

# O uso das variâncias do PQA na caracterização do isomorfismo de grafos

**Paulo Oswaldo Boaventura-Netto**

e-mail: [boaventu@pep.ufrj.br](mailto:boaventu@pep.ufrj.br)

**Laura Bahiense**

e-mail: [laura@pep.ufrj.br](mailto:laura@pep.ufrj.br)

Programa de Engenharia de Produção, COPPE/UFRJ  
Av. Athos da Silveira Ramos, 149  
21.941-972 Rio de Janeiro, RJ

**Resumo:** *A uma instância do Problema Quadrático de Alocação (PQA) podem ser associadas variâncias de valores de soluções que podem ser obtidas em tempo polinomial. O problema do isomorfismo de grafos pode ser modelado como um PQA. Procuramos, neste trabalho, utilizar valorações invariantes das arestas dos grafos componentes de cada instância para avaliar diferenças quantitativas que correspondem à ausência de isomorfismo. A técnica é bastante sensível para, mediante uma valoração adequada, detetar o efeito da troca de uma única aresta entre dois grafos com até 30.000 arestas, dentro do universo testado.*

## 1. Introdução

O problema do isomorfismo de grafos tem algumas variantes suscitadas pelas suas aplicações, particularmente ao reconhecimento de padrões, como [BS98] e [DePK03]. Habitualmente se considera a verificação do isomorfismo entre dois grafos de mesma ordem e mesmo número de arestas, ou então do isomorfismo entre um grafo e um subgrafo de um grafo de maior ordem. Este trabalho é dedicado ao primeiro destes problemas.

O problema tem sido estudado com o uso de diversos instrumentos, [CWH97], [DePK03], [ASSM06]. Nosso interesse reside na sua consideração dentro da estrutura do PQA, onde os dois grafos que são objeto de uma verificação podem constituir uma instância, para a qual o valor máximo será igual a  $m$  (número de arestas) se os grafos forem isomorfos, e algum valor  $z < m$  em caso

contrário. Esta condição é necessária e suficiente; no entanto, o PQA é NP-árduo e sua resolução exata fica limitada a instâncias de ordem abaixo de 40, o que é muito pouco para esta aplicação, quando se trabalha com grafos ligados a alguma aplicação.

Habitualmente se faz, então, recurso a algoritmos heurísticos, frequentemente baseados em metaheurísticas, como o VNS [ASSM06] e o GRASP [LRB07]. Desta forma, se chegou a processar problemas da ordem de 600 vértices, com elevado grau de certeza em relação ao resultado.

Por outro lado, o cálculo das variâncias associadas ao problema é polinomial, mas a igualdade delas não é suficiente para que os grafos envolvidos na construção das respectivas instâncias sejam isomorfos. Os contra-exemplos são frequentes e dentre eles podemos citar o par (grafo de Petersen, prisma pentagonal). Trata-se aqui da construção de instâncias com as matrizes de adjacência dos grafos em exame. Para contornar essa dificuldade, propomos neste trabalho o uso de valorações invariantes dos conjuntos de arestas dos dois grafos, de modo a procurar ressaltar as diferenças existentes através do uso das matrizes de valores assim obtidas. As referências associadas às variâncias do PQA são [BA97] e [ABQG02].

Neste trabalho foi considerada uma coleção de grafos regulares de ordens entre 10 e 500 vértices. Algumas valorações invariantes são apresentadas, optando-se ao final por uma que funciona bem com grafos regulares, no sentido de estabelecer diferenças

quantitativas sensíveis entre os grafos em exame. O uso de grafos regulares se prende à maior dificuldade de distinguir entre eles: uma técnica que o consiga funcionará

## 2. Base teórica

### 2.1 Definição do problema

O PQA é o problema da alocação de  $n$  atividades a  $n$  posições, de modo que o custo do transporte entre os pares de atividades, ao longo das distâncias entre os pares de posições, seja mínimo, [KB57]:

$$z = \min_{\varphi \in \Pi_n} \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij} d_{\varphi(i)\varphi(j)} \quad (2.1)$$

A matriz  $F = [f_{ij}]$  é a matriz de fluxos (quantidades que transitam entre as atividades, no caso, entre  $i$  e  $j$ ) e a matriz  $D = [d_{kl}]$  fornece as distâncias, sendo  $d_{kl}$  a distância entre as posições  $k$  e  $l$ . Não se distingue, neste trabalho, o sentido de trânsito do fluxo: o PQA aqui considerado é, portanto, simétrico e  $F$  e  $D$  são, portanto, matrizes simétricas.

