

# Algorithms and Experiments for Parameterized Approaches to Hard Graph Problems

Falk Hüffner

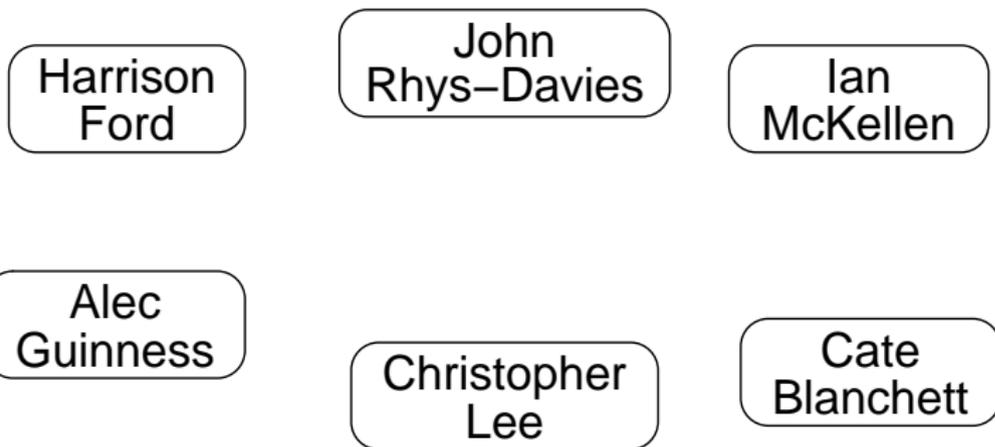
Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Institut für Informatik

19. Dezember 2007

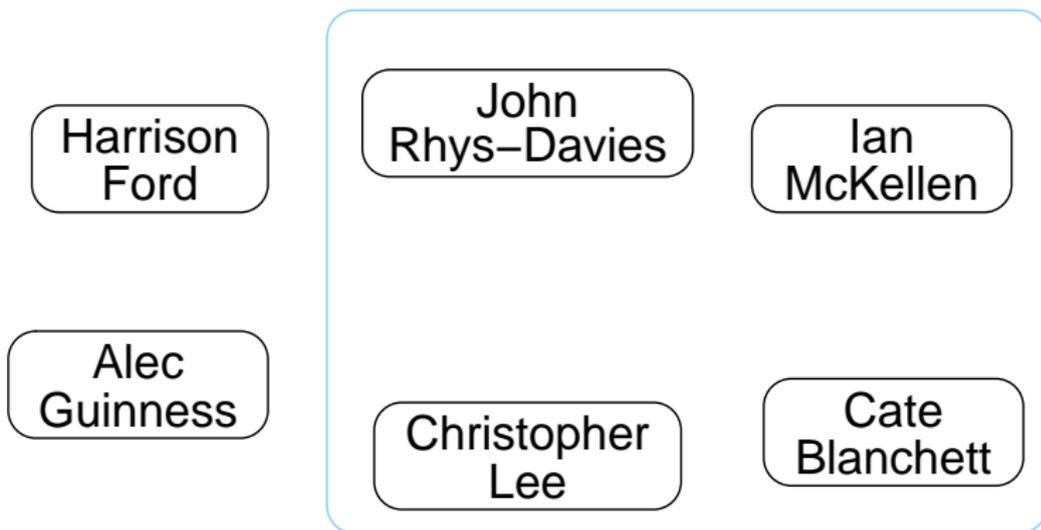
# Übersicht

- Datenreduktion
  - CLIQUE COVER
- Iterative Kompression
  - CLUSTER VERTEX DELETION
  - BALANCED SUBGRAPH
- Farbkodierung
  - MINIMUM-WEIGHT PATH

