividuals* = *parentNumber* db. legrosszabb értékkel bíró egyed *lecseréljük új egyedekre*
 - 2: *population* = *population* \ *worstIndividuals*
 - 3: *population* = *population* \cup *generateFeasibleSolutions*(*parentNumber*)
 - 4: *fitnessValues* = *evaluateFitness*(*population*)
 - 5: *bestIndividuals* = *parentNumber* db. legjobb értékkel bíró egyed *kiválasztjuk a következő iterációban való megőrzésre*
 - 6: **return** *bestIndividuals*
-

5. Algoritmus Szülők kiválasztása

Function selectParents(*population*, *fitnessValues*, *parentNumber*)

- 1: *fitnessImpliedProbabilities* = (*fitnessValues* – *min*(*fitnessValues*))/*sum*(*fitnessValues*)
 - 2: **for** *i* = 1 . . . *parentNumber* **do**
 - 3: *parentIndices* = *fitnessImpliedProbabilities* alapú eloszlásból visszatevés nélkül kettő minta vétele
 - 4: *parentsRow* = *population*[*parentIndices*]
 - 5: *parents_i* = *parentsRow*
 - 6: **end for**
 - 7: **return** *parents*
-

A *recombine* (máshol gyakran *crossover* névvel illetett) függvény a kiválasztott szülőket kapja meg paraméterként, és kombinálja a génállományukat. Az itt tárgyaltak közül ez a legfontosabb függvény, mivel ez különbözteti meg a három variáns működését. A naív GA esetében nem is részletezem pseudokódban a működést, mivel a leszármazottak összeállítása mindössze annyiból áll, hogy egyenletes eloszlás szerint kiválasztjuk a gének felét, melyeket az első szülő génállományából másolunk le, a többit pedig a másodikéból. Csúcsalapú GA-nél mindössze annyiban térünk

el ettől, hogy az x, y és d értékeket közösen tekintjük egy génnek, így ezek mindig együttesen öröklődnek egy szülőtől (továbbra is fele-fele arányban).

Élalapú GA esetében természetesen az egyes egyedekhez nem elég egyetlen fitness értéket nyilvántartani, hanem a - ahol értelmezett úgy - minden egyed minden élére szükséges azt tárolni. Az élalapú megoldás esetén a *recombine* függvénynek ezek az élalapú fitness értékek is bemenetei, melyeket az $edgewiseFitness \in \mathcal{R}^{|population| \times |E|}$ változó tartalmának tekintünk ($H = (V, E)$ esetén), illetve megkapja a hipergráf incidencia mátrixát is. A szóban forgó eljárás során továbbra is egy x, y, d hármast tekintünk génnek, így ezek csak együtt örökölhethetők, azonban egy gén szülőjének kiválasztása a korábbiaktól eltérő módon történik. Az egyes csúcsokhoz mindkét szülő esetén külön-külön meghatározzuk, hogy az adott csúcsot tartalmazó éleknek mennyi az átlagos fitness értéke. Az öröklődés során kiválasztjuk azokat a géneket (azaz csúcsenkénti x, y, d értékhármasokat), amelyeknek ez az átlagolt értéke nagyobb az első szülőben. A kiválasztást úgy módosítjuk, hogy mindig fele-fele arányban örököljünk a két szülőből. Ehhez a két átlagolt érték különbségét vesszük, és azokkal bővítjük/-csökkentjük az első szülőből átvett értékeket, amelyek a legkisebb eltérést mutatják. Így elveszíthetjük a legjobb értékek öröklését, azonban csak akkor, ha a másik szülő többi génjében nagyobb lenne a fitness értékben beállt veszteség.

A mutációt az új populáción alkalmazott normális eloszlású zajjal modellezzük, amelynek az átlaga nulla, a felső értéke a *mutationRate* változó.

Hipergráf konvolúciós hálózat

A neurális hálózaton alapuló megoldás esetében fontos felismernünk, hogy nem egy direkt optimalizációs megoldásról beszélünk. Függvényapproximációs módszerként itt nem egyetlen hipergráf legjobb elrendezését szeretnénk megkapni, hanem hipergráfok egy egész - azonos csúcs- és élszámú - családját szeretnénk leképezni (problémapéldányonként) különböző megoldásokra. Ez sajnos (nagyságrendekkel) lassabb tanulási idővel jár, és elkerülhetetlen a vizsgálandó hipergráfok köréből minél több legenerálása, amely alapján a hálózat betanítható. A hátrányok mellett a módszer természetesen előnyökkel is rendelkezik; a modellt elég egyszer betanítani, onnantól közvetlenül alkalmazható tetszőleges hipergráf Laplace-mátrixára.

A korábbiakban már bevezettük mind a hipergráf Laplaciant (2.3.5 fejezet), mind

a gráf konvolúciós neurális hálózatokat (2.3.4 fejezet). Ahogy láttuk, több módszer is definiált hipergráf konvolúciós hálózatokra létrehozására. A kísérleteim során egy egyszerű variánst választottam ezek közül, amely megegyezik a GCN számításával, azonban a Laplace-mátrixot lecseréljük a hipergráf Laplacianjára. A módszer nem csak intuíción alapuló kísérlet, Yadatiék cikkében[53] a FastHyperGCN nagy hasonlóságot mutat vele, mindössze én nem alkalmazok mediátorokat (máshogy súlyozom a Laplacian éleit).

A tanítás természetesen nem SGD alapú, hiszen a költségfüggvénytől nem várjuk el, hogy deriválható legyen, így a naív GA eljárást választottam a neurális háló betanítására. Mivel a gráf és hipergráf konvolúciós hálózatokkal foglalkozó cikkek jellemzően kettő rétegű architektúrát alkalmaznak[46, 53], ezért én sem fogok mély hálózatokkal kísérletezni. Az egyes rétegekhez relu ($f(x) = \max(0, x)$), sigmoid ($f(x) = e^x / (e^x + 1)$) vagy softmax ($f_i(x) = e^x / \sum_{i=1}^n (e^x)$) aktiválási használok (ahol emlékezzünk, hogy az aktiválási függvény minden neuron kimeneti értékére külön-külön számítható), azzal a kikötéssel, hogy az utolsó réteg nem lehet relu (mivel nem szorítaná az értékeket 0 és 1 közé). Neurális hálók tanítása során kevésbé látható át, hogy az egyes paraméterek hogyan befolyásolják a végeredményt, azonban közismert, hogy a paraméterek nagyságrendjének növekedése negatívan befolyásolja a hálózat tanulásának sebességét[56]. Ebből az okból kifolyólag a paramétereket kis értékekkel ($\text{mean} = 0, \sigma^2 \in (0, 1], \theta = (\text{mean}, \text{var})$ paraméterű normális eloszlással) inicializálok, ami után a hálózat sekélyisége biztosítja, hogy relu esetén se kapjunk nagy értékeket (ezért regularizációt nem alkalmaztam).

