

Tesis de Maestría

Búsquedas masivas de grafos de gran orden con grado y diámetro acotados

Alexis Rodríguez

Orientador: Eduardo Canale

Maestría en Ingeniería Matemática.

Facultad de Ingeniería, Universidad de la República.

Montevideo, Uruguay.

junio, 2013

Agradecimientos Le agradezco a Aileen Pedrozo que incondicionalmente estuvo a mi lado animándome a más. La presente tesis, no hubiese sido posible sin la guía de Eduardo Canale que con sabiduría y paciencia me llevó por este camino de conocimiento académico y desarrollo personal.

Agradezco especialmente el apoyo del equipo coordinador de la maestría por no cesar en la motivación de los alumnos a superarse.

Por el excelente trabajo que realiza el equipo del proyecto cluster FING, les agradezco por el uso de un poder de cómputo que no hubiese sido posible conseguir de otra manera.

Una de las mayores satisfacciones al enfrentar el problema fue descubrir una comunidad de investigadores que no dudaron en ayudarme dando respuestas a mis preguntas en todo momento a ellos: Francesc Comellas, Charles Delorme, Geoffey Exoo y Eyal Loz les agradezco el apoyo.

Finalmente, me gustaría agradecer a los miembros del tribunal que me honran al juzgar mi trabajo.

Índice general

1. Introducción	5
1.1. Definiciones básicas y notación	6
1.2. Cota de Moore	10
1.3. Complejidad Computacional	11
1.4. Grafos con defecto	14
1.5. Métodos Constructivos	15
2. Aproximaciones	23
2.1. Exoo	23
2.1.1. Introducción	23
2.1.2. Búsqueda	26
2.1.3. Resultados	33
2.2. Loz	36
2.2.1. Introducción	36
2.2.2. Grafos de voltaje y <i>lifts</i>	36
2.2.3. La búsqueda	42
2.2.4. Resultados	49
3. Conclusiones y Trabajo futuro	51
3.1. Trabajo Futuro	54

Capítulo 1

Introducción

El objetivo de la tesis es comprender el problema llamado: *Máximización del orden de grafos con grado y diámetro acotados*. Para ello se plantea formalmente el problema con una breve reseña histórica, además se presentan soluciones para casos particulares y problemas relacionados. A continuación se repasan las aproximaciones computacionales con mayor éxito a la fecha. En el siguiente capítulo, se muestran en profundidad dos estrategias para enfrentar el problema. Finalmente, en el último capítulo se plantean trabajos futuros como continuación de las líneas de trabajo actuales.

El problema del grado/diámetro se puede definir informalmente como la *búsqueda de grafos que maximicen la cantidad de vértices, con cierta cantidad máxima de aristas por vértice y con la distancia entre dos vértices acotada*.

La topología de una red de telecomunicaciones, de microprocesadores o redes locales de computadores se modela usualmente utilizando un grafo en el que los vértices representan nodos, mientras que arcos representan vinculaciones u otros tipos de conexiones entre ellos.

En el diseño de dichas redes que contengan grandes cantidades de no-

dos es frecuente que las restricciones sean sobre la cantidad de conexiones que cada nodo puede tener y la distancia máxima entre dos nodos.

Es en este marco que el problema del grado/diámetro tiene relevancia. Por ejemplo el diseño de super-computadoras como las utilizadas por el centro de investigación de turbulencia de la universidad de Standford [1] para la simulación de fluidos dinámicos durante el despegue y aterrizaje de aeronaves. Recientemente se utilizaron más de un millón de unidades de proceso para realizar dichas simulaciones [4]. Estas unidades de proceso, forman parte de un sistema que debe minimizar la latencia en la intercomunicación de nodos. Pero a su vez existe una limitación en la cantidad de líneas de comunicación disponibles por nodo. Hasta ahora es posible utilizar construcciones relativamente ineficientes, pero dada la tendencia a aumentar la capacidad de cómputo agregando unidades cobran importancia las herramientas para enfrentar el problema del grado/diámetro.

Por otro lado, el reciente desarrollo de las redes sociales como forma de comunicación hacen relevante el tener a disposición herramientas capaces de lidiar con grandes redes, como las que se obtienen como subproducto de aproximaciones a problemas de este tipo.

Como paso previo a la definición formal del problema es necesario hacer las siguientes definiciones extraídas de los libros de Diestel [22] y Biggs [11].

1.1. Definiciones básicas y notación

Un *grupo* es un conjunto G en conjunción con una función $f : G \times G \rightarrow G$, que se denota como $a \cdot b$ o ab para calificar como grupo, el par (G, \cdot) debe satisfacer las siguientes propiedades:

Asociativa: Para todos a, b y $c \in G$ se cumple que $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$.

Neutro: Existe un elemento $e \in G$ al que llamaremos *neutro* tal que para todos los elementos $a \in G$ se cumple que $e \cdot a = a \cdot e = a$

Inverso: Para todo elemento $a \in G$ existe un elemento $b \in G$ tal que $a \cdot b = b \cdot a = e$.

Como ejemplo de grupo, que usaremos en esta tesis, es \mathbb{Z}_n cuyos elementos son los enteros entre 0 y $n - 1$ y como operación la suma módulo n .

Definición. Sea (G, \cdot) un grupo, si un subconjunto $H \subset G$ cumple con la definición de grupo para la operación \cdot se le llama *subgrupo*.

Definición. Dado (G, \cdot) y $S \subset G$ se le llama *subgrupo generado por S* y se denota $\langle S \rangle$ al subgrupo que contiene todos los elementos que se pueden expresar por una cantidad finita de operaciones con los elementos de S y sus inversos. Si $\langle S \rangle = G$ se dice que S es *generador* de G .

Definición. En el contexto de teoría de grupos se le llama *orden del elemento g* al menor natural k que cumple $g^k = e$ donde e es el neutro del grupo.

Definición. Se entiende por *isomorfismo* entre dos grupos (G, \cdot) y (G', \circ) , a una biyección f entre los elementos de ambos grupos que preserva las operaciones. Es decir, se cumple que si $f(a) = a'$ y $f(b) = b'$ entonces $f(a \cdot b) = a' \circ b'$.

Definición. Sea un isomorfismo entre (G, \cdot) y (G', \circ) si $(G, \cdot) = (G', \circ)$ se le llama *automorfismo*. Al conjunto de automorfismos de G se lo nota como $Aut(G)$ que cumple la definición de grupo utilizando la composición de funciones como operación.

Formalmente un *grafo* Γ se compone de dos elementos: un conjunto de *vértices* o *nodos* que notaremos como $V\Gamma$ y un conjunto de *aristas* o *arcos* que notaremos como $E\Gamma$. Este último conjunto se compone de pares de vértices, dicho de otro modo $E\Gamma \subseteq V\Gamma \times V\Gamma$. Los elementos de este conjunto se notan como $e = (u, v)$ donde $(u, v) \in E\Gamma$ si y sólo si existe un arco desde el vértice u hasta el vértice v . Otra notación para la adyacencia de los vértices es: $u \sim v$. Cuando ambos extremos de la arista coinciden, es decir el arco comienza y termina en el mismo nodo se le llama *lazo* o *bucle*. Si dos aristas coinciden en los vértices de origen y destino a ese grafo se le llama *multigrafo*. En caso contrario y si además no contiene lazos se le llama *grafo simple*. Finalmente, cuando para cada arista $e = (u, v)$ existe una arista $f = (v, u)$ diremos que es un *grafo no dirigido*, en caso contrario diremos que es un *grafo dirigido*.

Definición. Se le llama *matriz de adyacencia* del grafo Γ a la matriz cuadrada de orden $n = |V\Gamma|$, que se nota como $A(\Gamma)$ donde las entradas a_{ij} son:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si } (i, j) \in E\Gamma, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Definición. Dado un grafo Γ se le llama *orden* al cardinal del conjunto de vértices $V\Gamma$.

Definición. Dado un grafo Γ se le llama *grado* de v al cardinal del conjunto de aristas en $E\Gamma$ que incluyen a v .

Definición. Un grafo Γ es *regular* si tiene el mismo grado en todos los vértices.

Definición. Dado un grafo Γ se le llama *grado máximo* al mayor grado de los vértices de Γ .

Definición. Se le llama *conexo* a un grafo Γ para el que existe un camino entre cualquier par de vértices del grafo.

Definición. Sea un grafo Γ y dos vértices $u, v \in V\Gamma$, se llama *distancia* $d(u, v)$ a la cantidad de arcos del camino más corto desde u hasta v . De no existir camino entre los vértices se dice que $d(u, v) = \infty$.

Definición. Sea un grafo Γ , se le llama *diámetro* a la mayor distancia entre dos nodos cualesquiera de Γ .

Definición. Dado un grafo Γ conexo, se le llama *excentricidad* a la función de $V\Gamma$ a \mathbb{N} dada por $\epsilon(u) = \max(d(u, v))$ con $u, v \in V\Gamma$. Notar que, cuando el grafo Γ no es conexo $\epsilon(v) = \infty \forall v \in V\Gamma$.

Definición. Se le llama *automorfismo de Γ* a una permutación π de $V\Gamma$ tal que se cumple: $\{u, v\} \in E\Gamma$ si y sólo si $\{\pi(u), \pi(v)\} \in E\Gamma$.

Se dice que dos vértices u y v pertenecen a la misma *órbita* si existe un automorfismo π tal que $\pi(u) = v$.

Definición. Se le llama *vértice-transitivo* a un grafo Γ si todos los vértices de $V\Gamma$ están en la misma órbita.

El problema del grado/diámetro se puede definir formalmente de la siguiente manera:

Definición. *Problema del grado/diámetro:* Dados dos números naturales Δ y k , encontrar el máximo número de vértices $n_{\Delta, k} = |V\Gamma|$ de un grafo conexo con grado máximo $\leq \Delta$ y diámetro $\leq k$ [47].

Análogamente se define el problema para grafos dirigidos cambiando el concepto de grado por grado de salida.

1.2. Cota de Moore

Esta cota refiere a la cantidad de vértices que un grafo puede tener con grado y diámetro acotado, esta surge naturalmente al contar la cantidad de vértices posibles. Supongamos un grafo Γ con grado máximo Δ y diámetro k . De los vértices $V\Gamma$ distingamos un nodo al que llamaremos u . Para determinar la cantidad máxima de vértices que puede tener Γ definiremos n_i , con $i = 0, \dots, k$ como la cantidad de nodos a distancia i desde el nodo u . Claramente $n_0 = 1$ y $n_1 = \Delta$, puesto que es el grado del vértice. Para distancia 2 tendremos a lo sumo $\Delta(\Delta - 1)$ tomando en cuenta el grado que asocia con el vértice a distancia 1 y así sucesivamente:

$$n_i \leq \Delta(\Delta - 1)^{i-1} \text{ para } i \geq 1.$$

Entonces,

$$|V\Gamma| = \sum_{i=0}^k n_i \leq \frac{\Delta(\Delta - 1)^k - 2}{\Delta - 2} = M_{\Delta,k}.$$

A los grafos que alcanzan la igualdad en la inecuación anterior se los conoce como *Grafos de Moore de tipo* (Δ, k) [12]. Que se alcanza en los casos triviales con $\Delta = 1$ o 2 y $k = 1$.

Hoffman y Singleton en 1960 [33] demuestran que la igualdad se puede alcanzar para $k = 2$ y $\Delta = 2, 3, 7$ y posiblemente para $\Delta = 57$. El grafo con $\Delta = 2$ es el anillo C_5 , con $\Delta = 3$ es el *grafo de Petersen* de la figura 1.1, finalmente con $\Delta = 7$ es el grafo conocido como *grafo de Hoffman-Singleton* que se puede ver en la figura 1.2 descubierto por los autores del mismo trabajo. En el caso de $k = 2$ y $\Delta = 57$, si bien no se pudo demostrar su no existencia todavía no se conoce ningún grafo con estas características, este es un problema abierto desde la presentación del trabajo.

Para valores de $\Delta \geq 3$ y $k \geq 3$ se demostró la inexistencia de grafos de Moore en 1973 por Damerell [19] y otro trabajo independiente de Bannai e Ito [6].