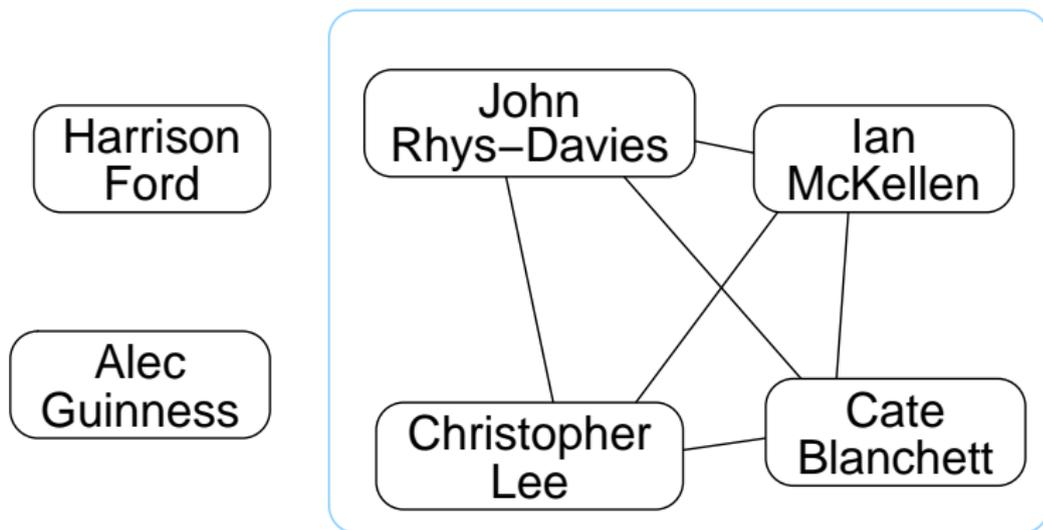
# Schauspieler-Graph



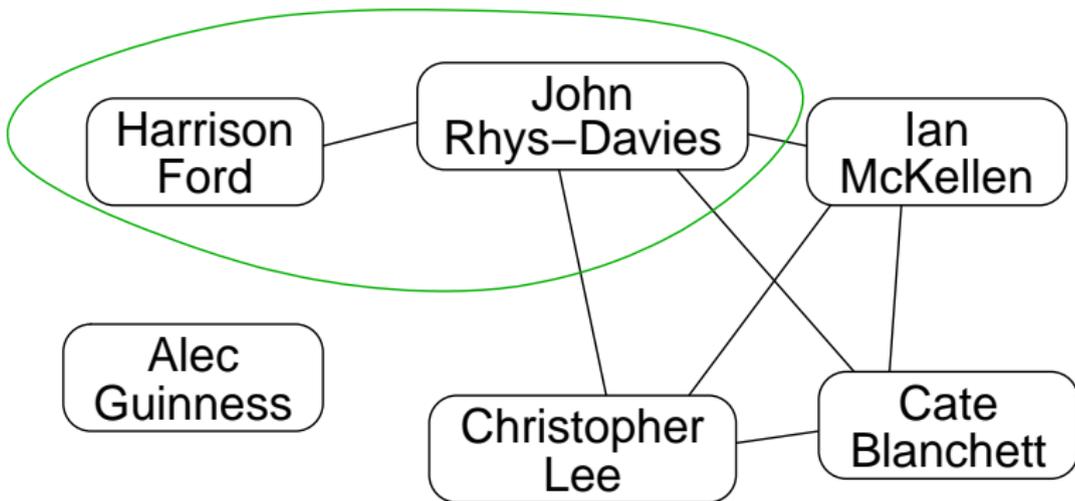
# Schauspieler-Graph



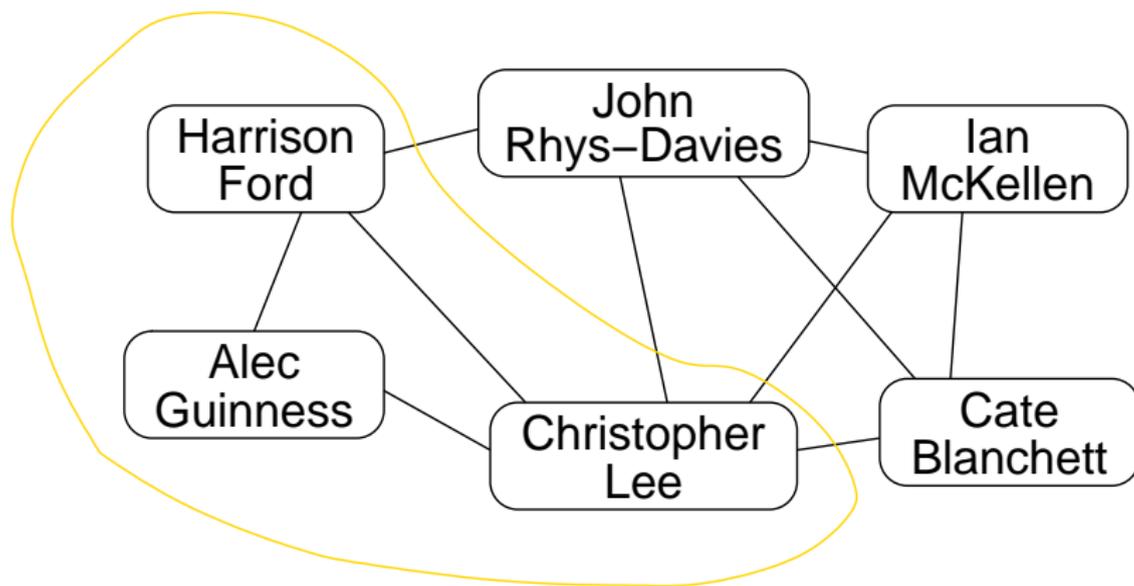
# Schauspieler-Graph



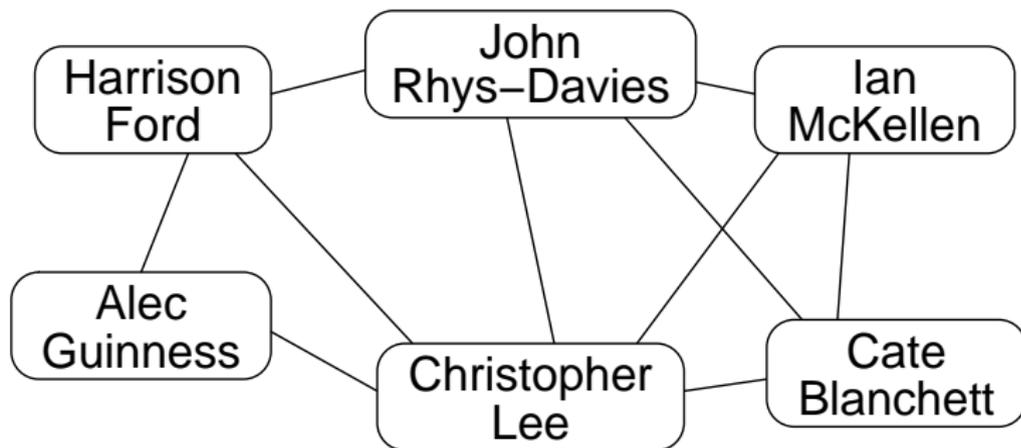
# Schauspieler-Graph



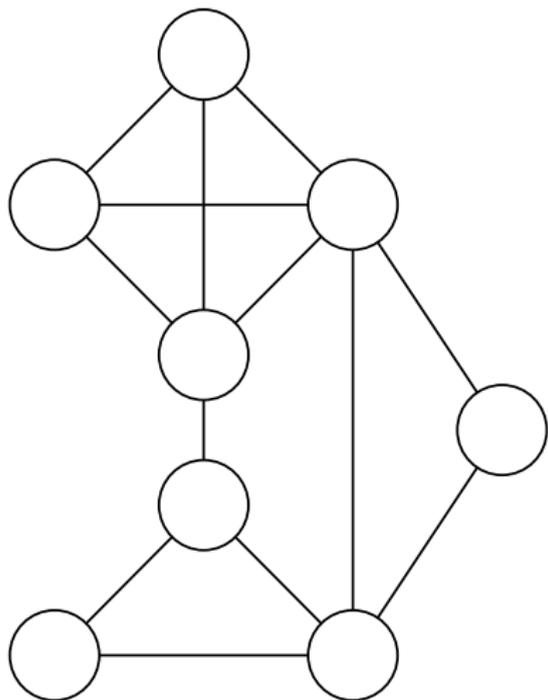
# Schauspieler-Graph



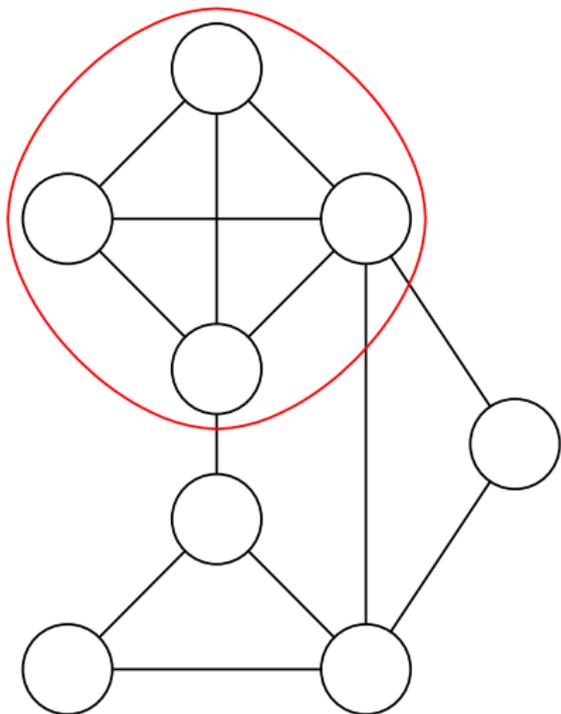
# Schauspieler-Graph



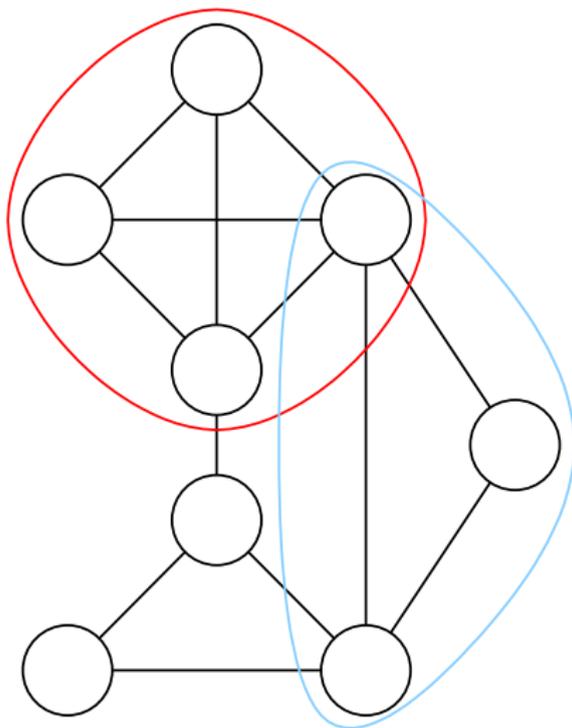
# Clique Cover



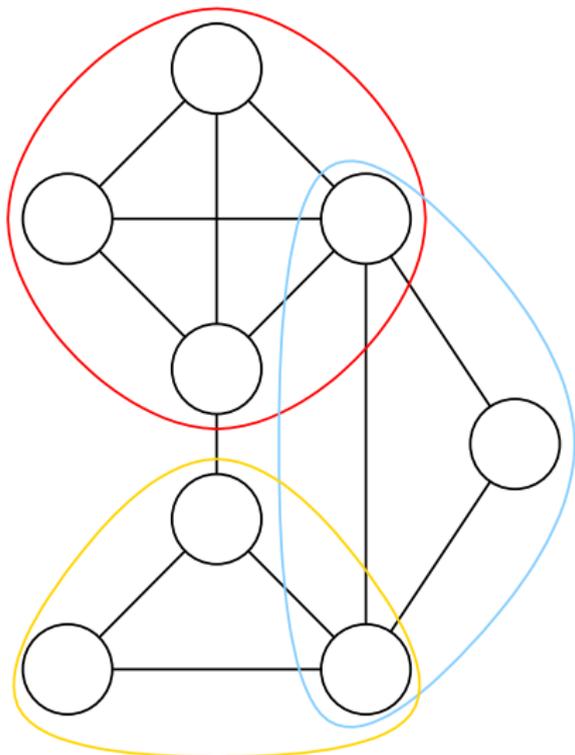
# Clique Cover



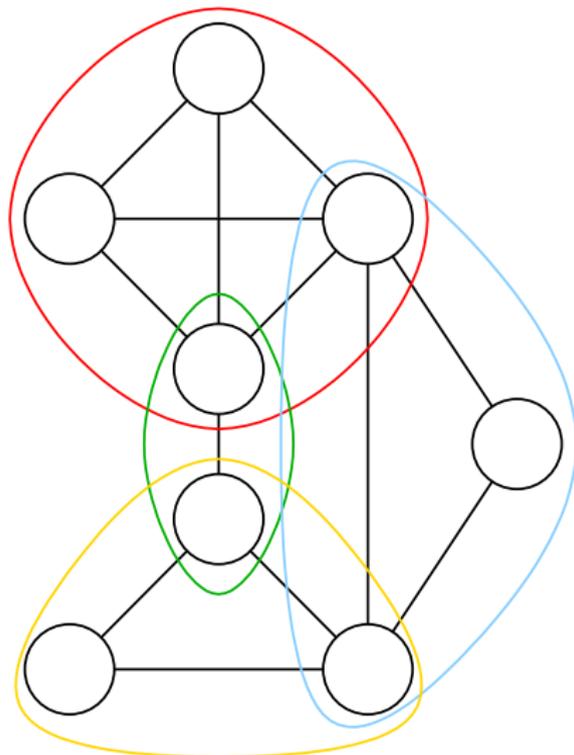
# Clique Cover



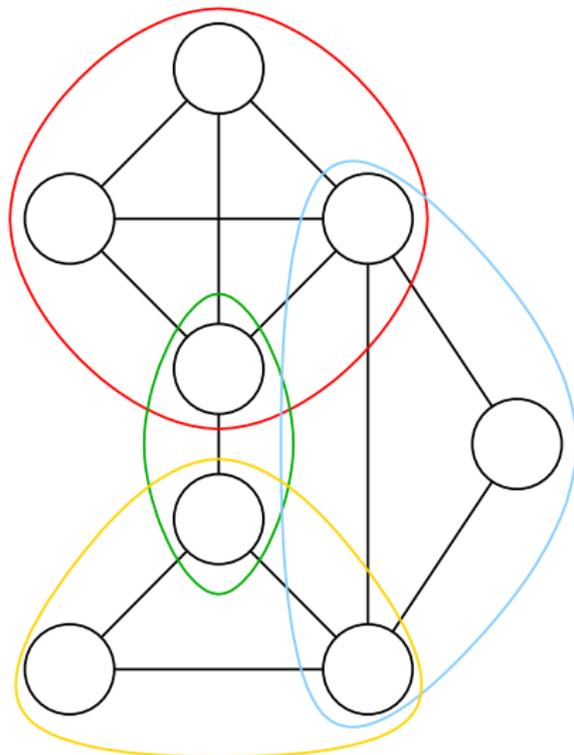
# Clique Cover



# Clique Cover



# Clique Cover



**CLIQUE COVER**

**Eingabe:** Ein ungerichteter Graph  $G = (V, E)$ .

**Aufgabe:** Finde eine kleinstmögliche Zahl  $k$  von Cliques, sodass jede Kante in mindestens einer Clique enthalten ist.

# Clique Cover

## Anwendungen

- Compiler-Optimierung,
- geometrische Berechnungsprobleme,
- Statistik-Visualisierung, ...

# Clique Cover

## Anwendungen

- Compiler-Optimierung,
- geometrische Berechnungsprobleme,
- Statistik-Visualisierung, ...

Theorem ([KELLERMAN, IBM Tech. Discl. Bull., 1973])

CLIQUE COVER ist *NP-schwer*.

