通过维度退火和Barnes–Hut近似进行双曲网络嵌入

Bukyoung Jhun[a、b、c]、Gangmin Son[d、e]、Hoyun Choi[d]、Sang Hoon Lee[f]

[a]批判性计算研究中心，法兰克福歌德大学，美因河畔法兰克福，德国[b]网络与数据科学系，中欧大学，维也纳，奥地利[c]物理与天文学系，首尔国立大学，首尔，韩国[d]计算科学学院，韩国高等研究院，首尔，韩国[e]物理系，罗马智慧大学，罗马，意大利[f]物理系，庆尚国立大学，晋州，韩国

arXiv:2611.22250v1 [physics.soc-ph] 22 Nov 2026

摘要

来自不同领域的复杂网络所表现出的共同特征，可以通过双曲空间中的网络几何加以解释。推断节点的潜在坐标能够实现高效导航、链接预测和几何重整化。然而，由于低维嵌入空间的拓扑约束，双曲模型的损失景观极其崎岖。为克服这一问题，我们提出了维度退火框架，通过引入辅助维度绕过这些约束。我们表明，与现有的基于能量的嵌入方法相比，维度退火能够实现质量更高的嵌入。此外，我们还引入了Barnes–Hut近似，以提高计算可扩展性。

关键词： 网络嵌入、双曲模型、复杂网络、维度退火、Barnes–Hut近似

1. 引言

在各个领域观测到的许多经验网络都表现出重尾度分布、高聚类系数和较短的直径 [1]。对这些现象的一种突出解释是，网络结构源于一种潜在几何：在这种几何中，两个节点之间的连接概率取决于它们在低维度量空间中的距离 [2, 3, 4]。如果每个节点都具有一个潜在坐标，并且潜在空间中距离较近的节点之间具有较高的连接概率，那么较高的聚类系数就会自然产生。当潜在空间为双曲空间时，异质度分布和较短的直径也可以得到解释。在庞加莱圆盘中，靠近中心的节点拥有更多邻居，而外围的大多数节点只有少量邻居（图 1(a)）。在这一框架下，双曲网络模型

引入了具有连接概率的费米–狄拉克分布，以解释幂律度分布和高聚类系数 [5, 6, 7, 8, 9]。近期研究进一步证明，潜在几何是现实世界超图中嵌套性的原点 [10]。

在现实世界网络中，潜在的双曲坐标并不可得，必须仅根据网络结构推断出来。这类逆问题之所以重要，是因为双曲模型并非只是可视化工具。成功推断出双曲坐标后，便可以在没有全局信息的情况下遍历网络 [9, 11]。此外，双曲坐标还可用于社区检测 [12], 链接预测 [13, 14], 网络拆解 [15], 以及几何重整化群 [16, 17]。

针对这一逆问题，即双曲嵌入，已有多种算法被提出。此类嵌入的质量可通过观测网络的负对数似然（NLL）来评估。双曲嵌入面临的一项根本挑战是，负对数似然景观极其崎岖，其中大量局部极小值被无限高的势垒隔开。这种崎岖性源于这样一个事实：当两个不相连节点的双曲坐标

电子邮箱地址：jhun@c3s.uni-frankfurt.de (Bukyoung Jhun), lshlj82@gnu.ac.kr(Sang Hoon Lee)

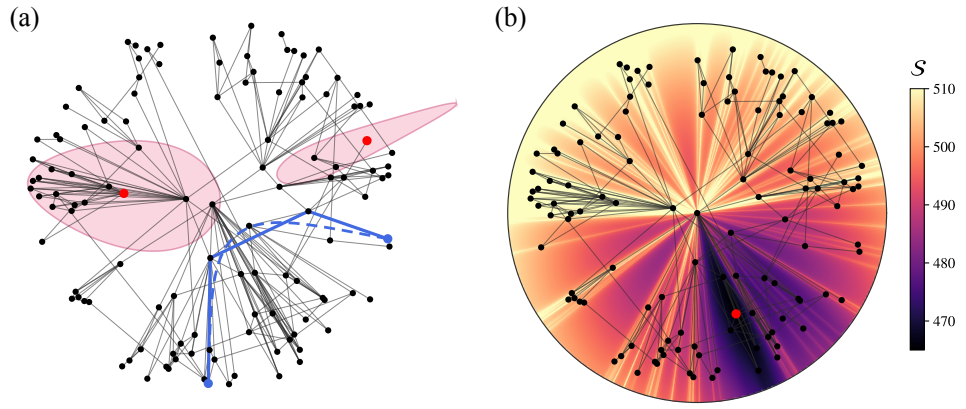

图1：（a）嵌入在庞加莱圆盘上的双曲网络模型（$N = 200$）。两个粉色双曲圆的半径（$R = 2.5$）相同，但分别包含16个和3个节点。固定半径的圆越靠近圆盘中心，所包含的节点就越多。蓝色虚线表示两个蓝点之间的双曲测地线，蓝色实线表示网络最短路径。两者都倾向于向圆盘中心弯曲，反映出最短路径倾向于经过高阶节点。（b）同一网络的负对数似然（NLL）景观。除红点所示的一个节点外，所有坐标均固定在其原始位置。大量局部极小值被沿径向延伸的势垒隔开，使得基于梯度下降的优化变得困难。

彼此靠近时，负对数似然会发散至无穷大。由于双曲网络模型的相似性空间是一维的，两点的轨迹若不相交，就无法改变彼此的顺序。因此，依赖梯度下降来最小化负对数似然的基于力的嵌入方法会陷入局部极小值。相反，当前文献采用基于能量的优化方案，对双曲坐标施加有限幅度的扰动，并根据扰动所导致的负对数似然变化接受或拒绝这些扰动。近期的贝叶斯方法揭示了后验景观具有很强的多模态性和势垒 [18]。

在此，我们提出**维度退火** 框架。该框架不改变问题的优化算法或目标函数，而是扩展嵌入的定义域。通过引入一个辅助维度，两个节点可以在不发生碰撞的情况下交换坐标，从而避免负对数似然发散。为了恢复原始低维空间中的嵌入，我们逐步将辅助坐标限制为零。

我们通过**维度退**火式**双曲嵌**入（DAHyE）实现了这一框架。这是一个 C++ 库，提供 Python 封装，可用于获取高质量的网络双曲嵌入。它还采用 Barnes–Hut近似，将贡献较小且平滑的节点归为一组，作为单个簇，将计算成本降低至 $\mathcal{O}(N \log N)$。

通过在来自不同领域的合成网络和现实世界网络上测试这一框架，我们表明，在大多数情况下，维度退火所产生的嵌入质量高于最先进的 Mercator 嵌入 [19, 20] 。此外，我们还表明，Barnes–Hut近似通过将计算复杂度降至 $\mathcal{O}(N \log N)$，大幅提升了该方法的可扩展性。

