

Probabilités 1 IS2A3 : Devoir Maison
À rendre le **Vendredi 04 décembre 2020**

Caroline Schmid



PROJET TUTORÉ DE STRUCTURES DE DONNÉES

-

GRAPHES ET COMBINATOIRES

PROBLÈME DU FLOT MAXIMUM

IS2A3 - Lundi 31 mai 2021

Encadrante : Clarisse DHAENENS

Auteurs : Badmavasan KIROUCHENASSAMY
Caroline SCHMID

Table des matières

1	Contexte du projet	1
2	Analyse	2
2.1	Représentation des données	2
2.2	Implémentation de la structure de données choisie	5
3	Mode d'emploi	9
4	Description des exemples traités	11

Chapitre 1

Contexte du projet

Pour résoudre un problème de flot maximum, plusieurs algorithmes peuvent être mis en œuvre. Nous étudions ici la mise en place de l'algorithme de **DINIC** ainsi que les structures de données nécessaires et l'arborescence des fichiers.

Le problème de flot maximum consiste en trouver le flot le plus élevé que l'on puisse faire passer dans un Réseau en respectant les capacités de chaque arc, soit le flot maximum que l'on puisse faire passer par chaque arc.

L'algorithme de **DINIC** permet, à partir d'un flot initial, de rechercher une chaîne améliorante dans un réseau de façon à construire un flot de valeur supérieure. En répétant cette opération un certain nombre de fois, le flot que l'on obtient devient maximum. L'algorithme prend en paramètre un graphe d'écart, il faut donc transformer le réseau du problème de flot maximum en un graphe d'écart pour trouver le flot maximum et revenir à un réseau répondant au problème posé.

On considère que le flot initial est de 0 et que les sommets sont au nombre de n et numérotés de 1 à n .

Chapitre 2

Analyse

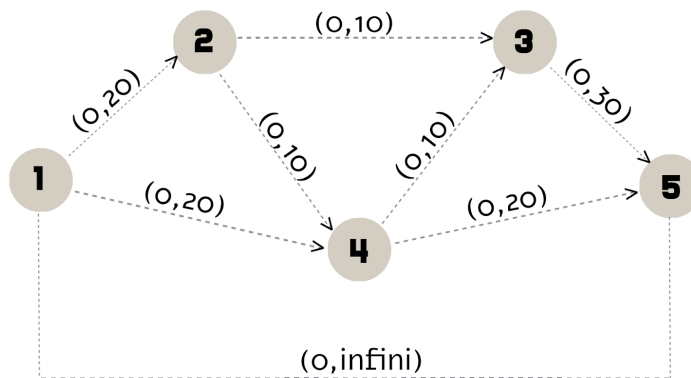
2.1 Représentation des données

La chaîne améliorante de l'algorithme de **DINIC** est la chaîne du plus court chemin en nombre d'arcs et sera trouvée donc par l'algorithme de parcours en largeur. Étant donné que ce dernier algorithme génère l'arborescence donnant le plus court chemin en nombre d'arc, on l'utilise pour trouver la chaîne améliorante de l'algorithme de **DINIC**.

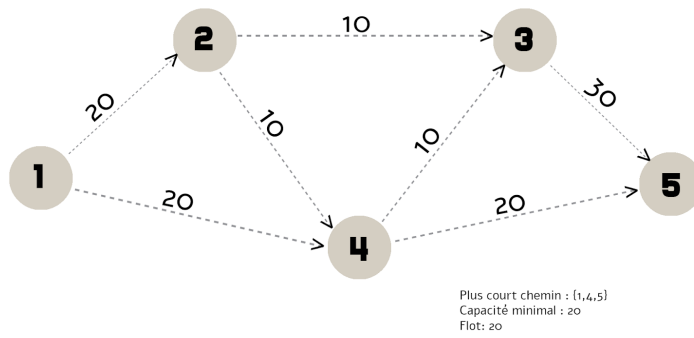
L'algorithme de parcours en largeur est un algorithme parcourant le graphe par couches. Les sommets de la couche n sont à une distance n du sommet source. L'exploration commence donc par la source, puis ses successeurs, puis les successeurs de ses successeurs, ... jusqu'à explorer le sommet puits et on sait alors que l'on peut s'arrêter. Grâce à un tableau répertoriant les prédécesseurs des sommets marqués (par convention, le sommet prédécesseur du sommet source est lui-même), on peut retrouver le chemin le plus court en nombre d'arcs menant d'un sommet à un autre (ici, menant du sommet source au sommet puits).

