Heuristiken für das Entfernen von verbotenen Teilgraphen

Paul Walger

1. Juni 2016

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	1
	1.1	Motivation	1
	1.2	Anwendungsbeispiele	3
		1.2.1 Maximum Clique auf Co-Graphen	3
		1.2.2 Soziale Netzwerke	3
		1.2.3 Protein interaction networks	4
	1.3	Annäherung	5
	1.4	Definitionen	5
		1.4.1 Notationen und Definitionen	5
		1.4.2 Problemstellung	6
	1.5	Ähnliche Arbeiten	6
	1.6	Überblick	6
${f 2}$	ΔΙσ	orithmen	7
_	2.1		8
	2.1	2.1.1 RandomChange	8
		2.1.2 Random	8
	2.2		8
			0
	2.3		2
	2.0		2
			2
	2.4	•	3
	2.1		.3
		1 0	5
3			.5
	3.1		5
			.5
		V	7
		1 0	7
		<u>e</u>	8
			8
		1 0	9
			9
			9
	3.2	Optimale Lösung	9

4	Imp	plementation	20
	4.1	Repräsentation vom Graphen	20
	4.2	Das Finden von induzierten Subgraphen	20
		4.2.1 Vergleich VFLib, Boost und eigene Implemtation	20
5	Aus	swertung	21
6	Ver	gleich mit anderen Heuristiken	21
	6.1	Cluster-Editing	21
		6.1.1 2K-Heuristik	
	6.2	Quasi-Threshold Mover	23
7	Zuk	künftige Forschungsmöglichkeiten	24
	7.1	Besser Sortierung von Grow-Reduce	24
	7.2	Besser Konvergenzkriterium	24
	7.3	Obere Schranken	24
	7.4	Obere Schranken	24
8	Zus	ammenfassung	24
9	Anl	hang	24
	9.1	Kleine Graphen	24

Zusammenfassung

Hight-Level: Was trage ich bei und was nicht?

1 Einleitung

Graphen sind eine bildliche Darstellung von Beziehungen zwischen Objekten. Dabei stellt man die Objekte als Kreise (auch Knoten genannt) und die Beziehungen als Linien, die diese Kreise verbinden (auch Kanten genannt) [20].

Graphen können eine Vielzahl von Problemen und Szenarien modellieren. Zum Beispiel können die Knoten Städte und die Kanten Zugverbindungen zwischen diesen Städten sein und somit wird der Graph das Zugnetzwerk von diesen Städten modellieren.

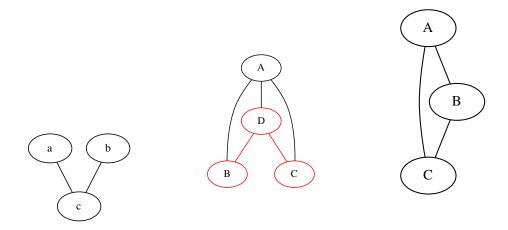
1.1 Motivation

Wird nun ein System von Objekten mittels einem Graphen modelliert, hat der Graph ebenso wie das modellierte System gewisse Eigenschaften.

Eine solche Eigenschaft wäre, dass wenn ein Knoten u mit einem anderen Knoten v verbunden ist, so ist u auch mit allen Nachbarn von v verbunden. Diese Graphen werden Cluster-Graphen genannt. Diese bestehen aus einer oder mehreren Komponenten, in welcher jeder Knoten mit jedem Knoten verbunden ist. Diese Cluster-Graphen lassen sich aber auch dadurch charakterisieren, dass sie gewisse Strukturen nicht besitzen und zwar dass sie in diesem Fall nicht den Graphen P_3 als einen induzierten Graphen haben. Der P_3 Graph ist in der Abbildung 1a zu sehen. Einen P_3 als induzierten Teilgraphen zu haben, bedeutet, dass man jedem Knoten aus dem P_3 einen Knoten aus dem Graphen zuordnen kann, sodass gilt, wenn zwei Knoten im P_3 durch eine Kante verbunden sind, so sind auch die entsprechenden Knoten in dem Graphen durch eine Kante verbunden und umgekehrt.

Erklären lässt sich das an der Abbildung 1. In dem Graphen G_1 in der Abbildung 1b sehen wir, dass der Teilgraph mit den Knoten B,D und C ein von P_3 induzierter Subgraph ist, weil wir den Knoten a dem Konten b, den Knoten b dem Knoten b und den Knoten b dem Knoten b und den Knoten b dem Knoten b und den Knoten b und b verbunden ist im Graphen b und b verbunden ist. Auch ist b und b und b verbunden ist. Auch ist b und b in Graphen b in Graphen b und b ebenso. Man kann überprüfen, dass die Voraussetzung für jede beliebiges Paar von Knoten geben ist und so ist der rot markierte Teilgraph ein von b induzierte Teilgraph.

Der Graph G_2 (Abbildung 1c)hat keinen P_3 als induzierten Teilgraphen, weil wir nicht die Knoten vom P_3 zu Knoten in diesem Graphen zu zuordnen können, sodass unsere Voraussetzung erfüllt bleibt. Wenn wir zum Beispiel, die Zuordnung vom Knoten a zum Knoten A, b zu B und c zu C nehmen, sehen wir das Problem, dass wir eine Kante zwischen A und C haben aber



(a) Ein P_3 Graph

(b) Graph G_1 mit einem von P_3 induzierten Teilgraphen.

(c) Graph G_2 ohne einen induzierten P_3

Abbildung 1: Cluster-Graphen

keine Kante zwischen a und b. Somit ist das keine gültige Zuordnung. Man kann aber auch nachvollziehen, dass egal wie die Zuordnung gewählt wird, es nicht möglich ist die Bedingung zu erfüllen.

Deshalb ist der Graph G_2 ein Cluster-Graph und hat eben diese besondere Eigenschaft, die auf zwei Weisen beschreiben werden kann: 1. Der Graph hat eine oder mehrere Komponenten wo jeder Knoten mit jedem Knoten verbunden ist und 2. Der Graph hat kein P_3 als einen induzierten Teilgraphen. Die erste Charakterisierung ist eine mehr natürliche und wir könnten zu einer solchen Beschreibung aus praktischen Beobachtungen über unsere Daten kommen, während die zweite eine eher mathematische ist und nicht immer intuitiv, aber dennoch sehr nützlich ist, weil wir eine Eigenschaft sehr leicht formulieren können.

In dieser Arbeit werden wir uns die Methoden anschauen, welche einen Graphen so modifizieren, so dass er eine bestimmte Eigenschaft hat. Viele Eigenschaften lassen sich, wie in dem vorherigen Beispiel mittels einer Charakterisation durch verbotenen Teilgraphen beschreiben.

