Optymalizacja efektywności sieci w scenariuszu epidemii

Z wykorzystaniem Głębokiej Sieci Efektywności Epidemii (DEEN)

Magdalena Proszewska, Michał Bujak,
Rafał Kucharski, Marek Śmieja, Jacek Tabor

Jagiellonian University, Kraków, Poland

June 5, 2024

Cel badania

Naszym celem jest **ograniczenie rozprzestrzeniania się wirusa** w systemie reprezentowanym przez strukturę **grafu**, jednocześnie **utrzymując wysoką sprawność/efektywność** sieci.

Rozwiązanie: *Model Głębokiej Sieci Efektywności Epidemii (DEEN)*:

- oparty na Grafowej Sieci Konwolucyjnej z autorską funkcją straty (loss);
- generuje podział grafu maksymalizujący użyteczność przy ustalonym progu epidemii;
- stosowalny do problemów rzeczywistych, zweryfikowany na trzech scenariuszach;
- zdolny do utrzymania niemal pierwotnej użyteczności przy znacznym zmniejszeniu potencjału rozprzestrzeniania się.

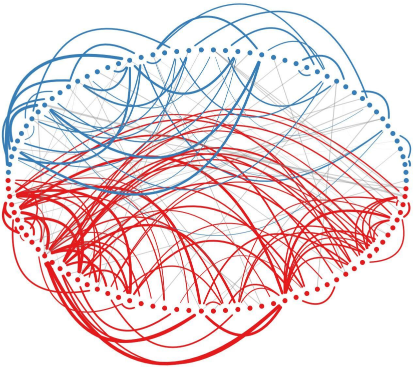
Dwa przypadki

W części eksperymentalnej analizujemy trzy potencjalne zastosowania w prawdziwym świecie.

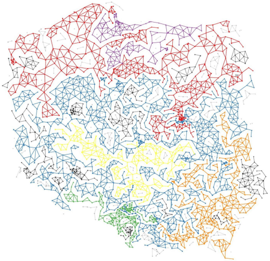
I. **Wspólne korzystanie z przejazdów**: Ograniczamy potencjalne kombinacje podróżnych, którzy mogą wspólnie podróżować. Naszym celem jest minimalizacja ryzyka pandemii przy jednoczesnym utrzymaniu korzyści związanych z usługą wspólnego korzystania z przejazdów.
II. **Regiony kraju**: Mając mapę regionów Polski, szukamy optymalnego podziału (krajowy lockdown), aby wymiana biznesowa i edukacyjna nie była zakłócona, a jednocześnie ryzyko pandemii było zmniejszone.

Prezentacja metody

Usługa wspólnego korzystania z przejazdów z 150 podróżnymi w Nowym Jorku. **Podział** grafu na **dwie grupy** skutkował **spadkiem wydajności o 3%** oraz **zwiększeniem progu epidemii o 170%**.



Prezentacja metody



Dla sieci gmin w Polsce możemy zwiększyć poziom odporności na rozlew epidemii.
Mozemy uzyskać wskaźnik 0.3 (*epidemic threshold*) dzieląc Polskę tak, że zachowane zostanie 37% oryginalnej *dostępności potencjałowej*.

Notacja

- $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ - graf reprezentujący sieć (spójny, skierowany, ważony);
- $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_{ij}) \in \mathrm{R}^{|\mathcal{V}| \times |\mathcal{V}|}$ - ważona macierz sąsiedztwa;
- $\Delta = (\Delta_{ij}) \in \{0,1\}^{|\mathcal{V}| \times |\mathcal{V}|}$:

$$\Delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \mathbf{A}_{ij} > 0 \\ 0, & \mathbf{A}_{ij} \leq 0. \end{cases}$$

- Podział $\mathcal{H}$ grafu $\mathcal{G}$ jest jego podgrafem (i.e. $\mathcal{V}_{\mathcal{H}} = \mathcal{V}, \mathcal{E}_{\mathcal{H}} \subseteq \mathcal{E}$) dzielącym go na rozłączne części, i.e. $\mathcal{H} = \bigcup_{j \leq k} \mathcal{H}_j$ takim, że:
  - $\mathcal{V}_{\mathcal{H}} = \bigcup_{j \leq k} \mathcal{V}_{\mathcal{H}_j}$,
  - $\mathcal{E}_{\mathcal{H}} = \bigcup_{j \leq k} \mathcal{E}_{\mathcal{H}_j}$,
  - $\mathcal{V}_{\mathcal{H}_i} \cap \mathcal{V}_{\mathcal{H}_j} = \emptyset$ for $i \neq j$.

