Teoria Algorytmów i Obliczeń

Dokumentacja

Aplikacja znajdująca maksymalną część wspólną dwóch spójnych grafów

Jakub Karolak Konrad Kurach Aleksy Miśtal

1. Opis biznesowy

Celem projektu było stworzenie aplikacji znajdującej maksymalny, spójny podgraf dwóch, także spójnych, grafów. Użytkownikiem docelowym jest osoba sprawdzająca zadanie. Projekt został stworzony na potrzeby przedmiotu Teoria Algorytmów i Obliczeń.

2. Wymagania funkcjonalne

Aplikacja wczytuje dwa grafy z pliku, następnie wylicza maksymalną część wspólną tych grafów algorytmem wybranym przez użytkownika. Użytkownik może wybrać jeden z trzech algorytmów. Jeden dokładny i dwa aproksymacyjne. Algorytmy aproksymacyjne muszą mieć złożoność rzędu wielomianowego. Aplikacja zwraca maksymalną część wspólną oraz czas wykonywania obliczeń podany w milisekundach.

3. Wymagania niefunkcjonalne

Aplikacja przyjmuje jako wejście dwa grafy reprezentowane jako macierze sąsiedztwa. Grafy te zapisane są w formacie .csv i przechowywane są w oddzielnych plikach. Aplikacja uruchamiana jest z konsoli poprzez wywołanie pliku startowego .exe. Po uruchomieniu i prawidłowym wczytaniu grafów użytkownik widzi tekstowe menu służące do wyboru odpowiedniego algorytmu. Użytkownik może nacisnąć klawisze '1', '2' lub '3', odpowiadające kolejno algorytmowi dokładnemu oraz dwóm algorytmom aproksymacyjnym. Wybór dowolnego innego klawisza powoduje wywołanie komunikatu błędu. Po naciśnięciu jednego z poprawnych klawiszy, aplikacja wykonuje obliczenia. Jako wynik zwracany jest plik z maksymalną częścią wspólną obu grafów, nazwany 'result[n].csv', gdzie [n] jest numerem wybranego algorytmu oraz czas wykonania, drukowany do konsoli. Zawartość pliku 'result[n].csv' będzie mapowaniem wierzchołków obu grafów w postaci dwóch ciągów w ten sposób, aby grafy indukowane były identyczne kolejne wierzchołki z pierwszego ciągu (pochodzące z pierwszego grafu) odpowiadają kolejnym wierzchołkom z drugiego ciągu (pochodzącym z drugiego grafu). Naciśniecie klawisza 'ESC' kończy prace aplikacji.

4. Zasada działania

Problem zadany treścią projektu jest bez wątpienia problemem NP-zupełnym, co oznacza, że na chwile obecną (zakładając P ≠ NP) nie istnieje żaden algorytm dokładny rozwiązujący go w czasie wielomianowym.

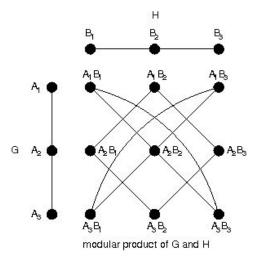
Opisane poniżej sprowadzenie problemu do szukania kliki w odpowiednio stworzonym grafie jest zabiegiem pozwalającym zastosować szerzej znane algorytmy wyszukiwania kliki maksymalnej w celu jego rozwiązania, jednak w żaden sposób nie wpływają na złożoność algorytmu, ponieważ problem znajdowania maksymalnej kliki jest również NP-zupełny.

W istocie, problem, który rozpatrujemy jest NP-trudny, co oznacza, że nie istnieje (zakładając P \neq NP) żaden algorytm aproksymacyjny, który w czasie wielomianowym dla n wierzchołków grafu zawsze znajdzie rozwiązanie zachowujące współczynnik n^{1- ϵ} rozwiązania optymalnego, gdzie $\epsilon > 0^{[7]}$.