Tanto el anillo C_5 , el grafo de Petersen y el de Hoffman-Singleton son grafos altamente simétricos, este hecho es de interés por su vinculación con fenómenos excepcionales en pequeños grupos finitos. En contraste con este último, Higman demostró que el grafo para $k = 2$ y $\Delta = 57$ no puede ser vértice transitivo. Esto sería un indicio de que aunque el grafo existiera sería menos interesante que sus pares más pequeños [14]. Sin embargo este problema es interesante por ser de los primeros trabajos en teoría algebraica de grafos, a pesar de ello y los esfuerzos dedicados al problema se conocen pocas características del mismo como para reducir significativamente el espacio de búsqueda.

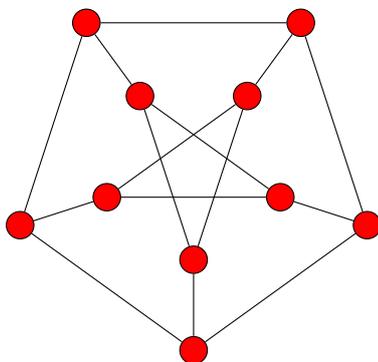


Figura 1.1: Grafo de Moore $k = 2$ y $\Delta = 3$.

1.3. Complejidad Computacional

Una de las características de los grafos de Moore y de los óptimos para el problema para diámetro k y grado Δ , es que cada vértice maximiza la cantidad de adyacentes a distancia k , para ello debe maximizar la can-

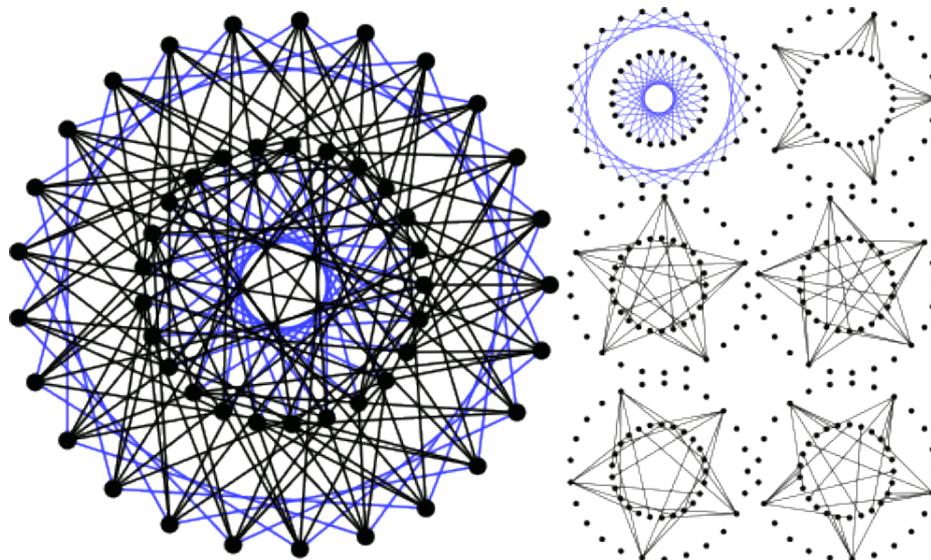


Figura 1.2: Grafo de Moore $k = 2$ y $\Delta = 7$ [33].

tividad de vértices a distancia $k - 1$ y así sucesivamente. Esto implica que no existirán dos caminos a un mismo vértice con distancias menores a k , dicho de otro modo grafos óptimos para el problema tenderán a tener pocos ciclos de tamaño menor o igual a $2k$. En este contexto se vinculan el problema del grado/diámetro y el problema *Max-g-Girth Subgraph* que a continuación se define:

Definición. Sea un grafo Γ se dice que tiene *girth* g si el menor ciclo contenido en Γ se compone de g arcos.

Definición. Para un grafo dado Γ y $g \in \mathbb{N} > 2$. El problema *Max-g-Girth Subgraph* busca el máximo subgrafo no inducido conexo con *girth* de por lo menos g .

Ambos problemas se relacionan puesto que los grafos de Moore son óptimos para los dos problemas, de hecho en el artículo [54] se vinculan las soluciones de ambos problemas. Por otra parte en 2008 Kortsarz et al. [37] demuestran que el problema *Max-g-Girth Subgraph* tiene complejidad NP-

Completo. Es decir, no se conocen algoritmos con complejidad polinómica que resuelvan este problema.

Otro problema vinculado es la maximización de la cantidad de vértices del subgrafo con diámetro y grado acotados, que se presenta en 2012 en el artículo [45]. Este problema restringe la búsqueda de grafos de gran orden con diámetro y grado acotados a un grafo específico, que es similar al problema origen de esta tesis. En el artículo se establece que en ciertas condiciones el problema es NP-Completo. Más precisamente, si restringimos la búsqueda a grafos con diámetro 1 el problema se convierte en la búsqueda de cliques máximos en un grafo, un problema conocido como NP-Completo [35].

Estas vinculaciones no implican que el problema del grado/diámetro sea NP-Completo, de hecho la complejidad del problema es desconocida hasta el momento [45], pero dada la relación entre ambos una conjetura conservadora lo colocaría en esa clase de problemas.

De acuerdo con la bibliografía [47] existen actualmente dos grandes líneas de trabajo en el área. La línea que investiga la existencia de grafos en la proximidad de la cota teórica y trabajos de construcción de grafos de gran orden utilizando herramientas computacionales. Sin embargo, los mejores resultados han sido obtenidos por métodos probabilísticos, por ejemplo en 1982 Bollobás y Fernandez [13] utilizando un modelo de grafos regulares aleatorios, muestran que conforme aumente la cantidad de vértices la probabilidad de que exista un grafo de cierto diámetro k tiende a 1. Es evidente que este tipo de resultados no implica obtener grafos en concreto puesto que se trata de resultados teóricos.

Los trabajos analíticos que se concentran sobre la existencia de grafos con [44] orden cercano a la cota de Moore consisten en el análisis de la

existencia de grafos con orden $M_{\Delta,k} - \delta$ para δ pequeños. A este parámetro se le conoce como *defecto*, usualmente se trata de $\delta \leq \Delta$. A continuación se presenta un breve resumen de los resultados de esta rama.

1.4. Grafos con defecto

En 1980 Erdős, Fajtlowicz y Hoffman [24] demostraron que no existen grafos con grado Δ , diámetro 2 y defecto 1 más allá del ciclo C_4 . Este resultado fue generalizado por Bannai e Ito [7] y por Kurosawa y Tsujili [38] para todos los diámetros, esto implica que para $\Delta \geq 3$ no existen grafos con defecto 1 y para $\Delta = 2$ los únicos grafos con esas características son los ciclos C_{2k} con k el diámetro.

En relación a los grafos con defecto $\delta = 2$, con grado $\Delta = 2$ los únicos grafos son los ciclos C_{2k-1} . Mientras que para $\Delta \geq 3$ se conocen solo 5 grafos (Δ, k) : dos grafos de orden 8 para el par $(3, 2)$, uno para el par $(4, 2)$ de orden 15, un grafo de orden 24 en el par $(5, 2)$, finalmente un grafo de orden 20 para el par $(3, 3)$. Este último grafo se puede construir a través de cierto producto utilizando el grafo C_5 como se muestra en el trabajo de Bermond, Delorme y Farhi [10]. Recientemente en el trabajo de Miller, Nguyen y Pineda-Villavicencio [43] se demostró que para varios valores de Δ los grafos de diámetro 2 no existen con defecto $\delta = 2$. Miller y Simanjuntak en un artículo publicado más recientemente [46] demuestran que un grafo con grado 4 y diámetro $k \geq 3$ no puede tener defecto $\delta = 2$. Finalmente para diámetros mayores o iguales a 4 y grado 3 Jørgensen en 1992 [34] demostró que su defecto es $\delta \geq 3$. En el caso de $k = 4$ se había alcanzado el resultado previamente en 1980 por Stanton, Seach y Cowan [52].

Diámetro (k)	Grado (Δ)	Cota superior
1	≥ 1	$M_{\Delta,1}$
2	2, 3, 7, 57	$M_{\Delta,1}$
	≥ 2	$M_{\Delta,1} - 2$
3	2	$M_{2,3}$
	3	$M_{3,3} - 2$
	4	$M_{4,k} - 3$
	≥ 5	$M_{\Delta,3} - 2$
≥ 4	2	$M_{2,4}$
	3	$M_{3,k} - 3$
	4	$M_{4,k} - 3$
	≥ 5	$M_{\Delta,k} - 2$

Cuadro 1.1: Resumen de los resultados conocidos sobre la existencia de grafos con defecto.

El cuadro 1.1 muestra un resumen de los esfuerzos de aproximar la cota de Moore desde el límite superior. Si bien los trabajos son interesantes, desde el punto de vista de las herramientas teóricas desarrolladas, la reducción de la cota es en pocas unidades. En particular, es destacable el análisis de valores propios sobre la matriz de adyacencia utilizado en el trabajo de Erdős, Fajtlowicz y Hoffman [24], que sirve de base para otros trabajos como el de Hoang y Nguyen [44], que trata sobre la no existencia de grafos con defecto $\delta = 2$ dadas ciertas condiciones estructurales de los grafos .

1.5. Métodos Constructivos

Como forma de fomentar el avance en la construcción de grafos de gran orden algunos investigadores mantienen tablas *online* [17, 39, 20] con los grafos más grandes conocidos al momento, estas tablas obran como compendio de los esfuerzos de construcción en este problema y es ahí donde se pueden observar los avances en esta dirección, para la mayoría de las

instancias del problema todavía no se alcanzó la mitad de la cota teórica.

El enfoque de esta tesis, está en los mecanismos que implican algún tipo de heurística en la construcción de grafos relevantes para el problema. Esto no significa que las otras estrategias no hayan sido efectivas. Dentro de las técnicas, que no implican la utilización de gran poder de cómputo, se destaca el método conocido en la bibliografía como *star product* presentada en los artículos de Bermond, Delorme y Farhi [9, 10, 8].

El *star product* de dos grafos H y K se puede explicar de la siguiente manera: dada una orientación \vec{D} de todas las aristas de H . A cada elemento uv en \vec{D} se le asigna una función biyectiva en los vértices de K $f_{uv} : VK \rightarrow VK$. Se define el grafo $H * K$ como el grafo en el que los vértices son el producto cartesiano $VH \times VK$, en cuanto a las aristas, (u, s) será adyacente a (v, t) si $u = v$ y s es adyacente a t en K o bien $uv \in \vec{D}$ y $f_{uv}(s) = t$. De forma que $H * K$ se puede ver como $|VH|$ copias de K donde las adyacencias entre copias quedan definidas por una función dependiendo de la orientación elegida. En cuanto al grado y diámetro de $H * K$ en [10] se establece que si Δ_H y Δ_K son respectivamente los grados máximos de H y K entonces el grado máximo de $H * K$ será $\Delta_H + \Delta_K$. En relación al diámetro de $H * K$ será menor o igual a la suma de los diámetros de H y K , por lo que una selección adecuada de las funciones biyectivas puede construir un grafo de diámetro adecuado para el problema.

Como ejemplo de *star product* veamos como sería $K_2 * C_5$, donde K_2 es el grafo completo de dos vértices y C_5 el grafo ciclo de tamaño 5. Identifiquemos los vértices de K_2 como 0 y 1 elementos de \mathbb{Z}_2 . De forma análoga asignemos un elemento de \mathbb{Z}_5 a cada vértice de C_5 como forma de identificarlos. Si asignamos al arco que va de 0 a 1 la función $f_{(0,1)}(x) = x$ con $x \in \mathbb{Z}_5$, se construye el grafo de la figura 1.3. Notar que los vértices de

cada copia de C_5 están unidos de acuerdo a su numeración, puesto que la función que utilizamos es la identidad. Con esta función construimos un grafo de diámetro 3. Veamos ahora que sucede con $f_{(0,1)}(x) = 2x$ en la figura 1.4. Las adyacencias en el ciclo de vértices rojos se preserva incambiada, pero el cambio de adyacencias entre vértices azules y rojos produce un grafo de diámetro 2.

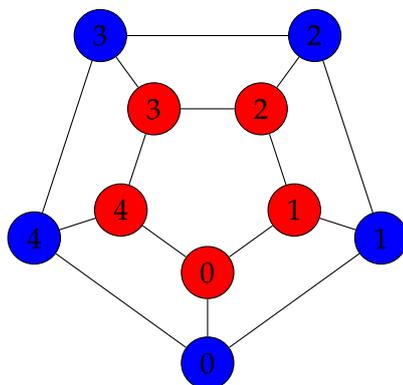


Figura 1.3: $K_2 * C_5$ con $f_{(0,1)}(x) = x$.

