УДК 519.157+519.161+519.163

О. С. Фирюлина

НАХОЖДЕНИЕ ВСЕХ МАКСИМАЛЬНЫХ НЕЗАВИСИМЫХ МНОЖЕСТВ НЕОРИЕНТИРОВАННОГО ГРАФА

Введение. Определение максимальных независимых множеств (МНМ) графа полезно в кластерном анализе в таких областях как информационный поиск и социология. Известно, что эта задача принадлежит к числу так называемых *NP-полных* задач и количество МНМ в графе может расти экспоненциально [1]. Простая схема решения, основанная на методе поиска с возвращением, приводит к генерации $p!$ всех возможных перестановок вершин для каждого МНМ размерности p. С учетом общего количества возможных МНМ в произвольном графе решение задачи методом полного перебора оказывается практически неосуществимым даже для графов сравнительно небольших размерностей. В данной статье представлен алгоритм *AllIS* для построения всех МНМ неориентированного графа, основанный на способе выделения структурных особенностей [2–5]. Каждому МНМ соответствует единственная ветвь дерева поиска, порожденного предложенным алгоритмом, поэтому повторного построения уже сформированных максимальных независимых множеств графа не происходит.

Основные определения. Здесь и далее множество неупорядоченных пар различных элементов некоторого множества B будем обозначать

$$B^{[2]} = \{(x, y) |\, x, y \in B \,\&\, x < y\}.$$

Обыкновенным графом $G = (V, E)$ называется упорядоченная пара множеств: конечного непустого V, элементы которого называются *вершинами* графа G, и подмножества $E \subseteq V^{[2]}$, представляющего собой множество неупорядоченных пар разных вершин, элементы которого называются *ребрами* этого графа.

Отметим два крайних случая обыкновенных n-вершинных графов: *безреберный* граф $H_n = (U, \emptyset),\ n = |U|$, и *полный* граф $F_n = (U, U^{[2]}),\ n = |U|$.

Если в неориентированном графе между двумя вершинами x и y есть ребро, тогда эти вершины *смежны*, в противном случае – *несмежны*. Ребро, соединяющее вершины x и y, *инцидентно* каждой из них (и наоборот, они обе инцидентны данному ребру).

Граф $G' = (V', E')$ называется *подграфом* графа $G = (V, E)$, если $V' \subseteq V$ и $E' = \{(x, y) \in E \,|\, x, y \in V'\}$. Иными словами, при образовании подграфа G' из графа G удаляются все вершины множества $Y = V \setminus V'$ и только те ребра, которые инцидентны хотя бы одной удаляемой вершине, поэтому для краткости будем записывать $G' = G \backslash Y$.

Множество вершин графа G, индуцирующее его безреберный подграф, называется *независимым*. Будем называть такое множество *максимальным независимым*, если оно

Фирюлина Оксана Сергеевна – аспирантка кафедры информационных систем факультета прикладной математики–процессов управления Санкт-Петербургского государственного университета. Научный руководитель: проф. И. В. Олемской. Количество опубликованных работ: 6. Научное направление: экстремальная теория графов. E-mail: firyulina.oxana@mail.ru.

© О. С. Фирюлина, 2013

не содержится ни в каком другом независимом множестве. Максимальное независимое множество наибольшей мощности называется наибольшим независимым множеством (ННМ). Множество всех максимальных независимых множеств графа G будем обозначать $M(G)$.

Пусть n-вершинный граф $G = (V, E)$ задан матрицей смежностей $A = \|a_{i,j}\|_{n,n}$:

$$a_{i,j} = \begin{cases} 1, & (i,j) \in E, \\ 0, & (i,j) \notin E. \end{cases}$$

Граф G можно представить в виде $G = (V, S_{V,A})$, где $V = \{1, 2, \ldots, n\}$, $S_{V,A} = \{(p,q) \,|\, (p,q) \in V^{[2]} \,\&\, a_{p,q} = 0;\ p, q \in V\}$ – множество всех несмежных пар различных вершин графа G.

Любую пару несмежных вершин $(\beta, \gamma) \in S_{V,A}$ будем называть *узлом* и обозначать буквой $\alpha = (\beta, \gamma)$.