We wszystkich zastosowanych przez nas algorytmach wykorzystaliśmy fakt, iż zadany problem można z powodzeniem sprowadzić do poszukiwania maksymalnej kliki w specjalnie skonstruowanym na potrzeby zadania, tzw. grafie modularnym (ang. modular product graph). Zbiór wierzchołków takiego grafu to iloczyn kartezjański wierzchołków dwóch grafów dla których badamy problem (V1 x V2), a krawędź w grafie modularnym istnieje wtedy i tylko wtedy, kiedy spełnione są następujące reguły:

(ui, uj)
$$\in$$
 E(G1) \land (vi, vj) \in E(G2)
lub
(ui, uj) \notin E(G1) \land (vi, vj) \notin E(G2)

gdzie (ui, uj) to krawędzie w grafie pierwszym, a (vi, vj) to krawędzie w grafie drugim.



rys.1. Przykładowy graf modularny dla dwóch prostych grafów

Nie trudno zauważyć, że w tak stworzonym grafie (*rys. 1*) maksymalna klika odpowiada maksymalnemu wspólnemu grafowi indukowanemu przez wierzchołki, które należą do tej kliki (każdy wierzchołek w grafie modularnym to dwa odpowiadające mu wierzchołki w grafach wejściowych). Podamy teraz szkic dowodu, iż w grafie modularnym jest klika wtedy i tylko wtedy, kiedy tworzy ona dwa grafy izomorficzne w grafach, z których powstał ten graf modularny:

- 1. /=/ Nie wprost. Załóżmy, że podgraf grafu modularnego nie jest kliką, ale grafy odpowiadające temu podgrafowi w grafach wejściowych są izomorficzne. Jeśli podgraf nie jest kliką to musi istnieć zależność w grafach G1 oraz G2, że wierzchołki jednego grafu łączą się ze sobą, a drugiego nie (gdyż nie są one połączone w grafie modularnym w myśl przedstawionych wyżej reguł). W takim razie nie mogą być one izomorficzne. Sprzeczność.
- 2. /⇒/ Nie wprost. Załóżmy, że wspólne podgrafy nie są izomorficzne, ale w grafie modularnym istnieje klika im odpowiadająca. Jeśli nie są izomorficzne to w grafie modularnym musi nie istnieć analogicznie krawędź pomiędzy którąś z par wierzchołków, gdyż w pierwszym grafie będą one połączone, a w drugim nie. Stąd odpowiadający podgraf grafu modularnego nie może być kliką. Sprzeczność.

W myśl przytoczonego wyżej szkicu dowodu dosyć łatwo przejść do stwierdzenia, iż znalezienie maksymalnej kliki w grafie modularnym oznacza znalezienie maksymalnego, wspólnego grafu indukowanego przez odpowiadające wierzchołki w grafach wejściowych. Bliższy opis przedstawionych zależności można znaleźć w pracy^[4] s. 3,4.

Naszym zadaniem było znalezienie maksymalnych wspólnych grafów, które będą indukowane przez zbiór wierzchołków i posiadały w pierwszej wersji problemu maksymalną ilość wierzchołków, a w drugiej wersji problemu maksymalną sumę ilości wierzchołków i krawędzi oraz co bardzo ważne - były spójne.

Warunek spójności jest o tyle ważny, że wymusza na nas wprowadzenie modyfikacji do algorytmu szukania maksymalnej kliki w grafie modularnym, ponieważ nie każda maksymalna klika odpowiada maksymalnemu spójnemu podgrafowi (co prawda będzie on zawsze maksymalny, ale niekoniecznie spójny).

Opisane wyżej przekształcenia wymuszają na nas przyjęcie odpowiedniego rozmiaru problemu. Jako, że będziemy działać na grafie modularnym, który jest iloczynem kartezjańskim wierzchołków grafów, z których powstał to za rozmiar problemu postanowiliśmy przyjąć $n = |V(G1)|^*|V(G2)|$.

4.1. Algorytm dokładny

Aby znaleźć maksymalną część wspólną dwóch grafów, jak już zostało to zasygnalizowane powyżej, rozpatrzymy problem znajdowania maksymalnej kliki w grafie modularnym. Do rozwiązania problemu został użyty algorytm Brona-Kerboscha z modyfikacją Iny Koch^[9], która to służy zachowaniu spójności grafów wynikowych. Algorytm Brona-Kerboscha jest jednym z najszerzej wykorzystywanych algorytmów rekurencyjnych do znajdywania maksymalnej kliki w grafie, który w podstawowej wersji znajduje wszystkie maksymalne kliki zapamiętując już wykorzystane wierzchołki i w ten sposób unikając niepotrzebnych wywołań rekurencyjnych (w odróżnieniu od wersji stosujących pełen przegląd możliwych rozwiązań).