1.2 Anwendungsbeispiele

In diesem Abschnitt werden wir auf einige Anwendungsfälle eingehen, warum man Graphen mit bestimmten Eigenschaften haben will.

1.2.1 MAXIMUM CLIQUE auf Co-Graphen

Um das Problem der Maximum Clique auf einem Graphen G zu finden, so ist es offensichtlich, dass wenn der Graph zwei Zusammenhangkomponenten hat, dann können wir Maximum Clique auf den beiden Komponenten lösen und das Maximum davon ist das Ergebnis für den Graphen G. Somit können wir das Problem also in kleinere Probleme zerlegen. Außerdem gilt es, dass das Finden einer Clique in einem Graphen G äquivalent zum Finden einer stabilen Menge in dem Komplementgraphen von G ist. Wir können also unser Problem weiter zerlegen, indem wir das Komplement von jeder Zusammenhangkomponente nehmen und es wieder in ihre Zusammenhangkomponenten zerlegen. Dabei gilt dass, eine maximale stabile Menge die Vereinigung aller maximalen stabilen Mengen der Zusammenhangkomponente ist.

Eine solche Vorgehensweise ist offensichtlich sehr attraktiv um ein schweres Problem, wie Maximum Clique es ist, zu lösen. Dieses Vorgehen hat jedoch ein Problem, der Graph G keine Zusammenhangkomponenten hat und der Komplementgraphen von G

Dann funktioniert unsere Vorgehensweise nicht mehr. Aber es gibt eine Klasse von Graphen, die complement reducible graphsöder kurz Co-Graphen, die so definiert worden ist, dass es nicht zu dem eben beschriebenen Problem kommt. Diese Klasse von Graphen ist auch durch charaktereriesiert, dass sie keinen P_4 als induzierten Teilgraphen enthalten [21]. Weil es nun bei dieser Klasse von Graphen nie dazu dem Problem kommt, können wir MAXIMUM CLIQUE in linearer Zeit auf solchen Graphen lösen, während auf allgemeinen Graphen dieses Problem NP-Vollständig ist.

1.2.2 Soziale Netzwerke

 (P_4, C_4) -freie Graphen modellieren eine familiäre Struktur oder eine Gemeinschaft die hierarchisch organisiert ist. Diese Graphen werden auch trivial perfekte Graphen oder quasi-threshold Graphen genannt[28].

Die letztere Bezeichnung kommt von Charakterisierung dieser Graphen als baumartige Strukturen. Ein solcher gerichteter Graph lässt sich als der transitive Abschluss eines Waldes sehen[8]. Dieser Graph muss gerichtet sein, weil es sonst eine Clique wird.

In der Abbildung 2 ist solch ein Quasi-Threshold Graph zu sehen. Die durchgehenden Kanten zeigen den Wald, in diesem Fall ist es ein Wald mit ge-

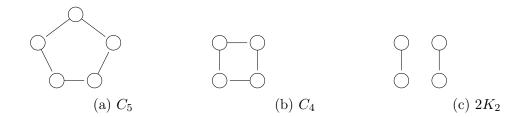


Abbildung 3: Die verbotenen Graphen in einem Split-Graphen

nau einem Baum. Der dunkle-graue Knoten ist die Wurzel des Baumes. Dabei stellen gestrichelten Kanten den transitiven Abschluss dar.

Solche Graphen modellieren eine große Anzahl von Netzwerken. Unter anderem auch soziale Strukturen, wie eine Hierarchie in einer Organisation. Sei die Knoten Personen und die Kanten stellen die Wege dar, auf denen die Befehle fließen. Fast alle haben einen Vorgesetzten (bis auf die Wurzel) und nehmen Befehle vom ihm an, was durch die Baumstruktur modelliert wird. Aber sie hören auch auf die Befehle von dem Vorgesetzen des Vorgesetzen, was durch den transitiven Abschluss modelliert wird[21].

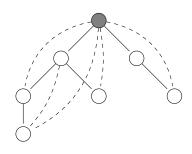


Abbildung 2: Ein Quasi-Threshold-Graph

Ähnlich dazu sind (P_5, C_5) -freie Graphen die auch soziale Strukturen modellieren und dafür geeignet sind Gemeinschaften zu identifizieren [25].

1.2.3 Protein interaction networks

Im Abschnitt 1.1 haben wir Cluster-Graphen betrachtet, wo jede Zusammenhangkomponente eine Clique ist. Split-Graphen sind ähnliche Graphen, aber bestehen nur aus einer Clique und einigen Knoten, die an der Clique anhängen. Formell definiert heißt es, dass man den Menge der Knoten des Graphens in zwei Mengen V_1 und V_2 teilen kann, sodass $G[V_1]$ ein stabile Menge und eine $G[V_2]$ eine Clique ist. Split-Graphen sind $(2K_2, C_4, C_5)$ -freie Graphen. Ein Split-Cluster Graph ist ein Graph wo jede Zusammenhangkomponente ein Split-Graph ist [9].

Diese Struktur modelliert gut Protein-Protein Interaktion Netzwerke. In Körper vom Menschen oder anderen Lebewesen gibt es eine Vielzahl von Proteinen, die einen Zweck haben, aber diesen erfüllen sie meistens nicht alleine, sondern in dem sie Proteinkomplexe bilden. Diese Protein-Komplexe bestehen aus einer großen Anzahl von Proteinen und sind nicht einfach zu untersuchen. Ein Weg um solche Proteinkomplexe zu identifizieren besteht darin, herauszufinden welche Proteine mit welche Proteinen überhaupt interagieren. So kann man die diese Proteine als Knoten ansehen und wenn es eine Interaktion zwischen diesen Proteinen gibt, diese als eine Kante ansehen. Ein Proteinkomplex hat einen Kern, wo jedes Protein mit jedem Protein interagiert und Anhängsel, einzelne Proteine, die nur mit dem Kern interagieren. Damit modellieren Split-Cluster-Graphen die Struktur von Proteinkomplexen und können dazu verwendet werden um Protein-Komplexe zu bestimmen.

1.3 Annäherung

Jedoch haben die Eingabedaten typischerweise Fehler oder sind unvollständig. So können in einem Cluster-Graphen bestimmte Kanten fehlen, obwohl sie dazu gehören sollten. Oder in Split-Cluster-Graphen fehlen Informationen zu Interaktionen zu bestimmten Paaren von Proteinen. Weil die Daten nun fehlerhaft sind, stellt sich die Frage, wie viele und welche Änderung müssen am Graphen getan werden, damit er die erwünschte Struktur hat. Wenn man nun die Struktur durch eine Menge \mathcal{F} von verbotenen Graphen charakterisiert, nennt sich das Problem \mathcal{F} -Free Edge Editing.

