

# **Polunhakualgoritmit ja -järjestelmät**

Rodion Efremov

Kandidaatintutkielma  
HELSINGIN YLIOPISTO  
Tietojenkäsittelytieteen laitos

Helsinki, 3. joulukuuta 2014

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Laitos — Institution — Department	
Matemaattis-luonnontieteellinen		Tietojenkäsittelytieteen laitos	
Tekijä — Författare — Author			
Rodion Efremov			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Polunhakualgoritmit ja -järjestelmät			
Oppiaine — Läroämne — Subject			
Tietojenkäsittelytiede			
Työn laji — Arbetets art — Level		Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidoantal — Number of pages
Kandidaatintutkielma		3. joulukuuta 2014	22
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Haettaessa lyhimpiä polkuja verkossa joudutaan väistämättä ottamaan kohdeverkon ominaisuuksia huomioon, mikäli halutaan suoriutua tehtävästä pienimmässä mahdollisessa ajassa. Toisinaan on mahdollista määritellä heuristiikkafunktio, ja siten käyttää A*-perheen algoritmeja; toisinaan tätä ei voida tehdä, ei ainakaan tehokkaasti, jolloin jäljelle jää kaksisuuntaisuus ja/tai verkon esiprosessointi haun nopeuttamiseksi. Tämän dokumentin tarkoituksena on siis antaa (hyvin suppea) katsaus asiaan liittyviin algoritmeihin ja järjestelmiin.</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
verkot, lyhimmat polut			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			

# Sisältö

<b>1 Johdanto</b>	<b>1</b>
<b>2 Tavallisimmat algoritmit</b>	<b>1</b>
2.1 Prioriteettijonon valinta . . . . .	3
<b>3 Kaksisuuntainen haku</b>	<b>5</b>
3.1 Kaksisuuntainen leveyssuuntainen haku . . . . .	5
3.2 Kaksisuuntainen Dijkstran algoritmi . . . . .	6
3.3 Kaksisuuntainen A* . . . . .	9
<b>4 Kaikkien parien lyhimät polut</b>	<b>11</b>
4.1 Floyd-Warshall -algoritmi . . . . .	11
4.2 Johnsonin algoritmi . . . . .	11
4.3 Soveltuvuus . . . . .	12
<b>5 Ruudukkoverkko ja jump point -haku</b>	<b>13</b>
<b>6 Dijkstran algoritmi kaarivivuilla</b>	<b>14</b>
6.1 Ositustekniikat . . . . .	14
6.2 Tulokset . . . . .	15
<b>7 Polunhaku ja Multiple Sequence Alignment -ongelma</b>	<b>15</b>
7.1 Ratkaisutekniikat . . . . .	17
<b>8 Lyhimät polut suunnatuissa syklittömissä verkoissa</b>	<b>17</b>
<b>9 Haku dynaamisilla verkoilla</b>	<b>19</b>
<b>10 Lyhimät polut ja rinnakkaisuus</b>	<b>20</b>
<b>11 Yhteenveto</b>	<b>20</b>
<b>Lähteet</b>	<b>20</b>

## 1 Johdanto

Polunhaku painotetuissa tai painottamattomissa verkoissa on perustavanlaatuisen ongelma, joka ei ole mielenkiintoinen vain itsessään, vaan myös tarvittavana alioperaationa muissa algoritmeissa. Esimerkiksi Edmond-Karpin algoritmi käyttää leveyssuuntaista hakua maksimivuo-ongelman ratkaisemiseksi [1]; multiple sequence alignment -ongelmaa on ruvettu viime vuosikymmeninä ratkomaan myös heuristisin polunhakualgoritmein.

Verkko  $G$  on pari  $(V, A)$ , jossa  $V$  on solmujen joukko ja  $A \subset V \times V$  on (suunnattujen) kaarien joukko. Suuntaamatonta verkkoa  $G' = (V, E)$  voidaan aina simuloida suunnatulla verkolla  $G = (V, A)$  siten, että jokaista suuntaamatonta kaarta  $\{u, v\} \in E$  kohti laitetaan  $A$ :han kaaret  $(u, v)$  ja  $(v, u)$ . (Suunnattu verkko on suuntaamattoman yleistys.) Polunhakua varten verkosta erotellaan kaksi solmua: lähtösolmu  $s$  ja maalisolmu  $t$ . Jatkossa,  $n = |V|$  ja  $m = |E|$ ; näin esimerkiksi leveyssuuntaisen haun aikavaativuus on  $\mathcal{O}(n+m)$ . Polku on  $\gamma_k = \langle u_0, u_1, \dots, u_k \rangle$ , missä mikään solmu ei esiinny yhtä kertaa enempää, ja verkossa on kaari  $(u_i, u_{i+1})$  jokaisella  $i = 0, 1, \dots, k-1$ . Polkuun liittyvä kustannus on sen kaarien painojen summa, ja mitä tulee itse painoihin, niiden oletetaan olevan ei-negatiivisia. Ei-painotettujen verkkojen kohdalla jokaisen kaaren paino oletetaan olevan 1. Suunatussa kaaressa  $(u, v)$   $u$  kutsutaan  $v$ :n vanhemmaksi ja  $v$   $u$ :n lapseksi.

## 2 Tavallisimmat algoritmit

Keskustellessa polunhakualgoritmeista paras etenemissuunta lienee yleisimmistä tekniikoista ad-hoc ratkaisuihin. Optimaalin polun haku on intuitiivisinta painottomissa verkoissa, joissa niinkin helppo algoritmi kuten leveyssuuntainen haku (Algoritmi 2) on riittävä. Algoritmi käyttää kaksi tietorakennetta: saavutettujen solmujen FIFO-jonon (engl. *first-in, first-out*) ja hajautustaulun  $\pi: V \rightarrow V$ , joka assosioi jokaisen saavutetun solmun  $u$  kanssa se solmu  $v$ , josta haku on edennyt  $u$ :hun. Intuitio tämän takana on se, että leveyssuuntainen haun hakuavaruus etenee ”verkon taso” kerralla lähtien lähtösolmusta  $s$ , kunnes saavuttaa maalisolmun  $t$ , minkä jälkeen löydetty lyhin polku  $\langle s = \pi(\pi(\dots)), \pi(\pi(t)), \pi(t), t \rangle$  voidaan rakentaa rutiinilla TRACEBACK-PATH (Algoritmi 1).

Mitä tulee painotettuihin verkkoihin Edsger W. Dijkstra esitti vuonna 1959 kuuluisan polunhakualgoritminsa, joka toimii polynomisessa ajassa [2]. Algoritmin voidaan katsoa yhdistävän ahneuden (engl. *greedy algorithm*), dynaamisen ohjelmoinnin ja inkrementaalisen lähestymistavan. Saatuaan lähtösolmun  $s$ , algoritmi laskee lyhimpien polkujen puun lähtien solmusta  $s$  kunnes  $t$  joutuu *avoimeen listaan* (engl. *open list; search frontier*), ja sitä kautta *suljettuun listaan* (engl. *closed list; settled node list*), jolloin lyhin  $s, t$ -polku on löytynyt. Hart et al. esittivät vuonna 1968 kuuluisan A\*-algoritminsa [4],

---

**Algoritmi 1:** TRACEBACK-PATH( $x, \pi, \pi_{REV}$ )

---

```
1  $u = x$ 
2  $p = \langle \rangle$ 
3 while  $u$  is not nil do
4    $p = \langle u \rangle \circ p$ 
5    $u = \pi(u)$ 
   Kaksisuuntainen haku?
6 if  $\pi_{REV}$  is not nil then
7    $u = \pi_{REV}(x)$ 
8   while  $u$  is not nil do
9      $p = p \circ \langle u \rangle$ 
10     $u = \pi_{REV}(u)$ 
11 return  $p$ 
```

---

---

**Algoritmi 2:** BREADTH-FIRST-SEARCH( $G, s, t$ )

---

```
1  $Q = \langle s \rangle$ 
2  $\pi(s) = \text{nil}$ 
3 while  $|Q| > 0$  do
4    $u = \text{DEQUEUE}(Q)$ 
5   if  $u$  is  $t$  then
6     return TRACEBACK-PATH( $u, \pi, \text{nil}$ )
7   for  $(u, v) \in G.A$  do
8     if  $v$  is not yet mapped in  $\pi$  then
9        $\pi(v) = u$ 
10      ENQUEUE( $Q, v$ )
11 return  $\langle \rangle$ 
```

---

joka – samoin kuten Djikstran algoritmi – ylläpitää mm. kunkin saavutetun solmun  $u$   $g$ -arvon  $g(u)$ , joka on toistaiseksi pienin kustannus lähtösolmusta  $s$  solmuun  $u$ , ja joka on taattu olemaan pienin mahdollinen heti kun  $u$  poistuu avoimesta listasta. Erona on kuitenkin se, että A\* käyttää kunkin solmun  $u$  prioriteettinä sen  $f$ -arvoa, joka on  $f(u) = g(u) + h(u)$ , missä  $h(u)$  on solmun  $u$  optimistinen (eli aliarvioitu) etäisyys maalisolmuun. Heuristiikkafunktion optimistisuus on välttämätön, mikäli halutaan taattaa, että solmun  $t$  poistuesssa avoimesta listasta, vanhempainfunktio  $\pi$  antaa lyhimmän  $s, t$ -polun. Lisäksi, heuristiikkafunktio on *monotoninen*, jos jokaisella kaarella  $(u, v)$  on voimassa  $h(u) \leq w(u, v) + h(v)$ .

