UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Finančna matematika – 1. stopnja

Klemen Hovnik
Matija Gubanec Hančič
Jan Rudof

Predpisana drevesa z najmanjšim/največjim Wienerjevim indeksom

Projekt v povezavi z OR

Ljubljana, 2018

Kazalo

1. Navodilo

We want to analyze the structure of trees on a fixed number of vertices n and fixed maximum degree Δ that have Wiener index (i.e. total distance) as small as possible. Similarly, we want to find the structure of trees on a fixed number of vertices n with fixed diameter d that have Wiener index (i.e. total distance) as large as possible. In order to get the answer for very small values of n first, apply an exhaustive search, and next, for larger n, apply a genetic algorithm or any other metaheuristic. Verify for how large n your exhaustive search and your genetic algorithm implementations are efficient.

2. Uvod

Naj bo $G = (V(G), E(G))$ enostaven povezan neusmerjen graf. *Wienerjev indeks* (oziroma *Wienerjevo število* $W(G)$) je definiran kot

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{u \in V(g)} \sum_{v \in V(g)} d_G(u, v). \tag{1}$$

Tukaj označimo z $d_G(u, v)$ razdaljo med vozliščem u in v v grafu G.

Naša naloga je, da analiziramo lastnosti dreves z določenim številom vozlišč in fiksno maksimalno stopnjo vozlišč, ki imajo najmanjši Wienerjev indeks. Podobno nas zanimajo tudi lastnosti dreves na določenem številu vozlišč s fiksnim premerom, ki imajo največji možni Wienerjev indeks.

Za izvedbo projekta smo si izbrali programski jezik *Sage*, saj ta že vsebuje orodja za delo z grafi, prav tako pa ima tudi generator dreves in že vgrajeno funkcijo za izračun Wienerjevega indeksa.

3. Opis dela

Najprej smo se lotili izračuna Wienerjevih indeksov na preprostih grafih z malo vozlišči, da vidimo, kako naj bi ta struktura grafov z minimalnimi oziroma maksimalnimi indeksi izgledala v splošnem.

3.1. **Enostaven algoritem.**

3.1.1. *Maksimalen Wiener index na drevesih s fiksnim premerom.*

Definirali smo funkcijo $drevesa(n)$, ki nam izpiše seznam vseh dreves s številom vozlišč n. Potem smo to funkcijo uporabili v funkciji $drevesa\_premer(n)$, ki nam iz prejšnjih dreves generira slovar, kjer so ključi možni premeri naših dreves, vrednosti ključev pa so pripadajoča drevesa. Tako smo si pripravili podlago za enostaven algoritem iskanja maksimalnega Wiener indexa za drevesa z določenim premerom. Sestavili smo funkcijo $max\_Weinerindex(n, N)$, kjer je N fiksen premer. Ta funkcija nam je za vsa drevesa s številom vozlišč n in premerom N izpisala maksimalni Wiener index in nam drevo, kjer je ta indeks dosežen tudi izrisala.

```
def drevesa(n):
    t = graphs.trees(n)
    T= next(t)
    k= []
    k.append(T.edges())
    for T in t:
        m = T.edges()
        k.append(m)
    return k
```

```
def drevesa_premer(n):
    L = []
    k = drevesa(n)
    for i in range(len(k)):
        premer1 = Graph(k[i]).diameter()
        L.append([premer1, k[i]])
    from collections import defaultdict
    d1 = defaultdict(list)
    for l, v in L:
        d1[l].append(v)
    d = dict((l, tuple(v)) for l, v in d1.iteritems())
    return d
```

```
def max_Weinerindex(n,N):
    d = drevesa_premer(n)
    x = []
    for i in range(len(d[N])):
        x.append(Graph(d[N][i]).wiener_index())
    print 'drevesa,  na ', n, 'vozliščih, s premerom', N, 'imajo maksimalni Wiener index:', max(x)
    for i in range(len(x)):
        if x[i] == max(x):
            Graph(d[N][i]).show()
```

