ЭВРИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ПРОВЕРКЕ ИЗОМОРФНОСТИ ГРАФОВ

Е.С. Сайфуллина

Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

Рассматривается эвристический подход к проверке изморфности графов, представляющий последовательную проверку характеристик графа являющихся его инвариантами. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, которые направленны на получение сравнительной оценки того, какая из различных последовательностей сравнения инвариантов более эффективна для определения изоморфности графов.

Ключевые слова: изоморфизм графов, инварианты графов, эвристические алгоритмы.

Введение

Отношением изоморфизма между двумя графами (неориентированными и не имеющими весов вершин и ребер) называется биекция между множествами вершин графов, сохраняющая смежность вершин [1]. При применении понятия изоморфизма к ориентированным или взвешенным графам, накладываются дополнительные ограничения на сохранение значений весов и ориентации дуг.

Задача определения изоморфизма графов принадлежит классу NP, но неизвестно принадлежит ли она классу P (если предположить что P≠NP). Пока нельзя сказать, является ли эта задача NP-полной [2], но известно, что NP-полной является задача поиска изоморфного подграфа в графе. Таким образом, актуальными являются проводимые в настоящее время исследования, которые направлены на решение задачи проверки изоморфности как для произвольных графов, так и для графов специального вида.

Инвариантом графа называется любая его характеристика, равная для изоморфных графов [3, 4].

Инвариант называется полным, если его равенство для двух графов возможно тогда и только тогда, когда графы изоморфны. Известными на сегодняшний день полными инвариантами являются описанные ниже мини-код и макси-код матрицы смежности, получаемые путем выписывания двоичных значений матрицы смежности в строчку с последующим переводом полученного двоичного числа в десятичную форму. Мини-коду соответствует такой порядок следования строк и столбцов, при котором полученное значение является минимально возможным; макси-коду — соответственно максимально возможным. В настоящее время полный инвариант графа, вычислимый за полиномиальное время, неизвестен, однако не доказано, что он не существует.

Наиболее очевидными инвариантами графа G являются: число вершин $n(G)$ и число ребер $m(G)$.

Степенью s вершины v графа $G = (V, E)$ называется число его вершин, смежных с v, или число ребер, инцидентных этой вершине. Очевидно, что при всяком изоморфизме графов L и L' соответствующие друг другу вершины должны иметь одинаковую степень.

Упорядоченную систему ($s_1, s_2, \ldots, s_n$) будем называть ***вектором степеней графа*** G (еще одно из возможных названий – *графическая последовательность*) и кратко обозначать $s(G)$.

Вектор степеней $s(G) = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$ дает еще два числовых инварианта: $min(s_i)$ и $max(s_i)$, ($i = 1,2,\ldots,n$). Второй из них часто называется степенью графа.

Описание эвристического подхода к проверке изоморфности графов и результаты вычислительного эксперимента

В данной работе были рассмотрены следующие инварианты графов [1, 3, 4].

Диаметр графа – длина кратчайшего пути (расстояние) между парой наиболее удалённых вершин.

Индекс Винера – величина $\omega = \sum d(v_i, v_j)$, где $d(v_i, v_j)$ – минимальное расстояние между вершинами v_i и v_j.

Индекс Рандича – величина $r = \sum\limits_{(v_i, v_j)} \frac{1}{\sqrt{d(v_i)d(v_j)}}$, где v_i и v_j – вершины, образующие ребро, $d(v_k)$ – степень вершины k.

Определитель матрицы смежности.

Число компонент связности графа.

Цикломатическое число графа – минимальное число ребер, которые надо удалить, чтобы граф стал ациклическим. Существует соотношение: $p_1(G) = p_0(G) + |E(G)| - |V(G)|$, где $p_1(G)$ – цикломатическое число, $p_0(G)$ – число компонент связности графа, $|E(G)|$ – число ребер, $|V(G)|$ – число вершин.

Хроматическое число графа – минимальное количество цветов, требуемое для раскраски вершин графа, при которой любые вершины, соединённые ребром, раскрашены в разные цвета.

Введём ещё один инвариант (характеристику) графа – будем называть его ***вектором степеней второго порядка***; отметим, что подобный инвариант может быть построен, например, на основе более общих моделей, рассматривавшихся в [5]. Каждый элемент этого вектора представляет собой список степеней вершин, смежных с данной вершиной. Очевидно, что данная характеристика является инвариантом графа.

В случае с задачей проверки изоморфизма для произвольных графов все известные алгоритмы, гарантирующие правильный ответ, экспоненциальные. Но для практически каждой из задач дискретной оптимизации существует несколько различных подходов к построению алгоритмов, предназначенных для её решения; при этом каждый из подходов эффективнее работает для своего множества входных данных. На эту тему в 1997 г. была сформулирована и доказана т.н. NoFreeLunchTheorem [6]. Существует несколько различных трактовок этой теоремы, один из которых – следующий.

Имеется некоторое множество входных данных для рассматриваемой задачи дискретной оптимизации (множество вариантов проблемы); при этом вместо самóго множества вариантов проблемы часто рассматривается некоторый алгоритм генерации этих вариантов. Если на одном множестве (заданном или сгенерированном) некоторый алгоритм решения данной задачи дискретной оптимизации оптимален по некоторым параметрам (например – по времени), то существует другое множество вариантов проблемы, на котором этот же алгоритм по этим же параметрам не является оптимальным.

