

Entwurfsmethoden

● Greedy Algorithmen:

- Löse ein einfaches Optimierungsproblem durch eine Folge „vernünftiger“ Entscheidungen.
- Eine getroffene Entscheidung wird nie zurückgenommen. ▶

● Dynamisches Programmieren:

- ▶ Zerlege ein zu lösendes Problem P in eine Hierarchie einfacherer Teilprobleme P_i .
- ▶ Die Hierarchie wird durch den **Lösungsgraphen** G_P modelliert. ▶
 - ★ Die Knoten entsprechen den Teilproblemen.
 - ★ Füge eine Kante (P_i, P_j) von Teilproblem P_i nach Teilproblem P_j ein, wenn die Lösung von P_i für die Lösung von P_j benötigt wird.
 - ★ Der Graph G_P muss **azyklisch** ist, darf also keine Kreise besitzen.

- **Divide & Conquer** ist ein Spezialfall des dynamischen Programmierens: Der Lösungsgraph G_P ist ein Baum. ▶

- Führe eine Reihe von Entscheidungen mit Hilfe einer Heuristik aus.
 - Keine Entscheidung darf jemals zurückgenommen werden. (Web)
- **Dijkstras Algorithmus:**
 - ▶ Die Entscheidung: Lege einen kürzesten Weg für einen neuen Knoten fest.
 - ▶ Die Heuristik: Der neue Knoten wird durch einen **kürzesten S-Weg** erreicht.
 - **Prims und Kruskals Algorithmen:**
 - ▶ Die Entscheidung: Setze eine neue Kante ein.
 - ▶ Die Heuristik: Wähle eine **kürzeste** kreuzende Kante.

Die Fragestellung:

Welche Probleme können mit Greedy-Algorithmen gelöst werden?

Intervall-Scheduling

- Eingabe:*
- Eine **Teilmenge** der Aufgaben $1, \dots, n$ ist auf einem einzigen Prozessor auszuführen.
 - Aufgabe i besitzt eine **Startzeit** s_i , eine **Terminierungszeit** t_i und wird somit durch das **Zeitintervall** $[s_i, t_i]$ beschrieben.
- Aufgabe:*
- Führe eine größtmögliche Anzahl nicht-kollidierender Aufgabe aus.
 - ▶ Zwei Aufgaben *kollidieren*, wenn sich ihre Zeitintervalle überlappen.

Anwendungen:

- Führe eine größtmögliche Anzahl von Veranstaltungen in einem einzigen Veranstaltungsraum aus.
- Erledige möglichst viele Druckaufträge auf einem einzigen Drucker fristgerecht nach der jeweils angekündigten Anlieferung.

- Führe Aufgaben nach aufsteigender Startzeit aus.

Keine gute Idee: Wenn eine frühe Aufgabe spät terminiert, werden viele andere Aufgaben ausgeschlossen.

- Führe kurze Aufgaben zuerst aus.

Keine gute Idee: **Eine** kurze Aufgabe kann **zwei** kollisionsfreie lange Aufgaben blockieren.

- Führe Aufgaben nach aufsteigender Terminierungszeit aus.

Startzeiten werden ignoriert!

Frühe Terminierungszeiten zuerst

- (1) Sortiere alle Aufgaben gemäß aufsteigender Terminierungszeit.
- (2) Solange noch Aufgaben vorhanden sind, wiederhole
führe die Aufgabe i mit **kleinster** Terminierungszeit aus, entferne diese Aufgabe und alle Aufgaben j mit $s_j \leq t_i$.
// Alle kollidierenden Aufgaben werden entfernt.

- Angenommen, eine **optimale** Ausführungsfolge führt Aufgabe j als erste Aufgabe aus, obwohl j **später** als i terminiert. Also $t_i < t_j$.
- Wir erhalten eine mindestens ebenso gute Ausführungssequenz, wenn wir j durch i ersetzen!
- **Es gibt also eine optimale Ausführungssequenz, in der eine Aufgabe mit kleinster Terminierungszeit als erste Aufgabe ausgeführt wird.**
 - ▶ Wiederhole das Argument für die zweite, dritte Aufgabe.

Gegeben seien folgende Aufgaben

(jeweils mit Start- und Terminierungszeit):

A_1 (2,5) A_2 (1,3) A_3 (4,8) A_4 (5,6).

Welche Aufgaben wählt der Algorithmus aus?

Auflösung: A_2 & A_4

- Das Prinzip „Frühe Terminierungszeiten zuerst“ funktioniert:
Eine größtmögliche Anzahl kollisionsfreier Aufgaben wird für n Aufgaben in Zeit $O(n \log_2 n)$ berechnet.
- Im **gewichteten** Intervall Scheduling erhalten Aufgaben einen Wert:
 - ▶ Führe eine Teilmenge von Aufgaben mit größtem Gesamtwert aus.
 - ▶ Greedy-Algorithmen sind nicht bekannt. Aber dynamisches Programmieren wird helfen.

Minimiere die Verspätung

- Eingabe:*
- n Aufgaben $1, \dots, n$ sind gegeben: Aufgabe i hat die Frist f_i und die Laufzeit l_i .
 - **Alle** Aufgaben sind auf einem einzigen Prozessor auszuführen.
 - Wenn Aufgabe i zum Zeitpunkt t_i fertig ist, dann ist $v_i = t_i - f_i$ ihre Verspätung.

