

### PROJECTE FINAL DE CARRERA

# RECONSTRUCIO DE XARXES A PARTIR DE LA COMMUNICABILITY CENTRALITY DELS NODES

RECONSTRUCTION OF NETWORKS FROM THE COMMUNICABILITY CENTRALITY OF NODES

Estudis: Enginyeria d' Electrònica

Autor: Oscar Raig Colon

Director: Francesc Comelles

Any: 2015

## **Índex general**

Col·laboracions	5
Agraïments	7
Resum del Projecte	8
Resumen del Proyecto	9
Abstract	10
1.Introducció	11
Context del projecte	11
Objectius	13
Estructura de la memòria	15
2.Teoria de Grafs	16
Definicions i exemples	16
Exemples d'utilització de grafs	21
Isomorfismes de Graf	27
Xarxes en el mon real	29
Propietats principals de les xarxes	32
Models de grafs	36
3.Els Indicadors o paràmetres rellevants del graf	41
Betweenness centrality	42
Communicability Centrality	43
Communicability Betweenness Centrality	44
4.Els Algorismes	47
Simulated Annealing (SA)	48
Threshold Acceptance (TA)	51
Paràmetres de l'algorisme TA	53



6.La implementació	55
Els principis bàsics	55
Principis de la programació Orientada a Objectes	64
Representació matricial de la classe Graf	65
Programes utilitzats per fer el projecte	65
Posibles millores en la simulació i obtenció de resultats	66
7.Els Resultats	67
Communicability Centrality amb Threshold Acceptance	69
Communicability Centrality amb Simulatead Annealing	71
Communicability Betweenness Centrality amb Threshold Acceptance	72
Betweenness Centrality amb Simulatead Annealing	73
8.Conclusions	74
9.Apèndix	75
10.Referències	76
Bibliografia	76



# **Col·laboracions**

Matemàtica Aplicada IV





# **Agra**ïments

Agreixo a Francesc Comelles la oportunitat que m'ha brindat de fer el projecte final de carrera.

El Francesc m'ha obert una porta a tot un seguit de coneixements i tecnologia que ni tant sols sabia que existien.

M'ha omplert de curiositat, Betweenness centrality, Comunicability Centrality, Simulated Annealing, Threshold Acceptance, algorismes determinestes, estocàstics, simulacions de hores, dies i mesos.

A més a tirat del "carro" quan jo estava cansat, m'ha motivat i ha tingut molt de "push". M'ha estirat de les orelles, ha estat exigent quan calia i comprensiu quan tocava.

Sincerament,

Moltes Gràcies Francesc.



# Resum del Projecte

L'objectiu del projecte és intentar esbrinar quins son els paràmetres rellevants d'una xarxa. Hem de veure si som capaços de "comprimir" la xarxa d'alguna manera, ja que cada vegada les xarxes són més grans i més volàtils. Per esbrinarho, donada una xarxa original, s'extreuen unes propietats o paràmetres que volem saber si descriuen la xarxa, s'executa uns algorismes que, intenten reconstruïr el graf original. Si obtenim un graf semblant a l'original sabrem que aquest paràmetre és rellevant per la xarxa.



# Resumen del Proyecto

El objetivo del proyecto es intentar averiguar cuales son los parámetros relevantes de una red. Hemos de ver si somos capaces de "comprimir" la red de alguna manera, ya que cada vez las redes son mas grandes y mas volátiles. Dada una red original, se extraen las propiedades o parametros . Después se ejecutan unos algoritmos que reconstruyen el grafo original. Si obtenemos un grafo parecido a el original sabremos que este parámetro es importante para la red.



## **Abstract**

The project objective is to try to find out what are the relevant parameters of a network. We must see if we can "compress" the network somehow, because networks are increasingly larger and more volatile. Given an original network, properties or parameters are extracted. After algorithms to reconstruct the original graph are executed. If we get a graph similar to the original we will know that this parameter is important for the network.



## 1. Introducció

### **Context del projecte**

### Importància de la Teoria de grafs en el contexte tecnòlogic actual

La teoria de grafs permet modelar de forma senzilla un sistema en el qual existeixi una relació binaria entre certs objectes, és per això que el seu àmbit d'aplicació és molt general i cubreix árees que van des de la mateixa matemàtica, fins l'enginyeria electrònica, les telecomunicacions, la informàtica i la investigació.

Actualment, amb la arribada de les **xarxes socials** (facebook, twitter), la possibilitat de recopilar grans quantitats de dades personals del usuaris d'internet i tractar-les (Big Data), la teoria de grafs esdevé un de les matèries per lligar tota aquesta informació i utilitzar-la com a eina de marketing. El **cloud computing** està sent importantíssim per l'avenç de totes aquestes tecnologies, ja que aumenta les possibilitats de càlcul.

Les aplicacions per mòbils estan substituïnt les aplicacions Desktop a les llars, la gent compra, consulta més sobre els dispositius mòbils originant unes xarxes enormes amb estructures que varien minut a minut.

Ja fa temps que existeixen "graph databases" com Neo4j per donar suport a totes aquestes utilitats, grans companyies com Google treballen amb teoria de grafs, Apache Giraph per processar grafs sobre Big Data, implementacions de map reduces com Apache Hadoop... Són eines, empreses i tecnologies que avui en dia estan apostant per la Teoria de Grafs.



### Justificació de la reconstrucció de xarxes

La proliferacio de les xarxes sense fils, el nombre de xarxes locals dina miques connectades a la xarxa de xarxes no para de cre ixer. Aquestes xarxes es poden modelar matema ticament mitjanc ant grafs, associant els nodes i enllac os de la xarxa als ve rtexs i arestes del graf.

Les xarxes socials són un altre exemple de **xarxa dinàmica**, on les amistats apareixen i desapareixen, les necessitats i els interessos també és pot modelar com un graf i aquests últims tenen una volatilitat encara més alta.

Quan una xarxa es esta tica, per cone ixer el seu estat "nome s" cal cone ixer l'estat de cadascun dels seus elements (nodes i enllac os). Si be e s cert que recollir tota aquesta informacio en alguns casos pot no ser trivial, en el cas de les xarxes dina miques, on els nodes i els enllac os apareixen i desapareixen conti nuament, aquesta feina por ser realment complicada, per no dir inviable. Una de les eines que podria ajudar a fer aquest estudi de la xarxa seria un mecanisme que permete s, una vegada obtingut el graf que representa la xarxa, emmagatzemar aquesta informacio en un format molt compacte (per poder-lo transmetre ra pidament) i a l'hora fa cilment descompactable (per poder recuperar fa cil i ra pidament tota aquesta informacio)

La reconstruccio dels grafs e s un dels temes en els que s'esta treballant actualment i on es poden trobar aproximacions molt diferents. La necessitat de reconstruir grafs te diverses justificacions. D'entre totes, aquest estudi prete n aportar una alternativa per l'emmagatzematge de grafs.

Per tal d'emmagatzemar aquesta informació hem de saber **quins són els paràmetres rellevants de la xarxa.** Si a partir d'aquests paràmetres som capaços de reconstruïr la xarxa original, vol dir que aquest paràmetre és més important que d'altres.

Si som capaços de redimensionar una imatge vectorial, seriem capaços de fer-ho amb una xarxa?



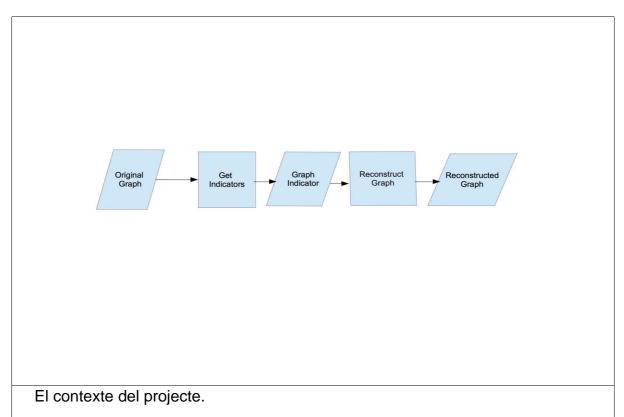
## **Objectius**

L'objectiu principal d'aquest projecte e s esbrinar cóm de rellevants són els paràmetres d'una xarxa i si ens permeten reconstruïr-la a partir d'aquests paràmetres.

Per esbrinar-ho s'ha evaluat l'us de dos algorismes el simulated annealing (SA) i threshold acceptance (TA), per reconstruir un graf a partir del betweenness centrality (BC), communicability betweeness centrality (CBC) o la communicability centrality(CC), que són uns paràmetres o indicadors del graf.

El treball posa especial focus en l'algorisme threhold acceptance i amb els paràmetres Communicability Betweenness Centrality i Communicability Centrality.

El algorisme simulated annealing i el paràmetre Betweenness centrality s'evalua amb menys rigor.



- 1.A partir d'un graf, extraiem indicadors, com la Betweeness centrality, la Communicability Betweenness Centrality o la Communicability Centrality.
- 2. A partir d'aquests indicadors, i el número de vértexs, intentem reconstruïr el graf original.



3. Si som capaços de reconstruïr el graf original és que el paràmetre és rellevant per la xarxa. També ens serveix per comparar quin paràmetre és més rellevant.

Per tant, que hem fet servir una mesura o indicador de cadascun dels ve rtexs del graf (o *vertex BC, CC, CBC*) per calcular la funcio de cost que utilitzen els algorismes. Aquesta mesura, com veurem me s endavant, do na molta informacio del graf, ja que a me s de l'ordre el graf, permet classificar els ve rtexs segons el nombre de camins curts que hi passen.

Hem escollit exemples representatius dels principals tipus de grafs que es fan servir per modelar diferents topologies de xarxes i hem realitzat la seva reconstruccio a partir de la llista de valors dels indicadors (BC, CC, CBC).

En concret, hem fet servir:

- · un graf aleatori (random),
- un graf petit-món (small-world),
- un graf amb invariància d'escala (scale-free),
- un graf circulant
- i un graf amb agrupament (clustering),

Tots ells amb el mateix ordre n=40, i per cadascun d'ells s'han realitzat entre 100 - 200 reconstruccions per disposar d'un nombre suficientment gran de grafs reconstruits i fer una ana lisi estadi stica dels resultats.



### Estructura de la memòria

Hi han 3 blocs principals:

- Conceptes teòrics
  - o Teoria de Grafs
  - o Indicadors
  - Algorismes
  - o Comparació dels grafs
- Implementació
  - o Algorisme de reconstrucció
  - o Generació de les 100-200 simulacions
  - Recollida de Resultats
- · Resultats i Conclusions.

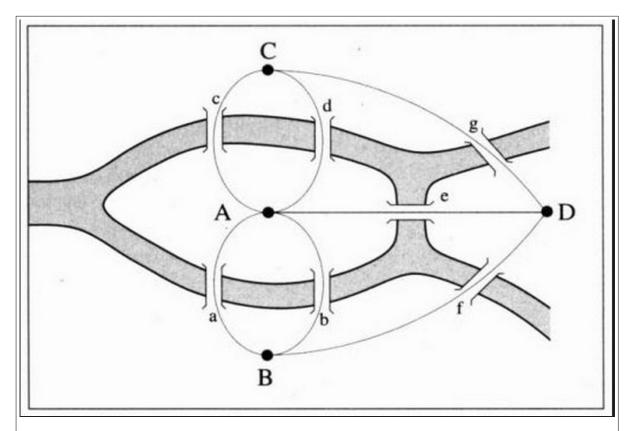


## **Leoria de Grafs**

## **Definicions i exemples**

### Ressenya Històrica : Euler i els ponts de Königsberg

L'origen de la teoria de grafs s'associa amb la resolucó que va donar Leonard Euler al anomenat problema dels ponts de Königsberg (1736). En aquesta ciutat hi ha una illa en mig del riu que travessa la ciutat. Aquesta illa està conectada per 7 ponts, el problema intanta passar un sol cop per cada un dels set ponts. La resolució que va donar Euler d'aquest problema no solament resolia a aquesta questió, sino que va introduïr la noció de graf i va resoldre al mateix temps un problema de caràcter més general.



