

Trabajo Práctico Número 3

16 de Mayo de 2016

Algoritmos y Estructuras de Datos III

Grupo 8

Integrante	LU	Correo electrónico
Ciruelos Rodríguez, Gonzalo	063/14	gonzalo.ciruelos@gmail.com
Costa, Manuel José Joaquín	035/14	manucos94@gmail.com
Gatti, Mathias Nicolás	477/14	mathigatti@gmail.com
Maddonni, Axel Ezequiel	200/14	axel.maddonni@gmail.com



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires

Ciudad Universitaria - (Pabellón I/Planta Baja) Intendente Güiraldes 2160 - C
1428 EGA Ciudad Autónoma de Buenos Aires - Rep. Argentina

 $Tel/Fax: (54\ 11)\ 4576-3359$ $\rm http://www.fcen.uba.ar$

${\bf \acute{I}ndice}$

0.	Introducción	4
	0.1. Experimentación	4
1.	Ejercicio 1	5
2.	Ejercicio 2: Algoritmo exacto	6
	2.1. Explicación detallada del algoritmo	6
	2.1.1. Complejidad del algoritmo	8
	2.2. Performance del algoritmo	9
3.	Ejercicio 3	11
4.	Ejercicio 4: Algoritmo Goloso	12
	4.1. Explicación detallada del algoritmo	12
	4.2. Complejidad temporal de peor caso	13
	4.3. Instancias no óptimas	13
	4.4. Performance del algoritmo	14
	4.5. Experimentación	14
	4.6. Método de experimentación	18
5.	Ejercicio 5: Búsqueda Local	19
	5.1. Introducción	19
	5.2. Explicación detallada de los algoritmos	19
	5.2.1. INTERCAMBIAR	19
	5.2.2. REEMPLAZAR	20
	5.2.3. 3-ROTACION	21
	5.3. Complejidades	21
	5.3.1. INTERCAMBIAR	21
	5.3.2. REMPLAZAR	21
	5.3.3. 3-ROTACION	21
	5.4. Análisis de performance y calidad	22
6.	Ejercicio 6: Tabu Search	25
	6.1. Explicación detallada del algoritmo	25

Algoritmos y Es	ructuras de	Datos	III:	TP3
-----------------	-------------	-------	------	-----

10	cuatrimestre	_1 _	001	C
	charrinesire	α	-Z(U)	•

	6.2. Performance del algoritmo	27
7.	Ejercicio 7	28
Α.	. Apéndice	29
	A.1. Generación de grafos conexos aleatorios	29
	A.2. Partes relevantes del código	30

0. Introducción

En este trabajo desarrollaremos varias soluciones para el problema de el subgrafo común máximo entre dos grafos G_1 y G_2 , con respecto a los vértices.

Más precisamente, dados $G_1 = (V_1, E_1)$ y $G_2 = (V_2, E_2)$ dos grafos simples, el problema de máximo subgrafo común consiste en encontrar un grafo $H = (V_H, E_H)$ isomorfo tanto a un subgrafo de G_1 como a un subgrafo de G_2 que maximice $|E_H|$.

Nuestros acercamientos al problema van a ser dos. Primero, vamos a desarrollar una solución exacta, es decir, una solución que encuentra el subgrafo común que maximiza la cantidad de aristas. Sin embargo, como veremos, esta forma de resolverlo no es razonable dado que se desconoce una solución en tiempo polinomial, por lo que encontrar la mejor solución no es viable para entradas grandes.

Luego, veremos varios algoritmos aproximados para el problema del subgrafo común máximo. Estos consisten en sacrificar exactitud a cambio de tiempo de ejecución. Su complejidad será polinomial, pero como dijimos, las soluciones que generen serán *aproximadas*, o sea, no exactas.

0.1. Experimentación

La experimentación en general sigue los pasos sugeridos por las consignas del trabajo. Los métodos de generación de casos estarán explicados al final de cada sección de experimentación, o en su defecto, en el apéndice.

Sobre la experimentación de tiempos, como las complejidades en general dependen de muchos parámetros, los resultados se vuelven difíciles de representar. Es por eso que seguiremos el mismo método de representación que utilizamos en los TPs anteriores. Supongamos que la complejidad del algoritmo es O(f(n,m)), entonces nuestro gráfico tendrá f(n,m) en el eje x y T(n,m) = "El tiempo que tarda el algoritmo para una entrada de tamaño (n,m)" en el eje y, de esta manera, nos interesará ver que el gráfico es el de una constante.

Por supuesto, también haremos experimentos en los que fijamos parámetros y movemos otros, para corroborar que las performances se comportan como deben. En caso de que las complejidades dependan de un parámetro, haremos un gráfico clásico, en caso contrario, haremos lo mismo que explicamos anteriormente.

1. Ejercicio 1

2. Ejercicio 2: Algoritmo exacto

2.1. Explicación detallada del algoritmo

El problema del sugrafo común máximo (con respecto a aristas) es un problema perteneciente a la clase NP, por lo que hasta el momento no se conocen algoritmos que lo resuelvan de manera exacta en tiempo polimonial.

Por esa razón, el algoritmo que lo resuelve de manera exacta debe ser de la clase de algoritmos que exploran todo el espacio de soluciones y se quedan con la mejor. De entre esos algoritmos, elegiremos un algoritmo de backtracking, dado que proponiendo buenas podas, se pueden mejorar los tiempos de ejecución del algoritmo, evitando mirar el espacio de soluciones en su enteridad.

Nuestras soluciones, es decir, nuestos isomorfismos, van a estar representados como un vector de pares. Cada par (v_{1i}, v_{2i}) es un par de vértices que cumplen que $v_{1i} \in V(G_1)$ y $v_{2i} \in V(G_2)$ y nuestro isomorfismo los mapea.

Por ejemplo, si nuestro isomorfismo es $f: V(G_1) \to V(G_2)$ tal que

f(0) = f(1)

f(1) = f(2)

f(3) = f(5)

f(6) = f(0)

Lo vamos a almacenar de la siguiente manera: (0,1),(1,2),(3,5),(6,0). Nótese que no importa que el "isomorfismo" sea parcial, dado que en realidad estamos describiendo subrafos isomorfos.

Por lo tanto, nuestro algoritmo de backtracking se va a basar en probar todas las posibles combinaciones de listas de pares, y buscar cual representa el isomorfismo con la mayor cantidad de aristas.

Una primera poda que proponemos (bastante fácil de explicar y muy poderosa) es la que sigue: podemos notar que si ciegamente consideramos todas las combinaciones de pares, estaremos considerando todos los isomorfismos varias veces. Por ejemplo, el vector (0,1),(1,2) y el vector (1,2),(0,1) representan el mismo isomorfismo, pero nuestro algoritmo naif los analizará 2 veces.