- Aufgabe:*
- Bestimme eine Ausführungssequenz, so dass die maximale Verspätung

$$\max_{1 \leq i \leq n} v_i$$

kleinstmöglich ist.

- Sortiere Aufgaben nach ihrem „Slack“ $f_i - l_i$ und führe Aufgaben mit kleinstem Slack zuerst aus.
 - ▶ Zwei Aufgaben mit $f_1 = 3, l_1 = 1$ und $f_2 = T + 1, l_2 = T$.
 - ▶ Zuerst wird die zweite Aufgabe ausgeführt und beansprucht das Intervall $[0, T[$.
 - ▶ Die erste Aufgabe beansprucht das Intervall $[T, T + 1[$ mit Verspätung $v_1 = T + 1 - 3 = T - 2$.
 - ▶ Besser (für $T > 2$): Zuerst Aufgabe 1 mit Intervall $[0, 1[$ und dann Aufgabe 2 mit Intervall $[1, T + 1[$.
Verspätungen: $v_1 = 1 - 3 = -2$ und $v_2 = T + 1 - (T + 1) = 0$.
- Sortiere Aufgaben nach aufsteigender Frist und führe Aufgaben nach dem Motto „Frühe Fristen zuerst“ aus.

Sollte auch nicht funktionieren, da wir Laufzeiten ignorieren.

Frühe Fristen zuerst

- (1) Sortiere alle Aufgaben gemäß aufsteigender Frist.
- (2) Solange noch Aufgaben vorhanden sind, wiederhole
führe die Aufgabe i mit kleinster Frist aus und entferne diese Aufgabe.

Das Prinzip „Frühe Fristen zuerst“ funktioniert:
Eine Ausführungsfolge mit **minimaler Verspätung** wird für n Aufgaben
in Zeit $O(n \cdot \log_2 n)$ berechnet.

Laufzeit $O(n \cdot \log_2 n)$ ist offensichtlich, denn das Sortieren dominiert.

Aber warum ist der Algorithmus korrekt?

opt sei eine optimale Ausführungssequenz.

- Das Paar (i, j) ist eine **Inversion**, wenn i in **opt** nach j ausgeführt wird, aber $f_i < f_j$ gilt.
 - ▶ Die Anzahl der Inversionen misst den „Abstand“ zwischen der optimalen Lösung und der Ausführung gemäß „Frühe Fristen zuerst“.
- Beseitige Inversionen, ohne die größte Verspätung zu erhöhen.
 - ▶ Jede Ausführungssequenz hat höchstens $\binom{n}{2}$ Inversionen.
 - ▶ Wenn das Ziel erreicht ist, dann erhalten wir „kurz über lang“ eine optimale Ausführung ohne Inversionen.
 - ▶ **Aber es gibt möglicherweise viele Ausführungssequenzen ohne Inversionen!**

Alle Ausführungen ohne Inversionen besitzen dieselbe maximale Verspätung.

- Zwei Ausführungen ohne Inversionen unterscheiden sich nur in der Reihenfolge, mit der Aufgaben mit selber Frist f ausgeführt werden.
- Die größte Verspätung wird für die jeweils zuletzt ausgeführte Aufgabe mit Frist f erreicht.
- Aber die größten Verspätungen sind identisch, denn die jeweils zuletzt ausgeführten Aufgaben werden zum selben Zeitpunkt erledigt!

Eine Inversion weniger

Es gibt Aufgaben i und j mit $f_i < f_j$, so dass Aufgabe i

direkt nach

Aufgabe j in **opt** ausgeführt wird.

Solche Aufgaben existieren, denn wenn je zwei aufeinanderfolgende Aufgaben inversionsfrei sind, dann hat die Ausführungssequenz keine Inversionen.

Was wir zeigen müssen:

Aufgabe i werde **direkt nach** Aufgabe j ausgeführt und es gelte $f_i < f_j$. Wenn wir die beiden Aufgaben vertauschen, dann steigt die größte Verspätung **nicht** an.

$f_i < f_j$, aber Aufgabe i wird direkt nach Aufgabe j erledigt.

- Wenn wir Aufgabe i vor Aufgabe j erledigen, dann nimmt die Verspätung von Aufgabe i ab.
- Aber die **nach Vertauschung** später ausgeführte Aufgabe j wird zu dem **späteren** Zeitpunkt T fertiggestellt.
 - ▶ Die neue Verspätung $v_j = T - f_j$ von Aufgabe j ist kleiner als die alte Verspätung $v_i = T - f_i$ von Aufgabe i , denn $f_i < f_j$.
 - ▶ Die maximale Verspätung kann also höchstens abnehmen.

Huffman Codes

Huffman Codes

- $\text{code} : \Sigma \rightarrow \{0, 1\}^*$ ist ein **Präfix-Code**, wenn kein Codewort $\text{code}(a)$ ein Präfix eines anderen Codewortes $\text{code}(b)$ ist.
 - ▶ Die Kodierung durch einen Präfix-Code kann durch das von **links-nach-rechts Lesen** des Codes dekodiert werden.
- Sei $T = a_1 \dots a_n$ ein Text mit Buchstaben $a_1, \dots, a_n \in \Sigma$. Dann ist

$$\text{code}(T) = \text{code}(a_1) \dots \text{code}(a_n)$$

die Kodierung von T mit der Kodierungslänge

$$\sum_{i=1}^n |\text{code}(a_i)|.$$

Ein **Huffman-Code** für T ist ein Präfix-Code **minimaler Länge**.

