Biblioteca de Grafos - (Python)

Requisitos

- Para o funcionamento dessa biblioteca, basta ter o Python - a partir da versão **3.0** - instalada em sua máquina; além do módulo venv (v. ≥ 3.0). Responsável pelo provisionamento de um ambiente isolado de execução - de maneira a conter somente o que for necessário às funcionalidades da biblioteca - esse pacote pode ser instalado com auxílio da documentação linkada em sua versão.

Instalação

- Utilizaremos o gerenciador de pacotes padrão do Python, chamado de **pip**, para realizar o download das dependências do projeto. Tais acervos são facilitadores para a criação de estruturas primitivas, controle de tamanho de dados em bits e optimalidade em termos de memória e performance. As dependências merecedoras de destaque são:
    - numpy (v. ≥ 1.23.3)
    - HeapDict (v. ≥ 1.0.1)
- Em um terminal de comando (PowerShell em sistemas Windows, idealmente), digite:

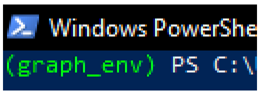
```
git clone https://github.com/RuasGAR/graph_library.git
cd C:/Users/${pasta de destino}

# Para ativar seu ambiente de execução:
  # Linux e Mac
    ./graph_env/bin/activate
  # Windows
    .\graph_env\bin\Activate.ps1

# Baixando as dependências

pip install graph_env/requirements.txt
```

- Veja que agora seu terminal dispõe de uma marcação ao lado do caminho de diretório.

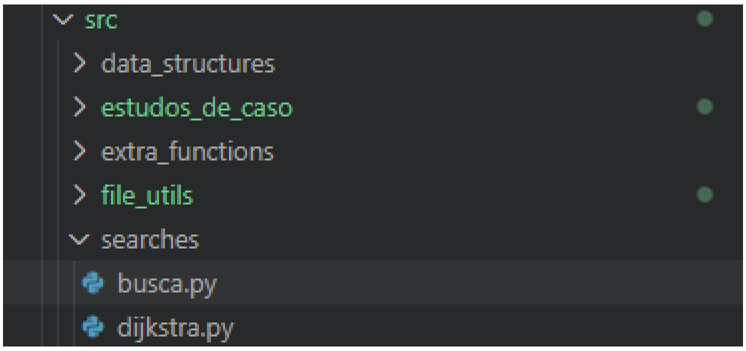


- Pronto! Todos os passos já foram dados e agora é só utilizar como quiser! Para uma melhor orientação de como rodar alguns testes, veja a seção "*Caso de Estudos*".

Ideação e Estrutura

Linguagem e Paradigma

- Python é uma linguagem bastante flexível em termos de paradigma, sendo a **orientação a objeto** um de seus destaques mais recentes, em especial no desenvolvimento de APIs simples e leves. Na ampla maioria do código, é essa a abordagem utilizada para o desenvolvimento da biblioteca: os códigos são segmentados como classes e separadas em módulos.



Estrutura hierárquica do projeto: menores componentes de modularização são as classes

- Certas escolhas de concepção - cuja totalidade é comentada com mais detalhes na seção *Funcionalidades* - reúnem algoritmos com características similares para evitar sintetizar e reduzir instâncias necessárias. Um exemplo dessa natureza pode ser visto no arquivo "busca.py", o qual inclui uma classe de Busca. Com somente uma instância dessa classe, podemos escolher o melhor algoritmo de busca para grafos sem peso - Breadth First Search ou Depth First Search.
- Por último - e certamente importante - faz-se importante a exposição do componente básico de praticamente todos os métodos de busca disponíveis na biblioteca. Estamos falando da classe Vertice, disponível no caminho *graph_env/src/data_structures/search_vertex.py*.

```python
class Vertice:
    def __init__(
        self,
        valor: int,
        pai: int,
        peso: float = 0.0,
    ) -> None:
        self.valor: int = valor
        self.marcador: bool = False
        self.pai: Union[int, None] = pai if pai else None
        self.nivel: int = 0
        self.peso = peso
```

Representação de Grafos

- Nossa biblioteca é capaz de representar grafos não direcionados, com pesos positivos ou com nenhum. Grafos com pesos só podem ser alocados em **Vetores de Adjacência**. Aqueles que não possuem intensidades associadas às arestas também podem ser representados por **Matrizes de Adjacência**, embora sempre tenhamos como recomendação a primeira estrutura de dados para menor consumo de memória e de processamento.