3.1.3. Inicializációs módszerek

A bemutatott algoritmusok során többször előfordul, hogy új megengedett megoldásokat kell generálnunk. Tekintve, hogy ezeknek a minősége nagyban befolyásolja a futás során elérhetőket, ezért különösen fontos kérdés, hogy kezdeti értékeket hogyan számítjuk ki. Ebből a célból a dolgozatban több módszert is vizsgálok a megoldások inicializálására, melyeket ebben a fejezetben részletezek.

Egyenletes eloszlás alapú inicializálás

A legegyszerűbb - és az optimalizációs algoritmusok eredeti leírásában általában alkalmazott - módszer, hogy a modell minden dimenziójához megadunk egy alsó és felső értéket, majd az inicializálás során a kettő közötti egyenletes eloszlás szerint választunk új értéket. A mi esetünkben az x és y koordináták felső határát az alkalmazott képméret adja meg, míg a d esetében akkor kapjuk a legnagyobb értelmes számot, ha a két átellenes csúcs távolságát nézzük, amely Pitagorasz-tétellel megkapható. Az alsó korlátok természetesen minden esetben nullával egyeznek meg.

Élenkénti inicializálás

Ennek az inicializálási módszernek a során először az élek pozícióit határozzuk meg (az egyenletes eloszlás alapú inicializálás szerint), majd az egyes csúcsokat az őket tartalmazó élek átlagaként értelmezzük. A d értékek ettől függetlenül, csúcsonként számíthatódnak ki. A mögöttes feltetelezés, hogy így olyan klaszterek alakulnak ki, amely egy-egy csúcs összes élet tartalmazza.

Erőalapú gráfelrendezés szerinti inicializálás

Egy hipergráfot leírhatunk leírhatunk gráfszerű struktúrákkal is (pl. a 2.2.1 fejezetben bevezetett bipartite incidence structure vagy szuperduális segítségével). A hiperélek klikkekre való cserélése első ránézésre ilyennek tűnhet, azonban figyeljük meg, hogy elveszik az az információ, hogy pontosan melyik hiperélből származik a két csúcs közötti él. Amennyiben továbbra is előző módszernél bevezetett megfontolásból indulunk ki (azaz a szomszédok valamiféle átlagolásával elérhető klasztereket szeretnénk), akkor azonban az így elvesző információ egyáltalán nem is szükséges. Tekintsük azt a fizikai szimulációt, amelyben a nem szomszédos csúcsok taszítják, a szomszédosak pedig vonzzák egymást. Ekkor a rendszer egyensúlyi helyzetei felfoghatók a ilyen átlagolásként is. Az így leírt módszer pontosan a force-directed gráf-kirajzoló módszerek (lásd 2.2.2) egy speciális esetét írja le. Az általam használt konkrét eljárás a Fruchterman-Reingold módszer[8], amelyet (a cikkből átemelve) alább láthatunk.

6. Algoritmus Fruchterman-Reingold

Function layout($Canvas = (width, height)$, $G = (V, E)$, $iterations$)

```

1:  $k = \sqrt{width * height / |V|}$ 
2:  $t = \sqrt{width^2 + height^2}$  lehetséges maximum (a cikkben nem definiált)
3: for  $i = 1 \dots iterations$  do
4:   for  $v \in V$  do taszítóerők kiszámítása
5:      $v.disp = 0$ 
6:     for  $u \in V$  do
7:       if  $\{u, v\} \notin E$  then
8:          $v.disp = 0$ 
9:          $\Delta = v.pos - u.pos$ 
10:         $v.disp = v.disp + (\Delta / |\Delta| * k^2 / |\Delta|)$ 
11:      end if
12:    end for
13:  end for
14:  for  $v, u \in E$  do vonzóerők kiszámítása
15:     $\Delta = v.pos - u.pos$ 
16:     $v.disp = v.disp - (\Delta / |\Delta| * |\Delta|^2 / k)$ 
17:     $u.disp = u.disp + (\Delta / |\Delta| * |\Delta|^2 / k)$ 
18:  end for
19:  for  $v \in V$  do
20:     $\Delta = v.pos + (v.disp / |v.disp| * \min(v.disp, t))$  t szerint maximáljuk az
    elmozdulást
21:     $v.pos.x = \min(width/2, \max(-width/2, v.pos.x))$  nem engedjük túlfutni a
    kép szélén
22:     $v.pos.y = \min(height/2, \max(-height/2, v.pos.y))$ 
23:  end for
24:   $t = cool(t)$  csökkentjük a maximális lehetséges elmozdulást
25: end for

```

Az algoritmus során kezdetben egyenletes eloszlású véletlen $v.pos$ értékeket tételezünk fel.

Megjegyzés. Mivel a szuperduális exponenciális méretű az eredeti hipergráfhoz ké-

pest, ezért a használatát a teljes kutatás során kerültem.

Hipergráf konvolúciós inicializálás

A HGCN módszernek megvan az az előnye, hogy tetszőleges - adott méretű - hipergráfon működik, azonban továbbra is csak egyetlen elrendezést rendel hozzánk, az inicializáláshoz szükséges variációkat nem szolgáltatja. Ez a probléma természetesen fennáll, ha a tanítás során mindössze egyetlen modellt (neurális hálót) optimalizálunk (például SGD esetén), illetve akkor is, ha csak a betanított neurális hálót tartjuk meg. Mivel én genetikus algoritmust használok a tanítási folyamatra, ezért annak a végén a populáció számával megegyező számú különböző modellel is rendelkezésre áll. Ezeket elmentve és felhasználva - a populáció méretéig - a variációs kritériumot is tudjuk teljesíteni, így inicializációs módszerként is tud működni.

