



数据结构与算法 (Python) -07/图及算法

刘云淮

北京大学计算机学院

目录

- 本章目标
- 图抽象数据类型及实现
- Word Ladder词梯问题
- 骑士周游问题
- 拓扑排序和强连通分支
- 最短路径问题
- Prim最小生成树算法



本章目标

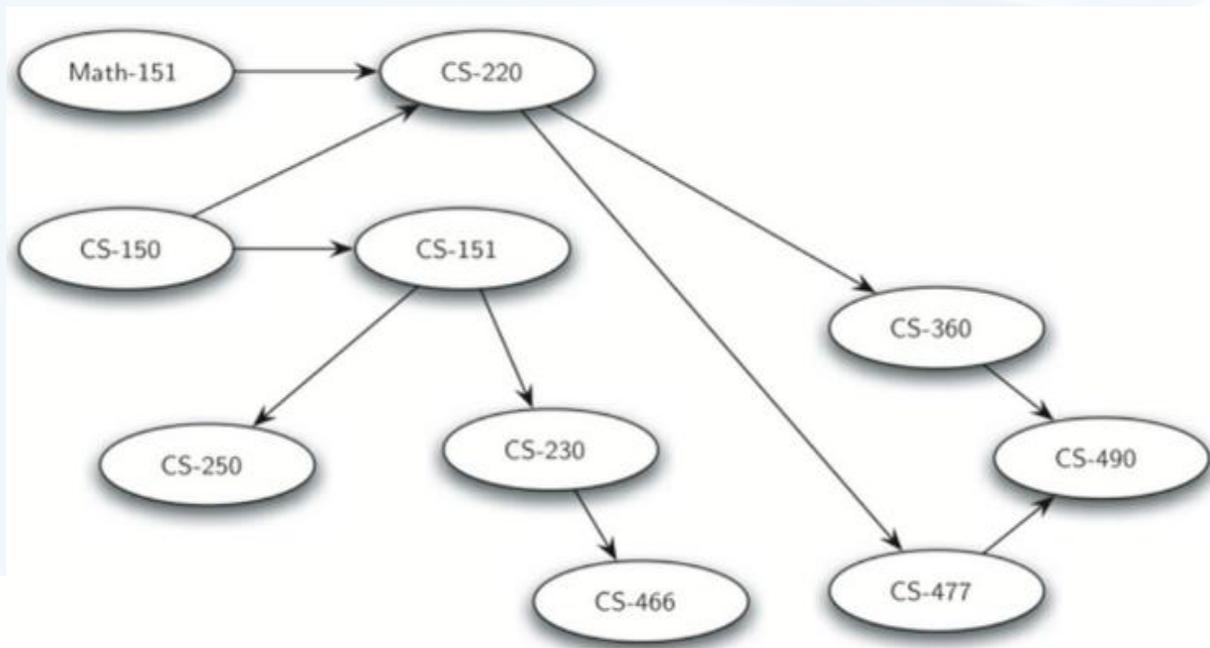
- 理解图的概念及使用
- 通过多种方法实现图抽象数据类型
- 图应用于解决不同领域的问题

图Graph的概念

- 就像“羊”在英文中并不是一个单独的词
- 中文的“图画”在英文中有很多对应的单词，其意义大不相同
 - painting: 用画刷画的油画
 - drawing: 用硬笔画的素描/线条画
 - picture: 真实形象所反映的画，如照片等，如take picture
 - image: 由印象而来的画，遥感影像叫做image，因是经过传感器印象而来
 - graph: 重在由一些基本元素构造而来的图，如点、线段等
 - figure: 轮廓图的意思，某个侧面的轮廓，所以有figure out的说法
 - diagram: 抽象的概念关系图，如电路图、海洋环流图、类层次图
 - chart: 由数字统计得来的柱状图、饼图、折线图
 - map: 地图; plot: 地图上的一小块

图Graph的概念

- 图Graph是比树更为一般的结构，也是由节点和边构成
实际上树是一种具有特殊性质的图
- 图可以用来表示现实世界中很多事物
道路交通系统、航班线路、或者是大学中课程的先修次序



图Graph的概念

- 一旦我们对图相关问题进行了准确的描述，就可以采用处理图的标准算法来解决那些看起来很艰深的问题

对于人来说，人脑的识别模式能够轻而易举地判断地图中不同地点的相互关联，但计算机并没有这样的能力；

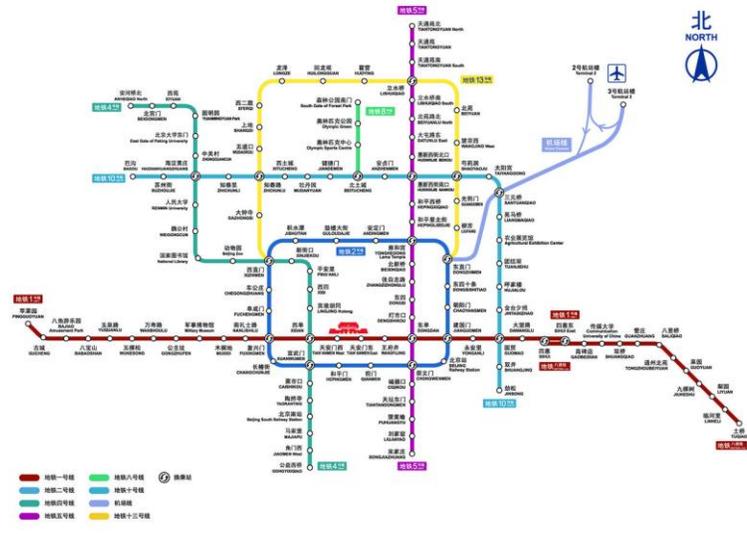
但如果用图来表示地图，就可以解决很多对地图很熟悉甚至专业的人才能解决的问题，甚至能超越；

互联网是由成千上万的计算机所连接起来的复杂网络，也可以通过图算法来确定计算机之间达成通讯的最短、最快或者最有效的路径。

大学课程之间的先修依赖关系，也适合用图来表示

北京公共交通

- 北京地铁共有18条运营线路，不重复计算换乘车站则为268座车站，总长约527千米。
- 北京公交系统有1020条运营线路，公交站点近2000个。



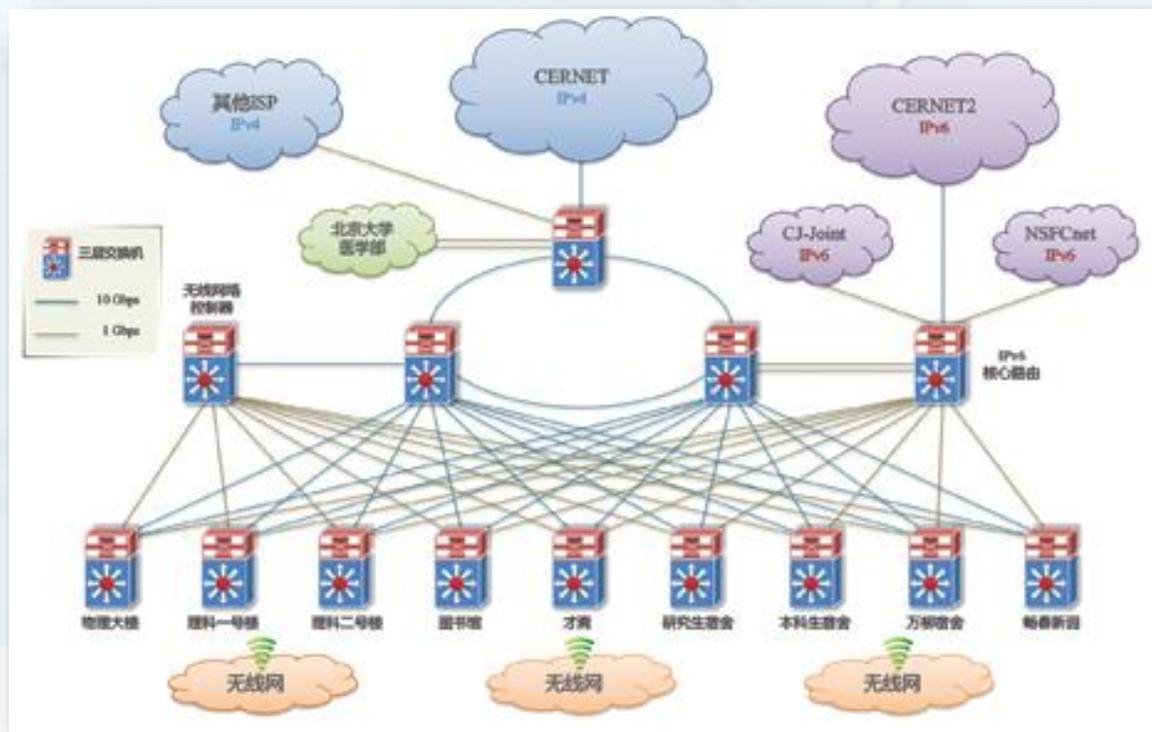
老人建义务指

03:59:41 来源: 北京青年报



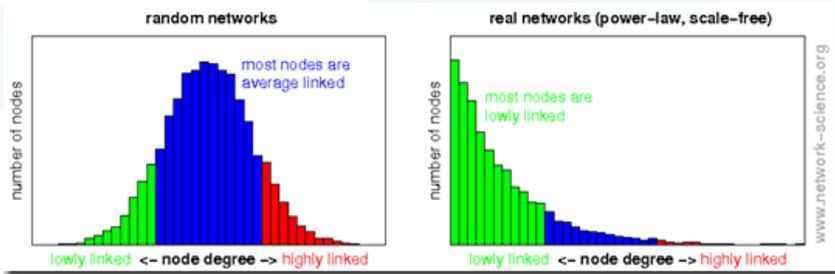
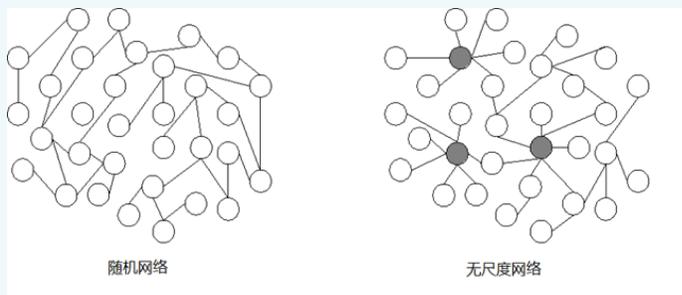
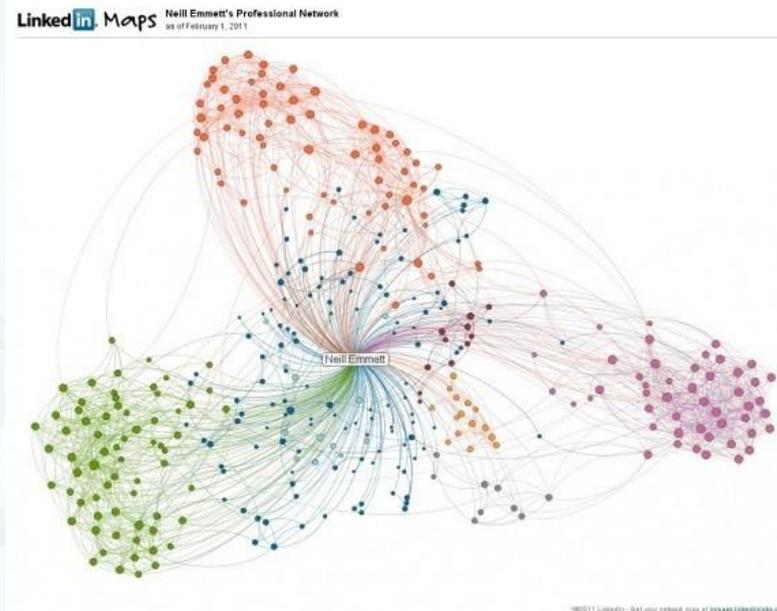
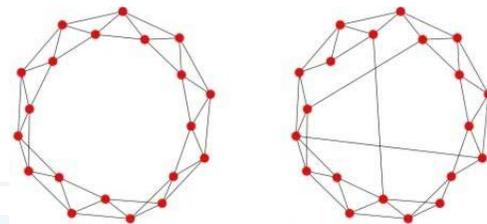
互联网

- 北京大学校园网目前已经具有近10万信息点通过层层交换机、路由器连接在一起，路由器之间又相互连接
- 互联网中ipv4的近40亿地址已接近枯竭一张几十亿个信息点的巨型网络
- 提供内容的Web站点已突破10亿个由超链接相互连接的网页更是不计其数Google每天处理的数据量约10PB
- 在天文数字规模的网络面前
- 人脑已经无法处理



社交网络：六度分隔理论

- 世界上任何两个人之间通过最多6个人即可建立联系
- 互联网社交网络的兴起将每个人联系到一起
- 在社会中有20%擅长交往的人，建立了80%的连接
- 区别于随机网络，保证了六度分隔的成立
- 引出了无尺度网络的研究
- 现实中的复杂网络多属于无尺度网络



术语表

- **顶点Vertex**
也称“节点Node”，是图的基本组成部分，顶点具有名称标识Key，也可以携带数据项payload。
- **边Edge**
也称“弧Arc”，是图的另一个基本组成部分，作为2个顶点之间关系的表示，边连接两个顶点；边可以是单向one-way或者双向two-way的，如果一个图中的所有边都是单向的，就称这个图为“有向图directed graph/digraph”。
- **权重Weight**
为了表达从一个顶点到另一个顶点的“代价”，可以给边赋权；例如公交网络中两个站点之间的“距离”、“通行时间”和“票价”都可以作为权重。

图的定义

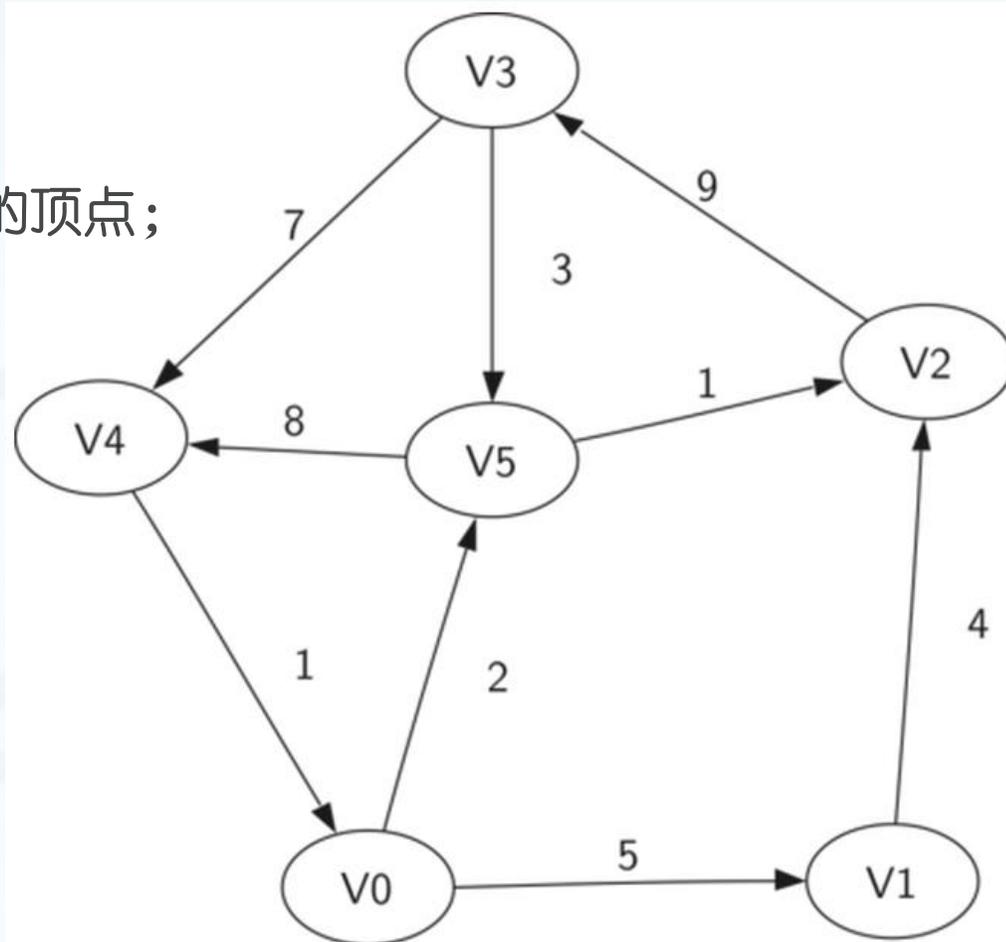
- 一个图G可以定义为 $G=(V, E)$
其中V是顶点的集合
E是边的集合, E中的每条边 $e=(v, w)$, v和w都是V中的顶点;
如果是赋权图, 则可以在e中添加第三个权重分量
子图subgraph: V和E的子集

- 赋权图的例子: 6个顶点及9条边
有向图

权重为整数

$$V = \{V0, V1, V2, V3, V4, V5\}$$

$$E = \left\{ \begin{array}{l} (v0, v1, 5), (v1, v2, 4), (v2, v3, 9), (v3, v4, 7), (v4, v0, 1), \\ (v0, v5, 2), (v5, v4, 8), (v3, v5, 3), (v5, v2, 1) \end{array} \right\}$$



术语表

- 路径Path

图中的路径，是由边依次连接起来的顶点序列；

$P=(w_1, w_2, \dots, w_n)$ ，其中对于所有 $1 \leq i \leq n-1$ ， (w_i, w_{i+1}) 属于E；

无权路径的长度为边的数量，等于 $n-1$ ；带权路径的长度为所有边权重的和；

如，前页中的一条路径 (v_3, v_4, v_0, v_1) ，其边为 $\{(v_3, v_4, 7), (v_4, v_0, 1), (v_0, v_1, 5)\}$

- 圈Cycle

圈是首尾顶点相同的路径，如前页中 (v_5, v_2, v_3, v_5) 是一个圈

如果一个图中不存在任何圈，则称作“无圈图acyclic graph”

无圈的有向图称作“有向无圈图directed acyclic graph: DAG”

后面我们可以看到如果一个问题能表示成DAG，就可以用图算法很好地解决

- 思考：树是一种什么性质的图？是DAG么？

抽象数据类型：ADT Graph

- 抽象数据类型ADT Graph定义如下：

`Graph()`：创建一个空的图；

`addVertex(vert)`：将一个顶点Vertex对象加入图中

`addEdge(fromVert, toVert)`：添加一条有向边

`addEdge(fromVert, toVert, weight)`：添加一条带权的有向边

`getVertex(vertKey)`：查找名称为vertKey的顶点

`getVertices()`：返回图中所有顶点列表

`in`：按照 `vert in graph` 的语句形式，返回顶点是否存在图中True/False

- ADT Graph的实现方法有两种主要形式：

邻接矩阵adjacency matrix和邻接表adjacency list

两种方法各有优劣，需要在不同的应用中加以选择

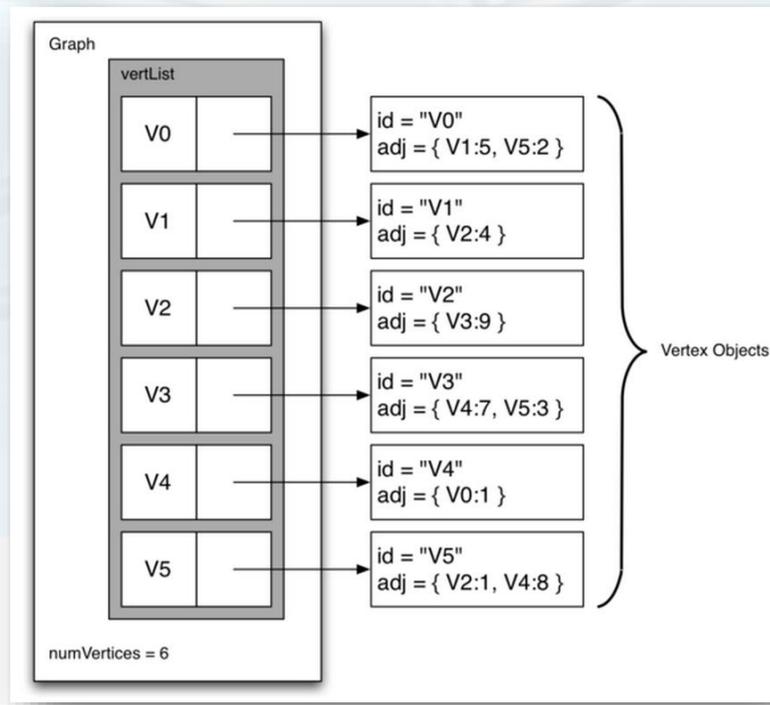
邻接矩阵Adjacency Matrix

- 对图的最直观实现方法是采用二维矩阵
- 矩阵的每行和每列都代表图中的顶点，如果两个顶点之间有边相连，则在相应行列值的矩阵分量中加以体现
无权边则将矩阵分量标注为1，或者0
带权边则将权重保存为矩阵分量值
- 邻接矩阵实现法的优点是简单
可以很容易得到顶点是如何相连
- 但如果图中的边数很少则效率低下
成为“稀疏sparse”矩阵
大多数问题所对应的图都是稀疏的
边远远少于 $|V|^2$ 这个量级

	V0	V1	V2	V3	V4	V5
V0		5				2
V1			4			
V2				9		
V3					7	3
V4	1					
V5			1		8	

邻接列表Adjacency List

- 邻接列表adjacency list可以成为稀疏图的更高效实现方案
维护一个包含所有顶点的主列表 (master list)
主列表中的每个顶点，再关联一个与自身有边连接的所有顶点的列表
 - 在Python实现的Vertex类中，可以采用字典来保存顶点列表
 - 字典中的key对应顶点标识，而value则可以保存顶点连接边的权重
- 邻接列表法的存储空间紧凑高效
- 很容易获得顶点所连接的所有顶点
- 以及连接边的信息



ADT Graph的实现

- 包括两个类Vertex和Graph

Graph保存了包含所有顶点的主表master list

Vertex则包含了顶点信息，以及顶点连接边的信息

nbr是顶点对象的key

```
class Vertex:
    def __init__(self, key):
        self.id = key
        self.connectedTo = {}

    def addNeighbor(self, nbr, weight=0):
        self.connectedTo[nbr] = weight

    def __str__(self):
        return str(self.id) + ' connectedTo: ' \
            + str([x.id for x in self.connectedTo])

    def getConnections(self):
        return self.connectedTo.keys()

    def getId(self):
        return self.id

    def getWeight(self, nbr):
        return self.connectedTo[nbr]
```

ADT Graph的实现

新加顶点

通过key查找顶点

```
class Graph:
    def __init__(self):
        self.vertList = {}
        self.numVertices = 0

    def addVertex(self, key):
        self.numVertices = self.numVertices + 1
        newVertex = Vertex(key)
        self.vertList[key] = newVertex
        return newVertex

    def getVertex(self, n):
        if n in self.vertList:
            return self.vertList[n]
        else:
            return None

    def __contains__(self, n):
        return n in self.vertList
```