Базовым множеством для некоторого узла $\alpha = (\beta, \gamma) \in S_{V,A}$ графа G назовем множество

$$D_G[\alpha] = \{d \,|\, (d, \beta) \in S_{V,A} \,\&\, (d, \gamma) \in S_{V,A},\ d \in V\} \cup \{\beta, \gamma\}.$$

Опорным множеством для некоторого узла $\alpha = (\beta, \gamma) \in S_{V,A}$ графа G будем называть множество

$$\omega_G[\alpha] = D_G[\alpha] \backslash \{\beta, \gamma\}.$$

Обозначим $Q_G[\alpha]$ – максимальное независимое множество в графе G, в котором содержатся две вершины β и γ, Δ_G – множество всех вершин, имеющих ребро с каждой вершиной рассматриваемого графа.

Теорема 1. *Любое максимальное независимое множество $Q_G[\alpha]$ содержится в базовом множестве, соответствующем паре $\alpha = (\beta, \gamma)$:*

$$Q_G[\alpha] \subseteq D_G[\alpha].$$

Доказательство. Пусть существует вершина $v_* \notin D_G[\alpha] : M = \{\beta, \gamma, v_*\}$ – независимое множество вершин, индуцирующее некоторый безреберный подграф $G' \subset G$. По определению безреберного графа, его вершины β, γ и v_* попарно несмежны, следовательно, вершина v_* одновременно несмежна с β и γ . Тогда по определению базового множества, должно выполняться условие $v_* \in D_G[\alpha]$. Противоречие доказывает, что не существует безреберного подграфа, множество вершин которого содержит пару (β, γ) и какой-либо элемент, не принадлежащий базовому множеству, соответствующему указанной паре. Таким образом, множества вершин, индуцирующие безреберный подграф, а следовательно, и все максимальные независимые множества, имеющие в качестве двух своих вершины β и γ, целиком содержатся в базовом множестве $D_G[\alpha]$.

Следствие. *Пусть $Q_G^i[\alpha]$ – i-е МНМ множество графа G, содержащее вершины β и γ, m – количество всех таких МНМ. Тогда*

$$D_G[\alpha] \setminus \cup_{i=1}^m Q_G^i[\alpha] = \emptyset.$$

Теорема 2. *Пусть задан обыкновенный граф $G = (V, S_{V,A})$. Если $D_G[\alpha] \subseteq D_G[\alpha^*]$, тогда для любого МНМ $Q_G[\alpha] \subseteq D_G[\alpha]$ найдется МНМ $\widetilde{Q}_G[\alpha^*] \subseteq D_G[\alpha^*]$ такое, что $\widetilde{Q}_G[\alpha^*] \equiv Q_G[\alpha]$ (другими словами, любое МНМ, содержащее вершины β и γ, будет являться МНМ, содержащим вершины β^* и γ^*).*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Положим $\alpha = (\beta, \gamma)$, $\alpha^* = (\beta^*, \gamma^*)$. Если $D_G[\alpha] \subset D_G[\alpha^*]$, значит, у всех вершин из множества $D_G[\alpha]$ нет ребер с вершинами $\beta^*, \gamma^* \in D_G[\alpha^*]$, в частности, имеем следующие несмежные пары вершин:

$$(\beta, \gamma), (\beta, \beta^*), (\beta, \gamma^*), (\gamma, \beta^*), (\gamma, \gamma^*), (\beta^*, \gamma^*).$$

Так как β и γ одновременно несмежны с вершинами β^* и γ^*, по определению базового множества $D_G[\alpha]$ следует, что $\beta^*, \gamma^* \in D_G[\alpha]$. Кроме того, подграф G' графа G, индуцированный множеством вершин $D_G[\alpha]$, представляет собой несвязный граф с числом компонент $\kappa(G') \geqslant 5$. Его можно представить в таком виде:

$$G' = G'_1 \cup G'_2 \cup G'_3 \cup G'_4 \cup \widetilde{G}'_5,$$

где $G'_1, G'_2, G'_3, G'_4, \widetilde{G}'_5$ – компоненты связности графа G'. Подграф $\widetilde{G}'_5$ характеризуется следующим свойством: любая его вершина не имеет ребер с вершинами $\beta, \gamma, \beta^*, \gamma^*$ в графе G'. Но так как без дополнительной информации о ребрах этого графа нельзя определить, является ли он связным или нет, то будем его обозначать волной сверху, чтобы отличить от связных подграфов G'_1, G'_2, G'_3 и G'_4. Не умоляя общности, будем считать подграф $\widetilde{G}'_5$ связным, так как на ход доказательства это никак не повлияет.