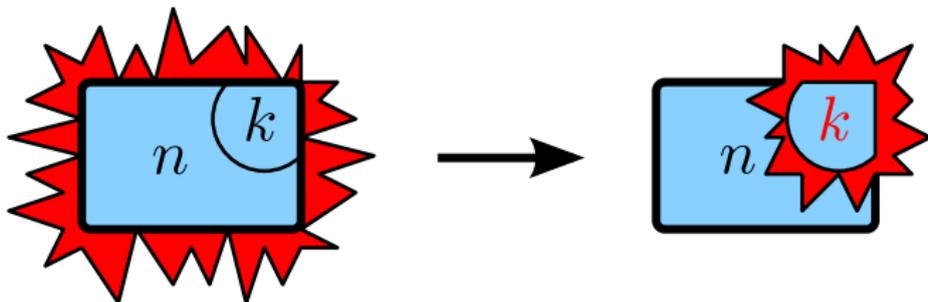
# NP-schwere Probleme

- In der theoretischen Informatik wird „effizient lösbar“ mit „in polynomiell beschränkter Zeit lösbar“ gleichgesetzt.
- Für keines der tausenden bekannten NP-schweren Probleme ist ein effizienter Lösungsalgorithmus bekannt.
- Vermutung: es gibt keine effizienten Lösungsalgorithmen!

# Parametrisierte Komplexität

Idee: Zweidimensionale Sichtweise

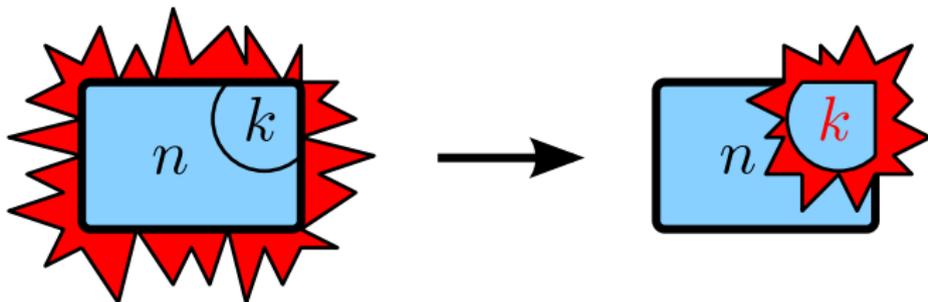
Zusätzlich zur Eingabegröße  $n$  betrachte einen Parameter  $k$ .



# Parametrisierte Komplexität

Idee: Zweidimensionale Sichtweise

Zusätzlich zur Eingabegröße  $n$  betrachte einen Parameter  $k$ .



## Definition

Ein Problem ist *festparameter-handhabbar*, wenn eine Instanz der Größe  $n$  in Zeit  $f(k) \cdot n^{O(1)}$  gelöst werden kann.

# Einfache Datenreduktionsregeln für Clique Cover

## Regel 1

Lösche isolierte Knoten.

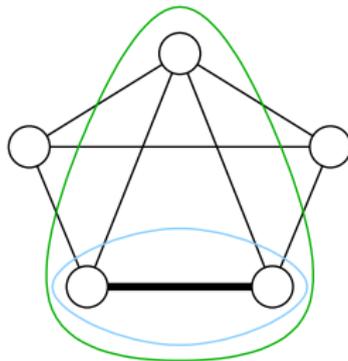
# Einfache Datenreduktionsregeln für Clique Cover

## Regel 1

Lösche isolierte Knoten.

## Regel 2

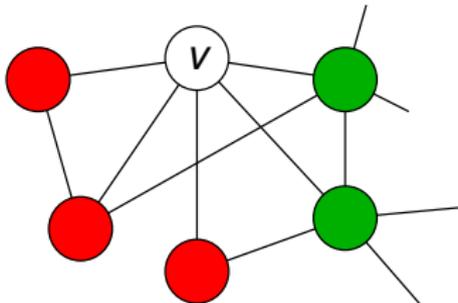
Wenn eine Kante  $\{u, v\}$  nur in genau einer maximalen Clique  $C$  enthalten ist, dann füge  $C$  zur Lösung hinzu.



# Gefangene/Ausgänge-Reduktionsregel für Clique Cover

Partitioniere die Nachbarschaft eines Knoten  $v$  in:

- **Gefangene**  $p$  mit  $N(p) \subseteq N(v)$  und
- **Ausgänge**  $x$  mit  $N(x) \setminus N(v) \neq \emptyset$ .



## Regel 3

Wenn alle **Ausgänge** mindestens einen **Gefangenen** als Nachbarn haben, dann lösche  $v$ .

# Festparameter-Handhabbarkeit von Clique Cover

## Theorem

*Nach Anwendung aller Reduktionsregeln hat die CLIQUE COVER-Instanz höchstens  $2^k$  Knoten, d. h. CLIQUE COVER hat einen **Problemkern**.*

# Festparameter-Handhabbarkeit von Clique Cover

## Theorem

*Nach Anwendung aller Reduktionsregeln hat die CLIQUE COVER-Instanz höchstens  $2^k$  Knoten, d. h. CLIQUE COVER hat einen **Problemkern**.*

## Korroloar

CLIQUE COVER ist **festparameter-handhabbar** bezüglich des Parameters  $k$ .

# Clique Cover-Experimente

## Getreideertragsdaten

Alle Testinstanzen mit bis zu 124 Knoten und 4 847 Kanten wurden in  $< 1$  s gelöst.

# Clique Cover-Experimente

## Getreideertragsdaten

Alle Testinstanzen mit bis zu 124 Knoten und 4 847 Kanten wurden in  $< 1$  s gelöst.

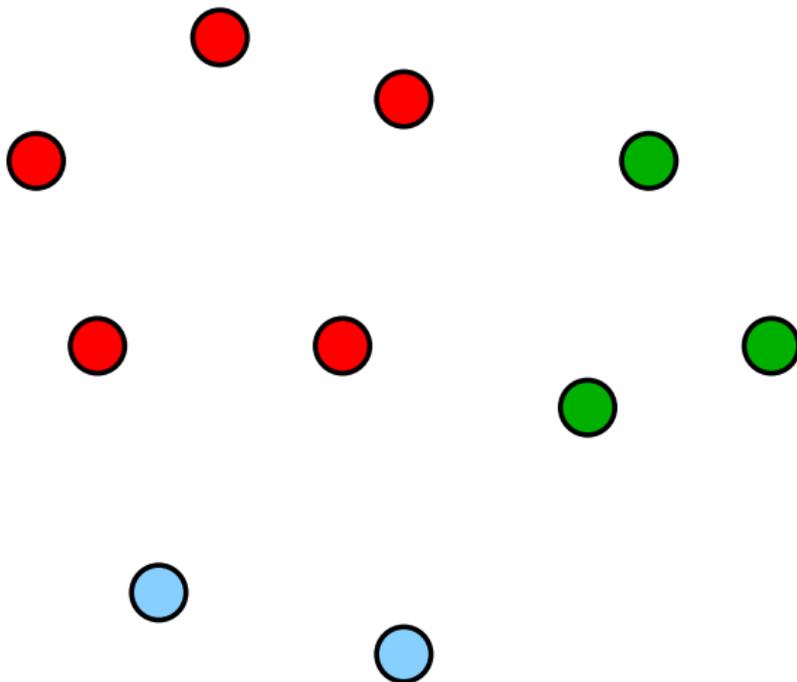
## Simulierte Getreideertragsdaten

Unter 20 Sekunden für bis zu 300 Knoten.

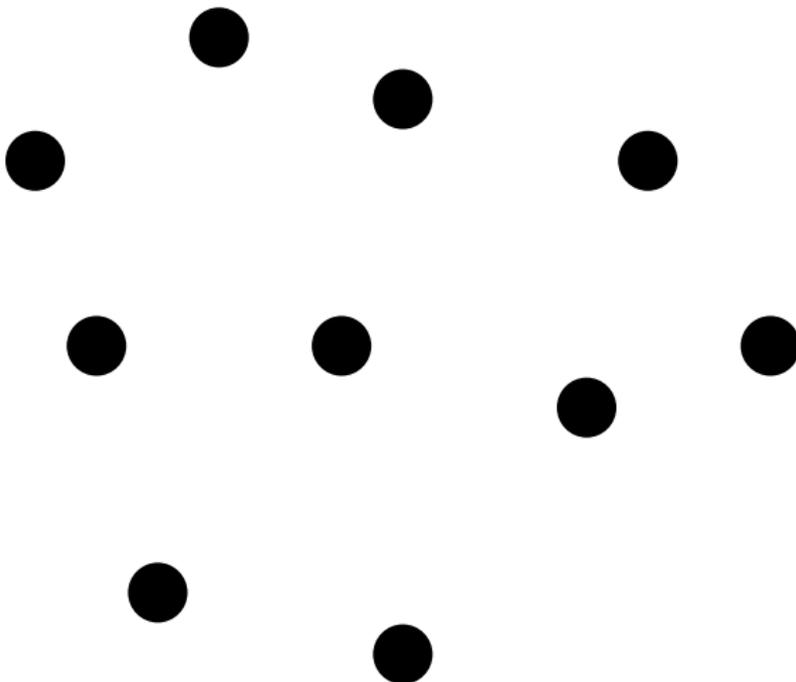
## Zufallsgraphen

Für Graphen mit wenigen Kanten ( $m \approx n \ln n$ ): 10 000 Knoten in 7 min gelöst, die meisten allein durch die Datenreduktion.

