Otimização por Colônias de Formigas para o problema do Clique Máximo

Jackson Nunes Silva¹

¹Departamento de Ciência da Computação – Universidade Federal de Minas Gerais Belo Horizonte – MG – Brasil

jacksonns@ufmg.br

Resumo. Esse trabalho apresenta uma abordagem de otimização heurística baseada em colônia de formigas para resolver o problema do clique máximo, que consiste em encontrar o maior subgrafo totalmente conectado dentro de um grafo. Para analisar o impacto da configuração de parâmetros no algoritmo, diferentes parâmetros foram testados e comparados, incluindo o número de formigas, a taxa de evaporação e o peso dos feromônios. Foi possível notar que esses parâmetros desempenham um papel crucial no desempenho do algoritmo e podem afetar significativamente a qualidade das soluções encontradas.

1. Introdução

A otimização por colônias de formigas é uma meta-heurística que se baseia no comportamento social das formigas para resolver problemas de otimização. Esse paradigma foi inicialmente proposto por Marco Dorigo em 1992 e tem sido amplamente estudado e aplicado em várias áreas desde então. Em suma, a inspiração vem principalmente do mecanismo de comunicação entre as formigas, que é o feromônio, uma substância química que é capaz de agir como hormônio fora do corpo do indivíduo secretor, impactando o comportamento dos indivíduos receptores.

Uma das aplicações possíveis desse paradigma é para obter soluções aproximadas para o problema do Clique Máximo, que é conhecidamente da classe NP-Difícil, ou seja, não há algoritmo eficiente conhecido capaz de resolver todas as instâncias em tempo polinomial. Dado um grafo não direcionado, o objetivo desse problema é encontrar um conjunto de vértices mutuamente adjacentes que seja máximo, ou seja, que contenha o maior número possível de vértices. Muitos problemas de distintas áreas podem ser modelados como um Clique Máximo, como redes sociais, bioinformática e otimização de redes.

Neste contexto, a otimização por colônias de formigas surge como uma abordagem promissora para encontrar soluções de alta qualidade para o problema do clique máximo. O algoritmo baseado em colônia de formigas utiliza uma população de agentes virtuais, chamados de formigas, que exploram o espaço de busca para encontrar soluções promissoras. As formigas constroem soluções parciais por meio da construção incremental de cliques e atualizam as trilhas de feromônio de acordo com a qualidade das soluções construídas.

A seguir, na Seção 2 são apresentadas as decisões de implementação da heurística. Em seguida, na Seção 3, discute-se a análise experimental do impacto dos parâmetros em duas instâncias do problema, bem como os resultados obtidos para os variações do número

de formigas, quantidade de iterações, peso e taxa de evaporação dos feromônios. Por fim, na Seção 4, são apresentados um resumo e as conclusões obtidas pelo trabalho.

2. Implementação

A heurística das colônias de formiga segue uma lógica bastante simples: primeiramente o problema é modelado em um grafo (no caso do clique máximo, a modelagem já é direta), posteriormente são inicializadas as trilhas de feromônios (processo explicado na Seção 2.1) e, a cada iteração, cada agente virtual (formiga) constrói uma solução probabilística determinada pelos feromônios depositados (como explicado na Seção 2.2). Após todas as formigas terem construído a solução, a melhor delas é obtida e as trilhas de feromônio são atualizadas (conforme explicado na Seção 2.3)

O algoritmo foi implementado na linguagem de programação Python 3.10 e dividido nos seguintes arquivos:

- aco.py: Contém a definição do algoritmo.
- graph.py: Contém a implementação de um grafo através de listas de adjacência.
- clique.py: Contém a implementação de uma clique a partir de um grafo.
- results.py: Classe utilizada para armazenar resultados das execuções do algoritmo.
- experiments.py: Scripts utilizados para a execução experimental do algoritmo.
- **util.py**: Definição de variáveis globais, como os limites superior e inferior para os valores dos feromônios.
- main.py: Chamada principal do programa.