La illa de la ciutat Königsberg, actualment Kaliningrad. Amb vèrtexs, A, B, C i D i amb arestes a,b,c,d,e,f,g.



### Definició de grafs dirigits, ordre i mida

Un **graf no dirigit** G=(V,E) és una estructura combinatòria constituïda per un conjunt V=V(G) d'elements anomenats vèrtexs i un conjunt E=E(G) de parells no ordenats de vèrtex distints anomenats arestes. Si la aresta  $e=\{u,v\}=uv$  relaciona els vèrtexs u i v, es diu que u i v són vèrtexs adjacents, de un altre mode, els vèrtexs es diuen independents.

El **grafs dirigits** les arestes són parells ordenats. En aquest document sempre parlarem de grafs dirigits.

El nombre de vèrtex de , |V(G)| , és l'**ordre** del graf i el nombre d'arestes |E(G)| és el **tamany del graf o la mida del graf.** 

Una manera de representar qualsevol relació és llistant els seus elements com a parells ordenats. En aquests cas és més convenient utilitzar una representació com la figura de sota. En aquest graf podem veure que pdem anar del vèrtex "u" a "w" a través de v. La visualització gràfica és més fàcil de interpretar que els parells ordenats de la relació.

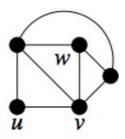


Figura 1.1: Graf no dirigit amb ordre 5 i tamany 8



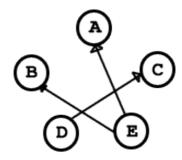


Figura 1.2: Graf dirigit amb ordre 5 i tamany 3

### Grau d'un vèrtex, camins

El node és comunica amb altres nodes mitjançant les arestes. El nombre d'arestes que té un node és el **grau del node**.

Un vèrtex aïllat és un vèrtex amb grau 0.

Un vèrtex full o terminal és un vèrtex amb grau 1.

Dos vèrtexs d'un grafs es poden comunicar mitjançant una sèrie d'arestes, que s'anomena **camí**.

El nombre d'arestes d'un camí s'anomena longitud del camí.

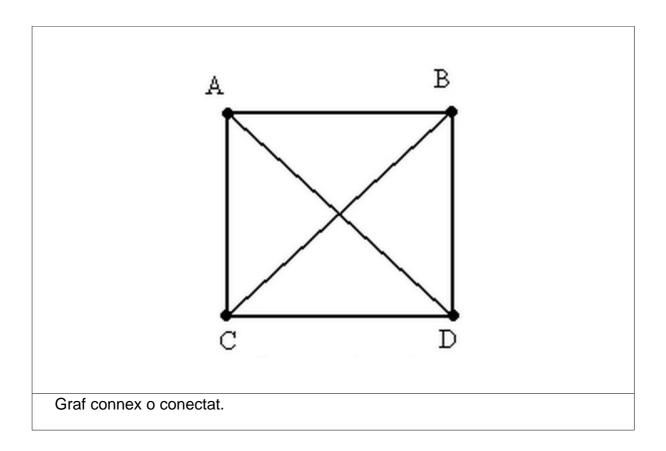
La **distància** entre dos vèrtexs és el nombre d'arestes que conté el camí més curt que els enllaça.

El diàmetre d'un graf és la màxima distància existent entre totes les parelles de vèrtexs que el formen.

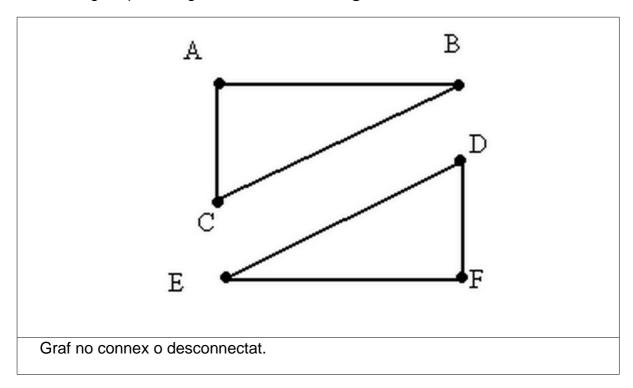
Quan el camí entre dos vèrtexs només passa una vegada per qualsevol d'ells s'anomena camí simple.

Un graf no dirigit s'anomena **graf connex** si existeix un camí entre dos vèrtexs distints.





Un graf que no sigui connex s'anomena graf no conex.



Si existeixen dues o més arestes que uneixen els mateixos vèrtexs parlem de



**branques paral.les**. un graf que contingui branques paral.leles s'anomena **multigraf**.

Un **llaç** és una aresta que comença i acaba en el mateix vèrtex.

### Clúster i clustering

Un **cluster** és un conjunt de vèrtexs entre els que existeixen moltes connexions. El **clustering** n'es un paràmetre relacionat, que mesura la connectivitat local d'un graf. El **clustering d'un vèrtex** es defineix com la fracció de branques que uneixen les veïns d'aquest vèrtex entre ells, entre la quantitat total possible de branques. El clustering d'un graf és la mitjana dels clusterings des seus vèrtexs, Si un vèrtex està aïllat o només té un veí, per conveni la seva aportació al clustering global és 1.

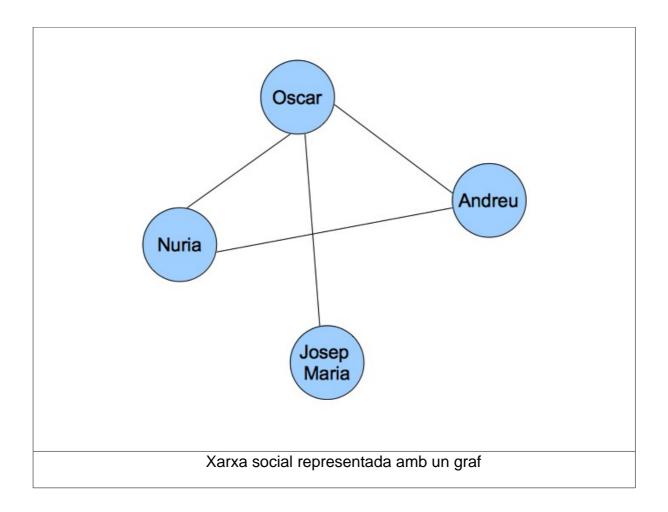
El **grau**, el **clustering**,el **diàmetre** i la **distància** són paràmetres que en els resultats finals ens ajudaran a comparar el graf original amb el reconstruït. Són paràmetres que defineixen la estructura del graf.

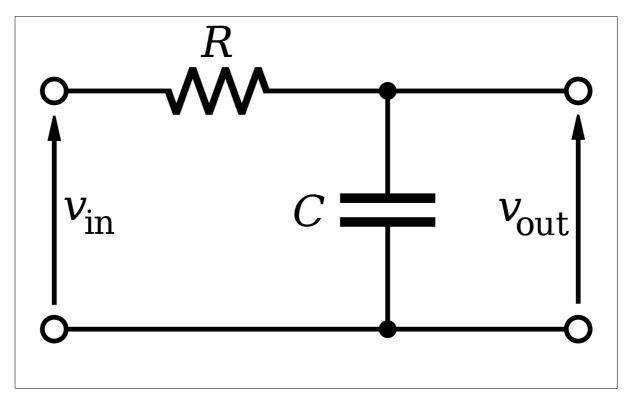


## Exemples d'utilització de grafs

Al final els grafs representen relacions entre elements. Avui en dia podríem parlar de facebook com a exemple de graf. Jo tinc 3 amistats. La Núria, l'Andreu i Josep Maria. La Núria també és amiga de l'Andreu.



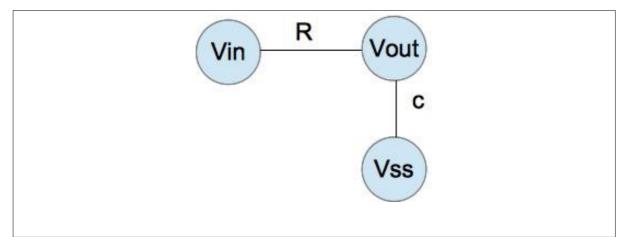






Filtre pasa baix

En un circuit elèctric clàssic passa baix, podríem definir els següent nodes:



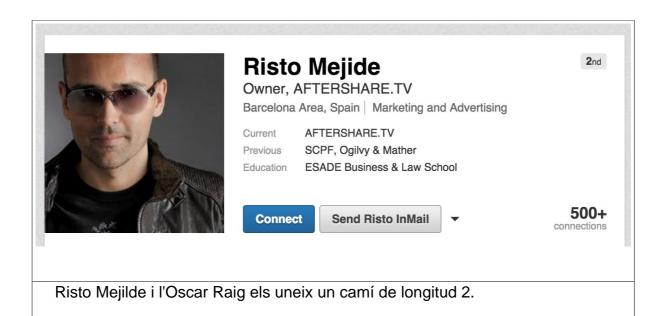
El node d'entrada es conecta al node de sortida mitjançant una aresta R. El node de Sortida és comunica amb Vss mitjçant un condensador.

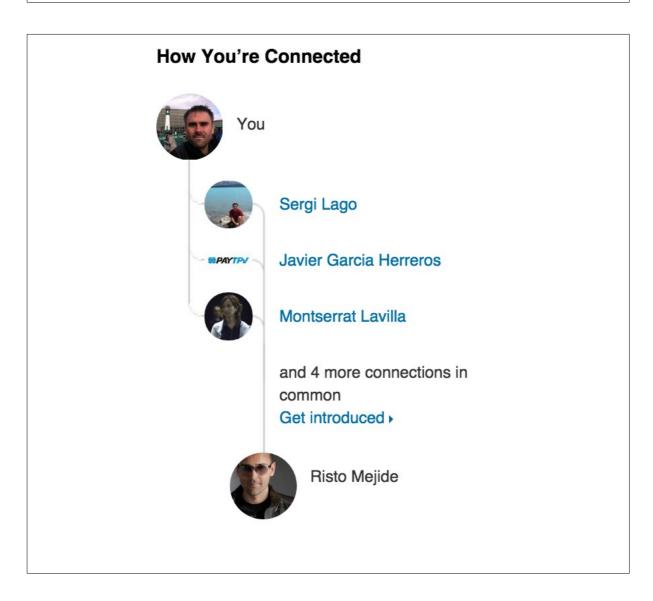




Dels "Seven Bridges of Königsberg" als carrers guarnits de les festes de Gràcia, podriem fer un algorisme que passi per tots els carrers guarnits una sola vegada?









Els Camins de Longitud 2 que uneixen Oscar Raig i Risto Mejilde són 7.