3.1.2. *Minimalen Wiener index na drevesih s fiksno stopnjo.*

Za iskanje najmanjših Wienerjevih indeksov pri določenem številu vozlišč n in pri fiksni maksimalni stopnji m smo definirali funkcijo $fiksna\_stopnja$, ki nam je iz seznama, ki ga vrne funkcija $drevesa(n)$ izpisala drevesa z maksimalno stopnjo m. Izmed teh optimalnih dreves pa smo potem s funkcijo $.wiener\_index()$ izračunali najmanjši Wiener index, ter drevo s tem indeksom tudi izrisali.

```
def fiksna_stopnja(n,m):
    k = drevesa(n)
    zaporedje = []
    optimalna_drevesa = []
    index = []
    for j in range(len(k)):
        zaporedje.append(Graph(k[j]).degree_sequence())

    for l in range(len(zaporedje)):
        T = Graph(k[l])
        if max(zaporedje[l]) == m:
            optimalna_drevesa.append(k[l])
            index.append(T.wiener_index())
    u = min(index)
    pozicija = [i for i, j in enumerate(index) if j == u]
    print 'Minimalni Wiener index s fiksno stopnjo', m,' je', u
    return Graph(optimalna_drevesa[pozicija[0]]).plot()
```

Hitro smo prišli do ugotovitve, da je naš algoritem za izračun indeksov časovno prepotraten. Zato smo se problema iskanja Wienerjevih indeksov lotili na drugačen način. In sicer z *genetskim algoritmom* katerega ideja je, da ustvarimo populacijo začetnih osebkov, ki jih potem kombiniramo s križanjem in mutacijami, da prihajamo do vedno boljših rezultatov.

3.2. **Genetski algoritem.**

Genetski algoritem je metahevristika, navdihnjena s strani procesov naravne selekcije in spada v razred *razvojnih algoritmov*. Uporablja se za generiranje kvalitetnih rešitev v optimizaciji, ki temeljijo na operatorjih kot so mutacija, križanje in selekcija.

V genetskem algoritmu se uporabi množica kandidatov za rešitev, ki jih nato razvijamo do optimalne rešitve. Vsak kandidat ima določene lastnosti, ki jih lahko spremenimo oziroma lahko mutirajo. Evolucija rešitev se ponavadi začne na naključni izbiri kandidatov, katere potem s pomočjo iteracije razvijamo. Na vsakem iterativnem koraku se potem oceni primernost novih kandidatov za optimizacijski problem. Najboljše kandidate potem uporabimo za naslednji korak iteracije in tako dalje. Na koncu se algoritem zaključi, ko doseže maksimalno število iteracijskih korakov oziroma, ko dobi najboljši približek optimalni rešitvi.

Naša začetna množica kandidatov bodo drevesa na n vozliščih, ki sta jim skupna ali premer ali pa največja stopnja. Nato smo ustvarili genetski algoritem, ki iz začetne množice dreves generira naslednjo generacijo dreves. Ta postopek nato iterativno nadaljujemo (in pri tem selekcioniramo iz novo nastalih dreves le najboljše za naslednje korake), dokler ne bomo prišli do optimalnih dreves za določeno število vozlišč. Pri tem bomo morali paziti, da se bo ohranjala maksimalna stopnja vozlišč, oziroma v drugem primeru, premer.

3.2.1. *Genetski algoritem za drevesa z največjo stopnjo.*

Pri tem algoritmu smo iskali grafe z določenim številom vozlišč in določeno največjo stopnjo vozlišč z najmanjšim Wienerjevim indeksom. Najprej definiramo funkcijo, ki zgenerira graf na $st\_vozlisc$ vozliščih z največjo stopnjo $max\_stopnja$. Pri preučevanju karakteristik optimalnih grafov smo ugotovili, da imajo najmanjše Wienerjeve indekse ravno zvezde. Zato smo funkcijo spisali tako, da najprej vzame graf zvezde in nato naključno dodaja povezave, medtem ko pazi, da katero vozlišče ne bi preseglo največje dovoljene stopnje. S pomočjo generatorja dreves nato ustvarimo začetno populacijo osebkov.

```python
import random

def nakljucni_graf(st_vozlisc, max_stopnja): #ustvarjamo naključne grafe z določenim številom vozlišč in max stopnjo
    zvezda = graphs.StarGraph(max_stopnja)
    i = max_stopnja
    while i < st_vozlisc:
        zvezda1 = Graph(zvezda)
        zvezda1.add_edge(random.randint(1, i), i + 1)
        if zvezda1.degree_sequence()[0] <= max_stopnja:
            zvezda = Graph(zvezda1)
            i = i + 1
    return zvezda

def zacetna_populacija(st_vozlisc, max_stopnja, stevilo_osebkov): #ustvari zacetno populacijo, ki jo bomo potem razvijali, da dobimo približek optimalnemu grafu
    zacetna_populacija = []
    i = 0
    while i < stevilo_osebkov:
        osebek = nakljucni_graf(st_vozlisc, max_stopnja)
        zacetna_populacija.append(osebek.to_dictionary())
        i = i + 1
    return zacetna_populacija
```

