BABEŞ-BOLYAI UNIVERSITY OF CLUJ-NAPOCA FACULTY OF MATHEMATICS AND INFORMATICS SPECIALIZATION: COMPUTER SCIENCE

Diploma Thesis

Critical node detection problem in complex networks

Abstract

EZ AZ OLDAL NEM RÉSZE A DOLGOZATNAK!

Ezt az angol kivonatot külön lapra kell nyomtatni és alá kell írni!

A DOLGOZATTAL EGYÜTT KELL BEADNI!

Kötelező befejezés:

This work is the result of my own activity. I have neither given nor received unauthorized assistance on this work.

2020 BÉCZI ELIÉZER

ADVISOR: ASSIST PROF. DR. GASKÓ NOÉMI Babeş-Bolyai University of Cluj-Napoca Faculty of Mathematics and Informatics Specialization: Computer Science

Diploma Thesis

Critical node detection problem in complex networks



ADVISOR: STUDENT:
ASSIST PROF. DR. GASKÓ NOÉMI BÉCZI ELIÉZER

Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca Facultatea de Matematică și Informatică Specializarea Informatică

Lucrare de licență

Identificarea nodurilor critice în rețele complexe



CONDUCĂTOR ȘTIINȚIFIC: LECTOR DR. GASKÓ NOÉMI ABSOLVENT: BÉCZI ELIÉZER

Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kolozsvár Matematika és Informatika Kar Informatika Szak

Szakdolgozat

Kritikus csomópontok meghatározása komplex hálózatokban



TÉMAVEZETŐ:

Szerző:

DR. GASKÓ NOÉMI, EGYETEMI ADJUNKTUS BÉCZI ELIÉZER

Tartalomjegyzék

1.	Bevezető	3
	1.1. Áttekintés	3
2.	Egycélú CNDP	4
	2.1. Páronkénti konnektivitás	4
	2.2.1. Általánosan	4
	2.3. Genetikus algoritmus	5
	2.3.1. Általánosan	5
	2.4. Hibrid Genetikus Algoritmus	10
3.	Kétcélú CNDP	11

1. fejezet

Bevezető

1.1. Áttekintés

Hálózatok terén nem minden csomópont egyforma fontosságú. A kulcsfontosságú csomópontok keresésével hálózatokban széles körben foglalkoznak, különösképpen olyan csomópontok esetén, melyek a hálózat konnektivitásához köthetők. Ezeket a csomópontokat általában úgy nevezzük, hogy Kritikus Csomópontok.

Kritikus Csomópontok Meghatározásának Problémája (CNDP) egy optimalizációs feladat, amely egy olyan csoport csomópont megkereséséből áll, melyek törlése maximálisan rontja a hálózat konnektivitását bizonyos predefiniált konnektivitási metrikák szerint.

A CNDP számos alkalmazási területtel rendelkezik. Például, közösségi hálók nagy befolyással bíró egyedeinek azonosítása, komputációs biológiában kapcsolatok definiálására jelút vagy fehérje-fehérje kölcsönhatás hálózatokban, smart grid sebezhetőségének vizsgálata, egyének meghatározása védőoltással való ellátásra vagy karanténba való zárásra egy fertőzés terjedésének gátlása érdekében.

A CNDP egy \mathcal{NP} -teljes feladat. Adva van egy G=(V,E) gráf, ahol |V|=n a csomópontok száma, és |E|=m pedig az élek száma. A feladat k kritikus csomópont meghatározása, amelyek törlése a bemeneti gráfból minimalizálja a hálózat páronkénti konnektivitását. Az alapján, hogy mit értünk egy hálózat konnektivitása alatt, a CNDP-nak van egycélú illetve többcélú megfogalmazása is.

1.2. Hozzájárulásaink

Ebben a dolgozatban többek között egy bi-objektív megfogalmazásával fogunk foglalkozni a CNDP-nak. Standard evolúciós algoritmusokat fogunk összehasonlítani egymással különböző szintetikus bemenetekre, illetve való világból inspirált bemenetekre, ugyanakkor célunk egy új hibrid algoritmus fejlesztése, melynek eredményei összehasonlíthatók a standard algoritmusok eredményeivel.

Az algoritmusokat Python-ban fogjuk bemutatni, és a NetworkX könyvtárat [Hagberg et al., 2008] fogjuk használni ahhoz, hogy gráfokat tudjunk manipulálni.