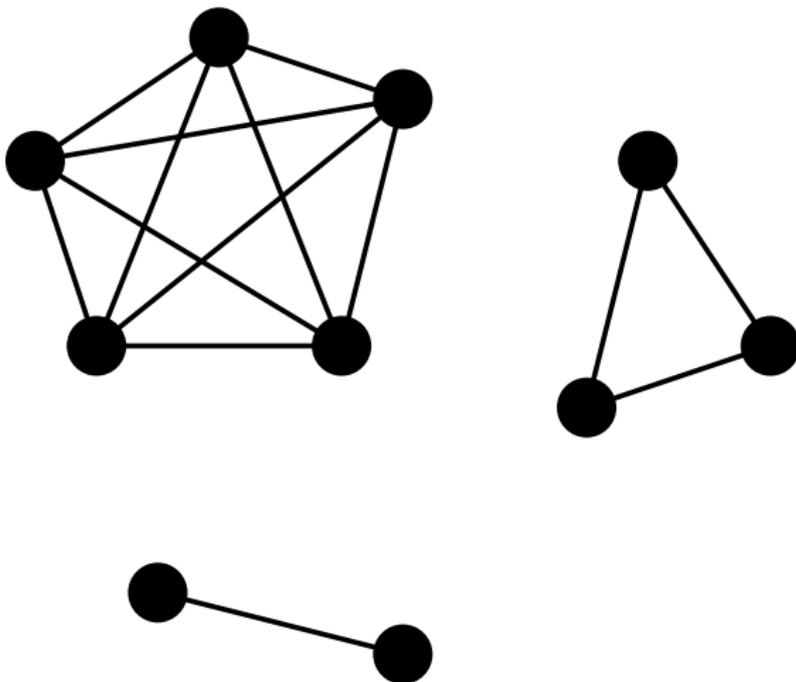
# Cluster Vertex Deletion



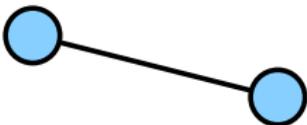
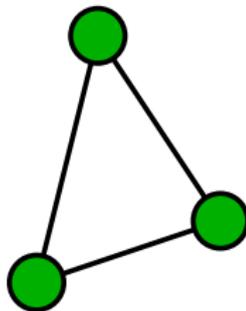
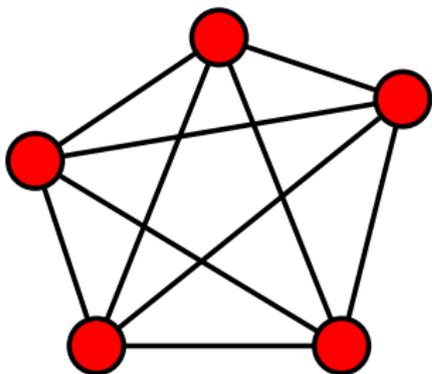
# Cluster Vertex Deletion



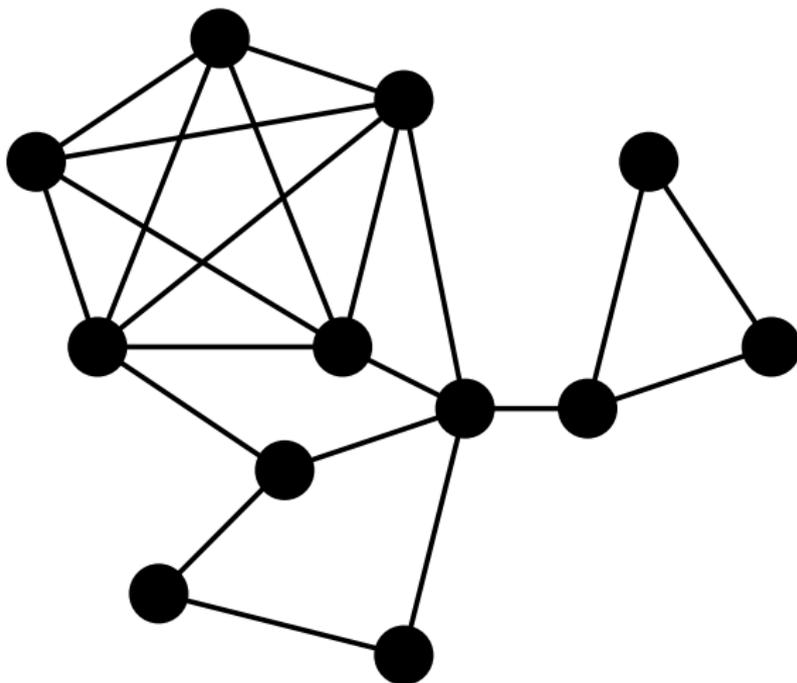
# Cluster Vertex Deletion



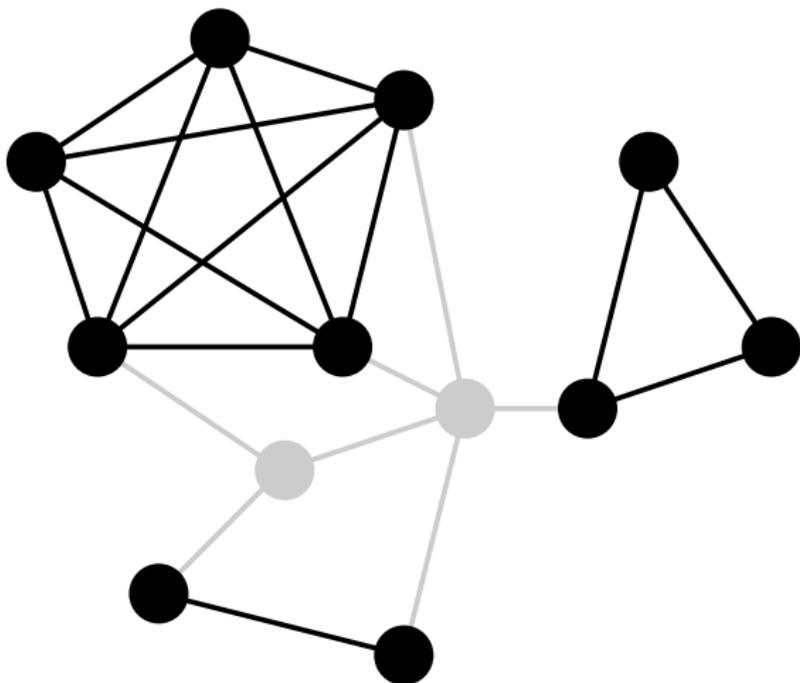
# Cluster Vertex Deletion



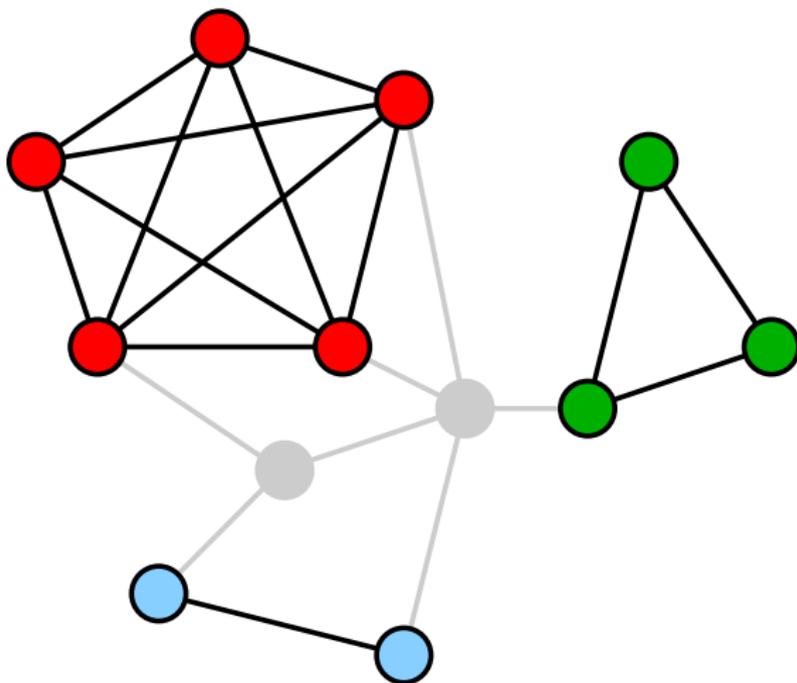
# Cluster Vertex Deletion



# Cluster Vertex Deletion



# Cluster Vertex Deletion



# Cluster Vertex Deletion

## Cluster Vertex Deletion

**Eingabe:** Ein ungerichteter Graph  $G = (V, E)$ .

**Aufgabe:** Lösche eine kleinstmögliche Zahl  $k$  von Knoten, sodass ein Clustergraph übrig bleibt.

# Cluster Vertex Deletion

## Cluster Vertex Deletion

**Eingabe:** Ein ungerichteter Graph  $G = (V, E)$ .

**Aufgabe:** Lösche eine kleinstmögliche Zahl  $k$  von Knoten, sodass ein Clustergraph übrig bleibt.

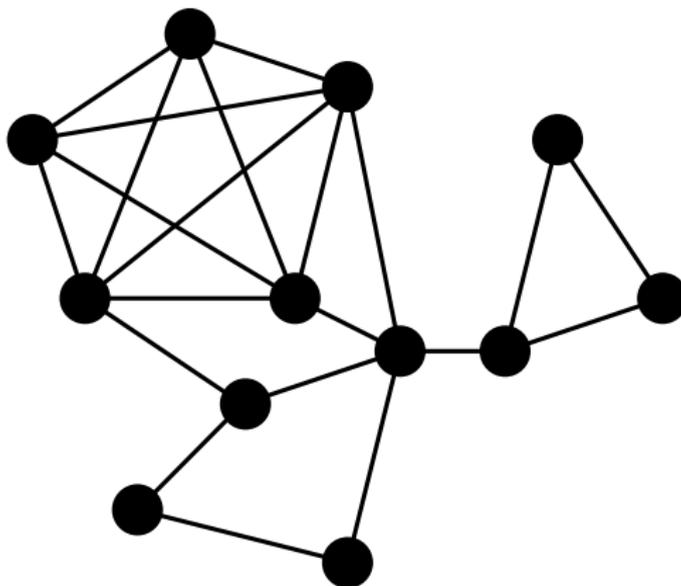
## Lemma

$G$  ist Clustergraph  $\iff G$  enthält keinen induzierten  $P_3$  ()

# Iterative Kompression

## Idee: Induktion

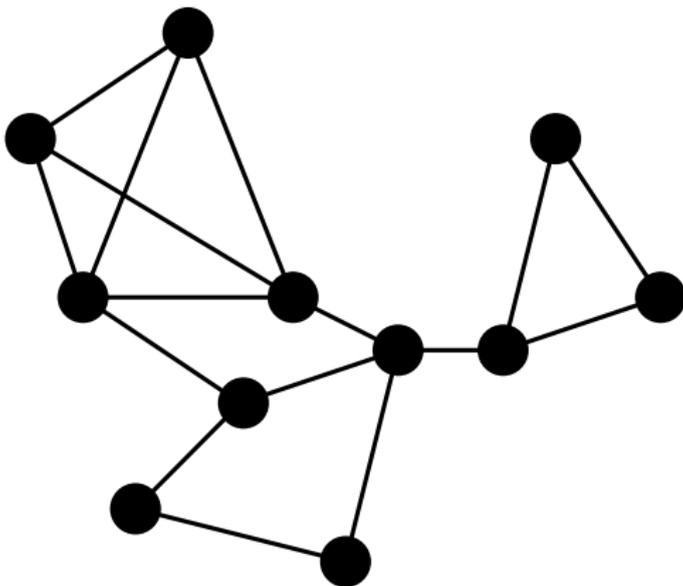
Nimm an, dass wir bereits die Lösung für die Instanz ohne einen Knoten haben.



