AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

**WYDZIAŁ ELEKTROTECHNIKI, AUTOMATYKI,
INFORMATYKI I INŻYNIERII BIOMEDYCZNEJ**

KATEDRA INFORMATYKI STOSOWANEJ

Projekt zaliczeniowy:

Problem istnienia k-kliki

Autorzy: *Wojciech Kasperek, Krzysztof Spytkowski, Izabela Śmietana*
Kierunek studiów: *Informatyka*
Przedmiot: *Badania operacyjne i teoria złożoności obliczeniowej*
Opiekun projektu: *dr Adam Sędziwy*

Kraków, 2014

Spis treści

1. Zarys problemu

Wybrany przez nas temat dotyczy kliki, dlatego omówienie zaczniemy od wprowadzenia tego pojęcia. Kliką w grafie nazywamy zbiór wierzchołków, w którym każda para wierzchołków jest połączona krawędzią, czyli podgraf będący grafem pełnym. Problem istnienia k-kliki polega na stwierdzeniu czy w danym grafie istnieje klika o podanym rozmiarze k. Problem ten należy do klasy NP, co oznacza, że rozwiązanie można zweryfikować w czasie wielomianowym (mając podane wierzchołki należące do szukanej kliki możemy w czasie $O(k^2)$ sprawdzić, czy faktycznie jest to klika).

Problem istnienia k-kliki jest także jednym z pierwszych zidentyfikowanych problemów NP-zupełnych. Problem NP-zupełny to problem, który należy do klasy NP oraz dowolny problem należący do NP może być do niego zredukowany w czasie wielomianowym. NP-zupełność naszego problemu wynika z NP-zupełności problemu zbioru niezależnego. Problem ten to pytanie czy dla danego grafu G i liczby k, istnieje w G zbiór niezależny (zbiór wierzchołków niepołączonych żadnymi krawędziami) o k wierzchołkach. W naszym problemie w grafie istnieje klika o rozmiarze k wtedy i tylko wtedy gdy w dopełnieniu grafu istnieje zbiór niezależny o rozmiarze k.

Ze względu na klasę złożoności problemu i brak odpowiednio szybkich algorytmów dokładnych, w naszym projekcie posłużymy się algorytmem przybliżonym (genetycznym).

1.1. Klasyczny algorytm genetyczny

Postawiony problem definiuje środowisko, w którym istnieje pewna populacja osobników. Każdy z osobników ma przypisany pewien zbiór informacji stanowiących jego genotyp, a będących podstawą do utworzenia fenotypu. Fenotyp to zbiór cech podlegających ocenie (przez funkcję przystosowania). Innymi słowy - genotyp opisuje proponowane rozwiązanie problemu, a funkcja przystosowania ocenia, jak dobre jest to rozwiązanie.

Genotyp składa się z chromosomów, w których zakodowany jest fenotyp i ewentualnie pewne informacje pomocnicze dla algorytmu genetycznego. Chromosomy składają się z genów.

Klasyczny algorytm genetyczny składa się z następujących kroków:

1. inicjalizacja – utworzenie populacji początkowej, wybór ustalonej liczby osobników i nadanie wartości losowych genom wchodzącym w skład ich chromosomów;
2. ocena przystosowania – obliczenie wartości funkcji przystosowania dla każdego osobnika;
3. selekcja – wybór osobników, które będą brać udział w tworzeniu nowej populacji;
4. zastosowanie operatorów genetycznych – na grupie osobników wybranych drogą selekcji działają operatory genetyczne (krzyżowanie i mutacja);
5. utworzenie nowej populacji – osobniki otrzymane jako rezultat działania operatorów genetycznych wchodzą w skład nowej populacji. Cała poprzednia populacja jest zastępowana przez tak samo liczną nową populację potomków;

6. sprawdzenie warunku stopu algorytmu - wyprowadzenie ”najlepszego” osobnika (o największej wartości funkcji przystosowania). Jeżeli osobnik ten spełnia postawione w zadaniu warunki to algorytm kończy pracę, w przeciwnym razie przechodzi do punktu 2 (działając już na populacji potomków).