Voici le déroulement de l'algorithme de **DINIC** sur un réseau à 5 sommets et 7 arcs :

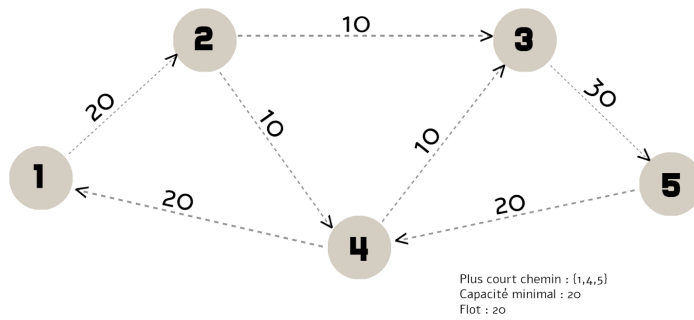
1. Réseau :



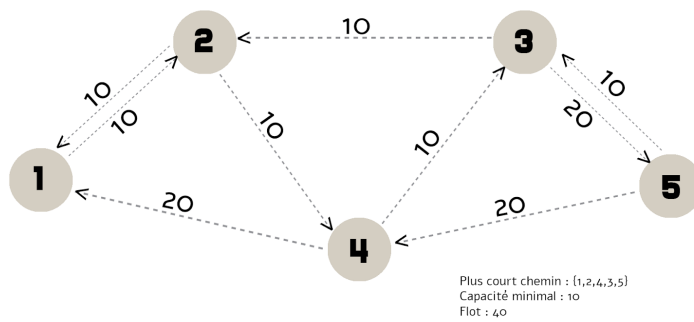
2. Graphe d'Écart :



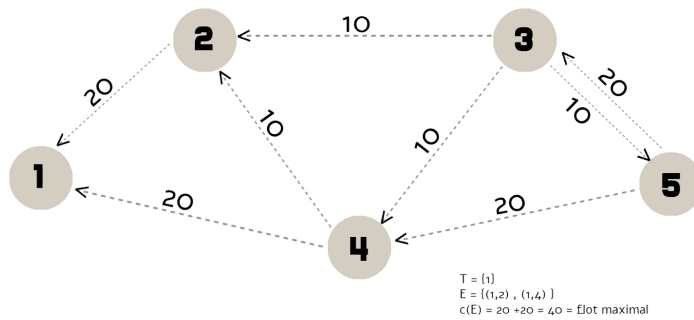
3. Graphe d'Écart :



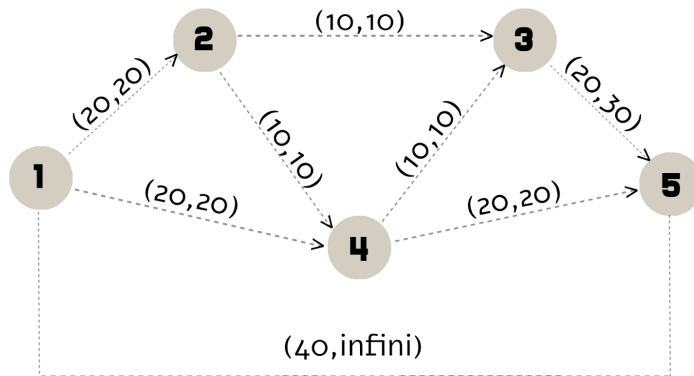
4. Graphe d'Écart :



