Problémy a algoritmy.

Algoritmus. Vlastnosti algoritmu. Analýza efektivity algoritmu. Asymptotická složitost.

Tomáš Bayer | bayertom@natur.cuni.cz

Katedra aplikované geoinformatiky a kartografie, Přírodovědecká fakulta UK.

1. Plán přednášek

Sylabus:

1. Úvod, Python, opakování (TB)
2. Algoritmy, datové struktury, časová/paměťová složitost (TB).
3. Rastrová data a jejich komprese LB).
4. Big data + Cloud computing prostorových dat (PŠ, JLaš).
5. Prostorová indexace dat (TB).
6. Digitální zpracování obrazu (JL).
7. Redukce dimenzionality a transformace dat (MP).
8. Shluková analýza (MP).
9. Vybrané grafové algoritmy a jejich implementace (TB).
10. Strojové učení (LBro)

Požadavky na zápočet:

Účast na cvičení.

Odevzdání úloh v daných termínech.

Zkouška:

Dle dosaženého bodového skóre.

Literatura:

Ke každé části specifická.

2. Geoinformatika

Multidisciplinární obor, napříč přírodními, technickými i exaktními vědami.

Syntéza teoretické informatiky, matematiky, počítačové grafiky, výpočetní geometrie, statistiky.

V rámci kurzu diskutovány pouze *vybrané problémy*.

Snaha o vysvětlení podstaty, principu, funkcionality.

Nestačí verbální popis, nutná multioborová syntéza.

Důležité stanovení míry detailu.

Cíle předmětu:

- Chápání teoretické podstaty geoinformatických problémů.
- Rozvoj logického a abstraktního myšlení.
- Schopnost dekomponovat složité problémy na jednodušší.
- Automatizace vybraných geoinformatických problémů (Python, Matlab).

Rule-based vs AI/ML přístup.

Current research problems:

Raster/vector data, models and storage. Collecting/measuring data. Big data. On-line access and processing. Distributed/parallel computing. Spatial data structures and algorithms. Spatial queries, indexing. Spatial interpolation. Visualization and 3D modelling. Artificial intelligence. Machine learning.

3. Problém & geoinformatika

Dynamický rozvoj přírodních/technických věd přináší řadu nových problémů.

Většina nějak řešitelná s využitím knihoven či specializovaného software.

Stávající řešení nemusí být efektivní, problém lze modifikovat.

Poptávka po odbornících:

- schopnost stávající problémy efektivně řešit (*),
- schopnost hledat řešení nová řešení stávajících problémů (**),
- schopnost hledat řešení řešení nových problémů (***).

Zajímají nás problémy, které lze přesně formulovat s využitím matematického aparátu.

Jejich řešení lze automatizovat (např. s využitím počítače).

U řady problémů neexistuje exaktní řešení (kartografie).

Řešení pak založeno na kombinaci *exaktních* a *subjektivních* přístupů.

Snaha omezovat vliv lidského faktoru při zpracování geodat.

Neexistuje univerzální technika vedoucí k nalezení řešení.

Někdy požadováno přesné řešení, jindy pouze přibližné (NP problémy).

V závislosti na typu problému/řešení/vstupní množiny nutné zvolit vhodnou strategii.

4. Problém z pohledu informatiky

“Problém” lze z pohledu geoinformatiky formalizovat:

NÁZEV: Slovní popis problému
IN: Popis přípustného vstupu (množina vstupních dat).
OUT: Popis výsledku, který je pro daný vstup očekáván.

Musí existovat funkce f přiřazující vstupním datům požadovaný výstup.
Nalezení řešení problému $\Rightarrow$ nalezení příslušné funkce f.