Nun ist $\mathcal{F}\text{-}\mathsf{FREE}$ EDGE EDITING für die meisten \mathcal{F} sehr aufwendig zu lösen.

1.4 Definitionen

1.4.1 Notationen und Definitionen

Mit Graphen sei im Folgenden stets ein ungerichteter, einfacher Graph gemeint. Wenn nicht anders angegeben ist G = (V, E) ein Graph, V die Menge seiner Knoten und E die Menge seiner Kanten.

Die Menge der Konten des Graphen G ist V(G) ist und die Menge der Kanten des Graphen G heißt E(G). Die Nachbarschaft vom Knoten u heißt N(u), während $N^*(u)$ ist die Nachbarschaft von u mit u inklusive ist.

Sei G=(V,E) ein Graph und $S\subseteq V$ eine beliebige Knotenmenge von V. Dann ist $G[S]=(S,E\cap\{\{u,v\}\,|\,u\in S\wedge w\in S\})$ der durch S induzierte Subgraph von G.

Seien $H=(V_H,E_H)$ und G=(V,E) zwei Graphen. Ein Subgraph-Isomorphismus von H nach G ist eine Funktion $f:V_H\to V$ sodass wenn $(u,v)\in E_H$, dann gilt auch $(f(u),f(v))\in E$. f ist ein induzierter Subgraph-Isomorphismus, wenn es auch gilt, dass wenn $(u,v)\notin E_H$, dann auch $(f(u),f(v))\notin E$ E.

Seinen G und F Graphen, dann ist der Graph G F-frei, wenn es nicht F als induzierten Subgraphen enthält. Für eine Menge \mathcal{F} von Graphen, heißt G \mathcal{F} -frei, wenn G F-frei ist für jeden $F \in \mathcal{F}$.

Siehe [10] für eine Definition von FPT und Kernel.

Ein ungerichteter Graph G heißt Wald, wenn er keinen Zyklus enthält. Ist der Graph G zudem zusammenhängend, dann heißt er auch Baum. Jede Zusammenhangkomponente eines Waldes ist daher ein Baum.

1.4.2 Problemstellung

Um Heuristiken für das Entfernen von verbotenen Teilgraphen entwickeln zu können, ist zuerst ein Problem zu definieren. Es ist unter dem Namen F-Free Edge Editing bekannt.

F-FREE EDGE EDITING

Eingabe: Graph G, natürliche Zahl k

Frage: Können wir von G höchstens k Kanten entfernen, so dass

G keinen induzierten Teilgraphen aus \mathcal{F} enthält?

Parameter: k

 \mathcal{F} -Free Edge Editing ist NP-Schwer für die meisten \mathcal{F} . Man es exakt mit FPT lösen[10], für die meisten Instanzen von \mathcal{F} gibt es keine Polynomiale Kernel.

 \mathcal{F} -Free Edge Editing

Eingabe: Graph G, natürliche Zahl k, Menge von Graphen \mathcal{F} **Frage:** Können wir von G höchstens k Kanten entfernen, so dass

G keinen induzierten Teilgraphen aus \mathcal{F} enthält?

Parameter: k

1.5 Ähnliche Arbeiten

Implicit Hitting Set hilft hier leider nicht viel.[19]

Approximation von H-Free Editing für montone graphen eigenschaften: $o(n^2)$ ist effizient, aber $O(n^{2-\epsilon})$ ist NP-Hard.[4]

1.6 Überblick

Im Abschnitt 2 werden die Ansätze vorstellt um dieses Problem zu lösen. Dann werden wir im Abschnitt 3 betrachten wie die Tests aussehen und auf welchen Modellen diese Algorithmen auf ihre Tauglichkeit getestet wurden.

Im Abschnitt 4 wird auf Details der Umsetzung von diesen Algorithmen eingegangen. Darauf folgend werden im Abschnitt 5 die Resultate vorgestellt und diskutiert, während im Abschnitt 6 unsere Lösungen mit anderen bisherigen Lösungsansätzen verglichen werden.

2 Algorithmen

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Ansätze an die das Problem beschrieben. Die im nachfolgenden beschriebenen Algorithmen basieren alle auf dem folgenden Prinzip: Suche einen validen Graphen, welcher die verbotenen Subgraphen nicht enthält. Wiederhole dies iterations-mal und dann geben die Differenz zwischen besten validen Graphen und dem Eingabegraphen aus.

Dieses Prinzip ist im Algoritmus 1 zu sehen. Dabei steht SOLVEALGO für einen der Algorithmen, die wir in den folgenden Abschnitten betrachten werden.

Algorithm 1 Genereller Aufbau

```
1: function Solve(G_{innut}, F, i_{max})
          G_{best} \leftarrow (\emptyset, \emptyset)
          for i = 1 to i_{max} do
 3:
               G_{valid} \leftarrow \text{SOLVEALGO}(G_{input}, F)
               if \#(\text{DIFF}(G_{best}, G_{input})) < \#(\text{DIFF}(G_{valid}, G_{input})) then
 5:
 6:
                    G_{best} \leftarrow G_{valid}
               end if
 7:
          end for
 8:
          print DIFF(G_{input}, G_{best})
 9:
10: end function
```

Da alle Ansätze diesen Schritte enthalten und sich nur in dem unterschieden, wie der valide Graph gefunden wird, wird folgend nur dieser Aspekt betrachtet.

Die entwickelten Ansätze sind in 3 große Gruppen zu unterteilen. Der Top-Bottom-Ansatz nimmt den Graphen und ändert ihn solange, bis ein gültiger Graph entsteht. Der Bottom-Top-Ansatz fängt mit einem leeren oder vollen Graphen an, und ändert solange Konten, bis man möglichst nahe an dem Eingabegraphen ist. Der Grow-Reduce-Ansatz kombiniert diese beiden Ansätze, indem es unterschiedliche Stadien gibt...

2.1 Backward-Ansatz

Der Backward-Ansatz nimmt den Graphen und ändert ihn solange, bis ein gültiger Graph entsteht.

2.1.1 RandomChange

Das ist der einfachste Algorithmus. Solange der Graph verbotene Subgraphen hat, dann versuche eine Kante in dem Graphen zu ändern.