# Iterative Kompression

## Idee: Induktion

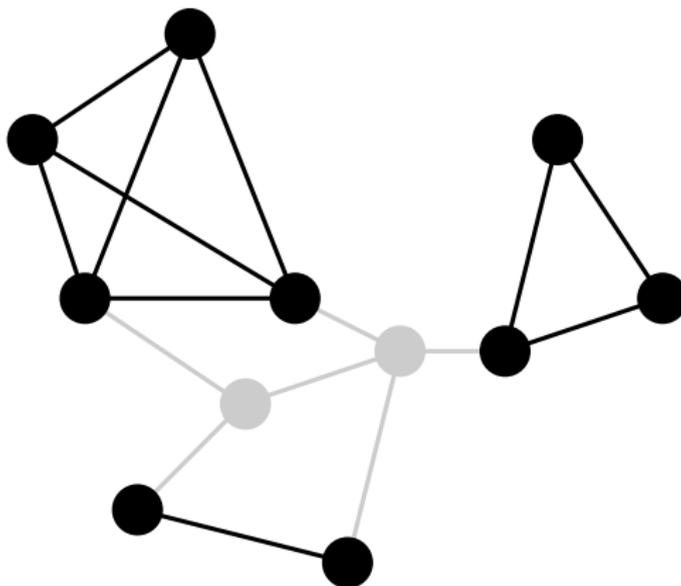
Nimm an, dass wir bereits die Lösung für die Instanz ohne einen Knoten haben.



# Iterative Kompression

## Idee: Induktion

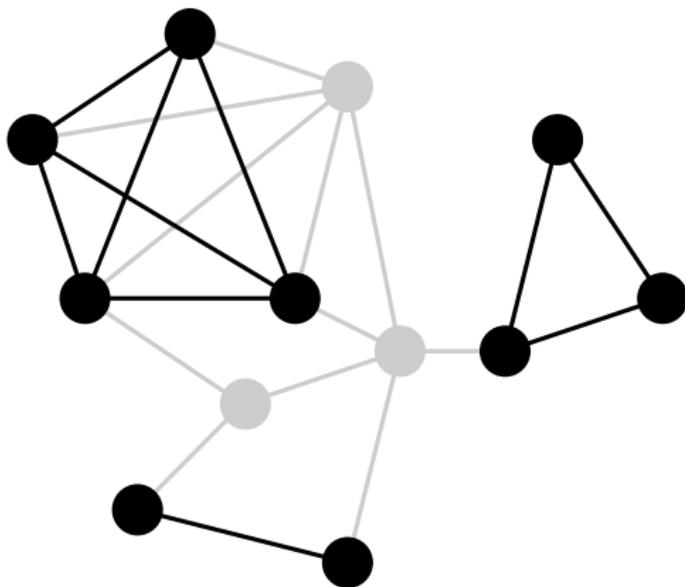
Nimm an, dass wir bereits die Lösung für die Instanz ohne einen Knoten haben.



# Iterative Kompression

## Idee: Induktion

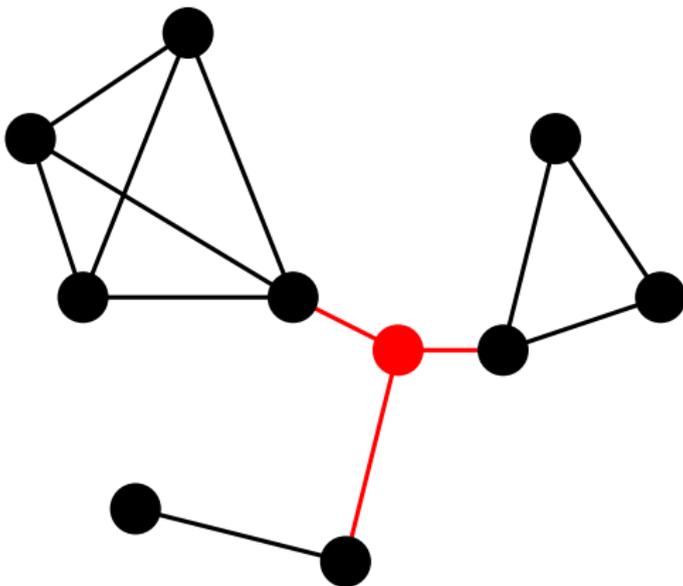
Nimm an, dass wir bereits die Lösung für die Instanz ohne einen Knoten haben.



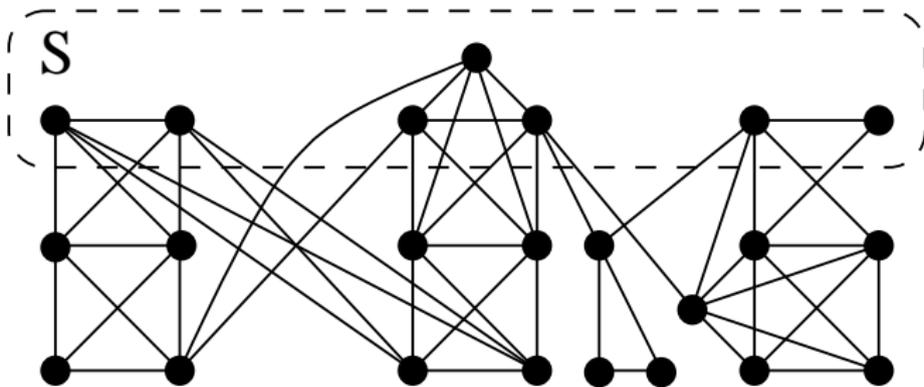
# Iterative Kompression

## Idee: Induktion

Nimm an, dass wir bereits die Lösung für die Instanz ohne einen Knoten haben.

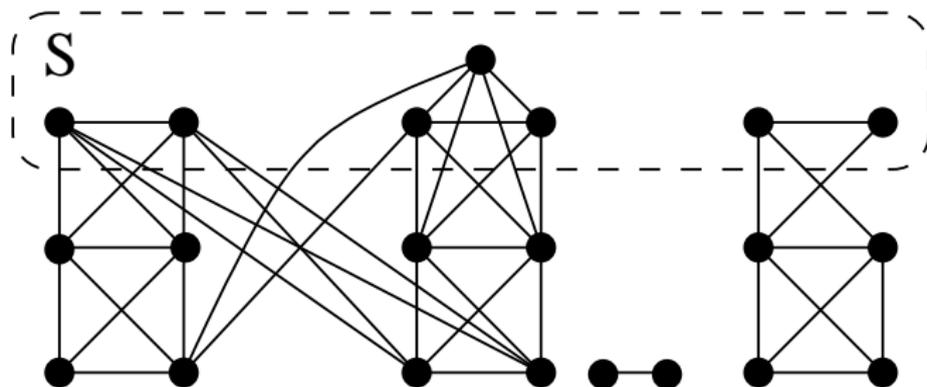


# Cluster Vertex Deletion-Kompression



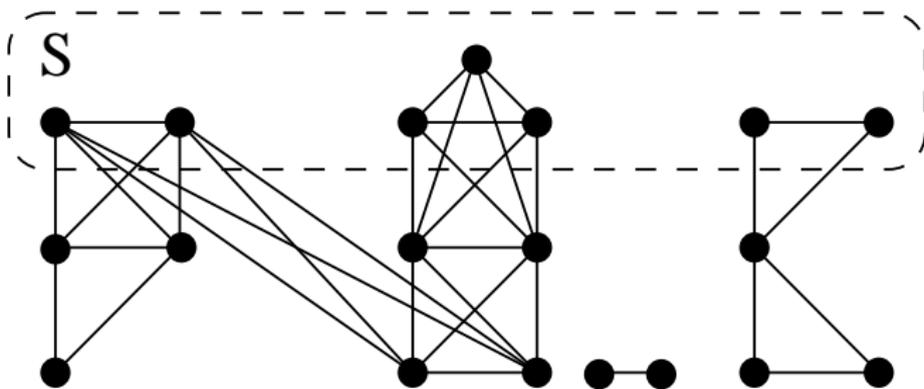
Lösche Knoten, die mit mehreren Clustern in  $S$  verbunden sind

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



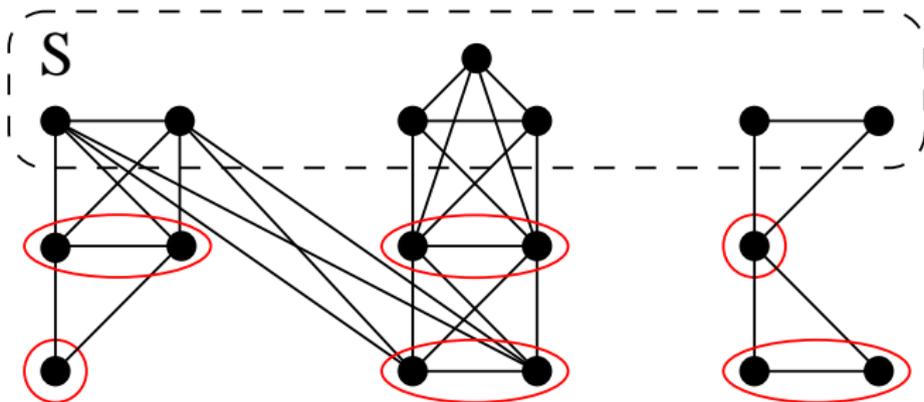
Lösche Knoten, die mit nur einigen Knoten eines Clusters in  $S$  verbunden sind