Súlyozott inicializálás

Mikor több, mint egy megoldást inicializálunk - azaz esetünkben mindig -, akkor megtehetjük, hogy az új elemek felét az egyik, felét egy másik inicializálási módszerrel definiáljuk. Ezt a módszert általánosíthatjuk tetszőleges számú inicializációs módszerre (amelyek esetleg csak a paraméterezésükben térnek el), illetve fele-fele bontás helyett tetszőleges súlyozásra is.

Távolságértékek statisztikai inicializálása

Minden korábbi módszer esetén a csúcsok pozicionálására koncentráltunk, a d értékek háttérbe szorultak. Ezt ellensúlyozandó az egyes módszerek során lehetőség van ezeket különböző módokon számítani. A fent bevezetett véletlenszerű módszeren kívül - a csúcsok koordinátáinak beállítása után - minden adott v csúcs d értékét beállíthatjuk a legközelebbi, legtávolabbi vagy átlagos szomszéd távolsága alapján, ahol minden csúcsot szomszédnak tekintünk, amellyel v közös hiperélben szerepel.

3.1.4. Heurisztikák

Az egyik legfontosabb tulajdonsága az általam használt Euler-diagram modellnek, hogy nem rigid szabályokon alapszik (például well-formed vagy well-matched

kritériumok teljesítésén), hanem súlyozható (és költségfüggvényként alkalmazható) mérőszámokon. A kapott ábrával szembeni elvárásaink természetesen sokrétűek lehetnek, azonban az irodalom áttekintése során láttuk, hogy egyes tulajdonságok több szerző szerint is segítik a végeredmény könnyebb értelmezését, emberi feldolgozását. A szabályalapú megoldásokat kiváltandó, az általam legfontosabbnak ítélt tulajdonságokat igyekeztem különböző heurisztikus mérőszámok segítségével leírni. A létrehozott heurisztikus módszerek, illetve egyáltalán az általuk leírt tulajdonságok köre is vitathatatlanul némileg önkényesen lettek meghatározva, azonban a dolgozat egyik fő célja pontosan annak kiderítése, hogy mennyire alkalmasak a vizsgált módszerek arra, hogy tetszőleges esztétikára szabva tudjunk hipergráfokat kirajzolni. Mivel kizárólag a költségfüggvényen alapszik a modell tanítása, ezért az magában kell foglalja a szemantikus információkat is, azaz hogy az ábrázolt csúcsok és görbék elhelyezkedése megfelel-e az Euler-diagram definíciójának. Bár ezutóbbi tulajdonság jóval fontosabbnak tűnhet, mint az esztétikai megfontolások, azonban könnyen előfordulhat például, hogy a hiperélek egymáshoz viszonyított relatív mérete jóval fontosabb információt hordoz a szemlélőnek, mint amit néhány csúcs rossz hiperélbe való helyezésével elveszít.

A heurisztikák által visszaadott mérőszámok persze nem alkalmasak arra, hogy önmagukban költségfüggvényként használjuk őket, hiszen csak egy-egy aspektusát vizsgálják az adott ábrának, ezért inkább veszteségfüggvényként, a költségfüggvény építőelemeként gondolhatunk rájuk. Ahogy már korábban is említettem, a heurisztikák direkt úgy lettek kialakítva, hogy ahol lehetséges hiperélenként is értelmezve (és tárolva) legyenek, a többi esetben pedig csak globálisan. Minden mérőszám a $[0, 1]$ intervallumból veszi fel az értékeit, ahol a 0 a legjobb, 1 a legrosszabb lehetséges érték. Ezzel a módszerrel kerültem el, hogy a különböző skálákból adódó értelmezés nehézség ellehetetlenítse az eredmények összehasonlítását. Igyekeztem a mérőszámokat úgy kilakítani, hogy ne csak a szélsőértékek legyenek felvehetők, hanem több diszkrét ugrás is legyen a két végpont között. Az ugrások jobban közelítenek egy folytonos függvénynek, amely többletinformációt szolgáltat az optimalizációs algoritmusok számára, hogy a paraméterek adott irányú elmozdulása pozitívan befolyásolja-e a költségfüggvényt. Kísérleteim során azonban közvetlenül is vizsgálni fogom, hogy csak a szélsőértékek használata (azaz gyakorlatilag szabályok elvárása) ténylege-

sen negatívan befolyásolja-e az algoritmusokat. A költségfüggvény kiszámításához hiperélenként súlyozva összeadjuk az arra alkalmas heurisztikák eredményét, majd ezek átlagához hozzáadva a csak globálisan értelmezettek eredményét, megkapjuk az aggregált, végső értéket. Ezek a súlyok a felhasználó által meghatározhatók, így a költségfüggvény egy paraméteres függvény.

Megjegyzés. Operálhatnának azzal a feltételezéssel a heurisztikák, hogy az ábra tere $[0, 1] \times [0, 1]$ -en értelmezett, majd a végfelhasználó átméretezhetné ezt a saját igényeinek megfelelően. Mivel az ábrák szélessége és magassága jellemzően nem $1 : 1$ arányú, ezért ezzel olyan torzítást is bevezetnénk, amely nem jelenik meg a modellben. Ezt elkerülendő a költségfüggvény, így a heurisztikák is paraméterként megkapják, illetve hozzáférnek az ábra szélesség/magasság attribútumához.

Megjegyzés. A szemfüles olvasónak feltűnhet, hogy a genetikus algoritmust végig úgy tárgyaltam, hogy maximalizálási feladaton operál, azonban a költségfüggvényt egyféleképp definiálom itt. Ez a tényleges megvalósítás során nem okozott problémát, mivel pontosan ebből a célból magát a genetikus algoritmust minimalizációs eszközként alkalmaztam.