Algorithm 2 RandomChange

```
1: function RANDOMCHANGESOLVE(graph, forbidden)
 2:
       for Graph f \in forbidden do
          forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
 3:
          while forbiddenSubgraph \neq \emptyset do
 4:
              change a random edge \in forbiddenSubgraph
 5:
              forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
 6:
          end while
 7:
       end for
 8:
 9:
       return graph
10: end function
```

2.1.2 Random

Es ist wie RandomChange, aber bereits editierte Kanten werden mit einer geringeren Wahrscheinlichkeit geändert. Auch hat es für kleine Graphen ein Konvergenzkriterium. Dieses Konvergenzkriterum besteht darin, dass nach für jede Änderung, die Anzahl der verbotenen Subgraphen gezählt wird und die nur dann ausgeführt wird, wenn die Anzahl der verbotenen Subgraphen dadurch weniger wird. Der allgemeine Vorgehensweise wird im Algorithmus 3 beschrieben. Der große Unterschied zu zum RandomChange sehen wir ab Zeile 6. Dort wählen wird die Kante ausgewählt welche geändert werden soll, aber eine bereits geänderte Kante bekommt eine Wahrscheinlichkeit zugewiesen die 4-mal kleiner ist(siehe Zeile 10).

2.2 Forward-Ansatz

Die Forward-Ansätze zeichnet sich dadurch aus, dass wir mit einem Graphen beginnen, der die selben Knoten wie der Eingabegraph hat, aber keine Kanten. Dieser Graph ist somit valide, weil er keine verbotenen Subgraphen ent-

Algorithm 3 Random

```
1: function STATERANDOM2SOLVE(graph, forbidden)
        for Graph f \in forbidden do
 2:
            fforbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
 3:
 4:
            while forbiddenSubgraph !=\emptyset do
                \texttt{foundEdge} \leftarrow \emptyset
 5:
                while true do
 6:
                    e \leftarrow random \ edge \ from \ forbiddenSubgraph
 7:
                    prob \leftarrow 1 / \#(E(f))
 8:
 9:
                    if e is already visited then
                        \texttt{prob} \leftarrow \texttt{prob} / 4
10:
                    end if
11:
12:
                    if random number from [0,1] > prob then
                        \texttt{foundEdge} \leftarrow \texttt{e}
13:
                        break
14:
                    end if
15:
                    flip e in graph
16:
                end while
17:
                forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
18:
            end while
19:
        end for
20:
        return graph
21:
22: end function
```

hält. Dies ist ein Vorteil gegenüber den Top-Bottom-Ansätzen, da es möglich ist immer einen validen Graphen zu haben und somit jederzeit terminieren.

2.2.1 Extend

Das ist der einfachste Algorithmus aus der Klasse der Forward-Ansätze. Zu sehen die Vorgehensweise in Algorithmus 4. Er fängt mit einem Graphen an, der die selben Knoten wie der Eingabegraph hat, aber keine Kanten (Zeile 2). Dann wird versucht jede Kante einzufügen, die auch im originalen Graphen input vorhanden war (Zeile 4). Wenn es einen invaliden Graphen erzeugt, also dass es nun einen verbotenen Teilgraphen im graph gibt, dann wird die Änderung rückgängig gemacht (Zeile 5). Wenn nun keine Änderung in einem Durchlauf gemacht wurden, dann bricht der Algorithmus ab (Zeile 7) und gibt den erzeugen Graphen zurück.

Ein beispielsweiser Ablauf für den Extend-Algorithmus, wo P_3 der verbotene Teilgraph ist ist in der Abbildung 4 zu sehen. Dabei wird der Graph graph dargestellt und eine gestrichelte Kante gibt an, wenn die Kante in dem Graphen input vorhanden ist, aber nicht in dem Graphen input. Wenn die Kante rot ist, dann wurde versucht die Kante einzufügen, aber es hat eine P_3 erzeugt, wenn die Kante grün ist, dann wurde die Kante eingefügt, ohne dass ein P_3 erzeugt wurde.

Es ist zu sehen, dass dieser Algorithmus keine Kanten hinzufügt, die nicht in dem Eingabe-Graphen nicht vorhanden waren.

Algorithm 4 Extend

```
1: function EXTENDSOLVE(input, forbidden)
       graph = (V(input), \emptyset)
 2:
       while true do
 3:
          for each Edge e \in Difference(graph,input) do
 4:
              try to flip e, revert if it produces an invalid graph
 5:
 6:
          end for
 7:
          break if there was no change
       end while
 8:
       return graph
 9:
10: end function
```

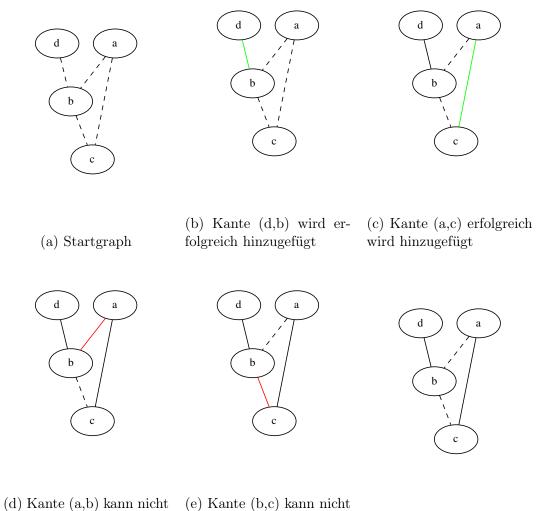


Abbildung 4: Beispielweiser Ablauf des Extends

hinzugefügt werden

(f) Resultierender Graph

hinzugefügt werden

2.3 GRASP

2.3.1 Grow-Reduce

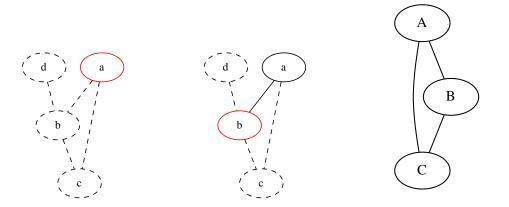
Der Grow-Reduce-Ansatz ist ein Art von einer greedy randomized adaptive search procedure(GRASP). GRASPH beschreiben Siehe [5] Der Grow-Reduce-Ansatz sieht wie folgt aus: Begonnen wird mit einem Graphen, der die selben Knoten wie der Eingabegraph hat, aber keine kanten. Dann wird in jeder Iteration ein Knoten und seine Umgebung hinzugefügt und durch lokale Suche werden alle neu entstandenen verbotenen Subgraphen wieder entfernt. Die ist im Algorithmus 5 zu sehen.

