Problem največjega polnega podgrafa

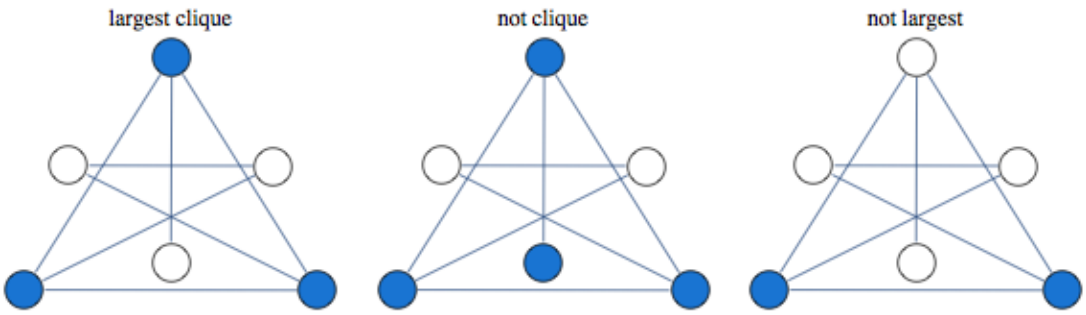
Poročilo
Predmet: Finančni praktikum
Avtorici: Vida Maver, Anamarija Mijatović
5.1.2018

Kazalo

1. Kratek opis problema

V svojem projektu sva se ukvarjali z optimizacijskim problemom iskanja največjega polnega podgrafa na nausmerjenih grafih, oziroma povedano drugače, s problemom iskanja maksimalne klike v danem neusmerjenem grafu.

Klika je podgraf grafa, v katerem so vsa vozlišča med seboj sosednja. Polni graf reda n je graf z n vozlišči, v katerem obstaja povezava med vsakim parom različnih vozlišč. Označimo ga s K_n, v njem pa je $\frac{n(n-1)}{2}$ povezav. Največja klika (ang. *maximal*) C na neusmerjenem grafu G je polni podgraf, ki ni vsebovan v nobenem drugem polnem podgrafu, torej če ne obstaja klika C' na grafu G, tako da $C \subseteq$ C' in C $\neq$ C'. Naj bo V množica vozlišč grafa $G(V, E)$. Polni podgraf grafa G je taka množica $G' \subset G$, da za vsak par vozlišč $v, w \in V$, kjer $v \neq w$, velja, da sta na grafu G sosednja. Poznamo tudi pojem maksimalne klike. Kliki C_{max} rečemo maksimalna (ang. *maximum*) klika, če ne obstaja klika na grafu G, ki bi vsebovala več vozlišč. Število vozlišč v maksimalni kliki označimo z $\omega(G)$ in ga imenujemo klično število. Velja, da je vsaka maksimalna klika $C_{max} \subseteq V$ na grafu G največja klika, obratno pa ni nujno res. Na primeru si oglejmo kliko in maksimalno kliko:



Iskanje maksimalne klike na neusmerjenem grafu je eden od pomembnih NP - težkih problemov, uporablja pa se predvsem v diskretni matematiki, bioinformatiki in računalniški kemiji. Problem je NP - težek, če zanj ne obstajajo učinkoviti natančni polinomski algoritmi in se zato raje posvetimo iskanju algoritmov, ki v korist hitrosti žrtvujejo natančnost.

Največjo kliko bi lahko iskali s sistematičnim pregledom vseh podmnožic, vendar bi takšno iskanje vzelo preveč časa in ne bi bilo uporabno za grafe z večjim številom vozlišč. Poznamo pa algoritme, ki potrebujejo manj časa za reševanje problema. Med njimi sta Bron-Kerbosch algoritem in MaxClique algoritem, ki sta uporabna za iskanje največje klike na neusmerjenih grafih. Bron in Kerbosch sta leta 1973 predstavila algoritem za iskanje vseh klik na neusmerjenm grafu z uporabo metode "razveji in omeji". Pri tej metodi možne rešitve hranimo in ocenjujemo njihovo obetavnost. MaxClique algoritem pa najde maksimalno kliko grafa, ki je neke omejene velikosti in je v ta namen koristno poznati čimbolj natančne meje, zato je ideja algoritma za izračun največje klike na neusmerjenih grafih ta, da bi bile v začetku algoritma že izračunane tesne zgornje meje, kar močno skrajša čas, ki je potreben za rešitev problema.