### 2.2 Momentos estatísticos do PQA

Para o PQA simétrico, podemos reduzir as matrizes  $F$  e  $D$  a vetores  $F$  e  $D$  de ordem  $N = n(n-1)/2$ , onde uma posição  $k$  pode ser referenciada à posição  $(i,j)$  de uma matriz pela expressão

$$k = (i-1)n - i(i+1)/2 + j. \quad (2.2)$$

Definimos então uma matriz de ordem  $N$ ,  $Q = FD^T$ . Esta matriz contém todas as parcelas componentes de qualquer solução  $\varphi$  (permutação de ordem  $n$ ); no entanto, (2.1) nos mostra tanto  $i$  quanto  $j$  variando entre 1 e  $n$ , sendo  $i < j$ , o que indica que uma solução de um PQA de ordem  $n$  contém  $N$  parcelas. Dispondo-se da matriz  $Q$ , será possível obter-se as parcelas de qualquer uma das  $n!$  soluções da instância, que corresponderão a posições independentes em  $Q$ . Seguindo [ABQG02], estaremos então referenciando uma instância dada como  $PQA(F,D)$ .

A recíproca não é, no entanto, verdadeira: nem todo conjunto de  $N$  posições independentes em  $Q$  é uma solução do PQA e, portanto, um problema baseado em  $Q$ , sem nenhuma restrição, é uma relaxação do PQA (que, por isso, denotamos  $PQA(Q)$ ). Cabe observar que este problema é de fácil

igualmente, ou melhor, com grafos não regulares. As definições referentes a grafos estão em [Bo06].

A observação de (2.1), cujas parcelas são vinculadas ao conjunto  $\Pi_n$  das permutações de  $n$  elementos, nos mostra que toda solução de uma instância PQA pode ser associada a uma permutação  $\varphi$ , no caso, de posições em relação às atividades.

A idéia original que levou à determinação de momentos estatísticos para uma instância PQA está relacionada à conveniência de se avaliar a dificuldade da resolução de uma dada instância, por meio de uma heurística, quando comparada a outras de mesma ordem. Esta questão de avaliação de dificuldades no âmbito do PQA despertou o interesse de vários pesquisadores, [GW70], [HG85], [MR94] e [ABQG02], este último trabalho envolvendo o cálculo da variância da relaxação linear do PQA, definida adiante.

resolução: basta ordenar  $F$  e  $D$  em ordens opostas (p. ex.,  $F$  em ordem não-crescente e  $D$  em ordem não-decrescente) obtendo-se neste caso vetores  $F^*$  e  $D^+$ , e definir uma matriz  $Q' = F^*(D^+)^T$ . Esta matriz tem o seu traço de valor igual ao valor mínimo da instância relaxada (sendo o máximo correspondente à soma dos valores dos elementos da diagonal principal transversa). Estes valores são produtos escalares e, para uma dada instância PQA, são limites inferior e superior para os valores de todas as soluções (viáveis) da instância. Dentro da notação utilizada, podem ser expressos como  $\langle F^*, D^+ \rangle$  e  $\langle F^*, D^- \rangle$ .

A média dos custos das soluções de uma instância  $PQA(F,D)$ , [GW70], [BA97], [AZ98], [ABQG02], é

$$\mu = S/N, \quad (2.3)$$

onde  $S$  é a soma de todos os elementos de  $Q$ .