1.2. Własna interpretacja problemu i adaptacja algorytmu

Zaimplementowany przez nas sposób rozwiązania problemu jest oparty na powyższym algorytmie, jednak program udostępnia wiele możliwości dostosowywania go. Dzięki temu możemy badać skuteczność poszczególnych metod w odniesieniu do zadanego problemu i ustalanych przez użytkownika parametrów wejściowych.

W aplikacji zawarte zostały dwa sposoby kodowania osobnika, binarny i grupowy. Są to zupełnie różne sposoby zapisu informacji w chromosomie, przez co przebieg działania algorytmu jest odmienny dla każdego z tych kodowań. Mimo różnic w genotypach, w obu przypadkach fenotypem jest graf. Program udostępnia również trzy różne sposoby selekcji możliwe do zastosowania w problemie istnienia k-kliki oraz rozmaite typy krzyżowań. Opisy wszystkich kodowań, operatorów genetycznych, funkcji oceny oraz motywacja wyboru właśnie takich, znajdują się w dalszych rozdziałach.

2. Kodowanie i funkcja przystosowania

W obu kodowaniach chromosomem jest tablica (o wielkości odpowiadającej liczbie wierzchołków w grafie), której indeksy oznaczają kolejne wierzchołki zadanego grafu.

2.1. Binarne

W binarnym kodowaniu chromosomu zasada jest następująca: gen ”0” w chromosomie oznacza przynależność danego wierzchołka do podgrafu, ”1” oznacza, że tego wierzchołka nie ma w podgrafie.

2.2. Grupowe

Kodowanie grupowe, w odróżnieniu od binarnego, dopuszcza przyjmowanie przez geny więcej niż dwóch wartości - możliwych jest ich tyle, ile aktualnie wynosi liczba grup. Każda grupa - a więc każda wartość $\langle 0; n)$, gdzie n to liczba grup - odpowiada podgrafowi w zadanym grafie. Takie podejście pozwala zawrzeć w genotypie znacznie więcej informacji, ponieważ każdy podgraf jest potencjalnym rozwiązaniem.

Ocena osobnika w tym wypadku polega na ocenie osobno każdej grupy i wyłonieniu najlepszej z nich. Wartość przystosowania tej grupy odpowiada przystosowaniu całego osobnika.

Ważnym aspektem jest odpowiednie numerowanie poszczególnych grup. Po każdej ocenie następuje przepisanie numeracji tak, aby najmniejszy numer odpowiadał najlepszemu podgrafowi, a odpowiednio większe kolejnym. Ma to bardzo duże znaczenie przy operacji krzyżowania, gdzie chroni nas przed utratą najlepiej ocenionych rozwiązań. Dla przykładu, ten sam dobrze przystosowany zbiór wierzchołków w różnych chromosomach mógł należeć do grup o różnych numerach, przez co nowo powstały w wyniku krzyżowania osobnik otrzymywał informacje o wspomnianym podgrafie rozbite na dwie grupy (czyli je tracił).

Ostatnim ważnym elementem dotyczącym omawianego kodowania jest liczba grup. W populacji cały czas utrzymywana jest taka sama ilość grup u każdego osobnika, jednak, w wybranych iteracjach, liczba grup dla całej populacji jest zmniejszana, za każdym razem o jeden. Likwidowany, najsłabiej przystosowany podgraf, zostaje dołączany do drugiego aktualnie najsłabszego.

Częstość usuwania grup zależy od zadanej ilości iteracji, tak, że w końcowych iteracjach pozostają jedynie dwie grupy.