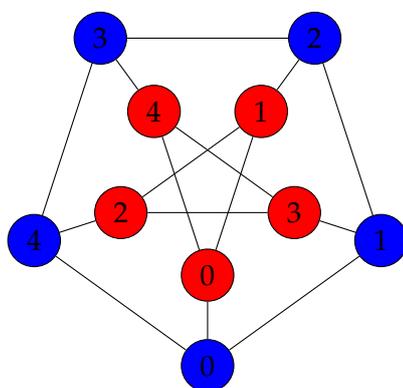


Figura 1.4: $K_2 * C_5$ con $f_{(0,1)}(x) = 2x$.

Recientemente generalizaciones de este método mezclado con otras construcciones han dado origen a varios resultados de la Tabla 1.2. En 2002 Delorme y Gómez [21] presentan varias estrategias para construir grafos de manera analítica que se basan en la composición de grafos. En-

tre ellas se utiliza como base grafos de Moore bipartitos, sobre los cuales en 2005 Martí y Gómez llegan a nuevos resultados para grafos de diámetro 3. Posteriormente en 2005 los mismos autores [30] utilizan con éxito otra técnica basada en la sustitución de ciertos vértices de un grafo de Moore bipartito por grafos completos y agregando aristas, de manera de alcanzar las metas de diámetro para el problema. Finalmente en 2006 esta vez junto a Miller [31] presentan dos familias de grafos compuestos con diámetro 10.

Las técnicas analíticas han demostrado ser efectivas en grafos de pequeño y mediano orden y es frecuente que las mejoras presentadas sean en pocas unidades. Sin embargo cualquier mejora obtenida desde este enfoque es valiosa por su potencial aplicación en composición con otras técnicas. Además tienen la propiedad de no depender del poder de cómputo. De hecho en [31] se presenta un grafo récord con orden de billones de nodos que. Ese récord, al momento de escribir esta tesis, no ha sido batido.

Los resultados presentados anteriormente se muestran en los correspondientes artículos como aplicación de técnicas analíticas, sobre las cuales no se realizan búsquedas masivas de grafos. Descompongamos ahora las aproximaciones que sí involucran algún tipo de heurística y que son el objetivo de análisis de esta tesis. Estos resultados se pueden apreciar en el cuadro 1.2 que se corresponde con la tabla mantenida por Comellas en el sitio [17], donde cada color identifica al investigador que obtuvo los resultados.

- *Grafos de voltaje*, inicialmente aplicados al problema por McKay, Miller y Širáň; más tarde también por Loz y finalmente como subproducto de esta tesis [40, 41, 15] en color naranja. También utilizando esta técnica y como extensión del trabajo de Loz los resultados obtenidos

Δ/k	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3	10	20	38	70	132	196	336	600	1250
4	15	41	98	364	740	1320	3243	7575	17703
5	24	72	212	624	2772	5516	17030	53352	164720
6	32	111	390	1404	7917	19282	75157	331387	1212117
7	50	168	672	2756	11988	52768	233700	1124990	5311572
8	57	253	1100	5060	39672	130017	714010	4039704	17823532
9	74	585	1550	8268	75893	270192	1485498	10423212	31466244
10	91	650	2223	13140	134690	561957	4019736	17304400	104058822
11	104	715	3200	18700	156864	971028	5941864	62932488	250108668
12	133	786	4680	29470	359772	1900464	10423212	104058822	600105100
13	162	851	6560	39576	531440	2901404	17823532	180002472	1050104118
14	183	916	8200	56790	816294	6200460	41894424	450103771	2050103984
15	187	1215	11712	74298	1417248	8079298	90001236	900207542	4149702144
16	198	1600	14640	132496	1771560	14882658	104518518	1400103920	7394669856

Cuadro 1.2: Tabla con los mejores resultados conocidos para el problema al momento de escribir esta tesis.

por las técnicas que se describirán en esta tesis en color rojo. En total constan de 63 casilleros en la tabla.

- El trabajo de Exoo, tiene 11 entradas en la tabla en color amarillo, que propone una aproximación heurística sobre una familia particular de grafos [26].
- James Allwright construye la entrada (4, 3) con orden 41 en base a una heurística de su autoría a la que no fue posible acceder para su análisis [5].
- La entrada (8, 3) por Comellas y Mitjana, de la que no tenemos otros datos que es un grafo de Cayley. Se infiere cierto tipo de heurística, pero no existe información sobre el trabajo.
- Un caso similar se da en la entrada (7, 4) con orden 672 también como grafo de Cayley.
- Dineen en su tesis de maestría aplica búsquedas aleatorias sobre grafos de Cayley [23]. Que se corresponde con la entrada (7, 5) de la tabla.

De acuerdo a [47] existen varios tipos de aproximaciones de construcción al problema, pero centrándonos en las estrategias que utilizan mecanismos heurísticos vemos que la tabla consta de 126 casilleros, y estas aproximaciones suman 78 entradas en total o lo que es equivalente un 61 % de las entradas de la tabla, que fueron aportadas en los últimos diez años. A su vez dentro de esta categoría claramente destacan las aproximaciones de Exoo y de Loz, que se desarrollarán en profundidad en las secciones siguientes.

En cuanto a las otras entradas, la mayoría se basan en búsquedas sobre *grafos de Cayley* [16] que se define de la siguiente manera:

Definición. Dado un grupo G y un conjunto generador S donde $e \notin S$, se le llama *grafo de Cayley* $\Gamma(G, S)$, donde $V\Gamma = G$ y dos vértices h y g son adyacentes si y sólo si $h = gs$ para algún elemento $s \in S$.

La definición anterior implica que los grafos de Cayley son dirigidos, *para que sean no dirigidos se deberá cumplir que $S = S^{-1}$* puesto que para cualquier arista entre g y h existirá un elemento $s \in S$ que hace que se cumpla $h = gs$ pero si $s^{-1} = t \in S$ entonces también existirá la arista entre h y g puesto que $g = ht$. En lo que respecta al grado, se puede calcular tomando en cuenta que si $s \in S$ y $s = s^{-1}$ entonces aportara dos unidades a cada vértice y en caso contrario sólo aportará uno. El orden de Γ es igual al orden de G . Por lo tanto, con este mecanismo es fácil construir grafos de gran orden. Con grado computable antes de la construcción del grafo.

Además se cumple que los grafos de Cayley tienen una propiedad que simplifica el cómputo del diámetro. Veremos que *los grafos de Cayley son vértice transitivos*. Dada la función $f_r(a) = ra$. Esta función es un automorfismo de $\Gamma(G, S)$ dado que si h y g son adyacentes entonces existirá s tal que $h = gs$. Ahora veamos que $f_r(h)$ es adyacente a $f_r(g)$ dado que

$rh = rgs$.

Por otro lado, para cualquier a y b existirá un $s = ba^{-1}$ que hace que $b = sa$, entonces existirá una función $f_s(a) = b$ que será automorfismo. Por lo tanto a y b están en la misma órbita. Lo que implica que, todos los vértices de $\Gamma(G, S)$ están en la misma órbita. Entonces $\Gamma(G, S)$ es vértice transitivo.

Esta propiedad implica que todos los vértices tienen la misma excentricidad. Puesto que por cada camino entre un par de vértices g y h existirá un único camino entre $f(g)$ y $f(h)$, de modo que la cantidad de vértices a distancia d desde cualquier vértice se preserva a través de la función f , por lo que la excentricidad se mantiene.

En cuanto a la aplicación de esta técnica a las construcciones de la tabla, dado que es dependiente del conjunto generador, una aproximación posible es realizar una búsqueda heurística sobre el espacio de los conjuntos generadores del grupo G . Esto tiene la ventaja de reducir el espacio de búsqueda, en relación al tamaño del espacio de todos los grafos conexos con orden y grado adecuado. Es por ello que esta técnica se ha vuelto popular en los últimos tiempos.

Capítulo 2

Aproximaciones

2.1. Exoo

2.1.1. Introducción

En esta sección desglosaremos el trabajo de Geoffrey Exoo [26], en el que se describe la técnica utilizada y además oficia de divulgación de diez nuevos valores para la tabla [17].

Sean un entero $s > 0$ y un grafo Γ con $|V\Gamma| = r$ que admite lazos y múltiples arcos entre dos vértices. A cada arco se le asigna un elemento de \mathbb{Z}_s . Con la restricción que si un arco (u, v) tiene asignado el elemento k existirá un arco (v, u) y tendrá asignado $-k$ como elemento de \mathbb{Z}_s . Claramente, Γ es no dirigido puesto que esta restricción implica que si existe un arco (u, v) existirá también un arco (v, u) .

Esta estructura se puede resumir con una matriz similar a la matriz de adyacencia, con la diferencia que cada entrada es un subconjunto de elementos de \mathbb{Z}_s :

$$A_{x,y} \subseteq \begin{cases} \mathbb{Z}_s & \text{si } (x,y) \in E\Gamma, \\ \emptyset & \text{si } (x,y) \notin E\Gamma. \end{cases}$$

Notar que la matriz cumple que todos los elementos de $A_{y,x}$ son los opuestos de $A_{x,y}$.

Sobre esta estructura se construye un grafo $\widehat{\Gamma}$ de la siguiente manera:

$$V\widehat{\Gamma} = \{v_{i,j} : i \in \mathbb{Z}_r, j \in \mathbb{Z}_s\}.$$

En cuanto a las adyacencias diremos que:

$$v_{i,j} \text{ es adyacente a } v_{l,m} \Leftrightarrow \begin{cases} e = (i,l) \in E\Gamma \text{ y adem\u00e1s,} \\ m = j + k \end{cases} \quad k \in A_{i,l}.$$

Veamos lo que sucede con los elementos de la diagonal de la matriz A , es decir los subgrafos de los v\u00e9rtices $V\widehat{\Gamma}_i = \{v_{i,j}, j \in \mathbb{Z}_s\}$. Dado $k \in A_{i,i}$ seg\u00fan lo descripto $v_{i,l}$ ser\u00e1 adyacente a $v_{i,l+k}$ que ser\u00e1 a su vez adyacente a $v_{i,l+k+k}$. Desde el punto de vista del grupo \mathbb{Z}_s $v_{i,l+k+k} = v_{i,l+2k}$, entonces $v_{i,l+mk}$ ser\u00e1 adyacente a $v_{i,l+(m+1)k}$. Ahora, supongamos que el orden de k es n , lo que implica que $nk \equiv 0 \pmod s$ entonces $v_{i,l+(n-1)k}$ ser\u00e1 adyacente a $v_{i,l}$. Entonces, por cada k se genera un ciclo de tama\u00f1o el orden del elemento k , exceptuando el caso en que k es *involutivo*, es decir que $k + k = 0$. En ese caso se genera un *matching* entre los v\u00e9rtices de $V\widehat{\Gamma}_i$.

Dado que el tama\u00f1o de los ciclos es importante para nuestro problema, veamos un m\u00e9todo para determinar el orden de los elementos de \mathbb{Z}_s . Utilizaremos la funci\u00f3n $\gcd(a,b)$ que es *m\u00e1ximo com\u00fan divisor* de a y b , mientras que $\text{lcm}(a,b)$ corresponde a *m\u00ednimo com\u00fan m\u00faltiplo* de los par\u00e1metros. En

el caso de \mathbb{Z}_s claramente el orden del elemento k será el menor entero positivo m que hace que se cumpla la congruencia $km \equiv 0 \pmod{s}$ o lo que es lo mismo $km = \text{lcm}(k, s)$. Recordemos que $\text{gcd}(a, b) = ab / \text{lcm}(a, b)$, entonces $km = ks / \text{gcd}(ks)$ por lo que el orden será $s / \text{gcd}(k, s)$. Esto también implica que se generarán $\text{gcd}(k, s)$ ciclos, salvo que tengan orden 1 en cuyo caso no se generarán ciclos.