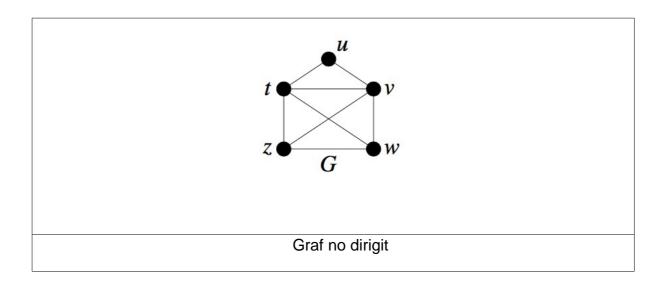
### Matriu d'adjacència d'un graf

Hem parlat de dues maneres de representar un graf, mitjançant una llista de parells ordenats i mitjançant un dibuix, de manera gràfica.

Una tercera manera de visualitzar un graf es mitjançant la matriu d'adjacència.

La matriu d'adjacència d'un graf de N vèrtexs, és una matriu quadrada NxN on:

- L'element Aij = 1 si el vèrtex i té una aresta amb el vértex j.
- Aij és 0 si no hi ha cap aresta que els conecti.





$$A = \left( egin{array}{ccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{array} 
ight)$$

Matriu d'adjacència pel graf de la figura d'adalt.

$$A^{2} = \left(\begin{array}{ccccc} 2 & 1 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & 2 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 3 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 3 & 2 & 2 & 4 \end{array}\right)$$

Càclcul de el nombre de recorreguts (o camins, tots els simples i els que no) de distància 2 entre vèrtex del graf.

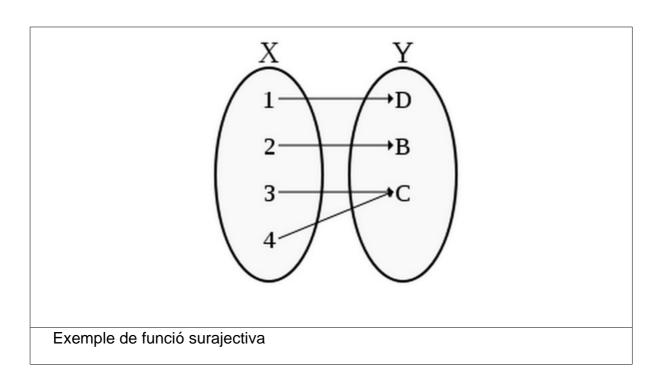


### Isomorfismes de Graf

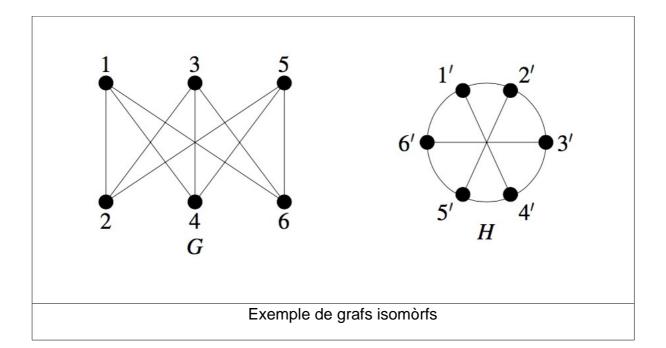
Sigui G1= (V1,A1) i G2=(V2,A2) dos grafs no dirigits.

Una funció f: V1 -> V2 s'anomena isomorfisme de grafs si:

- 1. f es un a un i suprajectiva
- 2. per tot a,b que pertany a V1, l'aresta a-b que pertany a A1, l'aresta f(a)-f(b) pertany a A2.









### Xarxes en el mon real

Durant molt de temps, els estudis que s'havien realitzat en xarxes complexes en basaven en models senzills (grafs aleatoris tipus Erdös-Renyi) que per qüestions de complexitat en els càlculs, i degut a la dificultat de poder fer estudis més exhaustius, no eren molt properes a la realitat. S'ha pogut comprovar que moltes de les xarxes que representen sistemes complexos no tenen l'estructura aleatòria que s'havia suposat fins aleshores.

### Tipus de xarxes científiques

En aquest apartat donarem una visio general de la estructura dalgunes xarxes complexes existents al mo n real, veurem quines so n les propietats me s importants. Inspirat per l'article de [Watts and Strogatz] ha hagut un estudi de les xarxes de difrents branques de la ciència, amb èmfasi en les propietats que son comuns a moltes de elles .

Entre els tipus de xarxes que podrem trobar tenim quatre grans grups: xarxes socials, d'informacio, tecnolo giques i biolo giques Newman]

#### **Xarxes Socials**

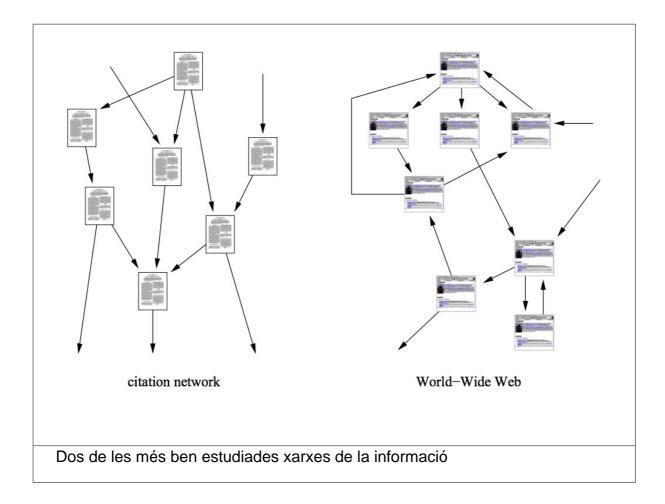
Es considera una xarxa social com un conjunt de persones o grups de persones que segueixen un patro de contactes o interaccions entre ells. Els patrons d'amistat entre individus, relacions de negocis entre companyies i casaments entre families, son totes elles exemples de xarxes que han estat estudiades en el passat.

Un important conjunt de experiments son els famosos expriments "petit-món" de Milgram. El experiment va provar la distribució de les longituds de camins en una xarxa demanant als participants que passesin una carta d'una persona a un altre esperant si arribava al seu destinatari. Moltes de les cartes del experiment es van perdre però una quarta part van arribar al destinatari passant per les mans de només sis persones. Aquest experiment va donar lloc al concepte popular dels "sis graus de separació" encara que la frase no apareix en el treball de Milgram, va se anomenat decades després per Guare.

#### Xarxes d'Informació

Tambe anomenades xarxes de coneixement ("knowledge networks"). Dins de les xarxes d'informacio es poden destacar dos exemples:





El primer seria la relacio de cites que hi ha entre publicacions acade miques, a partir de les publicacions i les refere ncies entre elles. Cal comentar pero, que la xarxa resultant e s dirigida( document A fa referència al document B) i sense cicles, donat que no es pot fer refere ncia a un article que encara no sha escrit.

Un altre exemple e s la xarxa www.considerant el conjunt de pa gines web i els seus hiperlinks com a ve rtexs i arestes respectivament. En aquest cas la xarxa resultant e s tambe dirigida, amb la difere ncia que alguns enllac os son bidireccionals i es poden donar cercles. No s'ha de confondre www amb la xarxa d'Internet, que és una xarxa física d'ordinadors enllaçats entre ells per fibra óptica i altre tipus d'enllaç.

### Xarxes tecnològiques

Aquest tipus de xarxes han estat, almenys en principi, dissenyades per l'home per a distribuir recursos com la eléctricitat o la informació. Hi ha diversos exemples: les xarxes electriques, les xarxes de rutes ae ries, ferrovia ries, xarxa telefo nica, correus...fins i tot els circuits electro nics son una forma de xarxa de distribucio



tecnolo gica. Un dels casos me s interessants e s Internet, la red física de conexions entre ordinadors. La xarxa és gran i el nombre d'elements conectats a la xarxa cambia constantment

Per estudiar la xarxa primer cal tenir en compte una se rie d'aspectes: La infraestructura fi sica que permet aquestes connexions no e s fa cil d'estudiar ja que el manteniment en depe n de diferents organitzacions. La forma de fer-ho e s mitjanc ant programes que realitzen traces entre dos punts (tracerout). Les dades dels nodes intermedis per els quals passa un paquet de dades és va emmagatzemant fins que es determina l'estructura global de la xarxa. Ara be , com a consequ e ncia d'aquesta metodologia sempre hi ha un conjunt de ve rtexs (aixi com un conjunt de enllac os) que mai son mostrejats, de forma que aquesta aproximacio pot arribar a ser prou bona, pero no perfecta.

### Xarxes biològiques

Hi ha nombrosos sistemes biolo gics que tambe formen xarxes complexes.

Una tipus de xarxa biolo gica e s la xarxa reguladora gene tica.

Les cadenes alimenticies, en el qual els vèrtexs representen especies en el ecosistema i una aresta dirigida entre A i B indica que A s'alimenta de B.

Xarxes neuronals son també un altre tipus de xarxa biologica d'importància considerable.



### Propietats principals de les xarxes

Descriurem les principals propietats de les xarxes:

- Distribucio potencial de graus (internet traceroute)
- Distribució de les distàncies (petit-món, la carta que pasa de mà a mà)
- · Correlacio entre graus
- Adjuncio preferent
- Robustesa i vulnerabilitat

### Distribució potencial dels graus

Durant me s de 40 anys, la comunitat cienti fica havia assumit que les xarxes complexes eren aleato ries i seguien el model proposat per Erdo s i Re nyi l'any 1959.

Partint d'aquestes hipo tesis, a partir duna distribucio aleato ria dels nodes, el sistema resultant hauria de ser molt semblant, en quant a nombre de enllac os per node. D'aquesta manera, la majoria de nodes tindrien aproximadament el mateix nombre d'enllac os i seguirien una distribucio de Poisson ben determinada, on trobar nodes de grau molt per sota o per sobre de la mitja seria gairebe impossible.

A l'any 1999, pero, Re ka Albert, Hawoong Jeong i Albert-Laszlo Baraba si van estudiar la topologia de la World Wide Web amb l'objectiu de determinar les propietats globals de la xarxa. En un principi, les seves conjectures els van dur a pensar que trobarien una xarxa aleato ria, degut al gran nombre de pa gines web i al gran nombre poblacio amb interessos diferents pero els resultats pero no van ser els previstos.

El mecanisme que s'encarregava de fer el recompte saltava des d'una pa gina web a un altre i recollia tots els enllac os que trobava. Tot i que u nicament van poder explorar una part molt petita de la xarxa, va ser suficient per veure que la WWW es sostenia a partir de molt pocs nodes amb un nombre molt elevat d'enllac os. Mes del 80% de les pa gines tenien menys de 4 enllac os, i menys d'un 0.01% de tots els nodes tenien me s de 1000.

Fent un recompte de quantes pagines web tenien exactament k enllac os (links), es va demostrar que l' histograma resultant seguia una distribucio de graus



potencial, e s a dir, la probabilitat de que un node fos connectat a k nodes era proporcional a 1/k<sub>expN</sub>. El valor de n per enllac os de entrada era aproximadament 2. En definitiva, era quatre vegades me s probable que qualsevol node tingue s la meitat del nombre d'enllac os d'entrada que un altre. El resultat era evident, e s tractava d'un altre tipus de distribucio totalment diferent a la aleato ria, era una xarxa lliure d'escala, i d'aqui el nom graf amb invariància d'escala

Me s formalment, el termeinvariàcia d'escala es refereix per totes les funcions f(x) que resten inalterables, tot i aplicar-les-hi factors multiplicatius o modificadors d'escala.