A variância da instância relaxada  $PQA(Q)$  é [GW70], [ABQG02],

$$\sigma_Q^2 = \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N f_i^2 \right) \left( \sum_{j=1}^N d_j^2 \right) + \frac{1}{N(N-1)} \left[ \sigma^2(f_i) \right] \left[ \sigma^2(d_j) \right] - \mu^2$$

$$(i, j = ,1, \dots, N) \quad (2.4)$$

A variância da instância  $PQA(\mathbf{F}, \mathbf{D})$  é, [BA97], [ABQG02],

$$\sigma_{F,D}^2 = (S_0 + S_1 + S_2) / n! - \mu^2, \quad (2.5.1)$$

onde

$$S_0 = 4(n-4)! \sum_{\cap_0} f_{ij} f_{rs} \sum_{\cap_0} d_{ij} d_{rs} \quad (2.5.2)$$

$$S_1 = (n-3)! \sum_{\cap_1} f_{ij} f_{rs} \sum_{\cap_1} d_{ij} d_{rs} \quad (2.5.3)$$

$$S_2 = 2(n-2)! \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}^2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_{ij}^2 \quad (2.5.4)$$

e

$$|\cap_k| = \{ \{i,j\}, \{r,s\} \} / | \{ \{i,j\} \cap \{r,s\} \} | = k$$

$$(k \in \{0,1,2\}) \quad (2.5.5)$$

Em (2.5.5) se tem

$$|\cap_0| = C_{n-2,2}, |\cap_1| = 2(n-2) \text{ e } |\cap_2| = 1.$$

O tempo de cálculo da primeira variância é, portanto,  $O(n^2)$ , e o da segunda,  $O(n^4)$ .

### 2.3 Classes de instâncias relacionadas e isomorfismo

Com base em  $\mathbf{Q}'$  podemos definir uma instância  $PQA(\mathbf{F}, \mathbf{D}^+)$ , que a tenha como matriz de coeficientes, e uma *classe de instâncias relacionadas*, onde toda instância possua a mesma matriz  $\mathbf{Q}'$  (logo, esteja associada à mesma instância relaxada) e os mesmos limites superior e inferior. Escreveremos então, [ABQG02],

$$Relclass(\mathbf{F}, \mathbf{D}^+) = \{ PQA(\mathbf{F}, \mathbf{D}) / (\mathbf{F}(\mathbf{D}^+)^T = \mathbf{Q}') \} \quad (2.6)$$

A instância  $PQA(\mathbf{F}, \mathbf{D}^+)$  é denominada *instância-padrão* da classe e pode ser resolvida em tempo polinomial. Seu valor ótimo corresponde ao limite inferior  $\langle \mathbf{F}, \mathbf{D}^+ \rangle$ .

Uma instância PQA pode ser representada por dois grafos completos  $K_F$  e  $K_D$  valorados sobre as arestas, por *funções-peso*  $w(K_F) = \mathbf{F}$  e  $w(K_D) = \mathbf{D}$  associadas a esses grafos.

Diremos então que dois grafos completos  $K_n(V_1, E_1, F_1)$  e  $K_n(V_2, E_2, F_2)$  são *w-isomorfos* se existir uma permutação de vértices  $\alpha \in \Pi_n$  tal que  $(i,j) \in E_1 \Leftrightarrow (\alpha(i), \alpha(j)) \in E_2$  e  $F_1(i,j) = F_2(\alpha(i), \alpha(j))$ . Para essas funções, denotaremos então o w-isomorfismo por  $w(K_{F_1}) \approx w(K_{F_2})$ . Por outro lado, o esquema associado à representação (2.1) mostra que os valores das funções-peso são exatamente os contidos nos vetores  $\mathbf{F}$  e  $\mathbf{D}$ . Então duas instâncias  $PQA(\mathbf{F}_1, \mathbf{D}_1)$  e  $PQA(\mathbf{F}_2, \mathbf{D}_2)$  serão *isomorfas* ( $PQA(\mathbf{F}_1, \mathbf{D}_1) \approx PQA(\mathbf{F}_2, \mathbf{D}_2)$ ) se e somente se  $w(K_{F_1}) \approx w(K_{F_2})$  e  $w(K_{D_1}) \approx w(K_{D_2})$ . Diz-se, por outro lado, que dois grafos  $G_1(V_1, E_1)$  e  $G_2(V_2, E_2)$  são isomorfos se e somente se existir uma função  $f$  que preserve as relações de adjacência sob uma permutação  $\alpha$  do conjunto de vértices de um deles em relação ao conjunto de vértices do outro, ou seja, se para todo  $(i,j) \in E_1$  tivermos  $f(\alpha(i), \alpha(j)) \in E_2$ . Então podemos considerar, para um grafo qualquer  $G = (V, E)$ , a valoração dada pela matriz de adjacência  $\mathbf{A}(G) = [a_{ij}]$ ,  $a_{ij} = 1$  se  $(i,j) \in E$  e  $a_{ij} = 0$  em caso contrário e enunciar:

**Teorema 2.1:** Sendo  $m$  o número (comum) de arestas de dois grafos  $G_1$  e  $G_2$ , a instância  $PQA(G_1, G_2)$ , construída com as respectivas matrizes  $\mathbf{A}_1$  e  $\mathbf{A}_2$ , apresentará um valor *máximo* igual a  $m$  para a função objetivo, se e somente se eles forem isomorfos.

**Prova:** [LRB07]. ■

**Teorema 2.2:** Duas instâncias isomorfas  $PQA(\mathbf{F}_1, \mathbf{D}_1)$  e  $PQA(\mathbf{F}_2, \mathbf{D}_2)$  possuem o mesmo conjunto de soluções viáveis.

**Prova:** [ABQG02] ■

Este isomorfismo se estende, também, às instâncias relaxadas correspondentes, visto que elas partilharão uma mesma matriz  $\mathbf{Q}'$ , e às respectivas instâncias-padrão, pelo mesmo motivo.

**Corolário 2.3:** Duas instâncias isomorfas possuem as mesmas variâncias e as variâncias de suas instâncias-padrão e de suas instâncias relaxadas são também iguais.

**Prova:** Decorre do teorema anterior, uma vez que o conjunto de soluções viáveis é o mesmo para ambas as instâncias. ■

A variância das instâncias PQA é, portanto, um *invariante* sob o isomorfismo.

### 3. Metodologia

A comparação entre dois grafos através do valor da função objetivo da instância definida por suas matrizes de adjacência é imediata e, como foi discutido, decorre desse valor. A dificuldade reside em que o PQA é um problema NP-árduo e, portanto, para um par de grafos de ordem suficientemente elevada, um resultado exato está fora da capacidade de qualquer máquina.

Já a comparação pela variância é polinomial ( $O(n^4)$  para as variâncias do PQA e  $O(n^2)$  para a variância da instância relaxada). Esta comparação exige o exame de um *trio* de instâncias: a primeira,  $PQA(G_1, G_2)$ , composta pelas matrizes dos dois grafos e as outras duas,  $PQA(G_1, G_1)$  e  $PQA(G_2, G_2)$ , por duas cópias da matriz de cada grafo, de modo que se constitua um padrão. Chamamos estas últimas de *instâncias associadas*.

O Corolário 2.3 é uma condição apenas necessária: duas instâncias isomorfas possuem a mesma variância, porém duas instâncias de mesma variância não são necessariamente isomorfas. Ao se procurar avaliar a importância desta característica em exemplos práticos, verifica-se que, em um grande número de casos, os trios de instâncias construídos com grafos de mesma ordem e *tamanho* (aqui definido como o número de arestas), com estruturas não muito diferentes, apresentam variâncias iguais.

Procurou-se contornar esta dificuldade através da definição de *valorações invariantes* sobre as arestas, ou seja, valorações que dependam apenas das propriedades da estrutura e não da rotulação dos vértices. Esta técnica contribui para destacar diferenças entre essas propriedades nos dois grafos. O exemplo mais simples de uma dessas valorações é a soma dos graus dos vértices que definem cada aresta, não utilizada aqui por se ter trabalhado com grafos regulares.

Este trabalho se baseia na seguinte conjectura:

**Conjetura 3.1:** Existe, para todo par de grafos  $G_1$  e  $G_2$  de mesma ordem e tamanho, uma valoração invariante das arestas tal que, para  $G_1$  e  $G_2$  não isomorfos, a instância  $PQA(G_1, G_2)$  apresentará variâncias diferentes das que corresponderão a  $PQA(G_1, G_1)$  e  $PQA(G_2, G_2)$ .