Benchmark tesztelés végett egy olyan gráfhalmazt fogunk használni, amelyben 4 alapvető típus jelenik meg, mindegyik a maga jellegzetességeivel.

2. fejezet

Egycélú CNDP

2.1. Páronkénti konnektivitás

Egycélú CNDP esetén a kihívás abban áll, hogy találjunk egy olyan konnektivitási metrikát, amely alkalmazási területtől függően megfelelően leírja egy gráf összefüggőségét. S-el fogjuk jelölni a törlendő csomópontok halmazát, míg azf(S) jóság függvény fogja jellemezni a $G[V\setminus S]$ feszített részgráf összefüggőségét. Ha H-val jelöljük a $G[V\setminus S]$ feszített részgráf összefüggő komponenseinek a halmazát, akkor a jóságfüggvény a következő képlettel írható le:

$$f(S) = \sum_{h \in H} \frac{|h| \cdot (|h| - 1)}{2},\tag{2.1}$$

amelyet az irodalom [Aringhieri et al., 2016; Ventresca, 2012] úgy tart számon, hogy **páronkénti konnektivitás**. Tehát a feladat a 2.1 függvénynek a minimalizálása:

$$\min_{S \subseteq V} f(S). \tag{2.2}$$

A 2.1 fitnesz függvény implementációját a 2.1. kódrészlet szemlélteti Python-ban.

Listing 2.1. Páronkénti konnektivitás

2.2. Mohó algoritmus

2.2.1. Általánosan

Egy mohó algoritmus egy egyszerű és intuitív algoritmus, amely gyakran használt optimalizációs feladatok megoldására. Az algoritmus helyi optimumok megvalósításával próbálja megtalálni a globális optimumot.

Habár a mohó algoritmusok jól működnek bizonyos feladatok esetében, mint pl. Dijkstra-algoritmus, amely egy csomópontból kiindulva meghatározza a legrövidebb utakat, vagy Huffman-kódolás, amely adattömörítésre szolgál, de sok esetben nem eredményeznek optimális megoldást. Ez annak köszönhető, hogy míg a mohó algoritmus függhet az előző lépések választásától, addig a jövőben meghozott döntésektől független.

Az algoritmus minden lépésben mohón választ, folyamatosan lebontva a feladatot kisebb feladattá. Más szavakkal, a mohó algoritmus soha nem gondolja újra választásait.

2.2.2. Saját mohó algoritmus

A mohó algoritmus kiindul a gráf csúcslefedéséből. 1 Ez lesz a kezdeti S megoldásunk. A maradék csomópontok $V\setminus S$ a gráf maximális független csúcshalmazát 2 MIS alkotják. Mivel majdnem biztos, hogy a megoldásunkban több, mint k csomópont lesz, ezért mohón elkezdünk kivenni csomópontokat S-ből, majd ezeket hozzáadni MIS-hez, amíg |S|>k. A hozzáadott csomópont az lesz, amelyiket ha visszatesszük az eredeti gráfba, akkor a minimum értéket téríti vissza a páronkénti konnektivitásra a keletkezett gráfban.

Mivel több olyan csomópont lehet, amelyeket ha visszateszünk az eredeti gráfba, akkor ugyanazt a minimális értéket adják vissza a páronkénti konnektivitásra, ezért ezeket eltároljuk a B halmazban, és minden lépésben random módon határozzuk meg, hogy melyik kerüljön vissza *MIS*-be. Ezzel az eljárással garantáljuk, hogy a mohó algoritmusunk különböző megoldásokat fog adni többszöri futtatások esetén.

A CNDP esetén a mohó algoritmust a 2.1 kódrészlet szemlélteti.

```
Algorithm 2.1 Greedy CNP
```

```
1: function GREEDY(G, k)

2: S \leftarrow VERTEX COVER(G)

3: while |S| > k do

4: B \leftarrow \arg\min_{i \in S} f(S \setminus \{i\})

5: S \leftarrow S \setminus \{SELECT(B)\}

6: end while

7: return S

8: end function
```

2.3. Genetikus algoritmus

2.3.1. Általánosan

A genetikus algoritmus a metaheurisztikák osztályába tartozik, és a természetes kiválasztódás inspirálta. Egy globális optimalizáló, amely gyakran használt optimalizációs és keresési problémák esetében, ahol

^{1.} Angolul: vertex cover.