Por esta razón, diseñamos la siguiente poda: solo considerar vectores cuyo vector de primera coordenadas esté ordenado ascendentemente. En el ejemplo anterior, cuando le llegue al turno a (1,2),(0,1), no lo analizaremos ni a él, ni a ninguno de sus descendientes, dado que todos ellos serán analizados como descendientes de (0,1),(1,2).

Otra poda que realizamos es que, si encontramos la solución máxima posible teóricamente (es decir, la solución cuya cantidad de aristas coincide con el mínimo de las aristas de G_1 y G_2), terminar con el algoritmo inmediatamente.

Una última poda que realizamos es considerar solamente aquellos vectores cuyo largo sea exactamente el del mínimo de los vértices de G_1 y G_2 . Esto se debe a que, si un vector es más chico, vamos a poder considerar a un vector extendido, cuyo isomorfismo potencialmente tendrá más aristas.

El algoritmo utiliza una variable global llamada solucin, que tiene 2 campos, aristas e isomorfismo. En esta variable global irá guardando la mejor solución encontrada hasta el momendo. solucin.aristas debe inicializarse en 0.

Sin más que analizar, pasemos a ver el pseudocódigo del algoritmo. Vale la pena aclarar que asumimos como preconodición que G_1 tiene menos nodos que G_2 (en tal caso de que asi no fuere, el llamador debe ocuparse de dar vuelta los parámetros).

Algorithm 1 Pseudocódigo del procedimiento Backtracking

```
1: procedure BT(Grafo g1, Grafo g2, vector<int> vertices1, vector<int> vertices2,
     Isomorfismo iso)
 2:
         if solution.aristas == MIN(g1.m, g2.m) then
                                                                                                             \triangleright O(1)
 3:
             return
                                                                                                           \triangleright O(n_1)
         if !ordenado\_asc(iso) then
 4:
             return
 5:
                                                                                                             \triangleright O(1)
 6:
         if iso.size == q1.n then
                                                                                                           \triangleright O(n_1^2)
 7:
             aristas \leftarrow contar \ aristas \ isomorfismo(g1, g2, iso)
             if aristas > solucion.aristas then
                                                                                                             \triangleright O(1)
 8:
                                                                                                           \triangleright O(n_1)
                  solucion.isomorfismo \leftarrow iso
 9:
                                                                                                             \triangleright O(1)
                  solucion.aristas \leftarrow aristas
10:
11:
             return
12:
         for u \in vertices1 do
                                                                                                 \triangleright v_1 \text{ veces } O(1)
             for v \in vertices2 do
                                                                                               \triangleright v_1v_2 \text{ veces } O(1)
13:
                  nuevo iso = iso
                                                                                              \triangleright v_1v_2 veces O(n_1)
14:
                  nuevo\ iso.push\ back(make\ pair(u,v))
                                                                                               \triangleright v_1v_2 \text{ veces } O(1)
15:
                  bt(g1, g2, copiar \ sin(vertices1, u), copiar \ sin(vertices2, v), nuevo \ iso)
16:
    v_1v_2 veces T(n_1, n_2, v_1 - 1, v_2 - 1)
```

Algorithm 2 Pseudocódigo del procedimiento contar aristas isomorfismo

```
1: procedure CONTAR ARISTAS ISOMORFISMO(Grafo g1, Grafo g2, Isomorfismo iso)

ightarrow Int
 2:
          aristas \leftarrow 0
                                                                                                                              \triangleright O(1)
          for p \in iso do
                                                                                                                 \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
 3:
               vq1 = p.first
                                                                                                                 \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
 4:
               vq2 = p.second
                                                                                                                 \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
 5:
               for q \in iso do
                                                                                                                 \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
 6:
 7:
                    uq1 = q.first
                                                                                                                 \triangleright n_1^2 \text{ veces } O(1)
                    uq2 = q.second
                                                                                                                 \triangleright n_1^2 \text{ veces } O(1)
 8:
                    if g1.adj matrix[vg1][ug1] \wedge g2.adj matrix[vg2][ug2] then \triangleright n_1^2 veces O(1)
 9:
                                                                                                                 \triangleright n_1^2 \text{ veces } O(1)
10:
          return aristas
```

Donde $n_i = |V(G_i)|$ y $m_i = |E(G_i)|$, para i = 1, 2. Nótese que el largo del vector isomorfismo está acotado superiormente por n_1 , pues $n_1 < n_2$ y el isomorfismo mapea a lo sumo a todos los vértices de n_1 y no puede mapear más cosas.

Además, v_i para i = 1, 2 es el tamaño del vector verticesi.

El algoritmo debe ser llamado de la siguiente manera:

$$bt(grafo1, \{1, ..., |V(grafo1)|\}, grafo2, \{1, ..., |V(grafo2)|\}, \{\})$$

•

Dado que inicialmente tódos los vértices están sin ser utilizados, y el isomorfismo es el isomorfismo vacío.

2.1.1. Complejidad del algoritmo

Calculemos la complejidad del algoritmo. Primero, como vimos, la complejidad del algoritmo contar_aristas_isomorfismo es $O(n_1^2)$ y es bastante fácil de calcular.

Ahora, calculemos la complejidad del algoritmo de backtracking. Sea $T(n_1, n_2, v_1, v_2)$ el tiempo que el algoritmo tarda para una entrada de ese tamaño. El tamaño del vector *iso* puede acotarse por n_1 , como vimos antes.

Como se ve en en análisis de complejidad, $T(n_1, n_2, v_1, v_2) = n_1 + n_1^2 + v_1 v_2 n_1 + v_1 v_2 + v_1 v_2 T(n_1, n_2, v_1 - 1, v_2 - 1)$.

Además, notemos que siempre pasa que $v_i < n_i$, luego, la complejidad puede acotarse por $T(n_1, n_2, v_1, v_2) < n_1 + n_1^2 + v_1 v_2 n_1 + v_1 v_2 + v_1 v_2 T(n_1, n_2, v_1 - 1, v_2 - 1)$. Nos tomamos la libertad de escribir $T(v_1, v_2)$, dado que son los únicos parámetros variables $(n_1 \ y \ n_2 \ están \ fijos)$.

Como
$$n_i > v_i$$
, $T(v_1, v_2) < n_1 + n_1^2 + n_1 n_2 n_1 + n_1 n_2 + v_1 v_2 T(v_1 - 1, v_2 - 1)$.
Luego, $T(v_1, v_2) < 4n_1^2 n_2 + v_1 v_2 T(v_1 - 1, v_2 - 1)$.

