Recherche de motifs dans les graphes colorés

Florian Sikora

LAMSADE

8 octobre 2012

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Motivations

- Complexité de l'homme $\Leftrightarrow$ nombre de gènes ?

Réseaux biologiques

- ▶ Énumérer les composants d'un avion ne suffit pas pour comprendre son fonctionnement.
- ▶ Étudier les relations entre les éléments.

Réseaux biologiques

- ▶ Les éléments biologiques (protéines, métabolites...) peuvent interagir entre-eux.

Réseaux biologiques

- ▶ Modélisation par un **graphe**.
 - ▶ Les **éléments** sont représentés par les **nœuds**.
 - ▶ Les **interactions** sont représentées par les **arêtes**.

Enjeux

- ▶ Nouvelles techniques : le nombre de données augmente très rapidement [SHARAN ET IDEKER 2006].
 - ▶ 2001 : quelques centaines d'interactions.
 - ▶ 2006 : plusieurs milliers.
- ▶ Beaucoup de bases de données :
 - ▶ BIND,
 - ▶ DIP,
 - ▶ KEGG,
 - ▶ MINT,
 - ▶ ...
- ▶ Encyclopédie ENCODE [NATURE SEPT 2012].

Enjeux

- ▶ Nouvelles techniques : le nombre de données augmente très rapidement [SHARAN ET IDEKER 2006].
 - ▶ 2001 : quelques centaines d'interactions.
 - ▶ 2006 : plusieurs milliers.
- ▶ Beaucoup de bases de données :
 - ▶ BIND,
 - ▶ DIP,
 - ▶ KEGG,
 - ▶ MINT,
 - ▶ ...
- ▶ Encyclopédie ENCODE [NATURE SEPT 2012].
- ▶ Besoin de l'outil informatique.

Rechercher des motifs

- ▶ Retrouver un sous-réseau respectant les labels et la topologie du motif.
- ▶ Deux labels correspondent si les éléments ont une fonction similaire (par ex. homologies pour les protéines).

Rechercher des motifs

- ▶ Retrouver un sous-réseau respectant les labels et la topologie du motif.
- ▶ Deux labels correspondent si les éléments ont une fonction similaire (par ex. homologues pour les protéines).

- ▶ Chercher des motifs pour retrouver des fonctions connues.
- ▶ **Déduire** les informations d'espèces **peu connues** depuis des espèces **bien connues**.

Rechercher des motifs

- ▶ Problèmes rapidement **NP-complets**.
 - ▶ N'existe probablement **pas d'algorithme exact** de complexité pire cas **polynomiale** (par ex. $\mathcal{O}(n^c)$).
 - ▶ Complexité **exponentielle** (par ex. $\mathcal{O}(c^n)$) pour au moins une instance.

Rechercher des motifs

- ▶ Mais tout n'est pas perdu !
- ▶ Idée : exploiter le fait que les **motifs sont plus petits** (~ 5 à 15 nœuds) que le réseau (par ex. ~ 5.000 pour la levure).
- ▶ Confiner la partie exponentielle à k (taille motif) au lieu de n (taille du réseau) : sujet de la **complexité paramétrée**.

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Algorithmes FPT

- ▶ Beaucoup de problèmes (paramétrés) sont de la forme :
 - ▶ Entrée : Un objet X , $|X| = n$, un entier k .
 - ▶ Question : Est-ce que X a une propriété selon k ?

Algorithmes FPT

- ▶ Beaucoup de problèmes (paramétrés) sont de la forme :
 - ▶ Entrée : Un objet X , $|X| = n$, un entier k .
 - ▶ Question : Est-ce que X a une propriété selon k ?
- ▶ Plusieurs paramètres possibles (souvent la taille de la solution).

Exemple : Vertex Cover

Exemple : Vertex Cover

Complexité paramétrée

- Problème dans la classe FPT s'il existe un algorithme **exact exponentiel** seulement en son **paramètre k** (et pas en la taille de l'entrée n) [DOWNEY ET FELLOWS 1999]. Exemple VERTEX COVER en $\mathcal{O}^*(1.28^k)$.