Opis działania podstawowej wersji algorytmu Brona-Kerbosha w języku naturalnym:

Przy pierwszym wywołaniu algorytmu zbiory R i X są puste, a zbiór P zawiera wszystkie wierzchołki grafu. Zasada działania algorytmu jest następująca:

Najpierw sprawdzamy w algorytmie, czy zbiory P i X są puste. Jeśli tak, to zbiór R zawiera maksymalną klikę. Wypisujemy zawartość zbioru R i kończymy.

Jeśli zbiór P nie jest pusty, to wybieramy z niego kolejne wierzchołki v. Dla każdego z tych wierzchołków tworzymy następujące zbiory tymczasowe:

- N zbiór wszystkich sąsiadów wierzchołka v
- R' zbiór R z dodanym wierzchołkiem v
- P' iloczyn zbiorów P i N (z P' zostaną usunięte wszystkie wierzchołki, które nie są sąsiadami wierzchołka *v*)
- X' iloczyn zbiorów X i N (z X' zostaną usunięte wszystkie wierzchołki, które nie są sąsiadami wierzchołka *v*)

Wywołujemy rekurencyjnie algorytm ze zbiorami P', R' i X'.

Następnie ze zbioru P usuwamy wierzchołek *v*, a dodajemy go do zbioru X i kontynuujemy pętlę.

Algorytm Brona-Kerboscha w wersji podstawowej, napisany przy użyciu pseudokodu:

```
G = wejściowy graf
```

R = zbiór wierzchołków, które są częściowym wynikiem znajdowania kliki

P = zbiór wierzchołków, które są kandydatami do rozważenia

X = zbiór wierzchołków pominiętych

C = zbiór wyjściowych klik maksymalnych

Modyfikacja algorytmu na potrzeby naszego problemu była konieczna ze względu na to, iż tak znalezione kliki maksymalne nie muszą implikować dwóch **spójnych** wspólnych podgrafów w grafach wejściowych.

W celu modyfikacji algorytmu zbiór krawędzi grafu modularnego został podzielony na dwie rozłączne klasy. Oznaczając krawędzie grafu modularnego, które powstały, ponieważ istniały dwie odpowiednie krawędzie w dwóch grafach (c-krawędzie, ang.connected) poprzez wagę równą 1, a resztę z nich, czyli takie, dla których nie istniały odpowiednie krawędzie w dwóch grafach (d-krawędzie, ang. disconnected) poprzez wagę -1 zapewnia nam podział krawędzi grafu na dwa rozłączne zbiory.

Wprowadźmy teraz pojęcie c-kliki. Niech będzie to klika w grafie G, która składa się z c- oraz d-krawędzi, która jest rozpinana przez c-krawędzie w sposób spójny oraz acykliczny.

Nie trudno jest zauważyć, że tak skonstruowana klika odpowiada wspólnemu podgrafowi w dwóch grafach wejściowych, który już w tym przypadku **zawsze** spójny.

Szkic dowodu:

1. /⇒/ Mamy daną c-klikę, która jest rozpinana przez c-krawędzie. c-krawędź w G oznacza, że dwa wierzchołki w grafach wejściowych posiadały odpowiednie krawędzie. Te krawędzie tworzą dwa spójne podgrafy w G1 oraz G2. Jeśli rozważymy następną c-krawędź w G, która jest incydentna z wcześniej analizowaną krawędzią, ponownie odpowiednie krawędzie zostaną dodane do podgrafów w G1 i G2. Ta c-krawędź tworzy w rezultacie kolejne spójne podgrafy w G1 i G2, ponieważ w grafie modularnym G incydentne c-krawędzie

pojawiają się tylko wtedy, gdy odpowiednie wierzchołki są połączone wspólną krawędzią w G1 i G2. Ostatecznie dwa wspólne grafy są spójne.

