Fakulteta za informacijske študije
Faculty of information studies

Kreativno jedro: Simulacije
Creative core: Simulations

Kampus šola HPC 2014

MaxClique

Algoritem za iskanje največje klike

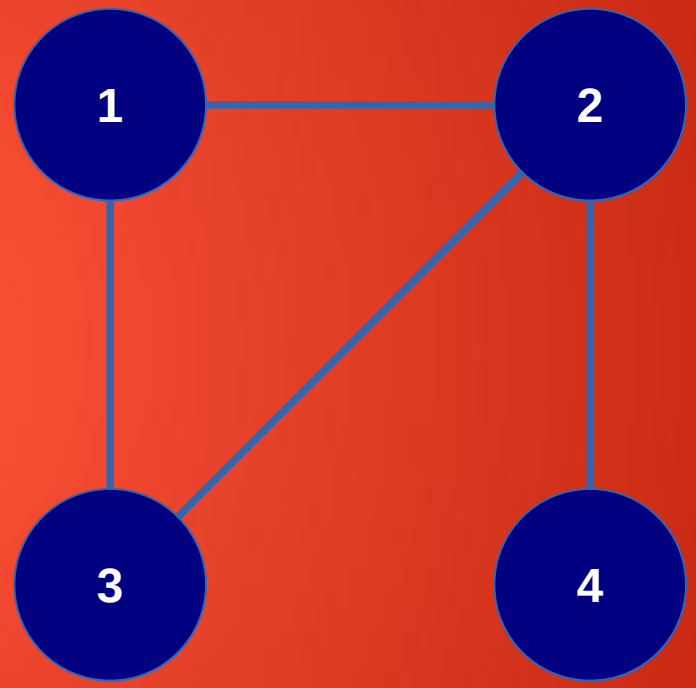
Matjaž Depolli
Odsek za komunikacijske sisteme
Inštitut „Jožef Stefan“

Naložba v vašo prihodnost
OPERACIJO DELNO FINANCIRA EVROPSKA UNIJA
Evropski sklad za regionalni razvoj

REPUBLIKA SLOVENIJA
MINISTRSTVO ZA IZOBRAŽEVANJE, ZNANOST IN ŠPORT

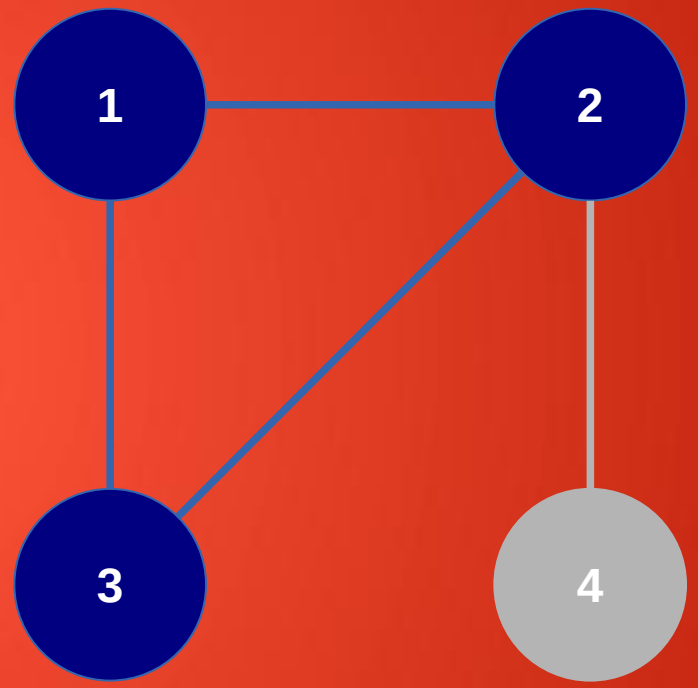
Klika

- Graf = <V, E>
  V so vozlišča (Vertices)
  E so povezave (Edges)
- V = {1, 2, 3, 4}
- E = {(1,2), (1,3), (2,3), (2,4)}
- Klika = polno povezan graf
- Induciran podgraf =
  vzamemo del vozlišč in vse
  povezave med temi vozlišči



Največja klika

- Induciran podgraf nad vozlišči {1, 2, 3}
- Algoritem za iskanje največje klike poišče največji podgraf, ki je polno povezan
- Vedno najde le enega



Osnovni algoritem največje klike

- $<V_{max}, E_{max}>$ je trenutno najdena največja klika
  - Na začetku sta V_{max} in E_{max} prazni množici
- Za vse možne V_1, kjer:
  V_1 = podmnožica vozlišč V
  E_1 = iz V_1 inducirana množica robov E
  - Preveri če je $<V_1, E_1>$ poln graf in $|V_1| > |V_{max}|$
    - če ni, pojdi dalje
    - če je, potem $<V_{max}, E_{max}> = <V_1, E_1>$