**Lause 1.** Jos heuristiikkafunktio  $h: V \rightarrow \mathbb{R}$  on monotoninen, se on myös optimistinen (engl. *admissible*).

*Todistus.* Olkoon solmut  $v, t \in V$  annettu. Nyt  $d(v, t)$  on lyhimmän polun  $\langle v_0 = v, v_1, \dots, v_k = t \rangle$  kustannus

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

Heuristiikkafunktion monotonisuuden nojalla

$$\begin{aligned} h(v) &= h(v_0) \\ &\leq w(v_0, v_1) + h(v_1) \\ &\leq w(v_0, v_1) + w(v_1, v_2) + h(v_2) \\ &\dots \\ &\leq \sum_{i=0}^{k-1} w(v_i, v_{i+1}) + h(v_k) \\ &= d(v_0, v_k) + h(v_k) \\ &= d(v, t) + h(t) \\ &= d(v, t), \end{aligned}$$

sillä  $h(t) = 0$ . □

Intuitio tämän järjestelyn takana on se, että  $A^*$  "tietää" mihin suuntaan haku on suunnattava, jota päästäisiin maalisolmuun, ainakin paremmin kuin Dijkstran algoritmi, jonka hakuavaruus kasvaa laajenevan pallon tavoin "kaikkiin suuntiin".  $A^*$ :n pseudokoodi on tasan sama kuin Dijkstran algoritmin (Algoritmi 3). Erotuksena riveillä 14 ja 18  $g(x)$ :n sijasta on  $f(x)$ , jolle siis  $f(x) = g(x) + h(x)$ . Molemmat kutsuvat TRACEBACK-PATH-rutiinin, joka muodostaa lyhimmän polun edeltäjäpuusta (engl. *predecessor tree*) ajassa  $\Theta(N)$ , missä  $N$  on lyhimmän polun solmujen määrä. On huomattava, että  $A^*$  palautuu Dijkstran algoritmiin määrittelemällä  $h(u) = 0$  jokaisella  $u \in V$ , sillä tuolloin  $f(x) = g(x)$ .

## 2.1 Prioriteettijonon valinta

Polkua haettaessa painotetussa verkossa joudutaan käyttämään prioriteettijonoja, jotka ovat tarpeellisia pitääkseen haut optimaaleina, ja joiden oletetaan tarjoavan ainakin seuraavat operaatiot:

1. INSERT( $H, x, k$ ) tallettaa solmun  $x$  sen prioriteettiavaimen  $k$  kera,
2. DECREASE-KEY( $H, x, k$ ) päivittää solmun  $x$  talletetun prioriteettiavaimen (pienemmäksi),
3. EXTRACT-MINIMUM( $H$ ) poistaa pienimmän prioriteetin omaava solmu,

---

**Algoritmi 3:** DIJKSTRA-SHORTEST-PATH( $G, s, t, w$ )

---

Monikkosijoitus

```
1 OPEN, CLOSED,  $g, \pi = (\{s\}, \emptyset, \{(s, 0)\}, \{(s, \text{nil})\})$ 
2 while |OPEN| > 0 do
3    $u = \text{EXTRACT-MINIMUM}(\text{OPEN})$ 
4   if  $u$  is  $t$  then
5     return TRACEBACK-PATH( $u, \pi, \text{nil}$ )
6   CLOSED = CLOSED  $\cup \{u\}$ 
   Jokaisella solmun  $u$  lapsisolmulla  $x$ , tee...
7   for  $(u, x) \in G.A$  do
8     if  $x \in \text{CLOSED}$  then
9       continue
10     $g' = g(u) + w(u, x)$ 
11    if  $x \notin \text{OPEN}$  then
12       $g(x) = g'$ 
13       $\pi(x) = u$ 
14      INSERT( $\text{OPEN}, x, g(x)$ )
15    else if  $g(x) > g'$  then
16       $g(x) = g'$ 
17       $\pi(x) = u$ 
18      DECREASE-KEY( $\text{OPEN}, x, g(x)$ )
   Ei  $s, t$  -polkua verkossa  $G$ .
19 return  $\langle \rangle$ 
```

---

4. MIN( $H$ ) palauttaa, muttei poista keosta solmun, jolla on pienin prioriteettiavain, ja
5. SIZE( $H$ ) palauttaa jonossa olevien alkioiden määrän.

Operaatiot (4) ja (5) voidaan aina toteuttaa siten, että ne toimivat vakioajassa. Helpoin prioriteettijonorakenne (jatkossa vain ”keko”), jonka operaatiot (1) - (3) käyvät logaritmisessa ajassa, on binäärikeko. Tällaisella keolla Dijkstran ja A\*-algoritmit käyvät kumpikin ajassa  $\mathcal{O}((m + n) \log n)$ . Teoriassa edelläoleva ylläraja voidaan parantaa käyttämällä Fibonacci-kekoa, jonka lisäysoperaatio (1) käy eksaktissa vakioajassa, päivitysoperaatio (2) tasoitettussa vakioajassa, ja poisto-operaatio (3) tasoitettussa ajassa  $\mathcal{O}(\log n)$ , jolloin haut voidaan suorittaa ajassa  $\mathcal{O}(m + n \log n)$ . Huomaa, että kaikki tähän asti mainitut keot perustuvat vertailuihin, ja teoriassa enintään yksi operaatiosta INSERT tai EXTRACT-MINIMUM voi käydä eksaktissa tai tasoitettussa vakioajassa, ja toisen on käytävä ajassa  $\Omega(\log n)$ , koska muuten algoritmi 4 tällaisella keolla rikkoisi vertailuihin perustuvan lajittelemisen informaatioteoreettisen rajan, joka on  $\Omega(n \log n)$ .

Jos kuitenkin kaarien painot ovat kokonaislukuja,  $\mathcal{O}(m + n \log n)$ -rajaa voidaan parantaa: Mikkel Thorup esitti vuonna 2003 keon, jonka poisto-operaatio käy ajassa  $\mathcal{O}(\log \log \min n)$  ja muut operaatiot vakioajassa [11]. Jos kuitenkin kokonaislukupainot ovat väliltä  $[0, N)$ , poisto-operaatio voidaan suorittaa ajassa  $\mathcal{O}(\log \log \min\{n, N\})$ . Nyt selvästi haun aikavaativuus tällaisella keolla on  $\mathcal{O}(m + n \log \log \min\{n, N\})$ . Lisäksi Dial on esittänyt liki triviaalin prioriteettijonon, joka soveltuu erityisesti kokonaislukuprioriteettiavaimiin väliltä  $[0, U]$ , missä  $U$  ei ole suuri (esimerkiksi alle 200), ja jonka lisäys- ja päivitysoperaatiot toimivat vakioajassa ja poisto-operaatio ajassa  $\mathcal{O}(U)$ , jolloin tällainen rakenne voi olla toivottava heuristisessa painotamattomassa haussa, kuten esimerkiksi  $(n^2 - 1)$ -palapelissä (engl. *8-puzzle*, *15-puzzle*, ...).

### 3 Kaksisuuntainen haku

Vaikka  $A^*$  on tyypillisesti tehokkaampi kuin Dijkstran algoritmi, käyttämällä *kaksisuuntaista* hakua, voidaan päästää verrattavissa olevaan suorituskykyyn. Ajatus kaksisuuntaisuuden takana on se, että algoritmi kasvattaa kaksi hakupuuta: yhden normaaliin tapaan ja toisen maalisolmusta ihan kuin kaaret olisi ”käännetty” päinvastaiseen suuntaan, kunnes kaksi hakuavaruutta ”kohtaavat” keskellä. Nyt jos lyhin polku koostuu  $N$  kaaresta, ja verkon solmujen keskiarvoinen aste on  $d$ , tavallinen, eli yksisuuntainen haku vaatii ajan

$$\sum_{i=0}^N d^i,$$

kun kaksisuuntainen vaatii

$$2 \sum_{i=0}^{\lceil N/2 \rceil} d^i.$$

Ylläoleva pätee leveyssuuntaiseen hakuun sellaisenaan, ja painotetun haun kohdalla voidaan saada yläraja kertomalla kunkin summan termin tekijällä  $\mathcal{O}(\log n)$ , joka liittyy algoritmien käyttämään prioritetijonon operaatioihin.