ADT Graph的实现

不存在的顶点先添加

调用起始顶点的方法
添加邻接边

```
def __contains__(self,n):  
    return n in self.vertList  
  
def addEdge(self,f,t,cost=0):  
    if f not in self.vertList:  
        nv = self.addVertex(f)  
    if t not in self.vertList:  
        nv = self.addVertex(t)  
    self.vertList[f].addNeighbor(self.vertList[t], cost)  
  
def getVertices(self):  
    return self.vertList.keys()  
  
def __iter__(self):  
    return iter(self.vertList.values())
```

ADT Graph的实现：实例

```
>>> g= Graph()
>>> for i in range(6):
        g.addVertex(i)
```

```
0 connectedTo: []
1 connectedTo: []
2 connectedTo: []
3 connectedTo: []
4 connectedTo: []
5 connectedTo: []
```

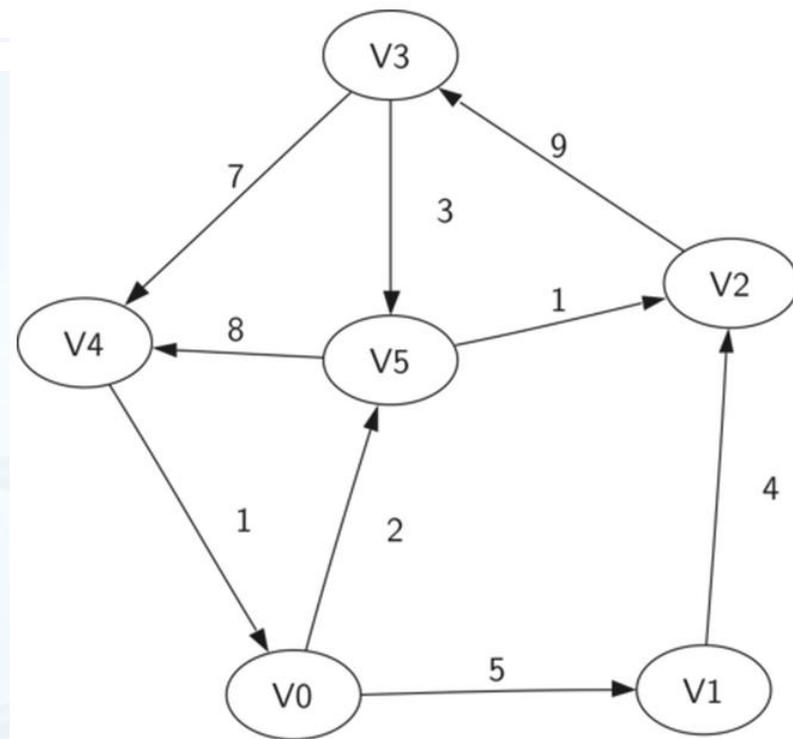
```
>>> print g.vertList
```

```
{0: 0 connectedTo: [], 1: 1 connectedTo: [], 2: 2 connectedTo: [], 3: 3 connecte
dTo: [], 4: 4 connectedTo: [], 5: 5 connectedTo: []}
```

ADT Graph的实现：实例

```
>>> g.addEdge(0,1,5)
>>> g.addEdge(0,5,2)
>>> g.addEdge(1,2,4)
>>> g.addEdge(2,3,9)
>>> g.addEdge(3,4,7)
>>> g.addEdge(3,5,3)
>>> g.addEdge(4,0,1)
>>> g.addEdge(5,4,8)
>>> g.addEdge(5,2,1)
>>> for v in g:
    for w in v.getConnections():
        print "(%s, %s)" % (v.getId(), w.getId())
```

```
(0, 5)
(0, 1)
(1, 2)
(2, 3)
(3, 4)
(3, 5)
(4, 0)
(5, 4)
(5, 2)
>>> |
```

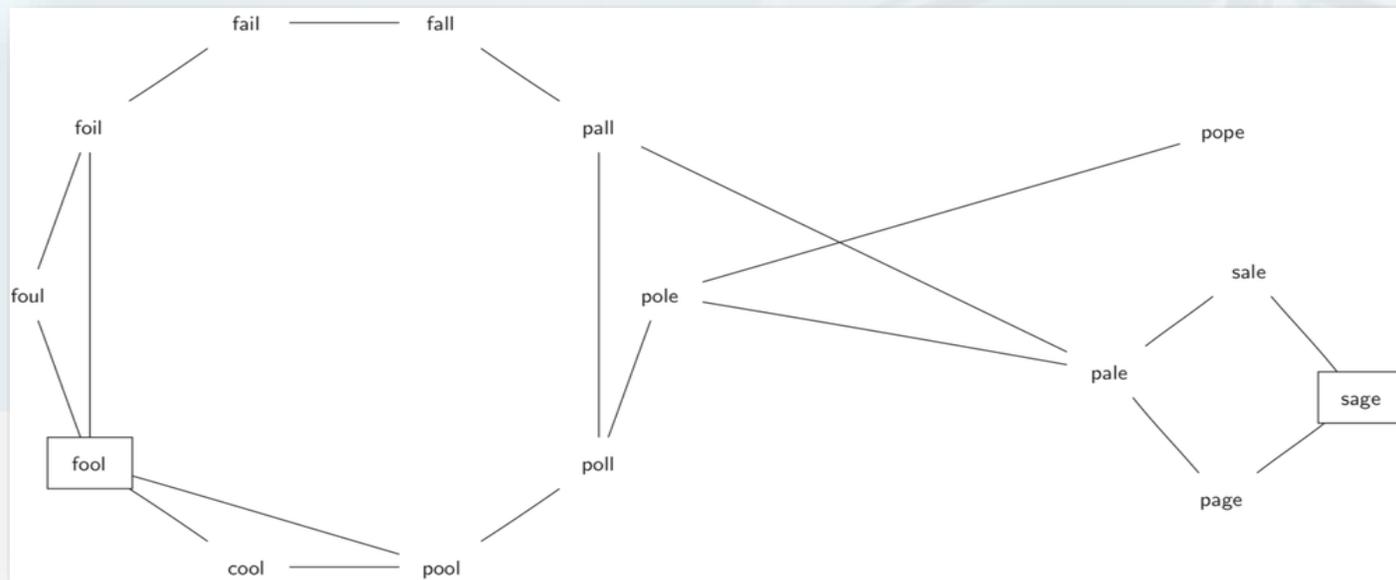


词梯Word Ladder问题

- 由“爱丽丝漫游奇境”的作者Lewis Carroll在1878年所发明的单词游戏
- 从一个单词演变到另一个单词，其中的过程可以经过多个中间单词
要求是相邻两个单词之间差异只能是1个字母，如FOOL变SAGE：
FOOL >> POOL >> POLL >> POLE >> PALE >> SALE >> SAGE
- 我们的目标是找到**最短**的单词变换序列
- 采用图来解决这个问题的步骤如下：
将可能的单词之间的演变关系表达为图
采用“**广度优先搜索 BFS**”来找到从开始单词到结束单词之间的有效路径

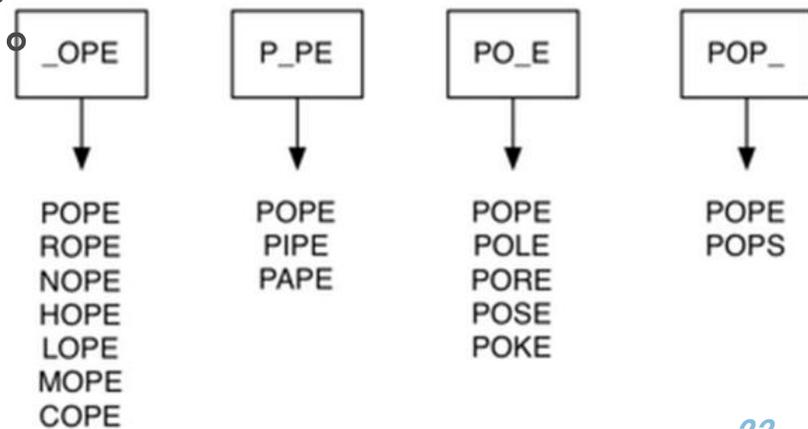
词梯问题：构建单词关系图

- 首先是如何将大量的单词集放到图中
将单词作为顶点的标识Key
如果两个单词之间仅相差1个字母，就在它们之间设一条边
这样，在两个单词之间的任意一条路径，就是词梯问题的一个解
- 下图是从FOOL到SAGE的词梯解，所用的图是无向图，边没有权重
FOOL到SAGE的每条路径都是一个解



词梯问题：构建单词关系图

- 单词关系图可以通过不同的算法来构建（以4个字母的单词表为例）
首先是将所有单词作为顶点加入图中，再设法建立顶点之间的边
- 建立边的最直接算法，是对每个顶点（单词），与其它所有单词进行比较，如果相差仅1个字母，则建立一条边
时间复杂度是 $O(n^2)$ ，对于所有4个字母的5110个单词，需要超过2600万次比较
- 改进的算法是创建大量的桶，每个桶可以存放若干单词，桶的标记是去掉1个字母，以通配符“_”占空的单词，所有匹配标记的单词都放到这个桶里，所有单词就位后，再在同一个桶的单词之间建立边即可。



词梯问题：构建单词关系图

- 可以采用Python字典来建立桶

4字母单词可以属于4个桶

同一个桶的单词之间建立边

```
def buildGraph(wordFile):
    d = {}
    g = Graph()
    wfile = open(wordFile, 'r')
    # create buckets of words that differ by one letter
    for line in wfile:
        word = line[:-1]
        for i in range(len(word)):
            bucket = word[:i] + '_' + word[i+1:]
            if bucket in d:
                d[bucket].append(word)
            else:
                d[bucket] = [word]
    # add vertices and edges for words in the same bucket
    for bucket in d.keys():
        for word1 in d[bucket]:
            for word2 in d[bucket]:
                if word1 != word2:
                    g.addEdge(word1, word2)
    return g
```

词梯问题：构建单词关系图

样例数据文件包含了5,110个4字母的单词
可从课程网站下载

如果采用邻接矩阵表示这个单词关系图，则需要2,600万个矩阵单元
 $5,110 * 5,110 = 26,112,100$

而单词关系图总计有53,286条边，仅仅达到矩阵单元数量的0.2%

单词关系图是一个非常稀疏的图

猜想与验证：这个单词关系图会是一个随机网络，还是一个无尺度网络？单词之间的关系会不会遵循六度分隔理论呢？

实现广度优先搜索(Breadth First Search)

在单词关系图建立完成以后，需要在图中寻找词梯问题的最短序列。

需要用到“广度优先搜索Breadth First Search:BFS”算法对单词关系图进行搜索

BFS是搜索图的最简单算法之一，也是其它一些重要的图算法的基础

给定图 G ，以及开始搜索的起始顶点 s

BFS搜索所有从 s 可到达顶点的边

而且在达到更远的距离 $k+1$ 的顶点之前，BFS会找到全部距离为 k 的顶点

可以想象为以 s 为根，构建一棵树的过程，从顶部向下逐步增加层次

广度优先搜索能保证在增加层次之前，添加了所有兄弟节点到树中

BFS算法过程

为了跟踪顶点的加入过程，并避免重复顶点，要为顶点增加3个属性

距离distance：从起始顶点到此顶点的路径长度；

前驱顶点predecessor：可追溯到起始顶点的反向路径；

颜色color：标识了此顶点是尚未发现（白色）、已经发现（灰色）、还是已经完成探索（黑色）

还需要用一个队列Queue来对已发现的顶点进行排列，决定下一个要探索的顶点（队首顶点）

BFS算法过程

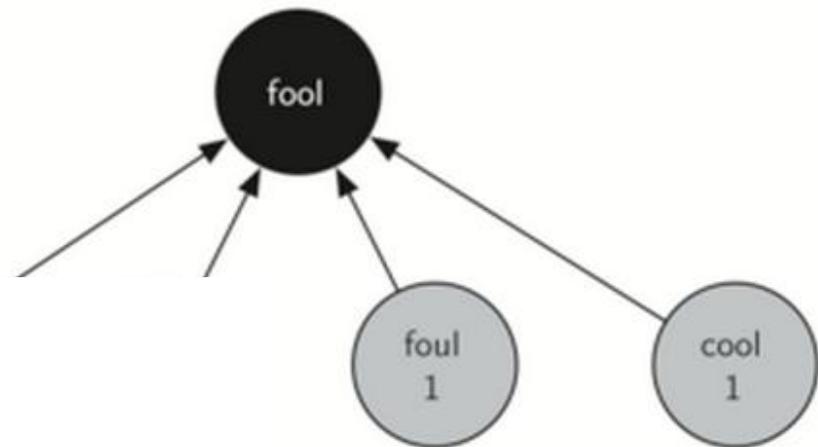
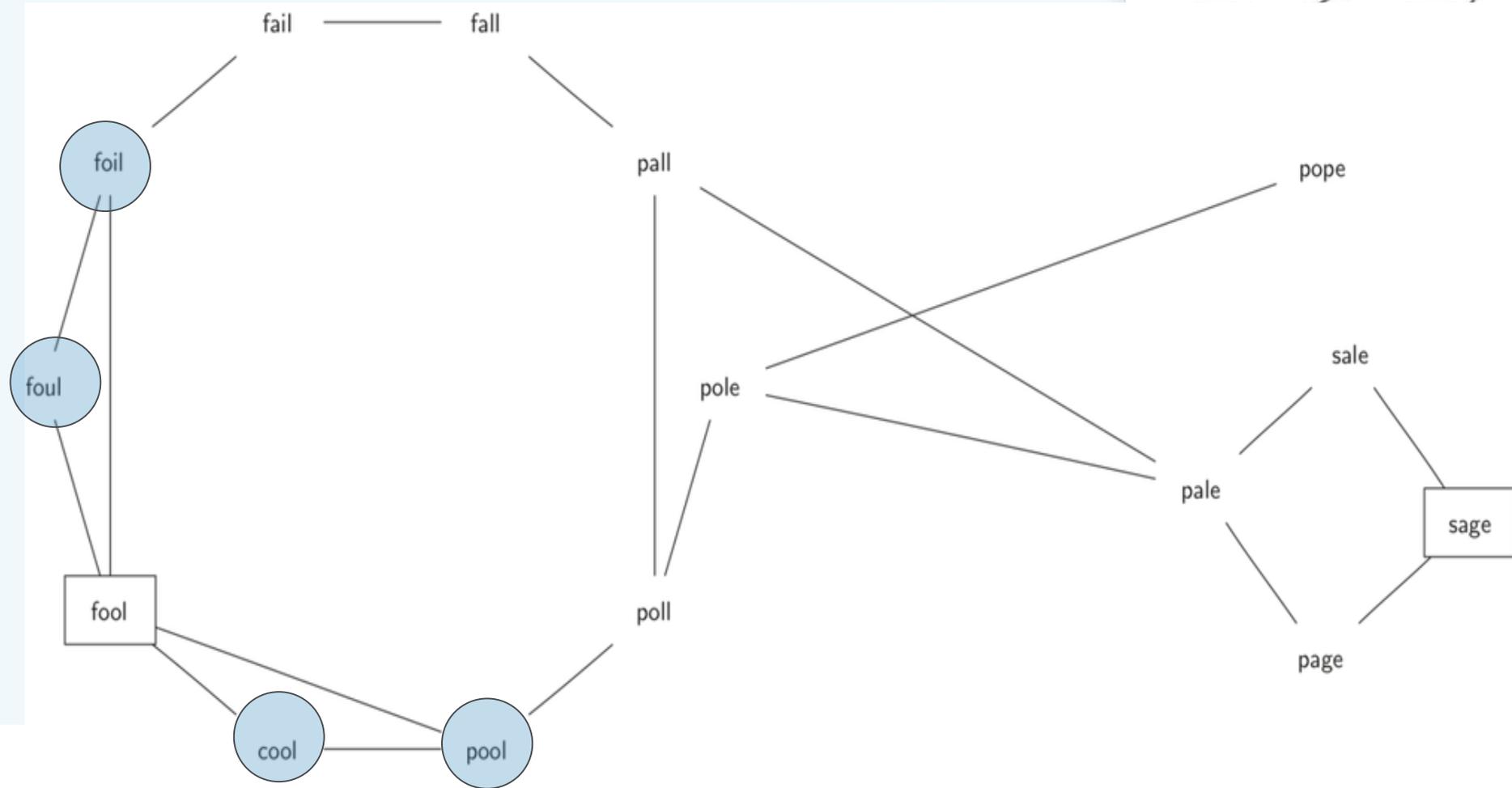
从起始顶点 s 开始，作为刚发现的顶点，标注为灰色，距离为0，前驱为None，加入队列，接下来是个循环迭代过程：

从队首取出一个顶点作为当前顶点；

遍历当前顶点的邻接顶点，如果是尚未发现的白色顶点，则将其颜色改为灰色（已发现），距离增加1，前驱顶点为当前顶点，加入到队列中

遍历完成后，将当前顶点设置为黑色（已探索过），循环回到步骤1

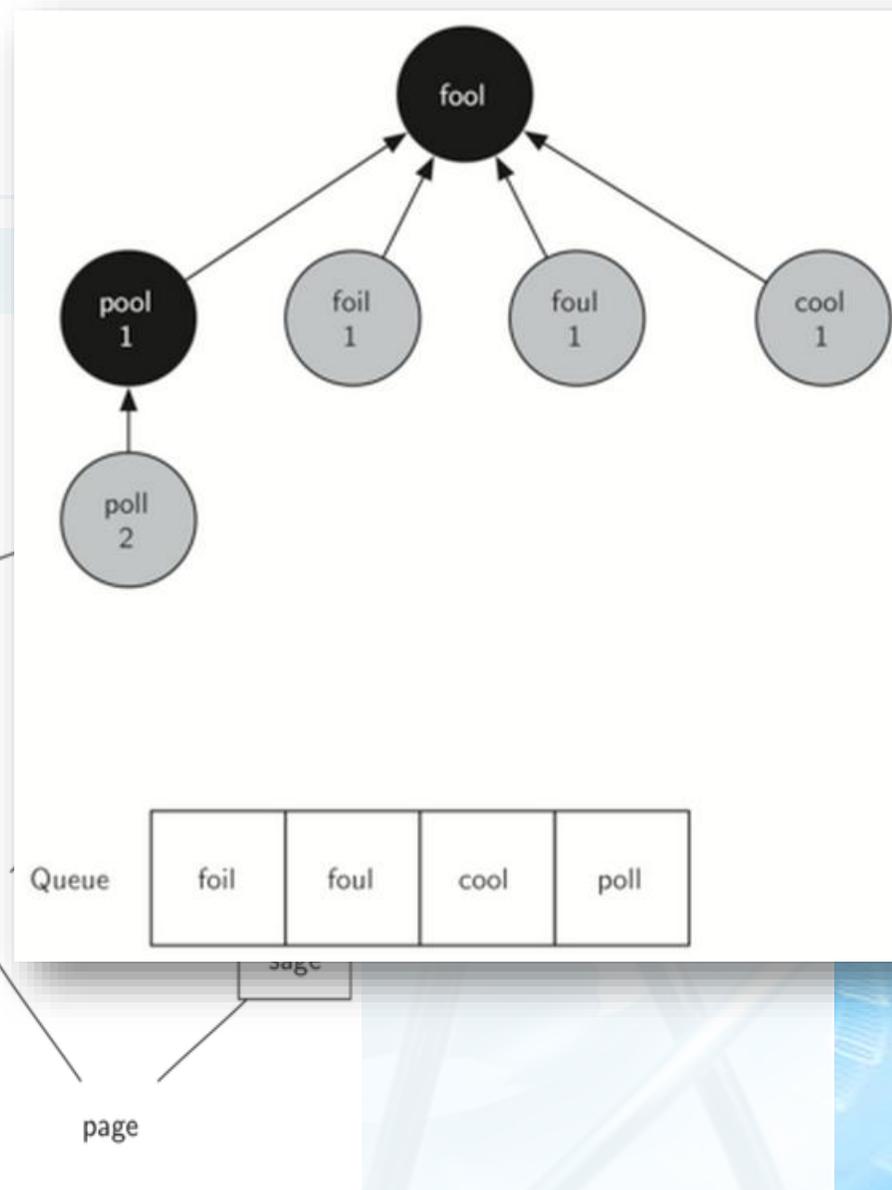
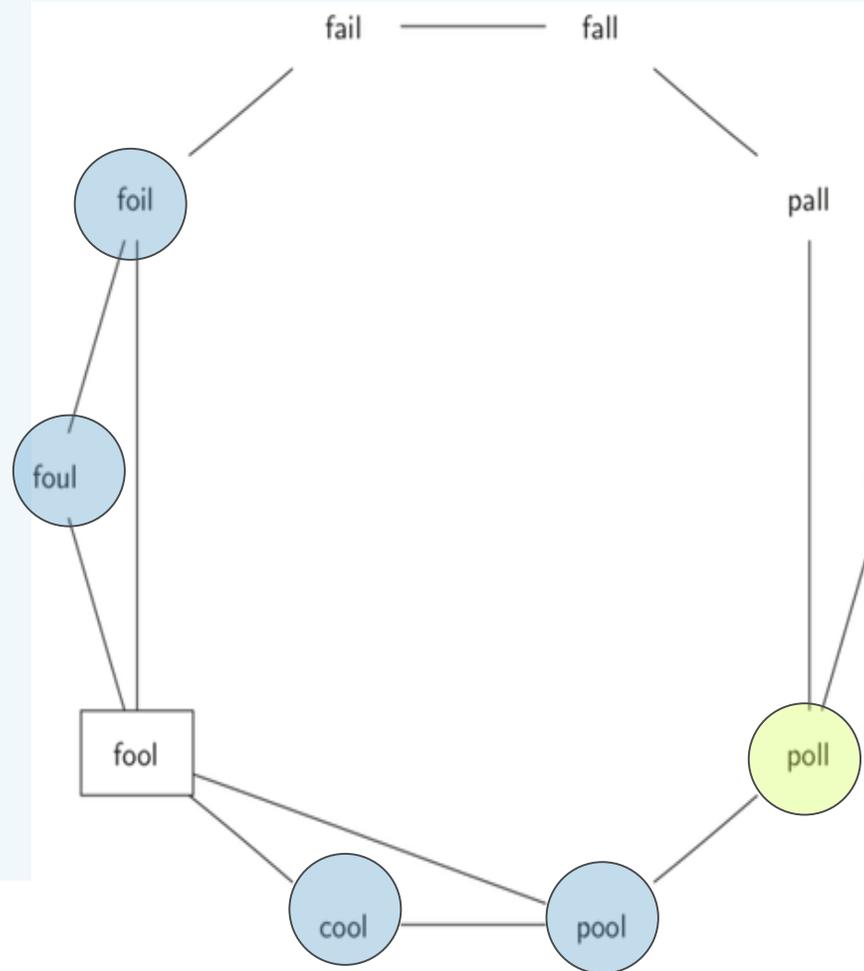
BFS算法实例运行