Kombinatorična eksplozija

- Potenčna množica P(V) je množica vseh podmnožic V
- $|P(V)| = 2^{|V|}$
- Osnovni (naivni) algoritem največje klike mora pregledati vse podmnožice V, torej vse elemente P(V)
  - Njegova kompleksnost je torej vsaj $O(2^n)$; n=|V|
  - Če ima graf 100 vozlišč, potem mora algoritem preveriti ~$1x10^{30}$ podgrafov
- NP-poln problem

Razveji in omeji algoritmi

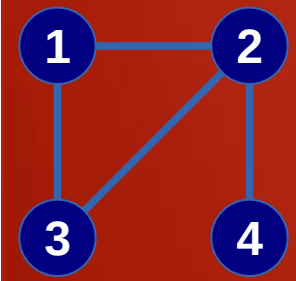
- 'Branch and bound'
- Algoritmi za obvladovanje kombinatorične eksplozije pri preiskovanju drevesa
- Z dodatnim znanjem se omeji področje iskanja
- Sestavljajo jih dve glavni funkciji
  - Razveji – trenutno stanje iskanja razcepi v več vej
    Spremeni prostor iskanja v preiskovalno drevo
  - Omeji – veji določi meje iskane količine
    omogoča rezanje vej in določanje vrstnega reda preiskovanja