#### 3.1 Kaksisuuntainen leveyssuuntainen haku

Leveyssuuntainen haku hyötyy kaksisuuntaisuudesta, vaikka toteutus vaatii kuusi erilaista tietorakennetta: kaksi FIFO-jonoa  $Q$  ja  $Q_{REV}$  (kumpikin on riittävä mallintamaan prioriteettijonoja painottomassa haussa). Lisäksi tarvitaan edeltäjäkuvaukset kumpaakin hakusuuntaa varten:  $\pi$  ja  $\pi_{REV}$ . Etäisyyskuvauksien  $d$  ja  $d_{REV}$  rooli on analoginen Dijkstran algoritmin  $g$ -kuvauksen kanssa:  $d(u)$  on lyhimmän  $s, u$ -polun kaarien määrä (ja siten myös kustannus) ja  $d_{REV}(u)$  on lyhimmän  $u, t$ -polun kustannus. Aina kun tiedyssä hakusuunnassa poistetaan jonosta solmu  $x$ , tarkistetaan joko vastakkaisen



hakusuunnan kuvauksissa on kuvaus solmulle  $x$ . Jos asia on niin, on löydetty välisolmu, johon molemmat hakusuunnat ovat edenneet, ja jos edellä mainittu  $x$ , jonka implikoima polun kustannus on  $d(x) + d_{REV}(x)$ , parantaa toistaiseksi parhaan tunnetun polun kustannuksen  $\mu$ ,  $x$  talletetaan välisolmuksi  $m$ , josta myöhemmin rutiini TRACEBACK-PATH (Algoritmi 1) pystyy muodostomaan lyhimmän polun. Yksi mahdollinen rajoite kaksisuuntaisen haun käyttöönotolle on se, että jos painottamattomassa verkossa on useampi lyhin polku, kaksisuuntainen versio ei välttämättä löydä samaa polkua kuten tavallinen. Tämä saattaa olla joissakin sovelluksissa ongelmallista mikäli on tarvetta laajentaa kunkin jonosta poistetun solmun seuraajasolmut tietyssä järjestyksessä.

### 3.2 Kaksisuuntainen Dijkstran algoritmi

Ylläolevan analyysin nojalla, on selvä, että Dijkstran algoritmi hyötyy kaksisuuntaisuudesta, eikä edellytä minkäänlaista verkon esiprosessointia. Lisäksi, algoritmin vahvuutena suhteessa  $A^*$ :iin ei ole pelkästään verrattavissa oleva tehokkuus, vaan myös heuristiikkafunktion tarpeettomuus.  $\mu$  on toistaiseksi lyhimmän polun kustannus, joka suorituksen alussa on  $\infty$ . Kun algoritmi löytää toistaiseksi lyhimmän polun hakuavaruuksien kohdatessa, ”välisolmu”  $m$  ja sen implikoima kustannus  $\mu$  päivitetään. Haku jatkuu siihen asti, kunnes molempien avointen listojen minimialkioiden kustannusten summa on vähintään  $\mu$ .

Molemmat hakusuunnat käyttävät alirutiinin EXPAND, mutta eri parametrein: listat OPEN ja CLOSED kuuluvat saman suunnan dataan (suunta  $d$ ),  $CLOSED_2$  on vastakkaisen hakusuunnan  $\hat{d}$  suljettu lista,  $g, \pi$  ovat suunnan  $d$  kustannuskuvaus ja vanhempainkuvaus vastaavasti,  $m$  on toistaiseksi lyhimmän polun ”välisolmu”, jossa kaksi hakuavaruutta kohtasivat,  $\mu$  on  $m$ :n implikoiman polun kustannus,  $*$  on laajentumisoperaattori, jolle  $*(u)$  antaa solmun  $u$  seuraajasolmut, ja kuvaus  $w: A \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$  antaa kaarien painot. Parametrit otaksutaan tässä rutiinissa viiteparametreiksi, jolloin esimerkiksi  $\mu$  ja  $m$  ovat päivitettävissä.

Rutiini UPDATE tarkistaa, että yhden hakusuunnan solmu on toisen suljetussa listassa, ja jos asia on niin, yrittää päivittää välisolmun ja siihen liittyvän toistaiseksi pienimmän kustannuksen  $\mu$  ja se vaatii parametreikseen hakusuunnan  $d$  solmun  $x$ , suunnan  $\hat{d}$  CLOSED-listan, solmun  $x$   $g$ -arvo  $g_x$  suunnassa  $d$ , suunnan  $\hat{d}$   $g$ -kuvauksen, välisolmun  $m$  ja sen implikoiman kustannuksen  $\mu$ . Tämänkin apurutiinin kohdalla parametrit otaksutaan viiteparametreiksi, jolloin niiden päivittäminen rutiinissa on mahdollista.

Laajentumisoperaattoreina (engl. *expansion operator*) kaksisuuntaisessa haussa on määriteltävä funktiot  $e, e_{REV}: V \rightarrow \mathcal{P}(V)$ , joille  $e(u) = \{v \in V: (u, v) \in A\}$  ja  $e_{REV}(u) = \{v \in V: (v, u) \in A\}$ . Nyt siis  $e(u)$  antaa solmun  $u$  lapsisolmut, ja  $e_{REV}(u)$  sen vanhempainsolmut, jolloin  $e$  käytetään normaalissa ja  $e_{REV}$  käännetyssä haussa. Rutiini 8 määrittelee

---

**Algoritmi 4:** GENERIC-HEAP-SORT( $S, H$ )

---

Tyhjennä keko

```
1  $H = \emptyset$ 
2 for  $i = 1$  to  $|S|$  do
   $S[i]$  on itsensä prioriteetti.
3    $\text{INSERT}(H, S[i], S[i])$ 
4 for  $i = 1$  to  $|S|$  do
5    $S[i] = \text{EXTRACT-MINIMUM}(H)$ 
```

---

---

**Algoritmi 5:** BIDIRECTIONAL-BREADTH-FIRST-SEARCH( $G, s, t$ )

---

```
1  $Q, \pi, d = (\langle s \rangle, (s, \text{nil}), (s, 0))$ 
2  $Q_{REV}, \pi_{REV}, d_{REV} = (\langle t \rangle, (t, \text{nil}), (t, 0))$ 
3  $m, \mu = (\text{nil}, \infty)$ 
4 while  $|Q| > 0$  and  $|Q_{REV}| > 0$  do
5   if  $m$  is not nil and  $d(\text{HEAD}(Q)) + d_{REV}(\text{HEAD}(Q_{REV})) \geq \mu$ 
6     then
7        $\text{return TRACEBACK-PATH}(m, \pi, \pi_{REV})$ 
8    $u = \text{DEQUEUE}(Q)$ 
9   if  $u$  is mapped in  $\pi_{REV}$  and  $\mu > d(u) + d_{REV}(u)$  then
10      $\mu = d(u) + d_{REV}(u)$ 
11      $m = u$ 
12   for  $(u, v) \in G.A$  do
13     if  $v$  is not yet mapped in  $\pi$  then
14        $\pi(v) = u$ 
15        $d(v) = d(u) + 1$ 
16        $\text{ENQUEUE}(Q, v)$ 
17    $u = \text{DEQUEUE}(Q_{REV})$ 
18   if  $u$  is mapped in  $\pi$  and  $\mu > d(u) + d_{REV}(u)$  then
19      $\mu = d(u) + d_{REV}(u)$ 
20      $m = u$ 
21   for  $(v, u) \in G.A$  do
22     if  $v$  is not yet mapped in  $\pi_{REV}$  then
23        $\pi_{REV}(v) = u$ 
24        $d_{REV}(v) = d_{REV}(u) + 1$ 
25        $\text{ENQUEUE}(Q_{REV}, v)$ 
26 return  $\langle \rangle$ 
```

---

---

**Algoritmi 6:** EXPAND(OPEN, CLOSED, CLOSED<sub>2</sub>,  $g, g_2, \pi, \mu, m, *, w$ )

---

```
1  $u = \text{EXTRACT-MINIMUM}(\text{OPEN})$ 
2  $\text{CLOSED} = \text{CLOSED} \cup \{u\}$ 
3 for  $x \in *(u)$  do
4   if  $x \in \text{CLOSED}$  then
5     continue
6    $g' = g(u)$ 
7   if  $*$  is  $e_{REV}$  then
8     Käännetty haku.
9      $g' = g' + w(x, u)$ 
10  else
11    Normaali haku.
12     $g' = g' + w(u, x)$ 
13  if  $x \notin \text{OPEN}$  then
14     $g(x) = g'$ 
15     $\pi(x) = u$ 
16    INSERT(OPEN,  $x, g(x)$ )
17    UPDATE( $x, \text{CLOSED}_2, g(x), g_2, \mu, m$ )
18  else if  $g(x) > g'$  then
19     $g(x) = g'$ 
20     $\pi(x) = u$ 
21    DECREASE-KEY(OPEN,  $x, g(x)$ )
22    UPDATE( $x, \text{CLOSED}_2, g(x), g_2, \mu, m$ )
```

