Úvod do grafových algoritmů.

Orientovaný, neorientovaný graf. BFS. DFS. Dijkstra algoritmus.

Tomáš Bayer | bayertom@natur.cuni.cz

Katedra aplikované geoinformatiky a kartografie, Přírodovědecká fakulta UK.

Obsah přednášky

1. Graf (1/2)

Graf: datová struktura popisující vztahy mezi objekty.

Datová struktura tvořená uzly U a hranami H.

Zpravidla konečný počet $\Rightarrow$ konečný graf.

Topologicko/geometrický model skutečnosti.

Informace o poloze méně důležitá než vzájemný vztah.

Lze znázornit nekonečně mnoha způsoby.

Široké využití v mnoha oblastech:

Úlohy o dopravním spojení, logistické problémy, optimální trasa, plánování, navigace, propustnost sítě, přenos energie, komprese dat.

Dělení grafů:

- neorientované,
- orientované,
- částečně orientované.

3. Neorientovaný graf

Uspořádaná trojice disjunktních množin

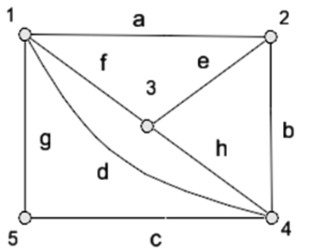
$$G = \langle H, U, \rho \rangle \, ,$$

kde H představují hrany, U uzly, ρ incidenci grafu G.

Incidence

$$\rho : H \to U \otimes U,$$

přiřazuje každé hraně z množiny H neprázdnou množinu dvojic uzlů z množiny U.



Množina uzlů: $U = \{1, 2, 3, 4, 5\}$,

Množina hran: $H = \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$,

Incidence: $\rho(a) = \{1, 2\}$, $\rho(b) = \{2, 4\}$, $\rho(c) = \{4, 5\}$, $\rho(d) = \{1, 4\}$, $\rho(e) = \{2, 3\}$, $\rho(f) = \{1, 3\}$, $\rho(g) = \{1, 5\}$, $\rho(h) = \{3, 4\}$.

4. Sled, tah, cesta

Sled: uspořádaná posloupnost uzlů a hran,

$$\langle 1, a, 2, e, 3, f, 1, d, 4, b, 2, e, 3, h, 4, c, 5 \rangle .$$

Tah: sled, ve kterém se vyskytuje každá hrana nejvýše jednou,

$$\langle 1, a, 2, e, 3, f, 1, g, 5, c, 4, b, 2 \rangle .$$

Uzavřený tah: začíná a končí ve stejném uzlu.
Cesta: tah, ve kterém se každý uzel vyskytuje nejvýše jednou,

$$\langle 3, f, 1, a, 2, b, 4, c, 5 \rangle .$$

Kružnice: uzavřená cesta, začíná a končí ve stejném uzlu,

$$\langle 3, f, 1, g, 5, c, 4, b, 2, e, 3 \rangle .$$

Stupeň uzlu $d(u)$:
Počet hran, které incidují s uzlem u, důležitá sudost, lichost.

$$\sum_{u \in G} d(u) = 2 \, \|H\|$$

Příklady: $d(1) = 2$, $d(5) = 1$

5. Orientovaný graf

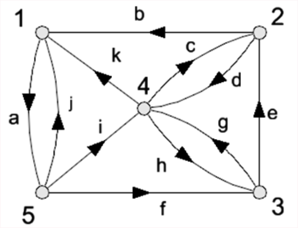
Uspořádaná trojice disjunktních množin $G = \langle H, U, \sigma \rangle$, kde

$$\sigma : H \to U \times U.$$

Pro $h \in H$

$$\sigma(h) = \{u, v\},$$

kde u je počáteční a v koncový uzel.



Stupeň uzlu: suma vstupujících $d^+(u)$ a vystupujících hran $d^-(u)$

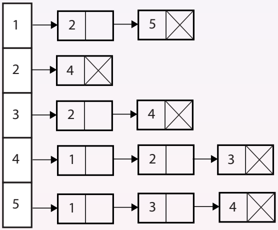
$$d(u) = d^+(u) + d^-(u).$$

6. Reprezentace grafů

Maticová reprezentace:

Výhodná pro výpočty, u řídkých grafů mnoho nulových prvků.

Maticová reprezentace neefektivní, velké paměťové nároky.



Reprezentace spojovým seznamem :

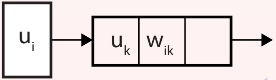
Ukládáme jen uzly, mezi kterými jsou vztahy, menší paměťové nároky.