Za reševanje problema si torej lahko pomagamo z več formulacijami v celoštevilskem linearnem programiranju. Midve sva si pomagali s formulacijo za iskanje maksimalne neodvisne množice grafa G. Samo formulacijo bova opisali v nadaljevanju.

V kakšnih aplikacijah pa nas namesto klike oziroma polnega podgrafa zanima zgoščen podgraf (ang. *dense subgraph*), za katerega velja, da je vsaj $(a * 100)\%$, $0 \leq a \leq 1$ povezav, ki bi v kliki morale biti, že v njej. Denimo, da imamo graf G z n vozlišči in zahtevano gostoto a. Potem lahko definiramo kliko, kvazikliko in k-psevdokliko.

- Klika velikosti t je taka podmnožica C vozlišč iz G s $|C| = t$, da sta poljubni vozlišči iz C sosednji v G, kar pomeni, da ima podgraf G, induciran na C, $\frac{t*(t-1)}{2}$ povezav.

- Kvaziklika velikosti t je taka podmnožica Q vozlišč iz G s $|Q| = t$, da ima podgraf G, induciran na Q, vsaj $\frac{a*t*(t-1)}{2}$ povezav.

- k - psevdoklika velikosti t (za neko število k) je taka podmnožica P vozlišč iz G s $|P| = t$, da ima podgraf G, induciran na P, vsaj $\frac{a*t*(k-1)}{2}$ povezav.

1.1. **Časovna zahtevnost.** Če nas zanima, ali graf G vsebuje kliko, ki ima k-vozlišč in če želimo najti vse take, lahko uporabimo tako imenovan *brute force* algoritem. Tak algoritem preveri vsak podgraf grafa G, ki ima k vozlišč in preveri če ta tvori kliko. Časovna zahtevnost tega postopka je $O(n^k k^2)$, ker mora algoritem preveriti $O(n^k)$ podgrafov, kjer pa mora nadalje še pri vsakem od teh preveriti $O(k^2)$ povezav. Vidimo, da je problem lahko rešen v polinomskem času, če je parameter k fiksna konstanta, če pa temu ni tako, pa je časovna zahtevnost tega algoritma eksponentna.

Moon & Moser pa sta ugotovila, da ima vsak graf z n vozlišči največ $3^{n/3}$ maksimalnih klik.

2. Postopek

2.1. **Opis podatkov.** Ker je bila najina naloga uporabiti celoštevilsko linearno programiranje za iskanje maksimalnih klik v grafih, ki jih lahko najdemo na internetu, sva si v začetni fazi izbrali konkreten graf, na katerem sva kasneje delali. Za konkretni primer sva si izbrali glasovanje znotraj Wikipedijinga omrežja. Če želi uporabnik postati Wikipedijin administrator, ga mora izvoliti zadostno število uporabnikov. Podatke sva pridobili za 2794 različnih tako imenovanih volitev, s 103.663 glasovi in 7066 uporabniki, ki so sodelovali v glasovanju (ali so glasovali, ali pa kandidirali). Vozlišča v omrežju predstavljajo uporabnike, usmerjene povezave od vozlišča i do vozlišča j pa predstavljajo, da je uporabnik i glasoval za uporabnika j. Odločili sva se, da bova iskali največji polni podgraf v neusmerjenih grafih, zato sva podatke interpretirali kot neusmerjen graf in sicer tako, da povezava med vozliščema obstaja, če je podana vsaj v eno smer.

2.2. **Opis dela.** V svojem delu sva napisali 4 različne funkcije, katere sva potrebovali za iskanje največje klike. Te funkcije bova sedaj podrobneje opisali.

- **Uvoz in zapis podatkov kot graf**

Funkcija *addEdge(d,u,v)* doda vozlišče v slovar d, če le-to vozlišče še ni v slovarju.

Vhodni podatki: Sosednji točki u in v, ki ju dodamo v slovar d.

Izhodni podatki: Slovar d, kjer so ključi vsa vozlišča grafa, vrednosti ključev pa vozlišča s katerimi je ključ povezan.

Nato sva funkcijo *addEdge(d,u,v)* uporabili na najinem konkretnem grafu *wiki.txt*, kjer sva vsak element v vsaki vrstici dodali v slovar d. S Sageovo vgrajeno funkcijo *Graph()* sva dobljeni slovar pretvorili v obliko na kateri lahko uporabimo Sagove vgrajene funkcije za delo z grafi.