Además, $T(n_1, n_2, 0, v_2) = n_1 + n_1^2$ (recordemos que siempre va a pasar que $n_1 < n_2$, por lo tanto $v_1 < v_2$). Por lo que la profundidad de la fórmula recursiva depende solo de v_1 . Luego,

$$\begin{split} T(v_1,v_2) &< 4n_1^2n_2 + v_1v_2T(v_1-1,v_2-1) \\ &< 4n_1^2n_2 + v_1v_2(4n_1^2n_2 + (v_1-1)(v_2-1)T(v_1-2,v_2-2)) \\ &= 4n_1^2n_2 + v_1v_24n_1^2n_2 + v_1v_2(v_1-1)(v_2-1)T(v_1-2,v_2-2) \\ &< 4n_1^2n_2 + 4n_1^3n_2^2 + v_1v_2(v_1-1)(v_2-1)T(v_1-2,v_2-2) \\ &< \dots \\ &< 4n_1^2n_2 + \dots + 4n_1^{v_1}n_2^{v_1-1} + v_1(v_1-1)\dots(v_1-v_1+1)v_2(v_2-1)\dots(v_2-v_1+1)T(0,v_2-v_1) \\ &< 4n_1^2n_2 + 4n_1^3n_2^2 + \dots + 4n_1^{v_1}n_2^{v_1-1} + 4n_1^{v_1+1}n_2^{v_1} \\ &< 4n_1^2n_2 + 4n_1^3n_2^2 + \dots + 4n_1^{v_1+1}n_2^{v_1} \\ &< 4n_1^2n_2 + 4n_1^3n_2^2 + \dots + 4n_1^{v_1+1}n_2^{v_1} \\ &< 4^{v_1+1}n_1^{v_1+1}n_2^{v_1+1} \\ &= (4n_1n_2)^{v_1+1} \end{split}$$

Luego,
$$T(n1, n2) \in O((4n_1n_2)^{n_1+1})$$
.

Nótese que esta es una cota bastante poco ajustada, pero es suficientemente exacta para el análisis que queremos hacer (una cota más ajustada, como se ve en los cálculos anteriores, involucra fórmulas con factoriales y combinatorios).

2.2. Performance del algoritmo

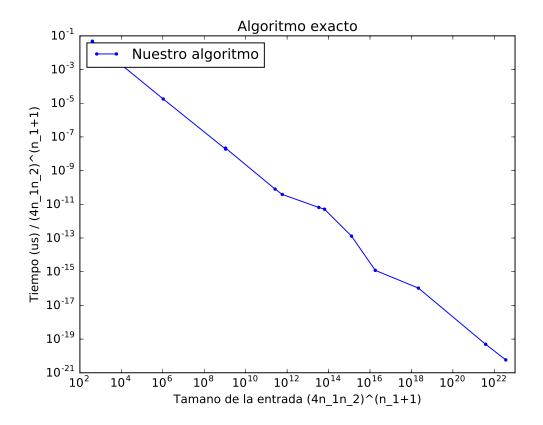


Figura 1

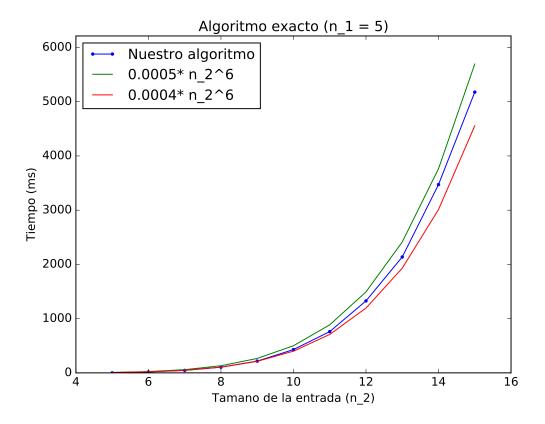


Figura 2

3. Ejercicio 3

4. Ejercicio 4: Algoritmo Goloso

4.1. Explicación detallada del algoritmo

Como ya mencionamos en el ejercicio 2 este problema no parece poder ser resuelto en tiempo polinomial, para poder acercarnos a una solución en tiempos razonables sacrificaremos la seguridad de conseguir siempre la opción óptima a cambio de mejorar la complejidad temporal. Esto se hará a partir de la implementación de una heuristica golosa, un programa que a partir de ciertas suposiciones, no necesariamente validas siempre pero muchas veces útiles, nos permitirá tomar desiciones rapidamente. Será golosa porque tomará desiciones buscando mejorar su estado actual sin pensar en la solución optima final, o sea, sin pensar a largo plazo.

Hicimos dos versiones distintas. La primer versión consiste en mapear los nodos de mayor grado entre si hasta agotar todos los del grafo mas chico. Esto puede funcionar en algunos grafos pero claramente no siempre será la mejor opción.

Algorithm 3 Pseudocódigo de la primer heurística golosa

```
1: procedure GOLOSO1(Grafo g1, Grafo g2, set<int> vertices1, set<int> vertices2) \rightarrow
    MCS
                                                                                            \triangleright O(n_1^2)
       ordenar\_por\_grado(vertices1, g1)
 2:
                                                                                            \triangleright O(n_2^2)
       ordenar\_por\_grado(vertices2, g2)
 3:
       MCS solution
 4:
       for int i = 0, i < vertices 1.tamanio(), i + + do
 5:
           solucion.isomorfismo.insertar\_atras(< vertices1[i], vertices2[i] >) > n_1  veces
 6:
    O(1)
 7:
        int aristas
       aristas = contar \ aristas \ isomorfismo(g1, g2, u, v, solucion.isomorfismo)
    O(n_1^2)
9:
        solucion.aristas = aristas
                                                                                              \triangleright O(1)
10:
       return solucion
```

Como se puede observar en el pseudo-código, el programa inicia ordenando por grado los vértices con $ordenar_por_grado()$ ayudandose con las matrices de adyacencia de g_1 y g_2 . Luego crea el isomorfismo escogiendo mapear el nodo de mayor grado de g_1 con el de g_2 , luego el segundo y asi sucesivamente hasta que se agoten. Una vez hecho esto se calculan las aristas del isomorfismo con $contar_aristas_isomorfismo()$, verificando que aristas se comparten en ambos grafos. (Para mas detalles sobre las funciones nombradas recurrir al apéndice.)

La segunda heurística tiene una mayor complejidad temporal pero da soluciones de calidad superior, esto será expuesto en sección de experimentación. El algoritmo inicia haciendo un mapeo entre el nodo de mayor grado de G_1 y G_2 luego expande este isomorfismo buscando en cada iteración agregar el mapeo de nodos que maximice la cantidad de aristas (del isomorfismo). Si hay empates se queda con la primer opción.