Ist $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow 1$, $c \rightarrow 00$, $d \rightarrow 01$ ein Huffman-Code?

- (1) Ja.
- (2) Nein.
- (3) Keine Ahnung.

Auflösung: (2) Nein.

Berechne einen Huffman Code für einen gegebenen Text T .

- Sei $H(a)$ die Häufigkeit mit der Buchstabe a im Text vorkommt.
 - ▶ Dann ist

$$\sum_{a \in \Sigma} H(a) \cdot |\text{code}(a)|$$

die Kodierungslänge des Codes.

- ▶ Wie wird ein Huffman-Code für T aussehen?
 - ★ Häufige Buchstaben erhalten kurze Codewörter,
 - ★ seltene Buchstaben erhalten lange Codewörter.
- Zwei zentrale Fragen:
 - ▶ Wie können wir Huffman-Codes veranschaulichen?
 - ▶ Wie kodiert ein Huffman-Code die beiden seltensten Buchstaben?

Der Text

$$T = \text{abbacaaca}$$

ist zu verschlüsseln.

- Wir erhalten die Häufigkeiten

$$H(a) = 5, H(b) = 2 \text{ und } H(c) = 2.$$

- Wie sollte der Huffman-Code für T aussehen?
 - ▶ Der häufige Buchstabe a sollte durch ein Bit kodiert werden?!
Zum Beispiel $\text{code}(a) = 0$.
 - ▶ Aufgrund der Präfixfreiheit beginnen alle anderen Codewörter mit dem Bit 1.
 - ★ Dann sollten wir $\text{code}(b) = 10$ und $\text{code}(c) = 11$ setzen.

Huffman-Codes und Binärbäume

Zu jedem Huffman-Code gibt es einen Huffman-Baum B mit den folgenden Eigenschaften:

- (a) alle inneren Knoten haben genau 2 Kinder,
- (b) jede Kante ist mit einem Bit $b \in \{0, 1\}$ markiert und
- (c) jedem Buchstaben $a \in \Sigma$ ist genau ein Blatt b_a zugewiesen:
Die Markierung des Weges von der Wurzel zum Blatt b_a stimmt mit $\text{code}(a)$ überein.

Gibt es stets einen Huffman Baum?

Annahme:

Ein Huffman-Code produziere nur Codewörter der Länge höchstens L .

- Erzeuge den vollständigen Binärbaum B_L der Tiefe L .
- Markiere Kanten zu einem linken Kind mit 0 und Kanten zu einem rechten Kind mit 1.

Aber B_L ist doch viel zu groß!

- Sei V die Menge aller Knoten von B_L , deren Wege (von der Wurzel aus) mit einem Codewort markiert sind.
- Ein Huffman-Code ist ein Präfix-Code: Für **keine** zwei Knoten $u, v \in V$ ist u ein Vorfahre von v .
 - ▶ Entferne alle Knoten aus B_L , die einen Knoten aus V als Vorfahren besitzen.
 - ▶ Der entstehende Baum ist der gewünschte Huffman-Baum.
- Wirklich? Haben denn alle inneren Knoten genau zwei Kinder?
 - ▶ Wenn der Knoten v nur ein Kind besitzt, dann ist der Code unnötig lang.
 - ▶ Wir erhalten einen kürzeren Code, indem wir v entfernen und den Vater von v mit dem Kind von v direkt verbinden.

Wo sind die beiden seltensten Buchstaben?

Die Kodierung der beiden seltensten Buchstaben

Sei der Text T vorgegeben. Dann gibt es einen Huffman-Code für T mit Huffman-Baum B , so dass

- B einen inneren Knoten v maximaler Tiefe besitzt und
- v zwei Buchstaben geringster Häufigkeit als Blätter hat.

Warum?

Die beiden seltesten Buchstaben sind Geschwisterblätter

- L sei die Länge des längsten Codewortes für den Huffman-Code.
- Der zugehörige Huffman-Baum hat zwei Geschwister-Blätter α und β der Tiefe L , denn innere Knoten haben genau zwei Kinder.
- Die beiden seltensten Buchstaben x und y werden Codeworte der Länge L erhalten, denn

$$\sum_{a \in \Sigma} H(a) \cdot |\text{code}(a)|$$

ist zu minimieren.

- ▶ Verteile die Blattmarkierungen für Blätter der Tiefe L so um, dass x und y den Blätter α und β zugewiesen werden.
- ▶ Die Kodierungslänge für den neuen Baum ist nicht angestiegen!

- (1) Füge alle Buchstaben $a \in \Sigma$ in einen anfänglich leeren Heap ein. Der Heap sei gemäß kleinstem Häufigkeitswert geordnet.
// Wir konstruieren einen Huffman-Baum B . Zu Anfang ist B ein
// Wald von Knoten v_a , wobei v_a dem Buchstaben a zugeordnet ist.
- (2) Solange der Heap mindestens zwei Buchstaben enthält, wiederhole:
 - (2a) Entferne die beiden Buchstaben x und y geringster Häufigkeit.
 - (2b) Füge einen neuen Buchstaben z in den Heap ein und setze $H(z) = H(x) + H(y)$.
 - ★ Schaffe einen neuen Knoten v_z für z
 - ★ Mache v_x und v_y zu Kindern von v_z .
 - ★ Markiere die Kante $\{v_x, v_z\}$ mit 0 und die Kante $\{v_y, v_z\}$ mit 1.