Algorithme exact avec complexité pire cas de la forme $f(k) \cdot |X|^c$

Complexité paramétrée

- ▶ Problème dans la classe FPT s'il existe un algorithme **exact exponentiel** seulement en son **paramètre k** (et pas en la taille de l'entrée n) [DOWNEY ET FELLOWS 1999]. Exemple VERTEX COVER en $\mathcal{O}^*(1.28^k)$.
- ▶ Parfois impossible : W-difficulté. Exemple INDEPENDENT SET.

Approximation

- ▶ Un autre possibilité pour contourner la difficulté d'un problème : l'approximation.

Approximation

- ▶ Un autre possibilité pour contourner la difficulté d'un problème : l'approximation.
- ▶ Pour un problème d'optimisation NP-difficile, pas d'algorithme **polynomial** possible (sauf si $P = NP$)...
- ▶ ... si la solution doit être optimale !

Approximation

- ▶ Un autre possibilité pour contourner la difficulté d'un problème : l'approximation.
- ▶ Pour un problème d'optimisation NP-difficile, pas d'algorithme **polynomial** possible (sauf si $P = NP$)...
- ▶ ... si la solution doit être optimale !
- ▶ Sacrifier de l'exactitude pour obtenir un algorithme polynomial.

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Recherche de motifs

- ▶ Vision “classique” de la recherche de motifs :
 - ▶ Le motif a une certaine topologie (chemin, arbre, graphes spécifiques...).
- ▶ La solution correspond aux labels **et** à la topologie du motif.

Recherche de motifs

- ▶ Vision “classique” de la recherche de motifs :
 - ▶ Le motif a une certaine topologie (chemin, arbre, graphes spécifiques...).
- ▶ La solution correspond aux labels **et** à la topologie du motif.
- ▶ Un nombre borné d'**insertions** et délétions peut-être autorisé

Recherche de motifs

- ▶ Vision “classique” de la recherche de motifs :
 - ▶ Le motif a une certaine topologie (chemin, arbre, graphes spécifiques...).
- ▶ La solution correspond aux labels **et** à la topologie du motif.
- ▶ Un nombre borné d’insertions et **délétions** peut-être autorisé

Recherche de motifs

- ▶ Vision “classique” de la recherche de motifs :
 - ▶ Le motif a une certaine topologie (chemin, arbre, graphes spécifiques...).
- ▶ La solution correspond aux labels **et** à la topologie du motif.
- ▶ Un nombre borné d’insertions et délétions peut-être autorisé
- ▶ Plusieurs d’algorithmes FPT, selon différents types de topologie
[SHLOMI ET AL. 2006, DOST ET AL. 2007] [BLIN ET AL. 2009].

Graph Motif

- ▶ Constat : les données biologiques sont expérimentales donc **très bruitées** [EDWARDS ET AL. 2002]
 - ▶ Manque des informations (faux négatifs). Estimé à 50%.
 - ▶ Informations erronées (faux positifs). Estimé à 50%.
- ▶ La topologie du motif peut ne pas être connue *a priori*.
- ▶ Différents motifs peuvent avoir une même topologie.

Graph Motif

- ▶ Constat : les données biologiques sont expérimentales donc **très bruitées** [EDWARDS ET AL. 2002]
 - ▶ Manque des informations (faux négatifs). Estimé à 50%.
 - ▶ Informations erronées (faux positifs). Estimé à 50%.
- ▶ La topologie du motif peut ne pas être connue *a priori*.
- ▶ Différents motifs peuvent avoir une même topologie.
- ▶ La topologie du motif peut ne pas être pertinente.

Graph Motif – Définition

- ▶ Chaque nœud du réseau est coloré selon sa famille.
- ▶ Le motif est juste un (multi-)ensemble de couleurs à retrouver connecté dans le réseau coloré [LACROIX ET AL. 2006].

Graph Motif – Définition

- ▶ Chaque nœud du réseau est coloré selon sa famille.
- ▶ Le motif est juste un (multi-)ensemble de couleurs à retrouver connecté dans le réseau coloré [LACROIX ET AL. 2006].
- ▶ Topologie n'est que la connexité de la solution.