Algorithm 5 GrowReduce

```
1: function GROWREDUCESOLVE(G, forbidden)
       graph \leftarrow (V(input), \emptyset)
 3:
       nodes \leftarrow RANDOMORDER(V(G))
 4:
       for node \in nodes do
                                                                  ▶ Grow Phase
           for neighbor \in N(\text{node}) do
 5:
               Add Edge (node, neighbor) to graph
 6:
           end for
 7:
            for \ f \in \texttt{forbidden} \ do 
                                                                 ▶ Reduce Phase
 8:
               forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph,f)
 9:
               while forbiddenSubgraph !=\emptyset do
10:
                   edge \leftarrow random Edge from forbiddenSubgraph
11:
                   count \leftarrow \#(FINDALLFS(graph,f))
12:
                   flip edge in graph
13:
                   countAfter \leftarrow \#(FINDALLFS(graph,f))
14:
                   if countAfter > count then
15:
                      flip edge in graph
16:
                   end if
17:
18:
                   forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
               end while
19:
           end for
20:
       end for
21:
       return graph
22:
23: end function
```

2.3.2 Explored-Grow-Reduce

Der Explored-Grow-Reduce-Ansatz ist dem Grow-Reduce-Ansatz ähnlich, bis auf das, es in der Grow-Phase nur die Kanten zu Knoten hinzufügt, die



- (a) Knoten a wird hinzugefügt
- (b) Knoten b wird hinzugefügt
- (c) Knoten c wird hinzugefügt

Abbildung 5: Beispielweise Grow-Phase

bereits erforscht sind.

Dieser Unterschied wird in der Abbildung 5 verdeutlich, wo nur die Grow Schritte visualiert wurden, ohne die Reduce-Phase, um es zu vereinfachen. In Abbildung 5a ist der Anfangstatus zu sehen. Die gestrichelten Kanten, sind Kanten die Graphen vorhanden sind, aber noch nicht hinzugefügt worden sind und es wird der Knoten a hinzugefügt, weil aber keine anderen Knoten bisher hinzugefügt worden sind, wird werden keine Kanten hinzugefügt. In Abbildung 5b wird der Knoten b hinzugefügt und weil a auch schon hinzugefügt wurde, wird auch die Kante (a, b) hinzugefügt. Aber weder (a, c) noch (a, b) werden hingefügt, weil c noch nicht erforscht wurde. In Abbildung 5c wird der Knoten c hinzugefügt und somit auch die Kanten (a, b) und (a, c).

2.4 Lineare Programmierung

2.4.1 Lineare Optimierung

Bei der linearen Optimierung wird eine lineare Zielfunktion minimiert bzw. maximiert, wobei sie durch lineare Gleichungen und Ungleichungen beschränkt ist.

Algorithm 6 ExploredGrowReduce

```
1: function EXPLOREDGROWREDUCESOLVE(input, forbidden)
        graph \leftarrow (V(input), \emptyset)
 2:
        nodes \leftarrow ORDER(V(input))
 3:
        explored \leftarrow \emptyset
 4:
        \mathbf{for}\ \mathtt{node}\in\mathtt{nodes}\ \mathbf{do}
 5:
            for neighbor \in N(\text{node}) do
                                                                       ▷ Grow Phase
 6:
                if neighbor \in explored then
 7:
 8:
                    Add Edge (node, neighbor) to graph
                end if
 9:
            end for
10:
            \mathtt{explored} \leftarrow \mathtt{explored} \cup \{\mathtt{node}\}
11:
                                                                     ▶ Reduce Phase
            for f \in forbidden do
12:
                forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph,f)
13:
14:
                while forbiddenSubgraph !=\emptyset do
15:
                    edge \leftarrow random Edge from forbiddenSubgraph
16:
                    count \leftarrow \#(FINDALLFS(graph,f))
                    flip edge in graph
17:
                    countAfter \leftarrow \#(FINDALLFS(graph,f))
18:
                    if countAfter \geq count then
19:
                        flip edge in graph
20:
                    end if
21:
22:
                    forbiddenSubgraph \leftarrow FINDFS(graph, f)
                end while
23:
            end for
24:
        end for
25:
26:
        return graph
27: end function
```

2.4.2 Das Model des Graphen

Wir nutzen binäre Variablen e_{uv} , wobei $u, v \in V$ sind und u < v gilt. Dabei ist $e_{uv} = 1$ genau dann wenn, die kante u, v ein Teil des Lösungsgraphen ist.

Wir minimieren

$$\sum_{u,v \in V} \begin{cases} e_{u,v} & \{u,v\} \in E \\ -e_{u,v} & \{u,v\} \notin E \end{cases}$$

Dies ist die Zielfunktion objective im Algorithmus 7.

Da alle möglichen Bedingungen hinzuzufügen, welche bei alle verbotenen Subgraphen ausschließen würden, viel zum umfangreich wäre, werden die Bedingungen iterative dort hinzugefügt, wo es einen verbotenen Teilgraphen gibt (siehe Zeile 5). Dann wird der Problem gelöst(siehe Zeile 16) und und die Änderungen auf den Graphen übertragen(siehe Zeile 17). Dann wird wieder nach alle verboteten Subgraphen gesucht(siehe Zeile 4). Dies wird solange wiederholt bis es keine mehr gibt. Nun ist die minimale Anzahl von Änderungen gefunden. Dieses Vorgehen ist im Algorithmus 7 zu sehen.

3 Aufbau der Test

3.1 Datensätze

Folgende Datensätze wurden verwendet. Da verschiedene Mengen von verbotenen Teilgraphen monotonen Grapheneigenschaften zugeordnet werden können und jeder Datensatz von Graphen und jede Methode zufällige Graphen zu erzeugen, charakteristische Eigenschaften hat, ist es notwendig verschiedene Datensätze zu verwenden und verschiedenen Methoden zur Erzeugung von zufälligen Graphen. Ingesammt wurde 5 verschiedene Methoden zur Erzeugung von zufälligen Graphen verwendet und 3 Datensätze. Wir brachten zuerst die zufälligen Graphen.

3.1.1 Barabási–Albert

Für den Datensatz barabasi_albert wurde das Barabási-Albert Modell verwendet, welches ein zufälliges skalenfreies Netz erzeugt.[3] Skalenfrei bedeutet hier, dass die Knotengrad einer Potenzverteilung folgt. Es gibt also viel mehr Konten die einen geringeren Grad haben als Knoten mit einem hohen Anzahl von Nachbarn.

Es wurden 56 Graphen generiert mit Knotenanzahl zwischen 10 und 150, wobei der Parameter m, welcher die Anzahl der der Kanten definiert, die zu bereits bestehenden Knoten erstellt werden, zwischen 1 und 8 war.

