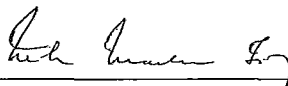


HEURÍSTICAS PARA O
PROBLEMA DE STEINER EUCLIDIANO
EM R^N

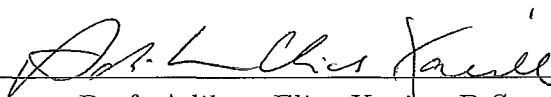
Flávio Marcelo Tavares Montenegro

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE SISTEMAS E COMPUTAÇÃO.


Aprovada por:



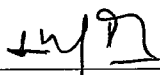
Prof. Nelson Maculan Filho, D.Sc.



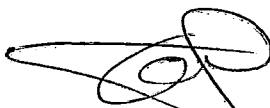
Prof. Adilson Elias Xavier, D.Sc.



Prof. José Ricardo de Almeida Torreão, Ph.D.



Prof. Luis Mauricio Graña Drummond, D.Sc.



Prof. Oscar Porto, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
SETEMBRO DE 2001

MONTENEGRO, FLÁVIO MARCELO TA-
VARES

Heurísticas para o Problema de Steiner Eu-
clidiano em R^n [Rio de Janeiro] 2001

X, 87 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc.,
Engenharia de Sistemas e Computação, 2001)

Tese - Universidade Federal do Rio de Ja-
neiro, COPPE

1. Otimização
2. Heurísticas e Metaheurísticas.
3. Problema de Steiner Euclidiano.

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedico meus esforços, empreendidos na realização desta tese, à memória de
minha querida avó

Severina Montenegro da Silva

Agradecimentos

Aos meus pais, por todo o esforço, carinho e apoio, no decorrer de toda a minha formação, fundamentais para que eu tivesse condições de me dedicar à carreira que escolhi. Aos meus demais parentes, pelo tanto que me ajudaram e torceram por mim.

A Elba, por seu afeto, compreensão e dedicação, e pelo seu esforço heróico por nosso querido filho João e por mim.

Ao João, por ter nascido e por toda a alegria e felicidade que trouxe.

Ao Professor Maculan, por sua orientação e pelo muito que ajudou a este seu aluno, que tanto trabalho lhe deu. Esta tese não poderia ter se consumado, não fosse a sua intervenção em momentos muito difíceis de meu doutorado. Ademais, o trabalho consigo foi um prazer e uma distinção para mim.

Aos membros de minha banca de tese, pelos comentários e sugestões, que melhoraram em muito a qualidade deste trabalho.

Ao Professor Rubem Mondaini, por sua importância fundamental em minha formação acadêmica e científica. Em especial, agradeço-o pelas extensas discussões e trabalhos desenvolvidos, relacionados ao problema de Steiner, que me ajudaram muito no estudo do assunto.

Aos colegas e professores com os quais tive o prazer de desenvolver uma colaboração, entre os quais destaco os professores Patrick Boucher, Carlile Lavor, Luiz Satoru Ochi, Gérard Plateau e José Ricardo A. Torreão.

À amiga Maria de Fátima Cruz Marques, por toda a sua ajuda e, em especial, pela revisão final do texto de minha tese.

A todos os que me ajudaram na solução dos numerosos problemas computacio-

nais e de implementação com os quais me deparei, em especial à Profa. Inês de Castro, à Clícia, ao Douglas, ao Carlos Godar e ao Fred.

Às muitas pessoas que me ajudaram com discussões, referências, comentários, etc, que foram muito importantes no desenvolvimento de meu trabalho, entre as quais, destaco os colegas e professores Leonardo Assis, Amir Barros, Márcia Cerioli, Lucídio Cabral, Elder Macambira, Wagner Pimentel, Marcone Souza, Eduardo Uchoa, Jorge Petrucio Viana e Adilson Xavier.

Aos Professores e funcionários do PESC, especialmente as secretárias Cláudia, Lúcia, Marli, Mercedes, Solange, Sueli, a Dona Gercina e a Lourdes.

Aos alunos, funcionários e professores do Curso de Tecnologia em Informática das Faculdades Pestalozzi/ESEHA, onde tive a oportunidade de ministrar aulas. Em especial, agradeço aos professores Geraldo Simas e Dalessandro Vianna, pelo apoio e incentivo.

Aos demais amigos e colegas do PESC, que torceram por mim e me ajudaram de diversas formas, em especial, Débora, Laura, Loana, Rosa, André, Fábio, Henrique, Luérbio e Passini.

À CAPES e à COPPE/COPPETEC, pelas bolsas de estudo que me foram concedidas, e demais suportes financeiros.

Enfim, a todos aqueles que de alguma forma me ajudaram neste trabalho.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

HEURÍSTICAS PARA O
PROBLEMA DE STEINER EUCLIDIANO
EM R^N

Flávio Marcelo Tavares Montenegro

Setembro/2001

Orientador: Nelson Maculan Filho

Programa: Engenharia de Sistemas e Computação

O problema de Steiner euclidiano (PSE) é um problema de otimização que envolve aspectos combinatórios e contínuos. Dado um conjunto de pontos em R^n com métrica euclidiana, queremos encontrar uma árvore mínima conectando todos estes pontos, usando ou não pontos extras. Tem sido desenvolvida uma boa quantidade de algoritmos heurísticos e exatos para o PSE em dimensão $n = 2$. Entretanto, existem relativamente poucas propostas em dimensões mais altas. Esta tese apresenta algumas novas heurísticas para o PSE em $n \geq 3$. Estas são basicamente: uma extensão para $n \geq 3$ de um esquema de relaxação baseado em um modelo físico para o PSE plano; uma busca local de estruturas topológicas do PSE aplicada no contexto de uma busca tabu; um algoritmo genético e uma metaheurística desenvolvida recentemente, chamada *Otimização Microcanônica*, aplicados a uma estrutura vetorial resultante de um esquema de enumeração de soluções para o PSE. Resultados computacionais são fornecidos e usados para análise de desempenho de tais heurísticas.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

HEURISTICS FOR THE
EUCLIDEAN STEINER PROBLEM
IN R^N

Flávio Marcelo Tavares Montenegro

September/2001

Advisor: Nelson Maculan Filho

Department: Computing and Systems Engineering

The Euclidean Steiner problem (ESP) is an optimization problem involving both combinatorial and continuous aspects. Given a set of points in R^n with Euclidean metric, we look for a minimum tree which spans these points using or not extra points. A number of heuristics and exact algorithms have been developed for the ESP in dimension $n = 2$. However, there are relatively few proposals in higher dimensions. This thesis presents some new heuristics for the ESP in $n \geq 3$. These are basically: an extension for $n \geq 3$ of a relaxation scheme based on a physical model to the plane ESP; a local search of topological ESP structures applied in the context of a tabu search technique, and a genetic algorithm and a recently developed metaheuristic, called *Microcanonical Optimization*, which are applied to a vector structure resulting of an enumerative scheme of solutions for the ESP. Computational results are provided and used to analyze the performances of such heuristics.

Sumário

1	O Problema de Steiner Euclidiano – Conceitos Básicos	1
1.1	Introdução	1
1.2	O Problema de Fermat	2
1.3	O Problema de Steiner	4
2	Dificuldade do Problema e Métodos de Abordagem	9
2.1	O Problema da Otimização Contínua	9
2.2	O Problema Combinatório	11
2.3	Métodos de Abordagem	13
2.4	A razão ρ de Steiner	15
2.5	Configurações de Energia Potencial Mínima	18
3	Soluções Exatas em Dimensões $n \geq 3$	22
3.1	O Algoritmo de Smith	22
3.1.1	Vetores Topologia	22
3.1.2	Minimização de Topologias	23
3.1.3	O Método <i>Branch-and-Bound</i> de Smith	24
3.2	Alguns Resultados Computacionais	25
4	Métodos Heurísticos	27
4.1	Heurísticas Anteriores	27
4.1.1	A Árvore Geradora Mínima	27

4.1.2	A Heurística de Lundy	28
4.1.3	A Heurística Kalpakis - Ravada - Sherman	31
4.1.4	A Heurística de MacGregor Smith - Weiss - Patel	33
4.1.5	As Heurísticas de Pereira et al.	34
4.2	Um Esquema Dinâmico de Relaxação	36
4.2.1	Heurística no Plano	37
4.2.2	Extensão para o caso $n \geq 3$	44
4.2.3	Um algoritmo <i>Multi-Start</i>	53
4.3	Uma Busca Tabu para o Problema de Steiner Euclidiano	55
4.3.1	Busca Local	55
4.3.2	Busca Tabu	59
4.4	Heurísticas Baseadas nos Vetores Topologia de Smith	62
4.4.1	Um Algoritmo Genético Simples	62
4.4.2	Uma Busca Local Baseada nos Vetores Topologia de Smith	65
4.4.3	Otimização Microcanônica Aplicada ao PSE	66
4.5	Resultados Complementares	68
4.6	Comparação com Heurísticas Anteriores	71
4.6.1	Heurística de Lundy	72
4.6.2	Heurística de Kalpakis-Ravada-Sherman	73
4.6.3	Heurística de MacGregor Smith - Weiss - Patel	74
4.6.4	Heurísticas de Pereira et al.	75

5 Conclusões e Extensões	79
Referências Bibliográficas	81

1 O Problema de Steiner Euclidiano – Conceitos Básicos

1.1 Introdução

Este trabalho apresenta alguns conceitos introdutórios e algumas propostas de abordagens heurísticas relacionadas ao problema de otimização conhecido como *Problema de Steiner Euclidiano* (PSE): dados p pontos no espaço euclidiano em n dimensões, encontrar a rede de comprimento mínimo que interliga estes pontos, sendo permitido o acréscimo de pontos extras.

Tal problema, apesar de seu enunciado relativamente simples, apresenta a um só tempo aspectos tanto de otimização combinatória quanto de otimização contínua, o que em geral torna muito difícil a sua solução exata, ótima, mesmo para p não muito grande. Assim sendo, uma abordagem possível para o problema é a utilização das chamadas *heurísticas*, ou seja, algoritmos que, apesar de em geral não fornecerem soluções ótimas, podem nos levar a boas soluções aproximadas.

Iniciaremos nosso estudo na próxima seção, a partir do problema de Fermat, que além de estar historicamente relacionado ao problema de Steiner euclidiano, também apresenta muitos aspectos em comum com este. Na Seção 3, apresentaremos mais algumas definições, conceitos e resultados já bem estabelecidos na literatura referente ao problema de Steiner. No Capítulo 2, caracterizaremos algumas das dificuldades do problema e apresentaremos algumas propostas de abordagem conhecidas. No Capítulo 3, apresentamos resultados exatos e, no Capítulo 4, alguns métodos heurísticos para a solução do problema. Resultados computacionais são fornecidos. Conclusões e extensões do trabalho são apresentadas no Capítulo 5.

1.2 O Problema de Fermat

A história do problema de Steiner é usualmente associada a um problema proposto no século XVII por Fermat [21, 26, 2]:

Problema de Fermat: *Dados três pontos em um plano, encontrar um quarto ponto tal que a soma de suas distâncias aos pontos dados seja mínima.*

Utilizando-se argumentos geométricos, como a desigualdade triangular e alguns argumentos de simetria e semelhança de triângulos, pode-se verificar que o ponto procurado é único e, com relação a este, (se for interno ao triângulo definido pelos três pontos dados) quaisquer dois dos pontos dados dispõem-se segundo um ângulo de 120° .

Uma construção geométrica proposta por Torricelli para determinar a posição do ponto em questão está representada na Figura 1. Segundo esta construção,

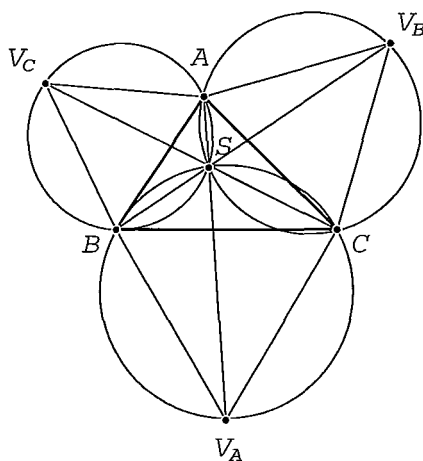


Figura 1: Construções de Torricelli e de Simpson

o ponto procurado, representado na Figura 1 pela letra S , está na interseção de três circunferências, cada uma circunscrevendo um triângulo equilátero, construído externamente sobre cada lado do triângulo definido pelos três pontos dados A , B e C . Este ponto é chamado com frequência de *ponto de Torricelli*, sendo também

conhecido como *ponto de Fermat* [3]. Neste trabalho chamaremos o ponto S de *ponto de Fermat-Torricelli*.

Em seu trabalho *Exercitationes Geometricae Sex*, publicado em 1647, Cavalieri mostrou que os lados do triângulo dado compreendem ângulos de 120° com respeito ao ponto de Fermat-Torricelli. De fato, podemos ver na Figura 1 que o ângulo \widehat{ASB} pertence ao quadrilátero $ASBV_C$, que está inscrito em um círculo. Portanto \widehat{ASB} é suplementar ao ângulo $\widehat{BV_C A} = 60^\circ$. Temos então $\widehat{ASB} = 120^\circ$, o que, por um raciocínio análogo, também é a medida de \widehat{BSC} e \widehat{CSA} .

Uma outra construção baseada nos três triângulos equiláteros acima também está representada na Figura 1. Esta é obtida, interligando-se os vértices exteriores V_A, V_B e V_C dos triângulos equiláteros aos respectivos vértices opostos no triângulo ABC . Simpson, em seu trabalho *Doctrine and Application of Fluxions*, de 1750, mostrou que os três segmentos $\overline{AV_A}$, $\overline{BV_B}$ e $\overline{CV_C}$, chamados *linhas de Simpson*, também se interceptam no ponto de Fermat-Torricelli.

Em certos casos, as construções acima apresentam soluções erradas, pois para que o ponto de Fermat-Torricelli seja o ponto de mínimo procurado, o mesmo deve pertencer à região triangular definida pelos pontos A, B e C . Na construção de Torricelli, por exemplo, sabendo que os arcos \widehat{AB} e \widehat{AC} medem 120° cada um, e que portanto encontram os respectivos segmentos \overline{AB} e \overline{AC} segundo um ângulo de 60° , não é difícil ver que o ângulo no vértice A deve ser menor ou igual a 120° , para que S permaneça na região delimitada pelo triângulo ABC . Portanto, se um ângulo qualquer do triângulo ABC for maior ou igual a 120° , o vértice correspondente a esse ângulo será o ponto que minimiza a interconexão. Foi Heinen, em 1834, possivelmente o primeiro a mostrar esse fato [26].

Considerando que o ponto S seja interno ao triângulo ABS , podemos mostrar sem maiores dificuldades que

$$\overline{AV_A} = \overline{BV_B} = \overline{CV_C} = \overline{AS} + \overline{BS} + \overline{CS}. \quad (1)$$

Seguindo um argumento apresentado em [3], realizaremos uma rotação de 60° do triângulo V_CAC em torno do vértice A , de forma a fazer com que coincidam o vértice V_C com B e o vértice C com V_B . Temos daí que $\overline{BV_B} = \overline{CV_C}$ e, por um raciocínio análogo, $\overline{AV_A} = \overline{BV_B} = \overline{CV_C}$. Para demonstrar a terceira igualdade das eqs.(1), podemos traçar na figura um segmento de reta de comprimento \overline{AS} , conectando o ponto A a um ponto P interior ao segmento $\overline{SV_C}$, de forma a construir um triângulo isósceles APS . Como $\widehat{ASV_C} = 60^\circ$ (posto que o arco $\widehat{AV_C}$ mede 120°) e $\overline{AS} = \overline{AP}$, temos que $\widehat{APS} = 60^\circ$, e o triângulo APS é na verdade equilátero. Assim $\overline{PS} = \overline{AS}$ e $\overline{CP} = \overline{CS} + \overline{AS}$. Rotacionando novamente o triângulo V_CAC de 60° em torno de A , podemos verificar que $\overline{PV_C} = \overline{BS}$, e portanto $\overline{CV_C} = \overline{AS} + \overline{BS} + \overline{CS}$, o que completa a demonstração da terceira igualdade. O resultado contido na eq.(1) também foi demonstrado por Heinen.

Foram propostos outros problemas que podem ser considerados como extensões do problema de Fermat. A generalização para vários pontos dados, possivelmente acrescentando-se pesos às distâncias destes pontos ao ponto de mínimo, é conhecida como *Problema Geral de Fermat* [26]. Este problema foi tratado por vários autores, incluindo Simpson, Weber e também Steiner [2, 21].

Entretanto, a generalização que veio a ser conhecida pelo nome de *Problema de Steiner* se refere na verdade a um problema sem restrição do número de pontos a serem procurados.

1.3 O Problema de Steiner

Foi talvez Gauss, em 1836, quem primeiro formulou um problema com uma extensão deste tipo. Em uma carta a Schuhmacher, Gauss fez a seguinte pergunta [2]: *Como uma rede de estradas de ferro de comprimento mínimo, conectando as quatro cidades Bremen, Harburg (hoje uma parte de Hamburg), Hannover e Braunschweig, pode ser criada?* Pode-se verificar que a solução é uma rede na qual Bremen, Harburg e Hannover são interconectadas por um ponto de Fermat-Torricelli, e Hannover e

Braunschweig são conectadas por uma linha reta.

Posteriormente, em 1934, Jarníc e Kössler propuseram o seguinte problema:

Encontrar a rede mínima interconectando p pontos no plano.

Estudaram, então, o caso particular de p pontos distribuídos como vértices de polígonos regulares [21]. Em seu livro *What is Mathematics?* [5], de 1941, Courant e Robbins trataram do problema, porém sem atribuí-lo a Fermat, nem a Gauss e nem a Jarníc e Kössler. Comentando que Steiner o havia estudado no caso $p = 3$, passaram a chamá-lo *problema de Steiner*, estendendo tal denominação também para o caso geral. Ao que parece, foi justamente a popularidade daquele livro que, por um lado, cristalizou o nome *Problema de Steiner* e, por outro, impulsionou fortemente o estudo do assunto.

Neste trabalho, trataremos do *Problema de Steiner* em n dimensões. Como estamos considerando o espaço euclidiano, a rede a ser encontrada deve ser um conjunto de segmentos de retas, com possíveis pontos extras na junção de alguns desses segmentos. Como a rede é de menor comprimento possível, com o comprimento de cada segmento de reta sendo positivo, tal rede não deve apresentar ciclos, sendo portanto uma árvore. Levando em conta tais considerações, e também para diferenciá-lo de outras versões, como o *Problema de Steiner Retilíneo* e o *Problema de Steiner em Grafos*, enunciaremos o problema da seguinte forma:

Problema de Steiner Euclidiano (PSE): *Dados p pontos no espaço euclidiano n -dimensional, encontrar a menor árvore que os interconecta.*

Chamaremos de *ponto de Steiner* a qualquer ponto extra na árvore, ou seja, qualquer ponto que não esteja entre os p pontos dados inicialmente. Chamaremos os segmentos de reta que ligam os diversos pontos da árvore, tanto os pontos dados quanto os pontos de Steiner, de *arestas*. Seguindo Gilbert e Pollak [16], definiremos uma *Árvore de Steiner* (AS) como uma árvore cujo comprimento não pode ser encurtado por uma perturbação nos pontos de Steiner, mesmo quando for permitido

o acréscimo de novos pontos. A menor árvore de Steiner para uma distribuição de pontos dados, sendo portanto a solução do Problema de Steiner Euclidiano (PSE), é chamada de *Árvore de Steiner Mínima* (ASM). Alguns exemplos de árvores de Steiner mínimas estão representados na Figura 2.

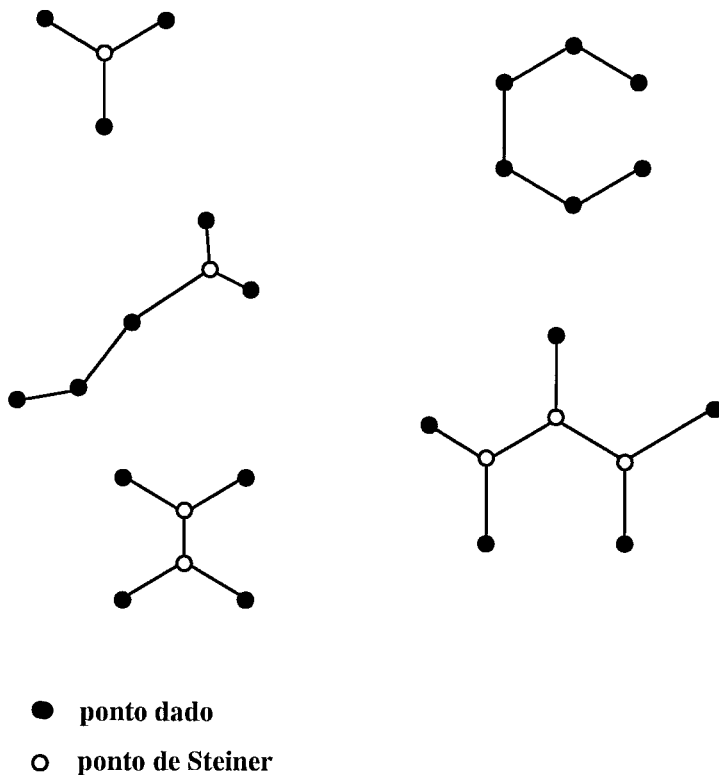


Figura 2: Exemplos de árvores de Steiner

Um ponto é dito ser de grau m , ou de *valência* m , se for extremo de m arestas. Uma árvore de Steiner deve satisfazer a alguns vínculos de grau. Por exemplo, não pode conter pontos de Steiner de grau 1 ou 2. Isto porque se um ponto de Steiner possuísse grau 1, poderia ser removido juntamente com a aresta da qual é extremo, o que tornaria a árvore menor. Se um ponto de Steiner possuísse grau 2, poder-se-ia removê-lo juntamente com as duas arestas das quais é extremo, interligando-se os dois pontos adjacentes por uma única aresta de comprimento menor que a soma das

arestas removidas, o que também tornaria a árvore menor. Assim o grau de um ponto de Steiner é, no mínimo, 3.