Há, naturalmente, interesse no uso de valorações de baixo custo computacional. As seguintes alternativas foram examinadas:

- valores dos *afastamentos* (maiores distâncias) dos vértices que definem cada aresta,  $O(n^2)$ ;
- valores da soma das distâncias em relação aos demais vértices,  $O(n^3)$ ;
- valores da soma dos valores das arestas vizinhas (aplicada a grafos com uma valoração anterior),  $O(n^2)$ ;
- valores do número de *passeios* (percursos com ou sem repetição de vértices) fechados de um dado comprimento  $k$  (*k-passeios fechados*) do qual cada aresta participa,  $O(n^{k-1})$ .

A valoração pela soma dos valores das arestas adjacentes somente faria diferença, em se tratando de grafos regulares, após outra valoração invariante.

A última valoração, com  $k = 3$ , se mostrou a mais efetiva e foi utilizada nos testes cujos resultados estão apresentados adiante. Cabe notar que o quadrado da matriz de adjacência conta o número de percursos de comprimento 2 [Bo06], os quais formam com a aresta em exame um ciclo de comprimento 3: o valor obtido é, portanto, o número desses ciclos.

Foi utilizado um programa de geração de grafos regulares com o uso de números pseudo-aleatórios entre 1 e  $C_{n,2}$ , que é o número de pares de vértices disponíveis. O valor do grau é acompanhado, bloqueando-se todos os pares que contenham um vértice que atingiu esse valor. O processo se repete até que seja gerado um máximo de  $m$  arestas: esse valor pode, porém, não ser atingido. Uma rotina de verificação da sequência de graus chama então, recursivamente, rotinas de correção.

Desta forma foram gerados grafos regulares de ordens entre 20 e 500, os quais foram submetidos a trocas aleatórias de arestas, mantendo a regularidade, realizando-se 1, 4, 8 e 16 trocas (indicadas pelas letras a, d, h e p adicionadas ao nome do grafo). Grafos de mesma ordem são distinguidos por um número de ordem. A valoração pelo número de *k-passeios fechados* de que cada aresta participa foi aplicada, então, a cada grafo obtido.

#### 4. Resultados

Os testes envolveram grafos valorados entre 20 e 500 vértices. Apresentam-se na Tabela 4.1 as variâncias das instâncias relaxadas (**Rlx**) originais (**Orig**) e padrão (**Pad**), sob forma de razões percentuais simetrizadas entre as variâncias  $\sigma^2(PQA(G_1, G_1))$  e  $\sigma^2(PQA(G_2, G_2))$  e a variância da instância combinada  $\sigma^2(PQA(G_1, G_2))$ :

$$R\% \text{ Grafo 1} = 100 ((\sigma^2(PQA(G_1, G_1)) /$$

$$\sigma^2(PQA(G_1, G_2)) - 1)), e \quad (4.1.1)$$

$$R\% \text{ Grafo 2} = 100 ((\sigma^2(PQA(G_2, G_2)) / \sigma^2(PQA(G_1, G_2)) - 1)). \quad (4.1.2)$$

Estes valores são nulos para grafos isomorfos.

A notação usada para os pares é Rn\_d\_k/kz, onde n é a ordem, d o grau, k o número de ordem do grafo e z  $\in \{a, d, h, p\}$  o indicativo do número de trocas de arestas feitas no primeiro grafo (Rn\_d\_k) para obtenção do segundo (Rn\_d\_kz).