Szemantikus heurisztikák

Elnevezés	Leírás
<i>Hamis pozitív tartalmazás</i>	Egy adott v hipercsúcstól elvárjuk, hogy a neki megfelelő pont az ábrán ne szerepeljen egyetlen olyan hiperélt reprezentáló görbében sem, amely hiperél nem tartalmazza őt. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)
<i>Hamis negatív tartalmazás</i>	Egy adott v hipercsúcstól elvárjuk, hogy a neki megfelelő pont az ábrán szerepeljen minden olyan hiperélt reprezentáló görbében, amely hiperél tartalmazza őt. (Konstans szám.)

A hamis pozitív tartalmazást úgy vizsgálom, hogy minden e hiperél minden $Seg_j \in Seg_e$ szegmense esetén egy hibásan tartalmazott csúcs $dist(v, Seg_j)/(|\{v \in V | v \notin Seg_j\}| * \min(width_{Seg_j}/2, height_{Seg_j}/2) * |Seg_e|)$ mennyiséggel járul hozzá a

metrika értékéhez, ahol $dist(v, Seg_j)$ jelöli egy belső csúcs távolságát a poligon széleitől, $width_{Seg_j}$ és $height_{Seg_j}$ a szegmenst ábrázoló poligon befoglaló négyzetének megfelelő paramétereit (pixelben). A nevező tagjai normalizálják a szegmenseken és nem tartalmazott csúcsokon való iterálást, illetve a távolságot a szélektől. Mivel a konvex burok egy belső pontjának a szélektől való legnagyobb lehetséges távolságának meghatározása nem triviális, ezért azt a befoglaló négyzettel közelítjük, amely felülről becsüli azt. Ez természetesen azt jelenti, hogy nem feltétlenül érhető el az (legrosszabb) 1 veszteségfüggvény-érték, viszont az továbbra is a $[0, 1]$ intervallumból fog kikerülni.

Hamis negatív tartalmazás a mi esetünkben nem fordulhat elő, hiszen a csúcsok konvex burkait használjuk, amely szükségszerűen tartalmazza az őt kifeszítő pontokat. Ebből kifolyólag ez a mérőszám csak a teljesség kedvéért (illetve az esetleges modellcseré miatt) került be, azonban esetünkben konstans 0 értéket kap.

Megjegyzés. *Konvex poligonok esetén egy pont tartalmazásának a vizsgálata $\mathcal{O}(\log(n))$ időben elvégezhető[57].*

Esztétikai heurisztikák

Elnevezés	Leírás
<i>Körszerűség</i>	A szimmetriát, speciálisan a körhöz való hasonlóságot értékeli. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)
<i>Szegmensek száma</i>	Bünteti a szegmensek számának növelését. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)
<i>Szegmensek mérete</i>	Előnyben részesíti az azonos méretű szegmenseket. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)
<i>Minimum távolság fenntartása</i>	A csúcsok közti távolságok minimumát igyekszik a célérték fölé tornászni. (Globálisan értelmezett mérőszám.)
<i>Minimum távolság előfordulása</i>	Csökkenti a célszám alatti csúcstávolságok előfordulásának számát. (Globálisan értelmezett mérőszám.)

<i>Területarányosság</i>	Egy adott hiperélet reprezentáló görbék területének az ábra teljes méretével vett arányát közelíti az általa tartalmazott csúcsok számának az összes csúccsal vett arányához. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)
<i>Szegmensmetszetek száma</i>	Minimalizálja a görbék metszeteit. (Globálisan értelmezett mérőszám.)
<i>Invalid szegmensmetszetek száma</i>	Minimalizálja a metszettel nem rendelkező éleket reprezentáló görbék metszeteit. (Globálisan értelmezett mérőszám.)
<i>Legközelebbi szomszéd élszomszéd</i>	Támogatja, hogy egy csúcs legközelebbi szomszédja közös élből származzon. (Hiperélekre értelmezett mérőszám.)

Számos Euler-diagramokat vizsgáló cikk koncentrált kifejezetten körök és ellipszisek által leírt halmazrendszerekre. Az egyszerű kezelhetőségen felül ez felveti annak a lehetőségét, hogy a szimmetrikus görbék ergonomiai előnyökkel járnak. A *köryszerűséget* (circularity) vizsgáló heurisztika a megjelenő poligonokat igyekszik közelíteni a körökhöz. Bár ez korlátozottan lehetséges (gondoljuk csak a három vagy négy csúccsal reprezentált polinomokra), azonban - a képfeldolgozás területén - létezik egy poligonnak pontosan ezt a tulajdonságát kifejező mérőszám. Alaktényezőnek (shape factor) nevezzük az $F = 4 * \pi * A / P^2$ számot, ahol A egy zárt poligon területét, P a kerületét írja le. Az általam használt mérőszámoknak megfelelően a $[0, 1]$ intervallumból veszi fel az értékeit, viszont 1 jelentvén, hogy tökéletes kör, míg attól távolodva egyre nagyobb az eltérés a „körségtől”. Mivel én pont fordítva vezettem be a skálát, ezért annak megfordítását az $1 - F$ képlettel kapjuk. Egy teljes hiperél értékét a $\sum_{Seg_j \in Seg_e} (1 - F(Seg_j)) / |Seg_e|$ normalizált összeggel kapjuk.

Egyik legfőbb célom volt, hogy általánosan alkalmazható Euler-diagram modellt dolgozzak ki, azonban a hiperélek több szegmensre bonthatósága növeli az ábra komplexitását is. Támogatandó az egyszerűbb(en értelmezhető) kirajzolásokat, szükséges a szegmensekre bontás büntetése. A *szegmensek számát* a hiperélenkénti $1 - 1/|Seg_e|$ mérték használatával igyekszem lesoorítani. Ahogy a szegmensek száma a végtelenbe tart, úgy ez az érték 1-hez konvergál, míg egyetlen görbéből álló él

esetén 0-t.

Nem tűnik az sem előnyösnek, hogy a szegmensek mérete nagyban ingadozzon. Amennyiben ezt támogatnánk, akkor a megnövekedhet a kevés csúcsot tartalmazó részhalmazok száma, ami megnehezítheti az egy halmazhoz tartozó görbék áttekintését. Hogy igyekezzünk elkerülni a kis csúcsszámú szegmenseket, minden e hiperélre kiszámítjuk a $\sum_{Seg_j \in Seg_e} ((|V_{Seg_j}|/|V_e| - 1/|Seg_e|)/|Seg_e|)$ értéket. A belső $(|V_{Seg_j}|/|V_e| - 1/|Seg_e|)$ szám megadja, hogy egy adott szegmens csúcsainak száma mennyire tér el a célként meghatározott egyenletes eloszlástól, míg a külső osztótényező a szumma normalizálásának feladatát látja el.