- **Ustrezno zmanjšanje grafa**

Ker je problem iskanja maksimalne klike na velikih grafih težak in traja dolgo časa, sva po tem, ko sva v programski jezik Sage izbran graf uvozili, poiskali naključni povezan podgraf z $n = 300$ vozlišči. Do izbranega končnega števila n sva prišli s postopnim povečevanjem le-tega, vse dokler je bilo do rešitve mogoče priti v nekem doglednem času.

Iskanja naključnega povezanega podgrafa sva se lotili tako, da sva naključno izbirali vozlišča izmed sosedov že izbranih vozlišč in jih dodajali v najin podgraf, dokler le-ta ni bil željene velikosti n. Izbiro vozlišč sva začeli z vozliščem 3, saj je to vozlišče največja povezana komponenta. Tako sva dobili povezan podgraf na katerem sva iskali največjo možno kliko in kvazi-kliko.

- **Komplement originalnega grafa**

Definicija maksimalne klike je tesno povezana z definicijo maksimalne neodvisne množice. V splošnem je neodvisna množica grafa G ekvivalentna maksimalni kliki v komplementu grafa G^C. Komplement grafa $G = (V, E)$ je graf $\overline{G} = (V, \overline{E})$, kjer je
$\overline{E} = \{(i, j)|i, j \in V, i \neq j \text{ in } (i, j) \notin E\}$.

- **Iskanje maksimalne klike s celoštevilskim linearnim programom**

V najinem celoštevilskem programu sva si pomagali s formulacijo za iskanje maksimalne neodvisne množice komplementa naključnega podgrafa H izbranega originalnega grafa. V splošnem lahko v danem danem grafu G največjo neodvisno množico poiščemo na naslednji način:

$$\text{Maximize} \sum_{v \in G} b_v$$

$$\forall uv \in G, b_u + b_v \leq 1$$

Z dejstvom, da je iskanje maksimalne neodvisne množice na komplementu grafa, ekvivalentno iskanju maksimalne klike na originalnem grafu, sva si pomagali z enim od ukazov v funkciji, ki jo bova sedaj na kratko opisali.

Funkcijo *max_klika(G)* sva zapisali kot linearni program. Poglejmo si vhodne in izhodne podatke funkcije *max_klika(G)*.

Vhodni podatki: Graf G (midve sva zaradi hitrejše prevedbe programa uporabili povezan podgraf H originalnega grafa G).

Izhodni podatki: Naključna maksimalna klika (v najinem primeru povezanega podgrafa) originalnega grafa.

- **Iskanje kvaziklike s celoštevilskim linearnim programom**

Vsaka klika je tudi kvaziklika, vsaka kvaziklika velikosti t pa je tudi k-psevdoklika za vsak $k \leq t$. Prav tako je vsaka k-psevdoklika velikosti $t \leq k$ tudi kvaziklika, vsaka k-psevdoklika pa je tudi k'-psevdoklika za vsak $k' \leq k$. Če ima maksimalna kvaziklika velikost m, potem zadošča, da poiščemo maksimalno m-kvazikliko velikosti največ m (oziroma maksimalno k-psevdokliko velikosti največ k za nek $k \geq m$). Kvaziklika velikosti m ima podmnožico velikosti $m-1$, ki je tudi kvaziklika (odstranimo vozlišče z najmanj sosedi znotraj kvaziklike) - obstajajo torej kvaziklike za vsako velikost $1, 2, \ldots, m$.

Za iskanje kvaziklik, za katere velja, da je vsaj 90% povezav, ki bi v kliki morale biti, res v kvazi-kliki, sva zapisali linearni program na naslednji način.

Uvedli sva dve spremenljivki x in y. Spremenljivka y_{uv} nam predstavlja neurejen par različnih vozlišč za vsak par vozlišč (u, v), x_u pa predstavlja spremenljivko za vsako vozlišče. Podobno kot pri iskanju maksimalne klike sva maksimizirali

$$\text{Maximize} \sum_{v \in G} x_v$$

$$\forall uv \in G, y_{uv} \leqslant x_u, \forall u \in G$$

Pojavi se problem, saj ima klika s k vozlišči $\frac{k(k-1)}{2}$ povezav, torej ima pripadajoča kvaziklika vsaj $a\frac{k(k-1)}{2}$ povezav. Ker je k določen kot vsota x-ov nam tak pogoj da kvadratno omejitev, kar pa v linearnem programu ni dovoljeno. Če poznamo velikost največje klike (označimo jo s k), lahko takšen problem odpravimo z naslednjo omejitvijo.

$$\sum_{u,v} y_{uv} \geqslant a\frac{k-1}{2} \sum_{v} x_v$$

Dodamo še omejitev da je velikost iskane psevdoklike največ k:

$$\sum_{v \in G} x_v \leqslant k$$

Zgornje omejitve in ciljno funkcijo sva zapisali v celoštevilskem linearnem programu, ki poišče maksimalno k-psevdokliko v danem grafu, ki je največ velikosti k.

