IV. Algoritmos Fundamentais sobre Grafos

Tópicos:

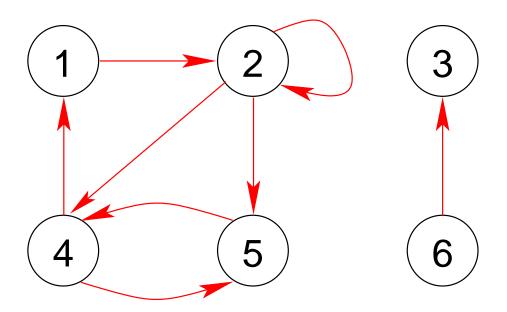
- Grafos: conceitos básicos e representação em memória de computador
- Algoritmos elementares: pesquisas (em largura e em profundidade)
- Algoritmos para determinação de árvores geradoras mínimas
- Algoritmos para determinação de caminhos mais curtos
- Estratégias algorítmicas: algoritmos "greedy"
- Algoritmos para determinação do fecho transitivo de um grafo

Conceitos Básicos

Um grafo orientado é um par (V,E) com V um conjunto finito de *vértices* ou *nós* e E uma relação binária em V – o conjunto de *arestas* ou *arcos* do grafo.

Exemplo: $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$,

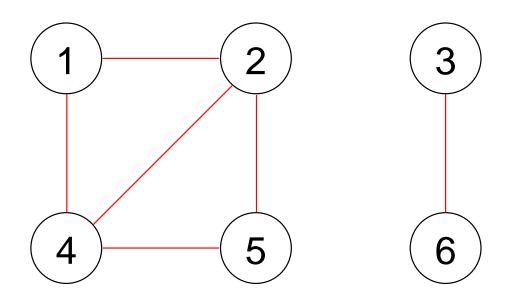
$$E = \{(1,2), (2,2), (2,4), (2,5), (4,1), (4,5), (5,4), (6,3)\}$$



Num grafo não-orientado o conjunto E é constituído por pares não-ordenados (conjuntos com 2 elementos). Assim, (i,j) e (j,i) correspondem ao mesmo arco.

Exemplo: $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$,

$$E = \{(1,2), (1,4), (2,4), (2,5), (3,6), (4,5)\}$$



Notas e terminologia

- Um arco (i,i) designa-se por *anel*. Os anéis são interditos nos grafos não-orientados.
- i e j são respectivamente os vértices de *origem* e de *destino* do arco (i,j). j diz-se *adjacente* a i.
- A relação de adjacência pode não ser simétrica num grafo orientado.
- O grau de entrada (resp. de saída) de um vértice num grafo orientado é o número de arcos com destino (resp. origem) no vértice. O grau do vértice é a soma de ambos.

Caminhos em Grafos

Num grafo (V, E), um caminho do vértice v_0 para o vértice v_k é uma sequência de vértices $\langle v_0, v_1, \dots v_k \rangle$ tais que

- $v_i \in V$ para todo o $i \in \{0, \ldots, k\}$
- $(v_i, v_{i+1}) \in E$ para todo o $i \in \{0, \ldots, k-1\}$

O comprimento de um caminho é o número de arcos nele contidos: $(v_0, v_1), (v_1, v_2), \dots (v_{k-1}, v_k)$.

Um sub-caminho de um caminho é uma qualquer sua sub-sequência contígua.

Um ciclo é um caminho de comprimento ≥ 1 com início e fim no mesmo vértice. Note-se que existe sempre um caminho de comprimento 0 de um vértice para si próprio, que não se considera ser um ciclo.

Um grafo diz-se acíclico se não contém ciclos. Um grafo orientado acíclico é usualmente designado por DAG, de Directed Acyclic Graph.

Caminhos Mais Curtos

Um vértice v é alcançável a partir do vértice s se existe um caminho de s para v. Num grafo orientado, isto não implica que s seja alcançável a partir de v.

A distância $\delta(s,v)$ do vértice s ao vértice v define-se como o menor número de arcos em qualquer caminho de s para v.

A distância $\delta(s,v)$ é infinita caso não existam caminhos de s para v.

Um caminho de comprimento $\delta(s,v)$ diz-se um caminho mais curto entre s e v.

Num grafo orientado, não há qualquer relação entre os caminhos mais curtos de A para B e os caminhos mais curtos de B para A.

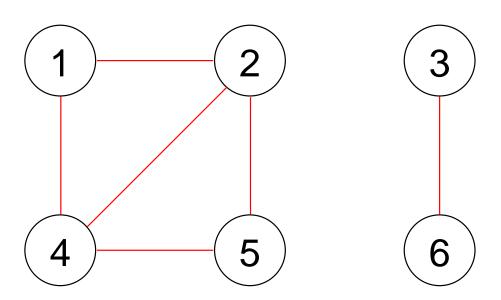
Lema. Seja G=(V,E) orientado ou não, e $s\in V$. Então para qualquer arco $(u,v)\in E$ tem-se $\delta(s,v)\leq \delta(s,u)+1$.

Componentes Ligados

Um grafo (V', E') é um sub-grafo de (V, E) sse $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$.

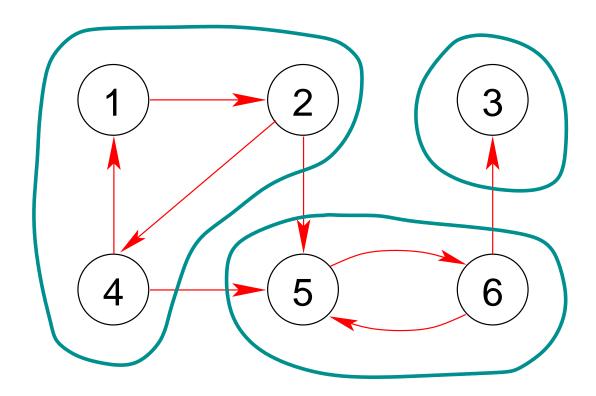
Um grafo não-orientado diz-se ligado se para todo o par de vértices existe um caminho que os liga.

Os componentes ligados de um grafo são os seus maiores sub-grafos ligados.



Componentes Fortemente Ligados

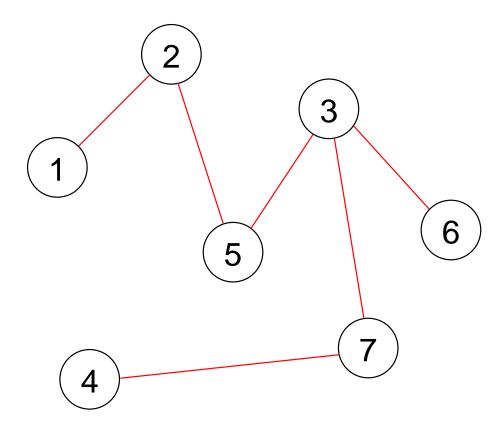
Um grafo orientado diz-se fortemente ligado se para todo o par de vértices m, n existem caminhos de m para n e de n para m. Os componentes fortemente ligados de um grafo são os seus maiores sub-grafos fortemente ligados.



Árvores

Uma floresta é um grafo não-orientado acíclico.

Uma árvore é um grafo não-orientado, acíclico, e ligado.



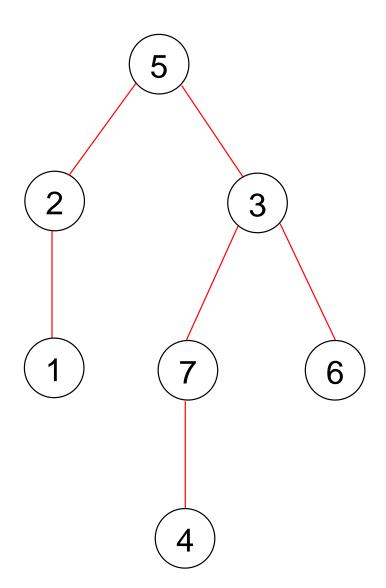
Árvores com Raíz

A escolha de um vértice arbitrário para *raíz* de uma árvore define noções de *descendentes* de um vértice e de *sub-árvore* com raíz num vértice.

Existe um caminho único da raíz para qualquer vértice.

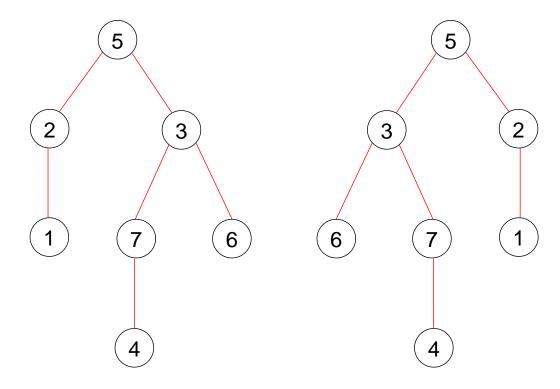
Uma árvore com raíz pode também ser vista como um caso particular de grafo orientado.

⇒ como se caracteriza?



Árvores Ordenadas

Uma árvore ordenada é uma árvore com raíz em que a ordem dos descendentes de cada vértice é relevante. As figuras seguintes representam a mesma árvore com raíz, mas árvores ordenadas diferentes.

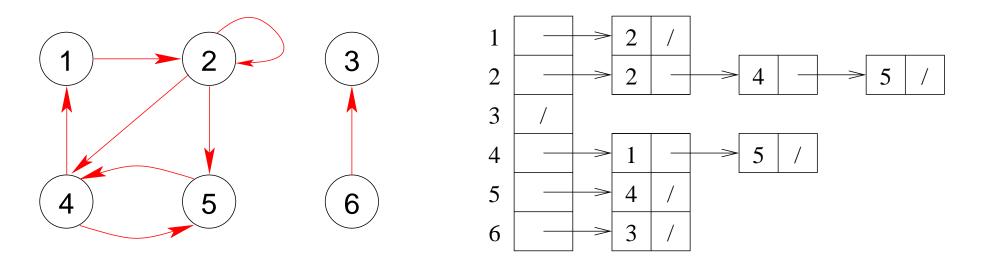


⇒ Como descrever uma árvore binária de pesquisa?

Representação de Grafos em Computador

Como representar um grafo orientado?

A representação mais usual é como um conjunto de listas de adjacências. Trata-se de uma representação compacta, útil para grafos em que o número de arcos |E| seja pequeno (muito menor que $|V|^2$) – grafos *esparsos*.



Consiste num vector Adj de |V| listas ligadas. A lista Adj[i] contém todos os vértices j tais que $(i,j) \in E$, i.e., todos os vértices adjacentes a i.

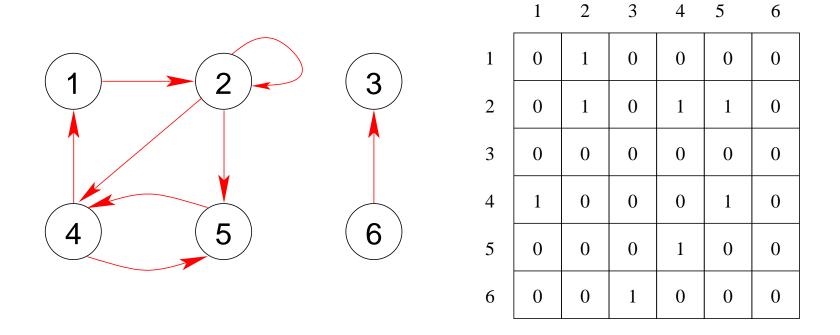
Representação por Listas de Adjacências

Notas:

- ullet A soma dos comprimentos das listas ligadas é |E|.
- Se o grafo for *pesado* (i.e., se contiver informação associada aos arcos), o peso de cada arco pode ser incluído no vértice respectivo numa das listas ligadas.
- No caso de um grafo não-orientado, esta representação pode ser utilizada desde que antes se converta o grafo num grafo orientado, substituindo cada arco (não-orientado) por um par de arcos (fecho simétrico).
- Neste caso a representação contém informação redundante e o comprimento total das listas é 2|E|.
- Em qualquer dos casos o espaço de memória necessário é $\Theta(V+E)$.

Representação de Grafos em Computador

Uma outra possibilidade é a representação por uma matriz de adjacências. É uma representação estática, e por isso apropriada para grafos densos — em que |E| se aproxima de $|V|^2$.



Trata-se de uma matriz de dimensão $|V| \times |V|$, $A = (a_{ij})$ com $a_{ij} = 1$ se $(i,j) \in E$; $a_{ij} = 0$ em caso contrário.

Representação por Matrizes de Adjacências

Notas:

- Se o grafo for *pesado* o peso de cada arco pode ser incluído na respectiva posição da matriz, em vez de 1.
- No caso de um grafo não-orientado a matriz de adjacências é simétrica, e é possível armazenar apenas o triângulo acima da diagonal principal.
- Uma vantagem em relação às listas de adjacências: é imediato verificar a adjacência de dois vértices ($\Theta(1)$, sem ter de se percorrer uma lista ligada).
- ullet O espaço de memória necessário é $\Theta(V^2)$ independente do número de arcos.

Travessias de Grafos: Travessia em Largura

Dado um grafo G = (V, E) e um vértice $s \in V$, um algoritmo de travessia explora o grafo passando por todos os vértices alcançáveis a partir de s.

O algoritmo de pesquisa em largura em particular:

- Calcula a distância (= menor número de arcos) de s a cada vértice;
- Produz uma árvore (sub-grafo de G) com raíz s contendo todos os vértices alcançáveis a partir de s;
- Nessa árvore o caminho da raíz s a cada vértice corresponde ao caminho mais curto entre os dois vértices.
- Algoritmo para grafos orientados e não-orientados.

Estes algoritmos designam-se também por algoritmos de pesquisa de grafos.

■ Travessia em Largura num Grafo ("Breadth-first Search")

Este algoritmo utiliza a seguinte estratégia para efectuar a travessia do grafo:

• Todos os vértices à distância k de s são visitados antes de qualquer vértice à distância k+1 de s.