Tomemos de ejemplo $s = 6$ si $k = 3$ que es involutivo, se genera el subgrafo de la figura 2.1(a), mientras que si $k = 2$ entonces $\text{gcd}(6, 2) = 2$ por lo que se generan dos ciclos como se muestra en la figura 2.1(b), finalmente si $k = 1$ $\text{gcd}(6, 1) = 1$ por lo que se genera un solo ciclo como se puede apreciar en la figura 2.1(c)

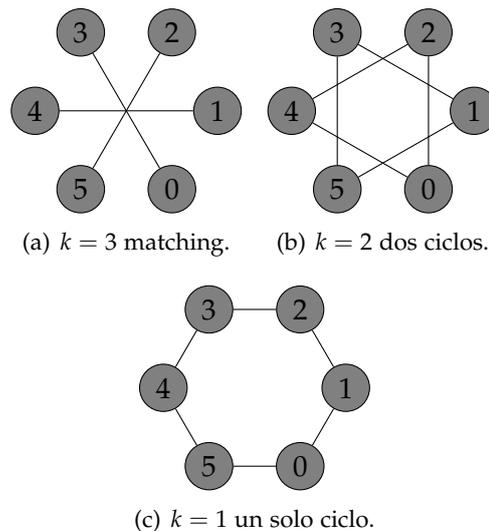


Figura 2.1: Subgrafo generado a partir de la diagonal de A .

Ejemplo de $\hat{\Gamma}$

Para fijar ideas veamos el grafo cociente de la figura 2.2, $r = 2$ y $s = 5$.

La matriz correspondiente sería:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

El resultado es el grafo de Petersen de la figura 2.3 donde los vértices en azul serán los $v_{i,j}$ con $i = 1$ y en rojo los que tienen $i = 2$ como en 2.3(a). Según la matriz cada $v_{1,j}$ se conectará con $v_{1,l}$ con $l = i + 1 \pmod{5}$ conformando el ciclo de vértices rojos, así mismo los vértices $v_{2,j}$ serán adyacentes a $v_{1,m}$ con $m = i + 2 \pmod{5}$ que se puede ver en la figura 2.3(b). Finalmente en la figura 2.3(c) $v_{1,i}$ se conecta con $v_{2,i}$ de acuerdo con los valores de la matriz para $(1,2)$ y $(2,1)$.

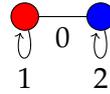


Figura 2.2: Γ .

2.1.2. Búsqueda

Utilizando esta construcción el autor propone como espacio de búsqueda variantes de la matriz, manteniendo r y s , es decir el tamaño del grafo Γ y el grupo utilizado en la matriz. La búsqueda entonces, se concentra en minimizar el diámetro de $\hat{\Gamma}$ manteniendo el grado dentro de lo factible. Veamos que sucede con el grado de los vértices del grafo construido. Para cada k en $A_{i,j}$ fuera de la diagonal existirá un adyacente, por lo que aportan al grado de ambos vértices una unidad, mientras que para los que

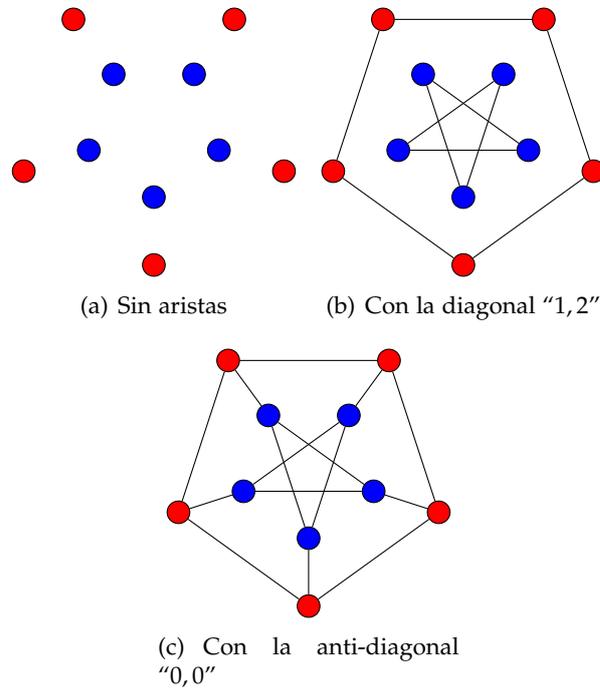


Figura 2.3: $\hat{\Gamma}$ Ejemplo de construcción de Exoo para el grafo de Petersen.

están en la diagonal, por lo que vimos en la figura 2.1, si $k = s/2$ aporta una unidad y sino aporta dos unidades:

$$\delta(v_{i,j}) = 2|\{l \in A_{i,i} : l \neq s/2\}| + |\{l \in A_{i,i} : l = s/2\}| + \sum_{y \neq i} |A_{i,y}|$$

Esto implica que es posible determinar el grado máximo de $\hat{\Gamma}$ a partir de la matriz A , por lo que se pueden descartar matrices que produzcan grafos por fuera del objetivo de Δ , sin tener que generar $\hat{\Gamma}$.

Pero veamos además que dado un i , todos los vértices $v_{i,j}$ tienen la misma excentricidad. Recordemos que $\epsilon(v)$ denota la excentricidad del vértice v .

Lema. Para todo $i \in \mathbb{Z}_r$:

$$\epsilon(v_{i,j}) = \epsilon(v_{i,l}) \quad \forall j, l \in \mathbb{Z}_s$$

Demostración. Si el grafo es inconexo se cumple por definición de excentricidad. En el caso que $\epsilon(v_{i,j}) = k$ entonces existirá un camino simple: $v_{i,j}, v_{i_2,j_2}^2, \dots, v_{i_{k+1},j_{k+1}}^{k+1}$, que llamaremos W . Para ello se deberán cumplir las condiciones de adyacencia para todo $n \leq k$:

- $v_{i_n} \sim v_{i_{n+1}}$ en Γ .
- $j_n \equiv j_{n+1} + \lambda_n \pmod{s}$ con $\lambda_n \in A_{i_n, i_{n+1}}$.

Dado $x \in \mathbb{Z}_s$, sea la función $T_x : V\widehat{\Gamma}_i \rightarrow V\widehat{\Gamma}_i$ dada por: $T_x(v_{i,j}) = v_{i,j+x}$. Veamos ahora que existe un camino W' que parte de $v_{i,j+x}$ de igual tamaño que W y además que W existe si y sólo si W' existe. Dado que la primera condición de adyacencia permanece incambiada para ambos caminos es suficiente ver que para la segunda condición se cumple que $j_n \equiv j_{n+1} + \lambda_n \pmod{s}$ si y sólo si $j_{n+1} + x \equiv j_n + x + \lambda_n$ o lo que es equivalente, $v_{i_n, j_n}^n \sim v_{i_{n+1}, j_{n+1}}^{n+1}$ sí y sólo si $T_x(v_{i_n, j_n}^n) \sim T_x(v_{i_{n+1}, j_{n+1}}^{n+1})$. Dado que para cualquier $v_{i,j}$ y $v_{i,l}$ existirá un $k = l - j$ que haga que $T_k(v_{i,j}) = v_{i,l}$ por lo tanto se cumple la tesis para todos los elementos de $V\widehat{\Gamma}_i$. \square

Una estrategia posible para calcular el diámetro consiste en calcular la distancia a todos los vértices partir de cada vértice, para ello se puede utilizar BFS. Dado que este algoritmo tiene orden $O(|V\widehat{\Gamma}| + |E\widehat{\Gamma}|)$ el orden total del cómputo sería $O(|V\widehat{\Gamma}|^2 + |V\widehat{\Gamma}||E\widehat{\Gamma}|)$. Con el resultado anterior, podemos calcular el diámetro a partir de un sólo elemento de cada $V\widehat{\Gamma}_i$ por lo que el orden sería $O(s|V\widehat{\Gamma}| + s|E\widehat{\Gamma}|)$ que es equivalente a: $O(s|V\widehat{\Gamma}| + s|V\widehat{\Gamma}|\Delta/2)$. Recordemos que $|V\widehat{\Gamma}| = rs$ lo que implica que el orden de la

$\Delta = 3$		$\Delta = 4$		$\Delta = 5$	
n	Cantidad de grafos	n	Cantidad de grafos	n	Cantidad de grafos
4	1	5	1	6	1
6	2	6	1	8	3
8	5	7	2	10	60
10	19	8	6	12	7848
12	85	9	16	14	3459383
14	509	10	59	16	2585136675
16	4060	11	265		
18	41301	12	1544		
20	510489	13	10778		
22	7319447	14	88168		
24	117940535	15	805491		
		16	8037418		
		17	86221634		
		18	985870522		

Cuadro 2.1: Tablas de Meringer que muestran la cantidad de grafos en función de la cantidad de vértices n y el grado Δ extraídas de [42].

operación sería $O(rs^2 + rs^2\Delta/2)$. Por lo tanto el orden es $O(rs^2)$.

En cuanto al tamaño de esta familia, consideramos solamente los grafos Γ que sean Δ regulares. Determinar el tamaño de ese conjunto es en sí mismo un problema complejo que todavía se encuentra abierto, existen trabajos como el de Meringer [42] que ofrecen tablas que, dada la cantidad de vértices y el grado, dicen cuántos grafos no isomorfos existen. Los valores del cuadro 2.1 crecen exponencialmente con la cantidad de vértices n por ejemplo en el caso de $(n = 10, \Delta = 3)$ vale 9 pero para $(n = 20, \Delta = 3)$ vale 510489. Esto significa que el espacio de búsqueda aun para valores pequeños es de tamaño considerable. Exoo utiliza una metaheurística para explorar este espacio. Dicha metaheurística puede ser caracterizada como una mezcla entre *Tabu Search* y *Simulated Annealing*. De acuerdo al autor, dado el tamaño del espacio de búsqueda es posible que otros métodos sean también exitosos. Esta metaheurística ya había sido aplicada con éxito al problema de búsquedas de coloraciones de Ramsey por el mismo autor [25]. A continuación se desglosan los conceptos principales y se presenta propiamente el algoritmo utilizado.

Tabu Search Creada por Glover en 1989 [29] es una metaheurística que se utiliza para resolver problemas de optimización combinatoria. Tabu search está basada en búsquedas locales. Esto es, moverse iterativamente desde una solución potencial a otra en la cercanía de mejor calidad, hasta que se satisface el criterio de parada. Para evitar que el proceso converja tempranamente a soluciones sub-óptimas Tabu search mantiene una lista de soluciones recientemente visitadas lo que le impide volver sobre sus pasos en movimientos consecutivos. El largo de esta lista puede ser variable a lo largo de la vida del proceso, esto permite controlar el nivel de exploración del espacio.

Simulated Annealing Es una metaheurística que debe su nombre a que está inspirada en el comportamiento a nivel molecular en la aleación de metales. Durante este procedimiento se somete a altas temperaturas al metal y después se le enfría, cambiando la configuración de las moléculas. Esta metaheurística fue descrita independientemente por Kirkpatrick et al. en 1983 [36] y por Černý en 1985 [53]. En cada paso *Simulated Annealing* considera los estados vecinos de la solución y decide probabilísticamente cambiar de estado o permanecer en el que está. Estas probabilidades cambian a la largo del tiempo, análogamente a como en el proceso de aleación aumenta y disminuye la temperatura.

En la figura 2.4 se describe el algoritmo utilizado por Exoo. Se parte de una solución inicial a la que se le hacen k modificaciones. Para cada una de estas modificaciones que se evalúan según f que es la función que determina cuán buena es la solución. Luego se repite el bucle utilizando como original la mejor de las modificaciones. Paralelamente se dan dos procesos: por un lado la selección de las mejores soluciones depende de la

temperatura actual. Este valor varía a lo largo de la ejecución análogamente a como se hace en *Simulated Annealing*. Por otro lado se mantiene una lista de soluciones ya visitadas de forma de evitar la convergencia temprana. Si bien en el artículo no se dan mayores detalles esta mezcla permite controlar el balance entre explotación y exploración mediante el control del tamaño de la lista H y la variación de la temperatura T .

```

initialize_randomly(V);
H ← ∅;
T ← MAX_TEMP;
repeat
  H ← H ∪ V;
  S ← ∅;
  foreach i ∈ {1...k} do
    Vi = perturb(V);
    if Vi ∈ H then
      | di ← MAX_INT;
    end
    else
      | di ← f(Vi) - f(V);
    end
    S ← S ∪ {(Vi, di)};
  end
  sort(S);
  V ← choose_random(top(S, T));
  decrement(T);
until stop_condition(V);

```

Figura 2.4: Pseudocódigo del algoritmo utilizado por Exoo en [25].

El autor no expone mayores detalles de la implementación ni en lo referente a las modificaciones de la solución inicial ni a los valores de los parámetros relevantes, como la variación de la temperatura o el tamaño de la lista H o en referencia a la función que se optimiza.

