

# Teoria da Computação

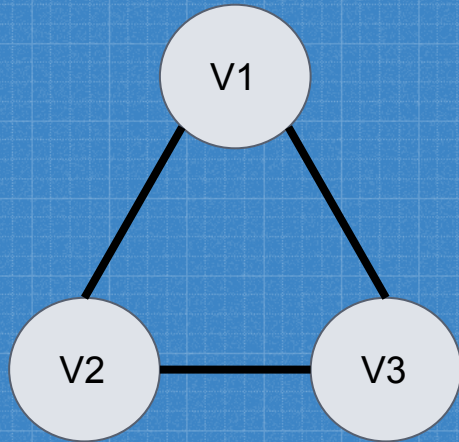
## Trabalho NP-Compleitude

### Isomorfismo de subgrafos

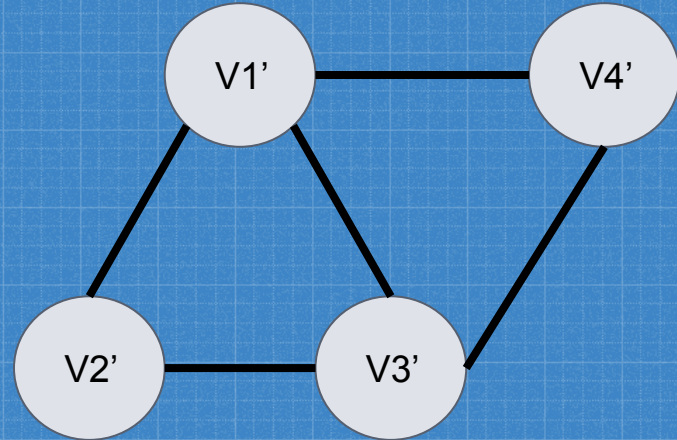
Antonio Luiz Weingartner Junior e  
Nicolas Elias Sant'Ana



