Relatório Final de Iniciação Científica

Algoritmos, Experimentação e Teoria em Otimização Combinatória

Aluna: Juliana Barby Simão
Orientador: José Coelho de Pina

Período: abril a dezembro de 2004
Processo n. 04/00580-8

Resumo

Este é o relatório final do projeto de iniciação científica *Algoritmos, Experimentação e Teoria em Otimização Combinatória*. O projeto visou ao estudo de técnicas recorrentes em otimização combinatória, através da análise, implementação e testes experimentais de algoritmos e do estudo de teoria. A iniciação foi desenvolvida em conjunto com o colega Marcelo Hashimoto (04/0581-4).

Após uma introdução sobre algumas motivações, o documento apresenta um resumo dos objetivos iniciais e da metodologia utilizada, seguido pela descrição das atividades realizadas. Por fim, nossos resultados são apresentados.

Seguem anexados os documentos que produzimos durante o ano. O sítio do projeto pode ser localizado em `http://www.ime.usp.br/~coelho/oticomb/`.

1 Introdução

Otimização combinatória é um campo da matemática aplicada que se baseia no uso conjunto de técnicas de combinatória, programação matemática e teoria de desenvolvimento de algoritmos para resolver problemas de otimização formulados sobre estruturas discretas. Uma característica comum dos problemas de otimização combinatória é o fato de que o conjunto de soluções viáveis, embora seja finito, pode ser muito grande. Isso inviabiliza estratégias de força bruta, como testar todos os valores de solução possíveis, e torna necessário o desenvolvimento de métodos eficientes.

Problemas de otimização combinatória têm sido um tópico central para a evolução de algoritmos e da teoria de *complexidade computacional*. Pesquisadores têm apresentado muitas idéias criativas para o projeto de algoritmos eficientes, baseados em conceitos e resultados na área. A sub-área conhecida como *combinatória poliédrica*, por exemplo, apresenta técnicas desenvolvidas a partir de conceitos de *programação linear*, como o *método primal-dual*, e que têm se mostrado muito úteis no projeto e análise de uma variedade de algoritmos para problemas em outros domínios. Muitas

das idéias inovadoras têm se baseado em um conjunto não muito grande de princípios comuns, como *scaling*, que são simultaneamente muito simples e muito poderosos.

Nem sempre, porém, é suficiente restringir a pesquisa de um problema ao estudo teórico de seus aspectos e ao desenvolvimento abstrato de algoritmos que o resolvem. Em diversos casos, existem fatores fundamentais que só podem ser resolvidos, ou mesmo descobertos, durante a implementação propriamente dita. Não é incomum que a obtenção de uma eficiência próxima àquela calculada na teoria, ou mesmo o próprio funcionamento de um algoritmo, dependa do uso de estruturas de dados sofisticadas e técnicas de programação que não são exatamente triviais.

Ademais, a complexidade de um algoritmo na teoria é muitas vezes insuficiente para classificá-lo na prática: não são incomuns algoritmos teoricamente eficientes mas lentos na prática, e algoritmos cuja análise não representa seu comportamento no caso médio. Diante dessa possibilidade, testes e experimentações são ferramentas poderosas e úteis, e que enfatizam ainda mais a importância da implementação.

2 Objetivos e metodologia

Neste projeto de iniciação científica, nós estudamos algumas das ferramentas mais fundamentais em otimização combinatória através do estudo, implementação e análise experimental de algoritmos para problemas clássicos envolvendo *fluxos em redes*. Um dos seus objetivos foi a nossa preparação para uma pós-graduação na área.

A principal fonte dos algoritmos incluídos no estudo, e também a principal base teórica, foi o livro *Network Flows* de Ahuja, Magnanti e Orlin [1]. Também utilizamos bastante a teoria do *Combinatorial Optimization* de Cook, Cunningham, Pulleyblank e Schrijver [5]. Diversas outras referências foram consultadas quando necessário.

Como corolário de nosso estudo, produzimos um texto científico contendo a descrição de grande parte da teoria envolvida nos problemas e em cada um dos algoritmos estudados. A linguagem algoritmica utilizada segue os padrões das notas de aula de Paulo Feofiloff [9], que nos permitiram destacar de maneira simples a razão pela qual os algoritmos funcionam. Cabe ressaltar que o texto produzido não é uma mera reprodução ou resumo do conteúdo das nossas referências, mas um texto independente e auto-contido que freqüentemente diverge delas em termos de notação, rigidez e até mesmo em aspectos como demonstrações de teoremas.