Méně přehledné pro rozsáhlé grafy.

V praxi použit 2D seznam: 1D seznam, každá položka opět 1D seznam.

Ohodnocené grafy:

Přidáno ohodnocení w_{ik} hrany u_{ik}.



7. Spojová reprezentace v Pythonu

Spojová reprezentace grafu prostřednictvím Dictionary

```
key: value
```

Klíčem uzel, hodnotou vnořený seznam incidujících uzlů.

```
V1 : [V1, V2, ..., Vk]
```

Obecný tvar reprezentace:

```
G={
   V1 : [V1, V2, ..., Vk],
   V2 : [V1, V2, ..., Vk],
   ...
   Vk : [V1, V2, ..., VK]
  }
```

Grafy s ohodnocením:

```
G={
   V1 : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk},
   V2 : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk},
   ...
   Vk : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk}
  }
```

8. Prohledávání grafu

Systematické procházení hran a uzlů grafu dle zadané strategie.

Nejčastěji řešené úlohy:

1. Dostupnost uzlu v z u.
2. Množina všech uzlů dostupných z u.
3. Nalezení cesty z u do v (libovolná, optimální).
4. Nalezení cesty z u do všech dosažitelných vrcholů.

Aplikace v oblasti geoinformatiky, logistiky, dopravy, navigace.

Techniky prohledávání grafu:

- Prohledávání do šířky.
- Prohledávání do hloubky.
- Kombinace + heuristiky.

9. Prohledávání grafu do šířky

BFS (Breadth First Search).

Častá strategie pří procházení grafu.

Vychází z něj: hledání minimální kostry, nejkratší cesty.

Lze použít pro neorientované/orientované grafy.

Idea:

- Postupné rozhlížení z uzlu u do všech jeho doposud neprohledaných sousedů v.
- Získáme uzly v jsou z tohoto uzlu dostupné.
- Následně skok na prvního souseda u, opakování pro dosud neprohledané uzly u.

Výsledek:

Strom hledání do šířky: BF strom.

- Seznam všech uzlů dosažitelných z výchozího uzlu.
- Cesta do těchto uzlů tvořená minimem hran.

BF strom uložen jako P-strom, strom předchůdců.

Velmi efektivní reprezentace.

Složitost $O(\|U\| + \|H\|)$.

10. Rozdělení uzlů

rovádíme značkování uzlů do kategorií.

Aby bylo jasné, které lze ještě použít, a které již nikoliv.

3 kategorie uzlů:

- *Nové uzly (New, White)*
  Dosud neobjevené uzly.
  Uzel, na který narazíme poprvé.
- *Otevřené uzly (Open, Gray)*
  Již objevený uzel.
  Prozkoumáni někteří sousedé.
- *Uzavřené uzly (Closed, Black)*
  Již objevený uzel.
  Prozkoumáni všichni sousedé.

Grafy neobsahující cykly: není třeba značkovat uzly.

11. Princip BFS

Nezohledňuje ohodnocení hran grafu: všechny jednotkové.

Na začátku všechny uzly “N”, následně “O”, potom “C”.

Uzly a atributem “O” uloženy v Q.

Princip BFS:

- Z fronty Q vezmi aktuální uzel u .
- Pro každé v sousedící s u opakuj následující kroky:
  Pokud má v atribut “N”, změň ho na “O”.
  Vytvoř novou hranu $\{u, v\}$ a přidej ji do BF stromu.
- Poté změň stav u na “C”.

Místo přidávání $\{u, v\}$ do BF stromu lze využít *předchůdce uzlu* v.

Předchůdce uzlu.

Uzel u je předchůdcem p uzlu v

$$p(v) = u.$$

Na základě znalosti $p(v)$ lze cestu zpětně zrekonstruovat (netřeba přidávat $\{u, v\}$ do BF).

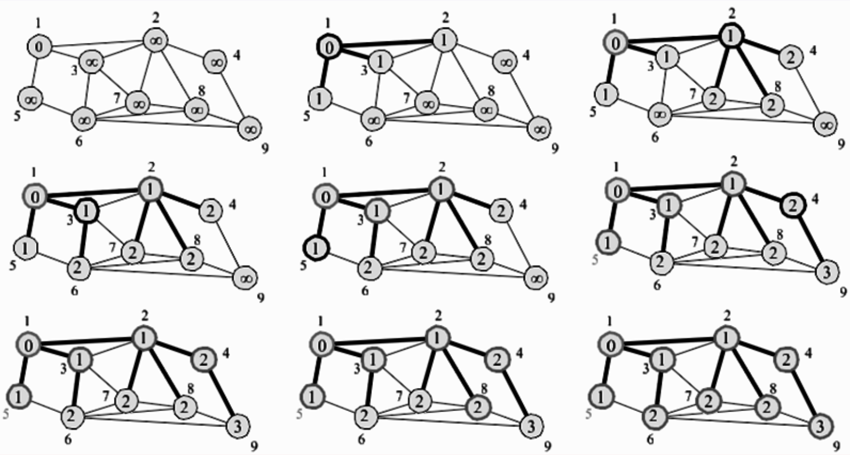
Rekonstrukce cesty od uzlu v ke kořenu u