Linearni program sva zapisali v funkcijo *max_psevdoklika(G, k, a)*.

Vhodni podatki: Graf G (ali H povezan podgraf originalnega grafa), k velikost največje klike in a vrednost zahtevane gostote.

Izhodni podatki: Naključna maksimalna k-psevdoklika povezanega podgrafa originalnega grafa.

Ker pogoj

$$\sum_{u,v} y_{uv} \geqslant a \frac{k-1}{2} \sum_{v} x_v$$

ne zagotavlja, da bo dobljena kvaziklika res imela dovolj povezav, sva k določili z bisekcijo. Z bisekcijo sva iskali najmanjši k, pri katerem je kvaziklika imela zadosti povezav.

Najprej sva določili interval znotraj katerega sva iskali k. Zgornja meja je bila velikost podgrafa, spodnja meja pa je bila velikost največje klike. Bisekcija se izvaja dokler ne dosežemo zgornje meje. V vsakem koraku bisekcije vzamemo srednjo vrednost intervala:

$$k = \frac{s+z}{2}.$$

Tako sva z linearnim programom za iskanje maksimalne psevdoklike poiskali maksimalno k-psevdokliko v povezanem podgrafu velikosti največ k. V funkciji *bisekcija(G, a = 0.9)* sva za zahtevano gostoto podali privzeto vrednost $a = 0.9$, saj iščeva kvaziklike, ki vsebujejo vsaj 90% povezav, ki bi v kliki že morale biti. Pri sami bisekciji pa je bilo potrebno paziti, saj nama je reševanje nedopustnega linearnega programa sprožilo napako, ki sva jo morali ujeti. V funkciji bisekcija sva obravnavali tri možnosti:

- *Dobimo kvazikliko velikosti 0;*
  Prazna množica je vedno dopustna rešitev ILP za iskanje k-kvaziklik in v tem primeru bi funkcija vrnila prazen seznam. Sklepamo lahko, da ima maksimalna kvaziklika očitno velikost manjšo od k, zato ustrezno popravimo zgornjo mejo $z = k - 1$

- *Dobimo kvazikliko velikosti k;*
  Maksimalna kvaziklika ima očitno velikost vsaj k, zato v tem primeru

popravimo spodnjo mejo $s = k + 1$

– *Dobimo kvazikliko velikosti manjše od k;* V tem primeru dobimo maksimalno kvazikliko, zato bisekcijo prekinemo.

Poglejmo si vhodne in izhodne podatke funkcije *bisekcija(G, a = 0.9).*

Vhodni podatki: Graf G (midve sva vstavili povezan podgraf H originalnega podgrafa G) in privzeta vrednost zahtevane gostote.

Izhodni podatki: Naključna maksimalna kvaziklika povezanega podgrafa originalnega grafa.

3. Rezultati

Kot sva omenili je iskanje maksimalne klike (kvaziklike) na najinem originalnem grafu preveč zahtevno in sva se omejili le na iskanje maksimalne klike (kvaziklike) na ustrezni podmnožici grafa.

Največji povezan podgraf, kjer nama je program še vrnil maksimalno kliko v doglednem času, je bil podgraf s številom vozlišč 300. Na njemu sva dobili maksimalno kliko velikosti 6 in sicer na vozliščih $15, 3643, 3956, 737, 766, 4310$. Čas iskanja največje klike je znašal 261.39 s. Čas iskanja največje 6-psevdoklike je bil 238.48 s, največja 6-psevdoklika pa povezuje vozlišča $3643, 5743, 766, 2516, 4310, 3614$.
Največja kvaziklika, pri podgrafu velikosti 300 je enaka 7 in povezuje vozlišča $6123, 737, 1403, 766, 6032, 4310, 2485$. Čas iskanja največje kvaziklike je bil 14412.2 s. Program je za izračun vsega porabil 14912.07s, torej dobre 4 ure.
V tem primeru, se je pri poganjanju funkcije max_psevdoklika pred bisekcijo za k uporabila velikost največje klike ($k = 6$).