Outro produto da nossa iniciação foi uma biblioteca de implementações dos algoritmos estudados, que nos permitiu realizar um estudo comparativo de desempenho experimental. Um documento contendo todos os detalhes desse estudo comparativo também foi produzido. Uma de nossas intenções com o projeto era disponibilizar todas as implementações em um sítio da Internet nos moldes da *Network Optimization Library* de Andrew Goldberg [12]. Por isso, para que as implementações pudessem ser facilmente compreendidas e utilizadas por outras pessoas, elas foram feitas na

linguagem `CWEB` [19] de *programação literária* [17] e utilizaram a plataforma combinatória `SGB` [18], desenvolvida por Donald E. Knuth.

3 Atividades realizadas

Inicialmente, estudamos alguns tópicos de otimização combinatória através dos livros de Cook et al. [5], Schrijver [22] e Cormen et al. [6] para nos familiarizar um pouco mais com a teoria envolvida nos problemas. Em particular, fizemos uma pequena revisão de programação linear, estudamos o *problema dos caminhos mínimos* sob o ponto de vista da combinatória poliédrica e discutimos algumas questões sobre *unimodularidade total*. Partimos, então, para o *problema do fluxo máximo* e, a partir desse ponto, a base teórica de nossos estudos foi quase puramente o livro de Ahuja, Magnanti e Orlin [1], como previsto no planejamento inicial.

Antes de nos dedicarmos a fundo ao estudo teórico do problema, trabalhamos em cima de uma implementação em `C` para um algoritmo que o resolve, proposto por Ford e Fulkerson [10]. O algoritmo, conhecido como *método dos caminhos de aumento*, havia sido implementado para a disciplina MAC0328 - Algoritmos em Grafos. A implementação utilizava a plataforma `SGB` e aplicava ao método uma especialização proposta por Edmonds e Karp [8], a qual resultou no algoritmo conhecido como *algoritmo dos caminhos de aumento de comprimento mínimo*. Revisamos nossas implementações e realizamos experimentos com algumas instâncias específicas.

Partindo de minha implementação revisada, desenvolvi uma implementação para uma versão alternativa do método dos caminhos de aumento, conhecida como *algoritmo dos fluxos bloqueadores de aumento*, proposta por Dinits [7]. Enquanto isso, o Marcelo modificou sua versão da implementação e desenvolveu implementações para o *algoritmo dos caminhos de maior aumento*, também idealizado por Edmonds e Karp [8], e para o *algoritmo capacity scaling*, desenvolvido por Ahuja e Orlin [3].

Realizamos pequenos testes experimentais com as implementações que fizemos para verificar e comparar seus desempenhos. Os testes iniciais foram feitos sobre instâncias básicas do problema. Para a maioria dos experimentos, porém, utilizamos um gerador de instâncias desenvolvido por Cherkassky e Goldberg [12], capaz de gerar entradas grandes e reconhecidamente difíceis para os algoritmos implementados.

Após a execução e análise dos testes mencionados, começamos a estudar mais a fundo os conceitos abordados em nosso livro-texto e a discutir algumas dúvidas teóricas entre nós e com o orientador. As principais discussões foram em torno da análise da complexidade dos algoritmos e da modelagem do problema sob o contexto de programação linear e *dualidade*. Estudamos um pouco da teoria envolvida no problema do fluxo máximo, particularmente o *teorema do fluxo máximo e corte mínimo*. Também discutimos alguns aspectos interessantes referentes à busca de fluxos em *grafos acíclicos*, como o funcionamento e análise do algoritmo de Karzanov [16].

A partir mais ou menos desse ponto, aproximadamente no final do primeiro período da iniciação, começamos a desenvolver o nosso texto teórico. Até então, havíamos escrito apenas alguns rascunhos iniciais com o objetivo de decidir qual seria a melhor notação e em que pontos deveríamos divergir de nossas referências. O desenvolvimento da versão definitiva se mostrou bem difícil e durante um longo período a iniciação resumiu-se ao estudo das referências e ao processo de incrementar e corrigir nosso texto teórico, sem dar muita ênfase na parte de implementação. Uma versão preliminar desse texto foi anexa ao relatório referente ao primeiro período.