Algorithm 7 F-Free BLP

```
1: function SOLVEBLP(graph, forbidden)
        \texttt{constraints} \leftarrow \emptyset
 2:
         for graph \ f \in \texttt{forbidden} \ do 
 3:
           while FINDFS(graph, f) !=\emptyset do
 4:
               for each graph M \in FINDEFS(graph, f) do
 5:
                   contstraint \leftarrow 0
 6:
                   for each \{u, v\} \in E(M) do
                                                            ▶ Add all Constraints
 7:
 8:
                       if \{u, v\} \in E(graph) then
 9:
                           contstraint += 1 - e_{uv}
10:
                       else
                           contstraint +=e_{uv}
11:
                       end if
12:
                   end for
13:
14:
                   constraints \leftarrow constraints \cup \{ constraint \}
15:
               end for
16:
               variables \leftarrow LPSOLVE(constraints, objective)
               for e_{u,v} \in \text{variables do}
                                                  ▶ Apply solution to the graph.
17:
                   if e_{u,v} = 1 then
18:
                       Set edge (u, v) in graph
19:
20:
                   else
                       Remove edge (u, v) in graph
21:
                   end if
22:
               end for
23:
           end while
24:
        end for
25:
26:
        return graph
27: end function
```

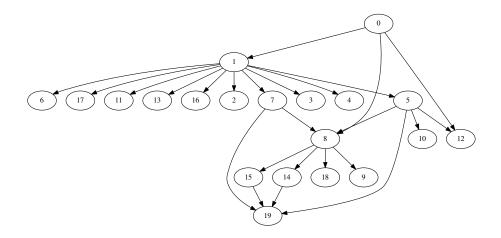


Abbildung 6: Ein beispielhafter Duplication-Divergence Graph mit n=20 und p=0,4

3.1.2 Erdős-Rényi

Für den Datensatz binomial wurde das Erdős-Rényi Modell verwendet[13] [6], wo jede Kante eine fixe Wahrscheinlichkeit hat zu existieren oder nicht zu existieren.

Es wurden dabei 54 Graphen generiert, mit einer Knotenanzahl zwischen 10 und 100 und den folgenden Wahrscheinlichkeiten: $\frac{1}{10}$, $\frac{2}{10}$, $\frac{5}{20}$, $\frac{4}{10}$, $\frac{5}{10}$, $\frac{8}{10}$.

3.1.3 Duplication-Divergence

Für den Datensatz duplication divergence wurde das Duplication Divergence Modell verwendet[15], welches Interaktionsnetzwerke zwischen Proteinen modelliert. Ein Beispiel ist in Abbildung 6 zu sehen.

Dabei gibt es in jeder Iteration bei der Erstellung eines solchen zufälligen Graphen zwei Phase. Die erste ist die Duplikations-Phase, wo ein zufälliger Knoten u genommen und dupliziert wird zu v. Dann beginnt die Divergence-Phase, wo zu jedem Nachbarn von u mit gewissen Wahrscheinlichkeit p eine Kante zu v hinzugefügt wird. Falls keine Kanten hinzugefügt wurde, dann wird v wieder gelöscht. Dies wird n-mal wiederholt

Es wurden mit diesem Modell 54 Graphen generiert mit n zwischen 10 und 100. Für die Wahrscheinlichkeiten p wurden folgenden Werte verwendet $\frac{1}{10}$, $\frac{2}{10}$, $\frac{5}{20}$, $\frac{4}{10}$, $\frac{5}{10}$, $\frac{8}{10}$.

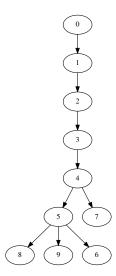


Abbildung 7: Ein Powerlaw-Baum mit n = 10

3.1.4 Newman-Watts-Strogatz

Für den Datensatz newman_watts_strogatz wurde das Newman-Watts-Strogatz Modell verwendet[23], welches einen Kleine-Welt-Graphen erzeugt mit kurzen durchschnittlichen Pfaden und einem hohen Clusterkoeffizienten.

Dabei wird zuerst ein Ring von n Knoten erstellt. Dann wird jeder Knoten mit k von seinen nächsten Nachbarn verbunden (oder mit k-1, wenn k ungerade ist). Dann werden Abkürzungen erzeugt indem, man für jede Kante (u,v) in dem zugrundeliegenden n-Ring mit den k-nächsten Nachbarn: Füge mit der der Wahrscheinlichkeit p eine neue Kante (u,w) ein, wobei w ein zufälliger existierender Knoten ist.

Es wurden mit diesem Model 144 Graphen generiert mit einer Knotenanzahl(n) zwischen 10 und 100, m zwischen 2 und 8 und der Wahrscheinlichkeit p zwischen 0,2 und 0,8.

3.1.5 Powerlaw-Baum

Für den Datensatz powerlaw, wurde ein Modell verwendet, dass einen Baum erzeugt, deren Knotengrad einer Potenzverteilung folgt. Ein Beispiel ist in Abbildung 7 zu sehen. Es wurden mit diesem Model 30 Graphen generiert mit einer Knotenanzahl zwischen 10 und 160.

3.1.6 UCINetworkDataRepository

Für den Datensatz UCINetworkDataRepository wurden 9 reale Graphen verwendet, bereitgestellt von der University of California.

Der Graph karate ist ein soziales Netzwerk von Freundschaften zwischen 34 Mitgliedern eines Karate-Clubs in einer US-Universität in 1970 [29].

Der Graph polbooks.paj ist ein Netzwerk von Bücher über die aktuelle US Politik, die von dem Onlinehänder Amazon.com verkauft wurdem. Kanten repräsentieren häufiges Kaufen von den beiden Büchern von dem selben Käufer [1].

Der Graph football ist ein Netzwerk von amerikanischen Footballspielen im Herbst 2000 [14].

Der Graph power.paj ist ein Netzwerk, dass die Topologie des "Western States Power Gridïn der Vereinigten Staaten wiederspieglt [27].

Der Graph adjnoun ist ein Netzwerk von häufigen Adjektiven und Nomen in dem Roman "David Copperfield"von Charles Dickens [22].

Der Graph lesmiserables ist ein Netwerke von Figuren, die in dem Roman Les Misérables"von Victor Hugo, zur gleichen Zeit auftreten [16].

Der Graph celegansneural.paj welches das neurale Netzwerk von Caenorhabditis elegans [27]. Es ist ein Fadenwurm, welcher gerne als Modellorganismus studiert wird. Jeder erwachsene C. elegans hat genau 302 Nervenzellen.