El pseudocódigo es el siguiente

Algorithm 4 Pseudocódigo de la heurística golosa

```
1: procedure GOLOSO(Grafo g1, Grafo g2, vector<int> vertices1, vector<int>
    vertices2) \rightarrow MCS
 2:
        MCS solucion
                                                                                                       \triangleright O(1)
        solucion.aristas = 0
 3:
        int\ vertice1 = mayor\ adj(vertices1, g1)
                                                                                                      \triangleright O(n_1)
 4:
        int\ vertice2 = mayor\ adj(vertices2, q2)
                                                                                                      \triangleright O(n_2)
 5:
        solucion.isomorfismo.insertar\_atras(< vertice1, vertice2 >)
                                                                                                       \triangleright O(1)
 6:
                                                                                                \triangleright O(\log(n_1))
        vertices 1.borrar(vertice1)
 7:
        vertices 2.borrar(vertice2)
                                                                                                \triangleright O(\log(n_2))
 8:
 9:
        while vertices1.tamanio() \neq 0 do
            par<int,int> par mayor deg = < vertices1.primero(), vertices2.primero() >
10:
    \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
            for u \in vertices1 do
11:
                 for v \in vertices2 do
12:
                                                                                         \triangleright n_1^2 n_2 \text{ veces } O(1)
                     {\tt int}\ aristas
13:
                     aristas = contar \ aristas \ isomorfismo(g1, g2, u, v, solucion.isomorfismo)
14:
    \triangleright n_1^2 n_2 \text{ veces } O(n_1^2)
                     if aristas > solucion.aristas then
                                                                                         \triangleright n_1^2 n_2 \text{ veces } O(1)
15:
                                                                                         solucion.aristas = aristas
16:
                         par mayor deg = \langle u, v \rangle
17:
            solucion.isomorfismo.insertar atras(par mayor deg)
                                                                                            \triangleright n_1 \text{ veces } O(1)
18:
            vertices1.borrar(par mayor deg.primero)
                                                                                     \triangleright n_1 \text{ veces } O(\log(n_1))
19:
20:
            vertices1.borrar(par mayor deg.segundo)
                                                                                     \triangleright n_1 \text{ veces } O(\log(n_2))
        return solucion
21:
```

4.2. Complejidad temporal de peor caso

El primer algoritmo tiene complejidad $O(n_2^2 + n_1^2)$ lo cual es acotable superiormente por $O(n_2^2)$ ya que n_2 siempre es mayor que n_1 , es la precondición del programa.

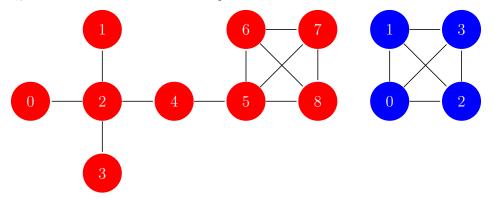
En la segunda heuristica la complejidad es precisamente $O(n_1^4n_2)$. Esto resulta de los 3 ciclos anidados que hay mas una operación de costo cuadratico respecto de n_1 . Si sumamos todo lo que se detalló en el pseudocódigo se puede ver que queda $O(n_1 + n_2 + \log(n_1) + \log(n_2) + n_1^2 \cdot n_2 + n_1^2 \cdot n_2 \cdot n_1^2 + n_1 \cdot \log(n_1) + n_1 \cdot \log(n_2)) = O(n_1^4n_2)$

4.3. Instancias no óptimas

La primer heurística tiene varios casos donde fallará rotundamente. Un ejemplo puede ser el caso en que G_1 es el grafo completo G_n y G_2 la unión de n grafos estrella S_n . En ese caso, por el funcionamiento de nuestro algoritmo, se mapeará a cada nodo del grafo completo con el centro de cada una de las n estrellas, ya que los centros de las estrellas son los nodos de mayor grado, esto formará un isomorfismo sin aristas, ya que en G_2 todos los nodos escogidos son disconexos entre si. Esta solución será mucho peor que la óptima que

se dá al tomar el centro de una estrella y n-1 nodos conexos a este y mapearlos a los del grafo completo, la solución óptima tiene n aristas.

Un ejemplo donde la segunda heuristica golosa puede ser tan mala como uno quiera es cuando en su entrada recibe al grafo completo G_n y a un grafo que resulta de la unión de G_n con S_n , el cual es ilustrado mas abajo.



Si recordamos como funciona nuestra segunda heurística golosa, se puede ver que esta arrancará mapeando el centro de la estrella (el nodo de mayor grado) con algun nodo del grafo completo. Luego seguirá con un nodo que maximice la cantidad de aristas del isomorfismo, el primero que encontrará que cumpla esto será el nodo 0, seguirá de esta manera mapeando los extremos de la estrella con los nodos del grafo completo. En vez de elegir la opción óptima, mapear el grafo completo con el grafo completo contenido en G_1 .

Para estos casos la salida de la heuristica, H(n), siempre va a devolver un isomorfismo con n aristas, ya que mapeara los nodos de la estrella con los del grafo completo. En vez de esto la solución óptima, Opt(n), sería G_n , o sea tendría $\frac{n \cdot (n-1)}{2}$ aristas, por lo cual este no es un algoritmo aproximado, para n suficientemente grande no existe ningun número real positivo, ρ , que acote inferiormente a $\frac{H(n)}{Opt(n)} = \frac{n}{n \cdot (n-1)/2} = \frac{2}{n-1}$.

4.4. Performance del algoritmo

4.5. Experimentación

En esta parte del informe nos dedicaremos a corroborar empíricamente ciertas hipótesis sobre nuestra herística golosa.

Primero intentamos ver que la complejidad del peor caso, $(n_1^4.n_2)$ sea una cota superior correcta. Esto es corroborado en el siguiente gráfico.

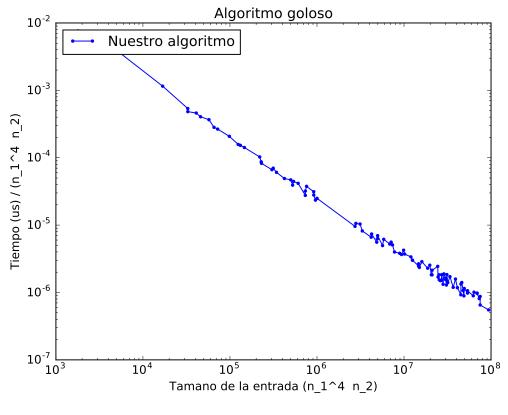


Figura 3

Se puede observar como, para instancias cada vez mas grandes, el tiempo en relación a la cota esperada decrece tendiendo a cero, de esto se puede deducir que nuestra cota no es la mas ajustada posible, o sea no serviría como cota inferior.

Como se puede observar, la complejidad que calculamos previamente depende de dos variables, n_1 y n_2 , los siguientes gráficos analizan por separado que pasa cuando se varía cada uno de estos valores y se intenta corroborar que la complejidad es correcta.