# O que é o problema de isomorfismo em um subgrafo?



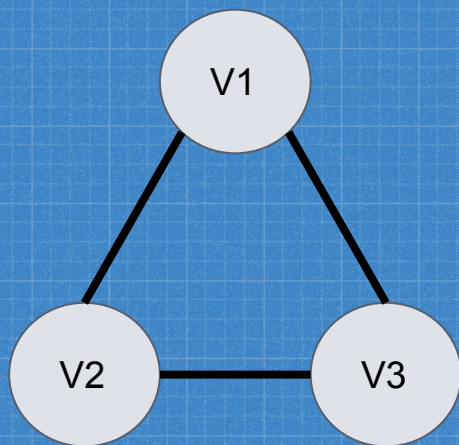
**Grafo G1**



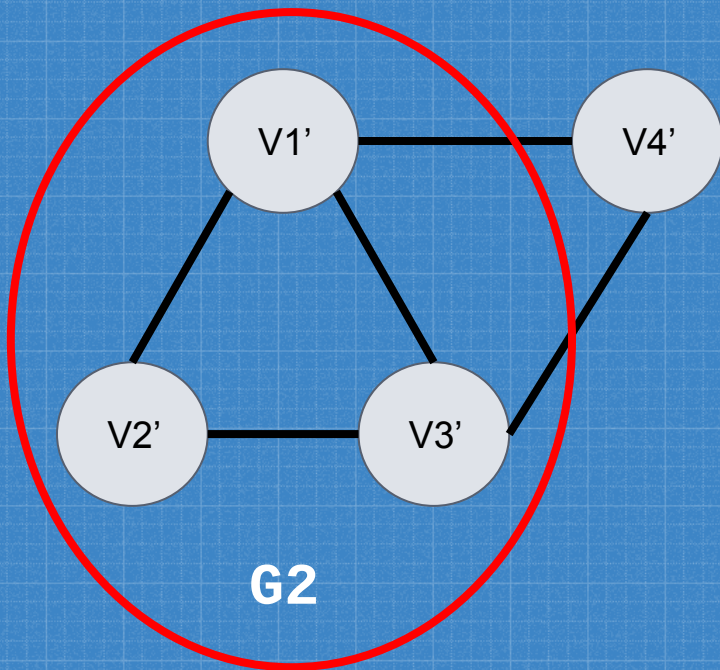
**Grafo G2**



É determinar se existe algum subgrafo em  $G_2$  que seja isomórfico a  $G_1$



$G_1$



$G_2$



# O que é um grafo isomorfo a outro?

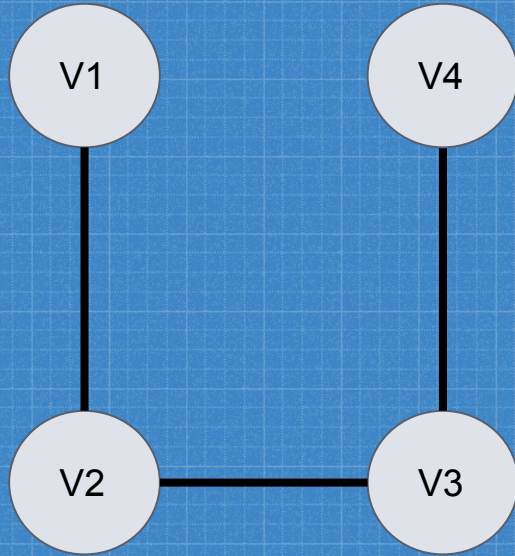
É quando podemos dizer que o arranjo de um grafo  $G_1$  é igual ao grafo  $G_2$ , em outras palavras conseguimos para cada par de vértices unidos por uma aresta em  $G_1$ , conseguimos mapear com uma bijeção de 1 para 1 no grafo  $G_2$ .

Dizemos que um grafo  $G_1(V_1, E_1)$  é isomórfico ao grafo  $G_2(V_2, E_2)$  sse:

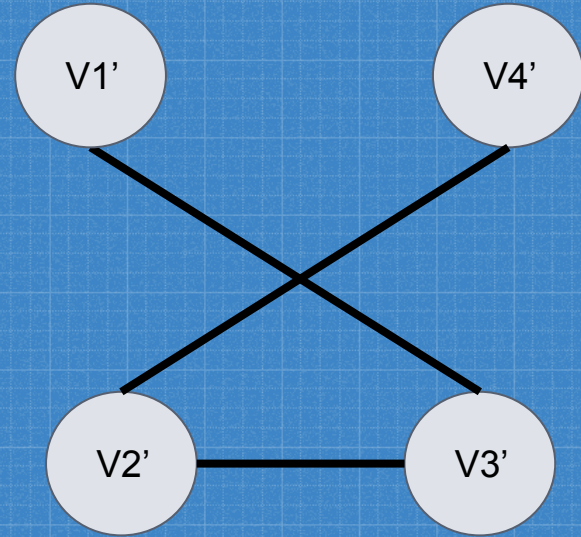
- $\exists f: V_1 \rightarrow V_2$  tal que  $f$  é bijetora
- $\exists g: E_1 \rightarrow E_2$  tal que  $g$  é bijetora