---

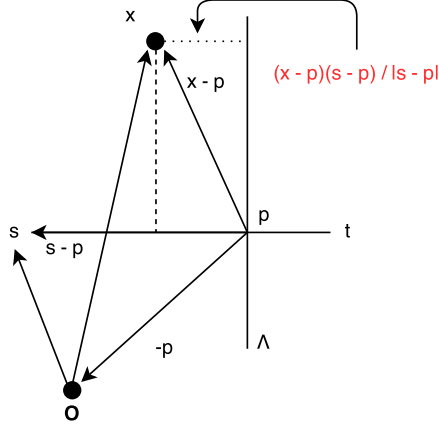
---

**Algoritmi 7:** UPDATE( $x, \text{CLOSED}, g_x, g, \mu, m$ )

---

```
1 if  $x \in \text{CLOSED}$  then
2    $p = g_x + g(x)$ 
3   if  $\mu > p$  then
4      $\mu = p$ 
5      $m = x$ 
```

---



Kuva 1:  $l(c(x))$

kaksisuuntaisen Dijkstran algoritmin pysähtymisehdon, joka on tarpeeksi vahva pitämään polut optimaaleina ja laskenta-ajan kohtuullisena.

### 3.3 Kaksisuuntainen $A^*$

Kaksisuuntaisen  $A^*$ :n saa aikaan muuttamalla algoritmin EXPAND (Algoritmi 6) riveillä 14 ja 19 esiintyvät  $g(x)$   $f(x)$ :ksi ja muuttamalla TERMINATE-rutiinin ehto seuraavanlaiseksi:

$$\max(f(\text{MIN}(\text{OPEN})), f_{REV}(\text{MIN}(\text{OPEN}_{REV}))) \geq \mu,$$

joka on siis Ira Pohlin vuonna 1971 ehdotetun BHPA-algoritminsa pysähtymisehto [8]. Yllä  $f_{REV}(u) = g_{REV}(u) + h_{REV}(u)$ , missä  $h_{REV}(u)$  antaa optimistisen arvion solmun  $u$  etäisyydestä lähtösolmusta  $s$ .

Vuonna 2007 Taeg-Keun Whangbo ehdotti toisenlaisen kaksisuuntaisen heuristisen hakualgoritmin [12], joka olettaa, että kullakin solmulla  $u$  on koordinaatit tasossa  $c(u) = (u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$ .  $h$ -arvon sijasta, määritellään

$$l(x) = \frac{[c(s) - c(p)] \cdot [c(x) - c(p)]}{|c(s) - c(p)|}, x \in \text{OPEN},$$

$$l_{REV}(x) = \frac{[c(t) - c(p)] \cdot [c(x) - c(p)]}{|c(t) - c(p)|}, x \in \text{OPEN}_{REV}.$$

Kun kaksi hakuavaruutta kohtaavat solmussa  $p$ , piirretään  $p$ :n kautta kulkeva suora  $\Lambda$ , joka on normaali sen suoran kanssa, joka kulkee solmujen  $s, t$  kautta. Nyt esimerkiksi jokaisella  $x \in \text{OPEN}$ ,  $l(c(x))$  on solmun  $x$  etäisyys  $\Lambda$ :sta, kuten kuvasta ?? ilmenee, ja uusi pysähtymisehto on

$$L_{\min}^1 \leq \min_{x \in \text{OPEN}} (g(x) + l(x)),$$

$$L_{\min}^2 \leq \min_{x \in \text{OPEN}_{REV}} (g_{REV}(x) + l_{REV}(x)),$$

---

**Algoritmi 8:** TERMINATE( $\text{OPEN}, \text{OPEN}_{REV}, g, g_{REV}, \pi, \pi_{REV}, \mu, m$ )

---

```

1 if  $g(\text{MIN}(\text{OPEN})) + g_{REV}(\text{MIN}(\text{OPEN}_{REV})) \geq \mu$  then
2   return TRACEBACK-PATH( $m, \pi, \pi_{REV}$ )
3 return nil

```

---



---

**Algoritmi 9:** BIDIRECTIONAL-DIJKSTRA-SHORTEST-PATH( $G, s, t, w$ )

---

```

1 OPEN, CLOSED,  $g, \pi = \{s\}, \emptyset, \{(s, 0)\}, \{(s, \mathbf{nil})\}$ 
2 OPENREV, CLOSEDREV,  $g_{REV}, \pi_{REV} = \{t\}, \emptyset, \{(t, 0)\}, \{(t, \mathbf{nil})\}$ 
3  $\mu = \infty$ 
4  $m = \mathbf{nil}$ 
5 while  $|\text{OPEN}| > 0$  and  $|\text{OPEN}_{REV}| > 0$  do
6   if  $m$  is not nil then
7      $p = \text{TERMINATE}(\text{OPEN}, \text{OPEN}_{REV},$ 
8        $g, g_{REV},$ 
9        $\pi, \pi_{REV},$ 
10       $\mu, m)$ 
11     if  $p$  is not nil then
12       return  $p$ 
13   if  $|\text{OPEN}| < |\text{OPEN}_{REV}|$  then
14     EXPAND( $\text{OPEN},$ 
15        $\text{CLOSED},$ 
16        $\text{CLOSED}_{REV},$ 
17        $g, g_{REV}, \pi, \mu, m, e, w)$ 
18   else
19     EXPAND( $\text{OPEN}_{REV},$ 
20        $\text{CLOSED}_{REV},$ 
21        $\text{CLOSED},$ 
22        $g_{REV}, g, \pi_{REV}, \mu, m, e_{REV}, w)$ 
23 return  $\langle \rangle$ 

```

---

missä  $L_{\min}^1$  on lyhimmän  $s, p$  -polun kustannus normaalin haun puussa, ja  $L_{\min}^2$  analogisesti lyhimmän  $p, t$  -polun kustannus vastakkainsuuntaisessa haussa. Kun algoritmin toiminta päättyy, lyhimmän polun kustannus on  $L_{\min}^1 + L_{\min}^2$ . Whangbo raportoi tavallisen  $A^*$ :n vievän yhteensä 372 aikayksikköä laskettuna yhteen yli joukon hakuja. Samalla datalla BHPA vie 509 aikayksikköä, ja Whangbon variantti 209 aikayksikköä (huomaa BHPA:n vievän enemmän aikaa kuin tavallinen  $A^*$ ).

## 4 Kaikkien parien lyhimät polut

Toisinaan on annettu  $n$  solmua ja halutaan löytää lyhimät polut kaikkien solmuparien välillä. Yksi tehokkaimmista algoritmeista on Floyd-Warshallin algoritmi, joka käy ajassa  $\Theta(n^3)$ , eikä sen toiminta riipu kaarien määrästä  $m$ . Ellei kohdeverkko ole täysi ( $m = o(n^2)$ ), Johnsonin algoritmi saattaa olla parempi valinta, sillä Fibonacci-keolla edellämainittu käy ajassa  $\mathcal{O}(n^2 \log n + nm)$ .

### 4.1 Floyd-Warshall -algoritmi

Vaikka Floyd-Warshall -algoritmin aikavaativuus ei ole koskaan Johnsonin algoritmin aikavaativuutta parempi, käytännössä Floyd-Warshall saattaa olla tehokkaampi vaihtoehto, sillä sen toteutus on vain kolme sisäkkäistä silmukkaa, joista kukin iteroi  $n$  kertaa, ja sisimmän silmukan runkossa tehdään vain yksinkertainen testi, jolloin koko algoritmiin aikavaativuuteen liittyvät vakioikertoimet ovat pieniä. Polunmuodostusrutiini BUILD-PATH (Algoritmi 7) eroaa yllä esitetystä rutiinista TRACEBACK-PATH (Algoritmi 1). Yllä on oletettu, että kokonaisluvut  $1, 2, \dots, n$  esittävät solmujoukon: voidaan aina johtaa bijektio  $\{1, 2, \dots, n\} \rightarrow V_{\text{domain}}$ , jolla kuvataan yhden esitystavan solmut toisen esitystavan solmuihin.