本文的组织结构如下：在第2节中，我们介绍双曲网络模型，并解释逆问题、双曲贪婪导航 [21], 和A*搜索算法。第3节介绍维度退火框架。第4节解释Barnes–Hut近似。在第5节中，我们评估嵌入的质量和可扩展性。第6节给出结论。

2. 双曲网络模型

在 $\mathbb{S}^1$ 模型中，网络中的每个 N 节点在半径为 $\mathcal{R} = N/$的圆（相似性空间）上都有一个坐标 $\theta_i \in [0, 2\pi)$（2π）。每个节点还具有一个隐藏度$\kappa_i > 0$，与其具有较高度的倾向相关。两个节点 i 和 j 相连的概率 p_{ij} 与这两个节点之间的距离 $d_{ij} = \mathcal{R}\Delta\theta_{ij}$

在相似性空间上。

$$p_{ij} = \frac{1}{1+\chi_{ij}^{\beta}}\,, \tag{1}$$

$$\chi_{ij} = \frac{N}{2\pi}\frac{\Delta\theta_{ij}}{\mu\kappa_i\kappa_j}\,. \tag{2}$$

这里，$\Delta\theta_{ij} = \pi - |\pi - |\theta_i - \theta_j|| \in [0,\pi]$ 是两个节点之间的角距离。β 是控制聚类系数的逆温度，μ 是控制生成网络平均度的参数。我们设置$\mu = \frac{\beta}{2\pi\langle k\rangle}\sin(\pi/\beta)$，使每个节点的期望度与隐藏度参数相匹配：$k_i \simeq \kappa_i$（$\beta > 1$）。

2.1. 双曲嵌入

对于真实网络，我们只能获取最终的网络结构，而无法获得其双曲坐标（θ_i，κ_i）。因此，我们需要根据网络结构推断双曲坐标。设 $\boldsymbol{\Theta} = (\{\theta_i\},\ \{\kappa_i\},\ \beta,\ \mu)$为双曲模型的参数。根据给定网络推断 $\boldsymbol{\Theta}$ 的一种标准方法是最大后验估计。根据贝叶斯定理，

$$P(\boldsymbol{\Theta}|A) = \frac{P(A|\boldsymbol{\Theta})P(\boldsymbol{\Theta})}{P(A)} \propto P(A|\boldsymbol{\Theta})P(\boldsymbol{\Theta})\,. \tag{3}$$

其中，A 是邻接矩阵。由于先验分布 $P(\boldsymbol{\Theta})$ 在可行参数域内为常数，最大后验估计等价于最大似然估计

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} P(\boldsymbol{\Theta}|A) = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} P(A|\boldsymbol{\Theta})\,. \tag{4}$$

观测网络的似然计算如下

$$\mathcal{L} = P(A|\boldsymbol{\Theta}) = \prod_{i<j} p_{ij}^{A_{ij}}(1-p_{ij})^{1-A_{ij}}\,. \tag{5}$$

最大化该似然等价于最小化负对数似然

$$\mathcal{S} = -\ln\mathcal{L} = -\sum_{(i,j)\in E}\ln p_{ij} - \sum_{(i,j)\notin E}\ln(1-p_{ij})\,, \tag{6}$$

其中 E 是网络中的边集。在这一过程中，第一项起到吸引力的作用，将相连的节点拉得更近；而第二个求和项是排斥项，会将不相连的节点推开。双曲嵌入方法旨在最小化式 (6) 中的负对数似然。

请注意，负对数似然在旋转 $\theta_i \mapsto \theta_i + \phi$和反射 $\theta_i \mapsto -\theta_i$下保持不变。因此，最优嵌入并非唯一，而是属于一个对称相关嵌入的等价类，且这些嵌入具有相同的负对数似然。实际上，嵌入方法会打破这种对称性，只找到一个对称性已被打破的嵌入。

2.2. 拉普拉斯特征映射初始化

负对数似然 (6) 关于 $(\theta_i,\ \kappa_i)$ 并非凸函数，并且由于对称性，局部最优解彼此连续相连。为了以极低的计算成本将嵌入坐标初始化到接近其最优值的位置，我们采用拉普拉斯特征映射 [22, 23]。

拉普拉斯特征映射将高维点$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$ 嵌入到低维空间 $\boldsymbol{y}_i \in \mathbb{R}^m$，同时保留局部邻近性，使原始空间中的相邻点仍彼此接近。因此，它最小化损失函数

$$\mathcal{E} = \sum_{i,j}||\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{y}_j||^2\omega_{ij}\,, \tag{7}$$

其中，ω_{ij} 表示权重因子，用于表示节点 i和 j 在原始空间中的接近程度。通常使用如下形式的热核:

$$\omega_{ij} = \exp\left(-\frac{||\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j||^2}{t}\right) \tag{8}$$

如果两个节点在原始空间中彼此接近，则 ω 较大（接近 1）；因此，将它们在低维空间中相距较远会使损失函数迅速增大。由于损失函数 $\mathcal{E} \geq 0$ 具有平凡解 $\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{y}_2 = \cdots = \boldsymbol{y}_N$，我们采用归一化条件

$$Y^T D Y = I\,, \tag{9}$$

其中，$D_{ii} = \sum_j \omega_{ij}$。此外，我们假设

$$\sum_{ij} y_i\omega_{ij} = 0 \tag{10}$$

将质心固定在原点。约束条件为式（9）和（10）时，最小化损失函数式（7）等价于求解一个广义特征值问题

$$L\boldsymbol{v} = \lambda D\boldsymbol{v}\,, \tag{11}$$

其中

$$L_{ij} = \begin{cases} \sum_k \omega_{ik}, & i = j, \\ -\omega_{ij}, & i \neq j. \end{cases} \tag{12}$$

该特征映射不能直接用于对给定网络进行降维，因为不同于通常的降维问题，$||\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j||$ 并未给出。我们使用两个节点之间的期望角间隔来替代该值。

$$\langle \Delta\theta_{ij} \rangle = \mathbb{E}[\Delta\theta_{ij} | A_{ij} = 1, \kappa_i, \kappa_j] \,. \tag{13}$$

我们将该值转换为圆上的弦长，以得到 ω_{ij}

$$d_{ij} = 2\sin\left(\frac{\langle \Delta\theta_{ij} \rangle}{2}\right), \tag{14}$$

$$\omega_{ij} = A_{ij} \exp\left(-\frac{d_{ij}^2}{t}\right). \tag{15}$$

我们获得与两个最小非零特征值 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$对应的特征向量，以构建双曲角坐标的拉普拉斯特征映射近似

$$\theta_i^{\mathrm{LE}} = \mathrm{atan2}(v_{2,i}, v_{1,i}) \,, \tag{16}$$

其中，atan2(y, x) 是双参数反正切函数，返回向量（x, y）的极角。

2.3. 逆温度

还需要从网络结构中推断逆温度 β。在这里，我们使用 Mercator嵌入 [19, 20]中采用的方法。对于具有潜在度 κ_i 和 κ_j的两个节点 i和j ，对均匀分布的角坐标取平均可得到连接概率

$$\bar{p}(\kappa_i, \kappa_j) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\Delta\theta}{1 + (N\Delta\theta/(2\pi\mu\kappa_i\kappa_j))^\beta} \tag{17}$$

$$= {}_2F_1\left(1, \frac{1}{\beta}; 1 + \frac{1}{\beta}; -\left(\frac{N}{2\mu\kappa_i\kappa_j}\right)^\beta\right), \tag{18}$$