Otimizações e Boas Práticas

- Por padrão, variáveis e valores inteiros ou de ponto flutuante serão criados com 64 bits pelo Python. Entretanto, em nosso uso corriqueiro, notamos que esse número de alocação de armazenamento é um pouco exagerado: 32 bits já são capazes de representar valores inteiros na casa dos 5 bilhões, enquanto o uso máximo de nossos problemas tinha como limite superior a região dos 10 milhões de vértices. Dessa maneira, fizemos um intensivo uso da biblioteca **numpy** com o intuito de reduzir esse espaço de ocupação e, por consequência, aumentando a eficiência do código para a grande maioria dos casos.

- Para além disso, outra preocupação levantada foi a legibilidade do programa, em especial no que diz respeito ao entendimento de entrada e saída dos métodos e funções. Python não é uma linguagem fortemente tipada, mas não impede que utilizemos módulos como **typing** para tornar mais transparente as expectativas de um código. Essa estratégia, apesar de verborrágica, facilita o debugging, os mecanismos de *hint* das IDEs mais populares e viabiliza de forma mais clara a colaboração da comunidade na elaboração do projeto.

Formato(s) de Entrada

- Até o momento (v_tal), a biblioteca permite o processamento de grafos não direcionados com pesos e sem pesos. O formato de entrada aceito pela biblioteca é bem similar nos dois casos, diferindo somente pela presença de um valor a mais quando as arestas possuem pesos. A escolha foi orientada pelo padrão acadêmico mais comum axs pesquisadorxs da área.

```
968
436 263
63 676
293 728
488 336
314 793
```

Sem peso

```
1000
180 251 7.39
243 294 6.33
22 416 4.67
364 502 6.36
200 997 7.09
```

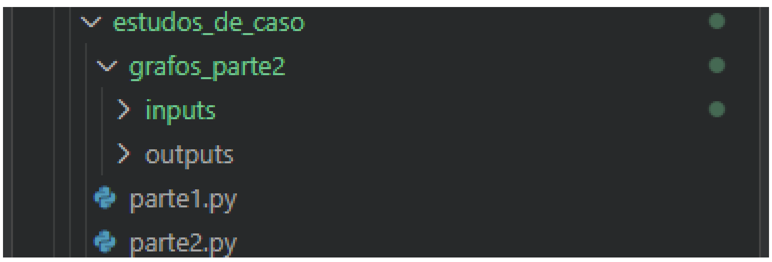
Com peso

Um arquivo .txt deve ser fornecido nos seguintes formatos:

- *Primeira linha*: nº de vértices
- *Da segunda linha em diante*: arestas codificadas em seus vértices incidentes, separados por um espaço.
- *Caso o grafo tenha pesos*, um terceiro valor (de ponto flutuante ou inteiro) pode ser incluído em cada aresta, a ser preenchido com um espaço de distância em relação aos vértices.

Como usar (foco nos estudos de caso)

- Em cada parcela do desenvolvimento da lib foram rodados estudos para averiguar a complexidade, viabilidade, qualidade e assertividade dos métodos implementados. Por uma questão de organização, desenvolvemos scripts relativos a cada uma das partes para enxugar a main.



- Dessa maneira, se quisermos verificar os resultados da “Questão 3” da parte 2, basta fazer o import do script relacionado. A parte 1 tem maior incidência de prints no terminal de execução como saída e monitoramento do programa, enquanto a parte 2 é um pouco mais inteligente, originando arquivos com as respostas correspondentes para cada grafo. Tais saídas podem ser encontradas no caminho *graph_env/src/estudos_de_caso/grafos_parte2/outputs*. E não se preocupe caso essa pasta não apareça de início: se esse for o caso, qualquer execução da parte 2 já criará o diretório automaticamente.
    - *Observação: todas as questões da parte 2 foram implementadas dessa maneira, tendo somente o caminho para armazenamento dos outputs como parâmetro. As da primeira exigem um pouco mais de desenvoltura com o estado do código.*

```
from estudos_de_caso.parte2 import questao1, questao2, questao3, questao4
from pathlib import Path
from os import getcwd


def __main__():

    caminho_grafos = Path(
        getcwd(), "graph_env", "src", "estudos_de_caso", "grafos_parte2", "inputs
    )

    questao1(caminho_grafos)

    # questao2(caminho_grafos)

    # questao3(caminho_grafos)
```

Funcionalidades

Parte 1

Focada especialmente em grafos sem pesos, essa parcela da biblioteca fornece os algoritmos de base no estudo de Grafos. Além disso, também é possível investigar características relevantes do grafo inserido, como o seu grau mínimo.