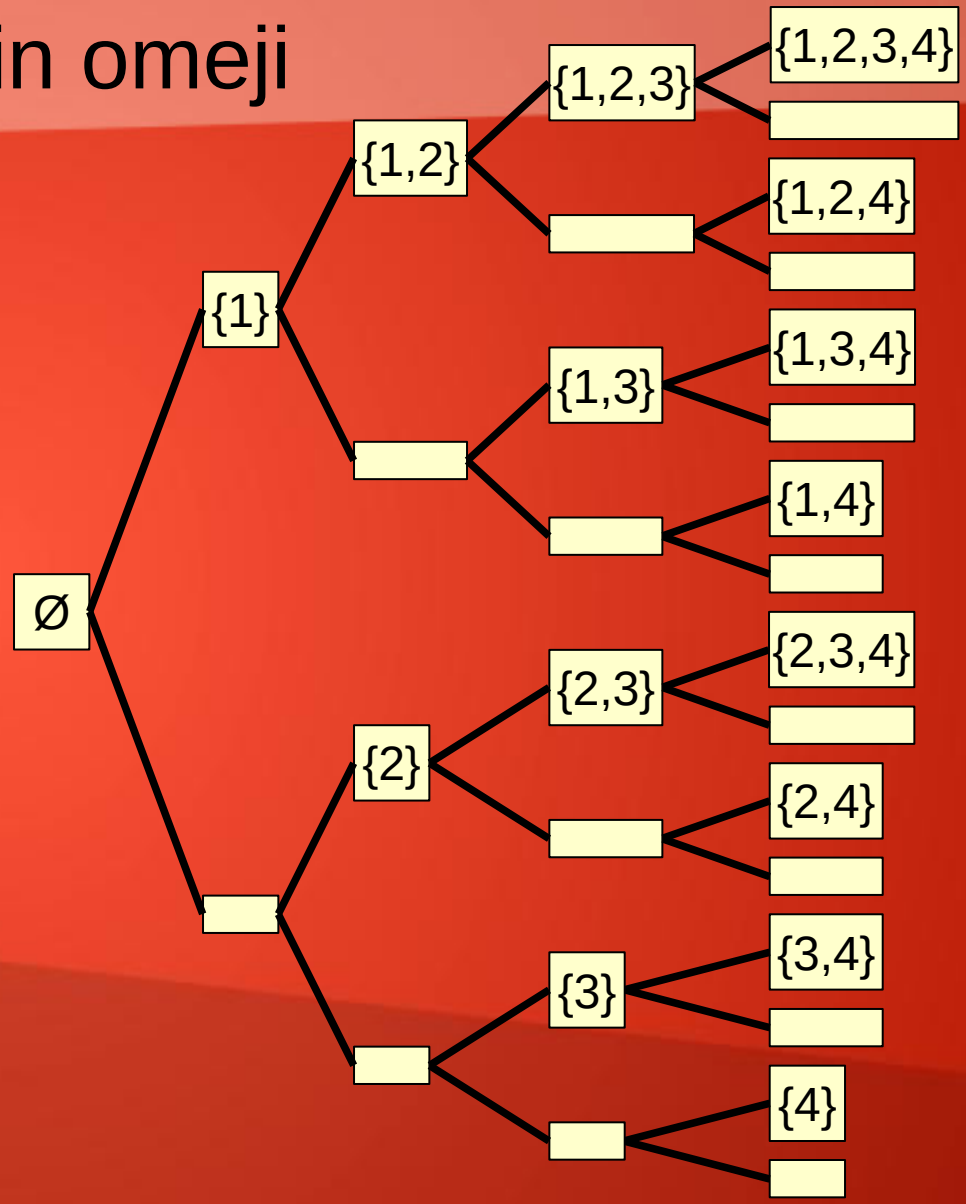
Razveji in omeji največjo kliko

- Trenutno stanje:
  - Trenutna klika
  - Množica preostalih vozlišč
  - Največja do sedaj najdena klika
- Razveji:
  - Vzame prvo vozlišče iz množice preostalih vozlišč in naredi dve novi stanji:
    - Eno, kjer vozlišče doda trenutni kliki
    - Eno, kjer trenutna klika ostane enaka, vozlišče se le odstrani iz preiskave
- Omeji:
  - Če je velikost klike, ki lahko nastane iz trenutnega stanja + preostalih vozlišč ≤ velikosti največje že najdene klike, potem zaustavi preiskovanje trenutne veje

Razveji in omeji

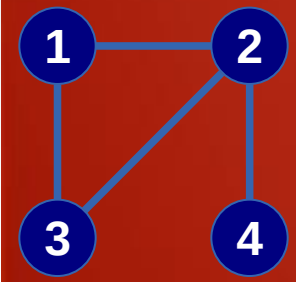
- Osnovno preiskovalno drevo za algoritem največje klike
- Število korakov = 16
  $|V| = 4$; $2^4=16$