^{2.} Angolul: maximal independent set.

a sok lehetséges megoldás közül a legjobbat kell megkeresni. Azt hogy egy megoldás mennyire jó, a fitnesz függvény mondja meg.

A genetikus algoritmus mindig egy populációnyi megoldással dolgozik. A populációba egyedek tartoznak, amelyek egyenként egyed esetén megoldásai a feladatnak. Az algoritmus minden iterációban egy új populációt állít elő az aktuális populációból úgy, hogy a **szelekciós operátor** által kiválasztott legrátermettebb szülőkön alkalmazza a **rekombinációs** és **mutációs operátorokat**.

Ezen algoritmusok alapötlete az, hogy minden újabb generáció az előzőnél valamelyest rátermettebb egyedeket tartalmaz, és így a keresés folyamán egyre jobb megoldások születnek.

2.3.2. Saját genetikus algoritmus

Egy Genetikus Algoritmus (GA) standard algoritmikus keretrendszerét használjuk fel. Generálunk egy kezdeti populációt megoldásokkal. Utána keresztezzük őket, hogy új megoldásokat kapjunk, amelyeket pedig mutálunk. Ezután rendezzük a régi és új megoldásokat egy fitnesz függvény alapján, és létrehozunk egy új populációt eltávolítva a rossz megoldásokat. A folyamatot addig ismételjük, amíg az iterációk száma el nem ér egy felső korlátot. Az algoritmus végén visszatérítjük a legjobb megoldást.

A CNDP esetén a genetikus algoritmust a 2.2 kódrészlet szemlélteti.

Algorithm 2.2 Genetic Algorithm

```
1: function GA(G, k, N, \pi_{\min}, \pi_{\max}, \Delta \pi, \alpha, t_{\max})
          INIT(N, P, S^*, \gamma, \pi)
 3:
 4:
          while t < t_{t_{\text{max}}} do
                P' \leftarrow \mathsf{CROSSOVER}(k, N, P)
 5:
                P' \leftarrow \text{MUTATION}(k, N, P', \pi)
                P \leftarrow \text{SELECTION}(N, P, P')
 7:
                S^*, \gamma, \pi = \text{Update}(N, P, S^*, \pi, \pi_{\min}, \pi_{\max}, \Delta\pi, \alpha)
 8:
 9:
                t \leftarrow t + 1
10:
          end while
           return P
11:
12: end function
```

Inicializáció

A kezdeti populáció egyedeit random generáljuk ki. Ez azt jelenti, hogy minden egyed kromoszómája egy k csomópontból álló részhalmaza lesz a bemeneti gráf csomóponthalmazának. Ezt szemlélteti a 2.3 kódrészlet.

Egy új fitnesz függvényt vezetünk be egyed esetén egyed jóságának felmérése végett. Ez abban tér el a 2.1 részben tárgyaltaktól, hogy nem csak a páronkénti konnektivitás mértékét vesszük figyelembe egy egyed esetén, hanem hogy az eddigi talált legjobb megoldástól mennyire tér el. Ezt a fitnesz függvényt a következő képlettel írjuk le:

$$q(S, S^*) = f(S) + \gamma \cdot |S \cap S^*|. \tag{2.3}$$

Algorithm 2.3 Random Solution

```
1: function RANDSOL(k)
2: S \leftarrow V
3: while |S| > k do
4: elem \leftarrow SELECT(S)
5: S \leftarrow S \setminus \{elem\}
6: end while
7: return S
8: end function
```

A képletben szereplő S^* jelenti az eddig talált legjobb megoldást. A γ egy változó, amely abban segít, hogy fenntartsuk a változatosságot a populáció egyedei között, megbüntetve azokat, amelyek túl közel vannak a legjobbhoz. A γ változót minden iterációban a következő képlettel számoljuk újra:

$$\gamma = \frac{\alpha \cdot f(S^*)}{\langle |S \cap S^*| \rangle_{S \in P}},\tag{2.4}$$

ahol a nevező a populáció egyedeinek és a legjobb egyed közötti átlagos hasonlóságot fejezi ki. Az α pedig a képletben található változók egymás feletti fontosságát befolyásolja.