O algoritmo pinta os vértices (inicialmente brancos) de cinzento ou preto:

- um vértice branco ainda não foi descoberto;
- um vértice cinzento já foi visitado mas pode ter adjacentes ainda não descobertos (brancos);
- um vértice preto só tem adjacentes já descobertos (i.e., cinzentos ou pretos).

Os cinzentos correspondem à fronteira entre descobertos e não-descobertos.

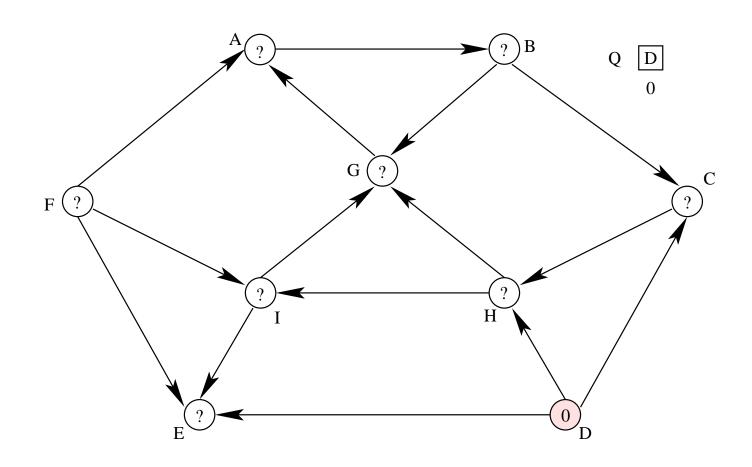
A árvore de travessia em largura é expandida atravessando-se a lista de adjacências de cada vértice cinzento u; para cada vértice adjacente v acrescenta-se à árvore o arco (u,v).

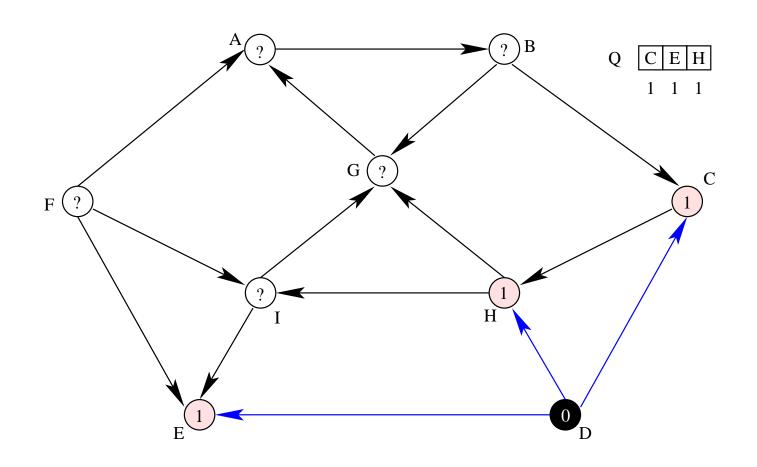
Algoritmo de Travessia em Largura - Notas

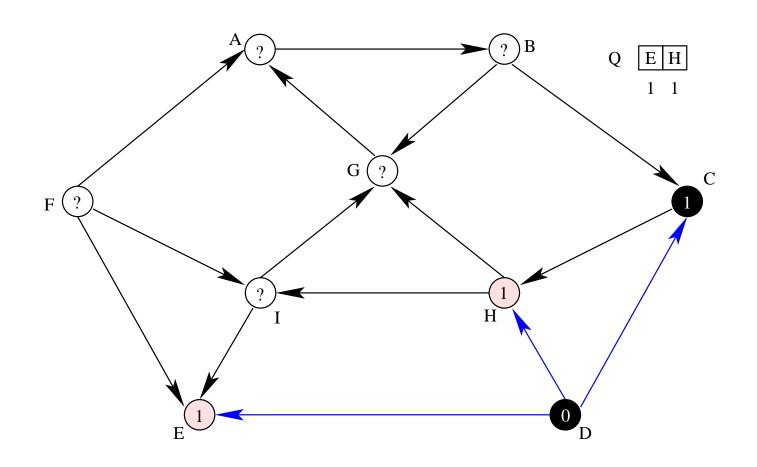
- Adj(u) denota o conjunto dos vértices adjacentes a u.
- Particularmente adequado para utilização com representação por listas de adjacências, que permite percorrer apenas os vértices adjacentes a u, em vez de percorrer todos os vértices testando se cada um é ou não adjacente a u.
- Utiliza uma fila de espera (estrutura FIFO) que se manipula com as funções:
 - void initialize_queue(Queue)
 - void enqueue (Queue, Vertex)
 - Vertex dequeue (Queue)
 - bool is_empty(Queue)
- Outras estruturas de dados: vectores
 - color[] para guardar as cores dos vértices;
 - d[] para as distâncias desde s;
 - parent[] para o pai de cada vértice na árvore construída.

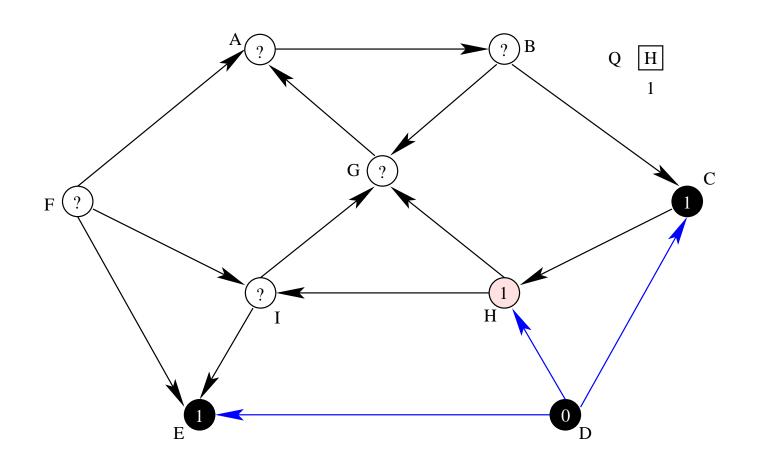
Algoritmo de Travessia em Largura

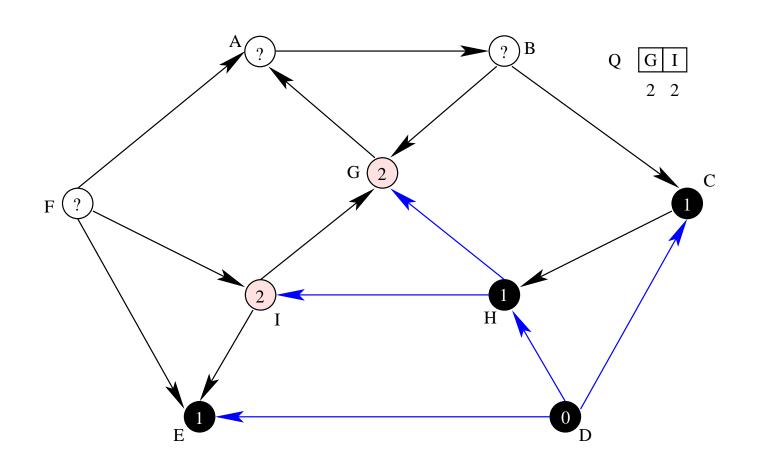
```
/* G = (V, E) */
void BFS((V, E), s) {
 for (u \in V, u \neq s)
    { color[u] = WHITE; d[u] = \infty; parent[u] = NIL; }
  color[s] = GRAY; d[s] = 0; parent[s] = NIL;
  initialize_queue(Q); enqueue(Q,s);
 while (!is_empty(Q)) {
   u = dequeue(Q);
    for (v \in Adj(u))
      if (color[v] == WHITE) {
        color[v] = GRAY;
        d[v] = d[u] + 1;
        parent[v] = u;
       enqueue(Q,v);
   color[u] = BLACK;
```

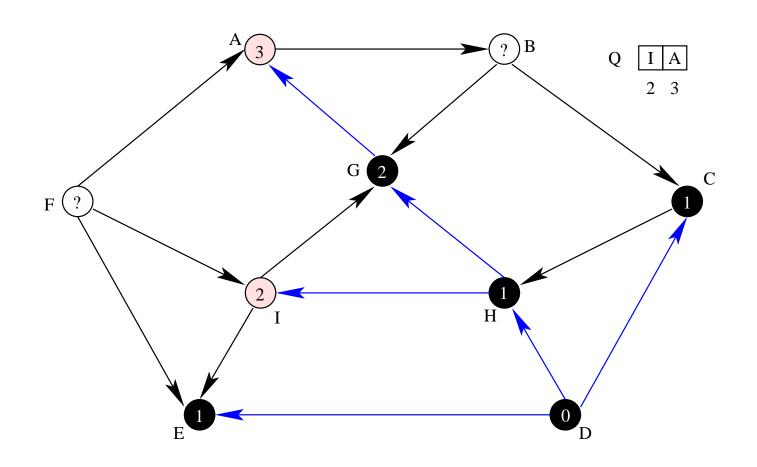


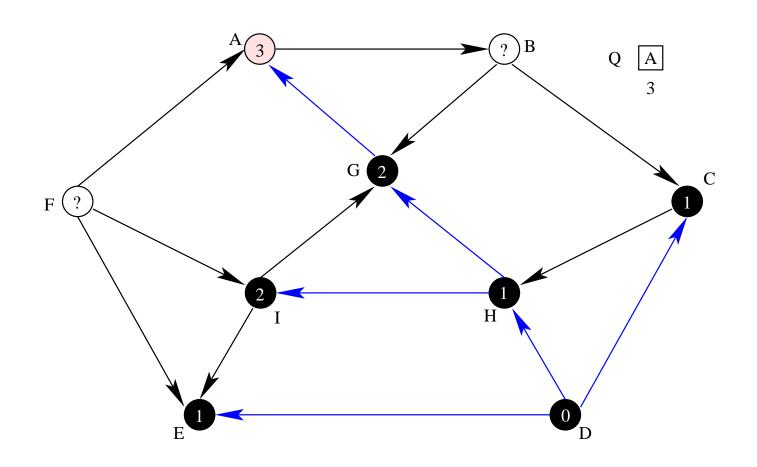


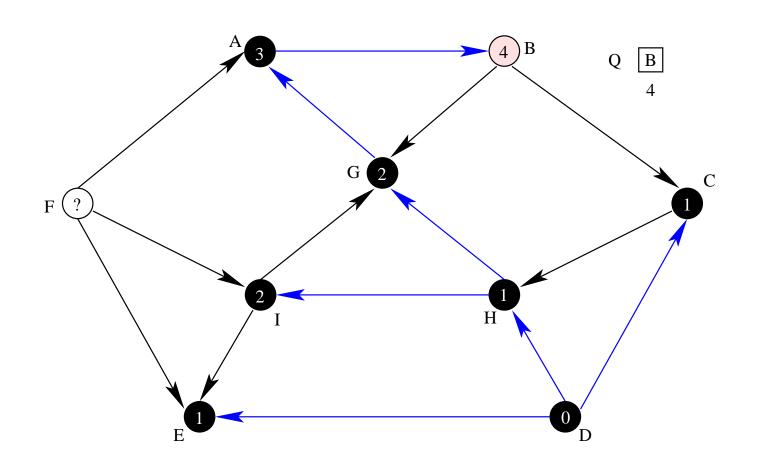


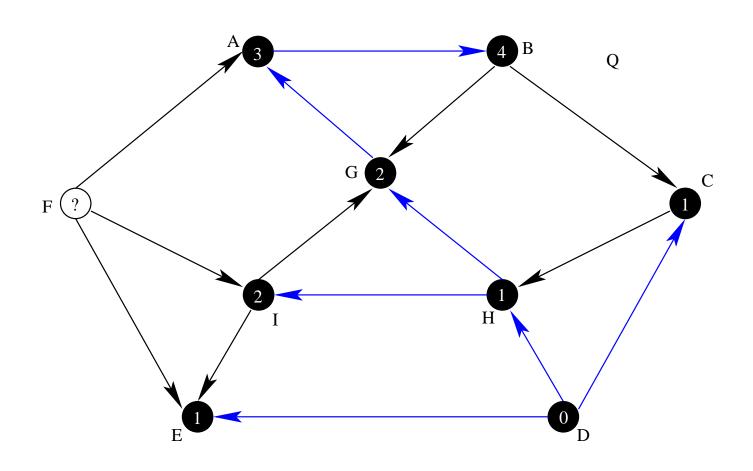












Exemplo de Execução - Notas

- O vértice F não é alcançável a partir de D, logo o algoritmo não passa por este vértice. Em geral, num grafo que não seja fortemente ligado, é necessário iniciar uma nova pesquisa em cada componente fortemente ligado, para garantir que todos os vértices são alcançados.
- Valores de d[] aparecem por baixo dos elementos na queue. Observe-se que nunca há mais de dois valores diferentes!
- A árvore de pesquisa em largura do grafo (a azul no exemplo) fica definida pelo vector parent []. ⇒ Como?
- Será única a árvore construída pelo algoritmo?
- ullet Serão as distâncias de s a cada vértice do grafo iguais, em diferentes árvores construídas pelo algoritmo?

Árvore de Travessia em Largura de um Grafo

Dados

- Um grafo G = (V, E), e
- ullet um vector $\pi[\]$ indexado por V, contendo o 'pai' de cada vértice,

define-se o sub-grafo $G_{\pi}=(V_{\pi},E_{\pi})$ como se segue:

$$V_{\pi} = \{ v \in V \mid \pi[v] \neq NIL \} \cup \{ s \}$$
 $E_{\pi} = \{ (\pi[v], v) \mid v \in V_{\pi} - \{ s \} \}$

Este grafo será uma árvore de pesquisa em largura (APL) de G a partir de s se

- V_{π} for o conjunto de vértices alcançáveis a partir de s, e
- para cada $v \in V_{\pi}$, o caminho mais curto (em G) de s até v pertencer a G_{π} .