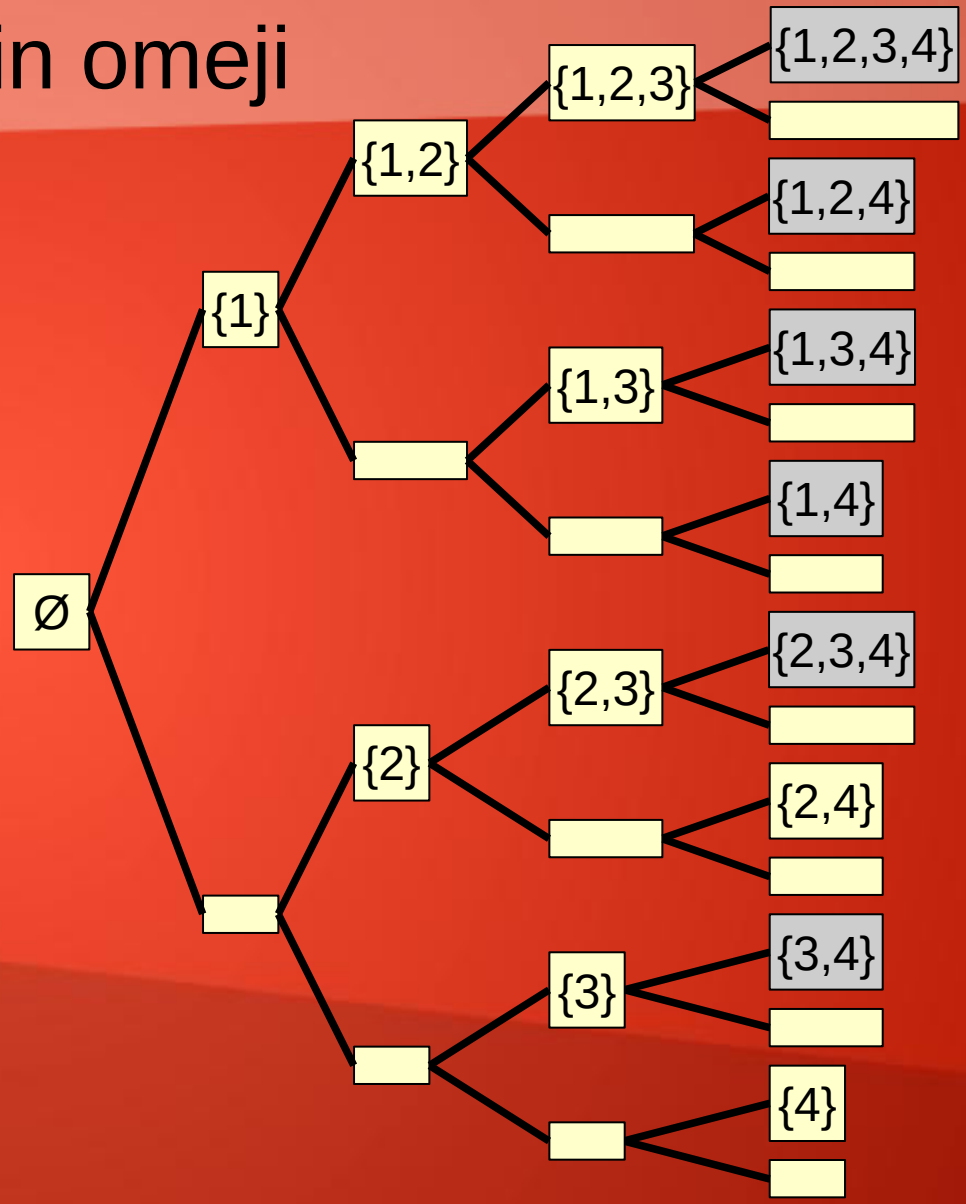




Razveji in omeji

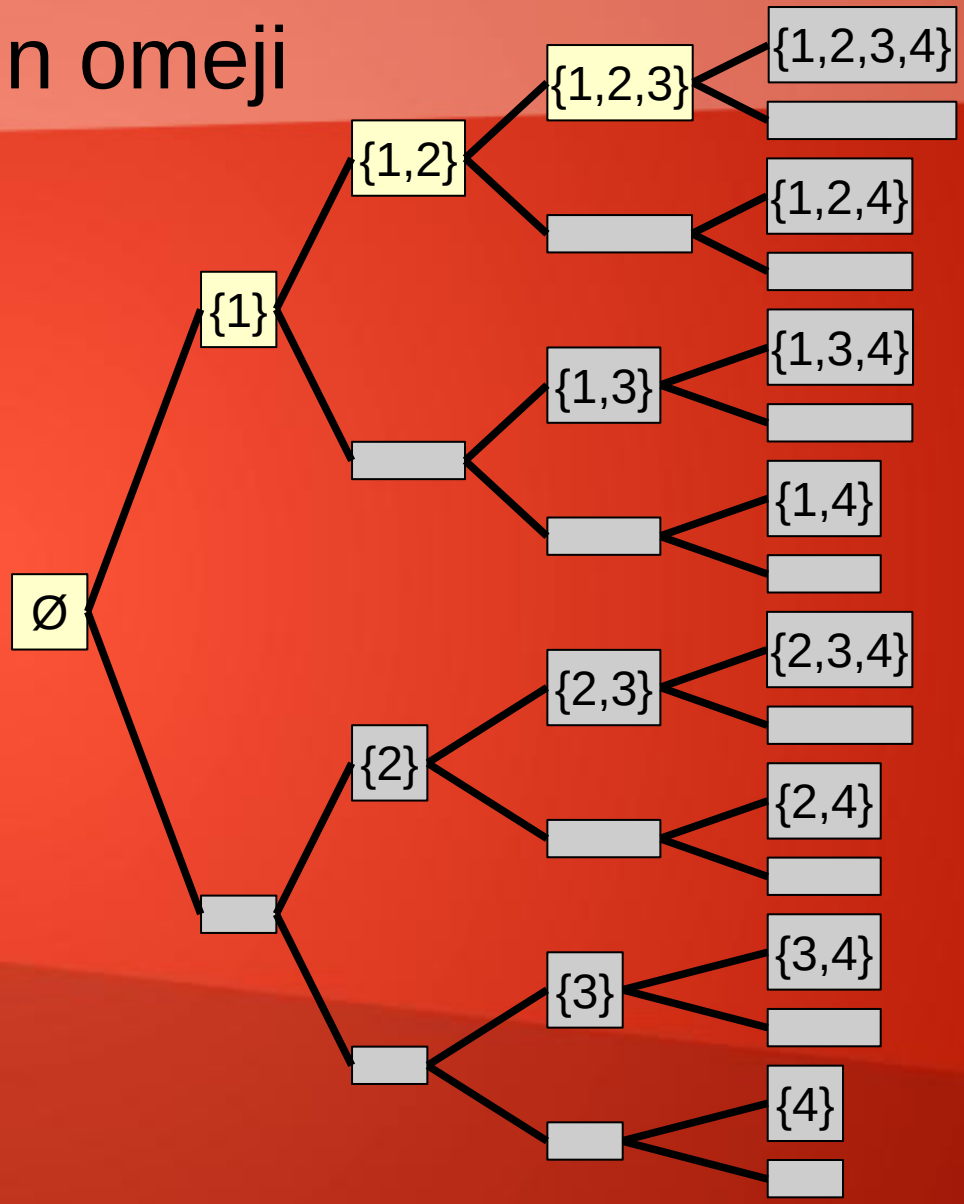
- Uporabimo znanje o povezavah
- Če med trenutno množico vozlišč in naslednjim vozliščem ni povezave, potem se vejo odreže
- Število korakov = 10

