Санкт-Петербургский государственный университет

Порсев Денис Витальевич

Экспериментальный анализ реализации алгоритмов на графах с использованием операций линейной алгебры

3 июня 2021 г.

Санкт-Петербург

2021

1 Введение

Современные компьютерные архитектуры позволяют легко обрабатывать линейные и иерархические структуры данных, такие как листы, стеки или деревья. Задачи обработки различных графов же зачастую имеют неструктурированный характер. В них отсутствует векторизация, в связи с чем распараллеливание и оптимизация алгоритмов на графах становятся трудными задачами, нерегулярный доступ к памяти вызывает промахи в кэше. В то же время алгоритмы на графах можно преобразовать к последовательности матрично-векторных операций, адаптировав для этого только базовые операции линейной алгебры. Что вместе со стандартизацией модели хранения различных видов графов в памяти в виде разреженной матрицы поможет упростить оптимизацию кода обработки графа.

В данной работе будет проведен анализ производительности алгоритмов на графах с использование операций линейной алгебры. Автором были реализованы следующие алгоритмы: поиск в ширину, подсчет треугольников, поиск кратчайших путей (алгоритм Беллмана-Форда). А именно, будет проведено сравнение реализаций вышеперечисленных алгоритмов с помощью библиотеки pygraphblas, являющейся оберткой написанной на языке python над API спецификацией GraphBlas, предоставляющей набор стандартных операций над матрицами и векторами. Реализации алгоритмов с помощью библиотеки SciPy, предназначенной для решения различных научных и инженерных математических проблем, а также реализации, предоставляемой стандартной библиотекой анализа графов NetworkX, специально предназначенной для работы с графами и другими сетевыми структурами.

2 Детали реализации

Каждый из алгоритмов оперирует над вершинами и ребрами графа, которые имеют различное представление в упомянутых библиотеках. В pygraphblas и SciPy граф представлен в разреженном матричном виде. Networkx использует вложенные словари.

Алгоритмы получают на вход граф в соответствующем реализации представлении. Также для поиска в ширину и алгоритма Беллмана-Форда передается начальная вершина, от которой происходит отсчет.

Выходными данными являются, в случае поиска ширину, — вектор посещенных вершин, значениями которого являются уровни обхода графа, на которых находится соответствующая вершина. В случае подсчета треугольников — общее количество треугольников (циклов длины 3) в графе, в случае алгоритма Беллмана-Форда — вектор кратчайших расстояний от начальной вершины до всех остальных (достижимых) вершин.

Поговорим подробнее о реализации каждого алгоритма.

Реализация на pygraphblas использует GraphBLAS API, предоставляющий элементы линейной алгебры для построения графовых алгоритмов.

Так, поиск в ширину построен на векторно-матричном умножении. Умножая вектор v булевых значений текущих вершин в обходе, на матрицу смежности A графа мы можем получить булев вектор, в котором на i-м месте будет храниться информация о достижимости i-й вершины от уже найденных вершин. Умножение v на A^2 даст вектор достижимых вершин на расстоянии двух переходов от текущих вершин и так далее. Векторно-матричное умножение при этом происходит в булевом полукольце, где операции поэлементного сложения и умножения работают со значениями True и False. Остается лишь на каждом шаге присваивать значение счетчика уровня обхода тем вершинам, что были помечены достижимыми.

Подсчет треугольников основан на умножении матриц. В наивной реализации можно трижды перемножить матрицу смежности на саму себя и получить количество циклов длины 3 для каждой вершины на соответствующей строчке главной диагонали. После чего сложить элементы главной диагонали и поделить сумму на 6, чтобы получить общее число треугольников в графе. Однако такой подход неэффективен, так как с каждым умножением матрица становится плотнее и ее дальнейшее умножение на саму себя начинает занимать большее число операций. Реализованная версия получает сначала нижнюю треугольную часть матрицы, а затем умножает ее на саму себя, при этом применяя маску, то есть считаются элементы только в тех i-х и j-х ячейках, что были в первоначальной треугольной матрице. После чего полученные значения складываются, и эта сумма является общим числом треугольников в графе.

