

Prof. Peter F. Stadler & Sebastian Will

Bioinformatik/IZBI  
Institut für Informatik  
& Interdisziplinäres Zentrum für Bioinformatik  
Universität Leipzig

30. April 2014

- kantenmarkierter (gewichteter) Graph  $G = (V, E, g)$ 
  - Weg/Pfad  $P$  der Länge  $n: (v_0, v_1), (v_1, v_2), \dots, (v_{n-1}, v_n)$
  - Gewicht (Länge) des Weges/Pfades  $w(P) = \sum_{i=1}^n g((v_{i-1}, v_i))$
  - Distanz  $d(u, v)$ : Gewicht des kürzesten Pfades von  $u$  nach  $v$
- Varianten
  - nicht-negative Gewichte vs. negative und positive Gewichte
  - Bestimmung der kürzesten Wege:
    - a) zwischen allen Knotenpaaren,
    - b) von einem Knoten  $u$  aus
    - c) zwischen zwei Knoten  $u$  und  $v$
- Bemerkungen
  - kürzeste Wege sind nicht immer eindeutig
  - kürzeste Wege müssen nicht existieren, z.B. wenn:
    - kein Weg existiert oder
    - ein Zyklus mit negativem Gewicht existiert

Zur Erinnerung: Warshall's Transitive Hülle

Warshall's Algorithmus für Distanzen

$A =$  Adjazenzmatrix  $G(V, E), n = |V|$

```
Von i = 1 bis n
  A[i][i] = 1
  Von j = 1 bis n
    Von i = 1 bis n
      Falls A[i][j] = 1 Dann
        Von k = 1 bis n
          Falls A[j][k] = 1 dann A[i][k] = 1
```

Warshall-Algorithmus lässt sich einfach modifizieren, um kürzeste Wege zwischen allen Knotenpaaren zu berechnen

```
Fuer alle Paare i, j tue A[i][j] = g((i, j))
Von j = 1 bis n
  Von i = 1 bis n
    Von k = 1 bis n
      A[i][k] = min (A[i][k], A[i][j] + A[j][k])
```

Annahme: kein Zyklus mit negativem Gewicht vorhanden  
Komplexität:  $O(n^3), n = |V|$

Dijkstra-Algorithmus I

Dijkstra-Algorithmus II

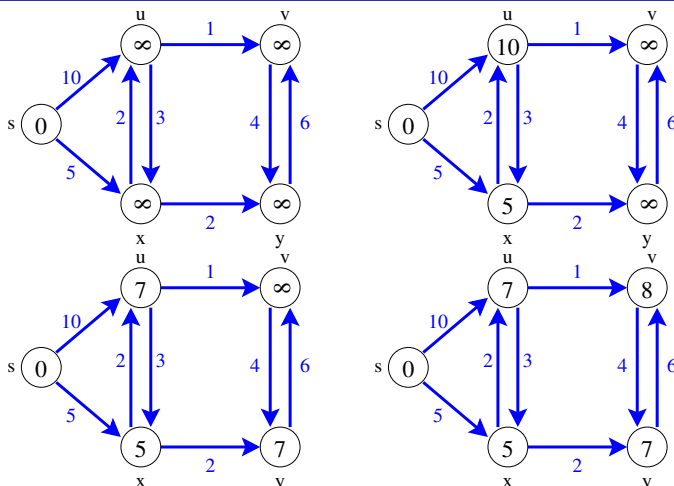
Bestimmung der von einem Knoten ausgehenden kürzesten Wege