Potem definiramo še funkcijo *fitness*, ki med danim seznamom dreves poišče tistega, ki ima najboljšo iskano lastnost. V našem primeru recimo izmed izbranih dreves poišče tistega z minimalnim Wienerjevim indeksom. Naslednja funkcija, ki jo definiramo je funkcija *mutate*. S to funkcijo v algoritem vpeljemo še možnost mutacije, kjer se v primeru, da do mutacije pride, eden od listov drevesa naključno prestavi na neko drugo mesto.

```python
def fitness(seznam_dreves): #iscemo iskano optimalno lastnost, se pravi minimalen Wienerjev indeks
    index = 10000000000 #neko veliko število, da bojo naslednji indeksi zihr manjši
    for drevo in seznam_dreves:
        graf_drevesa = Graph(drevo)
        if graf_drevesa.wiener_index() < index:
            index = graf_drevesa.wiener_index()
            drevo_min_index = drevo
    return drevo_min_index

def mutate(drevo, verjetnost): #mutacija grafa (odstranimo listek in ga pripnemo drugam)
    kopija_drevo = Graph(drevo)
    listki = []
    if random.random() <= verjetnost:
        for i in range(0, len(kopija_drevo.degree())): #iščemo vse listke v grafu, katere lahko odstranimo
            if kopija_drevo.degree()[i] == 1:
                listki.append(i)
        izbrano_vozlisce_listka = random.choice(listki)
        kopija_drevo.delete_edge(izbrano_vozlisce_listka, kopija_drevo.neighbors(izbrano_vozlisce_listka)[0]) #izbrišemo naključen listek
        vozlisca_drevo = kopija_drevo.vertices()
        del vozlisca_drevo[izbrano_vozlisce_listka] #treba je izločit vozlišče, ki ga pripenjaš
        kopija_drevo.add_edge(izbrano_vozlisce_listka, random.choice(vozlisca_drevo)) #pripnemo listek drugemu vozlišču
        if kopija_drevo.degree_sequence()[0] == Graph(drevo).degree_sequence()[0]:
            return kopija_drevo.to_dictionary()
        else:
            return mutate(drevo, verjetnost)
    else:
        return drevo
```