Se indican a continuación los criterios utilizados en nuestra implementación.

- La función objetivo está relacionada con el diámetro del grafo y la cantidad de vértices a distancia máxima entre sí. El diámetro no es una buena medida de la calidad de los grafos. Puesto que, dados dos grafos con el mismo diámetro, se entiende que será mejor aquel que tenga menor cantidad de vértices con excentricidad máxima. Aún así, esta función de optimización es altamente volátil, pequeños cambios en las aristas pueden producir grandes variaciones en el diámetro y viceversa. Tomar en cuenta estos vértices no resuelve este problema pero si ayuda a afinar los criterios de optimización.
- La temperatura T disminuye linealmente según la cantidad de iteraciones del algoritmo, pero existe el concepto de cantidad de iteraciones sin cambio. Una vez alcanzado cierto umbral T se reinicia a MAX_TEMP . Esta estrategia ayuda a la búsqueda de soluciones que en principio están lejos de las óptimas. En el trabajo original [25] no se dan detalles, pero podemos presumir que la implementación del autor funciona de la misma forma, pues este mecanismo de reajuste periódico de temperaturas es parte central de *Simulated Annealing*.
- Dada cierta cantidad de iteraciones, se genera nuevamente la matriz del grafo cociente. Durante la serie de experimentos de la implementación, notamos que no siempre a partir de una solución se llega a grafos interesantes desde el punto de vista del diámetro. Esto está vinculado a que la exploración del espacio, aún con las variaciones de la temperatura está de alguna manera confinada a cierta región. Con este mecanismo nos aseguramos que exista una explo-

ración más pareja, este tipo de mecanismos está más asociado con otras metaheurísticas más cercanas a *GRASP* [27].

- Para las modificaciones del grafo cociente se tomó el camino de hacerlo probabilístico. Cada perturbación de la solución original puede o cambiar un valor asociado a una arista o modificar las aristas existentes. Dado que cambios aleatorios sobre la matriz no siempre generan grafos válidos, se tomó la decisión de operar sobre el grafo cociente y reflejar los cambios en la matriz asociada. Evidentemente no es posible evaluar todas las modificaciones posibles de un grafo en cada paso por lo que se siguen las líneas del trabajo original que operan con cierta cantidad acotada de vecinos. Es natural que las perturbaciones en el trabajo original sean de este estilo, por las características de los objetos de optimización.

2.1.3. Resultados

El artículo publicado en 1998 [25] ha sido origen de varios resultados en la tablas [17, 39]. Se presentan en el cuadro 2.2 estos valores. Como se puede apreciar esta técnica es efectiva para grafos de bajo orden en relación a otros valores de la tabla. Esto indicaría que otras técnicas no son tan efectivas en instancias más pequeñas del problema, que por ser más accesibles en cuanto a poder de cómputo han sido más exploradas.

En negrita en el cuadro 2.2 se encuentran los resultados que pudimos comprobar con nuestra implementación, que a pesar de las posibles diferencias con la implementación original probó ser efectiva para comprobar los resultados. Incluso en el caso del grafo con orden 98 arribamos al resultado en forma concomitante con el autor.

La implementación fue realizada en el lenguaje *c++* utilizando *boost*

Grado	Diámetro	Orden
3	6	132
3	7	196
3	8	336
3	9	600
3	10	972
3	11	1600
3	12	2916
4	4	98
4	7	1296
4	8	3087
5	3	72
5	4	212
5	5	620
6	3	111
6	4	384
7	3	168
7	6	11232
11	2	104
14	3	912
16	2	198

Cuadro 2.2: Tabla con los récords obtenidos por Exoo. Los resultados que pudieron ser comprobados en negrita.

como biblioteca para grafos que se utiliza para calcular el diámetro aprovechando la implementación de BFS de la misma. El código fuente se encuentra disponible en [50].

Las ejecuciones se realizaron en el cluster FING [2] en ejecuciones de 48 horas. La mejora más accesible a la implementación tiene que ver con el paralelismo, una forma de hacerlo es paralelizar las evaluaciones de las matrices, es decir se podría utilizar un *thread-pool* para realizar en forma paralela y asíncrona la evaluación de estos elementos, que como se mostró anteriormente es central para la búsqueda.

2.2. Loz

2.2.1. Introducción

En 2006 Eyal Loz y Jozef Širáň [40] cambiaron más de la mitad de los valores de la tabla de mejores resultados [17, 39, 20]. Por ello, el estudio de esta metodología es ineludible en el análisis de las aproximaciones recientes al problema del grado/diámetro. La técnica utilizada se llama Grafos de Voltaje la cual fue usada por primera vez por Ringel y Young para la demostración de la conjetura de Headwood [48]. Antecedentes de Grafos de Voltaje se pueden encontrar en [41]. La técnica implica la generación aleatoria de grafos de gran orden a partir de grafos de menor porte.

2.2.2. Grafos de voltaje y *lifts*

Dado un grafo Γ que se llama *cociente* no dirigido que admite lazos y aristas múltiples, se define el conjunto de semi-aristas $S\Gamma$ de la siguiente manera: $\{u, v\} \in E \Rightarrow \{(u, v), (v, u)\} \subseteq S\Gamma$. De esta forma por cada arista en Γ tendremos un par de elementos en $S\Gamma$. Por notación si $e = (u, v) \in S\Gamma$ entonces $e^{-1} = (v, u)$ será el otro componente de la arista.

Se define además una función $\alpha : S\Gamma \rightarrow G$ donde G es un grupo, con la condición de que $(\alpha(e))^{-1} = \alpha(e^{-1}) \forall e \in S\Gamma$. A la aplicación de esta función sobre Γ se le llama asignación de voltaje.

Se le llama *lift* Γ^α al siguiente grafo:

- $V\Gamma^\alpha = V\Gamma \times G = \{v_g : v \in V\Gamma, g \in G\}$.
- $E\Gamma^\alpha = S\Gamma \times G = \{e_g : e \in S\Gamma, g \in G\}$.
- e_g une a los vértices u_g y v_h si e une a u y v en Γ y se cumple $h = g\alpha(e)$.

Dado que $\alpha(e^{-1}) = (\alpha(e))^{-1}$ si e_g une u_g y v_h entonces $(e^{-1})_{(\alpha(e))^{-1}}$ unirá v_h y u_g , por lo tanto Γ^α no es dirigido.

La función $\pi : \Gamma^\alpha \rightarrow \Gamma$ conforma una proyección desde el *lift* al grafo original utilizando el siguiente mecanismo $\pi(e_g) = e$ y $\pi(v_g) = v$. A los conjuntos $\pi^{-1}(e)$ y $\pi^{-1}(u)$ se les llama *fibre* o *fibra* sobre el vértice u y la arista e .

El mecanismo es similar al utilizado por Exoo, de hecho son equivalentes en algunos casos. Veamos como ejemplo si utilizamos el grafo la de la figura 2.5 usando como grupo $(\mathbb{Z}_5, +)$ y la asignación de voltajes que se muestra en las aristas.

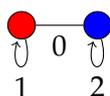


Figura 2.5: Γ .

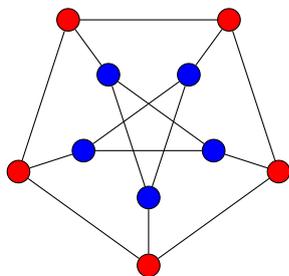


Figura 2.6: Γ^α Petersen.

Como se puede apreciar en la figura 2.6 el resultado es el mismo. Esto no significa que sean coincidentes en todos los casos.

Se dice que para todo camino W de u a v en Γ consistente en el conjunto de aristas e^1, e^2, \dots, e^m su *voltaje neto* es $\alpha(W) = \prod_{i=1}^m \alpha(e^i)$.

Lema. Por cada camino simple W en Γ que va desde u^1 a u^n y $g \in G$ existe un único camino simple W_g^α en Γ^α . Donde W_g^α parte de u_g^1 y termina en $u_{g\alpha(W)}^n$. Además, $\pi(W_g^\alpha) = W$ y $|W_g^\alpha| = |W|$

Demostración. Aplicando la definición de adyacencia, si el camino W_g^α comienza en la arista e_g^1 que va desde u_g^1 a $u_{g\alpha(e^1)}^2$, por la definición de adyacencia se cumplirá también que $u_{g\alpha(e^1)}^2$ y u_g^1 estarán unidos por $(e^1)_g^{-1}$.

Por lo tanto a partir de u_g^1 existe un camino que lleva a $u_{g\prod_{i=1}^m \alpha(e^i)}^n$. La unicidad está dada porque de no existir implicaría que α tome dos valores o bien que la operación de G tome dos valores, lo que es absurdo en ambos casos.

La proyección π aplicada al camino W_g^α es un único camino W en Γ que tiene el mismo tamaño, esto surge directamente de la aplicación de π .

Esto implica que para cada camino W en Γ y $g \in G$ existe un camino W_g^α en Γ^α . □

Además se asegura que no se generan ciclos a partir de un camino que no sea un ciclo del grafo original. Esto desde el punto de vista del diámetro es un aspecto importante. Dado que el objetivo de la construcción es maximizar la cantidad de vértices a los que se puede alcanzar recorriendo la menor distancia posible, tener ciclos de tamaño menor a la distancia objetivo es contraproducente, puesto que se llega a los mismos vértices por dos caminos diferentes.

Grado de Γ^α

En lo que respecta al grado, una arista que une dos vértices u y v diferentes en el grafo cociente, aporta una unidad al grado de ambos vértices de la fibra en el *lift*, debido a que para cada valor de $g \in G$ existirá un

vértice u_g que será adyacente al vértice $v_{g\alpha(e)}$. Análogamente en el caso de que la arista en el cociente sea un loop, se generarán uno o varios ciclos entre los vértices u_g con $g \in G$ de modo que aporta dos unidades al grado de cada vértice. Esto sucede salvo que la asignación de voltajes cumpla que $\alpha(e) = \alpha(e)^{-1}$. En tal caso se generará un matching entre los vértices de la fibra, y por tanto incrementa una sola unidad al grado de los vértices. Este comportamiento hace que a partir del cociente y la asignación de voltajes sea fácilmente determinable el grado del *lift* resultado.

Cómputo del diámetro de Γ^α

A los efectos del cómputo del diámetro, los grafos de voltaje presentan facilidades. Analicemos el grafo $\Gamma_{u,v,e} = \pi^{-1}(e) \cup \pi^{-1}(u) \cup \pi^{-1}(v)$ con u y $v \in V\Gamma$; y $e = (u, v) \in E\Gamma$. Si $u \neq v$ define un grafo bipartito regular de grado uno. En el caso de que $u = v$ entonces $\Gamma_{u,e}$ es la unión de ciclos disjuntos que se corresponden con las órbitas del conjunto generado por $\alpha(e)$ en G , en el caso particular de que $\alpha(e)$ sea la unidad, entonces $\Gamma_{u,v,e}$ no tiene aristas (solo *loops*).

Se muestra a continuación que para calcular el diámetro de Γ^α alcanza con calcular las distancias a todos los vértices a partir de un vértice de cada fibra.

Sea la transformación $T_j : V\Gamma^\alpha \rightarrow V\Gamma^\alpha$: $T_j(u_g) = u_{jg}$ con $j \in G$. Observemos que u_g es adyacente a $v_h \Leftrightarrow \exists e = (u, v)$ en Γ y además $h = g\alpha(e) \Leftrightarrow jh = jg\alpha(e) \Leftrightarrow T_j(u_g)$ es adyacente a $T_j(v_h)$.

Además u_g y v_h estarán en la misma órbita de T_j en Γ^α si existe $T_j(u_g) = v_h$. Dado que G , es un grupo la ecuación $h = jg$ con j como incógnita siempre tiene solución, entonces se cumple que $T_j(u) = v \Leftrightarrow u$ y $v \in \pi^{-1}(x)$ para u y $v \in V^\alpha$ y $x \in V$. Dicho de otro modo, u y v estarán en la

misma órbita de T_j si pertenecen a $\pi^{-1}(x)$ para algún $x \in V$.