Por outro lado, vamos supor que duas arestas na árvore se encontram em um ponto C , segundo um ângulo θ menor que 120° , como na Figura 3. Neste caso,

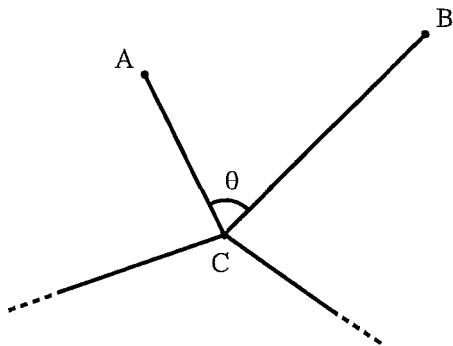


Figura 3: Trecho de árvore contendo um ponto C , de grau 4, no qual duas arestas se encontram segundo um ângulo θ menor que 120° .

podemos sempre encontrar um ponto S de Fermat-Torricelli (de grau 3) interior ao triângulo ABC tal que o ângulo \widehat{ASB} (e também \widehat{ASC} e \widehat{BSC}) meça 120° e satisfaça à desigualdade $\overline{AS} + \overline{BS} + \overline{CS} < \overline{AC} + \overline{CB}$. Obteremos uma árvore menor, com o ponto C tendo seu grau reduzido de 1 unidade. Se ainda restarem arestas encontrando-se em C com ângulo menor que 120° , devemos acrescentar novamente outro ponto de Fermat-Torricelli, de forma a reduzir o comprimento da árvore, e novamente reduzindo o grau de C . Ao final, ou o ponto C será extremo de três arestas que nele se encontram segundo ângulos mútuos de 120° , atendendo ao que chamamos *Condição de Ângulo*, ou será um ponto de grau menor que 3. Assim sendo, teremos no máximo três arestas encontrando-se em qualquer ponto da árvore. Como vimos, um ponto de Steiner não pode ter grau menor que 3; portanto, seu grau ou valência deve ser exatamente 3. Este é um resultado bem conhecido e muito útil no contexto do problema de Steiner euclidiano. Note-se que um ponto de Steiner é na verdade um ponto de Fermat-Torricelli com relação aos seus três vértices vizinhos, devendo estar no plano definido por estes mesmo no problema em

$n \geq 3$ dimensões.

Outra propriedade importante refere-se ao número máximo de pontos de Steiner que uma árvore de Steiner pode conter [5, 21]. Se uma árvore de Steiner contém p pontos dados e k pontos de Steiner, seu número de arestas é $p+k-1$. Levando-se em consideração que cada ponto dado possui ao menos grau 1 e cada ponto de Steiner possui exatamente grau 3, o número mínimo de arestas de uma árvore de Steiner é de $(p+3k)/2$ (a divisão por 2 sendo devida ao fato de que cada aresta é contada em dois vértices), e daí temos a desigualdade:

$$\frac{(p+3k)}{2} \leq p+k-1.$$

Dessa forma, o número k de pontos de Steiner é limitado por

$$k \leq p-2.$$

Quando uma árvore de Steiner possui exatamente $q = p-2$ pontos de Steiner, dizemos que ela é uma *árvore de Steiner cheia*, com cada ponto dado possuindo grau exatamente 1.

Chamaremos de *topologia* o grafo que representa uma árvore, não importando as coordenadas dos diversos pontos, e sim o conjunto de interconexões entre os mesmos. Uma topologia que satisfaça às exigências de grau de uma árvore de Steiner é chamada *topologia de Steiner*. Se a árvore de Steiner é cheia, sua topologia é correspondentemente chamada de *topologia de Steiner cheia*. Como veremos, o conceito de topologia de Steiner cheia é de importância especial no contexto do PSE.

2 Dificuldade do Problema e Métodos de Abordagem

2.1 O Problema da Otimização Contínua

Na Figura 4, temos três exemplos de topologias cheias, relacionadas a uma mesma distribuição de quatro pontos dados.

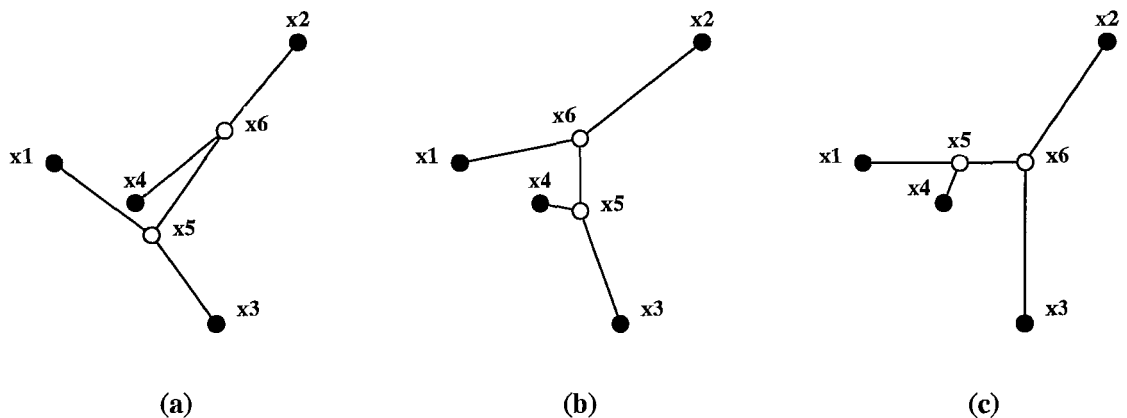


Figura 4: Exemplos de diferentes topologias de Steiner cheias para uma mesma configuração dos quatro pontos dados x^1, x^2, x^3 e x^4 , interligados através de dois pontos de Steiner x^5 e x^6 .

Denotando a distância euclidiana entre os pontos x^i e x^j por

$$|x^i - x^j| = \sqrt{\sum_{l=1}^n (x_l^i - x_l^j)^2} \quad (2)$$

temos, para o cálculo das posições de x^5 e x^6 na Figura 4, três problemas de otimização distintos.

Para o exemplo (a): minimizar $|x^1 - x^5| + |x^3 - x^5| + |x^5 - x^6| + |x^4 - x^6| + |x^2 - x^6|$, sujeito a x^5 e $x^6 \in R^3$.

Para o exemplo (b): minimizar $|x^3 - x^5| + |x^4 - x^5| + |x^5 - x^6| + |x^1 - x^6| + |x^2 - x^6|$, sujeito a x^5 e $x^6 \in R^3$.

Para o exemplo (c): minimizar $|x^1 - x^5| + |x^4 - x^5| + |x^5 - x^6| + |x^2 - x^6| + |x^3 - x^6|$, sujeito a x^5 e $x^6 \in R^3$.

Para dimensão $n = 2$ os problemas acima podem ser resolvidos por um algoritmo linear, devido a Hwang e Melzak, baseado em um método geométrico para localizar os pontos de Steiner, dada uma topologia de Steiner cheia [35, 20, 22]. Para o caso $n \geq 3$, o desenvolvimento de algoritmos baseados em métodos geométricos tem encontrado dificuldades, relacionadas, por exemplo, ao aparecimento de equações de grau oito ou mais [52]. Dessa forma, têm-se recorrido a algoritmos numéricos, que aproximam as posições dos pontos de Steiner através de iterações sucessivas, até que um critério de convergência seja satisfeito. Exemplos de procedimentos numéricos deste tipo podem ser encontrados em [1, 52]. Mas seja o caso $n = 2$ ou $n \geq 3$, os procedimentos realizados envolvem cálculos com raízes irracionais, de forma que os resultados computacionais obtidos serão em geral aproximados.

Sempre podemos obter uma topologia de Steiner G de alguma topologia de Steiner cheia F . Para isso, usamos a operação de *encolher uma aresta* (do inglês *shrinking an edge*), que corresponde a retirar uma aresta de F , colapsando os dois pontos adjacentes em um único ponto. Sempre que uma topologia A puder ser obtida de uma topologia B *encolhendo-se* arestas nesta última, dizemos que A é uma *degenerescência* de B , ou $A \in D(B)$, onde $D(B)$ denota o conjunto das degenerescências de B . Assim sendo, podemos dizer que para toda topologia de Steiner G , sempre existe uma topologia de Steiner cheia F , não necessariamente única, tal que $G \in D(F)$ [21]. Se a topologia G não for cheia, sua correspondente árvore de Steiner pode ser considerada como uma árvore cheia, na qual um ou mais pontos de Steiner coincidem com pontos dados. Chamamos tais pontos de *pontos de Steiner degenerados*.

Um resultado importante relacionado ao conceito de degenerescência é que uma

árvore de Steiner cuja topologia G pertence a $D(F)$, onde F é uma topologia de Steiner cheia, é a única árvore mínima dentre aquelas com topologias de Steiner pertencentes a $D(F)$ [23]. Podemos concluir que, como uma árvore de Steiner possui um comprimento localmente mínimo, este também é um mínimo global em $D(F)$. Assim, utilizando métodos de minimização que tratem de maneira adequada as não-diferenciabilidades da função objetivo nos pontos de degeneração, podemos encontrar uma solução para o problema de Steiner Euclidiano (PSE) concentrando nossa atenção apenas nas topologias cheias.

2.2 O Problema Combinatório

Voltando ao exemplo da Figura 4, se os quatro pontos dados estão igualmente afastados entre si, posicionados como vértices de um tetraedro regular, as árvores resultantes das minimizações possuirão todas o mesmo comprimento, devido à simetria da distribuição. Pode-se verificar através de argumentos geométricos simples que a solução para este PSE não poderia apresentar pontos degenerados, bastando que se realizasse apenas uma das minimizações (a), (b) ou (c) acima para se encontrar uma árvore de Steiner mínima (ASM). Em geral, entretanto, o PSE envolve minimizações de topologias de Steiner, cheias ou não, que resultam em árvores de comprimentos diferentes. Uma abordagem possível para resolver o PES é, portanto, encontrar todas as topologias de Steiner relacionadas a uma dada configuração, minimizá-las e comparar as árvores resultantes de forma a encontrar a de menor comprimento.

No entanto, tal procedimento, um método de *força bruta*, é muito limitado, pois o número de topologias diferentes aumenta rapidamente com o número p de pontos dados. Este é um aspecto combinatório que por si só já torna o PSE um problema de otimização de complexidade computacional bastante elevada. Versões do PSE como um problema discretizado de decisão o classificam como *NP-completo* [14, 15], fundamentalmente devido a este aspecto combinatório. Considerando-se apenas topologias com k pontos de Steiner, e com cada um dos p pontos dados possuindo

no máximo grau dois, o número $F(p, k)$ de topologias possíveis foi calculado por Gilbert e Pollak [16] como sendo

$$F(p, k) = \binom{p}{k+2} \frac{(p+k-2)!}{k! 2^k}.$$

Considerando-se apenas topologias cheias temos que

$$F(p) = F(p, p-2) = \frac{(2p-4)!}{(p-2)! 2^{p-2}},$$

e utilizando a identidade

$$(2m+1)! = 2^m m! (2m+1)!! \quad (3)$$

onde $(2m+1)!! = 1.3.5.7.....(2m-1).(2m+1)$, obtemos

$$F(p) = (2p-5)!! \quad (4)$$

Se temos, por exemplo, $p = 10$, o número total de topologias cheias será de $15!! = 1.3.5.7.9.11.13.15 = 2.027.025$. Este seria, no caso, o número de topologias cheias a serem minimizadas em um método de força bruta. Para valores de p maiores, o número $F(p)$ de topologias aumenta muito, podendo-se mostrar que este aumento é, na verdade, *superexponencial*.

Uma função real positiva $f(N)$ é chamada *exponencial* se puder ser limitada, para todo N suficientemente grande, por $(C_1)^N < f(N) < (C_2)^N$, onde $1 < C_1 \leq C_2$; se cresce mais rápido que qualquer limite superior deste tipo, é chamada *superexponencial* [52]. Podemos ver que a função $F(p)$ acima é superexponencial. A função $F(p)$ é da forma:

$$F(p) = (2p-5)(2p-7)(2p-9).....(2p-(2p-3))(2p-(2p-1)) = \prod_{i=2}^{p-1} (2p-(2i+1)),$$

e podemos ver que para $p > 4$,

$$F(p) > p^{\frac{p-2}{2}}.$$

Dado $C_1 > 1$, pode-se sempre encontrar $p > \max(4, C_1^4)$, quando teremos

$$p^{\frac{p-2}{2}} > C_1^{4\frac{p-2}{2}} > C_1^p.$$

Assim, para qualquer $p > \max(4, C_1^4)$, temos $F(p) > C_1^p$ e, portanto, $F(p)$ é superexponencial.

2.3 Métodos de Abordagem

Apesar da alta complexidade do PSE, têm-se desenvolvido muitos algoritmos exatos e heurísticos bastante eficientes para o caso $n = 2$ (ver [21] e [64] para um panorama destes algoritmos). Em especial na última década, tem havido uma grande melhoria na performance de tais algoritmos, que exploram as particularidades da geometria plana. Uma abordagem usual para o PSE baseia-se no fato de que se pode subdividir uma árvore de Steiner mínima com topologia geral em diversas componentes com subtopologias cheias. Assim, dada uma distribuição de pontos, pode-se procurar suas diversas regiões com subtopologias cheias (não degeneradas), efetuando-se minimizações locais e posteriormente concatenando de maneira adequada as subárvores mínimas encontradas. No plano, observa-se que dificilmente são encontradas subárvores cheias com mais de três pontos de Steiner, o que permite uma redução drástica no número de minimizações a serem realizadas (ver eq. 4). A utilização desta e de outras propriedades no PSE no plano tem permitido que se desenvolvam algoritmos extremamente rápidos, de tal ordem que hoje em dia já se relatam soluções exatas para distribuições de até 10.000 pontos dados [62].

Para o caso $n \geq 3$, além da maior dificuldade em se realizar minimizações de topologias, as estruturas e propriedades das árvores de Steiner passam a ser mais gerais e complexas, e os algoritmos no plano nem sempre podem ser diretamente estendidos a este caso. A abordagem de se subdividir o problema em muitos problemas menores com subtopologias cheias e depois reconcatená-las, um método *dividir para conquistar*, parece não funcionar tão bem como no caso plano, pois em dimensões mais altas têm-se observado experimentalmente uma tendência de os pontos de Steiner disporem-se segundo uma única topologia cheia, englobando todos os pontos [52], o que mantém o problema muito limitado por seu aspecto combinatório.

Um algoritmo numérico de força bruta para o PSE em dimensão n foi apresentado por Warren Smith [52]. Trabalhando em um contexto *branch-and-bound*, o algoritmo gera e minimiza uma grande quantidade de topologias de Steiner cheias na procura de árvores de Steiner mínimas. Este algoritmo demanda muito tempo para resolver problemas com pouco menos de 20 pontos dados. Entretanto, é muito rápido para problemas com poucos pontos, sendo usado com frequência em métodos de subdivisão e reconcatenação da distribuição dada, como descrito anteriormente, para $n = 3$. Nesta tese também o utilizaremos extensivamente, seja para o cálculo de soluções exatas ou para a utilização de alguns de seus procedimentos e estruturas de dados. No próximo capítulo, o descreveremos em maiores detalhes.

Formulações de programação matemática também foram propostas na busca de soluções exatas para o PSE n -dimensional. Maculan, Michelon e Xavier [32] formularam o PSE como um problema de programação inteira mista não-convexa, e propuseram um programa dual lagrangeano de forma a desenvolver um método *branch-and-bound*. Uma outra formulação para o PSE n -dimensional, uma relaxação em forma cônica, também foi proposta [12]. Para uma descrição das características principais destas duas formulações, ver [30].

Soluções heurísticas para o PSE em $n = 3$ comumente seguem o procedimento *dividir para conquistar* (ver, por exemplo, [46, 51, 55]). Em geral, os resultados não são tão bons como aqueles obtidos no plano, possivelmente pelos motivos que comentamos acima. Entretanto, devido à dificuldade do problema em $n = 3$, o uso de heurísticas parece ser, até o momento, a única possibilidade de se obter bons resultados computacionais, em tempos razoáveis, para distribuições gerais com mais de $p = 20$ pontos dados.

Nesta tese apresentaremos algumas novas heurísticas para o PSE em dimensão $n \geq 3$. Uma delas é uma extensão para dimensões gerais de uma heurística muito rápida, desenvolvida originalmente no plano por Chapeau-Blondeau et al. [1] e baseada em um modelo físico para o PSE. As demais são construídas a partir da apli-

cação de meta-heurísticas a buscas locais, desenvolvidas sobre diferentes estruturas relacionadas ao PSE. Em todas as heurísticas desenvolvidas, estaremos lidando sempre com topologias cheias para a distribuição inteira de pontos dados, ao contrário das desenvolvidas para $n = 3$ até aqui.

2.4 A razão ρ de Steiner

Em nosso estudo, para julgar a qualidade das soluções heurísticas encontradas, usaremos a chamada *razão de Steiner*, ρ , definida por

$$\rho = \frac{L_{AS}}{L_{AGM}}. \quad (5)$$

Na expressão acima, L_{AS} é o comprimento da árvore de Steiner encontrada, que pode ser mínima ou não, e L_{AGM} é o comprimento da árvore geradora mínima (AGM), ou seja, a menor árvore interconectando os pontos dados, sem a adição de pontos extras. Árvores geradoras mínimas nos fornecem uma primeira aproximação de uma ASM e podem ser obtidas em tempo $O(np^2)$, através de uma versão do algoritmo de Prim [49] para $n \geq 3$. Assim, um critério para que uma solução heurística, com razão de Steiner ρ_H , possa ser considerada de boa qualidade é que atenda a

$$\rho_H \leq 1. \quad (6)$$

Uma solução heurística para uma determinada distribuição de pontos dados será tanto melhor quanto menor for o valor de ρ_H . Uma idéia mais precisa da qualidade da solução pode ser obtida comparando-se o valor de ρ_H encontrado com o valor ótimo ρ_{OT} da distribuição dada ou, no caso de comparação de desempenhos, com resultados de outras heurísticas.

Alternativamente, em casos onde não se conheça ρ_{OT} , pode-se procurar limites inferiores para a solução. Formulações duais como a de Maculan et al. [32] podem nos fornecer estes limites. Levando em conta a eq.(6), uma razão de Steiner ρ_D relacionada a uma solução dual para o PSE deve atender a

$$\rho_D \leq \rho_{OT} \leq \rho_H \leq 1.$$

Assim sendo, se ρ_D for suficientemente próximo de ρ_{OT} , a diferença

$$\Delta\rho = \rho_H - \rho_D$$

também pode nos fornecer uma boa medida da qualidade da solução.

Neste trabalho nos concentraremos na obtenção de boas soluções heurísticas, ou seja, em reduzir a diferença $\Delta\rho$ acima através da obtenção de valores de ρ_H tão reduzidos quanto possível.

Limites inferiores também podem ser fornecidos pelo *ínfimo* ρ_n da razão de Steiner, isto é, o menor valor possível de ρ_{OT} , dentre todas as distribuições de pontos dados, para uma dada dimensão n . Por serem limites gerais, os valores de ρ_n normalmente não são apropriados para julgar com alguma precisão a qualidade das soluções encontradas. Entretanto nos dão uma idéia do quanto uma solução heurística pode estar distante, em termos de custo associado (comprimento da árvore), de uma solução ótima.

O estudo de ρ_n tem-se mostrado bastante complexo, envolvendo raciocínios intrincados e resultando em muitas questões em aberto [16, 21, 10]. Para $n = 2$, o ínfimo fora conjecturado como sendo de $\rho_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}$, correspondendo à distribuição de três pontos dados sobre os vértices de um triângulo equilátero [16]. Depois de mais de duas décadas de estudo, uma prova desta conjectura foi finalmente apresentada [9].

Para o caso $n = 3$, assim como para dimensões mais altas, ainda não se conhece o ínfimo. Existe uma prova de que $\rho_n \geq 0.615827$, mas conjectura-se que este valor deva ser na verdade maior [8, 10]. Uma conjectura devida a Smith e MacGregor Smith [54] atribui a ρ_3 o valor

$$\rho_3 \approx 0.784190373... \tag{7}$$

e afirma que este valor é alcançado por uma estrutura a que chamam *sausage*. Uma *sausage* com p pontos e em n dimensões pode ser descrita da seguinte forma:

1. Inicie com uma bola de diâmetro unitário no n -espaço.
2. Adicione bolas unitárias sucessivamente, de tal forma que a p -ésima bola adicionada esteja sempre tocando as $\min(n, p - 1)$ bolas adicionadas mais recentemente.

O conjunto discreto de pontos formado pelos centros dessas bolas é o que constitui a chamada *sausage*.

Assim uma *sausage* em $n = 1$ é simplesmente um conjunto de inteiros na reta real. Em $n = 2$, uma *sausage* terá seus pontos colocados nos vértices de um conjunto de triângulos equiláteros *empilhados*, ligados por lados comuns. Como uma extensão do caso $n = 2$, podemos considerar a *sausage* em 3 dimensões como os vértices de um conjunto de tetraedros regulares empilhados, ligados agora por faces comuns.

Du e Smith [10] mostraram que a configuração da *sausage* para $n \geq 3$ tende a apresentar razões de Steiner cada vez menores à medida em que o número p de pontos dados é aumentado, chegando a um limite assintótico, quando p tende a infinito, bastante baixo, sendo tão mais reduzido quanto maior o valor de n . Então conjecturaram que, ao menos para valores de n não muito altos, tal limite assintótico seria na verdade o valor do ínfimo ρ_n para a dimensão.

Os casos da *sausage* em $n = 1$ e $n = 2$, de fato, fornecem o ínfimo ρ_1 e ρ_2 [9, 10]. Já os casos em $n \geq 3$ permanecem sem comprovação, mas fornecem os menores valores conhecidos até agora.

O que é interessante notar é que os vértices da estrutura de tetraedros empilhados da *sausage* em $n = 3$ dispõem-se segundo uma distribuição helicoidal. Este fato nos fornece uma indicação de uma possível correlação do PSE com estruturas espaciais de proteínas, como veremos a seguir [56, 38, 39, 40].

2.5 Configurações de Energia Potencial Mínima

Podemos correlacionar uma árvore de Steiner com uma configuração de energia potencial mínima. Para tanto, podemos pensar nos pontos e arestas em uma dada árvore como sendo partículas carregadas interligadas por algum tipo de potencial. Em potenciais do tipo gravitacional ou eletrostático, onde a energia potencial cresce com a distância entre as partículas, a redução do comprimento total das interligações implica em uma redução da energia potencial total. Dessa forma, uma árvore de Steiner mínima seria uma configuração de energia mínima e, sendo assim, também uma configuração de equilíbrio estável, o que está de acordo com a característica das árvores de Steiner de não encurtarem seu comprimento devido a uma perturbação na posição dos pontos de Steiner.

Seguindo a correlação acima, uma medida ao menos qualitativa do quanto uma dada distribuição de pontos se aproxima ou se afasta de sua configuração de equilíbrio global pode ser fornecida pela razão de Steiner ρ . Para uma árvore de Steiner mínima temos $\rho = 1$ e energia potencial globalmente mínima. À medida em que são retirados pontos de Steiner dessa árvore, *encolhendo-se* arestas (*shrinking an edge*), a razão de Steiner da distribuição dos pontos restantes também se reduz, ao passo que a energia potencial aumenta. Em resumo, quanto maior a razão de Steiner, menor a energia potencial da configuração, sendo esta energia mínima quando $\rho = 1$.

