# Estimando Centralidade de Percolação utilizando Amostragem e Teoria da Dimensão Vapnik-Chervonenkis

Alane Marie de Lima<sup>1</sup>, Giovanne Marcelo dos Santos<sup>2</sup>, André Luis Vignatti<sup>1</sup>, Murilo Vicente Gonçalves da Silva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Informática – Universidade Federal do Paraná (UFPR) Caixa Postal 19.031 – 81531-980 – Curitiba – PR – Brasil

<sup>2</sup>Instituto de Matemática e Estatística – Universidade de São Paulo (USP)

{amlima, vignatti, murilo}@inf.ufpr.br, gsantos@ime.usp.br

**Resumo.** Medidas de centralidade em redes quantificam a importância relativa de seus nós e conexões, e podem variar de acordo com o contexto em que se aplicam. A centralidade de percolação determina a importância de um nó em aplicações em que há um processo de infestação na rede. O melhor algoritmo exato conhecido para computá-la de maneira exata em uma rede com n nós e m conexões executa em tempo  $\mathcal{O}(n^3)$ . Neste trabalho apresentamos um algoritmo aleatorizado para estimar a centralidade de percolação de um dado nó da rede. O algoritmo proposto utiliza resultados da Teoria da Dimensão VC e Teorema da  $\epsilon$ -amostra, e executa em tempo  $\mathcal{O}(\max(n^2, (n+m)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  para grafos sem peso e  $\mathcal{O}(\max(n^2, (m\log n)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  para grafos com peso, apresentando um erro de no máximo  $\epsilon$  com probabilidade  $1-\delta$ , para constante c>0.

**Abstract.** In network analysis, a variety of centrality measures are used to quantify the relative importance of entities and connections of a system. Percolation centrality refers to the importance of a node in a network going through a contagious process. The fastest algorithm for computing this measure in a network of n nodes and m edges runs in  $\mathcal{O}(n^3)$ . In this work, we propose a randomized algorithm to approximate the percolation centrality of a given vertex in a network. Our algorithm relies on VC-Dimension Theory and  $\epsilon$ -samples, and have running time  $\mathcal{O}(\max(n^2, (n+m)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  for unweighted graphs and  $\mathcal{O}(\max(n^2, (m\log n)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  for weighted graphs, within a factor of  $\epsilon$  for the error and with probability  $1-\delta$ , for a constant c>0.

**Keywords:** Percolation Centrality, Approximation Algorithm, VC-Dimension

Palavras-chave: Centralidade de Percolação, Algoritmo de Aproximação, Dimensão VC

## 1. Introdução

No estudo de redes complexas é comum quantificar a centralidade de nós e de conexões de uma rede a fim de determinar a importância relativa que estas entidades têm no sistema. Em particular, a centralidade de um nó pode ser definida em termos de características locais, como *grau*, ou globais, como *intermediação* ou *percolação*. O foco deste trabalho

é a medida de *centralidade de percolação*, proposta por [Piraveenan et al. 2013], que mede a importância de um nó no contexto em que há um processo de infestação da rede (e.g., transmissão de doenças ou divulgação de notícias falsas).

O estudo do fenômeno de percolação em um sistema foi introduzido por [Broadbent e Hammersley 1957], que atribuíram a aleatoriedade ao processo de passagem de um dado fluido, ou seja, cada parte do "meio" onde passa o fluido possui uma probabilidade de transmiti-lo ou não (estado de percolação). No caso de redes, a centralidade de percolação de um nó generaliza a centralidade de intermediação do mesmo. Enquanto esta última se refere a quantidade de caminhos mínimos que passam pelo nó, a centralidade de percolação, além desta quantidade, leva em consideração o estado de percolação dos nós da rede.