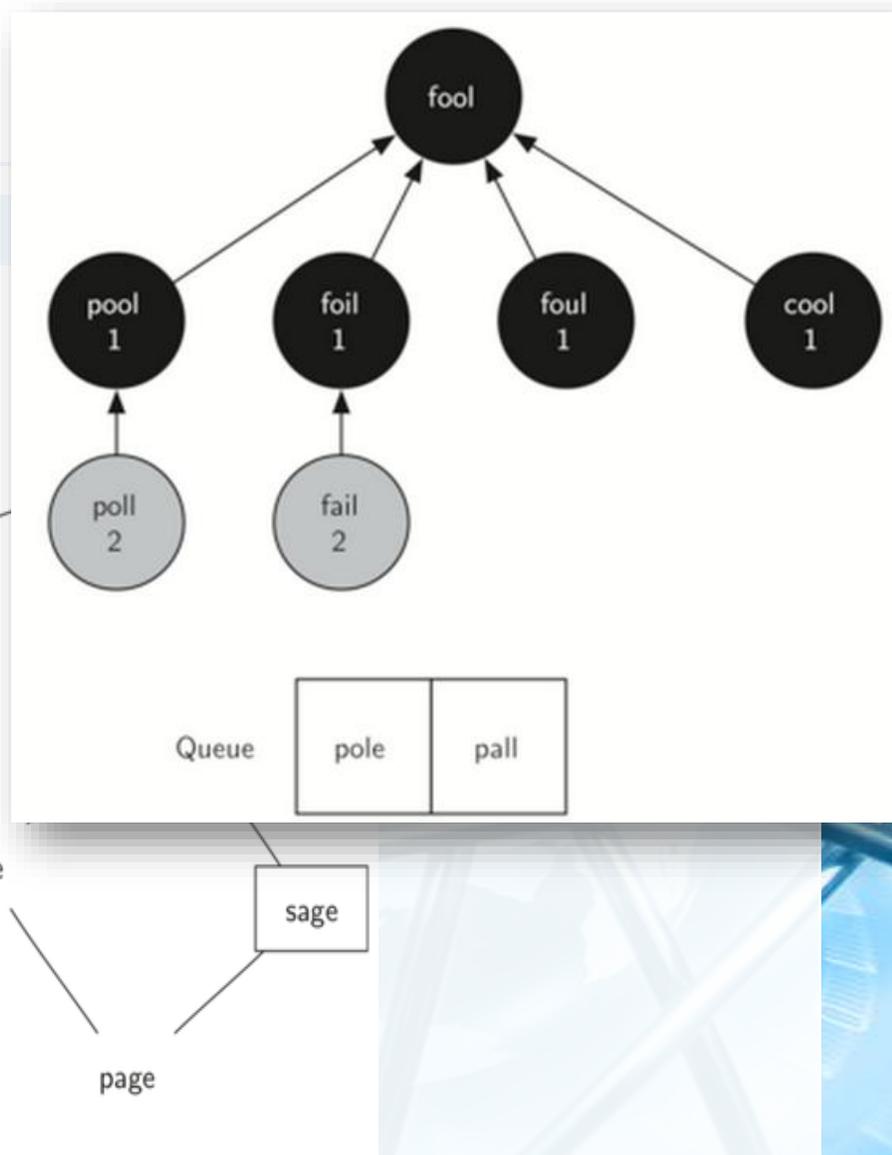
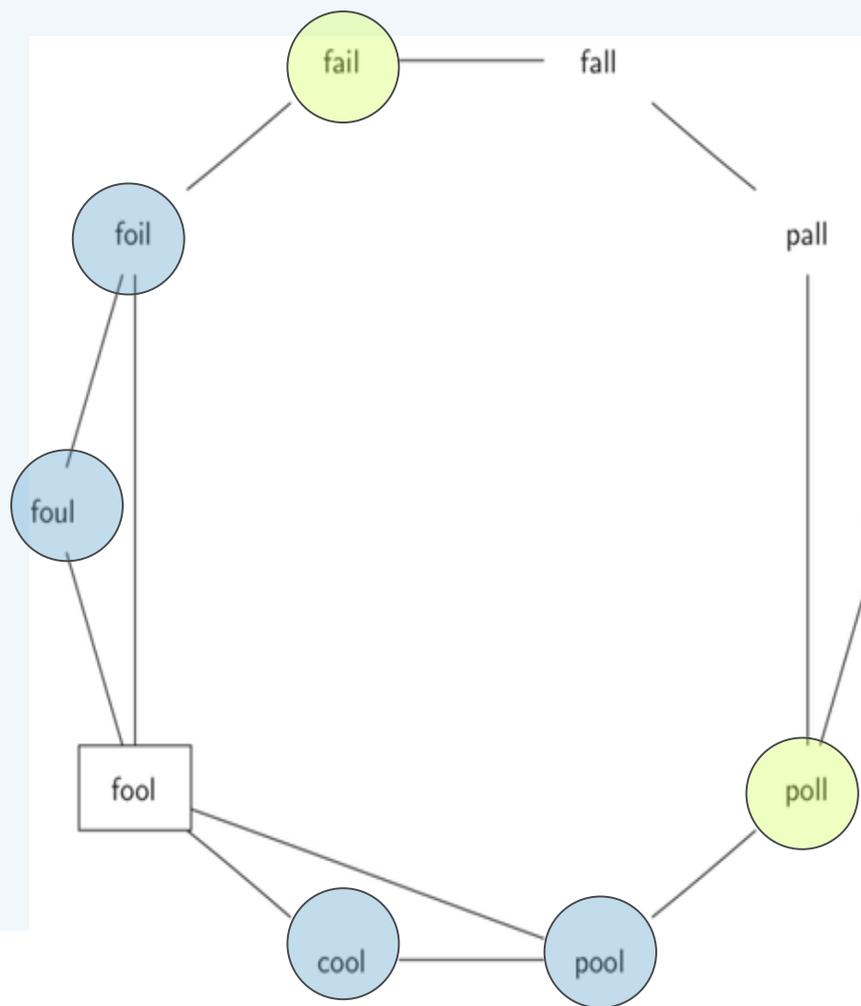
oil	foul	cool
-----	------	------



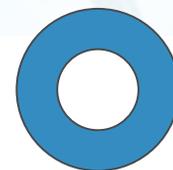
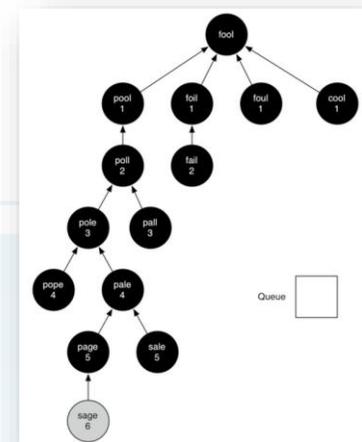
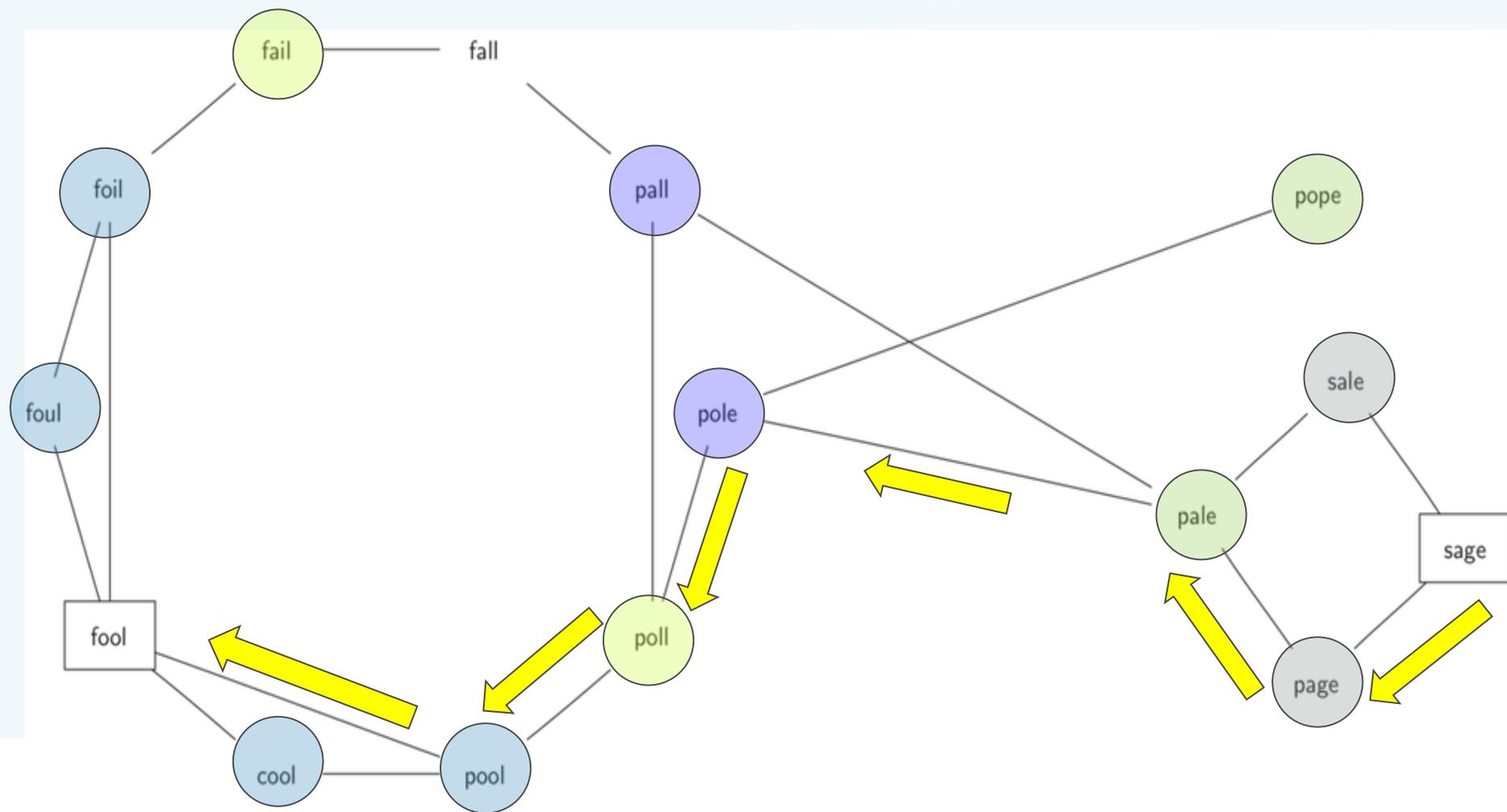
BFS算法实例运行



BFS算法实例运行



BFS算法实例运行



BFS算法代码

取队首作为当前顶点

遍历当前顶点邻接顶点

当前顶点设黑色

```
def bfs(g, start):
    start.setDistance(0)
    start.setPred(None)
    vertQueue = Queue()
    vertQueue.enqueue(start)
    while (vertQueue.size() > 0):
        currentVert = vertQueue.dequeue()
        for nbr in currentVert.getConnections():
            if (nbr.getColor() == 'white'):
                nbr.setColor('gray')
                nbr.setDistance(currentVert.getDistance() + 1)
                nbr.setPred(currentVert)
                vertQueue.enqueue(nbr)
        currentVert.setColor('black')
```

BFS算法代码

在BFS以FOOL为起始顶点，遍历了所有顶点，并为每个顶点着色、赋距离和前驱之后

即可以通过一个回途追溯函数来确定FOOL到任何单词顶点的最短词梯！

思考：BFS能得到

所有的最短词梯解么？

为什么？

```
def traverse(y):  
    x = y  
    while (x.getPred()):  
        print(x.getId())  
        x = x.getPred()  
    print(x.getId())  
  
wordgraph = buildGraph("fourletterwords.txt")  
bfs(wordgraph, wordgraph.getVertex('FOOL'))  
traverse(wordgraph.getVertex('SAGE'))  
  
#traverse(wordgraph.getVertex('COOL'))
```

广度优先搜索算法分析

BFS算法主体是两个循环的嵌套：while-for

while循环对图中每个顶点访问一次，所以是 $O(|V|)$

而嵌套在while中的for，由于每条边只有在其起始顶点u出队的时候才会被检查一次，而每个顶点最多出队1次，所以边最多被检查1次，一共是 $O(|E|)$

综合起来BFS的时间复杂度为 $O(|V|+|E|)$

词梯问题还包括两个部分算法

建立BFS树之后，回溯顶点到起始顶点的过程，最多为 $O(|V|)$

创建单词关系图也需要时间，思考：其复杂度为多少？

广度优先搜索算法分析

课后练习1

整理词梯问题完整算法 (ADT Graph实现、buildGraph、BFS、traverse)

课后练习2

用嵌套列表作为矩阵来实现ADT Graph

骑士周游问题 Knight's Tour Problem

在一个国际象棋棋盘上，一个棋子“马”（骑士），按照“马走日”的规则，从一个格子出发，要走遍所有棋盘格恰好一次。

把一个这样的走棋序列称为一次“周游”

在 8×8 的国际象棋棋盘上，合格的“周游”数量有 1.305×10^{35} 这么多，走棋过程中失败的周游就更多了

采用图搜索算法，是解决骑士周游问题最容易理解和编程的方案之一，解决方案还是分为两步：

首先将合法走棋次序表示为一个图

采用图搜索算法搜寻一个长度为（行 \times 列-1）的路径

路径上包含每个顶点恰一次

35	40	47	44	61	08	15	12
46	43	36	41	14	11	62	09
39	34	45	48	07	60	13	16
50	55	42	37	22	17	10	63
33	38	49	54	59	06	23	18
56	51	28	31	26	21		03
29	32	53	58	05	02	19	24
52	57	30	27	20	25	04	01

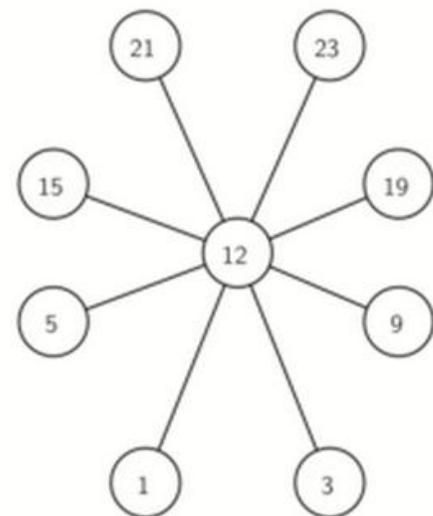
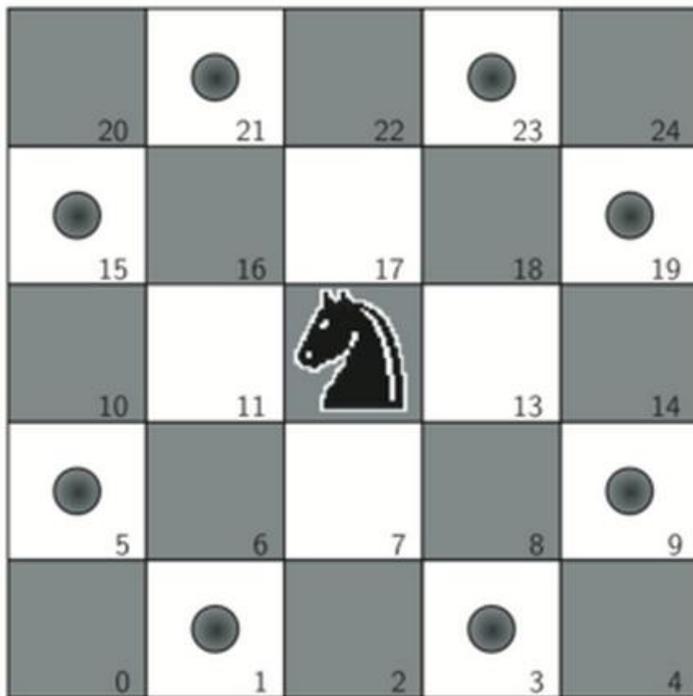
构建骑士周游图

将棋盘和走棋步骤构建为图的思路，顶点和边

将棋盘格作为顶点

按照“马走日”规则的合法走棋步骤作为顶点之间的连接边

建立每一个棋盘格的所有合法走棋步骤能够到达的棋盘格关系图



遍历每个格

单步合法走棋

添加边及顶点

马走日8个格子

确认不会走出棋盘

```
def knightGraph(bdSize):
    ktGraph = Graph()
    for row in range(bdSize):
        for col in range(bdSize):
            nodeId = posToNodeId(row,col,bdSize)
            newPositions = genLegalMoves(row,col,bdSize)
            for e in newPositions:
                nid = posToNodeId(e[0],e[1],bdSize)
                ktGraph.addEdge(nodeId,nid)
    return ktGraph

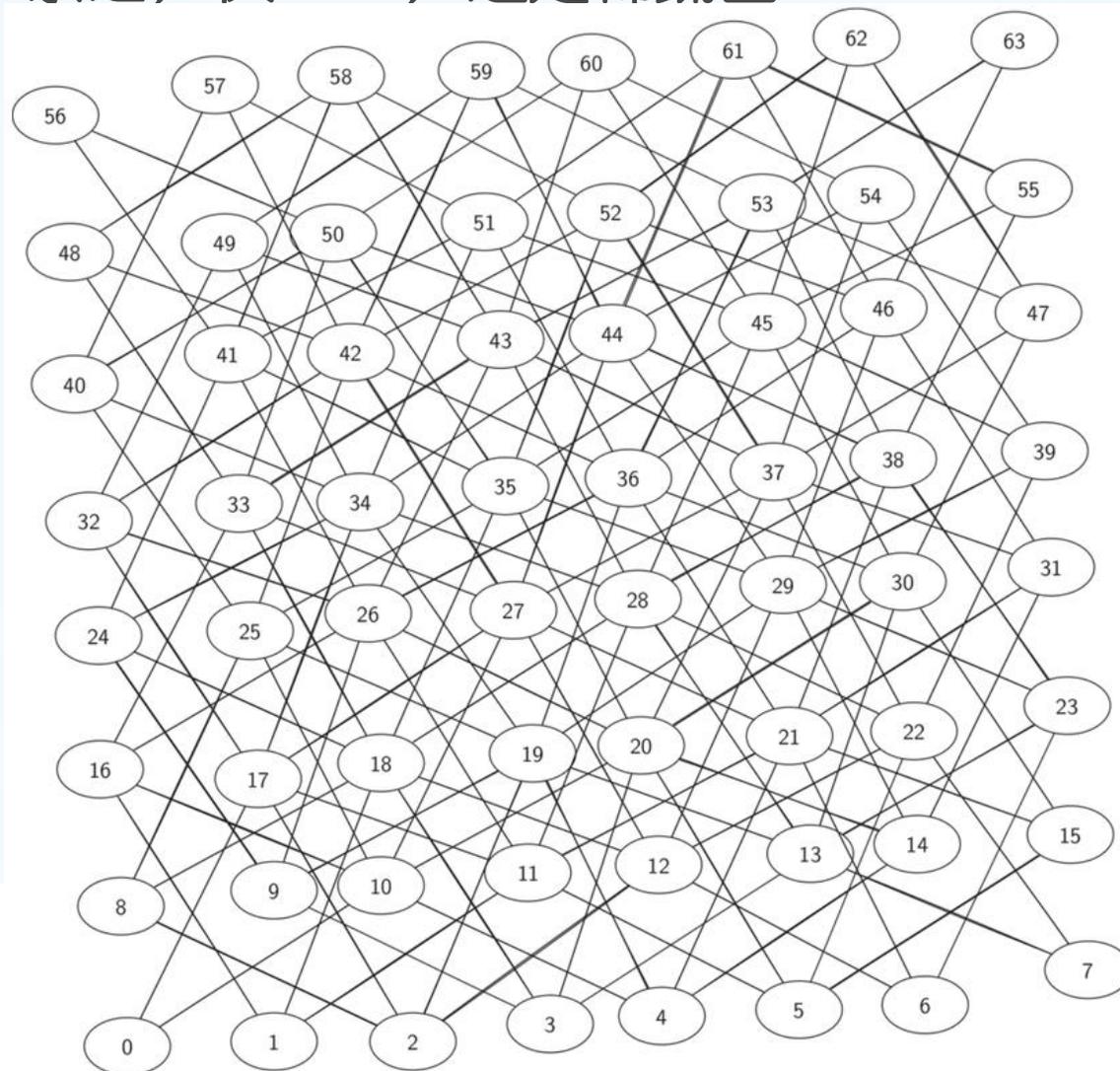
def posToNodeId(row,col,bdSize):
    return row*bdSize+col

def genLegalMoves(x,y,bdSize):
    newMoves = []
    moveOffsets = [(-1,-2),(-1,2),(-2,-1),(-2,1),
                   ( 1,-2),( 1,2),( 2,-1),( 2,1)]
    for i in moveOffsets:
        newX = x + i[0]
        newY = y + i[1]
        if legalCoord(newX,bdSize) and legalCoord(newY,bdSize):
            newMoves.append((newX,newY))
    return newMoves

def legalCoord(x,bdSize):
    if x >= 0 and x < bdSize:
        return True
    else:
        return False
```

骑士周游图：8×8棋盘生成的图

具有336条边，相比起全连接的4096条边，仅8.2%，还是稀疏图



骑士周游算法实现

用于解决骑士周游问题的图搜索算法是深度优先搜索 (Depth First Search:DFS)