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



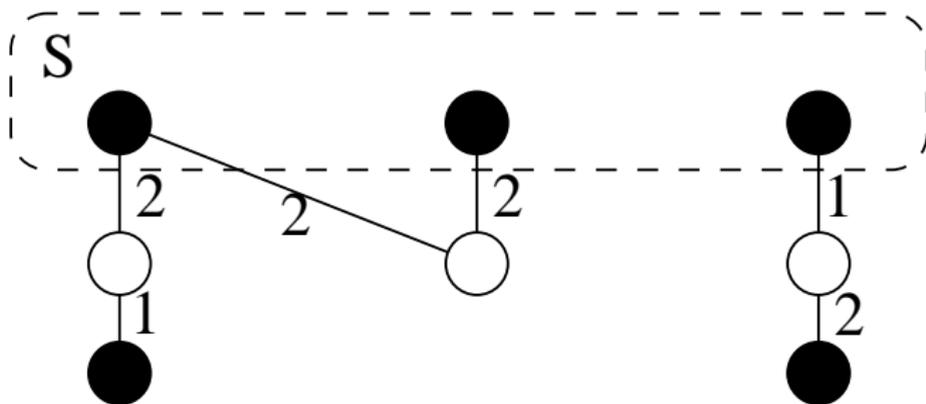
Lösche Clique-Komponenten

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



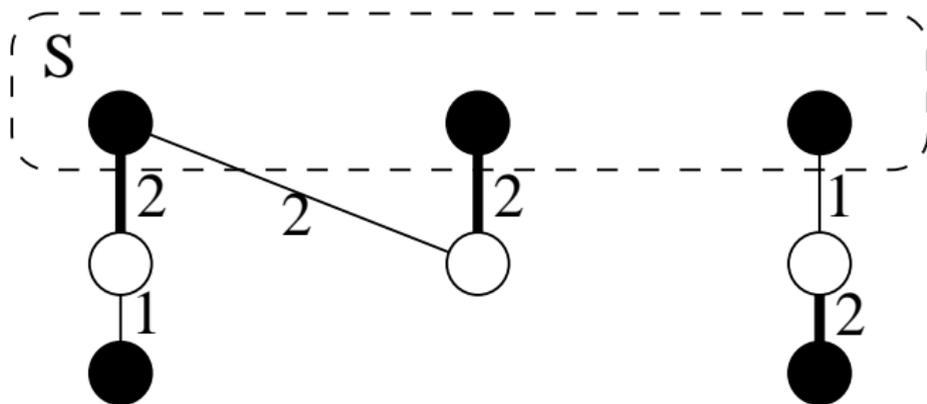
Klassifikation nach Nachbarschaft

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



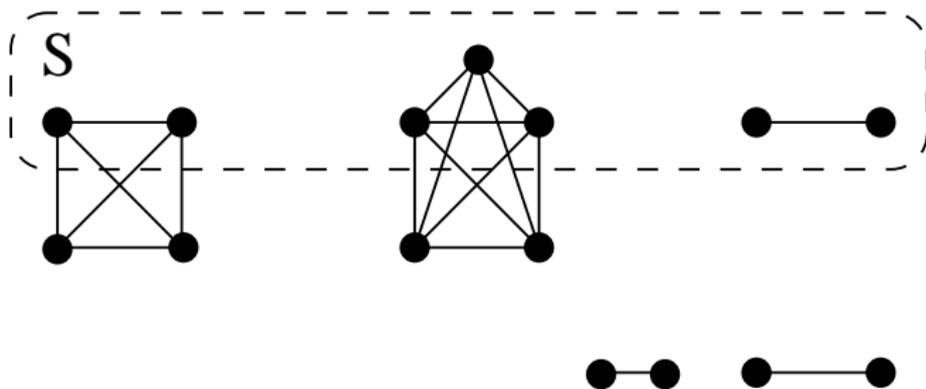
Matching-Instanz

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



Matching-Lösung

# Cluster Vertex Deletion-Kompression



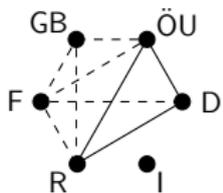
Gefundener Clustergraph

# Cluster Vertex Deletion

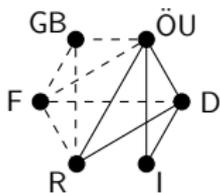
## Theorem

CLUSTER VERTEX DELETION *kann in Zeit  $O(2^k \cdot km\sqrt{n} \log n)$  gelöst werden.*

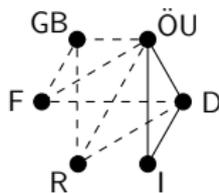
# Staatsbeziehungen



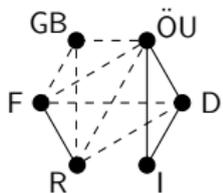
Dreikaiserbund 1872–81



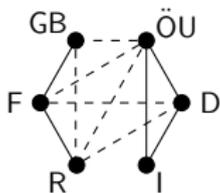
Dreibund 1882



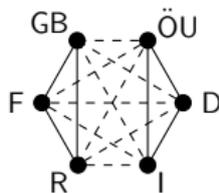
Deutsch-Russischer Streit 1890



Frz.-Russisches Bündnis 1891–94



Entente cordiale 1904



Britisch-Russisches Bündnis 1907

—— positive Beziehungen  
- - - - negative Beziehungen

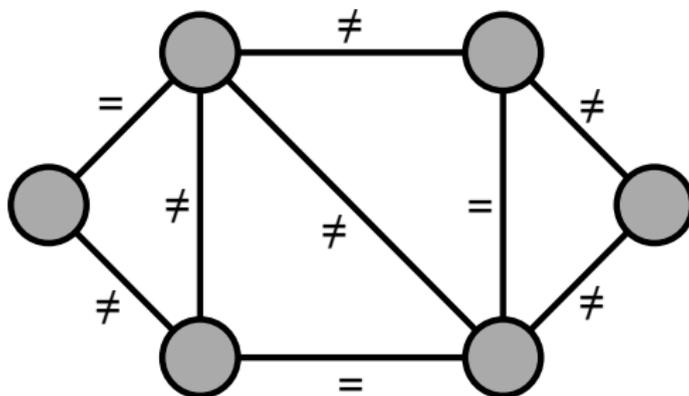
GB = Großbritannien  
F = Frankreich  
R = Russland

ÖU = Österreich-Ungarn  
D = Deutschland  
I = Italien

# Balancierte Graphen

## Definition

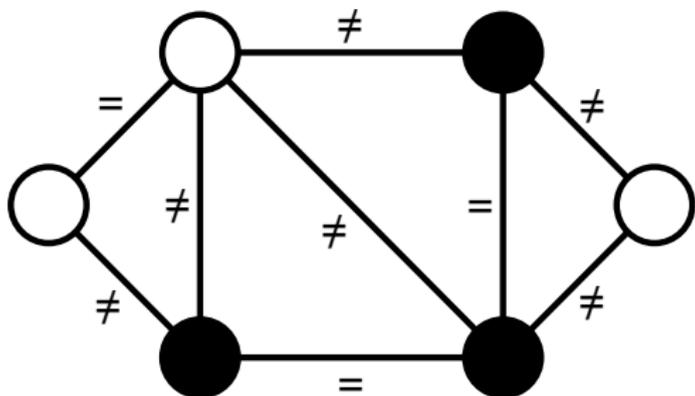
Ein Graph mit Kantenbeschriftungen  $=$  oder  $\neq$  ist **balanciert**, wenn seine Knoten mit zwei Farben so eingefärbt werden können, dass die Relation entlang jeder Kante eingehalten wird.



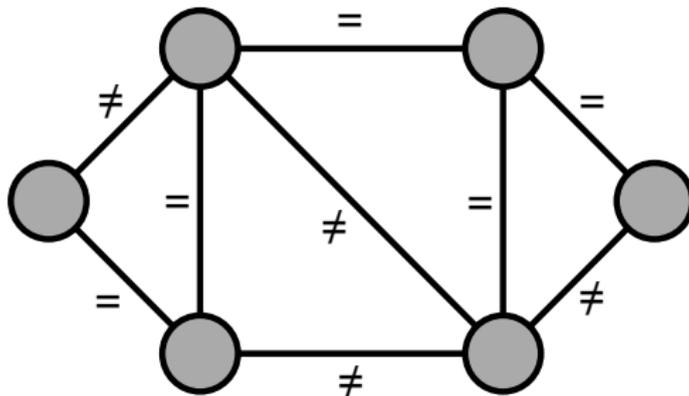
# Balancierte Graphen

## Definition

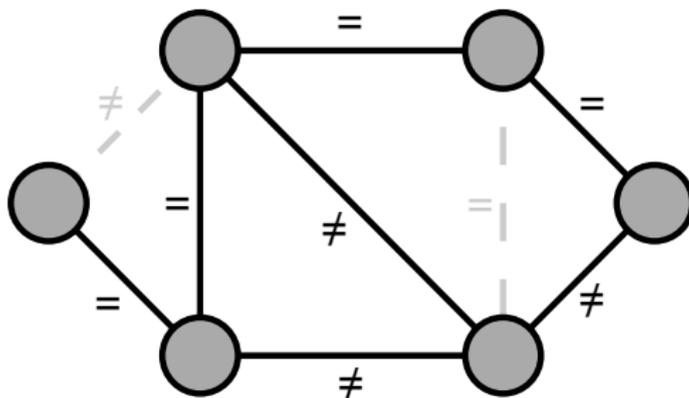
Ein Graph mit Kantenbeschriftungen  $=$  oder  $\neq$  ist **balanciert**, wenn seine Knoten mit zwei Farben so eingefärbt werden können, dass die Relation entlang jeder Kante eingehalten wird.