Par Rn_d_k/k1	Trocias		Arestas		Razão % vars. Grafo 1			Razão % vars. Grafo 2		
	Nº	%	m	Dens. %	Rlx	Orig	Pad	Rlx	Orig	Pad
R20_7_3/3a	1	1,428	70	36,84	4,8847	5,1388	6,5774	-4,6572	-4,8494	-5,8664
R20_7_4/4a	2	2,857	70	36,84	8,2152	8,1088	8,8396	-7,5916	-7,4894	-8,1239
R30_8_5/5a	1	0,833	120	27,59	1,1498	0,7823	1,9573	-1,1367	-0,7013	-0,6437
R30_8_6/6a	2	1,667	120	27,59	10,0587	9,9064	12,3089	-9,1394	-8,9995	-8,9379
R40_10_1/1a	1	0,500	200	25,64	6,0430	5,8336	6,0851	-5,6986	-5,4934	-5,6077
R40_10_2/2a	1	0,500	200	25,64	1,4465	1,3740	1,2088	-1,4258	-1,3511	-0,7640
R50_25_1/1a	1	0,148	625	51,02	0,0716	0,0578	0,0276	-0,0716	-0,0577	-0,1519
R50_25_2/2a	1	0,148	625	51,02	0,0870	0,0602	0,0779	-0,0870	-0,0599	-0,0542
R60_15_1/1a	1	0,222	450	25,42	0,2870	0,3019	0,1230	-0,2862	-0,3008	-0,2566
R60_15_2/2a	1	0,222	450	25,42	2,3140	2,2868	2,2900	-2,2617	-2,2353	-2,0258
R100_15_1/1a	1	0,133	750	15,15	0,1692	0,1696	0,1338	-0,1689	-0,1693	-0,2575
R100_15_1/1d	4	0,532	750	15,15	1,2770	1,2670	1,3122	-1,2609	-1,2503	-1,3210
R100_15_1/1h	8	1,064	750	15,15	2,3276	2,3120	1,8145	-2,2746	-2,2567	-2,3690
R100_15_1/1p	16	2,128	750	15,15	3,1484	3,2422	3,5419	-3,0523	-3,1099	-2,6756
R100_15_2/2a	1	0,133	750	15,15	1,0442	1,0518	1,1140	-1,0334	-1,0408	-1,1501
R100_15_2/2d	4	0,532	750	15,15	2,2580	2,2803	2,2780	-2,2081	-2,2286	-2,3370
R100_15_2/2h	8	1,064	750	15,15	4,0297	4,0329	4,3590	-3,8736	-3,8766	-4,4877
R100_15_2/2p	16	2,128	750	15,15	1,7110	1,7122	1,7672	-1,6822	-1,6853	-1,9543
R200_75_1/1a	1	0,013	7500	37,69	0,2563	0,2578	0,2309	-0,2557	-0,2571	-0,2679
R200_75_1/1d	4	0,053	7500	37,69	0,0714	0,0704	0,0608	-0,0713	-0,0703	-0,0718
R200_75_1/1h	8	0,106	7500	37,69	0,0121	0,0111	0,0083	-0,0121	-0,0111	-0,0140
R200_75_1/1p	16	0,213	7500	37,69	0,0079	0,0073	-0,0020	-0,0078	-0,0073	-0,0115
R200_75_2/2a	1	0,013	7500	37,69	0,0001	0,0003	0,0011	-0,0001	-0,0003	-0,0010
R300_50_1/1a	1	0,013	7500	16,72	0,0501	0,0508	0,0503	-0,0501	-0,0507	-0,0497
R300_50_1/1d	4	0,053	7500	16,72	0,0037	0,0034	0,0038	-0,0037	-0,0034	-0,0067
R300_50_1/1h	8	0,106	7500	16,72	0,1739	0,1736	0,1970	-0,1736	-0,1733	-0,1579
R300_50_1/1p	16	0,213	7500	16,72	0,1795	0,1789	0,1788	-0,1791	-0,1786	-0,1716
R300_50_2/2a	1	0,013	7500	16,72	0,0713	0,0714	0,0746	-0,0712	-0,0714	-0,0689
R300_50_2/2d	4	0,053	7500	16,72	0,0991	0,0991	0,0914	-0,0991	-0,0990	-0,0947
R300_50_2/2h	8	0,106	7500	16,72	0,2310	0,2298	0,2240	-0,2305	-0,2292	-0,2107
R300_50_2/2p	16	0,213	7500	16,72	0,0992	0,0971	0,0988	-0,0991	-0,0970	-0,0949
R400_50_1/1a	1	0,010	10000	12,53	0,0258	0,0256	0,0258	-0,0208	-0,0256	-0,0248
R400_50_1/1d	4	0,040	10000	12,53	0,0021	0,0021	0,0044	-0,0021	-0,0021	-0,0052
R400_50_1/1h	8	0,080	10000	12,53	0,1685	0,1683	0,1832	-0,1682	-0,1680	-0,1627
R400_50_1/1p	16	0,160	10000	12,53	0,2598	0,2598	0,2643	-0,2591	-0,2591	-0,2532
R400_150_2/2a	1	0,003	30000	37,59	0,0033	0,0033	0,0020	-0,0033	-0,0033	-0,0034
R400_150_2/2d	4	0,013	30000	37,59	0,0007	0,0007	-0,0014	-0,0007	-0,0007	-0,0011
R400_150_2/2h	8	0,026	30000	37,59	0,0068	0,0068	0,0069	-0,0068	-0,0068	-0,0075
R400_150_2/2p	16	0,052	30000	37,59	0,0128	0,0127	0,0127	-0,0128	-0,0127	-0,0084
R500_50_1/1a	1	0,008	12500	10,02	0,1140	0,1135	0,1112	-0,1138	-0,1133	-0,1066
R500_50_1/1d	4	0,032	12500	10,02	0,0896	0,0887	0,0897	-0,0895	-0,0886	-0,0891
R500_50_1/1h	8	0,064	12500	10,02	0,0073	0,0071	0,0184	-0,0073	-0,0071	-0,0118
R500_50_1/1p	16	0,128	12500	10,02	0,0403	0,0408	0,0541	-0,0403	-0,0408	-0,0541