Por outro lado, considere uma árvore de Steiner mínima A . Se realizarmos uma perturbação qualquer (no sentido de reduzir o comprimento de algumas arestas) na posição dos pontos de Steiner de A , e recalcularmos a razão de Steiner para esta nova configuração, obteremos um valor de ρ menor, ou no máximo igual, ao valor unitário correspondente à árvore A . Esta diminuição do valor de ρ é em geral tanto maior quanto mais afastados estejam os pontos de Steiner de suas posições iniciais, alcançando um limite inferior quando forem coincidentes aos pontos de valência 1 ou 2 de A . Correspondentemente, a energia potencial da configuração aumentará com a perturbação, sendo este aumento também limitado. A diferença entre o valor

mínimo inicial e o valor máximo que a energia potencial pode alcançar, pode, a grosso modo, nos dar uma medida da estabilidade do equilíbrio da configuração de A considerando-se que a variação na posição dos pontos de Steiner não seja muito grande. Em termos da razão ρ de Steiner, podemos considerar, ao menos em primeira aproximação, que distribuições de pontos dados que possuam menores valores de ρ dão origem a árvores de Steiner correspondentes a configurações de equilíbrio mais estável.

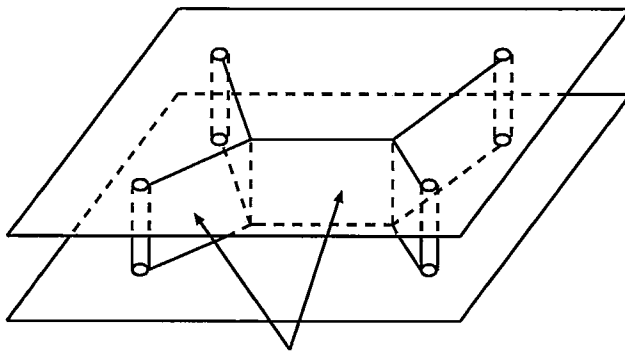
Como dissemos anteriormente, em 3 dimensões a configuração de pontos dados candidata a ser o ínfimo ρ_3 é aquela da *sausage*, com os pontos dispostos segundo uma hélice. Podemos esperar, então, que este tipo de configuração esteja presente em estruturas bastante estáveis, relativamente fáceis de serem encontradas na natureza. De fato, uma estrutura predominantemente helicoidal é encontrada comumente em muitos tipos de macromoléculas orgânicas, tais como DNA, RNA e diversos tipos de proteínas [61]. A sugestão clara é correlacionar os conceitos matemáticos de vértices, arestas e árvores de Steiner com os respectivos conceitos físico-químicos de átomos, ligações interatômicas / intermoleculares e de configurações espaciais de moléculas.

No trabalho desenvolvido por MacGregor Smith et al. [56] foram calculadas as razões de Steiner das localizações espaciais dos átomos de diversas proteínas, algumas das quais apresentando estruturas predominantemente helicoidais. Os valores encontrados eram notavelmente próximos da unidade, o que indica, pelo que vimos acima, que os átomos de tais moléculas estavam muito próximos dos vértices de árvores de Steiner. Isto parece corroborar a idéia de que se pode associar a minimização do comprimento de uma árvore interligando vários pontos (problema de Steiner) com a minimização da energia potencial de uma configuração de átomos, obtendo-se uma estrutura estável como é uma proteína. Até que ponto esta correlação é válida, entretanto, é algo que vem sendo examinado [56, 38, 39, 40].

Do ponto de vista matemático, uma vez que se mostre válida esta correlação entre árvores de Steiner e estruturas espaciais de moléculas, um benefício é poder

encontrar na natureza informações importantes e, possivelmente, soluções para um problema complexo, intratável mesmo para quantidades não muito grandes de dados iniciais. Já de um ponto de vista bioquímico, um ganho considerável talvez seja obtido através de novas idéias e técnicas que ajudem no tratamento de um problema intrincado como é o da determinação da conformação espacial de proteínas [61, 63].

Os conceitos de configurações de energia mínima e de equilíbrio de forças estão também presentes em algumas propostas, conhecidas já há algum tempo, de modelagem do PSE através da utilização de dispositivos físicos. Um exemplo é o *modelo de película de sabão* [5, 36]. Este modelo gera árvores de Steiner sem uma topologia pré-determinada. Duas placas paralelas são separadas por bastões localizados nas posições correspondentes aos pontos dados. Todo o dispositivo é mergulhado em um preparado contendo água e sabão. Quando levantado, haverá uma película de sabão conectando os bastões entre as placas (ver Figura 5). Devido a forças de



película de sabão

Figura 5: Modelo de película de sabão. No exemplo acima, as duas placas paralelas separam-se por quatro bastões correspondentes às posições de quatro pontos dados. Os bordos da película sobre as placas descrevem um padrão equivalente a uma árvore de Steiner localmente mínima.

tensão superficial na película, esta deverá apresentar uma área mínima [5]. Sendo as placas paralelas, com as alturas das paredes entre os bastões constantes, os bordos

da película sobre as placas deverão assumir conformações de comprimento mínimo, descrevendo o padrão de uma árvore de Steiner. Os pontos de Steiner serão correspondentes à junção de três paredes, cada uma exercendo uma força de tensão T_k , $k = 1, 2, 3$, de mesma intensidade T sobre a junção. Na posição de equilíbrio, tais forças devem anular-se, e sendo todas de mesma intensidade, os ângulos respectivos entre pares destas devem ser de 120° , e temos de fato a descrição de uma árvore de Steiner. Esta, entretanto, não será necessariamente uma ASM, pois pequenas perturbações nas condições em que o experimento é realizado conduzirão a diferentes árvores de Steiner, localmente mínimas. Repetindo-se o procedimento, pode-se obter outras árvores com topologias de Steiner diferentes e, eventualmente, uma ASM.

Existem outros modelos físicos além deste, como o *modelo de cordas* [36, 48] e o *modelo de membrana* [57]. Tal como no modelo de película de sabão, nestes modelos pode ser muito difícil identificar, entre as possíveis árvores de Steiner, aquela árvore mínima que resolve o problema. Além disso, dificuldades operacionais podem torná-los impraticáveis para um número muito grande de pontos dados. Entretanto, tais dificuldades podem ser contornadas através de simulações computacionais adequadas. Mais à frente neste trabalho, apresentaremos uma extensão para $n \geq 3$ de uma heurística para o PSE plano que simula a evolução dinâmica de uma película de sabão, segundo o modelo apresentado acima.

3 Soluções Exatas em Dimensões $n \geq 3$

Neste capítulo apresentamos alguns procedimentos e estruturas importantes utilizados pelo algoritmo *exato* de Smith para o PSE em dimensão $n \geq 3$ [52]. Apresentamos, também, um breve estudo acerca de soluções exatas em dimensão $n = 3$, obtidas através da aplicação de um código C do algoritmo de Smith [53].

3.1 O Algoritmo de Smith

O método de *força bruta* desenvolvido por Smith para o PSE consiste, basicamente, em enumerar todas as possíveis soluções para o problema e minimizá-las, selecionando dentre estas a melhor solução. A enumeração das soluções é realizada através dos chamados *vetores topologia*, cada um representando uma possível topologia cheia, que são aplicados, em seguida, no contexto de um procedimento *branch-and-bound*, o que evita a minimização de algumas soluções ruins.

3.1.1 Vetores Topologia

O esquema enumerativo de Smith é baseado em uma correspondência 1 – 1 entre topologias de Steiner cheias com $p \geq 3$ pontos dados e $(p-3)$ -vetores \mathbf{a} , cuja i -ésima componente a_i é um inteiro no intervalo $1 \leq a_i \leq 2i + 1$. Cada $(p-3)$ -vetor \mathbf{a} , que descreve uma topologia cheia, pode ser obtido construtivamente partindo de um vetor nulo () inicial, relativo a uma topologia de Steiner cheia descrevendo três pontos dados, 1, 2 e 3, conectados através das respectivas arestas 1, 2 e 3 a um ponto de Steiner numerado com $p + 1$ (Figura 6a).

A conexão de um quarto ponto é feita através do ponto $p + 2$, que deve ser inserido sobre uma das três arestas existentes, por exemplo a aresta 2, o que dará origem a duas novas arestas, numeradas 4 e 5 na Figura 6b. Como escolhemos a aresta 2 para inserir o ponto de Steiner $p + 2$, a nova topologia resultante será correspondente ao vetor topologia (2). Entre as cinco arestas disponíveis podemos

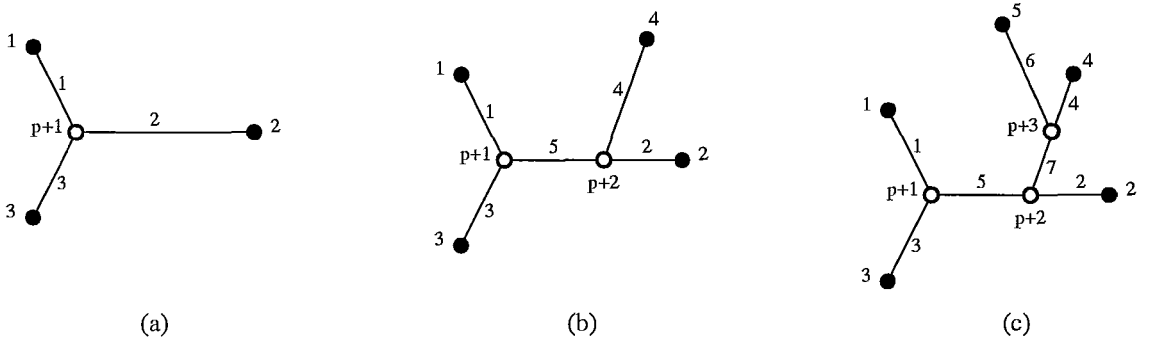


Figura 6: O vetor nulo () inicial corresponde à topologia apresentada em (a); as inclusões do ponto dado 4, através da aresta 2 em (b), e do ponto dado 5, através da aresta 4 em (c), darão origem a novas topologias, correspondentes respectivamente aos vetores topologia (2) e (2, 4).

agora escolher a aresta 4, por exemplo, para inserir o ponto de Steiner $p + 3$ que irá conectar o ponto dado 5 à árvore. A nova topologia (Figura 6c) corresponderá ao vetor topologia (2, 4), e duas novas arestas, 6 e 7, serão originadas. Em geral, a i -ésima entrada a_i do vetor topologia está relacionada à inserção do ponto de Steiner $p + i + 1$, à conexão do ponto dado $i + 3$, e à introdução de duas novas arestas: a aresta $2i + 2$, conectando o novo ponto de Steiner ao novo ponto dado; e a aresta $2i + 3$, conectando o novo ponto de Steiner ao extremo da aresta a_i que possuir o maior número. Ao final da construção, obtemos um $(p - 3)$ -vetor topologia completo.

É fácil ver que podemos descrever todas as $(2p - 5)!!$ topologias de Steiner cheias apenas combinando todos os diferentes valores das $p - 3$ componentes do vetor \mathbf{a} . O próximo passo no algoritmo exato de Smith é a minimização destas topologias.

3.1.2 Minimização de Topologias

O processo numérico de minimização utilizado por Smith para minimização de uma árvore com topologia de Steiner A prefixada consiste em resolver em cada iteração i o seguinte sistema de $p - 2$ equações lineares:

$$\vec{x}_k^{(i+1)} = \frac{\sum_{j|(jk) \in A} \frac{\vec{x}_j^{(i+1)}}{|\vec{x}_j^{(i)} - \vec{x}_k^{(i)}|}}{\sum_{(jk) \in A, j \in S} \frac{1}{|\vec{x}_k^{(i)} - \vec{x}_j^{(i)}|}}, \quad p+1 \leq k \leq 2p-2. \quad (8)$$

Na equação acima, S é o conjunto dos pontos de Steiner e o n -vetor \vec{x}_k é o conjunto das n coordenadas do k -ésimo ponto, que pode ser um ponto dado, se $1 \leq k \leq p$, ou um ponto de Steiner, se $p+1 \leq k \leq 2p-2$. Cada equação deve ser resolvida para os $\vec{x}_k^{(i+1)}$ desconhecidos (os pontos de Steiner) em suas n dimensões.

Smith [52] relacionou as equações acima com a energia potencial de um sistema de molas ideais sobre as arestas da árvore e apresentou uma demonstração de que para qualquer escolha inicial das coordenadas dos pontos de Steiner $\vec{x}_k^{(0)}$, exceto para um conjunto de medida zero em $R^{(p-2)n}$, as iterações convergem monotonicamente para as únicas coordenadas dos pontos de Steiner ótimas, que minimizam o comprimento total da árvore. Como critério de parada, a condição a ser atendida é que todos os ângulos na árvore sejam maiores ou iguais a 120° .

3.1.3 O Método *Branch-and-Bound* de Smith

No algoritmo de Smith, os vetores topologia são minimizados pelo processo acima, à medida em que são construídos componente a componente. Se, por exemplo, estamos construindo um vetor topologia com 12 componentes, minimizações são realizadas desde a subárvore inicial correspondente ao vetor (). Após a inclusão da primeira componente, a árvore é novamente minimizada, e assim por diante, verificando-se sempre o comprimento total de cada subárvore e armazenando os resultados, até que as 12 componentes estejam inseridas.

A vantagem deste procedimento baseia-se no fato de que o comprimento de uma árvore mínima com p pontos dados não pode ser menor que a árvore mínima conectando seus primeiros $q < p$ pontos dados. Se ao inserir o q -ésimo ponto dado, referente à coordenada $q-3$, encontrarmos uma árvore com comprimento maior que a menor árvore com p pontos já encontrada, poderemos desprezar não só o próprio

vetor topologia que estamos construindo, mas também todos os vetores que possuam aquele mesmo prefixo ruim.

A partir daí, basta que se realize um procedimento *backtracking* para eliminar famílias inteiras de soluções, que não precisarão mais ser minimizadas, sendo este o princípio básico do método *branch-and-bound* de Smith.

3.2 Alguns Resultados Computacionais

Em termos práticos, o algoritmo de *força bruta* de Smith é muito rápido para configurações de poucos pontos, tornando-se bastante lento, por sua complexidade computacional, para configurações com pouco mais de 10 pontos dados. Entretanto, até o momento, é possivelmente o único método exato, funcionando para dimensões $n \geq 3$, razão por que o utilizaremos para comparações de razões de Steiner das heurísticas apresentadas nesta tese.

A versão do programa de Smith que utilizaremos nesta tese é, na verdade, uma versão corrigida do código C apresentado em [53]. Em nosso trabalho com soluções heurísticas, verificamos que o programa de Smith muitas vezes apresentava soluções inconsistentes, com razões de Steiner excessivamente altas. Tais soluções erradas foram eliminadas, realizando-se algumas pequenas alterações sobre o código, acrescentando pré-otimizações em alguns pontos. Esta nova versão parece funcionar muito bem, e nenhuma inconsistência tem sido detectada. O tempo de computação foi em média muito pouco afetado por tais correções; na verdade, foi ligeiramente reduzido.

Na tabela abaixo apresentamos vários conjuntos de 1.000 configurações tridimensionais de pontos dados, distribuídos aleatoriamente em cubos unitários. São apresentados a razão de Steiner média, o desvio padrão e os tempos médios de UCP, em segundos, para cada conjunto de $p = 3 \dots 11$ pontos dados. Os computadores utilizados, aqui e nos demais experimentos computacionais apresentados ao longo desta tese, foram máquinas *Sun Ultra 1*.

p	ρ médio	Desvio padrão	UCP médio (s)
3	0,964875	0,034326	0,012
4	0,954396	0,030591	0,019
5	0,948091	0,027433	0,037
6	0,948861	0,023776	0,093
7	0,945709	0,021279	0,32
8	0,946761	0,019507	1,4
9	0,946397	0,017754	7,8
10	0,946758	0,017531	43
11	0,946831	0,015840	240

Tabela 1: Resultados obtidos pelo algoritmo exato de Smith para conjuntos de 1.000 configurações aleatórias de p pontos dados em um cubo unitário (dimensão $n = 3$). São apresentados, para cada valor de p , a razão ρ de Steiner média, o desvio padrão e o tempo médio de UCP em segundos.

Realizamos testes de aderência (χ^2) para os conjuntos $p = 8\dots 11$, supondo que as distribuições dos valores de ρ para cada um destes conjuntos eram distribuições normais, com médias dadas pelos valores médios de ρ da tabela e seus respectivos desvios padrão. Verificou-se que os valores de ρ para cada um destes conjuntos parecem, de fato, seguir distribuições aproximadamente normais, em um nível de significância em geral acima de $\alpha = 20\%$, exceto para o caso $p = 10$, cujo nível de significância foi de apenas 1,3%. Contudo, acreditamos que o valor de α , neste caso, possa ser aumentado, por exemplo, através da utilização de escolhas mais adequadas da média e do desvio padrão considerados ou do número de observações realizadas. A informação da forma normal da distribuição das razões de Steiner, juntamente com a informação da tendência à redução do desvio padrão com o aumento de p , que podemos observar na tabela, é útil para se verificar o quanto pode ser rara uma distribuição de muitos pontos dados com $\rho \approx 1$. Voltaremos a este assunto mais à frente.

4 Métodos Heurísticos

Neste capítulo, apresentaremos algumas abordagens heurísticas para o PSE em dimensão $n \geq 3$. Iniciaremos com algumas heurísticas desenvolvidas anteriormente por outros autores. A seguir, apresentaremos aquelas que desenvolvemos em nosso projeto de doutorado, quais sejam, um esquema dinâmico de relaxação e seu desenvolvimento em um algoritmo *multi-start*, uma busca local de topologias cheias e sua aplicação no contexto de uma *busca tabu* e, finalmente, um *algoritmo genético* e um algoritmo de *otimização microcanônica* baseados no vetor topologia de Smith. Apresentaremos, também, alguns resultados computacionais.

4.1 Heurísticas Anteriores

Apresentaremos nesta seção algumas heurísticas para o PSE em dimensão $n \geq 3$, previamente desenvolvidas por outros autores, cujos resultados usaremos posteriormente para uma comparação de desempenhos. Iniciaremos, apresentando alguns resultados relacionados à construção da árvore geradora mínima — AGM — que, além de ser uma primeira aproximação de uma árvore de Steiner, usualmente fornece soluções iniciais para heurísticas que buscam resultados mais aproximados.

4.1.1 A Árvore Geradora Mínima

No caso euclidiano, uma árvore geradora mínima, AGM, consiste em um conjunto de segmentos de reta, conectando todos os p pontos dados, sem a adição de novos pontos, e de comprimento total mínimo [4, 50].

Um algoritmo apresentado por Prim [49] para construir uma AGM é o seguinte: inicie a árvore com um único ponto dado; em seguida, acrescente à árvore a menor aresta conectando um ponto dado da árvore a um ponto dado ainda não pertencente à árvore; repita este processo até que todos os pontos estejam conectados. A estrutura resultante será uma AGM, conectando os p pontos através de $p - 1$ arestas.

O algoritmo de Prim pode ser implementado em tempo $O(np^2)$. No plano, este algoritmo pode ter sua complexidade de tempo reduzida para $O(p \log p)$, utilizando-se estruturas bem conhecidas da geometria computacional, tais como *diagramas de Voronoi* e *triangulações de Delaunay* [4, 21, 50]. Neste trabalho, calcularemos AGMs, utilizando a rotina em C do algoritmo de Prim, para n dimensões, implementada no programa de Smith [53].

A tabela seguinte contém alguns resultados de um estudo experimental da AGM para distribuições aleatórias de pontos, em hipercubos unitários, utilizando a versão de Smith do algoritmo de Prim. São apresentados os valores máximos, médios e mínimos dos comprimentos da AGM, bem como desvios padrão e tempos médios de UCP, para 10^{5-a} distribuições com $p = 10^a$ pontos dados, onde a é um expoente inteiro, variando de 1 a 4. Os tempos médios de UCP, referentes a uma estação de trabalho *Sun Ultra 1*, foram obtidos através da função *rusage[user]* do compilador C, e são apresentados em segundos.

Podemos perceber na tabela acima um aumento do tempo de computação aproximadamente quadrático com relação a p e aproximadamente linear com relação a n .

A seguir, descreveremos em linhas gerais algumas heurísticas que buscam soluções melhores que as fornecidas pela AGM. Utilizaremos alguns dos resultados obtidos por estas heurísticas para uma comparação de performances com relação às heurísticas por nós desenvolvidas e apresentadas nesta tese.

4.1.2 A Heurística de Lundy

A heurística de Lundy [29] fornece soluções para o PSE em dimensão n qualquer. Constitui-se na aplicação de um técnica do tipo *annealing* [25] ao *problema da árvore evolucionária*, que consiste em construir uma árvore de descendência, usando medidas de frequências genéticas, para identificar o grau de parentesco entre diversas populações. Este problema pode ser relacionado ao PSE através do chamado *método*

p		n			
		3	4	5	10
10 (10.000 pbs.)	Máximo	4,689748	6,065290	7,085945	10,722848
	Mínimo	1,936014	2,284137	3,266352	6,603894
	Médio	3,237494	4,255035	5,148893	8,661695
	DP	0,387494	0,450991	0,498898	0,584817
	tempo UCP	0,000245	0,000299	0,000358	0,000649
100 (1.000 pbs.)	Máximo	16,583630	25,835188	34,856674	73,306927
	Mínimo	13,603007	21,506379	29,916229	64,959464
	Médio	15,015500	23,753077	32,311498	69,203680
	DP	0,448096	0,661176	0,847766	1,323936
	tempo UCP	0,0169	0,0205	0,0242	0,0420
1.000 (100 pbs.)	Máximo	69,015175	130,108007	198,442626	531,842136
	Mínimo	65,339926	125,533579	191,286826	518,628340
	Médio	67,037024	127,805872	194,480740	525,474319
	DP	0,640758	0,948189	1,426271	2,816326
	tempo UCP	1,71	2,04	2,42	4,20
10.000 (10 pbs.)	Máximo	306,109403	699,744418	1196,565710	4036,582162
	Mínimo	302,976040	695,833740	1186,966876	4016,562578
	Médio	304,717028	698,422590	1190,640848	4027,986632
	DP	0,955207	1,184866	3,025804	6,825276
	tempo UCP	204	240	271	449

Tabela 2: Valores máximos, mínimos e médios do comprimento e respectivos desvios padrão (DP) e tempos médios de UCP em segundos (tempo UCP) das AGMs, obtidos para vários conjuntos de pontos dados, distribuídos aleatoriamente em hipercubos unitários. Para cada dimensão foram tratados conjuntos de 10^{5-a} distribuições com 10^a pontos, onde a é um expoente inteiro, variando de 1 a 4.

de evolução mínima, que trata árvores de Steiner mínimas $(p-1)$ -dimensionais como o melhor critério para a construção de árvores evolucionárias adequadas a problemas com p populações [59, 11].