A execução do programa deve ser feita através do seguinte comando, onde –config é o argumento contendo o caminho até o **arquivo json** com os parâmetros:

```
python main.py --config config_path
```

Um modelo que pode ser seguido para o arquivo json de configuração é o seguinte, onde o campo *ants_num* corresponde ao número de formigas, *iterations* é o número de iterações, *evaporation* é a taxa de evaporação do feromônio (deve ser um valor entre 0 e 1), *alpha* é um peso dado aos feromônios (explicado na Seção 2.2), *file_path* é o caminho para o arquivo contendo a instância do problema do clique máximo e *results_path* é o caminho do arquivo onde devem ser escritos os resultados da execução.

```
"ants_num": 30,
"iterations": 500,
"evaporation": 0.8,
"alpha": 1,
"file_path": "path_to_file",
"results_path": "path_to_results"
}
```

A seguir, são comentadas as decisões de implementação a respeito das etapas principais da otimização por colônias de formigas, como inicialização dos feromônios, construção das soluções parciais (cliques, no caso do problema em questão) e atualização das trilhas de feromônios.

2.1. Inicialização dos feromônios

O algoritmo implementado utiliza a abordagem MAX-MIN para Colônias de formigas [Stützle and Hoos 2000], que impõe explicitamente limites inferiores e superiores para as trilhas de feromônio (com $0 \le \tau_{min} \le \tau_{max}$). O objetivo de limitar os valores de feromônio dentro de um intervalo é evitar a estagnação prematura da busca, ou seja, uma situação em que todas as formigas constroem a mesma solução repetidamente, de modo que não seja possível encontrar soluções melhores. Assim, os limites impostos garantem que as diferenças relativas entre as trilhas de feromônio não se tornem muito extremas.

Para a definição inicial dos feromônios, todos são inicializados com o valor de τ_{max} , o que garante que durante os primeiros ciclos a diferença relativa entre as trilhas de feromônio seja pequena. Assim, a ênfase é dada à exploração no início da busca (vértices tem probabilidades semelhantes de serem escolhidos). Conforme explicado em [Solnon and Fenet 2006], os melhores desempenhos médios dos algoritmos baseados em colônias de formigas para o problema do Clique Máximo foram definindo $\tau_{min}=0.01$ e $\tau_{max}=6$, portanto essa foi a configuração escolhida para a execução desse trabalho.

2.2. Construção das cliques

A construção da clique é guiada por um processo probabilístico, no qual a probabilidade de um novo vértice ser adicionado à clique é proporcional aos feromônios depositados nas arestas que conectam esse novo vértice a cada um dos vértices pertencentes à clique em construção (C_k) . A fórmula da probabilidade de um vértice v_i ser selecionado segue o que foi apresentado em [Solnon and Fenet 2006] e é definida pela Equação 1.

$$p(v_i) = \frac{\tau(v_i)^{\alpha}}{\sum_{v_j \in C_k} \tau(v_j)^{\alpha}}$$
(1)

Nesse caso, o valor de α é um parâmetro que funciona como um peso para o valor do feromônio (seu impacto foi discutido na Seção 3) e $\tau(v_i)$ é dependente da quantidade de feromônio depositada nas arestas que conectam o vértice v_i aos vértices já pertencentes à clique parcial. Sua fórmula é dada pela Equação 2, onde τ_{ij} é o feromônio depositado na aresta (i,j).

$$\tau(v_i) = \sum_{v_j \in C_k} \tau_{ij} \tag{2}$$

2.3. Atualização dos feromônios

No final de cada ciclo, as trilhas de feromônio são atualizadas. Inicialmente, todos os feromônios nas arestas sofrem um processo de "evaporação", que consiste em multiplicar o valor do feromônio pelo fator de 1 - taxa de evaporação (valor entre 0 e 1 definido como parâmetro do algoritmo). Com isso, arestas não trilhadas vão ficando cada vez menos prováveis de serem escolhidas pelas formigas.

Após a atualização de todas as arestas, é selecionado a a melhor clique construída pelas formigas naquela iteração e os feromônios das arestas pertencentes à clique são acrescidas de um fator τ_{ant} , definido pela Equação 3, onde $|C_{best}|$ é o número de vértices

da melhor clique entre todas as iterações (até o momento) e $|C_k|$ é o número de vértices da maior clique construída na iteração atual.

$$\tau_{ant} = \frac{1}{1 + |C_{best}| + |C_k|} \tag{3}$$

3. Experimentação

A condução dos testes experimentais se deu através da análise inicial da influência dos parâmetros na qualidade da solução utilizando duas instâncias do problema, obtidas no acervo DIMACS. Entre os parâmetros avaliados, foram considerados o número de formigas, o número de iterações, o peso α e a taxa de evaporação. A fim de obter uma conclusão consistente, visto que o algoritmos é estocástico, cada configuração de parâmetros foi executado 30 vezes e foi coletada a média dos resultados. O objetivo foi gradativamente otimizar os parâmetros e verificar alguma possível melhoria no algoritmo.