Egymáshoz túl közel kirajzolt csúcsok összezsúszhatnak a kirajzolás során, akár teljesen el is fedhetik egymást. Elkerülendő ennek az előfordulását, a kirajzoló algoritmus ismeretében meghatározhatunk egy olyan távolságot, amelyet az optimalizációs algoritmus aztán igyekszik minden csúcspár esetében biztosítani. Erre a célra hoztam létre a *minimum távolság fenntartása* heurisztikát, amelyet $1 - \min(\min_{actual}/\min_{target}, 1)$ -ként határoztam meg, ahol \min_{actual} a csúcsok között ténylegesen előforduló legkisebb távolság, míg \min_{target} a bemenetként megadott célszám. A korábbiakkal ellentétben ez egy globálisan, nem pedig hiperélenként értelmezett heurisztika. Amennyiben \min_{actual} nagyobb a célnál, akkor $1 - 1$ -ként értékelődik ki a függvény, azaz minimalizálási feladatban optimálisként. Ellenkező esetben egy lineáris függvényt kapunk 1 és 0 között, ahogy a tényleges minimum közelíti a célt. A globális heurisztikák nagyobb súllyal számíthatódnak a végeredménybe (hiszen nem átlagolódnak), azonban az optimalizációs algoritmus számára kevesebb információt szolgáltatnak, hogy mely irányba lehet érdemes folytatni a keresést.

Felmerül a kérdés, hogy mikor nagyszámú csúcspár távolsága van a kitűzött cél alatt, akkor hogyan ismerje fel az optimalizációs algoritmus, hogy ezek számát csökkenteni előnyös. *Minimum távolság előfordulásaként* hivatkozok arra a globálisan értelmezett arányszámra, hogy az összes lehetséges páron belül hány kisebb, mint \min_{target} , azaz $|\{\{u, v\} | u, v \in V, u \neq v, dist(\{u, v\}) < \min_{target}\}| / (|V| * (|V| - 1) / 2)$.

Az Euler-diagramok ergonómiáját áttekintő 2.2.4 fejezetben láthattuk, hogy a méretarányosság egy gyakran vizsgált tulajdonság a szakirodalomban. A fogalom azt írja le, hogy minden $Region_i$ régió esetén az $Area_{Region_i} / \sum_{Region_j \in Regions} (Area_{Region_j})$ arány azonos a - régiókon értelmezett

ω súlyfüggvény alapján megkapott - $\omega(Region_i)/\sum_{Region_j \in Regions}(\omega(Region_j))$ aránnyal. A ω függvény gyakran a tartalmazott csúcsok számát írja le. Mivel a régiók száma exponenciális lehet az élek számához képest, ezért csak nagyon kis példákön alkalmazzák közvetlenül ezt a fogalmat, módszerről-módszerre eltérő mérőszámokat alkalmazva. Az általam kialakított heurisztika során - amelyet *terület-arányosságnak* fogok nevezni - a polinomiális futásidő és a méretarányossági tulajdonság legalább részleges megtartása is a szemem előtt lebegett. Ennek megfelelően régiók helyett minden e hiperél esetén csak az azt alkotó szegmenseket vizsgálom a $\sum_{Seg_i \in Seg_e}(|Area_{Seg_i}/Area_{Canvas} - |V_{Seg_i}|/|V|/|Seg_e|)$ képlet alapján. A korábbiaknak megfelelően itt is egy célértéktől (a csúcsaránytól) való eltérést igyekszünk minimalizálni, egy normalizációs faktorról ($|Seg_e|$) leosztva. A méretarányossággal ellentétben itt a teljes ábra méretéhez viszonyítom a görbe területét, hogy ne fordulhasson elő, hogy az összes szegmens területarányosan, de az ábrának csak nagyon kis részterületén helyezkedjen el.

Ismert, hogy az egymást metsző görbék körül megnehezül az ábra értelmezése (gondoljunk csak gráfok síkbarajzolhatóságára). Érdekes ezért alacsonyan tartani a görbemetsetek számát, amihez a globálisan kiértékelt *szegmensmetsetek számát* minimalizáljuk. Természetesen minden olyan él tudja metszeni egymást, ami nem ugyanazon élből származik (azok közös konvex burkot alkotnának egyébként). Az elérhető metsetek száma $(\sum_{e \in E}(|Seg_e|)) * (\sum_{e \in E}(|Seg_e|) - 1)/2 - \sum_{e \in E}(|Seg_e| * (|Seg_e| - 1)/2)$, a különböző élekben lévő szegmensek metseteinek leszámllálása során ezzel osztunk le.

Invalid szegmensmetseteknek fogom nevezni azt az esetet, mikor két görbe úgy metszi egymást, hogy az általuk reprezentált hiperéleknek nincs közös eleme. Ezeknek a számának alacsonyan tartásával csökkenthetjük az üres metsetek létrejöttét az ábrán. A számítás hasonlóan történik az előző esethez, azonban a itt csak akkor számlálunk egy metsetéspontot, ha az invalid, illetve normalizációs faktort $(\sum_{e \in E}(|Seg_e|)) * (\sum_{e \in E}(|Seg_e|) - 1)/2 - \sum_{e \in E}(|Seg_e| * (|Seg_e| - 1)/2) - \sum_{e, e' \in E, e \neq e', e \cap e' \neq \emptyset}(|Seg_e| * |Seg_{e'}|)$ -nak választjuk, hiszen szomszédos élek szegmensei között sem fordulhat elő számlált metset.

Élmetseteket, így speciálisan a szegmensek metseteit kiszámítani különösen lassú művelet, melyet hasznos lehet inkább közelíteni. Az invalid szegmensmetsetek

közvetlen leszámlálása helyett egy alternatív heurisztikát is bevezettem, amely azt vizsgálja, hogy egy csúcs legközelebbi szomszédja szerepel-e vele közös hiperélben. A feltételezésem, hogy így ez megnehezíti az invalid metszetek létrejöttét, mivel nem hagyja, hogy nem szomszédos csúcsok ékelődjenek egy szegmens csúcsai közé. Ez természetesen csak egy hipotézis, amit a méréseim során külön vizsgálni fogok.