$$\langle v, p(v), p(p(v)), ..., u\rangle .$$

Pomocné proměnné.

BFS využívá 3 pomocné proměnné:

12. Ukázka BFS



13. Implementace BFS

```
def BFS(G, u):
    s = ['N'] * (len(G)+1)       #All vertices are new
    p = [None] * (len(G)+1)      #Without predecessors
    d = [-1] * (len(G)+1)        #No distance
    Q = []                       #Empty queue
    Q.append(u)                  #Add start vertex to Q
    s[u] = 'O'                   #Set as open
    d[u] = 0                     #Set its distance
    while Q:
        u = Q.pop(0)             #Pop first node
        for v in G[u]:           #Browse incident nodes
            if s[v] == 'N':      #We found a new node
                s[v] = 'O'       #Change status to Open
                d[v] = d[u] + 1  #Compute distance
                p[v] = u         #Set predecessors
                Q.append(v)      #Add v to Q
        s[u] = 'C'               #Change status
```

Pokud nás nezajímá vzdálenost d[v].

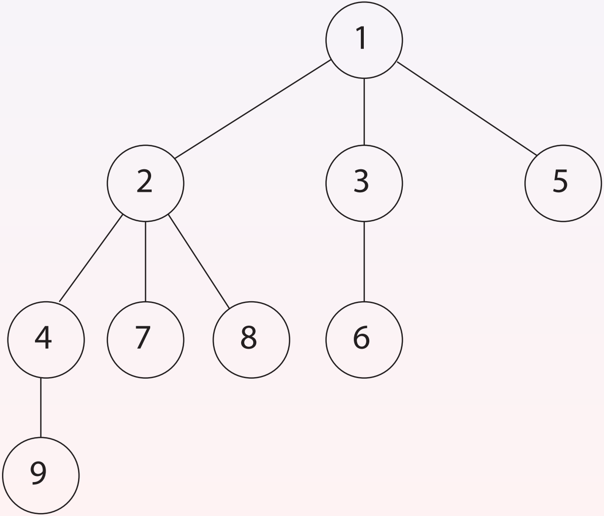
14. Ukázka činnosti algoritmu, $u = 1$

Aktualizace předchůdců a stav Q.

$\#$	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7	u_8	u_9	Q	$Q \leftarrow$
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1,	2,3,5
2	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	2, 3, 5	4,7,8
3	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	3, 5, 4, 7, 8	6
4	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	5, 4, 7, 8, 6	
5	-1	1	1	2	1	-1	-1	-1	-1	4, 7, 8, 6	9
6	-1	1	1	2	1	-1	2	-1	-1	7, 8, 6, 9	
7	-1	1	1	2	1	-1	2	2	-1	8, 6, 9	
8	-1	1	1	2	1	3	2	2	-1	6, 9	
9	-1	1	1	2	1	3	2	2	4	9	

Obsah Q: procházení BF stromu po úrovních.

15. Výsledný BF strom



16. Graf a jeho popis

Popis grafu:

```
G = {
    1 : [2, 3, 5],
    2 : [1, 3, 4, 7, 8],
    3 : [1, 2, 6, 7],
    4 : [2, 9],
    5 : [1, 6],
    6 : [3, 5, 7, 8, 9],
    7 : [2, 3, 6, 8],
    8 : [2, 6, 7, 9],
    9 : [4, 6, 8]
}
```

Výsledky:

```
print(p)
print(d)
print(s)
>>[None, 1, 1, 2, 1, 3, 2, 2, 4]
>>[0, 1, 1, 2, 1, 2, 2, 2, 3]
>>['C', 'C', 'C', 'C', 'C', 'C', 'C', 'C', 'C']
```

17. Zpětná rekonstrukce cesty

Cesta mezi uzly $\langle u, v \rangle$.

Postup od koncového uzlu v blížíme k počátečnímu uzlu u.

Využití předchůdce $p[v]$.