Graph Motif – Un exemple jouet

Graph Motif – Un exemple jouet

M :

G :

Graph Motif – Un exemple jouet

M :

G :

Graph Motif

- ▶ S'applique à différents types de réseaux biologiques.
 - ▶ Initialement sur les réseaux métaboliques [LACROIX ET AL. 2006].
 - ▶ Utilisable sur les réseaux PPI [BRUCKNER ET AL. 2009].
 - ▶ Applicable également à la spectrométrie de masse [BOCKER ET AL. 2009].
- ▶ Selon [BETZLER ET AL. 2008], peut être utilisé pour les réseaux sociaux.

Graph Motif – Difficulté

- ▶ Le problème est NP-complet, même si :
 - ▶ Le réseau est un arbre [LACROIX ET AL. 2006],
 - ▶ Cet **arbre est de degré maximum 3** et le motif est un **colorful** [FELLOWS ET AL. 2007],
 - ▶ L'**arbre enraciné est de profondeur 2** et le motif est un **colorful** [AMBALATH ET AL. 2010],
 - ▶ Le motif n'est constitué que de **2 couleurs** et le réseau est un graphe biparti de degré maximum 4 [FELLOWS ET AL. 2007].

Graph Motif – Complexité paramétré

- ▶ Le problème est FPT par la taille k du motif :
 - ▶ $\mathcal{O}^*(87^k)$ [FELLOWS ET AL. 2007].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(4.3^k)$ (motif multi-ensemble) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(3^k)$ (motif colorful) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ Pas de kernel polynomial, même si G est un *comb graph* [AMBALATH ET AL. 2010].

Graph Motif – Complexité paramétré

- ▶ Le problème est FPT par la taille k du motif :
 - ▶ $\mathcal{O}^*(87^k)$ [FELLOWS ET AL. 2007].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(4.3^k)$ (motif multi-ensemble) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(3^k)$ (motif colorful) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ Pas de kernel polynomial, même si G est un *comb graph* [AMBALATH ET AL. 2010].
- ▶ Programmation dynamique et color-coding : **complexité en espace exponentielle** en k .

Graph Motif – Complexité paramétré

- ▶ Le problème est FPT par la taille k du motif :
 - ▶ $\mathcal{O}^*(87^k)$ [FELLOWS ET AL. 2007].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(4.3^k)$ (motif multi-ensemble) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ $\mathcal{O}^*(3^k)$ (motif colorful) [BETZLER ET AL. 2008].
 - ▶ Pas de kernel polynomial, même si G est un *comb graph* [AMBALATH ET AL. 2010].
- ▶ Programmation dynamique et color-coding : **complexité en espace exponentielle** en k .
- ▶ Mais $W[1]$ -difficile si paramétré par le **nombre de couleurs** différentes, même si G est un arbre [FELLOWS ET AL. 2007].

Graph Motif et polynômes

- ▶ Amélioration de la complexité *via* un outil dû à Koutis et Williams [2008,2009].

Graph Motif et polynômes

- ▶ Amélioration de la complexité *via* un outil dû à Koutis et Williams [2008,2009].
- ▶ Résultat clef :
 - ▶ On peut déterminer par un algorithme randomisé, en **temps** $\mathcal{O}^*(2^k)$ et en **espace polynomial**, si un polynôme représenté par un circuit arithmétique contient un **monôme multilinéaire de degré k** .

Graph Motif et polynômes

- ▶ Un monôme est **multilinéaire** si chaque variable du monôme n'apparaît qu'une seule fois.
- ▶ Par définition, le degré d'un monôme multilinéaire est son nombre de variables.
- ▶ Exemple : $P(X) = (x_1^2 x_3 x_5 + x_1 x_2 x_4 x_6)$:
 - ▶ $x_1 x_2 x_4 x_6$ est un monôme multilinéaire de degré 4.
 - ▶ $x_1^2 x_3 x_5$ n'est pas un monôme multilinéaire.

Graph Motif et polynômes

- ▶ Un **circuit arithmétique** sur un ensemble de variables X est un DAG t.q. :
 - ▶ les noeuds internes sont les opérations $\times$ ou $+$,
 - ▶ les feuilles sont des éléments de X .