Összehasonlítás a szakirodalommal

Érdemes megvizsgálni, hogy a modell tulajdonságai, illetve a fenti heurisztikák mennyire felelnek meg a szakirodalomban megjelenő ergonómiai kritériumoknak.

Először a 2.2.4 fejezetben tárgyalt well-formedness, kikötéseit veszem végig. A WFC1 kritérium (a görbék nem metszik önmagukat) mindenképp teljesül, hiszen az egyes görbék konvexek, míg a modellt direkt úgy alkottuk meg, hogy a WFC6 (nem rendelkezik két görbe azonos címkével) ne legyen elvárás (így az sem teljesül). Részben függ a kirajzolástól a WFC2 (nincs görbéknek közös határolószakasza) és WFC4 (két görbe metszi egymást, ha érintkezik). Ezekben az esetekben ugyanis a konvex burkok megnövelhetők a csúcsok közti minimális távolság felével, ami szemantikailag nem változtatja meg az ábrát (hiszen mindegyik görbe ugyanazokat a csúcsokat fogja tartalmazni), viszont minden közös határolószakaszt metszetté alakít. Ezzel szemben sem a modell, sem az alkalmazott heurisztikák nem fedik le a WFC3 (nincs pont, ahol három él érintkezik) és WFC5 (minden zóna egyetlen minimális régióból áll, azaz részhalmazok nem üres metszete pontosan egy összefüggő síkpartícióval van reprezentálva) kritériumokat, bár a szegmensek számának csökkentése áttételesen segítheti a WFC5 kitételt. Jegyezzük meg, hogy bár széleskörűen alkalmazott a well-formedness kritériumrendszer, azonban az empirikus kísérletek nem támasztották alá a hasznosságát.

Nem mondható ez el a - ugyanott tárgyalt - well-matched követelményekről, amelyről az állapították meg az ergonómiai kísérletek, hogy segíti a halmazábrák emberi értelmezését. Itt kissé nehezebb dolgunk van, mivel a csúcsok megjelenítésével nem tisztán Euler-diagram alapú reprezentációt kapunk, ami megnehezíti a kritériumok értelmezését. A WMP1 tulajdonság kimondja, hogy nem jelenik meg olyan részhalmazt reprezentáló görbe, amely üres. Az eddig részletezett modellben ez előfordulhat - bár az invalid szegmensmetszetek minimalizálása pont ezt igyekszik

elkerülni -, azonban ezek nem fognak csúcsokat tartalmazni. A WMP2 és WMP4 (a halmazok relációi megfelelnek a görbék átfedésének) ugyanettől a problémától szenved; maguk a görbék önmagukban nem feltétlenül teljesítik, de a csúcsok figyelembevételével már igen. Az egyedüli pont, amit kétségtelenül megsért a modell a WMP3, ami a WMP2-n felül előírja, hogy a WFC5 is teljesüljön. Láttuk, hogy ez már az előző paragrafusban sem állt fenn, és heurisztikák sem célozzák közvetlenül. Ennek oka, hogy a minimális régiók bejárása exponenciálissá tenné a futásidőt, amit elkerülni igyekeztem. További kutatások kiemelt célja lehet ennek a WMP3-at célzó, de polinomális futásidejű heurisztika kidolgozása.

Az előző kettő esztétikai kritériumrendszeren kívül még a méretarányosságot emeltem ki az irodalmi áttekintés során, azonban annak kapcsolatát a heurisztikákkal már részleteztem a területarányosságot leíró paragrafusban.

3.2. Összefoglalás

Az előző fejezetekben a megoldási módszert részleteit fejtettem ki, azonban a jobb átláthatóság érdekében úgy gondolom, hasznos egy helyen is áttekinteni, hogy azok hogyan állnak össze egészszé.

3.3. Mérések és következtetések

Irodalomjegyzék

- [1] C. Berge. *Hypergraphs*. North Holland Publishing Company, 1989. ISBN: 9780080880235.
- [2] Hooman Reisi Dehkordi és tsai. “Circular Graph Drawings with Large Crossing Angles”. *WALCOM: Algorithms and Computation*. Szerk. Subir Kumar Ghosh és Takeshi Tokuyama. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, 298–309. old. ISBN: 978-3-642-36065-7.
- [3] Janet M. Six és Ioannis G. Tollis. “Circular Drawings of Biconnected Graphs”. *Algorithm Engineering and Experimentation: International Workshop ALENEX’99 Baltimore, MD, USA, January 15–16, 1999 Selected Papers*. Szerk. Michael T. Goodrich és Catherine C. McGeoch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1999, 57–73. old. ISBN: 978-3-540-48518-6. DOI: 10.1007/3-540-48518-X_4. URL: https://doi.org/10.1007/3-540-48518-X_4.
- [4] Markus Eiglsperger, Sandor Fekete és Gunnar Klau. “Orthogonal Graph Drawing”. *Drawing Graphs: Methods and Models, 121-171 (2001)* 2025 (1999. jan.). DOI: 10.1007/3-540-44969-8_6.
- [5] Brian Beckman. “Theory of spectral graph layout”. *vertex* 1 (1994), 2. old. URL: <http://research.microsoft.com/pubs/69611/tr-94-04.ps>.
- [6] Stephen Kobourov. “Force-Directed Algorithms”. 2013. jan., 383–408. old.
- [7] Walter Didimo, Giuseppe Liotta és Salvatore A. Romeo. “Topology-Driven Force-Directed Algorithms”. *Proceedings of the 18th International Conference on Graph Drawing. GD’10*. Konstanz, Germany: Springer-Verlag, 2010, 165–176. ISBN: 9783642184680.