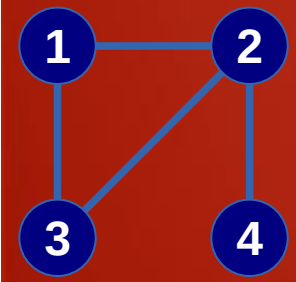




Razveji in omeji

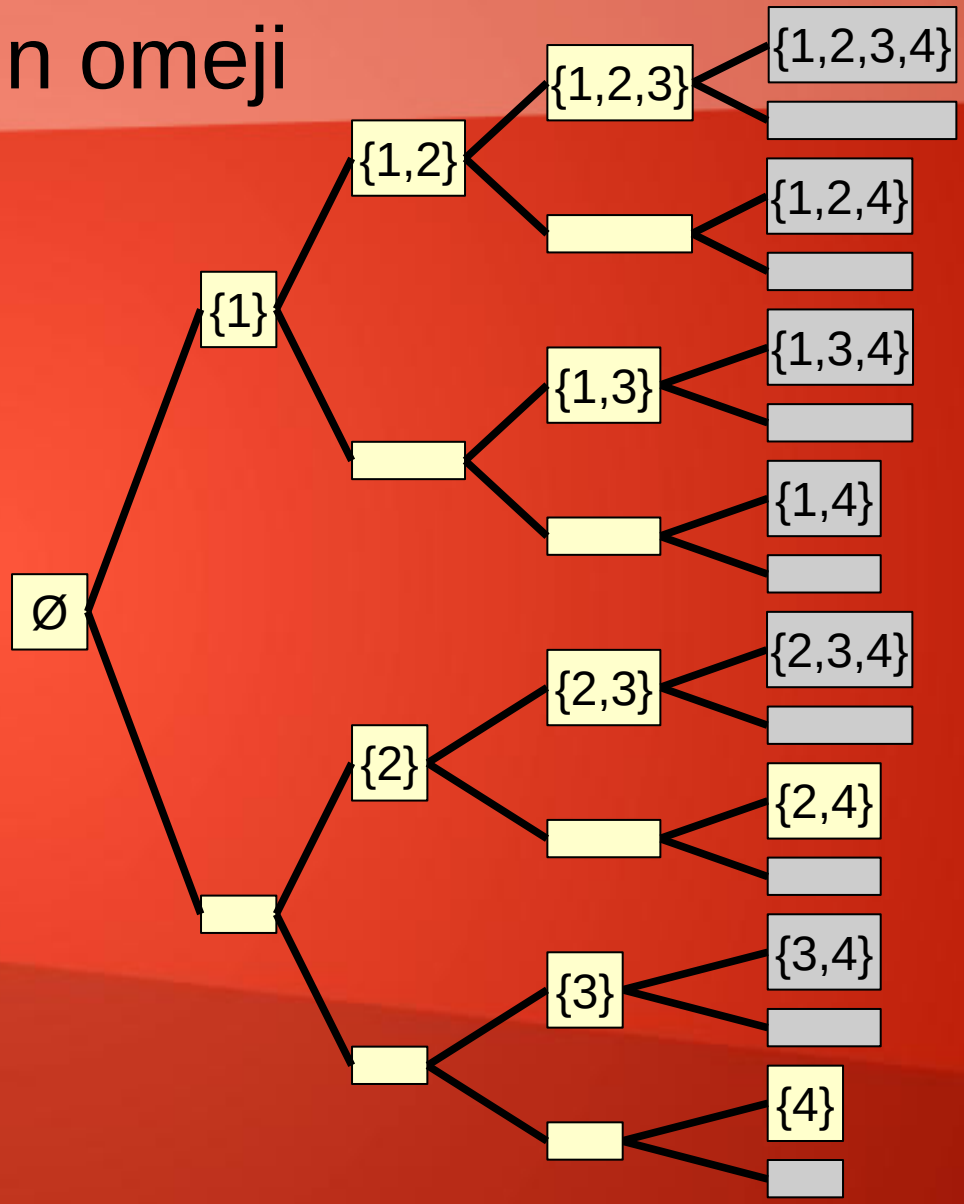
- Uporabimo znanje o številu preostalih vozlišč in trenutni velikosti klike
- Če v veji ni možno najti večje klike od že najdene, se vejo odreže
- Število korakov = 4

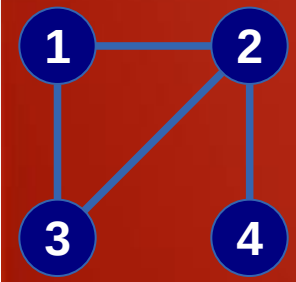




Razveji in omeji

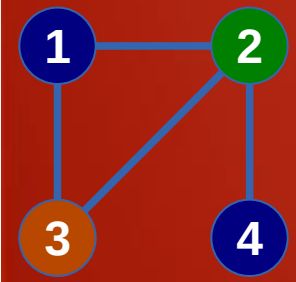
- Veliko je možnosti za vrstni red preiskave
- Število korakov = 10





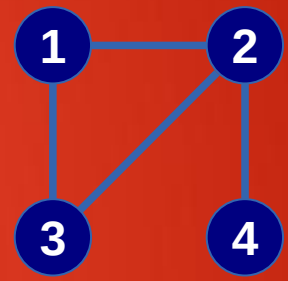
Dodamo kanček hevristik

- Vozlišča se pred začetkom sortira po njihovi stopnji
  - Stopnja vozlišča = število povezav na to vozlišče
  - Iz primera: $D_2=4$, $D_1=3$, $D_3=3$, $D_4=1$
- Izboljša se oceno o največji možni kliki trenutne veje z barvanjem vozlišč
  - Število barv predstavlja zgornjo mejo za velikost klike
  - Barvanje je sicer tudi NP-poln problem
  - Obstaja požrešni algoritem ki vrne približen (sub-optimalen) rezultat; časovna kompleksnost je $O(n^2)$