El diámetro del grafo Γ^α es $\max(d_{\Gamma^\alpha}(u_g, v_h))$ siendo d_{Γ^α} la cantidad de arcos del camino simple más corto entre u_g y v_h . Entonces d_{Γ^α} define un camino que se puede expresar como una cadena de vértices adyacentes: $u_g, u'_{x_1}, u''_{x_1}, \dots, u^{n-1}_{x_n}, v_h$, por la definición de T_j existirá también el camino: $T_j(u_g), T_j(u'_{x_1}), T_j(u''_{x_1}), \dots, T_j(u^{n-1}_{x_n}), T_j(v_h)$.

Dado que las órbitas de T_j sobre Γ^α son las fibras de los vértices entonces si v_h es el nodo a mayor distancia de u_g entonces para cualquier elemento $u_i = T_j(u_g) \in \pi^{-1}(u)$ existirá un camino de ese mismo largo a $v_k = T_j(v_h) \in \pi^{-1}(v)$ y no existirá uno menor.

Por lo tanto para calcular el diámetro de Γ^α hace falta seleccionar un sólo vértice de cada fibra y computar la distancia al resto de los vértices, el máximo de esas distancias será el diámetro de Γ^α . La topología del grafo resultado dependerá del grupo utilizado, en el caso del trabajo de Loz se usó el grupo semidirecto: $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$, donde r cumple la congruencia: $r^n \equiv 1 \pmod{m}$ con el producto $(a, b)(c, d) = (a + r^b c, b + d)$.

Acerca del grupo $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$

Analicemos el grupo utilizado por Loz y su definición, para eso vamos a definir grupo semidirecto. Para ello a su vez deberemos repasar las siguientes definiciones.

Definición. Dado los grupos $(G, +)$ y $(H, *)$ se le llama *homomorfismo* a la función $\phi : G \rightarrow H$ si y sólo si se cumple que si $g, h \in G$ entonces $\phi(g + h) = \phi(g) * \phi(h)$

Definición. Sean $(G, +)$ y $(H, *)$ grupos y $\psi : H \rightarrow \text{Aut}(G)$ homomorfismo, se le llama *producto semi-directo* $G \rtimes_\psi H$ al grupo con conjunto $G \times H$ y operación $(a, b)(c, d) = (a + \psi(b)(c), b * d)$

El grupo utilizado en el trabajo de Loz es $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$ que es el producto semidirecto de los grupos $(\mathbb{Z}_m, +)$ y $(\mathbb{Z}_n, +)$ donde el homomorfismo $(\psi(x))(y) = r^x y$ con r un entero que cumple $1 \leq r \leq m-1$, por tanto la operación será: $(a, b)(c, d) = (a + r^b c, b + d)$. Para que ψ sea homomorfismo se deberá cumplir que $r^n \equiv 1 \pmod{m}$, como veremos a continuación.

Recordemos que en \mathbb{Z}_n , $a + kn \equiv a \pmod{n}$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Dado que en $(\psi(a))(x) = r^a x$ y que $\psi : \mathbb{Z}_n \rightarrow \text{Aut}(\mathbb{Z}_m)$ se deberá cumplir que $(\psi(a))(x) = (\psi(a + kn))(x)$ por lo tanto $r^a x \equiv r^{a+kn} x \pmod{m}$ que es equivalente a $r^a x \equiv r^a r^{kn} x \pmod{m}$. Para esto se deberá cumplir que $r^{kn} \equiv 1 \pmod{m}$, para todo $k \in \mathbb{N}$, y esto es cierto si y sólo si $r^n \equiv 1 \pmod{m}$.

Otro aspecto sobre el que vale la pena detenerse son las familias de cocientes que utiliza para la construcción de los *lifts*. Se trata de cuatro familias que se describen a continuación:

- $B(s, l)$ *Bouquet* grafos con un solo vértice con s lazos con voltaje involutivo y l lazos con voltaje libre.
- $D(l, e)$ *Dipolo*, grafos con dos vértices l lazos y e arcos entre cualquier par de vértices.
- $T(l, e)$ K_3 con l lazos y e arcos entre cualquier par de vértices.
- $X(l, e)$ K_4 con l lazos y e arcos entre cualquier par de vértices.

Acerca de los cocientes *Bouquet* y los grafos de *Cayley*

Sea G un grupo y Ω un conjunto de generadores cerrado bajo el inverso y al que no pertenece el elemento neutro. Se llama $\text{Cayley}(G, \Omega)$ al grafo Γ si cumple:

- $V\Gamma = G$

$$\blacksquare E\Gamma = \{\{g, h\} : gh \in G \text{ y } g^{-1}h \in \Omega\}$$

En el caso particular de los grafos que se producen sobre un cociente del tipo *Bouquet* claramente son grafos de *Cayley*.

Con esto finaliza la introducción de los elementos básicos que permiten la creación de un *lift* de un cociente con un grupo. También se mostraron las familias de grafos cociente que se utilizan en el trabajo de Loz. A continuación se expone la mecánica que opera sobre estos elementos para hacer la búsqueda de grafos de gran orden.

2.2.3. La búsqueda

En el trabajo de Loz [40] no se describe el método utilizado para realizar las búsquedas, solamente se establece en alto nivel comportamientos relacionados a la cantidad de muestras necesarias para encontrar un *lift* viable. Por lo tanto inferimos que el mecanismo de búsqueda implica la generación aleatoria de grafos previa selección de los parámetros del grupo y el grafo cociente. Veamos las características de los experimentos que describe el autor. En el contexto de búsquedas aleatorias se establece que son mejores los parámetros m, n, r que tienen mayor cantidad de soluciones para la congruencia $r^n \equiv 1 \pmod{m}$. También el tamaño del centro del grupo $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$. Grupos con estas dos características hacen que de forma rápida las búsquedas aleatorias arriben a grafos con el diámetro buscado. El autor da un argumento heurístico para este comportamiento, en el que vincula el tamaño del centro del grupo con la cantidad de automorfismos del grupo.

Podemos inferir que el algoritmo de búsqueda utilizado por Loz consiste en búsquedas aleatorias sobre la asignación de voltajes evaluando el *lift* en cada paso. A continuación se exponen las líneas de razonamiento

que concluyeron en leves modificaciones que se introdujeron al trabajo de Loz y los resultados obtenidos.

Modificaciones

Durante la búsqueda de grafos que se ajusten a los criterios del problema se realizaron varios experimentos con cocientes idénticos variando el grupo que genera el *lift*. En ese contexto, se hizo variar solamente el valor en r mostrando un efecto particular. Para ciertos r un muestreo relativamente grande de experimentos (crear el *lift*, medir el grado máximo Δ y el diámetro k) tienen aproximadamente la misma cantidad de grafos que cumplen las restricciones del problema. Esto permite conjeturar que el espacio de búsqueda que se genera con cada r aloja distintas probabilidades de encontrar grafos viables y también que algunos de ellos son equivalentes.

Algunas definiciones previas:

- Se define $\mathcal{G}_{(m,n,r)}(\Gamma)$ como el conjunto de *lifts* generados por el grupo $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$ con grafo cociente Γ .
- Sea el conjunto $\langle r \rangle = \{r^i \bmod m : 1 \leq i \leq n\}$. Nótese que $\langle r \rangle$ es el subgrupo de \mathbb{Z}_m^* generado por r . Con \mathbb{Z}_m^* el grupo con elementos los enteros i que cumplen $0 < i < m$ y la multiplicación módulo m como operación.
- Si $\langle s \rangle \subseteq \langle r \rangle$ entonces existe i que cumple $s \equiv r^i \bmod m$. Se define la función $\psi(a) = ia$, que cumple $s^a \equiv r^{\psi(a)} \bmod m$.
- Finalmente, se define la función $\phi : \mathbb{Z}_m \rtimes_s \mathbb{Z}_n \rightarrow \mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$, tal que $\phi((a, b)) = (a, \psi(b))$

Lema. Sean m, n, s, r naturales tales que r y s verifican $x^n \equiv 1 \pmod{m}$. Entonces, si $\langle s \rangle = \langle r \rangle$, cada grafo de $\mathcal{G}_{(m,n,s)}(\Gamma)$ es isomorfo a un grafo de $\mathcal{G}_{(m,n,r)}(\Gamma)$ y viceversa.

Demostración. Por simetría basta demostrar que todo grafo de $\mathcal{G}_{(m,n,s)}(\Gamma)$ es isomorfo a un grafo de $\mathcal{G}_{(m,n,r)}(\Gamma)$. Para demostrarlo, dado $\Gamma^\alpha \in \mathcal{G}_{(m,n,s)}(\Gamma)$ debemos encontrar un $\Gamma^\beta \in \mathcal{G}_{(m,n,r)}(\Gamma)$ isomorfo a Γ^α , o sea debemos encontrar $\beta : S\Gamma \rightarrow \mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$ y $\Psi : V\Gamma^\alpha \rightarrow V\Gamma^\beta$ tales que Ψ sea un isomorfismo de grafos.

Primero definiremos β y de Ψ y luego demostraremos que Ψ es efectivamente un isomorfismo. Definamos β como $\beta(e) = \phi(\alpha(e))$, siendo $\phi(x, y) = (x, iy)$ y i un natural tal que $s \equiv r^i \pmod{m}$. La existencia de i está asegurada por la hipótesis $\langle r \rangle = \langle s \rangle$. Por otro lado, la función Ψ , será definida como $\Psi(u_e) = u_{\beta(e)}$.

Basta ver que Ψ es un isomorfismo. Para ello alcanza con que Ψ sea un homomorfismo de grafos y además biyectiva.

Ψ es homomorfismo de grafos: sea $u_{(a,b)} \sim v_{(c,d)}$ en Γ^α , entonces si $\alpha((u, v)) = (e, f)$ se cumplirá que $u \sim v$ en Γ y que $(c, d) = (a + s^b e, b + f)$, es decir

$$c = a + s^b e$$

$$d = b + f.$$

Debemos chequear que $\Psi(u_{(a,b)}) = u_{(a,ib)}$ y $\Psi(v_{(c,d)}) = v_{(c,id)}$ sean adyacentes en Γ^β . Para ello se deben cumplir dos cosas. Primero $u \sim v$ en Γ , lo cual ya sabemos que se cumple. Lo segundo que debe cumplirse es

$(a, ib)\beta((u, v)) = (c, id)$, o sea, $(a, ib)(e, if) = (c, id)$. Hagamos la cuenta:

$$\begin{aligned} (a, ib)(e, if) &= (a + r^{ib}e, ib + if) = (a + (r^i)^b e, i(b + f)) \\ &= (a + s^b e, i(b + f)) = (c, id). \end{aligned}$$

Biyectividad de Ψ : basta ver que $a \mapsto ia$ como función de invertible como elemento de \mathbb{Z}_n^* . Efectivamente, como $\langle s \rangle = \langle r \rangle$, existirá j tal que $r \equiv s^j \pmod{m}$, de donde $r \equiv r^{ij} \pmod{m}$ de donde $1 \equiv ij \pmod{n}$. \square

Durante varias series de experimentos también se encontró que si $\langle s \rangle \subseteq \langle r \rangle$ utilizando la misma asignación de voltajes α en la mayoría de los casos el diámetro de Γ^{α_r} es menor o igual al diámetro de Γ^{α_s} . Es por ello que en la búsqueda se utilizan grupos que maximicen $\langle r \rangle$. Esta selección de r no garantiza que se encuentren grafos buenos en la búsqueda. En el caso de los resultados de [40] encontramos solamente un caso en el que no se cumple. En efecto para el grafo de orden 29470 con grado máximo 12 y diámetro 5, se utiliza $m = 421$, $n = 70$ y $r = 27$, siendo el cardinal de $\langle 27 \rangle$ menor que el de $\langle 7 \rangle$. Durante nuestros experimentos pudimos comprobar a 7 como mejor opción tomando el criterio de cantidad de experimentos hasta alcanzar un grafo con el diámetro y grado máximo que se buscaba.

La implementación de la búsqueda, que se encuentra disponible online [51], se puede separar en dos etapas. Dado un cociente, el diámetro k y grado máximo Δ objetivos y un rango de posibles valores m y n para los parámetros del grupo, la primera etapa de la búsqueda realiza un análisis preliminar, que se muestra en pseudocódigo en la figura 2.7. Este análisis consiste en determinar los mejores candidatos para r , esto implica buscar los $\langle r \rangle$ maximales para ese m y n . Luego se evalúan las tuplas (m, n, r) como se puede ver en el pseudocódigo de la figura 2.8. La evaluación genera

un conjunto de *lifts* y calcula la proporción de elementos con diámetro igual a $k + 1$, esto nos sirve como indicador de cuán buena es la tupla. Finalmente la búsqueda preliminar ordena la lista de tuplas por sus valores de evaluación.