Correcção do Algoritmo

Teorema. [Correcção] Seja G = (V, E) orientado ou não, e $s \in V$, e considerese a execução de BFS(G, s). Então:

- 1. no fim da execução tem-se $d[v] = \delta(s, v)$ para todo $v \in V$;
- 2. O algoritmo alcança todos os vértices $v \in V$ alcançáveis a partir de s;
- 3. O vector parent construído é tal que $G_{\mathtt{parent}}$ é uma APL de G.

Exercício:

- \Rightarrow Escrever um algoritmo que recebe dois vértices u e v e devolve (caso exista) o caminho mais curto entre u e v.
- ⇒ Como Implementar a travessia em largura de uma BST? E de uma heap?

Propriedades da Fila de Espera

Invariante do ciclo while: no início de cada iteração, a fila Q contém exactamente os vértices cinzentos.

- Inicialização: Antes da primeira iteração Q contém apenas o vértice s.
- **Preservação**: Quando um vértice muda para cinzento entra para a fila; quando sai passa a ser preto.

Lema. Se durante uma execução a queue $Q \leftarrow 0$ contém $\langle v_1, v_2, \dots v_r \rangle$, então

$$d[v_i] \le d[v_{i+1}], i \in \{1, 2, \dots r-1\}$$
 e $d[v_r] \le d[v_1] + 1$

Prova. Indução no número de operações de acesso à queue (incl. dequeue).

Algoritmo de Travessia em Largura

```
void BFS((V, E), s) { /* G = (V, E) */
 for (u \in V, u \neq s)
    { color[u] = WHITE; d[u] = \infty; parent[u] = NIL; }
  color[s] = GRAY; d[s] = 0; parent[s] = NIL;
  initialize_queue(Q); enqueue(Q,s);
 while (!is_empty(Q)) {
   u = dequeue(Q);
    for (v \in Adj(u))
      if (color[v] == WHITE) {
        color[v] = GRAY;
        d[v] = d[u] + 1;
        parent[v] = u;
       enqueue(Q,v);
   color[u] = BLACK;
```

Análise do Tempo de Execução de BFS

Assumimos que o grafo é fortemente ligado e identificamos as operações:

- Cada vértice é enqueued e dequeued exactamente uma vez. Isto é garantido pelo facto de os vértices nunca serem pintados de branco depois da inicialização.
- Assumindo que enqueue e dequeue executam em tempo $\Theta(1)$, o tempo total gasto em operações sobre a Queue é $\Theta(|V|)$.
- A lista de adjacência de cada vértice é percorrida exactamente uma vez (quando o vértice é dequeued), e o comprimento total das listas é $\Theta(|E|)$. Logo, o tempo total tomado pela travessia das listas de adjacências é $\Theta(|E|)$.
- ullet As operações de *inicialização* do algoritmo são feitas em tempo $\Theta(|V|)$.
- Assim, o tempo de execução de BFS é $\Theta(|V| + |E|)$
 - linear no tamanho da representação por listas de adjacências de G.

Travessia em Profundidade ("Depth-first Search")

Este algoritmo utiliza a seguinte estratégia para efectuar a travessia do grafo:

• Os próximos arcos a explorar têm origem no *mais recente* vértice descoberto que ainda tenha vértices adjacentes não explorados.

Assim, quando todos os adjacentes a v tiverem sido explorados, o algoritmo recua ("backtracks") para explorar vértices com origem no vértice a partir do qual v foi descoberto.

Estudaremos a versão deste algoritmo que percorre todos os vértices do grafo. Depois de terminada a pesquisa com origem em s, serão feitas novas pesquisas para descobrir os vértices não-alcançáveis a partir de s.

O grafo dos antecessores de G é neste caso uma floresta composta de várias árvores de pesquisa em profundidade (APP).

Travessia em Profundidade ("Depth-first Search")

A coloração (branco, cinzento, preto) garante que cada vértice pertence a *uma única árvore*. Estas são pois *disjuntas*.

O algoritmo faz ainda uma etiquetagem dos vértices com marcas temporais ('timestamps'): d[v] para o instante em que o vértice é descoberto (passa a cinzento) e f[v] quando todos os seus adjacentes são descobertos (passam a preto). Logo d[v] < f[v].

Estas marcas são inteiros entre 1 e $2|V| \Rightarrow porquê$?

N.B.: A etiquetagem ajuda a compreender a ordem pela qual os vértices são visitados, mas o algoritmo de pesquisa em profundidade não tem necessariamente que a produzir – isso dependerá da aplicação concreta em que se utiliza.

Algoritmo de Travessia em Profundidade

```
void DFS((V, E), s) {
                                  /* G = (V, E) */
  color[s] = GRAY;
 time = time+1;
 d[s] = time;
 for (v \in Adj(s))
    if (color[v] == WHITE) {
     parent[v] = s;
     DFS((V, E), v);
  color[s] = BLACK;
 time = time+1;
 f[s] = time;
```

Inicia pesquisa no vértice s; assume que todas as inicializações foram feitas – nomeadamente da variável global time.

Algoritmo de Travessia em Profundidade

Utiliza o algoritmo anterior como sub-rotina; efectua todas as inicializações e garante que todos os vértices são descobertos.

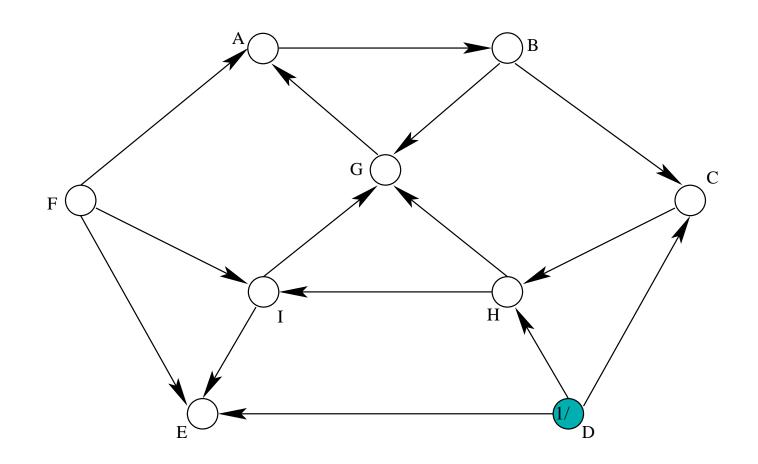
Cada invocação DFS ((V,E), u) em CDFS gera uma nova APP com raíz u.

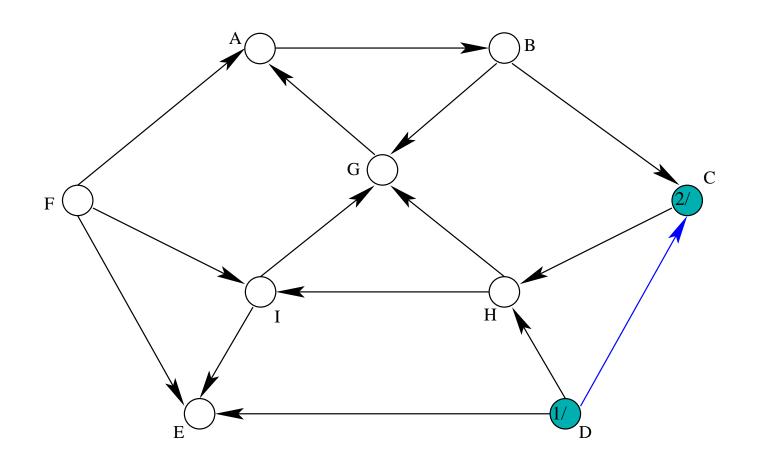
Observações

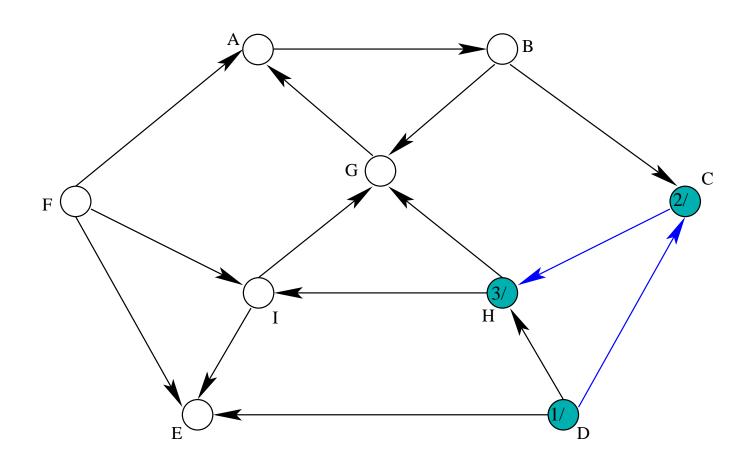
- No fim da execução de CDFS foram atribuídas a todos os vértices u marcas temporais d[u] e f[u].
- Os resultados produzidos pelo algoritmo (floresta gerada e marcas temporais)
 não são únicos, dependendo da ordem pela qual são percorridos os vértices nos
 diversos ciclos for, ou seja, da representação concreta do grafo.
- No entanto, para os efeitos importantes nas aplicações típicas deste algoritmo, os diversos resultados possíveis são equivalentes.
- → Por que razão não calcula este algoritmo a distância a que cada vértice se encontra da origem da travessia?

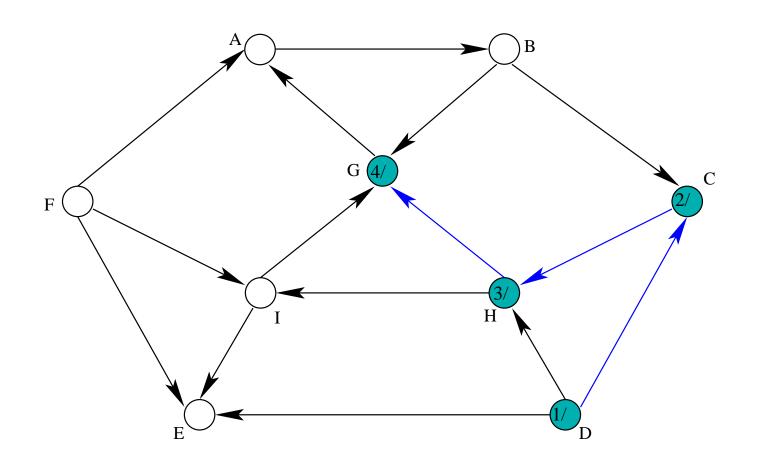
Análise do Tempo de Execução de DFS e CDFS

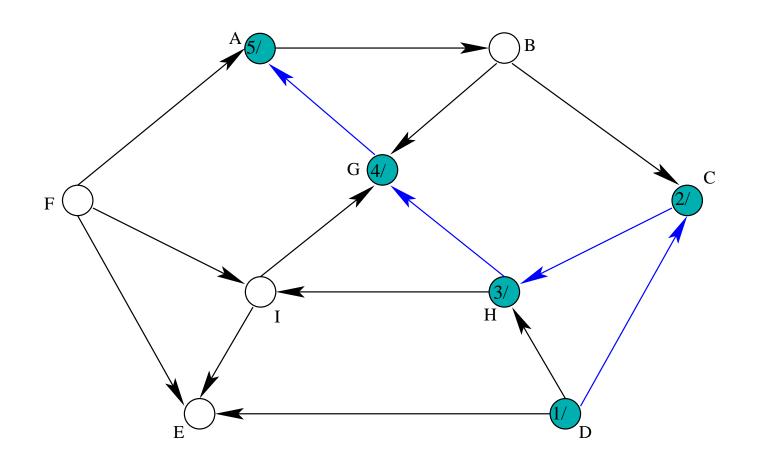
- Em CDFS, os ciclos for executam em tempo $\Theta(|V|)$, excluindo o tempo tomado pelas execuções de DFS.
- DFS é invocada exactamente uma vez para cada vértice do grafo (a partir de CDFS ou da própria DFS) – garantido porque é invocada apenas com vértices brancos e a primeira coisa que faz é pintá-los de cinzento (e nenhum vértice volta a ser pintado de branco).
- Em DFS(G,s), o ciclo for executa Adj(s) iterações. No total das invocações de DFS, este ciclo é então executado $\sum_{v \in V} |Adj(v)|$ vezes $= \Theta(|E|)$.
- O tempo de execução de CDFS é então $\Theta(|V| + |E|)$ também linear no tamanho da representação.