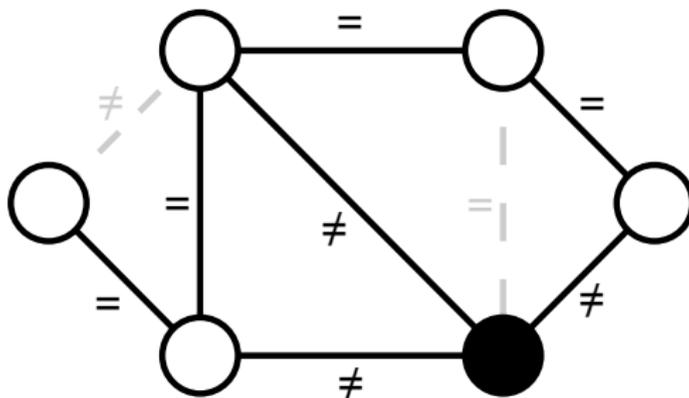
# Balanced Subgraph



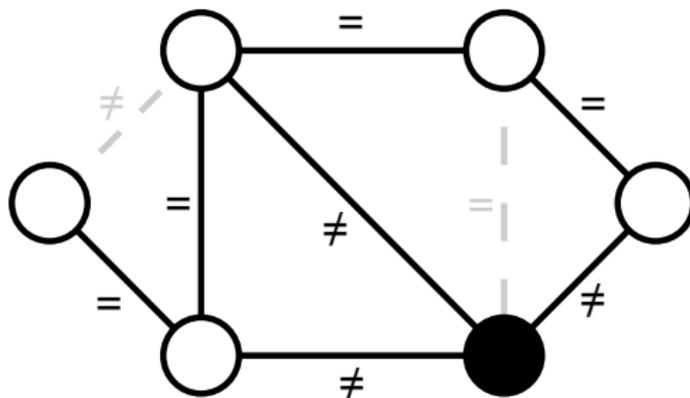
# Balanced Subgraph



# Balanced Subgraph



# Balanced Subgraph



## Definition (BALANCED SUBGRAPH)

**Eingabe:** Ein Graph mit Kantenbeschriftungen = oder  $\neq$ .

**Aufgabe:** Lösche möglichst wenig Kanten, sodass der Graph balanciert wird.

# Anwendungen von Balanced Subgraph

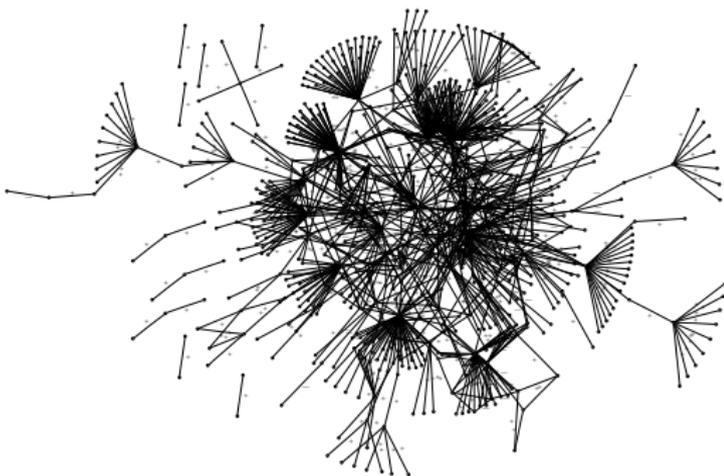
- Balance in Sozialen Netzwerken  
[HARARY, Mich. Math. J. 1953]
- Minimalenergiezustände in magnetischen Materialien (Spin-Gläser)  
[KASTELEYN, J. Math. Phys. 1963]
- „Monotone Subsysteme“ in biologischen Netzwerken  
[DASGUPTA et al., WEA 2006]
- Portfolio-Risikoanalyse  
[HARARY et al., IMA J. Manag. Math. 2002]
- Stabilität von Fullerenen  
[DOŠLIĆ&VIKIČEVIĆ, Discr. Appl. Math. 2007]
- Entwurf integrierter Schaltungen  
[CHIANG et al., IEEE Trans. CAD of IC&Sys. 2007]

# Anwendungen von Balanced Subgraph

- Balance in Sozialen Netzwerken  
[HARARY, Mich. Math. J. 1953]
- Minimalenergiezustände in magnetischen Materialien (Spin-Gläser)  
[KASTELEYN, J. Math. Phys. 1963]
- „Monotone Subsysteme“ in biologischen Netzwerken  
[DASGUPTA et al., WEA 2006]
- Portfolio-Risikoanalyse  
[HARARY et al., IMA J. Manag. Math. 2002]
- Stabilität von Fullerenen  
[DOŠLIĆ&VIKIČEVIĆ, Discr. Appl. Math. 2007]
- Entwurf integrierter Schaltungen  
[CHIANG et al., IEEE Trans. CAD of IC&Sys. 2007]

BALANCED SUBGRAPH ist NP-schwer.

# Datenreduktion



$n = 690, m = 1082$



$n = 144, m = 405$

# Festparameter-Handhabbarkeit von Balanced Subgraph

## Theorem

*Mittels iterativer Kompression kann BALANCED SUBGRAPH in Zeit  $O(2^k \cdot m^2)$  gelöst werden.*

# Balanced Subgraph-Experimente

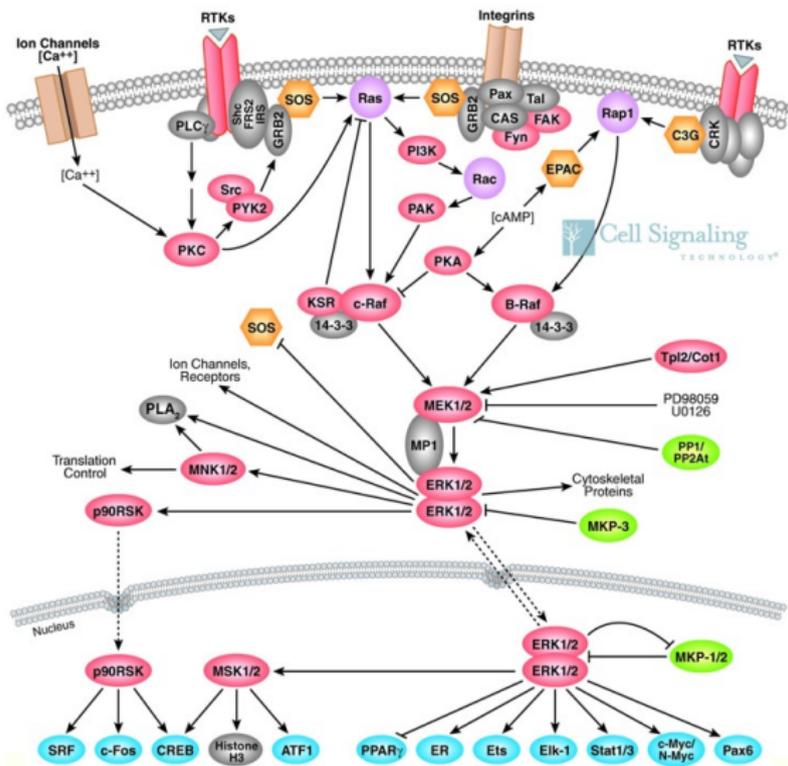
Netzwerk	$n$	$m$	Approximation			Neuer Alg.	
			$k \geq$	$k \leq$	$t$ [min]	$k$	$t$ [min]
EGFR	330	855	196	219	7	210	108
Hefe	690	1082	0	43	77	41	1
Macr.	678	1582	218	383	44	374	1

# Balanced Subgraph-Experimente

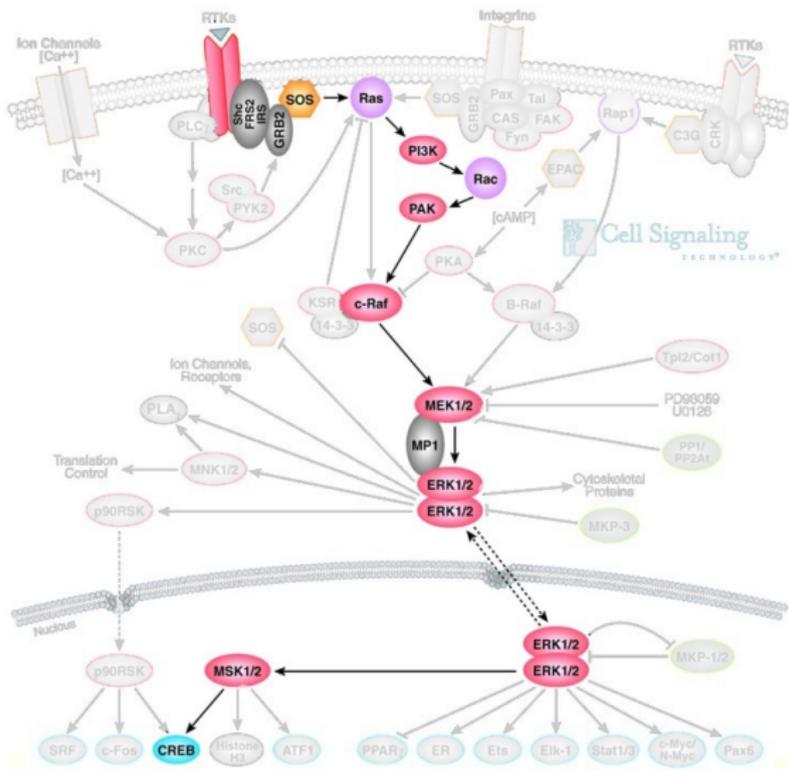
Netzwerk	$n$	$m$	Approximation			Neuer Alg.	
			$k \geq$	$k \leq$	$t$ [min]	$k$	$t$ [min]
EGFR	330	855	196	219	7	210	108
Hefe	690	1082	0	43	77	41	1
Macr.	678	1582	218	383	44	374	1

- Ein Netzwerk mit 688 Knoten und 2 208 Kanten konnte nicht gelöst werden.

