Algoritmos

Pedro Hokama

1/23

Problema do Alinhamento de Sequências

Sejam $X=x_1x_2\ldots x_m$ e $Y=y_1y_2\ldots y_n$ duas sequências sobre um alfabeto Σ . Deseja-se formar X' e Y' inserindo lacunas (-) em X e/ou Y até que |X'|=|Y'|=L, de modo a minimizar a penalidade total

$$C(X', Y') = \sum_{k=1}^{L} c(X'_k, Y'_k),$$

onde

$$c(a,b) = egin{cases} 0, & ext{se } a = b \in \Sigma, \ eta, & ext{se } a
eq b \in \Sigma, \ lpha, & ext{se } a = - ext{ ou } b = -. \end{cases}$$

Fontes

- [clrs] Algoritmos: Teoria e Prática (Terceira Edição) Thomas H. Cormen, Charles Eric Leiserson, Ronald Rivest e Clifford Stein.
- [timr] Algorithms Illuminated Series, Tim Roughgarden
- Desmistificando Algoritmos, Thomas H. Cormen.
- Algoritmos, Sanjoy Dasgupta, Christos Papadimitriou e Umesh Vazirani
- Stanford Algorithms https://www.youtube.com/playlist?list=PLXFMmlk03Dt7Q0xr1PIAriY5623cKiH7V https://www.youtube.com/playlist?list=PLXFMmlk03Dt5EMI2s2WQBsLsZ17A5HEK6
- Conjunto de Slides dos Professores Cid C. de Souza, Cândida N. da Silva, Orlando Lee, Pedro J. de Rezende
- Conjunto de Slides do Professores Cid C. de Souza para a disciplina MO420
 Qualquer erro é de minha responsabilidade.

2/23

Considere as sequências $X=\mathsf{ACGT}$ e $Y=\mathsf{AGA}$, com penalidade de lacuna $\alpha=2$ e de mismatch $\beta=1$. Um possível alinhamento seria:

$$X'$$
: A C G T Y' : A G A $-$

com custo total:

$$C = c(A, A) + c(C, G) + c(G, A) + c(T, -) = 0 + 1 + 1 + 2 = 4.$$

Entretanto um alinhamento melhor é:

$$X'$$
: A C G T Y' : A G A

O custo total é:

$$C(X', Y') = c(A, A) + c(C, -) + c(G, G) + c(T, A) = 0 + 2 + 0 + 1 = 3.$$

Logo, o custo mínimo de alinhamento é 3.

5 / 23

Recorrência do Problema de Alinhamento

A partir da subestrutura ótima, obtemos a seguinte recorrência:

$$D(i,j) = \begin{cases} 0, \text{se } i = j = 0, \\ i\alpha, \text{se } j = 0, \\ j\alpha, \text{se } i = 0, \\ \min \begin{cases} D(i-1,j-1) + (0 \text{ se } x_i = y_j, \text{ senão } \beta), \\ D(i-1,j) + \alpha, \\ D(i,j-1) + \alpha. \end{cases}$$

O valor D(m, n) fornece o custo mínimo de alinhamento entre X e Υ.

Subestrutura Ótima do Problema de Alinhamento

Sejam $X = x_1 x_2 \dots x_m$ e $Y = y_1 y_2 \dots y_n$. O alinhamento ótimo de X e Y possui a seguinte propriedade:

 $D(i,j) = \text{custo mínimo de alinhar } x_1 x_2 \dots x_i \text{ com } y_1 y_2 \dots y_i.$

Então, se conhecemos a solução ótima dos prefixos menores, podemos construir a solução ótima de prefixos maiores. Em particular, o alinhamento ótimo de X e Y termina com uma das três situações:

- \bigcirc x_i alinhado com y_i ;
- x_i alinhado com uma lacuna;
- 3 y; alinhado com uma lacuna.

Essa decomposição garante a subestrutura ótima.

Algoritmo 1: Alinhamento-Seg(X, Y, α , β)

```
1 D[0,0]=0:
```

2 para i = 1, 2, ..., m faça

 $D[i,0] = i \cdot \alpha$;

4 para j = 1, 2, ..., n faça

 $D[0,j]=j\cdot\alpha;$

6 para i = 1, 2, ..., m faça

para $i = 1, 2, \ldots, n$ faça

$$D[i,j] = \min egin{cases} D[i-1,j-1] + egin{cases} 0, & ext{se } x_i = y_j \ eta, & ext{caso contrário} \end{cases}, \ D[i-1,j] + lpha, \ D[i,j-1] + lpha \end{cases}$$
 ;

9 devolva D[m, n];