Алгоритм Беллмана-Форда так же, как и поиск в ширину основан на векторно-матричном умножении. Главное отличие здесь — использование мин-плюс полукольца, в котором классические операции сложения и умножения заменяются на операции взятия минимума и сложения соответственно.

Подробнее эти алгоритмы приведены в псевдокоде в листингах 1,2,3.

Алгоритмы поиска в ширину и подсчета треугольников на SciPy были реализованы на тех же принципах линейной алгебры. Использование булевых полуколец было заменено на сравнение полученных значений с нулем. В листингах 4,5 приводится код основных частей алгоритмов, которые синтаксически отличаются от кода, использующего pygraphblas.

Для Беллман-Форда на SciPy вызывается библиотечная функция (листинг 6) из модуля scipy.sparse.csgraph (compressed sparse graph routines). В ней *n - 1* раз расчитывается минимальная дистанция до каждой вершины, где n — число вершин в графе. После чего проверяется наличие отрицательных циклов в графе с помощью еще одной итерации по всем вершинам графа.

Также библиотечные функции вызываются для алгоритмов, использующих NetworkX (листинги 7,8,9). Поиск в ширину в NetworkX реализован стандартным образом. В то время как Беллман-Форд использует улучшенную версию алгоритма под названием SPFA (Shortest Path Faster Algorithm), в которой, в отличие от стандартной реализации, используется очередь для хранения вершин, расстояние до которых уже было пересчитано. Вершины из этой очереди просматриваются первыми. В подсчете треугольников в алгоритме NetworkX каждый треугольник считается три раза, по одному разу в каждой вершине. Алгоритм возвращает словарь, сопоставляющий вершине количество треугольников в ней, после чего значения суммируются и делятся на три для получения общего числа треугольников в графе.

Algorithm 1 (pygraphblas)
Поиск в ширину. Псевдокод.

```
# Input: A - adj matrix NxN
#        s - source vertex
# Output: v

v = [0, ... , 0]
q = [False, ... , False]
q[s] = True
level = 1

while level <= N and q
    v<q> = level  # mask q
    q = [False, ... , False]
    q<v> = q x A  # lor-land sem.
    level++
```

Algorithm 2 (pygraphblas)
Беллман-форд. Псевдокод.

```
# Input: A - adj matrix NxN
#        s - source vertex
# Output: v

# check if graph is weighted

v = [inf, ... , inf]
v[s] = 0

for k = 0 to N-1:
    v = v min.+ A

    # break if v not changing
```

Algorithm 3 (pygraphblas) Подсчет треугольников.

```
    # Input: A - adj matrix
    # Output: r

    # check if graph is undirected

    # Sandia algorithm
    L = tril(A)
    R = L x L  # using mask L
    r = sum(R)
```

Algorithm 4 (SciPy)
Поиск в ширину. Основная часть.

```
# initialize vects ...
not_empty = True; level = 1
while not_empty and\
level <= n_verts:
    for i in range(n_verts):
        if (found_nodes_vect[i]):
            res_vect[i] = level

    found_nodes_vect =\
        ((res_vect @ graph > 0)\
        - res_vect) > 0

    not_empty =\
        found_nodes_vect\
            .sum() > 0
    level += 1
# ...
```

Algorithm 5 (SciPy)
Подсчет треугольников.Основная часть.

```
# load lower portion
# of adj matrix as
# adj_matrix_part ...

def triangular_adj_matr_count\
(adj_matrix_part):
    res_matr = adj_matrix_part\
        .multiply(adj_matrix_part\
        *adj_matrix_part)
        return int(res_matr.sum())
# ...
```

Algorithm 6 (SciPy) Беллман-Форд.

```
# from scipy.sparse import csgraph
def sp_bellman_ford(graph, src_vertex):
    return csgraph.bellman_ford(graph, indices=src_vertex,
                                return_predecessors=False)
```

Algorithm 7 (NetworkX) Поиск в ширину, стандатная реализация.

```
# import networkx as nx
def std_bfs(graph, src_vertex):
    res = nx.single_source_shortest_path_length(graph, src_vertex)
    return [dist+1 for _, dist in sorted(res.items())]
```