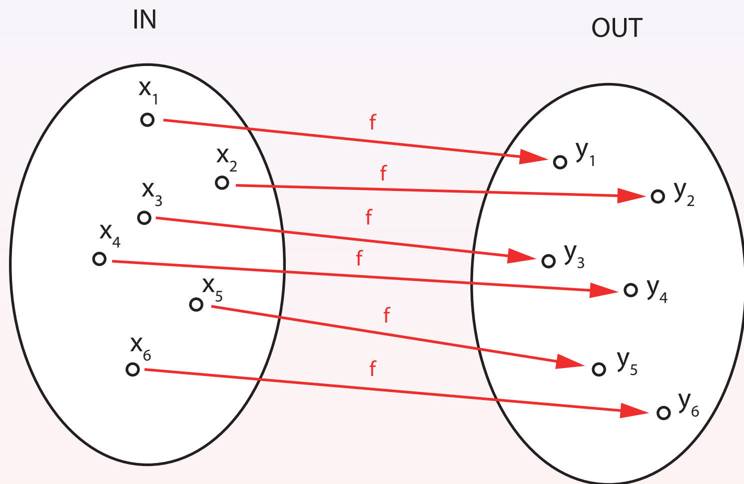
Každý problém P určen uspořádanou trojicí $P(IN, OUT, f)$

$$f : IN \rightarrow OUT,$$

IN množina přípustných vstupů, OUT množina očekávaných výstupů, f přiřazuje každému vstupu očekávaný výstup.

IN/OUT: Kombinace znaků, celých čísel či přirozených čísel představující kódování.

5. Znázornění problému



6. Algoritmus a jeho vlastnosti

Obecný předpis sloužící pro řešení zadaného problému.

Představuje posloupnost kroků doplněných jednoznačnými pravidly.

Algoritmicky řešitelný problém:

Algoritmus A řeší problém P, pokud libovolnému vstupu x, $x \in IN$, přiřazuje v konečném počtu kroků (alespoň jeden) výstup y, $y \in OUT$, tak, že platí: $y = f(x)$.

Pro zadaný vstup x může existovat více než jedno řešení y.

Algoritmus A by měl nalézt alespoň jedno řešení.

Vlastnosti algoritmu:

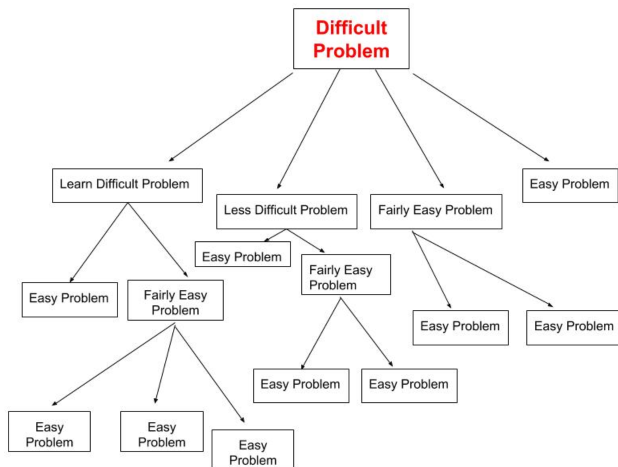
- *Determinovanost*: Algoritmus jednoznačný jako celek i v každém dílčím kroku.
- *Rezultativnost*: Vede vždy ke správnému výsledku v konečném počtu kroků.
- *Hromadnost*: Lze použít pro řešení stejné třídy problémů s různým vstupem.
- *Opakovatelnost*: Při opakovaném použití stejného vstupu poskytne tentýž výsledek.
- *Efektivita*: Každý krok algoritmu by měl být efektivní.

Strategie řešení: Rozkládání problému na dílčí podproblémy.

Dekompozice *s využitím Top-Bottom Approach.*

Strategie implementace: opačná, Bottom-up Approach.

7. Top-Down Decomposition



8. Efektivita algoritmu

Efektivita algoritmu je důležitou *výkonnostní charakteristikou*.

Výkonnostní charakteristiky algoritmů nelze ignorovat.

Časové a materiální úspory.

Efektivní algoritmus řeší problém s minimálními nároky na HW.

Strategie "Time Is Money".

Optimální využití existujících prostředků".

Pozor na zdánlivě nepodstatné detaily.

Nejrychlejší vs. optimální řešení:

Nejjednodušší zpravidla nejpomalejší, ale implementačně jednoduché.

Nejrychlejší velmi náročné na implementaci (časově kritické aplikace).

V praxi používáno optimální, kompromis (běžné aplikace).

Hodnocení efektivity empiricky/matematickou analýzou.

9. Analýza efektivity algoritmu

Efektivita algoritmu funkcí velikosti dat a jejich typu.

Empirická analýza:

Srovnáním běhu více algoritmů, různé množiny:

- 1) Random: ověření funkcionality.
- 2) Worst: schopnost zpracovat libovolná data.
- 3) Best: nejlepší případ.