Os melhores algoritmos para o cálculo exato da centralidade de intermediação dos nós da rede dependem da computação de todos os seus caminhos mínimos [Riondato e Kornaropoulos 2016] e, consequentemente, o mesmo vale para o cálculo da centralidade de percolação. Até onde os autores sabem, isso se aplica mesmo ao caso de se calcular a centralidade de percolação de um único nó da rede. O melhor algoritmo conhecido para o problema possui complexidade de tempo  $\mathcal{O}(n^3)$ , e pode ser reduzida para  $\mathcal{O}(nm)$  por meio de uma adaptação do algoritmo proposto por [Brandes 2001] em uma versão mais simples do problema que não é a que lidamos aqui. Segundo [Riondato e Kornaropoulos 2016], em redes de larga escala, este algoritmo é custoso e, além disso, resultados aproximados respeitando parâmetros de qualidade e confiança podem ser suficientes na prática. Em nosso trabalho, propomos um algoritmo para estimar a centralidade de percolação de um dado vértice, satisfazendo parâmetros de qualidade e confiança arbitrários fornecidos juntos com a entrada. Este trabalho se baseia na abordagem de [Riondato e Kornaropoulos 2016] para estimar a centralidade de intermediação usando resultados da teoria da Dimensão Vapnik-Chervonenkis (VC) e  $\epsilon$ -amostra. O algoritmo proposto executa em tempo  $\mathcal{O}(\max(n^2,(n+m)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  para grafos sem peso e  $\mathcal{O}(\max(n^2, (m \log n) \frac{c}{\epsilon^2} \ln \frac{1}{\delta}))$  para grafos com peso, apresentando um erro de no máximo  $\epsilon$  com probabilidade  $1-\delta$ , para constante c>0. Na prática os parâmetros  $\epsilon$  e  $\delta$  podem ser tratados como constantes, sendo que tipicamente fazendo  $\delta = 0.1$  e  $\epsilon = 0.015$ , obtém-se resultados bastante satisfatórios [Riondato e Kornaropoulos 2016].

### 2. Preliminares Matemáticos

Nesta seção, apresentamos as definições, notação e resultados utilizados neste trabalho.

## 2.1. Grafos e Centralidade de Percolação

Dado um grafo G=(V,E) (direcionado ou não), os estados de percolação  $x_v, \forall v \in V$ , e  $(u,w) \in V^2$ , seja  $S_{uw}$  o conjunto de todos os caminhos mínimos entre u e w, e  $\sigma_{uw}=|S_{uw}|$ . A quantidade de caminhos mínimos entre u e w em que  $v \in V$  é vértice interno é denotada por  $\sigma_{uw}(v)$ , para  $u \neq v \neq w$ . O conjunto de vértices internos de um caminho mínimo  $p_{uw} \in S_{uw}$  é denotado por  $Int(p_{uw})$ . O conjunto de predecessores de w em  $p_{uw}$  é definido como  $P_u(w) = \{s | s \in V \text{ e } (s,w) \in E_{p_{uw}}\}$ , onde  $E_{p_{uw}}$  denota o conjunto de arestas de  $p_{uw}$ . Seja  $0 \leq x_v \leq 1$  o estado de percolação do vértice  $v \in V$ . Dizemos que

v está totalmente percolado se  $x_v = 1$ , não percolado se  $x_v = 0$  e parcialmente percolado se 0 < x < 1. A centralidade de percolação p(v) é definida abaixo.

**Definição 1.** Seja  $R(x) = \max\{x,0\}$ . Dado grafo G = (V,E) e estados de percolação  $x_v, \forall v \in V$ , a centralidade de percolação p(v) do vértice  $v \in V$  é  $p(v) = \sum_{\substack{(u,w) \in V^2 \\ u \neq v \neq w}} \frac{\sigma_{uw}(v)}{\sigma_{uw}} \frac{R(x_u - x_w)}{\sum\limits_{\substack{(f,d) \in V^2 \\ f \neq v \neq d}}}.$ 

A Definição 1 segue a notação original. Para simplificar, seja 
$$r_{uw} = R(x_u - x_w)$$
 e  $S(v) = \sum_{\substack{(f,d) \in V^2 \\ f \neq v \neq d}} R(x_f - x_d)$ . Assim,  $p(v) = \frac{1}{S(v)} \sum_{\substack{(u,w) \in V^2 \\ u \neq v \neq w}} \frac{\sigma_{uw}(v)r_{uw}}{\sigma_{uw}}$ .