Eine schnelle Berechnung von Huffman-Codes

Der Algorithmus findet einen Huffman-Code für n Buchstaben. Die Laufzeit ist durch $O(n \log_2 n)$ beschränkt.

Warum? Es werden höchstens $4n$ Heap-Operationen durchgeführt:

- Am Anfang werden alle Buchstaben einmal eingefügt.
- Nach Entfernen von zwei Buchstaben und...
- Einfügen eines neuen Buchstabens...

...hat der Heap insgesamt einen Buchstaben verloren.

- Es gibt bessere Kodierverfahren als Präfix-Codes, zum Beispiel **Lempel-Ziv Codes** und **arithmetische Codes**.
- Aber Präfix-Codes gehören zu den mächtigsten Codes, für die ein **bester Code** effizient gefunden werden kann.

Ein Huffmanbaum für einen Text mit n Zeichen kann in Zeit $O(n \log n)$ berechnet werden. Ginge es auch in Zeit $\Theta(n)$?

- (1) Ja.
- (2) Nein.
- (3) Keine Ahnung.

Auflösung: (1) Ja, mit einfacher Integer-Prioritätswarteschlange.

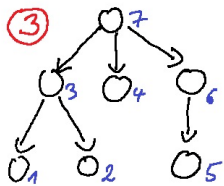
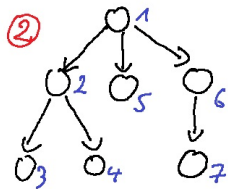
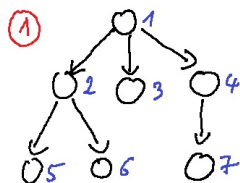
Divide & Conquer

Wir kennen bereits erfolgreiche Divide & Conquer Algorithmen:

- Binärsuche,
- Präorder und Postorder Traversierung von Bäumen,
- Tiefensuche,
- Quicksort und Mergesort,

Jedesmal wird das Ausgangsproblem **rekursiv** gelöst, nachdem ähnliche, aber kleinere Probleme gelöst wurden.

Welches ist eine Postorder-Traversierung?



Auflösung: (3).

Die schnelle Multiplikation natürlicher Zahlen

Eingabe: Zwei n -Bit Zahlen

$$x = \sum_{i=0}^{n-1} a_i 2^i \quad \text{und} \quad y = \sum_{i=0}^{n-1} b_i 2^i$$

sind gegeben.

Aufgabe: Bestimme die Binärdarstellung des Produkts $x \cdot y$.

Addiere die Zahlen $x \cdot 2^i$ für jedes i mit $b_i = 1$.

Der Aufwand in **Bitoperationen**:

- Bis zu n Zahlen mit bis zu $2n - 1$ Bits müssen addiert werden.
- Für eine Addition werden bis zu $2n$ Bitoperationen benötigt.

Insgesamt werden $\Theta(n^2)$ Bit-Operationen benötigt.

Ein erster rekursiver Algorithmus

Wir nehmen an, dass n eine Zweierpotenz ist.
(Wenn nicht, dann fülle mit führenden Nullen auf.) Dann ist

$$x = x_2 2^{n/2} + x_1 \text{ und } y = y_2 2^{n/2} + y_1,$$

wobei x_1, x_2, y_1 und y_2 Zahlen mit jeweils $n/2$ Bits sind.

Berechne die vier Produkte

$$x_1 \cdot y_1, x_1 \cdot y_2, x_2 \cdot y_1 \text{ und } x_2 \cdot y_2$$

rekursiv und addiere

$$x \cdot y = x_1 \cdot y_1 + 2^{n/2} \cdot (x_1 \cdot y_2 + x_2 \cdot y_1) + 2^n x_2 \cdot y_2.$$

Und welche Laufzeit erzielen wir?

- Sei $\text{Bit}(n)$ die Anzahl der benötigten Bit-Operationen. Wir erhalten die Rekursionsgleichung

$$\text{Bit}(n) = 4 \cdot \text{Bit}(n/2) + c \cdot n.$$

Der additive Term $c \cdot n$ zählt die Anzahl der nicht-rekursiven Bit-Operationen, also die drei Shifts und Additionen.

- Was ist die Lösung dieser Rekursionsgleichung ?
Stimmen wir ab ...

$$\text{Bit}(n) = 4 \cdot \text{Bit}(n/2) + c \cdot n.$$

hat die Lösung

- (1) $\Theta(n \cdot \log^4 n)$
- (2) $\Theta(n \cdot n^{4/3})$
- (3) $\Theta(n^2)$
- (4) $\Theta(n^2 \log n)$
- (5) $\Theta(n^4)$

Auflösung: (3) $\Theta(n^2)$, nicht schneller als die Schulmethode!

Wenn wir aber mit **drei** statt **vier** rekursiven Multiplikationen auskommen würden, dann wären wir im Geschäft.