# Exemplo



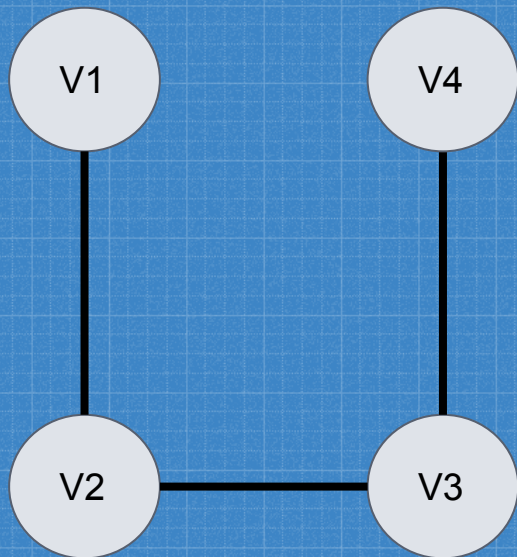
**G1**



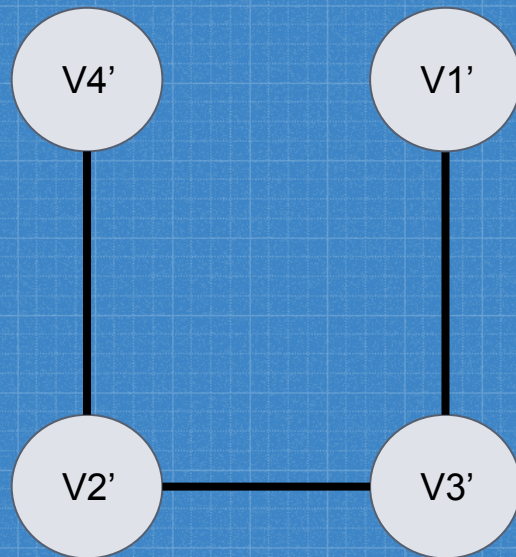
**G2**



Os dois grafos possuem a mesma estrutura



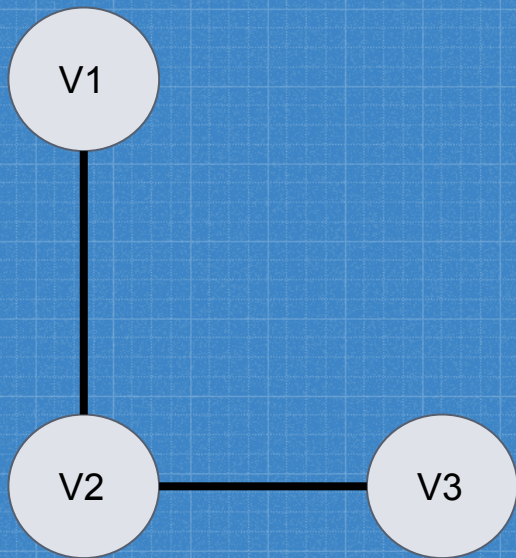
**G1**



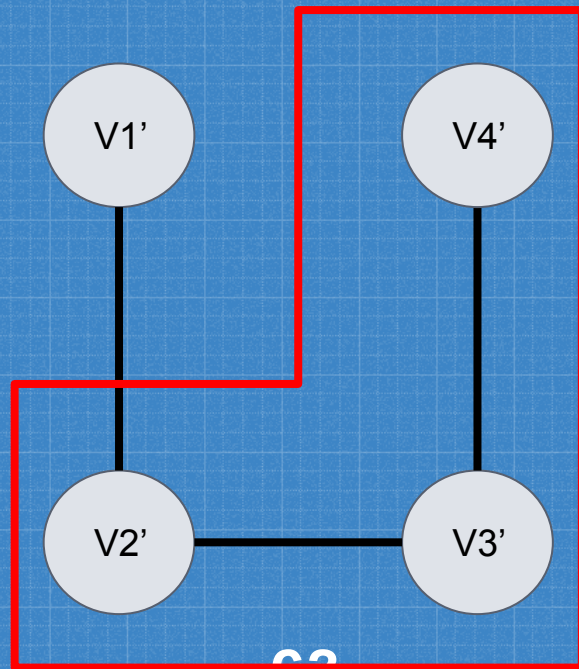
**G2**



A ideia é a mesma, mas um subgrafo de  $V, E$  pertencentes a  $G_2$



$G_1$



$G_2$



# Quais são as aplicações?

Bonnici et al. BMC Bioinformatics 2013, 14(Suppl 7):S13  
<http://www.biomedcentral.com/1471-2105/14/S7/S13>