Tabela 4.1: Razões percentuais entre instâncias PQA associadas a grafos não isomorfos

Observa-se, nos resultados de R400\_150\_2/2d, que a valoração utilizada se encontra próxima do esgotamento: as razões se tornam demasiadamente pequenas. O uso de outra valoração, como o número de passeios de comprimento 4, ou de uma sobrevaloração, como a soma dos valores das arestas adjacentes dados pela valoração atual poderá, em princípio, permitir que se vá mais adiante.

Optamos pela apresentação, na Tabela 4.1, dos resultados referentes às três instâncias associadas a cada par de grafos com a intenção de mostrar com clareza a similaridade dos resultados, já que se trata do primeiro trabalho sobre o tema. Nossa intenção, em estudos subsequentes, deverá ser a de concentrar o interesse na instância relaxada, dada sua menor complexidade, a menos que outras classes de grafos apresentem comportamento diferente dos grafos regulares.

Observa-se com estes que o aumento do número de trocas não apresenta resultados previsíveis, embora em alguns casos ele esteja associado a maiores razões percentuais. No exemplo citado, a introdução de 4 trocas de aresta diminuiu a razão entre as variâncias. De fato, sendo a valoração aleatória e não se dispondo de detalhes sobre a estrutura do grafo, não há como prever o efeito causado, no caso, menos significativo que o obtido com a troca de uma única aresta. Os testes com R100\_15\_1, por exemplo, mostraram aumento das razões com o aumento do número de trocas, enquanto R200\_75\_2 mostra exatamente o contrário. Apesar do interesse que este comportamento possa suscitar, ele não é examinado neste trabalho, cujo objetivo é o de apontar diferenças de valor entre as variâncias associadas a grafos não isomorfos. Parece, no entanto, constituir um tema de interesse a ser examinado mais adiante.

Os tempos de execução estão referenciados a uma máquina com processador AMD Athlon 64/3400 com 2 Gb de memória RAM, utilizando-se Windows XP e Fortran Powerstation IV. O Gráfico 4.1 adiante mostra os tempos de computação obtidos para *uma* instância relaxada, em função da ordem do problema.

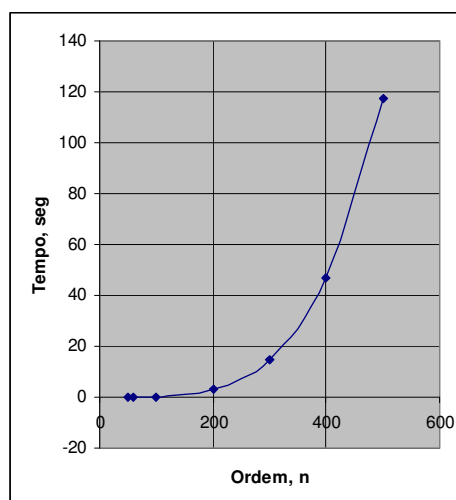


Gráfico 4.1

## 5. Conclusões

Os testes realizados, dentro dos limites utilizados, estão de acordo com a Conjetura 3.1.

