XXXIII Congresso de Iniciação Científica da Unicamp 2025

DETERMINAÇÃO DE CICLOS MINIMIZANTES EM GRAFOS POR MEIO DE MÉTODO EM FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO

Palavras-Chave: Otimização de Médias em Grafos, Algoritmo de Floría-Griffiths, Álgebra Min-Plus

Autores:
Murilo Felício Nascimento dos Santos, IMECC - UNICAMP
Prof. Dr. Eduardo Garibaldi (orientador), IMECC - UNICAMP

INTRODUÇÃO

Na década de 1980, os pesquisadores Weiren Chou e Robert B. Griffiths estudavam os estados fundamentais de modelos unidimensionais de partículas sujeitas a um potencial periódico, relacionados ao chamado modelo de Frenkel-Kontorova. Em seu artigo [1], eles descrevem tais estados a partir do chamado "potencial efetivo", que surge como a solução de um problema espectral não linear. Posteriormente, Griffiths, juntamente com Luis M. Floría, descrevem um procedimento numérico para a solução do problema [2]. Esse método, que ficaria conhecido como **Algoritmo de Floría-Griffiths**, possui um potencial teórico e prático muito mais amplo que o contexto original da física do estado sólido, se mostrando muito eficiente no problema de **otimização de médias em grafos**, com aplicações teóricas e práticas que vão desde a logística de transporte em redes à teoria de otimização ergódica

O presente trabalho de pesquisa teve por objetivos a introdução da teoria de otimização de médias em grafos e do algoritmo de Floría-Griffiths. Além disso, foi feita sua implementação computacional e análise empírica de sua complexidade temporal.

Ademais, o autor foi, entre os meses de agosto de 2024 e maio de 2025, bolsista do Programa de Iniciação Científica e Mestrado (PICME), financiado pelo CNPq.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Para definir o problema de **otimização de médias em grafos**, consideramos um grafo orientado fortemente conexo $G = (V, A)$ com uma função de custo sobre suas arestas $c : A \to \mathbb{R}$. Assim, o custo médio associado a um caminho no grafo é a média aritmética dos custos das arestas do caminho. Definimos então a constante cíclica minimal como o menor dos custos médios dos ciclos do grafo, isto é,

$$m(c) = \min_{P \text{ ciclo}} \frac{1}{|P|} \sum_{(i,j)\in P} c(i,j). \tag{1}$$

Desse modo, o problema consiste na determinação tanto da **constante cíclica minimal** como dos **ciclos minimizantes** do grafo, isto é, os ciclos que minimizam o custo médio. Chamamos de **subgrafo crítico** o subgrafo formado exatamente pelos ciclos minimizantes. Além disso, a determinação de $m(c)$ pode ser feita classicamente a partir do Algoritmo de Karp [5], que opera em complexidade temporal $O(|V| \cdot |A|)$.

Esse problema pode ser traduzido para a chamada **álgebra min-plus** $(\mathbb{R} \cup \{+\infty\}, \oplus, \otimes)$, também conhecida como álgebra tropical, onde as operações de soma e produto são

$$a \oplus b = \min(a, b) \qquad \text{e} \qquad a \otimes b = a + b. \tag{2}$$

Assim, munidos dessas duas operações, podemos definir algo análogo à álgebra linear usual para o caso de matrizes e vetores min-plus. Aplicada ao contexto de otimização de médias em grafos, associamos a cada grafo G com função de custo c uma matriz dada por

$$S_c(i,j) := \begin{cases} c(i,j), & \text{se } (i,j) \in A \\ +\infty, & \text{se } (i,j) \notin A \end{cases}, \tag{3}$$

que chamaremos de **matriz de custos**. Agora, a condição de conexidade de G é equivalente à irredutibilidade da matriz S_c, isto é, à existência, para cada $(i,j) \in A$, de $k(i,j) \in \mathbb{Z}_{>0}$ tal que $S_c^{k(i,j)}(i,j) \neq +\infty$. A solução para este problema é elegantemente articulada através da seguinte versão do Teorema de Perron-Frobenius para a álgebra min-plus:

Teorema (Perron-Frobenius versão min-plus): Toda matriz min-plus irredutível $A \in (\mathbb{R} \cup \{+\infty\})^{n\times n}$ possui um único autovalor, e existe autovetor com todas as entradas reais, isto é, finitas. Além disso, definindo um grafo dado pela matriz de custos $S_c := A^T$, temos que o autovalor de A é exatamente $m(c)$.