Exaktní analýza:

Matematická analýza řad, hledání asymptotických funkcí.

Cíle analýzy algoritmů:

- Porovnání > algoritmů řešící problém: výběr optimálního.
- Odhad výkonnosti algoritmu: lze ho použít pro problém & data?
- Nastavení parametrů algoritmu: co nejefektivnější běh.

Chybou soustředění se pouze na výkonnostní charakteristiky.

Implementace a odladění rychlého algoritmu pro libovolný vstup složité.

Lépe pomalejší, ale univerzálnější algoritmus.

10. Posuzování složitosti algoritmu

Měřitelné charakteristiky: doba běhu,výpočtu, počet instrukcí, množství paměti...

Časová složitost algoritmu (Time Complexity):
Doba zpracování vstupních dat D algoritmem A v čase T

$$T = \tau(A(D)).$$

Paměťová složitost algoritmu (Space Complexity):
Množství paměti M pro zpracování vstupních dat D algoritmem A

$$M = \mu(A(D)).$$

Složitost algoritmu funkcí velikosti a typu vstupních dat.

A) Velikost vstupu n

Složitost jako funkce velikosti vstupu n.
Algebraický tvar složitý (např. $4n^3 - 9n^2 + 20n + 27$), asymptotický (limitní) odhad (např. $O(n^3)$).

B) Charakteristika vstupních dat

Pro vstup n se složitost závisí na hodnotách vstupu (např. náhodná setříděná nebo reverzně setříděná data).

Složitost lze posuzovat empiricky:

- dle nejhoršího možného případu (Worst Case).
- dle průměrné doby běhu (Average Case).
- dle nejlepšího možného případu (Best Case).

11. Worst/Best/Average Cases

Worst Case:

Maximum z dob běhu algoritmu pro všechny vstupy velikosti n

$$T_{WORST} = \max(T_1(n), T_2(n), ..., T_n(n)).$$

Nevhodná konfigurace vstupních dat.
O několik řádů vyšší než Average Case.

Best Case:

Minimum z dob běhu algoritmu pro všechny vstupy velikosti n

$$T_{BEST} = \min(T_1(n), T_2(n), ..., T_n(n)).$$

Ideální konfiguraci vstupních dat.
Až o několik řádů lepší než Average Case.

V praxi k takové situaci nemusí dojít (nebo jen ve velmi řídkých případech).
Vlastnosti algoritmu mohou být tímto odhadem zkresleny.

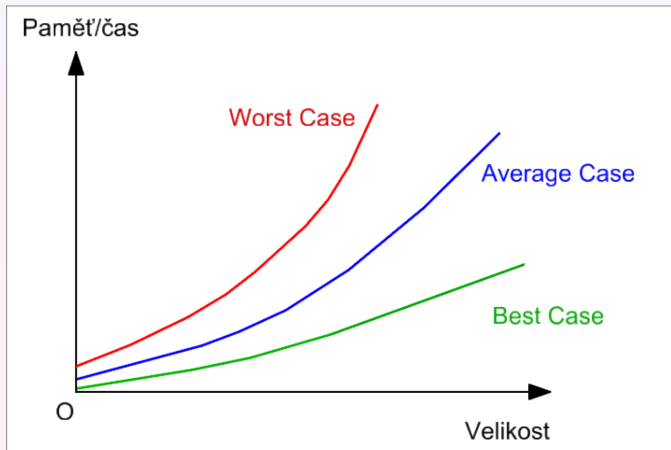
Average Case:

Průměrná doba běhu na (běžných) datech velikosti n

$$T_{AVERAGE} = E(T_1(n), T_2(n), ..., T_n(n)).$$

Běžná konfigurace vstupních dat.
Může být o několik řádů lepší/horší než Worst/Best Case .

12. Ukázka BC/WC/AC



U dobře navržených algoritmů rozdíl mezi Best Case a Worst Case malý.

Optimalizace algoritmu: snížení rozpětí mezi Best Case a Worst Case.

Pokud Best Case = Worst Case, nelze dále optimalizovat.

13. Asymptotická složitost

Empirické srovnání algoritmů nepostačuje, relativní.

Algebraické (přesné) vyjádření složitosti matematicky náročné.