A π paraméter a mutáció valószínűségét fejezi ki egy egyed esetén. Ezt kezdetben π_{\min} -re állítjuk, de minden iterációban frissítjük aszerint, hogy találtunk-e az új generációban egy olyan megoldást, amely jobb, mint a globális legjobb. Ha találtunk az eddigieknél jobb megoldást, akkor a π értékét π_{\min} -re állítjuk, különben a $\pi = \min\left(\pi + \Delta\pi, \pi_{\max}\right)$ képlet szerint növeljük. Ez arra jó, hogy fenntartsuk a populáció sokféleségét abban az esetben, amikor nem tudunk javítani az eddig talált legjobb megoldáson, mindezt úgy, hogy megnöveljük a mutációk kialakulásának a valószínűségét.

Az S^* , γ és π változók frissítését a 2.4 kódrészlet mutatja be.

Reprodukció

A genetikus algoritmus egy kulcsfontosságú fázisa a reprodukció. Itt döntjük el, hogy a meglévő populációból miként jöjjön létre az új generáció. Ez azt jelenti, hogy meghatározzuk, hogy az S_1 és S_2 szülők kromoszómáit hogyan olvasztjuk egybe annak érdekében, hogy egy új S' egyed szülessen.

Esetünkben úgy történik egy új egyed létrehozása, hogy random módon kiválasztunk 2 különböző szülőt, és ezek kromoszómáit egybevonjuk: $S' = S_1 \cup S_2$. Mivel majdnem biztos, hogy az így kapott egyed kromoszómája több, mint k csomópontot tartalmaz, ezért szükséges törölnünk belőle nódusokat, amíg |S'| > k. Az hogy melyik nódus kerül törlésre az új egyed kromoszómájából, random módon történik.

Fontos megemlítenünk, hogy mivel a szülőket random módon választjuk ki egyed esetén egyed létrehozásához, ezért a populáció egyedei között nem teszünk különbséget. Vagyis keresztezéskor nem nézzük, hogy csak a legrátermettebb szülőket válasszuk, hanem egyenlő eséllyel választunk kevésbé jó fitnesz értékkel rendelkező egyedet is szülőnek. Ez lelassítja a populáció uniformizálódásának folyamatát, de segíti a megoldástér bejárását. Ez azért jó, mert nem tudjuk előre, hogy a csomópontok mely

Algorithm 2.4 Update S^* , γ and π variables

```
1: function UPDATE(N, P, S^*, \pi, \pi_{\min}, \pi_{\max}, \Delta \pi, \alpha)
 2:
           avq \leftarrow 0
           for i \leftarrow 1, N do
 3:
                 S \leftarrow P[i]
 4:
                 avg \leftarrow avg + |S \cap S^*|
 5:
           \mathbf{end}\;\mathbf{for}_{avg}
 6:
 7:
 8:
           S \leftarrow P[0]
 9:
           if f(S) < f(S^*) then
10:
                 S^* \leftarrow S
11:
                 \pi \leftarrow \pi_{\min}
12:
           else
13:
                 \pi \leftarrow \min(\pi + \Delta \pi, \pi_{\max})
14:
           end if
15:
16:
           return S^*, \gamma, \pi
17: end function
```

kombinációja fogja eredményezni a bemeneti gráf maximális szétesését, ha ezeket együtt töröljük a gráfból. Ezért a kevésbé jó fitnesz értékkel rendelkező egyedeket sem kell figyelmen kívül hagyni, mert kombinálva őket jó megoldásokhoz juthatunk.

A reprodukciós folyamatot szemlélteti a 2.5 kódrészlet.

Mutáció

A következő nagy jelentőséggel bíró fázisa a genetikus algoritmusnak a mutáció. Mutáció alatt azt értjük, hogy vesszük az újonnan létrejött populációt, és a populációban található egyedek génjeit perturbáljuk valamilyen csekély valószínűséggel. A mutáció azért tartozik a nagy döntések halmazába, mert a mutáció révén fenntartjuk a populáció sokféleségét, és elkerüljük a korai konvergenciát. ³

A populáció minden egyes új egyede esetén, a mutáció valószínűségét a π paraméter befolyásolja. Generálunk egy egyenletes eloszlású véletlen számot 1 és 100 között, és ha ez kisebb, mint π , akkor módosítjuk a megoldást. A módosítás úgy történik, hogy leszögezzük, hogy a megoldás hány génjét szeretnénk változtatni. Ezt a számot tükrözi az n_g változó, amely értékét a [0,k] intervallumból veszi, és random generáljuk. A következő lépés, hogy kitörlünk n_g csomópontot a megoldásból, de mivel majdnem biztos, hogy a megoldásunk így nem-optimális, mert |S| < k, ezért szükséges visszaadogatnunk csomópontokat S-be. Ennek érdekében véletlenszerűen kiválasztunk egy csomópontot a $V \setminus S$ halmazból, és a kiválasztott csomópontot visszatesszük a megoldásba.