## RESEARCH

## Open Access

### A subgraph isomorphism algorithm and its application to biochemical data

Vincenzo Bonnici<sup>1†</sup>, Rosalba Giugno<sup>2\*†</sup>, Alfredo Pulvirenti<sup>2</sup>, Dennis Shasha<sup>3</sup>, Alfredo Ferro<sup>2</sup>

From Ninth Annual Meeting of the Italian Society of Bioinformatics (BITS)  
Catania, Sicily. 2-4 May 2012

#### Abstract

**Background:** Graphs can represent biological networks at the molecular, protein, or species level. An important query is to find all matches of a pattern graph to a target graph. Accomplishing this is inherently difficult (NP-complete) and the efficiency of heuristic algorithms for the problem may depend upon the input graphs. The common aim of existing algorithms is to eliminate unsuccessful mappings as early as and as inexpensively as possible.

**Results:** We propose a new subgraph isomorphism algorithm which applies a search strategy to significantly reduce the search space without using any complex pruning rules or domain reduction procedures. We compare our method with the most recent and efficient subgraph isomorphism algorithms (VFlib, LAD, and our C++ implementation of FocusSearch which was originally distributed in Modula2) on synthetic, molecules, and interaction networks data. We show a significant reduction in the running time of our approach compared with these other excellent methods and show that our algorithm scales well as memory demands increase.

**Conclusions:** Subgraph isomorphism algorithms are intensively used by biochemical tools. Our analysis gives a comprehensive comparison of different software approaches to subgraph isomorphism highlighting their weaknesses and strengths. This will help researchers make a rational choice among methods depending on their application. We also distribute an open-source package including our system and our own C++ implementation of FocusSearch together with all the used datasets (<http://ferrolab.dmi.unict.it/ri.html>). In future work, our findings may be extended to approximate subgraph isomorphism algorithms.

- Algoritmos de isomorfismo de subgrafos são muito utilizados em ferramentas bioquímicas para realizar pesquisas de sub estruturas moleculares.



# Quais são as aplicações?

- Também utilizado em inteligência artificial, realizando casamento de padrões em grafos, conhecido como mineração de grafos

Journal of Graph Algorithms and Applications

<http://www.cs.brown.edu/publications/jgaa/>

vol. 3, no. 3, pp. 1-27 (1999)

## Subgraph Isomorphism in Planar Graphs and Related Problems

David Eppstein

Department of Information and Computer Science  
University of California, Irvine  
<http://www.ics.uci.edu/~eppstein/>  
eppstein@ics.uci.edu

### Abstract

We solve the subgraph isomorphism problem in planar graphs in linear time, for any pattern of constant size. Our results are based on a technique of partitioning the planar graph into pieces of small tree-width, and applying dynamic programming within each piece. The same methods can be used to solve other planar graph problems including connectivity, diameter, girth, induced subgraph isomorphism, and shortest paths.

Communicated by Roberto Tamassia: submitted December 1995, revised November 1999.

D. Eppstein, *Planar Subgraph Isomorphism*, JGAA, 3(3) 1-27 (1999)

11

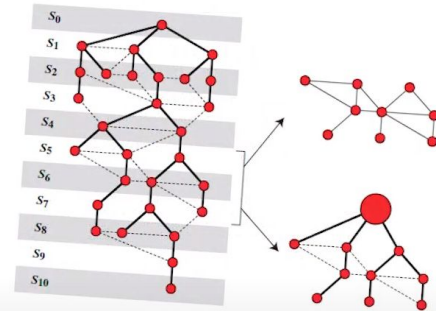


Figure 4: Planar graph with breadth first spanning tree (heavy edges), partition into layers  $S_i$ , subgraph  $G_i$  (for  $w = 3$ ,  $i = 5$ ), and minor  $G'_i$  (with large supervertex and contracted breadth first spanning tree).

all the vertices with distance at least  $i + w$ .  $G'_i$  is a minor of the planar graph  $G$  and is therefore also planar. Then similarly collapsing a breadth first spanning tree of  $G$  gives a spanning tree of  $G'_i$  with depth at most  $w$ , so  $G'_i$  has a tree decomposition with width at most  $3w$ , in which each node of the decomposition includes the collapsed supervertex in its label.  $G_i$  is formed by deleting this most  $3w - 1$  by removing the supervertex from the decomposition of  $G'_i$  with width at most  $3w - 1$ . Next, we need to show that any connected subgraph of  $G_i$  is a subgraph of  $G'_i$ .