相比前述的广度优先搜索, 其逐层建立搜索树的特点, 深度优先搜索是沿着树的单支尽量深入向下搜索, 如果到无法继续的程度还未找到问题解, 就回溯上一层再搜索下一支

下面介绍DFS的两个实现算法

一个DFS算法用于解决骑士周游问题, 其特点是每个顶点仅访问一次

另一个DFS算法更为通用, 允许顶点被重复访问, 可作为其它图算法的基础

骑士周游算法实现

深度优先搜索解决骑士周游的关键思路在于：

如果沿着单支深入搜索到无法继续（所有合法移动都已经被走过了）时
路径长度还没有达到预定值（ 8×8 棋盘为63）

那么就清除颜色标记，返回到上一层，换一个分支继续深入搜索。

骑士周游算法代码

```
def knightTour(n, path, u, limit):  
    u.setColor('gray')  
    path.append(u)  
    if n < limit:  
        nbrList = list(u.getConnections())  
        i = 0  
        done = False  
        while i < len(nbrList) and not done:  
            if nbrList[i].getColor() == 'white':  
                done = knightTour(n+1, path, nbrList[i], limit)  
            i = i + 1  
        if not done: # prepare to backtrack  
            path.pop()  
            u.setColor('white')  
    else:  
        done = True  
    return done
```

n:层次; path:路径; u:当前顶点;
limit:搜索总深度

当前顶点加入路径

对所有合法移动逐一深入

选择白色未经过的
顶点深入

都无法完成总深度, 回
溯, 试本层下一个顶点

层次加
1, 递
归深入

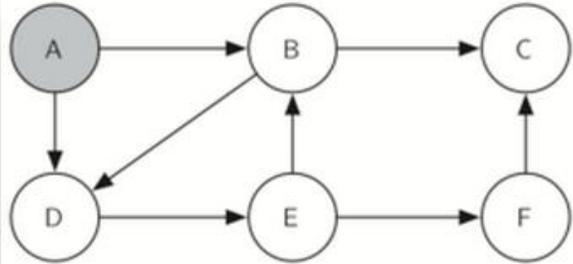


Figure 3: Start with node A

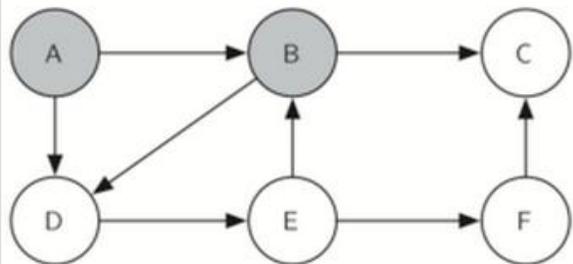


Figure 4: Explore B

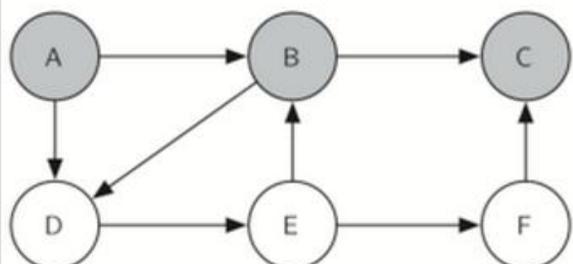


Figure 5: Node C is a dead end

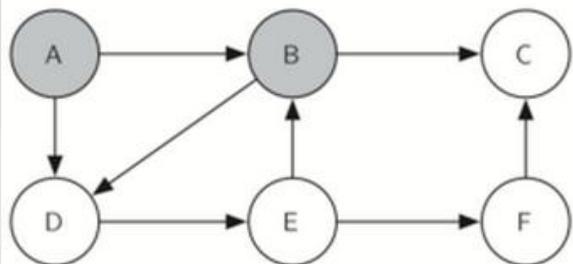


Figure 6: Backtrack to B

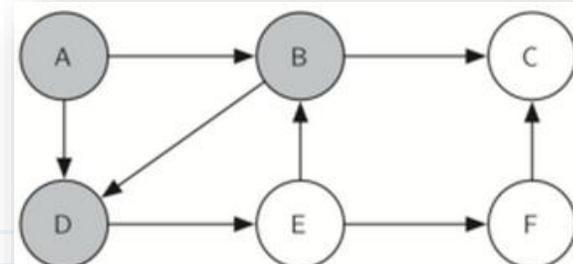


Figure 7: Explore D

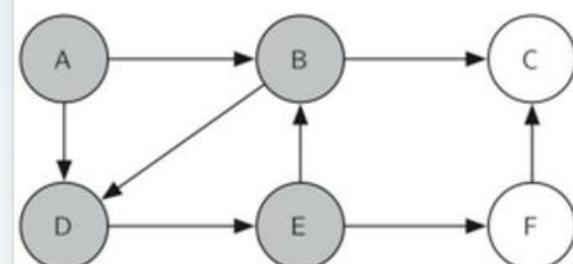


Figure 8: Explore E

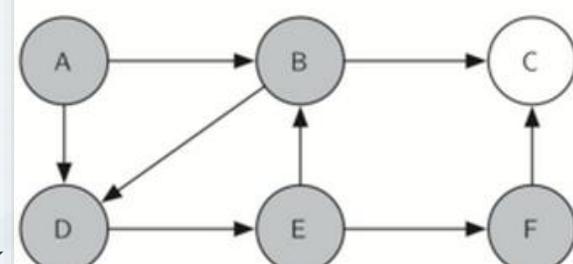


Figure 9: Explore F

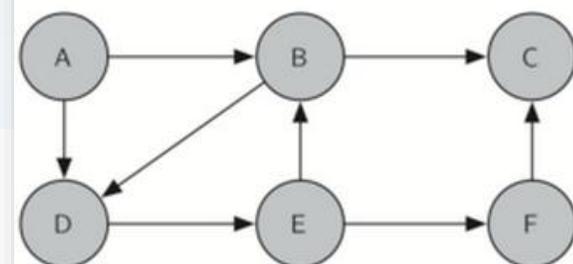
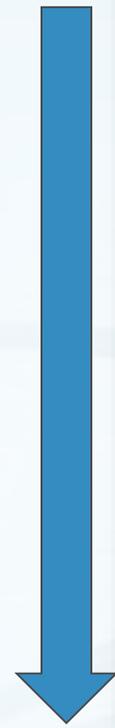
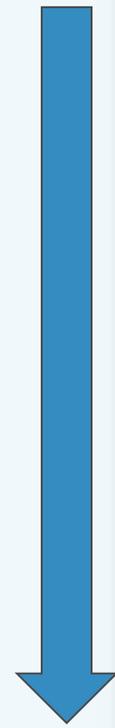
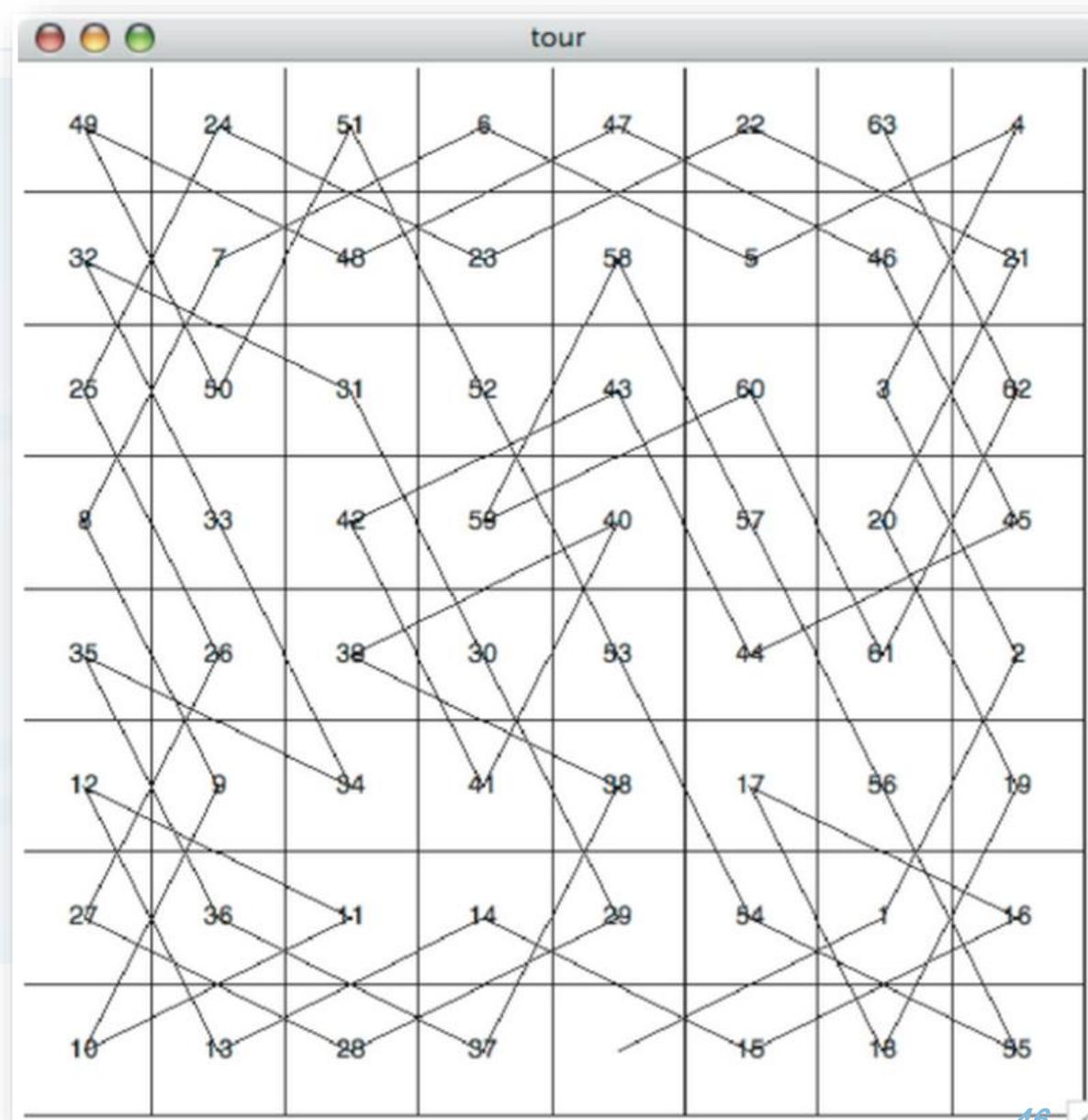


Figure 10: Finish



骑士周游问题：一个解



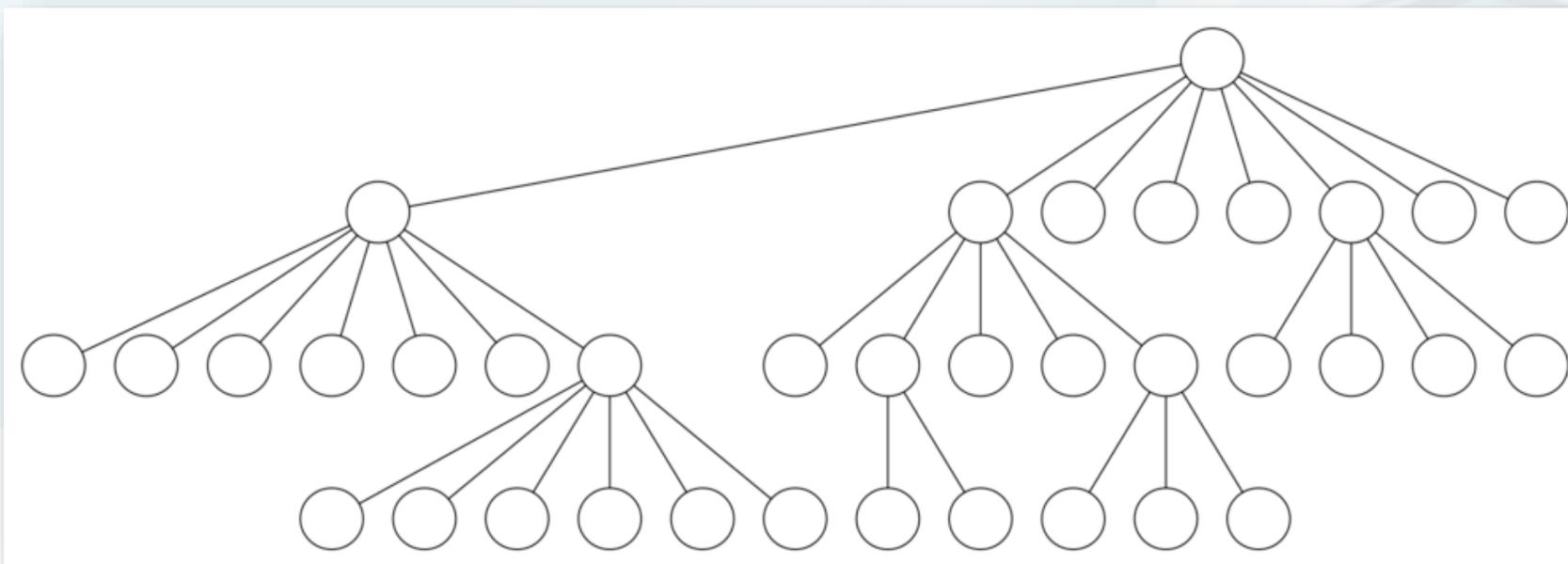
骑士周游算法分析

上述算法knightTour的性能高度依赖于深入顶点nbrList的搜索次序：

就 5×5 的棋盘而言，大约1.5秒可以得到一个周游路径

但 8×8 的棋盘上，则需要半个小时以上的时间才能得到一个解！

目前实现的算法，其复杂度为 $O(k^n)$ ，其中 n 是棋盘格数目，这是一个指数时间复杂度的算法！其搜索过程表现为一个层次为 n 的树



骑士周游算法改进

幸运的是，即便是指数时间复杂度算法也可以在实际性能上加以大幅度改进。对nbrList的灵巧构造，以特定方式排列顶点访问次序，可以使得8×8棋盘的周游路径搜索时间降低到秒级！

初始算法中nbrList= list(u.getConnections())，直接以原始顺序来确定深度优先搜索的分支次序，新的算法，仅修改了nbrList= orderByAvail(u)将u的合法移动目标棋盘格排序为：具有最少合法移动目标的格子优先搜索

思考：为什么能提高性能？

尝试：相反的次序会如何？

```
def orderByAvail(n):
    resList = []
    for v in n.getConnections():
        if v.getColor() == 'white':
            c = 0
            for w in v.getConnections():
                if w.getColor() == 'white':
                    c = c + 1
            resList.append((c,v))
    resList.sort(key=lambda x: x[0])
    return [y[1] for y in resList]
```

骑士周游算法改进

这个改进算法被特别以发明者名字命名：Warnsdorff算法

采用先验的知识来改进算法性能的做法，称作为“启发式规则heuristic”

启发式规则经常用于人工智能领域；

可以有效地减小搜索范围、更快达到目标等等；

如棋类程序算法，会预先存入棋谱、布阵口诀、高手习惯等“启发式规则”，能够在最短时间内从海量的棋局落子点搜索树中定位最佳落子。

- 例如：黑白棋中的“金角银边”口诀，指导程序优先占边角位置等等

通用的深度优先搜索

骑士周游问题是一种特殊的对图进行深度优先搜索，其目的是建立一个没有分支的最深的深度优先树

一般的深度优先搜索实际上更为容易，其目标是在图上进行尽量深的搜索，连接尽量多的顶点，必要时可以进行分支（创建了树）

有时候深度优先搜索会创建多棵树，称为“深度优先森林”

深度优先搜索同样要用到顶点的“前驱”属性，来构建树或森林

另外还要设置“发现时间”和“结束时间”两个属性

- 前者是算法在第几步访问到这个顶点（设置灰色）
- 后者则是算法在第几步完成了此顶点的探索（设置黑色）

这两个新属性对后面的图算法很重要

通用的深度优先搜索

我们把带有DFS算法的图实现为Graph的子类
顶点Vertex增加了成员Discovery及Finish
图Graph增加了成员time用于记录算法执行的步骤数目

通用的深度优先搜索算法代码

BFS采用队列存储待访问顶点
DFS则是通过递归调用, 隐式使用了栈

颜色初始化

如果还有未包括的顶点, 则建森林

算法的步数

深度优先递归访问

```
from pythonds.graphs import Graph
class DFSGraph(Graph):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.time = 0

    def dfs(self):
        for aVertex in self:
            aVertex.setColor('white')
            aVertex.setPred(-1)
        for aVertex in self:
            if aVertex.getColor() == 'white':
                self.dfsvisit(aVertex)

    def dfsvisit(self, startVertex):
        startVertex.setColor('gray')
        self.time += 1
        startVertex.setDiscovery(self.time)
        for nextVertex in startVertex.getConnections():
            if nextVertex.getColor() == 'white':
                nextVertex.setPred(startVertex)
                self.dfsvisit(nextVertex)
        startVertex.setColor('black')
        self.time += 1
        startVertex.setFinish(self.time)
```

通用的深度优先搜索算法：示例

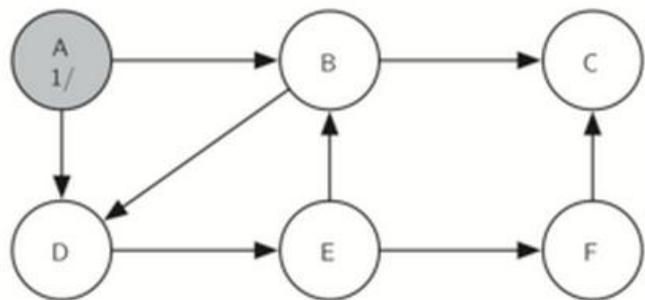


Figure 14: Constructing the Depth First Search Tree-10

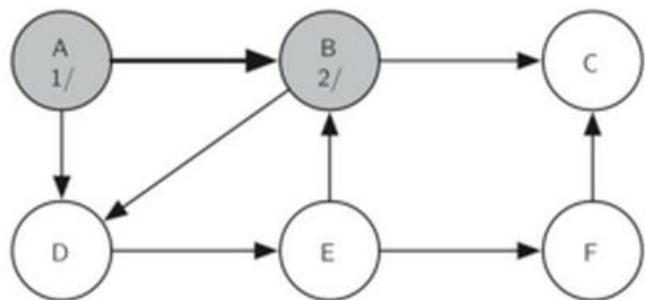


Figure 15: Constructing the Depth First Search Tree-11

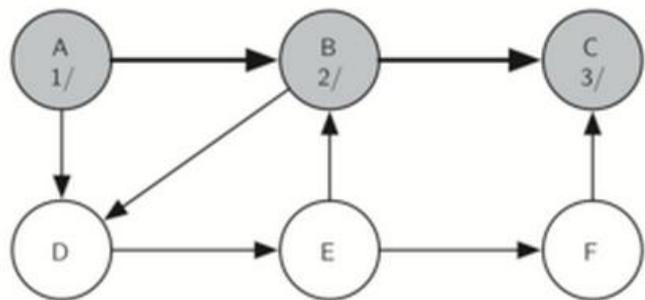


Figure 16: Constructing the Depth First Search Tree-12

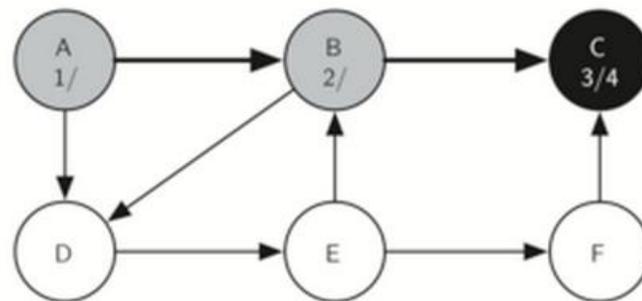


Figure 17: Constructing the Depth First Search Tree-13

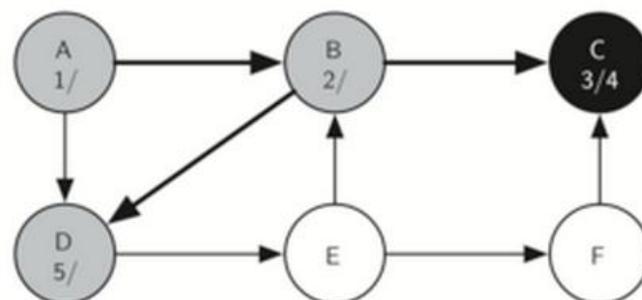


Figure 18: Constructing the Depth First Search Tree-14

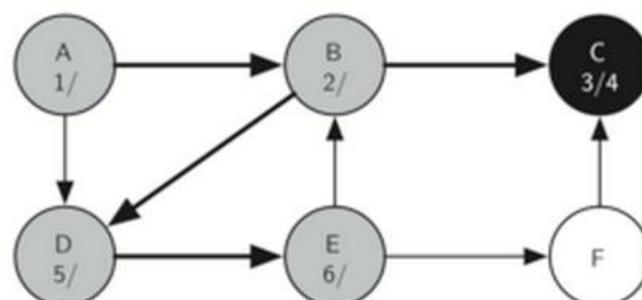


Figure 19: Constructing the Depth First Search Tree-15

通用的深度优先搜索算法：示例

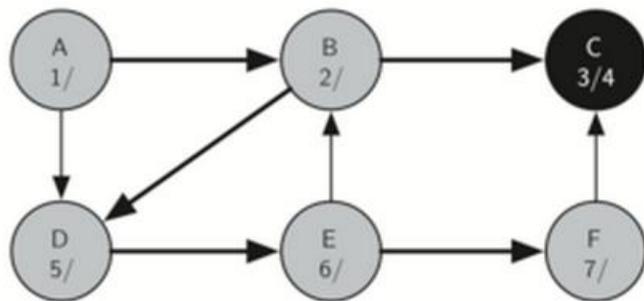


Figure 20: Constructing the Depth First Search Tree-16

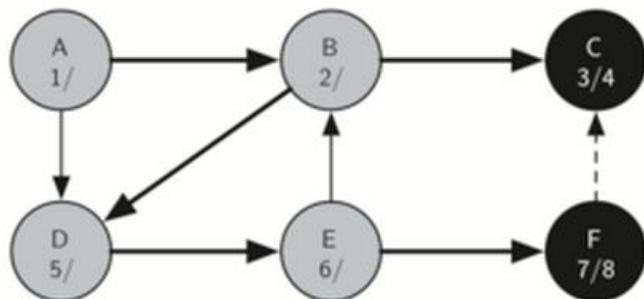


Figure 21: Constructing the Depth First Search Tree-17

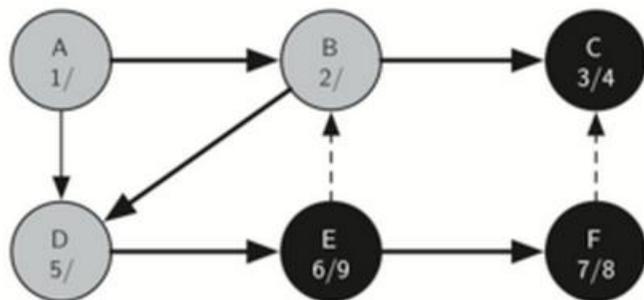


Figure 22: Constructing the Depth First Search Tree-18

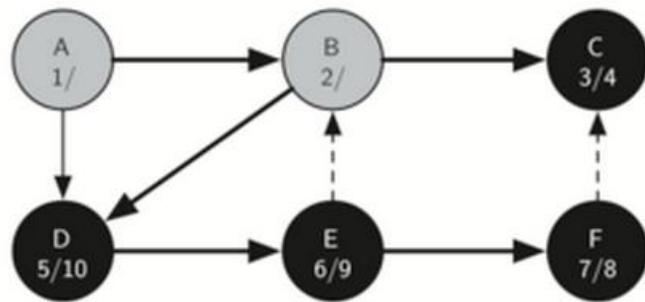


Figure 23: Constructing the Depth First Search Tree-19

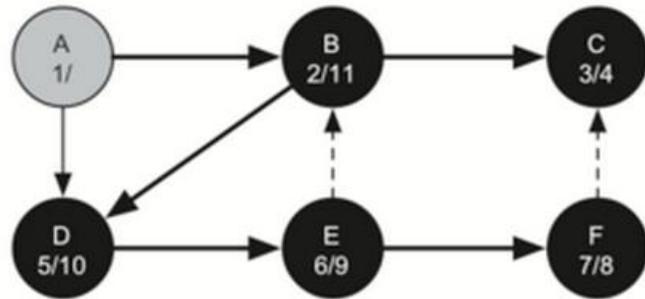


Figure 24: Constructing the Depth First Search Tree-20

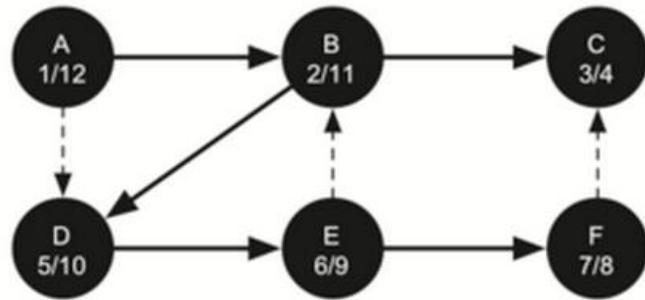


Figure 25: Constructing the Depth First Search Tree-21

通用的深度优先搜索算法：分析

DFS构建的树，其顶点上的“发现时间”和“结束时间”属性，具有类似括号的性质：即一个顶点的“发现时间”总小于所有子顶点的“发现时间”，而“结束时间”则大于所有子顶点的“结束时间”
比子顶点更早被发现，更晚被结束探索