Любое МНМ множество $Q_{G'}$ в графе G' можно представить в виде объединения соответствующих МНМ $Q_{G'_1}, Q_{G'_2}, Q_{G'_3}, Q_{G'_4}, Q_{\widetilde{G}'_5}$ в графах $G'_1, G'_2, G'_3, G'_4, \widetilde{G}'_5$:

$$Q_{G'} = Q_{G'_1} \cup Q_{G'_2} \cup Q_{G'_3} \cup Q_{G'_4} \cup Q_{\widetilde{G}'_5},$$

или, учитывая то, что графы $G'_i,\ i = \overline{1,4}$, состоят из одной вершины:

$$Q_{G'} = \{\beta^*\} \cup \{\gamma^*\} \cup \{\beta\} \cup \{\gamma\} \cup Q_{\widetilde{G}'_5}.$$

Таким образом, любое МНМ $Q_{G'}$, а значит, и любое $Q_{G'}[\alpha]$, будет являться МНМ, содержащим вершины β^*, γ^*. Так как, согласно теореме 1, все МНМ, имеющие в качестве двух своих элементов β, γ, содержатся в базовом множестве $D_G[\alpha]$, которое, напомним, индуцировало подграф G', то, очевидно, любое МНМ $Q_{G'}[\alpha]$ в подграфе G' – максимально независимое в исходном графе G, поэтому индекс G' можно изменить на $G : Q_{G'}[\alpha] \equiv Q_G[\alpha]$. Так как все МНМ, имеющие в качестве двух своих элементов β^*, γ^*, содержатся в базовом множестве $D_G[\alpha^*]$, а любое МНМ $Q_G[\alpha]$ есть МНМ, содержащее вершины β^*, γ^*, следовательно,

$$\forall Q_G[\alpha] \subseteq D_G[\alpha] \, \exists \, \widetilde{Q}_G[\alpha^*] \subseteq D_G[\alpha^*] \, | \, \widetilde{Q}_G[\alpha^*] \equiv Q_G[\alpha].$$

Алгоритм *AllIS* для построения всех максимальных независимых множеств. Выбрав узел $\alpha^0 = (\beta^0, \gamma^0) \in S_{V,A}$ в графе $G^0 \equiv G$, строим для него опорное множество $\omega_{G^0}[\alpha^0]$. Задача нахождения МНМ, содержащего вершины β^0, γ^0, в графе G сводится к поиску МНМ в подграфе $G^1 \subset G^0$, индуцированном множеством вершин $\omega_{G^0}[\alpha^0] \subseteq V$, а затем объединению каждого найденного МНМ в G^1 с парой вершин (β^0, γ^0). Для нахождения МНМ в подграфе $G^1 = (\omega_{G^0}[\alpha^0], S_{\omega_{G^0}[\alpha^0],A})$ используется та же схема. Выбираем узел $\alpha^1 = (\beta^1, \gamma^1) \in S_{\omega_{G^0}[\alpha^0],A}$, строим для него опорное множество $\omega_{G^1}[\alpha^1]$ и переходим к нахождению МНМ в подграфе $G^2 \subset G^1 \subset G^0$. Таким образом, выбрав некоторую пару вершин в графе, переходим к соответствующему подграфу, тем самым сужая размерность задачи.

Решение задачи можно представить в виде дерева поиска, в котором каждый k-й уровень отвечает рассмотрению некоторого подграфа $G^k \subset G^{k-1} \subset \ldots \subset G^0 \equiv G$. Здесь $\alpha^k = (\beta^k, \gamma^k)$ – некоторый узел в соответствующем графе G^k, индуцированном множеством $\omega_{G^{k-1}}[\alpha^{k-1}]$. Узлы α^k и α^{k-1} связаны следующим образом: $\alpha^k \in S_{\omega_{G^{k-1}}[\alpha^{k-1}],A}$. Для компактности записи можно опустить индекс G^k у множества $\omega_{G^k}[\alpha^k]$, так как по индексу узла α^k однозначно можно определить, из вершин какого графа формируется опорное множество $\omega[\alpha^k]$.