7 / 23

6/23

Multiplicação de cadeia de Matrizes

- Em diversas áreas da computação, muitos problemas requerem multiplicação de matrizes como um de seus procedimentos.
- Tratamento de imagem, Aprendizado de Máquinas, etc.
- Um problema comum é dado uma sequência de matrizes $\langle A_1, A_2, \dots, A_n \rangle$, encontrar o produto $A_1 A_2 \dots A_n$.
- A multiplicação de matrizes é uma operação associativa. O que significa que podem ser parentizadas em qualquer ordem. e. g.,

$$A_1A_2A_3$$

pode ser calculado

 $((A_1A_2)A_3)$

ou também

 $(A_1(A_2A_3))$

9 / 23

11/23

$$\begin{pmatrix} 1 \cdot 7 + 2 \cdot 10 & 1 \cdot 8 + 2 \cdot 11 & 1 \cdot 9 + 2 \cdot 12 \\ 3 \cdot 7 + 4 \cdot 10 & 3 \cdot 8 + 4 \cdot 11 & 3 \cdot 9 + 4 \cdot 12 \\ 5 \cdot 7 + 6 \cdot 10 & 5 \cdot 8 + 6 \cdot 11 & 5 \cdot 9 + 6 \cdot 12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 27 & 30 & 33 \\ 61 & 68 & 75 \\ 95 & 106 & 117 \end{pmatrix}.$$

Agora, multipliquemos $A \times B$ por C:

$$(A \times B) \times C = \begin{pmatrix} 27 & 30 & 33 \\ 61 & 68 & 75 \\ 95 & 106 & 117 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 13 & 14 \\ 15 & 16 \\ 17 & 18 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 27 \cdot 13 + 30 \cdot 15 + 33 \cdot 17 & 27 \cdot 14 + 30 \cdot 16 + 33 \cdot 18 \\ 61 \cdot 13 + 68 \cdot 15 + 75 \cdot 17 & 61 \cdot 14 + 68 \cdot 16 + 75 \cdot 18 \\ 95 \cdot 13 + 106 \cdot 15 + 117 \cdot 17 & 95 \cdot 14 + 106 \cdot 16 + 117 \cdot 18 \end{pmatrix} =$$

Quantas multiplicações foram necessárias?

Sejam Sejam as matrizes A, B e C definidas por

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 13 & 14 \\ 15 & 16 \\ 17 & 18 \end{pmatrix}.$$

Primeiro, calculemos $A \times B$:

$$A \times B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 7 + 2 \cdot 10 & 1 \cdot 8 + 2 \cdot 11 & 1 \cdot 9 + 2 \cdot 12 \\ 3 \cdot 7 + 4 \cdot 10 & 3 \cdot 8 + 4 \cdot 11 & 3 \cdot 9 + 4 \cdot 12 \\ 5 \cdot 7 + 6 \cdot 10 & 5 \cdot 8 + 6 \cdot 11 & 5 \cdot 9 + 6 \cdot 12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 27 & 30 & 33 \\ 61 & 68 & 75 \\ 95 & 106 & 117 \end{pmatrix}.$$

10 / 23

12 / 23

Agora iremos calcular $A \times (B \times C)$. Primeiro, calculemos $B \times C$:

$$B \times C = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 13 & 14 \\ 15 & 16 \\ 17 & 18 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 7 \cdot 13 + 8 \cdot 15 + 9 \cdot 17 & 7 \cdot 14 + 8 \cdot 16 + 9 \cdot 18 \\ 10 \cdot 13 + 11 \cdot 15 + 12 \cdot 17 & 10 \cdot 14 + 11 \cdot 16 + 12 \cdot 18 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 364 & 388 \\ 499 & 532 \end{pmatrix}.$$

Agora, multipliquemos A por $B \times C$:

$$A \times (B \times C) = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 364 & 388 \\ 499 & 532 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 \cdot 364 + 2 \cdot 499 & 1 \cdot 388 + 2 \cdot 532 \\ 3 \cdot 364 + 4 \cdot 499 & 3 \cdot 388 + 4 \cdot 532 \\ 5 \cdot 364 + 6 \cdot 499 & 5 \cdot 388 + 6 \cdot 532 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1362 & 1452 \\ 3088 & 3392 \\ 4814 & 5132 \end{pmatrix}.$$

E agora? Quantas multiplicações foram necessárias?

- Note que é uma diferença de 50%.
- Mas em matrizes maiores, a diferença seria ainda maior.

Algoritmo 2: MatrizMultiply(A, B)

Entrada: Duas matrizes
$$A(p,q)$$
 e $B(q,r)$
Saída: o produto $A \times B$
1 para $i=1,2,\ldots,p$ faça
2 para $j=1,2,\ldots,r$ faça
3 $c_{ij}=0;$
4 para $k=1,2,\ldots,q$ faça
5 $c_{ij}=c_{ij}+a_{ik}\cdot b_{kj};$
6 devolva C ;

- Qual a complexidade desse algoritmo?
- $O(pqr)^1.$

• Queremos então descobrir qual a melhor ordem para fazer as multiplicações.

Problema da Multiplicação de Cadeia de Matrizes

Dada uma sequência $\langle A_1,A_2,\ldots,A_n\rangle$. expresse uma parentização do produto $A_1A_2\ldots A_n$ de forma que o número de multiplicações escalares seja mínimo.