其中 ${}_2F_1$ 是超几何函数

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!} \tag{19}$$

其中使用（上升）波赫哈默符号 $(q)_n = q(q+1)\cdots(q+n-1)$，适用于 $n > 0$和 $(q)_0 = 1$。

因此，逆温度 β 控制连接概率对距离的敏感度，从而影响网络的聚类系数。当 β 较大时，只有彼此距离较近的节点对才会连接，形成大量三角形，并产生较高的聚类系数。因此，网络的聚类系数提供了推断 β的信息。模型聚类系数 $c_{\mathrm{model}}(\beta)$可通过选取一个节点及其两个邻居，然后计算这两个邻居之间的连接概率来求得。两个相连节点之间角距离的累积分布 $\Delta\theta$ 为

$$F(\theta) = \frac{\int_0^\theta p(\Delta\theta) d\Delta\theta}{\int_0^\pi p(\Delta\theta) d\Delta\theta} \tag{20}$$

$$= \frac{\theta}{\pi} \frac{{}_2F_1(1, 1/\beta; 1 + 1/\beta; -(N\theta/(2\pi\mu\kappa_i\kappa_j))^\beta)}{{}_2F_1(1, 1/\beta; 1 + 1/\beta; -(N/(2\mu\kappa_i\kappa_j))^\beta)} \,. \tag{21}$$

由于 $F(\theta)$从 $F(0) = 0$ 到$F(\pi) = 1$单调递增，我们可以高效地对两个邻居的 $\Delta\theta$ 进行采样。模型聚类系数可通过对 $\theta(u)$和 $\theta(v)$进行采样，并对三角形形成概率 $c_k = \langle p_{uv} \rangle$的贡献求和来计算。

$$c_{\mathrm{model}}(\beta) = \frac{1}{N} \sum_k N_k c_k \,, \tag{22}$$

其中， N_k 是度为 k的节点数。由于$c_{\mathrm{model}}(\beta)$是 β的单调递增函数，我们通过二分搜索确定 β ，使其与观测网络的聚类系数相匹配。

2.4. 贪婪导航

双曲嵌入最突出的应用之一是导航。要通过传统路由到达给定目的地，通常需要掌握网络结构的全局信息。相比之下，贪婪导航利用节点坐标，只需要局部信息 [24, 25, 26]。具体而言，朝目的地 t 进行双曲贪婪导航时，每一步都会前往使

$$\chi_{it} = \frac{\Delta\theta_{it}}{\mu\kappa_i\kappa_t} \,. \tag{23}$$

由于角距离会根据节点的潜在流行度进行折减，因此路径倾向于经过枢纽节点。这与复杂网络中的最短路径模式相吻合（图 1(a)）。因此，既不需要路由表，也不需要对网络进行全局搜索，而且每个节点必须存储的信息量不受网络规模影响。正因如此，双曲贪婪导航作为一种可扩展的互联网路由方法，受到了广泛关注 [11]。

只有当推断出的坐标能够忠实地编码潜在几何结构时，贪婪导航才是有效的；也就是说，在嵌入空间中接近目的地的同时，网络距离也往往会随之减小。然而，当下一跳将返回某个已经访问过的节点时，这种简单的导航有时会陷入困境。因此，我们使用贪心导航成功率 s作为双曲嵌入质量的实用指标，该指标在随机选取的源—目的地节点对上进行测量。

*2.5. A*算法*

在真实系统中，无法找到路径通常是不可接受的。因此，人们提出了 A*搜索算法 [27]，该算法保证在两节点之间存在路径时能够找到一条路径。假设我们正从节点 s 导航至节点 t。A*通过以下方式评估每个候选节点 i：

$$f(i) = d(s,i) + \chi_{it}\,, \tag{24}$$

其中，$d(s,\ i)$ 是迄今为止从源节点s 找到的最短路径距离，而 χ_{it} 则用于估计到目的地 t的剩余距离。f 较小的节点会优先展开，因此搜索会朝着目的地推进，而不是像广度优先搜索（BFS）那样均匀扩散。

与贪婪导航类似，更准确的距离估计 χ_{it} 可以提高 A* 的搜索效率。我们通过以下方式量化相对于广度优先搜索的搜索成本：

$$R = \frac{\langle n_{\mathrm{A}*}\rangle}{\langle n_{\mathrm{BFS}}\rangle}\,, \tag{25}$$

其中，$\langle n_{\mathrm{A}*}\rangle$ 和 $\langle n_{\mathrm{BFS}}\rangle$分别表示相应算法探索的节点数量，平均值则是在源—目的地节点对上取的。

3. 维度退火

式 (6) 中的负对数似然 $\mathcal{S}$ 对坐标可微，原则上可以通过梯度下降进行优化。然而，其损失面极为崎岖，存在众多被无限高势垒隔开的局部最优解（图 1(b)）。对于未连接的节点 i 和 j，随着它们之间的角分离趋于零，p_{ij} 趋近于 1，导致排斥项 $-\ln(1-p_{ij})$ 发散。这些势垒使梯度下降无法逃离局部极小值，限制了其寻找高质量嵌入的能力。

这一局限源于一维相似性空间：节点若不发生碰撞，就无法交换顺序。为此，我们提出< style id='1'>维度退火 框架，通过在相似性空间中引入辅助维度 z 来绕过这一难题。每个节点的嵌入坐标扩展为 $(\kappa_i, \theta_i, z_i)$。随后，式 (2) 修改为

$$\chi'_{ij} = \frac{1}{2\pi}\frac{d'_{ij}}{\mu\kappa_i\kappa_j}\,, \tag{26}$$

$$d'_{ij} = \sqrt{(N\Delta\theta)^2 + (z_i - z_j)^2}\,. \tag{27}$$

负对数似然仍然可微，我们使用梯度下降将其最小化，并加入一个额外的 z方向势能 $V(\mathbf{z}\ t) = a(t)\sum_i |z_i|$。这里，退火系数$a(t) = t/T_{\mathrm{penalty}} = \ell\delta t/T_{\mathrm{penalty}}$，其中 ℓ 为优化步数，δt 为梯度下降的学习率。在优化初期，较小的 $a(t)$使节点能够利用辅助维度交换相对顺序而不发生碰撞；随着 $a(t)$增大，所有节点被挤压至 $z = 0$ 平面，使最终嵌入收缩到 $(\theta, z = 0)$。图 2 展示了维度退火的概览。

