| Polunhakualgoritmit ja -järjestelmät |  |
|--------------------------------------|--|
| Rodion Efremov                       |  |
|                                      |  |
|                                      |  |

Kandidaatintutkielma-aine HELSINGIN YLIOPISTO Tietojenkäsittelytieteen laitos

Helsinki, 26. marraskuuta 2014

## HELSINGIN YLIOPISTO — HELSINGFORS UNIVERSITET — UNIVERSITY OF HELSINKI

| Tiedekunta — Fakultet — Faculty  |                   | Laitos — Institution - | - Department            |                                      |  |
|--|-------------------|------------------------|-------------------------|--------------------------------------|--|
|  |                   |                        | 1.1                     |                                      |  |
| Matemaattis-luonnontieteellinen  Tekijä — Författare — Author  |                   | Tietojenkäsittely      | rtieteen laitos         |                                      |  |
| Rodion Efremov   |                   |                        |                         |                                      |  |
| Työn nimi — Arbetets titel — Title   |                   |                        |                         |                                      |  |
| Polunhakualgoritmit ja -järjestelmät  Oppiaine — Läroämne — Subject  |                   |                        |                         |                                      |  |
| Tietojenkäsittelytiede   |                   |                        |                         |                                      |  |
| Työn laji — Arbetets art — Level   | Aika — Datum — Mo |                        | Sivumäärä — Sidoantal — | - Number of pages                    |  |
| Kandidaatintutkielma-aine  Tiivistelmä — Referat — Abstract  | 26. marraskuuta   | 2014                   | 13                      |                                      |  |
| Tiivistelmä – Referat – Abstract  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. |                   |                        |                         | sa ajassa.<br>dgoritme-<br>untaisuus |  |
|  |                   |                        |                         |                                      |  |
| Avainsanat — Nyckelord — Keywords  |                   |                        |                         |                                      |  |
| verkot, lyhimmät polut   |                   |                        |                         |                                      |  |
| Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited  |                   |                        |                         |                                      |  |
| Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information  |                   |                        |                         |                                      |  |

## Sisältö

| 1  | Johdanto  | 1                  |
|----|---|--------------------|
| 2  | Tavallisimmat algoritmit  | 1                  |
| 3  | Kaksisuuntainen haku         3.1       Kaksisuuntainen Dijkstran algoritmi            | <b>2</b><br>3<br>4 |
| 4  | Prioriteettijonon valinta   | 5                  |
| 5  | Kaikkien parien lyhimmät polut  | 7                  |
| 6  | Ruudukkoverkko ja jump point -haku  | 7                  |
| 7  | Dijkstran algoritmi kaarivivuilla7.1 Ositustekniikat7.2 Tulokset                      | 8<br>9<br>10       |
| 8  | Polunhaku ja Multiple Sequence Alignment -ongelma 8.1 Ongelman muotoileminen verkkona | 10<br>10<br>11     |
| 9  | Lyhimmät polut ja rinnakkaisuus   | 11                 |
| Lä | ähteet  | 12                 |

#### 1 Johdanto

Polunhaku painotetuissa tai painottamattomissa verkoissa on perustavanlaatuinen ongelma, joka ei ole mielenkiintoinen vain itsessään, vaan myös tarvittavana alioperaationa muissa algoritmeissa. Esimerkiksi Edmond-Karpin algoritmi käyttää leveyssuuntaista hakua maksimivuo-ongelman ratkaisemiseksi; 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 O(n+m). Polku on  $\gamma_k = \langle u_0, u_1, \ldots, u_k \rangle$ , missä mikään solmu ei esiinny yhtä kertaa enempää, ja verkossa on kaari  $(u_i, u_{i+1})$  jokaisella  $i = 0, 1, \ldots, k-1$ . Polkuun liittyvä kustannus on sen kaarien painojen summa, ja mitä tulee itse painoihin, niiden oletetaan olevan ei-negatiivisia. Ei-painotettujen verkojen kohdalla jokaisen kaaren paino oletetaan olevan 1.