Foram utilizados apenas grafos regulares, o que dificulta o problema mas por outro lado, pode permitir o estudo de grafos quaisquer através do seu particionamento em subgrafos regulares. Os valores bastante próximos obtidos para as razões referentes às variâncias das instâncias relaxadas, das instâncias originais e das instâncias-padrão, indicam a possibilidade do uso apenas da primeira delas para a decisão sobre a presença do isomorfismo em um par de grafos. A complexidade do processo ficaria então reduzida a  $O(n^2)$ , além de se evitar a dispendiosa ordenação dos vetores **F** e **D** para obtenção da instância-padrão.

Para o estudo de casos de isomorfismo, o processo poderá ser aperfeiçoado com o uso de novas valorações e de programação mais eficiente e voltada apenas para as instâncias relaxadas, o que deve permitir que se chegue a valores de  $n \leq 5.000$  com um tempo capaz de competir com outras técnicas existentes baseadas no PQA.

Um objetivo mais distante seria o de se utilizar a técnica em problemas de reconhecimento de padrões, o que exigiria ordens bastante mais elevadas e, também, alguma experiência com a aplicação da técnica a grafos planares.

## Referências

- [ABQG02] Abreu, N.M.M., Boaventura-Netto, P.O., Querido, T.M. e Gouvêa, E.F.. (2002). *Classes of quadratic assignment problem instances: isomorphism and difficulty measures using a statistical approach*. Discrete Applied Mathematics 124, 113-116.
- [ASSM06] Abreu, N. M. M, Siqueira, A. S., Silveira, D. S. e Melo, V. A. (2006), *Notas de aula do curso de Meta-Heurística em Otimização Combinatória*, Área de PO, Programa de Engenharia de Produção, COPPE/UFRJ.
- [AZ98] Angel, R. e Zissimopoulos, V. (1998). *On the quality of the local search for the quadratic assignment problem*. Discrete Applied Mathematics 82, 15-25.
- [BA97] Boaventura-Netto, P.O. e Abreu, N.M.M. (1997). *Cost solution average and variance for the quadratic assignment problem: a polynomial expression for the variance of solutions*. Actas de Resúmenes Extendidos, 408-413, I ELIO/Optima 97, Concepción, Chile.
- [Bo06] Boaventura-Netto, P.O., *Grafos: Teoria, Modelos, Algoritmos*. Edgard Blücher, São Paulo, 2006.
- [BS98] Bunke, H. e Shearer, K. (1998). *A graph distance metric based on the maximal common subgraph*. Pattern Recognition Letters 19, 3-4, 255-259.
- [CWH97] Cross, A. D. J., Wilson, R. C. e Hancock, E. R. (1997), *Inexact graph matching using genetic search*, Pattern Recognition, 30, n. 6, 953-970.
- [DePK03] DePiero, F. e Krout, D. (2003). *An algorithm using length-r paths to approximate subgraph isomorphism*. Pattern Recognition Letters 24, 33-46.
- [GW70] Graves, G.W. e Whinston, A.B. (1970). *An algorithm for the quadratic assignment problem*. Management Science 17, 453-471.
- [HG85] Herroeleven, W. e Van Gils, A. (1985). *On the use of flow dominance in complexity measures for facility layout problems*. International Journal of Production Research 23, 97-108.
- [KB57] Koopmans, T. e Beckmann, M.J. (1957). *Assignment problems and the location of economic activities*, Econometrica 25, 53-76.
- [LRB07] Lee, L., Rangel, M.C. e Boeres, M.C.S.. (2007). *Reformulação do Problema de Isomorfismo de Grafos como o Problema Quadrático de Alocação*, Anais do XXXIX SBPO, 1601-1612, Fortaleza, setembro.
- [MR94] Mautor, T. e Roucairol, C. (1994). *Difficulties of exact methods for solving the quadratic assignment problem*. In Quadratic Assignment and Related Problems, DIMACS Series on Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, Vol. 16, AMS, Providence, RI.