Opakujeme, dokud $v \neq u$.

```
def createPath(u, v, p):
    path = []                       //Create empty path
    while v != u and v != -1:       //Until we reach a start node
        path.append(v)              //Add current node
        v = p[v]                    //Go to the predeccessor
    path.append(v)                  //Add last vertex
    return path
```

Volání:

```
createPath(1, 9, p)
>> 1 2 4 9
```

Existuje i rekurzivní implementace.

Založena na opakovaném zkracování cesty.

18. Prohledávání grafu do hloubky

DFS (Depth First Search)

Prohledávání grafu s cílem dostat se do grafu co nejhlouběji.

Postupné procházení všech možných cest grafem.

Analogie bludiště: vracíme se zpět, když cesta nepokračuje.

Strategie známa jako *Backtracking*.

Jedna ze základních metod procházení stavového prostoru.

Idea:

- Z uzlu u jdeme do prvního dosud neprohledaného souseda v.
- Pokud takový uzel v neexistuje, návrat do uzlu, ze kterého jsme vstoupili do u, tj. do $p[u]$.
- Opakováno, dokud neobjeveny všechny dosažitelné uzly z výchozího uzlu.

Výsledek:

Strom hledání do šířky: DF strom.

- Seznam všech uzlů dosažitelných z výchozího.
- Cesta do těchto uzlů není nejkratší.

DF strom uložen jako P-strom, strom předchůdců.

Složitost $O(\|U\| + \|H\|)$.

19. Princip DFS

Uchovávané informace o uzlu:

- stav uzlu $s[u]$,
- předchůdce $p[u]$ uzlu u,

Rekurzivní implementace, snadná.

Převod na zásobník obtížnější, incidující vrcholy procházeny v opačném pořadí.

Rekurzivní procedura DFSR spuštěna 1x nad každým novým uzlem.

Pokud G souvislý, stačí 1x nad libovolným uzlem.

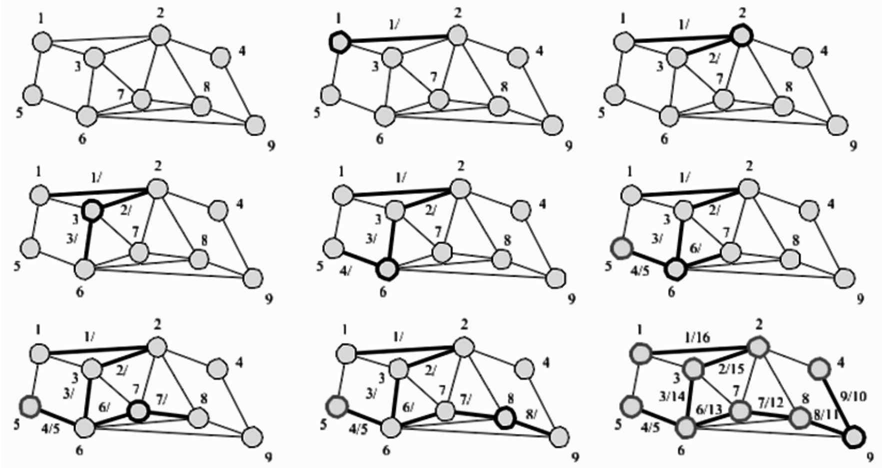
Pro nový uzel u projdi všechny jeho sousedy v.

Pokud v je nový:

- nastavení předchůdce $p[v] = u$,
- rekurzivně projdi všechny sousedy uzlu v.

Výsledkem DF les: tvořen DF stromy (>, pokud G nesouvislé).

20. Ukázka DFS



21 Implementace DFS

Souvislý graf, 1x z libovolného uzlu:

```
def DFS(G, u):
    s = ['N'] * (len(G)+1)              #All vertices are new
    p = [None] * (len(G)+1)             #Without predecessors
    DFSR(G, s, p, d, u)                 #Run DFS for connected graph
```

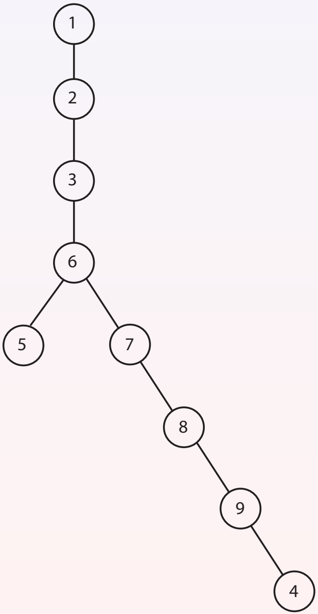
Nesouvislý graf:

```
def DFS(G, u):
    s = ['N'] * (len(G)+1)              #All vertices are new
    p = [None] * (len(G)+1)             #Without predecessors
    for u, value in G.items():          #Process all new nodes
        if s[u] == 'N':
           DFSR(G, s, p, d, u)          #Run DFS for disconnected graph
```