Após formalizar os conceitos do método dos caminhos de aumento, iniciamos o estudo de um outro algoritmo para o problema do fluxo máximo, conhecido como *método do pré-fluxo*, desenvolvido por Goldberg e Tarjan [13]. Eu fiquei encarregada de estudar e implementar a versão do método conhecida como *algoritmo da fila de vértices ativos*, proposta por Schiloach e Vishkin [23], e o Marcelo se encarregou do *algoritmo dos vértices de maior rótulo*, idealizado pelos próprios Goldberg e Tarjan, e do *algoritmo excess scaling*, proposto por Ahuja e Orlin [2]. Algumas novas discussões teóricas interessantes foram levantadas durante esse período. Questionamos a razão do uso de algumas notações em nossas referências e conseguimos desenvolver algumas análises de complexidade ligeiramente diferentes e mais simples.

Com as implementações do método do pré-fluxo já encaminhadas, começamos a estudar o *problema do fluxo de custo mínimo*. Discutimos um pouco a respeito da equivalência das diferentes *condições de otimalidade* existentes e de como elas estão relacionadas com a modelagem em programação linear. Houve uma breve discussão sobre o *algoritmo out-of-kilter* e suas diferenças em relação a outros algoritmos.

Devido à limitação de tempo, não houve oportunidade de tantas discussões como no caso do problema do fluxo máximo. Logo partimos, de maneira um pouco apressada, para a formalização teórica dos conceitos e para as implementações. Eu me encarreguei do *método do cancelamento de circuitos*, proposto por Goldberg e Tarjan [14] e com implementação sugerida por Bellman [4] e Ford [11], e do algoritmo *cost scaling*, também proposto por Goldberg e Tarjan [15]. Enquanto isso, o Marcelo cuidou do *método dos caminhos de viabilidade*, proposto por Edmonds e Karp [8], e do algoritmo *path scaling*, idealizado por Orlin [20]. Um aspecto interessante dessas implementações foi o fato de elas envolverem a resolução de um problema de fluxo máximo como pré-processamento. Pudemos reutilizar nossas implementações anteriores. Além disso, elas foram desenvolvidas diretamente em `CWEB`.

Paralelamente às implementações dos algoritmos para o problema do fluxo de custo mínimo, estudamos o algoritmo *simplex para redes*. Tivemos algumas discussões relacionadas ao seu funcionamento e procuramos compreender como tal algoritmo está relacionado ao *método simplex* para a resolução de problemas de programação linear. Estudamos, por exemplo, como os custos reduzidos associados aos vértices de uma rede estão relacionados às variáveis duais da formulação do problema do fluxo de custo mínimo como um programa linear inteiro. Um aspecto interessante desse

estudo foi a oportunidade que tivemos para fazer uma revisão mais aprofundada da teoria envolvida no método simplex.

Como o simplex para redes é um algoritmo que resolve qualquer problema sobre fluxos em redes que possa ser modelado como um problema de fluxo de custo mínimo, procuramos também relacionar seu funcionamento ao funcionamento dos algoritmos polinomiais que estudamos para os problemas específicos.

Com as implementações dos algoritmos para o problema do fluxo máximo e para o problema do fluxo de custo mínimo realizadas, pudemos iniciar os testes experimentais. Além do gerador de instâncias de Goldberg, utilizamos um conjunto de instâncias disponível na página de Schmidt [21]. Após documentar os testes, nos dedicamos a melhorar e refinar todos os documentos e a organizar o sítio do projeto.

4 Resultados

Como resultados do projeto, produzimos uma série de documentos que estão anexados a este relatório e também podem ser encontrados em versão eletrônica no sítio do projeto, localizado em `http://www.ime.usp.br/~coelho/oticomb/`.

Além dos documentos principais já mencionados, como o texto científico, as implementações em `CWEB` e o relatório de análise experimental, estão anexados os documentos que foram feitos para a disciplina MAC0499 - Trabalho de Formatura Supervisionado. Nosso trabalho de formatura foi baseado neste projeto de iniciação científica e, em função disso, confeccionamos um pôster e slides para uma apresentação oral de nosso trabalho. Minha monografia entregue para a disciplina está localizada em `http://www.linux.ime.usp.br/~cef/mac499-04/monografias/juliana`.

Nosso cronograma de estudos para o segundo período do projeto foi cumprido com sucesso. Restaram apenas os tópicos adicionais, que haviam sido programados para estudo entre o final de dezembro e o início de janeiro, os quais não puderam ser adiantados em função da falta de tempo e das disciplinas cursadas durante o semestre.