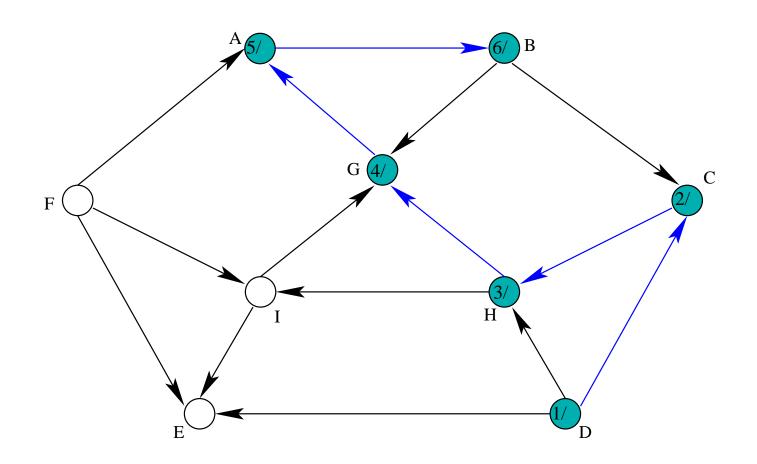


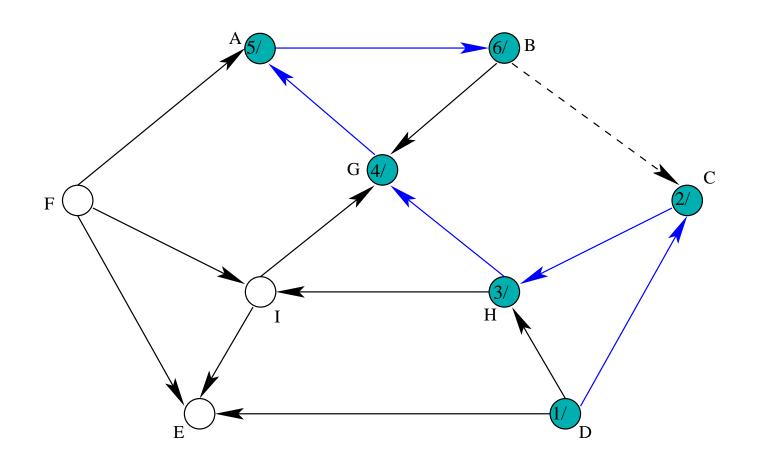


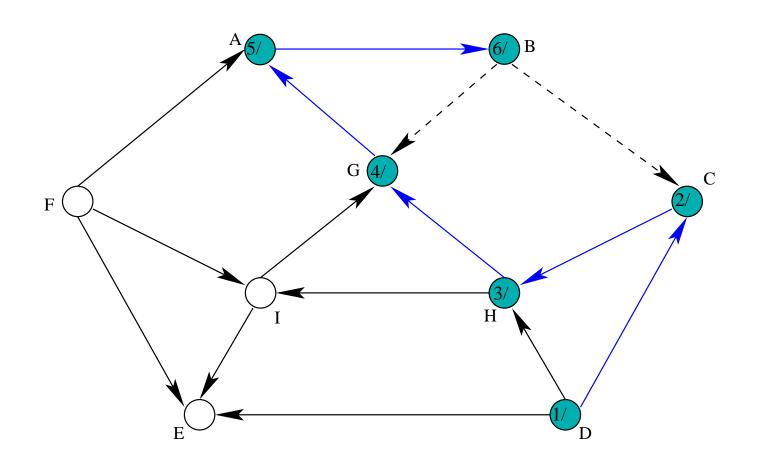


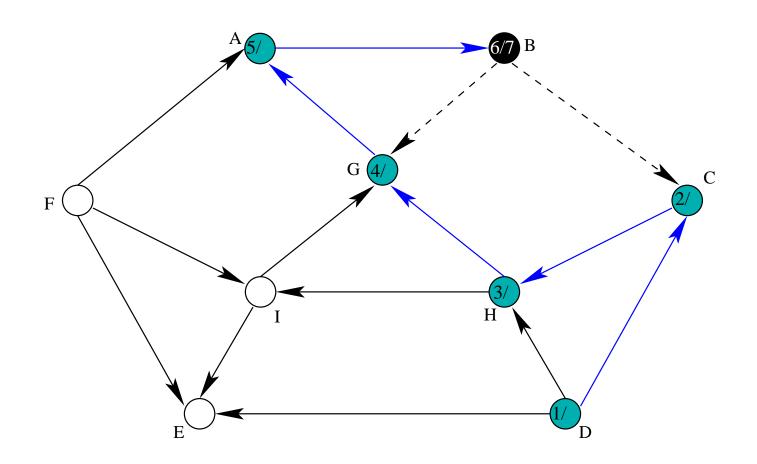


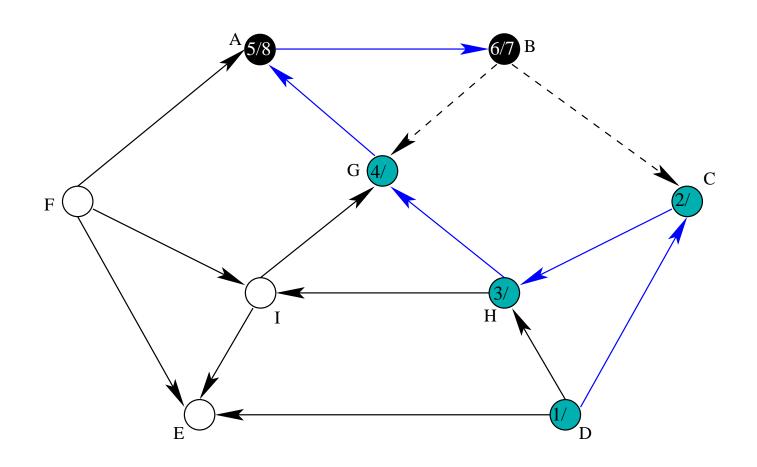


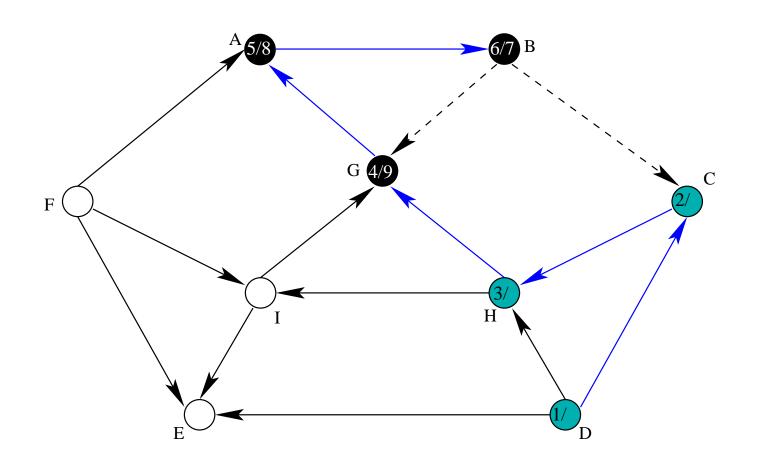


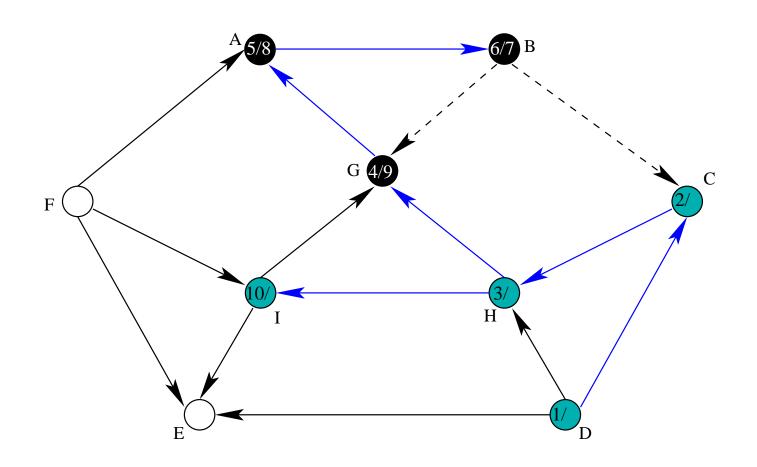


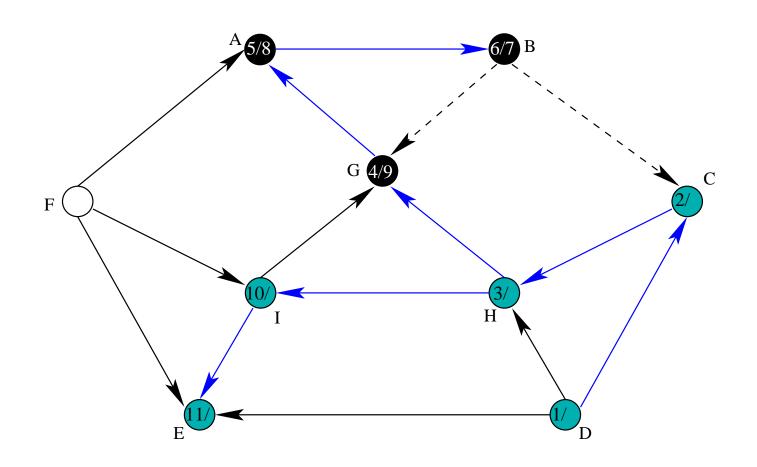


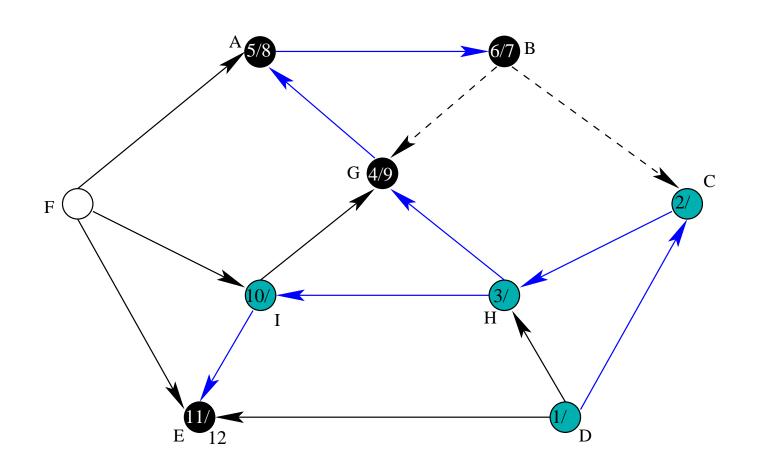


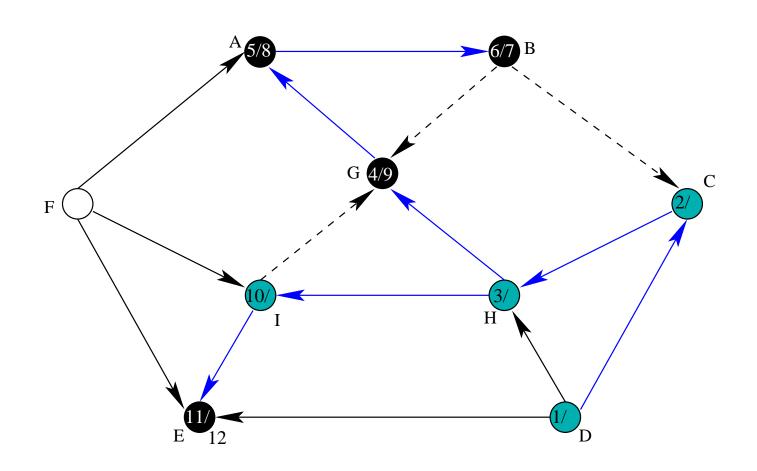


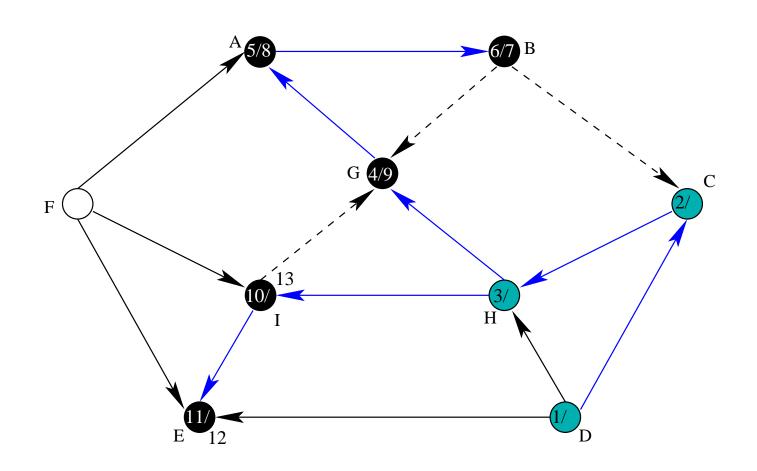


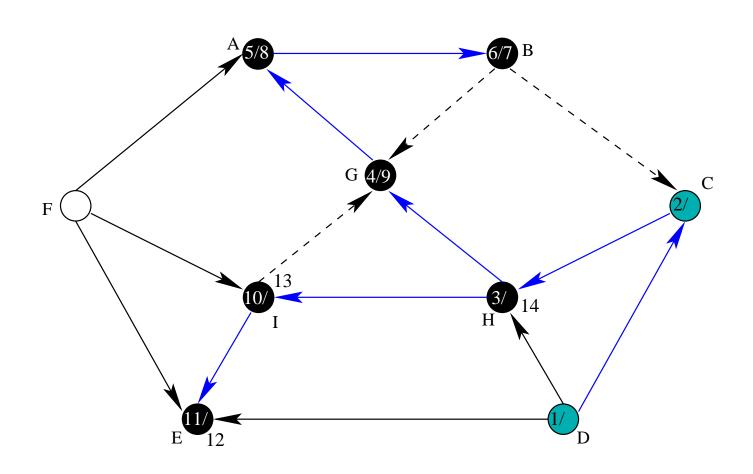


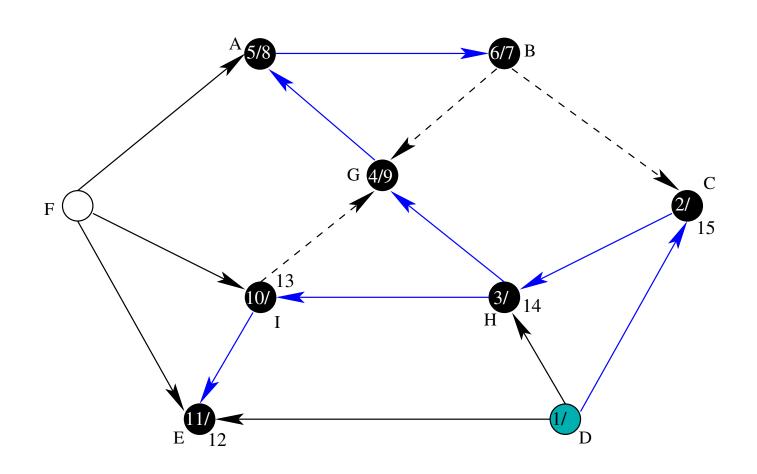


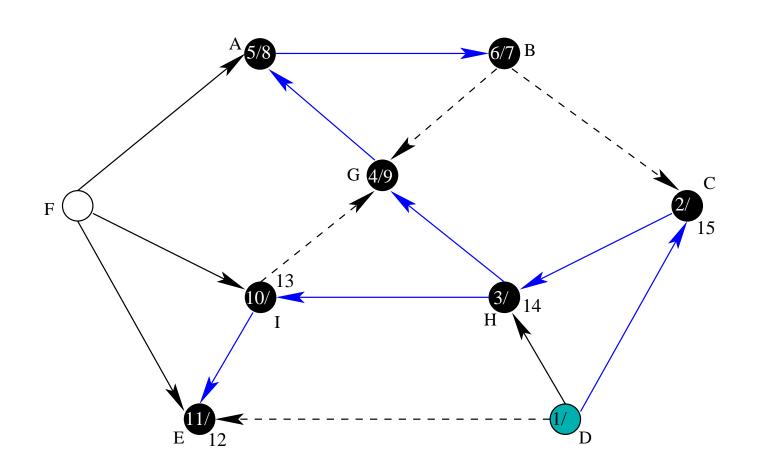


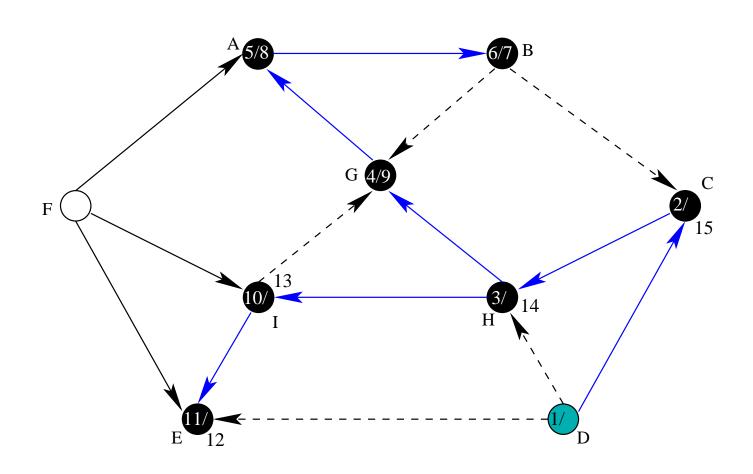


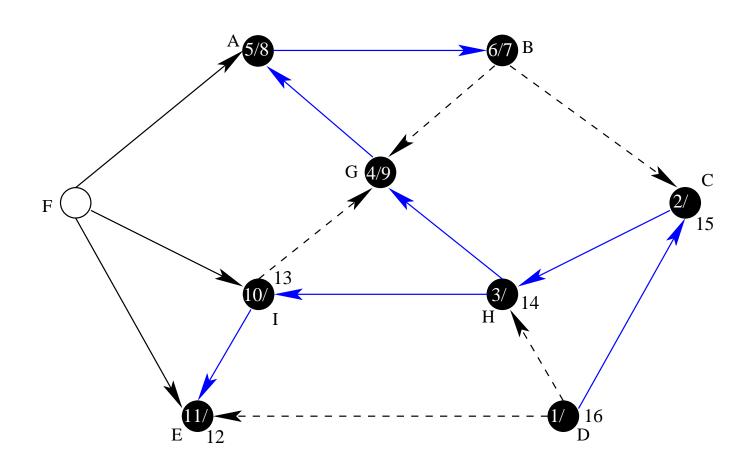




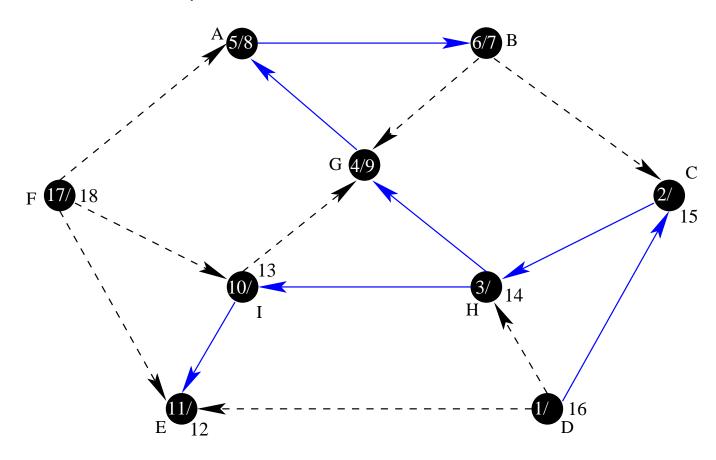








E depois da nova invocação DFS(G,F)



(D (C (H (G (A (B B) A) G) (I (E E) I) H) C) D) (F F)

Propriedades da Travessia em Profundidade

Teorema. [Parêntesis] Em qualquer pesquisa em profundidade de G = (V, E), tem-se para qualquer par de vértices u, v que uma e só uma das seguintes situações é válida:

- O intervalo [d[u], f[u]] está contido em [d[v], f[v]] e u é descendente de v numa APP;
- O intervalo [d[v], f[v]] está contido em [d[u], f[u]] e v é descendente de u numa APP;
- ullet Os dois intervalos são disjuntos e nem u é descendente de v nem o contrário.

Corolário. v é um descendente de u em G se e só se

$$d[u] < d[v] < f[v] < f[u]$$

Aplicações de Travessias de Grafos

• Ordenação topológica de um grafo acíclico orientado: determinar uma ordem linear dos vértices tal que $(u,v)\in E$ implica que u aparece antes de v nessa ordem.

Este algoritmo permite determinar ordens possíveis de execução de tarefas (representadas pelos vértices) quando os arcos representam restrições de precedência (Tarjan).

• Identificação de componentes fortemente ligados: pode ser resolvido efectuando-se duas pesquisas, uma no grafo original e outra no seu transposto (Kosaraju) ou uma *stack* auxiliar (Tarjan).