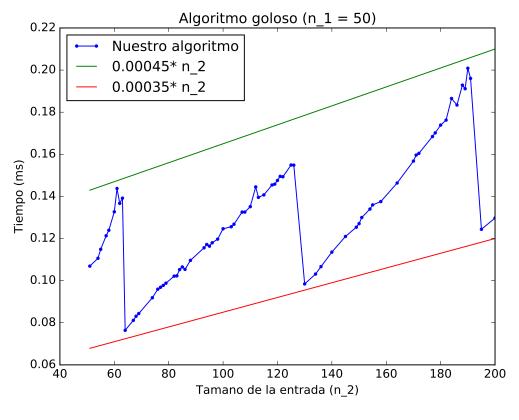


Figura 4

Este gráfico tiene dos particularidades que valen la pena comentar. Primero que púdimos ajustar el problema inferior y superiormente para esta variable. Segundo que hay picos, esto se debe a la manera en que maneja c++ a los vectores, estos se copian y aumentan de tamaño al pasar un tamaño multiplo de 64 elementos.

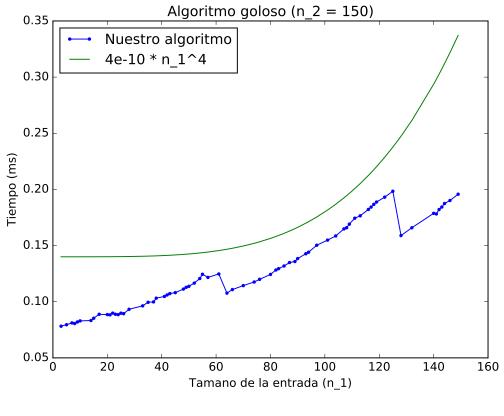


Figura 5

En este gráfico se ve como acotamos superiormente las instancias generadas con la complejidad que habiamos calculado y variando solo n_1 .

La siguiente fígura expone la cantidad de aristas que tenian los isomorfismos calculados por nuestras dos heurísticas golosas, la mala (la primera) y la segunda, la que escogimos como nuestro algoritmo predilecto.

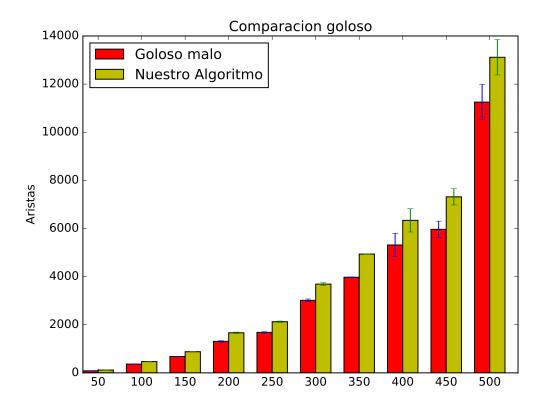


Figura 6

Se puede ver como nuestro algoritmo siempre es en promedio superior. Aunque la ventaja no es tampoco inmensa, lo cual deja a criterio de la aplicación deseada si es preferible usar una u otra, ya que si recordamos lo dicho antes, la complejidad del Goloso Malo es bastante mejor, $O(n_2^2)$.

4.6. Método de experimentación

5. Ejercicio 5: Búsqueda Local

5.1. Introducción

En la sección anterior implementamos y analizamos una heurística golosa para atacar el problema planteado. Si bien resulta bastante deseable desde el punto de vista de la complejidad temporal (polinomial), tiene el problema de que, como vimos, la solución que nos provee puede ser arbitrariamente mala y en el caso general no tenemos ningún tipo de garantía de que tan cerca puede estar de una solución verdaderamente óptima.

Lo que quisiéramos entonces es poder refinar la solución que nos devuelve la heurística golosa para que se acerce más al máximo real. Para esto probaremos 3 algoritmos de búsqueda local. Dichos algoritmos se basan en la noción de "vecindad" de soluciones. Dada una solución fuente S, una vecindad de S, N(S), es un subconjunto del conjunto de posibles soluciones (en nuestro caso un subconjunto del conjunto de subgrafos comunes) que a diferencia de este último tiene un cardinal lo suficientemente pequeño como para poder ser recorrido en tiempo polinomial. Entonces los algoritmos de búsqueda local se diferenciarán a partir de la vecindad escogida en cada caso.

Es importante resaltar que los algoritmos de búsqueda local no dejan de ser algoritmos heurísticos cuya calidad dependerá tanto de la solución fuente utilizada como de la vecindad escogida.

En particular nosotros escogimos 3 vecindades para el problema, bajo los siguientes rótulos:

- INTERCAMBIAR
- REEMPLAZAR
- 3-ROTACION

5.2. Explicación detallada de los algoritmos

En pos de la claridad separamos la explicación y el pseudocódigo de las tres vecindades.

5.2.1. INTERCAMBIAR

Un aspecto importante de nuestro algoritmo goloso es que siempre mapea exactamente todos los vértices del gráfico con menor número de vértices a la hora de devolver la solución. En esta primera vecindad lo que planteamos es considerar todos los swapeos posibles para el mapeo de la solución source. Formalmente, si $S = \{(v_0, w_{i_1}), \dots, (v_n, w_{i_n})\}$ es el mapeo de la solución source, entonces la vecindad de tipo INTERCAMBIAR asociada a S es $N_I(S) = \{S': S' = \{(v_0, w_{i_1}), \dots, (v_p, w_{i_q}), \dots, (v_q, w_{i_p}), (v_n, w_{i_n})\}\}$.

Algorithm 5 Pseudocódigo de INTERCAMBIAR

```
1: procedure INT(Grafo G_1, set<int> vertices_1, Grafo G_2, set<int> vertices_2)\rightarrow MCS
         MCS \ source \leftarrow goloso(G_1, vertices_1, G_2, vertices_2)
                                                                                                                             \triangleright O()
         bool mejore \leftarrow true
                                                                                                                           \triangleright O(1)
 3:
 4:
         while mejore do
                                                                                                           \triangleright O(min\{m_1, m_2\})
 5:
              mejore \leftarrow false
                                                                                                                           \triangleright O(1)
              for i \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo| do
 6:
                                                                                                                       \triangleright n_1 veces
 7:
                  for j \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo|, i \neq j do
                                                                                                                       \triangleright n_1 veces
                       swap(source.isomorfismo[i].first, source.isomorfismo[j].first)
 8:
                                                                                                                           \triangleright O(1)
                       int aristas \leftarrow contar \ aristas \ isomorfismo(G_1, G_2, source.isomorfismo)  \triangleright
 9:
     O(n_1^2)
10:
                       if aristas > source.aristas then
                                                                                                                           \triangleright O(1)
11:
                            source.aristas \leftarrow aristas
                                                                                                                           \triangleright O(1)
                                                                                                                           \triangleright O(1)
12:
                            mejore \leftarrow true
Complejidad: O(minn_1, n_2)
```