A 2.6 kódrészlet a mutáció műveletét hívatott bemutatni.

^{3.} Angolul: premature convergence.

Algorithm 2.5 Recombination Operator

```
1: function Crossover(k, N, P)
          P' \leftarrow \emptyset
 2:
          for i \leftarrow 1, N do
 3:
               S_1 \leftarrow \text{SELECT}(P)
 4:
               S_2 \leftarrow \text{SELECT}(P)
 5:
               S' \leftarrow S_1 \cup S_2
 6:
               if |S'| = k then
 7:
                    P' \leftarrow P' \cup \{S'\}
 8:
 9:
               else
                    S' \leftarrow \text{RANDOM SAMPLE}(S', k)
                                                                                            \triangleright Take k random elements from S'
10:
                    P' \leftarrow P' \cup \{S'\}
11:
               end if
12:
          end for
13:
          return P'
14:
15: end function
```

Algorithm 2.6 Mutation Operator

```
1: function MUTATION(k, N, P, \pi)
 2:
          P' \leftarrow \emptyset
          for i \leftarrow 1, N do
 3:
               r \leftarrow \text{RAND INT}(1, N)
 4:
               if r \leq \pi then
 5:
                    S' \leftarrow P[i]
 6:
                    n_q \leftarrow \text{RAND INT}(0, k)
                                                                                                      Number of genes to mutate
 7:
 8:
                    for j \leftarrow 1, n_q do
                         elem \leftarrow Select(S')
 9:
                         S' \leftarrow S' \setminus \{elem\}
10:
                    end for
11:
                    MIS \leftarrow V \setminus S'
12:
13:
                    while |S'| < k do
                         elem \leftarrow \texttt{SELECT}(\textit{MIS})
14:
                          S' \leftarrow S' \cup \{elem\}
15:
16:
                    end while
                     P' \leftarrow P' \cup \{S'\}
17:
               else
18:
                     S \leftarrow P[i]
19:
                     P' \leftarrow P' \cup \{S\}
20:
21:
               end if
          end for
22:
          return P'
23:
24: end function
```

Szelekció

Az utolsó fázisa a genetikus algoritmusunknak a szelekció. Itt döntjük el, hogy mely egyedek fogják alkotni a következő nemzedéket. Jelen esetben ez úgy megy végbe, hogy összefésüljük a régi P és az újonnan létrejött P' populációkat, és rendezzük az egyedeket a 2.3 fitnesz függvény alapján. Növekvő sorrendbe rendezzük őket, mivel nem szabad elfelejtenünk, hogy célunk végső soron a páronkénti konnektivitás minimalizálása. Ezután kiválasztjuk az első N egyedet, és ezeket visszük tovább a következő iterációba.

Genetikus algoritmusunk szelekciós szakaszát a 2.7 kódrészlet ismerteti.

Algorithm 2.7 Selection Operator

return P[:N]

- 1: **function** Selection(N, P, P')
- 2: $P \leftarrow P \cup P'$
- 3: SORT(P)

- > Sort individuals by fitness function is ASC order
 - \triangleright Take best N solutions

5: end function

2.4. Hibrid Genetikus Algoritmus

3. fejezet

Kétcélú CNDP

Irodalomjegyzék

- Aringhieri, R., Grosso, A., Hosteins, P., és Scatamacchia, R. A general evolutionary framework for different classes of critical node problems. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 55: 128–145, 2016.
- Hagberg, A., Swart, P., és S Chult, D. Exploring network structure, dynamics, and function using networkx. Technical report, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 2008.
- Ventresca, M. Global search algorithms using a combinatorial unranking-based problem representation for the critical node detection problem. *Computers & Operations Research*, 39(11):2763–2775, 2012.