2. /=/ Dwa spójne podgrafy w G1 i G2 składają się ze zbioru incydentnych krawędzi. Dwa wierzchołki, które posiadają wspólną krawędź w grafie G1 oraz mogą być zmapowane na odpowiednie wierzchołki w grafie G2 implikują c-krawędź w grafie modularnym G. Jeśli do tej pary wierzchołków zostanie dodany wierzchołek, który jest połączony krawędzią z tą parą wierzchołków w G1 i G2, pojawia się nowa możliwość mapowania tego nowego wierzchołka oraz wierzchołka z pary w G1 do odpowiednich w G2. Ta możliwość mapowania jest reprezentowana przez c-krawędź w G, która jest incydentna z pierwszą c-krawędzią. W takim razie klika, która odpowiada dwóm spójnym podgrafom jest rozpinana przez c-krawędzie w sposób spójny oraz acykliczny.

Po przedstawieniu powyższych obserwacji nasz problem sprowadza się w takim razie do wyszukiwania w grafie maksymalnej c-kliki.

Aby rozwiązać ten problem należy odpowiednio zmodyfikować przedstawiony już algorytm Brona-Kerboscha. W tym przypadku zbiór R będzie rozszerzany tylko o takie wierzchołki, które są połączone przynajmniej jedną c-krawędzią z wierzchołkami w zbiorze R w grafie. Zbiór P dzielimy na dwa zbiory - P, który zawiera wierzchołki, które są połączone przynajmniej jedną c-krawędzią z wierzchołkami zbioru R oraz D, który zawiera wierzchołki, które nie są połączone żadną c-krawędzią z wierzchołkami zbioru R. Tak jak poprzednio zbiór R jest rozszerzany jedynie o wierzchołki ze zbioru P. Każdy nowo wybrany wierzchołek z P implikuje weryfikacje wierzchołków ze zbioru D, czy są one połączone z tym wierzchołkiem poprzez c-krawędź, a jeśli tak to odpowiedni wierzchołek jest usuwany ze zbioru D i dodawany do zbioru P. Podczas rekursji nowy zbiór D jest przecinany ze zbiorem sąsiadów wierzchołka dodanego ostatnio do R.

```
G = wejściowy graf
R = zbiór wierzchołków, które są częściowym wynikiem znajdowania kliki
P = zbiór wierzchołków, które są kandydatami do rozważenia (c-krawędzie)
D = zbiór wierzchołków nie połączonych z R żądnymi c-krawędziami
X = zbiór wierzchołków pominiętych
C = klika największa

BK_Koch(G, R, P, D, X):
begin
    if P is empty and X is empty then
        add R to C;  // znaleziona spójna klika maksymalna
    end
    else
```

W przeciwieństwie do podstawowego algorytmu Brona-Kerbosha, zmodyfikowany algorytm nie może zostać zainicjowany ze zbiorem R, który jest pusty, ponieważ zbiór P musi zawierać wierzchołki, które są połączone przynajmniej jedną c-krawędzią z wierzchołkami zbioru R i w tym przypadku podczas inicjalizacji byłby on również pusty.

Aby rozwiązać to ograniczenie wystarczy inicjować zmodyfikowany algorytm kolejnymi wierzchołkami z grafu jako zbiór R oraz odpowiednim zbiorem wierzchołków P i D. W tym przypadku każda c-klika z ilością wierzchołków n zostanie wskazana n razy, dlatego też konieczne jest wprowadzenie nowego zbioru T, który eliminuje wierzchołki grafu, które zostały już wykorzystane do zainicjowania algorytmu w jego dalszych wywołaniach.

Pseudokod algorytmu inicjalizującego:

```
BK_Koch(G, v, P, D, X);
T = D ∪ v;
end
end
```

Aby jeszcze bardziej ograniczyć ilość analizowanych klik tego samego rozmiaru zmodyfikowany został fragment algorytmu BK_Koch(), a dokładniej moment, kiedy wierzchołki są dodawane do zbioru P - wierzchołki, które są już w zbiorze T nie są dodawane do P, ale do zbioru X (linia 10).