Graph Motif et polynômes

- ▶ Un **circuit arithmétique** sur un ensemble de variables X est un DAG t.q. :
 - ▶ les noeuds internes sont les opérations $\times$ ou $+$,
 - ▶ les feuilles sont des éléments de X .
- ▶ Exemple pour $P(X) = (x_1 + x_2 + x_3)(x_3 + x_4 + x_5)$.

Graph Motif et polynômes

- ▶ Pour résoudre GRAPH MOTIF avec **motif colorful** :
 - ▶ On introduit des **variables correspondant aux couleurs**.
 - ▶ On construit un circuit correspondant aux couleurs de **tous les sous-graphes (connexes) de taille k** de G .
 - ▶ Un monôme multilinéaire de degré k correspond alors à un sous-graphe avec k couleurs différentes (motif colorful), donc k sommets différents.

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$\times_R$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$x_R \cdot (P_{2,v_2})$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3})$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (P_{1,v_1} + P_{1,v_3} + P_{1,v_4}) + P_{2,v_3})
 \end{aligned}$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (P_{1,v_1} + P_{1,v_3} + P_{1,v_4}) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (x_R + x_R + x_B) + P_{2,v_3})
 \end{aligned}$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (P_{1,v_1} + P_{1,v_3} + P_{1,v_4}) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (x_R + x_R + x_B) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_B + P_{2,v_3})
 \end{aligned}$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (P_{1,v_1} + P_{1,v_3} + P_{1,v_4}) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (x_R + x_R + x_B) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_B + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R x_J x_R + x_R x_J x_R + x_R x_J x_B + \dots
 \end{aligned}$$

Exemple

Construction récursive

Les monômes de degré $k = 3$ contenant le nœud v_1 sont la somme des produits des monômes :

1. de degrés $k' < k$ contenant le nœud v_1 ,
2. de degrés $k - k'$ contenant un voisin de v_1 .

Pour $k' = 1$:

$$\begin{aligned}
 & x_R \cdot (P_{2,v_2} + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (P_{1,v_1} + P_{1,v_3} + P_{1,v_4}) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot (x_R + x_R + x_B) + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R \cdot (x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_R + x_J \cdot x_B + P_{2,v_3}) \\
 &= x_R x_J x_R + x_R x_J x_R + x_R x_J x_B + \dots
 \end{aligned}$$

Il y a un monôme multilinéaire (donc une solution).

Graph Motif et polynômes

- ▶ La construction est polynomiale.
- ▶ Il existe **un monôme multilinéaire de degré k** si et seulement s'il existe **un sous-graphe connexe colorful de taille k** .

Graph Motif et polynômes

- ▶ La construction est polynomiale.
- ▶ Il existe **un monôme multilinéaire de degré k** si et seulement s'il existe **un sous-graphe connexe colorful de taille k** .
- ▶ On peut résoudre GRAPH MOTIF lorsque le motif est colorful en $\mathcal{O}^*(2^k)$ (algorithme randomisé) et en espace polynomial [GUILLEMOT ET S. 2011].

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.

$$\dots = x_R x_J x_R + x_R x_J x_B + x_R x_J x_R + \dots$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$.

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$.

$$\dots = (x_{R,1} + x_{R,2})x_{J,1}(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).

$$\begin{aligned} \dots &= (x_{R,1} + x_{R,2})x_{J,1}(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots \\ &= x_{R,1}x_{J,1}x_{R,1} + x_{R,1}x_{J,1}x_{R,2} + x_{R,2}x_{J,1}x_{R,1} \\ &\quad + x_{R,2}x_{J,1}x_{R,2} + \dots \end{aligned}$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).

$$\begin{aligned} \dots &= (x_{R,1} + x_{R,2})x_{J,1}(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots \\ &= x_{R,1}x_{J,1}x_{R,1} + x_{R,1}x_{J,1}x_{R,2} + x_{R,2}x_{J,1}x_{R,1} \\ &\quad + x_{R,2}x_{J,1}x_{R,2} + \dots \end{aligned}$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).
- ▶ Ajout de variables y_v pour les nœuds v du graphe.