Cabe ressaltar que alguns dos documentos entregues em anexo não estão em sua versão final. O texto teórico, por exemplo, ainda contém diversos trechos que precisam ser melhor escritos e desenvolvidos. Espera-se que até janeiro a versão definitiva de todos os documentos esteja disponível em nosso sítio, possivelmente incluindo também uma implementação em `CWEB` para o algoritmo simplex para redes.

Por fim, menciono que o trabalho realizado foi extremamente proveitoso e com ele atingi o objetivo de me aprofundar na área de otimização combinatória, na qual realizarei minha pós-graduação. Como próximos passos, pretendo iniciar o mestrado já no próximo ano e sob orientação do professor Coelho. Em particular, estudaremos aspectos de submodularidade em otimização combinatória.

Referências

[1] R.K. Ahuja, T.L. Magnanti, and J. Orlin, *Network flows: Theory, algorithms, and applications*, Practice Hall, 1993.

[2] R.K. Ahuja and J.B. Orlin, *A fast and simple algorithm for the maximum flow problem*, Operations Research (1989), no. 37, 748–759.

[3] ———, *Distance-directed augmenting path algorithms for maximum-flow and parametric maximum flow problems*, Naval Research Logistics Quarterly (1991), no. 38, 413–430.

[4] R. Bellman, *On a routing problem*, Quarterly of Applied Mathematics (1958), no. 16, 87–90.

[5] W.J. Cook, W.H. Cunningham, W.R. Pulleyblank, and A. Schrijver, *Combinatorial otimization*, Wiley-Interscience series in discrete mathematics and optimization, John Wiley & Son's, New York, 1998.

[6] T.H. Cormen, C.E. Leiserson, R.L. Rivest, and C. Stein, *Introduction to algorithms*, 2nd. ed., The MIT Press and McGraw-Hill, 2001.

[7] E.A. Dinits, *Algorithm for solution of a problem of maximum flow in a network with power estimation*, Sov. Math. Dokl. **11** (1970), no. 5, 1277–1280.

[8] J. Edmonds and R.M. Karp, *Theoretical improvements in algorithmic efficiency for network flow problems*, J. ACM **19** (1972), no. 2, 248–264.

[9] P. Feofiloff, *Notas de aula de MAC 5781 otimização combinatória*, `http://www.ime.usp.br/~pf/`, 2002.

[10] L.R. Ford and D.R. Fulkerson, *Maximal flow through a network*, CJM **8** (1956), 399–404.

[11] ———, *Flows in networks*, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1962.

[12] A.V. Goldberg, *Network otimization library*, `http://www.avglab.com/andrew/soft.html`.

[13] A.V. Goldberg and R.E. Tarjan, *A new approach to the maximum flow problem*, Journal of ACM (1988), no. 35, 921–940.

[14] ———, *Finding minimum-cost circulations by cancelling negative cycles*, Journal of ACM (1989), no. 36, 873–886.

[15] ———, *Solving minimum cost flow problem by successive approximation*, Mathematics of Operations Research (1990), no. 15, 430–466.

[16] A.V. Karzanov, *Determining the maximal flow in a network by the method of preflows*, Soviet Mathematics Doklady (1974), no. 15, 434–437.

[17] D.E. Knuth, *Literate programming*, Center for the study of Language and Information (CSLI), 1992.

[18] ———, *The stanford graphbase: A plataform for combinatorial computing*, ACM Press, 1993.

[19] D.E. Knuth and S. Levy, *The `CWEB` system of structured documentation*, Addison-Wesley, 1994.

[20] J.B. Orlin, *A faster strongly polynomial minimum cost flow algorithm*, Operations Research (1988).

[21] B. Schmidt, *Test problems for max flow, min cost flow, mst, shortest path, and edge connectivity*, `http://www.math.uni-augsburg.de/~schmidtb/bschmidt/OR_Testdata/ORTestdata.html`.

[22] A. Schrijver, *Combinatorial optimization: Polyhedra and efficiency*, Algorithms and Combinatorics, vol. 24, Springer, 2003.

[23] Y. Shiloach and U. Vishkin, *An $o(n^2 \log n)$ parallel max-flow algorithm*, Journal of Algorithms (1982), no. 3, 128–146.

Juliana Barby Simão
Aluna

José Coelho de Pina Jr.
Orientador