- Por exemplo matrizes de dimensões A (10, 100), B (100, 5) e C (5, 50)
- Calculando (A B) C
- Para calcular AB = Z (10, 5), fazemos 10 · 100 · 5 = 5000 multiplicações.
- Para calcular ZC, fazemos $10 \cdot 5 \cdot 50 = 2500$.
- Totalizando 7500 multiplicações
- Para calcular A (B C),
- Para calcular B C = X(100, 50), fazemos $100 \cdot 5 \cdot 50 = 25000$
- Para calcular AX, fazemos $10 \cdot 100 \cdot 50 = 50000$.
- Totalizando 75000 multiplicações!
- a diferença é entre 7500 multiplicações e 75000 multiplicações.
 10x mais rápido.
- Mas é comum termos matrizes muito maiores, e uma cadeia muito maior de matrizes.

14 / 23

- Qual o número de possíveis soluções?
- Seja P(n) o número de formas de parentizar um problema com n matrizes.

$$P(n) = \begin{cases} 1 & \text{se } n = 1, \\ \sum_{k=1}^{n-1} P(k)P(n-k) & \text{se } n \le 2. \end{cases}$$

 $\Omega(2^n)$

13 / 23

- Vamos então usar programação dinâmica
 - ► Caracterizar a estrutura de uma solução ótima
 - ▶ Definir recursivamente o valor de uma solução
 - ► Calcular o valor de uma solução ótima
 - ► Construir a solução ótima com as informações calculadas.

15/23 16/23

 $^{^1}$ existem algoritmos mais eficientes, como o algortimo de Strassen, mas esse não é o foco agora

Uma estrutura de parentização ótima

- Vamos denotar A_{i...j} a matriz que resulta da multiplicação da cadeira A_iA_{i+1}...A_i.
- Essa multiplicação pode ser dividida em duas partes $A_{i...k}$ e $A_{k+1...k}$
- Qual é o custo (quantidade de multiplicações) para obter $A_{i...j}$ considerando essa divisão?
- É o custo de obter $A_{i...k}$ mais o custo de obter $A_{k+1...j}$ mais o custo de multiplicar essas duas.
- Substrutura ótima: uma parentização ótima de $A_i A_{i+1} \dots A_j$ inclui alguma divisão $A_i A_{i+1} \dots A_k$ e $A_{k+1} \dots A_i$
- Necessariamente $A_i A_{i+1} \dots A_k$ deve ser parentizado de maneira ótima, senão poderíamos reduzir o custo total.

17 / 23

Algoritmo 3: Matrix-Chain-Order(p)

```
Entrada: A sequência de dimensões das matrizes
```

```
Saída: o custo da solução ótima
1 para i = 1, 2, ..., n faça
```

3 // / é o comprimento da cadeia

4 para l = 2, ..., n faça 5 para i = 1, n - l + 1 faca

i = i + l - 1;

6 j = i + l - 1;7 $m[i, j] = \infty;$

8 para $k = 1, \ldots, j-1$ faça

 $q = m[i, k] + m[k+1, j] + p_{i-1}p_kp_i;$

se q < m[i,j] então

m[i,j] = q;

12 devolva C;

11

Solução recursiva

• Seja m[i,j] o menor custo para obter $A_{i...j}$. Na solução ótima existe um k^* tal que:

$$m[i,j] = m[i,k^*] + m[k^*+1,j] + p_{i-1}p_k^*p_j$$

• Obviamente não sabemos qual é o k^* mas podemos testar todos.

$$m[i,j] = \begin{cases} 0 & \text{se } i = j, \\ \min_{i \le k < j} \{ m[i,k] + m[k+1,j] + p_{i-1}p_k p_j \} & \text{se } i < j, \end{cases}$$

18/23

- Para obter a solução ótima, poderíamos reconstruí-la.
- Mas iremos adicionar uma matriz s que ira ajudar nessa tarefa.

19/23

Algoritmo 4: Matrix-Chain-Order(p)

```
Entrada: A sequência de dimensões das matrizes
   Saída: o custo da solução ótima
1 para i = 1, 2, ..., n faça
       m[i, i] = 0;
3 // / é o comprimento da cadeia
4 para l = 2, ..., n faça
       para i = 1, n - l + 1 faça
          j = i + l - 1;
          m[i,j]=\infty;
          para k = i, \ldots, j-1 faça
8
             q = m[i, k] + m[k + 1, j] + p_{i-1}p_kp_j;
9
             se q < m[i,j] então
10
                 m[i,j]=q;
11
                 s[i,j]=k;
12
13 devolva C;
```

21/23

30, 35 35, 15 15, 5

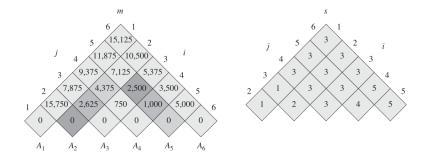
5, 10 10, 20 20, 25

• Considere agora o seguinte exemplo:

 A_1

matriz

dimensão



• Qual a complexidade desse algoritmo?

23 / 23