A seguir, na Subseção 3.1, são apresentados os resultados para a instância p_hat700– 2^1 . Já na Subseção 3.2, são apresentados os resultados para a instância brock800 4^2

3.1. Dataset p hat700-2

Essa instância considerada é composta por 700 vértices e 121.728 arestas, a sua solução ótima é conhecida, que é uma clique de tamanho 44. Inicialmente, foi testada a influência do número de formigas na qualidade da solução, portanto foram testadas configurações com 5, 10, 15, 20 e 30 formigas, fixando o número de iterações em 300, α em 1 e taxa de persistência igual a 0.8. A média dos tamanhos das melhores cliques por iteração podem ser observados na Figura 1.

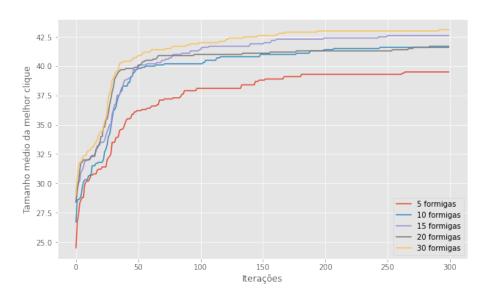


Figura 1. Variação do número de formigas

https://iridia.ulb.ac.be/~fmascia/files/DIMACS/p_hat700-2.clq

²https://iridia.ulb.ac.be/~fmascia/files/DIMACS/brock800_4.cl

Como é possível observar, um número de formigas muito baixo (como 5, representado pela linha vermelha) tende a convergir para soluções piores, uma vez que possui uma menor exploração do espaço de busca. O melhor resultado foi obtido utilizando 30 formigas e já no primeiro teste uma clique de tamanho 44 (tamanho ótimo) foi encontrada. Mesmo tendo obtido o ótimo em uma das 30 execuções, é possível perceber que a solução não converge para 44 (a linha amarela converge para um valor próximo de 42.5), portanto, os testes foram continuados para tentar uma melhoria.

Em seguida, foi decidido utilizar diferentes variações para os parâmetros α e taxa de evaporação. As configurações utilizadas foram para α igual a 1 ou 2 e taxa de persistência do feromônio igual a 0.8, 0.9 ou 0.99 (1 - taxa de evaporação). Os resultados obtidos para cada combinação desses valores podem ser observados na Figura 2.

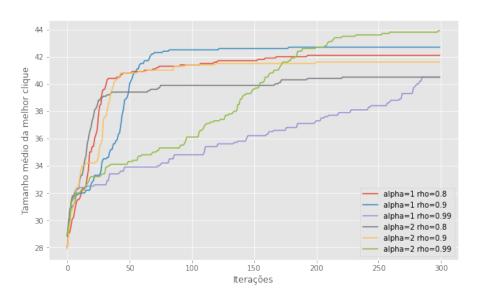


Figura 2. Variação de α e taxa de evaporação (rho)

Como é possível observar, ambos os parâmetros tem uma influência bastante significativa na qualidade da solução. Quando o valor de α é diminuído, existe um ênfase maior na diversificação, pois as formigas se tornam menos sensíveis a trilhas de feromônio. O mesmo efeito é obtido quando aumentamos o parâmetro "rho" (como esse valor é multiplicado pelo valor do feromônio durante a atualização, quanto maior a taxa, menor a diminuição da força do feromônio). Ao aumentar a habilidade exploratória das formigas, geralmente se encontra melhores soluções, mas em contrapartida leva mais tempo para encontrá-las. Um bom balanceamento de exploração e ênfase foi encontrado com a configuração $\alpha=2$ e rho = 0.99, como mostra a linha verde da Figura 2, que convergiu para a solução ótima (tamanho 44).

3.2. Dataset brock800 4

Essa instância considerada é composta por 800 vértices e 207.643 arestas, a sua solução ótima é conhecida, que é uma clique de tamanho 26. Para encontrar a combinação de parâmetros adequada, a mesma metodologia foi aplicada, começando inicialmente pela variação do número de formigas.