Prva vzporednost

- Množice vozlišč predstavimo kot bitne množice
  {} = [0000]
  {1} = [1000]
  {2} = [0100]
  ...
  {1,2,3,4} = [1111]

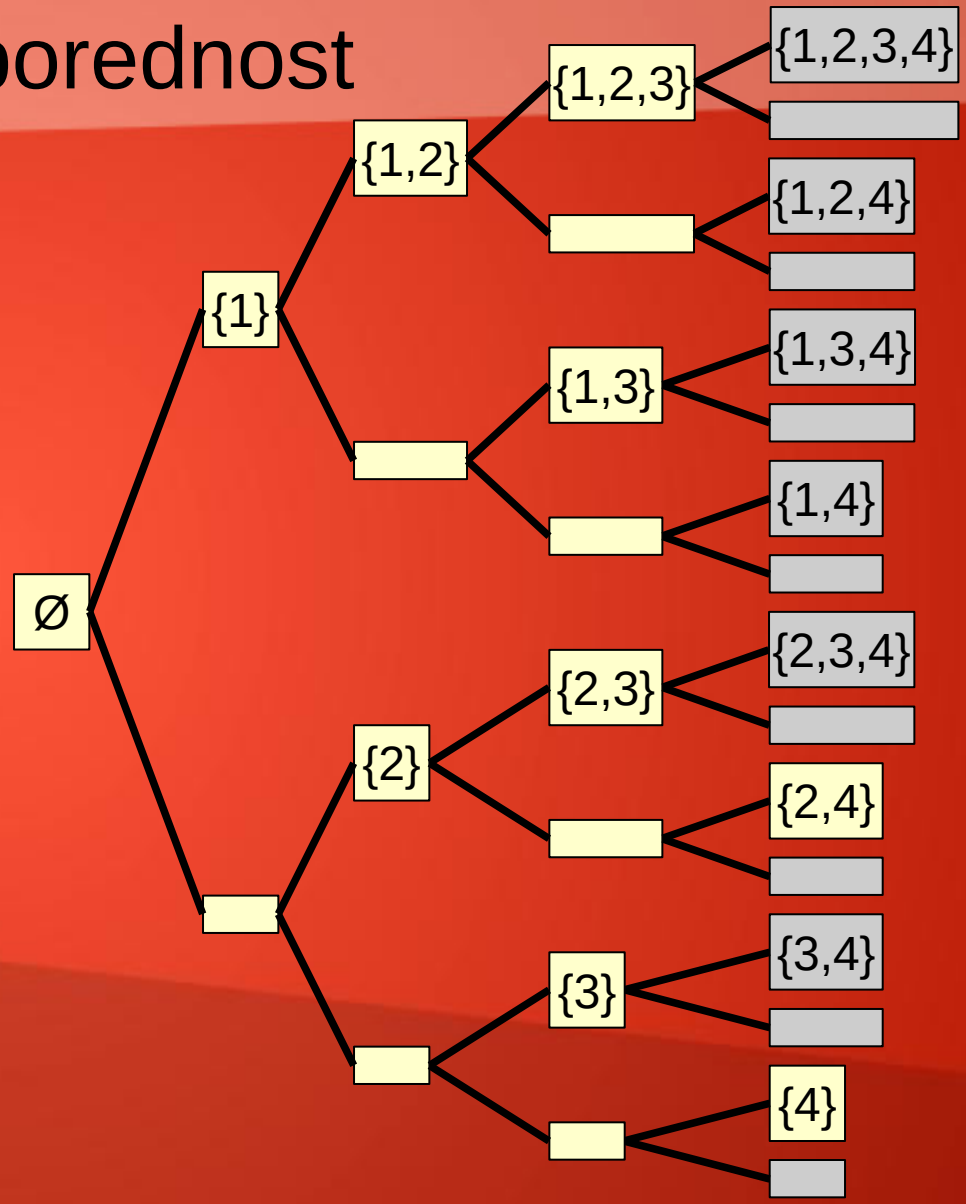


- Povezanost vozlišč predstavimo kot bitne množice
  1: {(1,2),(1,3)}: [0110]
  2: {(1,2),(2,3)}: [1010]
- Rezanje vej je izvedeno kot logični IN med povezanostjo dveh vozlišč:
  [0110] in [1010] = [0010]
- Izkoriščamo strojne logične operacije nad 64-bitnimi operandi

Druga vzporednost

Paralelizacija z nitmi

- Prva nit je glavna in začne izvajanje
- Vsako 'polno' vejo dobi v pregled druga nit (do max št. niti)
- Ko niti zmanjka dela, si vzame novo vejo iz spiska še nedodeljenih polnih vej
- Komunikacija preko dveh globalnih spremenljivk
- Drevo mora biti veliko, da se taka delitev izplača