Znajdując wszystkie maksymalne c-kliki w grafie największa z nich ze względu na ilość wierzchołków stanowi rozwiązanie pierwszej wersji naszego problemu. Wśród maksymalnych c-klik jest również klika, która stanowi rozwiązanie drugiej wersji problemu, ale w tym przypadku należy wziąć również pod uwagę ilość krawędzi, która ta klika implikuje w grafach wejściowych.

Dokładny dowód poprawności zmodyfikowanego algorytmu Brona-Kerbosha na potrzeby zachowania spójności przedstawiła Ina Koch w swojej pracy [9].

Dolne ograniczenie wywołań algorytmu Brona-Kerbosha można oszacować poprzez wielkość największej kliki w grafie, kiedy to cały graf jest kliką maksymalną i jest ono równe wielkości tej kliki czyli ilości wierzchołków tego grafu (n).

Aby oszacować złożoność pesymistyczną algorytmu Brona-Kerbosha należy zastanowić się nad operacjami dominującymi, które w nim występują. Za operacje dominujące przyjmijmy liczbę wywołań rekurencyjnych (wywołań funkcji BK(G, R, P, X)) Bez wątpienia w najgorszym przypadku, nawet dla wersji z wykorzystaniem piwotu algorytm będzie musiał przejrzeć wszystkie możliwe kliki w danym grafie. Dochodząc do takich wniosków, bardzo pomocna w dalszej analizie jest praca J.W. Moon'a oraz L. Moser'a^[6], z której wynika, że maksymalna liczba klik w dowolnym grafie o n wierzchołkach wynosi $3^{n/3}$. Biorąc to pod uwagę dochodzimy do wniosku, iż złożoność zastosowanego na potrzeby zadania algorytmu Brona-Kerbosha jest rzedu $O(3^{n/3})^{[8]}$.

4.2. Algorytm aproksymacyjny 1

Jako pierwszy algorytm aproksymacyjny został zaimplementowany algorytm wykorzystujący zachłanną heurystykę. Jest to algorytm dający dosyć dobre wyniki dla grafów losowych, jednak stosunkowo łatwo jest podać złośliwy przykład grafu, dla którego algorytm zwraca jako wynik klikę składającą się z dwóch wierzchołków pomimo, iż w grafie wejściowym istnieje klika o wiele większa.

Algorytm z zachłanną heurystyką napisany za pomocą pseudokodu:

```
G = wejściowy graf

Greedy(G):
begin
    if G is empty then return ∅;
    else choose a vertex v ∈ G of highest degree;
        return {v} ∪ Greedy(neighborhood(v));
    end
end
```

Algorytm ten rozpoczyna wybierając wierzchołek o najwyższym stopniu. Ten wierzchołek jest dodawany do potencjalnej kliki. Następnie usuwa ten wierzchołek i wszystkie wierzchołki nie będące jego sąsiadami i przechodzi na sąsiada o najwyższym stopniu. Ten proces jest powtarzany dopóki wszystkie wierzchołki grafu nie zostaną usunięte.

Złożoność pesymistyczna tego algorytmu jest rzędu $O(n^3)$, ponieważ operacją dominującą w tym algorytmie jest znajdowanie wierzchołka o najwyższym stopniu, dla której złożoność czasowa wynosi $O(n^2)^{[2]}$ natomiast funkcja Greedy(G) jest wywoływana maksymalnie n razy, bo tyle wierzchołków jest w grafie co daje sumaryczną złożoność rzędu $O(n^3)$.

4.3. Algorytm aproksymacyjny 2

Jako drugi z algorytmów aproksymacyjnych został zaimplementowany algorytm Ramseya. Algorytm Ramseya jest ulepszeniem algorytmu zachłannej heurystyki, więc powinien on w naturalny sposób dawać lepsze wyniki. Usprawnienie to polega w głównej mierze na rozpatrywaniu również części grafu, który algorytm z zachłanną heurystyką by od razu odrzucił (wierzchołki nie będące sąsiadami wierzchołka o najwyższym stopniu). Dzięki temu algorytm Ramseya ma zawsze do wyboru dwie kliki, jedną znalezioną w sąsiedztwie wraz z wierzchołkiem o największym stopniu oraz drugą znalezioną poza sąsiedztwem. Algorytm wybiera zawsze większą z tych dwóch. *Preprocessing* oraz *postprocessing* wygląda również analogicznie jak w dwóch zaprezentowanych już algorytmach.