## 2 Tavallisimmat algoritmit

Edsger W. Dijkstra esitti vuonna 1959 kuuluisan polunhakualgoritminsa. joka toimii polynomisessa ajassa [1]. 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 [3], joka – samoin kuten Djikstran algoritmi – ylläpitää mm. kunkin saavutetun solmun u q-arvon q(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. 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 1). Erotuksena rivillä 3 g(x):n sijasta on f(x), jolle siis f(x) = g(x) + h(x). Molemmat kutsuvat Traceback-Pathrutiinin, joka muodostaa lyhimmän polun edeltäjäpuusta (engl. predecessor

#### **Algoritmi 1:** DIJKSTRA-SHORTEST-PATH(G, s, t, w)

```
Monikkosijoitus
 1 OPEN, CLOSED, g, \pi = (\{s\}, \emptyset, \{(s, 0)\}, \{(s, \mathbf{nil})\})
   while |OPEN| > 0 do
       u = \arg\min q(x)
            x \in \widetilde{OPEN}
       if u is t then
 4
          return Traceback-Path(u, \pi, \mathbf{nil})
 5
       OPEN = OPEN - \{u\}
 6
       CLOSED = CLOSED \cup \{u\}
 7
       Jokaisella solmun u lapsisolmulla x, tee...
       for (u, x) \in G.A do
 8
           if x \in CLOSED then
 9
               continue
10
           g' = g(u) + w(u, x)
11
           if x \notin OPEN then
12
               OPEN = OPEN \cup \{x\}
13
               g(x) = g'
14
              \pi(x) = u
15
           else if g(x) > g' then
16
               g(x) = g'
17
               \pi(x) = u
18
   Ei s, t -polkua verkossa G.
19 return ()
```

tree) ajassa  $\Theta(N)$ , missä N on lyhimmän polun solmujen määrä. On huomattava, että  $A^*$  palautuu Dijkstran algoritmiin määrittelemällä h(u)=0 jokaisella  $u\in V$ .

## 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

#### **Algoritmi 2:** 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)
```

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  $O(\log n)$ , joka liittyy algoritmien käyttämään prioritettijonojen operaatioihin.

#### 3.1 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 implikoiva kustannus  $\mu$  päivitetään. Haku jatkuu siihen asti, kunnes molempien avointen listojen minimialkioiden kustannusten summa on vähintään  $\mu$ . Rutiini UPDATE tarkistaa, että yhden hakusuunnan solmu on toisen suljetussa listassa, ja jos asia on niin, yrittää päivittää Laajentumisoperaattoreina (engl. expansion operator) kakvälisolmun. sisuuntaisessa haussa on määriteltävä funktiot  $e, e_{REV}: V \to \mathcal{P}(V)$ , 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 ekäytetään normaalissa ja  $e_{REV}$  käännetyssä haussa.

## Algoritmi 3: EXPAND(OPEN, CLOSED, CLOSED<sub>2</sub>, $g, g_2, \pi, \mu, m, e, w$ )

```
u = \arg\min g(x)
       x \in OPEN
2 OPEN = OPEN - \{u\}
3 CLOSED = CLOSED \cup \{u\}
4 for x \in e(u) do
      if x \in CLOSED then
       continue
6
      g' = g(u)
 7
      if e(u) gives child nodes of u then
8
          "Normaali" haku.
         g' = g' + w(u, x)
9
      else
10
          Käännetty haku.
        g' = g' + w(x, u)
11
      if x \notin OPEN then
12
          OPEN = OPEN \cup \{x\}
13
          g(x) = g'
14
          \pi(x) = u
15
        UPDATE(x, \text{CLOSED}_2, q', q_2, \mu, m)
16
      else if g(x) > g' then
17
          g(x) = g'
18
          \pi(x) = u
19
          UPDATE(x, \text{CLOSED}_2, g', g_2, \mu, m)
```

#### 3.2 Kaksisuuntainen A\*

Kaksisuuntaisen A\*:n saa aikaan muuttamalla algoritmin 3 rivillä 1 esiintyvä q(x) f(x):ksi ja muuttamalla TERMINATE-rutiinin ehto seuraavanlaiseksi:

$$\max(\min_{x \in \text{OPEN}} f(x), \min_{x \in \text{OPEN}_{REV}} f_{REV}(x)) \ge \mu,$$

joka on siis Ira Pohlin vuonna 1971 ehdotetun BHPA-algoritminsa pysähtymisehto [6].

Vuonna 2007 Taeg-Keun Whangbo ehdotti toisenlaisen kaksisuuntaisen heuristisen hakualgoritmin [9], joka olettaa, että kullakin solmulla on koordinaatit tasossa. h-arvon sijasta, määritellään

$$\begin{split} l(x) &= \frac{(s-p) \cdot (x-p)}{|s-p|}, x \in \text{OPEN}, \\ l_{REV}(x) &= \frac{(t-p) \cdot (x-p)}{|t-p|}, x \in \text{OPEN}_{REV}. \end{split}$$

#### **Algoritmi 4:** UPDATE $(x, \text{CLOSED}, g', g, \mu, m)$