Учитывая тот факт, что любой подграф G^k, G^{k-1},..., G^0 является подграфом G, а множества несмежных пар в них определяются: $S_{\omega[\alpha^{k-1}],A}$, $S_{\omega[\alpha^{k-2}],A}$, $S_{\omega[\alpha^0],A}$ соответственно, то индекс A у множества S также можно опустить, понимая, что все несмежные пары вершин в указанных подграфах несмежны и в исходном графе с матрицей смежностей A. Множество $S_{\omega[\alpha^k],A}$ будем записывать в виде $S[\alpha^k]$.

Подграф $G^{k+1} \subset G^k$ будем задавать в следующем виде:

$$G^{k+1} = (\omega[\alpha_*^k], S[\alpha_*^k]),\ \alpha_*^{k+1} \in S[\alpha_*^k].$$

Для компактной формализации алгоритма введем узел отрицательного уровня с вершинами, не имеющими ребра ни с одной вершиной графа G, и обозначим его $\alpha_*^{-1} = (\beta_*^{-1}, \gamma_*^{-1}) = (\overline{0}, \underline{0})$:

$$\omega[\alpha_*^{-1}] \equiv V,\ \ S[\alpha_*^{-1}] \equiv S_{V,A}.$$

Базовое множество $D[\alpha^{k+1}]$ для узла $\alpha^{k+1} = (\beta^{k+1}, \gamma^{k+1}) \in S[\alpha_*^k]$ графа G^{k+1} представим как

$$D[\alpha^{k+1}] = \{d \,|\, (d, \beta^{k+1}) \in S[\alpha_*^k] \,\&\, (d, \gamma^{k+1}) \in S[\alpha_*^k],\ d \in \omega[\alpha_*^k]\}.$$

Опорное множество $\omega[\alpha_*^{k+1}]$ для узла $\alpha_*^{k+1} = (\beta_*^{k+1}, \gamma_*^{k+1}) \in S[\alpha_*^k]$ графа G^{k+1} определяем по правилу

$$\omega[\alpha_*^{k+1}] = D[\alpha_*^{k+1}] \setminus \{\beta_*^{k+1}, \gamma_*^{k+1}\}.$$

Множество $S[\alpha_*^{k+1}]$ несмежных пар в графе, индуцированном множеством вершин $\omega[\alpha_*^{k+1}]$:

$$S[\alpha_*^{k+1}] = \{(p,q) | (p,q) \in \omega[\alpha_*^{k+1}]^{[2]} \,\&\, a_{p,q} = 0,\ p,q \in \omega[\alpha_*^{k+1}]\}.$$

Находим множество $\Delta[\alpha_*^{k+1}]$ по правилу

$$\Delta[\alpha_*^{k+1}] = \omega[\alpha_*^{k+1}] \setminus \cup_{(p,q) \in S[\alpha_*^{k+1}]} \{p, q\}.$$

Множество $P[\alpha_*^{k+1}]$, сформированное согласно правилу

$$P[\alpha_*^{k+1}] = \{Q[\alpha_*^k] \in P[\alpha_*^k] \,|\, \{\beta_*^{k+1}, \gamma_*^{k+1}\} \subseteq Q[\alpha_*^k]\},\ P[\alpha_*^{-1}] = \emptyset,$$

будем называть *окрестностью* узла α_*^{k+1}.

Приведем реализацию алгоритма *AllIS* в псевдокодах:

procedure ALLIS ($G = (V, S_{V,A})$)
begin
$k := 0$ //номер текущего уровня дерева перебора