As funcionalidades implementadas, **para grafos não direcionados e sem pesos**, são:

- Obtenção de grau mínimo, máximo, médio e da mediana do grau de um grafo sem pesos não direcionado.
- Fornecimento de número de arestas e de vértices de um grafo sem pesos não direcionado.
- BFS e DFS → completas, essas formas de busca têm como principal diferença a garantia de optimalidade em cenários finitos: enquanto a primeira garante o encontro do melhor caminho, a segunda é sensível a estruturas com loops e, portanto, pode não encontrar a melhor trajetória de um vértice ao outro. A BFS utiliza filas em sua implementação, enquanto a DFS faz uso de pilhas.
    - O time de desenvolvimento da linguagem Python oferece uma biblioteca de estruturas primitivas chamada **collections,** a qual contém uma estrutura chamada de **deque.** Apelido de *double ended queue,* esse construto pode ser utilizado tanto como filas (FIFO) como stacks (FILO), já que podemos escolher adicionar ou retirar itens no início ou no fim da estrutura.
- Identificação de componentes conexas, bem como a quantificação dos vértices em cada uma delas. Utiliza BFS como base.

Parte 2

A etapa 2 consiste na extensão dos principais objetivos de análise em um grafo para instâncias que tenham pesos positivos. Introduzindo técnicas de paradigmas gulosos, podemos agora calcular o custo de percorrer determinado caminho, bem como determinar conjuntos de vértices cuja que sejam alcançáveis entre si.

Mais especificamente, você poderá utilizar os seguintes algoritmos:

- Dijkstra, implementado com vetor de distâncias → com complexidade $O(n^2)$, a versão tradicional desse famoso algoritmo é capaz de identificar o custo de todos os outros nós para um ponto de partida escolhido pelo usuário. No entanto, deve-se ter cautela com seu uso: para grafos muito grandes, sua complexidade pode ser impeditiva, seja em termos de memória, seja de processamento (principalmente).

```python
def dijkstra_com_vetor(grafo: VetorAdj, vertice_s: int) -> List[Dict]:

    # Criação de vertices de todos os vértices, da fila de descobertos
    vertices: List[Dict] = [
        Vertice(x, np.int32(-1), np.inf) for x in range(1, grafo.num_vertices + 1)
    ]

    # vai funcionar como se fosse uma fila, constantemente reordenada

    descobertos: List[Dict] = []

    # Setando distância do inicial e colocando-o entre os descobertos
    vertices[vertice_s - 1].peso = 0
    descobertos.append(vertices[vertice_s - 1])
```

Estruturas auxiliares para o algoritmo de Dijkstra com vetor

- Dijkstra, implementado com fila de prioridade → instanciadas como heap, as filas de prioridade nos possibilita o acesso e extração de mínimos em tempo O(1) e O(log n), respectivamente. Ambas são bem menores do que a complexidade de acesso do vetor, que no pior caso exige uma passagem por todos os n vértices disponíveis. Dessa forma, a complexidade total de Dijkstra torna-se O((n+m) log n), o que é menor do que n^2 *em casos de grafos de baixa densidade*.
    - Por se tratarem de estruturas básicas na computação, a heap possui inúmeras implementações disponíveis em forma de biblioteca para uma grande gama de linguagens. O algoritmo de Dijkstra requer que tenhamos o poder de alterar o custo de um determinado nó, o que significa alterar a estrutura global como um todo. A biblioteca encontrada para tal finalidade foi a HeapDict, que mistura dicionários com as operações de **decrease-key** e **extract** min das heaps.

```python
teste = heapdict.heapdict
for i in range(10):
    teste[i] = np.inf
teste[8] = 0.0
```

Exemplo de utilização da HeapDict.
Aqui são criados 10 itens na heap, cujas chaves são os identificadores de vértices e o valor, seu custo associado.