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).
- ▶ Ajout de variables y_v pour les nœuds v du graphe.

$$\dots = y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) \cdot y_2 x_{J,1} \cdot y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).
- ▶ Ajout de variables y_v pour les nœuds v du graphe.

$$\begin{aligned} \dots &= y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) \cdot y_2 x_{J,1} \cdot y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots \\ &= y_1 x_{R,1} y_2 x_{J,1} y_1 x_{R,1} + y_1 x_{R,1} y_2 x_{J,1} y_1 x_{R,2} + \dots \end{aligned}$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ Si le **motif est un multi-ensemble**, un monôme non multilinéaire sur les couleurs est une solution.
- ▶ La construction précédente n'est plus suffisante.
- ▶ Pour chaque couleur c qui apparaît m fois dans le motif, on introduit des variables $x_{c,1}, x_{c,2}, \dots, x_{c,m}$ (reste insuffisant).
- ▶ Ajout de variables y_v pour les nœuds v du graphe.

$$\begin{aligned} \dots &= y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) \cdot y_2 x_{J,1} \cdot y_1(x_{R,1} + x_{R,2}) + \dots \\ &= y_1 x_{R,1} y_2 x_{J,1} y_1 x_{R,1} + y_1 x_{R,1} y_2 x_{J,1} y_1 x_{R,2} + \dots \end{aligned}$$

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ La construction est toujours polynomiale.
- ▶ Il existe un **monôme multilinéaire de degré $2k$** si et seulement si il existe une **solution de taille k** .

Graph Motif et polynômes – Multi-ensemble

- ▶ La construction est toujours polynomiale.
- ▶ Il existe un **monôme multilinéaire de degré $2k$** si et seulement si il existe une **solution de taille k** .
- ▶ On peut résoudre GRAPH MOTIF lorsque le motif est un multi-ensemble en $\mathcal{O}^*(4^k)$ (algorithme randomisé) et en espace polynomial [GUILLEMOT ET S. 2011].
- ▶ Implémentation comparable à l'état de l'art en pratique.

Graph Motif et polynômes – La suite

- ▶ Algorithme randomisé en $\mathcal{O}^*(2^k)$ et espace polynomial, même dans le cas multi-ensemble [KOWALIK, PRE-PRINT 2012].
- ▶ Approche par Narrow sieves [BJORKLUND ET AL., 2012].

Graph Motif et polynômes – La suite

- ▶ Algorithme randomisé en $\mathcal{O}^*(2^k)$ et espace polynomial, même dans le cas multi-ensemble [KOWALIK, PRE-PRINT 2012].
- ▶ Approche par Narrow sieves [BJORKLUND ET AL., 2012].
- ▶ Un algorithme en $\mathcal{O}((2 - \epsilon)^k)$ (même pour le cas ensemble simple) impliquerait un algorithme en $\mathcal{O}((2 - \epsilon')^n)$ pour SET COVER (ce qui est peu crédible (SETH) [CYGAN ET AL., 2012]) [KOWALIK, PRE-PRINT 2012].

Graph Motif et polynômes

- ▶ La méthode précédente répond au problème de décision.
- ▶ On peut **construire** une solution au prix d'un facteur $|V|$.

Graph Motif et polynômes

- ▶ La méthode précédente répond au problème de décision.
- ▶ On peut **construire** une solution au prix d'un facteur $|V|$.
- ▶ Pour chaque sommet v , tester si une solution de taille k existe dans le graphe $G = G \setminus \{v\}$:
 - ▶ Si oui : continuer.
 - ▶ Si non : remettre le sommet v .
- ▶ Le graphe final correspond à une solution.

Graph Motif et polynômes – Comptage

- ▶ **Compter** le nombre d'occurrences d'un motif **colorful** : $\mathcal{O}^*(2^k)$ (construction similaire).

Graph Motif et polynômes – Comptage

- ▶ **Compter** le nombre d'occurrences d'un motif **colorful** : $\mathcal{O}^*(2^k)$ (construction similaire).
- ▶ Mais, si le motif est un **multi-ensemble**, le problème est $\#W[1]$ -difficile [GUILLEMOT ET S. 2011].

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Variantes

- ▶ Données expérimentales, **imprécisions**.
- ▶ Rechercher une occurrence exacte d'un motif peut échouer.