# Idéia de Prova

$S = \{ \langle G1, G2 \rangle \mid G1 \text{ É isomorfo a um subgrafo de } G2 \}$

1. Demonstrar que  $S$  pertence à classe NP.
2. Reduzir polinomialmente o problema do clique para  $S$ .



# MTND que decide S em tempo polinomial

M = Entrada(  $\langle G1, G2 \rangle$ , onde G1 e G2 são grafos ):

1. Calcule a quantidade de nós no G1.
2. De forma não-determinística, selecione um subgrafo G3 de G2 com n vértices.
3. Verifique se G3 é isomórfico no G1.
4. Se sim, aceite, caso contrário, rejeite



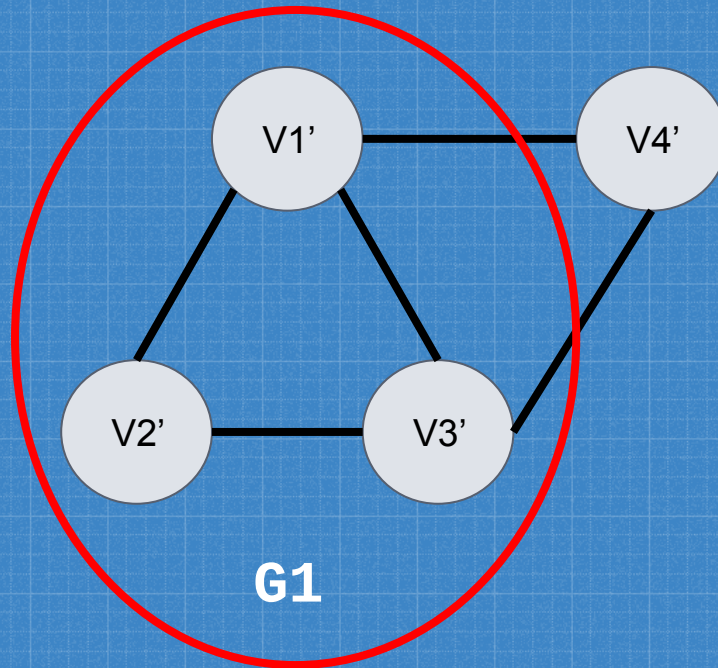
# Problema do Clique

- Clique =  $\{ \langle G, k \rangle \mid G \text{ é um grafo não-dirigido com uma clique de } k \text{ nós} \}$
- Consiste em encontrar um subgrafo completo em um grafo  $G$ .
- É um problema NP-Completo.