2.3. Funkcja przystosowania

W obu powyższych kodowaniach zastosowanliśmy tę samą funkcje przystosowania. Wzór pozwalający obliczyć przystosowanie j-tego osobnika w populacji (oznaczanego jako x_j) to:

$$f(x_j) = \max_{0 \leq i \leq n-1} \left(\frac{e_{j_i}}{\frac{v_{j_i}(v_{j_i}-1)}{2}} \frac{k - |v_{j_i} - k|}{k} \right)$$

gdzie n oznacza liczbę grup wierzchołków w chromosomie, i identyfikuje kolejną grupę (dla kodowania binarnego rozpatrujemy tylko $i = 0$), e_{j_i} i v_{j_i} to odpowiednio liczba krawędzi i wierzchołkół i-tego podgrafu, a k jest rozmiarem szukanej kliki.

Pierwszy ułamek wyraża "gęstość" grafu, czyli stosunek liczby jego krawędzi do pożądanej wartości (liczby krawędzi w k-klice); natomiast drugi to kara dotycząca rozmiaru ocenianego grafu (przyjmuje wartość 1 tylko i wyłącznie wtedy gdy rozmiary są równe).

3. Selekcja

Selekcja dokonuje wyboru osobników będących rodzicami dla nowego pokolenia. W zależności od wartości funkcji przystosowania danego osobnika w populacji ma on większe (gdy jest ”dobry”) lub mniejsze (gdy jest ”słaby”) szanse na znalezienie się w kolejnym pokoleniu.

3.1. Turniejowa

Polega na podziale populacji na grupy n-osobników (w naszej implementacji są to grupy 3-osobnikowe). Z każdej z tych grup wybierany jest najlepiej przystosowany osobnik, który zostaje dołączony do grona rodziców.

3.2. Koła ruletki

Polega na n krotnym (n - liczba osobników w populacji) losowaniu osobników ze starej populacji i przepisaniu ich do grupy rodziców, przy czym osobniki w tej grupie mogą się powtarzać. Przed rozpoczęciem losowania każdemu j-temu osobnikowi nadawane jest prawdopodobieństwo wylosowania, które wyliczane jest zgodnie ze wzorem:

$$P(x_j) = \frac{f(x_j)}{\sum_{i=1}^{n} f(x_i)}$$

gdzie f jest funkcją oceny, a x to osobniki populacji.

3.3. Rankingu liniowego

Selekcja ta jest bardzo podobna do metody koła ruletki. Modyfikacja polega jedynie na zmianie funkcji określającej prawdopodobieństwo wyboru danego osobnika. Przed przystąpieniem do tej selekcji należy nadać każdemu z osobników pewną wartość (pozycje w rankingu) zależną od jego położenia na liście posortowanej względem wartości funkcji przystosowania. Wzór pozwalający obliczyć prawdopodobieństwo wyboru j-tego osobnika to:

$$P(x_j) = \frac{pos(x_j)}{\sum_{i=1}^{n} f(x_i)}$$

gdzie f to funkcja oceny, pos to funkcja zwracająca położenie na posortowanej liście, a x to osobniki populacji.

4. Krzyżowanie

Zadaniem krzyżowania jest wymiana ”materiału genetycznego” pomiędzy dwoma osobnikami w populacji. Polega na połączeniu niektórych (wybranych od rodziców) genów w jeden nowy genotyp (lub w dwa, jeśli w wyniku krzyżowania powstaje dwóch potomków). Kojarzenie ma sprawić, że potomek dwóch osobników rodzicielskich ma zespół cech, który jest kombinacją ich cech (może się zdarzyć, że tych najlepszych).

4.1. Jednopunktowe z dwoma potomkami

Polega na podziale dwóch chromosomów (pochodzących od rodziców) na dwie części (niekoniecznie równe) i utworzeniu z nich dwójki dzieci: pierwsze dziecko składa się z początkowej części materiału genetycznego pierwszego rodzica i końcówki drugiego, natomiast drugie dziecko otrzymuje początek materiału genetycznego drugiego rodzica i końcówkę pierwszego.