#### Distribució de les distàncies

El fet que la distribucio de graus en una xarxa complexa sigui amb invariàcia d'escala no implica que la distribucio de la dista ncia entre nodes tambe segueixi aquesta regla. Aquest efecte e s conegut amb el nom de efecte petit-mo n on certs enllac os entre nodes poden connectar dues parts molt distants en el graf..

L'experiment que hem comentat abans sobre les cartes expliquen el concepte. En el nostre estudi un dels paràmetres que observem en les reconstruccions és la mitja de les distàncies i els diàmetres.

Sovint trobem xarxes que conviuen els dos models el de invariàcia d'escala i el de "petit-món".

#### Correlació entre graus

Una altra caracteri stica important de les xarxes amb invariàcia d'escala e s veure la relacio que hi ha entre nodes del mateix grau.

Ell clustering del ve rtex en funcio del seu grau. En aquest cas,'bbjectiu e s veure fins a quin punt valors clustering elevat implica un grau elevat en els nodes vei ns.

#### Adjunció Preferent

Una de les sorpreses me s importants que es van donar en lestudi de les diferents xarxes complexes va ser la existe ncia de nodes altament connectats -tambe anomenats hubs. Per explicar el motiu d'existe ncia daquests hubs es proposara com a exemple el mateix que van fer servir Baraba si per a les seves proves.

Des del seu llanc ament al 1990 amb una u nica pa gina, la WWW ha experimentat



un enorme creixement. El model de creixement pero, s'ha mantingut al llarg dels anys, i el que e s me s important, la seva distribucio potencial no ha canviat.

No tots els nodes son iguals, quan una nova pa gina es crea l'autor pot decidir enllac ar-la alla on vulgui. Si tenim en compte que la majoria de la poblacio coneix nome s una petita part, la tende ncia natural sera connectar la web al lloc on sigui me s accessible i on tothom la pugui veure. Amb aquest mecanisme, els nous nodes, tendeixen a enllac ar-se als millor connectats, fet que afavoreix encara me s aquests hubs, dotant-los de me s connexions i fent-los mes "atractius" per a nous nodes. Aquesta prefere ncia a l'hora d'escollir el node d'enllac es coneix amb el nom d'adjuncio preferent. Si tenim en compte que es tracta d'un model de creixement, aquesta realimentacio constant afavoreix que els nodes me s antics tinguin me s probabilitat de esdevenir hubs en el futur, tot i que com veurem me s endavant no te perque ser aixi .

Aquest grau tan alt de creixement, unit a l'adjuncio preferent do na una bona rao per entendre l'existe ncia dun nombre tan elevat de xarxes amb invariàcia d'escala en qualsevol tipus d'entorn natural o artificial.

Investigacions en els diferents tipus de d'adjuncio preferent expliquen que el mecanisme de generacio de hubs tendeix a ser lineal. Un nou node es connectara amb probabilitat doble, a un node antic que tingui almenys el doble d'enllac os que el seu vei . Daltra banda si es forc a a que la probabilitat sigui 4 vegades me s gran, el resultat sera un u nic hub que compartira totes les connexions.

#### Resilència i vulnerabilitat

Aquest tipus de xarxes son a la vegada molt robustes i molt vulnerables, tot depe n del tipus d'atac al que siguin sotmeses. Baraba si i Jeong van realitzar proves sobre una xarxa amb invariàcia d'escala amb dos tipus d'atacs. En primer lloc van dirigir-se de forma aleato ria i uniforme als nodes de la xarxa, mentre que en una altra prova van atacar directament als hubs.

En xarxes aleato ries ( Poisson ) donat que gran part de nodes tenen el mateix nombre d'enllac os, els dos tipus datacs els afectaren de la mateixa manera. A les poques iteracions la connectivitat entre els elements restants del graf ja estava molt malmesa i la "caiguda" de la xarxa era inevitable.

Les xarxes amb invariàcia d'escala tenen dos tipus de comportament enfront els atacs. En el cas de ser atacades de forma aleato ria demostren gran robustesa, ja que "per probabilitat" la majoria de nodes tenen molt pocs enllac os ( o vei ns ), i tot i eliminar molts nodes, la seva connectivitat es veu afectada nome s de forma local.



### [Reconstrucció de xarxes a aprtir de la Communicability Centrality dels nodes]35

D'altra banda, si els atacs van dirigits als hubs les conseque ncies solen ser desastroses. U nicament eliminant molt pocs nodes la connectivitat de la xarxa passa a un estat cri tic. Segons les proves realitzades per Baraba si, u nicament eliminant el 5% dels hubs, la dista ncia per creuar la xarxa es duplicava. A partir daqui es va demostrar que eliminant entre el 5 i el 15% dels nodes millor connectats (comenc ant pel me s gran) rihi hauria prou per fer caure qualsevol xarxa d'aquest tipus.



### Models de grafs

Tal com s'ha dit anteriorment, els grafs es fan servir per modelar matema ticament diferents relacions binàries entre objectes. Per permetre'n adaptar i reproduir direrents situacions de grafs, s'han definit models de grafs a partir de para metres com la distribucio dels graus o el mecanisme per triar les associacions entre ve rtexs. A continuacio veurem la descripcio d'uns quants exemples de grafs que es fan servir per modelar xarxes reals per a les que es pot aplicar la te cnica de reconstruccio descrita en aquesta memo ria.

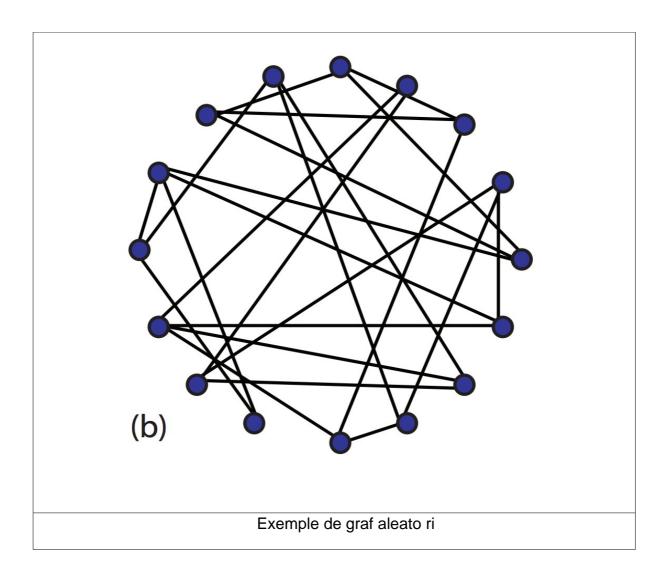
### **Graf Aleatori**

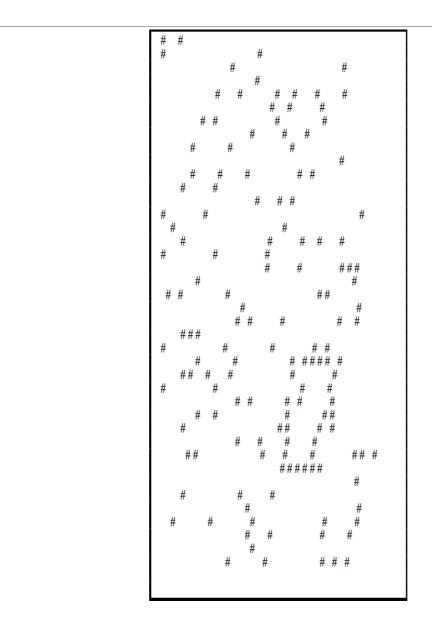
En els grafs aleatoris, com els que s'obtenen seguint el model Erdo s-Re nyi ( dos matemàtics húngars) que hem fet servir per generar el graf aleatori del nostre estudi, per a cada parella de ve rtexs hi ha una aresta que els uneix amb una probabilitat p fixada i independent de les altres parelles. Donat que hi ha connexions amb la mateixa probabilitat amb qualssevol dels nodes, les distancies acostumen a ser petites (Average distance 2.89, dels més baixos dels 5 grafs). L'aleatorietat fa que dos ve rtex adjacents difi cilment comparteixen vei ns, per la qual cosa el clustering acostuma a ser baix (Clustering = 0.2, el més baix dels 5 grafs).

Nom del Graf		Random
Diamater		6
Avarage Dist		2.89
	min.	1
Degrees	avg.	3.8
	max.	8
Clustering		0.2
Comm. Centr	avg.	6.564
Com. Betw Centr	avg.	0.0894

Caracterísitiques del graf aleatori que utilitzem per fer les proves. Distància i clustering baixos.







Matriu d'adjacència del graf aleato ri

## **Graf circulant**

En els grafs regulars, tots els ve rtexs tenen el mateix grau. Hi ha grafs regulars amb enllac os aleatoris. En aquest cas ( grafs circulars amb enllaços aleatoris) les caracteri stiques de clustering i de les distancies son similars a les dels grafs aleatoris.

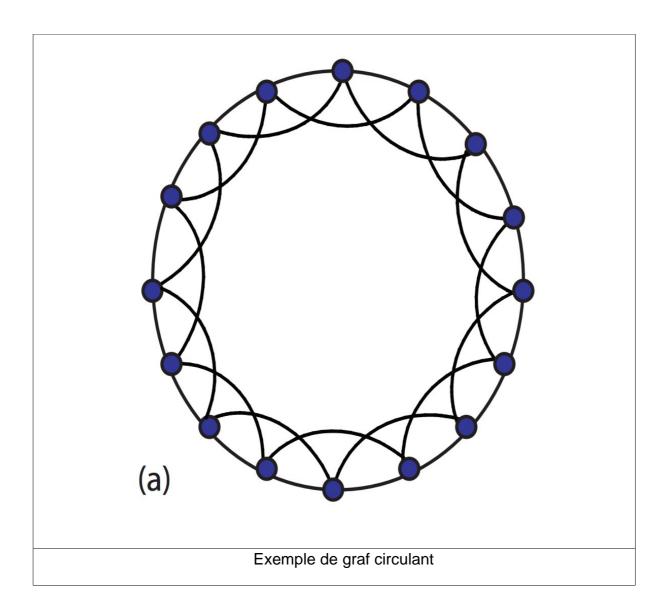
En els grafs fortament regulars, els ve rtexs adjacents comparteixen un cert



nombre de vei ns, per la qual cosa el clustering e s gran (Clustering 0.5 en el nostre cas, el més gran de la sèrie). Per altra banda, per construccio no existeixen enllac os de llarga dista ncia que uneixin parts allunyades de la xarxa, per la qual cosa les dista ncies so n elevades (5.38 la més gran de la sèrie).

	Circular
	10
	5.38
min.	4
avg.	4
max.	4
	0.5
avg.	7.458
avg.	0.152
	avg. max. avg.

Caracterísitiques del graf circulant/regular que utilitzem per fer les proves. Distàncies llargues. Tots els nodes tenen el mateix grau. Diàmetre, Average Distance i Clustering alts.



```
# ###
## ##
### #
### #
        ## ##
         ### #
           # ###
            # ###
            ## ##
                # ###
                ## ##
                ### #
                 ### #
                    # ###
                         # ###
                        ## ##
                        ### #
                             # ###
                             ## ##
                             ### #
#
                              ###
```

Matriu d'adjacència del graf circulant, podem observar com les conexions s'agrupen a la diagonal, per exemple el 3 amb el 2 i el 4 i el 4 amb el 2.

#### **Graf Small world**

Els grafs small world so n una modificacio dels grafs circulants descrits abans, en els que s'introdueixen alguns enllac os aleatoris.