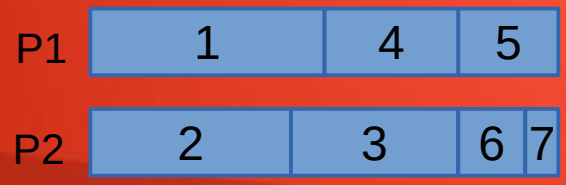


Niti, sinhronizacija

- Slabosti vzporednega algoritma
  - En proces mora prevzeti glavno vlogo in imeti pregled nad iskanjem
  - Globalna spremenljivka – velikost največje že najdene klike
  - Ena veja je lahko bolj zahtevna kot vse ostale skupaj
  - Nepredvidljivost
- Prednosti vzporednega algoritma
  - Več vzporedno preizkovanih vej lahko pozitivno spremeni potek preiskovanja
  - Zelo malo komunikacije

Učinkovitost algoritma

- Zelo malo sinhronizacije zaradi zaščitenih spremenljivk
- Avtomatski load-balancing
  - Vej je toliko kot vozlišč (razmeroma dobro razdrobljen problem)
  - Veje (poddrevesa) se deli od največjih do najmanjše

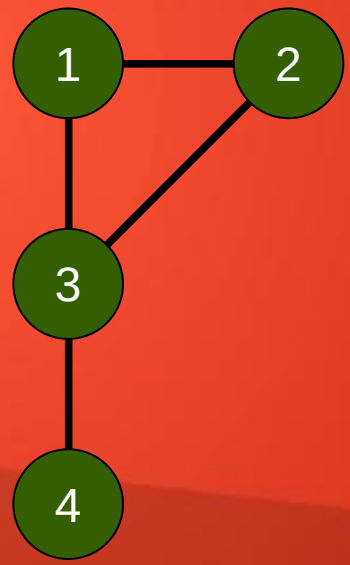


- Popolnoma neodvisni podproblemi
- Enostavnost

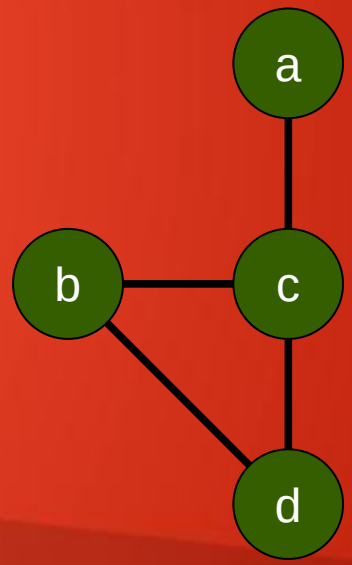
Primer uporabe

- Dva grafa
  - Npr: dve molekuli
- Ali sta grafa ekvivalentna, oziroma, kako podobna sta si?

4 == a
1 == b
(2 == b



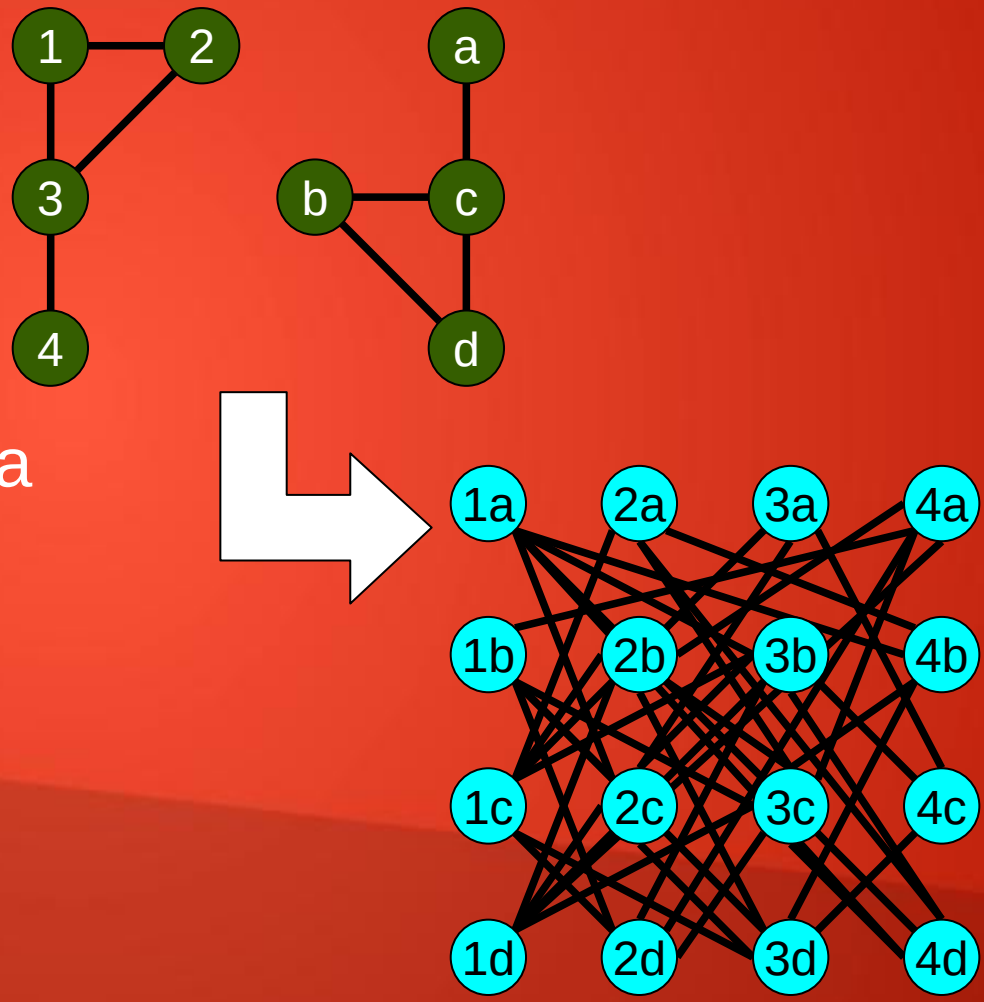
3 == c
2 == d
1 == d)