  Zbiór takich podziałów grafu $\mathcal{G}$ oznaczamy jako $\mathcal{D}(\mathcal{G})$.

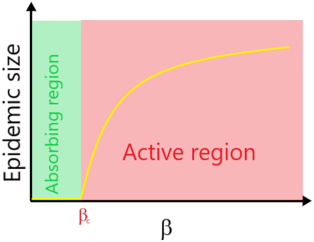
Funkcja Użyteczności

Funkcja użyteczności określa **sprawność** systemu sieciowego przedstawionego przez graf. Aby zapewnić **stosowalność** algorytmu w różnorodnych scenariuszach, przyjmujemy następujące założenia dotyczące funkcji użyteczności:

1. może nie mieć jawnego rozwiązania analitycznego;
2. może być przybliżona za pomocą wag połączeń;
3. jest wyliczana za pomocą zewnętrznego algorytmu (black box).

Próg epidemiczny

Poziom krytyczny transmisji wirusa zależy od topologii sieci, oznaczamy go jako $ET(\mathcal{G})$.



Próg epidemiczny obliczamy dla każdej spójnej składowej po czym stosujemy proporcjonalne do rozmiaru klastra ważenie. Przyjmując założenie heterogenicznego pola średniego, wzór przyjmuje postać:

$$ET(\mathcal{G}) = \sum_{i \leq K} \frac{|\mathcal{V}_i|}{|\mathcal{V}|} \frac{\sum_{v \in \mathcal{V}_i} \deg(v)}{\sum_{v \in \mathcal{V}_i} \deg(v)^2}.$$

Problem optymalizacyjny

Dane wejściowe:

- ważony graf $\mathcal{G}$;
- docelowy próg epidemii β_c;
- funkcja użyteczności U (nieznana nam).

Wyjście: Podział $\mathcal{H}_{\max} \in \mathcal{D}(\mathcal{G})$ zdefiniowany jako:

$$\max_{\mathcal{H} \in \mathcal{D}(\mathcal{G})} U(\mathcal{H}), \text{ takie, że } \quad ET(\mathcal{H}) \geq \beta_c. \tag{1}$$

Architektura modelu

Sieć rozwiązauje problem przy użyciu **Grafowych Sieci Konwolucyjnych** (GCNN) (Kipf i Welling[1]) z wynikiem **określonym** przez **softmax**. Aby uwzględnić informacje o cechach węzłów, modyfikujemy macierz wag przed przekazaniem do GCNN:

$$\widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \delta \mathbf{I},$$

gdzie $\delta \in \mathbb{R}_+$ (zgodnie z sugestią Lamperta[2]). GCNN zwraca macierz przypisania $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{V}| \times K}$:

$$\mathbf{S} = \mathrm{softmax}(\mathrm{GCNN}(\widehat{\mathbf{A}})),$$

gdzie $K \in \mathbb{N}_+$ to końcowa liczba grup. W odróżnieniu od Kipfa i Wellina, algorytm wygładzana wynik, dlatego nie musimy stosować normalizacji Laplaciana.

[1] Kipf and Welling, *Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks*

[2] Lampert and Scholtes, *The Self-Loop Paradox: Investigating the Impact of Self-Loops on Graph Neural Networks*

Funkcja straty

Konstruujemy funkcję straty tak, aby uwzględniała trzy czynniki:

- maksymalizacja użyteczności;
- maksymalizacja progu epidemii;
- zapobieganie degeneracji rozwiązań (pojedyncze węzły, balans między klastrami).