Umíme určit jen u jednoduchých problémů.

Nahrazení algebraické složitosti asymptotickým (limitním) odhadem.

Asymptotická složitost pro $n \to \infty$ odpovídá algebraické složitosti.

Zajímá nás chování algoritmu pro velká n.

Popisuje řád růstu funkce, zjednodušení.

Zásady:

1) Zanedbání konstant (aditivní/multiplikativní).

2) Zanedbání funkcí s nízkým růstem řádu("rychlé" části algoritmu).

Hodnoty $f_1(n) = 0.1n^2$ pro velká n podobné $f_2(n) = 100n^2 + 90n$.

$$\lim_{n\to\infty} f_1(n) = \lim_{n\to\infty} f_2(n).$$

14. Zanedbání konstant

Předpoklad 1: Zanedbání multiplikativní konstanty c:

Nechť $f(n)$ je libovolná funkce a c libovolná konstanta, $c > 0$. Pak funkce $f(n)$ a $c \cdot f(n)$ jsou označovány jako (asymptoticky) stejně rychle rostoucí.

$$\lim_{n\to\infty} c \cdot f(n) = \lim_{n\to\infty} f(n)$$

Předpoklad 2: Zanedbání aditivní konstanty d:

Nechť $f(n)$ je libovolná funkce a d libovolná konstanta, $d > 0$. Pak funkce $f(n)$ a $f(n) + d$ jsou označovány jako (asymptoticky) stejně rychle rostoucí.

$$\lim_{n\to\infty} f(n) + d = \lim_{n\to\infty} f(n)$$

Důsledek:

Funkce $f(n)$ a $c \cdot f(n) + d$ jsou (asymptoticky) stejně rychle rostoucí.

Stejný řád růstu.

$$\lim_{n\to\infty} c \cdot f(n) + d = \lim_{n\to\infty} f(n).$$

Funkce $f_1(n) = 0.1n^2$ a $f_2(n) = 100n^2 + 90n$ patří do stejné třídy (kvadratické

15. Přehled asymptotických odhadů

5 asymptotických odhadů složitosti:

1. Asymptotický horní odhad složitosti ostrý $O(g(N))$.
2. Asymptotický dolní odhad složitosti ostrý $\Omega(g(N))$.
3. Asymptotický oboustranný odhad složitosti: $\Theta(g(N))$.
4. Asymptotický horní odhad časové neostrý $o(g(N))$.
5. Asymptotický dolní odhad časové neostrý $\omega(g(N))$.

16. Asymptotický horní odhad $O(g(n))$

Ilustruje nejhorší možný případ doby běhu algoritmu.

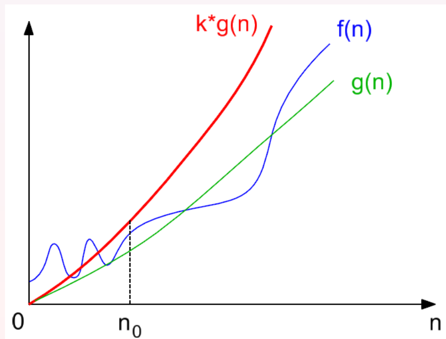
Tzv. O-notace (Big O-notation).

Pro libovolné funkce $f, g\colon \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ *platí:* $f(n) \in O(g(n)) \Leftrightarrow \exists k \in \mathbb{R}, \exists n_0 \in \mathbb{N}, \forall n > n_0$*:*

$$f(n) \leq k \cdot g(n).$$

Interpretace: f roste nejvýše tak rychle jako g.

Nejčastější typ odhadu, informuje o nejpomalejším možném řešení problému.



Příklad: Platí, že $20n^2 \in O(n^2)$?. Řešení: $20n^2 \leq k \cdot n^2$, $k \geq 20$.

17. Asymptotický dolní odhad $\Omega(g(n))$

Ilustruje nejlepší možný případ doby běhu algoritmu.

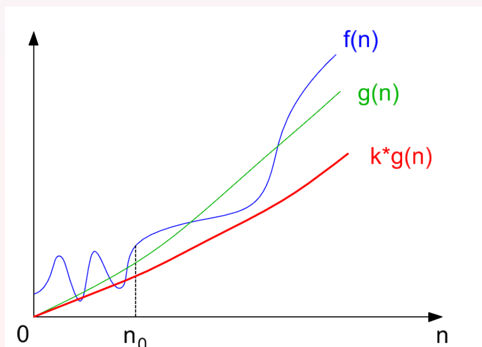
Tzv. Ω-notace.