Algorithm 8 (NetworkX) Подсчет треугольников, стандатная реализация.

```
def std_triangles_count(graph):
    if nx.is_directed(graph):
        raise Exception("Graph is not undirected")
    return sum(nx.triangles(graph).values()) // 3
```

Algorithm 9 (NetworkX) Беллман-Форд стандатная реализация.

```
def std_bellman_ford(graph, src_vertex):
    res = nx.single_source_bellman_ford_path_length(graph, src_vertex)
    return [dist for _, dist in sorted(res.items())]
```

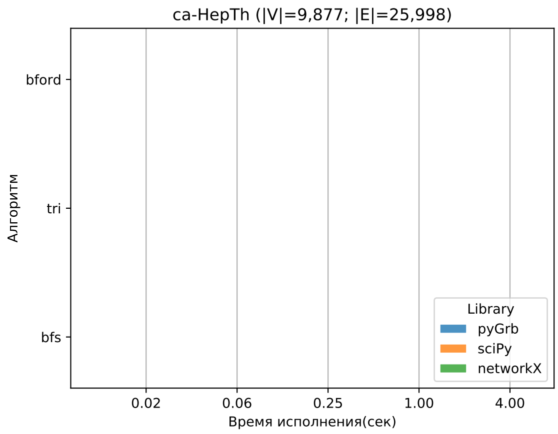
3 Проведение эксперимента

Измерения производились на компьютере со следующими характеристиками: процессор AMD A10-5757M 2.5 GHz, 8 Гб оперативной памяти DDR3, под управлением операционной системы Ubuntu 20.04.2 LTS.

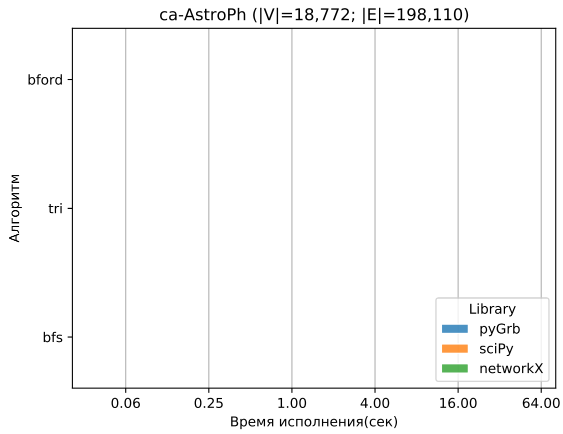
В качестве исходных данных были использованы датасеты SNAP (Stanford Network Analysis Platform[3]) взятые из SuiteSparse Matrix Collection — коллекции разреженных матриц реальных данных[2]. А именно, наборы данных ca-AstroPh[1], ca-CondMat, ca-HepTh описывающие соавторство в научных работах в виде неориентированного графа. Наборы amazon-0302, amazon-0312, amazon-0505, amazon-0601, представляющие собой ориентированные графы, собранные парсингом сайта Amazon с промежутком в несколько месяцев, а также неориентированный граф социальной сети com-Youtube, в котором более миллиона вершин.

Эксперимент был поставлен следующим образом. В память программы загружался граф из датасета, после чего случайным образом выбиралась начальная вершина для поиска в ширину и поиска кратчайшего пути (для реализованного алгоритма подсчета треугольников в графе начальная вершина не требуется). Затем к этому графу последовательно применялись упомянутые алгоритмы и измерялось время исполнения каждого. Для измерения времени использовалась библиотека time, значения сохранялись в долях секунды. Для датасетов *ca* выполнялось 10 итераций, для остальных датасетов алгоритмы исполнялись 5 раз ввиду больших размеров графов. Полученные временные значения записывались в файл.

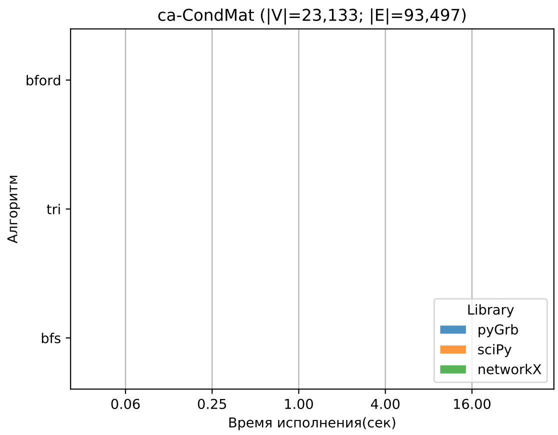
На рисунках 1-4 представлены результаты проведенных измерений.



