### Graphenalgorithmen

#### Professor Dr. Petra Mutzel

Abteilung für Computational Analytics Institut für Informatik (Abt. 1) Universität Bonn





RHEINISCHE INSTITUT FÜR
FRIEDRICH-WILHELMS- INFORMATIK DER
UNIVERSITÄT BONN UNIVERSITÄT BONN

SoSe 2024

VO 1 (Teil 1)

9. April 2024

## Kurzvorstellung

- Studium an Univ. Augsburg (WiMa/Math), 1983–1990
- Wiss. Mitarbeiterin an Rice University, Houston (TX), 1990
- Wiss. Mitarbeiterin an FU Berlin, 1990/91
- Wiss. Mitarbeiterin an Univ. zu Köln, 1991–1994
- Promotion an Univ. zu Köln (Informatik), 1994
- PostDoc am Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken, 1994–1999
- Habilitation am Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken, 1999
- Vertretungs-Professur (C3) an Univ. Heidelberg, 1999
- Lehrstuhl für Algorithmen und Datenstrukturen, TU Wien, 1999–2004
- Lehrstuhl für Algorithm Engineering, LS11, TU Dortmund, 2004–2019
- Lehrstuhl für Computational Analytics (Inf 1), sowie Leiterin HPC/A-Lab, Universität Bonn, seit 2019

# Mein Forschungsgebiet

Algorithm Engineering: Design, theoretische Analyse, Implementierung, und experimentelle Evaluation von Algorithmen und Datenstrukturen

Computational Analytics: Entwicklung neuer Methoden zur Datenanalyse, Algorithmen, ganzzahlige lineare Optimierung, und Data Mining

Graphenalgorithmen und kombinatorische Optimierung, u.a.

- Netzwerkdesign und -optimierung, z.B. kürzeste Wege,
   Steinerbaumprobleme, multikriterielle Optimierung, Graphfärbung
- Graphähnlichkeit, Graphisomorphie, Graph Mining, Datenanalyse
- Cheminformatik: Ähnlichkeitssuche, Graphclustering, Visualisierung
- Physik: Grundzustände von Spin-Gläsern, Quantum Annealing
- Graph Drawing, Kreuzungsminimierung, Planarität
- Geodäsie (Satellitendatenauswertung u.a. für Meeresspiegelprädiktion)

anwendungsorientiert

## Graphenalgorithmen

Prof. Dr. Petra Mutzel Lehrstuhl für Computational Analytics, Abteilung 1 Institut für Informatik

Kontakt petra.mutzel@cs.uni-bonn.de

Friedrich-Hirzebruch Allee 8, Raum 2.077

Sekretariat Christiane Stuke: stuke@cs.uni-bonn.de

Sprechstunde Dienstag 12:00-13:00 Uhr (im SoSe 2024)

am besten nach der VO Bescheid geben

## **Organisatorisches**

- Vorlesung Graphenalgorithmen f
  ür Bachelor Informatik
- Wahlpflichtmodul in Bachelor Informatik (4.-6. Semester)

#### Termin der Vorlesung

- Dienstag, 10:15-11:45 Uhr,
- interaktive VO (Diskussionen, Umfragen, ...)

#### zentrale Quelle

- eCampus
- dort Folien, Übungsblätter
- aktuelle Informationen

# Übungen — Organisatorisches

Übungsgruppenleiter Jonas Charfreitag, Philip Mayer Übungen Aktive Teilnahme extrem wichtig!

Termine (2 Alternativtermine)

Di 14:00-16:00 Uhr in Informatikgebäude R. 2.050 Do 14:00-16:00 Uhr in Informatikgebäude R. 2.050

#### Anmeldung und Übungseinteilung via TVS:

ab 09.04., 12:00 bis 12.4., 18:00

Alle Links und weitere Informationen in eCampus

Übungen ab 16./18.4. (Präsenzübungsblatt)

Ausgabe 2. Übungsblatt: ab 17.4. (Besprechung ab 23./25.4.)

Vorsicht! Man lernt erst durch Übungen!!!

