

# Maximiser l'intersection de bases de cycles de poids minimum

Ylène Aboulfath<sup>1</sup>    Dominique Barth<sup>1</sup>    Thierry Mautor<sup>1</sup>    Dimitri Watel<sup>2,3</sup>  
Marc-Antoine Weisser<sup>4</sup>

<sup>1</sup> DAVID, Université Versailles Saint-Quentin-En-Yvelines, France [ylene.aboulfath@uvsq.fr](mailto:ylene.aboulfath@uvsq.fr),  
[dominique.barth@uvsq.fr](mailto:dominique.barth@uvsq.fr), [thierry.mautor@uvsq.fr](mailto:thierry.mautor@uvsq.fr)

<sup>2</sup> SAMOVAR, Telecom SudParis, France

<sup>3</sup> ENSIIE, Evry, France [dimitri.watel@ensiie.fr](mailto:dimitri.watel@ensiie.fr)

<sup>4</sup> LISN, Centrale Supélec, France [marc-antoine.weisser@centralesupelec.fr](mailto:marc-antoine.weisser@centralesupelec.fr)

**Mots-clés :** *Base de cycles minimum, Intersection de matroïdes, Complexité algorithmique, Complexité paramétrée*

## 1 Introduction

Dans un graphe simple non orienté, une base de cycles est un ensemble minimum de cycles capable de générer tous les autres. On utilise ici pour les cycles une définition très générale : un cycle est un graphe dont les nœuds sont de degré pair. Ainsi deux cycles élémentaires disjoints forment un cycle, et un graphe eulérien est également un cycle. On définit une opération d'addition  $\oplus$  sur les cycles : connaissant deux cycles  $c_1$  et  $c_2$ , le cycle  $c_1 \oplus c_2$  consiste à garder les arêtes de  $c_1 \cup c_2$  qui ne sont pas dans  $c_1 \cap c_2$ . La Figure 1 donne des exemples de cycles et d'addition de cycles.

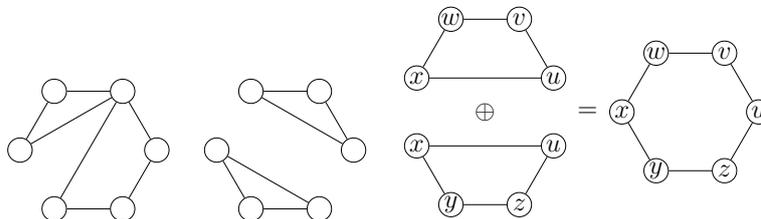


FIG. 1

On dit qu'un ensemble de cycles  $C$  génère un cycle  $d$  si  $\bigoplus_{c \in C} c = d$ . Muni de l'opérateur  $\oplus$  et du corps  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ , l'ensemble  $C$  forme un espace vectoriel dont la dimension est le nombre cyclomatique  $\mu(G) = m - n + p$  où  $m, n$  et  $p$  sont respectivement le nombre d'arêtes, de nœuds et de composantes connexes de  $G$ . Une base de cycles est une base de cet espace vectoriel.

On s'intéresse dans cette présentation aux bases minimums. Chaque cycle est associé à un poids égal à sa taille, une base minimum est une base de cycles dont la somme totale des poids des cycles est minimum. Trouver une base de cycles minimum pour un graphe peut se faire en temps polynomial, par exemple avec l'algorithme de Horton [5]. Connaissant plusieurs graphes, on souhaite trouver des bases minimums dont l'intersection est la plus grande possible.

**Problème 1 (MAX-MCBI).** Soient  $(G_1, G_2, \dots, G_k)$  des graphes ayant les mêmes nœuds, trouver un sous-ensemble de cycles  $B$  de  $\bigcap_{i=1}^k G_i$  de taille maximum tel que, pour tout  $i \in \llbracket 1; k \rrbracket$  il existe une base minimum  $B_i$  de  $G_i$  telle que  $B \subseteq B_i$ .