Drei statt vier Multiplikationen

- Berechne $z = (x_1 + x_2)(y_1 + y_2)$ sowie
- $z_1 = x_1 \cdot y_1$ und $z_2 = x_2 \cdot y_2$. Dann ist

$$\begin{aligned}x \cdot y &= x_1 \cdot y_1 + 2^{n/2} \cdot (x_1 \cdot y_2 + x_2 \cdot y_1) + 2^n \cdot x_2 \cdot y_2 \\&= z_1 + 2^{n/2} \cdot (x_1 \cdot y_2 + x_2 \cdot y_1) + 2^n \cdot z_2 \\&= z_1 + 2^{n/2} \cdot (z - z_1 - z_2) + 2^n \cdot z_2.\end{aligned}$$

Es genügen **3** (vorher **4**) Multiplikationen, aber wir haben jetzt **6** (vorher **3**) Shifts und Additionen. Wir erhalten die neue Rekursion

$$\text{Bit}(n) = 3 \cdot \text{Bit}(n/2) + d \cdot n.$$

- Unser Algorithmus benötigt nur $\text{Bit}(n) = \Theta(n^{\log_2 3}) = O(n^{1.59})$ Bitoperationen.
- „Weltrekord“ ist $O(n \cdot \log_2 n)$ Bitoperationen ([Web](#)).

Matrizenmultiplikation, schneller als in der Schule

Eingabe: Zwei $n \times n$ -Matrizen A und B

Aufgabe: Bestimme die Produktmatrix $C = A \cdot B$.

- Multipliziere die i te Zeile von A mit der j ten Spalte von B , um den Eintrag $C[i, j]$ zu berechnen: $O(n)$ arithmetische Operationen.
- Insgesamt sind $\Theta(n^3)$ arithmetische Operationen erforderlich, da C n^2 Einträge hat.

Wir nehmen wieder an, dass n eine Zweierpotenz ist. Wir zerlegen A und B in $n/2 \times n/2$ Teilmatrizen:

$$A = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix}$$

Um C zu berechnen, benötigt die Schulmethode 8 Multiplikationen.

7 Matrizenmultiplikationen reichen

$$M_1 = (A_{1,2} - A_{2,2}) \cdot (B_{2,1} + B_{2,2})$$

$$M_2 = (A_{1,1} + A_{2,2}) \cdot (B_{1,1} + B_{2,2})$$

$$M_3 = (A_{1,1} - A_{2,1}) \cdot (B_{1,1} + B_{1,2})$$

$$M_4 = (A_{1,1} + A_{1,2}) \cdot B_{2,2}$$

$$M_5 = A_{1,1} \cdot (B_{1,2} - B_{2,2})$$

$$M_6 = A_{2,2} \cdot (B_{2,1} - B_{1,1})$$

$$M_7 = (A_{2,1} + A_{2,2}) \cdot B_{1,1},$$

denn für die vier Teilmatrizen $C_{i,j}$ gilt

$$C_{1,1} = M_1 + M_2 - M_4 + M_6$$

$$C_{1,2} = M_4 + M_5$$

$$C_{1,3} = M_6 + M_7$$

$$C_{1,4} = M_2 - M_3 + M_5 - M_7.$$

Unser Algorithmus benötige $A(n)$ arithmetischen Operationen, um zwei $n \times n$ Matrizen zu multiplizieren. Dann ist

$$A(n) = 7A(n/2) + c \cdot n^2,$$

wenn $c \cdot n^2$ die Additionen zählt.

Schnelle Multiplikation: Zahlen und Matrizen

- (a) Zwei n -Bit Zahlen können mit $O(n^{\log_2 3}) = O(n^{1.59})$ Bitoperationen multipliziert werden.
- (b) Zwei $n \times n$ Matrizen können mit $O(n^{\log_2 7}) = O(n^{2.81})$ arithmetischen Operationen multipliziert werden.

Da viele Additionen ausgeführt werden, erhalten wir Ersparnisse nur für große Eingabelängen n . (**Große Konstanten im $O()$.**)

Dynamische Programmierung

Zerlege das Ausgangsproblem wie in Divide & Conquer in eine Hierarchie **ähnlicher**, aber **kleinerer** Teilprobleme (**Web**).

- **Der Lösungsgraph der dynamischen Programmierung:**

- ▶ Die Teilprobleme P_i sind Knoten des Graphen.
- ▶ Füge die Kante $P_i \rightarrow P_j$ ein, wenn die Lösung von P_i in der Lösung von P_j benötigt wird.

- **Der wesentliche Unterschied zu Divide & Conquer:**

- ▶ Der Lösungsgraph ist ein **kreisfreier gerichteter Graph**, für Divide & Conquer erhalten wir stets einen **Baum**.
- ▶ Die Lösung eines Teilproblems wird mehrmals benötigt und muss deshalb abgespeichert werden.

- **Die wesentlichen Schritte im Entwurf:**

- ▶ Definiere die **Teilprobleme** und
- ▶ bestimme die **Rekursionsgleichungen**: Löse schwierigere Teilprobleme mit Hilfe bereits gelöster, einfacherer Teilprobleme.

Ein Orakel beantwortet Fragen über eine optimale Lösung \circ .

- Wir stellen unsere Frage über \circ und erhalten die Orakel-Antwort.
 - ▶ Nicht jede Frage ist sinnvoll, denn letztlich müssen wir unsere Fragen selbst beantworten!
 - ▶ Die Bestimmung einer optimalen Lösung, *mit Hilfe der Antwort*, sollte auf ein *etwas leichteres, ähnliches Problem* führen.
- Um dieses etwas leichtere Problem zu lösen, stellen wir eine zweite Frage und denken diesen Prozess fortgesetzt, bis eine Lösung offensichtlich ist.
 - ▶ Die in diesem Prozess gestellten Fragen definieren unsere **Teilprobleme**.
 - ▶ Die **Rekursionsgleichung** beschreibt, wie das jeweilige Teilproblem zu lösen ist.