```
\begin{array}{c|cccc} \mathbf{1} & \mathbf{if} & x \in CLOSED \ \mathbf{then} \\ \mathbf{2} & p = g' + g(x) \\ \mathbf{3} & \mathbf{if} & \mu > p \ \mathbf{then} \\ \mathbf{4} & \mu = p \\ \mathbf{5} & m = x \end{array}
```

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  $x \in \text{OPEN}_{REV}$ ,  $l_{REV}(x)$  on solmun x etäisyys  $\Lambda$ :sta, ja uusi pysähtymisehto on

$$\begin{split} L_{\min}^1 &\leq \min_{x \in \text{OPEN}}(g(x) + l(x)), \\ L_{\min}^2 &\leq \min_{x \in \text{OPEN}_{REV}}(g_{REV}(x) + l_{REV}(x)), \end{split}$$

missä  $L^1_{\min}$  on lyhimmän s,p-polun kustannus normaalin haun puussa, ja  $L^2_{\min}$  analogisesti lyhimmän p,t-polun kustannus vastakkainsuuntaisessa haussa. 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 Prioriteettijonon valinta

Polkua haettaessa painotetussa verkossa joudutaan käyttäämään prioriteettijonoja, jotka ovat tarpeellisia pitääkseen haut optimaaleina, ja joiden oletetaan tarjoavan ainakin neljä operaatiota:

- 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,
- 4. Min palauttaa, muttei poista keosta solmun, jolla on pienin prioriteettiavain, ja
- 5. Is-Empty(H) varmistaa, että jonossa on vielä alkioita.

Operaatiot (4) ja (5) voidaan aina toteuttaa siten, että ne toimivat vakioajassa. Helpoin prioriteettijonorakenne (jatkossa vain "keko"), jonka operaatiot

#### **Algoritmi 5:** BIDIRECTIONAL-DIJKSTRA-SHORTEST-PATH(G, s, t, w)

```
1 OPEN, CLOSED, g, \pi = \{s\}, \emptyset, \{(s, 0)\}, \{(s, \mathbf{nil})\}
 2 OPEN<sub>REV</sub>, CLOSED<sub>REV</sub>, g_{REV}, \pi_{REV} = \{t\}, \emptyset, \{(t,0)\}, \{(t, \mathbf{nil})\}
 \mu = \infty
 4 m = nil
   while |OPEN| \cdot |OPEN_{REV}| > 0 do
        if m is not nil then
 6
            p = \text{Terminate}(\text{OPEN}, \text{OPEN}_{REV},
 8
                                 g, g_{REV},
 9
                                 \pi, \pi_{REV},
10
                                 \mu, m
            if p is not nil then
11
                return p
12
        Triviaali kuormantasaus
13
        if |OPEN| < |OPEN_{REV}| then
            EXPAND(OPEN,
14
                       CLOSED,
15
                       CLOSED_{REV},
16
                       g, g_{REV}, \pi, \mu, m, e, w)
17
        else
18
            EXPAND(OPEN_{REV},
19
                       CLOSED_{REV},
20
                       CLOSED,
21
22
                       g_{REV}, g, \pi_{REV}, \mu, m, e_{REV}, w)
23 return ()
```

(1) - (3) käyvät logaritmisessa ajassa, on binäärikeko. Tällaisella keolla Dijkstran ja A\*-algoritmit käyvät kumpikin ajassa  $O((m+n)\log n)$ . Teoriassa edelläoleva ylläraja voidaan parantaa käyttämällä Fibonacci-kekoa, jonka lisäysoperaatio (1) käy eksaktissa vakioajassa, päivitysoperaatio (2) tasoitetussa vakioajassa, ja poisto-operaatio (3) tasoitetussa ajassa  $O(\log n)$ , jolloin haut voidaan suorittaa ajassa  $O(m + n \log n)$ . Huomaa, että kaikki tähän asti mainitut keot perustuvat vertailuihin, ja teoriassa enintään yksi operaatiosta Insert tai Extract-Minimum voi käydä eksaktissa tai tasoitetussa vakioajassa, ja toisen on käyttävä ajassa  $\Omega(\log n)$ , koska muuten algoritmi 7 tällaisella keolla rikkoisi vertailuihin perustuvan lajittelemisen informaatioteoreettisen rajan, joka on  $\Omega(n \log n)$ . Jos kuitenkin kaarien painot ovat kokonaislukuja,  $O(m + n \log n)$ -rajaa voidaan parantaa: Mikkel Thorup esitti vuonna 2003 keon, jonka poisto-operaatio käy ajassa  $O(\log\log\min n)$  ja muut operaatiot vakioajassa [8]. Jos kuitenkin kokonaislukupainot ovat väliltä [0, N), poisto-operatio voidaan suorittaa ajassa  $O(\log \log \min\{n, N\})$ . Nyt