## 2 Motivations

Cette étude s'inscrit dans un projet plus général d'étude de trajectoires de conformations moléculaires. Une conformation représente l'état d'une molécule à un instant donné, qui peut

différer légèrement de la formule chimique de base car des liaisons faibles peuvent apparaître ou disparaître selon la forme 3D de la molécule [1]. La trajectoire représente la succession d'apparitions et de disparitions de liaisons faibles au cours du temps. Les bases de cycles minimums font partie des propriétés structurelles des molécules capables de caractériser certaines propriétés chimiques [3, 4, 6]. Nous étudions la capacité de la similarité entre les bases minimums des conformations d'une trajectoire à caractériser de telles propriétés. Cette présentation se concentre uniquement sur notre capacité à résoudre le problème MAX-MCBI.

On peut également noter que MAX-MCBI est un cas particulier du problème d'intersection de matroïdes dans lequel, connaissant  $k$  matroïdes avec les mêmes éléments, la question est de trouver un ensemble d'éléments indépendants de taille maximum. Ce problème est polynomial quand  $k = 2$  [2], NP-Complet quand  $k = 3$  [8] et  $\frac{1}{k}$ -approximable [7]. Une question intéressante est de savoir si les propriétés des graphes, par exemple le fait qu'un graphe dispose d'un nombre exponentiel de cycles, influent sur la complexité de notre sous-problème.

### 3 Résultats

Nous nous sommes intéressés à la complexité du problème MAX-MCBI et de son problème de décision associé MCBI vis-à-vis de 5 paramètres naturels des problèmes principalement issus des motivations : le nombre de graphes  $k$ , le degré maximum  $\Delta$  dans les graphes, la taille  $\gamma$  du plus grand cycle dans une base minimum d'un des graphes, l'entier  $K$  associé au problème de décision MCBI et la distance d'édition  $ed$  (en terme d'apparition ou disparition d'arêtes) maximum entre deux paires de graphes de l'instance.

Nous avons établi une dichotomie complète de complexité vis-à-vis des 3 premiers paramètres : le problème est NP-Complet dès lors que  $(k = 3, \gamma = 4, \Delta = 4)$  ou  $(k = 3, \gamma = 5, \Delta = 3)$  mais polynomial pour  $k = 2$ , pour  $(\gamma = 4, \Delta = 3)$ , pour  $\gamma = 3$  et pour  $\Delta = 2$ . Nous avons également montré que le problème reste NP-Complet même si 3 des 4 paramètres  $k, \Delta, \gamma$  et  $ed$  sont fixés. Savoir si le problème est XP vis-à-vis de ces 4 paramètres est une question ouverte.

Nous avons également démontré que le problème est XP mais W[1]-difficile vis à vis de  $K$ , et qu'il est  $\frac{1}{k}$ -approximable en temps polynomial sachant que ce rapport est serré.

### Références

- [1] S. Bougueroua, R. Spezia, S. Pezzotti, S. Vial, F. Quessette, D. Barth, and M.-P. Gaigeot. Graph theory for automatic structural recognition in molecular dynamics simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 149(18) :184102, nov 2018.
- [2] Jack Edmonds. *Submodular Functions, Matroids, and Certain Polyhedra*, pages 11–26. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [3] Benoît Gaüzère, Luc Brun, and Didier Villemin. Relevant cycle hypergraph representation for molecules. In Walter G. Kropatsch, Nicole M. Artner, Yll Haxhimusa, and Xiaoyi Jiang, editors, *Graph-Based Representations in Pattern Recognition*, pages 111–120, Berlin, Heidelberg, 2013. Springer Berlin Heidelberg.
- [4] Petra M Gleiss, Peter F Stadler, Andreas Wagner, and David A Fell. Relevant cycles in chemical reaction networks. *Advances in complex systems*, 4(02n03) :207–226, jun 2001.
- [5] J. D. Horton. A polynomial-time algorithm to find the shortest cycle basis of a graph. *SIAM Journal on Computing*, 16(2) :358–366, apr 1987.
- [6] Stefi Nouleho Ilemo, Dominique Barth, Olivier David, Franck Quessette, Marc-Antoine Weisser, and Dimitri Watel. Improving graphs of cycles approach to structural similarity of molecules. *PLOS ONE*, 14(12) :e0226680, dec 2019.
- [7] Bernhard Korte and Dirk Hausmann. An analysis of the greedy heuristic for independence systems. In *Annals of Discrete Mathematics*, volume 2, pages 65–74. Elsevier, 1978.
- [8] Dominic JA Welsh. *Matroid theory*. Courier Corporation, 2010.