5. Graphe d'Écart :

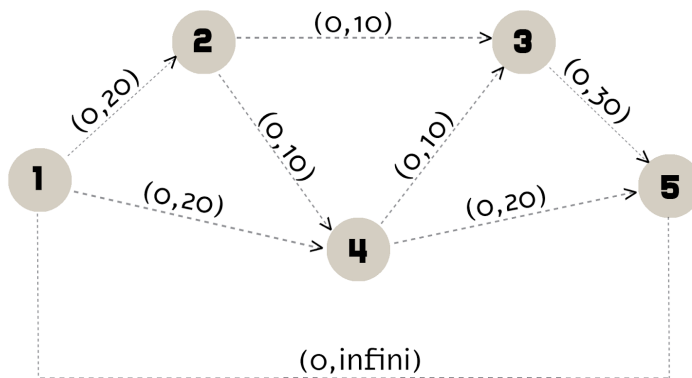


6. Réseau :



Par convention, un graphe est constitué de n sommets et m arcs. On utilisera donc ces notations pour alléger le texte.

Pour représenter le réseau, on voit trois structures de données possibles. Elles seront illustrées ici par une représentation graphique basée sur l'exemple du réseau suivant :



1. une matrice d'incidence :

Un tableau de tableaux : chaque case du premier tableau est elle-même un tableau. les sommets sont représentés en lignes et les arcs en colonnes. La case est à 0 si le sommet n'est pas incident à l'arc, 1 s'il est source de l'arc et -1 s'il est destination de l'arc.

2. un tableau sommets - successeurs :

Deux tableaux. Le premier tableau de la longueur du nombre d'arc est un tableau de pointeurs pointant vers le premier sommet successeur dans le second tableau. Le second tableau, de la longueur du nombre d'arcs, représente les successeurs des sommets du premier tableau. Les successeurs d'un même sommet sont contigus dans le second tableau.

3. un tableau de listes de successeurs :

Un tableau de listes de successeurs. Chaque case contient une liste. La tête de la liste indique quel est le sommet source et les maillons de la liste sont les successeurs de ce sommet source.

Comparons les avantages des trois structures de données sur 3 critères : le coût de stockage en mémoire, le coût de traitement en accès au successeur d'un sommet donné et finalement l'ajout et la suppression d'un successeur d'un sommet donné.

Coût de stockage en mémoire	La dimension de la matrice est
Coût de traitement en accès au successeur	Il faut parcourir la matrice afin de trouver les successeurs d'u
Ajout et la suppression d'un successeur	Il faut redimensionner une matrice à 2 dimensions et donc réalouer plu

La structure de données correspondant le plus aux opérations que l'algorithme de **DINIC** nécessite est la structure de données en tableau de listes de successeurs étant donné que pour le coût de

stockage en mémoire et pour le coût de traitement en accès au successeur, la complexité est la même entre cette solution et le tableau sommets - successeurs et qu'elle a une complexité plus faible en ajout et la suppression d'un successeur que cette dernière. La matrice d'incidence à une complexité largement moins bonne que celle du tableau de listes de successeurs sur les différents critères.

Pour réduire le nombre d'ajout et de suppressions d'arcs dans le graphe d'écart lors de ses mises à jour entre deux itérations de **DINIC**, on pourrait, lors de la création du graphe à partir du réseau, créer pour chaque sommet dans le graphe un arc avec le flot égalant la capacité de l'arc du graphe et un arc inverse de flot nul. Ça permettrait d'utiliser les arcs déjà construits et ne pas ajouter de nouvel arc ou en retirer un de flot nul.

Nous n'appliquerons pas cette idée car elle permet d'économiser un peu d'espace mémoire. L'espace économisé n'est pas nécessairement important mais il devient significatif lorsque le nombre d'arcs devient grand car on passe de m arcs à $2m$ arcs. On notera que cette solution aurait pu être appliquée au tableau sommets - successeurs et il n'y aurait plus eu d'avantages à utiliser la solution retenue plutôt que cette structure de données avec $2m$ arcs pour les deux structures de données.