⇒ Aulas teórico-práticas

Árvores Geradoras Mínimas

("Minimum spanning trees" – MST)

Seja G=(V,E) um grafo $n\~ao$ -orientado, ligado. Uma 'arvore geradora de G é um sub-grafo (V,T) acíclico e ligado de G.

Observe-se que a árvore (V,T) liga todos os vértices de G entre si.

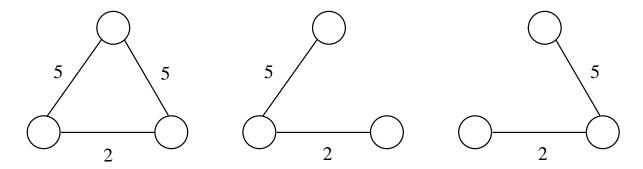
Associe-se agora a cada arco $(u,v) \in E$ um peso w(u,v) numérico. As árvores geradoras mínimas de G são aquelas para as quais o peso total

$$w(T) = \sum_{(u,v)\in T} w(u,v)$$

é mínimo.

Árvores Geradoras Mínimas

As MSTs não são únicas:



Exemplo de aplicação: ligação eléctrica de um número de "pins" num circuito integrado. Cada fio liga um par de "pins"; o peso corresponde à quantidade de cobre necessária na ligação. Pretende-se minimizar a quantidade total de cobre.

A determinação de uma MST ocorre como sub-problema de muitos outros!

Algoritmo de Prim para Determinação de MSTs

Considera em cada instante da execução o conjunto de vértices dividido em 3 conjuntos disjuntos:

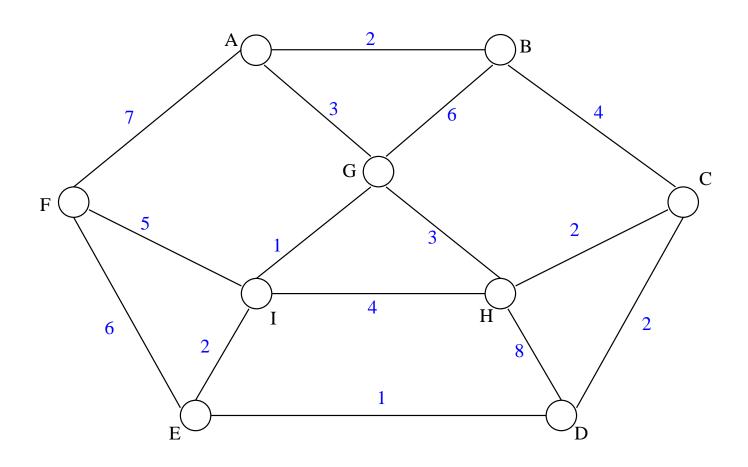
- 1. os vértices da árvore construída até ao momento;
- 2. os vértices na orla (alcançáveis a partir dos anteriores);
- 3. os restantes vértices.

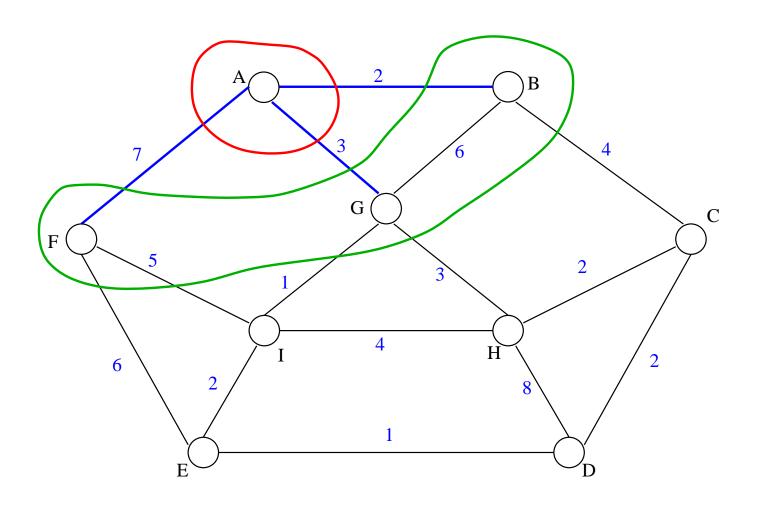
Em cada passo selecciona-se um arco (com origem em 1 e destino em 2) para acrescentar à árvore. O vértice destino desse arco é também acrescentado.

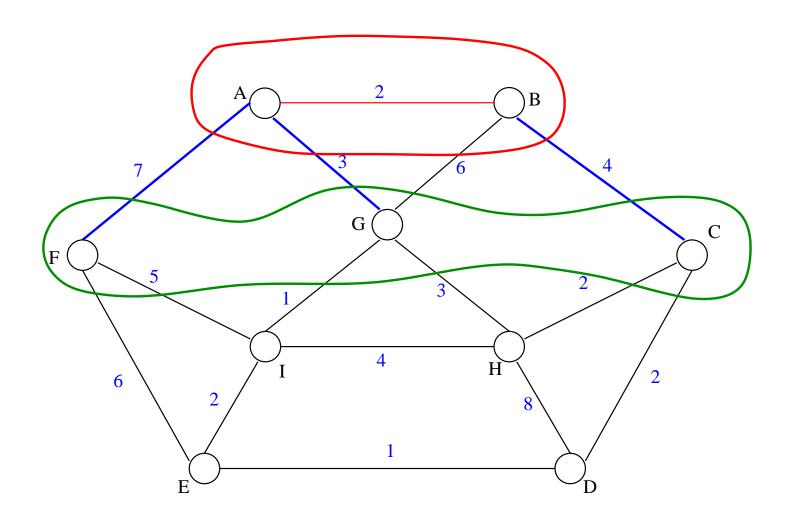
O algoritmo de Prim selecciona sempre o arco com *menor peso* nestas condições.

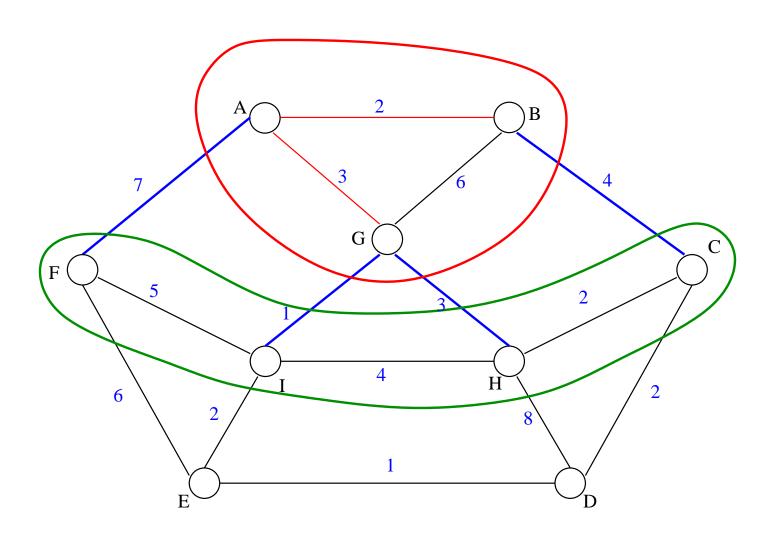
Estrutura Geral do Algoritmo

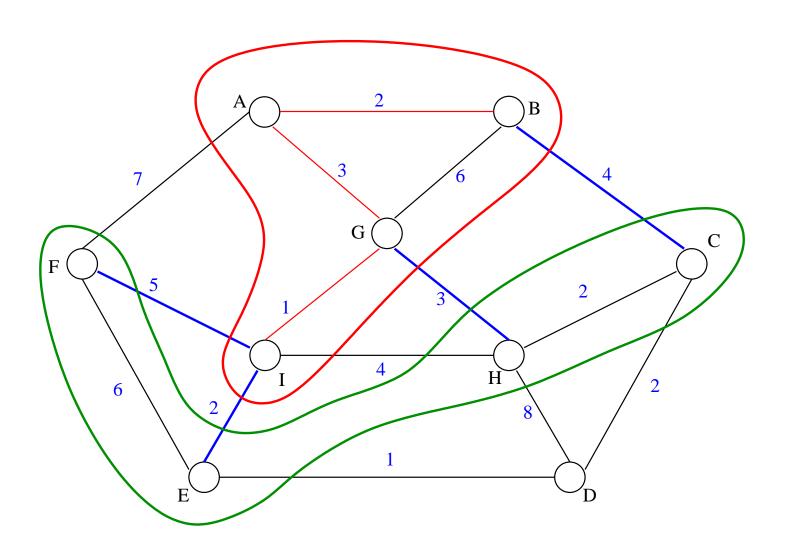
O exemplo seguinte mostrará que não é necessário examinar *todos* os arcos com origem na árvore actual e destino na orla. Para cada vértice da orla, basta considerar um arco (o de menor peso) com origem na árvore – o *arco candidato* desse vértice.