(a) Набор данных ca-HepTh



(b) Набор данных ca-AstroPh



(c) Набор данных ca-CondMat

Рис. 1: Времена работы алгоритмов на наборах данных *ca*. Среднее 10 замеров.

Рисунок 1 иллюстрирует среднее время исполнения алгоритмов реализованных с помощью разных библиотек в виде гистограммы. Такое представление удобно использовать в случае, когда данные можно сгруппировать по категориям. На временной оси используется логарифмический масштаб. Это связано с тем, что алгоритм Беллмана-Форда в реализации на SciPy работает существенно медленнее остальных вариантов.

На графе другого типа — amazon-0302, состоящем из большего числа вершин и ребер было проверено, не является ли плохая производительность алгоритма поиска кратчайшего пути на SciPy зависимой от входных данных первого эксперимента. Алгоритм поиска треугольников к графам типа *amazon* на применялся, так как написанные реализации считают треугольники только в неориентированном графе. Результаты представлены на рисунке 2.

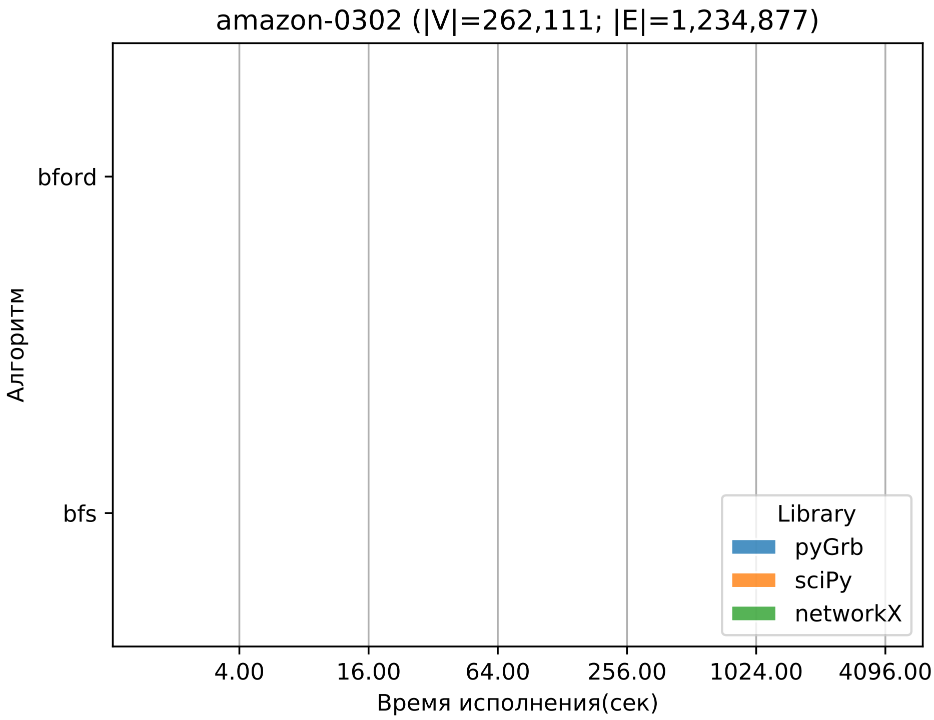
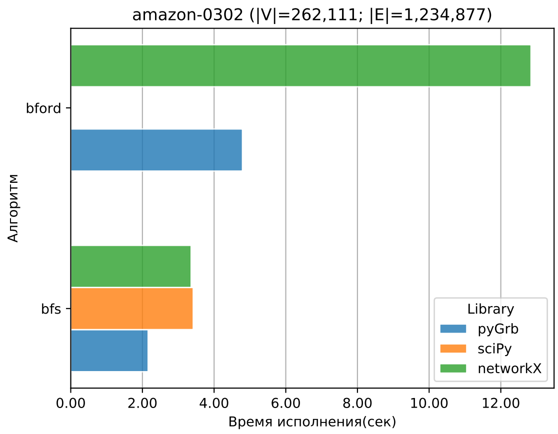
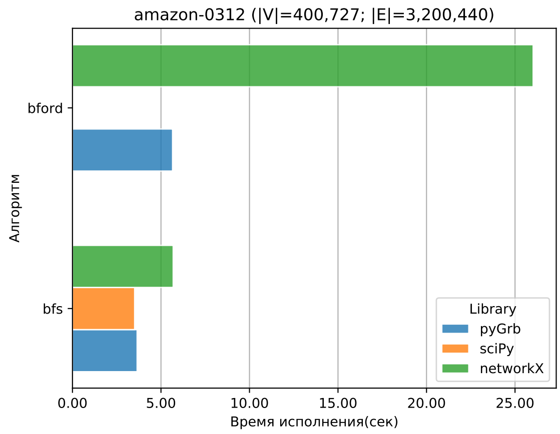