TSP: Das Travelling Salesman Problem

Eingabe: n Städte sind gegeben, wobei $laenge(u, v)$ die Distanz zwischen Stadt u und Stadt v ist.

Aufgabe: Bestimme eine Permutation π der Städte, so dass die Länge der Rundreise, also

$$\sum_{i=1}^{n-1} laenge(\pi(i), \pi(i+1)) + laenge(\pi(n), \pi(1)),$$

kleinstmöglich ist.

- TSP ist sehr schwierig und effiziente Algorithmen sind nicht zu erwarten.
- Eine triviale Lösung: Zähle alle Permutationen von $\{1, \dots, n\}$ auf und bestimme die Beste.
 - ▶ fürchterliche Laufzeit $\Theta(n!)$: **3,6 Millionen** für $n = 10$,
6,2 Milliarden für $n = 13$, **1,3 Billionen** für $n = 15$ und
6,3 Billionen Permutationen für $n = 18$.
- Ziel: Eine substantielle Verbesserung der Laufzeit $\Theta(n!)$.

Unsere erste Frage: Welche Stadt wird nach Stadt 1 in einer optimalen Rundreise \mathcal{O} besucht?

- Ziemlich naive Frage?!
- Aber die Antwort hilft in der Bestimmung einer optimalen Rundreise.
 - ▶ Wenn die Stadt j als nächste besucht wird, dann benutzt \mathcal{O} die Kante $1 \rightarrow j$.
 - ▶ Die zweite Frage: Welche Stadt wird nach j besucht?
 - ▶ Weitere Fragen nach der jeweils nächsten Stadt decken die optimale Rundreise Schritt für Schritt auf.

Aber leider müssen wir unsere Fragen selbst beantworten.

Die Teilprobleme

Zu jedem Zeitpunkt arbeiten wir mit einem Wegstück $1 \rightarrow j \rightarrow \dots \rightarrow k$ und fragen

nach einem kürzesten Weg, der in k startet, alle noch nicht besuchten Städte besucht und dann in 1 endet.

- Sei $L(k, S)$ die Länge eines kürzesten Weges, der in Stadt k beginnt, alle Städte in der Menge $S \subseteq V$ besucht und in 1 endet.
 - ▶ Ein Teilproblem (k, S) für jedes $k \neq 1$ und für jede Teilmenge $S \subseteq \{2, \dots, n\} \setminus \{k\}$.
- Die Teilprobleme (k, \emptyset) sind sofort lösbar, denn

$$L(k, \emptyset) = \text{länge}(k, 1).$$

Die Rekursionsgleichungen

Um $L(k, S)$ zu bestimmen, müssen wir alle Möglichkeiten für die erste Kante (k, v) eines kürzesten Weges durchspielen.

Wenn wir Knoten v probieren, dann

- muss der kürzeste Weg von k nach v springen,
- alle Knoten in $S \setminus \{v\}$ besuchen und
- schließlich im Knoten 1 enden.

Wir erhalten **die Rekursionsgleichung:**

$$L(k, S) = \min_{v \in S} \{ \text{länge}(k, v) + L(v, S \setminus \{v\}) \}.$$

Der Aufwand

- Die Anzahl der Teilprobleme ist höchstens

$$(n - 1) \cdot 2^{n-2},$$

denn es ist stets $k \neq 1$ und $S \subseteq \{2, \dots, n\} \setminus \{k\}$.

- Da wir für jedes Teilproblem (k, S) alle Elemente $v \in S$ probieren, kann jedes Teilproblem in $O(n)$ Schritten gelöst werden.

Der Aufwand für TSP

Das allgemeine Traveling Salesman Problem für n Städte kann in Zeit $O(n^2 \cdot 2^n)$ gelöst werden.

Wir haben eine riesige Zahl von Teilproblemen produziert, aber

- für $n = 15$: Die triviale Lösung benötigt über 1,3 Billion Schritte, wir benötigen knapp 7,2 Millionen Operationen.
- für $n = 18$: Die triviale Lösung benötigt über 6,3 Milliarden Schritte, wir benötigen knapp 83 Millionen Schritte.

Das gewichtete Intervall Scheduling

Eingabe: n Aufgaben sind gegeben, wobei

Aufgabe i durch das Zeitintervall $[s_i, t_i]$
beschrieben wird und den Wert w_i erhält.

Aufgabe: Wähle eine kollisionsfreie Menge $A \subseteq \{1, \dots, n\}$ von
Aufgaben aus und führe sie auf einem einzigen Pro-
zessor aus.

Der Gesamtwert der ausgeführten Aufgaben ist
zu maximieren.

Das gewichtete Intervall Scheduling: Der Greedy Algorithmus

Der Greedy-Algorithmus „Frühe Terminierungszeiten zuerst“ funktioniert nicht mehr: Die Aufgabenwerte werden nicht beachtet.

Wir brauchen neue Ideen.

Wir greifen zuerst die Grundidee unserer Greedy-Lösung auf: Die Aufgaben seien nach aufsteigender Terminierungszeit angeordnet.