4. Barnes–Hut近似

维度退火缓解了势垒问题，但由于式（6）包含对所有 $\binom{N}{2}$ 节点对的求和，负对数似然的 $\mathcal{O}(N^2)$复杂度仍然存在。与天文学中的引力 N体模拟类似，我们采用 *Barnes–Hut*近似 [28, 29]对相距较远的节点进行分组，并近似计算它们的总贡献，从而将计算复杂度降至$\mathcal{O}(N \log\ N)$。

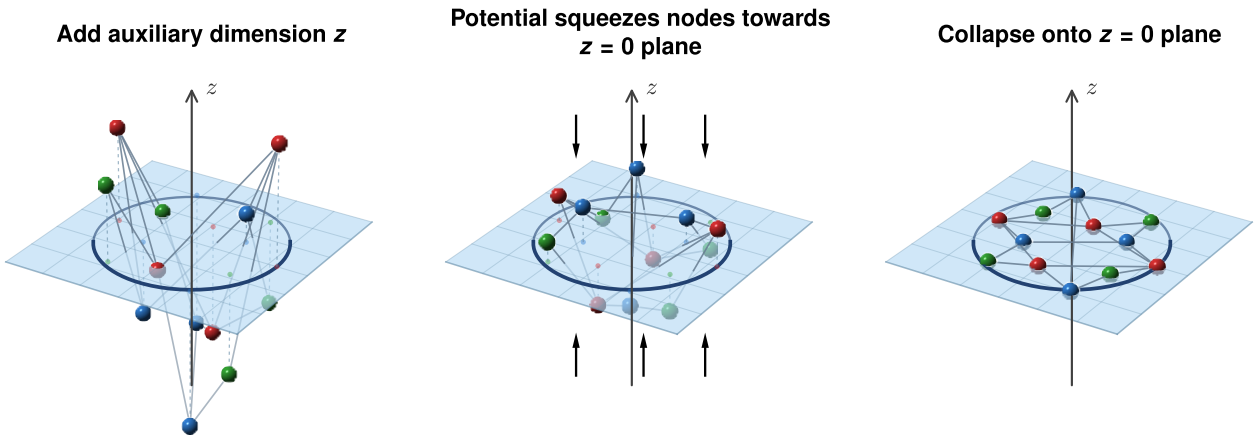

图 2：维度退火示意图。首先，引入一个辅助维度。与原始双曲模型不同，两个未连接的节点可以沿 z 方向彼此绕行而不发生碰撞。接着， z 方向的势能将节点挤向 $z = 0$ 平面。节点借助辅助维度逐渐接近其近似嵌入坐标。最后，节点塌缩到 $z = 0$ 平面上，从而得到双曲嵌入。

式（6）可改写为

$$\mathcal{S} = -\underbrace{\sum_{(i,j)\in E} [\ln p_{ij} - \ln(1-p_{ij})]}_{\text{attractive, edges only}} - \underbrace{\sum_{i<j} \ln(1-p_{ij})}_{\text{repulsive, all pairs}} . \quad (28)$$

由于网络稀疏性，式 (28) 的第一项可以低成本计算，而第二项则使用 Barnes–Hut方法进行近似。

在维度退火过程中，每个节点都有 θ_i、κ_i 和 z_i 坐标。坐标空间在 (θ, κ) 平面上进行划分。随着动力学过程的推进，辅助坐标 z 趋近于零。我们不沿 z 方向划分空间，而只跟踪每个单元中的平均 z 值。

划分采用树结构进行分层处理。根单元包含所有节点。如果一个单元中有两个或更多节点，就沿 θ 和 κ 维度分别二分，将该单元划分为四个单元。如此迭代，直至每个叶单元至多包含一个节点。Barnes-Hut树如图 3 所示。每个单元（叶单元或非叶单元）都会记录节点数量 n_c 及其质心

$$(\bar{\theta}_c, \bar{\kappa}_c, \bar{z}_c) = \frac{1}{n_c} \sum_{j\in c} (\theta_j, \kappa_j, z_j) . \quad (29)$$

优化的每个时间步都会构建该树。

空间划分完成后，可以从树的根节点开始遍历树，以计算负对数似然（NLL）及其梯度。当考察单元格 c时，我们要么近似其贡献（使用该单元格的质心），要么递归检查其子单元格。假设单元格 c 在 θ方向上的长度为 s_c。给定精度参数 Θ, 如果

$$s_c/\Delta\theta_{ic} \le \Theta , \quad (30)$$

然后，我们近似认为该单元的全部贡献都来自单元 c 的质心。否则，我们将打开该单元，以考察其子单元。较大的 Θ 会提高计算速度，但会降低准确性，反之亦然。

如果节点分布在嵌入空间中，则满足公式（30）的单元会按照距离进行层次排列，并且每一层用于计算负对数似然的单元数量保持不变。由于树的深度按 $\mathcal{O}$（log N）扩展，计算排斥项的总计算成本变为 $\mathcal{O}$（Nlog N）。此外，计算吸引项需要$\mathcal{O}$（$|E|$） = $\mathcal{O}$（$N\langle k\rangle$），因此，对于稀疏网络，最终的计算复杂度为 $\mathcal{O}$（Nlog N）。

5. 结果

5.1. 嵌入质量

在本节中，我们评估维度退火方法在合成双曲模型和现实世界网络中的有效性与准确性。式（6）中的负对数似然 $\mathcal{S}$直接衡量嵌入对给定网络结构的解释能力。贪婪导航成功率 s和 A*搜索算法的相对搜索成本 R 则评估其在导航中的实用性。

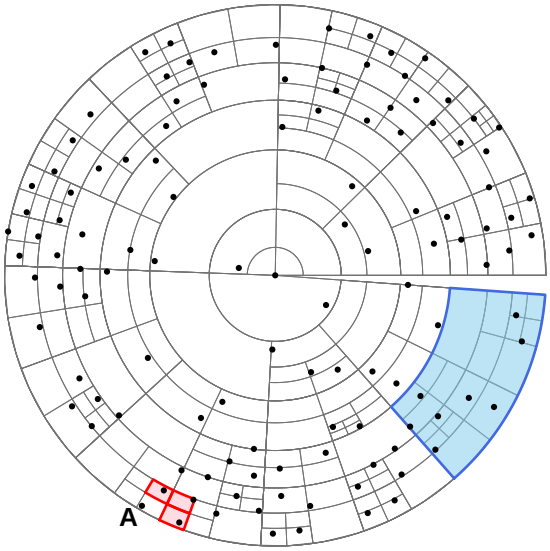

图 3：Barnes–Hut近似示意图。双曲空间被迭代划分：当一个单元格中包含多个节点时，该单元格就被划分为四个，直到每个单元格至多包含一个节点。计算相近节点的负对数似然（NLL）贡献时，会精确考虑每个节点的坐标。而远处节点的贡献则合并为一组，只考虑其质心。这使 NLL 的计算复杂度从 $\mathcal{O}(N^2)$ 降至 $\mathcal{O}(N \log N)$。例如，计算节点 A 的 NLL 项时，红色单元格中的节点距离较近，因此在计算中会分别精确考虑这三个单元格。与此同时，蓝色单元格中的节点距离较远，因此只将它们作为一组来考虑。