DFS运行时间同样也包括了两方面：

dfs函数中有两个循环，每个都是 $|V|$ 次，所以是 $O(|V|)$

而dfsvisit函数中的循环则是对当前顶点所连接的顶点进行，而且仅有在顶点为白色的情况下才进行递归调用，所以对每条边来说只会运行一步，所以是 $O(|E|)$

加起来就是和BFS一样的 $O(|V|+|E|)$

拓扑排序Topological Sort

很多问题都可以转化为图，利用图算法来解决

例如早餐吃薄煎饼的过程
以动作为顶点

以先后次序为有向边

问题是对整个过程而言

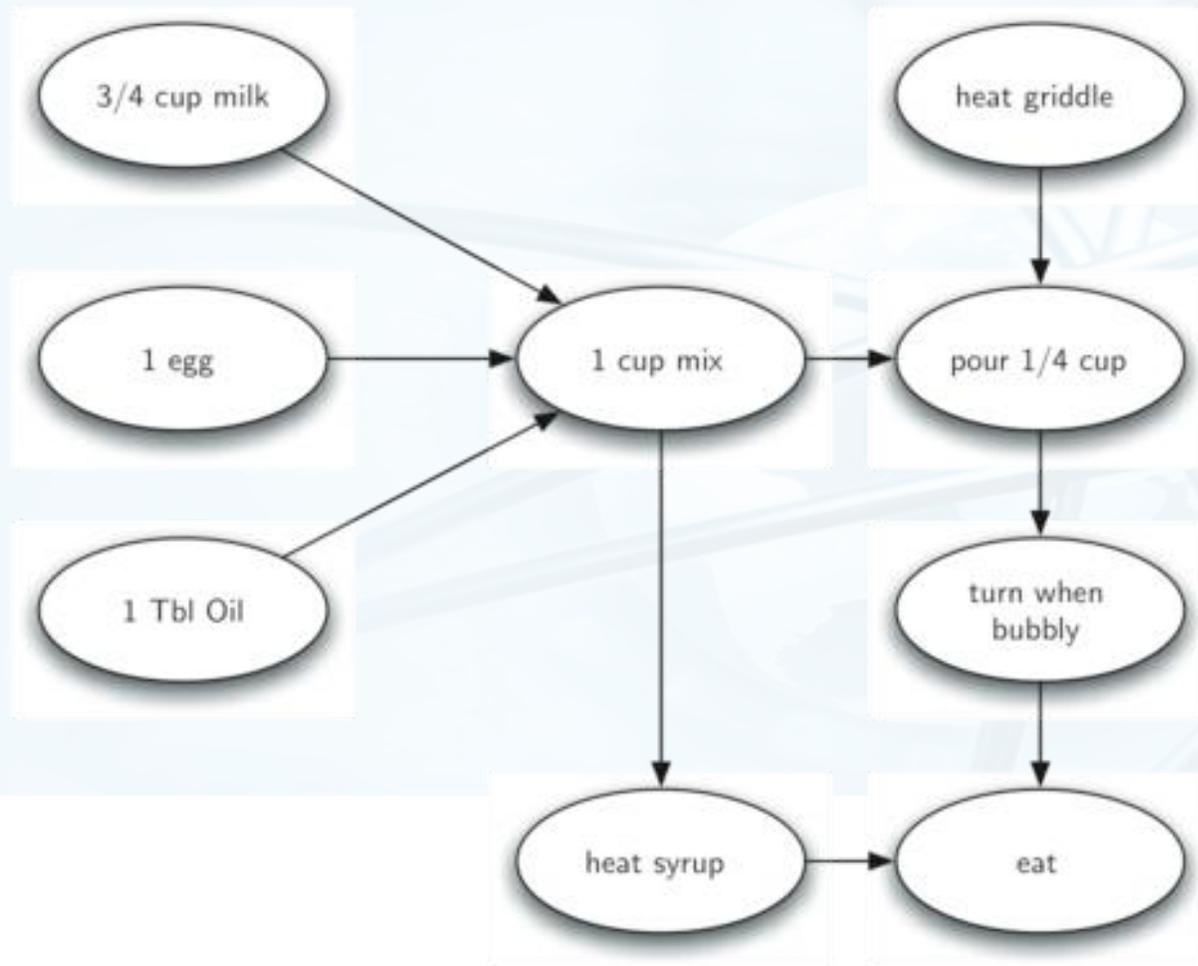
如果一个人独自做，

所有动作的先后次序？

从加料开始？

还是从加热烤盘开始？

思考：整个过程次序



拓扑排序Topological Sort

从工作流程图得到工作次序排列的算法，称为“拓扑排序”

拓扑排序处理一个DAG，输出顶点的线性序列，使得两个顶点 v, w ，如果 G 中有 (v, w) 边，在线性序列中 v 就出现在 w 之前。

DAG的广泛应用在依赖事件的排期上，除了吃早餐过程之外，还可以用在项目管理、数据库查询优化和矩阵乘法的次序优化上

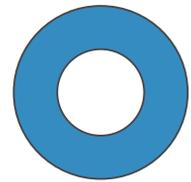
拓扑排序可以采用DFS很好地实现：

对DAG图调用DFS算法，以得到每个顶点的“结束时间”

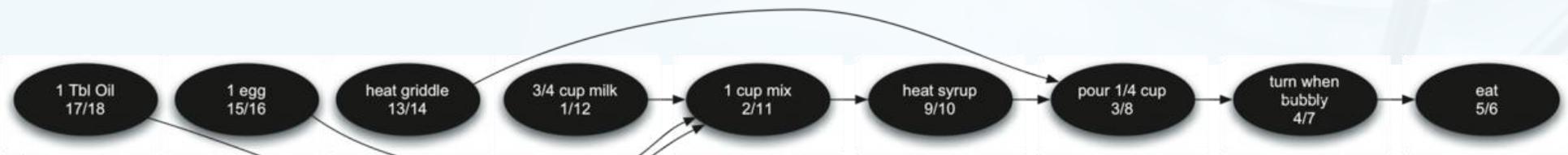
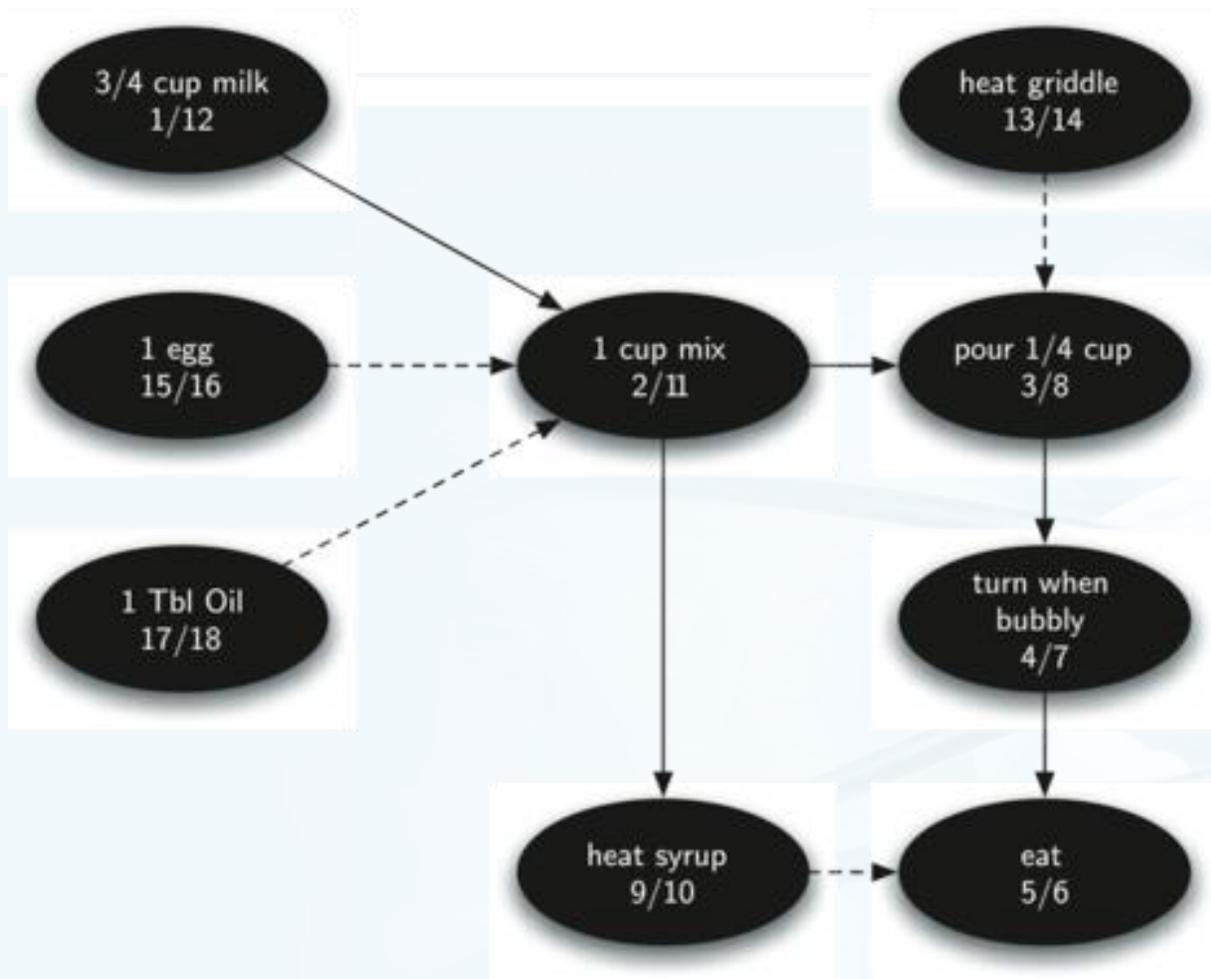
按照每个顶点的“结束时间”从大到小排序

输出这个次序下的顶点列表

课后练习：整理出骑士周游算法、通用DFS以及拓扑排序算法的代码



拓扑排序：示例



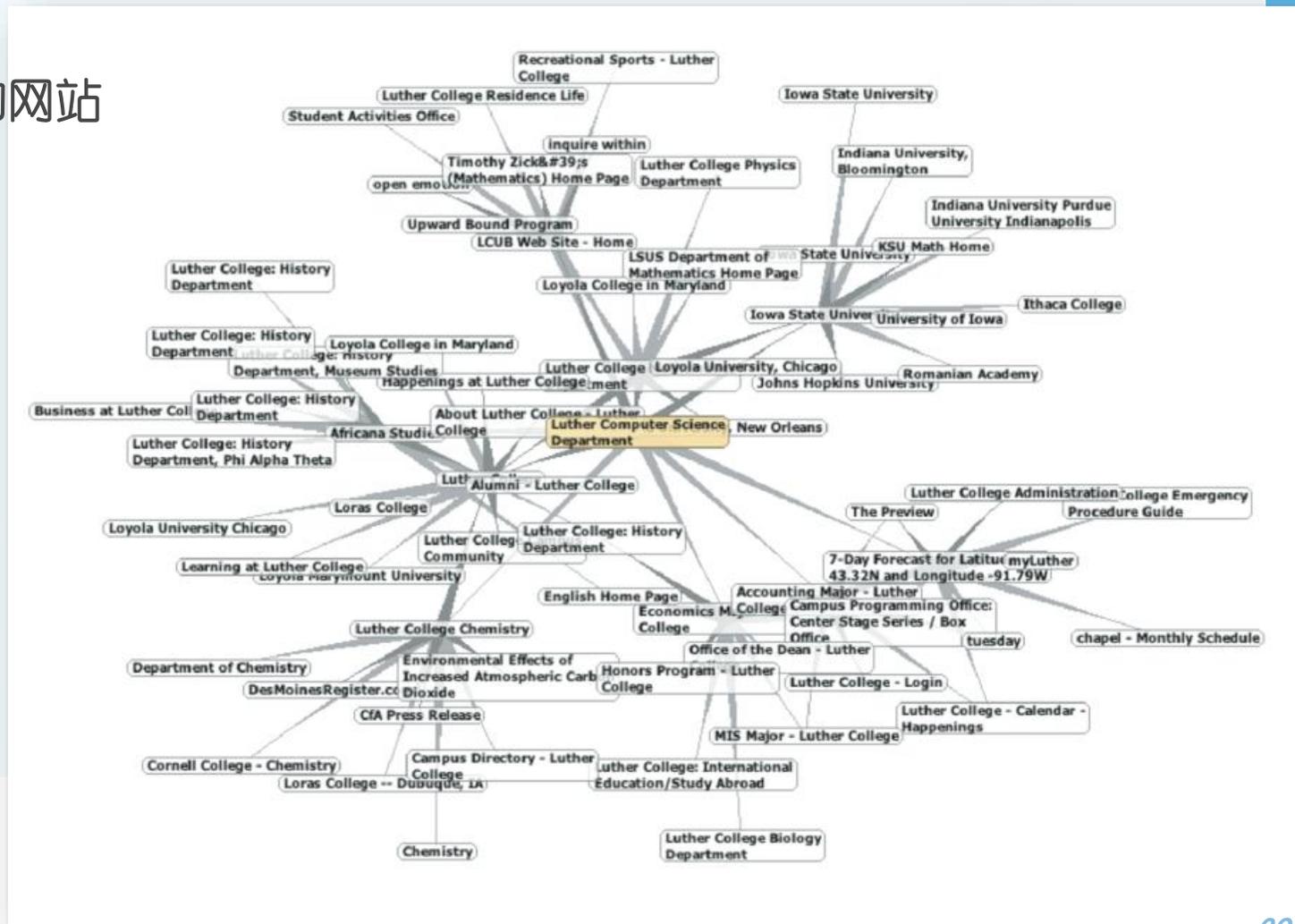
强连通分支

上图是Luther College的Computer Science网站链接情况，有三个有趣的现象

图中包含了许多Luther College其它系的网站

包含了一些Iowa其它大学学院的网站

还包含了一些人文学院的网站



强连通分支

我们可以猜想，Web的底层结构可能存在某些同类网站的聚集

在图中发现高度聚集节点群的算法，即寻找“强连通分支 Strongly Connected Components”算法。

强连通分支SCC，定义为图G的一个子集C

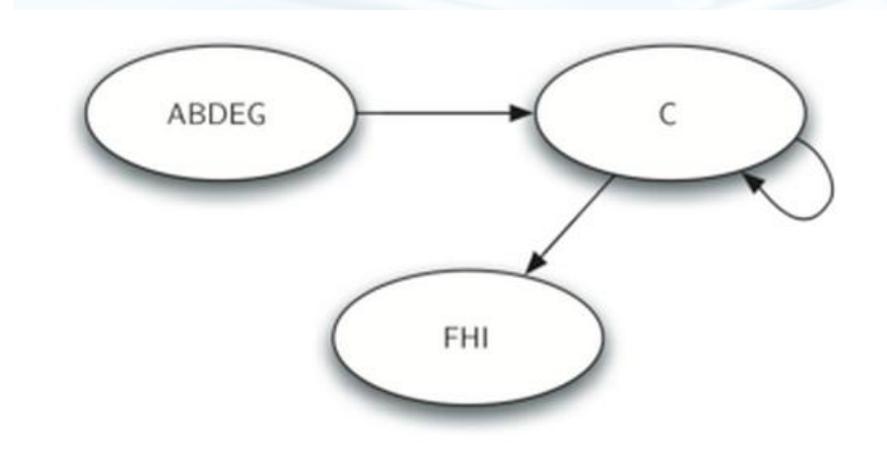
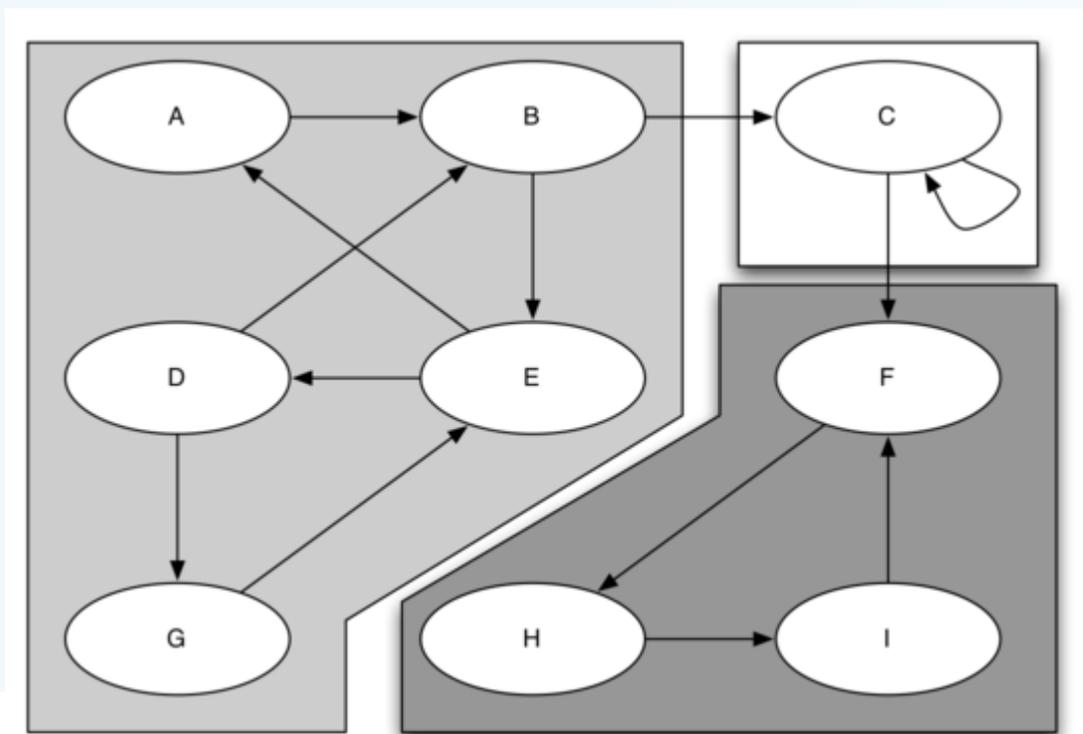
C中的任意两个顶点 v, w 之间都有路径来回
即 (v, w) (w, v) 都是C的路径，

而且C是具有这样性质的最大子集

强连通分支例子

右图是具有3个强连通分支的9顶点有向图

一旦找到强连通分支，可以据此对图的顶点进行分类，并对图进行化简。

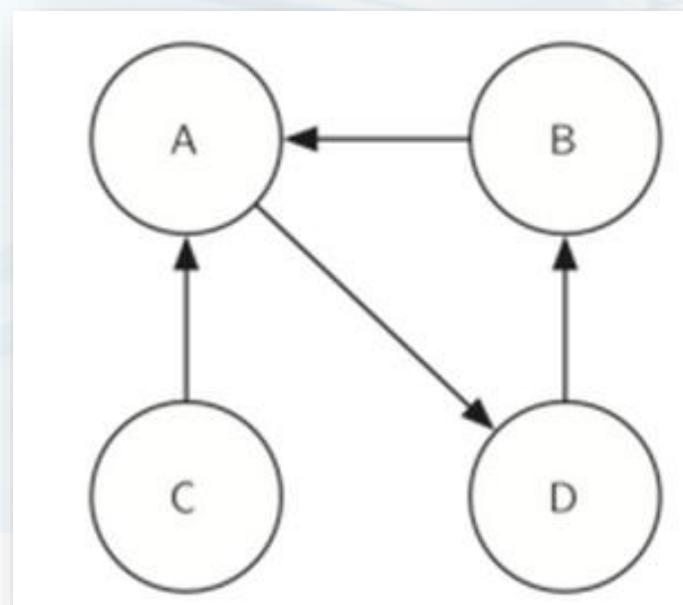
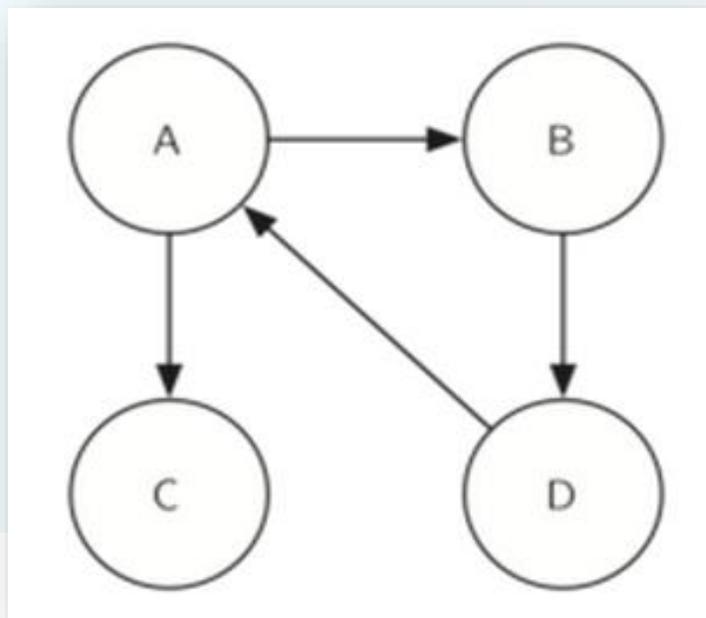


强连通分支算法：转置Transposition概念

在使用深度优先搜索DFS算法来发现强连通分支之前，先熟悉一个概念：
Transposition转置

一个有向图 G 的转置 G^T ，定义为将图 G 的所有边的顶点交换次序，如将 (v, w) 转换为 (w, v) ，如图所示的图 G 和转置 G^T ：

可以观察到图和转置图在强连通分支的数量和划分上，是相同的。



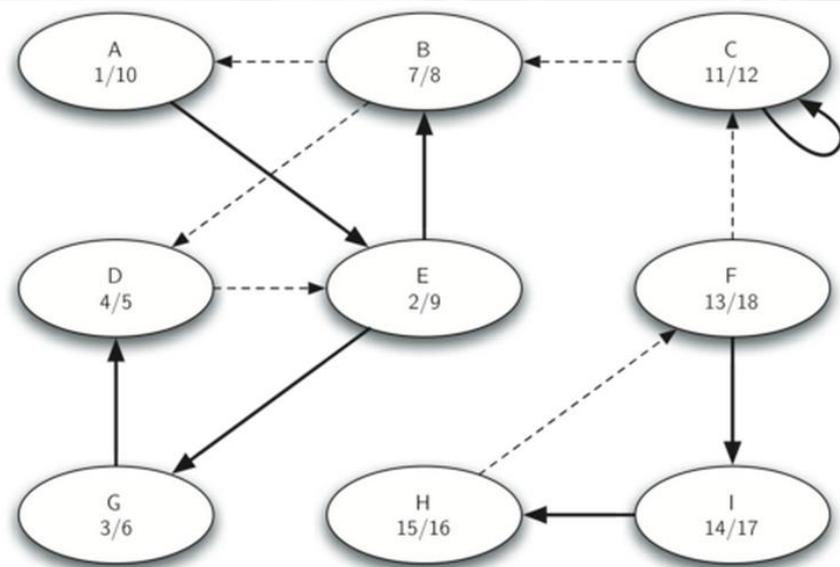
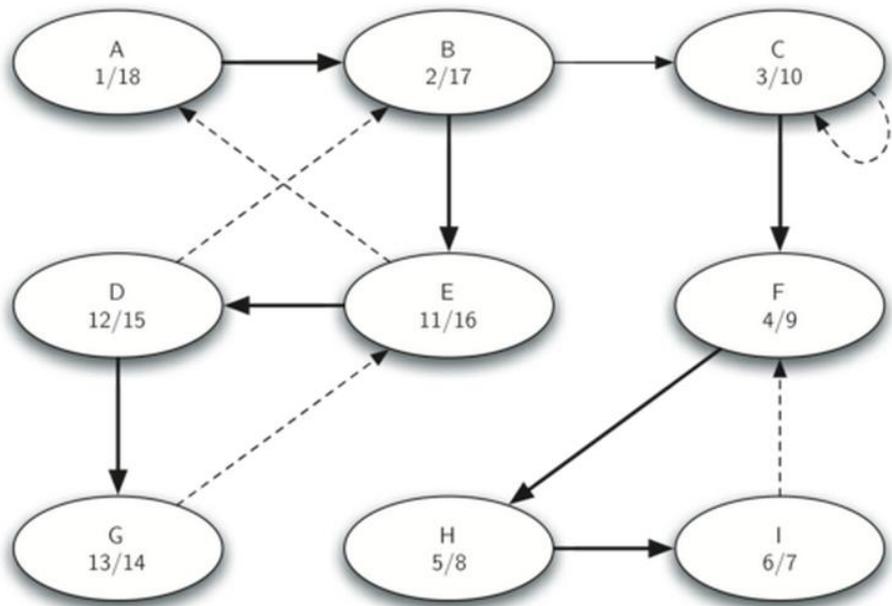
强连通分支算法：思路