- gegeben: kanten-bewerteter Graph  $G = (V, E, g)$  mit  $g: E \rightarrow \mathbb{R}_0^+$  (Kantengewichte)
- Startknoten  $s$ ; zu jedem Knoten  $u$  wird die Distanz zu Startknoten  $s$  in  $D[u]$  geführt
- $Q$  sei Prioritäts-Warteschlange (sortierte Liste);  
Priorität = Distanzwert
- Funktion  $succ(u)$  liefert die Menge der direkten Nachfolger von  $u$
- Verallgemeinerung der Breitensuche (gewichtete Entfernung)
- funktioniert nur bei nicht-negativen Gewichten
- Optimierung gemäß Greedy-Prinzip

```
Fuer alle Knoten v tue D[v] = unendlich
D[s] = 0
PriorityQueue Q = V
Solange Q nicht leer dann
  v = naechster Knoten aus Q mit kleinstem Abstand D
  Entferne v aus Q
  Fuer jeden Nachbarn u in succ(v) & Q
    Falls D[v] + g((v, u)) < D[u] dann
      D[u] = D[v] + g((v, u))
```

Dijkstra: Beispiel

Dijkstra-Algorithmus: Korrektheit



Korrektheitsbeweis

- nach  $i$  Schleifendurchgängen sind die Längen von  $i$  Knoten, die am nächsten an  $s$  liegen, korrekt berechnet und diese Knoten sind aus  $Q$  entfernt.
- Induktionsanfang:  $s$  wird gewählt,  $D(s) = 0$
- Induktionsschritt: Nimm an,  $v$  wird aus  $Q$  genommen. Der kürzeste Pfad zu  $v$  gehe über direkten Vorgänger  $v'$  von  $v$ . Da  $v'$  näher an  $s$  liegt, ist  $v'$  nach Induktionsvoraussetzung mit richtiger Länge  $D(v')$  bereits entfernt. Da der kürzeste Weg zu  $v$  die Länge  $D(v') + g((v', v))$  hat und dieser Wert bei Entfernen von  $v'$  bereits  $v$  zugewiesen wurde, wird  $v$  mit der richtigen Länge entfernt.
- erfordert nicht-negative Kantengewichte (wachsende Weglänge durch hinzugenommene Kanten)

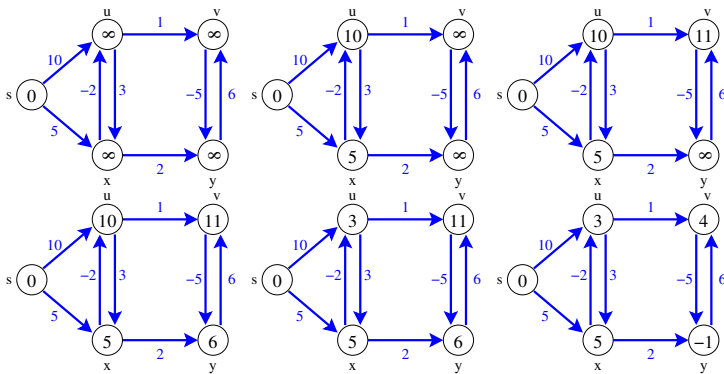
Komplexität  $O(n^2)$ ,  $n = |V|$

- $n$ -maliges Durchlaufen der äußeren Schleife liefert Faktor  $O(n)$
- innere Schleife: Auffinden des Minimums begrenzt durch  $O(n)$ , ebenso das Aufsuchen der Nachbarn von  $v$
- Pfade bilden aufspannenden Baum (der die Wegstrecken von  $s$  aus gesehen minimiert)
- Bestimmung des kürzesten Weges zwischen  $u$  und  $v$ :  
Spezialfall für Dijkstra-Algorithmus mit Start-Knoten  $u$  (Beendigung sobald  $v$  aus  $Q$  entfernt wird)

**Bellmann-Ford-Algorithmus**  $BF(G,s)$

Fuer alle Knoten  $v$  tue  $D[v] = \text{unendlich}$   
 $D[s] = 0$   
 Von  $i = 1$  bis  $n-1$   
 Fuer alle Paare  $(u,v)$   
 Falls  $D[u] + g((u,v)) < D[v]$  dann  
 $D[v] = D[u] + g((u,v))$