Primer uporabe

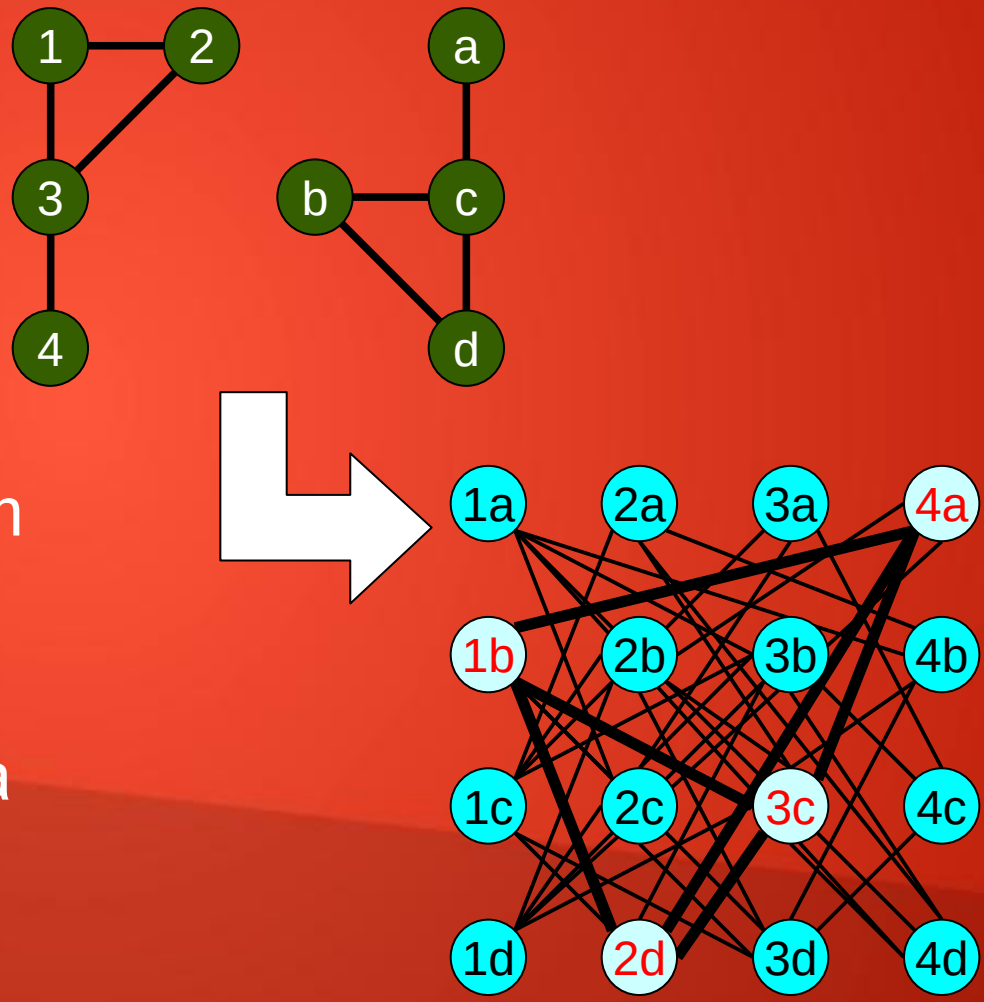
Produktni graf

- Vozlišča so kombinacije vozlišč vhodnih grafov
- Povezave so tam, kjer so ekvivalentno povezana vozlišča vhodnih grafov



Primer uporabe

Produktni graf



- Vsaka klika v produktnem grafu predstavlja ekvivalentne podgrafe
- Največja klika predstavlja najboljšo preslikavo med grafoma