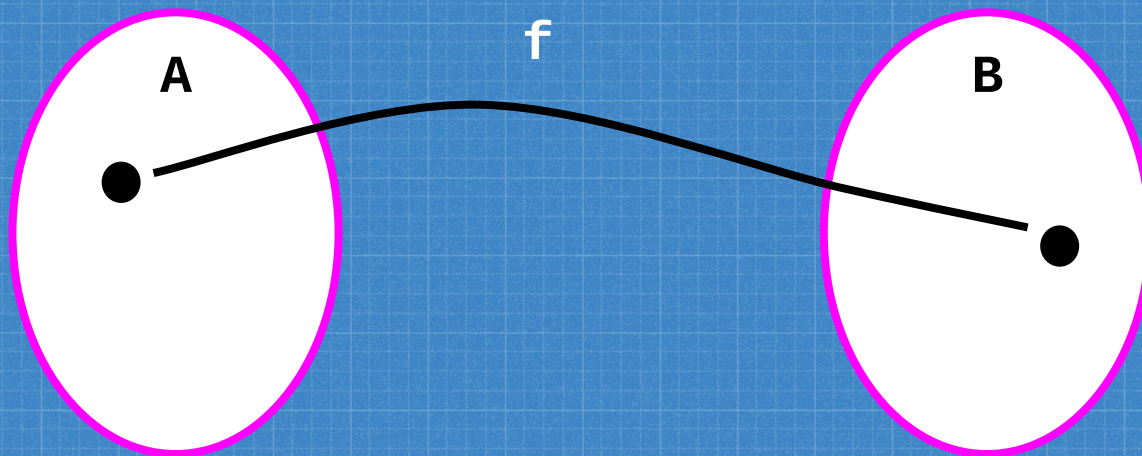
# Problema do Clique

Exemplo:





# Redução clique para isomorfismo de subgrafos



$W$  está em Clique sse  $f(w)$  está em Isomorfismo de subgrafos. Em outras palavras, se uma entrada está em A ela deve estar em B.



## Redução

- Uma instância do problema do clique é  $\langle G, k \rangle$  (Criar uma máquina redutora que transforma o clique em uma instância de S).
- Construir uma tupla de grafos  $\langle G_1, G_2 \rangle$ , de forma que  $G_1$  seja o grafo completo de  $k$  vértices e  $G_2$ , seja o  $G$ , onde  $G_1$  e  $G_2$  são entradas para o problema S (isomorfismo em subgrafos). O  $k$  do clique seria utilizado para criar um novo grafo completo com  $K$  nós (equivalente à entrada  $G_1$  de S), e o próprio  $G$  seria o  $G_2$  do problema S.
- O tempo gasto para criar o  $G_1$  é  $O(k^2)$ .

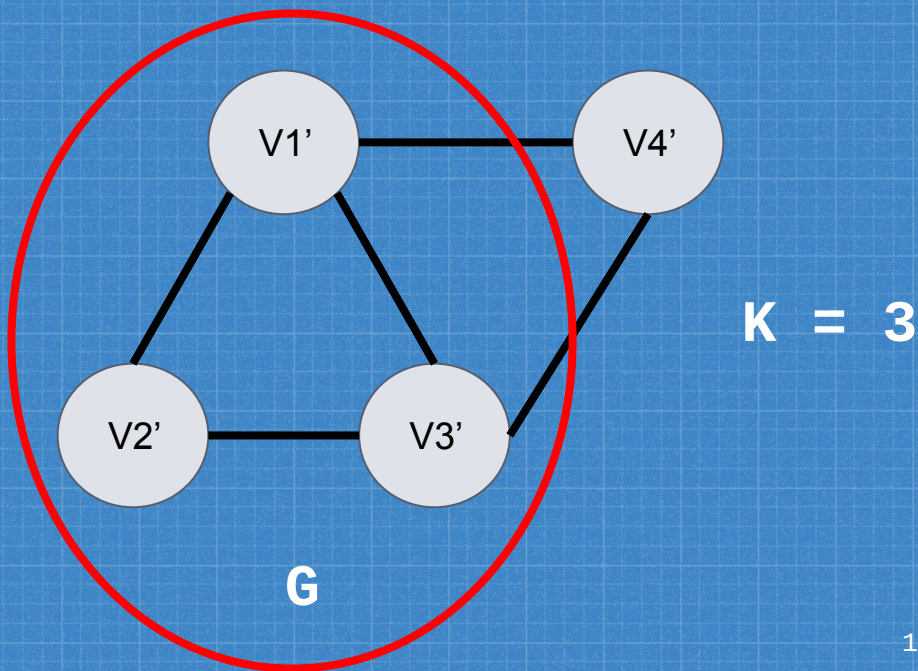


## Redução

- Se  $w$  está em clique, então  $f(w)$  está em  $S$
- 1. Se  $w$  está em clique, então o grafo  $G$  possui uma clique de tamanho  $k$
- 2. Se  $G$  possui uma clique de tamanho  $k$ ,  $G$  possui um subgrafo completo de  $k$  nós
- 3. Uma vez que  $G_1$  é um subgrafo de  $G_2$  e todo grafo é isomórfico a si mesmo,  $f(w)$  está em  $S$