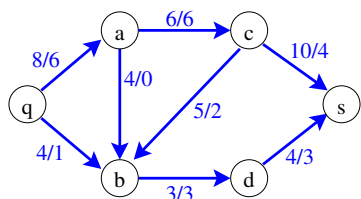
**Bellmann-Ford: Beispiel**



(Kanten werden hier in lexikographischer Ordnung durchlaufen), also  $(s, u)(s, x)(u, v)(u, x)(v, y)$

**Flüsse in Netzwerken II**

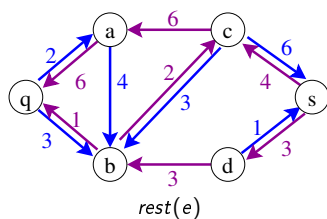
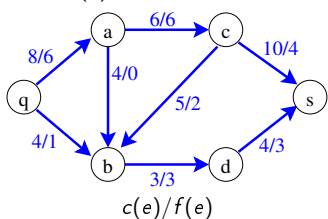
- Ein (Fluss-) Netzwerk ist ein gerichteter Graph  $G = (V, E, c)$  mit ausgezeichneten Knoten  $q$  (Quelle) und  $s$  (Senke), sowie einer Kapazitätsfunktion  $c : E \rightarrow \mathbb{R}^+$ .
- Ein Fluss für das Netzwerk ist eine Funktion  $f : E \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ , so dass gilt:
  - Kapazitätsbeschränkung:  $\forall e \in E : f(e) \leq c(e)$ .
  - Flussserhaltung:  $\forall v \in V \setminus \{q, s\} : \sum_{(v',v) \in E} f((v',v)) = \sum_{(v,v') \in E} f((v,v'))$
  - Der Wert von  $f$ ,  $w(f)$ , ist die Summe der Flusswerte der die Quelle  $q$  verlassenden Kanten:  $\sum_{(q,v) \in E} f((q,v))$



**Restgraph**

Sei  $f$  ein zulässiger Fluss für  $G = (V, E, c)$ . Sei  $E' = \{(v, w) | (v, w) \in E \vee (w, v) \in E\}$

- Wir definieren die Restkapazität einer Kante  $e = (v, w)$  wie folgt:
  - $rest(e) = c(e) - f(e)$  falls  $e \in E$
  - $f((w, v))$  falls  $(w, v) \in E$
- Der Restgraph von  $f$  (bzgl.  $G$ ) besteht aus den Kanten  $e \in E'$ , für die  $rest(e) > 0$



**Flüsse in Netzwerken III**

Gesucht: Fluss mit maximalem Wert

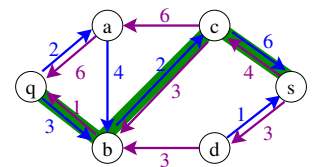
- begrenzt durch Summe der aus  $q$  wegführenden bzw. in  $s$  eingehenden Kapazitäten
- jeder weitere "Schnitt" durch den Graphen, der  $q$  und  $s$  trennt, begrenzt max. Fluss

Schnitt  $(A, B)$  eines Fluss-Netzwerks ist eine Zerlegung von  $V$  in disjunkte Teilmengen  $A$  und  $B$ , so dass  $q \in A$  und  $s \in B$ .

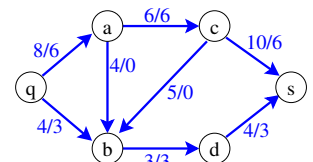
- Die Kapazität des Schnitts ist  $c(A, B) = \sum_{u \in A, v \in B} c((u,v))$
- minimaler Schnitt (minimal cut): Schnitt mit kleinster Kapazität

**Zunehmender Weg**

- Jeder gerichtete Pfad von  $q$  nach  $s$  im Restgraphen heißt zunehmender Weg.



- Optimierung des Flusses für  $G$ :
  - entlang des zunehmenden Weges  $q$
  - um  $\min(rest(e))$  mit  $e$  liegt auf  $q$



**Theorem (Min-Cut-Max-Flow-Theorem):** Sei  $f$  ein zulässiger Fluss für  $G$ . Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

- $f$  ist maximaler Fluss in  $G$ .
- Der Restgraph von  $f$  enthält keinen zunehmenden Weg.
- $w(f) = c(A, B)$  für einen Schnitt  $(A, B)$  von  $G$ .