## Prüfungen für Bachelor Informatik

Modulprüfung voraussichtlich: Mündliche Prüfungen

voraussichtlich: 25 oder 30 Minuten

Hilfsmittel keine

Studienleistungen mindestens 40% der Punkte

mindestens 2-mal Lösung einer Aufgabe vorstellen

genaue Durchführung: siehe Übung

Ubungsblätter klassische theoretische Aufgaben, sowie

kleinere Programmieraufgaben (keine Pflicht)

Vorsicht! Übungsstoff ist auch Prüfungsstoff!

## Voraussetzungen an Teilnehmer\*innen

- Grundlagen von Algorithmen und Programmierung (Datenstrukturen, Algorithmenanalyse, ...)
- Grundlegende Algorithmenentwurfsmethoden (Greedy, Dynamische Programmierung)
- Graphtraversierung: BFS, DFS
- Minimale Spannbäume: Algorithmus von Kruskal
- Kürzeste Wege Algorithmen: Dijkstra
- Grundlagen der Komplexitätsklassen
- Programmierkenntnisse

⇒ erreicht durch Algorithmen und Berechnungskomplexität I sowie grundlegende Informatik Module

### Unterlagen

#### Bücher zu Graphenalgorithmen zum Beispiel

- Krumke, Noltemeier: Graphentheoretische Konzepte und Algorithmen, Springer Vieweg 2012
- Cook, Cunningham, Pulleyblank, Schrijver: Combinatorial Optimization, John Wiley and Sons, New York, 1997
- F. Harary: Graph Theory, Addison-Wesley, Reading, MA, 1969 (Klassiker, eher Theorie statt Algorithmen)
- R. Diestel: Graph Theory, 3. Auflage, Springer-Verlag, Heidelberg Graduate Texts in Maths, Vol. 173 (auch in deutsch); elektronische Ausgabe:
  - http://diestel-graph-theory.com/german/index.html (die englische Auflage ist frei)

Petra Mutzel 5. April 2022 12 / 31

## Unterlagen

#### Bücher zu Algorithmen u.a. auch Graphenalgorithmen

- Cormen, Leiserson, Rivest, Stein: Algorithmen Eine Einführung,
   Oldenburg Verlag, 2013 (grundsätzlich immer gut als Nachschlagewerk)
- Korte, Vygen: Kombinatorische Optimierung, Springer, 2012 (oder auch englische Version)
- Sanders, Mehlhorn, Dietzfelbinger, Dementiev: Sequential and Parallel Algorithms and Data Structures: The Basic Toolbox, Springer, 2019

Aktuelle Originalliteratur, zusätzlich zu Folien und Skriptteilen

Petra Mutzel 5. April 2022 13

/ 31

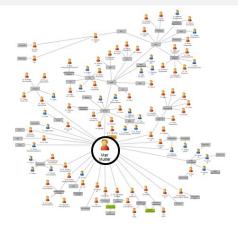


FRAGEN?

Source: https://www.inc.com/chris-matyszczyk

Petra Mutzel 5. April 2022 14 / 31

## Motivation: Soziale Netzwerkanalyse

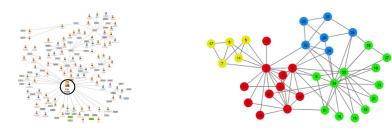


Soziales Netzwerk mit Akteuren (Knoten) and Beziehungen (Kanten des Graphen)

[Image: http://wiki.cogneon.de]

Petra Mutzel 5. April 2022 16 / 3:

## Motivation: Soziale Netzwerkanalyse



- Welche Akteure sind die Zentralsten/Wichtigsten/Aktivsten/
   Prominentesten? ← Centrality ← Kürzeste Wege
- Welche Akteure k\u00f6nnen das Netzwerk am besten beeinflussen/kontrollieren? ← gerichtetes Matching in Graphen

[Images: http://wiki.cogneon.de und https://markhneedham.com]

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022

## Motivation: Soziale Netzwerkanalyse





- Welche Gruppen existieren in dem sozialen Netzwerk (Community Detection)? Clustering des Graphen
- Welche Netzwerke sind ähnlich? ← Clustering von Graphmengen

[Images: http://wiki.cogneon.de und https://markhneedham.com]