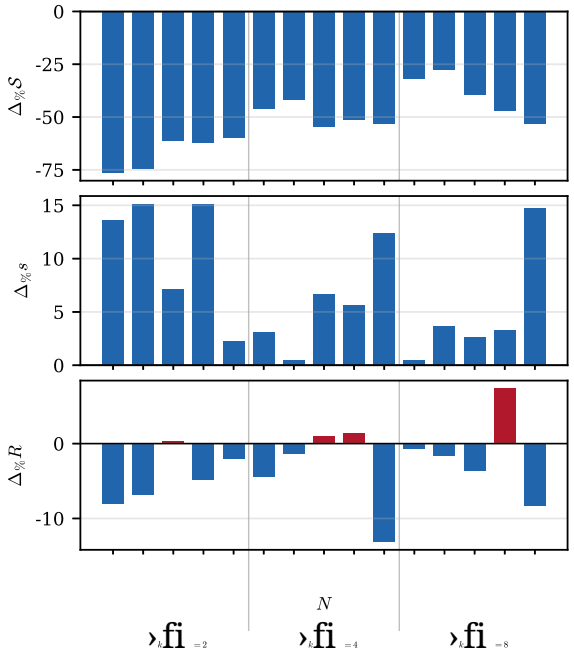

图 4：维度退火框架与最先进的 Mercator嵌入之间的比较。考虑平均度为 $\langle k \rangle = 2$、4、8 和 $N = 128$、256、$\cdots$、2048 的情况。顶部面板展示负对数似然（NLL），中部面板展示贪心导航成功率，底部面板展示 A*搜索算法的扩展比。图中绘制了它们的百分比差异。所提出的方法表现更好的情况以蓝色表示，而 Mercator 表现更好的情况以红色表示。对于所有情况，所提出的方法在 NLL 和贪心导航成功率方面均表现更好。对于大多数网络，所提出的方法在 A* 扩展比率方面表现更佳。

我们将最先进的 Mercator 嵌入 [19]用作基准。

我们生成了规模为$N = 128$、256、.....、2048、平均度为 $\langle k \rangle = 2$、4、8 的合成双曲网络$\beta = 4.0$。由于 Mercator 嵌入是为连通网络设计的，我们取每个网络的最大连通分量。我们通过百分比差异比较维度退火与 Mercator

$$\Delta_{\%}\mathcal{X} = 100 \times \frac{\mathcal{X}_{\mathrm{DA}} - \mathcal{X}_{\mathrm{mercator}}}{\mathcal{X}_{\mathrm{mercator}}}, \qquad (31)$$

其中 $\mathcal{X} \in \{\mathcal{S}, s, R\}$ ，下标表示嵌入方法。 $\mathcal{S}$ 和 R 的值越低，嵌入质量越高； s 的值越高，结果越准确。维度退火表现更好的情况以蓝色表示，Mercator 表现更好的情况以红色表示（图4）。就负对数似然和贪心导航成功率而言，维度退火在所有合成案例中均优于 Mercator。对于 A*搜索算法的扩展比，维度退火取得了更好的

在 15 个案例中的 11 个案例中取得了更好的结果。

在图5中，我们将相同的指标应用于来自社会、生物学、信息型和交通运输领域的真实网络数据集。数据集的详细信息和原始来源见补充表 S1。各面板的构成和配色方案与图4相同。在这三项指标中，维度退火在大多数情况下优于 Mercator。维度退火在 25 个案例中的 22 个案例里取得了低于 Mercator 的负对数似然。Mercator 表现更好的网络，其 $\beta \simeq 1$ 较低，因此这些网络呈现出较弱或可忽略的潜在几何结构。维度退火在 25 个网络中的 19 个网络上实现了更高的贪心导航成功率。在 25 个网络中的 18 个网络上，维度退火取得了更优的 A* 扩展比率。

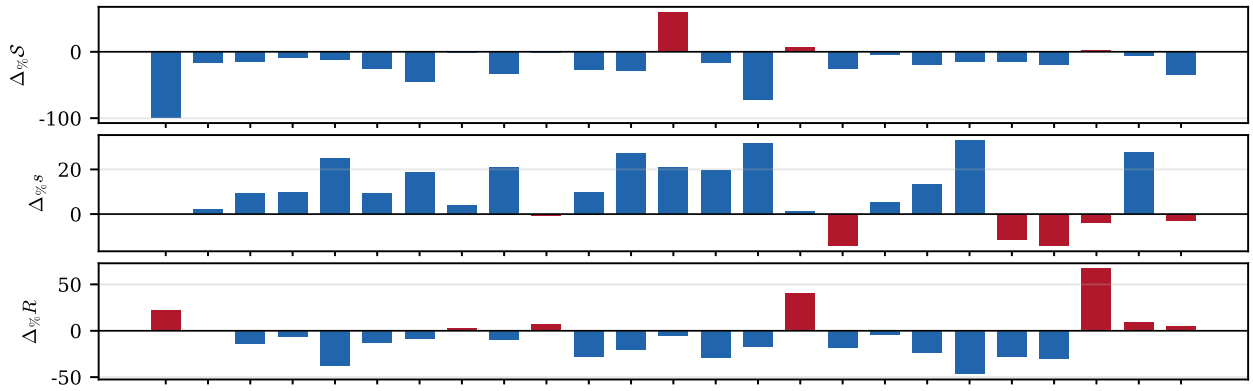

图 5：维度退火嵌入与 Mercator 在真实网络中的比较。网络按网络规模递增排序 N。上方面板展示负对数似然（NLL），中间面板展示贪心导航成功率，下方面板展示 A*搜索算法的扩展比。图中绘制了百分比差异。蓝色表示维度退火表现优于最先进的 Mercator 嵌入的情况，红色表示 Mercator 表现更优的情况。在这三个指标上，维度退火在大多数情况下表现更好。

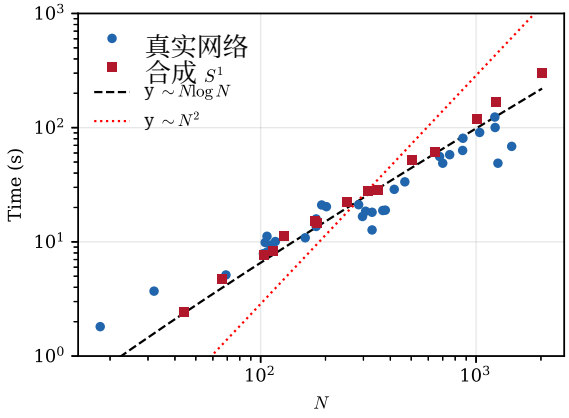

图 6：嵌入运行时间随网络规模的变化 N。蓝色圆圈表示真实网络，红色方块表示合成 $\mathbb{S}^1$ 模型网络。黑色虚线表示 $t \sim N \log N$，红色点线表示 $t \sim N^2$。计算时间大致与 $N \log N$ 成正比。