Ford-Fulkerson-Algorithmus:

- füge solange zunehmende Wege zum Gesamtfluss hinzu wie möglich
- Kapazität erhöht sich jeweils um Minimum der verfügbaren Restkapazität der einzelnen Kanten des zunehmenden Weges

Solange es einen zunehmenden Weg  $p$  in Restgraph  $G$  gibt

$$r = \min(\text{rest}(e) \mid e \text{ liegt auf } p)$$

Fuer alle  $e = (v, w)$  auf  $p$  tue

Falls  $e$  in  $E$  dann

$$f(e) = f(e) + r$$

$$\text{Sonst } f((w, v)) = f((w, v)) - r$$

## Maximales Bipartites Matching

Beispiel:

- Eine Gruppe von Erwachsenen und eine Gruppe von Kindern besuchen Disneyland.
- Auf der Achterbahn darf ein Kind jeweils nur in Begleitung eines Erwachsenen fahren.
- Nur Erwachsene/Kinder, die sich kennen, sollen zusammen fahren. Wieviele Kinder können maximal eine Fahrt mitmachen?

## Matching

Matching (Zuordnung)  $M$  für ungerichteten Graphen  $G = (V, E)$  ist eine Teilmenge der Kanten, so dass jeder Knoten in  $V$  in höchstens einer Kante vorkommt

- $|M|$  = Größe der Zuordnung
- Perfektes Matching: kein Knoten bleibt "allein" (unmatched), d.h. jeder Knoten ist in einer Kante von  $M$  vertreten

Matching  $M$  ist maximal, wenn es kein Matching  $M'$  gibt mit  $|M| < |M'|$

Ein bipartiter Graph ist ein Graph, dessen Knotenmenge  $V$  in zwei disjunkte Teilmengen  $V_1$  und  $V_2$  aufgeteilt ist, und dessen Kanten jeweils einen Knoten aus  $V_1$  mit einem aus  $V_2$  verbinden. (also keine Kanten innerhalb von  $V_1$  oder  $V_2$ )

## Bipartites Matching und maximaler Fluss

## Zusammenfassung I

Maximales Matching kann auf maximalen Fluss zurückgeführt werden:

- Quelle und Senke hinzufügen.
- Kanten von  $V_1$  nach  $V_2$  richten.
- Jeder Knoten in  $V_1$  erhält eingehende Kante von der Quelle.
- Jeder Knoten in  $V_2$  erhält ausgehende Kante zur Senke.
- Alle Kanten erhalten Kapazität  $c(e) = 1$

→ Anwendung des Ford-Fulkerson-Algorithmus

- Viele wichtige Informatikprobleme lassen sich mit gerichteten bzw. ungerichteten Graphen behandeln.
- wesentliche Implementierungsalternativen: Adjazenzmatrix und Adjazenzlisten
- Algorithmen mit linearem Aufwand:
  - Traversierung von Graphen: Breitensuche vs. Tiefensuche
  - Topologisches Sortieren
  - Test auf Azyklichkeit (Kreisfreiheit)

## Zusammenfassung II

- Weitere wichtige Algorithmen:
  - Bestimmung der transitiven Hülle: Warshall-Algorithmus
  - Kürzeste Wege: Dijkstra, Bellmann-Ford und Warshall
  - Minimale Spannbäume: Kruskal-Algorithmus
  - maximale Flüsse bzw. maximales Matching: Ford-Fulkerson-Algorithmus
- viele NP-vollständige Optimierungsprobleme
  - Traveling-Salesman-Problem, Cliquesproblem, Färbungsproblem ...
  - Bestimmung eines planaren Graphen (2D-Graph-Darstellung ohne überschneidende Kanten)