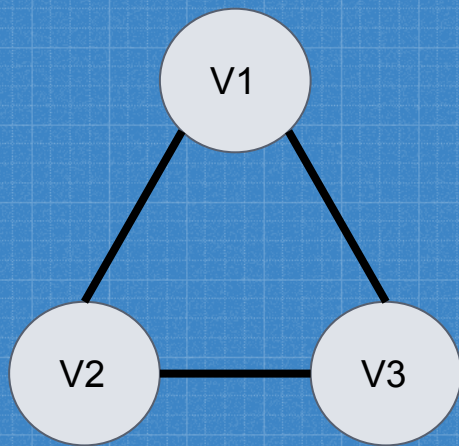


1. Se  $w$  está em clique, então o grafo  $G$  possui uma clique de tamanho  $k$
2. Se  $G$  possui uma clique de tamanho  $k$ ,  $G$  possui um subgrafo completo de  $k$  nós

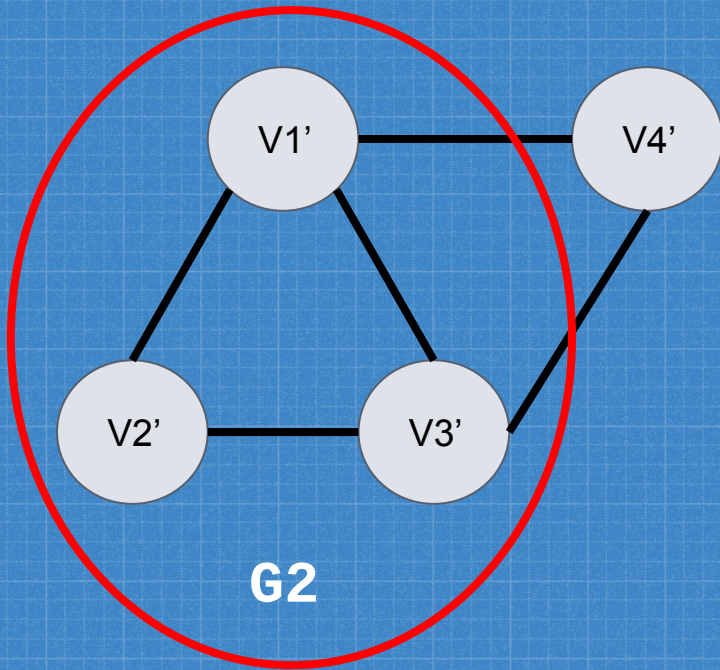




1. Uma vez que  $G1$  é um subgrafo de  $G2$  formado por  $k$  nós de um clique, e todo grafo é isomórfico a si mesmo,  $f(w)$  está em  $S$



**G1**



**G2**



## Conclusão

Concluimos que:

- Se  $w$  está em clique, então  $f(w)$  está em Isomorfismo de subgrafos
- Logo o problema de Isomorfismo em subgrafos é **NP-Completo**



# Referencias

- Wikipedia Problema do isomorfismo de subgrafos:  
[https://pt.wikipedia.org/wiki/Problema do isomorfismo de subgrafos](https://pt.wikipedia.org/wiki/Problema_do_isomorfismo_de_subgrafos)
- 
- YouTube Prova que Subgraph Isomorphism é NP-Complete:  
<https://www.youtube.com/watch?v=Sxg9Ib9vL2k&t=194s>
- YouTube O problema do isomorfismo:  
<https://www.youtube.com/watch?v=7rCes066jq8>