Em linhas gerais, o método de Lundy parte de uma árvore evolucionária aleatória, sobre a qual são efetuadas perturbações consecutivas da topologia e das posições dos pontos de Steiner. As perturbações na topologia são realizadas, retirando-se aleatoriamente *arestas externas*, ou seja, arestas conectando diretamente um ponto dado a um ponto de Steiner, e reconectando-as sobre alguma outra aresta, também escolhida aleatoriamente dentre as arestas restantes da árvore. Uma vez realizada a perturbação da topologia, são realizadas também perturbações sobre os pontos de Steiner, de maneira a conduzi-los à sua posição correta, de tal forma que suas três arestas adjacentes se encontrem segundo ângulos mútuos de 120° , o que reduz localmente o comprimento da árvore.

O esquema de perturbação segue um procedimento *annealing*, que aceita a perturbação sempre que a nova solução possui comprimento menor ou igual ao da solução atual; caso contrário, a nova solução ainda poderá ser aceita de acordo com uma dada probabilidade dependente do comprimento da nova solução. Tal probabilidade é forçada a reduzir-se gradativamente no decorrer das iterações, até que o algoritmo convirja para uma única solução de comprimento localmente mínimo.

São fornecidos resultados computacionais para distribuições de 20 e 50 pontos, com respectivamente 19 e 49 coordenadas escolhidas aleatoriamente no intervalo $[-10, 10]$. O algoritmo é reiniciado 10 vezes para cada uma destas duas distribuições e para diferentes valores de parâmetros de controle, partindo sempre de soluções iniciais aleatórias diferentes. Os dados de entrada não são apresentados, sendo informados apenas os comprimentos das árvores obtidas, o que dificulta o julgamento da qualidade das soluções.

O melhor resultado obtido para o problema de 20 pontos foi uma árvore com comprimento 433,78, obtida em cerca de 23 segundos em um computador IBM

3081. Para tempos médios de 23 segundos, o melhor comprimento médio foi de 436,17, obtido para uma dada escolha de parâmetros. Comprimentos médios apenas ligeiramente melhores foram obtidos, entretanto, em tempos de computação uma ordem de grandeza maior. Já para o problema de 50 pontos, o melhor comprimento e o melhor comprimento médio foram 1774,25 e 1783,82, respectivamente, com tempos de computação médios de cerca de 270 segundos.

4.1.3 A Heurística Kalpakis - Ravada - Sherman

Kalpakis e Sherman [24] propuseram uma heurística para o PSE em R^n , posteriormente desenvolvida e implementada para R^2 e R^3 por Ravada e Sherman [51]. A heurística Kalpakis - Ravada - Sherman (KRS) basicamente particiona a distribuição de pontos dados em vários subconjuntos, aplica um procedimento de minimização para cada subconjunto e então reconcatena toda a distribuição.

Cada subconjunto possui no máximo t pontos dados, $2 \leq t \leq p$. Este é um parâmetro que pode ser usado para ajustar o compromisso entre qualidade da solução e o tempo de computação exigido, pois soluções melhores, com maior demanda de tempo, são alcançadas para valores maiores de t . A partição é realizada da seguinte forma: primeiramente divide-se a distribuição em duas, através do ponto dado cuja coordenada x_1 é a mediana das coordenadas x_1 de todos os pontos dados; a seguir, é realizado o mesmo procedimento para cada uma das duas distribuições resultantes, desta vez efetuando as subdivisões através das medianas das coordenadas x_2 ; o procedimento segue, até que os subconjuntos possuam tamanho máximo t .

Na implementação de Ravada e Sherman [51], as minimizações são feitas usando-se o algoritmo de Smith, que procura uma solução exata ou aproximada para cada subconjunto durante um tempo τ prefixado. A reconcatenação final é realizada, calculando-se a AGM para toda a distribuição de pontos dados e pontos de Steiner encontrados. Um pós-processamento também é aplicado para remover arestas desnecessárias.

As soluções obtidas são, então, comparadas com aquelas fornecidas pelo algoritmo de Smith para toda a distribuição. O algoritmo de Smith, em geral, exige um tempo demasiadamente longo para convergir a uma solução exata, mas no decorrer de seu funcionamento apresenta algumas soluções parciais cada vez mais próximas do ótimo. Assim, o procedimento usado por Ravada e Sherman, e também por alguns outros autores, é tratar o algoritmo de Smith como uma heurística, mantendo-o em funcionamento por um certo período prefixado de tempo, após o qual recolhe-se a melhor solução encontrada.

Foram reportados alguns resultados referentes a distribuições aleatórias de pontos dados no cubo $[0, 100]^3$, utilizando-se uma versão em C do algoritmo em estações de trabalho *Silicon Graphics IRIS4D (Crimson and Indigo)*. A comparação com os resultados de Smith é realizada através da razão $\hat{R} = c_h/c_s$, onde c_h é o comprimento médio das árvores encontradas pela heurística KRS e c_s é o comprimento médio das árvores *heurísticas* apresentadas pelo algoritmo de Smith. Os melhores resultados em $n = 3$ são:

- Para 10 distribuições de 25 pontos, o melhor valor de \hat{R} foi de $597,84/588,90 = 1,0151$, correspondente a um parâmetro $t = 13$. Ou seja, obteve-se um comprimento médio a cerca de 1,5% do valor fornecido pelo algoritmo de Smith. O comprimento médio da árvore geradora foi de $c_{AGM} = 618,21$, fornecendo uma razão de Steiner média de $\rho_{KRS} = 0,96705$. O tempo médio exigido pela heurística neste caso foi de 18,47 segundos, contra 25 segundos do algoritmo de Smith. Com parâmetro $t = 5$, as soluções foram obtidas bem mais rapidamente, em média em 0,34 segundo, mas com razão de Steiner média $\rho_{KRS} = 0,99028$.
- Para 10 distribuições de 60 pontos, o melhor valor foi $\hat{R} = 0,9923$, para $t = 31$, equivalendo a uma razão de Steiner média $\rho_{KRS} = 0,96665$. Aqui, o comprimento médio é menor que aquele fornecido pelo algoritmo de Smith. O tempo médio, obtido para uma implementação distribuída, foi de 107,50

segundos, contra 200 segundos do algoritmo de Smith.

4.1.4 A Heurística de MacGregor Smith - Weiss - Patel

Esta é uma heurística com complexidade de tempo $O(p^2)$ que utiliza uma triangulação de Delaunay em $n = 3$ dimensões — uma *tetraedrização de Delaunay* — para calcular árvores de Steiner subótimas [55]. Baseia-se na conjectura de Smith & Smith [54] (ver Capítulo 2 desta tese) de que o ínfimo ρ_3 corresponde à estrutura conhecida como *sausage*.

Fundamentalmente, dada uma distribuição de pontos, a heurística de MacGregor Smith - Weiss - Patel (SWP) realiza uma *tetraedrização de Delaunay* e utiliza a AGM como guia para construir seqüências de tetraedros empilhados, com topologia do tipo *sausage*, e para identificar possíveis junções entre cadeias diferentes de tetraedros. Toda a estrutura é, então, decomposta em subestruturas menores, resultantes da combinação de cadeias de tetraedros vizinhas, segundo o tipo de junção, para as quais são calculadas subárvores de Steiner mínimas. O procedimento de decomposição é conduzido de forma a reduzir o comprimento esperado da estrutura final, usando como protótipo distribuições especiais compostas por tetraedros regulares. Ao fim de todo o processo, as subárvores de Steiner mínimas são concatenadas, dando origem a uma solução heurística para a distribuição.

MacGregor Smith et al. implementaram esta heurística utilizando o algoritmo de Smith para calcular as subárvores de Steiner mínimas. Embora tenha sido proposta como uma heurística para distribuições gerais de pontos dados, testes foram realizados apenas para distribuições especiais de pontos localizados nos vértices de tetraedros regulares justapostos. Tais estruturas especiais em geral apresentam razões de Steiner ρ bastante reduzidas, algumas vezes próximas ao ínfimo. Esta é uma informação útil no julgamento da qualidade de uma solução heurística, pois mesmo que não se conheça a razão de Steiner ótima, pode-se esperar ao menos um valor bastante reduzido.

Vários testes foram realizados pelos autores, utilizando distribuições especiais de até pouco mais de 60 pontos dados. As razões ρ_{SWP} de Steiner das soluções heurísticas encontradas, calculadas como a média aritmética das razões de Steiner de suas respectivas subárvores componentes, foram comparadas àquelas obtidas *heuristicamente* pelo algoritmo de Smith, após um período predeterminado de tempo, geralmente, o dobro do tempo exigido pela heurística SWP. De fato, foram encontrados valores bastante reduzidos de ρ_{SWP} , em geral pouco acima de 0,800 e usualmente inferiores àquelas obtidos pelo algoritmo de Smith. Os tempos de computação da heurística SWP reportados variam entre 30 e 700 segundos, porém são apresentados sem a especificação do equipamento computacional utilizado.

4.1.5 As Heurísticas de Pereira et al.

Em sua dissertação de Mestrado, Pereira [46] propõe três heurísticas para $n = 3$ baseadas em um método de subdivisão da distribuição de pontos dada em sub-regiões de poucos pontos, obtenção das subárvores de Steiner cheias para estas regiões e posterior concatenação das subárvores obtidas. Cada sub-região pode englobar três ou quatro pontos dados, de forma que a computação de cada subárvore pode ser realizada de maneira bastante rápida, usando-se, por exemplo, o algoritmo de Smith, e em complexidade de tempo constante.

A primeira heurística é chamada pelo autor de *Algoritmo Básico* (AB) e é semelhante a um trabalho anterior de Pereira et al. [47]. Esta heurística parte da AGM, utilizada como um guia para encontrar distribuições de três e quatro pontos, com topologia cheia, de tal modo a obter as maiores reduções locais de comprimento. As subárvores correspondentes às maiores reduções são agrupadas em uma lista de prioridades, ordenadas em ordem decrescente das reduções obtidas. A árvore solução é construída segundo uma estratégia *gulosa*, concatenando-se em seqüência as diversas subárvores da lista de prioridades, sempre que tal concatenação não gerar um ciclo, até que se obtenha uma árvore interligando toda a distribuição dada de

pontos.

Em alguns casos, a solução assim obtida não será uma árvore conexa, mas uma *floresta* de subárvores desconectadas entre si. Neste caso, utilizam-se algumas arestas da AGM, chamadas *arestas não visitadas*, para se obter uma única árvore conexa.

Este é um algoritmo muito rápido, apresentando em poucos segundos soluções com razão de Steiner em geral inferior a 0,960, para configurações de até 500 pontos dados. Tais soluções são um pouco melhoradas pelos dois outros algoritmos propostos.

O segundo algoritmo, chamado pelo autor de *Algoritmo Melhorado* (AM), é resultado de algumas alterações incorporadas ao Algoritmo Básico (AB), buscando-se maneiras adequadas de se obter árvores cheias de quatro pontos, nos locais onde as arestas não visitadas são inseridas, de forma a reduzir o comprimento local da árvore. Este algoritmo demanda um tempo de computação cerca de 20% maior do que o exigido pelo algoritmo AB. Entretanto, apresenta soluções um pouco melhores, com razões de Steiner geralmente em torno 0,956. Tanto este algoritmo quanto o anterior apresentam uma complexidade de tempo linear, dada uma AGM. Desta forma, a heurística completa tem a complexidade de tempo do cálculo da AGM, que é de $O(p^2)$.

O terceiro algoritmo é semelhante aos dois anteriores; entretanto, ao invés de utilizar a AGM como guia na subdivisão da distribuição dada de pontos, utiliza uma estrutura mais geral chamada *Grafo de Gabriel*, GG, que pode ser entendido como uma subárvore de uma *tetraedrização de Delaunay* [50, 55]. O autor refere-se a esta heurística como *algoritmo AGG*. Neste algoritmo, a idéia é permitir a obtenção de uma maior variedade de árvores cheias de três e quatro pontos dados, possibilitando maiores reduções de comprimento, ainda que a um custo computacional maior.

O algoritmo AGG pressupõe a existência da AGM e de uma solução inicial I , calculadas pelo Algoritmo Melhorado (AM). Como antes, as subárvores cheias, calculadas com três e quatro pontos, são incluídas em uma lista ordenada decrescente-

mente em relação às reduções locais de comprimento obtidas. A lista de prioridades encontrada anteriormente pelo AM também é utilizada aqui. Partindo-se da solução inicial I , é aplicado um procedimento iterativo de reconstrução de novas árvores, de comprimentos cada vez menores, a partir de cada subárvore da lista. Tal procedimento origina uma árvore final que não pode ser maior que a árvore inicial I , mas eleva a complexidade do algoritmo para $O(p^3)$, devido à reconstrução completa da árvore a cada tentativa de inserção de uma nova subárvore.

As soluções encontradas pelo AGG são, em geral, um pouco melhores do que aquelas encontradas pelo AM, mas o tempo exigido de computação aumenta rapidamente com p . Para distribuições aleatórias de 500 pontos dados, por exemplo, são reportados tempos médios de cerca de 29 horas de processamento. O AGG é, portanto, mais adequado para distribuições com um número não muito alto de pontos.

4.2 Um Esquema Dinâmico de Relaxação

Nesta seção, apresentaremos uma heurística que é uma extensão quase direta, para $n \geq 3$, de uma heurística desenvolvida no plano por Chapeau-Blondeau et al. [1]. Esta é um esquema que simula a evolução dinâmica de uma película de sabão sujeita a forças de tensão superficial.

Como vimos no Capítulo 2, o modelo de película de sabão, no qual se baseia o esquema de relaxação de Chapeau-Blondeau et al., é um modelo físico adequado para a obtenção de soluções aproximadas para o PSE. Naquele modelo, considerávamos uma película de sabão presa a bastões interligando duas placas paralelas. Sujeita a forças de tensão, de mesma intensidade, a película evoluía para uma configuração de equilíbrio, ou seja, uma configuração de energia mínima, correspondente a um mínimo do comprimento da película. Ao final do processo, os bordos da película nas placas descreviam, então, uma árvore de Steiner *localmente* mínima, possivelmente

uma solução ótima para o PSE.

4.2.1 Heurística no Plano

A heurística de Chapeau-Blondeau et al. utiliza uma simulação computacional desse modelo. Partindo de uma árvore inicial com topologia cheia, temos um primeiro estágio na composição das forças de tensão superficial. Sujeita a estas forças, a película *relaxa* para uma nova configuração, possivelmente com topologia diferente, e o processo segue iterativamente até que se encontre uma configuração de equilíbrio, que corresponderá a uma árvore de Steiner localmente mínima, candidata a ASM.

Esta é uma heurística bastante rápida. Os processos de relaxação são todos locais, com exigências de tempo de computação e de memória lineares em p , e a complexidade $O(p \log p)$ da heurística deve-se apenas à construção da solução inicial, que é derivada da árvore geradora mínima (AGM). Os autores conseguiram obter soluções heurísticas de boa qualidade para distribuições de até 10.000 pontos dados. No entanto, não adotaram o procedimento, comum em algoritmos no plano, de subdividir a distribuição dada em sub-regiões de poucos pontos e topologia cheia. Talvez por isso, em nossa extensão ao caso $n \geq 3$, conseguimos resultados similares, que nos fazem acreditar que soluções exatas para distribuições de até 10.000 pontos dados também possam ser factíveis para $n \geq 3$ (ver argumentação no início da seção 2.3).

Descreveremos, a seguir, as linhas gerais da heurística de Chapeau-Blondeau et al. no plano, após o que apresentaremos os aspectos principais de nossa extensão desta heurística para o caso $n \geq 3$.

Solução inicial. Como dissemos, a heurística de Chapeau-Blondeau et al. parte de uma solução inicial construída a partir da árvore geradora mínima (AGM). Dada uma distribuição com p pontos, a construção da AGM pode ser realizada, no caso plano, em tempo $O(p \log p)$ [4, 21]. A solução inicial é construída, inserindo-se $p - 2$ pontos de Steiner na AGM, de forma a se obter uma árvore de Steiner inicial cheia,

da seguinte forma.

Suponha um ponto dado P_1 que na AGM possua grau $g_1 > 1$. Desconecte dois dos seus vizinhos e os reconecte a um ponto de Steiner S_1 , posicionado próximo a P_1 , e conecte S_1 a P_1 para completar o grau 3 de S_1 . Os vizinhos de P_1 manterão seu grau, mas o grau g_1 de P_1 será reduzido de uma unidade. Se g_1 ainda for maior que 1 na nova árvore, desconecte um dos vizinhos de P_1 e o reconecte, e também a P_1 , a um outro ponto de Steiner, S_2 , colocado nas proximidades de P_1 . Finalmente, desconecte P_1 de S_1 , reconectando-os a S_2 . Repita este procedimento até que o grau de P_1 seja reduzido a 1. A seguir, procure outro ponto dado com grau $g > 1$ na nova árvore e repita todo o procedimento. A Figura 2 ilustra o processo para um ponto dado de grau originalmente 4 na AGM. Isto deverá ser feito enquanto a árvore possuir algum ponto dado com grau maior que 1.

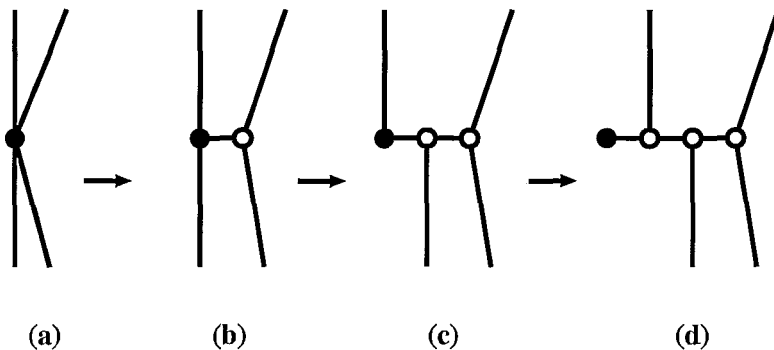


Figura 2: Exemplo de inserção de pontos de Steiner a partir de um ponto dado de grau 4 na AGM. Em (a), temos o ponto dado conectado a 4 vizinhos. Em (b), um ponto de Steiner é inserido, conectando-se ao ponto dado e a dois vizinhos deste. O grau do ponto dado é reduzido para 3. Em (c), mais um vizinho é desconectado do ponto dado. O quarto vizinho é desconectado em (d), quando o grau do ponto dado passa a ser 1. No processo, três pontos de Steiner foram gerados.

Ao final, só haverá pontos dados possuindo grau 1. Como em uma árvore com p pontos devemos ter exatamente $p - 1$ arestas, e sendo a soma dos graus em uma árvore igual ao dobro do número de arestas, vemos que a soma dos graus na AGM é de $g_{tot} = 2(p - 1)$. Destes, somente p graus (um para cada ponto dado) não são

reduzidos pela inserção de pontos de Steiner. Ou seja, são inseridos exatamente $2(p - 1) - p = p - 2$ pontos de Steiner. A árvore resultante do processo de inserção de pontos de Steiner é, portanto, uma árvore com topologia cheia.

Observe que dada uma AGM para uma distribuição de p pontos dados, o processo acima pode ser realizado em tempo $O(p)$. Isto ocorre, porque cada um dos p pontos da árvore geradora só é tratado uma vez. Além disso, como comentado pelos autores em [1], alguns argumentos geométricos simples (no plano) mostram que o grau de cada ponto dado na AGM não pode ser maior do que 6. De fato: suponha que um ponto P qualquer da AGM possua ao menos grau 7; neste caso, como a árvore está em um plano, ao menos duas arestas contíguas, conectando P a pontos P_a e P_b , fazem entre si um ângulo menor do que 60° ; considerando o triângulo PP_aP_b , temos que ao menos um dos ângulos, em P_a ou P_b , digamos que seja em P_a , deve ser maior que 60° ; o lado oposto a este ângulo, $\overline{PP_b}$ é, portanto, necessariamente maior do que $\overline{P_aP_b}$, por ser este oposto a um ângulo menor que 60° . Substituindo-se $\overline{PP_a}$ por $\overline{P_aP_b}$, a árvore continuaria conectada e obteríamos uma árvore geradora menor do que a AGM, o que é um absurdo; portanto, o grau de um ponto qualquer de uma AGM não pode ser maior que 6. Contudo, pode ser 6, no caso de os vizinhos do ponto em questão estarem todos a uma mesma distância, e posicionados como os vértices de um hexaedro regular do qual o ponto em questão é o centro. Portanto, 6 é o número máximo de vizinhos a serem tratados para cada ponto dado, o que garante a complexidade linear não só de tempo, como também de memória (em termos práticos, podemos representar toda a estrutura por uma matriz com $6p$ entradas, o que facilita bastante o trabalho de programação).

Uma vez de posse de uma árvore cheia inicial, o esquema de relaxação de Chapeau-Blondeau et al. segue basicamente dois processos iterativos: um processo de evolução e um processo de interação.

Processo de evolução. Este processo simula o deslocamento de cada ponto de Steiner S sujeito a forças de tensão superficial. Para simular o efeito de forças de

mesma intensidade, atuando sobre S segundo cada uma das três arestas das quais é extremo, podemos, sem perda de generalidade, considerar tais forças como sendo unitárias. Sendo A, B e C os três pontos vizinhos a S na árvore, forças unitárias atuando sobre S podem ser obtidas dividindo-se os vetores \overrightarrow{SA} , \overrightarrow{SB} e \overrightarrow{SC} pelos seus respectivos módulos. A força \overrightarrow{F} resultante sobre S será, portanto,

$$\overrightarrow{F} = \frac{\overrightarrow{SA}}{\|\overrightarrow{SA}\|} + \frac{\overrightarrow{SB}}{\|\overrightarrow{SB}\|} + \frac{\overrightarrow{SC}}{\|\overrightarrow{SC}\|} \quad (1)$$

Na simulação, o deslocamento em cada iteração é proporcional a \overrightarrow{F} . O coeficiente de proporcionalidade λ é gradualmente reduzido a zero, no decorrer das iterações, de forma a evitar oscilações em torno de uma posição de equilíbrio. Dessa forma, a resultante \overrightarrow{F} sobre S torna-se cada vez menor. Como \overrightarrow{F} resulta da composição de três vetores de mesmo comprimento (unitário), sua redução significa uma aproximação de S de uma posição na qual os três vetores perfazem ângulos mútuos de 120° . Ou seja, quanto mais S se aproxima de uma posição de equilíbrio, mais próximo estará da posição correta de um ponto de Fermat-Torricelli, o que implica em uma redução no comprimento total da árvore.

Tal processo de evolução é conduzido sobre uma topologia cheia fixa. Neste caso, mesmo a melhor árvore obtida pode ser muito ruim, como no exemplo ilustrado na Figura 3, no qual obtivemos uma solução com razão de Steiner $\rho > 1$.

Tal limitação é solucionada através do processo de interação que, como veremos a seguir, permite a reorganização da árvore em novas topologias cheias.

Processo de interação. Este processo ocorre sempre que o ponto S , pelo processo de evolução, se coloca a uma distância menor do que uma distância T , predeterminada, de um ponto de Steiner S' vizinho. Através dele torna-se possível mudar a topologia da árvore, como ilustrado na Figura 4.