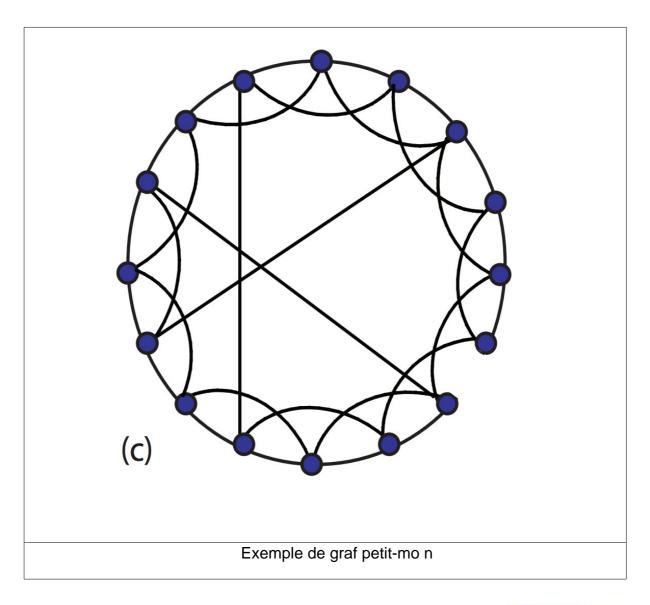
Aquest tipus de graf e s d'intere s per moltes situacions reals perque permet modelar alguns aspectes de les xarxes reals, gra cies a que presenta alhora una dista ncia mitjana entre ve rtexs petita, aixi com un dia metre petit i un grau d'agrupament de nodes elevat. Aquest tipus de valors son frequ ents en sistemes



complexos com la xarxa telefo nica o Internet.

Name del Ones		0
Nom del Graf		Small World
Diamater		6
Avarage Dist		3.31
	min.	3
Degrees	avg.	4
	max.	5
Clustering		0.32
Comm. Centr	avg.	6.709
Com. Betw Centr	avg.	0.0934

Caracterísitiques del graf small world que utilitzem per fer les proves. Valors ni molt alt ni molt baixos.





```
# # #
## ##
                                  #
 #
       # ###
        # ###
        ## ##
        ### #
                 # ###
                                  #
                         # ###
                         # ###
                         ## ##
                             # ##
                              # # #
                              ##
 #
                               ##
```

Matriu d'adjacència del graf petit-món, molt semblant al graf circulant però amb algunes connexions allunyades de la diagonal, conectant zones llunyanes.

#### Graf amb invariància d'escala

En els grafs amb invariància d'escala, la distribucio dels graus dels ve rtex segueix una llei potencial, de manera que molts ve rtexs tenen un grau petit mentre que molt pocs ve rtexs tenen un grau gran. Aquest model tambe es important a la practica perque reprodueix l'estructura de les connexions d'Internet i de moltes altres xarxes reals.



El terme invariàcia d'escala s'aplica en general a aquelles xarxes que a mesura que s'afegeixen nodes no canvia el factor d'escala de la seva distribucio dels graus. Un exemple de xarxes complexes d'aquest tipus e s la WWW, que ha mantingut la seva distribucio de graus tot i haver augmentat considerablement el nombre de nodes i enllac os en els u ltims anys.

Barabasi, A.-L. i Albert R. van proposar el 1999 un algorisme estoca stic per generar grafs invariants d'escala que incorpora dos conceptes generals molt presents a les xarxes reals:

- El creixement (o growth) indica que el nu mero d'enllac os augmenta a mesura que s'afegeixen nous nodes a la xarxa.
- La prefere ncia d'associacio (preferential attachment) indica que, quan un node esta molt connectat, e s me s probable que rebi nous enllac os. Dit d'una altre manera, els ve rtexs de me s grau capten me s enllac os.

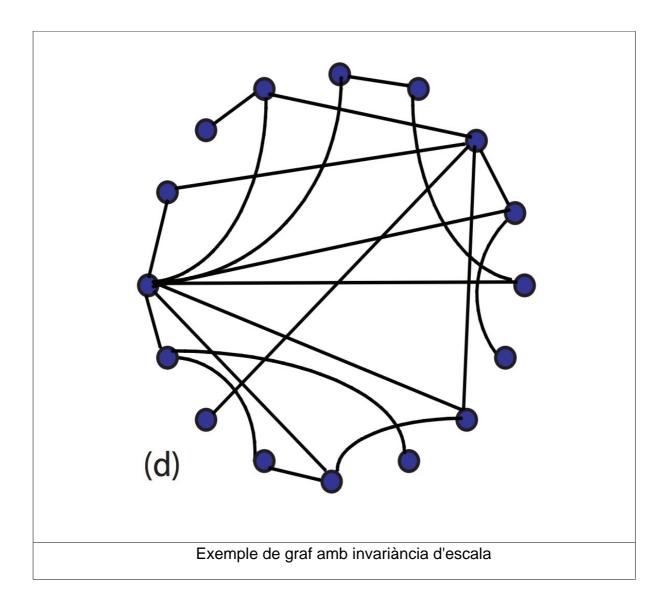
Les característiques d'aquest graf són:

- La distribucio de graus no canvia amb me s iteracions i queda descrita per una fórmula.
- La dista ncia mitjana creix logari tmicament amb l'ordre del graf.
- El clustering és una mica més gran que en les xarxes aleatòries.

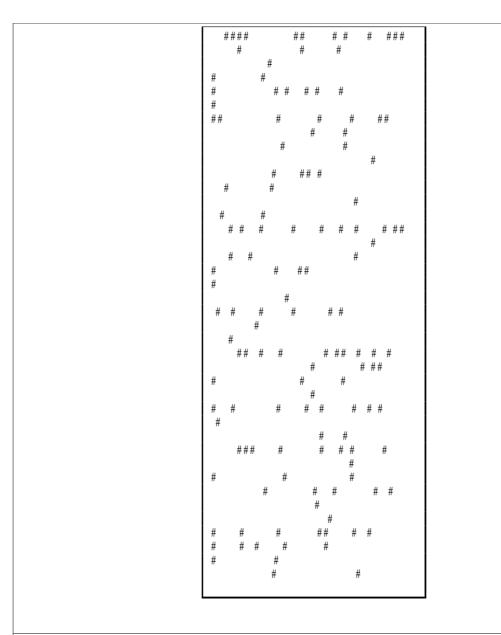
Nom del Graf		Scale Free
Diamater		4
Avarage Dist		2.32
	min.	1
Degrees	avg.	4.95
	max.	17
Clustering		0.26
Comm. Centr	avg.	24.244
Com. Betw Centr	avg.	0.113

Diàmetre baix, i distàncies mitges baixes.









Matriu d'adjacència del graf amb invariàcina d'escala

## **Graf amb agrupament**

És un graf que conte grups de nodes molt conectectats entre si, aquests grups s'anomenen clústers.



	T	01 1
Nom del Graf		Cluster
Diamater		5
Avarage Dist		2.65
	min.	2
Degrees	avg.	6.3
	max.	13
Clustering		0.37
Comm. Centr	avg.	144.619
Com. Betw Centr	avg.	0.14089

Graf amb agrupament, clustering alt i distàncies baixes.

```
###
## #
                           #####
                         ## ## #
                             #
                 ##### ### ###
                 ## #
```



Matriu d'adjacència del graf clúster, es pot veure com els nodes s'agrupen en tres clústers.



# 3. Els Indicadors o paràmetres rellevants del graf

En aquesta secció definirem els paràmetres rellevants del graf o indicadors que són candidats a definir una xarxa.

Els indicadors que utilitzarem per la funció de cost dels algorismes del projecte són 3:

- Communicability:
  - Communicability Centrality
- · Centrality:
  - o Betweeness Centrality
  - Communicability Betweenness Centrality

Estrada en el seu llibre situa la CBC com una variant de la Centrality, en pàgines com Networkx, la situen dintre de la communicability.



## **Betweenness centrality**

La **centralitat** ens indica quins vèrtexs d'un graf són els més importants. Per exemple en una xarxa social ens indicaria quina és la persona que més influència té o en una xarxa de computadors els nodes claus.

Hi han diverses maneres de mesurar la centralitat d'un vèrtex. La betweeness centrality és una d'elles.

La Betweeness centrality mesura el nombre de **vegades que un vèrtex actua com a pont en un camí curt** entre altres dos nodes del graf.

Aquest concepte va se introdït per Freeman, 1979.

La fórmula per calcula la BC és la següent:

$$BC(k) = \sum_{i} \sum_{j} \frac{\rho(i, k, j)}{\rho(i, j)}, \quad i \neq j \neq k$$

p(i,k,j) són els camins curts que passen per k.

p(i,j) son tots els camins curts que passen per i i j.

## **Communicability Centrality**

La communicability és una mesura introduïda per Ernesto Estrada. En capítol 6 del seu llibre "The structure of Complex Networks" ho explica amb detall i rigor científic.

La comuncicació, posem per cas entre dos ciutats no sempre és fa per les carreteres més curtes. Podria ser que el camí més curt és una autopista, però com s'ha de pagar peatge els conductors sovint preferiexen passar per camins més llargs.

És possible doncs que una ciutat esdevingui important encara que no estigui en un dels camins curts de la xarxa viària.

La communicability, per tant té en conté la importància de totes les rutes del graf, no només les més curtes.

La communicability centrality én concret és calcula tenint en conte tots els camins tancats que comencen i acaben al node n.

La **communicability centrality** és pot calcular operant directament amb la matriu d'adjacència que representa un graf. És per això que la implementació del graf que s'ha escollit per aquest projecte **és una implemtació de la estructura graf mitjançant una matriu d'adjacència**.



## **Communicability Betweenness Centrality**

La communicability Betweeness Centrality va ser proposada per Estrada en el 2009.

La fórmula per calcular la CBC és:

$$BC_r = \frac{1}{C} \sum_{p} \sum_{q} \frac{G_{prq}}{G_{pq}}, \quad p \neq q, \ p \neq r, \ q \neq r$$

El resultat esta dividit per C, que és un factor de normalització . La CBC és un número entre 0 i 1.

Gpq són els camins entre p i q, Gprq, els camins entre p i q que passen per r.

$$G_{pq} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\mathbf{A}^k\right)_{pq}}{k!},$$

Càlcul dels camins que passen de p a q.

Aquesta fórmula convergeix cap a:

$$G_{pq}=\left(e^{A}\right)_{pq}$$
.



$$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}.$$

$$e^{At} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n A^n}{n!}.$$

On eA és la matriu exponencial, fent una analogia amb les series de Taylor, i amb una matriu A nxn.

$$G_{prq} = \left(e^{\mathbf{A}}\right)_{pq} - \left(e^{\mathbf{A} + \mathbf{E}(r)}\right)_{pq}$$

Càclul del camins que van de p a q passen per r.

$$BC_r = \frac{1}{C} \sum_{p} \sum_{q} \frac{\left(e^{\mathbf{A}}\right)_{pq} - \left(e^{\mathbf{A} + \mathbf{E}(r)}\right)_{pq}}{\left(e^{\mathbf{A}}\right)_{pq}}, p \neq q, p \neq r, q \neq r$$

El resultat final de la fórmula per la Communicability Betweenness Centrality

Per informació més detallada sobre aquest càlcul, recomano la lectura *The communicability betweenness in complex networks. Ernesto Estrada, Physica A,388* (2009) 764-774.