Рис. 2: Результаты работы алгоритмов на графе amazon-0302.
Среднее 5 замеров.

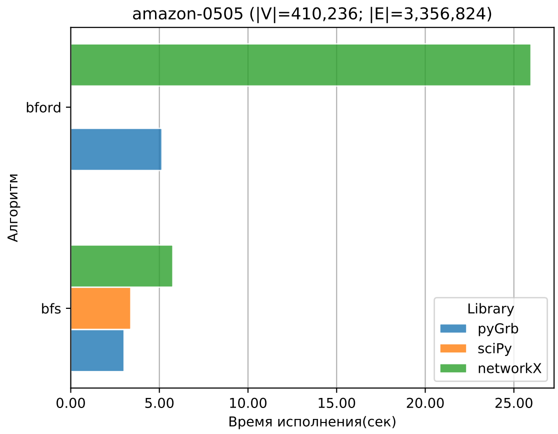
После чего производительность реализаций поиска в ширину и алгоритма Беллмана-Форда были проанализированы на графах amazon-0312, amazon-0505, amazon-0601. Они интересны тем, что были собраны с одной сети с разницей не больше чем в месяц друг от друга, благодаря чему производительность алгоритмов можно оценить на одинаково структурированных начальных данных с разным количеством вершин и ребер (рисунок 3). Время исполнения Беллмана-Форда на SciPy было принято за 0, чтобы на графике линейного масштаба разница в производительности алгоритмов была видна нагляднее.



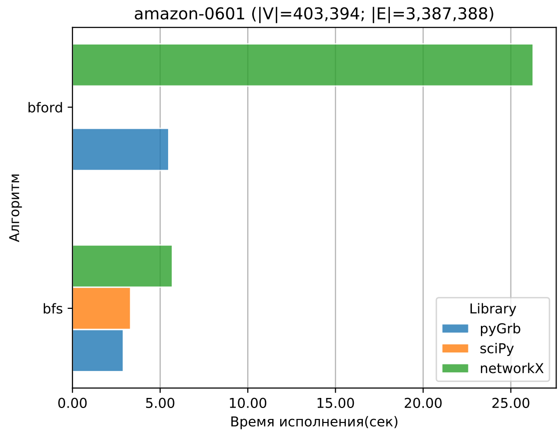
(a) Набор данных amazon-0302



(b) Набор данных amazon-0312



(c) Набор данных amazon-0505



(d) Набор данных amazon-0601

Рис. 3: Времена работы алгоритмов на наборах данных *amazon*. Среднее 5 замеров.

В заключении был проанализирован граф с существенно превосходящим числом вершин и примерно равным числом ребер относительно графов *amazon*. Результаты представлены на рисунке 4.