5.2. 可扩展性

图6展示了维度退火的运行时间随网络规模 N 的变化。蓝色圆形表示真实网络，红色方块表示合成 $\mathbb{S}^1$ 模型网络。作为对比，$y \propto N \log N$ 以黑色虚线表示，$y \propto N^2$ 则以红色点线表示。数据点大致沿着黑色虚线分布，显然并不符合红色点线所示的扩展趋势。这与 Mercator 方法 [19] 的$\mathcal{O}(N^2)$计算扩展性形成对比。计算时间使用 AMD Ryzen AI 9 HX 370 处理器。

6. 结论

在本研究中，我们引入了维度退火框架，并结合 Barnes–Hut近似，以获得可扩展的高质量双曲嵌入。通过在潜在空间中引入一个辅助维度，可以绕过一维相似性空间施加的拓扑约束。逐渐增大的势能会逐步限制辅助坐标，最终恢复原始的双曲嵌入。在许多方面，该方法类似于模拟退火 [30]。模拟退火会逐渐降低温度，同时以依赖于温度的概率随机接受上坡移动。维度退火对有效维度进行退火。利用额外自由度可以绕过势垒。随着优化的推进，额外自由度会逐渐受到抑制，最终被消除。我们通过负对数似然、贪心导航成功率和 A* 扩展比率评估了维度退火在合成网络和现实世界网络上的表现，结果表明该方法能够生成高质量嵌入。Barnes–Hut近似将计算复杂度从 $\mathcal{O}(N^2)$ 降至$\mathcal{O}(N \log N)$。维度退火框架也可能适用于具有以下特征的其他逆问题

这些问题存在大量局部极小值，并受到低维性所施加的拓扑约束。当前框架假设相似性空间为 $\mathbb{S}^1$；然而，真实网络的潜在空间可能具有更高维度 [31, 32, 33] ，或具有非平凡拓扑 [34, 35, 36]。因此，将该框架扩展到此类一般潜在空间，是未来研究的一个自然方向。

7. 致谢

我们感谢 Deok-Sun Lee 提供的许多宝贵建议并参与讨论。本研究得到韩国国家研究基金会（NRF）以下项目资助：RS-2026-25468383（S.H.L.）、RS-2023-00245174（B.J.）、RS-2025-00556024（H.C.）和 RS-2026-25539287（G.S.）；此外，G.S. 还获得韩国高等研究院 KIAS个人基金（编号 CG098002）资助。

8. 代码可用性

本文介绍的双曲嵌入框架已在基于**D**维**A**火**H**yperbolic **E**mbedding（DAHyE）的库中实现，该库使用 C++ 编写，并通过 pybind11 提供 Python 接口。源代码已公开发布于 https://github.com/bukyoungjhun/dahye。

参考文献

[1] R. Albert, A.-L. Barabási，复杂网络的统计力学，《现代物理评论》74 (1) (2002) 47–97。doi:10.1103/RevModPhys.74.47。[2]M. Barthélemy，空间网络，《物理学报告》499 (1–3) (2011) 1–101。doi:10.1016/j.physrep. 2010.11.002。[3] J. Dall, M. Christensen，随机几何图，《物理评论E》66 (1) (2002) 016121。doi:10. 1103/PhysRevE.66.016121。[4] N. Masuda, H. Miwa, N. Konno，具有小世界和无标度特性的地理阈值图，《物理评论E》71 (3) (2005) 036108。doi: 10.1103/PhysRevE.71.036108。

[5]M. Boguñá、I. Bonamassa、M. De Domenico、S. Havlin、D. Krioukov、M. Á. Serrano，网络几何，《自然综述：物理学》3（2）（2021）114–135。doi:10.1038/s42254-020-00264-4。[6] F. Papadopoulos、C. Psomas、D. Krioukov，通过重演双曲增长进行网络映射，《IEEE/ACM网络汇刊》23（1）（2015）198–211。doi:10.1109/TNET.2013.2294052。[7]D. Krioukov，聚类意味着网络中的几何，《物理评论快报》116（20）（2016）208302。doi:10.1103/PhysRevLett.116.208302。[8]M. Á. Serrano、D. Krioukov、M. Boguñá，复杂网络的自相似性与隐藏度量空间，《物理评论快报》100（7）（2008）078701。doi:10.1103/PhysRevLett.100.078701。[9] D. Krioukov、F. Papadopoulos、M. Kitsak、A. Vahdat、M. Boguñá，复杂网络的双曲几何，《物理评论E》82（3）（2010）036106。doi:10.1103/PhysRevE.82.036106。[10] B. L. Nortier、J. van der Kolk、R. Jankowski、S. Dobson、M. Á. Serrano、F. Battiston、M. Boguñá，潜在几何组织高阶相互作用，arXiv预印本 arXiv:2609.07906（2026）。[11]M. Boguñá、F. Papadopoulos、D. Krioukov，以双曲映射维持互联网，《自然通讯》1（2010）62。doi:10.1038/ncomms1063。[12] B. Kovács、G. Palla，双曲网络固有的社群结构，《科学报告》11（1）（2021）16050。doi:10.1038/s41598-021-93921-2。[13] Z. Wang、Y. Wu、Q. Li、F. Jin、W. Xiong，基于具有社群结构的双曲映射进行复杂网络链接预测，《物理学A：统计力学及其应用》450（2016）609–623。doi:10.1016/j.physa.2016.01.010。[14] M. Kitsak，利用双曲几何进行链接预测，《物理评论：研究》2（4）（2020）043113。doi:10.1103/PhysRevResearch.2.043113。[15] S. Osat、F. Papadopoulos、A. S. Teixeira、F. Radicchi，嵌入辅助的网络拆解，《物理

评论：研究》5（1）（2023）013076。
doi:10.1103/PhysRevResearch.5.013076。

[16] G.García-Pérez, M. Boguñá, M. Á. Serrano，通过几何重整化对真实网络进行多尺度展开，《自然·物理》14 (6) (2018) 583–589.
doi:10.1038/s41567-018-0072-5.

[17]J. van der Kolk，具有弱几何耦合的网络重整化，《物理评论E》110 (3) (2024) L032302.
doi:10.1103/PhysRevE. 110.L032302.

[18] S.Lizotte, J.-G. Young, A. Allard，对称性驱动的网络双曲空间嵌入，Communications Physics 8 (2025) 199. doi:10.1038/ s42005-025-02122-0.