5.2.2. REEMPLAZAR

Algorithm 6 Pseudocódigo de REMPLAZAR

```
1: procedure REMP(Grafo G_1, set<int> vertices_1, Grafo G_2, set<int> vertices_2)\rightarrow MCS
 2:
         MCS \ source \leftarrow goloso(G_1, vertices_1, G_2, vertices_2)
 3:
         bool mejore \leftarrow true
                                                                                                                          \triangleright O(1)
 4:
         vector < int > vertices \leftarrow set to vector(vertices_2)
                                                                                                                 \triangleright O(n_2-n_1)
 5:
         while mejore do
                                                                                                         \triangleright O(min\{m_1, m_2\})
              mejore \leftarrow false
                                                                                                                          \triangleright O(1)
 6:
 7:
              for i \leftarrow 0 \dots |vertices| do
                                                                                                              \triangleright n_2 - n_1 veces
 8:
                  for j \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo| do
                                                                                                                     \triangleright n_1 veces
                       swap(vertices[i], source.isomorfismo[j].second)
 9:
                                                                                                                          \triangleright O(1)
10:
                       int \ aristas \leftarrow contar\_aristas\_isomorfismo(G_1, G_2, source.isomorfismo)
     O(n_1^2)
                       if aristas > source.aristas then
                                                                                                                          \triangleright O(1)
11:
                           source.aristas \leftarrow aristas
                                                                                                                          \triangleright O(1)
12:
                                                                                                                          \triangleright O(1)
13:
                           mejore \leftarrow true
14:
                       else
                           swap(vertices[i], source.isomorfismo[j].second)
                                                                                                                          \triangleright O(1)
15:
```

5.2.3. 3-ROTACION

Algorithm 7 Pseudocódigo de 3-ROTACION

```
1: procedure 3-ROT(Grafo G_1, set<int> vertices_1, Grafo G_2, set<int> vertices_2)\rightarrow MCS
         MCS \ source \leftarrow goloso(G_1, vertices_1, G_2, vertices_2)
 3:
         bool mejore \leftarrow true
                                                                                                                         \triangleright O(1)
 4:
         while mejore do
                                                                                                         \triangleright O(min\{m_1, m_2\})
 5:
              mejore \leftarrow false
                                                                                                                         \triangleright O(1)
                                                                                                                \triangleright O(n_1) veces
 6:
              for i \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo| do
 7:
                  for j \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo|, i \neq j do
                                                                                                                     \triangleright n_1 veces
                       for k \leftarrow 0 \dots |source.isomorfismo| do
 8:
                                                                                                                     \triangleright n_1 veces
                           swap(source.isomorfismo[i].first, source.isomorfismo[k].first)
 9:
                                                                                                                         \triangleright O(1)
10:
                           swap(source.isomorfismo[k].first, source.isomorfismo[j].first)
                                                                                                                         \triangleright O(1)
                           int \ aristas \leftarrow contar\_aristas\_isomorfismo(G_1, G_2, source.isomorfismo)
11:
    \triangleright O(n_1^2)
                                                                                                                         \triangleright O(1)
12:
                           if aristas > source.aristas then
                                source.aristas \leftarrow aristas
                                                                                                                         \triangleright O(1)
13:
14:
                                source.isomorfismo \leftarrow source.isomorfismo
                                                                                                                        \triangleright O(n_1)
15:
                                mejore \leftarrow true
                                                                                                                         \triangleright O(1)
```

5.3. Complejidades

5.3.1. INTERCAMBIAR

 $O(\min\{m_1, m_2\}n_1^4)$

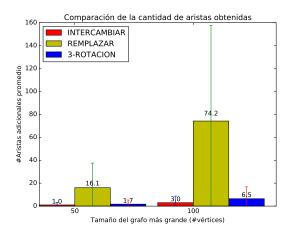
5.3.2. REMPLAZAR

$$O(min\{m_1, m_2\}(n_2 - n_1)n_1^3)$$

5.3.3. 3-ROTACION

 $O(min\{m_1, m_2\}n_1^5)$

Análisis de performance y calidad 5.4.



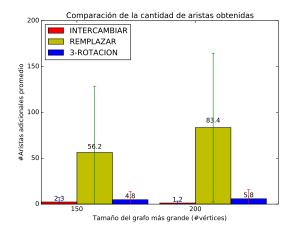
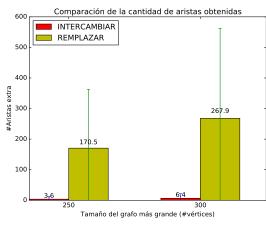


Figura 7:



Figura 8:



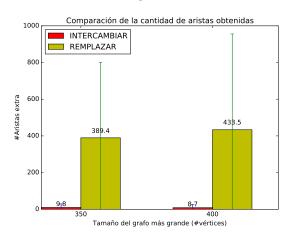


Figura 9:

Figura 10:

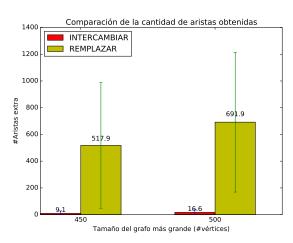


Figura 11:

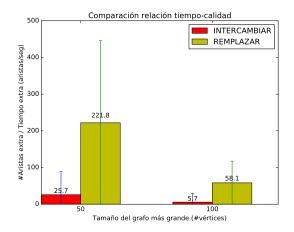


Figura 12:

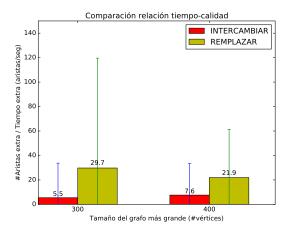


Figura 14:

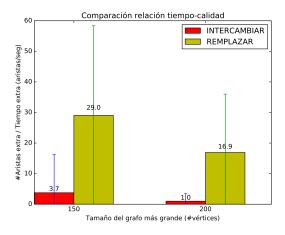


Figura 13:

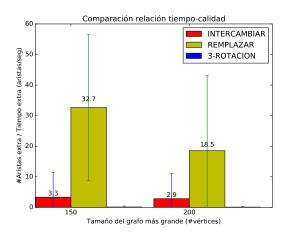


Figura 15:

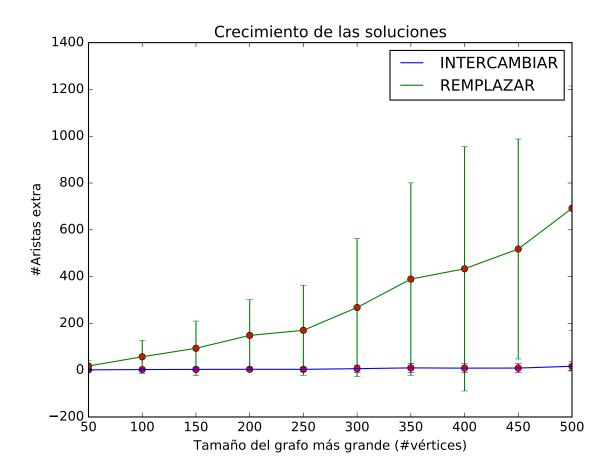


Figura 16:

6. Ejercicio 6: Tabu Search

6.1. Explicación detallada del algoritmo

En la sección anterior analizamos varios algoritmos de búsqueda local. La búsqueda local es una heuristica para algoritmos aproximados. Sin embargo, las heurísticas de búsqueda local pueden verse como un algoritmo de *gradient descent*. Estos algoritmos tienen el problema de los mínimos locales: cuando encuentran un mínimo local se quedan trabados y no pueden mejorar esa solución no óptima.

Por esa razón surgen las metaheuristicas. Una metaheurística es un método heurístico para resolver un problema computacional general. Una meteheurística usa los parámetros dados por el usuario sobre unos procedimientos genéricos y abstractos. Normalmente, estos procedimientos son heurísticos.

En particular, nosotros utilizaremos la metaheurística del tabu search, que a su vez se basa en la heurística de búsqueda local. Una explicación completa de la heurística de tabú search puede encontrarse en [Tab].

Expliquemos los detalles de nuestra implementación antes de ver el pseudocódigo.

Nuestra lista tabú en nuestro caso debería contener soluciones posibles, es decir, isomorfismos. Sin embargo, como comparar isomorfismos es muy caro, decidimos usar una función de hash y almacenar este valor. De esta manera, buscar soluciones en la lista tabú se vuelve mucho menos costoso.

Nuestra función de aspiración, es decir, nuestro método para elegir el isomorfismo inicial de la siguiente iteración hace lo obvio si hay alguna solución no tabú: elige la mejor. Sin embargo, si todas las soluciones son tabú, elegiremos la mejor solución tabú en cuestión.

No creemos que fuera adecuado elegir ningun movimiento prohibido, como vimos en la teórica (la definición de movimiento prohibido no existe en la definición original de la metaheuristica tabu search, si no que es una adición posterior), dado que no parecía razonable prohibir ningún movimiento ni ninguna solución particular (más allá de la tabú). Esto se debe principalmente a que no hay características que hagan que, inmediatamente, podamos descartar una solución y declararla inviable.

Sin más que explicar, veamos nuestra implementación.

Algorithm 8 Pseudocódigo del procedimiento Tabu Search

```
1: procedure TABU SEARCH(Grafo g1, vector<int> vertices1, Grafo g2, vector<int>
    vertices2)
 2:
       source \leftarrow goloso(q1, vertices1, q2, vertices2)
 3:
       lista tabu \leftarrow lista(1000, make pair(0, 0))
       indice\ lista\ tabu \leftarrow 0
 4:
       Inicializar estructuras relacionadas con el criterio de parada.
 5:
       while criterio de parada do
 6:
           mejor\ tabu \leftarrow \{.isomorfismo = Isomorfismo(), .aristas = 0\}
 7:
           mejor \quad solucion \leftarrow \{.isomorfismo = Isomorfismo(), .aristas = 0\}
 8:
           for dovecino \in vecindad(source)
 9:
               aristas \leftarrow buscar(lista_t abu, hash(vecino))
10:
               if aristas = 0 then
                                                                 ⊳ Source es una solución tabu.
11:
                  if aristas > mejor tabu.aristas then
12:
                      mejor\_tabu.aristas \leftarrow aristas
13:
                      mejor\ tabu.isomorfismo \leftarrow vecino
14:
                      continue
15:
               else
16:
                  aristas = contar \ aristas \ isomorfismo(g1, g2, vecino)
17:
                  if aristas > mejor tabu.aristas then
18:
                      mejor \ solucion.aristas \leftarrow aristas
19:
                      mejor\_solucion.isomorfismo \leftarrow vecino
20:
                      continue
21:
           if mejor solution.aristas > 0 then
22:
               lista tabu.push back(
23:
                make\ pair(hash(mejor\ solucion.isomorfismo), mejor\ solucion.aristas))
24:
               if lista \ tabu.size() > lista \ tabu \ limite then
25:
26:
                  lista tabu.pop front()
27:
           if mejor solution.aristas = 0 then
                                                               ▶ Todas las soluciones son tabu.
               source \leftarrow mejor tabu
28:
29:
           else
30:
               source \leftarrow mejor \quad solucion
           Actualizar estructuras relacionadas con el criterio de parada.
31:
```

Para la experimentación, decidimos plantear tres tamaños distintos de lista tabú. A continuación, detallaremos nuestras expectativas. El tamaño más pequeño funcionará muy rápido, dado que la búsqueda es muy efectiva, pero la calidad de los resultados será la peor de entre todas, dado que no podremos guardar muchos resultados previos. El tamaño más grande nos proveerá de los mejores resultados (en promedio) pero la búsqueda en la lista será terriblemente lenta, por lo cual no valdrá tanto la pena. El tamaño intermedio será, según nuestra creencia, un balance entre velocidad y calidad de los resultados.

En cuanto a los criterios de parada, hay varios de entre los cuales elegir, pero todos se reducen a los mismos dos criterios de parada. Analicemoslos.

1. Primero, podemos setear una cantidad de iteraciones global k, y simplemente parar

luego de que la cantidad de iteraciones supera k. Este es el criterio más simple y esperamos que funcione peor que el siguiente.

2. El segundo criterio de parada, es un criterio que se fija cuantas iteraciones pasaron desde que la solución fue mejorada por última vez. Una vez que esa cantidad de iteraciones supera un límite k, el algoritmo terminará.

Esperamos que el segundo criterio funcione mucho mejor, dado que se adapta a lo que esta sucediendo en cada momento: si encuentra cada vez mejores soluciones sigue buscando y si deja de encontrar mejores soluciones termina. Sin embargo, lo bueno del otro criterio de parada, es que tenemos asegurado que va a terminar dentro de un margen de tiempo que podemos determinar muy fácilmente con el límite de iteraciones k.

6.2. Performance del algoritmo

7. Ejercicio 7

A. Apéndice

A.1. Generación de grafos conexos aleatorios

Algorithm 9 Pseudocódigo del procedimiento para generar grafos al azar

- 1: $procedure GRAFO_RANDOM(int n, int m) \rightarrow Grafo$
- 2: $k_n \leftarrow \{(0,1), (0,2), ..., (0,n), (1,2), (1,3), ..., (n-2,n-1)\}$
- 3: $grafo \leftarrow random.choice(k_n, m)$ **return** grafo

Este fue el algoritmo que usamos para generar grafos al azar. A diferencia de trabajos anteriores, no era necesario que los grafos fueran conexos.

