

2. félévi beszámoló

Bendegúz Sulyok (bsulyok94@gmail.com)

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája PhD program

Témavezető: Dr. Pollner Péter

A dolgozat címe: Beágyazások GRS optimalizációja.

Bevezetés

A valós hálózatok bizonyos jellemző tulajdonságai (kis világ és skálamentesség) erősen motiválják a hiperbolikus terekbe való beágyazásukat. Féléves munkám során folytattam az ilyen hiperbolikus beágyazások numerikus optimalizáció útján való készítését.

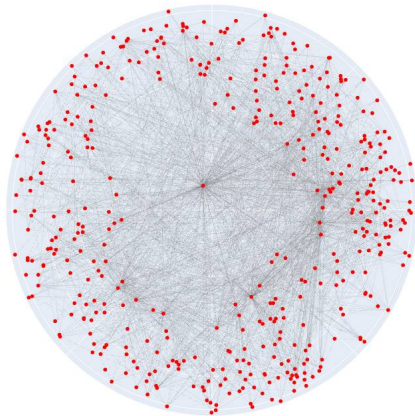
Kutatás

A Greedy Routing Score (GRS) egy mennyiség, mellyel jellemezhető egy hálózat beágyazása. Több, valamelyest különböző, variánsa ismert a GRS-nek, ezek közül én a következő verziót használom: Adott egy kiinduló vertex és egy cél vertex; a kiinduló vertex küld egy "jelet", amely mindig abba a szomszédos vertex-be mozog, mely a legközelebb helyezkedik el céljához; ha a "jel" megérkezik a célba, a Greedy Routing sikeres, ha azonban egy már korábban látogatott vertex-be ér, a "jel" elvész és a Greedy Routing sikertelen; a GRS értéke a sikeres utak és az összes út hányadosa.

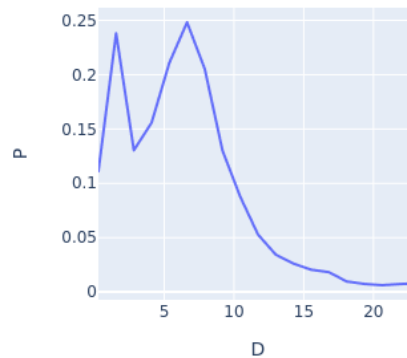
A GRS-ra optimalizált Simulated Annealing algoritmust alkalmazok: egy- vagy több vertex egyidejű, véletlenszerű mozgását elfogadom vagy elvetem a GRS értékének módosulása alapján.

Mivel egyelőre nem találtam a GRS változásával kellő nagyságú korrelációt mutató mennyiséget, mely számottevően gyorsabban számolható annál, ezért minden iterációban kiszámításra kerül a GRS. Ez igen jelentős számítási kapacitást igényel, ezért számos optimalizációs problémát küzdöttem le az elmúlt szemeszter alatt. Elméleti és algoritmikus munka útján arra jutottam, hogy a GRS számításának idő-komplexitása nem lehet kisebb, mint $O(N^2 \log N + N^2 k)$, ahol N a vertex-ek száma, k pedig az átlagos fokszám. Itt az egyik tag a szomszédok sorba rendezéséért felelős, a másik tag pedig az útvonalkeresést karakterizálja. Mivel ez valamelyest rosszul skálázódik a hálózat méretével, további optimalizációra van szükség. A szimulációs algoritmus különböző lépéseinél (a hűtés ütemezése, elemi mozgás és mozgató vertexek kiválasztása) alkalmazott módosításokkal egyre gyorsabban konvergáló szimulációt és ezáltal rövidebb futási időt tudtam elérni. Emellett folytatom a keresést valami gyorsabban számolható alternatíva reményében.

Számos lehetséges metrika használható egy beágyazás minőségének számszerű karakterizálására. Ezek egyike a vertex-ek kapcsolódásának távolságtól függő feltételes valószínűsége. Az (1) ábrán látható ez a feltételes valószínűség egy példa hálózatra.



(a) Szimulációs model által készített beágyazás (GRS = 0.92)



(b) Vertex-ek távolságfüggő feltételes kapcsolási valószínűsége.

1. ábra. Az felhasznált hálózat egy $N = 453$ vertex-et tartalmazó metabolikus hálózat.

Az általam alapvonalként használt *Mercator* [1] algoritmus által készített hiperbolikus beágyazásokat sokszor számottevően javítani tudom a szimulációs modellel.

Noha jelenleg csupán két dimenziós, egység görbületű hiperbolikus térben dolgozom, a szimulációs model kevés módosítással könnyedén kiterjeszthető magasabb dimenziós-, illetve más görbületű hiperbolikus terekre.

Tanulmányi tevékenység

A félév során a következő tárgy(ak)at végeztem el:

- *Elméleti Evolúcióbíológia* (FIZ/3/005E).

Oktatási tevékenység

A félév során mérésvezetőként vettem részt a Modern fizika laboratórium (fizlab3f19la / ff1c4s13) lebonyolításában, ahol a *Spektrofotometria* mérésért voltam felelős.

További szakmai tevékenység

Folytattam az előző szemeszterben a *Semmelweis Egyetemmel* (SE) megkezdett közös munkát, melynek keretében szkennelt szövetmintákon vastagbélrákot detektálunk gépi tanulási módszerekkel.

Csatlakoztam a CountR európai pályázathoz.

Csapattagként részt vettem az [ai4covid CXR hackathon](#) számítástechnikai versenyen. Itt mellkas-röntgen felvételek és mellékelt klinikai adatok felhasználásával kellett COVID-19

fertőzés súlyosságát megítélni, illetve a halálozás valószínűségét megjósolni. A *pontosság* kategóriában fődíjat nyertünk.

Hivatkozások

- [1] Guillermo García-Pérez, Antoine Allard, M Ángeles Serrano, and Marián Boguñá. Mercator: uncovering faithful hyperbolic embeddings of complex networks. *New Journal of Physics*, 21(12):123033, dec 2019.