```
Algoritmi 6: TERMINATE(OPEN, OPEN<sub>REV</sub>, g, g<sub>REV</sub>, \pi, \pi<sub>REV</sub>, \mu, m)
```

```
1 if \min_{x \in OPEN} g(x) + \min_{x \in OPEN_{REV}} g_{REV}(x) \ge \mu then
2 | return Traceback-Path(m, \pi, \pi_{REV})
3 return nil
```

#### **Algoritmi 7:** GENERIC-HEAP-SORT(S, H)

selvästi haun aikavaativuus tällaisella keolla on  $O(m + n \log \log \min\{n, N\})$ .

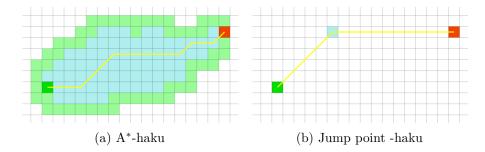
## 5 Kaikkien parien lyhimmät polut

Toisinaan on annettu n solmua ja halutaan löytää lyhimmät 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  $O(n^2 \log n + nm)$ . Ajatus Johnsonin algoritmissa on ensin tarkistaa, ettei verkossa ole sykliä, jonka kokonaispaino on negatiivinen, minkä jälkeen algoritmi ajaa n kertaa Dijkstran algoritmin jokaisesta solmusta, ja jokaisella kerralla hakee kokonaisen lyhimpien polkujen puun.

Yllä esitetyistä aikavaativuuksista ilmenee, etteivät asianomaiset algoritmit ole tarpeeksi tehokkaita jo 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, ei ainakaan ilman edistynempää algoritmiikkaa. (Ja vaikka voisikin, polun tulostaminen ja/tai piirtäminen on jo vähintään  $\Omega(N)$ .)

## 6 Ruudukkoverkko ja jump point -haku

Ruudukkoverkko (engl. *grid graph*) on suuntamattoman verkon erikoistapaus, ja sen rakenne voidaan määritellä siten, että kullakin solmulla on kahden



Kuva 1: Polkusymmetria

kokonaisluvun koordinaatti, eli solmujoukko on  $\{(x,y): 1 \leq x \leq w, 1 \leq w\}$  $y \leq h$ , 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 1a 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 [2].

## 7 Dijkstran algoritmi kaarivivuilla

Vuonna 2007 Möhring et al. esittivät mielenkiintoisen tavan nopeuttaa Dijkstran algoritmi [5]. Ajatuksena on osittaa suunnatun verkon G = (V, A) solmujoukko osioihin  $V_1, \ldots, V_p$  siten, että

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

ja  $V_i \cap V_j = \emptyset$  jokaisella  $i \neq j$ . Ositus voidaan toteuttaa kuvauksella  $r: V \to \{1, \dots, p\}$ . 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.

#### 7.1 Ositustekniikat

Kuten ylläolevasta kävi ilmi, "kaarivipu"-Dijkstra vaatii verkon solmujen osituksen, minkä jälkeen joudutaan esiprosessoimaan koko verkko. Koska esiprosessoinnin aika riipuu 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 nelipuualgoritmille 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 mediaanialkion 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 [4], 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  $G_{m-1}, G_{m-2}, \ldots$  kunnes päästään takaisin alkuperäiseen verkkoon  $G_0 = G$ , joka on osioitu.

#### 7.2 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.

# 8 Polunhaku ja Multiple Sequence Alignment -ongelma

Multiple sequence alignment -ongelmassa on annettu  $\kappa$  sekvenssiä yli aakkoston  $\Sigma$ , kustannusmatriisi  $c\colon \Sigma^2 \to \mathbb{Z}$  ja "välisakko" (engl.  $gap\ penalty$ ), joka liittyy merkkiin -. Aakkostona on tyypillisesti 20 aminohappoa, ja tarkoituksena on laittaa eri sekvensseissa välimerkit "-" siten, että jokainen (mahdollisesti) pidennetty sekvenssi sisältää saman määrän merkkejä, ja koko "linjaus" (engl. alignment) omaa optimaalin kustannuksen. Jos M on  $\kappa \times L$ -matriisi, jossa kukin rivi on tietty sekvenssi välimerkkeineen, kunkin sarakkeen s kustannus määritellään olevan