La llibreria GNU gsl, ofereix tot de funcions per obtener eA. Es per això que en el



projecte s'ha escollit que la implementació dels grafs sigui una matriu en format de la llibreria GNU/gsl, per facilita els càlculs.



## 4. Els Algorismes

Entre els tipus de problemes que ens podem trobar, n'hi ha que son relativament fa cils de resoldre, on el temps de resolucio creix de forma lineal amb la quantitat de dades del problema, en els que es poden trobar les solucions ra pidament aplicant una amplia gamma d' algorismes. Sovint trobem un altre tipus de problemes en que la seva dificultat de **resolucio augmenta de forma exponencial**, per als quals no es pot garantir una solucio o ptima en un interval de temps relativament curt.

Hi ha una gran quantitat de problemes que hi ha d'aquest tipus en el dia a dia, i tenim la necessitat de poder-los resoldre de forma ra pida, es van impulsar el desenvolupament de algorismes per trobar bones solucions encara que no fossin les o ptimes, pero si bones aproximacions en intervals de temps acceptables.

Aquests me todes, en els que la qualitat de la solucio e s tan important com el temps que cal per trobar-la so n els anomenats me todes heuri sticso aproximats. Aquests mecanismes proporcionen sovint una bona aproximacio a la solucio, pero no necessa riament la o ptima. Lo gicament el temps invertit per un me tode exacte per solucionar aquest tipus de problema seria d'una magnitud molt superior, i en alguns casos impracticable.

Un exemple de problema d'optimitzacio combinato ria el trobem en el famo s "problema del viatjant", on s'intenta trobar la ruta o ptima que ha de seguir un viatjant per passar per totes les ciutats on ha de realitzar vendes sense passar dues vegades per la mateixa i fent la mi nima distància possible.

Entre els algorismes existents treballem amb els Simulated annealing o recuita simulada i el Threshold Accptance.



## Simulated Annealing (SA)

## Origen de l'algorisme Simulated Annealing

El nom ve del procés de recuït (annealing en anglés) d'àcer i ceràmiques, una técnica que consisteix en calentar i després refredar lentament el material per variar les seves propietats físiques. La calor causa que els àtoms augmentin la seva energia i que puguin desplaçar-se a les seves posicions inicial; el refredament lent els hi dona majors probabilitats de recristalitzar en configuracions amb menor energia que la inicial.

Aquest métode fou descrit per Scott Kirkpatrick a mitjans dels anys 80, s'ha demostrat que e s un mecanisme molt potent i molt exito s per resoldre un gran nombre de problemes d'optimitzacio.

## Descripció general i pseudocodi de l'algorisme Simulated Annealing

Traduït als algorismes, per començar ens cal una solució inicial a l'atzar i una funcio de cost que n'avaluiï la qualitat. A partir d'aqui,i repetidament, es modifica aleatoriament la solució acceptada en aquell moment i se'n trona a avaluar el cost. El punt clau de l'algorisme és aconseguir que en els primers instants sigui fàcil acceptar una solució que sigui pitjor que l'actual, i que a mesura que avança l'execució sigui cada cop més dificil i es tendeixi a adaptar només els canvis que millorin la resposta acceptada en aquell moment. El paràmetre que regula aquesta evolució s'anomena temperatura.

Pel seu disseny, el simulated annealing evita encallar-se en els mínims locals de la funció de cost. Si cau en un, l'atzar fa que en algun moment s'accpeti un canvi a pitjor i es pugui torna a evolucioanr cap a la solució òptima.

L'algorisme, en resum, és el següent:

- 1. Generar aleatòriament una solució inicial. Fixar la temperatura inicial, Tk=To.
- 2. Repetirn Nk vegades:
  - Modificar lleugerament ( de forma aleatoria) la solució i calcular la seva funció de cost.
  - 2. Si és millor, apcceptar-la com a nova solució.



3. Si és pitjor, acceptar-la solament si

e exp (Delta f/Tk) < rand

on Delta f és la diferència de cost entre la millor solució i la que s'estar revisant i Tk és la temperatura actual.

3. Disminuir Tk i repetir 2 fins que Tk< Tmin

Cal ajustar els paràmetres Nk, To, Tmin, la forma de disminuir Tk, etc. Segons la funció de cost i els resultats que s'obtinguin, tant en temps com en qualitat, en cada execució.

## Aplicació específica per la reconstrucció de grafs amb Simulated Annealing

El que ens cal e s veure com podem adaptar al problema que volem resoldre a aquesta descripcio general del proce s d'optimitzacio per recuita simulada. Per aixo hem de veure quina analogia podem fer dels conceptes que s'utilitzen en aquest proce s, que s'inspira en un proce s metal·lu rgic, amb les caracteri stiques del proce s de reconstruccio dels grafs que e s el que ens interessa. A continuacio enumerem i descrivim tots i cadascun dels elements clau de la recuita i el relacionem amb el seu equivalent en el context de la reconstruccio de grafs.

- Generar aleatoriament una solució inicial: En el cas del SA, la Temperatura inicial ha de ser lo bastant alta per acceptar al principi qualsevol canvi. D'aquesta manera l'aletorietat del resultat pot ser alta, i evitar els mínims locals.
- 2. Número d'iteracions: Quants intents farem per aconseguir un resultat millor amb una temperatura donada. Aquest paràmetre si és molt alt pot fer que l'algorisme trigui molt, si és molt baix que els resultats no siguin òptims encara que trigarà menys.
- 3. La temperatura final: La temperatura va disminuint cada N iteracions, arriba un moment que és dificil superar el resultat actual i la probabilitat d'acceptar resultats no tan bons també. Per tant és posa un límit al nombre d'iteracions amb aquest valor



## **Threshold Acceptance (TA)**

## Origen de l'algorisme Threshold Acceptance

Threshold acceptance proposa un algoritme que te moltes de les característiques del simulatead annealing però on la regla de modificació es deterministica. Els resultats en comparació els dos algoritmes indiquen que la estocasticitat dels criteris d'acceptació en el simulateda annealing algorithm no juga un rol important en la búsqueda del "near-optimal minima".

Desde que el **simulated annealing** va ser proposat en 1983 per Kirpattrick, ha estat un del més populars algorismes heurístics per trobar solucions near-optimal per problemes d'optimització combinatoria. Kirpattrick el van aplicar a un layout VLSI i la partició de grafs. L'algorisme normalment es veu atrapat en un mínim local de la funció de cost. Per escapar d'aquest minim local, Kirkpatric, van utilitzar un criteri d'acceptació estocàstic, que pot acceptar un nova configuració de cost major que la pervia, es a dir accepta un resultat pitjor que l'anterior. La probabilitat de acceptar una nova configuració és:

P(S) = exp(-Delta E/T) .
Si DeltaE>0 la probabilitat es 1.

## Els criteris d'acceptació passen de ser estocàstics a deterministes

Per tal de presentar amb enfasis el suport a la idea que la estocacitat de la regla de modificació no és essencial per al bon rendiment del simulated annealing, es proposa una regla determinística, la qual accepta modificacions quan la T és alta, i es reduiexi iterativament a T=0.

P(S)=0, si Delta E > T

és igual a 1 per qualsevol altre.

D'aquesta manera el valor de T és el que determina la accptació de la modificació, la T esdevé un llindar un "threshold".

Aquest llindar, aquesta tolerància predefinida va disminuint a mesura que el nombre d'iteracions augmenta. Això vol dir que al principi de les iteracions del



algorisme estem més disposats a acceptar resultats no tan bons. A mesura que van passant les iteracions ens fem més restrictius.

### Beneficis del threshold

El càlcul d'acceptació del TA és més ràpid que el del SA perque no necessita la generació de nombre aleatoris i perque la evaluació de l'exponencial en la equació, encara que el guany en velocitat és considerablement reduit en aquests problemes on el càlcul del cambi d' energia és el que consumeix més temps.



## Descripció general i pseudocodi de l'algorisme Threshold Acceptance

En aquesta taula és veuen els dos algorismes un al costat de l'altre on es pot veure que la diferència és mínima.

```
SA ALGORITHM FOR MAXIMIZATION.
                                                                             TA ALGORITHM FOR MAXIMIZATION
choose an initial configuration
                                                                            choose an initial configuration
choose an initial temperature T > 0
                                                                             choose an initial THRESHOLD T > 0
Opt: choose a new configuration which is a stochastic small
                                                                             Opt: choose a new configuration which is a stochastic small
  perturbation of the old configuration
                                                                               perturbation of the old configuration
  compute \Delta E := \text{quality(new configuration)-quality(old configuration)}
                                                                              compute \Delta E := quality(new configuration)-quality(old configuration) IF \Delta E > -T
    THEN old configuration := new configuration
                                                                                 THEN old configuration := new configuration
    ELSE with probability \exp(\delta E/T)
                                                                               IF a long time no increase in quality or too many iterations
              old configuration := new configuration
                                                                                 THEN lower THRESHOLD T
  IF a long time no increase in quality or too many iterations
                                                                              IF some time no change in quality anymore THEN stop
    THEN lower temperature T
  IF some time no change in quality anymore
                                                                             GOTO Opt
    THEN stop
GOTO Opt
  Simulatead Annealing Algorithm
                                                                               Threshold Acceptance Algorithm
```

## Paràmetres de l'algorisme TA

Durant el treball s'han realitzat diferentes proves amb diferents paràmetres del algorisme. Que no expliquem en la memòria.

**Llindar d'acceptació:** És el valor que s'utilitza per saber que s'acceptarà un resultat pitjor que l'anterior. Aquest paràmetre normalment és un percentatge. El llindar cada N iteracions, disminueix de valor.

**Nombre d'Iteracions:** Es el nombre d'intents per millorar el resultat actual abans de baixar el llindar. És un dels paràmeres més crítics. Si és molt baix l'algorisme és més ràpid pero fa pocs intents. Si el nombre és molt alt, el temps e execució s'allarga. Sovint l'algorisme quan el llindar és molt baix, la probabilitat de millora és baixa si aquest paràmetre és alt podem estar malgastant el temps.

Una millora de l'algorisme és contar el nombre d'iteracions en el qual no s'obte millores i posar-hi un màxim.

**Velocitat de refredament**: En cada interació el llindar és va disminuint per un factor. Tk. Aquest valor normalment té els valors, 0.98, 0.95, o 0.90. Es a dir cada vegada que decidim baixar el llindar ho fem en un 2%, un 5% o un 10%.



Per més informació sobre la relació entre el Simulatead Annealing i el Threshold llegir interessant article "Threshold Accepting: A general purpose optimization algorithms appearing superior to Simulated Annealing" de Gunter Dueck, Tobias Scheuer.



## 6. La implementació

## Els principis bàsics

En aquesta secció explicarem els principis que s'han utilitzat per fer el disseny del software:

- **Tests unitaris**: S'han creat tests unitaris del software que testegen el comportament del propi programa que fa els càlculs. Explico breument que són els tests unitaris, per que serveixen i quines llibreries s'han utilitzat i introdueixo el concepte de coverage.
- A



#### **Tests Unitaris**

En programació una prova unitària és una forma de comprovar el correcte funcionament d'un módul de códi. Això serviex per assegurar que cadascun del móduls funcionen correctament per separat. Després amb les proves d'integració, es poden asegurar el correcte funcionament del sistema o subsistema.

La idea és escriure casos de prova per cada funció no trivial o métode en el módul, de forma que cada cas sigui independent de la resta.