Intuitio Floyd-Warshallin algoritmin takana on se, että se tutkii, voidaan-ko parantaa nykyisen  $i, j$ -polun kustannus menemällä solmun  $k$  kautta, ja jos voi molemmat matriisit päivitetään kuvastamaan sitä tilannetta, ja koska Floyd-Warshall iteroi kaikkien kolmikkoiden  $(k, i, j) \in \{1, 2, \dots, n\}^3$  yli, se ratkaisee kaikkien-parien lyhimät polut optimaalisesti.

### 4.2 Johnsonin algoritmi

Johnsonin algoritmi lisää syöteverkon solmujoukkoon uuden solmun  $s$ , kaaret  $(s, v)$  kaikilla  $v \in V$ , ja asettaa kunkin edellä mainitun kaaren painoksi 0. Sen jälkeen algoritmi ajaa Bellman-Ford -algoritmin solmusta  $s$  lähtien: jos on löytynyt negatiivisen painon omaava sykli, Johnsonin algoritmin toiminta päättyy. Negatiivisen painon omaava sykli on jono  $\langle v_1, v_2, \dots, v_k \rangle$ , missä

---

**Algoritmi 10:** FLOYD-WARSHALL( $n, w$ )

---

```
1  $d = \mathbb{R}^{n \times n}$ 
2  $\pi = \mathbb{N}^{n \times n}$ 
3 for  $i = 1$  to  $n$  do
4   for  $j = 1$  to  $n$  do
5      $d(i, j) = w(i, j)$ 
6     if  $w(i, j) \neq \infty$  then
7        $\pi(i, j) = j$ 
8     else
9        $\pi(i, j) = \text{nil}$ 
10 for  $k = 1$  to  $n$  do
11   for  $i = 1$  to  $n$  do
12     for  $j = 1$  to  $n$  do
13       if  $d(i, j) > d(i, k) + d(k, j)$  then
14          $d(i, j) = d(i, k) + d(k, j)$ 
15          $\pi(i, j) = \pi(i, k)$ 
16 return  $(d, \pi)$ 
```

---

$v_1 = v_k$ , muut solmut kuin  $v_1 = v_k$  esiintyvät vain kerran ja

$$\sum_{i=1}^{k-1} w(v_i, v_{i+1}) + w(v_k, v_1) < 0.$$

Mikäli verkossa ei ole negatiivisia sykleja, rakennetaan jokaisesta solmusta lähtien kokonaiset lyhimpien polkujen puut ja sen mukaan kun jokainen puu valmistuu, poimitaan siitä asianomaisten polkujen painot ja talletetaan ne kustannus- ja edeltäjämatriiseihin. Koska Dijkstran algoritmi olettaa kunkin kaaren painon ei-negatiiviseksi, jos verkossa on sellaisia, Johnsonin algoritmi joutuu käyttämään toisenlaista painofunktiota  $\hat{w}(u, v) = w(u, v) + h(u) - h(v)$  (uudelleenpainotus), missä  $h(u) = \delta(s, u)$  ja  $s$  on solmu, josta lähtien Bellman-Ford oli ajettu, ja  $\delta(s, u)$  on jälkimmäisen laskema lyhin kustannus  $s, u$ -polulle.

### 4.3 Soveltuvuus

Yllä esitetyistä aikavaativuuksista ilmenee, etteivät asianomaiset algoritmit ole tarpeeksi tehokkaita ainakin  $n:n$  arvoilla  $\geq 10000$ . Jos kuitenkin ongelman koko sallii kaikkien parien algoritmin ajon, algoritmi palauttaa ”edeltäjämatriisin” (engl. *predecessor matrix*), josta  $N:n$  solmun lyhin polku voidaan rakentaa ajassa  $\Theta(N)$ , mitä ei pysty parantamaan tuon enempää,

---

**Algoritmi 11:** BUILD-PATH( $\pi, i, j$ )

---

```
1 if  $\pi(i, j) = \text{nil}$  then
2   return  $\langle \rangle$ 
3  $p = \langle i \rangle$ 
4 while  $i \neq j$  do
5    $i = \pi(i, j)$ 
6    $p = p \circ \langle i \rangle$ 
7 return  $p$ 
```

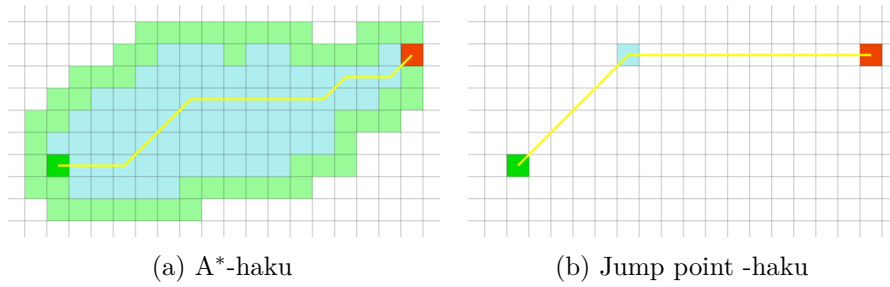
---

ei ainakaan ilman edistynempää algoritmiikkaa. (Ja vaikka voisikin, polun tulostaminen ja/tai piirtäminen on jo vähintään  $\Omega(N)$ .)

## 5 Ruudukkoverkko ja jump point -haku

Ruudukkoverkko (engl. *grid graph*) on suuntamattoman verkon erikoistapaus, ja sen rakenne voidaan määritellä siten, että kullakin solmulla on kahden kokonaisluvun koordinaatti, eli solmujoukko on  $\{(x, y) : 1 \leq x \leq w, 1 \leq y \leq h\}$ , missä  $w$  on ruudukkoverkon leveys ja  $h$  on sen korkeus. Nyt kun on annettu kaksi solmua  $(x_1, y_1)$  ja  $(x_2, y_2)$ , jos vain yksi koordinaateista eroavat yksikön verran, kyseessä on vaaka- tai pystysuuntainen kaari ja sen painoksi asetetaan 1. Toisaalta, kun molemmat koordinaatit eroavat yksikön verran, kyseessä on vino kaari, jonka painoksi asetetaan  $\sqrt{2}$ . On selvää, että jo leveyssuuntainen haku on optimaali tällaisella verkolla, sillä aina kun se etenee vinottain, esim. solmusta  $(x, y)$  solmuun  $(x + 1, y - 1)$ , se ohittaa kahden kaaren siirron solmun  $(x + 1, y)$  tai  $(x, y - 1)$  kautta, joka pidentäisi lyhimmän polun pituuden kahdella yksiköllä  $\sqrt{2}$  sijaan. Heuristinen haku on kannattavaa tällaisella verkkotyypillä, sillä heuristiset funktiot kuten euklidinen (tai Manhattan-metriikka, ellei vinoja kaareja sallita) on helppoa toteuttaa ilman esiprosessointia. Toisaalta, juuri tällaisella verkkotyypillä  $A^*$  kärsii polkujen ”symmetriasta”, kuten kuvasta 2a ilmenee. Jos siis solmujen  $s$  ja  $t$  molemmat koordinaatit eroavat,  $A^*$  kasvattaa suunnikkaanmuotoisen hakuavaruuden solmusta  $s$  solmuun  $t$ , sillä niiden välissä on monta saman kustannuksen omaavaa polkua. Kuten yleensä erikoistapauksiin rajoittuessa, polunhaku ruudukolla voidaan tehdä paljon tehokkaammin. Vuonna 2011 Harabor ja Grastien esittivät ”jump point search” -nimisen  $A^*$ :n muunnelman, joka karsii pois polkusymmetriat ja etenee ”hyppien” yli monen solmun siinä, missä muut algoritmit etenevät jokaisen välisolmun kautta [3].





Kuva 2: Polkusymmetria

## 6 Dijkstran algoritmi kaarivivuilla

Vuonna 2007 Möhring et al. esittivät mielenkiintoisen tavan nopeuttaa Dijkstran algoritmi [6]. Ajatuksena on osittaa suunnatun verkon  $G = (V, A)$  solmujoukko osioihin  $V_1, \dots, V_p$  siten, että

$$\bigcup_{i=1}^p V_i = V,$$

ja  $V_i \cap V_j = \emptyset$  jokaisella  $i \neq j$ . Ositus voidaan toteuttaa kuvauksella  $r: V \rightarrow \{1, \dots, p\}$ . Kustakin osiosta  $V_i$  puhuttaessa, sen ”rajasolmut” (engl. *boundary nodes*) määritellään joukkona

$$B_i = \{v \in V_i : \exists (u, v) \in A \text{ siten että } r(v) \neq r(u)\}.$$

Lisäksi, järjestelmä liittää jokaiseen verkon kaareen ”kaarivipuvektorin” (engl. *arc-flag vector*), jota voidaan toteuttaa  $p$ :n bitin bittivektorina. Nyt jokaisella osiolla  $V_i$  järjestelmän esiprosessointialgoritmi ajaa ”takaperin” tavallisen Dijkstran algoritmi kustakin rajasolmusta  $b \in B_i$ , ja asettaa tuloksena syntyvässä lyhimpien polkujen puussa jokaisen kaaren  $a$  kohdalla  $a$ :n vipuvektorin  $r(b)$ :nnen bitin päälle. Tuloksena syntyvässä järjestelmässä, haettaessa polkua solmuun  $t$ , nopeutettu Dijkstran algoritmi voi karsia kaikki ne kaaret, joiden vektorin  $r(t)$ :s bitti ei ole päällä, ainakin niin kauan kunnes haku pääsee samaan osioon solmun  $t$  kanssa. Tekniikka voidaan siis nähdä tasopainoilevan tavallisen Dijkstran algoritmin ( $V_1 = V$ ) ja kaikkien parien algoritmin (kukin solmu on osio) välillä.