Aunque el algoritmo es muy simple, nos parece importante mostrarlo y aclarar que los grafos con los que testeamos no necesariamente son conexos.

A.2. Partes relevantes del código

Durante algunas partes del informe al explicar nuestras implementaciones mencionamos u obviamos algunas funciones para no volver demasiado extensa o densa la explicación. Dejamos aquí el pseudocódigo de algunos de los métodos utilizados para evacuar posibles dudas.

Los algoritmos de lectura y escritura no fueron tomados en cuenta para el cálculo de complejidad ya que las mediciones de I/O son muy variables y suelen producir gráficos muy ruidosos. Por otro lado lo que intentabamos cuantificar era la complejidad de los algoritmos para el calculo del MCS propiamente dichos, por lo que no nos pareció provechoso agregar un estudio de estos métodos de lectura y escritura, los cuales son agenos al objetivo principal de estudio.

Algorithm 10 Pseudocódigo del procedimiento para leer la entrada

```
1: procedure LEER ENTRADA(Grafo g1, Grafo g2)
         leo entrada >> q1.n >> q1.m >> q2.n >> q2.m
                                                                                                               \triangleright O(1)
         g1.adj matrix \leftarrow vector < vector < bool >> nuevo vector1[g1.n][g1.n, false]
 3:
    O(g1.n)
         g2.adj matrix \leftarrow vector < vector < bool >> nuevo vector2[g2.n][g2.n, false]
 4:
     O(g2.n)
         g1.grafos = vector < int > vector[g1.n, 0]
                                                                                                           \triangleright O(g1.n)
 5:
         g2.grafos = vector < int > vector[g2.n, 0]
                                                                                                           \triangleright O(g2.n)
 6:
 7:
         for int i = 0; i < g1.m; i + + do
 8:
             \mathtt{int}\ u,\ v
                                                                                                \triangleright g1.m \text{ veces } O(1)
                                                                                                \triangleright q1.m \text{ veces } O(1)
 9:
             leo\ entrada >> u >> v
             g1.adj\_matrix[u][v] = true
                                                                                                \triangleright g1.m \text{ veces } O(1)
10:
             g1.adj matrix[v][u] = true
11:
                                                                                                \triangleright g1.m \text{ veces } O(1)
             q1.qrados[u] + +
                                                                                                \triangleright q1.m \text{ veces } O(1)
12:
             g2.grados[v] + +
                                                                                                \triangleright g1.m \text{ veces } O(1)
13:
         for int i = 0; i < q2.m; i + + do
14:
                                                                                                \triangleright q2.m \text{ veces } O(1)
15:
             int u, v
             leo\ entrada >> u >> v
                                                                                                \triangleright q2.m \text{ veces } O(1)
16:
             q2.adj matrix[u][v] = true
                                                                                                \triangleright q2.m \text{ veces } O(1)
17:
             g2.adj\_matrix[v][u] = true
                                                                                                \triangleright g2.m \text{ veces } O(1)
18:
             g2.grados[u] + +
                                                                                                \triangleright g2.m \text{ veces } O(1)
19:
20:
             g2.grados[v] + +
                                                                                                \triangleright g2.m \text{ veces } O(1)
```

Algorithm 11 Pseudocódigo del procedimiento para imprimir la solucion

```
1: procedure IMPRIMIR SOLUCIONH(bool inverso, vector<int, int> aristas, MCS solu-
    cion)
 2:
        imprimo valores
                               >>
                                          solucion.isomorfismo.tamanio()
                                                                                     >>
                                                                                                     >>
    aristas.tamanio() >> "" >> final de linea
                                                                                                  \triangleright O(1)
        for p \in solution.isomorfismo do
 3:
            if \neg inverso then
                                                                        \triangleright A lo sumo q1.n veces O(1)
 4:
                                                                                     \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
                imprimo valores >> p.primero >>
 5:
            else
 6:
                imprimo\_valores >> p.segundo >>
                                                                                     \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
 7:
        for p \in solution.isomorfismo do
 8:
            if \neg inverso then
                                                                                     \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
 9:
                imprimo valores >> p.segundo >>
                                                                                     \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
10:
            else
11:
                imprimo valores >> p.primero >>
                                                                                     \triangleright g1.n \text{ veces } O(1)
12:
```

El programa analiza de cuantas aristas sería el isomorfismo si se le agregara el mapeo entre v1 y v2, siendo estos nodos de q1 y q2 respectivamente.

Algorithm 12 Pseudocódigo del procedimiento para contar aristas del isomorfismo

```
1: procedure CONTAR ARISTAS ISOMORFISMO AGREGAR(Grafo g1, Grafo g2, int v1,
     int v2, Isomorfismo iso ) \rightarrow int
 2:
         int aristas = 0
                                                                                                              \triangleright O(1)
 3:
         for i = 0; i < iso.size(); i + + do
                                                                                               \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
 4:
             if i < iso.tamanio then
                  int vg1 = iso[i].primero
                                                                                               \triangleright g1.n \text{ veces } O(1)
 5:
                  int vg2 = iso[i].primero
                                                                                               \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
 6:
             else
 7:
                  int vg1 = v1
                                                                                               \triangleright g1.n \text{ veces } O(1)
 8:
                  int vg2 = v2
                                                                                               \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
 9:
             for j = 0; j \le iso.size(); j + + do
10:
                  if i < iso.tamanio then
                                                                                               \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
11:
                      int ug1 = iso[j].primero
12:
                      int ug2 = iso[j].primero
13:
                  else
14:
                      int ug1 = v1
                                                                                               \triangleright q1.n \text{ veces } O(1)
15:
                      int ug2 = v2
                                                                                               \triangleright g1.n \text{ veces } O(1)
16:
                  if g1.adj\_matrix[vg1][ug1] \land g2.adj\_matrix[vg2][ug2] then
17:
                      aristas++
                                                                                               \triangleright g1.n \text{ veces } O(1)
18:
         return aristas/2
```

Hay dos pequeñas variantes a esta función que son utilizadas en nuestro código, estas son contar_aristas_isomorfismo y hallar_aristas_isomorfismo, dado un isomorfismo la primera calcula la cantidad de aristas y la segunda averigua y almacena las aristas

del mismo.

Referencias

[Tab] "Tabu Search—Part I". En: ORSA Journal on Computing 1.3 (1989), págs. 190-206.

DOI: 10.1287/ijoc.1.3.190. eprint: http://dx.doi.org/10.1287/ijoc.1.3.190.