$J := \emptyset$//независимое множество
$Q := \emptyset$//максимальное независимое множество
$F := \emptyset$ //множество использованных пар
$R := \emptyset$ //множество узлов, использование которых не позволит построить новое уникальное МНМ
$M(G) := \emptyset$ //множество всех МНМ графа G
$\alpha_*^{-1} := (\overline{0}, \underline{0})$
$Z_\Delta := \emptyset$//множество вершин, которые будут удаляться из множества $\Delta[\alpha_*^k]$
$P[\alpha_*^{k-1}] := \emptyset$
$\omega[\alpha_*^{k-1}] := V$
$S[\alpha_*^{k-1}] := S_{V,A}$
construct $\Delta[\alpha_*^{k-1}]$
$\alpha^k := (\beta^k, \gamma^k) \in S_{V,A},\ \beta^k, \gamma^k \in V$
construct $D[\alpha^k]$
$continue := true$
while $continue = true$ **do**
$\Delta[\alpha_*^{k-1}] := \Delta[\alpha_*^{k-1}] \setminus Z_\Delta$
while $\Delta[\alpha_*^{k-1}] \neq \emptyset$ **do**
$\forall \delta_* \in \Delta[\alpha_*^{k-1}]$ **do** $Q := J \cup \{\delta_*\}$, $M(G) := M(G) \cup \{Q\}$
  for $\xi := -1$ **to** $k-1$ **do** $P[\alpha_*^\xi] := P[\alpha_*^\xi] \cup \{Q\}$ **end do**
$\Delta[\alpha_*^{k-1}] := \Delta[\alpha_*^{k-1}] \setminus \{\delta_*\}$
end do
if $S[\alpha_*^{k-1}] = \emptyset$
then
 if $k = 0$
 then $continue := false$
 else $J := J \setminus \{\beta_*^{k-1}, \gamma_*^{k-1}\}$, $F := F \setminus \{\alpha_*^{k-1}\}$
 $k := k-1$
 end if
else
 choose $\alpha_*^k := (\beta_*^k, \gamma_*^k) \in S[\alpha_*^{k-1}] :\ |D[\alpha_*^k]| = max_{\alpha^k \in S[\alpha_*^{k-1}]} |D[\alpha^k]|$
$R := \{(\beta^k, \gamma^k) \mid D[\alpha^k] \subseteq D[\alpha_*^k],\ (\beta^k, \gamma^k) \in S[\alpha_*^{k-1}] \setminus \{\alpha_*^k\}\}$
$Z_\Delta := \emptyset$
construct $P[\alpha_*^k]$
$exist := 0$
for all $I \in P[\alpha_*^k]$ **do**
 if $|(I \setminus J) \setminus \{\beta_*^k, \gamma_*^k\}| = 1$
 then $Z_\Delta := Z_\Delta \cup (I \setminus J) \setminus \{\beta_*^k, \gamma_*^k\}$
  if $|D[\alpha_*^k]| = 3$ **or** $|D[\alpha_*^k]| = |I \setminus J|$
  then $exist := 1$ **end if**
 end if
end do
if $exist = 1$
then $S[\alpha_*^{k-1}] := S[\alpha_*^{k-1}] \setminus (R \cup \{\alpha_*^k\})$
else
$J := J \cup \{\beta_*^k, \gamma_*^k\}$, $F := F \cup \{\alpha_*^k\}$
construct $\omega[\alpha_*^k]$

if $\omega[\alpha_*^k] = \emptyset$
then $S[\alpha_*^k] := \emptyset,\ \Delta[\alpha_*^k] := \emptyset,\ Q := J,\ M(G) := M(G) \cup \{Q\}$
 for $\xi := -1$ **to** $k-1$ **do** $P[\alpha_*^\xi] := P[\alpha_*^\xi] \cup \{Q\}$ **end do**
else
 construct $S[\alpha_*^k]$, $\Delta[\alpha_*^k]$
 construct $D[\alpha^{k+1}]$ **for all** $\alpha^{k+1} \in S[\alpha_*^k]$
end if
$S[\alpha_*^{k-1}] := S[\alpha_*^{k-1}] \setminus (R \cup \{\alpha_*^k\})$, $k := k+1$
end if
end if
end do
return $M(G)$
end {of ALLIS}

Тестирование алгоритма. Предложенный в статье алгоритм сравнивался при тестировании с алгоритмом Брона–Кербоша [6]. Для тестирования генерировались графы с различными значениями плотности. В целях сохранения единообразия оба алгоритма были реализованы в пакете Maple 14. Тесты проводились на одинаковых матрицах и были запущены на процессоре Intel Core i5 2.6 GHz 4 GB RAM в системе Windows 7.

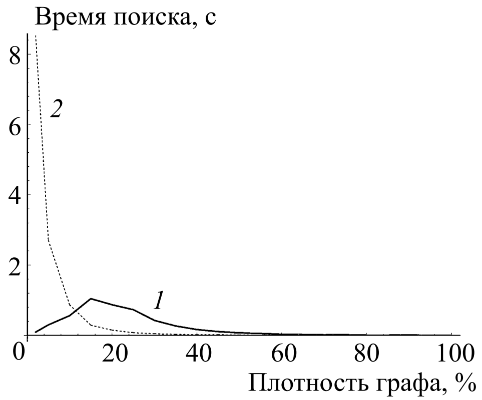

Рис. 1. Зависимость времени поиска решения от плотности графа
1 – по алгоритму *AllIS*; *2* – по алгоритму Брона–Кербоша [6].