## 2.2. Dimensão Vapnik-Chervonenkis

Em algoritmos que utilizam amostragem, a análise de complexidade de amostra relaciona o tamanho mínimo necessário que uma amostra aleatória deve ter para que os resultados aproximados obtidos estejam consistentes com os parâmetros de confiança e qualidade desejados [Mitzenmacher e Upfal 2017]. Limitantes superiores para a Dimensão VC do espaço de intervalos (definido abaixo) modelado para um determinado problema estabelecem limitantes sobre o tamanho da amostra com essas características. A definição de  $\epsilon$ -amostra formaliza isso (Definição 3). Mais detalhes acerca das definições e resultados apresentados a seguir podem ser encontrados em [Shalev-Shwartz e Ben-David 2014].

Um espaço de intervalos é um par  $R=(X,\mathcal{I})$ , onde X é um domínio (finito ou infinito) e  $\mathcal{I}$  é uma coleção de subconjuntos de X, denominados intervalos. Dado  $S\subseteq X$ , a projeção de  $\mathcal{I}$  em S é o conjunto  $\mathcal{I}_S=\{S\cap I|I\in\mathcal{I}\}$ . Se  $|\mathcal{I}_S|=2^{|S|}$  então dizemos que S é despedaçado por  $\mathcal{I}$ .

**Definição 2.** A Dimensão VC de um espaço de intervalos  $R = (X, \mathcal{I})$ , denotada por VCDim(R), é  $VCDim(R) = \max\{d : \exists S \subseteq X \text{ tal que } |S| = d \text{ e } |\mathcal{I}_S| = 2^d\}$ .

**Definição 3.** Sejam  $R=(X,\mathcal{I})$  um espaço de intervalos, e  $\mathcal{D}$  uma distribuição de probabilidade em X. Um conjunto  $S\subseteq X$  é uma  $\epsilon$ -amostra para X com respeito a  $\mathcal{D}$  se para todos os conjuntos  $I\in\mathcal{I}, |\mathrm{Pr}_{\mathcal{D}}(I)-|S\cap I|/|S||\leq \epsilon$ , onde  $\mathrm{Pr}_{\mathcal{D}}(I)$  é a probabilidade de um elemento pertencer ao intervalo I de acordo com a distribuição  $\mathcal{D}.$  **Teorema 1.** (prova em [Li et al. 2001]) Sejam  $R=(X,\mathcal{I})$  um espaço de intervalos tal que  $VCDim(R)\leq d$  e  $\mathcal{D}$  uma distribuição de probabilidade em X. Para qualquer  $\epsilon,\delta\in[0,1]$ , existe  $m=\frac{c}{\epsilon^2}\left(d+\ln\frac{1}{\delta}\right)$  tal que uma amostra aleatória com respeito a  $\mathcal{D}$  de tamanho m é uma  $\epsilon$ -amostra para X com probabilidade  $1-\delta$ , para constante c>0.

Segundo [Löffler e Phillips 2009], a constante c é aproximadamente 0.5. A seguir, demonstramos que VCDim(R) = 0 se  $|\mathcal{I}| = 1$ .

**Teorema 2.** Um espaço de intervalos  $R = (X, \mathcal{I})$  com  $|\mathcal{I}| = 1$  possui VCDim(R) = 0. Demonstração. Seja VCDim(R) = k, onde  $k \in \mathbb{N}$ . Então existe um conjunto  $S \subseteq X$  de tamanho k que é despedaçado por  $\mathcal{I}$ , isto é, existem  $2^{|S|}$  intervalos distintos em  $\mathcal{I}$  tais que  $|\mathcal{I}_S| = 2^k$ . Por outro lado,  $|\mathcal{I}| = 1$ , e então, como  $2^k = 1$ , temos que k = 0.

## 3. Algoritmo Proposto

Nesta seção, modelamos o problema em termos de um espaço de intervalos e apresentamos um algoritmo cuja corretude e tempo de execução sustentam-se no Teorema 1.