首先，对图G调用dfs算法，为每个顶点计算“结束时间”；

然后，将图G进行转置，得到 G^T ；

再对 G^T 调用dfs算法，但在dfs函数中，对每个顶点的搜索循环里，要以顶点的“结束时间”倒序的顺序来搜索

最后，深度优先森林中的每一棵树就是一个强连通分支



强连通分支算法：思路

输出的强连通分支如图

本算法的延伸阅读

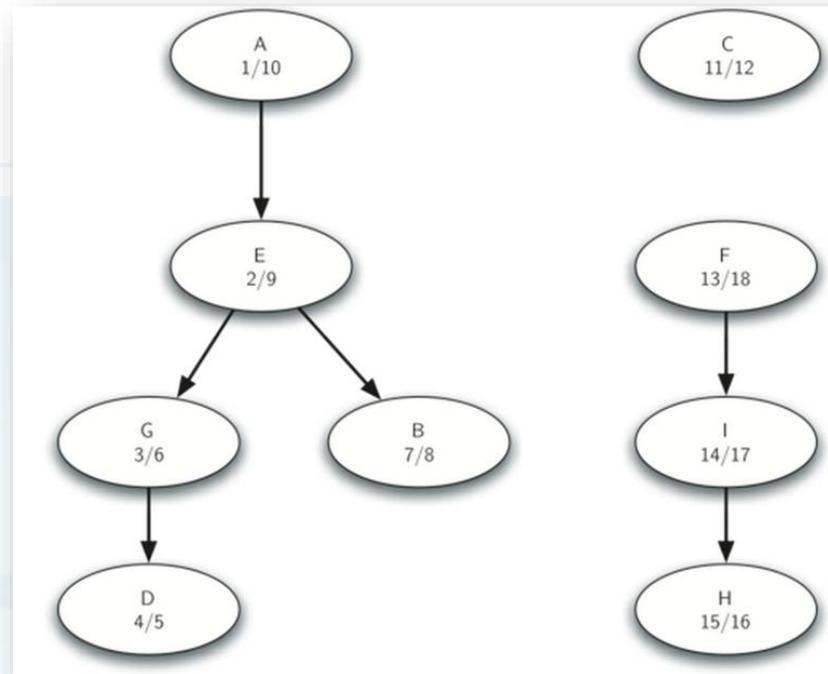
<http://edward-mj.com/archives/455>

另一个常用的强连通分支算法

Tarjan算法

<http://www.cnblogs.com/luweiseu/archive/2012/07/14/2591370.html>

- 课后练习1：写出本算法（Kosaraju算法）的代码
- 课后练习2：根据参考资料写出Tarjan算法的代码

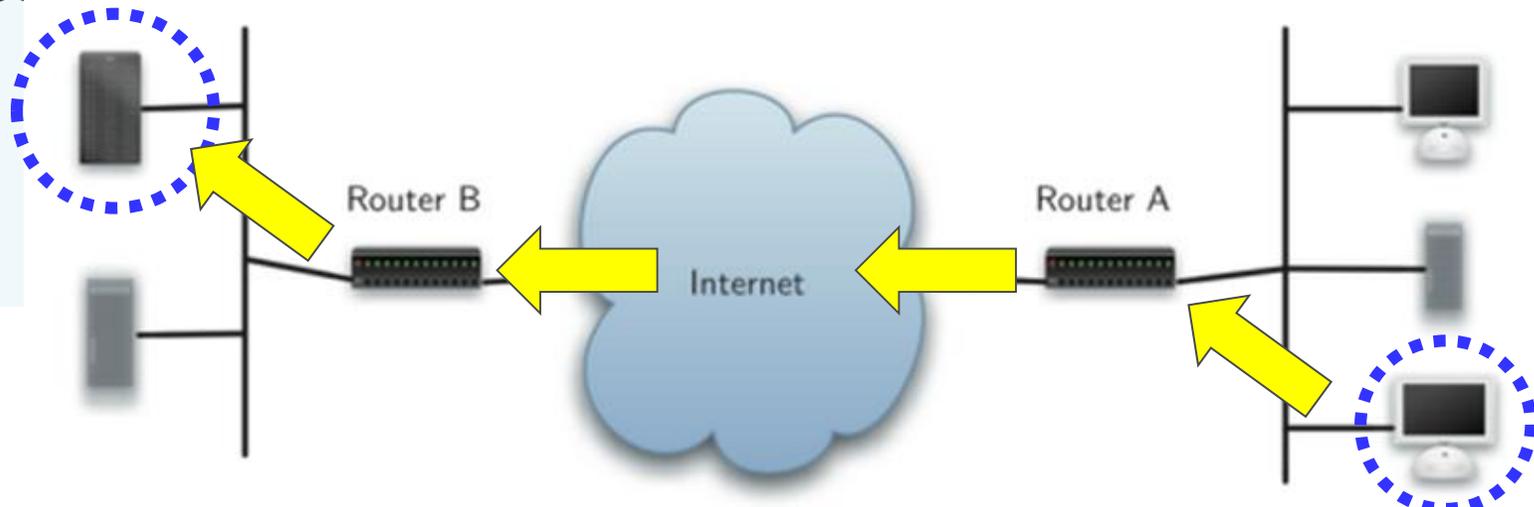


最短路径问题：介绍

当我们通过网络浏览网页、发送电子邮件、QQ消息传输的时候，数据会在联网设备之间流动，计算机网络专业领域会详尽地研究网络各层面上的技术细节

我们对Internet工作方式感兴趣的主要是其中包含的图算法

如图，当PC上的浏览器向服务器请求一个网页时，请求信息需要先通过本地局域网，由路由器A发送到Internet，请求信息沿着Internet中的众多路由器传播，最后到达服务器本地局域网所属的路由器B，从而传给服务器。



最短路径问题：介绍

图中标注“Internet”的云状结构，实际上是一个由路由器连接成的网络，这些路由器各自独立而又协同工作，负责将信息从Internet的一端传送到另一端。

我们可以通过“traceroute”命令来跟踪信息传送的路径（由于某种原因，北大校园网某些部分关闭了路由追踪，无法正常使用本命令），我们来看看从Luther College的web服务器到University of Minnesota的mail服务器之间的一条路由器路径，包含了13个路由器。

- 由于网络流量的状况会影响
- 路径选择算法，在不同的时
- 间，路径可能不同。

```
1 192.203.196.1
2 hilda.luther.edu (216.159.75.1)
3 ICN-Luther-Ether.icn.state.ia.us (207.165.237.137)
4 ICN-ISP-1.icn.state.ia.us (209.56.255.1)
5 p3-0.hsa1.chi1.bbnplanet.net (4.24.202.13)
6 ae-1-54.bbr2.Chicago1.Level3.net (4.68.101.97)
7 so-3-0-0.mpls2.Minneapolis1.Level3.net (64.159.4.214)
8 ge-3-0.hsa2.Minneapolis1.Level3.net (4.68.112.18)
9 p1-0.minnesota.bbnplanet.net (4.24.226.74)
10 TelecomB-BR-01-V4002.ggnet.umn.edu (192.42.152.37)
11 TelecomB-BN-01-Vlan-3000.ggnet.umn.edu (128.101.58.1)
12 TelecomB-CN-01-Vlan-710.ggnet.umn.edu (128.101.80.158)
13 baldrick.cs.umn.edu (128.101.80.129)(N!) 88.631 ms (N!)
```

最短路径问题：介绍

所以我们可以将互联网路由器体系表示为一个带权边的图

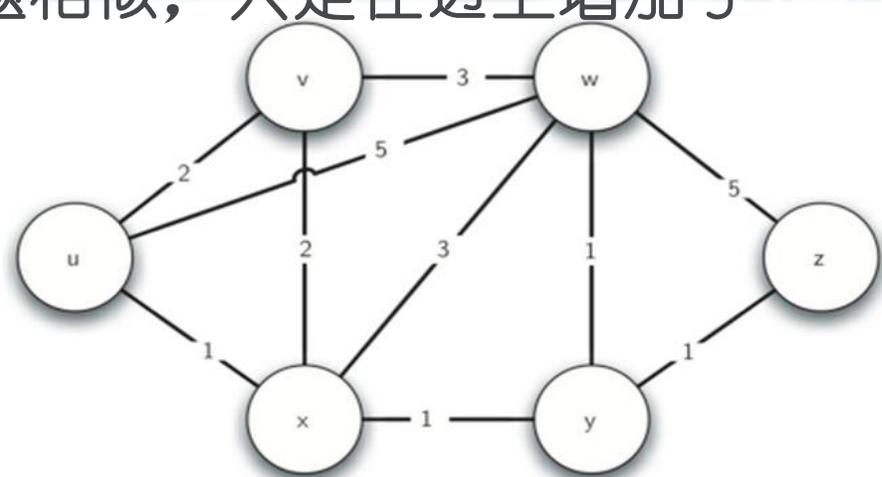
路由器作为顶点，路由器之间的网络连接作为边

权重可以包括网络连接的速度、网络负载程度、分时段优先级等影响因素

作为一个抽象，我们把所有影响因素合成为单一的权重

解决信息在路由器网络中选择传播速度最快路径的问题，就转变为在带权图上最短路径的问题。

这个问题与广度优先搜索BFS算法解决的词梯问题相似，只是在边上增加了权重（如果所有权重相等，还是还原到词梯问题）



最短路径问题：Dijkstra算法

/ˈdɛɪkstrə
/

数据结构与算法 (Python)

解决带权最短路径问题的经典算法是以发明者命名的“Dijkstra算法”，这是一个迭代算法，得出从一个顶点到其余所有顶点的最短路径，很接近于广度优先搜索算法BFS的结果。

具体实现上，在顶点Vertex类中的成员`dist`用于记录从开始顶点到本顶点的最短带权路径长度（**权重之和**），算法对图中的每个顶点迭代一次。

顶点的访问次序由一个**优先队列**Priority Queue来控制，优先队列中作为优先级的是顶点的`dist`属性。

最初，只有开始顶点`dist`设为0，而其他所有顶点`dist`设为`sys.maxsize`（最大整数），全部加入优先队列。

随着开始顶点率先出队，并计算它与邻接顶点的权重，会引起其它顶点`dist`的减小和修改，引起堆重排，并据此依次出队。

最短路径问题：Dijkstra算法代码

对所有顶点建堆，
形成优先队列

优先队列出队

修改出队顶点所邻
接顶点的dist，并逐
个重排队列

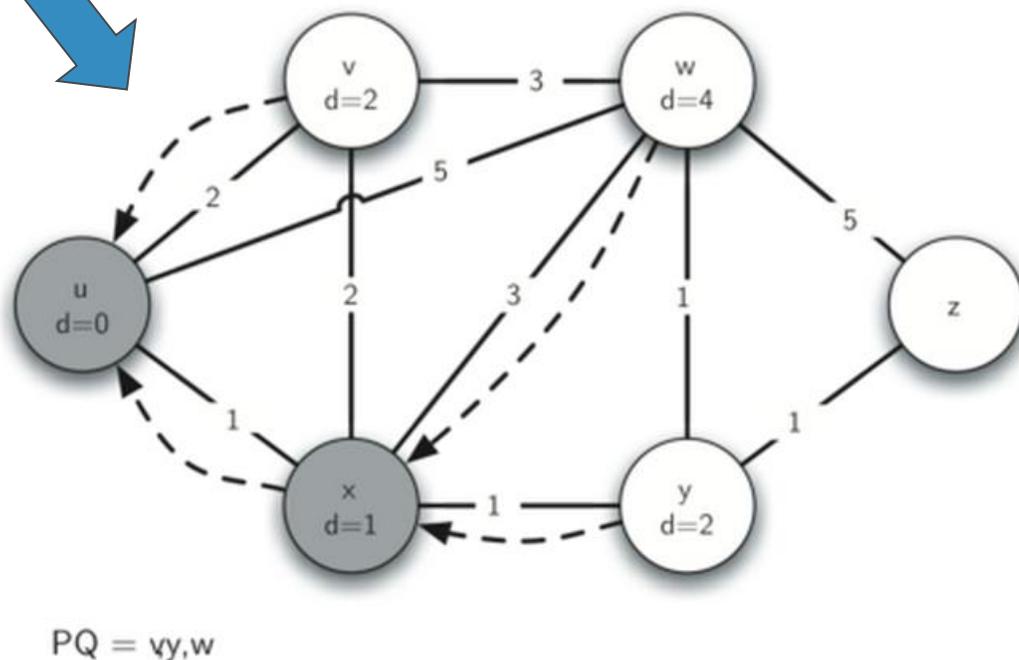
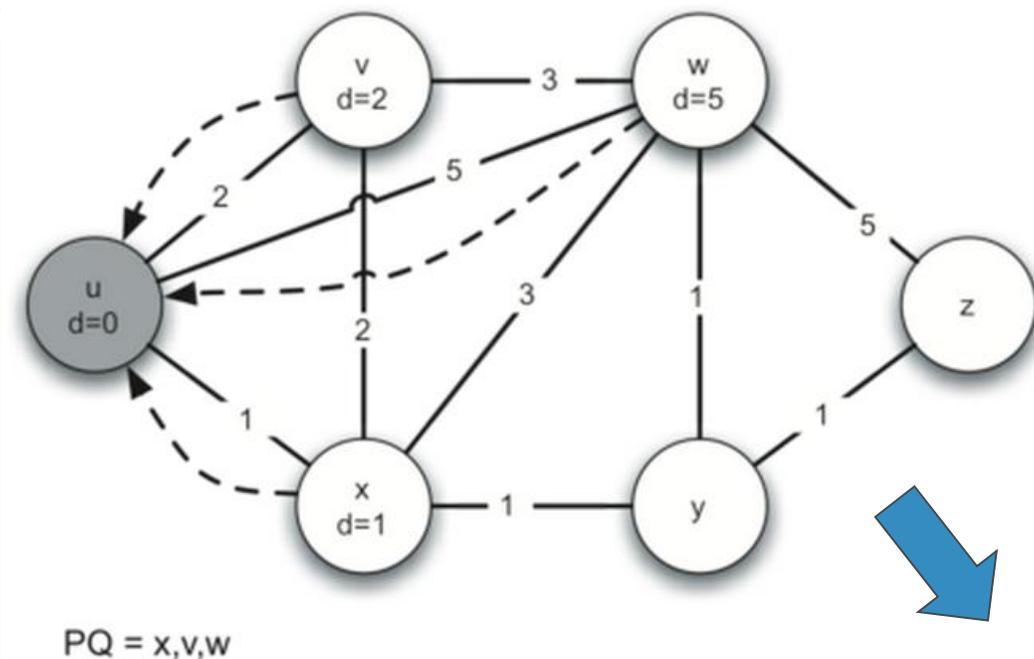
重
排
队
列

```
from pythonds.graphs import PriorityQueue, Graph, Vertex
def dijkstra(aGraph, start):
    pq = PriorityQueue()
    start.setDistance(0)
    pq.buildHeap([(v.getDistance(), v) for v in aGraph])
    while not pq.isEmpty():
        currentVert = pq.delMin()
        for nextVert in currentVert.getConnections():
            newDist = currentVert.getDistance() \
                + currentVert.getWeight(nextVert)
            if newDist < nextVert.getDistance():
                nextVert.setDistance(newDist)
                nextVert.setPred(currentVert)
                pq.decreaseKey(nextVert, newDist)
```

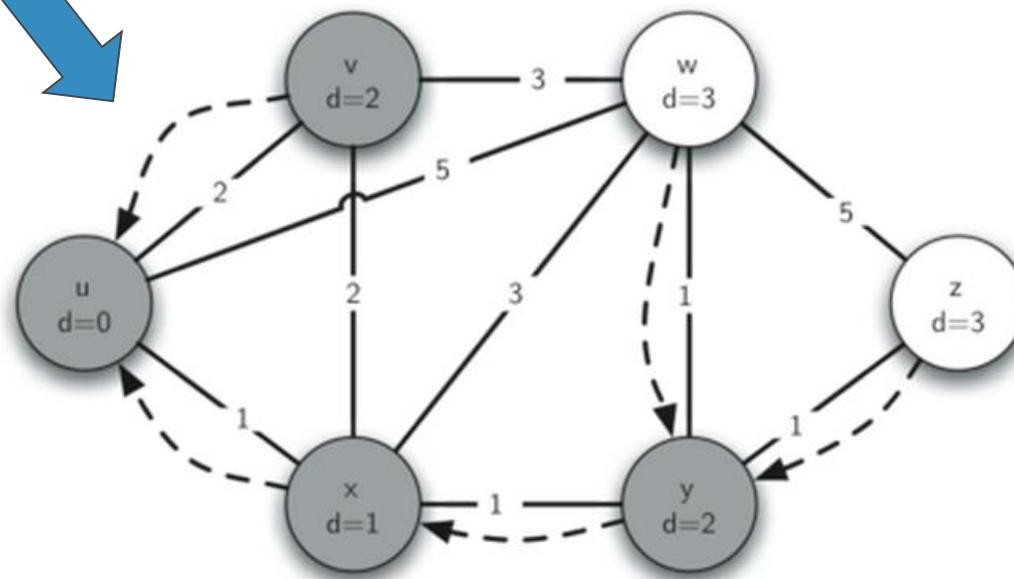
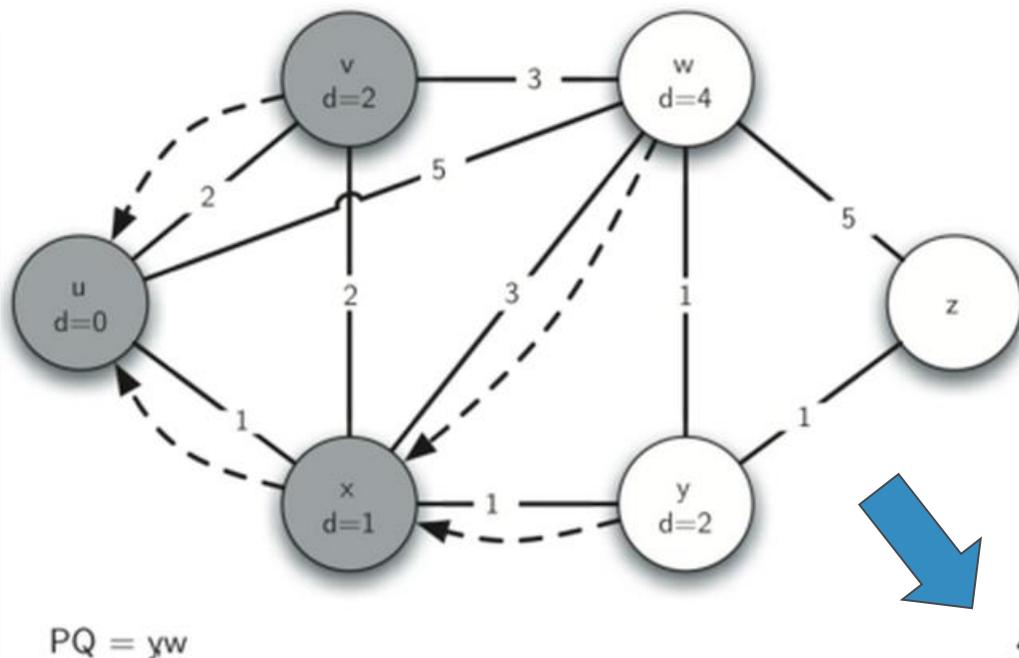
BFS对比

```
def bfs(g, start):
    start.setDistance(0)
    start.setPred(None)
    vertQueue = Queue()
    vertQueue.enqueue(start)
    while (vertQueue.size() > 0):
        currentVert = vertQueue.dequeue()
        for nbr in currentVert.getConnections():
            if (nbr.getColor() == 'white'):
                nbr.setColor('gray')
                nbr.setDistance(currentVert.getDistance() + 1)
                nbr.setPred(currentVert)
                vertQueue.enqueue(nbr)
        currentVert.setColor('black')
```