Rekurzivní procedura:

```
def DFSR(G, s, p, u):
    s[u] = 'O'                          #Set node as open
    for v in G[u]:                      #Browse all edges from u
        if s[v] == 'N':                 #For each new node
            p[v] = u                    #Set predeccessor
            DFSR (G, s, p, v)           #Browse its neighbors
    s[u] = 'C'                          #Node u is closed
```

22. Výsledný DF strom



23. Použití BFS/DFS

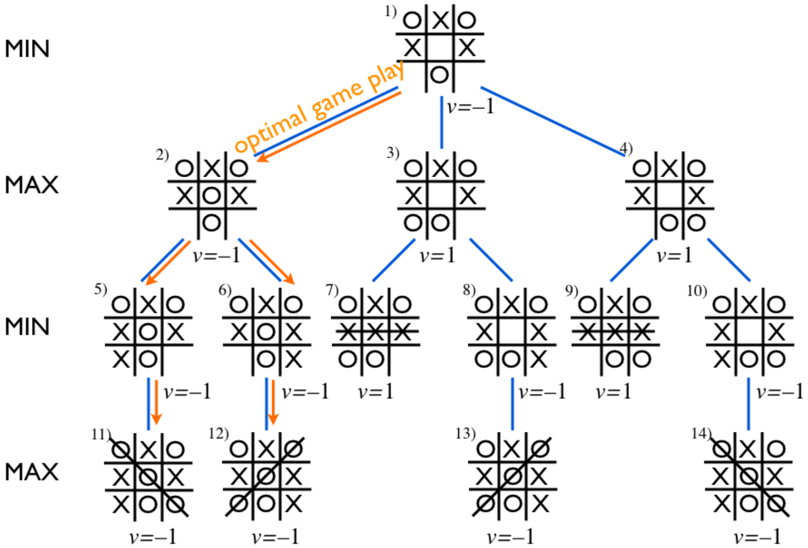
Jedny z nejčastěji používaných algoritmů.

Častá aplikace i pro problémy s grafy zdánlivě nesouvisejícími.

Nejčastější použití:

- *Optimalizační strategie:*
  Heuristika, TSP (přibližné řešení), turnajová schémata, procházení složek/podsložek.
- *Stolní hry:*
  Šachy, dáma, GO, piškvorky + doplněno efektivnějšími strategiemi.
- *Hlavolamy:*
  Magické čtverce, SUDOKU, křížovky, Rubikova kostka, bludiště.
- *Dopravní a logistické problémy*
  Existence cesty, optimální cesty, vzdálenosti centra/pobočky, údržba silnic, elektrifikace.

24. Piškvorky, stavový strom



25. Nejkratší cesta mezi 2 uzly

Nejčastěji řešená “dopravní” úloha.

Hledání nejkratší cesty z uzlu s do k v G.

Předpoklady pro G:

Orientovaný, neorientovaný, souvislý, konečný.

Popis G - spojový seznam (úspornější).

Většina metod vychází z BFS: prohledávání do šířky.

Provádí opakovanou relaxaci, netřeba značkovat.

Uzly uloženy v prioritní frontě (místo běžné fronty).

Ohodnocení hran $w > 0$ (obecně $w \in \mathbb{R}$).

Interpretace w: vzdálenost, čas jízdy, náklady, spotřeba, ...

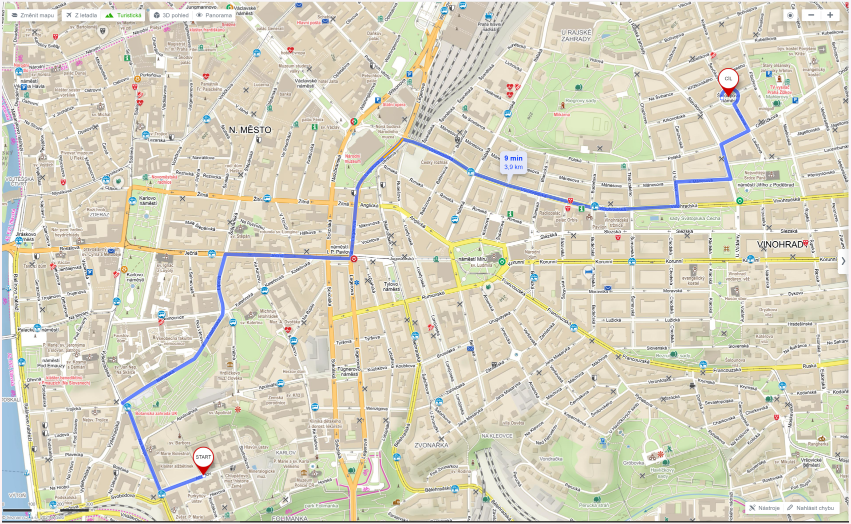
Lze hledat nejkratší, nejlevnější či jinou cestu.