- Aufgabe 1 endet als erste, ...
 - Aufgabe n endet als letzte.
-
- Welche Aufgaben können vor Aufgabe i ausgeführt werden?
 - ▶ $a(i)$ sei die Aufgabe mit **spätester** Terminierungszeit, die **vor** Aufgabe i endet. Offensichtlich ist $a(i) < i$.
 - ▶ Nur Aufgaben $j \leq a(i)$ können vor Aufgabe i ausgeführt werden.
 - **Unsere Frage an das Orakel:** Wird Aufgabe n in einer optimalen Lösung ausgeführt?
 - ▶ Wenn n ausgeführt wird, dann ist das kleinere Intervall Scheduling Problem mit Aufgaben in $\{1, \dots, a(n)\}$ optimal zu lösen.
 - ▶ Sonst ist eine optimale Lösung für die Aufgaben in $\{1, \dots, n-1\}$ zu bestimmen.

Die Teilprobleme und ihre Rekursionsgleichungen

Bestimme nicht nur eine optimale Lösung für die Aufgaben in $\{1, \dots, n\}$, sondern für alle Teilmengen $\{1, \dots, i\}$:

$\text{opt}(i)$ = Der Gesamtwert einer optimalen Lösung für die Aufgaben in $\{1, \dots, i\}$

Wir erhalten die Rekursionsgleichung

$$\text{opt}(i) = \max\{\text{opt}(a(i)) + w_i, \text{opt}(i - 1)\}$$

- Entweder eine optimale Lösung führt Aufgabe i aus und wir erzielen den Gesamtwert $\text{opt}(a(i)) + w_i$.
- Oder Aufgabe i wird nicht ausgeführt und wir erzielen den Gesamtwert $\text{opt}(i - 1)$.

- (1) Sortiere alle n Aufgaben nach aufsteigender Terminierungszeit. Wir nehmen $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n$ an.
- (2) Für jedes i
 - ▶ bestimme $a(i)$, die Aufgabe mit spätester Terminierungszeit, die vor Aufgabe i endet.
 - ▶ Wenn es keine vor Aufgabe i endende Aufgabe gibt, dann setze $a(i) = 0$.
- (3) Setze $\text{opt}(0) = 0$.
// Wenn keine Aufgabe auszuführen ist, dann entsteht kein Wert.
- (4) for ($i = 1, i \leq n; i++$)
 $\text{opt}(i) = \max\{\text{opt}(a(i)) + w_i, \text{opt}(i - 1)\},$

Wie schnell kann in Schritt (2) des Algorithmus eines der $a(i)$ berechnet werden?

- (1) $\Theta(\sqrt{n})$
- (2) $\Theta(\log n)$
- (3) $\Theta(1)$
- (4) $\Theta(n \log n)$
- (5) $\Theta(n)$

Auflösung: (2) $\Theta(\log n)$, binäre Suche!

Wie bestimmt man denn ein optimales Scheduling?

Wir kennen den Wert einer optimalen Auswahl, aber nicht die optimale Auswahl selbst!

- Wir definieren ein Array V , so das $V[i] = j \Leftrightarrow j$ ist die letzte, „vor“ Aufgabe i ausgeführte Aufgabe.
 - Setze $V[0] = 0$.
 - Wenn $\text{opt}(i) = \text{opt}(a(i)) + w_i$, dann gehört i zur optimalen Auswahl unter den ersten i Aufgaben. Wir setzen $V[i] = i$.
 - Ansonsten ist $\text{opt}(i) = \text{opt}(i - 1)$. Wir setzen $V[i] = V[i - 1]$.
- Berechne die optimale Auswahl $A \subseteq \{1, \dots, n\}$ durch:
 - (1) $A = \emptyset; i = n$; // Initialisierung.
 - (2) while ($i \neq 0$)
 - $A = A \cup \{V[i]\}$; // $V[i]$ ist die letzte ausgeführte Aufgabe
 - $i = a(V[i])$; // und $V[a(V[i])]$ die vorletzte.
 - (3) Entferne die imaginäre Aufgabe 0 aus A , falls vorhanden.

Das All-Pairs-Shortest-Path Problem

Das All-Pairs-Shortest-Path Problem

Eingabe: Gegeben ist ein gerichteter Graph
 $G = (\{1, \dots, n\}, E)$ sowie die Kantenlängen

$$\text{länge} : E \rightarrow \mathbb{R}.$$

Aufgabe: Für je zwei Knoten u und v ist

$\text{distanz}[u][v]$ = die Länge eines kürzesten
Weges von u nach v

zu berechnen.

Unsere Frage: Was ist die erste Kante (u, w) eines kürzesten Weges $W(u, v)$ von u nach v ?

- $W(u, v)$, nach Herausnahme der Kante (u, w) , ist ein kürzester Weg von w nach v , und **dieser Weg hat eine Kante weniger**.
- Unsere zweite Frage gilt der zweiten Kante von $W(u, v)$. Der verbleibende Weg hat jetzt zwei Kanten weniger.
- Um unsere eigenen Fragen beantworten zu können, müssen wir für alle Knoten u, v und alle i , die Länge eines kürzesten Weges von u nach v **mit höchstens i Kanten** bestimmen.