#### **Beneficis dels Tests Unitaris**

L'ojbectiu del unit testing es aillar cada part del programa i mostrar quines de les parts individuals són correctes. Un test unitar proporciona un escricte, contracte que cada fragment de codi ha de satisfer. Com a resultat, proporciona diversos beneficis.

#### Busca problemes ràpidament

Els test unitaris busquen problemes ràpidament en el cicle de desenvolupament. Això inclou bugs en la implementació del programador i errors i parts de la especificació per al fragment de codi. El proces d'escriure un conjunt de tests força al programador a pensar entrades, sortides i condicions d'errors i aquells tests més detallats defineixen el comportament desitjat. El cost de buscar un bug abans que la programació comenci o quan el codi acaba de ser escrit és considerablament més baix que el cost de detectar-ho, identificar-ho i corregir el bug més tard. Els bugs també poden causar problemes per els usuaris finals del software. El codi que es imposible o difícil de testejar la seva qualitat és baixa, el test unitaris poden forçar als desenvolupadors a estructurar les funcions i els objectes de manera millor.

En les técniques més extremes de unit testing, el Test Driven development (TDD), que s'utilitza en extreme programming i scrum, els tests unitares es creen abans del propi codi. Si passen els tests es consideren que el codi està complert. Els tests unitaris s'executen frequentment, si els tests unitaris fallenalerten el equip de desenvolupadors del problema abans de passar el codi al l'equip de test o als propis clients.

#### Facilita el canvi

Els tests unitaris permeten al programador refactoritzar el codi o actualitzar les llibrerias posteriorment, i assegurar que el módul continua funcionant correctament (regression testing). El procediment és esciure casos de test per totes les funcions i métodes aixi que qualsevol canvi que causi un error, es pugui identificar ràpidament.



Els test unitaris detecten canvis que pot trencar el contracte de disseny.

### Simplifica la integració

Els tests unitaris poden ser utilitzats en una aproximació de baix cap a dalt en el estil de test. Testejant les parts del programa primer i després testejar la suma de totes les parts, els test de integració esdevenen molt fàcil.

#### Documentació

Els tests unitaris proporcionen documentació sobre el sistema. Els desenvolupadors que busquin queina és la funcionalitat que proporciona un módul, i com utilitzar-la, poden mirar els tests unitaris per obtenir un coneixement bàsic de la interfície del módul.

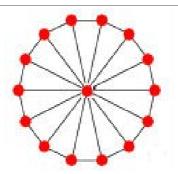
Els tests unitaris incorporen característiques que son crítiques per al funcionament dels tests. Aquestes característiques iniquen apropiats/inapropiats ús dels móduls, així com a comportaments negatius que son tractats pel módul. Un cas de test unitiri, per si mateix, documenta aquestes característiques critiques.

#### Disseny

Quan el software és desenvolupat utilitzant test-driven development, la comuinacació de escriure test unitaris per especificar la interficie a més de les activitats de refactorització realitzades després que els test passin, donen lloc de un disseny formal. Cada test unitari pot ser vist com un element de disseny especificant classes, métode i el comportament observat.

A continuació mostro un fragment de codi dels tests unitaris del projecte. En aquest test unitari s'esta testejant la rutina vertexAreNeigbours. Aquesta rutina retorna VERTEX\_CONNECTED si els dos vertexs estan conectats i VERTEX DISCONNECTED si no ho estan. El graf wheel14 és el següent.





Wheel 14 graph utilitzat en un dels test unitaris, el node 0, es conecta a la resta.

```
void UTest_gslGraph_vertexAreNeighbours(){
    gslGraph * wheel14Graph = ReadPythonGraphFile::readPythonGraphFile(DIR_GRAPHS "wheel14.txt");
    int numberOfVertexForWheel14Graph = 14;

for ( int i = 1; i < numberOfVertexForWheel14Graph; i++ ){
    BOOST_CHECK( wheel14Graph->vertexAreNeighbours(0,i) == gslGraph::VERTEX_CONNCTED);
    BOOST_CHECK( wheel14Graph->vertexAreNeighbours(i,0) == gslGraph::VERTEX_CONNCTED);
}

BOOST_CHECK( wheel14Graph->vertexAreNeighbours(2,4) == gslGraph::VERTEX_DISCONNECTED);
delete wheel14Graph;
}
```

Exemple de test unitari per la rutina vertexAreNeighbours, per el graf tipo roda.

#### Frameworks de tests automatitzats de C++

Hi han diversos frameworks per realitzar tests unitaris en C++, més de 30. En destaquem dos que son els que s'han utilitzat al projecte:

 La llibreria Boost test library. Boost és una llibreria de c++ que et dona moltes funcionalitats extres. En el projecte s'utilitza per parsejar els paràmetres d'entrada i per fer tests unitaris.



 Google test, que juntament amb la llibreria Google C++ Mocking Framework de google, te moltes funcionalitats com mock.

A continuació és mostra la sortida d'un test suite del google test framework del projecte. En aquest cas s 'esta testejant la utilitat analitza:

```
DYLD_LIBRARY_PATH=../gtest/libs/ ./utestanalitza_main
[======] Running 6 tests from 3 test cases.
[-----] Global test environment set-up.
[-----] 3 tests from Llegir_dadaes
OK ] Llegir_dadaes.if_file_do_not_exists_should_return_error (0 ms)
[ RUN ] Llegir_dadaes.if_file_exist_should_return_ok
    OK ] Llegir_dadaes.if_file_exist_should_return_ok (1 ms)
[ RUN ] Llegir_dadaes.circ_graph_should_return_specificvalues
       OK ] Llegir_dadaes.circ_graph_should_return_specificvalues (1 ms)
[-----] 3 tests from Llegir_dadaes (2 ms total)
[-----] 2 tests from clustering
[ RUN ] clustering.circ_graph_should_return_specificvalues
      OK ] clustering.circ_graph_should_return_specificvalues (0 ms)
[ RUN ] clustering.rand_graph_should_return_specificvalues
   OK ] clustering.rand_graph_should_return_specificvalues (1 ms)
[-----] 2 tests from clustering (1 ms total)
[----] 1 test from distances
         ] distances.circ_graph_should_return_specificvalues

    RUN

        Clustering 0.594762
        Diametre 5
        Distancia mitja 0.255128
       OK ] distances.circ_graph_should_return_specificvalues (0 ms)
[-----] 1 test from distances (0 ms total)
[-----] Global test environment tear-down
[======] 6 tests from 3 test cases ran. (3 ms total)
[ PASSED ] 6 tests.
  Output dels tests uniaris de la utilitat analitza
```

Es pot veure com hi han 6 tests, agrupats en 3 test cases.

Els 3 test cases són:

Llegir dades, relacionatsa amb llegir un graf desde un fitxer amb tres tests:



## [Reconstrucció de xarxes a aprtir de la Communicability Centrality dels nodes]67

- Si el fitxer no existeix la rutina retorna un error.
- Si el fitxer existiex la rutina retorna ok
- o Si el fiter existeix es comproven que els valors del graf siguin correctes.
- El segon test case és relacionat amb el clustering
- El tercer test case és relacionat amb les distances.

Visualment mostra força informació:

- Quins test cases hi han
- Quants tests hi han per test case
- Quins tests han passat i quins tests han fallat.



## Representació matricial de la classe Graf

El nucli bàsic del programa és la classe graf. Aquesta classe graf representa una xarxa.

Els grafs de N vèrtex es poden representar amb una matriu M de NxN elements.

Si un vèrtex v està connectat amb un vèrtex u aleshores M[u,v]=1 i M[v,u]=1, per grafs no dirigits que són els que parlem sempre en aquest treball.

Existeix una llibrearia GNU gsl que s'ha utilitzat per fer operacions en matrius. Aquesta llibreria permet multiplicar matrius i calcular la matriu exponencial. Aquestes dos operacions són molt imortants a l'hora de calcular la CC i la CBC.

Per aquesta raó en la implementació de la matriu de la classe graf està implementada amb una matriu GNU gsl.

## Programes utilitzats per fer el projecte

- Git: És un repositori de codi font. En concret he utilitzat un que permet emmagazemar el codi de manera privada. Bitbucket.
- Vagrand: Eina que serveix per veure si el programa té memory leaks.
- gprof: Serveix per visualitzar el performance de la aplicació.



# Posibles millores en la simulació i obtenció de resultats

Després de realitzar el projecte, es podrien tenir en compte aquestes millores en la implementació del software.

## Paralelització i cloud Computing

Una de les posibles millores seria que aquest algorisme es pogues exectuar en varies instàncies del amazon web service de manera paral.lela.

#### Utilització de varis Indicadors simultàneament

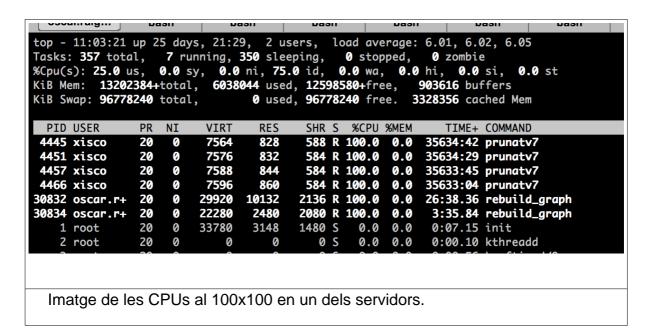
Per tal de reconstruïr un graf en comptes de utilitzar un paràmetre es podria utilitzar una funció de cost multivariable amb dos d'ells. Podria donar lloc a un graf més semblant a l'original.

## Altres algoritmes alternatius al Simulated Annealing i al Threshold acceptance

Utilitzar algun altre algorisme, no tan genèrics com son Simulated o el Threshold i buscar un que fos més específic del problema de xarxes i que se li treiés més suc als paràmetres BC,CC,CBC amb que es traballen. Es podria combinar amb una tècnica d'algorisme voraç.



## 7. Els Resultats



Les simulacions s'han executat en 3 ordinadors diferents.

- Un Servidor de la UPC Linux Ubuntu de 24 cores 125 Gb de memòria RAM
- Un ios de la UPC amb 8 cores 32 Gb memòria RAM.
- Un portàtil personal ios amb 4 cores. 16Gb memòria RAM.

A continuació es mostren els resultats obtinguts per diferents simulacions.

El procediment per totes elles és idèntic.

Es generen N simulacions per cada graf d'exemple. Els grafs d'exemple són 5:

- Graf aleatori
- Graf amb clusters
- Graf petit-món
- Graf amb invariàcia d'escala
- Graf circulant



## Paràmetres dels algorismes

Els paràmetres que s'han utilitzat per executar els algorismes SA i TA són:

Temperatura Inicial:1.0

Temperatura final: 0.000001

Tasa de refredament: 0.9

Número de passos per iteració:2000

## Paràmetres obtinguts com a resultat de les simulacions

Per cada conjunt de simulacions, es realitzen unes mitjes d'algunes mesures dels grafs resultants. Les mesures són:

**Diàmetre**: Mitja del diàmetres del grafs reconstruït. Al costat de la taula pots veure el diàmetre del graf original. Per exemple. aleatori original 6, aleatori Reconstruït amb CC i TA 5.075.

**Distància mitja:** Mitja de les distàncies dels grafs reconstrït. Per exemple. aleatori Original 2.89, aleatori reconstruït CC i TA, 2.65.

**Degrees o Graus**: Valors Mínim del grau per tots els vèrtexs, la mitja i el valor màxim de Grau. Per exemple, aleatori original 1, 3.8 i 8, i per aleatori Reconstrït CC i TA 1, 3.94 i 12.