[19]G. García-Pérez, A. Allard, M. Á. Serrano, M. Boguñá，Mercator：揭示复杂网络的忠实双曲嵌入，New Journal of Physics 21 (12) (2019) 123033.
doi:10.1088/ 1367-2630/ab57d2.

[20]R. Jankowski, A. Allard, M. Boguñá, M. Á. Serrano，《真实网络多维双曲嵌入的 D-Mercator 方法》，《自然·通讯》14 (1) (2023) 7585。
doi:10.1038/s41467-023-43337-5。

[21]M. Boguñá, D. Krioukov，《在超短时间内探索超小世界》，《物理评论快报》102 (5) (2009) 058701。
doi:10.1103/PhysRevLett.102.058701。

[22] G. Alanis-Lobato, P. Mier, M. A. Andrade-Navarro，《通过拉普拉斯算子将复杂网络高效嵌入双曲空间》，《科学报告》6 (1) (2016) 30108。
doi:10.1038/srep30108。

[23] A.Muscoloni, J. M. Thomas, S. Ciucci, G. Bianconi, C. V. Cannistraci，通过双曲空间中的合并嵌入实现机器学习与复杂网络的结合，《自然·通讯》8 (1) (2017) 1615. doi:10.1038/s41467-017-01825-5.

[24] J. M. Kleinberg，《小世界中的导航》，《自然》406 (6798) (2000) 845。doi:10.1038/35022643。

[25]S. H. Lee，P. Holme，《利用贪婪导航者探索地图》，《物理评论快报》108 (12) (2012) 128701。
doi:10.1103/PhysRevLett.108.128701。[26] J. Sun, D. ben Avraham，《地理嵌入图的贪婪连通性》，《物理评论E》82 (1) (2010) 016109。
doi:10.1103/PhysRevE.82. 016109。

[27] P. E. Hart, N. J. Nilsson, B. Raphael，最小成本路径启发式确定的形式化基础，IEEE Transactions on Systems Science and Cybernetics 4 (2) (1968) 100–107. doi:10.1109/TSSC. 1968.300136.

[28] J. Barnes, P. Hut，一种分层 $O(N\log\ N)$ 力计算算法，《自然》324 (1986) 446–449.
doi:10.1038/324446a0.

[29]T. Hamada、K. Nitadori、K. Benkrid、Y. Ohno、G. Morimoto、T. Masada、Y. Shibata、K. Oguri、M.Taiji，GPU 上 Barnes–Hut树算法的一种新型多步行并行算法——面向具有成本效益的高性能 N体模拟，《计算机科学：研究与开发》24 (1) (2009) 21–31。
doi:10.1007/s00450-009-0089-1。

[30]S. Kirkpatrick、C. D. Gelatt、M. P. Vecchi，通过模拟退火进行优化，《科学》220 (4598) (1983) 671–680。
doi:10.1126/science.220.4598. 671。

[31] G. Budel、M. Kitsak、R. Aldecoa、K. Zuev、D. Krioukov，$d+1$ 维随机双曲图，《物理评论E》109 (5) (2024) 054131。doi:
10.1103/PhysRevE.109.054131。

[32] P. Almagro, M. Boguñá, M. Á. Serrano，检测真实网络的超低维性，《自然·通讯》13 (1) (2022年) 6096。
doi:10.1038/ s41467-022-33685-z。

[33] B. Désy, P. Desrosiers, A. Allard，在双曲空间中对网络社群建模时，维度至关重要，《PNAS Nexus》2 (5) (2023) pgad136。
doi:10.1093/pnasnexus/pgad136。

[34] B. Jhun，复杂网络潜在几何的拓扑分析，《混沌：跨学科非线性科学期刊》32（1）（2022年）013116。
doi:10.1063/5.0073107。

[35] D. Taylor、F. Klimm、H. A. Harrington、M. Kramár、K. Mischaikow、M. A. Porter、P. J. Mucha，利用传染图的拓扑数据分析考察网络上的传播过程，《自然通讯》6（1）（2015）7723。doi:10.1038/ncomms8723。

[36] B. I. Mahler，《嵌入环面中的一类网络上的传染图分析》，《SIAM应用数学杂志》81(4) (2021) 1416–1440。doi:10.1137/18M1235910。

补充材料：通过维度退火和 Barnes–Hut近似实现双曲网络嵌入

Bukyoung Jhun[a, b], [c]Gangmin Son[d], [e]Hoyun Choi[d], Sang Hoon Lee[f]

[a]批判性计算研究中心，法兰克福歌德大学，德国法兰克福[b]网络与数据科学系，中欧大学，奥地利维也纳[c]物理与天文学系，首尔国立大学，韩国首尔[d]计算科学学院，韩国高等研究院，韩国首尔[e]物理系，罗马智慧大学，意大利罗马[f]物理系，庆尚国立大学，韩国晋州

S1. 数据集描述

表 S1 列出了本研究使用的经验网络。分析前，所有网络均转换为不含自环或重边的无向图。对于有向网络，忽略边方向；对于加权网络，忽略边权重。名称 列给出了正文中展示的网络名称，键 列给出了其在 Netzschleuder 数据库中的标识符 [1]。各行按图中的顺序排列，并按节点数递增排序。 N 表示节点数，E表示边数。所分析的网络均为无向简单图。

表 S1：实　　证网络数据集，用于真实网络　　比较。

Name	Key	描述	N	E	领域
疟原虫基因 A	疟疾_基因/HVR_3	重组抗原基因网络来自人类疟原虫 *P.* 恶性疟原虫 [2].	18	55	生物学
高中 A	add_health/comm3	美国高中的友谊网络学生（1994–95 年 ADD Health 调查。 [3]。	32	91	社会
高中 B	add_health/comm1	美国高中友谊网络生的 1994–95 ADD Health 调查 [3]。	69	220	社会
高中 C	add_health/comm2	美国高中友谊网络生的友谊网络，数据来自1994–95年 ADD Health 调查 [3]。	103	348	社会
政治类书籍	polbooks	美国政治类书籍的销售网络，基于美国亚马逊上销售的2004年总统选举前后政治类书籍的网络，其中边表示频繁的共同购买行为 [4]。	105	441	信息型
Game of 王座	《权力的游戏》_	《权力的游戏》角色的共同出现网络《列王的纷争》中的《权力的游戏》角色《列王的纷争》，边权重表示两个角色的名称出现的频率彼此相距不超过 15 个词 [5]。	107	352	社会
疟疾基因 B	疟原虫_基因/HVR_2	重组抗原基因网络来自人类疟原虫 *P.* 恶性疟原虫 [2].	112	743	生物学