4.2. Jednopunktowe z jednym potomkiem

Krzyżowanie analogiczne do powyższego, ale w wyniku powstaje jedno dziecko, końcówka materiału genetycznego pierwszego rodzica i początek materiału genetycznego drugiego rodzica są zaniedbywane.

4.3. Jednorodne z jednym potomkiem

W wyniku tego krzyżowania powstaje jeden nowy osobnik, któremu przypisywane są kolejne geny rodziców, każdy z prawdopodobieństwem 50%.

4.4. Ważone z jednym potomkiem

Krzyżowanie analogiczne do powyższego, modyfikacji ulega jedynie prawdopodobieństwo otrzymania przez dziecko konkretnego genu. Tutaj prawdopodobieństwo przekazania dziecku przez i-tego rodzica k-tego genu (przy czym drugi rodzic to x_j) jest liczone ze wzoru:

$$P(g_{i_k}) = \frac{f(x_i)}{f(x_i) + f(x_j)}$$

przy czym g_i to genotyp rodzica x_i, a f to funkcja przystosowania.

4.5. Dwupunktowe z dwoma potomkami

W tym typie krzyżowania chromosomy rodziców dzielone są na 3 części. Pierwsze dziecko otrzymuje początkową części materiału genetycznego pierwszego rodzica, środkową drugiego rodzica i końcową pierwszego rodzica. Natomiast drugie dziecko - początkową części materiału genetycznego drugiego rodzica, środkową pierwszego rodzica i końcową drugiego rodzica.

4.6. Dwupunktowe z jednym potomkiem

Krzyżowanie analogiczne do powyższego, ale w wyniku powstaje jedno dziecko. Środowa część materiału genetycznego pierwszego rodzica oraz początkowa i końcowa część materiału genetycznego drugiego rodzica są zaniedbywane.

5. Mutacja

Zadaniem mutacji jest wprowadzenie subtelnych zmian do genotypu losowo wybranych osobników. Dzięki temu w kolejnych pokoleniach zachowana zostaje różnorodność w populacji, co pozwala zapobiec przedwczesnej zbieżności algorytmu. Mutacja zachodzi z pewnym przyjętym prawdopodobieństwem - zazwyczaj rzędu $1 - 5\%$. Powinno być ono tak niskie, ponieważ zbyt silna mutacja przynosi efekt odwrotny do zamierzonego: zamiast różnicować dobre rozwiązania - niszczy je.

W trakcie mutacji zmieniany zostaje tylko jeden wylosowany gen należący do genotypu osobnika.

5.1. Przy kodowaniu binarnym

Polega na zamianie wartości wylosowanego genu w genotypie osobnika z ”1” na ”0” (i odwrotnie).