A força resultante sobre S é calculada para cada uma das três triplas $\{x^1, x^2, S'\}$,

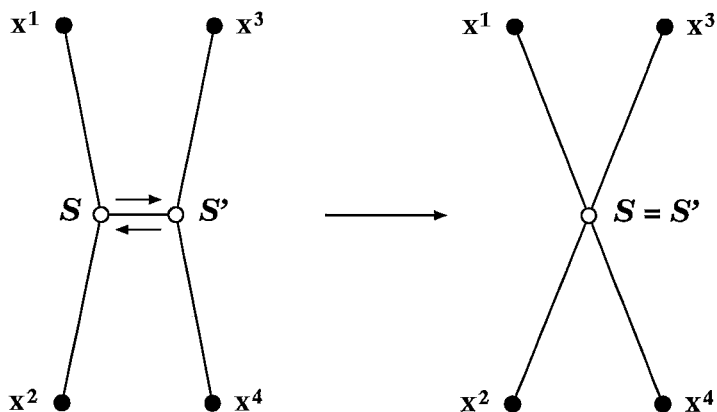


Figura 3: Neste exemplo, os pontos de Steiner S e S' , obedecendo a uma topologia fixa, degeneram-se em um único ponto $S = S'$ durante a processo de evolução. A árvore resultante, nesta configuração, possuirá um comprimento maior que o da AGM. A razão de Steiner, ρ , será portanto maior que 1.

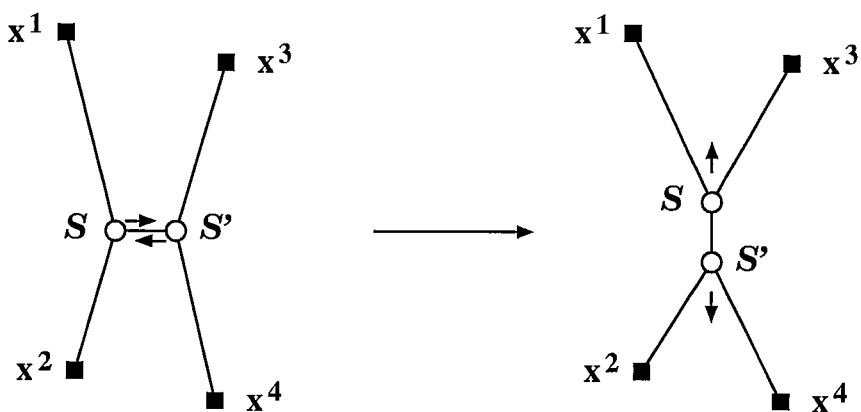


Figura 4: Pontos de Steiner vizinhos, S e S' , quando se aproximam de menos de uma distância T predeterminada sofrem um processo de interação, no qual suas conexões com os demais pontos podem ser alteradas. Neste exemplo, cada ponto x^1, x^2, x^3 e x^4 , representados por quadrados cheios, pode ser um ponto dado ou um ponto de Steiner.

$\{x^1, x^3, S'\}$ e $\{x^1, x^4, S'\}$. Estas triplas correspondem às três possibilidades de conexão entre os pontos x^1, x^2, x^3 e x^4 através de subtopologias cheias. A tripla $\{x^3, x^4, S'\}$ não é interessante, pois representa apenas uma permutação das posições de S e S' sem mudança na topologia de conexões da árvore.

As três forças resultantes obtidas são, então, comparadas. A tripla correspondente à maior força resultante fornecerá o novo, ou possivelmente o mesmo, conjunto de conexões de S . Uma troca complementar na vizinhança deve ser aplicada a S' , o que completa o processo de interação. Ao induzir localmente a maior força resultante, o processo de interação modifica a topologia na direção de maior redução local do comprimento da árvore.

Assim como o parâmetro λ , também o parâmetro T é gradualmente reduzido a zero no decorrer das iterações. Os autores dão uma interpretação interessante para o parâmetro T a partir da correlação de uma árvore de Steiner com uma configuração de energia mínima. Em uma situação onde comprimento equivale a energia, o parâmetro T pode ser entendido como uma temperatura física da árvore de Steiner. Pictoricamente, os pontos de Steiner, nas proximidades de suas posições corretas na árvore, estariam em um permanente movimento aleatório de magnitude T . Interação ocorreria sempre que duas nuvens de diâmetro T relacionadas a dois pontos de Steiner colidissem. A redução gradativa do parâmetro T para zero é justamente para reduzir a possibilidade de interação e para que a árvore possa ser *resfriada* até uma configuração de energia mínima.

Temos, assim, dois processos que simulam a dinâmica de uma película de sabão relaxando, segundo forças de tensão superficial, para uma configuração de equilíbrio estável. O procedimento iterativo geral da simulação é apresentado a seguir.

Heurística completa em $n = 2$. O algoritmo geral de Chapeau-Blondeau et al. é apresentado no quadro a seguir.

Faça a unidade de comprimento $\sigma_p = p^{-1/2}$.

Iniciação: construa uma árvore inicial com topologia de Steiner cheia.

Inicie T e λ como pequenas frações de σ_p .

Passo de iteração $k = 1$

Repita

Para cada ponto de Steiner S da árvore de Steiner

Evolução:

S está conectado a três vértices vizinhos A, B e C

Calcule a força resultante sobre S como $\vec{F} = \frac{\vec{SA}}{\|\vec{SA}\|} + \frac{\vec{SB}}{\|\vec{SB}\|} + \frac{\vec{SC}}{\|\vec{SC}\|}$

Desloque S por $\vec{OS} \leftarrow \vec{OS} + \lambda \vec{F}$

Se entre os vizinhos de S existe um ponto de Steiner distante de menos que T

Interação:

Seja S' o ponto de Steiner vizinho a S tal que $\|\vec{SS'}\| < T$

(S' pode ser A, B ou C . Se houver mais que um S' possível, então escolha um deles aleatoriamente).

Troque vizinhos entre S e S' como explicado no texto e na Figura 4.

Fim-~~Se~~

Fim-~~Para~~

Reduza os valores de T e λ de acordo com uma dada prescrição.

$k \leftarrow k + 1$

Até que um critério de convergência seja satisfeito.

Quadro 1: Algoritmo de Chapeau-Blondeau et al. para o PSE plano para p pontos dados, que resulta da aplicação do esquema de relaxação para uma árvore inicial com topologia de Steiner cheia.

Dada uma AGM para uma distribuição de p pontos dados e um número fixo de iterações, este algoritmo apresenta complexidade de tempo $O(p)$. Como vimos anteriormente, a construção da solução inicial, dada uma AGM, é realizada em tempo $O(p)$. Os dois processos de evolução e interação são realizados $p - 2$ vezes em cada iteração e envolvem apenas cálculos locais relacionados aos três vizinhos do ponto de Steiner em questão, de forma que cada iteração também é realizada em tempo $O(p)$. A heurística completa, portanto, apresenta a complexidade de tempo da construção da AGM, sendo, então, de $O(p \log p)$. Por outro lado, a solução

inicial pode também ser construída a partir de uma AGM heurística, obtida em tempo linear. Neste caso, teremos uma heurística completa para o PSE em tempo $O(p)$, embora provavelmente menos eficiente.

O algoritmo acima foi implementado e testado pelos autores para configurações de p pontos distribuídos aleatoriamente em um quadrado unitário. A variável σ_p no algoritmo pode ser entendida como uma unidade natural de comprimento, uma separação média entre um ponto dado e seu vizinho mais próximo no quadrado unitário. A prescrição utilizada para a redução dos valores dos parâmetros T e λ foi a seguinte: inicie a redução do valor de T , com λ constante, na iteração $k = 100$; T é reduzido de um quinto de seu valor inicial a cada vinte iterações, anulando-se na iteração $k = 180$. Inicie a redução de λ na iteração $k = 200$, com seu valor sendo dividido por dois a cada vinte iterações, até a iteração $k = 400$, quando o programa pára.

Apesar da baixa complexidade, alguns bons resultados foram obtidos, para alguns valores de T e λ , para distribuições de até 10.000 pontos dados. Obteve-se reduções em média de 2,8% com relação ao comprimento da AGM (ou alternativamente, uma razão de Steiner ρ de 0,972 em média). Segundo os autores, a redução esperada seria menor do que 3,5% (ρ maior do que 0,965), o que está razoavelmente próximo do que foi obtido. Em nosso desenvolvimento para o caso $n \geq 3$, obtivemos resultados ao menos tão bons quanto os relatados acima e um pouco melhores em média, como veremos a seguir.

4.2.2 Extensão para o caso $n \geq 3$

Apresentaremos nesta seção uma extensão da heurística de Chapeau-Blondeau et al. para dimensões $n \geq 3$ [41, 45, 33]. O algoritmo que usamos é basicamente o mesmo do quadro 1. Não nos preocupamos, ao menos neste primeiro momento, em como interpretar a dinâmica de uma bolha de sabão evoluindo entre placas paralelas nestas dimensões mais altas. Este é certamente um problema interessante e não tri-

vial, e possivelmente pode nos trazer elementos importantes relacionados ao próprio desenvolvimento de algoritmos para o PSE. Entretanto, observando o algoritmo de Chapeau-Blondeau et al., nos parece que o aspecto fundamental é o da composição linear de três forças de mesma intensidade, aqui representadas por vetores unitários, que nos fornecem uma direção de decréscimo do comprimento da árvore. Sabendo que o grau de um ponto de Steiner é de exatamente 3 em qualquer dimensão $n \geq 2$, concluímos que tanto o processo de evolução quanto o de interação não sofrem maiores alterações mesmo em dimensões $n \geq 3$. Devido a isso, nestes dois processos mantivemos os mesmos procedimentos baseados em composições de forças, desta vez atuando em $n \geq 3$ dimensões, supondo ser isto suficiente para conduzir a árvore solução a uma configuração de equilíbrio adequada, onde seu comprimento possa estar muito próximo de seu valor mínimo.

Entretanto, algumas considerações foram necessárias, principalmente com relação à obtenção da árvore inicial, cuja construção é realizada, visitando-se uma vez cada ponto dado e seus vizinhos na AGM seguindo Chapeau-Blondeau et al. Para que não se tenha que percorrer toda a AGM p vezes à procura dos vizinhos de cada ponto dado, o que implicaria em uma complexidade de tempo, no caso plano, de $O(p^2)$ nesta fase, podemos no lugar disso, sendo a AGM uma árvore orientada, percorrer a lista apenas uma vez, verificando qual é o *pai* de cada ponto dado. Os resultados podem ser armazenados em uma matriz com p linhas, cada linha representando um ponto dado *pai* e cada coluna representando o conjunto de seus respectivos *filhos* na AGM orientada. Vimos que o número de vizinhos a um ponto dado na AGM no plano não pode ser maior que 6, de forma que a matriz final possuirá uma dimensão máxima de $6p$, sendo obtida em tempo $O(p)$ e permitindo que a árvore inicial seja obtida também em tempo linear.

Porém, a prescrição acima não é adequada quando estamos trabalhando no contexto de dimensões mais altas, pois o número máximo possível de vizinhos a um ponto na AGM cresce bastante à medida em que o valor de n é aumentado. Este número está relacionado ao *kissing number*, o número máximo de hiperesferas

que podem tocar ao mesmo tempo uma única hiperesfera central, considerando-se que todas as hiperesferas são do mesmo tamanho e que suas hipersuperfícies não se atravessem [2, 31, 6]. Denotando o *kissing number* em dimensão n por τ_n , pode-se mostrar que o grau máximo possível g_n de um ponto em uma AGM, com p pontos em dimensão n , é tal que

$$\min(\tau_n, p - 1) \leq g_n \leq p - 1 \quad (2)$$

Vemos de imediato que g_n não pode ser maior que $p - 1$, pois $p - 1$ é exatamente o número máximo de vizinhos que um ponto pode ter em qualquer árvore. Vamos, então, considerar uma AGM na qual tenhamos $\tau_n \leq p - 1$. Podemos ver que $g_n \geq \tau_n$ considerando uma configuração ótima para o problema do *kissing number* em dimensão n , ou seja, uma hiperesfera interna de diâmetro d , em dimensão n , em contato com τ_n outras hiperesferas externas, idênticas à primeira, sem que haja interpenetração entre hiperesferas. Suponha que os centros das hiperesferas correspondam à distribuição de pontos dados para a qual queremos encontrar uma AGM. Como o diâmetro de cada hiperesfera é d , os τ_n pontos centrais das τ_n hiperesferas externas estão todos a uma distância d do ponto central da hiperesfera interna. Como não pode haver interpenetração de hiperesferas, quaisquer dois pontos centrais de hiperesferas externas P_k e P_l , $1 \leq k, l \leq \tau_n$, $k \neq l$, devem manter entre si uma distância maior ou igual a d . Assim sendo, podemos simplesmente conectar o ponto central da hiperesfera interna aos τ_n centros das hiperesferas externas, obtendo assim uma AGM de comprimento $d\tau_n$ cujo ponto central possui grau $g = \tau_n$. Como $g_n \geq g$, temos, portanto, $g_n \geq \tau_n$.

Alguns valores conhecidos de τ_n são $\tau_2 = 6$, $\tau_3 = 12$ e $\tau_8 = 240$. Em várias outras dimensões são conhecidos apenas limites inferiores e superiores, por exemplo, $24 \leq \tau_4 \leq 25$ e $840 \leq \tau_{12} \leq 1416$ [31], e limites assintóticos conhecidos estabelecem um crescimento exponencial de τ_n com relação a n [2].

Assim, de acordo com a eq.(2), temos que, para dimensão n suficientemente alta, o número máximo de vizinhos a um ponto qualquer da AGM é de $g_n = p - 1$. De

acordo com a prescrição acima, para encontrar os vizinhos de cada ponto, e levando-se em consideração que cada ponto será representado por n coordenadas cartesianas, a complexidade de memória passaria a ser de $O(np^2)$.

Para resolver este problema, reduzindo a complexidade de memória e de tempo para um valor mínimo $O(np)$, adotamos uma outra prescrição. Esta consiste em criar uma lista L com $p - 1$ entradas contendo todos os filhos na AGM agrupados segundo seus pais. Assim, as primeiras q_1 posições são ocupadas pelos q_1 filhos do ponto 1 (a raiz), as q_2 posições seguintes são ocupadas pelos q_2 filhos do ponto 2 e assim por diante, até o último dos $p - 1$ filhos (o ponto raiz 1 não pode ser filho de nenhum outro ponto, daí o total de $p - 1$ filhos). Esta lista pode ser construída em tempo $O(p)$ com o auxílio de duas outras listas, L_a e L_b , contendo respectivamente o número de filhos de cada nó e a posição do primeiro filho de cada nó na lista L . O algoritmo geral consistirá de 3 procedimentos lineares, descritos a seguir, cada um relacionado à construção de uma das listas:

1. a primeira lista a ser construída é a lista L_a , na qual a primeira posição corresponde ao número de filhos do primeiro ponto 1, a segunda ao número de filhos do ponto 2, e assim por diante; a lista L_a é iniciada com *zero* em todas as suas posições e construída, percorrendo-se uma vez a AGM; para cada ponto, verifica-se qual é o seu pai i e então incrementa-se o valor $L_a[i]$ de uma unidade;
2. L_b é construída, percorrendo-se uma vez a lista L_a ; a primeira posição de L_b é 1, correspondente à posição do primeiro filho de 1 na lista L a ser obtida; a posição i , $2 \leq i \leq p$ em L_b será dada por $L_b[i] = L_b[i - 1] + L_a[i - 1] - 1$;
3. a lista L é construída, percorrendo-se mais uma vez a AGM; para cada ponto j , verifica-se qual é o seu pai i , fazendo $L[L_b[i]] = j$ e incrementando-se $L_b[i]$ de uma unidade.

Ao final, a lista L contém, em seqüência, os filhos de cada ponto i na AGM, agrupados em ordem crescente de i . A lista L_b pode ser restaurada simplesmente

fazendo-se $L_b[i] = L_b[i] - L_a[i]$. Esta restauração não é estritamente necessária, mas pode simplificar a utilização de L_b .

De posse das três listas acima, já podemos identificar os vizinhos de cada ponto j na AGM. Estes serão os seus $L_a[j]$ filhos, agrupados na lista L , a partir da posição $L_b[j]$ na lista L_b restaurada e o seu pai i na AGM. A partir daqui, a construção da árvore inicial com topologia de Steiner pode seguir normalmente através do procedimento de Chapeau-Blondeau et al. para inserção de pontos de Steiner, como ilustrado na Figura 2. Note que como os três procedimentos acima são lineares e cada um gera uma lista de tamanho $O(p)$, temos que tanto a complexidade de tempo quanto de memória alcançam seu valor mínimo $O(np)$ para todo o algoritmo de construção da solução inicial, dada uma AGM.

Uma outra modificação realizada em nossa extensão para o caso $n \geq 3$ do esquema de relaxação de Chapeau-Blondeau et al. é relacionada à variável σ_p , que nos fornece uma distância característica entre os pontos da AGM. No caso plano, esta distância foi definida como sendo

$$\sigma_p = p^{-1/2}. \quad (3)$$

Considere quatro pontos distribuídos em um quadrado unitário. Estes pontos podem ser distribuídos uniformemente da seguinte maneira: particione o quadrado em quatro sub-regiões quadradas, cada uma possuindo lados de comprimento $1/2$; então, posicione cada ponto dado no centro de cada quadrado. As distâncias entre pontos vizinhos na AGM correspondente serão todas iguais a $1/2$. Este valor corresponde exatamente a $\sigma_4 = 4^{-1/2} = 1/2$ de acordo com a fórmula (3). No caso de 16 pontos dados, por exemplo, teríamos 16 quadrados com lado $1/4$, que seria a distância entre cada par de pontos vizinhos na AGM, e também igual a σ_{16} de acordo com (3).

Considere agora o caso $n = 3$. Para distribuir, por exemplo, 8 pontos da maneira uniforme como fizemos acima em um cubo unitário, devemos particionar o cubo

em oito cubos menores, com lados de comprimento $1/2$, e posicionar os pontos no centro destes cubos. As distâncias entre cada par de pontos na AGM, portanto, serão também de $1/2$. Para que o valor de sigma seja igual a esta distância, podemos redefini-lo, usando o valor $-1/3$ como expoente de p em (3). Induzindo esse raciocínio para dimensões mais altas (o que pode ser feito através de uma representação em coordenadas cartesianas n -dimensionais), vemos que uma definição mais adequada de σ_p será

$$\sigma_p = p^{-1/n}, \tag{4}$$

que, portanto, passa a ser um valor dependente da dimensão n , e permanecendo válido também para o caso $n = 2$.

Outra consideração em nossa extensão refere-se à ordem em que os pontos de Steiner são tratados em cada iteração completa da heurística. Tal ordem não é mencionada no trabalho de Chapeau-Blondeau et al., embora pareça ter sua importância na qualidade da solução obtida. Em nosso trabalho, verificamos experimentalmente que uma ordem prefixada de tratamento dos pontos de Steiner parece acrescentar um viés que impede que algumas boas soluções sejam alcançadas. Sendo assim, adotamos uma ordem aleatória de tratamento dos pontos de Steiner, em geral diferente a cada iteração. Com isto, houve um aumento muito pequeno, e linear, no tempo de UCP exigido, mas com um ganho apreciável na qualidade das soluções obtidas.

De acordo com os processos apresentados na extensão acima, temos então um algoritmo que em uma dimensão n não prefixada, e dada uma AGM, é desenvolvido em complexidade $O(np)$ de tempo e de memória.

Implementação da heurística estendida

Desenvolvemos um código C para a extensão desenvolvida acima. Seguindo os autores do esquema de relaxação no caso plano, mantivemos o mesmo esquema de 400 iterações, com os parâmetros T e λ sendo reduzidos segundo a mesma prescrição. Para construir a AGM usamos uma versão para $n \geq 2$ do algoritmo de Prim [49], com

complexidade $O(np^2)$, sendo esta, portanto, a complexidade da heurística completa implementada. Por ser esta uma heurística muito rápida, pudemos realizar, no decorrer do desenvolvimento do programa, um número da ordem de 10^7 testes. Os resultados principais são apresentados a seguir.

Resultados computacionais

Aplicamos o esquema de relaxação estendido a várias configurações de pontos dados, distribuídos aleatoriamente em um hipercubo unitário. Alguns resultados estão listados na Tabela 3, que apresenta valores médios da razão de Steiner ρ obtidos para 10^{5-a} problemas com $p = 10^a$ pontos dados, onde a é um expoente inteiro variando de 1 a 4. Os resultados são apresentados para dimensões 3, 4, 5 e 10. Os tempos de UCP são apresentados em segundos, obtidos através da função *rusage[user]* do compilador C, e consideramos o tempo médio de resolução, incluindo a construção das AGMs, para cada conjunto de problemas. Todos os resultados de tempo para esta heurística, e também para as outras heurísticas que desenvolvemos, apresentadas nesta tese, são referentes a uma estação de trabalho *Sun Ultra 1*. Os desvios padrão são também apresentados para cada conjunto. Os resultados foram obtidos com parâmetros iniciais $T = 0,18\sigma_p$ e $\lambda = 0,12\sigma_p$.

A Tabela 3 nos mostra alguns aspectos interessantes. Por exemplo, o valor médio de ρ parece decrescer com o aumento da dimensão n . De fato, temos verificado que esta tendência continua mesmo para dimensões muito altas. Experimentando 10 configurações de 100 pontos dados em cada uma das dimensões 50, 100 e 1.000, a heurística estendida obteve razões de Steiner médias 0,775727, 0,748003 e 0,702645, respectivamente, apresentando dispersões reduzidas ($DP < 0,005$) nos três casos. Esta redução do valor de ρ com o aumento da dimensão n está de acordo com as conjecturas sobre o ínfimo ρ_n comentadas no Capítulo 2 desta tese. Ao que parece, uma possível redução do valor do ínfimo, com o aumento da dimensão n , encontra apoio nesta redução gradativa do valor médio de ρ , evidenciada por esses e outros resultados que temos obtido.

p		n			
		3	4	5	10
10 (10.000 pbs.)	ρ médio	0,951522	0,932607	0,916304	0,864513
	DP	0,017663	0,018602	0,019062	0,018263
	tempo UCP	0,0638	0,0751	0,0865	0,149
100 (1.000 pbs.)	ρ médio	0,953682	0,939578	0,928165	0,886429
	DP	0,005476	0,005804	0,005487	0,005531
	tempo UCP	0,854	1,01	1,17	1,96
1.000 (100 pbs.)	ρ médio	0,953672	0,940196	0,930097	0,900173
	DP	0,001482	0,001633	0,001650	0,001777
	tempo UCP	10,2	11,9	13,7	23,0
10.000 (10 pbs.)	ρ médio	0,954098	0,941104	0,931523	0,904967
	DP	0,000472	0,000305	0,000535	0,000516
	tempo UCP	285	338	392	638

Tabela 3: Valores médios de ρ , desvios padrão (DP) e tempos médios de UCP em segundos (tempo UCP) obtidos pela heurística estendida para vários conjuntos de pontos dados distribuídos aleatoriamente em hipercubos unitários. Para cada dimensão foram testados conjuntos de 10^{5-a} problemas com 10^a pontos, onde a é um expoente inteiro, variando de 1 a 4.