电子邮箱： jhun@c3s.uni-frankfurt.de（Bukyoung Jhun），lshlj82@gnu.ac.kr（Sang Hoon Lee）

表 S1（续）

Name	Key	描述	N	E	领域
医师	医师_信任	.....之间的信任关系网络 美国中西部四个地区的医师 1966 [6]中的城市。	117	465	社会
漫威	漫威_ 合作关系	漫威角色之间的合作关系网络 从维基百科提取， 其中节点代表英雄或 反派，边代表 合作关系。	181	224	社会
秀丽隐杆线虫 神经	celegansneural	表示神经连接的网络 秀丽隐杆线虫 线虫 [7]。	297	2148	生物学
疟疾基因 C	疟疾_基因/HVR_ 1	重组抗原基因网络 来自人类疟原虫 *P.* 恶性疟原虫 [2].	307	2812	生物学
Facebook	facebook_好友	一个经过匿名化的小型 Facebook 自我中心 网络，数据来自 2014年4月。节点是 Facebook 个人资料，且当 这两个个人资料在 Facebook [8] 上是“好友”。	329	1954年	社会
大肠杆菌 操纵子	大肠杆菌_ 转录/v1.0	操纵子网络及其两两 相互作用于大肠杆菌 [9]。	329	456	生物学
伦敦 运输	伦敦_运输	具有三种边类型的多层网络 表示其中链接的类型 伦敦火车站三层之间的连接: 伦敦地铁、伦敦地上铁和 码头区轻轨 [10]。	369	430	交通运输
网络科学	网络科学	.....之间的合著网络 从事网络科学研究的科学家， 来自2006年。该网络是一个单模 由.....的二部图投影得到的 作者及其科学 出版物 [11]。	379	914	社会
欧洲航空公司	欧盟_航空公司	航空路线的多层网络 欧洲机场之间，其中每个 37 种边类型代表不同航空公司的航线 由不同的航空公司运营 [12]。	417	2953	交通运输
维也纳街道	城市_街道/ 维也纳	城市街道网络，对应于 20座城市的1平方英里地图 遍布全球 [13, 14]。	467	691	交通运输
维基百科 （《科学》）	维基_科学	科学领域网络，提取自 英文维基百科，时间为年初 2020 [15]。	677	6517	信息型
互联网	互联网_top_pop/ Kdl	互联网图在以下时间的各种快照 存在点（PoP）层级（该层级 介于互联网协议层级和自治系统层级之间）， 从世界各地收集，并在 不同时期。最早的快照 来自 ARPANET（1969–1972），此外还有 少数更早的快照 2000 [16]。	754	895	技术
出口产品	product_space/HS	基于全球贸易的产品网络， 边连接由出口 相似国家所出口的产品，并赋予权重 按出口相似度 [17] 加权。	866	2532	经济
首尔街道	城市_街道/ 首尔	城市街道网络，对应于 20座城市的1平方英里地图 世界各地 [13, 14]。	869	1307	交通运输
欧洲道路	欧洲道路	国际“E级道路”网络， 主要分布在欧洲 [18]。	1039	1305	交通运输

表 S1（续）

Name	Key	描述	N	E	领域
政治博客	polblogs	……之间的有向超链接网络美国政治博客 [19]。	1222	16714	信息型
航线	美国联邦航空管理局_航线	航空交通航线网络，来自美国联邦航空管理局（联邦航空管理局）国家飞行数据中心（NFDC）优选航线数据库 [20]。	1226	2408	交通运输
科学合作	new_新西兰 _合作	科学合作网络新西兰机构之间 [21]。	1463	4246	社会

参考文献

[1] T. P. Peixoto, 《Netzschleuder 网络目录与存储库》，Zenodo（2020年）。

[2] D. B. Larremore、A. Clauset 和 C.O. Buckee, 《分析高度[2] 重组疟原虫基因的网络方法》，PLoS Comput Biol**9**，e1003268（2013）。

[3] J. Moody, 《同伴影响群体：识别大型网络中的稠密簇》，Soc. Networks **23**，261–283（2001）。

[4] V. Krebs, 《政治书籍网络》，未发表（2004）。

[5] A. Beveridge 和 J. Shan, 《权力的游戏》网络，Math. Horizons **23**，18–22（2016）。

[6] J. Coleman、E. Katz 和 H. Menzel, 《医师群体中的创新扩散》，《社会测量学》**20**，253（1957）。[7] J. G. White、E. Southgate、J. N. Thomson 和 S. Brenner, 《线虫秀丽隐杆线虫的神经系统结构：蠕虫的心智》，《伦敦皇家学会哲学汇刊》**314**，340（1986）。[8] B. F. Maier 和 D. Brockmann, 《任意复杂网络上随机游走的覆盖时间》，《物理评论 E》**96**，042307（2017）。[9] S. S. Shen-Orr、R. Milo、S. Mangan 和 Uri Alon, 《大肠杆菌转录调控网络中的网络模体》，《自然遗传学》**31**，64–68（2002）。[10] M. De Domenico、A. Sole-Ribalta、S. Gomez 和 A. Arenas, 《随机故障下互连网络的可导航性》，《美国国家科学院院刊》**111**，8351–8356（2014）。[11] M. E. J. Newman, 《利用矩阵的特征向量发现网络中的社群结构》，《物理评论 E》**74** （2006），10.1103/physreve.74.036104。[12] A. Cardillo、J. Gómez-Gardeñes、M. Zanin、M. Romance、D. Papo、F. del Pozo 和 S. Boccaletti, 《多重性中网络特征的涌现》，《科学报告》**3**（2013），10.1038/srep01344。[13] P. Crucitti、V. Latora 和 S. Porta, 《城市街道空间网络中的中心性度量》，《物理评论 E》**73** （2006），10.1103/physreve.73.036125。[14] V. Latora、V. Nicosia 和 G. Russo, 复杂网络（剑桥大学出版社，2017）。[15] A. Calderone, 《基于维基百科的科学地图》（2020），10.6084/m9.figshare.11638932.v5。[16] S. Knight、H. X. Nguyen、N. Falkner、R. Bowden 和 M. Roughan, 《互联网拓扑动物园》，《IEEE精选通信领域期刊》**29**，1765–1775（2011）。[17] C. A. Hidalgo 和 R. Hausmann, 《经济复杂性的构成要素》，《美国国家科学院院刊》**106**，10570–10575（2009）。

[18] L. Šubelj 和 M. Bajec, 《使用平衡传播进行鲁棒网络社区检测》, Eur. Phys. J. B **81**, 353–362（2011）。[19] L. A. Adamic 和 N. Glance, 《政治博客圈与2004年美国大选》, 载于第三届链接发现国际研讨会 - *LinkKDD '05* 论文集（ACM Press, 2005）。[20] U. S. F. A. Administration, 《空中交通管制系统指挥中心》（2010）。[21] S.Aref、D.Friggens 和S.Hendy, 《利用 Scopus文献计量数据分析新西兰机构的科学合作》, 载于澳大拉西亚计算机科学周多会议论文集（ACM, 2018）。