## 3.1. Espaço de Intervalos sobre Caminhos Mínimos

Seja  $S_G$  o conjunto de todos os caminhos mínimos em G, isto é,  $S_G = \bigcup_{(u,w) \in V^2: u \neq w} S_{uw}$ . Dado  $v \in V$ , cada caminho  $p_{uw} \in S_G$  é amostrado com probabilidade  $\mathcal{D}^v(p_{uw}) = \frac{r_{uw}}{S(v)\sigma_{uw}}$ . Para cada vértice v, seja  $\tau_v$  o conjunto de caminhos mínimos  $p_{uw} \in S_G$  em que v é interno, isto é,  $\tau_v = \{p_{uw}|p_{uw} \in S_G, v \in Int(p_{uw}) \text{ e } u, w \in V\}$ . Seja também  $R^v = (S_G, \mathcal{I})$  o espaço de intervalos definido para v onde  $\mathcal{I} = \{\tau_v\}$ . Pelo Teorema 2, como  $|\mathcal{I}| = 1$ , então  $VCDim(R^v) = 0$ .

## 3.2. Algoritmo

Inicialmente, a matriz de diferenças R, de dimensão  $(n+2)\times(n+1)$ , é pré-computada no Algoritmo 1. Cada posição R[u][w] corresponde ao valor  $r_{uw}$ , para  $(u,w)\in V^2$ , como descrito na Definição 1. As posições R[n+1][w] e R[w][n+1] contém os valores  $\sum_{u\in V} r_{uw}$  e  $\sum_{u\in V} r_{wu}$ , respectivamente. A posição R[n+1][n+1] contém a soma  $\sum_{(u,w)\in V^2: u\neq w} r_{uw}$ , enquanto R[n+2][v] contém o valor S(v).

## **Algoritmo 1:** PRECALCULADIFERENCAS(x)

```
Entrada: O estado de percolação x_v para todo vértice v \in V.

Saída: Matriz R de tamanho (n+2) \times (n+1).

1 R[i][j] \leftarrow 0, \ \forall (i,j) \in (n+2) \times (n+1)

2 para i \leftarrow 1 até n+1 faça

3 para j \leftarrow 1 até n+1 faça

4 dif \leftarrow (x[i]-x[j]);

5 se dif > 0 então

6 R[i][n+1] \leftarrow R[i][n+1] + \text{dif}, \ R[n+1][j] \leftarrow R[n+1][j] + \text{dif};

7 R[i][j] \leftarrow \text{dif}, \ R[n+1][n+1] \leftarrow R[n+1][n+1] + \text{dif};

8 para i \leftarrow 1 até n faça

9 R[n+2][i] \leftarrow R[n+1][n+1] - R[n+1][i] - R[i][n+1];

10 retorna R
```

No Algoritmo 2 é apresentado o método proposto, dado um grafo com um estado de percolação  $x_v$ , para todo  $v \in V$ , e os parâmetros de erro e confiabilidade  $\epsilon, \delta \in [0,1]$ , respectivamente. Em linhas gerais, dois vértices u e w são amostrados de acordo com os valores de R (linha 3), e em seguida um caminho  $p_{uw} \in S_{uw}$  é amostrado uniformemente nas linhas 5–10. Se o vértice v é interno a  $p_{uw}$ , então  $\tilde{p}(v)$  é incrementado em 1/r (passo que corresponde a média amostral, demonstrada no Teorema 3). O algoritmo utilizado na linha 4 calcula  $\sigma_{uz}$ ,  $\sigma_{ut}$  e  $P_u(t)$ , necessários para o passo da linha 8.

**Teorema 3.** Para uma amostra S de tamanho  $r = \frac{c}{\epsilon^2} \ln \frac{1}{\delta}$  e constante c > 0, a saída do Algoritmo 2 possui erro de no máximo  $\epsilon$  tal que  $\Pr(|p(v) - \tilde{p}(v)| < \epsilon) >$ 