В ходе проведенного исследования были описаны и реализованы алгоритмы восстановления (случайной генерации) графов и, на их основе, описан и реализован эвристический алгоритм решения задачи проверки изоморфности графов на основе выбираемого предположения о применённом алгоритме генерации.

Для проведения вычилительного эксперимента из восьми упомянутых ранее инвариантов графа:

1. хроматическое число;
2. определитель матрицы смежности;
3. диаметр графа;
4. число компонент связности графа;
5. цикломатическое число графа;
6. индекс Винера;
7. индекс Рандича;
8. вектор степеней второго порядка.

Случайным образом было сгенерировано 1000 алгоритмов проверки изоморфизма графов. Каждый из этих алгоритмов представляет собой последовательное вычисление и сравнение характеристик для проверяемых графов. Если значения одной из характеристик у графов не совпадает, то мы завершаем алгоритм и говорим, что графы неизоморфны. Если же все 8 характеристик равны, то мы говорим, что для указанных графов ожидаем изоморфизм.

Рассмотрим используемую в ходе проведения вычислительного эксперимента цепь Маркова. Данная цепь состоит из пяти состояний, каждое их которых представляет собой один из перечисленных ниже алгоритмов генерации графов на основе заданного вектора степеней.

1. Алгоритм, основанный на цепи Маркова и методе Монте-Карло [7]
2. Последовательный алгоритм для построения графов с заданным вектором степеней [8]
3. Алгоритм, разработанный Стегером и Вормалдом [9]
4. Разработанный автором диссертации алгоритм генерации графа на основе вектора степеней [10]
5. Разработанный автором диссертации алгоритм генерации графа на основе вектора степеней второго порядка [10]

Вероятность перехода в каждое из состояний погалась равной 0,2.

Приведем описание алгоритма проведения вычислительного эксперимента.

Вход: размерность и функция распределения значений вектора 1-го порядка.

1. На основе размерности и функции распределения был сгенерирован вектор степеней 1-го порядка.
2. Алгоритмом, основанным на критерии Гавела-Хакими [], был сгенерирован исходный граф, изоморфизм с которым мы будем проверять для других графов.
3. Алгоритмом, соответствующим текущему состоянию цепи Маркова был сгенерирован граф. Цепь Маркова запускалась 1000 раз. На каждой итерации применялся один из 1000 упомянутых ранее алгоритмов проверки изоморфности (одна из последовательностей проверки инвариантов).

Выход: множество рёбер E.

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что наиболее эффективными для проверки изоморфизма графов являются индекс Винера и вектор степеней второго порядка, а наименее эффективным – определитель матрицы смежности.

Таким образом, был предложен один из возможных вариантов выбора лучшего (получение оценки эффективности применения) из нескольких алгоритмов, решающих некоторую задачу дискретной оптимизации (в данном случае – задачу проверки изоморфности графов) – причём лучшего для заданных (либо сгенерированных) входных данных (вариантов проблемы).

Литература

1. Оре, О. Графы и их применение / О. Оре – М.: URSS, 2006. – 168 с.
2. Громкович, Ю. Теоретическая информатика. Введение в теорию автоматов, теорию вычислимости, теорию сложности, теорию алгоритмов, рандомизацию, теорию связи и криптографию / Ю. Громкович. – СПб.: БХВ-Петербург, 2010. – 336 с.
3. Зыков, А. Основы теории графов / А. Зыков – М.: Наука, 1986. – 384 с.
4. Харари, Ф. Теория графов / Ф. Харари. – М.: Мир, 1973. – 302 с.
5. Остроумова, Л. А. Математические ожидания k-х входящих степеней вершин в случайных графах в модели Боллобаша-Риордана / Л. А. Остроумова // Труды Московского физико-технического института. – 2012. – Т. 4, № 1 (13). – С. 29–40
6. Wolpert, D. No free lunch theorems for optimization / D. Wolpert, W. Macready // IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 1997, vol. 1, no. 1, P. 67-82.
7. Berg, B. Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis / B. Berg. – Singapore, World Scientific Publ., 2004. – 361 p.
8. Blitzstein, J. «A Sequential Importance Sampling Algorithm for Generating Random Graphs with Prescribed Degrees» / J. Blitzstein, P. Diaconis [Электронный ресурс]. – 2006. – URL: http://statweb.stanford.edu/~cgates/PERSI/papers/degrees.pdf (дата обращения 01.04.2016).
9. Steger, A. Generating random regular graphs quickly / A. Steger, N. Wormald // Combinatorics, Probab. andComput. – 1999. – № 8. – P. 377–396.
10. Мельников, Б. Ф. Применение мультиэвристического подхода для случайной генерации графа с заданным вектором степеней / Б. Ф. Мельников, Е. Ф. Сайфуллина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – No 3(27). – С. 69-82.
11. Frank, H. Circuit Theory / H. Frank, S. Hakimi // IEEE Transactions on. – 1965, Vol. 12, № 3. – P. 44–51.