Como é possível observar pela Figura 3, o número de formigas igual a 30 continua

obtendo as melhores soluções, no entanto, o melhor valor obtido foi 19, que está bem além do valor ótimo (26).

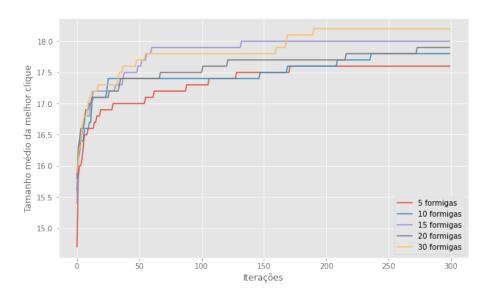


Figura 3. Variação do número de formigas em 300 iterações

A fim de tentar melhorar a solução, a primeira tentativa é aumentar o número de iterações, para observar se o algoritmo consegue convergir para soluções maiores quando aumentamos o número de ciclos. Executando com o dobro de iterações (600), foi obtido o mesmo resultado como pode ser observado pela Figura 4, então realmente há uma convergência para um valor que está longe do ótimo.

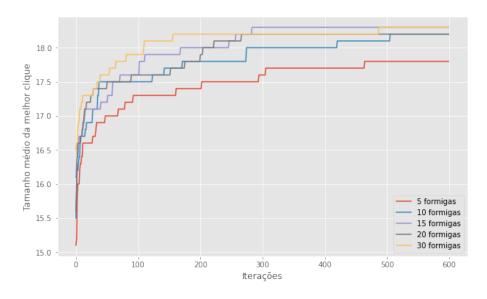


Figura 4. Variação do número de formigas em 600 iterações

Com o fim de tentar melhorar a solução, foram testados diferentes valores de α e taxa de persistência do feromônio. Para isso, foi considerada a mesma combinação de valores utilizada no conjunto anterior. Como é possível observar pela Figura 5, a melhor combinação obtida foi de α igual a 1 e "rho" igual a 0.9, pois esses parâmetros favorecem

a exploração do espaço de busca, então soluções ligeiramente superiores são encontradas. No entanto, o maior valor obtido com essa configuração (20) ainda está muito além da clique ótima (26). Um possível motivo para o algoritmo implementado não ter encontrado o valor ótimo, pode ser algum erro no modo de atualização do feromônio, ou seja, uma implementação equivocada do conceito teórico. Para confirmar essa hipótese, uma análise mais minuciosa do algoritmo deveria ser feita, o que não foi concluído em tempo hábil.

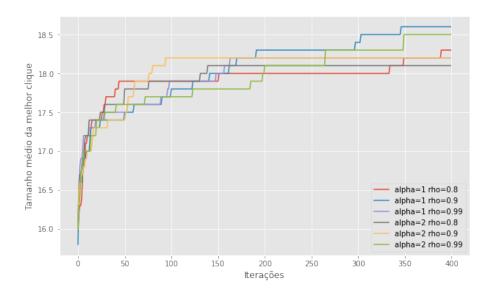


Figura 5. Variação de α e taxa de evaporação (rho)

4. Conclusões

Esse trabalho apresentou bem o poder da otimização por colônias de formigas em aproximar soluções de problemas inerentemente difíceis. Aplicado no contexto do Clique Máximo, foi possível observar e experimentar diversas combinações de parâmetros, bem como analisar seu impacto na qualidade das soluções obtidas.

Em suma, foi possível notar que o número de formigas é um ponto importante para o algoritmo, geralmente, um número perto de 30 garante soluções melhores para o problema, no entanto são mais lentas. Mas o principal ponto notado foi em como é possível equilibrar a exploração e a ênfase do espaço de busca através dos parâmetros de peso e evaporação dos feromônios. Aumentando o peso ou aumentando a taxa de evaporação, o foco vai para a exploração, mas é possível encontrar um ponto de equilíbrio, aumentando um e diminuindo o outro, o que favorece melhores soluções. No geral, o trabalho foi uma excelente oportunidade de aprender na prática o funcionamento de algoritmos baseados em colônias de formiga.

Referências

[Solnon and Fenet 2006] Solnon, C. and Fenet, S. (2006). A study of aco capabilities for solving the maximum clique problem. *Journal of Heuristics*, 12:155–180.

[Stützle and Hoos 2000] Stützle, T. and Hoos, H. H. (2000). Max-min ant system. *Future Generation Computer Systems*, 16(8):889–914.