- Árvore geradora mínima, utilizando o algoritmo de Prim: muito similar a Dijkstra, o algoritmo de Prim é capaz de obter os subgrafos nos quais os nós estão todos conectados, assegurando uma das configurações possíveis de se obter essa propriedade com o menor custo possível. Foi implementada usando a estratégia de heaps.

```
for vizinho in grafo.percorrer_vizinhos(u):

    valor_vizinho = vizinho[0]
    peso_u_vizinho = vizinho[1]

    try:
        if (
            distancias[valor_vizinho] > peso_u_vizinho
        ):  # comparamos somente com as arestas locais
            distancias[valor_vizinho] = np.float32(peso_u_vizinho)
            pais[valor_vizinho - 1] = u
    except KeyError:
        continue
```

Em destaque, podemos ver o fator de disparidade com Dijkstra: na exploração de vértices, não nos preocupamos com o menor custo acumulado, mas sim com aquele que garante o menor próximo passo. No exemplo, se a distância conhecida para um vértice for maior do que a distância de u a esse mesmo nó, então devemos substituir o custo associado, e atualizar seu parentesco.

Parte 3

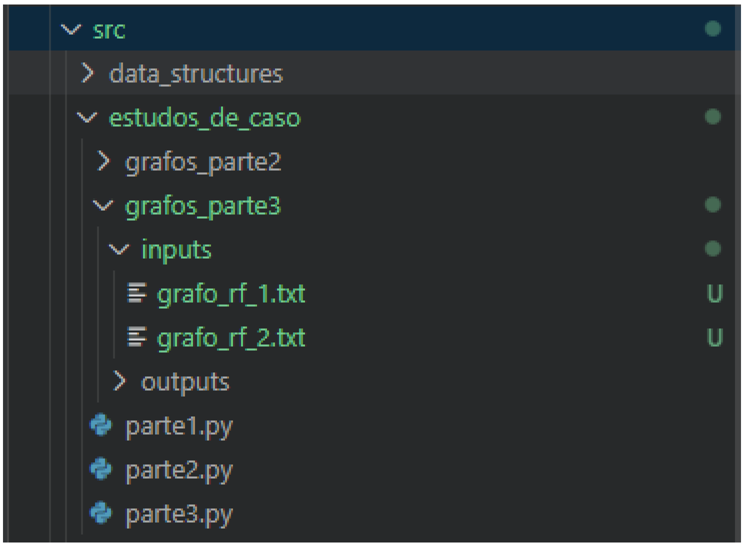
Introdução

O algoritmo de foco da vez é o Ford Fulkerson, utilizado para encontrar soluções de fluxo máximo em redes de capacidades discretas. Para a implementação dessa técnica, algumas novas features precisaram ser elaboradas ou incluídas como alternativas de caminho em funcionalidades previamente feitas. Algumas dessas escolhas podem aumentar o número de instruções em determinados passos, mas não afetam a complexidade geral da solução.

Agora, arestas e vértices de vizinhança (em uma lista de adjacência) podem ter mais informação do que apenas o peso - a exemplo de fluxo passante ou marcação de originalidade (em grafos residuais). O algoritmo principal, cujo pseudo-código é bem abstrato, foi adaptado de maneira segmentada em diferentes funções, baseadas severamente na passagem de parâmetros por referência características do Python.

Como utilizar

Após fazer o clone do projeto, os grafos disponibilizados pelo professor no site https://www.cos.ufrj.br/~daniel/grafos/ devem ser agregados em uma pasta de nome "*inputs*", a qual, por sua vez, será alocada na pasta (do projeto) de caminho *graph_env/src/estudos_de_caso/grafos_parte3/inputs.* A estrutura de arquivos deve ficar como a apresentada na imagem a seguir:



Grafos Direcionados, Residuais e Overloading

Inicialmente, poderíamos somente adaptar o método de construção do vetor de adjacência para que recebesse uma flag da leitura do arquivo, indicando direcionamento ou não, como foi feito com o peso na etapa anterior. Contudo, ao longo do desenvolvimento do projeto, ficou claro que seria uma estratégia simplória e confusa reunir todos os formatos diferentes de um grafo em um só método construtor. Esse fator, junto com as particularidades de redes de fluxo e de grafos residuais, fez com que optássemos então pelo uso de uma abordagem adaptada, utilizando **Constructor Overloading.**

Como nosso vetor de adjacências (**VetorAdj**) pode ter arestas de formatos diferentes, nós utilizamos um recurso do Python muito parecido com essa estratégia, adicionando um decorator (um modificador de funções e classes, em resumo) chamado de **classmethod.**