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022 18

## Motivation: Rationales Wirkstoff Design

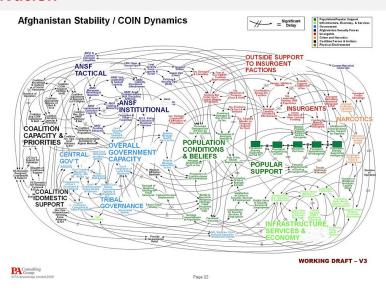
- Welche Moleküle sind aktiv gegen Krankheit X?
- Welche Moleküle haben eine ähnliche Funktion/Effekte? (Reduktion von Nebenwirkungen)
- Welche Moleküle haben eine verbesserte Wirkung?
- High-throughput Screening für vielversprechende Kandidaten

- Moleküle können als Graphen mit Attributen modelliert werden
- Direkte Beziehungen zwischen Struktur und Effekt

 $\rightarrow$  Graphähnlichkeit

Petra Mutzel

Graphenalgorithmen



[Image: https://www.nytimes.com/2010/04/27/world/27powerpoint.html]



Ein Schaubild über die Verzweigung des Terrornetzwerkes zeigte am Donnerstag die Schweizer Regierung. Mis-

#### **US-Präsident Bush gelingt Schlag** gegen Bin Ladens Finanznetz

In der Schweiz und in Somalia wird gegen Verdächtige ermittelt der neuen Aktion sind die Netzwer- Bank, die internationale Geldtras

US-Präsident Bush hat die Vermögenswerte von zwei in mehr als 40 Ländern operierenden Finanzgruppen einfrieren lassen. Sie sollen Millionen-Beträge für Bin Laden und dessen Organisation El Kaida verschoben haben.

Washington Bern - Weltweit wurden am Donnerstag die Vermögens-werte von 62 Einzelbersonen und Gruppen mit vermuteten Verbindungen zu Terroroganisationen und zu zwei Finanznetzwerken in der Schweiz und Somalia eingefroren. Dabei handelt es sich um 43 Millionen Dollar Zu den verdückti. fundamentalistischer Moslem gilt. Mit den neuen 62 Namen erhöht sich die Zahl von Organisationen und Individuen, deren finanzielle Bewegangsfreibeit die USA beschnitten

O'Neill sprachen von einem sehwe- plischen Vererenung ren Schlag gegen den Terror. Von vorgenommen.

Es wurde nach amerikanischen Er-Gefolgsmann Bin Ladens gegrün-det. Al Barakaat steht im Verdacht, die El Kaida jährlich mit Dutzenden Millionen Dollar versorgt zu haben. Das Netzwerk operiere als "hawa-la". Das ist eine Art inoffizielle

#### 160 deutsche Konten gesperrt

In Deutschland sind derzeit noch gespert. Vor gut einem Monet wa-Der Rückgang ergibt sich dadurch, dass inzwischen etliche Konten-Spermingen aufgehöhen wurden well diese Korten nicht mehr als verdächtig geiten. Insgesamt wur de die Summe von rund acht Mil-lionen Mark despent, Die Spemun-Bush und Finanzminister Paul gen wurden auf Grund einer euro-

ke Al Tagwa und Al Baraksat be- fers durchführt, ohne dabei den troffen Das von Somalia ausonerie- Kontrollen und Regulierungen eirende Al-Barakast-Netz gilt als nes lizenzierten Geldinstitutes un-weitzus bedeutrealer als Al Tarwa terworfen zu sein. Die Mittel für El Kaida wurden kenntnissen 1989 von einem engen O'Neill zufolge von den Gebühren "abgezweigt", die Kunden für die Transfers bezahlen. Al Tagwa mit

Hauptsitz in der Schweiz fungierte die El Kaida. Beide Gruppen sollen aber auch Waffentransporte finan-ziert und bei der Kommunikation Agypter, wird wegen der Mitglied-schaft in einer kriminellen Vereini-gung ermittelt. Die Gesellschaft führte vor den Anschlägen in den USA noch den Zusatz Al Taqwa in ihrem Namen. Präsident des Verwaltungsrats ist der 73-jährige Mohamed Mansour, der von 1968 bis Eidgenössisch Technischen Hoch-