Přehled algoritmů:

- Dijkstra ($w \in \mathbb{R}^+$), běžně používán.
- Bellman+Ford ($w \in \mathbb{R}$), specializované případy.

Použití: navigační SW, logistika, doprava.

26.Ukázka nejkratší cesty mezi 2 uzly



27. Datový model grafu s ohodnocením

Každá hrana $h = (u, v)$ má ohodnocení $w(u, v) \in \mathbb{R}^+$ (nezáporné ohodocení).

Spojová reprezentace, v Pythonu použit Dictionary

$$\langle K, V \rangle .$$

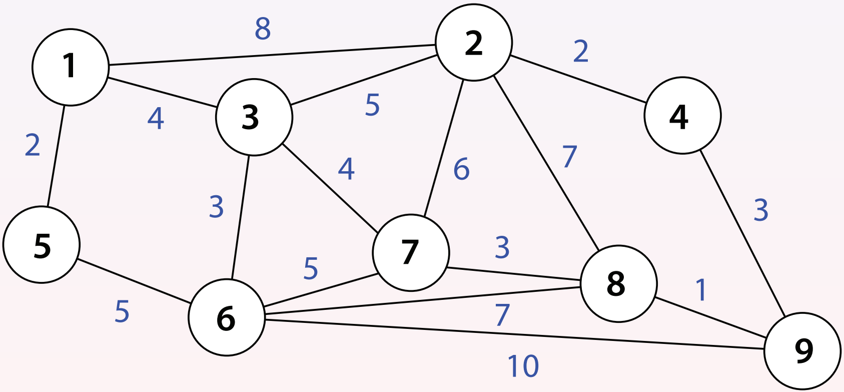
Klíč K : uzel.
Hodnota V: seznam incidujících vrcholů s ohodnocením hran.

```
G={V1 : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk},
   V2 : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk},
   ...
   Vk : {V1:W1, V2:W2, ..., Vk:Wk}}
```

Ukázka popisu G:

```
G3 = {
    1 : {2:8, 3:4, 5:2},
    2 : {1:8, 3:5, 4:2, 7:6, 8:7},
    3 : {1:4, 2:5, 6:3, 7:4},
    4 : {2:2, 9:3},
    5 : {1:2, 6:5},
    6 : {3:3, 5:5, 7:5, 8:7, 9:10},
    7 : {2:6, 3:4, 6:5, 8:3},
    8 : {2:7, 6:7, 7:3, 9:1},
    9 : {4:3, 6:10, 8:1}
```

28. Ukázka grafu s ohodnocením



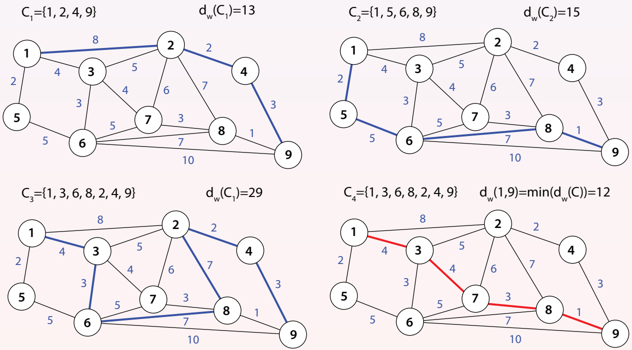
29. *W*-délka a *w*-vzdálenost

W-délka d_w cesty $C = \langle h_1, \ldots, h_k \rangle$ s k hranami h_i

$$d_w(C) = \sum_{i=1}^{k} w(h_i).$$

W-vzdálenost $d_w(u, v)$ uzlů u, v, nejmenší w-délka cesty z u do v

$$d_w(u, v) = \min_{\forall C} d_w(C).$$



Mezi uzly 1, 9 mnoho cest C s různými $w-$délkami (modré).

Jedna z nich nejkratší (červeně), definuje $w-$vzdálenost, $d_w(1, 9) = 12$.