5.2. Przy kodowaniu grupowym

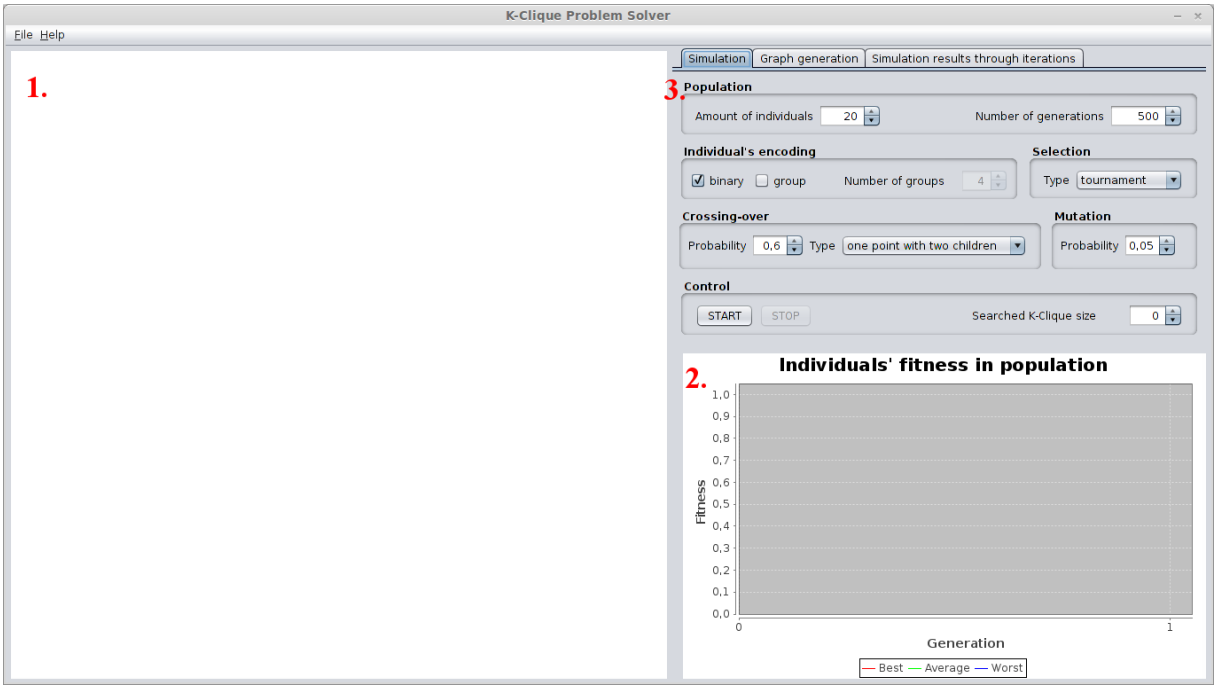
Polega na zamianie wartości genu na liczbę wylosowaną z przedziału $\langle 0, n)$, gdzie n to aktualna liczba grup. Jeżeli liczebność najlepszej grupy (opisanej zerami) jest mniejsza niż rozmiar szukanej kliki, zamiast losować nową wartość genu, ustalamy ją na 0. Oznacza to, że dodajemy wierzchołek odpowiadający mutowanemu genowi do najlepszej grupy. Ma to na celu szybsze otrzymanie podgrafu o zadanym rozmiarze.

6. Program

Stworzony przez nas program *K-Clique Problem Solver* został napisany w języku JAVA. Do rysowania i wizualizacji grafów użyliśmy biblioteki JUNG. Przy rysowaniu i tworzeniu wykresów przystosowania osobników w populacji pomocna okazała się biblioteka JFreeChart.

Program służy do graficznego przedstawiania procesu rozwiązywania problemu istnienia k-kliki. Umożliwia użytkownikowi wybór i zmianę wielu paramtrów algorytmu, co pozwala skutecznie wpływać na przebieg symulacji, a także badać sam proces rozwiązywania pod kątem poszczególnych metod. Poniżej opisany został interfejs programu, możliwe parametry wejściowe, przebieg pojedynczej iteracji algorytmu, a także zaprezentowany został przykład generowanego wykresu i wizualizacji grafu.

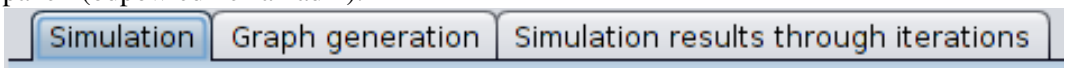
6.1. Interfejs programu



Program składa się z trzech głównych sekcji:

1. wizualizacji grafu;
2. wykresu;
3. panelu sterowania.

Pierwsze dwie zostaną bliżej pokazane w kolejnych podpunktach. Panel sterowania składa się z trzech podpaneli (odpowiednie zakładki):



Jak wskazują nazwy służą one kolejno do:

- zarządzania symulacją - ustalanie parametrów, start/stop;
- generowania grafu - opcje generowania grafu o zadanej liczbie wierzchołków i krawędzi, a także zawierającego klikę o żądanym rozmiarze, wczytywania/zapisywania grafu z/do pliku oraz rysowania grafu;
- przeglądania wyników symulacji, czyli wyświetlaniu najlepszego rozwiązania dla zadanej iteracji.