- [8] Thomas M. J. Fruchterman és Edward M. Reingold. “Graph drawing by force-directed placement”. *Software: Practice and Experience* 21.11 (1991), 1129–1164. old. DOI: <https://doi.org/10.1002/spe.4380211102>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/spe.4380211102>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/spe.4380211102>.
- [9] Walter Didimo, Giuseppe Liotta és Salvatore A. Romeo. “Topology-Driven Force-Directed Algorithms”. *Proceedings of the 18th International Conference on Graph Drawing*. GD’10. Konstanz, Germany: Springer-Verlag, 2010, 165–176. ISBN: 9783642184680.
- [10] Bilal Alsallakh és tsai. “The State-of-the-Art of Set Visualization”. *Comput. Graph. Forum* 35.1 (2016. febr.), 234–260. ISSN: 0167-7055. DOI: 10.1111/cgf.12722. URL: <https://doi.org/10.1111/cgf.12722>.
- [11] Luana Micalef és Peter Rodgers. “eulerAPE: Drawing Area-Proportional 3-Venn Diagrams Using Ellipses”. *PloS one* 9 (2014. júl.), e101717. DOI: 10.1371/journal.pone.0101717.
- [12] Nathan Bailey és tsai. “Tissue-Specific Transcriptomics in the Field Cricket *Teleogryllus oceanicus*”. *G3 (Bethesda, Md.)* 3 (2013. febr.), 225–30. old. DOI: 10.1534/g3.112.004341.
- [13] P. Simonetto és D. Auber. “Visualise Undrawable Euler Diagrams”. *2008 12th International Conference Information Visualisation*. 2008, 594–599. old. DOI: 10.1109/IV.2008.78.
- [14] B. Alper és tsai. “Design Study of LineSets, a Novel Set Visualization Technique”. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 17.12 (2011), 2259–2267. old. DOI: 10.1109/TVCG.2011.186.
- [15] Steven S. Skiena. *The Algorithm Design Manual*. 2nd. Springer Publishing Company, Incorporated, 2008. ISBN: 1848000693.
- [16] P. Chapman és tsai. “Visualizing Sets: An Empirical Comparison of Diagram Types”. *Diagrams*. 2014.

- [17] W. Freiler, K. Matkovic és H. Hauser. “Interactive Visual Analysis of Set-Typed Data”. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 14.6 (2008), 1340–1347. old. DOI: 10.1109/TVCG.2008.144.
- [18] Margaret E. Baron. “A Note on the Historical Development of Logic Diagrams: Leibniz, Euler and Venn”. *The Mathematical Gazette* 53.384 (1969), 113–125. old. ISSN: 00255572. URL: <http://www.jstor.org/stable/3614533>.
- [19] Richard Brath. “Multi-Attribute Glyphs on Venn and Euler Diagrams to Represent Data and Aid Visual Decoding”. 2012. júl.
- [20] Anne Verroust és Marie-Luce Viaud. “Ensuring the Drawability of Extended Euler Diagrams for up to 8 Sets”. *Diagrammatic Representation and Inference*. Szerk. Alan F. Blackwell, Kim Marriott és Atsushi Shimojima. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004, 128–141. old. ISBN: 978-3-540-25931-2.
- [21] Luana Micalef és Peter Rodgers. “eulerForce: Force-directed layout for Euler diagrams”. *Journal of Visual Languages & Computing* 25.6 (2014). Distributed Multimedia Systems DMS2014 Part I, 924 –934. old. ISSN: 1045-926X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jvlc.2014.09.002>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1045926X14000810>.
- [22] Peter Rodgers, Leishi Zhang és Helen Purchase. “Wellformedness Properties in Euler Diagrams: Which Should Be Used?": *IEEE transactions on visualization and computer graphics* 18 (2012. júl.), 1089–100. old. DOI: 10.1109/TVCG.2011.143.
- [23] J. Flower, P. Rodgers és P. Mutton. “Layout metrics for Euler diagrams”. *Proceedings on Seventh International Conference on Information Visualization, 2003. IV 2003*. 2003, 272–280. old. DOI: 10.1109/IV.2003.1217990.
- [24] Mithileysh Sathiyarayanan és John Howse. “Well-matchedness in Euler Diagrams”. 2014. júl. DOI: 10.13140/2.1.2861.9524.
- [25] A. Blake és tsai. “Does the orientation of an Euler diagram affect user comprehension?": *Proceedings: DMS 2012 - 18th International Conference on Distributed Multimedia Systems* (2012. jan.), 185–190. old.

- [26] Gem Stapleton és tsai. “Automatically drawing Euler diagrams with circles”. *Journal of Visual Languages & Computing* 23.3 (2012), 163 –193. old. ISSN: 1045-926X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jvlc.2012.02.001>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1045926X12000134>.
- [27] S. Chow. “Generating and Drawing Area-Proportional Euler and Venn Diagrams”. Dissz. University of Victoria, 2007. URL: <http://hdl.handle.net/1828/128>.
- [28] Stirling Chow és Frank Ruskey. “Drawing Area-Proportional Venn and Euler Diagrams”. *Graph Drawing*. Szerk. Giuseppe Liotta. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004, 466–477. old. ISBN: 978-3-540-24595-7.
- [29] Stirling Chow és Frank Ruskey. “Towards a General Solution to Drawing Area-Proportional Euler Diagrams”. *Electronic Notes in Theoretical Computer Science* 134 (2005). Proceedings of the First International Workshop on Euler Diagrams (Euler 2004), 3 –18. old. ISSN: 1571-0661. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.entcs.2005.02.017>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1571066105050395>.
- [30] Paolo Simonetto, David Auber és Daniel Archambault. “Fully Automatic Visualisation of Overlapping Sets”. *Computer Graphics Forum* 28.3 (2009), 967–974. old. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1467-8659.2009.01452.x>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1467-8659.2009.01452.x>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1467-8659.2009.01452.x>.
- [31] Andrew Blake és tsai. “How Should We Use Colour in Euler Diagrams?”. *Proceedings of the 7th International Symposium on Visual Information Communication and Interaction*. VINCI '14. Sydney NSW, Australia: Association for Computing Machinery, 2014, 149–158. ISBN: 9781450327657. DOI: 10.1145/2636240.2636838. URL: <https://doi.org/10.1145/2636240.2636838>.
- [32] Andrew Fish, Babak Khazaei és Chris Roast. “User-comprehension of Euler diagrams”. *Journal of Visual Languages & Computing* 22.5 (2011), 340 –