Pro libovolné funkce $f, g\colon \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ platí: $f(n) \in \Omega(g(n)) \Leftrightarrow \exists k \in \mathbb{R}, \exists n_0 \in \mathbb{N}, \forall n > n_0$:

$$f(n) \geq k \cdot g(n).$$

Interpretace: f roste nejméně tak rychle jako g.

Používán méně častěji, zpravidla nás nezajímá, jak nejrychleji problém vyřešíme.



18. Asymptotický oboustranný odhad $\Theta(g(n))$

Popisuje očekávanou složitost (tj. průměrný případ).

Tzv. Θ-notace.

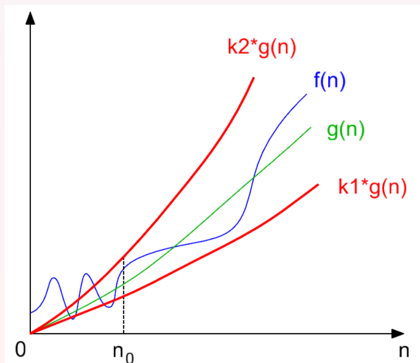
Pro libovolné funkce $f, g\colon \mathbb{N} \to \mathbb{N}$ *platí:* $f(n) \in \Theta(g(n)) \Leftrightarrow \exists k_1 \in \mathbb{R}, \exists k_2 \in \mathbb{R}, \exists n_0 \in \mathbb{N}, \forall n > n_0:$

$$0 \leq k_1 \cdot g(n) \leq f(n) \leq k_2 \cdot g(n).$$

Odhad stejné rychlosti růstu, f roste stejně rychle jako g.

Nalezení funkce, která roste asymptoticky stejně rychle až na konstantu.

Odpovídá původní definici “efektivity” algoritmu.



19. Ukázka $\Theta(g(N))$ odhadu

Platí, že $9n^2 - 5n + 6 \in \Theta(n^2)$?

Nalezneme vhodné konstanty k_1, k_2

$$k_1 n^2 \leq 9n^2 - 5n + 6 \leq k_2 n^2,$$

např.: $k_1 = 8$, $k_2 = 9$.
Pak $8n^2 \leq 9n^2 - 5n + 6 \Rightarrow n^2 - 5n + 6 \geq 0$, $n \geq 3$.
Pak $9n^2 - 5n + 6 \leq 9n^2 \Rightarrow 5n \geq 6$, $n \geq \frac{6}{5}$.
Protože $n \geq 3 \wedge n \geq \frac{6}{5} \Rightarrow n \geq 3$, $n_0 = 3$.

20. Charakteristika algoritmů dle časové složitosti

Složitost	**Vyjádření**	**Charakteristika**
Konstantní	1	Konstantní doba běhu programu. Nezávisí na vstupních datech.
Logaritmická	$\log(n)$	Doba běhu se mírně zvětšuje v závislosti na N. Řešení hledáno opakovaným dělení vstupní množiny na menší množiny (hledání v binárním stromu).
Lineární	n	Doba běhu programu roste lineárně s N. Zpracováván každý prvek, např.cyklus.
$n\log(n)$	$n\log(n)$	Doba běhu roste téměř lineárně. Opakované dělení vstupního problému na menší problémy, které jsou řešeny nezávisle (Divide and Conquer, např. třídění).
Kvadratická	n^2	Doba běhu roste kvadraticky, vhodný pro menší množiny dat. Vnořený cyklus.
Kubická	n^3	Doba běhu roste s třetí mocninou, dvojnásobně vnořený cyklus. V praxi snaha nahrazovat algoritmus předchozími dvěma kategoriemi (Greedy algoritmy)
Exponenciální	2^n	Exponenciální doba běhu. Použitelné pro množiny do n=30 Aplikace v kryptografii.

21. Ukázka časové složitosti algoritmů

Vstupní množina $n = 10, 100, 1000$ prvků.

Počet operací nutných pro řešení problému.