2.2 Implémentation de la structure de données choisie

Pour dérouler l'algorithme de **DINIC** et trouver le flot maximum du réseau donné, on utilisera 4 structures de données :

1. Une liste, et ses maillons, représentant les successeurs d'un sommet dans le réseau (listes constituant le tableau de de listes de successeurs).
2. Une liste, et ses maillons, représentant les successeurs d'un sommet dans le graphe d'écart (listes constituant le tableau de de listes de successeurs).
3. Une liste, et ses maillons, représentant les sommets constituant le plus court chemin en nombre d'arcs permettant d'améliorer le flot d'un graphe donné.
4. Une file permettant de trouver le plus court chemin en nombre d'arcs dans un graphe donné.

Voici le code C décrivant ces structures de données :

```
1      /* Reseau */
2
3      struct maillon_graph_reseau {
4          int id;
5          int flot;
6          int capacite;
7          struct maillon_graph_reseau* next;
8      };
9
10     struct liste_graph_reseau {
11         int id;
12         struct maillon_graph_reseau* head;
13     };
14
```

```

15
16
17      /* Graphe Ecart */
18
19      struct maillon_graph_ecart {
20          int id;
21          int flot_entrant;
22          struct maillon_graph_ecart* next;
23      };
24
25      struct liste_graph_ecart {
26          int id;
27          struct maillon_graph_ecart* head;
28      };
29
30
31
32      /* Chemin */
33
34      struct maillon_chemin {
35          int id;
36          int capacite_residual;
37          struct maillon_chemin * next;
38      };
39
40      struct liste_chemin {
41          struct maillon_chemin * head;
42      };
43
44
45
46      /* File */
47
48      struct file {
49          int* tab;
50          int taille;
51          int read_end;
52          int write_end;
53          int n;
54      };

```

Lorsqu'un maillon est le dernier de la liste, il pointe vers un pointeur null de son type :

```

1      /* Reseau */
2
3      #define NIL_lr (struct liste_graph_reseau*) 0
4      #define NIL_mr (struct maillon_graph_reseau*) 0
5
6
7
8      /* Graphe Ecart */
9
10     #define NIL_lge (struct liste_graph_ecart *) 0
11     #define NIL_mge (struct maillon_graph_ecart *) 0

```

```

12
13
14
15     /* Chemin */
16
17     #define NIL_lc (struct liste_chemin *) 0
18     #define NIL_mc (struct maillon_chemin *) 0

```

De manière schématique, les structures de données ressembleraient donc à :

— Réseau :

— Graphe Écart :

— Chemin :

— File :

L'arborescence des fichiers est la suivante :

La description de la file ainsi que les déclarations des fonctions applicables dessus se trouvent dans le fichier `File.h` et ses fonctions sont décrites dans le fichier `File.c`.

Le réseau et le graphe d'écart sont tout deux des graphes et le chemin est construit à partir d'un graphe donc les fonctions dépendant de ces 3 structures de données sont contenues dans le fichier `Graph.c`. Ce dernier importe 4 fichiers d'entête : `GraphReseau.h`, `GraphEcart.h` et `Chemin.h` contenant la description des structures de données respectives. Le dernier fichier importé est `Graph.c`, contenant la déclaration des fonctions produites dans le fichier `Graph.c`.

Enfin, `Dinic.h` contient la signature de la fonction programmée dans le fichier `Dinic.c` et `main.c` fait tourner le programme et maximise le flot du réseau donné en paramètres.

Ainsi, la File est importée dans le Chemin pour permettre de trouver le plus court chemin, le Chemin, le Graphe Écart et le Réseau sont importés dans le Graphe, le Graphe est importé dans Dinic et enfin Dinic est importé dans le main.

`File.h` étant importé par tout les autres fichiers directement ou indirectement, toutes les inclusions de bibliothèques sont faites dans ce fichier.

Chapitre 3

Mode d'emploi

L'entrée du programme est un fichier contenant la description d'un réseau au format **DIMACS**. (des exemples de ce format sont présents dans le dossier `./DIMACS/` ou encore sur MOODLE).

On va donc exécuter notre programme sur ce réseau pour maximiser le flot et obtenir un nouveau fichier *result.txt* en sortie, contenant la description du réseau de flot maximum ainsi que le flot maximum final.