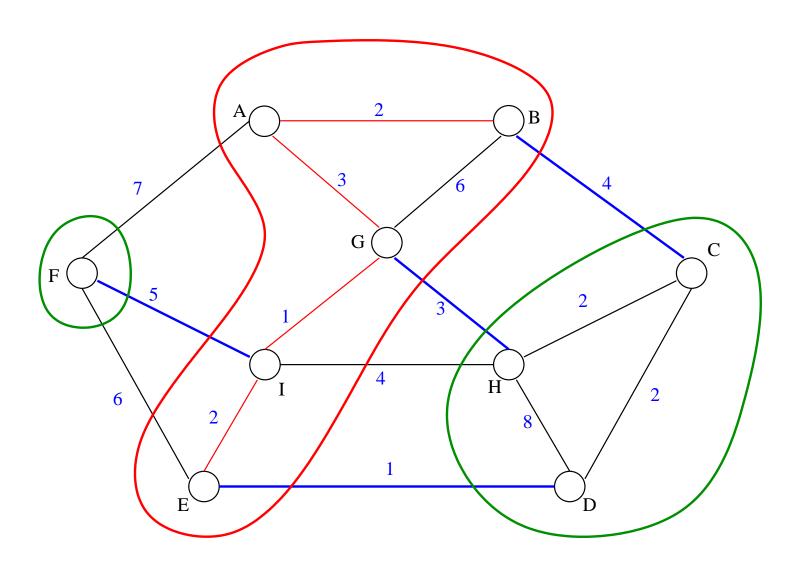


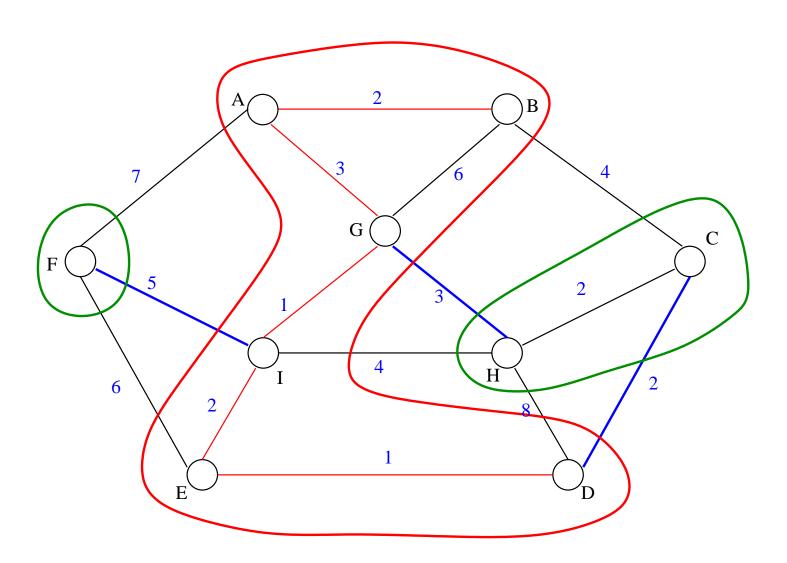


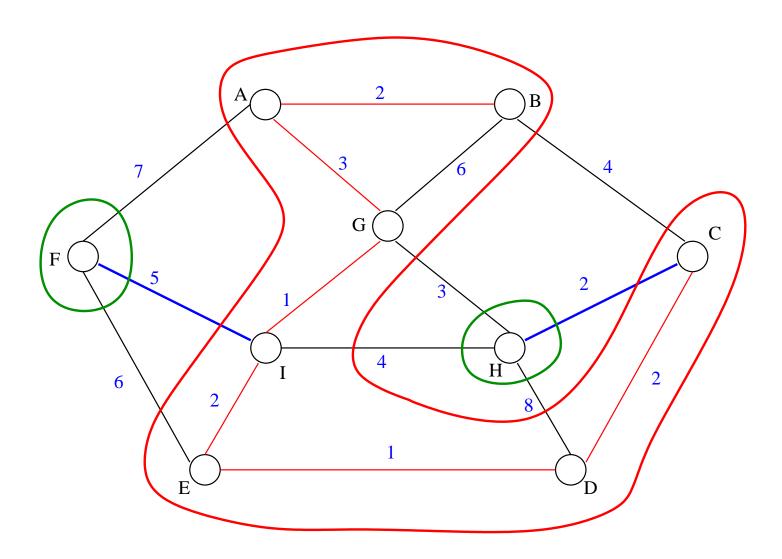


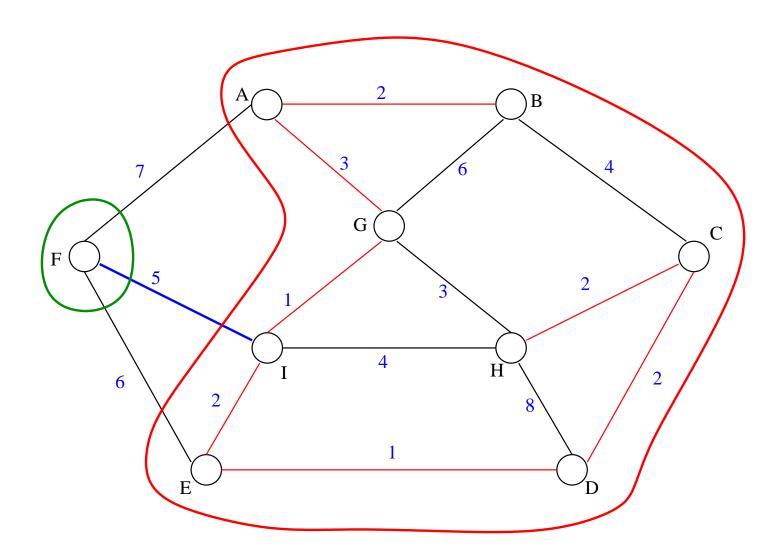


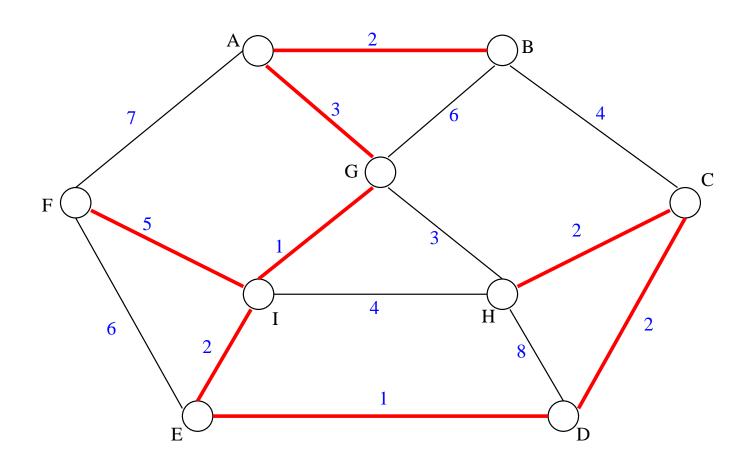












■ Correcção do Algoritmo de Prim – Invariante de Ciclo

No início de cada iteração do ciclo while, (V',T') é uma sub-árvore de uma árvore geradora mínima de G.

Inicialização $(\{x\},\emptyset)$ é sub-árvore de todas as árvores geradoras de G . . .

Preservação Próximo slide . . .

Execução termina sempre, e se o grafo for ligado ter-se-á $V^\prime=V$

 $\log (V',T')$ é uma árvore geradora mínima de G

Correcção do Algoritmo de Prim

Teorema. Seja G=(V,E) um grafo não-orientado ligado, (V,T) uma árvore geradora mínima de G, e (V',T') uma sub-árvore ligada de (V,T). Se (u,v) é um arco de peso mínimo tal que $u \in V'$ e $v \notin V'$, então $(V' \cup \{v\}, T' \cup (u,v))$ é uma sub-árvore de uma árvore geradora mínima (V,\widehat{T}) de G.

Prova.

- Se $(u,v) \in T$, a prova é imediata e $(V,\widehat{T}) = (V,T)$.
- Caso contrário, existe um caminho de u para v em (V,T); os primeiros vértices desse caminho estão em V'. Seja (w,x) o primeiro arco tal que $w \in V'$ e $x \notin V'$, e $\widehat{T} = T \{(w,x)\} \cup \{(u,v)\}$. Então:
 - $-(V,\widehat{T})$ é uma árvore geradora (\Rightarrow porquê?);
 - $-(V,\widehat{T})$ tem custo mínimo: $w(u,v)\leq w(x,y)$, logo $w(V,\widehat{T})\leq w(V,T)$;
 - $-(V'\cup\{v\},T'\cup(u,v))$ é uma sub-árvore de (V,\widehat{T}) .

Algoritmo Detalhado

```
\text{void MST}((V,E)) \ \{ \qquad \qquad /* \ \mathbf{G} = (V,E) \ */
  V' = \{x\}; T' = \emptyset; /* x escolhido arbitrariamente*/
  stuck = 0:
  while (V' \neq V \&\& !stuck) {
     for (y \in \text{orla}, y \text{ adjacente a } x)
        if (w(x,y) < w(\text{arco candidato de } y))
          substituír arco candidato de y por (x, y);
     for (y \notin V', y \notin \text{orla}, y \text{ adjacente a } x) {
        colocar y na orla;
        marcar (x, y) arco candidato;
     if (não há arcos candidatos) stuck = 1;
     else { escolher arco candidato (u, v) de custo mínimo; x = v;
              V' = V' \cup \{x\}; \ T' = T' \cup \{(u, v)\};
              remover x da orla;
              desmarcar (u, v) como candidato;
} } }
```

Observações

- Em que circunstâncias termina o algoritmo com stuck == 1?
- No fim da execução, se stuck == 0, (V',T') é uma MST.
- Como proceder para obter uma floresta de MSTs para um grafo não ligado?

Detalhes de implementação do Algoritmo de Prim

- Grafo implementado por listas de adjacências;
- são mantidos vectores adicionais para o estado de cada vértice (indicando se está na árvore, na orla, ou nos restantes), para a construção da árvore (vector parent como nos algoritmos de pesquisa), e para o peso dos arcos candidatos;
- mantida uma lista ligada correspondente aos vértices na orla.

Estas escolhas utilizam bastante espaço mas permitem acelerar a execução:

- A pesquisa e remoção do arco candidato de menor peso é feita por uma travessia da orla e consulta directa dos pesos dos arcos candidatos;
- Os nós da orla e os respectivos arcos candidatos podem fazer parte da árvore representada pelo vector *parent* a substituição de um arco candidato é assim feita facilmente, alterando-se *parent* e o vector de pesos dos arcos candidatos.

Tempo de Execução do Algoritmo de Prim

Análise sobre G = (V, E). Assumimos grafo ligado (stuck não toma o valor 1), representado por listas de adjacências e uma lista *não-ordenada* para a orla.

- Número de operações de inicialização é linear em |V|.
- Ciclo while é executado |V|-1 vezes.
- Os dois ciclos for podem ser fundidos num único que atravessa vértices adjacentes a x. Estes ciclos atravessam todas as listas de adjacências, e o seu corpo é executado em tempo constante, logo executam em $\Theta(|V| + |E|)$.
- Número total de comparações na escolha do arco candidato de peso mínimo está em $\Omega(|V|)$ e $O(|V|^2)$. (\Rightarrow porquê?)

Então, o algoritmo executa em tempo $O(|V|^2 + |E|)$.

■ Tempo de Execução do Algoritmo de Prim – Notas

- Pior caso para o número total de comparações não exige que o grafo seja completo: basta que o vértice inicial tenha todos os outros como adjacentes.
- O limite $O(|V|^2 + |E|)$ caracteriza o comportamento do algoritmo em geral, inclusivamente no caso em que (V, E) é um *multi-grafo*.
- Se se tratar de um grafo *simples*, em que o número máximo de arcos entre cada par de vértices é 1, o tempo de execução no pior caso está em $O(|V|^2 + |E|) = O(|V|^2)$ uma vez que $|E| = O(|V|)^2$.

Tempo de Execução: Limite Inferior

Teorema: Qualquer algoritmo de construção de MSTs examina necessariamente todos os arcos do grafo, logo executa em tempo $\Omega(|E|)$.

Prova. Por contradição:

- Seja G = (V, E) um grafo ligado cujos arcos têm todos peso 2.
- Imaginemos que existe um algoritmo que constrói uma árvore geradora mínima (V,T) sem examinar um arco (x,y) de G. Então T não contém (x,y).
- T contém forçosamente um caminho c de x para y; G contém um ciclo constituído por esse caminho e pelo arco (x,y).
- Se alterarmos o peso w(x,y) para 1, isso não altera a acção do algoritmo (uma vez que não considera esse arco). No entanto podemos construír uma árvore geradora com peso inferior a (V,T): basta substituír qualquer arco de c por (x,y) contradição!