Složitost	$n = 10$	$n = 100$	$n = 1000$
Logaritmická složitost	1	2	3
Lineární složitost	10	100	1000
Kvadratická složitost	100	10000	$1.0 \cdot 10^6$
Kubická složitost	1000	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^9$
Bikvadratická složitost	10000	$1.0 \cdot 10^8$	$1.0 \cdot 10^{12}$
Exponenciální složitost	1024	$1.3 \cdot 10^{30}$	$1.1 \cdot 10^{301}$
Faktoriální složitost	$3.6 \cdot 10^6$	$9.3 \cdot 10^{157}$	$4.0 \cdot 10^{2567}$

22. Ukázka doby běhu algoritmů

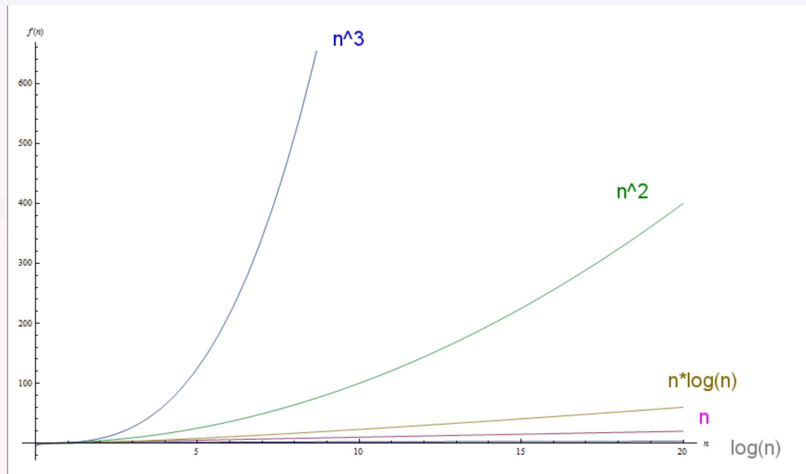
Ukázka doby běhu algoritmu pro $n = 10^9$.

CPU: Počet operací/s $\frac{10^6}{s}$, $\frac{10^9}{s}$, $\frac{10^{12}}{s}$.

Složitost	**CPU** $\frac{10^6}{s}$	**CPU** $\frac{10^9}{s}$	**CPU** $\frac{10^{12}}{s}$
Logaritmická složitost	hodiny	vteřiny	okamžitě
Lineární složitost	hodiny	vteřiny	okamžitě
$n\log(n)$	hodiny	vteřiny	okamžitě
Kvadratická složitost	nikdy	roky	týdny
Kubická složitost	nikdy	nikdy	měsíce
Bikvadratická složitost	nikdy	nikdy	roky
Exponenciální složitost	nikdy	nikdy	nikdy
Faktoriální složitost	nikdy	nikdy	nikdy

23. Grafické znázornění algoritmů dle časové složitosti

Vstupní množina: $n \in (0, 20)$



24. Datové struktury, asymptotická složitost

Data Structure	Time Complexity								Space Complexity
	Average				Worst				Worst
	Access	Search	Insertion	Deletion	Access	Search	Insertion	Deletion	
Array	Θ(1)	Θ(n)	Θ(n)	Θ(n)	O(1)	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)
Stack	Θ(n)	Θ(n)	Θ(1)	Θ(1)	O(n)	O(n)	O(1)	O(1)	O(n)
Queue	Θ(n)	Θ(n)	Θ(1)	Θ(1)	O(n)	O(n)	O(1)	O(1)	O(n)
Singly-Linked List	Θ(n)	Θ(n)	Θ(1)	Θ(1)	O(n)	O(n)	O(1)	O(1)	O(n)
Doubly-Linked List	Θ(n)	Θ(n)	Θ(1)	Θ(1)	O(n)	O(n)	O(1)	O(1)	O(n)
Skip List	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)	O(n log(n))
Hash Table	N/A	Θ(1)	Θ(1)	Θ(1)	N/A	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)
Binary Search Tree	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)
Cartesian Tree	N/A	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	N/A	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)
B-Tree	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(n)
Red-Black Tree	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(n)
Splay Tree	N/A	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	N/A	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(n)
AVL Tree	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(log(n))	O(n)
KD Tree	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	Θ(log(n))	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)	O(n)

Optimalizace na úrovni algoritmu.