Pour lancer le programme, un `MAKEFILE` est mis à disposition pour gérer la compilation. La compilation se résume donc à lancer un terminal dans le répertoire courant et lancer la commande `make`. Cette commande exécute les commandes de compilation et liens avec les options `-Wall` et `-g`. On obtient ainsi tout les warnings et on peut lancer le programme sous un débugeur comme `gdb`. Le compilateur utilisé est `gcc`. L'exécutable produit est `a.out`.

Le programme nécessite un fichier en entrée, fournissant le réseau initial. Il faut saisir les chemin et le nom du fichier en question. On peut donc exécuter les lignes suivantes :

```
1 make
```

Commande compilant et faisant les liens d'import. Un fichier 'a.out' exécutable est généré. Le programme peut être lancé par exemple des différentes manières suivantes :

```
1 ./a.out
2 DIMACS/net1.txt
```

Le fichier 'result.txt' contient à présent le réseau à 5 sommets de flot maximum.

```
1 ./a.out
2 DIMACS/net2.txt
```

Le fichier 'result.txt' contient à présent le réseau à 6 sommets de flot maximum.

```
1 ./a.out
2 DIMACS/G_100_300.max
```

Le fichier 'result.txt' contient à présent le réseau à 102 sommets de flot maximum.

```
1 ./a.out
2 DIMACS/G_900_2700.max
```

Le fichier 'result.txt' contient à présent le réseau à 902 sommets de flot maximum.

```
1 ./a.out
2 DIMACS/G_2500_7500.max
```

Le fichier 'result.txt' contient à présent le réseau à 2502 sommets de flot maximum.

Chapitre 4

Description des exemples traités

Tous les fichiers de graphes fournis se trouvent actuellement dans le répertoire **DIMACS**.

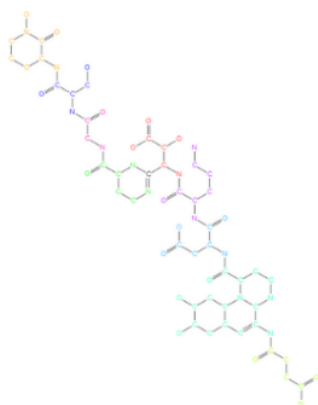
Tous les fichiers ayant été donnés ont été traités. Les résultats obtenus sont les suivants :

- net1.txt : flot maximum = 40.
- net2.txt : flot maximum = 15.
- G_100_300.max : flot maximum = 9860177.
- G_900_2700.max : flot maximum = 28258807.
- G_2500_7500.max : flot maximum = 42791871.

Les résultats sont bien ceux souhaités.

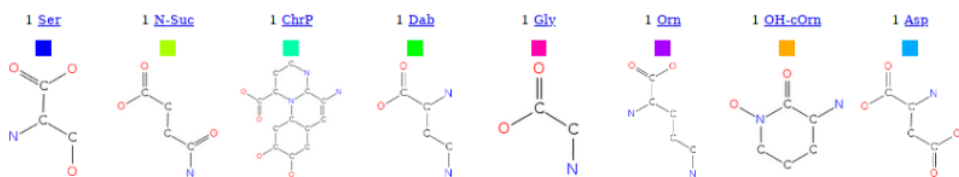
Conclusion

Bilan personnel

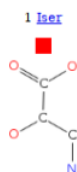


pyoverdinin G4R
Atomic coverage : 0.986
Correctness : 0.894

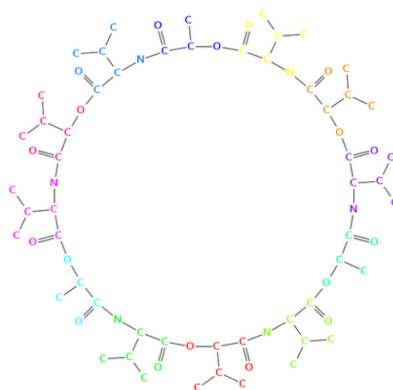
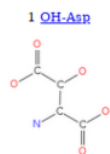
Correct monomers