La segunda etapa que se corresponde con el pseudocódigo 2.9 es simplemente una búsqueda secuencial, sobre las tuplas resultado de la fase anterior.

El tiempo de cómputo de la búsqueda se consume en su mayor parte en la evaluación del diámetro del *lift* esta operación tiene orden $O(|\Gamma|^2 |m * n|)$ como se indica en [40]. Que está directamente vinculado con el tamaño del *lift* a evaluar. También la búsqueda de valores de r que maximicen $|\langle r \rangle|$, es una operación costosa en este caso la evaluación de cada valor tiene orden $O(n)$ donde la operación es evaluar $r^i \bmod m$, pero dado que se realiza con valores enteros (no flotantes) no es tan pesada como evaluar el diámetro del *lift*. Dado que existieron mejoras en los valores de la tabla [17, 20, 39] recientemente es muy costoso en tiempo de cómputo superar dichos logros. Es por eso interesante cualquier mejora en los algoritmos utilizados.

Input: $(m_a, m_b), (n_a, n_b), k$ diámetro objetivo, Δ grado objetivo, Γ grafo cociente, i_{max} cantidad de evaluaciones

Output: L lista de parámetros del grupo (m, n, r)

$E \leftarrow \emptyset;$

for $m = m_a$ **to** m_b **do**

for $n = n_a$ **to** n_b **do**

$RList \leftarrow \{r : \langle r \rangle \text{ es maximal}\};$

foreach $r \in RList$ **do**

$E \leftarrow E \cup \text{evaluate_tuple}((m, n, r), \Gamma, i_{max}, k, \Delta);$

end

end

end

return $\text{sort}(E)$

Figura 2.7: Pseudocódigo que determina las tuplas candidatas.

Input: m, n, r parámetros del grupo, Γ grafo cociente, i_{max} evaluaciones, k diámetro esperado, Δ grado esperado

Output: dga cantidad de grafos con diámetro = $k + 1$

for $i = 1$ **to** i_{max} **do**

$\alpha \leftarrow \text{random_voltage}();$

$\Gamma^\alpha \leftarrow \text{compute_lift}(\Gamma, \alpha);$

$k' \leftarrow \text{diameter}(\Gamma^\alpha);$

$d' \leftarrow \text{max_degree}(\Gamma^\alpha);$

if $k' = k + 1$ **then**

$dga \leftarrow dga + 1;$

end

end

Figura 2.8: Pseudocódigo de *evaluate_tuple*.

Input: L lista de tuplas (m, n, r) parámetros del grupo, Γ grafo cociente, i_{max} evaluaciones, k diámetro esperado, Δ grado esperado

Output: A tuplas que generaron *lifts* con diámetro y grado adecuados

$A \leftarrow \emptyset;$

```

foreach  $(m, n, r) \in L$  do
  for  $i = 1$  to  $i_{max}$  do
     $\alpha \leftarrow \text{random\_voltage}();$ 
     $\Gamma^\alpha \leftarrow \text{compute\_lift}(\Gamma, \alpha);$ 
     $k' \leftarrow \text{diameter}(\Gamma^\alpha);$ 
     $d' \leftarrow \text{max\_degree}(\Gamma^\alpha);$ 
    if  $k' = k \wedge d' = \Delta$  then
       $A \leftarrow A \cup (m, n, r);$ 
    end
  end
end

```

Figura 2.9: Pseudocódigo de la búsqueda.

2.2.4. Resultados

En el trabajo de Loz [40] se presentaron 65 grafos record. Dado que la tabla consiste de 120 entradas fue un aporte importante desde el punto de vista cuantitativo. Desde el punto de vista cualitativo, las mejoras en las instancias más pequeñas son modestas pero conforme aumenta el orden de los grafos las mejoras fueron más sustanciales. Esto deja en claro el rango de efectividad de la aproximación, puesto que las instancias de menor orden son de fácil acceso para aproximaciones más analíticas (es decir que no involucran búsquedas aleatorias). En cuanto a las instancias más grandes el alto poder de cómputo necesario para realizar las evaluaciones de diámetro se hacen muy costosas en tiempo, con el poder de cómputo disponible en la actualidad.

El cuadro 2.3 muestra los grafos record que fueron reportados por Loz y en negrita los encontrados como resultado de la aplicación de las modificaciones que se proponen en este trabajo.

Δ/k	4	5	6	7	8	9	10
4				1 320	3 243	7 575	17 703
5		624		5 516	17 030	57 840	187 056
6	390	1 404		19 383	76 461	331 387	1 253 615
7			11 988	52 768	249 660	1 223 050	6 007 230
8	1 100	5 060		131 137	734 820	4 243 100	24 897 161
9	1 550	8 268		279 616	1 697 688	12 123 288	65 866 350
10	2 286	13 140		583 083	4 293 452	27 997 191	201 038 922
11		19 500		1 001 268	7 442 328	72 933 102	600 380 000
12		29 470		1 999 500	15 924 326	158 158 875	1 506 252 500
13		40 260		3 322 080	29 927 790	249 155 760	3 077 200 700
14		57 837			55 913 932	600 123 780	7 041 746 081
15		76 518		8 599 986	90 001 236	1 171 998 164	10 012 349 898
16					140 559 416	2 025 125 476	12 951 451 939

Cuadro 2.3: Tabla con los records obtenidos por Loz, en negrita los obtenidos de este trabajo.

En [40] se pueden encontrar los grafos cociente y las asignaciones de voltaje que dieron origen a los *lifts* expuestos en el cuadro 2.3. Los datos

para los grafos que encontramos fueron:

- El grafo con 8268 vértices con diámetro 5 y grado máximo 9, se obtuvo con el grupo $m = 159$, $n = 52$ y $r = 2$, usando el cociente $B(1, 4)$ con voltajes: $(41, 14)$, $(112, 47)$, $(82, 37)$, $(113, 10)$ y $(147, 26)$ como valor involutivo.
- El resultado con 331387 nodos con diámetro 9 y grado 6, los parámetros del grupo fueron: $m = 6763$, $n = 49$ y $r = 41$. El cociente es $B(0, 3)$ con los voltajes: $(1254, 25)$, $(541, 18)$ y $(4642, 47)$
- Finalmente el grafo con grado 9, orden 1 697 688 y diámetro 8. En este caso el grupo fue: $m = 23 579$, $n = 72$, $r = 1 413$. El grafo cociente es $B(1, 4)$ los voltajes fueron: $(5 958, 8)$, $(6 086, 27)$, $(22 093, 37)$, $(22 621, 33)$ y $(2 717, 36)$ como valor involutivo.

Los grafos presentados por tener cocientes con un solo nodo también son de Cayley por lo que también son los más grandes conocidos para el problema del grado/diámetro sobre grafos de Cayley y grafos vértice transitivos.

Para la implementación se utilizó el lenguaje *c++* con la librería *pthread*s que permite la ejecución en paralelo en varios hilos. Las ejecuciones se hicieron en el cluster FING [2] en dos etapas de 150 horas utilizando 16 procesadores en cada una, en una primera instancia se analizan los candidatos utilizando el algoritmo 2.7 y en la segunda se realiza la búsqueda secuencial utilizando el algoritmo 2.9

Capítulo 3

Conclusiones y Trabajo futuro

En este trabajo se presentó el problema del grado/diámetro, las principales líneas de investigación y dos aproximaciones exitosas al mismo, se encontraron nuevos resultados y se verificaron algunos resultados ya conocidos. Todo esto ayuda a componer una visión panorámica y con cierta profundidad del estado actual de la investigación del problema.

Para ambas técnicas se presentan también implementaciones en código que son accesibles para todos, dados los resultados obtenidos y comprobados por los responsables de las tablas [17, 39, 20] la correctitud de las implementaciones está asegurada. Esto es claramente un avance para la investigación puesto que los trabajos originales no presentaban ni la implementación ni los detalles de las mismas.

En el trabajo de Exoo [26] se utilizan mecanismos similares a los utilizados por Loz. Sin embargo, no se referencia a los grafos de voltaje, ni al trabajo cronológicamente previo de McKay, Miller y Širáň [41]. Aún así es fácil ver que las construcciones de Exoo son un caso particular de grafos de voltaje. Estas coincidencias son interesantes puesto que permiten comparar la aplicación de ambas técnicas, no sólo porque forman parte de la

construcción de soluciones mediante la aplicación de métodos numéricos. En ambas mecánicas propuestas se parte de un grafo cociente al que se le asignan elementos de un grupo dado a las aristas. El grafo final se construye de forma tal que los vértices son el producto cartesiano de los vértices del grafo cociente y el grupo involucrado. La regla de adyacencia en ambas construcciones implica a la operación del grupo. Hasta este punto las técnicas son idénticas. De hecho en ambas secciones los ejemplos utilizados son los mismos. La diferencia se manifiesta en la concreción de estas ideas.

En la implementación de Exoo [26], se utiliza como grupo $(\mathbb{Z}_s, +)$, mientras que en el caso de Loz [40] se utiliza el producto semidirecto $\mathbb{Z}_m \rtimes_r \mathbb{Z}_n$ con la operación $(a, b)(c, d) = (a + r^b c, b + d)$. Dado que este último grupo es paramétrico en función de r se analiza tanto en el trabajo de Loz como en el presente las características que producen buenos resultados en relación al grafo. Es fácil ver que una de ellas es que el grupo tenga centro lo más pequeño posible. Pues esto reduce la cantidad de aristas posibles que se pueden generar, afectando el espacio de búsqueda. Esta es una diferencia fundamental puesto que en el caso de Exoo se realizan búsquedas en dos espacios al mismo tiempo: el espacio de elementos del grupo asignados a las aristas y también las aristas en sí, puesto que la matriz de adyacencia cambia a lo largo de la búsqueda. Esto claramente multiplica el espacio de búsqueda, pero a su vez permite que se utilicen grupos más sencillos y simétricos en la búsqueda. La reducción es tal que le permite afirmar que es factible la aplicación de diversas heurísticas en la búsqueda.

Se da entonces un contrapunto entre variar el grafo o utilizar grupos más complejos en ambas técnicas. En cuanto a la efectividad de las mis-

mas, si bien es cierto que cuantitativamente la aproximación de Loz obtuvo mejores resultados, dado que las entradas de la tabla para valores más pequeños son más accesibles desde el punto de vista computacional es más probable que sean objetivo de otras investigaciones. Esto implica que en las entradas de menor orden sea más difíciles de mejorar. Es por esto que no es justo comparar efectividad de ambas aplicaciones, puesto que en el caso de Loz las mejoras se dan en las entradas de mayor orden de la tabla y las de Exoo en las menores.

En cuanto al estado actual de las aproximaciones constructivas del problema, en el cuadro 3.1 se muestra en porcentaje de la mejor cota teórica conocida, el estado actual de la investigación. Cómo se puede apreciar para instancias con menor diámetro y grado las construcciones están más cercanas de las cotas teóricas. Sin embargo conforme crece el diámetro y el grado los grafos construidos están más lejos de las cotas.

Δ/k	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3	100 %	100 %	100 %	76,08 %	70,21 %	51,57 %	43,97 %	39,16 %	40,74 %
4	100 %	78,84 %	61,25 %	75,20 %	50,82 %	30,19 %	24,71 %	19,24 %	14,99 %
5	100 %	69,23 %	50,00 %	36,61 %	40,62 %	20,20 %	15,59 %	13,23 %	10,70 %
6	100 %	59,67 %	41,66 %	29,96 %	33,78 %	16,54 %	13,04 %	10,50 %	8,55 %
7	100 %	55,81 %	37,06 %	25,31 %	18,35 %	13,46 %	10,61 %	8,66 %	7,09 %
8	90,47 %	55,48 %	34,37 %	22,58 %	25,29 %	11,94 %	9,56 %	7,88 %	6,61 %
9	92,50 %	89,04 %	29,43 %	19,46 %	22,51 %	10,37 %	7,81 %	7,02 %	4,77 %
10	91,91 %	71,42 %	27,87 %	17,80 %	20,27 %	9,75 %	7,97 %	5,78 %	4,61 %
11	86,66 %	58,55 %	26,18 %	15,95 %	12,83 %	8,19 %	6,08 %	5,96 %	4,91 %
12	93,00 %	49,24 %	26,63 %	15,24 %	16,92 %	8,55 %	6,19 %	5,58 %	4,83 %
13	96,42 %	41,69 %	26,77 %	13,69 %	15,05 %	7,84 %	5,88 %	4,08 %	4,20 %
14	93,84 %	35,75 %	24,60 %	13,35 %	14,49 %	8,46 %	5,87 %	4,85 %	4,37 %
15	83,03 %	38,38 %	26,42 %	12,33 %	16,31 %	7,07 %	5,28 %	4,91 %	2,99 %
16	77,64 %	41,49 %	25,30 %	15,26 %	13,60 %	7,62 %	4,79 %	4,60 %	1,96 %

Cuadro 3.1: Tabla con los mejores resultados conocidos en porcentajes de las cotas teóricas conocidas [39].