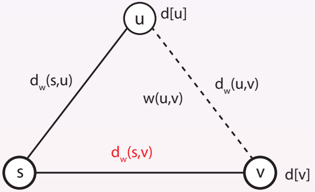
30. Relaxace hrany (u, v)

Věta o nejkratší cestě:

Pokud $d_w(s, v)$ nejkratší cestou z s do v přes u, pak $d_w(s, u)$ nejkratší cestou z s do u a $d_w(u, v)$ nejkratší cestou z u do v.

$$d_w(s, v) = d_w(s, u) + d_w(u, v) = d_w(s, u) + w(u, v).$$

Libovolná část nejkratší cesty je též nejkratší.



Relaxace hrany:

Nalezení nejkratší cesty z $s \to v$ + aktualizace předchůdce v.

2 varianty: $s \to v$ (přímá) nebo $s \to u \to v$ (delší).

Hodnoty $d[u]$, $d[v]$ horními odhady $d_w(s, u)$, $d_w(s, v)$.

Opakovanou aktualizací odhadu $d[v]$ hledáme $d_w(s, v)$, odhad $d[v]$ se průběžně snižuje.

Aneb první nalezení v neznamená, že jsme k němu došli nejkratší cestou.

Pokud

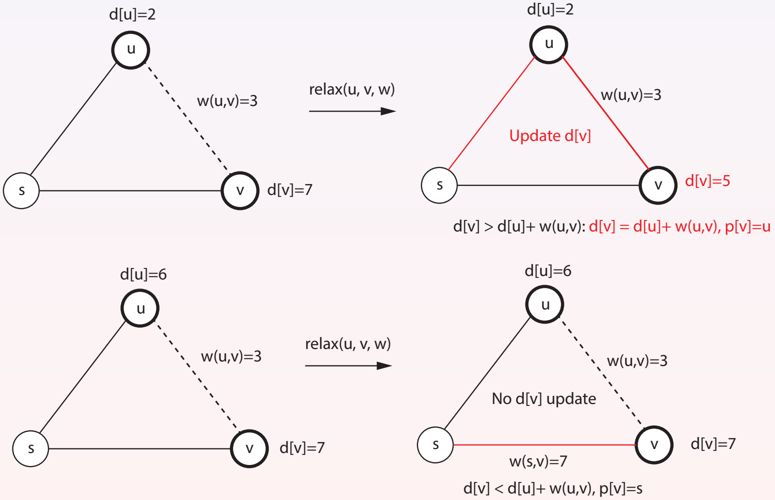
$$d[v] > d[u] + w(u, w),$$

nejkratší cesta vede přes u a $p[v] = u$.

```
def relax(u, v, w):
    if d[v] > d[u]+w(u,v):       #Is path (s, u, v) shorter than (s, v)?
        d[v] = d[u]+w(u,v)       #Update d[v]
        p[v] = u                 #Update predecessor
```

31. Ukázka relaxace hrany (u, v)

Výhodnější cesta $s \rightarrow u \rightarrow v$ nebo $s \rightarrow v$?



32. Dijkstra algoritmus

Autor Edsger W. Dijkstra (1956).

Nejznámější algoritmus pro hledání nejkratších cest mezi 2 uzly.

Ve skutečnost nejkratší cesta z s do všech ostatních uzlů G.

Zobecňuje strategii BFS + relaxace + prioritní fronta.

Uzly netřeba značkovat.

Předpoklady:

- nezáporné ohodnocení w,
- G je souvislý.

Snaha o co nejmenší prodloužení cesty.

Realizuje se opakovanou relaxací hrany (u, v).

Využívá *Greedy strategii*:

Heuristická optimalizace, zde úspěšná (obecně nemusí být).

Hledá globální minimum tak, že v každém kroku hledáme lokální.

Jednoduchá implementace.

33. Princip Dijkstra algoritmu

Hledána nejkratší cesta mezi uzly s a k.

Využívá postupného zpřesňování odhadu nejkratší délky od s do k.

Stávající nejkratší cestu se snažíme co nejméně prodloužit (+ 1 uzel).

Hodnota $d[u]$: aktuální odhad nejkratší vzdálenosti $d_w(s, u)$ k uzlu u.

Hodnota $d[v]$: aktuální odhad nejkratší vzdálenosti $d_w(s, v)$ k uzlu v.