## **Algoritmo 2:** CENTRALIDADE DE PERCOLACAO $(G, x, v, \epsilon, \delta)$

```
Entrada: Grafo G = (V, E) com n = |V|, estados de percolação x, vértice
                   v \in V, erro \epsilon, confiança \delta.
    Saída: Aproximação \tilde{p}(v) para a centralidade de percolação do vértice v.
 1 R \leftarrow \text{preCalculaDiferencas}(x), \quad r \leftarrow \frac{c}{c^2} \ln \frac{1}{\delta}
 2 para cada \ i \leftarrow 1 \ at\'erral r faça
         amostre w com probabilidade \frac{R[n+1][w]}{R[n+2][w]} e u com probabilidade \frac{R[u][w]}{R[n+1][w]};
 3
         S_{uw} \leftarrow \operatorname{todosCaminhosMínimos}(u, w);
 4
         se S_{uw} \neq \emptyset então
 5
              t \leftarrow w;
 6
              enquanto t \neq u faca
7
                   amostre z \in P_u(t) com probabilidade \frac{\sigma_{uz}}{\sigma_{ut}};
8
                    se z \neq u e z = v então \tilde{p}(z) \leftarrow \tilde{p}(z) + 1/r;
10
11 retorna \tilde{p}(v)
```

 $1-\delta$ . Demonstração. O Algoritmo 2 amostra um caminho mínimo  $p_{uw}$  com probabilidade  $\mathcal{D}^v(p_{uw})$ , dada a maneira como os vértices u e w são selecionados e que o laço da linhas 7–10 amostra um caminho mínimo  $p_{uw}$  de maneira uniforme sobre o conjunto  $S_{uw}$  (Lema 5 em [Riondato e Kornaropoulos 2016]). Seja  $\tilde{p}(v)$  a estimativa para a centralidade de percolação do vértice v e seja  $S=\{p_1,...,p_r\}$  o conjunto de r elementos de  $S_G$  amostrados pelo Algoritmo 2. Temos que  $\Pr_{\mathcal{D}}(\tau_v)$  é igual a  $\sum_{\substack{p_{uw} \in \tau_v \\ u \neq v \neq w}} \frac{r_{uw}}{S(v)} \frac{1}{\sigma_{uw}} = \sum_{\substack{(u,w) \in V^2 \\ u \neq v \neq w}} \sum_{p \in S_{uw}} \frac{r_{uw}}{S(v)} \frac{1}{\sigma_{uw}} = \sum_{\substack{(u,w) \in V^2 \\ u \neq v \neq w}} \frac{r_{uw}}{\sigma_{uw}} \frac{\sigma_{uw}(v)}{\sigma_{uw}} = p(v)$ . Temos também

que  $\tilde{p}(v)$  corresponde a média amostral dada por  $\tilde{p}(v)=\frac{1}{r}\sum_{p\in S}1_{\tau_v(p)}=\frac{|S\cap\tau_v|}{|S|}$ , onde  $1_{\tau_v(p)}$  é a função indicadora para o conjunto  $\tau_v$  (o valor de  $1_{\tau_v(p)}$  é 1 se  $p\in\tau_v$  e 0 caso contrário). Como  $\left|\Pr_{\mathcal{D}}(\tau_v)-\frac{|S\cap\tau_v|}{|S|}\right|=|p(v)-\tilde{p}(v)|$ , então podemos aplicar os Teoremas 1 e 2 para obter  $d=VCDim(R^v)=0$  e obter que S é uma  $\epsilon$ -amostra de tamanho  $r=\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}$  tal que  $\Pr(|p(v)-\tilde{p}(v)|\leq\epsilon)\geq 1-\delta$ .

**Teorema 4.** O Algoritmo 2 executa em tempo  $\mathcal{O}(\max(n^2, (n+m)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  para grafos sem peso e em tempo  $\mathcal{O}(\max(n^2, (m\log n)\frac{c}{\epsilon^2}\ln\frac{1}{\delta}))$  para grafos com peso. Demonstração. Seja  $T_R$  o tempo de execução do Algoritmo 1. Note que  $T_R = \Theta(n^2)$ . Para a amostragem utilizada nas linhas 3 e 8 utilizamos o algoritmo de [Vose 1991], de tempo linear. Sejam  $T_{su}$  e  $T_{sw}$  os tempos de execução da amostragem do vértice u e do vértice u, respectivamente. Então  $T_{su} = T_{sw} = \mathcal{O}(n)$ . Sejam  $T_p$  o tempo de execução do trecho das linhas 7–10 e  $T_{Suw}$  o tempo de execução da linha 4. Como  $|P_u(w)| \leq d_G(w)$ , onde  $d_G(w)$  denota o grau do vértice u em u0, e o laço do trecho das linhas 7–10 é executado no máximo u0 vezes caso o caminho amostrado passe por todos os vértices do grafo, então u0 então u0, e u0, e u0, o algoritmo executado na linha 4 é Dijkstra ou BFS, dependendo do grafo ter ou não pesos. Portanto u0, e, respectivamente, u0, u1, o u2, o u3. Como o laço principal