Sam algorytm składa się z dwóch procedur. Podprocedura Ramsey(G) wygląda bardzo podobnie jak w przypadku pierwszego algorytmu aproksymującego, jednak różni się wprowadzeniem zmian opisanych powyżej oraz bardzo istotną dla dalszej

części algorytmu modyfikacją polegającą na zwracaniu oprócz kliki także zbioru niezależnego, który to jest ściśle z nią związany (znajdowanie zbioru niezależnego jest problemem dualnym do znajdowania kliki). Znalezione zbiory niezależne są następnie wykorzystywane przez procedure IS_Removal(G) (ang. IS = Independent Set), która to sukcesywnie zmniejsza graf o znalezione zbiory niezależne (usunięcie zbioru niezależnego może prowadzić do maksymalnie usunięcia jednego wierzchołku z kliki, gdyż klika i zbiór niezależny mogą współdzielić maksymalnie jeden wierzchołek) i w ten sposób usprawniając działanie finalnego algorytmu.

Podprocedura Ramsey(G) napisana za pomocą pseudokodu:

G = wejściowy graf

end

```
Ramsey(G):
begin
       if G = \emptyset then return (\emptyset, \emptyset);
       choose a vertex v \in G of highest degree;
       (C_1; I_1) = Ramsey(N(v));
       (C_2; I_2) = Ramsey(\overline{N}(v));
       return (larger of (C_1 \cup \{v\}, C_2), larger of (I_1; I_2 \cup \{v\}));
end
Procedura IS Removal(G) napisana za pomocą pseudokodu:
G = wejściowy graf
IS_Removal(G):
begin
       i = 1;
       (C_i; I_i) = Ramsey(G);
       while G \neq \emptyset:
               G = G \setminus I_i;
               i = i + 1;
               (C_i; I_i) = Ramsey(G);
       return \max_{i \le i} C_i;
```

Złożoność pesymistyczna tego algorytmu jest rzędu $O(n^4)$. Wiemy już z analizy poprzedniego algorytmu aproksymacyjnego, że znajdowanie wierzchołka o najwyższym stopniu wymaga $O(n^2)$ operacji. Liczbę wywołań funkcji Ramsey(G) możemy oszacować przez O(n) gdyż każdy z wierzchołków wybierany jest jako

maksymalny dokładnie raz i nie bierze udziału w dalszych wywołaniach. Zarówno wybór sąsiadów wierzchołka v: N(v) jak i dodanie wierzchołka do kliki oraz zbioru wierzchołków niezależnych nie przekracza $O(n^2)$ operacji elementarnych, więc nie mają wpływu na rząd wielkości złożoności obliczeniowej. Funkcja IS_Removal(G) wywołuje funkcję Ramsey(G) O(n) razy, co daje sumaryczną złożoność rzędu $O(n^4)$.

Literatura

- [1] Edmund Duesbury, ''Applications and Variations of the Maximum Common Subgraph for the Determination of Chemical Similarity'', 2015
- [2] Steven Homer, Marcus Peinado, "On the Performance of Polynomial-time CLIQUE Approximation Algorithms on Very Large Graphs", 2000
- [3] Ravi B. Boppana, Magnús M. Halldórsson, "Approximating maximum independent sets by excluding subgraphs", 1992
- [4] Andrea Torsello, Marcello Pelillo, Andrea Albarelli, "Matching Relational Structures using the Edge-Association Graph", 2007
- [5] Whitney, H, "Congruent Graphs and the Connectivity of Graphs", 1932
- [6] Moon, J. W., Moser, L., "On cliques in graphs", 1965
- [7] Zuckerman, D., "Linear degree extractors and the inapproximability of max clique and chromatic number", 2006
- [8] Akira Tanaka, Haruhisa Takahashi, "The worst-case time complexity for generating all maximal cliques and computational experiments", 2006
- [9] Ina Koch, "Enumerating all connected maximal common subgraphs in two graphs", 2000