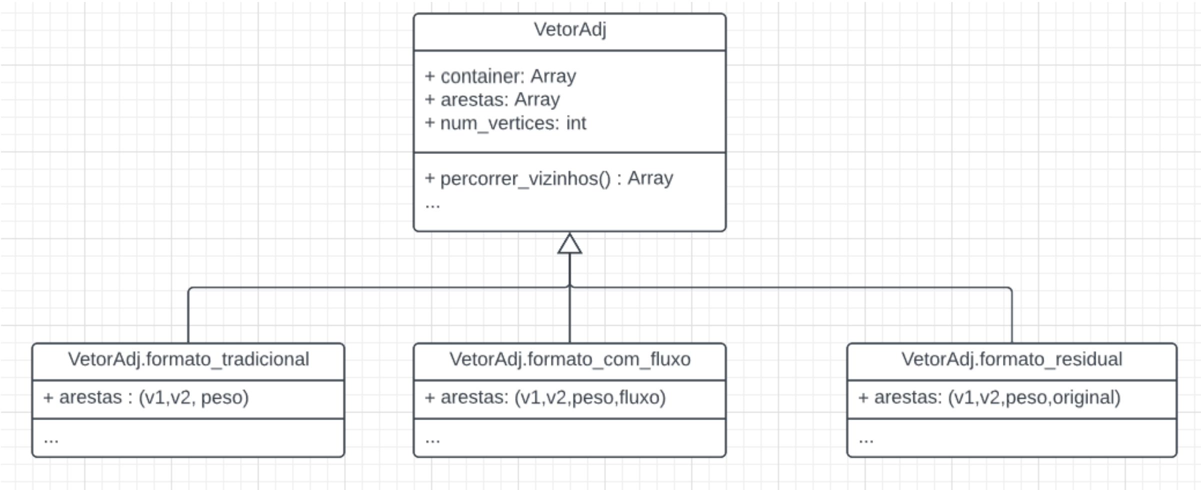


Diagrama em formato livre para entendimento de como todos esses grafos, mesmo com informações diferentes, são da mesma classe.

Cada um terá uma função particular decorada com "classmethod", mas todos irão originar a mesma classe

Vejamos o exemplo a seguir, no código da estrutura presente em *adjacency_vector.py*.

```python
@classmethod
def formato_com_fluxo(
    cls,
    num_vertices: int,
    arestas: List[List[Union[int, bool]]],
):

    fluxo: int = 0

    # Aqui, assumimos que o grafo é direcionado e com pesos por padrão
    # As aretas terão formato de 4-upla: (vertice1, vertice2, capacidade, fluxo_passante)

    container: List[ElementoInicialVetorAdj.__class__] = [
        ElementoInicialVetorAdj(x) for x in range(1, num_vertices + 1)
    ]

    for index, a in enumerate(arestas):
        # Inserção nos vetores de vizinhos de cada vértice
        container[a[0] - 1].vetor_vizinhos.append([a[1], a[2], fluxo])
        # Acrescentando informação de fluxo para cada aresta
        arestas[index] = [a[0], a[1], a[2], fluxo]

    return cls(num_vertices=num_vertices, arestas=arestas, container=container)
```

Exemplo de método "decorado" com classmethod. O retorno de uma função dessas é sempre a chamada do construtor da classe relacionada

Primeiro de tudo, se estamos familiarizados com Python, podemos ver de cara que esse não é um método construtor - e de fato, não o é, o que inclusive faz com que a repetição de métodos assim não configure um equivalente ao overloading de construtores.

A forma mais tranquila de entender esse recurso é pensar na ideia de pré-processamento: podemos ter objetos com características levemente diferentes, que demandam tratamentos específicos, mas que resultarão numa estrutura abstrata similar.