### 6.1 Ositustekniikat

Kuten ylläolevasta kävi ilmi, ”kaarivipu”-Dijkstra vaatii verkon solmujen osituksen, minkä jälkeen joudutaan esiprosessoimaan koko verkko. Koska esiprosessoinnin aika riippuu lineaarisesti kaikkien osioiden kaikkien rajasolmujen yhteenlasketusta määrästä, jälkimmäisen minimointi on toivottavaa.

Mikäli on annettu kunkin solmun koordinaatit tasossa, helpoin tapa osioida verkko (”ruudukointi”) on jakaa pienin, kaikki solmut sisältävä suorakulmio  $w$  sarakkeeseen ja  $h$  riviin. Tämä ei kuitenkaan ole vailla ongelmia: esimerkiksi viidenkymmenen neliökilometrin osio pääkaupunkiseudulla sisältäisi paljon enemmän infrastruktuuria kuin jokin samankokoinen alue Kainuun maakunnassa. Asia voidaan parantaa käyttämällä ”nelipuita” (engl. *quad-tree*): koko suorakulmio jaetaan neljään, samankokoiseen suorakulmioon, minkä jälkeen jaetaan jälkimmäiset, ja niin edelleen pysäyttäen jaon niiden suorakulmioiden kohdalla, joissa on enintään  $\kappa$  solmua ( $\kappa$  annetaan nelipuu-algoritmille parametrina). Tämä ottaa solmujakauman jo paremmin kuin ruudukointi, mutta ei niin hyvin kuin  $kd$ -puu (engl. *kd-tree*), joka lajittelee kaikkien solmujen listan ensin esimerkiksi  $x$ -koordinaattien perusteella, poimii mediaanialueen  $x$ -koordinaatin  $x_{mid}$ , ja implisiittisesti jakaa koko listan kahteen osalistaan  $V_{\leq}$  ja  $V_{>}$ , missä  $V_* = \{x \in V : x * x_{mid}\}$ , minkä jälkeen lajitellaan  $V_{\leq}$  ja  $V_{>}$ , mutta jo  $y$ -koordinaattien perusteella, ja jako pysähtyy niiden solmujoukkojen kohdalla, joissa on enintään  $\kappa$  solmua (tässäkin  $\kappa$  on  $kd$ -puulle annettu parametri).

Neljäs tapa, jota Möhring et al. ovat tarkastelleet, on vuonna 1998 kehitetty METIS [5], joka ei edes tarvitse solmukoordinaatteja. Järjestelmä toimii siten, että syöteverkosta  $G_i$  muodostetaan verkko  $G_{i+1}$ , joiden suhde on sellainen, että verkossa  $G_i$  yhdistetään ”tiheästi” yhdistetyt solmujoukot yhdeksi solmuksi verkossa  $G_{i+1}$ . Alunperin syötetään verkko  $G_0 = G$ , jolloin saadaan  $G_1$ , minkä jälkeen syötetään samaan algoritmiin  $G_1$  ja saadaan  $G_2$  ja niin jatketaan kunnes saadaan tarpeeksi pieni verkko  $G_m$ . Kun  $G_m$  on osioitu, ”laajennetaan takaperin” verkot  $G_{m-1}, G_{m-2}, \dots$  kunnes päästään takaisin alkuperäiseen verkkoon  $G_0 = G$ , joka on osioitu.

## 6.2 Tulokset

Koska kaksisuuntainen haku on mahdollista myös kaarivipujärjestelmässä, asia vaatii vain sen, että kuhunkin kaaren liitetään kaksi vipuvektoria, yksi kutakin hakusuuntaa varten. Tällaisella algoritmilla Möhring et al. raportoivat nopeutuksen suhteessa tavalliseen Dijkstran algoritmiin olleen yli 500 noin yhden miljoonan solmun ja  $2.5 \times 10^6$  kaaren verkolla.

## 7 Polunhaku ja Multiple Sequence Alignment -ongelma

Multiple sequence alignment -ongelmassa on annettu  $\kappa$  sekvenssiä yli aakkoston  $\Sigma$  (useimmiten 20 aminohappoa), kustannusfunktio  $c: \Sigma^2 \rightarrow \mathbb{Z}$  ja ”välisakko” (engl. *gap penalty*), joka liittyy merkkiin -. Useimmiten tarkoitus on arvioida eri organismien samasta ilmiöstä vastaavien geenien evolutiivinen yhteys. Ongelma on mahdollista muotoilla polunhakuongelmana siten,

että kukin sekvenssi laitetaan  $\kappa$ -ulotteisen ”hilan” (engl. *lattice*) akseleiksi ja kukin solmu  $x$  voidaan ajatella olevan vektori  $(x_1, \dots, x_\kappa)$ , missä  $x_i$  on  $i$ nnesta sekvenssista luettujen merkkien määrä. Kun solmusta  $x$  siirrytään solmuun  $y = (y_1, \dots, y_\kappa)$ , jokaisella  $i = 1, \dots, \kappa$   $y_i = x_i + 1$  tai  $y_i = x_i$ , jolloin maksimaalinen solmusta lähtevien kaarien määrä on tasan  $2^\kappa - 1$ . Jos kahden vierekkäisen solmun koordinaateista jotkut eivät eroa, niittä vastavista sekvensseistä ei ”lueta” merkkiä, vaan laitetaan sen sijaan välimerkki -. Optimaali rivitys näin olleen löytyy hakemalla lyhin polku solmusta  $(0, \dots, 0)$  solmuun  $(|S_1|, \dots, |S_\kappa|)$ . Esimerkiksi, sekvenssien BACB, BCD, DB optimaali rivitys voi olla seuraavanlainen:

B	A	C	B	-
B	-	C	-	D
-	-	-	B	D

jolloin vastaava polku on

$$\langle s = (0, 0, 0), (1, 1, 0), (2, 1, 0), (3, 2, 0), (4, 2, 1), (4, 3, 2) = t \rangle.$$

Mitä tulee ratkaisuun, algoritmi palauttaa  $\kappa$  samanpituista merkkijonoa yli aakkoston  $\Sigma \cup \{-\}$ , joista  $i$ des merkkijono vastaa  $i$ dennettä sekvenssiä, johon mahdollisesti on laitettu eri kohdissa välimerkit, jolloin kunkin merkkijonon pituus on  $L \geq \max(|S_1|, \dots, |S_\kappa|)$ . Ajatus välimerkkien takana on se, että se mahdollistaa sekvenssien osien siirtämisen eteenpäin kohtiin, joissa kustannus pienenee. Tarkemmin ilmaistuna koko rivityksen (tulomerkkijonon) kustannus on

$$\sum_{i=1}^L \mathfrak{C}(i),$$

missä

$$\mathfrak{C}(s) = \sum_{1 \leq i < j \leq \kappa} c(M_{i,s}, M_{j,s}).$$

Siis rivityksen kustannus on sen sarakkeiden kustannuksien summa ja kunkin sarakkeen kustannus on sen kaikkien merkkiparien kustannuksien summa. Jos jonkin merkkiparin merkeistä vain yksi on välimerkki, käytetään sen kustannuksena edellä mainittu välisakko; muuten merkkiparin kustannus on annettu kuvauksessa  $c$ , ja jos kumpikin merkki on väli, kustannus on  $c(-, -) = 0$ . Ongelman parametrisoinnin yhteydessä, kustannus ei välttämättä ole niin yksinkertainen: usein on tarpeen käyttää affiini (engl. *affine*) kustannus, joka liittyy jokaiseen  $n$ :n välimerkin vaakasuuntaiseen sekvenssiin kustannuksen  $a + bn$ , koska on todennäköisempää, että yhteen kohtaan tulee kerralla  $n$  välimerkkiä, kuin se, että tulisi esimerkiksi  $n$  kertaa merkki kerrallaan suurinpiirtein samaan kohtaan. Lisäksi, toisinaan halutaan olla ottamatta huomioon ne välimerkit, jotka sijoittuvat rivityksessä sekvenssien alkuun tai loppuun. Edellämainitut seikat vaikeuttavat MSA-algoritmien suunnittelua ja toteutusta.