Predzadnja funkcija, ki smo jo napisali, je funkcija *crossover*. Ta iz dveh podanih dreves s križanjem sestavi dve novi drevesi. To stori tako, da naključno v teh drevesih izbere vozlišči in njuna soseda, nato povezavo med izbranim vozliščem in sosedom prekine ter navzkrižno poveže del prvega grafa z delom drugega in obratno. Nato preveri, ali karakteristike dobljenih dreves ustrezajo iskanim. V primeru, da ustrezajo, vrne dobljena grafa, v nasprotnem primeru pa križanje izvaja toliko časa, dokler ne dobi dveh ustreznih grafov.

```
58 ▾ 57 def crossover(drevo1, drevo2): #križanje dveh grafov, kjer dobimo ven dva nova (za naslednjo generacijo vzamemo
        le optimalnega)
59  58     kopija_drevo1 = Graph(drevo1)
60  59     kopija_drevo2 = Graph(drevo2)
61  60
62  61     izbrano_vozlisce1 = random.randint(0, kopija_drevo1.order() - 1) #izberemo vozlišče kjer bomo razpolovili
        graf
63  62     izbrano_vozlisce2 = random.randint(0, kopija_drevo2.order() - 1)
64  63     sosed_vozlisca1 = random.choice(kopija_drevo1.neighbors(izbrano_vozlisce1)) #izberemo soseda vozlisca, kjer
        bomo razpolovili graf
65  64     sosed_vozlisca2 = random.choice(kopija_drevo2.neighbors(izbrano_vozlisce2))
66  65
67  66     kopija_drevo1.delete_edge(izbrano_vozlisce1, sosed_vozlisca1) #naključno odstranimo povezavo
68  67     kopija_drevo2.delete_edge(izbrano_vozlisce2, sosed_vozlisca2)
69  68
70  69     kopija_drevo1_a =
        kopija_drevo1.subgraph(kopija_drevo1.connected_component_containing_vertex(izbrano_vozlisce1)) #naredimo
        podgrafe
71  70     kopija_drevo1_b =
        kopija_drevo1.subgraph(kopija_drevo1.connected_component_containing_vertex(sosed_vozlisca1))
72  71     kopija_drevo2_a =
        kopija_drevo2.subgraph(kopija_drevo2.connected_component_containing_vertex(izbrano_vozlisce2))
73  72     kopija_drevo2_b =
        kopija_drevo2.subgraph(kopija_drevo2.connected_component_containing_vertex(sosed_vozlisca2))
74  73
75  74     novo_drevo1 = kopija_drevo1_a.disjoint_union(kopija_drevo2_b) #povezemo dva podgrafa v nov graf
76  75     novo_drevo1.add_edge((0, izbrano_vozlisce1), (1, sosed_vozlisca2))
77  76     novo_drevo1.relabel()
78  77
79  78     novo_drevo2 = kopija_drevo2_a.disjoint_union(kopija_drevo1_b) #povezemo dva podgrafa v nov graf
80  79     novo_drevo2.add_edge((0, izbrano_vozlisce2), (1, sosed_vozlisca1))
81  80     novo_drevo2.relabel()
82  81
83 ▾ 82     if novo_drevo1.degree_sequence()[0] == novo_drevo2.degree_sequence()[0] and novo_drevo1.degree_sequence()
        [0] == Graph(drevo1).degree_sequence()[0] and novo_drevo1.order() == novo_drevo2.order():
84  83         #preverimo, če se max stopnja in število vozlišč ohrani
85  84         return [novo_drevo1.to_dictionary(), novo_drevo2.to_dictionary()]
86 ▾ 85     else:
87  86         return crossover(drevo1, drevo2)
```

Zadnja funkcija, ki smo jo spisali, je funkcija *nova_generacija*. Parametra, ki ju podamo tej funkciji sta *zacetna_generacija* in *verjetnost*. S pomočjo te funkcije iz začetne generacije z mutacijami in križanjem dreves ustvarimo novo generacijo. Iz začetne generacije naključno vzamemo dva osebka, ju podvržemo možnosti mutacije in nato prekrižamo. Nato izmed dobljenih dreves in njunih staršev izberemo najboljša dva, ki ju pošljemo v naslednjo generacijo. Na ta način se najboljša drevesa skoraj vedno prenesejo v naslednjo generacijo. Na koncu nam preostane še, da vse, kar smo do sedaj spisali uporabimo v simulaciji, ki ustvari začetno populacijo in nato *stevilo_generacij*-krat iz prejšnje generacije ustvari novo, kar bi v teoriji po dovolj velikem številu korakov moralo pripeljati do zelo dobrega približka optimalne rešitve.

```
89 ▾ 88  def nova_generacija(zacetna_generacija, verjetnost): #definira novo generacijo osebkov
90   89      nova_generacija = []
91   90      i = 0
92 ▾ 91      while i < len(zacetna_generacija):
93   92
94   93          drevo1 = random.choice(zacetna_generacija)
95   94          drevo2 = random.choice(zacetna_generacija)
96   95          mutirano_drevo1 = mutate(drevo1, verjetnost)
97   96          mutirano_drevo2 = mutate(drevo2, verjetnost)
98   97          novi_drevesi = crossover(mutirano_drevo1, mutirano_drevo2)
99   98          novo_drevo1 = novi_drevesi[0]
100  99          novo_drevo2 = novi_drevesi[0]
101 100          optimalno_drevo = fitness([novo_drevo1, novo_drevo2, mutirano_drevo1, mutirano_drevo2, drevo1, drevo2])
102 101
103 102          nova_generacija.append(optimalno_drevo)
104 103
105 104          i = i + 1
106 105
107 106      return  nova_generacija
108 107
109 ▾ 108  def simulacija(st_vozlisc, max_stopnja, stevilo_osebkov, stevilo_generacij, verjetnost): #požene program in
         išče graf z min wiener indeksom
110 109      populacija = zacetna_populacija(st_vozlisc, max_stopnja, stevilo_osebkov)
111 110      i = 0
112 ▾ 111      while i < stevilo_generacij:
113 112          populacija = nova_generacija(populacija, verjetnost)
114 113          i = i + 1
115 114      return fitness(populacija), Graph(fitness(populacija)).wiener_index(), Graph(fitness(populacija)).show()
```