6.2. Zmienne parametry algorytmu

Oprócz wejściowego grafu użytkownik ma możliwość ustalić:

- liczebność populacji - im większa, tym wolniej będzie przebiegać symulacja, jednak uzyskane wyniki powinny być lepsze;
- maksymalną liczbę iteracji - jeżeli algorytm nie znajdzie kliki o zadanym rozmiarze wcześniej, zakończy działanie po ustalonej tutaj liczbie iteracji;
- sposób kodowania - użytkownik ma do wyboru kodowanie binarne i grupowe, oba opisane wcześniej, w drugim przypadku możliwe jest również ustalenie początkowej ilości grup;
- typ selekcji - trzy wymienione wyżej możliwości przeprowadzania procesu selekcji;
- prawdopodobieństwo krzyżowania;
- sposób krzyżowania - sześć różnych metod krzyżowania;
- prawdopodobieństwo mutacji;
- rozmiar szukanej kliki.

6.3. Przebieg pojedynczej iteracji

Każda iteracja algorytmu składa się z:

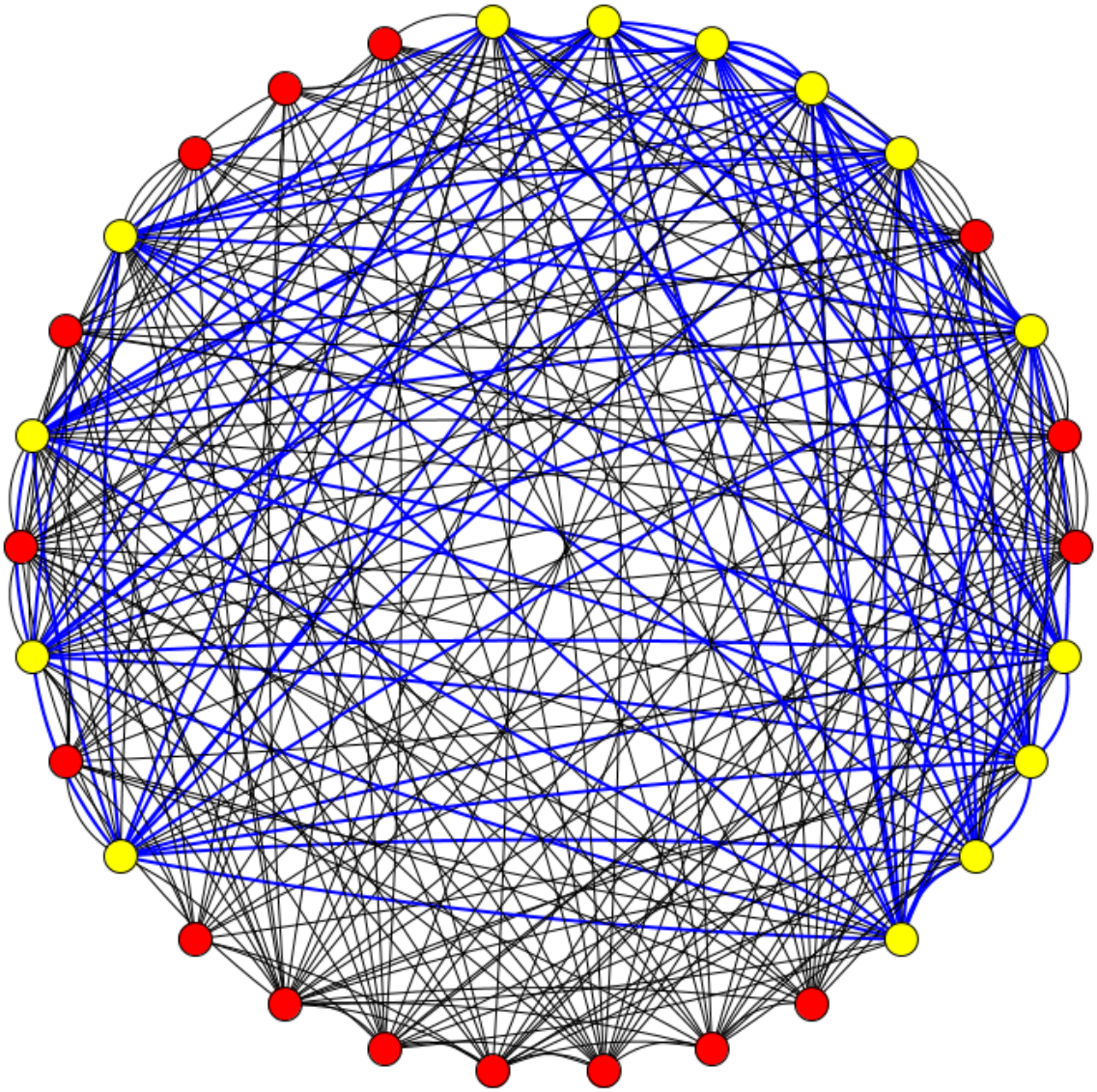
- selekcji, czyli wyboru grupy rodziców (z możliwymi duplikatami), z których powstanie nowe pokolenie dzieci;
- krzyżowania, czyli utworzenia nowej populacji (dzieci) z wybranych wcześniej osobników (rodziców) przy pomocy wybranego typu krzyżowania (stosowanego z uwzględnieniem prawdopodobieństwa krzyżowania);
- mutacji genotypu niektórych osobników zgodnie z zadanym prawdopodobieństwem;
- usunięcia najgorszych osobników;
- poprawienia liczebności populacji, czyli operacji mającej na celu utrzymanie stałej ilości osobników w populacji; (polega na uzupełnieniu populacji nowo utworzonymi (losowymi) osobnikami, jeśli rozmiar populacji był zbyt mały, lub na usunięciu najgorszych jednostek w przeciwnym wypadku);
- sprawdzenia warunku stopu.