Es interesante notar que, en la casi totalidad de los trabajos referenciados ninguno utiliza una estrategia de búsqueda diferente de la *Random Walk*, de hecho se conocen solamente la tesis doctoral de Guarch [32] y un artículo de Comellas [18] como mecanismo propuesto que utiliza una

heurística diferente. En diálogo con este último nos transmitió que la dificultad principal para la aplicación de las meta-heurísticas clásicas es que la función objetivo de las mismas es dependiente del diámetro. Esto implica que pequeños cambios en la topología del grafo, como el cambio en una arista, hacen variar mucho la excentricidad de los vértices del grafo por lo que es difícil lograr buenos resultados aplicando metaheurísticas. En el correr de las investigaciones para esta tesis se realizaron varias implementaciones con metaheurísticas, incluso relajamos las restricciones y aplicamos optimización multi-objetivo basándonos en [49] pero no obtuvimos resultados relevantes. En la falla de estas estrategias existieron dos factores que son determinantes. Por un lado las funciones objetivo, como se establece anteriormente, son muy sensibles a los cambios en la topología del grafo. Pero el factor más influyente es el tamaño del espacio de búsqueda. Si tomamos todos los grafos conexos posibles la dimensión del problema [42] es muy grande aún para pequeñas instancias del problema y el poder de cómputo actual. Es así que podemos concluir que dadas las condiciones actuales es más importante el esfuerzo en encontrar familias de grafos restrictivas que sean interesantes al problema que los algoritmos utilizados en la búsqueda.

3.1. Trabajo Futuro

Como se establece en la sección anterior las técnicas analizadas en profundidad presentan muchas similitudes pero además plantean un balance entre la variabilidad de los grafos cocientes y los grupos utilizados, en donde en la aproximación de Exoo [26] se varía el grafo, pero utilizando un grupo sencillo como contrapartida en el trabajo de Loz [40] se usan

grafos fijos con un grupo complejo. Es interesante como perspectiva buscar un mejor balance entre ambas técnicas. Es decir, por ejemplo utilizar grupos más complejos utilizando como base la propuesta de Exoo o bien permitir que varíen los grafos cociente en la aproximación de Loz. Durante el diseño e implementación de ambas soluciones se hizo hincapié en producir código que fuese modular de forma de poder ser re-utilizado en futuros trabajos, aún así la disección de las estrategias que se realiza en la presente tesis permite fácilmente implementarlas con éxito.

Un punto crítico sobre estas estrategias es el consumo de poder de cómputo en la evaluación de un grafo, sobre esta área existen grandes avances en procesadores vectoriales que permiten aplicar una instrucción sobre múltiples conjuntos de datos, este tipo de paralelismo se llama *SIMD* de acuerdo a la clasificación de Flynn [28]. Los avances en esa área se pueden ver en el sitio [3]. Este tipo de tecnología tiene el potencial de acelerar cierto tipo de cálculos en varios órdenes de magnitud.

Bibliografía

- [1] Center for turbulence research, standford university. <http://ctr.stanford.edu/>, 2013. [Online; accessed 20-February-2013].
- [2] Cluster fing. <http://www.fing.edu.uy/cluster>, 2013. [Online; accessed 13-June-2013].
- [3] General-purpose computation on graphics hardware. <http://gggpu.org/>, 2013. [Online; accessed 16-February-2013].
- [4] Stanford researchers break million-core supercomputer barrier. <http://engineering.stanford.edu/news/stanford-researchers-break-million-core-supercomputer-barrier>, 2013. [Online; accessed 20-February-2013].
- [5] J. Allwright. New (δ , d) graphs discovered by heuristic search. *Discrete Applied Mathematics*, 37/38:3–8, 1992.
- [6] E. Bannai and T. Ito. On finite moore graphs. *Journal of the Faculty of Science*, J. Fac. Sci. Tokyo, Sect. 1A, 1973.
- [7] E. Bannai and T. Ito. Regular graphs with excess one. *Discrete Mathematics*, 37(2–3):147 – 158, 1981.
- [8] J. C. Bermond, C. Delorme, and J.-J. Quisquater. Grands graphes de degré et diamètre fixés. In *Combinatorial mathematics (Marseille-*

Luminy, 1981), volume 75 of *North-Holland Math. Stud.*, pages 65–73, Amsterdam, 1983. North-Holland.

- [9] J.C. Bermond, C. Delorme, and G. Farhi. Large graphs with given degree and diameter. III. In *Graph theory*, volume 62 of *North-Holland Math. Stud.*, pages 23–31. North-Holland, Amsterdam, 1982. Présenté au Colloque Cambridge, England, 1981.
- [10] J.C. Bermond, C. Delorme, and G. Farhi. Large graphs with given degree and diameter. II. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 36(1):32–48, 1984.
- [11] N. Biggs. *Algebraic graph theory*. Cambridge mathematical library. Cambridge University Press, 1993.
- [12] B. Bollobás. *Modern graph theory*. Graduate texts in mathematics. Springer, 1998.
- [13] B. Bollobás and W. Fernandez de la Vega. The diameter of random regular graphs. *Combinatorica*, 2(2):125–134, 1982.
- [14] Q. Cameron, P. J. and Mary. Automorphisms of graphs, 2001.
- [15] E. Canale and A. Rodríguez. On the application of voltage graphs to the degree/diameter problem. [Online; accessed 30-May-2013], 2013.
- [16] Professor Cayley. Desiderata and suggestions: No. 2. the theory of groups: Graphical representation. *American Journal of Mathematics*, 1(2):pp. 174–176, 1878.
- [17] F. Comellas. Largest known graphs. http://www-mat.upc.es/grup_de_grafs/table_g.html/, 2004. [Online; accessed 30-August-2012].

- [18] F. Comellas and M. A. Fiol. Using simulated annealing to design interconnection networks. Technical report, Universitat Politècnica de Catalunya, 1991.
- [19] R. M. Damerell. On moore graphs. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 74, issue 02:227, 1973.
- [20] C. Delorme. Table des grands graphes. <http://www.lri.fr/~cd/>, 2012. [Online; accessed October-2012].
- [21] C. Delorme and J. Gómez. Some new large compound graphs. *European Journal of Combinatorics*, 23(5):539 – 547, 2002.
- [22] R. Diestel. *Graph Theory*, volume 173 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, Heidelberg, third edition, 2005.
- [23] M. J. Dinneen. Algebraic methods for efficient network constructions. Master's thesis, University of Idaho, 1991.
- [24] P Erdős, S. Fajtlowicz, and A. J. Hoffman. Maximum degree in graphs of diameter 2. *Networks*, pages 87–90, 1980.
- [25] G. Exoo. Some new ramsey colorings. *Electronic J. Combinatorics*, 5:2–9, 1998.
- [26] G. Exoo. A family of graphs and the degree / diameter problem. *Journal of Graph Theory*, 37(2):118–124, 2001.
- [27] T. A. Feo and M. G. C Resende. A probabilistic heuristic for a computationally difficult set covering problem. *Oper. Res. Lett.*, 8(2):67–71, April 1989.
- [28] M. Flynn and K. Rudd. Parallel architectures. *ACM Computing Surveys*, 28(1):67–70, 1996.

- [29] F. Glover. Tabu Search — Part I. *ORSA Journal on Computing*, 1(3):190–206, 1989.
- [30] J. Gómez. On large $(\Delta, 6)$ -graphs. *Netw.*, 46(2):82–87, September 2005.
- [31] J. Gómez and M. Miller. Two new families of large compound graphs. *Netw.*, 47(3):140–146, May 2006.
- [32] X. Guarch. *Construcció de xarxes d'interconnexió denses i cages mitjançant simulated annealing*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, 2000.
- [33] A. J. Hoffman and R. R. Singleton. On moore graphs with diameters 2 and 3. *IBM J. Res. Develop.*, 4:497–504, 1960.
- [34] L. K. Jørgensen. Diameters of cubic graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 37/38:347–351, 1992.
- [35] R. Karp. Reducibility among combinatorial problems. In R. Miller and J. Thatcher, editors, *Complexity of Computer Computations*, pages 85–103. Plenum Press, 1972.
- [36] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220:671–680, 1983.
- [37] G. Kortsarz, M. Langberg, and Z. Nutov. Approximating maximum subgraphs without short cycles. In Ashish Goel, Klaus Jansen, JoséD.P. Rolim, and Ronitt Rubinfeld, editors, *Approximation, Randomization and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques*, volume 5171 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 118–131. Springer Berlin Heidelberg, 2008.

- [38] K Kurosawa and S. Tsujii. Considerations on diameter of communication networks. *Electronics and Communications in Japan Part I-communications*, 64:37–45, 1981.
- [39] E. Loz. The degree diameter problem for general graphs. http://combinatoricswiki.org/wiki/The_Degree_Diameter_Problem_for_General_Graphs, 2011. [Online; accessed 30-August-2012].
- [40] E. Loz and J. Širáň. New record graphs in the degree-diameter problem. *Australasian Journal of Combinatorics*, 41:63–80, 2008.
- [41] B. D. McKay, M Miller, and J. Širáň. A note on large graphs of diameter two and given maximum degree,. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 74(1):110 – 118, 1998.
- [42] M. Meringer. Fast generation of regular graphs and construction of cages. *J. Graph Theory*, 30:137–146, 1999.
- [43] M. Miller, M. Nguyen, and G. Pineda-Villavicencio. On the nonexistence of graphs of diameter 2 and defect 2. *Journal of Combinatorial Mathematics and Combinatorial Computing*, 2008.
- [44] M. Miller, M. H. Nguyen, and G. Pineda-Villavicencio. On the nonexistence of even degree graphs with diameter 2 and defect 2. In *CATS '08: Proceedings of the fourteenth symposium on Computing: the Australasian theory*, pages 93–95, Darlinghurst, Australia, Australia, 2008. Australian Computer Society, Inc.
- [45] M. Miller, H. Pérez-Rosés, and J. Ryan. The maximum degree and diameter-bounded subgraph in the mesh. *Discrete Appl. Math.*, 160(12):1782–1790, August 2012.

- [46] M. Miller and R. Simanjuntak. Graphs of order two less than the moore bound. *Discrete Mathematics*, 308(13):2810 – 2821, 2008.
- [47] M Miller and J. Širáň. Moore graphs and beyond: A survey of the degree/diameter problem. *ELECTRONIC JOURNAL OF COMBINATORICS, DYNAMIC SURVEY D*, 14:2005, 2005.
- [48] G. Ringel and J. W. T. Young. Solution of the headwood map-coloring problem. *Proc. Nati. Acad. S. USA*, 60:438–445, 1968.
- [49] A. Rodríguez and S. Nesmachnow. Moe: un entorno de trabajo para optimización multiobjetivo con algoritmos evolutivos. Technical report, Instituto de Computación, Facultad De Ingeniería, Universidad de la República, 2009.
- [50] A. Rodríguez. Source code of the geoffrey exoo’s graph search. <https://github.com/axs-mvd/exoo-graph-search>, 2012. [Online; accessed 30-August-2012].
- [51] A. Rodríguez. Source code of the voltage graph search. <https://github.com/axs-mvd/voltage-graph-search>, 2012. [Online; accessed 30-August-2012].
- [52] R. G. Stanton, S. T. E. Seach, and D. D. Cowan. Nonexistence of an extremal graph of a certain type. *Journal of the Australian Mathematical Society (Series A)*, 30:55–64, 8 1980.
- [53] V. Černý. Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 45(1):41–51, January 1985.
- [54] P. Wong. Cages—a survey. *Journal of Graph Theory*, 6(1):1–22, 1982.