На рис. 1, 2 приведены результаты тестирования. Зависимость времени поиска решения от плотности графа размерности $n = 20$ отражает рис. 1. Из этого рисунка видно, что при увеличении плотности время поиска решения уменьшается для обоих алгоритмов. Следует отметить, что для сильно разреженных графов при плотности меньше 10% время работы алгоритма *AllIS* значительно меньше времени работы алгоритма Брона–Кербоша. Эспериментальные значения времени работы обоих алгоритмов для произвольных графов размерности $n \in [10, 30]$ при фиксированной величине плотности $p = 2\%$ приведены на рис. 2, *а*. Результаты представлены в логарифмической шкале: по горизонтальной оси – $\lg n$, по вертикальной – $\mathrm{time\_log} = \log_2 t + |t_{\min}|$, где n – количество вершин в графе, t – экспериментальное время поиска всех

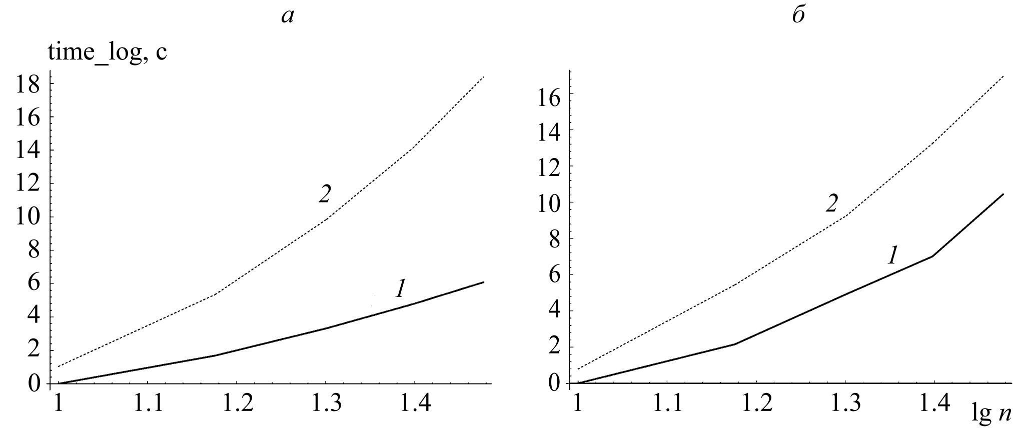

Рис. 2. Зависимость времени работы алгоритмов
от размерности графа при плотности 2% (*а*) и 4% (*б*)
1 – по алгоритму *AllIS*; *2* – по алгоритму Брона–Кербоша [6].

максимальных независимых множеств, $t_{\min}$ – минимальное экспериментальное время. На рис. 2, *б* даны результаты аналогичных экспериментов при плотности 4%.

Заключение. В статье описан алгоритм *AllIS* нахождения всех МНМ обыкновенного неориентированного графа. Приведены результаты экспериментального сравнения этого алгоритма с широко известным алгоритмом для поиска всех МНМ в графе – алгоритмом Брона–Кербоша. Установлено, что при небольшом значении плотности графа скорость алгоритма *AllIS* заметно выше.

Литература

1. *Moon J. W., Moser L.* On cliques in graphs // Israel J. Math. 1965. Vol. 3. P. 23–28.
2. *Олемской И. В.* Алгоритм выделения структурных особенностей // Николай Ефимович Кирин: сб. ст.; под ред. В. В. Жука, В. Ф. Кузютина. СПб.: АССПИН, 2003. С. 224–251.
3. *Олемской И. В.* Методы интегрирования систем структурно разделенных дифференциальных уравнений. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2009. 180 с.
4. *Олемской И. В.* Модификация алгоритма выделения структурных особенностей // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 10: Прикладная математика, информатика, процессы управления. 2006. Вып. 2. С. 55–65.
5. *Олемской И. В.* Явный метод типа Рунге–Кутты пятого порядка // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10, № 2. С. 87–105.
6. *Bron C., Kerbosch J.* Algorithm 457: Finding all cliques of an undirected graph // Comm. ACM. 1973. Vol. 16. P. 575–577.

Статья рекомендована к печати проф. Л. А. Петросяном.

Статья принята к печати 25 октября 2012 г.