354. old. ISSN: 1045-926X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jvlc.2011.01.002>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1045926X11000036>.
- [33] Andrew Blake és tsai. “The Impact of Shape on the Perception of Euler Diagrams”. *Diagrammatic Representation and Inference*. Szerk. Tim Dwyer, Helen Purchase és Aidan Delaney. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, 123–137. old. ISBN: 978-3-662-44043-8.
- [34] G. Stapleton és tsai. “Inductively Generating Euler Diagrams”. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 17.1 (2011), 88–100. old. DOI: 10.1109/TVCG.2010.28.
- [35] M. Wang és tsai. “SketchSet: Creating Euler diagrams using pen or mouse”. *2011 IEEE Symposium on Visual Languages and Human-Centric Computing (VL/HCC)*. 2011, 75–82. old. DOI: 10.1109/VLHCC.2011.6070382.
- [36] Roger Fletcher. “On the Barzilai-Borwein Method”. *Optimization and Control with Applications*. Szerk. Liqun Qi, Koklay Teo és Xiaoqi Yang. Boston, MA: Springer US, 2005, 235–256. old. ISBN: 978-0-387-24255-2.
- [37] John H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control and Artificial Intelligence*. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1992. ISBN: 0262082136.
- [38] Warren Hare, Julie Nutini és Solomon Tesfamariam. “A survey of non-gradient optimization methods in structural engineering”. *Advances in Engineering Software* 59 (2013), 19 –28. old. ISSN: 0965-9978. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2013.03.001>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0965997813000288>.
- [39] J. Kennedy és R. Eberhart. “Particle swarm optimization”. *Proceedings of ICNN’95 - International Conference on Neural Networks*. 4. köt. 1995, 1942–1948 vol.4. DOI: 10.1109/ICNN.1995.488968.
- [40] Yuhui Shi és B.Gireesha Obaiahnahatti. “A Modified Particle Swarm Optimizer”. 6. köt. 1998. jún., 69 –73. old. ISBN: 0-7803-4869-9. DOI: 10.1109/ICEC.1998.699146.

- [41] F. Ahmad és tsai. “Performance comparison of gradient descent and Genetic Algorithm based Artificial Neural Networks training”. *2010 10th International Conference on Intelligent Systems Design and Applications*. 2010, 604–609. old. DOI: 10.1109/ISDA.2010.5687199.
- [42] Edmund Ronald és Marc Schoenauer. “Genetic Lander: An Experiment in Accurate Neuro-Genetic Control”. *Proc. 3rd Conf. Parallel Problem Solving from Nature*. Springer-Verlag, 1994, 452–461. old.
- [43] F. R. K. Chung. *Spectral Graph Theory*. American Mathematical Society, 1997.
- [44] M. Gori, G. Monfardini és F. Scarselli. “A new model for learning in graph domains”. *Proceedings. 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks, 2005*. 2 (2005), 729–734 vol. 2.
- [45] David K Duvenaud és tsai. “Convolutional Networks on Graphs for Learning Molecular Fingerprints”. *Advances in Neural Information Processing Systems 28*. Szerk. C. Cortes és tsai. Curran Associates, Inc., 2015, 2224–2232. old. URL: <http://papers.nips.cc/paper/5954-convolutional-networks-on-graphs-for-learning-molecular-fingerprints.pdf>.
- [46] Thomas Kipf és M. Welling. “Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks”. *ArXiv abs/1609.02907* (2017).
- [47] Michaël Defferrard, Xavier Bresson és Pierre Vandergheynst. “Convolutional Neural Networks on Graphs with Fast Localized Spectral Filtering”. *Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems*. NIPS’16. Barcelona, Spain: Curran Associates Inc., 2016, 3844–3852. ISBN: 9781510838819.
- [48] Wen-Ch’ing Winnie Li és Patrick Solé. “Spectra of Regular Graphs and Hypergraphs and Orthogonal Polynomials”. *European Journal of Combinatorics* 17.5 (1996), 461–477. old. ISSN: 0195-6698. DOI: 10.1006/eujc.1996.0040.
- [49] Andries E. Brouwer és Willem H. Haemers. *Spectra of Graphs*. New York, NY, 2012. DOI: 10.1007/978-1-4614-1939-6.

- [50] Anand Louis. “Hypergraph Markov Operators, Eigenvalues and Approximation Algorithms”. *Proceedings of the Forty-Seventh Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. STOC '15. Portland, Oregon, USA: Association for Computing Machinery, 2015, 713–722. ISBN: 9781450335362. DOI: 10.1145/2746539.2746555. URL: <https://doi.org/10.1145/2746539.2746555>.
- [51] T.-H. Hubert Chan és tsai. “Spectral Properties of Hypergraph Laplacian and Approximation Algorithms”. *J. ACM* 65.3 (2018. márc.). ISSN: 0004-5411. DOI: 10.1145/3178123. URL: <https://doi.org/10.1145/3178123>.
- [52] Yifan Feng és tsai. “Hypergraph Neural Networks”. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence* 33.01 (2019), 3558–3565. old. DOI: 10.1609/aaai.v33i01.33013558. URL: <https://ojs.aaai.org/index.php/AAAI/article/view/4235>.
- [53] Naganand Yadati és tsai. “HyperGCN: Hypergraph Convolutional Networks for Semi-Supervised Classification”. (2018. szept.).
- [54] Sambaran Bandyopadhyay, Kishalay Das és M. Murty. “Line Hypergraph Convolution Network: Applying Graph Convolution for Hypergraphs”. (2020. febr.).
- [55] Loc Tran. “Directed Hypergraph Neural Network”. *Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems* 12 (2020. márc.), 1434–1441. old. DOI: 10.5373/JARDCS/V12SP4/20201622.
- [56] Twan Laarhoven. “L2 Regularization versus Batch and Weight Normalization”. (2017. jún.).
- [57] Kai Hormann és Alexander Agathos. “The point in polygon problem for arbitrary polygons”. *Computational Geometry* 20.3 (2001), 131–144. old. ISSN: 0925-7721. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-7721\(01\)00012-8](https://doi.org/10.1016/S0925-7721(01)00012-8). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925772101000128>.