## 7.1 Ratkaisutekniikat

Vaikka MSA-ongelmaa määrittävä hilaverkko on syklitön, se koettelee myös kehittyneiden polunhakualgoritmien rajoja, sillä jo muutamalla sekvenssillä verkko on liian iso, jotta sen voisi säilyttää tietokoneen muistissa eksplisiittisesti, jolloin jäljelle jää solmujen generointi laajennusoperaattorin yhteydessä. Toinen – myös muistiin liittyvä – rajoite on se, että algoritmien tietorakenteet paisuvat niin suuriksi, että keskusmuisti loppuu kesken: Yoshizumi et al. raportoivat  $A^*$ :n pystyvän käsittelemään enintään seitsemän sekvenohjssia. He ehdottavat  $PEA^*$  nimistä algoritmia (engl. *Partial Expansion  $A^*$* ), jonka voidaan ajatella uhraavan hieman aikaa pitääkseen listat pienempinä, jolloin algoritmi pystyy käsittelemään 8 sekvenssiä [13]. Algoritmi lajittelee avoimen listan solmut ei  $f$ -, vaan  $F$ -arvojen perusteella, missä  $F(u)$  on solmun  $u$  ”ei-lupaavien” solmujen pienin  $f$ -arvo. Myös on annettu ei-negatiivinen katkaisuarvo  $C$ ; (engl. *cutoff value*). Lapsisolmu pidetään ”lupaavana”, jos sen  $f$ -arvo ei ole suurempi kuin vanhempainsolmunsa  $F$ -arvon ja  $C$ :n summa. Alunperin kunkin solmun  $F$ -arvo on sen  $f$ -arvo. Lisäksi, jos solmulla  $u$  on ei-lupaavat lapsisolmut,  $u$  laitetaan takaisin avoimeen listaan. Kaikki kaikkiaan,  $C$ :n arvolla 50,  $PEA^*$ , vähentää muistintarpeen 87%, vaikka käyttää vain 20% enemmän aikaa kuin  $A^*$  hilassa, jossa solmun ja sen lapsen  $f$ -arvot eroavat enintään 396 yksikköä. Lisäksi,  $PEA^*$ :n suhde  $A^*$ :iin on se, että edellinen palautuu jälkimmäiseksi, kun  $C = \infty$ .

Toinen varteenotettava MSA-algoritmi on Schroedlin kehittämä IDDP (engl. *Iterative-Deepening Dynamic Programming*) [10]. IDDP on ad-hoc ratkaisu, joka eroaa muista polunhakualgoritmeista sikäli, että se tallettaa suljettuun ja avoimeen listoihin ei solmuja, vaan kaareja. Lisäksi, IDDP karsii suorituksen aikana joitakin suljetussa listassa olevia kaareja, ja koska algoritmi vaatii yhtenä parametreistaan kustannuksen ylärajan  $U$ , se myös karsii kaaret, joiden implikoima  $f$ -arvo on suurempi kuin  $U$ .

Schroedl vertaili IDDP:n,  $PEA^*$ :n ja  $A^*$ :n keskenään. Kahden gigatavun keskusmuistin koneella  $A^*$  pystyi rivittämään maksimissaan yhdeksän sekvenssiä, ja  $PEA^*$  vaatii vain noin yhden prosentin siitä muistitilasta ja kykenee rivittämään samalla alustalla 12 sekvenssiä. 12 sekvenssillä IDDP vaatii vain noin 67 prosenttia  $PEA^*$ :n laskenta-ajasta ja käyttää vain kuudennen osan siitä muistitilasta, mitä  $PEA^*$ .

## 8 Lyhimmät polut suunnatuissa syklittömissä verkoissa

Suunnattu syklitön verkko (engl. *dag, directed acyclic graph*) on verkko  $G = (V, A)$ , jossa ei ole mahdollista lähteä mielivaltaisesta solmusta  $u$  seuraamalla suunnatut kaaret ja päästää takaisin  $u$ :hun. Eräs sovellus on tilanne, jossa jokainen kaari  $(u, v)$  vastaa jotakin tehtävää ja  $w(u, v)$  sen kesto. Lisäksi,

jos verkossa on kaaret  $(u, v)$  ja  $(v, x)$ , tehtävä  $(u, v)$  edeltää ajassa tehtävää  $(v, x)$ . Niin sanottu *kriittinen polku* yllä esitetyssä verkossa on suurimman kustannuksen omaava polku, joka kulkee syklittömän verkon läpi säilyttäen kaarien presedenssin, ja siten se antaa yllärajan ajalle, joka menee verkon kuvailemien tehtävien suoritukseen. Käytännössä tällaisen ”pisimmän polun” voidaan aina laskea asettamalla jokaisella kaarella  $e \in A$   $\hat{w}(e) = -w(e)$  ja ajamalla lyhimpien polkujen algoritmin käyttäen painofunktiona kuvausta  $\hat{w}$ .

Varsinainen lyhimpien polkujen algoritmi suunnatuilla syklittömillä verkoilla ensin lajittelee solmut topologiseen järjestykseen, eli sellaiseen järjestykseen, jossa jokaisesta solmusta  $u$  lähtevät kaaret osoittavat solmuihin, jotka ovat  $u$ :n oikealla puolella. Nyt jos verkko on yhdistetty, sen topologisessa järjestyksessä ensimmäiseen solmuun ei tule kaareja ja järjestyksen viimeisestä solmusta ei lähde kaareja. Seuraavaksi algoritmi käy läpi järjestettyjen solmujen yli ja jokaisen kohdalla iteroi yli sen lapsisolmujen päivittäen tarvittaessa asionomaisten solmujen  $g$ - ja  $\pi$ -arvot, jotka siis antavat solmujen parhaat kustannukset lähtösolmusta ja vanhemmat toistaiseksi lyhimmillä polulla, vastaavasti. Koska tässäkin yhteydessä halutaan rajoittaa

---

**Algoritmi 12:** DAG-SHORTEST-PATH( $G, s, t, w, L, \mu$ )

---

```

1  $i = \mu(s)$ 
2  $j = \mu(t)$ 
3  $g = \{(s, 0)\}$ 
4  $\pi = \{(s, \text{nil})\}$ 
5 for  $k = i$  to  $j$  do
6    $u = L[k]$ 
7   if  $u$  is not mapped in  $g$  then
8     continue
9   if  $u$  is  $t$  then
10    return TRACEBACK-PATH( $u, \pi, \text{nil}$ )
11  foreach  $(u, v) \in A$  do
12    if  $v$  is not mapped in  $g$  then
13       $g(v) = g(u) + w(u, v)$ 
14       $\pi(v) = u$ 
15    else if  $g(v) > g(u) + w(u, v)$  then
16       $g(v) = g(u) + w(u, v)$ 
17       $\pi(v) = u$ 
18 return  $\langle \rangle$ 

```

---

siten, ettei lasketa kokonaista lyhimpien polkujen puuta, vaan lopetetaan polunhaku heti kun päästetään maalisolmuun (engl. *point-to-point shortest*

*paths*), niin algoritmi DAG-SHORTEST-PATH (Algoritmi 12) olettaa, että sille anetaan parametreina myös sekvenssi  $L$ , joka sisältää kaikki verkon solmut topologisessa järjestyksessä, ja kuvaus  $\mu: V \rightarrow \{1, 2, \dots, |V|\}$ , jolle  $\mu(u)$  on solmun  $u$  sijainnin indeksi sekvenssissa  $L$ . Tämä järjestely säästää (toisinaan arvokasta) suoritusaikaa,  $L$  ja  $\mu$  on laskettava vain siinä vaiheessa, kun verkko on rakennettu tai sen topologia on muutettu. DAG-SHORTEST-PATH-algoritmin testi rivillä 7 on tarpeen siinä tilanteessa, jossa testattavaan solmuun  $u$  ei tule kaareja välillä  $L[\mu(s), \mu(u) - 1]$ , jolloin se ei ole tallennettu  $g$ -kuvaukseen. Tällainen solmu on ohitettava, koska muuten jossakin riveistä 13, 15, 16 algoritmi lukee  $g(u)$ , mikä ei tule olemaan määritelty. Lisäksi, tällainen solmu  $u$  ei voi olla saavutettavissa oleva maalisolmu, sillä muuten sen  $g$ -arvo olisi ollut määritelty ja rivin 9 testi menisi sillä solmulla läpi. Koska algoritmi ei käytä aikaa solmujen järjestämiseen topologiseen järjestykseen, eikä rakenna kuvausta  $\mu$ , on helppo nähdä sen aikavaativuuden olevan  $\mathcal{O}(n + m)$ . Vielä vahvempi ylläraja on kuitenkin  $\mathcal{O}(d(\mu(t) - \mu(s)))$ , missä  $d$  on solmujen keskiarvoinen ulosaste.