Com relação à qualidade das soluções obtidas, podemos notar que o valor médio de ρ tende a ser maior quanto maior for o número p de pontos dados na distribuição. Além disso, o aumento é tanto maior quanto maior for a dimensão considerada. Acreditamos que isso não signifique necessariamente que a heurística perca sua qualidade de maneira significativa em dimensões maiores ou para distribuições com maiores quantidades de pontos dados. Antes, nos parece que a velocidade de decréscimo com n do valor médio da razão de Steiner ótima é que pode ser, de fato, mais alta para distribuições com valores mais reduzidos de p . Entretanto, este é um comportamento a ser melhor averiguado em trabalhos futuros.

Com relação aos tempos de computação, verificamos que a heurística é muito rápida, sendo capaz, por exemplo, de resolver problemas de até 10.000 pontos dados, em média, em pouco menos de 5 minutos, em dimensão 3, e em pouco mais de 10 minutos, em dimensão 10. Removendo os tempos esperados de obtenção da AGM dos tempos médios reportados acima para a heurística, obtemos a Tabela 4 (obs:

consideraremos como tempos esperados aqueles informados na Tabela 2; tais tempos referem-se a dados de entrada diferentes).

p	n			
	3	4	5	10
10	0,0636	0,0748	0,0861	0,148
100	0,837	0,990	1,15	1,92
1.000	8,50	9,86	11,3	18,8
10.000	81	98	121	189

Tabela 4: Tempos médios de UCP, em segundos, necessários para realizar a relaxação estendida, descontando-se os tempos médios esperados de cálculo da AGM.

De fato, podemos perceber nos dados da Tabela 4 uma tendência aproximadamente linear de crescimento no tempo de computação, em relação tanto a p quanto a n . Podemos, no entanto, perceber uma certa tendência do algoritmo de tratar os problemas de 10 pontos de maneira mais rápida do que seria de se supor pela linearidade apresentada para os problemas com $p = 100$ a $p = 10.000$. Este é um comportamento a ser ainda averiguado, mas uma possível causa para este privilégio das distribuições de 10 pontos é terem sido justamente estas as distribuições testadas, por exemplo, para a escolha de parâmetros, quando da construção e desenvolvimento do algoritmo.

Um outro aspecto interessante refere-se à análise dos desvios padrão obtidos na Tabela 3. Observe que são todos relativamente reduzidos. Além disso, essa redução é tanto maior quanto maior for o número p de pontos dados nas distribuições. Caso este seja um comportamento típico também para soluções ótimas, temos uma evidência a mais de uma possível correlação do PSE com a estrutura espacial de proteínas. Isto porque várias classes de proteínas parecem apresentar razões de Steiner tipicamente acima de 0,990 [56]. Poder-se-ia pensar que não há razão para se considerar que tais proteínas sejam estruturas especiais no contexto do PSE. Razões de Steiner de magnitude 0,990 poderiam ser relativamente fáceis de serem encontradas, principalmente quando se leva em conta, pelos dados da tabela acima, por exemplo, que em $n = 3$ tais razões são em média relativamente próximas a 0,950,

que é um valor não tão distante de 0,990. Entretanto, considerando que as proteínas em questão eram compostas por mais de uma centena de átomos, e que o desvio padrão nesta faixa, de acordo com a tabela acima, é de cerca de 0,005, com ρ médio aproximadamente 0,955, temos que o valor 0,990 está a cerca de 7 desvios padrão acima de seu valor esperado, podendo já ser caracterizado como um valor raro. Além disso, caso os valores de ρ de fato se apresentem segundo uma distribuição normal para os valores médios e os desvios padrão fornecidos (ver Capítulo 3), temos que a chance de se encontrar um valor $\rho = 0,990$ é ainda mais reduzida.

Testamos, também, os conjuntos de configurações em $n = 3$ para os quais conhecemos o valor ótimo através do algoritmo de Smith. Não obtivemos nenhuma solução ótima nestes testes. No entanto, valores bastante próximos do valor ótimo de ρ foram obtidos, e de maneira extremamente rápida. Por exemplo, para o conjunto com 1.000 distribuições de 10 pontos dados, o algoritmo exato forneceu um valor médio $\rho = 0,946758$ (DP = 0,017531), em um tempo total de cerca de 12 horas de UCP. A heurística estendida obteve um valor médio $\rho = 0,951185$ (DP = 0.018012), um valor a cerca de 0,47% do valor ótimo médio, mas exigindo um tempo total de apenas 73 segundos de UCP. Apesar de não termos obtido nenhum valor ótimo, obtivemos 461 resultados distantes até 0,01% do ótimo, 831 resultados até 1% do ótimo, e todos os 1.000 resultados a no máximo 4,87% do ótimo.

4.2.3 Um algoritmo *Multi-Start*

A heurística apresentada acima, como vemos, é bastante rápida e fornece resultados que podem ser considerados bons, apesar de dificilmente apresentar soluções ótimas. Entretanto, temos buscado realizar melhorias neste algoritmo, no sentido de alcançar soluções de qualidade ainda maior, embora em detrimento de sua rapidez. Sendo este um algoritmo muito rápido e não determinístico, uma estratégia adequada de melhoria da qualidade é a aplicação de uma técnica *multi-start*, ou seja, múltiplas reiniciações do algoritmo com *sementes* diferentes da função geradora de números

aleatórios.

Resultados recentes que temos obtido têm mostrado que esta estratégia funciona muito bem, sendo o principal motivo pelo qual acreditamos poder conseguir soluções exatas para o PSE, mesmo para configurações de centenas e, talvez, milhares de pontos dados.

Em nossa implementação deste método, levamos em consideração também a construção da árvore inicial, que não é necessariamente única. Como podemos ver através da Figura 2, o ponto dado em questão, quando da conclusão do processo local de construção da árvore, se encontra conectado ao ponto de Steiner que se liga à aresta voltada verticalmente para cima, já que esta corresponde ao último vizinho tratado. Entretanto, o último vizinho tratado poderia corresponder a qualquer das outras três arestas, o que implicaria em uma árvore topologicamente diferente, que poderia levar a uma solução eventualmente melhor. Dessa forma, em nosso algoritmo *multi-start*, utilizamos uma ordem aleatória de tratamento dos *filhos* de cada ponto da AGM durante a fase de construção. Portanto, a cada nova iniciação do algoritmo, teremos a construção de uma árvore inicial, em geral diferente, o que pode levar a soluções potencialmente melhores, como de fato temos observado.

Como um exemplo da *performance* do algoritmo *multi-start*, podemos voltar ao mesmo conjunto de 1.000 distribuições de 10 pontos dados em $n = 3$ acima. Realizando-se um total de 500 iniciações da relaxação estendida, obtivemos uma razão média $\rho = 0,947964$ (DP = 0,017645), um valor a cerca de 0,13% do valor ótimo médio, em um tempo total de UCP de aproximadamente 10 horas. Foram encontradas 851 soluções a até 0,01% do valor ótimo, 955 soluções a até 1% do ótimo e todas as 1.000 soluções novamente a até 4,87% do ótimo. Para este caso de distribuições de 10 pontos dados, o ganho em termos de tempo, com relação ao algoritmo exato, é ainda muito pequeno. Porém, já para distribuições de 11 pontos, o ganho passa a ser substancialmente maior, como veremos mais à frente. Por outro lado, desta vez encontramos 2 valores ótimos de ρ , o que também é ainda

muito pouco mas que pode ser melhorado, por exemplo, através da hibridização com outras heurísticas, tais como as que apresentaremos no prosseguimento desta tese.

Outros resultados, tanto relacionados ao esquema de relaxação estendido simples quanto à sua versão *multi-start*, serão posteriormente apresentados para comparação de desempenhos. A seguir, apresentaremos outras abordagens heurísticas para o PSE que, apesar de serem mais demoradas do que o esquema de relaxação estendido, apresentam outras possibilidades de se obter soluções de boa qualidade, alcançando-se o ótimo em um grande número de casos. Começaremos apresentando, na próxima seção, uma busca local para topologias de Steiner cheias, para a qual aplicamos uma busca tabu.

4.3 Uma Busca Tabu para o Problema de Steiner Euclidiano

Apresentaremos nesta seção uma abordagem heurística para o PSE, que consiste no desenvolvimento de uma *busca local* de topologias de Steiner cheias, a partir da qual uma *busca Tabu* é desenvolvida [44, 34, 45].

4.3.1 Busca Local

Heurísticas de busca local são freqüentemente utilizadas em problemas de otimização combinatória. Dada uma solução inicial $S = S_0$, em geral ruim, uma busca por soluções melhores é realizada dentro de uma vizinhança $N(S)$ bem definida. Encontrada uma solução $S' \in N(S)$ melhor que a solução atual S , faz-se $S \leftarrow S'$ e reinicia-se a busca, agora dentro de uma nova vizinhança $N(S)$. Esse esquema de busca prossegue até que não se encontre mais nenhuma solução S' melhor que a solução atual S na vizinhança $N(S)$. A solução S encontrada ao fim de todo o processo, em geral, não é uma solução ótima S^* , mas pode ser bastante próxima desta.

Nossa busca local parte de uma topologia de Steiner cheia dada. A partir desta, queremos encontrar outras topologias de Steiner cheias. Introduziremos algumas

definições [34, 45].

Arestas livres

Uma aresta livre é uma aresta de uma topologia de Steiner cheia, em que ambos os extremos são pontos de Steiner.

Árvore de Steiner livre

A árvore de Steiner livre é a subárvore da topologia de Steiner cheia, formada por todas as arestas livres (Figura 5).

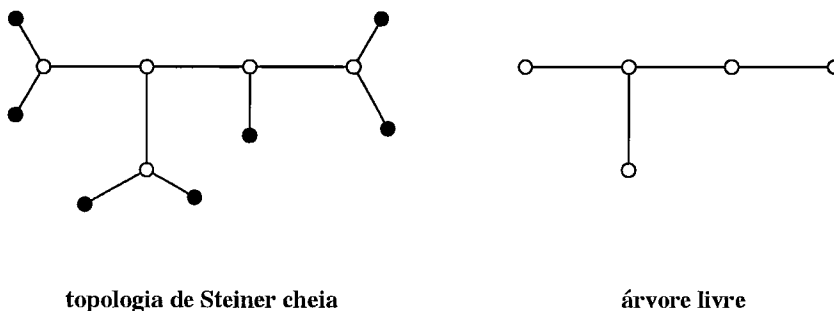


Figura 5: Exemplo de uma topologia de Steiner cheia e sua árvore de Steiner livre correspondente.

Consideraremos apenas topologias de Steiner cheias que possam ser obtidas da topologia de Steiner cheia dada, mantendo-se inalteradas as arestas que conectam pontos dados a pontos de Steiner, ou seja, podemos trocar apenas arestas livres, como no exemplo da Figura 6.

Assim, dada uma topologia de Steiner cheia, definiremos sua vizinhança como o conjunto de todas as topologias cheias que podem ser obtidas pela troca de um par qualquer de arestas livres na topologia dada.

É fácil ver que apenas as trocas de arestas livres não-adjacentes é que levarão a topologias de Steiner cheias diferentes. Além disso, cada par de arestas livres

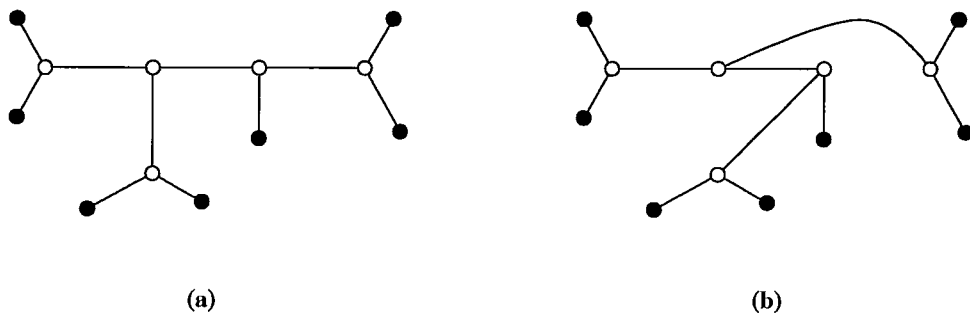


Figura 6: Exemplo de uma troca de arestas livres em uma topologia de Steiner cheia dada, originando uma nova topologia de Steiner cheia.

não-adjacentes escolhidas para a troca dará origem a apenas uma única topologia de Steiner cheia nova, pois uma vez que as arestas tenham sido desconectadas, só haverá uma única possibilidade de reconexão sem a criação de sub-topologias desconectadas entre si.

O número total de topologias vizinhas a uma dada topologia de Steiner cheia é da ordem de p^2 . Dependendo do tamanho da topologia de Steiner cheia, não será possível considerar todas a p^2 vizinhas. Assim, reduziremos nossa pesquisa a apenas um subconjunto da vizinhança da árvore livre. Para tanto, introduziremos uma raiz e um raio para a árvore de Steiner livre. Uma vez que um ponto de Steiner da árvore tenha sido escolhido como raiz, já podemos orientar as arestas desta árvore através de caminhos diretos da raiz para todos os outros pontos, definindo assim uma ordem parcial na árvore.

A raiz divide a árvore orientada em no máximo três regiões, de acordo com o número de arestas que saem da raiz, limitadas pelo raio. Trocas são realizadas entre pares de arestas livres dentro de uma mesma região da árvore. Dizemos que duas arestas livres estão em uma mesma região da árvore orientada, se no mínimo um dos dois extremos de cada aresta possui um ancestral em comum que não seja a raiz. A busca local é, então, conduzida dentro de cada uma destas regiões.

Para implementar a busca local, utilizamos o programa numérico de W. Smith, o qual calcula árvores de Steiner mínimas através da minimização de um grande número de topologias cheias. No entanto, fizemos algumas adaptações, para que fossem otimizadas apenas topologias cheias dadas. O raio de busca foi fixado em 3, e uma raiz *principal* foi escolhida aleatoriamente a cada iteração da busca. A partir dessa raiz principal, e dentro de uma mesma iteração, novas raízes foram fixadas, espaçadas regularmente por uma distância de $\lfloor p/3 \rfloor$ arestas, de forma a não haver concentração excessiva em uma única parte de toda árvore.

Os resultados não foram muito bons, apresentando soluções com razões de Steiner tipicamente acima de $\rho = 1$. Além do comportamento já esperado das buscas locais, que caem rapidamente em um mínimo local, temos mais duas explicações para este mau resultado.

Primeiramente, estamos trabalhando com uma vizinhança que é, na verdade, restrita. Em geral, a troca de pares de arestas livres não nos permitirá alcançar a topologia ótima. Por exemplo, se dois pontos dados x^1 e x^2 são adjacentes ao mesmo ponto de Steiner S , tais pontos permanecerão adjacentes a S todo o tempo. Se x^1 e x^2 não forem adjacentes a um mesmo ponto na topologia ótima, trocas de arestas livres não poderão conduzir a solução corrente para a solução ótima.

Em segundo, quando se realiza a otimização de uma topologia de Steiner pré-especificada, é comum a obtenção de pontos de Steiner situados em uma mesma posição na árvore solução, descrevendo um padrão de arestas cruzadas. Usualmente, esta é uma indicação de um vínculo da topologia dada, que impede que os pontos de Steiner alcancem suas posições corretas, dando origem a soluções ruins.

Para solucionar estes problemas, desenvolvemos uma busca tabu. Suas principais características e alguns resultados preliminares são apresentados a seguir.

4.3.2 Busca Tabu

A busca tabu é uma metaheurística que possibilita a continuação da busca, além do primeiro mínimo local, usando uma lista de soluções proibidas, para evitar o retorno da pesquisa a um mínimo local já visitado (ver [17] para detalhes). A busca tabu também nos possibilita introduzir um mecanismo de diversificação para tentar compensar algumas das restrições da vizinhança que definimos. Tal mecanismo é baseado no esquema de relaxação estendido que apresentamos anteriormente.

Em nossa implementação da busca tabu, um *movimento* é a troca de duas arestas livres na solução corrente para alcançar a melhor solução vizinha. Se o melhor vizinho possui razão de Steiner ρ maior que a corrente, então o inverso do movimento corrente é armazenado em uma lista tabu de tamanho $Tmaxsize$.

A diversificação é realizada da seguinte maneira: após um certo número $Tdiver$ de iterações, sem redução do melhor valor de ρ , procure pares de pontos de Steiner adjacentes, localizados na mesma posição na árvore ou próximos um do outro, dentro de uma distância máxima $Tmaxdist$. Então, troque arestas, não necessariamente arestas livres, escolhidas de acordo com o mecanismo de comparação de forças usado no esquema de relaxação descrito anteriormente. Tal mecanismo leva a novas topologias que não podem ser alcançadas apenas trocando-se arestas livres. Depois de um número $Tmaxiter > Tdiver$ de iterações sem redução do melhor valor de ρ , a busca termina.

Usamos o melhor valor de ρ como critério de aspiração, ou seja, um movimento proibido será aceito, desde que leve a uma solução com valor ρ melhor que o melhor valor encontrado até então. Uma intensificação da busca em uma dada região ocorre apenas quando a diversificação falha, ou seja, quando a topologia corrente não é modificada durante a diversificação.

No estágio atual de nossa implementação, a qualidade da melhor solução encontrada depende da escolha da topologia inicial. Boas topologias iniciais podem ser

obtidas a partir do mesmo procedimento de inserção de pontos de Steiner na AGM, utilizado anteriormente no esquema estendido de relaxação.

Alguns Resultados

Alguns resultados preliminares foram obtidos para conjuntos de pontos dados distribuídos aleatoriamente em hipercubos unitários. A Tabela 5 contém alguns destes resultados, relacionados a quatro distribuições de 30 pontos dados, um para cada dimensão $n = 3, 4, 5$ e 10 , e parâmetros $Tmaxsize = 10$, $Tmaxiter = 60$, $Tdiver = 20$ e $Tmaxdist = 0,1$. Incluímos, para comparação, as soluções obtidas pelo esquema estendido de relaxação.

Heurística		n			
		3	4	5	10
Tabu: árvore inicial aleatória	ρ inicial	1,908440	1,609124	1,380460	1,049683
	ρ final	1,143431	1,166904	1,053670	0,970418
	iterações	405	475	403	453
	tempo UCP	710	990	790	1.300
Tabu: árvore inicial derivada da AGM	ρ inicial	0,951580	0,954699	0,940332	0,888046
	ρ final	0,943675	0,950510	0,928105	0,869665
	iterações	84	185	68	82
	tempo UCP	140	380	200	650
Relaxação estendida	ρ final	0,946895	0,942472	0,916997	0,871621
	tempo UCP	0,23	0,27	0,2	0,52

Tabela 5: Valores de ρ obtidos pela busca tabu para árvores iniciais aleatórias e derivadas da AGM, e pelo esquema estendido de relaxação. Os parâmetros para a busca tabu são $Tmaxsize = 10$, $Tmaxiter = 60$, $Tdiver = 20$ e $Tmaxdist = 0,1$. O número total de iterações é apresentado para cada conjunto. Tempos de UCP são apresentados em segundos. Para cada dimensão $n = 3, 4, 5$ e 10 foi testada uma distribuição de 30 pontos dados.

Como vemos na Tabela 5, os tempos de computação e os valores de ρ obtidos com soluções iniciais derivadas da AGM são muito melhores do que aqueles obtidos com soluções iniciais aleatórias. Contudo, comparando os tempos de computação dos melhores resultados obtidos pela busca tabu com aqueles da relaxação estendida,

podemos ver claramente a supremacia desta última heurística. Apesar disso, os valores de ρ às vezes são melhores, quando obtidos pela busca tabu.

Aqui também podemos perceber a mesma tendência de redução do valor de ρ , à medida que a dimensão n aumenta, como já havíamos observado para outros resultados da relaxação estendida.

Também aplicamos a busca tabu aos 1.000 problemas de 10 pontos em dimensão $n = 3$ para os quais conhecemos os valores ótimos de ρ . O valor médio obtido para a razão de Steiner foi $\rho = 0,957394$ (DP = 0,017954) e o tempo total de UCP foi de cerca de 6 horas. Apesar do valor relativamente alto da razão de Steiner média, mais alto que aquele de 0,951185 obtido com a relaxação estendida, conseguimos alcançar o valor ótimo em 228 casos, estando o pior resultado a 7,1% do ótimo.

Com relação a esta busca tabu, há muito ainda por ser feito, podendo ser melhorada de diversas maneiras, seja através de uma necessária calibração de parâmetros, seja pelo aperfeiçoamento dos mecanismos de diversificação e principalmente de intensificação ou pela utilização de soluções obtidas pela relaxação estendida e outros mecanismos de hibridização, etc. Por outro lado, a própria busca local pode ser melhorada, por exemplo, sendo estendida a uma vizinhança menos restrita. Além disso, pode ser adaptada a outras metaheurísticas. De todo modo, tal como se apresenta, esta é uma heurística que se mostra capaz de conduzir a busca por soluções do PSE um pouco além do que foi previamente alcançado com a relaxação estendida, ao menos para as configurações de poucos pontos, encontrando-se muitas soluções ótimas.

Na próxima seção apresentaremos outras heurísticas que também são propostas como novas possíveis abordagens para o PSE e que encontram um número considerável de soluções ótimas dentre os problemas testados. Tais heurísticas baseiam-se nos vetores topologia de Smith.

4.4 Heurísticas Baseadas nos Vetores Topologia de Smith

Abordagens heurísticas para o PSE também podem ser desenvolvidas a partir dos vetores topologia usados no algoritmo exato de Smith [52]. Apresentaremos aqui duas heurísticas que os utilizam de diferentes maneiras. A primeira é um algoritmo genético simples, que os trata como cromossomos; a segunda é, na verdade, uma busca local sobre tais vetores, aplicada no contexto de uma metaheurística desenvolvida recentemente, chamada *Otimização Microcanônica*.

4.4.1 Um Algoritmo Genético Simples

Algoritmos genéticos (AGs) são procedimentos adaptativos que simulam a evolução de uma população de indivíduos, cada um representando uma possível solução de um dado problema de otimização. Cada indivíduo é caracterizado por um cromossomo que codifica suas características relevantes ao problema. A população evolui iterativamente através de processos de seleção dos indivíduos mais bem adaptados, ou seja, as melhores soluções, segundo uma dada função objetivo. Estes indivíduos têm seus cromossomos combinados de forma que se possa obter novas gerações de indivíduos cada vez mais aptos. Para se induzir maior diversidade entre os indivíduos, são utilizados, também, mecanismos de mutação. Ao fim de todo o processo, o melhor indivíduo encontrado corresponderá a uma solução heurística para o problema. Para detalhes, ver [18, 58].