# Signalpfade in Proteininteraktionsnetzwerken



# Signalpfade in Proteininteraktionsnetzwerken



# Signalpfade

## Signalpfade

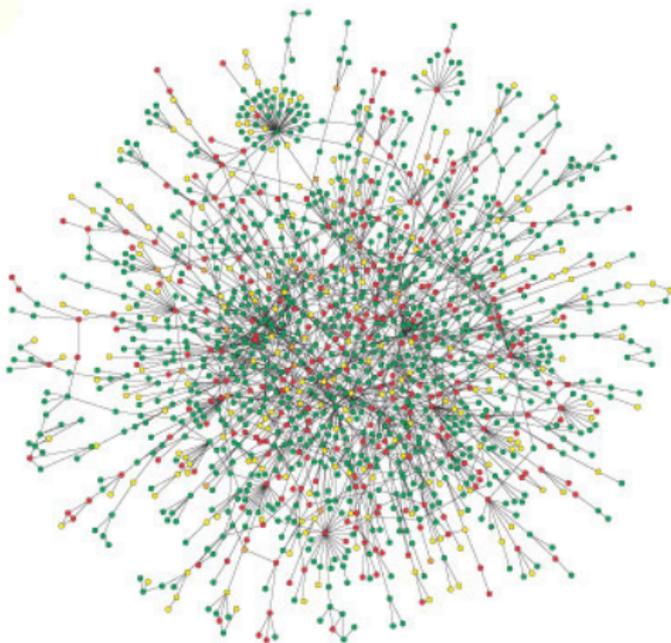
Ein Signalpfad ist eine Folge unterschiedlicher Proteine, sodass jedes mit dem vorigen stark wechselwirkt.

## MINIMUM-WEIGHT PATH

**Eingabe:** Graph  $G = (V, E)$ , Gewicht  $w : E \rightarrow [0, 1]$ , ganze Zahl  $k > 0$

**Aufgabe:** Finde einen einfachen Pfad  $v_1, \dots, v_k$  der Länge  $k$  in  $G$ , der  $w(v_1, v_2) + \dots + w(v_{k-1}, v_k)$  minimiert.

# Hefenetzwerk



4 400 Proteine, 14 300 Interaktionen, gesucht Pfade der Länge 5–15

# Minimum-Weight Path

## Theorem

MINIMUM-WEIGHT PATH *ist NP-schwer* [GAREY&JOHNSON 1979].

## Idee

Nutze die Tatsache, dass die gesuchten Pfade relativ kurz sind ( $\approx 5-15$ ): Beschränkung der kombinatorischen Explosion auf den Parameter „Pfadlänge“.

# Farbkodierung

**Farbkodierung** ist ein parametrisiertes Verfahren zur Lösung von MINIMUM-WEIGHT PATH

**Color-coding** [ALON, YUSTER & ZWICK, J. ACM 1995]

- Färbe jeden Knoten des Graphen zufällig mit einer von  $k$  Farben
- Hoffe, dass die Knoten im optimalen Pfad alle unterschiedliche Farben erhalten (**bunt**)
- Löse MINIMUM-WEIGHT PATH unter dieser Annahme (was erheblich schneller geht)
- Wiederhole diese **Versuche**, bis mit hoher Wahrscheinlichkeit mindestens einmal der Pfad tatsächlich bunt war.

# Mehr Farben

Idee

Benutze  $k + x$  anstelle von  $k$  Farben.

# Mehr Farben

## Idee

Benutze  $k + x$  anstelle von  $k$  Farben.

## Theorem

MINIMUM-WEIGHT PATH *kann in Zeit*  $O(-\ln \varepsilon \cdot 4.32^k |G|)$  *gelöst werden, indem man*  $x = 0.3k$  *setzt.*

# Mehr Farben

## Idee

Benutze  $k + x$  anstelle von  $k$  Farben.

## Theorem

MINIMUM-WEIGHT PATH *kann in Zeit  $O(-\ln \varepsilon \cdot 4.32^k |G|)$  gelöst werden, indem man  $x = 0.3k$  setzt.*

**Aber:** Höherer Speicherbedarf

# Zustandsraumsuche

## Idee

Fasse das dynamische Programmieren als Zustandsraumsuche auf (Kürzeste-Wege-Problem in einem implizit definierten Graphen).

# Zustandsraumsuche

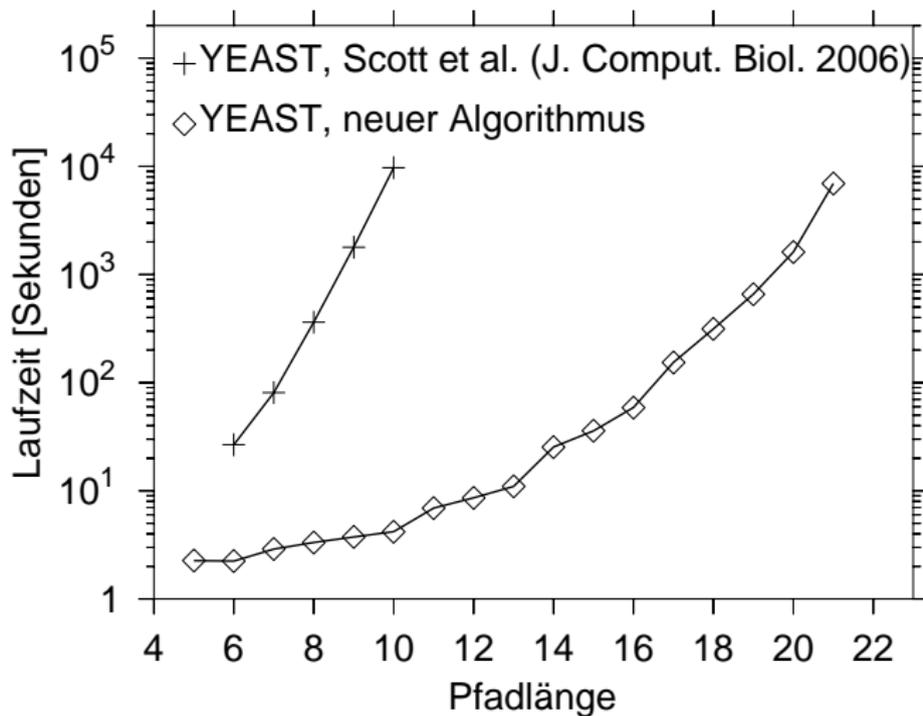
## Idee

Fasse das dynamische Programmieren als Zustandsraumsuche auf (Kürzeste-Wege-Problem in einem implizit definierten Graphen).

## Heuristische Evaluationsfunktionen

- können Zustände wegschneiden
- können die Suche leiten ( $A^*$ )

# Hefenetzwerk



# Graphical user interface: FASPAD

The screenshot shows the 'Fast Signaling Pathway Detection' (FASPAD) software interface. The main window displays a graph with 10 green nodes and several edges. The interface includes a menu bar (File, View, Help), a toolbar with icons for file operations and a timer showing 72:31. Below the toolbar are tabs for 'Options' and 'Information'. The 'Options' tab is active, showing settings for 'Start nodes', 'End nodes', 'Pathlength' (8), 'Number of paths' (50), 'Filter' (70%), and 'Success probability' (99.9%). A 'Load Graph' button and a text field containing a file path are also visible. Below the graph is a 'Result list' table with columns for Weight, Prot 1 through Prot 8, and a 'Selected' checkbox. The table contains 8 rows of results, with the 5th row highlighted in orange.

	Weight	Prot 1	Prot 2	Prot 3	Prot 4	Prot 5	Prot 6	Prot 7	Prot 8	Selected
1	0.317429	CG6998	CG3227	CG5450	CG32130	CG18743 C CG7945	CG11761	CG5063		<input type="checkbox"/>
2	0.323947	CG1871	CG8929	CG13030	CG10108	CG1856	CG7057	CG13811	CG3779	<input checked="" type="checkbox"/>
3	0.399116	CG32130	CG18743 C CG7945	CG11761	CG17599	CG9740	CG4622	CG11454		<input type="checkbox"/>
4	0.398402	CG5450	CG32130	CG18743 C CG7945	CG11761	CG1435	CG2774	CG8282		<input type="checkbox"/>
5	0.373798	CG15293	CG14169	CG7224	CG13630	CG1856	CG7057	CG13811	CG2774	<input checked="" type="checkbox"/>
6	0.391802	CG15468	CG14818	CG9951	CG8856	CG17599	CG9740	CG4622	CG11454	<input type="checkbox"/>
7	0.416075	CG18591	CG16792	CG13277	CG6610	CG1249	CG8282	CG2774	CG1138	<input type="checkbox"/>
8	0.433175	CG6425	CG5203	CG18743 C CG32130	CG5450	CG3183	CG6998	CG3227		<input type="checkbox"/>

Freie software, erhältlich bei

<http://theinf1.informatik.uni-jena.de/faspad/>

# Zusammenfassung

- Neue Festparameter-Algorithmen für eine Reihe von Problemen
- Implementierungen für
  - CLIQUE COVER
  - BALANCED SUBGRAPH
  - MINIMUM-WEIGHT PATH
  - VERTEX BIPARTIZATION

# Zusammenfassung

- Neue Festparameter-Algorithmen für eine Reihe von Problemen
- Implementierungen für
  - CLIQUE COVER
  - BALANCED SUBGRAPH
  - MINIMUM-WEIGHT PATH
  - VERTEX BIPARTIZATION

## Schlussfolgerung

Der parametrisierte Ansatz ist ein nützlicher Leitfaden zum Entwurf praktisch einsetzbarer Algorithmen für NP-schwere Probleme.