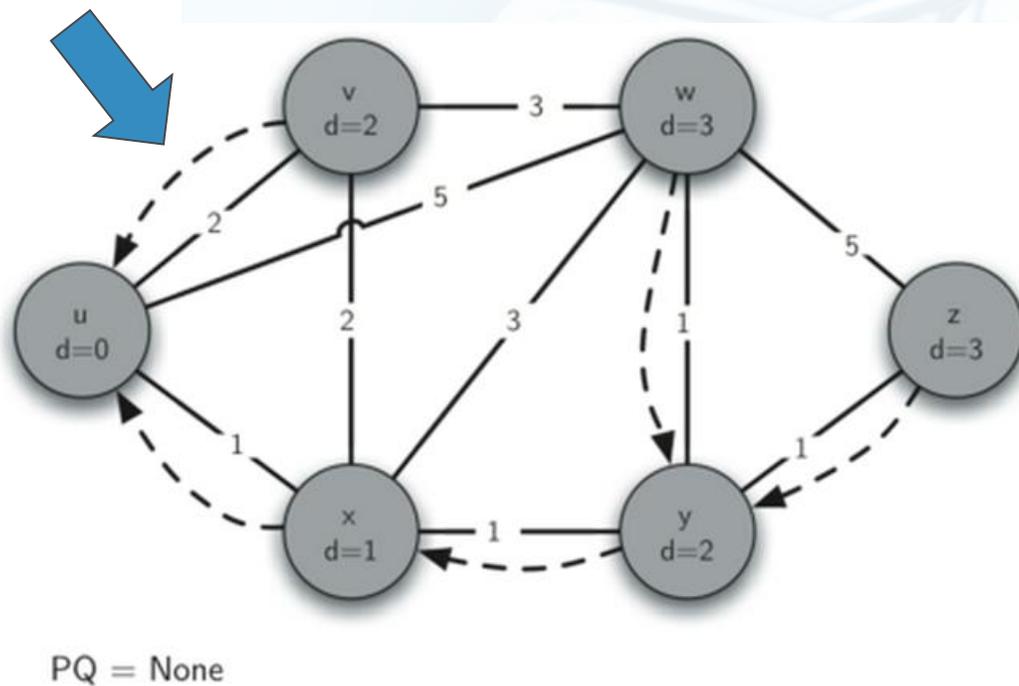
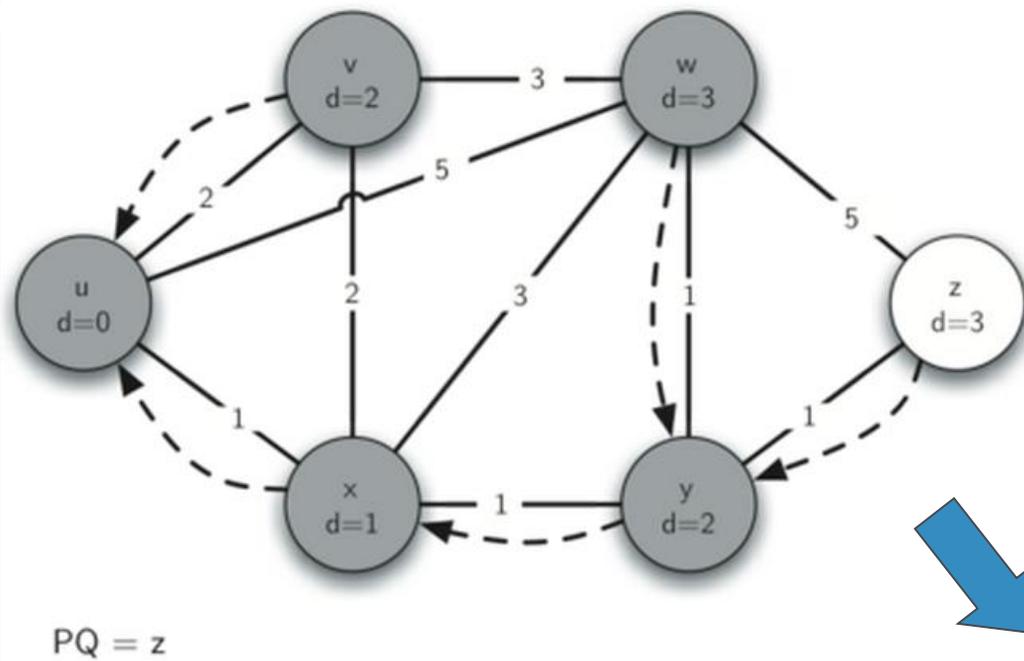
最短路径问题：Dijkstra算法实例



最短路径问题：Dijkstra算法实例



最短路径问题：Dijkstra算法实例



最短路径问题：Dijkstra算法

需要注意的是，Dijkstra算法只能处理大于0的权重，如果图中出现负数权重，则算法会陷入无限循环

虽然Dijkstra算法完美解决了带权图的最短路径问题，但实际上Internet的路由器中采用的是其它算法 (☺)

其中最重要的原因是，Dijkstra算法需要具备整个图的数据，但对于Internet的路由器来说，显然无法将整个Internet所有路由器及其连接信息保存在本地，这不仅是数据量的问题，Internet动态变化的特性也使得保存全图缺乏现实性。

路由器的选径算法（或“路由算法”）对于互联网极其重要，有兴趣可以进一步参考“距离向量路由算法”。

<http://baike.baidu.com/view/1227645.htm>

最短路径问题：Dijkstra算法分析

最后，我们对Dijkstra算法的运行时间进行分析

首先，将所有顶点加入优先队列并**建堆**，时间复杂度为 $O(|V|)$

其次，每个顶点仅出队1次，每次**delMin**花费 $O(\log|V|)$ ，一共就是 $O(|V|\log|V|)$

另外，每个边关联到的顶点会做一次**decreaseKey**操作 ($O(\log|V|)$)，一共是 $O(|E|\log|V|)$

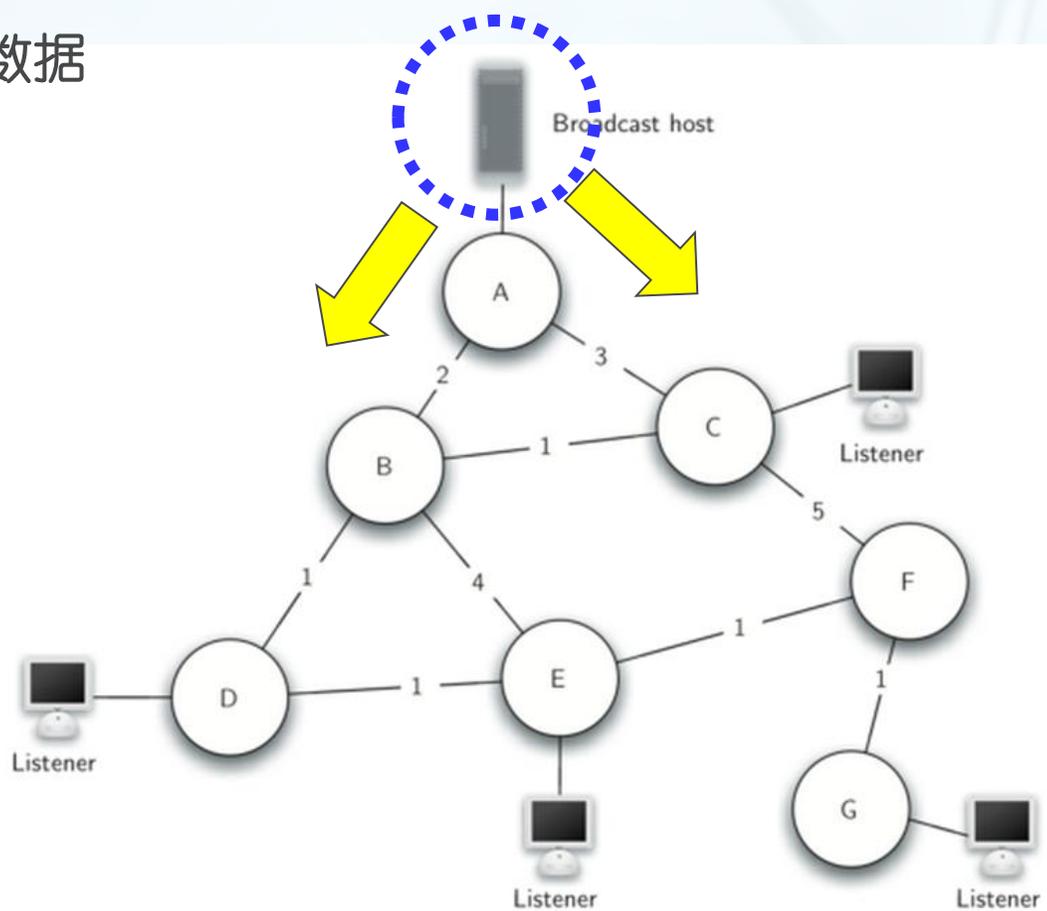
三个加在一起，数量级就是 $O((|V|+|E|)\log|V|)$

最小生成树

最后一个图算法，涉及到在互联网中网游设计者和Internet收音机所面临的问题：信息广播问题

网游需要让所有玩家获知其他玩家所在的位置

收音机则需要让所有收听用户获取直播的音频数据



信息广播问题：单播解法

数据科学入门 (Python)

信息广播问题最简单的解法是由广播源维护一个收听者的列表，将每条消息向每个收听者发送一次

如图，每条消息会被发送4次，每个消息都采用最短路径算法到达收听者

路由器A会处理4次相同消息；

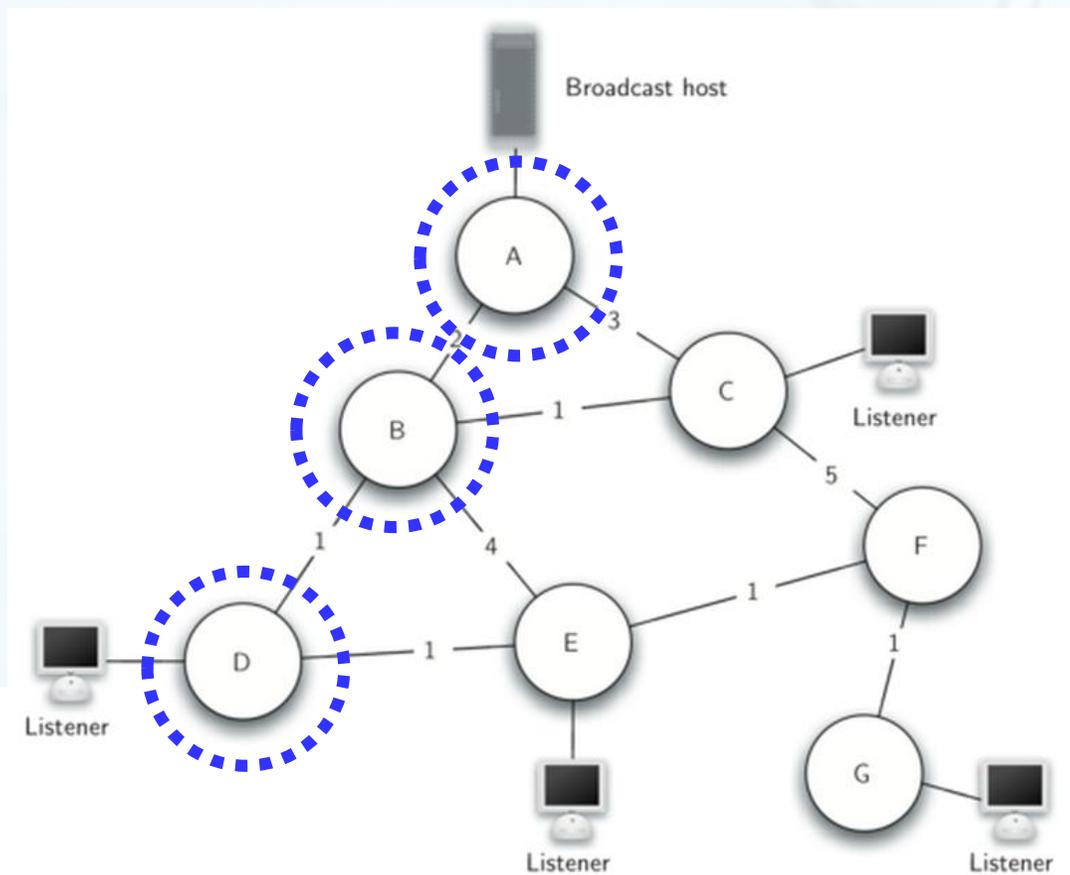
路由器C仅会处理1次；

而路由器B/D位于其它3个

收听者的最短路径上，则

各会处理转发3次相同消息；

所以，会产生许许多多额外流量



信息广播问题：洪水解法

信息广播问题的暴力解法，是将每条消息在路由器间散布出去，所有的路由器都将收到的消息转发到自己相邻的路由器和收听者

显然，如果没有任何限制，这个方法将造成网络洪水灾难，很多路由器和收听者会不断重复收到相同的消息，永不停止！

所以，洪水解法还会给每条消息附加一个生命值 (TTL:Time To Live)，初始设置为从消息源到最远的收听者的距离；

- 每个路由器收到一条消息，如果其TTL值大于0，则将TTL减少1，再转发出去。如果TTL等于0了，则就直接抛弃这个消息。

- TTL的设置防止了灾难发生，但这种洪水解法显然比前述的单播方法所产生的流量还要大。

信息广播问题：最小生成树

数据科学入门 (Python)

信息广播问题的最优解法，依赖于路由器关系图上选取具有最小权重的生成树 (minimum weight spanning tree)

生成树：拥有图中所有的顶点和最少数量的边，以保持连通的子图。

图 $G(V, E)$ 的最小生成树 T ，定义为包含所有顶点 V ，以及 E 的无圈子集，并且边权重之和最小。

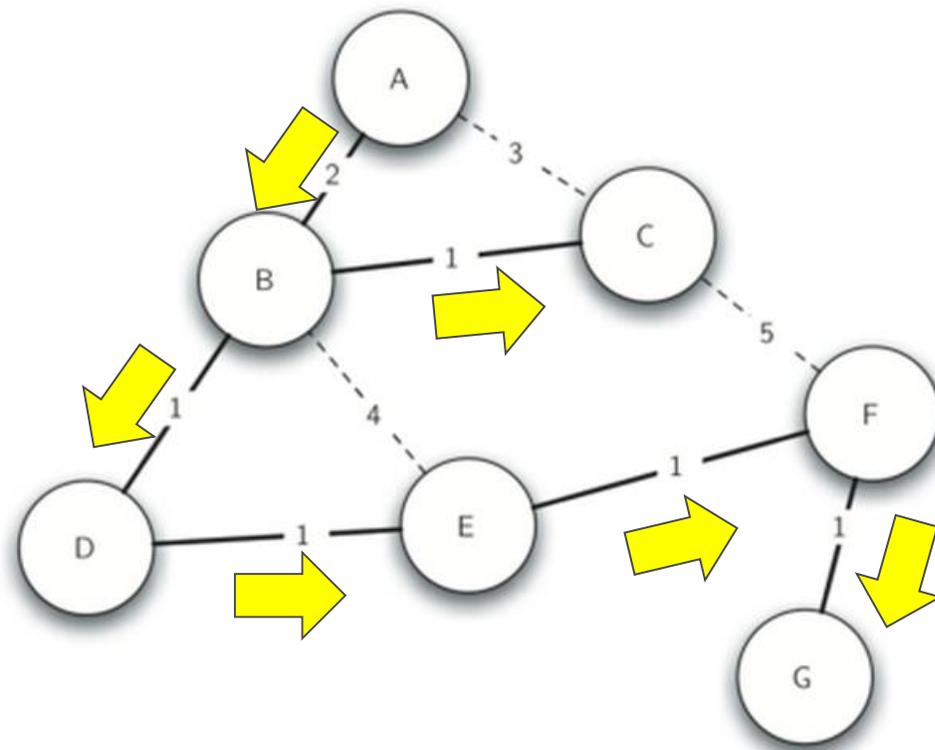
图为一个最小生成树

这样信息广播就只需要从A开始

沿着树的路径层次向下传播

就可以达到每个路由器只需要

处理1次消息，同时总费用最小。



最小生成树：Prim算法

解决最小生成树问题的Prim算法，属于“贪心算法”，即每步都沿着最小权重的边向前搜索。

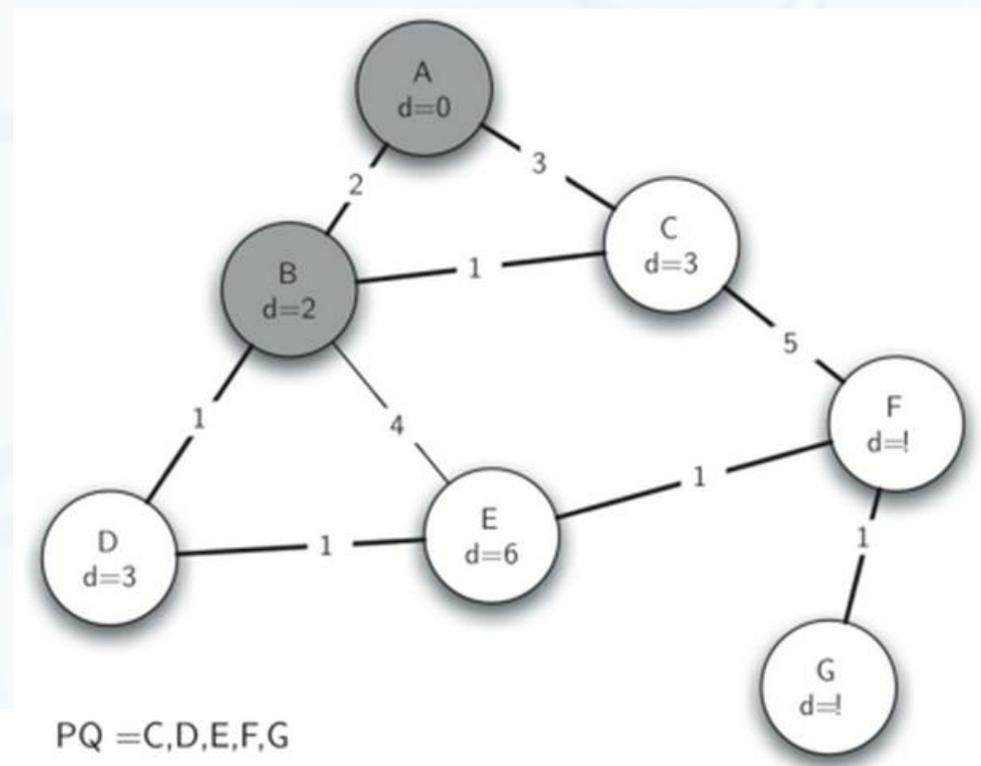
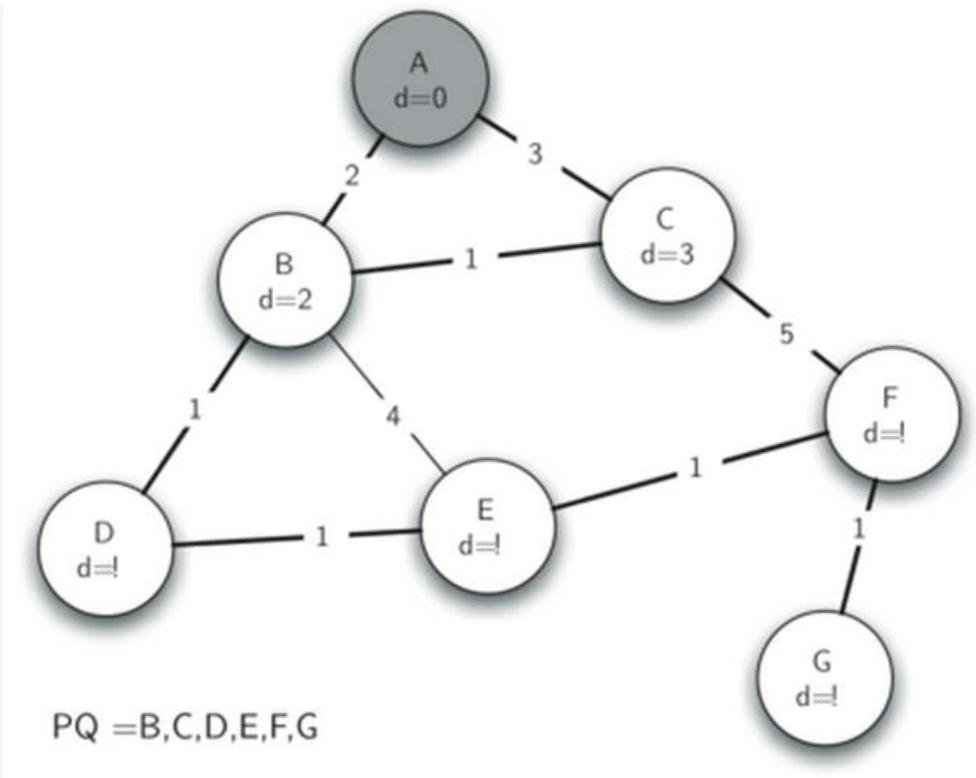
构造生成树的思路如下：

如果T还不是生成树，则反复做：

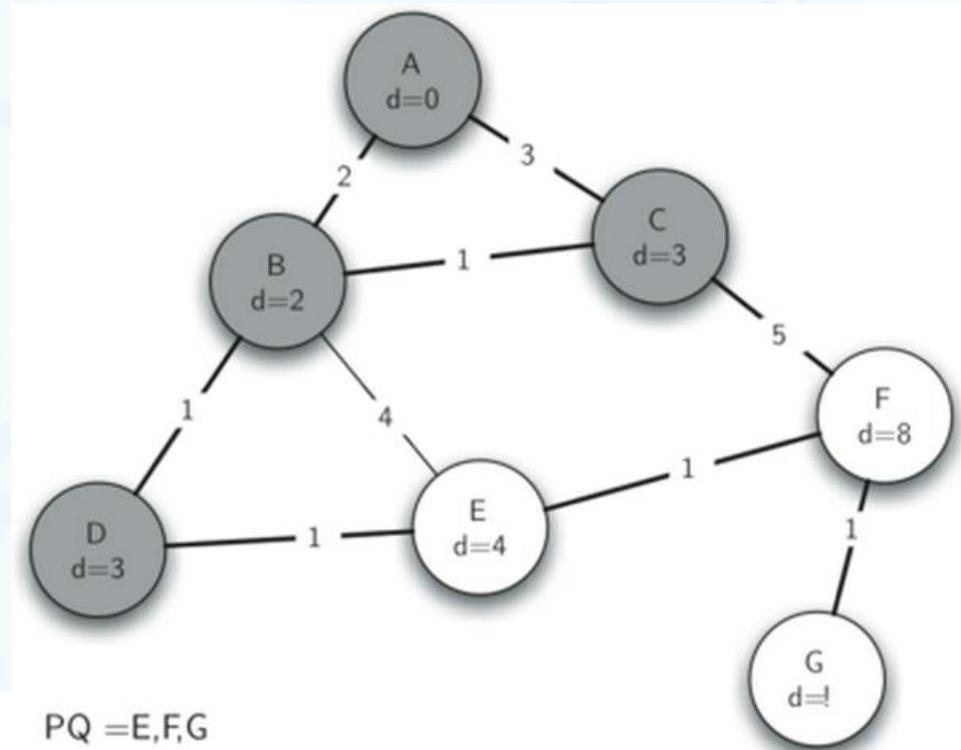
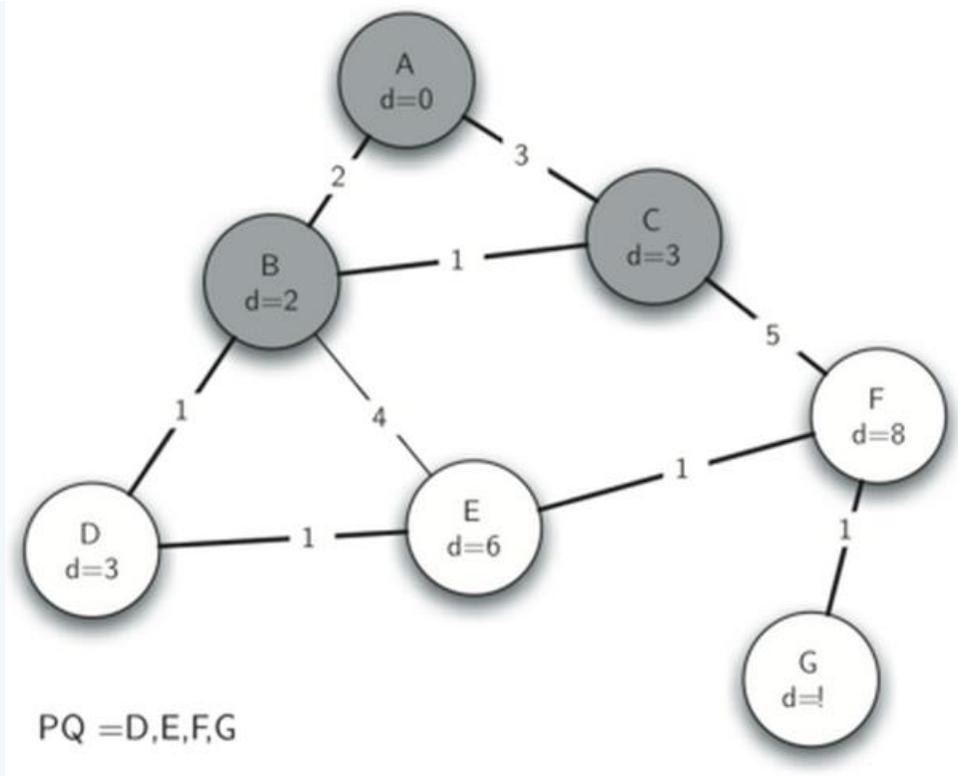
- 找到一条可以安全添加到树T的边
- 将边添加到树T