Como uma outra abordagem heurística para o PSE em $n \geq 3$, nossa idéia central é considerar os vetores topologia de Smith como os cromossomos no contexto de um algoritmo genético (AG) [42]. Implementamos uma versão inicial deste AG, cujas principais características são:

- a população é constituída por um número fixo *Pop_size* de indivíduos (vetores topologia);
- a função objetivo é a razão de Steiner ρ , obtida para cada novo vetor topologia,

pela aplicação do processo de minimização do algoritmo de Smith;

- a população inicial possui *MST_derived* indivíduos construídos pela inserção de pontos na AGM; os indivíduos restantes da população inicial são construídos aleatoriamente; usualmente, $MST_derived \neq 0$ faz com que o AG convirja rapidamente para uma configuração com razão de Steiner ρ bastante reduzida, mas também implica em uma menor diversidade da população corrente, o que algumas vezes implica em uma convergência rápida demais, sem que a solução ótima possa ser encontrada;
- a seleção do conjunto de indivíduos mais aptos ao cruzamento é realizada através de torneios de 3 indivíduos, escolhidos aleatoriamente e comparados segundo suas respectivas razões de Steiner, com uma maior aptidão correspondendo a um menor valor de ρ ;
- cada par de indivíduos, escolhidos aleatoriamente dentre aqueles já selecionados para reprodução, tem probabilidade de reprodução *Reproduction_rate*; na reprodução, utiliza-se *crossover* de dois pontos, ou seja, os cromossomos (vetores topologia) de dois indivíduos têm suas componentes permutadas dentro de um intervalo que vai da componente $i \geq 1$ até a componente j tal que $i < j \leq p - 3$, com i e j escolhidos arbitrariamente; caso não haja reprodução do par de indivíduos escolhidos, estes passam diretamente para a nova população, que ainda será submetida ao processo de mutação;
- cada componente cromossomial i possui uma mesma probabilidade de mutação *Mutation_rate*; quando uma mutação ocorre, o novo valor da componente cromossomial i será um inteiro escolhido aleatoriamente no intervalo $1 \leq a_i \leq 2i + 1$;
- a melhor solução é mantida na população corrente (estratégia elitista);
- cópias múltiplas de um mesmo cromossomo, ou cromossomos que já foram *minimizados*, podem ocorrer na população; para evitar minimizações repetitivas

de um mesmo cromossomo, acrescentamos alguns mecanismos de identificação de cromossomos já recentemente minimizados;

- o algoritmo termina após *Max_iter* gerações (iterações completas) sem melhora da melhor solução já encontrada.

Esperamos que estas características possam ser melhoradas, pois foram desenvolvidas com base apenas em experimentos computacionais iniciais, no contexto de um AG sem sofisticções. Apesar disso, temos obtido alguns resultados que sugerem que abordagens do PSE por AGs deste tipo podem ser promissoras.

Alguns Resultados

Desenvolvemos um código C para o AG acima. Os valores escolhidos para os parâmetros foram $Pop_size = 50$, $Mst_derived = 1$, $Reproduction_rate = 0.7$, $Mutation_rate = 0.01$ e $Max_iter = 50$. Também aqui testamos milhares de distribuições em dimensão $n = 3$. Para o conjunto padrão de 1.000 problemas de $p = 10$ pontos dados, para o qual conhecemos os valores ótimos de ρ , obtivemos uma razão de Steiner de 0,948360 (DP = 0,018003), em um tempo de UCP total de aproximadamente 11 horas, o que não é muito bom, se comparado com os resultados do algoritmo de *força bruta* de Smith, que encontra as soluções exatas em cerca de 12 horas. Entretanto, para configurações já de 11 pontos, os tempos obtidos pelo AG costumam ser quase cinco vezes menor que o algoritmo exato. Por outro lado, dentre os 1.000 problemas acima, o AG encontrou um número de 766 soluções exatas, uma porcentagem de 76,6% que se reduz apenas um pouco para problemas de 11 pontos. Ainda no caso $p = 10$, também foram encontradas 939 soluções com razão de Steiner a até 1% do ótimo e todas as 1.000 soluções a até 3,60% do ótimo. Em média, as razões de Steiner estavam a 0,17% do valor ótimo. Mais à frente, veremos outros resultados que nos permitem uma análise mais completa.

4.4.2 Uma Busca Local Baseada nos Vetores Topologia de Smith

Os vetores topologia também são adequados para serem usados com outras classes de metaheurísticas, uma vez que não é difícil definir diferentes tipos de vizinhanças para estes vetores, de forma a desenvolver buscas locais.

Aqui consideraremos uma estrutura de vizinhança simples, definida da seguinte maneira: dado um vetor topologia \mathbf{a} , seus vizinhos serão os vetores topologia \mathbf{a}' que puderem ser obtidos a partir da troca de apenas uma das $p - 3$ componentes de \mathbf{a} .

Assim, uma busca local pode ser definida como segue. Dado um vetor topologia inicial/corrente \mathbf{s} , relacionado a uma solução S do PSE, com custo ρ , escolha aleatoriamente uma componente i e um novo valor s_i para criar um vetor vizinho \mathbf{s}' . Realize um processo de minimização sobre \mathbf{s}' , no nosso caso, o processo de minimização de Smith, para obter S' e ρ' . Se $\rho' < \rho$, então faça $s_i \leftarrow s'_i$ (um movimento), $S \leftarrow S'$ e $\rho \leftarrow \rho'$, e reinicie a busca. Senão, tente outra vez com um vetor \mathbf{s}' diferente. Após um certo número de tentativas sem melhora da solução corrente, pare a busca. A solução corrente S será considerada um mínimo local na região de busca.

Esta busca local é bastante simples e pode ser redefinida e sofisticada de diversas maneiras, mas já funciona bem. Alternativamente, pode-se também realizar uma busca mais agressiva, escolhendo-se o melhor dentre um número previamente fixado de vizinhos, em cada iteração, como a próxima solução candidata a mínimo local, o que também funciona, segundo alguns testes que realizamos. Entretanto, seja agressiva ou não-agressiva, a busca local simples acima já é suficiente para nos permitir usar os vetores topologia de Smith em uma variedade de metaheurísticas. A seguir, apresentaremos uma aplicação desta busca no contexto de uma nova metaheurística, a *Otimização Microcanônica*.

4.4.3 Otimização Microcanônica Aplicada ao PSE

O algoritmo de otimização microcanônica (μO) [60, 27, 28], tal como o chamado *simulated annealing* [25], é uma abordagem baseada na Física Estatística para resolver problemas gerais de otimização. Entretanto, o algoritmo de *simulated annealing* utiliza a temperatura como um parâmetro de controle, funcionando no contexto do chamado *canonical ensemble*, que representa um sistema físico evoluindo em contato térmico com um reservatório a uma temperatura T . Já no algoritmo μO , o que temos é uma simulação da evolução de um sistema físico, isolado termicamente, e em equilíbrio em uma dada energia interna, trabalhando, portanto, no chamado *ensemble microcanônico* [19].

Descrição do Algoritmo μO

O algoritmo μO parte de uma solução inicial arbitrária, um estado com energia E (o custo da solução), e aplica alternadamente dois procedimentos principais, chamados *iniciação* e *sampling*, até que o sistema se estabilize em um estado de baixa energia. A fase de *iniciação* realiza uma busca local, aceitando apenas soluções melhores que a solução corrente, ou escolhendo a primeira melhor (busca não agressiva) ou selecionando a melhor dentre um dado número de soluções vizinhas (busca agressiva). Esta fase termina quando o sistema alcança um estado de energia local mínima E_S .

Na fase *sampling*, o algoritmo tenta escapar do mínimo local, mas mantendo sua energia próxima ao valor E_S obtido na *iniciação*. Isto é feito, utilizando-se a simulação microcanônica de Creutz [7], que gera amostras de estados de energia fixa. Na técnica de Creutz, existe um grau de liberdade chamado *demônio*, que possui uma quantidade variável mas sempre positiva de energia E_D . Esta energia pode ser trocada com o sistema de forma tal que o valor $E_{total} = E_S + E_D$ é mantido constante. Mudanças locais na configuração do sistema são tentadas, sendo aceitas sempre que o *demônio* puder suportar, mantendo o vínculo $E_D > 0$, a diferença de energia $-\Delta E_S$ que deve ser adicionada à sua energia E_D para que a

energia total do sistema seja preservada. No algoritmo μO , o limite $E_D \leq E_{D_{MAX}}$ é também imposto, o que vincula o sistema a evoluir dentro de um intervalo limitado de energia. A fase *sampling*, portanto, gera configurações dentro deste intervalo de energia, parando após um certo número dado de iterações. O algoritmo, então, continua a partir da nova solução corrente, alternando procedimentos de *iniciação* e *sampling* até que uma condição de parada seja alcançada.

Implementação

Desenvolvemos um código C de um algoritmo μO para o PSE que realiza a busca local não agressiva descrita acima [43], em sua fase de *iniciação*. A solução inicial em nossa implementação não é arbitrária, mas construída pela inserção de pontos de Steiner na AGM, tal como descrito anteriormente. Como parâmetros do algoritmo μO , temos:

- o número máximo de iterações consecutivas sem melhora da solução corrente na fase de iniciação foi escolhido com sendo $MaxInit = 50$;
- o número de iterações em cada fase *sampling* foi fixado em $MaxSamp = 25$;
- o programa pára após $MaxCycles = 5$ ciclos das fases de *iniciação/sampling* sem melhora da melhor solução já encontrada.

Seguindo [27], incluímos uma lista de movimentos rejeitados na fase de iniciação, escolhendo o 5º valor mais baixo de energia como o valor tanto da energia inicial E_{DI} do demônio quanto seu valor máximo $E_{D_{MAX}}$.

Alguns Resultados

Alguns testes foram feitos para configurações em $n = 3$. Particularmente, no caso das 1.000 distribuições de 10 pontos cujas soluções exatas conhecemos, obtivemos um razão de Steiner média de 0,948521 (DP = 0,017828) em um tempo total de UCP de cerca de 9,5 horas. Os resultados aqui são bem próximos, em termos de qualidade, àqueles do AG desenvolvido anteriormente, mas foram obtidos em um

tempo um pouco menor. Foram encontradas 773 soluções ótimas, 926 soluções com razão de Steiner a até 1% do ótimo e todas as 1.000 soluções a até 3,61% do ótimo. Em média, as razões de Steiner estavam a 0,17% do valor ótimo. Também aqui, os tempos de computação decrescem bastante para configurações de 11 pontos, como veremos na próxima seção.

Como dissemos, usamos soluções iniciais derivadas da AGM, apesar de isto não ser necessário para o algoritmo μO , que prevê soluções iniciais aleatórias. Para efeito de comparação, verificamos o desempenho do algoritmo μO para o PSE, também partindo de soluções aleatórias. No caso das 1.000 distribuições acima, as soluções podem perder muito da qualidade, tendo sido encontradas razões de Steiner distantes mais de 10% de seu valor ótimo (algumas com $\rho > 1$). A razão de Steiner média também sofreu um pequeno aumento, passando para 0,952242 (DP = 0,024057), ou seja, a 0,58% da razão ótima média, sendo agora exigido um tempo de UCP maior, de cerca de 12 horas. Ainda assim foram encontradas 701 soluções ótimas.

Na próxima seção veremos mais alguns resultados relacionados a este algoritmo μO e às demais heurísticas para o PSE apresentados nesta tese.

4.5 Resultados Complementares

A Tabela 6 abaixo apresenta um resumo dos resultados obtidos pelas heurísticas apresentadas nesta tese para quatro conjuntos de 1.000 configurações, cada um correspondendo a distribuições aleatórias de p pontos dados, $p = 8, 9, 10$ e 11 , em um cubo unitário. As heurísticas consideradas são: 1) o esquema de relaxação estendido; 2) o algoritmo *multi-start*, com 100 repetições, do esquema de relaxação estendido; 3) a busca tabu baseada em trocas de arestas livres, com soluções iniciais obtidas a partir da AGM; 4) o algoritmo genético (AG); 5) a otimização microcanônica (μO). Acrescentamos no alto da tabela os resultados obtidos pelo algoritmo exato de Smith, para efeito de comparação.

Nesta tabela podemos perceber que, alternativamente ao crescimento *explosivo*

Algoritmo		p			
		8	9	10	11
Exato (Smith)	ρ médio	0,946761	0,946397	0,946758	0,946831
	DP	0,019507	0,017754	0,017531	0,015840
	UCP	1,4	7,8	43	240
Esquema Estendido de Relaxação	ρ médio	0,950232	0,950600	0,951185	0,951379
	DP	0,020179	0,018415	0,018012	0,016693
	UCP	0,059	0,067	0,073	0,083
	sol. ótimas	0	0	0	0
<i>Multi-Start</i> 100 repetições	ρ médio	0,947843	0,947760	0,948386	0,948319
	DP	0,019674	0,018024	0,017677	0,015909
	UCP	5,8	6,6	7,6	8,2
	sol. ótimas	55	10	2	2
Busca Tabu	ρ médio	0,955957	0,957400	0,957394	0,957894
	DP	0,020386	0,018422	0,017772	0,016325
	UCP	12	15	21	30
	sol. ótimas	400	286	228	214
AG	ρ médio	0,947165	0,947581	0,948360	0,948787
	DP	0,019643	0,018115	0,017851	0,016269
	UCP	22	31	39	51
	sol. ótimas	930	826	766	712
μO	ρ médio	0,947507	0,947494	0,948521	0,948724
	DP	0,019637	0,017884	0,017828	0,016434
	UCP	22	28	34	37
	sol. ótimas	908	845	773	725

Tabela 6: Valores médios de ρ , desvios padrão (DP), tempos médios de UCP em segundos e número de soluções ótimas obtidas por cada algoritmo para quatro conjuntos de distribuições aleatórias de p pontos dados em um cubo unitário ($n = 3$). A cada valor $p = 8, 9, 10$ e 11 está associado um conjunto com 1.000 distribuições.

do tempo de computação do algoritmo exato, as exigências de tempo das heurísticas apresentam um crescimento bem mais suave. Vemos, também, que o esquema de relaxação fornece soluções em um tempo bem menor que quaisquer das outras heurísticas. Entretanto, as demais heurísticas apresentam soluções de melhor qualidade.

O algoritmo *multi-start* necessita de uma quantidade de tempo bem maior que o esquema estendido de relaxação, já que corresponde a 100 repetições deste, mas encontra soluções em média bem mais próximas das soluções ótimas, em alguns casos, embora poucos, alcançando o próprio ótimo. Sua utilização passa a apresentar vantagem com relação ao algoritmo exato, no que concerne a tempos de computação, em média para configurações de $p \geq 10$ pontos. A qualidade das soluções encontradas pode melhorar ainda mais, se um número maior de repetições for realizado. Entretanto, alguns experimentos iniciais que temos realizado parecem indicar que o simples aumento do número de repetições não é suficiente para que se encontre um número significativamente maior de soluções ótimas (ver resultados referentes a 500 repetições comentados acima).

O próximo algoritmo na tabela, a busca tabu, apresenta soluções que são em média razoavelmente distantes das soluções ótimas. Os tempos de computação são maiores e parecem crescer um pouco mais rapidamente com p do que a versão anterior da heurística *multi-start* de 100 repetições. Entretanto, o número de soluções ótimas é agora significativamente maior. Isto indica um comportamento essencialmente diferente desta heurística com relação às anteriores, algo que pode ser muito útil no desenvolvimento de heurísticas híbridas, que combinam as melhores características de diferentes heurísticas. Quanto ao desenvolvimento da heurística em si, algo a ser melhor estudado são maneiras de torná-la mais robusta, pois apesar de apresentar um certo número de soluções ótimas, vemos pelo valor médio de ρ que o número de soluções ruins também é alto. Um primeiro passo neste estudo pode ser o ajuste dos parâmetros da busca tabu, assim como o desenvolvimento de mecanismos adequados de intensificação. Por outro lado, a extensão da busca local a uma

vizinhança menos restritiva pode ajudar bastante.

Com relação às heurísticas baseadas nos vetores topologia de Smith, vemos outra vez soluções que são em média de boa qualidade e que encontram o ótimo em um número considerável de casos, numa proporção correspondente a mais de 70% dos 4.000 casos acima. Comparando as duas heurísticas AG e μO , podemos perceber, ao menos para os valores de parâmetros considerados, um desempenho ligeiramente melhor desta última, que encontra soluções de qualidade quase similar às das soluções do AG, mas em um tempo em geral menor e tendendo a crescer mais lentamente com p . Estes resultados nos dão indicações notáveis da maleabilidade dos vetores topologia de Smith na construção de diferentes tipos de heurísticas para o PSE. Por outro lado, nos apresentam mais uma aplicação dando suporte ao estabelecimento do algoritmo μO como uma boa proposta de abordagem para problemas de otimização gerais.

Finalmente, com relação ao número p de pontos dados que cada heurística está apta a tratar dentro de um tempo razoável de computação, temos o esquema estendido de relaxação e suas versões *multi-start* como as heurísticas sem dúvida mais apropriadas para tratar problemas maiores. Para a busca tabu, temos configurações razoáveis sendo encontradas para até 100 pontos dados, mas esses são resultados que ainda necessitam de melhor desenvolvimento, especialmente com relação a ajustes de parâmetros. Este também é o caso das heurísticas AG e μO , que também estão atualmente tendo seus parâmetros ajustados, para evitar que convirjam precocemente em soluções razoavelmente distantes do ótimo, nestas configurações com mais pontos dados.

4.6 Comparação com Heurísticas Anteriores

Nesta seção, realizaremos algumas comparações de desempenho entre as heurísticas que desenvolvemos em nosso trabalho e aquelas apresentadas na Seção 4.1.

4.6.1 Heurística de Lundy

Como não conhecemos os dados de entrada e nem o comprimento das AGMs utilizados por Lundy em [29], não temos como realizar uma comparação de desempenhos precisa. O procedimento que usaremos é dividir os comprimentos das soluções fornecidas, informados na Seção 4.1.2, por 20, para reduzir os resultados a uma mesma escala e, a seguir, pelos valores esperados do comprimento da AGM para problemas de $p = 20$ e $p = 50$ pontos dados em hipercubos unitários em dimensões $n = 19$ e $n = 49$, respectivamente. Tais valores esperados, obtidos testando-se 1.000 problemas para cada valor de p , são, respectivamente, 25,936543 e 115,428966.

Na Tabela 7, são informados os melhores valores e os valores médios das razões de Steiner correspondentes aos comprimentos obtidos pela heurística de Lundy para $p = 20$ e $p = 50$ (10 reiniciações para cada conjunto). São informadas, também, as razões de Steiner médias, os tempos médios de computação (UCP) em segundos e os desvios padrão DP, estes obtidos pela relaxação estendida para conjuntos de 1.000 problemas de $p = 20$ pontos dados, em dimensão $n = 19$, e de $p = 50$ pontos dados, em dimensão $n = 49$. Tempos médios de computação (UCP) são informados em segundos.

p		Lundy	Relaxação
20	melhor ρ	0,836233	—
	ρ médio	0,840841	0,820719
	DP	—	0,010612
	UCP	23	0,65
50	melhor ρ	0,768542	—
	ρ médio	0,774277	0,773541
	DP	—	0,004704
	UCP	270	4,32

Tabela 7: Comparação dos resultados obtidos pela heurística de Lundy e pela relaxação estendida.

Podemos observar que as razões médias obtidas pela heurística de Lundy são maiores do que as obtidas pela relaxação estendida. Para o problema de 20 pontos,

especialmente, a heurística de Lundy forneceu razão média e melhor razão a cerca de 2 e 1,5 desvios padrão, respectivamente, acima da razão média obtida pela relaxação. Já para o problema de 50 pontos, a melhor razão obtida pela heurística de Lundy está a pouco mais de um desvio padrão abaixo da razão média que obtivemos. Tais resultados são bastante inconclusivos, já que os valores reportados por Lundy se baseiam em apenas dois problemas, e nos dão somente uma idéia mínima acerca dos desempenhos relativos das heurísticas. Uma diferença bem maior entre os desempenhos pode ser obtida quando são comparados os tempos de computação. Entretanto, por não conhecermos a diferença de velocidade de cálculo entre os respectivos computadores utilizados, também nada podemos concluir, com segurança, por esse critério.

4.6.2 Heurística de Kalpakis-Ravada-Sherman

Para a heurística de Kalpakis-Ravada-Sherman (KRS) também não foram fornecidos os dados de entrada, mas foram informados os comprimentos de AGMs. Realizaremos, então, apenas uma comparação direta entre os valores médios da razão de Steiner ρ , apesar de estes terem sido obtidos para conjuntos diferentes de problemas.

Para os dois conjuntos de 25 e 60 pontos dados, reportados na Seção 4.1.3, vemos que a melhor razão de Steiner média obtida foi de 0,96665, referente aos 10 problemas aleatórios de 60 pontos. Este é um valor relativamente alto, se comparado com os resultados que temos obtido com as heurísticas que desenvolvemos. Por exemplo, as razões médias obtidas pelo esquema estendido de relaxação, apresentados na Tabela 3 são todas inferiores a 0,955, para configurações de até 10.000 pontos.

A comparação de tempos de computação é dificultada pela diferença entre os equipamentos computacionais utilizados, mas podemos ter ao menos uma boa idéia *qualitativa* da diferença de performance, observando que os tempos médios obtidos pela relaxação estendida para $p = 100$ são em média inferiores a 1 segundo, enquanto a heurística KRS exige em média mais de 100 segundos, em uma computação

distribuída, para configurações de 60 pontos dados. Por maior que possa ser a diferença de performance entre os computadores utilizados, acreditamos que tal não seja suficiente para explicar a diferença de mais de duas ordens de grandeza nos tempos de computação.

Por outro lado, foi também informado um tempo computacional médio de 0,34 segundos para configurações de 25 pontos, com parâmetro de controle $t = 5$ — ver Seção 4.1.3, o que já é um resultado de tempo bem mais reduzido. Entretanto, este resultado corresponde a soluções com razão de Steiner média $\rho_{KRS} = 0,99028$. Este pode ser considerado um resultado muito ruim, de acordo com os resultados que temos apresentado nesta tese, e também quando se leva em conta que os próprios autores encontraram uma razão de Steiner média de 0,96705, para o mesmo conjunto de problemas, com parâmetro $t = 13$.

Assim sendo, acreditamos que os resultados obtidos pelo esquema estendido de relaxação, e também por algumas das outras heurísticas que desenvolvemos, são ao menos tipicamente melhores do que os obtidos pela heurística KRS.

4.6.3 Heurística de MacGregor Smith - Weiss - Patel

Com relação à heurística de MacGregor Smith et al., SWP, o único conjunto de dados de entrada apresentado é uma distribuição especial de 14 pontos dados sobre os vértices de tetraedros justapostos. A razão de Steiner fornecida pela heurística SWP foi, neste caso, $\rho_{SWP} = 0,804496\dots$. O tempo de computação informado foi de 31 segundos, porém não houve nenhuma especificação do tipo de computador usado.