Caminhos Mais Curtos

("Shortest Paths" – SP)

Seja G=(V,E) um grafo pesado orientado ou não-orientado, e $P=v_0,v_1,\ldots v_k$ um caminho nesse grafo. O *peso* do caminho P define-se como

$$w(P) = \sum_{i=0}^{k-1} w(v_i, v_{i+1})$$

Um caminho P do vértice v para o vértice w diz-se um caminho mais curto entre v e w se não existe nenhum caminho de v para w com peso inferior a w(P). P não é necessariamente único.

O nome vem da analogia geográfica, quando os vértices representam *locais* e os pesos *distâncias* entre eles. Outras aplicações: pesos podem representar *custos*, por exemplo de viagens entre locais.

Caminhos Mais Curtos

O problema: dado um grafo G e dois vértices v e w nesse grafo, determinar um caminho mais curto entre eles.

Questão prévia: se construírmos uma árvore geradora mínima com origem em v, será o caminho (único) de v para w contido nessa árvore um caminho mais curto? A resposta pode ser encontrada no exemplo anterior . . .

Uma estratégia imediata: força bruta — construír *todos* os caminhos de v para $w \ (\Rightarrow \ como?)$; seleccionar o mais curto.

Veremos em seguida um algoritmo muito mais eficiente.

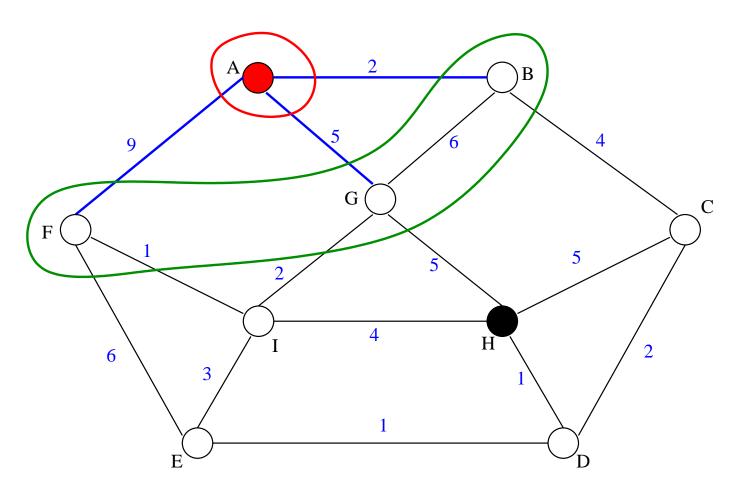
Uma definição necessária: no contexto dos grafos com pesos, a distância d(x,y) do vértice x ao vértice y é dada pelo peso do caminho (ou de um dos caminhos) mais curto de x para y.

Algoritmo de Dijkstra para Determinação de SPs

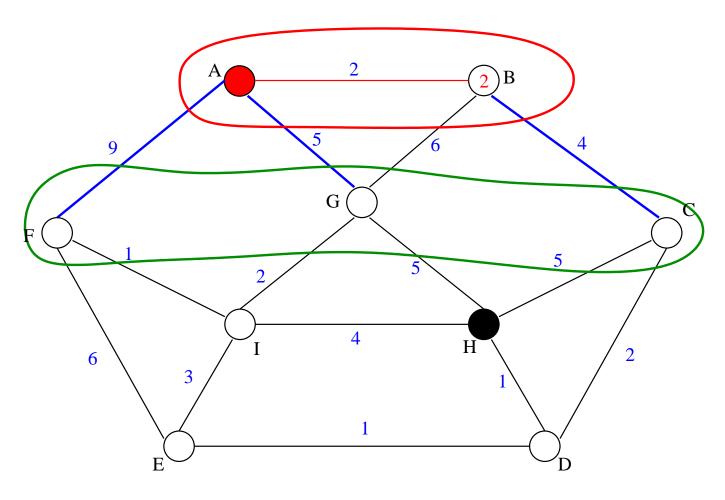
- Muito semelhante ao algoritmo de PRIM para MSTs.
- Selecciona em cada passo um vértice da orla para acrescentar à árvore que vai construindo.
- O algoritmo vai construindo caminhos cada vez mais longos (i.e. com peso cada vez maior) a partir de v, dispostos numa árvore; pára quando alcançar w.
- A grande diferença em relação ao algorito de Prim é o critério de selecção do arco candidato.
- A análise do tempo de execução é análoga.

Algoritmo de Dijkstra – Arcos Candidatos

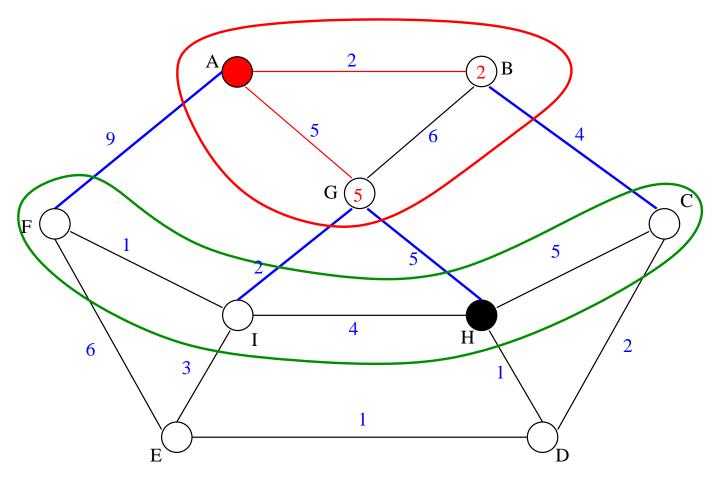
- Para cada vértice z na orla, existe um caminho mais curto $v, v_1, \ldots v_k$ na árvore construída, tal que $(v_k, z) \in E$.
- Se existirem vários caminhos $v, v_1, \ldots v_k$ e arco (v_k, z) nas condições anteriores, o arco candidato (único) de z será aquele para o qual $d(v, v_k) + w(v_k, z)$ for mínimo.
- Em cada passo, o algoritmo selecciona um vértice da orla para acrescentar à árvore. Este será o vértice z com valor $d(v, v_k) + w(v_k, z)$ mais baixo.



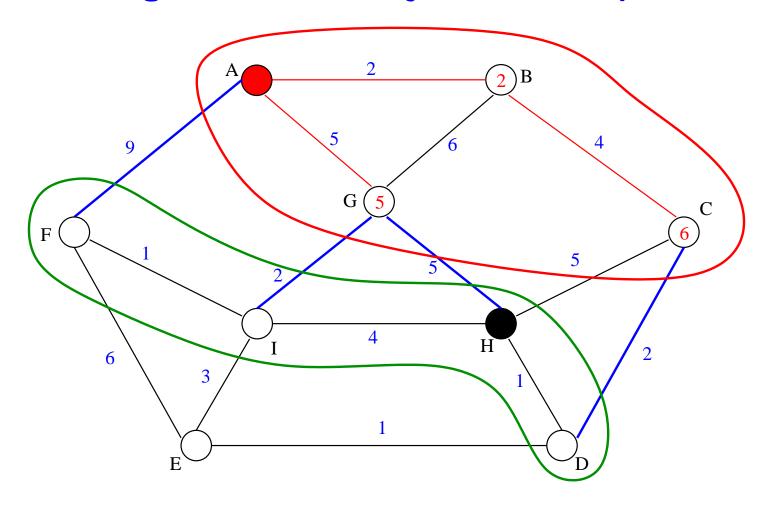
$$d(A, A) + w(A, B) = 2;$$
 $d(A, A) + w(A, F) = 9;$ $d(A, A) + w(A, G) = 5.$



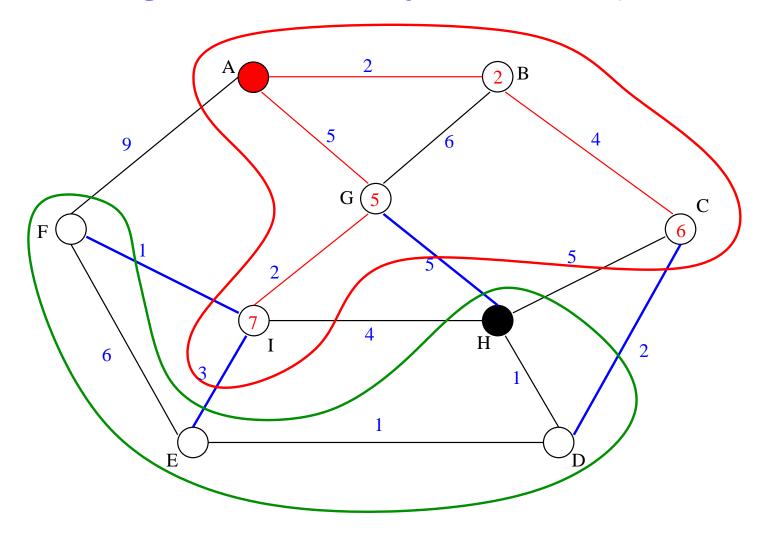
$$d(A, B) + w(B, C) = 6;$$
 $d(A, A) + w(A, F) = 9;$ $d(A, A) + w(A, G) = 5.$



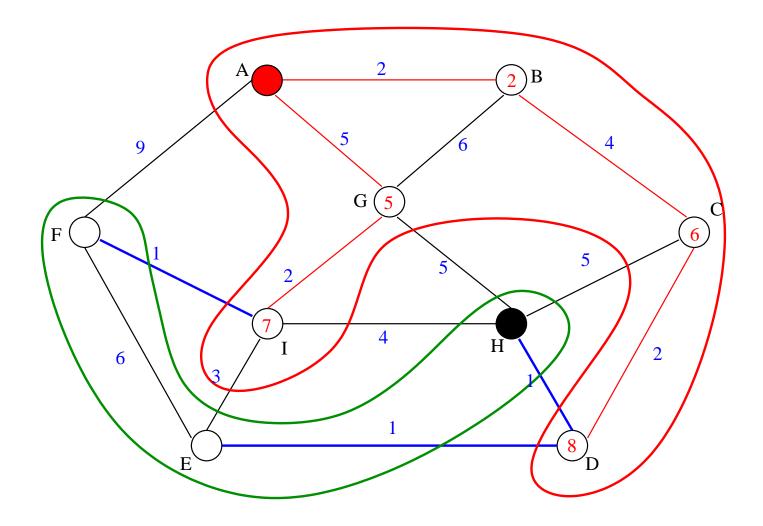
$$d(A,B) + w(B,C) = 6;$$
 $d(A,A) + w(A,F) = 9;$ $d(A,G) + w(G,H) = 10;$ $d(A,G) + w(G,I) = 7.$



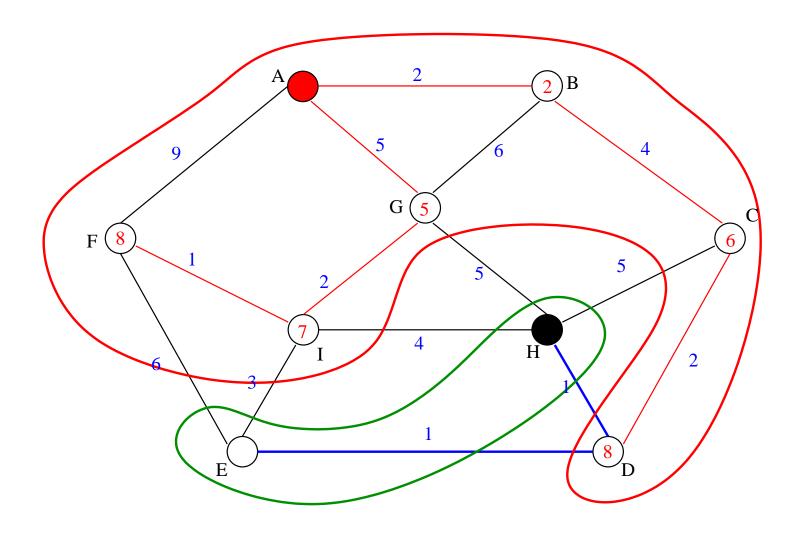
$$d(A,C) + w(C,D) = 8;$$
 $d(A,A) + w(A,F) = 9;$ $d(A,G) + w(G,H) = 10;$ $d(A,G) + w(G,I) = 7.$

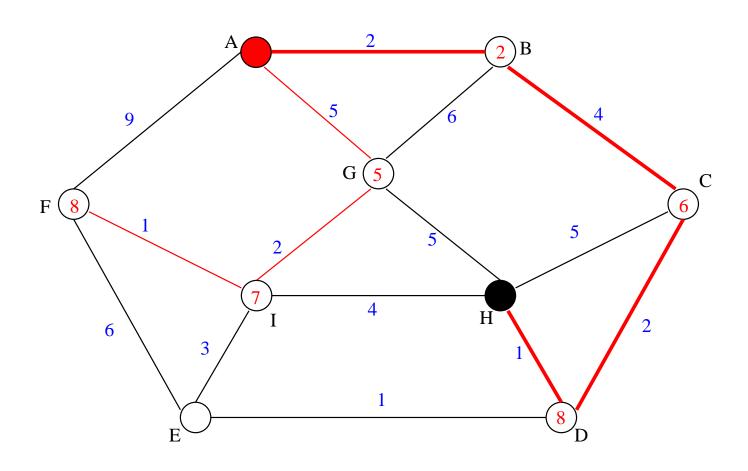


Alteração do arco candidato de F!



Alteração do arco candidato de H!





Implementação

Utiliza-se um vector $dist[\]$ para guardar a seguinte informação:

- dist[y] = d(v, y) se y está na árvore construída até ao momento;
- dist[z] = d(v, y) + w(y, z) se z está na orla e (y, z) é o seu arco candidato.