Der Graph dolphins ist ein soziales Netzwerk von 62 Dolphinen die in einer Gemeinschaft in der Nähe von Neuseeland leben [17].

Der Graph polblogs ist ein Netzwerk von Hyperlinks zwischen Webblogs in 2005, die sich mit auf US Politik beschäftigten [2].

3.1.7 bio1

Anzahl: 147 Was ist die Quelle für diese Daten???

3.1.8 bio2

Der Datensatz bio2 sind COG protein similarity data [24] [7] Es sind 360 Graphen mit einer Knotenanzahl zwischen 3 und 80.

3.2 Optimale Lösung

Um die Qualität der Lösung eines heuristischen Ansatzes bewerten zu können, ist es sehr gut die optimale Lösung zu wissen. Es gibt verschiedene Ansatz wie das Problem zu lösen sein, wir haben uns jedoch für die lineare Optimierung entschieden. Der BLP-Alogoritmus versucht eine optimale

Lösung zu finden. Dies kann jedoch sehr lange dauern, da die Komplexität des Problemes exponentiell. In der Tabelle Tabelle 1 sehen wir, dass für viele verbotene Teilgraphen wir für alle Instanzen eine optimale Lösung berechnen konnten, aber es gibt schwierige verbotene Teilgraphen wie (P_5 , triangle) wo man wir für die meisten Instanzen keine optimale Lösung haben.

Tabelle 1: Nicht gelöste Instanzen für den Datensatz bio2

Verbetener Teilgraph	Anzahl	Prozent
Verbotener Teilgraph	Anzam	Frozent
$2P_3$	0	0%
C_4	0	0%
claw	0	0%
paw	4	1%
triangle	11	3%
splitcluster	26	7%
(P_4, C_4)	37	10%
(x172, triangle)	129	36%
$(P_5, \text{triangle})$	309	86%

4 Implementation

4.1 Repräsentation vom Graphen

Die Graphen werden in einer Adjazenzmatrix gespeichert.

4.2 Das Finden von induzierten Subgraphen

[26] Wie verwenden einen VF Algorithmus für FINDFS(graph,forbidden). Dieser gibt eine Menge von Subgraphen zurück.

4.2.1 Vergleich VFLib, Boost und eigene Implemtation

•	find all p3s	count all p3s	has a p3
Spezial	0.73s	0.04s	0.00016s
VFLib	1.73s	0.87s	0.01236s
Boost	3.04s	1.68	0.00102s

Bei VFLib ist der Graph immutable und bei der Suche nach einem Subgraphen müssen wir jedes Mal den Graphen neu erstellen.

5 Auswertung

6 Vergleich mit anderen Heuristiken

6.1 Cluster-Editing

6.1.1 2K-Heuristik

Die 2K-Heuristik basiert auf einem Kernel für das Cluster-Editing-Problem, welches maximal 2K Knoten liefert [11]. Wenn man dort eine Bedingung für die Reduktionsregel abschwächt, kommt eine gute Heuristik für das Cluster-Editing-Problem heraus. Dabei wird die Bedingung mit jedem Durchlauf abgeschwächt.

Algorithm 8 2K Heuristik

```
1: function SOLVE2K(g :: Gewichteter Graph)
 2:
        x \leftarrow 1.0
 3:
        while g has a P3 do
            \mathbf{for} \ \mathrm{each} \ \mathrm{knoten} \ \mathbf{u} \in \mathbf{g} \ \mathbf{do}
 4:
                if 2 \cdot x \cdot costClique(g, u) + x \cdot costCut(g, u) < \#(N(u)) then
 5:
                     for each \{a,b\} mit a \in N(u), b \in N(u) \land a \neq b do
 6:
                         MERGE(a,b)
 7:
                    end for
 8:
                end if
 9:
            end for
10:
            x \leftarrow 0.99 \cdot x - 0.01
11:
        end while
12:
13:
        return graph
14: end function
15: function COSTCLIQUE(graph :: Gewichteter Graph, u :: Kante)
16:
        cost \leftarrow 0
17:
        for each \{a,b\} mit a \in N^*(u), b \in N^*(u) \land \{a,b\} \notin graph do
            cost += |w(\{a,b\})|
18:
19:
        end for
20:
        return cost
21: end function
22: function COSTCUT(graph :: Gewichteter Graph, u :: Kante)
        cost \leftarrow 0
23:
        for each \{a,b\} mit a \in N^*(u), b \notin N^*(u) \land \{a,b\} \in graph do
24:
            cost += w(\{a, b\})
25:
        end for
26:
        return cost
27:
28: end function
```

Tabelle 2: Vergleich der durchschnittlichen Lösungsgröße

Programm /	Aprox2k		$ExploredGrowReduce^1$	
Datensatz	mean	std	mean	std
bio1 ²	43.44	79.81	133.59	249,62
bio2 ³	34.11	19.79	113.81	166,01
duplication-divergence ⁴	155.17	217.38	92.30	$115,\!22$
newman-watts-strogatz ⁵	165.22	149,86	152.34	127,51
albert-barabasi ⁶	324.30	316,32	248.84	$226,\!87$
binomial ⁷	493.17	$545,\!19$	554.61	670,91

6.2 Quasi-Threshold Mover

In [8] wurde ein neuer schneller und auch für große Graphen geeigneter Algorithmus entwickelt für das Quasi-Threshold Editing Problem. Quasi-Threshold Graphen, auch bekannt als trivial perfekte Graphen lassen sich auch als (P_4, C_4) - freie Graphen charakterisieren.

In Tabelle 3 wird die Lösungsqualität von dem Quasi-Thresold-Mover und unserem Algorithmus ExploredGrowReduce verglichen. In der Tabelle 4 wird die durschnittliche Größe der Lösungen verglichen. Der Quasi-Threschold-Mover ist unserem Ansatz weit überlegen.