Usamos o algoritmo de Smith para encontrar a solução ótima para esta distribuição especial, encontrando uma razão ótima $\rho = 0,804669$ em aproximadamente 39 horas de computação. Como vemos, este valor de ρ é maior que o apresentado pela heurística SWP. Lembramos, porém, que o valor ρ_{SWP} é apresentado como uma média de valores de ρ para subárvores com sub-AGMs de tamanhos em geral diferentes, de forma que valores de ρ_{SWP} abaixo do ótimo podem de fato ocorrer.

A relaxação estendida não funcionou bem em termos de qualidade para esta distribuição, fornecendo uma razão de Steiner $\rho = 0,852668$, porém em 0,09 segundo, reduzida para 0,844794, após aplicação da versão *Multi-Start* com até 500 repetições. Isto sugere que esta heurística pode não ser apropriada para configurações especiais, mas isso não é necessariamente verdadeiro. Observamos em nossos experimentos que tanto o algoritmo genético, AG, quanto a otimização microcanônica, μO , conseguem alcançar a razão de Steiner ótima em 130 e 190 segundos, respectivamente, com parâmetros de controle um pouco alterados, desde que as soluções iniciais envolvidas não sejam derivadas da AGM. Uma explicação para este fato observado é que configurações com muitos pontos igualmente espaçados podem apresentar muitas AGMs diferentes, e nem sempre a AGM escolhida é adequada para se construir uma boa solução inicial. Dessa forma, uma possível melhora em algoritmos como a relaxação estendida acima, que também parte de uma solução inicial obtida a partir de uma AGM, é a utilização de soluções iniciais mais adequadas. Entretanto, este é um estudo ainda a ser desenvolvido.

Como vemos acima, a heurística SWP parece apresentar bons resultados, possivelmente em um tempo mais curto que os algoritmos AG e μO que desenvolvemos. Entretanto, ressaltamos aqui o fato de que não foram apresentados resultados para distribuições gerais de pontos. As heurísticas que construímos, por outro lado, são todas adequadas para distribuições gerais, funcionando também, ao menos a contento, para distribuições especiais. Além disso, acreditamos que seus desempenhos podem ser bastante melhorados, especialmente tornando mais robusta a relaxação estendida através do uso de soluções iniciais mais adequadas.

4.6.4 Heurísticas de Pereira et al.

A comparação com as heurísticas de Pereira et al. pode ser realizada de forma direta, já que os dados de entrada estão disponibilizados em [46]. Além de muito rápidas, estas heurísticas também funcionam para distribuições gerais de pontos dados.

Compararemos aqui apenas resultados do Algoritmo Melhorado (AM), que fornece valores com melhor qualidade que o Algoritmo Básico, com apenas um acréscimo aproximadamente linear de cerca de 20% de tempo computacional, e do algoritmo usando *Grafos de Gabriel*, AGG, que apresenta os resultados de melhor qualidade dentre as três heurísticas apresentadas por Pereira [46], embora com demanda de tempo bem maior. Comparamos tais resultados com os que obtivemos, aplicando o esquema estendido de relaxação com: (I) a prescrição de 400 iterações para redução dos parâmetros T e λ , como apresentado acima; e (II) uma prescrição de 100 iterações em que T e λ são reduzidos a uma velocidade quatro vezes maior que o caso anterior.

A Tabela 8 contém alguns resultados principais reportados na página 68 da monografia de Pereira [46]. Referem-se a diversos conjuntos de pontos, cada conjunto contendo 15 distribuições de p pontos dados em um cubo. Os valores de p de cada conjunto variam desde 10 a até 500 pontos dados. Para cada valor de p e para cada uma das heurísticas são apresentados a razão de Steiner média ρ e o tempo de computação médio em segundos. No caso das heurísticas de Pereira et al., os tempos de computação referem-se a um computador Pentium 133MHz, 32 Mb de RAM, enquanto que aqueles referentes às nossas heurísticas foram obtidos utilizando-se, como dissemos, estações de trabalho *Sun Ultra 1*. Os tempos de computação em ambos os casos englobam o tempo de cálculo da AGM. Os resultados de Pereira foram originalmente reportados em termos das reduções médias $R(\%)$ com relação aos comprimentos das AGMs para cada conjunto. Por uniformidade com os nossos, convertemos estes resultados para a razão de Steiner média ρ através da fórmula $\rho = 1 - (R(\%)/100)$.

Podemos observar na Tabela 8 que a Relaxação (I) fornece, em geral, resultados de melhor qualidade do que aqueles fornecidos pelas heurísticas AM e AGG. O algoritmo AGG apresenta um resultado de qualidade melhor do que o apresentado pela Relaxação (I) apenas para o conjunto de distribuições de 40 pontos dados. A diferença neste caso é muito pequena, além do que a Relaxação (I) encontra

p	AM		AGG		Relaxação (I)		Relaxação (II)	
	ρ	UCP	ρ	UCP	ρ	UCP	ρ	UCP
10	0,953670	0,1043	0,952909	0,2248	0,949945	0,0773	0,951774	0,0293
20	0,960745	0,2160	0,959868	1,4615	0,957542	0,1600	0,959966	0,0500
30	0,956062	0,3435	0,955586	4,7709	0,955426	0,2413	0,957236	0,0747
40	0,956021	0,4582	0,955292	9,1153	0,955295	0,3267	0,955859	0,0967
50	0,955438	0,5790	0,954356	18,3855	0,952930	0,4167	0,954709	0,1180
60	0,958187	0,6662	0,956930	28,0358	0,955892	0,4887	0,958291	0,1407
70	0,956410	0,7859	0,955712	45,3766	0,955358	0,5627	0,955950	0,1647
80	0,955218	0,8592	0,953886	66,3446	0,951770	0,6487	0,952360	0,1827
90	0,954051	1,0150	0,953134	76,2937	0,951100	0,7393	0,952324	0,2087
100	0,957026	1,1444	0,956155	104,0851	0,955264	0,8320	0,955638	0,2260
250	0,954722	3,1375	0,953877	1230,83	0,953046	2,1420	0,954550	0,6447
500	0,956465	8,0842	0,955413	10444,55	0,954240	4,5253	0,955640	1,4873

Tabela 8: Comparação de performances entre as heurísticas de Pereira – AM e AGG – e o esquema estendido de relaxação com prescrições de 400 iterações – Relaxação (I) – e de 100 iterações – Relaxação (II) – respectivamente.

os resultados em um tempo muito inferior e linear em p , com relação aos tempos apresentados pela heurística AGG.

Com relação à heurística AM, a Relaxação (I) apresenta resultados de qualidade claramente melhor, mas em um tempo apenas um pouco menor. Esta diferença no tempo talvez seja conseqüência apenas da diferença entre equipamentos, compiladores, etc.

De todo modo, notamos, sem um estudo pormenorizado, que a relaxação estendida pode ter sua velocidade bastante aumentada, simplesmente dividindo-se por 4 o número de iterações em cada passo nas prescrições de redução dos parâmetros T e λ . A qualidade das soluções tende a reduzir-se, mas mantendo um nível ainda satisfatório, com resultados, em geral, ainda um pouco melhores do que aqueles fornecidos pela heurística AM, e em um tempo cerca de 4 vezes menor, como podemos ver na tabela acima na coluna referente à Relaxação (II).

Acreditamos que um estudo pormenorizado acerca das prescrições de redução de T e λ pode melhorar bastante a performance da relaxação estendida, tanto em

termos de qualidade quanto de rapidez. Um outro estudo importante seria a combinação desta heurística, e de sua versão *Multi-Start*, com as heurísticas mais precisas apresentadas acima e/ou no contexto de possíveis algoritmos exatos a serem desenvolvidos.

5 Conclusões e Extensões

Apresentamos neste trabalho várias heurísticas para tratamento do problema de Steiner Euclidiano em R^n . Obtivemos alguns bons resultados, o que, esperamos, possa vir a significar boas possibilidades no desenvolvimento de algoritmos exatos para problemas com muitos pontos.

Salientamos que, ao contrário do que foi feito em alguns trabalhos anteriores, evitamos a utilização de propriedades que parecem ser, na verdade, inerentes ao problema no plano. Possivelmente por isso é que tenhamos conseguido resultados em geral melhores do que aqueles relatados na literatura até aqui.

A continuação deste trabalho envolve:

- testes de parâmetros para as heurísticas;
- análise das soluções encontradas e aperfeiçoamento dos mecanismos utilizados, tal como a construção de soluções iniciais mais adequadas, na busca de soluções finais melhores e heurísticas mais robustas;
- extensão da busca local sobre árvores de Steiner livres a uma vizinhança mais abrangente;
- aplicação da busca local, e de algumas estruturas de dados já utilizadas no trabalho, no contexto de outros métodos heurísticos, tais como *GRASP* [13], busca em vizinhança variável [37], etc;
- combinação das melhores características das heurísticas, visando ao desenvolvimento de heurísticas híbridas mais potentes;
- extensão das heurísticas para outras métricas, em variedades riemannianas ou outras mais gerais;
- estudo mais aprofundado da correlação entre o problema de Steiner euclidiano e o problema da conformação de proteínas;

- aplicação das heurísticas desenvolvidas em problemas de determinação de árvores evolucionárias.

Algoritmos exatos podem partir da utilização das heurísticas desenvolvidas no presente trabalho e nas extensões acima. Acreditamos que, por sua rapidez e qualidade, o esquema estendido de relaxação possa ser bastante aperfeiçoado, de maneira a dar origem a um algoritmo exato, capaz de resolver, em $n \geq 3$, e tal como tem sido relatado em $n = 2$, problemas possivelmente de até 10.000 pontos dados. De todo modo, as heurísticas apresentadas e extensões propostas, se configuram como abordagens que podem, ao menos, oferecer limites superiores a serem utilizados em algoritmos que trabalham com métodos de *branch-and-bound*, tais como o algoritmo de Smith, possivelmente incluindo limites inferiores obtidos através da aplicação da formulação dual para o PSE de Maculan et al. [32].

Referências

- [1] F. Chapeau-Blondeau, F. Janez, J-L Ferrier. “A dynamic adaptive relaxation scheme applied to the Euclidean Steiner minimal tree problem”, *SIAM Journal on Optimization*, v. 7, pp. 1037–1053, 1997.
- [2] D. Cieslik. *Steiner Minimal Trees*. In: *Nonconvex Optimization and Its Applications*, vol 23, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [3] H. S. M. Coxeter, S. L. Greitzer. *Geometry Revisited*. In: *New Mathematical Library*, v. 19, The Mathematical Association of America, Washington D.C., 1967.
- [4] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest. *Introduction to Algorithms*. In: *The MIT Electrical Engineering and Computer Science Series*, MIT Press, Cambridge, 1990.
- [5] R. Courant, H. Robbins. *What is Mathematics?* Oxford University Press, New York, 1941.
- [6] J. H. Conway, N. J A. Sloane. *Sphere Packings, Lattices and Groups*. Springer-Verlag, New York, 2nd ed., 1993.
- [7] M. Creutz. “Microcanonical Monte Carlo Simulation”, *Phys. Rev. Lett.*, v. 50, pp. 1411–1414, 1983.
- [8] D. Z. Du. “On Steiner Ratio Conjecture”, *Annals of Operations Research*, v. 33, pp. 437–449, 1991.
- [9] D. Z. Du, F. K. Hwang. “A Proof of the Gilbert-Pollak Conjecture on the Steiner Ratio”, *Algorithmica*, v. 7, n. 2/3, pp. 121–135, 1992.
- [10] D. Z. Du, W. D. Smith. “Disproofs of Generalized Gilbert-Pollak Conjecture on the Steiner Ratio in Three or More Dimensions”, *Journal of Combinatorial Theory*, series A, v. 74, pp. 115–130, 1996.

- [11] A. W. F. Edwards, L. L. Cavalli-Sforza. “The Reconstruction of Evolution”, Abstract in *Annals of Human Genetics*, v. 27, pp. 104–105, 1963.
- [12] M. H. C. Fampa, L. Bahiense e N. Maculan. “A new relaxation in conic form for the Euclidean Steiner problem”, *Institute for Operations Research and the Management Sciences – INFORMS Fall 1999 Meeting*, Philadelphia, PA, USA, MD19.1, 1999.
- [13] T. A. Feo, M. C. Resende. “Greedy Randomized Adaptive Search Procedures”, *Journal of Global Optimization*, v. 6, pp. 109–133, 1995.
- [14] M. R. Garey, R. L. Graham, D. S. Johnson. “The Complexity of Computing Steiner Minimal Trees”, *Siam J. Appl. Math.*, v. 32, pp. 835–859, 1977.
- [15] M. R. Garey, D. S. Johnson. *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of Np-completeness*. W. H. Freeman, San Francisco, 1979.
- [16] E.N. Gilbert, H.O. Pollak. “Steiner minimal trees”, *SIAM Journal on Applied mathematics*, v. 16, pp. 323–345, 1968.
- [17] F. Glover and M. Laguna. *Tabu Search*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 1997.
- [18] J. H. Holland. “Genetic Algorithms”, *Scientific American*, v. 267, pp. 66–72, 1992.
- [19] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2nd ed., New York, 1987.
- [20] F. K. Hwang. “A Linear Time Algorithm for Full Steiner Trees”, *Oper. Res. Lett.*, v. 4, pp. 235–237, 1986.
- [21] F.K. Hwang, D.S. Richards, P. Winter. *The Steiner tree problem*. In: *Annals of Discrete Mathematics*, v. 53, North-Holland, Amsterdam, 1992.
- [22] F. K. Hwang, J. F. Weng. “Hexagonal Coordinate Systems and Steiner Minimal Trees”, *Discrete Math.*, v. 62, pp. 49–57, 1986.

- [23] F. K. Hwang, J. F. Weng. “The Shortest Network Under a Given Topology”, *J. Algorithms*, v. 13, pp. 468–488, 1992.
- [24] K. Kalpakis, A. T. Sherman. “Probabilistic Analysis of an Enhanced Partitioning Algorithm for the Steiner Tree Problem in R^d ”, *Networks*, v. 24, pp. 147–159, 1994.
- [25] S. Kirkpatrick, D. C. Gelatt, M. Vecchi. “Optimization by Simulated Annealing”, *Science*, v. 220, pp. 671–680, 1983.
- [26] H. W. Kuhn. “Steiner’s Problem Revisited”, In: Dantzig e B. C Eaves (eds.), *Studies in Optimization, Studies in Mathematics*, v. 10, Math. Assoc. Amer., pp. 53–70, 1975.
- [27] A. Linhares and J. R. A. Torreão. “Microcanonical Optimization Applied to the Traveling Salesman Problem”, *Int. J. Modern Phys. C*, v. 9, pp. 133–146, 1998.
- [28] A. Linhares, H. H. Yanasse and J. R. A. Torreão. “Linear Gate Assignment: A Fast Statistical Mechanics Approach”, *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, v. 18, pp. 1750–1758, 1999.
- [29] M. Lundy. “Applications of the Annealing Algorithm to Combinatorial Problems in Statistics”, *Biometrika*, v. 72, n. 1, pp. 191–198.
- [30] S. Maculan. *Problema Euclidiano de Steiner no Plano*. Monografia de Projeto Final – UFRJ/EE-DEM, 2001.
- [31] N. Maculan, P. Michelon, J. MacGregor Smith. “Bounds on the Kissing Number in R^n : Mathematical Programming Formulations”, In: *preprint – COPPE/PESC*, 1995.
- [32] N. Maculan, P. Michelon, A. E. Xavier. “The Euclidean Steiner Tree Problem in R^n : a Mathematical Programming Formulation”, *Annals of Operations Research*, v. 96, pp. 209–220, 2000.

- [33] N. Maculan, F. Montenegro, P. Boucher, G. Plateau. “Nouvelles heuristiques pour le problème de Steiner euclidien dans R^n ”, In: *3^{ème} congrès de la société Française de Recherche Opérationnelle et d’Aide à la Décision – ROADEF’2000*, Nantes, França, pp. 207–208, Jan. 2000.
- [34] N. Maculan, G. Plateau, F. Montenegro. A Local Search for the Euclidean Steiner Problem in R^n . *Institute for Operations Research and the Management Sciences – INFORMS Fall 1999 Meeting*, Philadelphia, PA, USA, MD19.2, 1999.
- [35] Z. A. Melzak. “On the Problem of Steiner”, *Canad. Math. Bull.*, v. 4, pp. 143–148, 1961.
- [36] W. Miehle. “Link-length minimization in networks”, *Operations Research*, v. 6, pp. 232–243, 1958.
- [37] N. Mladenović, P. Hansen. “Variable Neighborhood Search”, *Computers Ops. Res.*, v. 24, n. 11, pp. 1097–1100, 1997.
- [38] R. Mondaini, N. Maculan. “Steiner and Baricentric Trees. The Possible Binders of Macromolecular Structure”, In: *Relatório Técnico, UFRJ/COPPE/PESC*, ES-409/96, 1996.
- [39] R. Mondaini, D. Freire Mondaini, N. Maculan. “The Study of Steiner Points Associated with the Vertices of Regular Tetrahedra Joined Together at Common Faces”, *Investigación Operativa*, v. 6, n. 1-2-3, pp. 103–110, 1998.
- [40] R. Mondaini, D. F. Mondaini, F. Montenegro. “Modelling a Steiner Point Distribution of a Special Helix Point Configuration”, In: *Relatório Técnico, UFRJ/COPPE/PESC*, ES-398/96, 1996.
- [41] F. Montenegro, N. Maculan. “O Modelo de Película de Sabão Aplicado ao Problema de Steiner em R^n ”, *XXXI Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional*, Juiz de Fora, MG, 1999.

- [42] F. Montenegro, N. Maculan. “A Genetic Algorithm for the Euclidean Steiner Problem in R^n ”, In: *Proc. X Cong. Ibero-latinoamericano Inv. Oper. – CLAIO*, Cidade do México, México, A241, 2000.
- [43] F. Montenegro, N. Maculan, J. R. A. Torreão. “Microcanonical Optimization applied to the Euclidean Steiner Problem in R^n ”, In: *MIC’2001 – 4th Metaheuristics International Conference*, Porto, Portugal, v. 2, pp. 515–519, 2001.
- [44] F. Montenegro, N. Maculan, G. Plateau, P. Boucher. “A Tabu Search for the Euclidean Steiner Tree Problem in R^n ”, Abstract in: *MIC’99 – III Metaheuristics International Conference*, Angra dos Reis, RJ, Brasil, p. 343, 1999.
- [45] F. Montenegro, N. Maculan, G. Plateau, P. Boucher. “New Heuristics for the Euclidean Steiner Problem in R^n ”, In: *Essays and Surveys in Metaheuristics*, C. Ribeiro and P. Hansen (editors), *Operations Research/Computer Science Interfaces series*, v. 15, Kluwer Academic Publishers, Boston, pp. 509–524, 2001.
- [46] M. Pereira. *Proposta e Avaliação para o Problema de Steiner Geométrico em Duas e Três Dimensões*. Dissertação de M. Sc., UFPE, 1998. O texto e dados de entrada estão disponibilizados em <http://www.di.ufpe.br/posgraduacao/antigo/mestrado/mtp98/index.html>
- [47] M. Pereira, M. Gomes, Y. Abtibol, T. Cira, e N. Maculan. “Stym, Um Ambiente MVI para a Geração de Árvores de Steiner em Grafos Euclidianos”, In: *XXIX SBPO*, p. 178, 1997.
- [48] G. Polya. *Induction and Analogy in Mathematics*. Princeton Univ. Press, New Jersey, 1954.
- [49] R. C. Prim. “Shortest Connection Networks and Some Generalizations”, *The Bell System Technical Journal*, v. 36, 1389–1401, 1957.

- [50] F. P. Preparata, M. I. Shamos. *Computational Geometry: An Introduction*. Springer-Verlag, New York, 1985.
- [51] S. Ravada, A. T. Sherman. “Experimental Evaluation of a Partitioning Algorithm for the Steiner Tree Problem in R^2 and R^3 ”, *Networks*, v. 24, pp. 409–415, 1994.
- [52] W. D. Smith. “How to find Steiner minimal trees in Euclidean d-space”, *Algorithmica*, v. 7, n. 2/3, pp. 137–177, 1992.
- [53] W. D. Smith. Simplified Steiner tree backtrack code. Versão modificada para *INPUT/OUTPUT* pelo Dr. Jim Smith’s group a partir da versão simplificada, disponível eletronicamente em <http://www.neci.nj.nec.com/homepage/wds>
- [54] W. D. Smith, J. MacGregor Smith. “On the Steiner Ratio in 3-Space”, *J. Combin. Theory*, v. 69, pp. 301–332, 1995.
- [55] J. MacGregor Smith, R. Weiss, M. Patel. “An $O(N^2)$ heuristic for Steiner minimal trees in E^3 ”, *Networks*, v. 25, pp. 273–289, 1995.
- [56] J. MacGregor Smith, R. Weiss, B. Toppur, N. Maculan. “Characterization of Protein Structure and 3-d Steiner Networks”, In: *Proceedings of the II ALIO-EURO Workshop on Practical Combinatorial Optimization*, v. 1, pp. 37–44, Valparaiso, Chile, 1996.
- [57] J. Soukup. “Minimum Steiner Trees, Roots of a Polynomial, and Other Magic”, ACM/SIGMAP newsletter, v. 22, pp. 37–51, 1977.
- [58] M. Srinivas and L.M. Patnaik. “Genetic Algorithms: a Survey”, *IEEE Computer*, v. 27, n. 6, pp. 17–26, 1994.
- [59] E. A. Thompson. “The Method of Minimum Evolution”, *Annals of Human Genetics*, vol 36, pp. 333–340.

- [60] J. R. A. Torreão, E. Roe. “Microcanonical optimization applied to visual processing”, *Phys. Lett. A*, v. 205, pp. 377–382, 1995.
- [61] D. Voet, J. G. Voet. *Biochemistry* 2nd ed., John Wiley & Sons, New York, 1995.
- [62] D. M. Warme, P. Winter, M. Zachariasen. “Exact Algorithms for Plane Steiner Tree Problems: A Computational Study.”, In: D.Z. Du, J.M. Smith e J.H. Rubinstein (eds.) *Advances in Steiner Trees*, Kluwer Academic Publishers, pp. 81–116, 2000. Ver também página na internet: <http://www.diku.dk/geosteiner/>
- [63] J. D. Watson, N. H. Hopkins, J. W. Roberts, J. A. Steitz, A. M. Weiner. *Molecular Biology of the Gene*. 4th, ed. Benjamin/Cummings, Menlo Park, CA, 1987.
- [64] M. Zachariasen. “Local search for the Steiner tree problem in the Euclidean plane”, *European Journal of Operational Research*, v. 119, pp. 282–300, 1999.