“**可以安全添加**”的边，定义为一端顶点在树中，另一端不在树中的边，以便保持树的无圈特性

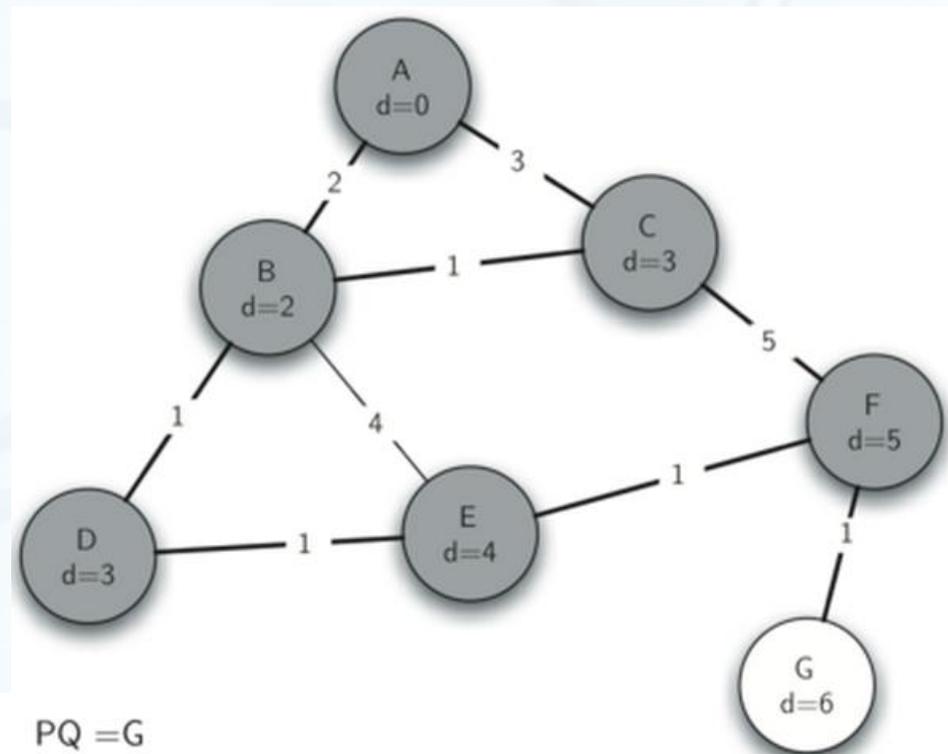
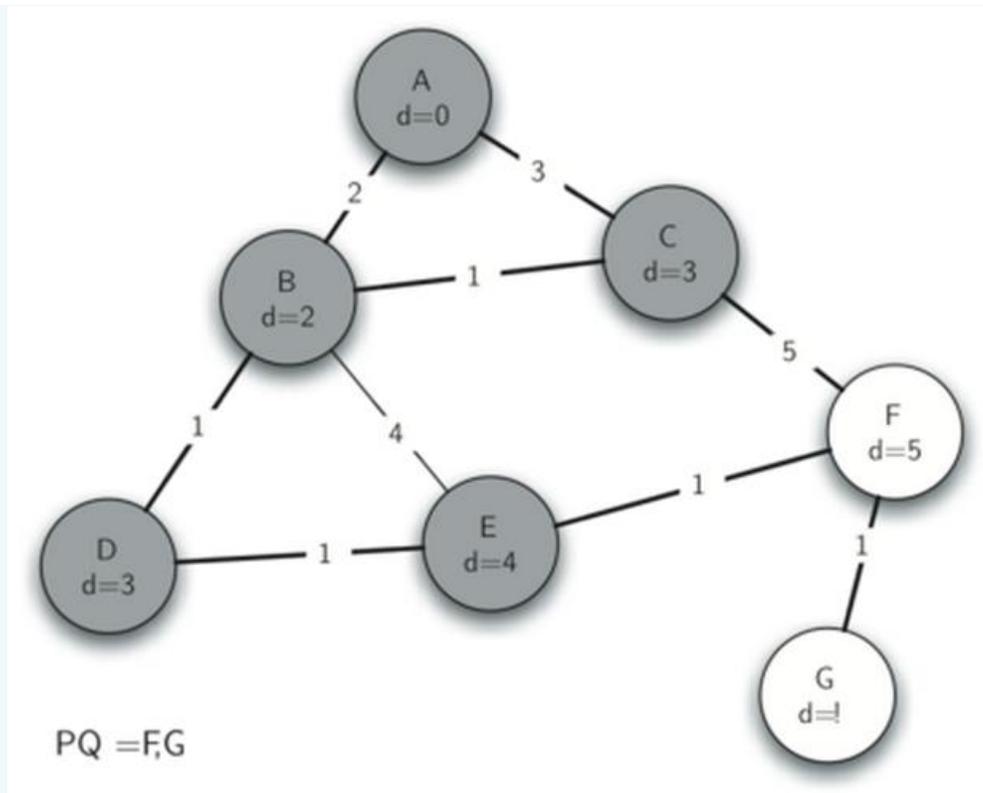
最小生成树：prim算法示例



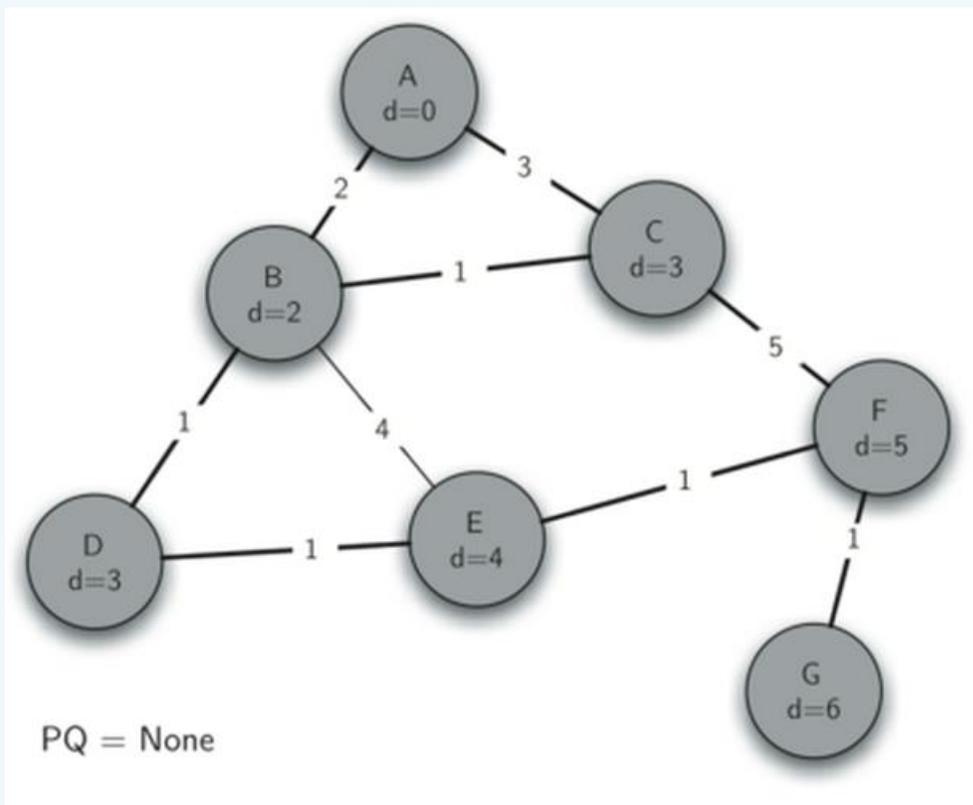
最小生成树：prim算法示例



最小生成树：prim算法示例



最小生成树：prim算法示例

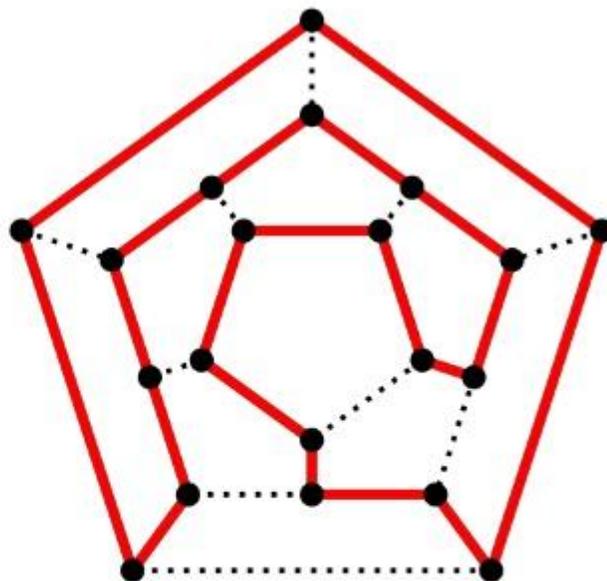


一些经典NPC的图问题

- Hamiltonian path problem (哈密顿回路问题)
- Traveling salesman problem (旅行商问题)
- Subgraph isomorphism problem (子图同构问题)
- Clique problem (团集问题)
- Vertex cover problem (dominating set) (顶点覆盖问题)
- Graph Coloring Problem (图着色问题)

哈密顿路径问题

A **Hamiltonian path** (or **traceable path**) is a path in an undirected graph which visits each vertex exactly once. A **Hamiltonian cycle** (or **Hamiltonian circuit**) is a cycle in an undirected graph which visits each vertex exactly once and also returns to the starting vertex. Determining whether such paths and cycles exist in graphs is the Hamiltonian path problem which is NP-complete.

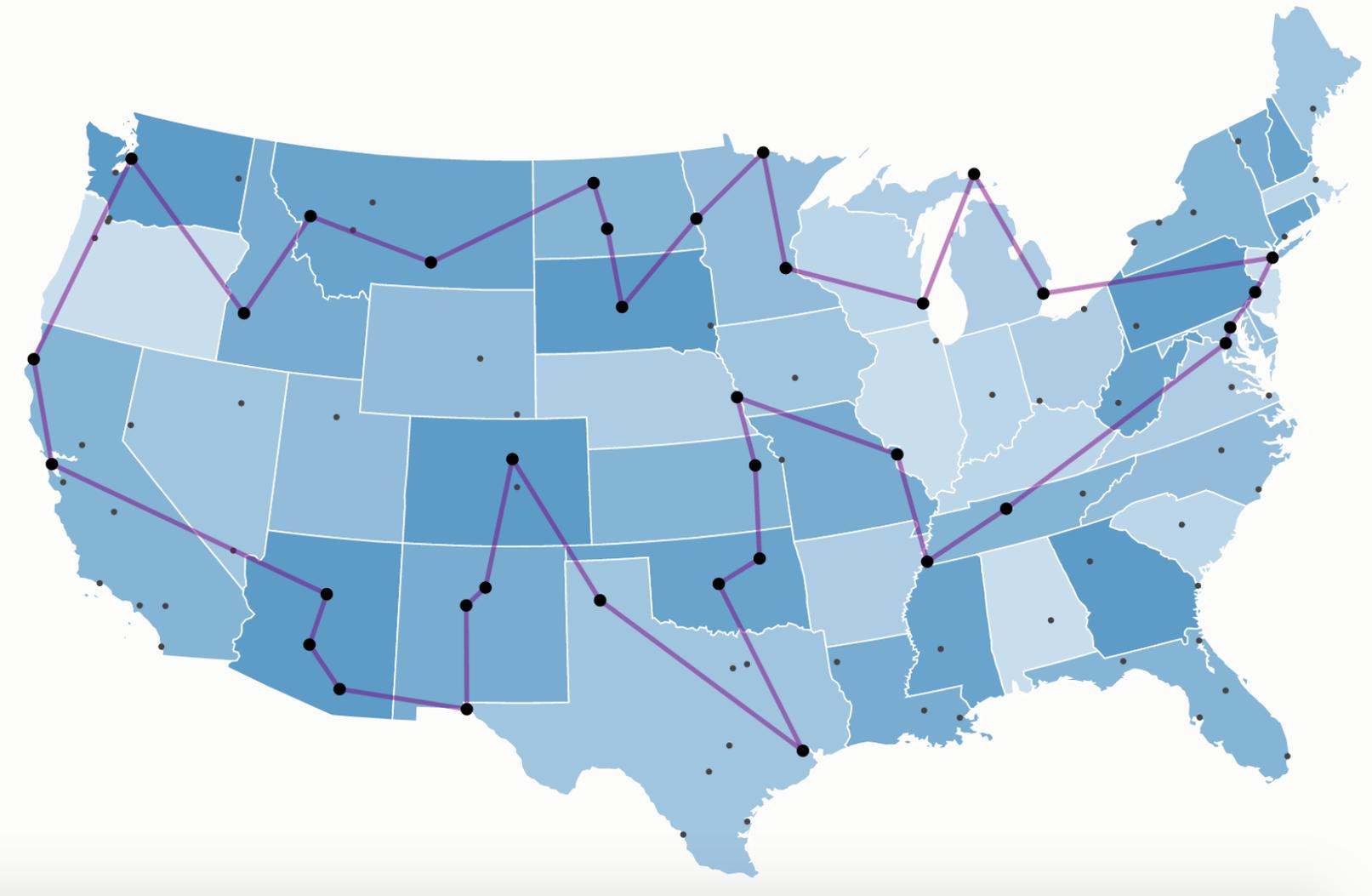


A graph representing the vertices, edges, and faces of a dodecahedron, with a Hamiltonian cycle shown by red color edges.

7

NP problem can not be solved in polynomial time.

Traveling Salesman Problem

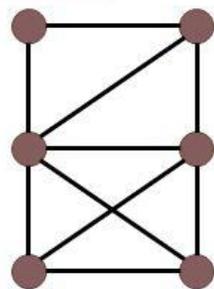


Subgraph isomorphism problem

Subgraph Isomorphism Problem

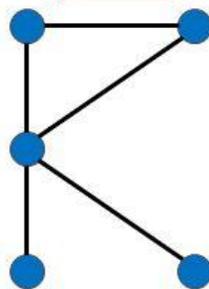
- **Input:** Two graphs $G=(V_G, E_G)$ and $H=(V_H, E_H)$
 - $|V_H| \leq |V_G|$ and $|E_H| \leq |E_G|$
- **Question:** Is H a subgraph isomorphic to G ?
 - Is there an injective map f from V_H to V_G
 - $\{f(u), f(v)\} \in E_G$ holds for any $\{u, v\} \in E_H$

Example



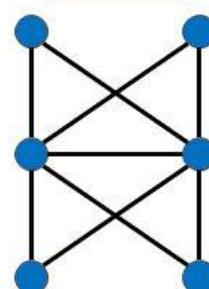
Graph G

Yes



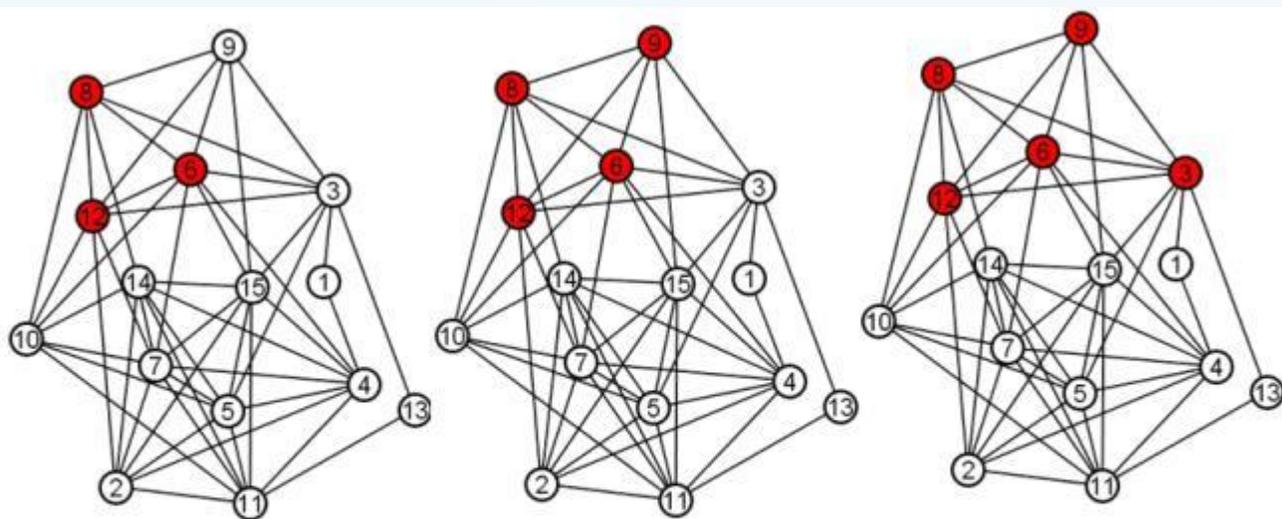
Graph H_1

No



Graph H_2

Clique problem

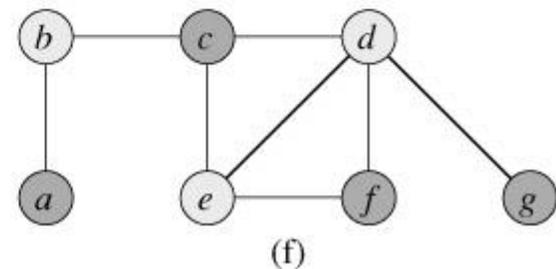
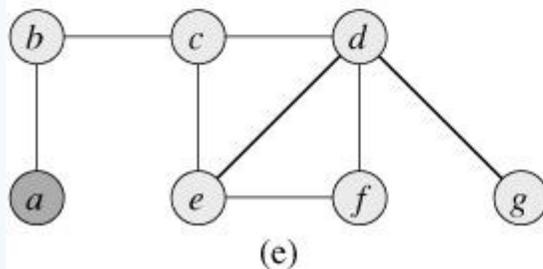
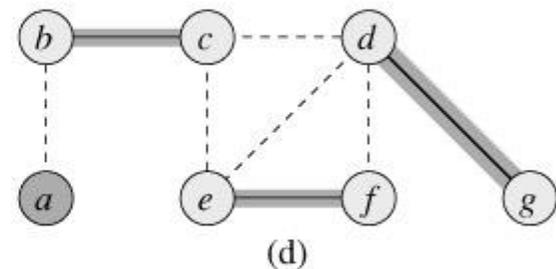
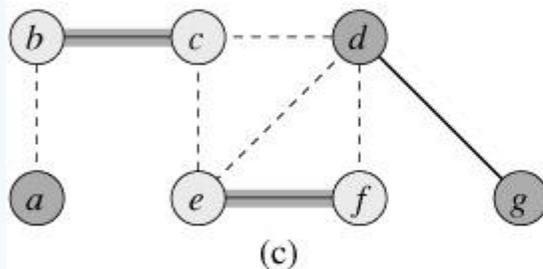
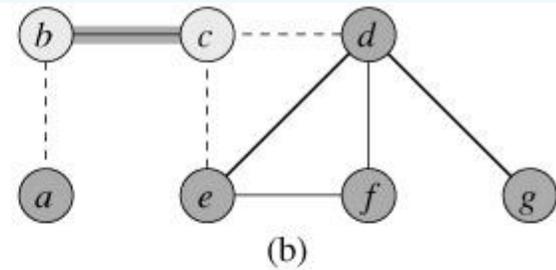
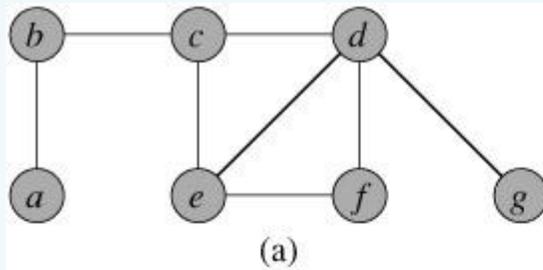
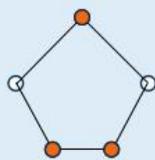


You can find a maximal clique by starting with a small clique (at left) and repeatedly adding another node so that the selected set of nodes is still a clique. The procedure stops when all nodes are selected or there is no way to add another node without violating the complete connectedness of the existing clique. Note that the final result in the above example is not the largest possible clique in the graph.

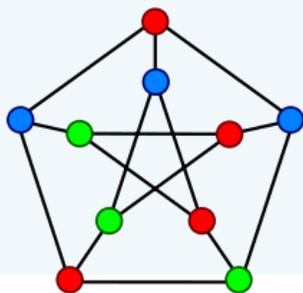
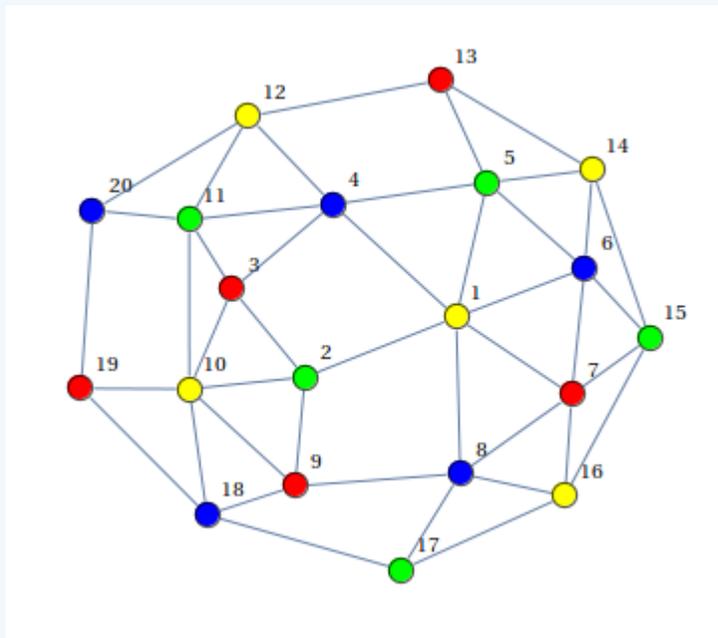
Vertex cover problem

Vertex Cover Problem

Problem: Given graph $G = (V, E)$, find *smallest* $V' \subseteq V$ s. t. if $(u, v) \in E$, then $u \in V'$ or $v \in V'$ or both.



Graph Coloring Problem



- 同一条边的两个端点不同颜色
- K -colorable, 最多用 k 个颜色
- 给定一张图, 其最小颜色数称为 chromatic number
- 最早的NPC问题

本章总结

本章我们学习了图抽象数据类型，以及若干实现方法

本章讨论了一些图的算法和应用

广度优先搜索算法BFS，解决无权图的最短路径问题；

带权图的Dijkstra算法；

图的深度优先搜索算法；

用于简化图的强连通分支算法；

用于关联任务排序的拓扑排序算法；

用于广播消息的最小生成树算法。

参考文献

从六度分隔到无尺度网络：

<http://www.socialbeta.com/articles/the-wisdom-of-sns-part-one.html>