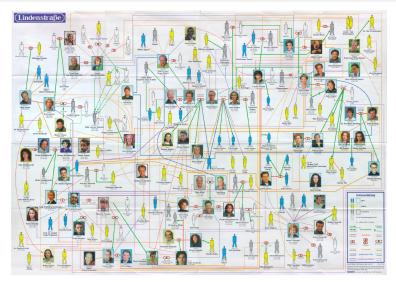
Bitten trat die Polizei auch in den

Ambischen Emiraten, in Saudi-

Arabien, Liechtenstein und in der

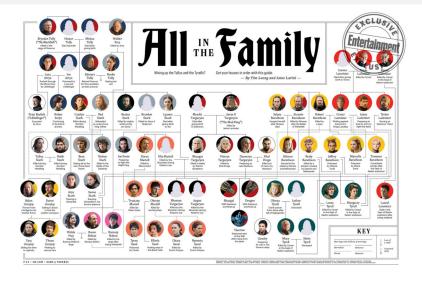
Schweiz in Aktion. (dpa, rtr, ap)

[Image: Süddeutsche 2010]



[Bister, Müller: Das Lindenstraßen-Universum, 1998]

#### Motivation: Stammbäume Game of Thrones

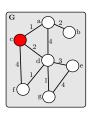


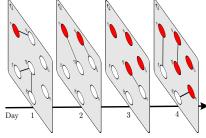
 $Quelle: \ https://ew.com/tv/2019/03/20/game-of-thrones-family-tree/$ 



[Image: Kölner Stadtanzeiger, Magazin, 7. Mai 2014]

## Ausbreitung von Infektionen





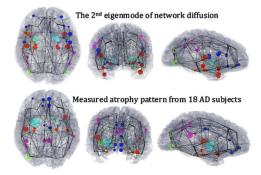
/ 31

#### Temporale Graphen: SI-Modell für epidemische Ausbreitungen

- Knoten sind Personen, temporale Kanten modellieren die Kontakte
- Knoten sind entweder infiziert oder anfällig
- zu Beginn werden zufällig s Personen als infiziert ausgewählt; einmal infizierte Personen bleiben infiziert
- Infektionen progagieren durch das Netzwerk in diskreten Zeitschritten entlang temporaler Kanten mit einer Wahrscheinlichkeit 0 .

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022

#### **Brain Netzwerke**



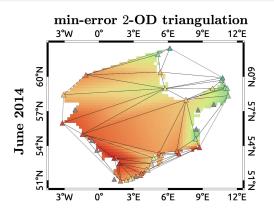
- Konnektivitätsnetzwerk des Gehirns aus Diffusions-MRT Daten
- Dicke der Kante: Verbindungsstärke

Quelle: Raj, Kuceyeski, Weiner: PCM 2013; aktuelles Lab mit Dr. Xenia Kobeleva zu temporale Graphen mit fMRI Daten

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022 2

/ 31

## Rekonstruktion der dynamischen Meeresoberfläche



- Saisonale Variabilität des Meeresspiegels (hier im Bild: Nordsee)
- Mathematisches Problem: Minimum Weight Triangulierung

Aktuelles Projekt mit Mayer, Driemel, Röglin, Kusche, Haunert, Schmidt, Sohler, u.a.; Bildquelle: Nitzke, Niedermann, Fenoglio-Marc, Kusche, Haunert, 2020

## **Generelle Graphenalgorithmen**

- Graphtraversierung: BFS, DFS
- Zuordnungsprobleme: Heiratsproblem, maximales Matching
- Graphfärbung: Landkartenfärbung
- Wegeprobleme: kürzeste, längste, TSP
- Flussprobleme in Netzwerken: max-flow, min-cost-flow
- Graphpartitionierung: st-min-cut, min-cut, max-cut
- Netzwerkdesign: MST, Minimum Steiner Tree
- Uberdeckungsprobleme: vertex cover
- Spezielle Graphklassen: planare Graphen, beschränkte Baumweite
- Layoutprobleme: Kreuzungsminimierung

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022 28

/ 31

#### Themen der VO+UE: Probleme

- Stabiles Heiratsproblem
- Maximales Matching, Controllability von Netzwerken
- Wegeprobleme: Dynamische kürzeste Wege, temporale Wege, starker Zusammenhang
- Planare Graphen: Max-Cut in planaren Graphen
- Graphfärbungsprobleme
- Graphseparatoren (in planaren Graphen)
- Baumweite, chordale Graphen
- ... und/oder anderes

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022 30 / 31



FRAGEN?

#### MEINE KURZE UMFRAGE AN SIE

Source: https://www.inc.com/chris-matyszczyk

Petra Mutzel Graphenalgorithmen 5. April 2022 31 / 31