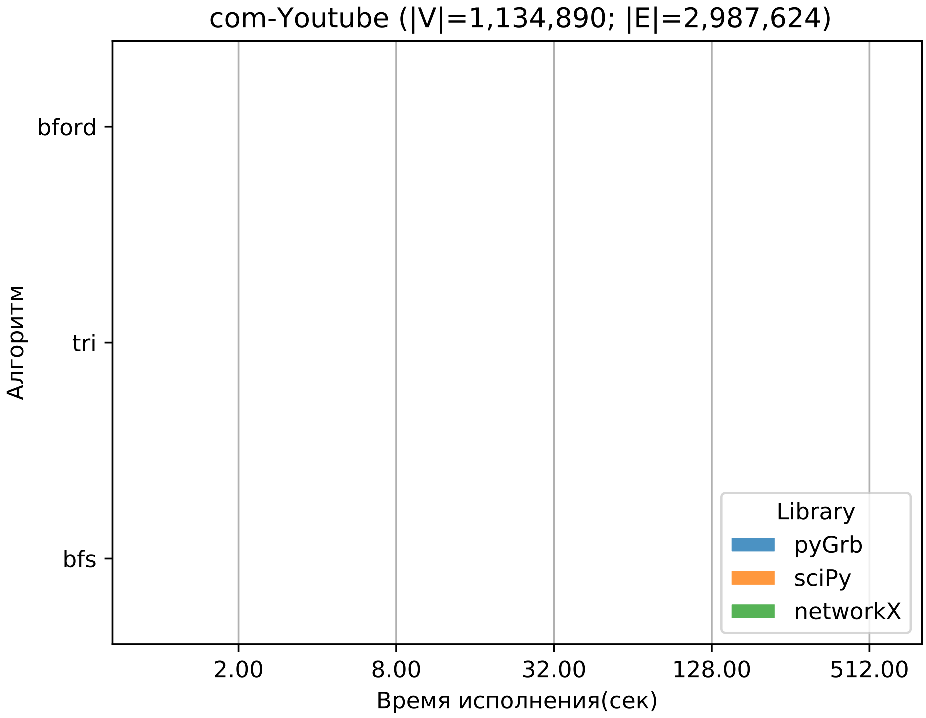


Рис. 4: Результаты работы алгоритмов на графе com-Youtube. Среднее 5 замеров.

4 Заключение

В результате проведенных экспериментов было получено:

1. Реализация алгоритмов с помощью операций линейной алгебры на pygraphblas оказалось самой эффективной. Наибольшая разница обнаружилась в алгоритме подсчета треугольников. Это можно объяснить тем, что его реализация в большей степени основана на перемножении матриц, которое в pygraphblas максимально оптимизировано. В поиске в ширину были отмечены наименьшие различия. Это можно обосновать использованием меньшего числа операций линейной алгебры в реализации.

2. Хочется отметить, что в реализации алгоритмов поиска в ширину и подсчета треугольников на SciPy были использованы операции линейной алгебры, из-за чего код реализации этих алгоритмов на pygraphblas и SciPy получился практически идентичным. Из этого можно сделать вывод о том, что эти операции не так эффективно адаптированы в SciPy по сравнению с pygraphblas. Тем не менее, с увеличением числа вершин графа реализации с помощью SciPy все заметнее опережали стандартные решения, используемые NetworkX.

3. Беллман-Форд на SciPy использовал одноименную функцию из библиотеки[4], что может объяснить такой непропорционально большой отрыв во времени исполнения в сравнении с другими алгоритмами. По всей видимости, проверки на отрицательные циклы повлияли на время исполнения алгоритма на больших графах. Однако результат оказался гораздо медленнее ожидаемого, даже с учетом проверок.

4. По полученным графикам на наборах данных *amazon* можно судить о пропорциональной зависимости размеров графов ко времени исполнения алгоритмов. Однако окончательный анализ о существовании такой зависимости стоит провести на более разнородных данных. Возможно, стоит использовать датасеты графов с большей разницей в размерах, при этом имеющих одинаковую структуру.

Список литературы

[1] G. A. Davis and Y. Hu. The university of florida sparse matrix collection. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 38(Article 1 (December 2011)):25, 2011.

[2] S. P. Kolodziej, M. Aznaveh, M. Bullock, J. David, T. A. Davis, M. Henderson, Y. Hu, and R. Sandstrom. The suitesparse matrix collection website interface. *Journal of Open Source Software*, 4(35 (March 2019)):1244–1248, 2019.

[3] J. Leskovec. Stanford large network dataset collection.

[4] scipy.org. scipy.sparse.csgraph.bellman_ford.