das linhas 2–10 é executado r vezes, e  $r \in \mathcal{O}(\frac{1}{\epsilon^2} \ln \frac{1}{\delta})$ , então o custo total do Algoritmo 2 é  $\mathcal{O}(\max(T_R, T_{su}, T_p, T_{S_{uw}})) = \mathcal{O}(\max(n^2, r(n, m, T_{S_{uw}})))$ , que corresponde a  $\mathcal{O}(\max(n^2, \frac{c}{\epsilon^2} \ln \frac{1}{\delta}(n+m)))$  em grafos sem peso e  $\mathcal{O}(\max(n^2, \frac{c}{\epsilon^2} \ln \frac{1}{\delta}(m \log n)))$  em grafos com peso.

### 4. Conclusão

Apresentamos um algoritmo baseado em amostragem e conceitos da teoria da Dimensão VC para o cálculo da centralidade de percolação de um vértice que permite a escolha entre baixo tempo de execução ou alta precisão na estimativa por meio parâmetros  $\epsilon$  e  $\delta$ . Para o caso de  $\epsilon$  e  $\delta$  constantes, este é o algoritmo mais rápido conhecido para o problema. Observamos que o algoritmo proposto neste trabalho, quando modificado para o problema mais geral de estimar a centralidade de percolação de todos os vértices do grafo, torna-se menos eficiente que o melhor algoritmo exato conhecido. Dessa forma, como trabalhos futuros, outras técnicas e resultados da área de complexidade de amostra como médias de Rademacher poderiam ser utilizadas para reduzir o número de amostras necessárias, servindo como base no projeto de um algoritmo de tempo  $o(n^3)$  para calcular a centralidade em todos os vértices do grafo. Finalmente, uma análise experimental comparativa dos algoritmos seria útil para verificar o comportamento do algoritmo proposto na prática e como usá-lo para equilibrar tempo de execução com os parâmetros de qualidade e confiança desejados.

### Referências

- Brandes, U. (2001). A faster algorithm for betweenness centrality. *Journal of Mathematical Sociology*, 25(163):163–177.
- Broadbent, S. e Hammersley, J. M. (1957). Percolation processes: I. crystals and mazes. *Math. Proc. of the Cambridge Philosophical Society*, 53(3):629–641.
- Li, Y., Long, P. M., e Srinivasan, A. (2001). Improved bounds on the sample complexity of learning. *Journal of Computer and System Sciences*, 62(3):516–527.
- Löffler, M. e Phillips, J. M. (2009). Shape fitting on point sets with probability distributions. In *European Symposium on Algorithms*, pages 313–324. Springer.
- Mitzenmacher, M. e Upfal, E. (2017). *Probability and computing: Randomization and Probabilistic Techniques in Algorithms and Data Analysis*. Cambridge University Press.
- Piraveenan, M., Prokopenko, M., e Hossain, L. (2013). Percolation centrality: Quantifying graph-theoretic impact of nodes during percolation in networks. *PLOS ONE*, 8(1):1–14.
- Riondato, M. e Kornaropoulos, E. M. (2016). Fast approximation of betweenness centrality through sampling. *Data Mining and Knowledge Discovery*, 30(2):438–475.
- Shalev-Shwartz, S. e Ben-David, S. (2014). *Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms*. Cambridge University Press.
- Vose, M. D. (1991). A linear algorithm for generating random numbers with a given distribution. *IEEE Transactions on software engineering*, 17(9):972–975.