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

ja koko linjauksen kustannus on

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

Lisäksi, määritellään c(-,-)=0, ja aina kun jompikumpi merkki  $a \in \Sigma$  ja toinen on väli -, käytetään merkkiparin kustannuksena em. välisakko. (Näin siis optimaalissa linjauksessa ei ole sarakkeita, joiden jokainen merkki on -.)

#### 8.1 Ongelman muotoileminen verkkona

Kun on annettu sekvenssit  $S_1, \ldots, S_\kappa$ , kukin niistä asetetaan  $\kappa$ -ulotteisen "hilan" (engl. lattice) akseleiksi. Kukin solmu voidaan ajattella omistavan koordinaatit  $(x_1, \ldots, x_\kappa)$ , ja kun siitä siirrytään seuraavaan solmuun  $(y_1, \ldots, y_\kappa)$ , kukin  $y_i$  on joko  $x_i$  tai  $x_i + 1$ , jolloin niiden koordinaattien  $y_i$  kohdalla, jotka eroavat koordinaatista  $x_i$ , luetaan i:nnen sekvenssin  $y_i$ :des merkki, ja muiden kohdalla ei lueta mitään, vaan laitetaan samaan sarakkeeseen

välimerkki -. Selvästi, jokaisella hilan "sisäsolmulla" on tasan  $2^{\kappa} - 1$  lapsisolmua, ja vaikka hilaverkko on syklitön, jo muutaman sekvenssin hilaa ei voida säilyttää muistissa eksplisiittisesti, vaan solmut joudutaan generoimaan vanhempainsolmuja laajennettaessa (sekvenssien pituus on sadan merkin suuruusluokkaa). Nyt ongelma palautuu reitinhakuongelmaksi, jossa on löydettävä lyhin polku hilan solmusta  $(0, \ldots, 0)$  solmuun  $(|S_1|, \ldots, |S_{\kappa}|)$ .

#### 8.2 Ratkaisu

Yoshizumi et al. raportoivat  $A^*$ :n pystyvän käsittelemään enintään seitsemmän sekvenssia, sillä sen avoimet ja suljetut listat kasvavat liian isoiksi. He ehdottavat PEA\* nimistä algoritmia (engl.  $Partial\ Expansion\ A^*$ ), jonka voidaan ajatella uhraavan hieman aikaa pitääkseen listat pienempinä, jolloin algoritmi pystyy käsittelemään 8 sekvenssia [10]. 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-negaativinen 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  $C = \infty$ .

## 9 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 asteen 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 [7]. 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 edellinen.

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 nopeutus 1/(1-P).

#### Lähteet

- [1] Dijkstra, Edsger W.: A note on two problems in connexion with graphs. Numerische Mathematik, 1:269–271, 1959.
- [2] Harabor, Daniel ja Grastien, Alban: Online Graph Pruning for Pathfinding on Grid Maps. Teoksessa 25th National Conference on Artificial Intelligence. AAAI, 2011.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] Pohl, Ira: *Bi-directional search*. Machine Intelligence 6, sivut 127–140, 1971.
- [7] Rios, Luis Henrique Oliveiral ja Chaimowicz, Luiz: PNBA\*: A Parallel Bidirectional Heuristic Search Algorithm. 2011.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.