Če pa sva za k uporabili vrednost iz prvega koraka bisekcije, torej $k = floor\frac{\text{len}(najvecja\_klika)+n}{2}$ (v tem primeru je kot rečeno, $n = 300$), pa je bil za vse skupaj porabljen čas slabih 80 minut. Na tem mestu ne bova znova pisali, na katerih vozliščih sva dobili rezultate, saj morava pripomniti, da sva delali na naključnem povezanem podgrafu in lahko zaradi naključnosti program ob vsaki izvedbi vrne drugačen podgraf in s tem drugačno maksimalno kliko.

Za podgraf velikosti 100 sva dobili maksimalno kliko velikosti 4 in sicer kliko, ki povezuje vozlišča $2135, 4191, 4335, 2909$. Čas iskanja največje klike v podgrafu velikosti 100 je bil 1.23 s. Čas iskanja 4-psevdoklike je bil 0.49 s in le-ta povezuje vozlišča $2135, 4335, 4899, 2909$. Največja kvaziklika je bila velikosti 5 in vsebuje vozlišča $2135, 4191, 4335, 4948, 29094$. Čas iskanja največje kvaziklike je bil 7.56 s. Program je za izračun vsega porabil 9.28 s.

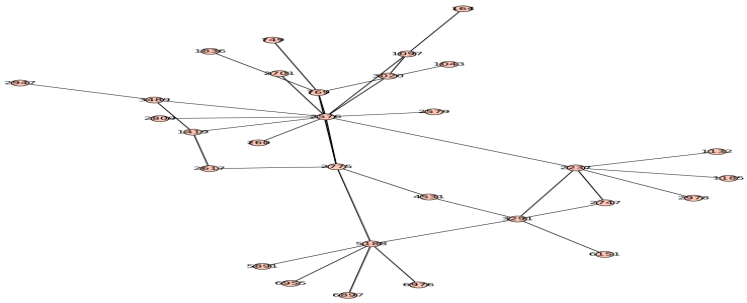
Če pa sva za k uporabili vrednost iz prvega koraka bisekcije, sva za podgraf velikosti 100 sva dobili maksimalno kliko velikosti 4 in sicer kliko, ki povezuje vozlišča $2576, 1972, 2485, 3009$. Čas iskanja največje klike v podgrafu velikosti 100 je bil 1.19 s. Čas iskanja 52-psevdoklike je bil 0.03, v tem primeru je največja 52-psevdoklika kar prazen seznam. Največja kvaziklika je bila velikosti 4 in vsebuje

vozlišča $2576, 1972, 2485, 3009$. Čas iskanja največje kvaziklike je bil 9.57 s. Program je za izračun vsega porabil 10.79 s.

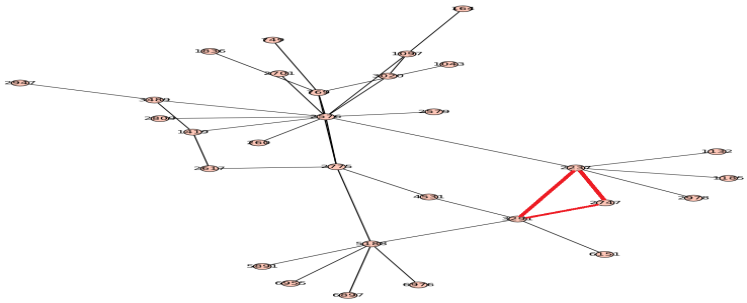
Opazimo da se z večanjem velikosti grafa, časovna zahtevnost zelo povečuje. Za trikratno povečanje velikosti grafa, se je čas izvedbe povečal za več kot 1500-krat. Opazimo, da ima največjo časovno zahtevnost funkcija za iskanje največje kvaziklike. To je tudi logično, saj je to edina funkcija, ki tudi kliče funkciji za izračun k-psevdoklike in največje klike. Najmanjšo časovno zahtevnst, pa ima funkcija za iskanje k-psevdoklike.

Zaradi preglednosti si poglejmo naključen povezan podgraf s samo 30 vozlišči, njegovo maksimalno kliko in kvazi-kliko. Maksimalna klika je velikosti 3 in povezuje vozlišča $2747, 2237, 3291$. Psevdoklika velikosti 3 povezuje vozlišča $769, 2576, 2775$ in je enaka dobljeni največji kvazikliki s pomočjo bisekcije. Oglejmo si grafe, ki prikazujejo rezultate na podgrafu velikosti 30.

Slika 1. Poljuben povezan podgraf velikosti 30



Slika 2. Maksimalna klika na podgrafu velikosti 30



Slika 3. Psevdoklika velikosti 3 in največja kvaziklika na podgrafu velikosti 30