Tais autovetores reais $u \in \mathbb{R}^n$ são autovetores à esquerda de S_c e, portanto, satisfazem

$$u^T \otimes S_c = m(c) \otimes u^T \quad \Leftrightarrow \quad \min_{i:(i,j)\in A} \{u(i) + c(i,j)\} = m(c) + u(j), \quad \forall j \in V. \tag{4}$$

Chamaremos tais vetores de **corretores calibrados** do grafo. A partir deles, podemos fazer uma normalização do custo do grafo definindo $\tilde{c} : A \to \mathbb{R}$ dado por

$$\tilde{c}(i,j) = c(i,j) + u(i) - u(j) - m(c), \quad \forall (i,j) \in A. \tag{5}$$

Definimos então um subgrafo de G composto pelas arestas (i,j) tais que $\tilde{c}(i,j) = 0$. Esse subgrafo tem a importante propriedade que diz que suas componentes fortemente conexas formam exatamente o subgrafo crítico. Assim, algoritmos clássicos como Tarjan [7] são capazes de retornar o subgrafo crítico em complexidade temporal $O(|V| + |A|)$.

Dessa maneira, o problema de otimização de médias em grafos se reduz à determinação do par autovalor-autovetor $(m(c), u)$ da matriz S_c.

O ALGORITMO DE FLORÍA-GRIFFITHS

O algoritmo consiste num **método iterativo** para calcular o par $(m(c), u)$. Para isso, definimos o chamado **operador de Lax-Oleinik**, T_c, que é a forma funcional da multiplicação à esquerda da matriz S_c:

$$T_c f(j) = \min_{i:(i,j)\in A} \{f(i) + c(i,j)\}. \tag{6}$$

Vemos então que todo corretor calibrado u é um **ponto fixo** de $T_{c-m(c)}$, isto é,

$$T_{c-m(c)}u = u \iff T_c u = u + m(c). \tag{7}$$

A partir do resultado obtido por Nussbaum em [6], sabemos que o operador converge para um ponto fixo em um número finito de iterações. O que o algoritmo faz, portanto, é estimar a cada passo $m(c)$ e u simultaneamente, a partir da aplicação do operador de Lax-Oleinik. No entanto, a demonstração de sua convergência se baseia no Teorema do Ponto Fixo de Ishikawa, que, por sua vez, esconde qualquer noção de velocidade de convergência das iterações. Desse modo, apenas métodos empíricos podem estimar a complexidade temporal do algoritmo até então.

Pseudocódigo

Algoritmo de Floría-Griffiths

Entradas: Dados $G = (V, A)$ e $c : A \to \mathbb{R}$,
$u_0 : V \to \mathbb{R}$ estimativa para um corretor calibrado arbitrária;
$m_0 \geq m(c)$ cota superior para $m(c)$;
$\sigma_0 : V \to V$, $\sigma_0(j) \in \{i \in V : (i,j) \in A\}$.

Para $r = 1, 2, \ldots$, enquanto $V_r \neq \varnothing$, faça

Etapa 1: *Cálculo de vértices ativos:*

$$V_r := \big\{j \in V : T_{c-m_{r-1}}u_{r-1}(j) < u_{r-1}(j)\big\}.$$

Etapa 2: *Atualização de u:*

$$u_r(j) := \min\{u_{r-1}(j), T_{c-m_{r-1}}u_{r-1}(j)\}, \quad \forall j \in V.$$

Etapa 3: *Atualização de σ:*

$$\sigma_r(j) \in \arg\min_{i:(i,j)\in A} \big[u_{r-1}(i) + c(i,j) - m_{r-1}\big], \quad \forall j \in V_r,$$

e defina $\sigma_r(j) := \sigma_{r-1}(j)$ para $j \notin V_r$.

Etapa 4: *Atualização da cota superior para $m(c)$:*
Para cada $j \in V_r$, siga σ até formar um ciclo $P_r^j := j \to \sigma_r(j) \to \cdots \to \sigma_r^s(j) = j$ e defina

$$m_r := \min\left\{m_{r-1}, \min_{j\in V_r} c(P_r^j)\right\}.$$

Saída: O algoritmo para quando $V_r = \varnothing$; então $m_r = m(c)$ e u_r é corretor calibrado.

METODOLOGIA

Para avaliar o desempenho do algoritmo em comparação com Karp, foi conduzida uma análise para estimar sua complexidade temporal média seguindo os seguintes passos:

- **Definição dos Parâmetros:** Foram definidos o número de vértices n (variando de 50 a 800) e a densidade de arestas d (variando de 0.1 a 0.9).
- **Geração de Grafos Aleatórios:** Para cada par (n, d), foram gerados grafos onde cada aresta (i, j) tem probabilidade d de existir. Os custos foram amostrados de uma distribuição uniforme no intervalo $[1, 20]$ e a conexidade de cada grafo foi verificada.
- **Amostragem:** Para garantir robustez estatística, o tempo de execução foi calculado como a média aritmética sobre 30 matrizes aleatórias para cada par (n, d).
- **Regressão linear:** A partir da disposição dos dados em escala log-log, obtemos o coeficiente angular da regressão linear como uma estimativa para k, onde $O(n^k)$ representa a complexidade temporal do algoritmo.