## 9 Haku dynaamisilla verkoilla

Tähän asti käsitellyt verkot olivat staattisia: ne rakennetaan kerran ja niiden yli ajetaan useammat polunhakukyselyt, joiden palauttama lyhin polku riippuu vain lähtö- ja maalisolmuista. Dynaamisissa verkoissa lyhin polku riippuu myös siitä ajasta, jona lähdetään lähtösolmusta/saavutaan maalisolmuun ja tyypillisesti halutaan optimoida reittiin liittyvä ajankäyttö. Käytännön sovellus dynaamisista verkoista ja hakualgoritmeista on Reittiopas-palvelu. Haku dynaamisilla verkoilla eroaa staattisesta versiosta myös siten, että painot liitetään myös solmuihin, jotka edustavat linja-auto- tai raitiovaunun pysäkkejä ja metroasemia. Esimerkiksi, jos Pekka saapuu hetkellä  $\tau_{\text{Pekka}}$  lähimpään pysäkkiin  $P$  odottamaan bussia, joka saapuu sinne hetkellä  $\tau > \tau_{\text{Pekka}}$ , liitetään dynaamisessa hakualgoritmissa  $P$ :tä edustaavaan solmuun paino  $\tau - \tau_{\text{Pekka}}$ . Toinen epätriviaali vaatimus on tilan säilyttäminen ja päivittäminen; saman tieosuuden voidaan joissain verkon kohdissa kulkea useammantyyppisellä ajoneuvolla, ja lisäksi joillakin pysäkkeillä on tarpeen vaihtaa ajoneuvosta toiseen.

Vaikka verkon (ja myös algoritmin) dynaamisuus on väistämätön vaatimus kun halutaan mallintaa suurkaupunkien liikenneinfrastruktuuria ja tarjota reitinsuunnittelupalvelu käyttäjille, se karsii ainakin yhden tavan nopeuttaa haku: kuten Nannicini ja Liberti toteavat, kaksisuuntaistaminen ei ole reaalistinen ajatus, sillä se vaatii, että sekä lähtö- että saapumisaajat ovat tiedossa ja toinen niistä on määritettävissä vain siten, että ajetaan yksisuuntainen hakualgoritmi yhden ajankohdan perusteella [7]. Dynaamisella algoritmilla on siis vain kaksi toimintatilaa: kun halutaan hakea lähtöajan perusteella, ajetaan yksisuuntainen haku ”normaalisti” lähtösolmusta maali-

solmuun. Toisaalta kun haetaan saapumisajan perusteella, algoritmi hakee ajassa ”taaksepäin” lähtien maalisolmusta kunnes päättyy lähtösolmuun.

## 10 Lyhimmät polut ja rinnakkaisuus

Toistaiseksi lyhimpien polkujen haku ei ole juuri antanut paljon aihetta rinnakkaistamiseen. Vuonna 1998 Meyer ja Sanders esittivät  $\Delta$ -stepping-nimisen algoritminsa, joka asettaa kunkin saavutetun solmun  $u$  omaan ”koriin” (engl. *bucket*) numero  $i$  aina, kun  $g(u) \in [(i-1)\Delta, i\Delta)$ , jolloin kukin säie käsittelee vain osan kaikista koreista.  $2^{19}$  solmun verkolla, jonka keskiarvoinen aste on 3, Meyer ja Sanders raportoivat peräkkäisen (engl. *sequential*) version olleen 3.1 kertaa nopeampi kuin ”optimoitu” Dijkstran algoritmi, ja 16 suorittimen hajautetussa järjestelmässä nopeutus 9.2 on mitattu suhteessa peräkkäiseen  $\Delta$ -stepping-algoritmiin. On huomattava, että algoritminsa toiminta riippuu  $\Delta$ :n arvosta, ja Meyer et al. ehdottavat arvon  $\Delta = 4/d$ , missä  $d$  on keskiarvoinen solmun aste.

Rinnakkaistamiseen liittyvien käytännön ongelmista huolimatta, myös kaksisuuntaisen  $A^*$ :n variantti nimeltään NBA\* sai rinnakkaisen version: PNBA\* käyttää kaksi säiettä, kukin omaa hakusuuntaa varten, ja sisältää suhteellisen vähän synkronoinnin tarvetta [9]. Esimerkiksi, 15-palapelillä (engl. *15-puzzle*), NBA\* löysi lyhimmän 58 siirron polun noin 2.5 kertaa nopeammin kuin  $A^*$ , ja PNBA\* oli noin tasan kaksi kertaa nopeampi kuin NBA\*.

On huomattava, että rinnakkaistaessa algoritmeja, ei ole mahdollista saada mielivaltaisen suuria nopeutuksia jo Amdahlin lain nojalla, jonka mukaan maksimaalinen nopeutus on

$$\frac{1}{(1-P) + \frac{P}{N}},$$

missä  $N$  on suorittimien määrä ja  $P \in (0, 1]$  on sen laskennan suhteellinen osuus, jota voidaan tehdä rinnakkain, eikä  $P$  ole koskaan 0, sillä jokaisessa rinnakkaisessa laskennassa joudutaan luomaan säikeet, mikä on ainakin osittain peräkkäinen operaatio. Ottaen raja-arvon  $N$ :n kasvaessa rajatta, saadaan maksimaalinen (teoreettinen) nopeutus  $1/(1-P)$ .

## 11 Yhteenveto

### Lähteet

- [1] Cormen, Thomas H., Leiserson, Charles E., Rivest, Ronald L. ja Stein, Clifford: *Introduction to Algorithms*, luku 26, sivu 727. The MIT Press, 3. painos, 2009, ISBN 0262033844, 9780262033848.

- [2] Dijkstra, Edsger W.: *A note on two problems in connexion with graphs*. Numerische Mathematik, 1:269–271, 1959.
- [3] Harabor, Daniel ja Grastien, Alban: *Online Graph Pruning for Pathfinding on Grid Maps*. Teoksessa *25th National Conference on Artificial Intelligence. AAAI*, 2011.
- [4] Hart, Peter E., Nilsson, Nils J. ja Raphael, Bertram: *A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths*. IEEE Transactions on Systems, Science, and Cybernetics, SSC-4(2):100–107, 1968.
- [5] Karypis, George ja Kumar, Vipin: *A Fast and High Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs*. SIAM J. Sci. Comput., 20(1):359–392, joulukuu 1998, ISSN 1064-8275. <http://dx.doi.org/10.1137/S1064827595287997>.
- [6] Möhring, Rolf H., Schilling, Heiko, Schütz, Birk, Wagner, Dorothea ja Willhalm, Thomas: *Partitioning Graphs to Speedup Dijkstra's Algorithm*. J. Exp. Algorithmics, 11, helmikuu 2007, ISSN 1084-6654. <http://doi.acm.org/10.1145/1187436.1216585>.
- [7] Nannicini, Giacomo ja Liberti, Leo: *Shortest paths on dynamic graphs*. 2008.
- [8] Pohl, Ira: *Bi-directional search*. Machine Intelligence 6, sivut 127–140, 1971.
- [9] Rios, Luis Henrique Oliveiral ja Chaimowicz, Luiz: *PNBA\*: A Parallel Bidirectional Heuristic Search Algorithm*. 2011.
- [10] Schroedl, Stefan: *An Improved Search Algorithm for Optimal Multiple-Sequence Alignment*. Journal of Artificial Intelligence Research, sivut 587 – 623, 2005.
- [11] Thorup, Mikkel: *Integer Priority Queues with Decrease Key in Constant Time and the Single Source Shortest Paths Problem*. Teoksessa *Proceedings of the Thirty-fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing, STOC '03*, sivut 149–158, New York, NY, USA, 2003. ACM, ISBN 1-58113-674-9. <http://doi.acm.org/10.1145/780542.780566>.
- [12] Whangbo, Taeg Keun: *Efficient Modified Bidirectional A\* Algorithm for Optimal Route-Finding*. Teoksessa *New Trends in Applied Artificial Intelligence, 20th International Conference on Industrial, Engineering and Other Applications of Applied Intelligent Systems, IEA/AIE 2007, Kyoto, Japan, June 26-29, 2007, Proceedings*, sivut 344–353, 2007. [http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-73325-6\\_34](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-73325-6_34).



- [13] Yoshizumi, Takayuki, Miura, Teruhisa ja Ishida, Toru: *A\* with Partial Expansion for Large Branching Factor Problems*. Teoksessa *Proceedings of the Seventeenth National Conference on Artificial Intelligence and Twelfth Conference on Innovative Applications of Artificial Intelligence*, sivut 923–929. AAAI Press, 2000, ISBN 0-262-51112-6. <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=647288.721436>.