Strata pierwotnej użyteczności

Motywacja:

1. reprezentacja faktycznej wydajności systemu;
2. różniczkowalność;
3. szybka i analityczna obliczalność;
4. ogólna zastosowalność.

Powody 2, 3 i 4 skłoniły nas do zaproponowania formuły, która nie obejmuje dokładnego sformułowania użyteczności w danym problemie. Ponadto, nasz algorytm może znaleźć rozwiązanie w sytuacji, gdy prawdziwa funkcja użyteczności jest nieznana.

Końcowa postać straty

$$\mathcal{L}_{DEEN}(\mathbf{S};\mathbf{A}) = \mathcal{L}_u(\mathbf{S};\mathbf{A}) + \lambda\mathcal{L}_{vs}(\mathbf{S};\mathbf{A}) + \mathcal{R}_c(\mathbf{S})$$

- λ wyważa rozprzestrzenianie się wirusa i wydajność;
- wysokie λ priorytetuje zapobieganie epidemii;
- niskie λ faworyzuje wydajność;
- we wszystkich naszych eksperymentach uznaliśmy $\lambda = 0.4$ za optymalny poziom.

Rozwiązywanie problemu optymalizacyjnego

Aby przeprowadzić obliczenia, musimy ustalić liczbę grup:

- duże liczby prowadzą do większej liczby składników, co obniża transmisję wirusa;
- małe liczby pomagają utrzymać konieczną łączność dla lepszej wydajności.

Aby znaleźć optymalny poziom dla docelowego progu epidemii, przeprowadzamy przeszukiwanie, aby znaleźć najmniejszą liczbę grup, która przekracza podany poziom. Ze względów technicznych stosujemy również maksymalną liczbę grup, którą uznajemy za hiperparametr.

Hiperparametry

Dla każdego eksperymentu używamy tej samej architektury i prawie tych samych hiperparametrów.

- 3 warstwy nieznormalizowanych warstw konwolucyjnych grafu, 1 warstwa gęsta;
- aktywacja ReLU po każdej warstwie;
- optymalizator Adam z szybkością uczenia 0.001;
- trening do zbieżności (2000 epok);
- maksymalna liczba grup: $\frac{n}{2}$ dla eksperymentu z przejazdami wspólnymi, w pozostałych 32 (dla większych grafów).

Dwa przypadki

W części eksperymentalnej analizujemy trzy potencjalne zastosowania w prawdziwym świecie.

I. **Wspólne korzystanie z przejazdów**: Ograniczamy potencjalne kombinacje podróżnych, którzy mogą wspólnie podróżować. Naszym celem jest minimalizacja ryzyka pandemii przy jednoczesnym utrzymaniu korzyści związanych z usługą wspólnego korzystania z przejazdów.
II. **Regiony kraju**: Mając mapę regionów Polski, szukamy optymalnego podziału (krajowy lockdown), aby wymiana biznesowa i edukacyjna nie była zakłócona, a jednocześnie ryzyko pandemii było zmniejszone.

Przypadek I: Wspólne korzystanie z przejazdów

Problem: Wspólne korzystanie z przejazdów to usługa transportowa podobna do standardowego Ubera, z dodatkową korzyścią polegającą na tym, że podróżni dzielą części swoich podróży. Przestrzenny i czasowy rozkład zgłoszeń podróżnych tworzy graf, w którym podróżni o podobnych ścieżkach pochodzenia i przeznaczenia (oraz czasie) są połączeni.

Cel: Podzielić graf w taki sposób, aby maksymalizować redukcję pojazdokilometrów pojazdu i uzyskać zadany próg epidemii.

Wagi krawędzi:

$$w(v,u) = \frac{d(v) + d(u) - d(v,u)}{d(v) + d(u)},$$

$d(v,u)$ - dystans gdy pasażerowie u oraz v podróżują wspólnie, $d(u)$ - dystans gdy u jadą osobno.