Dodatkowo, w kodowaniu grupowym w odpowiednich iteracjach następuje usunięcie najsłabszej grupy (podgrafu o najniższej wartości funkcji przystosowania).

6.4. Wykres przystosowania

Wykres jest rysowany równolegle z przebiegiem algorytmu. Przedstawia wartości funkcji przystosowania najlepszego (czerwony) i najgorszego (niebieski) osobnika w populacji, oraz wartość średnią funkcji przystosowania wszystkich osobników (zielony) w każdym kolejnym pokoleniu.

6.5. Wizualizacja grafu



Wizualizowany graf jest aktualizowany równolegle z przebiegiem algorytmu, co 5 iteracji. Rozwiązanie - najlepszy osobnik w populacji - zostało wyróżnione żółtymi wierzchołkami i niebieskimi, pogrubionymi krawędziami.

Aplikacja pozwala wybrać sposób prezentowania grafu, jednak zalecanym jest przedstawiony powyżej (o nazwie *circle*).

7. Źródła

Podczas opracowywania rozwiązania problemu korzystaliśmy z:

– dr inż. Lidia Dutkiewicz, wykład *Algorytmy ewolucyjne*;
– dr inż. Piotr Urbanek, wykład *Algorytmy genetyczne*;
– Michał Bereta, Paweł Jarosz *Algorytmy genetyczne*;
– James A. Foster, Terry Soule *Using Genetic Algorithms to Find Maximum Cliques*;
– Harsh Bhasin, Rohan Mahajan *Genetic Algorithms Based Solution To Maximum Clique Problem*;
– *http://en.wikipedia.org/wiki/Genetic_algorithm*;
– *http://pl.wikipedia.org/wiki/Problem_kliki*;
– *http://pl.wikipedia.org/wiki/Problem_NP-zupelny*;
– *http://pl.wikipedia.org/wiki/Algorytm_genetyczny*;
– *http://www.k0pper.republika.pl/geny.htm*.