A implementação dos algoritmos e a análise de dados foram realizadas na linguagem de programação Python.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos foram dispostos no seguinte gráfico em escala log-log de tempo de execução médio por número de vértices:

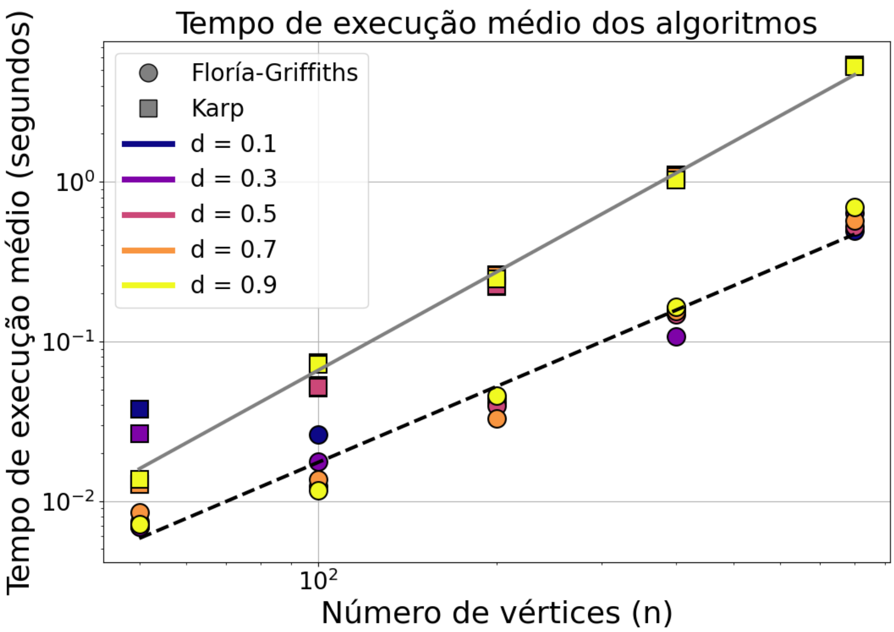

Figura 1: Gráfico em escala log-log de tempo de execução de cada algoritmo para cada par (n, d). As linhas representam ajustes lineares.

Baseado nele, observamos que a influência da densidade d do grafo é baixa, de modo que o tempo de execução depende aproximadamente apenas do número de vértices. Além disso, o tempo de execução para cada algoritmo escalou de forma polinomial sobre os dados, isto é, linear em escala log-log, o que justifica a utilização da regressão linear. Explicitamente, observamos uma complexidade empírica de $O(n^k)$, onde $k = 1.58 \pm 0.05$ para Floría-Griffiths e $k = 2.05 \pm 0.05$ para Karp. Ainda, para grafos grandes ($n = 800$), Floría-Griffiths apresentou uma melhora de **7 a 10 vezes** no tempo de execução quando comparada a Karp.

CONCLUSÕES

Concluímos que a abordagem de Floría-Griffiths apresenta uma vantagem significativa no caso médio quando comparada à abordagem clássica, demonstrando complexidade temporal melhor que $O(n^2)$. Entretanto, os resultados foram obtidos em grafos totalmente aleatórios, sem qualquer padrão estrutural. Assim, investigar o desempenho do algoritmo em **topologias desfavoráveis** é um direcionamento de interesse para estudos futuros.

Referências

[1] W. Chou and R. B. Griffiths. **Ground states of one-dimensional systems using effective potentials**. *Phys. Rev. B*, 34:6219–6234, Nov 1986.

[2] L. M. Floria and R. B. Griffiths. **Numerical procedure for solving a minimization eigenvalue problem**. *Numerische Mathematik*, 55(4):565–574, 1989.

[3] E. Garibaldi. ***Ergodic Optimization in the Expanding Case***. SpringerBriefs in Mathematics. Springer, 2017.

[4] E. Garibaldi and J. T. A. Gomes. ***Otimização de médias sobre grafos orientados***. IMPA, IMPA, Rio de Janeiro, 2013.

[5] R. M. Karp. **A Characterization of the Minimum Cycle Mean in a Digraph**. *Discrete Mathematics*, 23(3):309–311, 1978.

[6] R. D. Nussbaum. **Convergence of iterates of a nonlinear operator arising in statistical mechanics**. 2002.

[7] Robert E. Tarjan and Uri Zwick. **Finding Strong Components Using Depth-First Search**, 2022.