Použití relaxace:

Pokud

$$d[v] > d[u] + w[u][v],$$

pak

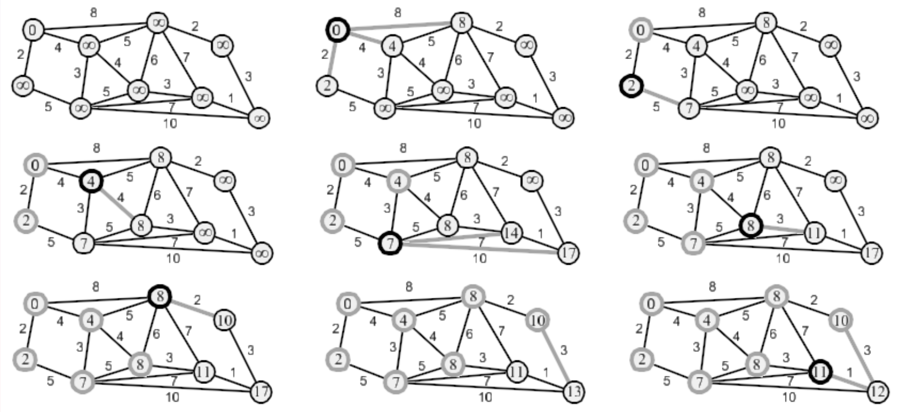
$$d[v] = d[u] + w[u][v],$$

je novým odhad $d[v]$ a

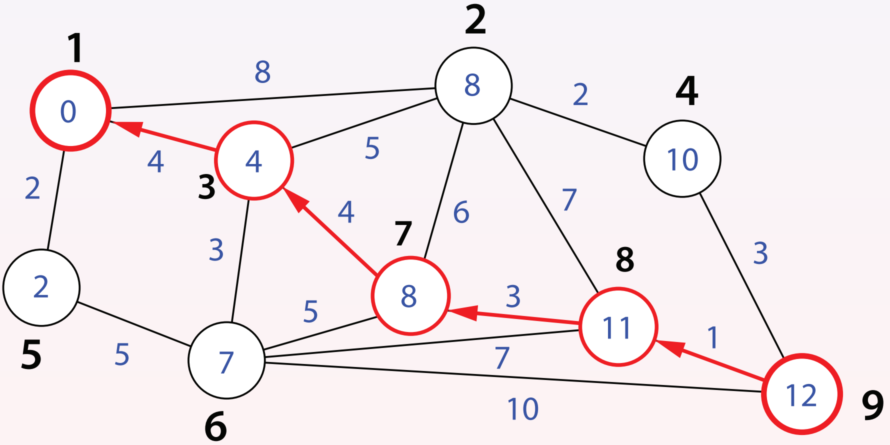
$$p[v] = u.$$

V každém kroku vybírán uzel u s nejmenší hodnotou $d[u]$.

34. Ukázka Dijkstra algoritmu



35. Výsledek Dikjstra algoritmu



36. Popis Dijkstra algoritmu

U každého uzlu uchováváno: $d[u]$, $p[u]$.

Uzly uloženy v prioritní frontě Q

$$Q = \{d[u], u\}.$$

Netřeba značkovat uzly.

Cesta rekonstruována ze seznamu předchůdců zpětně.

Startovní uzel s, jednotlivé fáze:

1. *Inicializační fáze:*
   Inicializace vstupních hodnot: $d(u) = \infty$, $p(u) = -1$.
   Nastavení $d[s] = 0$. Přidání $\langle d[s], s \rangle$ do Q.
2. *Iterativní fáze:*
   Dokud Q není prázdná:
   - Z Q vybrán uzel s nejmenší hodnotou $d(u)$.
   - Relaxaci z u na všechny sousedy v:
     - Pokud nové $d[v]$ menší než původní, aktualizujeme.
     - Aktualizujeme předchůdce: $p[v] = u$.
     - Přidáme $\langle d[v], v \rangle$ do Q.

Opakujeme (2), dokud Q není prázdná, tj. existuje nějaký otevřený uzel.

Snadná implementace, analogie BFS.

37. Implementace Dijkstra algoritmu

Implementace s prioritní frontou.

```
def dijkstra(G, start, end):
    d = [inf] * (len(G) + 1)           #Set infinite distance
    p = [-1] * (len(G) + 1)            #No predecessors
    Q = queue.PriorityQueue()          #Priority queue
    Q.put((0, start))                  #Add start vertex
    d[start] = 0                       #Start d[s] = 0
    while not Q.empty():
        du, u = Q.get()                #Pop first element
        for v, wuv in G[u].items():    #Relaxation, all (u,v)
            if d[v] > d[u] + wuv:      #We found a better way
                d[v] = d[u] + wuv      #Update distance
                p[v] = u               #Update predecessor
                Q.put((d[v], v))       #Add to Q
```

Ukázka:

```
dijkstra(G, 1, 9)
path(p, 1, 9)
>> 1 3 7 8 9
```