3.2.2. *Genetski algoritem za drevesa s fiksnim premerom.*

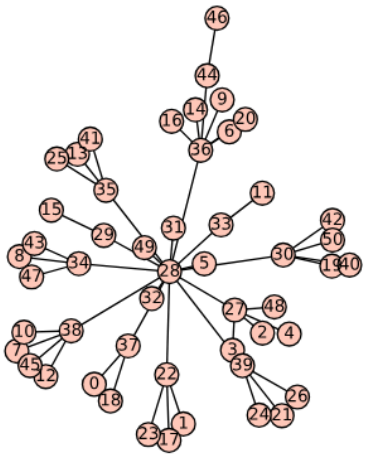
Pri drevesih s fiksnim premerom je princip precej podoben tistemu, ki ga uporabimo pri drevesih z določeno maksimalno stopnjo vozlišč. Le, da smo tukaj iskali maksimalen Wienerjev indeks. Uporabljene funkcije so podobne, razlikujejo se po tem, da se ne osredotočajo na maksimalno stopnjo, temveč preverjajo premer grafa. Celoten algoritem si lahko pogledate na github repozitoriju.

4. Zaključek

Funkciji, ki iščeta optimalna drevesa prek izčrpne metode, oziroma načina, da preverita vsa drevesa in vrneta tistega z iskano optimalno lastnostjo, naj bo to maksimalni al minimalni Wienerjev indeks, sta, kot že rečeno, zelo potratni in dobro delujeta le do okoli 18 vozlišč.
Nasprotno genetski algoritem za iskanje dreves z minimalnim Wienerjevim indeksom dela zelo dobro, testirali smo ga na drevesih s 50 vozlišči, z največjo stopnjo 15, velikostjo začetne populacije 100, številom generacij 100 in z verjetnostjo 0.05, da pride

do mutacije. Rezultat vrne v malo manj kot dveh minutah, kar se nam zdi precej dobro.

```
116 simulacija(50, 15, 100, 100, 0.05)
```




```
({0: [37], 1: [22], 2: [27], 3: [27], 4: [27], 5: [28], 6: [36], 7: [38], 8: [34], 9: [36], 10: [38], 11:
[33], 12: [38], 13: [35], 14: [36], 15: [29], 16: [36], 17: [22], 18: [37], 19: [30], 20: [36], 21: [39],
22: [1, 17, 23, 28], 23: [22], 24: [39], 25: [35], 26: [39], 27: [48, 2, 3, 4, 28], 28: [32, 33, 49, 34, 35,
36, 5, 37, 22, 38, 39, 27, 29, 30, 31], 29: [28, 15], 30: [50, 19, 40, 42, 28], 31: [28], 32: [28], 33: [11,
28], 34: [8, 43, 28, 47], 35: [25, 41, 28, 13], 36: [16, 20, 6, 9, 28, 44, 14], 37: [0, 18, 28], 38: [7, 10,
12, 28, 45], 39: [21, 24, 26, 28], 40: [30], 41: [35], 42: [30], 43: [34], 44: [36, 46], 45: [38], 46: [44],
47: [34], 48: [27], 49: [28], 50: [30]}, 4124, None)
```

Slabše deluje genetski algoritem za iskanje max Wienerjevega indeksa pri fiksnem primeru, za isti problem porabi približno 100-krat več časa. Menimo, da je to tako, ker se pri križanju dveh dreves z največjo stopnjo največja stopnja vedno ohrani, torej se mora ujeti le število vozlišč. Pri križanju dreves, kjer želimo, da se ohrani premer in število vozlišč, pa je oboje hkrati težko doseči, torej ista metoda križanja kot pri iskanju minimalnega indeksa ne deluje, prilagoditve pa vzamejo nekaj časa.