**Clustering**: El valor de clustering per el graf original i la mitja del clustering per tots els grafs reconstuïts.

**Comm. Centr.**: El valor del paràmetre rellevant que estem analitzant. Que pot ser La Communicability Centrality, la Communicability Betweenness Centrality o la Betweenness Centrality.

**Delta**: Es un valor que indica la similitud o com d'isomorf son els dos grafs, el que volem reconstruir i el graf original.



# Communicability Centrality amb Threshold Acceptance

Les simulacions amb el Communicabiliy Centrality suposen la aportació més important del projecte.

També la utilització del Threshold Acceptance com algorisme de reconstrucció de grafs.

La communicability Centrality és ràpida de calcular en comparació al CBC, que es més costosa. És calcula a partir de la matriu exponencial, de la matriu d'adjacència que representa la xarxa.

S'han realitzat unes 200 simulacions diferents, cadascuna generada amb llavors diferents per generar nombres aleatoris diferents a cada simulació.

Els resultats són els següents:

CC. N=200. It	eracions=2000,	Random			Circulant		Small World		Scale	Free	Clustered	
	0,To=1.0, Tmin=0.00001 Ref. Recons		Recons	Ref.	Recons			Ref.	Recons	Ref.	Recons	
Execucions				200		200		200		200		3
Diamater			6	5.075	10	4.115	6	4.545	4	3.975	5	3.354
Avarage Dist			2.89	2.65	5.38	2.46129	3.31	2.54639	2.32	2.205	2.65	2.0
-	min.		1	1	4	3	3	2	1	1	2	
Degrees	avg.		3.8	3.94575	4	4.7265	4	4.429	4.95	5.1485	6.3	6.6752
	max.		8	12	4	6	5	8	17	21	13	
Clustering			0.2	0.102	0.5	0.0796417	0.32	0.0783089	0.26	0.244784	0.37	0.32873
Comm. Centr	avg.	-	6.564	6.69521	7.458	7.342	6.709	6.66323	24.244	25.72	144.619	163.62
delta	avg.			0.023218		0.0492574		0.0280698		0.025497		0.05984

Resultats del Threshold Acceptance amb Communicability Centrality

En primer lloc podem dir que l'algorisme Threshold Acceptance funciona força bé.

Com a entrada li donem una xarxa, per exemple la xarxa amb invariàcia d'escala amb una CC de 24.44 i ens retorna una xarxa reconstruïda amb un paràmetre molt semblant 25.72.

Per saber si el paràmetre Communicability Centrality és un paràmetre rellevant hem de mirar la delta que indica l'isomorfisme dels grafs.

En aquest cas les xarxes que ha reconstruït millor són el aleatori i la xarxa amb invariàcia d'escala.



Els grafs que han reconstruït pitjor són la xarxa amb agrupament i el circulant.



# Communicability Centrality amb Simulatead Annealing

Aquestes simulacions tenen molt poques simulacions tants sols 10 llavors. Serveixen a mode orientatiu, per validar els números d'altres simulacions.

	Random		Circulant		Small	World	Scale	Free	Clustered		
		Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons
Execucions			10		10		10		10		10
Diamater		6	5.1	10	4	6	4.5	4	4	5	3.4
Avarage Dist		2.89	2.6641	5.38	2.44538	3.31	2.56679	2.32	2.19692	2.65	2.01436
	min.	1	1	4	4	3	2	1	1	2	2
Degrees	avg.	3.8	3.915	4	4.745	4	4.4	4	5.08	6.3	6.685
	max.	8	11	4	6	5	7	17	21	13	19
Clustering		0.2	0.137416	0.5	0.096	0.32	0.0905119	0.26	0.264205	0.37	0.324739
Comm. Centr	avg.	6.564	6.66531	7.458	7.41109	6.709	6.63693	24.244	25.6669	144.619	163.294
delta	avg.		0.0214472		0.0515977		0.0271608		0.0309376		0.0579789

Observem que els número són bastants semblants als de la simulació anterior, podriem dir que realment la incidència en els resultats no depenen del tipus d'algorisme utilitzat, es a dir si utilitzem SA o TA.



# **Communicability Betweenness Centrality amb Threshold Acceptance**

La Communicability Betweenness Centrality és molt costosa de calcular que la CC o la BC.

El cost del algorisme és proporcional al nombre de nodes de la xarxa. Això vol dir que aproximadament triguem unes 40 vegades més que la CC.

Això dificulta les simulacions, i generar una gran base de resultats.

CBC,1000 reconstrctions Random		Circ	ulant	Small	World	Scale	Free	Clustered			
R		Ref.	Recons	Ref. Recons		Ref.	Recons		Recons	Ref.	Recons
Execucions			101		101		101		101		101
Diamater		6	5.14851	10	3	6	4.01	4	4.62626	5	4.23762
Avarage Dist		2.89	2.58788	5.38	1.89752	3.31	2.33	2.32	2.37602	2.65	2.14372
	min.	1	1	4	6	3	2	1	1	2	1
Degrees	avg.	3.8	4.3178	4	8.22216	4	5.18	4	4.73636	6.3	6.46931
	max.	8	12	4	10	5	8	17	19	13	16
Clustering		0.2	0.1027	0.5	0.171352	0.32	0.0982679	0.26	0.212506	0.37	0.19063
Com. Betw Centr	avg.	0.0894399926	0.0928439	0.152059922	0.154439	0.093424735	0.0951614	0.113	0.112127	0.14089	0.138573
delta	avg.		0.0283287		0.153646		0.0523173		0.0243007		0.0552344

Els resultats veiem que el CBC, és el que reproduiex millor el scale free, amb un 0.024 de delta, el aleatori també el reprodueix força bé. En canvi el Circulant, el petit-món i el Clustered els reprodueix força malament. Té el millor resultat en les xarxes amb invariància d'escala i el pitjor en Circulant.



# Betweenness Centrality amb Simulatead Annealing

La BC, és un indicador fàcil de calcular, l'ordre de càclcul és semblant al del CC.

Hem fet 10 llavors.

Els resultats serveixen per comparar els resultats amb anteriors treballs i assegurar-nos que el Simulated Annealing com la resta de funcionalitats del programa són correctes.

		Random		Circulant		Sm	all World	Scale	Free	Clustered	
ļ		Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons	Ref.	Recons
Execucions			10		10		10		10		10
Diamater		6	5.6	10	8.8	6	6.6	4	4.4	5	5.5
Avarage Dist		2.89	2.78615	5.38	4.75821	3.31	3.015	2.32	2.34846	2.65	2.59808
	min.	1	1	4	2	3	1	1	1	2	1
Degrees	avg.	3.8	3.96	4	2.58	4	3.75	4	5.075	6.3	4.375
	max.	8	12	4	5	5	9	17	21	13	13
Clustering		0.2	0.100475	0.5	0.0313333	0.32	0.0714147	0.26	0.217116	0.37	0.126449
Betweeness Cen	avg.	0.0498	0.047004	0.115384	0.0989001	0.06076	0.0530263	0.03461	0.0354858	0.043319	0.0420547
delta	avg.		0.0264763		0.0740158		0.0322809		0.0237428		0.0849496



## 8 Conclusions

## Reconstrucció de grafs

No hem conseguit reconstruïr el graf original al 100x100, però si que s'assemblen bastant a l'original en alguns casos, sobretot en xarxa aleatòria, la xarxa amb invariància d'escala i el petit-món.

Els pitjors casos són el circulant o regular i el graf clúster.

Crec que els dos algorsmes amb aquestes mesures generen sempre una topoligia de graf que estaria a la mateixa distància isomòrfica de les xarxes aleatòries, petit-món i xarxes amb invariància d'escala i que en funcio de la CC/BC/CBC amb que estem comparant és belluga cap al graf original però no suficient.

## Simulated Annealing vs Threshold Acceptance

Els dos algorismes el Simulated Aleanning i el Threshold Acceptance reprodueixen grafs amb la mesura que utilitzaven. Es a dir si tu vols obtenir un graf amb una determinada BC, CC o CBC, els algorimes et generen aquest graf.

Crec que la **diferència entre un algorisme** i l'altre (entre SA i TA) **no és significativa**. Potser el Simulated Annealing funciona una mica millor en algún cas (SA amb CC graf aleatori 0.21), però el número de simulacions he realitzat amb SA no és concloent.

## CBC, CC i BC

De les tres mesures estudiades, la rellevància que tenen, també és molt semblant. El que si sembla que el CC s'aproxima molt més al grafs circulant i la xarxa amb agrupament que el BC. El BC amb el graf circulant és el que s'apropa més al diàmetre.

El CBC obté els millors resultats amb xarxes amb invariància d'escala i els pitjors amb circulant.

El CC és més regular amb tots els tipus de graf.



### **Millores**

Una posible millora seria que al modificar el graf, en comptes de fer-ho sobre un vèrtex aleatori ho fes sobre el conjunt de vèrtex que tenen pitjor semblança amb el paràmetre BC, CC, CBC del orginal. S'hauria de testejar. Seria utilitzar una barreja entre SA-TA i un algorsme de tipo greedy.



## 9. Apèndix



## 10. Referències

## **Bibliografia**

#### Teoria de Grafs

Matemáticas discreta y combinatoria, Ralph P.Grimaldi, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana

Matemática discreta, Francesc Comellas, Josep Fábrega, Anna Sanchez, Oriol Sera Ed. Edicions UPC

The Structure of complex Networks, Ernesto Estrada, Oxford Press, 2011

Chapter 6: Communicability functions in Networks

The communicability betweenness in complex networks. Ernesto Estrada, Physica A,388 (2009) 764-774

Complex Networks, Structure, Robustness and Function. Shlomo Havlin, Reuven Cohen. Cambridge.

#### **Tipus de Xarxes**

[Newman] The structure and function of complex networks. Newman.

[Watts, Strogatz] Collective dynamics of "small-world" networks, Nature 393, 440-442.

#### Isomorfismes:

https://es.wikipedia.org/wiki/Isomorfismo\_de\_grafos

## **Algorismes**

Stochastic versus deterministic Update in Simulated Annealing, Pablo Moscato, J.F.Fontanari, 1990, physics Letters A, Volume 146, number 4.

Threshold Accepting: A general Purpose Optimization Algorithm Appearing Superior to Simulated Annealing, Gunter Dueck, Tobias Scheuer, Jornal of Computtional Physcs,90,161-175, 1990.

## **Design Patterns**

Head First Design Patterns, Eric Freeman, Elisabeth Robson, Bert Bates, Kathy



Sierra. 2004

## Altres treballs referants a la reconstruccions de grafs

Reconstrucció Espectral de Grafs, Jordi Díaz Lopez, PFC 2005

Reconstruccio de grafs a partir del grau d'intermediacio (betweenness) dels seus ve rtexs, Juan Paz Shanchez

#### Links d'interés

- Big data i teoria de grafs
  - Graph Theory: Key to Understanding Big Data
    - http://www.wired.com/insights/2014/05/graph-theory-keyunderstanding-big-data-2/
  - Grafs aleatoris
    - https://en.wikipedia.org/wiki/Erd%C5%91s%E2%80%93R %C3%A9nyi\_model
  - Llibreria de Python amb funcions per grafs.
    - https://networkx.github.io/
  - Ernesto Estrada, introductor de la communicability
    - https://en.wikipedia.org/wiki/Ernesto\_Estrada