Observe-se que se trata de informação que é reutilizada várias vezes pelo que deve ser armazenada quando é calculada pela primeira vez.

Algoritmo Detalhado

```
void SP((V,E), v, w) {
                                                  /* G = (V, E) */
  x = v; \ V' = \{x\}; \ T' = \emptyset;
  stuck = 0;
  while (x \neq w \&\& !stuck) {
     for (y \in \text{orla}, y \text{ adjacente a } x)
        if (\operatorname{dist}[x] + w(x,y) < \operatorname{dist}[y]) {
           substituír arco candidato de y por (x, y);
           dist[y] = dist[x] + w(x, y);
     for (y \notin V', y \notin \text{orla}, y \text{ adjacente a } x) {
        colocar y na orla;
        marcar (x, y) arco candidato;
        dist[y] = dist[x] + w(x, y);
```

Algoritmo Detalhado

```
if (não há arcos candidatos) stuck = 1;
else { escolher arco candidato (u, z) com dist[z] mínimo;
x = z;
V' = V' \cup \{x\}; T' = T' \cup \{(u, z)\};
remover x da orla;
desmarcar (u, z) como candidato;
}
}
```

Nota: O grafo G pode ser orientado (é de facto a situação mais comum), ao contrário do que acontece no problema de árvores geradoras mínimas.

■ Correcção do Algoritmo de Dijkstra – Invariante de Ciclo ■

No início de cada iteração do ciclo while, (V',T') é uma árvore com raíz em v tal que todo o caminho de v para y nela contido é um caminho mais curto em G.

Prova:

Inicialização trivial para $(\{v\},\emptyset)$

Preservação dada pelo Teorema do próximo slide

No fim da execução do ciclo, se stuck != 0, V' contém w logo contém um caminho mais curto de v para w.

Correcção do Algoritmo de Dijkstra

Teorema. Seja G = (V, E) um grafo pesado e $V' \subseteq V$ contendo o vértice v. Se (u, z), com $u \in V'$, $z \notin V'$, é escolhido por forma a minimizar d(v, u) + w(u, z), então o caminho obtido acrescentando-se (u, z) no fim de um caminho mais curto de v para u é um caminho mais curto de v para z.

Prova. \Rightarrow **Exercício!!**

Variantes do Problema dos Caminhos Mais Curtos

Seja G um grafo orientado. O problema estudado designa-se também por "Single-pair Shortest Paths" e pode ser visto como um caso particular de:

- 1. Single-source Shortest Paths: determinar todos os caminhos mais curtos com origem num vértice v dado e destino em cada vértice de G. Poder ser resolvido por uma versão ligeiramente modificada do algoritmo de Dijkstra. \Rightarrow como?
- 2. **Single-destination Shortest Paths**: determinar todos os caminhos mais curtos com destino num vértice w dado e origem em cada vértice de G. Pode ser resolvido por um algoritmo de resolução do problema 1, operando sobre um grafo obtido do original invertendo-se o sentido de todos os arcos.

Variantes do Problema dos Caminhos Mais Curtos

3. **All-pairs Shortest Paths**: determinar caminhos mais curtos entre todos os pares de vértices de G.

Os algoritmos para 1. e 2. são assimptoticamente tão rápidos quanto o algoritmo de Dijkstra. O problema 3. pode ser resolvido de forma mais simples do que pela resolução do problema 1 repetidamente.

Estratégias Algorítmicas – Algoritmos "Greedy"

A estratégia "greedy" pode ser utilizada na resolução de problemas de optimização. Um algoritmo greedy efectua uma sequência de escolhas; em cada ponto de decisão no algoritmo, esta estratégia elege a solução que "parece" melhor:

Fazer escolhas localmente óptimas esperando que elas resultem numa solução final globalmente óptima.

Nota: Esta estratégia não resulta sempre em soluções globalmente óptimas, pelo que tipicamente é necessário *provar* que a estratégia é adequada.

Sub-estrutura Óptima

Diz-se que um problema possui *sub-estrutura óptima* se uma solução óptima para o problema contém *soluções óptimas para sub-problemas* do problema original.

- ullet Árvores Geradoras Mínimas: Cada sub-árvore de uma MST do grafo G é uma MST de um sub-grafo de G.
- Caminhos Mais Curtos: Todos os sub-caminhos do caminho mais curto de v até w são caminhos mais curtos.

Para que um problema seja resolúvel por uma estratégia "greedy" é condição necessária que ele possua sub-estrutura óptima. . .

Algoritmos Greedy

- . . . e que possa ser reformulado como se segue:
- É efectuada uma escolha, da qual resulta um (único) sub-problema que deve ser resolvido.
- Essa escolha é efectuada localmente sem considerar soluções de sub-problemas
 o novo sub-problema resulta da escolha efectuada; a escolha greedy não pode depender da solução do sub-problema criado.
- Trata-se pois de um método *top-down*: cada problema é reduzido a um mais pequeno por uma escolha greedy e assim sucessivamente.
- Isto contrasta com a Programação Dinâmica uma estratégia bottom-up em que cada escolha efectuada depende já de soluções de sub-problemas.

Algoritmos Greedy

Por exemplo no caso do algoritmo de Prim:

- 1. O sub-problema actual: estender a árvore já construída (V',T') até conter todos os vértices de V.
- 2. A escolha greedy aumenta (V',T') com um vértice e um arco; seja (V'',T'') a árvore resultante.
- 3. O novo problema resultante desta escolha é mais pequeno: estender (V'', T'') até conter todos os vértices de V.

Prova de Correcção Típica

1. O sub-problema actual: estender a árvore já construída (V',T') até conter todos os vértices de V.

Assume-se uma solução globalmente óptima deste sub-problema: a MST (V,T). A árvore (V',T') é sub-árvore desta.

- 2. A escolha greedy aumenta (V',T') com um vértice e um arco; seja (V'',T'') a árvore resultante.
- 3. O novo problema resultante desta escolha é mais pequeno: estender (V'',T'') até conter todos os vértices de V. (V,T) não contém necessariamente (V'',T'').

Há então que provar que (V'',T'') é sub-árvore de uma (outra?) solução globalmente óptima (V,\widehat{T}) , i.e., uma solução para o sub-problema obtido depois da escolha greedy é globalmente óptima.

Fecho Transitivo de um Grafo Não-pesado

Considere-se uma relação binária A sobre um conjunto S $(A \subseteq S \times S)$. Escreveremos xAy quando $(x,y) \in A$. Dada uma enumeração s_1, s_2, \ldots de S, a relação A pode ser representada por uma matriz de dimensão |S|:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ se } s_i A s_j \\ 0 \text{ caso contrário} \end{cases}$$

Se A for a relação de adjacência de um grafo G, a respectiva matriz é a matriz de adjacências de G. A determinação de elementos do fecho transitivo de A:

$$xAy$$
 e yAz \Longrightarrow xAz

corresponde à inserção de arcos em G:

$$x \longrightarrow y \longrightarrow z \implies x \longrightarrow z$$

Algoritmo de Fecho Transitivo de um Grafo

Considere-se a situação seguinte com i < k' e j < k:

$$s_i \longrightarrow s_{k'} \longrightarrow s_k \longrightarrow s_j$$

Então o algoritmo tenta acrescentar o arco (s_i, s_j) antes de (s_i, s_k) e $(s_{k'}, s_j)$.

Este algoritmo é incorrecto porque não processa os vértices pela ordem adequada.

Algoritmo de Warshall

Uma correcção possível do algoritmo consiste na introdução de um novo ciclo (mais exterior), while (houver arcos a acrescentar...).

Uma solução mais eficiente é o Algoritmo de Warshall, que difere do anterior apenas na disposição dos ciclos:

Este algoritmo executa em tempo $\theta(|V|^3)$.

Correcção do Algoritmo – Invariante de Ciclo

Seja
$$S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$$
, para $k \leq |V|$.

No início da iteração de índice k do ciclo for mais exterior, R[i][j]==1 sse existe um caminho (de comprimento > 0) de s_i para s_j contendo além destes apenas vértices de S_{k-1} .

Inicialização R contém apenas os arcos iniciais do grafo e $S_0 = \emptyset$.

Preservação Para os pares de vértices (i,k), (k,j), e (i,j), para todos os vértices i,j, $R[\cdot][\cdot]$ contém 1, no início da iteração k, se existir um caminho passando apenas por vértices de S_{k-1} . A iteração k vai testar se existe caminho de i para j passando adicionalmente por k, e colocar R[i][j]=1 se for esse o caso (N.B. este valor podia já ser 1 antes!).

No fim da última execução do ciclo, tem-se pois R[i][j]==1 sse existe um caminho (de comprimento > 0) de s_i para s_j em G.

Programação Dinâmica

Recordemos a definição da sequência de números de Fibonacci:

$$fib(1) = 1$$

 $fib(2) = 1$
 $fib(n) = fib(n-1) + fib(n-2)$

Uma implementação recursiva directa desta definição resulta num algoritmo de tempo claramente exponencial, no entanto há margem para optimização:

$$fib(n) = fib(n-1) + fib(n-2)$$

= $2 * fib(n-2) + fib(n-3)$
= $3 * fib(n-3) + 2 * fib(n-4)$
= ...

A implementação directa (top-down) vai repetir 3 vezes o cálculo de fib(n-3), que pode alternativamente ser calculado uma única vez e armazenado ("memoized") para utilização futura.

Programação Dinâmica

A estratégia algorítmica pomposamente conhecida por *programação dinâmica* consiste na optimização de uma definição recursiva, quando há margem para armazenamento de resultados intermédios, que se calculam bottom-up.

No caso da sequência de Fibonacci, basta calcular os valores sequencialmente e armazená-los num vector – solução de tempo $\Theta(n)$, às custas de espaço adicional também em $\Theta(n)$.

```
int Fibonacci (int n) {
  int fib[n];
  fib[1] = 1; fib[2] = 1;
  for (k=3; k<=n; k++)
    fib[k] = fib[k-1] + fib[k-2];
  return fib[n];
}</pre>
```

De facto, pode-se dispensar o vector (uma vez que fórmula recursiva necessita só dos dois últimos valores calculados), substituindo-o por apenas duas variáveis.

Caminhos mais curtos, revisitados

Consideremos o problema do cálculo da distância (peso do caminho mais curto) entre dois vértices.

Seja $d_k(i,j)$ o peso do caminho mais curto de i para j passando apenas pelos vértices de $S_k = \{s_1, \ldots, s_k\}$. É imediato que

$$\delta(i,j) = d_n(i,j), \quad \text{com } n = |V|$$

Esta noção tem uma definição simples, recursiva em k:

$$\begin{array}{ll} d_0(i,j) &= w_{i,j} & \text{[peso do arco } i \longrightarrow j] \\ d_k(i,j) &= \min \left(d_{k-1}(i,j) \;,\; d_{k-1}(i,k) + d_{k-1}(k,j) \right) \end{array}$$

Este cálculo apresenta um padrão (top-down) muito ineficiente, mas, tal como no caso do cálculo da sequência de Fibonacci, com muito potencial para armazenamento de resultados intermédios, se se optar por uma estratégia de cálculo $bottom\ up$; calcular e armazenar por esta ordem $d_0,\ d_1,\ \ldots,\ d_n$.

Cálculo de Distâncias

Seja então $\{D_k \mid 1 \le k \le n\}$ um vector de n matrizes, com $D_k[i][j] = d_k(i,j)$. O seguinte algoritmo inspira-se no de Warshall para cálculo do fecho transitivo:

Será possível dispensar o armazenamento de matrizes intermédias, usando uma única matriz D? Note-se que os valores de D[i][k] e de D[k][j] podem bem ser actualizados antes de D[i][j]. Mas de facto $d_{k-1}(i,k) = d_k(i,k)$, e $d_{k-1}(k,j) = d_k(k,j)$, pelo que esta ordem de actualização é irrelevante.

Algoritmo de Floyd-Warshall

O algoritmo resultante desta simplificação é o seguinte:

```
void Distances (Weight W[][], Weight D[][], int n) {
  D = W;
  for (k=0; k<n; k++)
    for (i=0; i<n; i++)
     for (j=0; j<n; j++)
        D[i][j] = min(D[i][j], D[i][k] + D[k][j]);
}</pre>
```

Pode ser facilmente modificado para guardar os caminhos mais curtos além da distância. Basta utilizar uma matriz adicional que conterá na posição (i,j) um vértice contido no caminho mais curto de i para j.

■ "All-pairs shortest paths" – algoritmo de Floyd-Warshall

```
void FW (Weight W[][], Weight D[][], int P[][], int n) {
   P = [0];
   D = W;
   for (k=0; k<n; k++)
      for (i=0; i<n; i++)
        for (j=0; j<n; j++)
        if (D[i][k] + D[k][j] < D[i][j]) {
            D[i][j] = D[i][k] + D[k][j];
            P[i][j] = k;
        }
}</pre>
```

A matriz pode ser consultada recursivamente para se construir um caminho: por exemplo, se P[3][10]=5, então o caminho mais curto de 3 para 10 será $\phi 5\psi$, em que ϕ é o caminho mais curto de 3 para 5 e ψ é o caminho mais curto de 5 para 10, pelo que consultaríamos em seguida P[3][5] e P[5][10] para construir ϕ e ψ . Quando P[i][j]=0 não existem mais vértices intermédios (j é adjacente a i).

■ "All-pairs shortest paths" – algoritmo de Floyd-Warshall

A execução deste algoritmo é em termos assimptóticos semelhante ao de Dijkstra (repetido a partir de todos vértices do grafo).

Existe um outro algoritmo (Bellman-Ford), também baseado em programação dinâmica, que permite lidar com *pesos negativos*, úteis em aplicações financeiras (proveitos vs. custos).

No entanto, isto só será possível em grafos que *não contenham ciclos de custo total negativo*. . .

FIM DO CAPÍTULO