Variantes

- ▶ Données expérimentales, **imprécisions**.
- ▶ Rechercher une occurrence exacte d'un motif peut échouer.
- ▶ Autoriser des sommets supplémentaires dans la solution pour atteindre la connexité (**insertions**).

Variantes

- ▶ Données expérimentales, **imprécisions**.
- ▶ Rechercher une occurrence exacte d'un motif peut échouer.
- ▶ Autoriser des sommets supplémentaires dans la solution pour atteindre la connexité (**insertions**).
- ▶ Autoriser l'absence de couleurs du motif dans la solution (**délétions**).

Variantes

- ▶ Données expérimentales, **imprécisions**.
- ▶ Rechercher une occurrence exacte d'un motif peut échouer.
- ▶ Autoriser des sommets supplémentaires dans la solution pour atteindre la connexité (**insertions**).
- ▶ Autoriser l'absence de couleurs du motif dans la solution (**délétions**).
- ▶ Autoriser **plusieurs composantes connexes** dans la solution.

Variantes

- ▶ Données expérimentales, **imprécisions**.
- ▶ Rechercher une occurrence exacte d'un motif peut échouer.
- ▶ Autoriser des sommets supplémentaires dans la solution pour atteindre la connexité (**insertions**).
- ▶ Autoriser l'absence de couleurs du motif dans la solution (**délétions**).
- ▶ Autoriser **plusieurs composantes connexes** dans la solution.
- ▶ Autoriser une **liste de couleurs** pour chaque sommet du réseau.

Une variante de Graph Motif : Minimum Substitutions

- ▶ Une autre variante : MINIMUM SUBSTITUTIONS [DONDI ET AL. 2011].
- ▶ Trouver une occurrence qui reprend "le plus de couleurs possible" du motif, mais de même taille que le motif.
- ▶ On *substitue* des couleurs du motif par de nouvelles couleurs.

Minimum Substitutions : Exemple

M :

G :

Minimum Substitutions : Exemple

Minimum Substitutions : Exemple

Une variante de Graph Motif : Minimum Substitutions

- ▶ Il n'existe pas de ratio d'approximation inférieur à $c \log |V|$, sauf si $P = NP$, même lorsque le motif est colorful et G est un arbre de profondeur 2.

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

○○○○○ ○○○○ ○○○○

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

M G

Construction

○○○○○ ●●●●● ○○○○ ● ● ●

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

M G

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

$|\mathcal{S}'| = \text{nombre de substitutions}$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

$|\mathcal{S}'| = \text{nombre de substitutions}$

Construction

$$X = \{x_1, x_2, x_3\}, \mathcal{S} = \{\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_3\}, \{x_2\}\}$$

$|\mathcal{S}'| = \text{nombre de substitutions}$

Résultat

- ▶ Il n'existe pas de ratio d'approximation meilleur que $c \log |X|$ pour MINIMUM SET COVER (sauf si $P = NP$) [RAZ ET SAFRA 1997].

Résultat

- ▶ Il n'existe pas de ratio d'approximation meilleur que $c \log |X|$ pour MINIMUM SET COVER (sauf si $P = NP$) [RAZ ET SAFRA 1997].
- ▶ Il n'existe pas de ratio d'approximation meilleur que $c \log |V|$ pour MINIMUM SUBSTITUTIONS (sauf si $P = NP$) [RIZZI ET S. 2012].

Plan

Introduction

Complexité paramétrée

Recherche exacte de motifs

Recherche approchée de motifs

Perspectives

Perspectives

[KOMUSIEWICZ ET NIEDERMEIER, 2012]

Perspectives

- ▶ Utilisation de paramètres structurels (adaptés aux données biologiques)
- ▶ Algorithme déterministe en espace polynomial ?

Perspectives

- ▶ Utilisation de paramètres structurels (adaptés aux données biologiques)
- ▶ Algorithme déterministe en espace polynomial ?
- ▶ Le bruit pousse à la recherche d'extensions plus souples :
 - ▶ Contraintes sur les couleurs.
 - ▶ Contraintes sur la connexité :
 - ▶ Simple connexité : FPT,
 - ▶ 2-connexité : W[1]-difficile,
 - ▶ Modules : FPT.
 - ▶ Alternatives ?

Modules

Modules

a)

b)