Perceba que esse método recebe como parâmetro a própria classe (**cls**), e retorna justamente a sua chamada de construção, cuja rotina segue abaixo:

```
class VetorAdj:
    def __init__(
        self,
        num_vertices: int,
        arestas: List[Tuple[int]],
        container: List[ElementoInicialVetorAdj],
    ) -> None:
        self.num_vertices = num_vertices
        self.arestas = arestas
        self.container = container
```

Construtor da classe VetorAdj. Recebe os parâmetros de métodos com a anotação “classmethod”

Dessa forma, a construção da classe pode ser alterada conforme o uso que desejamos utilizar. Porém, essa intenção deve ser explícita, como no trecho de código abaixo:

```
# Anteriormente
grafo = VetorAdj(num_vertices, arestas, tem_pesos=False)

# Agora
grafo_tradicional = VetorAdj.formato_tradicional(num_vertices,arestas,tem_pesos=False)

grafo_residual = VetorAdj.formato_residual(num_vertices, arestas)

grafo_com_fluxo = VetorAdj.formato_com_fluxo(num_vertices, arestas)
```

Mais OO: Herança

Dada a natureza da lista/vetor de adjacência, as arestas acabam sendo mapeadas pelas características embutidas na vizinhança dos vértices. Se estamos olhando o vértice 2 e ele é vizinho de 4, por exemplo, seu registro precisa ter consigo o peso que precisamos pagar para ir do 2 ao 4. Esse aspecto é importante porque nossa BFS - feita lá no primeiro trabalho, há alguns meses - utilizava uma estrutura que chamamos de Vertice. Cada nó era uma instância desse formato, e continha informações sobre pai, peso, nível, etc.

Com grafos residuais, para respeitar as regras e podermos usar a mesma BFS com a menor quantidade de alterações possível, nós tivemos de fazer um **Vertice_Residual**, que herda do Vertice e introduz mais um atributo: o de originalidade de uma aresta. Se esse valor for verdadeiro, então a aresta percorrida é original; do contrário, ela é reversa. Ela também recebe um override no método mágico de representação, utilizado para casting em strings (o que inclui o print).

```python
class Vertice_Residual(Vertice):
    def __init__(
        self,
        valor: int,
        pai: int = -1,
        peso: float = 0,
        original_ou_reversa: bool8 = True,
    ) -> None:
        super().__init__(valor, pai, peso)
        self.original_ou_reversa = original_ou_reversa

    def __repr__(self) -> str:

        info_com_peso = super().__repr__()
        original_ou_reversa = (
            "Original" if self.original_ou_reversa == True else "Reversa"
        )
        return f"{info_com_peso} Original/Reversa: {original_ou_reversa}"
```

Código de herança básica utilizada para vértices com características mais específicas

Ford Fulkerson: *sabendo que 1+1 é 2, fatore a integral da Faixa de Moebius*

Esse algoritmo é um tanto simplista quando olhamos apenas para seu passo a passo: cada uma de suas instruções representa um conjunto de funcionalidades mais complexas.

Tendo isso em mente, segmentamos nosso código em diversas funções auxiliares, identificadas e descritas na tabela abaixo.

Ordem de Exec	Função	Descrição	Chamada por
1	ford_fulkerson (*grafo_original, fonte, destino*)	Executa o passo a passo tradicional do pseudo código apresentado pelo professor	*Usuário*
2	construir_residual (*grafo_original*)	Cria um novo grafo, com arestas originais e reversas	*ford_fulkerson*
3	encontrar_caminho_e gargalo (*grafo_residual, fonte, destino*)	Instancia a classe Busca e executa uma BFS. Pega todos os vértices e utiliza indexação para reconstruir o caminho.	*ford_fulkerson*
-	-	ENTRADA NO LOOP DE CAMINHO MÍNIMO	-
4	atualizar_grafos (*grafo_original, grafo_residual, gargalo, caminho_min*)	Para grafos originais, atualiza o fluxo passante pelas arestas. Para residuais, atualiza a capacidade de arestas diretas e reversas. É talvez o método mais complexo e certamente deveria ser separado também (no futuro).	*ford_fulkerson*

Ordem de Exec	Função	Descrição	Chamada por
5	encontrar_arestas(*grafo, original, meta*)	Esse método é o que acrescenta 3 x (g max) no processamento: precisamos buscar as arestas em suas posições de vizinhança. Recebe um grafo original ou residual, indicado pelo parâmetro *original,* e retorna uma ou duas arestas (direta e reversa), respectivamente. Meta é a aresta do caminho, em formato (*v1,v2, capacidade, original_ou_reversa*)	*atualizar_grafos( )*, 2 vezes para cada aresta do caminho. Uma para original e uma para residual (que precisa buscar 2 arestas sempre)
6	encontrar_caminho_e_gargalo (*mesmos parâmetros*)	Com os grafos atualizados, buscamos a existência de novos caminhos mínimos	*ford_fulkerson*