Tabelle 3: Vergleich der durchschnittlichen Lösungsqualität

Programm /	$ExploredGrowReduce^8$		Quasi-Threshold-Mover	
Datensatz	mean	std	mean	std
bio1 ⁹	1.61x	1.30	1.05x	0.14
bio2 ¹⁰	1.69x	1.03	1.05x	0.10
duplication-divergence ¹¹	1.42x	0.33	1.04x	0.05
newman-watts-strogatz ¹²	1.38x	0.22	1.06x	0.05

Tabelle 4: Vergleich der durchschnittlichen Lösungsgröße

¹Siehe Algorithmus 6 mit 5 Iterationen

²Testergebnis: 2016-04-20 17:29:08

³Testergebnis: 2016-04-20 17:31:40

⁴Testergebnis: 2016-04-20 17:36:40

⁵Testergebnis: 2016-04-20 17:36:57

⁶Testergebnis: 2016-04-20 17:38:17

⁷Testergebnis: 2016-04-20 18:17:08

⁸Siehe Algorithmus 6 mit Standard-Parametern

⁹Testergebnis: 2016-04-20 12:46:35

¹⁰Testergebnis: 2016-04-20 12:53:45

¹¹Testergebnis: 2016-04-20 13:09:36

¹²Testergebnis: 2016-04-20 13:12:44

Programm /	ExploredGrowReduce		ExploredGrowReduce Quasi-Threshold-Mo		reshold-Mover
Datensatz	mean	std	mean	std	
bio1	52.25	150.25	20.88	46.51	
bio2	23.12	19.91	13.89	9.64	
duplication-divergence	73.87	117.35	51.46	80.23	
newman-watts-strogatz	146.48	128.42	103.38	87.99	

7 Zukünftige Forschungsmöglichkeiten

- 7.1 Besser Sortierung von Grow-Reduce
- 7.2 Besser Konvergenzkriterium
- 7.3 Obere Schranken
- 7.4 Obere Schranken
- 8 Zusammenfassung
- 9 Anhang
- 9.1 Kleine Graphen

Literatur

- [1] Books about us politics. http://networkdata.ics.uci.edu/data.php?d=polbooks.
- [2] Lada A. Adamic and Natalie Glance. The political blogosphere and the 2004 u.s. election: Divided they blog. In *Proceedings of the 3rd International Workshop on Link Discovery*, LinkKDD '05, pages 36–43, New York, NY, USA, 2005. ACM.
- [3] Reka Albert and Albert-Laszlo Barabasi. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics*, 74:47, 2002.
- [4] Noga Alon and Uri Stav. Hardness of edge-modification problems. *Theoretical Computer Science*, 410(47):4920–4927, 2009.
- [5] Lucas Bastos, Luiz Satoru Ochi, Fábio Protti, Anand Subramanian, Ivan César Martins, and Rian Gabriel S. Pinheiro. Efficient algorithms

- for cluster editing. Journal of Combinatorial Optimization, 31(1):347–371, 2014.
- [6] V. Batagelj and U. Brandes. Efficient generation of large random networks. *Physical Review E*, 71(3):36113, 2005.
- [7] Sebastian Böcker, Sebastian Briesemeister, Quang Bao Anh Bui, and Anke Truß. A fixed-parameter approach for weighted cluster editing. In *APBC*, pages 211–220. Citeseer, 2008.
- [8] Ulrik Brandes, Michael Hamann, Ben Strasser, and Dorothea Wagner. Fast quasi-threshold editing. *CoRR*, abs/1504.07379, 2015.
- [9] Sharon Bruckner, Falk Hüffner, and Christian Komusiewicz. A graph modification approach for finding core-periphery structures in protein interaction networks. *Algorithms for Molecular Biology*, 10:16, 2015.
- [10] Leizhen Cai. Fixed-parameter tractability of graph modification problems for hereditary properties. *Information Processing Letters*, 58(4):171–176, 1996.
- [11] Jianer Chen and Jie Meng. A 2k kernel for the cluster editing problem. J. Comput. Syst. Sci., 78(1):211–220, 2012.
- [12] Gilberto F de Sousa Filho, F Lucidio dos Anjos, Luiz Satoru Ochi, Fábio Protti, Rio Tinto-PB-Brazil, and Joao Pessoa-PB-Brazil. Metaheuristic grasp for the bicluster editing problem. 2012.
- [13] Edgar N Gilbert. Random graphs. The Annals of Mathematical Statistics, 30(4):1141–1144, 1959.
- [14] M. Girvan and M. E. J. Newman. Community structure in social and biological networks. *PNAS*, 99(12):7821–7826, June 2002.
- [15] Iaroslav Ispolatov, PL Krapivsky, and A Yuryev. Duplication-divergence model of protein interaction network. *Physical review E*, 71(6):061911, 2005.
- [16] D. E. Knuth. The Stanford GraphBase: a platform for combinatorial computing. ACM Press New York, NY, USA, 1993.
- [17] David Lusseau, Karsten Schneider, Oliver J Boisseau, Patti Haase, Elisabeth Slooten, and Steve M Dawson. The bottlenose dolphin community of doubtful sound features a large proportion of long-lasting associations. Behavioral Ecology and Sociobiology, 54(4):396–405, 2003.

- [18] Sara C. Madeira and Arlindo L. Oliveira. Biclustering algorithms for biological data analysis: A survey. IEEE/ACM Trans. Comput. Biol. Bioinformatics, 1(1):24–45, January 2004.
- [19] Erick Moreno-Centeno and Richard M. Karp. The implicit hitting set approach to solve combinatorial optimization problems with an application to multigenome alignment. *Operations Research*, 61(2):453–468, 2013.
- [20] James Nastos. (p5, not-p5)-free graphs. Master's thesis, University of Alberta, Spring 2006.
- [21] James Nastos and Yong Gao. Familial groups in social networks. *Social Networks*, 35(3):439–450, 2013.
- [22] M. E. J. Newman. Finding community structure in networks using the eigenvectors of matrices. *Physical Review E*, 74:036104, 2006.
- [23] M. E. J. Newman and D. J. Watts. Renormalization group analysis of the small-world network model. *Physics Letters A*, 263(4-6):341–346, 1999.
- [24] Sven Rahmann, Tobias Wittkop, Jan Baumbach, Marcel Martin, Anke Truss, and Sebastian Böcker. Exact and heuristic algorithms for weighted cluster editing. In *Comput Syst Bioinformatics Conf*, volume 6, pages 391–401. Citeseer, 2007.
- [25] Philipp Schoch. Editing to (p5, c5)-free graphs a model for community detection? Bachelor's thesis (Studienarbeit), Karlsruher Institut für Technologie, October 2015.
- [26] J. R. Ullmann. An algorithm for subgraph isomorphism. *Journal of the Association for Computing Machinery*, 23(1):31–42, 1976.
- [27] D. J. Watts and S. H. Strogatz. Collective dynamics of "small-world" networks. *Nature*, 393:440–442, 1998.
- [28] E. S. Wolk. A note on "The comparability graph of a tree". *Proceedings* of the American Mathematical Society, 16:17–20, 1965.
- [29] Wayne Zachary. An information flow model for conflict and fission in small groups. *Journal of Anthropological Research*, 33:452–473, 1977.