Optimalizace volbou vhodné datové struktury.

25. Příklad: Analýza složitosti, Bubble Sort (1/2)

```
def bubbleSort(x):
    for i in range(0, len(x)):
        for j in range(0, len(x) - i - 1):
            if x[j] > x[j + 1]:
                temp = x[j];
                x[j] = x[j + 1];
                x[j + 1] = temp;
```

Hledáme časovou funkci $\tau(f(n))$ a asymptotický horní odhad $O(g(n))$.

26. Příklad: Analýza složitosti, Bubble Sort (2/2)

Závislost na vstupních datech.

Vnější cyklus for, proměnná i, proběhne n krát.
Vnitřní cyklus for, proměnná j, proběhne nejvýše $n-1$ krát.

Pro setříděnou posloupnost neprovedeno žádné prohození $x[i]$ a $x[i+1]$.
Pro nesetříděnou posloupnost provedeno $n-1$ prohození $x[i]$ a $x[i+1]$.
Pro běžná data bude počet prohození v intervalu $(0, n-1)$.

Časová funkce

$$
\begin{aligned}
f(n) &= n-1+n-2+\ldots+2+1+0,\\
&= (0+n-1)\frac{n-1}{2},\\
&= \frac{n^2}{2}-n+\frac{1}{2}.
\end{aligned}
$$

Zanedbání konstant a nevýznamných členů:

$$g(n) \equiv n^2.$$

Algoritmus náleží do kvadratické třídy $O(n^2)$.

27. Třída složitosti algoritmů

Zaváděny pro kategorizaci problémů dle jejich složitosti.

Rozčlenění problémů do tříd téže složitosti umožňuje:

- Odhalovat vzájemné podobnosti těchto problémů.
- Řešení jednoho problému převodem na jiný problém.

Problém se snažíme “zařadit” do třídy s co nejnižší složitostí.

Většina problémů má limitní hranici složitosti, po jejímž dosažení již algoritmus nelze urychlit.

Dvě základní třídy složitosti:

- třída složitosti PTIME (problémy rychle řešitelné),
- třída složitosti NPTIME (problémy rychle verifikovatelné).

Třída složitosti PTIME:

Do této třídy patří problémy řešitelné algoritmy s polynomiální složitostí $O(n^c)$.

$$PTIME = \bigcup_{c=0}^{\infty} \tau(n^c)$$

Výpočetně snadné, zvládnutelné, problémy.

V praxi nejčastěji používány algoritmy se složitostí: $O(n)$, $O(n\log(n)$, $O(n^2)$, $O(n^3)$.

Příklady: aritmetické operace, třídění, vyhledávání, některé grafové či geometrické algoritmy.

28. Třída složitosti NPTIME

Třída algoritmů

$$NPTIME = \bigcup_{c=0}^{\infty} \tau(n^c)$$

NP problémy obtížně řešitelné ale verifikovatelné.

Řešitelné nedeterministickými algoritmy v polynomiálním čase $O(n^c)$, $c > 0$.

Avšak existuje verifikační algoritmus pracující v polynomiálně omezeném čase.

Vztah mezi PTIME a NPTIME:

$$PTIME \subseteq NPTIME \text{ nebo } PTIME = NPTIME?$$

Další třídy:

- *NP-complete*
  Nelze nalézt exaktní řešení, lze verifikovat.
- *NP-hard*
  Nelze nalézt exaktní řešení ani verifikovat.

29. Příklady NP-úplných problémů

V současné době existuje přes 1000 NP-úplných problémů.

Není znám polynomiální algoritmus jejich řešení.

Často velmi podobné problémům, u kterých existuje polynomiální algoritmus.

Příklady NP-úplných problémů:

- TSP (problém obchodního cestujícího): navštívení všech vrcholů grafu právě jednou, délka cesty nejkratší.
- Problém k barev: obarvení vrcholů grafu tak, aby žádné dva sousední vrcholy nebyly obarveny dvěma stejnými barvami.
- Problém batohu: Jak naskládat do batohu předměty známého tvaru tak, aby zabíraly co nejméně místa?
- Loupežnický problém: rozdělení množiny na dvě podmnožiny se stejným součtem.
- Faktorizace prvočísel.

NP-úplné problémy lze řešit **přibližně**: aproximační algoritmy.