Faktyczna użyteczność: Niezależna, zewnętrzna czarna skrzynka (black-box[3].

[3] For creation of the compatibility and utility we rely on Kucharski and Cats, "Exact matching of attractive shared rides (ExMAS) for system-wide strategic evaluations".)

Przypadek II: Regiony kraju

Problem: Reprezentujemy mapę 3000 gmin Polski jako graf, gdzie sąsiadujące regiony są połączone. Każdy region charakteryzuje się swoją populacją.

Cel: Optymalizacja krajowego lockdownu tak, aby dostępność między regionami pozostawała jak najwyższa, a ryzyko pandemii było zmniejszone.

Wagi krawędzi:

$$w(v,u) = \left(\frac{p(v)}{2 \cdot \max_{w \in \mathcal{N}(u)} p(w)} + \frac{p(u)}{2 \cdot \max_{w \in \mathcal{N}(v)} p(w)} \right).$$

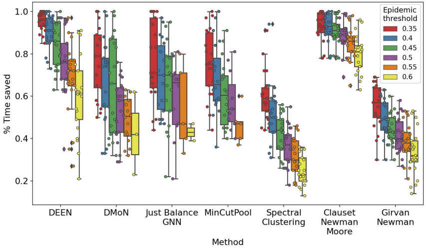
Faktyczna użyteczność: Korzystamy z klasycznych miar dostępności geograficznej (Levinson[4]):

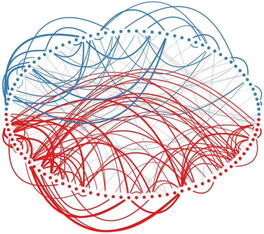
$$U(v, \mathcal{R}_v) = \sum_{u \in \mathcal{R}_v / \{v\}} \frac{p(v) \cdot p(u)}{d(u,v)},$$

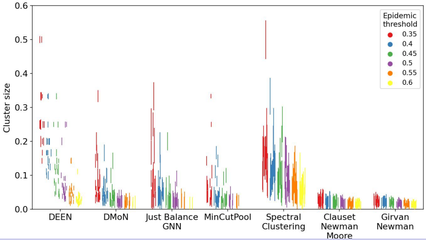
gdzie $p(u)$ jest ludnością gminy, $d(u,v)$ oznacza dystans między gminami, a $\mathcal{R}_v$ oznacza gminy dostępne z v.

[4] Levinson, "Accessibility and the journey to work"

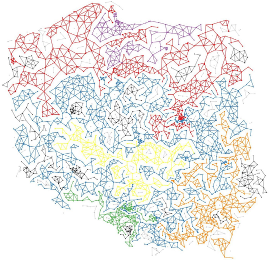
Przypadek I: Wspólne korzystanie z przejazdów



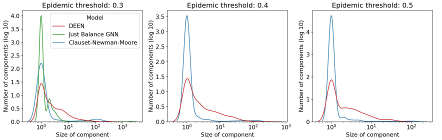




Przypadek II: Regiony kraju



Epidemic threshold	0.3	0.4	0.5
DEEN	0.37	0.36	0.28
DmoN	-	-	-
Just Balance GNN	0.61	-	-
MinCutPool	-	-	-
Clauset-Newman-Moore	0.31	0.29	0.26



Podsumowanie

- **Przypadek I: Wspólne korzystanie z przejazdów**: Nasze wyniki pokazują sugerują, że odpowiedni podział grafu przejazdów wspólnych może znacząco zmniejszyć ryzyko pandemii przy minimalnym wpływie na wydajność usługi.
- **Przypadek II: Regiony kraju**: Zaproponowana strategia krajowego lockdownu pozwala na zachowanie stabilnej wymiany pracy i edukacji między regionami (dostępność) przy jednoczesnym zmniejszeniu ryzyka pandemii.

Dziękujemy za uwagę!

Dziękujemy za uwagę,
rafal.kucharski@uj.edu.pl

This research is funded by National Science Centre in Poland program OPUS 19 (Grant Number 2020/37/B/HS4/01847