Incorrect monomers

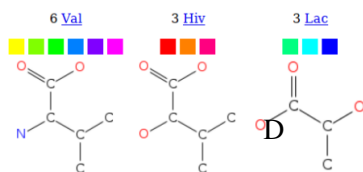


Not found monomers



Valinomycin
Atomic coverage : 1.0
Correctness : 1.0

Correct monomers



Incorrect monomers

Not found monomers

```
> ant s2m
Buildfile: /home/cruz/logiciels/Stage/Smiles2Monomers/build.xml

s2m:
    [java] args : -mono
    [java] args : -rul
    [java] args : -res
    [java] args : -poly
```

```
> ant s2m -Dexec.polymers="folder1/polymers.json" -Dexec.outfolder="fol
der1/res/" -Dexec.residues="folder1/residues.json" -Dexec.learning="fol
der1/learning.json" -Dexec.chains="folder1/chains.json" -Dexec.serials=
"folder1/serials/"
Buildfile: /home/cruz/logiciels/Stage/Smiles2Monomers/build.xml

s2m:
    [java] args : -mono
    [java] args : -rul
    [java] args : -res
```

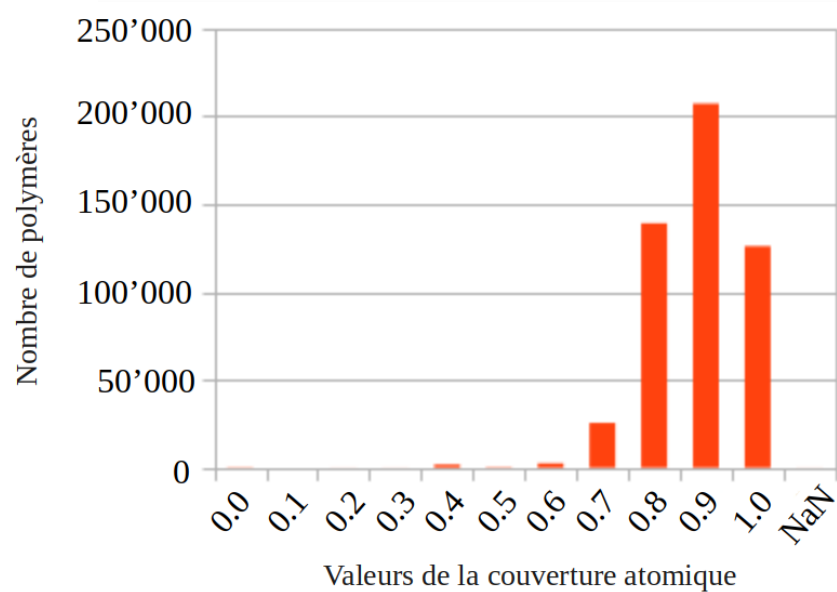
— “. ” : Les Smiles contenant des points sont plusieurs polymères, il faut donc couper au niveau du point et traiter séparément chaque polymère (ex :

”CC (C) (C) OC (=O) N [C@H] (CC1=CC=C (C=C1) I) C (=O) =C . CC (C) (C)
OC (=O) N [C@@H] (CC1=CC=C (C=C1) I) C (=O) =C” devient

”CC (C) (C) OC (=O) N [C@H] (CC1=CC=C (C=C1) I) C (=O) =C” et

”CC (C) (C) OC (=O) N [C@@H] (CC1=CC=C (C=C1) I) C (=O) =C” [ici, les deux po-
lymères sont l’isomère l’un de l’autre]).

```
1 Coverage :
2 0.0 -> 195
3 0.1 -> 0
4 0.2 -> 1
5 0.3 -> 8
6 0.4 -> 1699
7 0.5 -> 315
8 0.6 -> 2375
9 0.7 -> 25427
10 0.8 -> 139092
11 0.9 -> 207199
12 1.0 -> 126079
13 NaN -> 14
```



La majorité des polymères sont recouverts à plus de 70% et le taux de couverture de la majorité des polymères est de 0.9.