Die Teilprobleme und ihre Rekursionsgleichungen

Wir führen die Teilprobleme

$\text{distanz}_i[u][v]$ = die Länge eines kürzesten Weges von u nach v
mit höchstens i Kanten

ein und erhalten sofort die **Rekursionsgleichungen**

$$\text{distanz}_i[u][v] = \min_{w, (u,w) \in E} \{ \text{länge}(u, w) + \text{distanz}_{i-1}[w][v] \}$$

Die Länge eines kürzesten Weges von u nach v mit höchstens i Kanten ist das Minimum über die Längen aller kürzesten Wege, die

- von u zu einem Nachbarn w
- und dann von w über höchstens $i - 1$ Kanten nach v laufen.

Der Bellman-Ford Algorithmus

$$(1) \text{ Setze } \text{distanz}[u][v] = \begin{cases} \text{länge}(u, v) & (u, v) \in E, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

// Nächster[u][v] soll stets der auf u folgende Knoten auf einem
// kürzesten Weg von u nach v sein.

$$\text{Nächster}[u][v] = \begin{cases} v & (u, v) \in E, \\ \text{nil} & \text{sonst} \end{cases}$$

(2) for ($i = 1; i \leq n - 1, i++$)

for ($u = 1; u \leq n, u++$)


für alle Knoten v : $\text{distanz}[u][v] =$

$\min_{w, (u,w) \in E} \{ \text{länge}(u, w) + \text{distanz}[w][v] \}$. ◀

Wenn das Minimum im Knoten w angenommen wird,
dann setze $\text{Nächster}[u][v] = w$.

Warum können wir $\text{distanz}_i[u][v]$ durch $\text{distanz}[u][v]$ ersetzen?

The Good and the Bad

- **Die guten Nachrichten:** Wir können einen kürzesten Weg von u nach v rekonstruieren, wenn wir von u nach $u_1 = \text{Nächster}[u][v]$ und von u_1 nach $u_2 = \text{Nächster}[u_1][v]$ wandern.
- **Die guten Nachrichten:** Auch bei negativen Kantengewichten funktioniert Bellman-Ford, **solange** es keine Kreise negativer Länge gibt.
- **Die schlechten Nachrichten:** Der Aufwand ist sehr hoch. 
 - ▶ Wir haben $n - 1$ „Runden“, wobei n die Anzahl der Knoten ist.
 - ▶ Pro Runde werden die Summen $\text{länge}(u, w) + \text{distanz}[w][v]$ für alle Knoten v und alle Kanten (u, w) bestimmt. (Keine Neuberechnung erforderlich, wenn sich $\text{distanz}[w][v]$ nicht ändert.)
 - ▶ Pro Runde werden $O(|V| \cdot |E|)$ und insgesamt $O(|V|^2 \cdot |E|)$ Operationen ausgeführt.

Dijkstra's Algorithmus, für jeden Knoten ausgeführt, benötigt höchstens $O(|V| \cdot |E| \cdot \log_2 |V|)$ Operationen.

Wenn alle kürzesten Pfade in G nur aus höchstens k Kanten bestehen, wie schnell kann dann Bellman-Ford ausgeführt werden?

- (1) $\Theta(|V| \cdot |E|)$
- (2) $\Theta(|V| \cdot |E| \cdot \log k)$
- (3) $\Theta(|V| \cdot |E| \cdot \log k \cdot \log |V|)$
- (4) $\Theta(|V| \cdot |E| \cdot k)$
- (5) $\Theta(|V|^2 / \log k \cdot |E|)$

Auflösung: (4) $\Theta(|V| \cdot |E| \cdot k)$.

Der Algorithmus von Floyd

Ziel: Eine Beschleunigung von Bellman-Ford.

Unsere Frage an das Orakel: Durchläuft ein kürzester Weg $W(u, v)$ von u nach v den Knoten n als **inneren** Knoten oder nicht?

- **Wenn ja**, dann erhalten wir $W(u, v)$, indem wir zuerst einen kürzesten Weg $W(u, n)$ von u nach n und dann einen kürzesten Weg $W(n, v)$ von n nach v durchlaufen!

Und was ist die große Erkenntnis?

Weder $W(u, n)$ noch $W(n, v)$ besitzen n als **inneren** Knoten.

- **Wenn nein**, dann wissen wir auch mehr, denn $W(u, v)$ benutzt n **nicht** als inneren Knoten.

Die Teilprobleme und ihre Rekursionsgleichungen

Wir führen deshalb die **Teilprobleme**

$\text{distanz}_i[u][v]$ = die Länge eines kürzesten Weges von u nach v
mit *inneren* Knoten aus der Menge $\{1, \dots, i\}$.

ein. Die Teilprobleme für $i = 0$ sind trivial (keine inneren Knoten):

$$\text{distanz}_0[u][v] = \begin{cases} \text{länge}(u, v) & (u, v) \in E, \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Die **Rekursionsgleichungen**: $\text{distanz}_i[u][v] =$

$$\min\{ \text{distanz}_{i-1}[u][v], \text{distanz}_{i-1}[u][i] + \text{distanz}_{i-1}[i][v] \}.$$



Entweder *lasse i aus* oder *laufe von u nach i und dann nach v .*

Die Matrix A :

$$A[u][v] = \begin{cases} \text{länge}(u, v) & \text{falls } (u, v) \in E, \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Der Algorithmus:

```

for (u=1; u ≤ n; u++)
  for (v=1; v ≤ n; v++)
    distanz0[u][v] = A[u][v];
for (i=1; i ≤ n; i++)
  for (u=1; u ≤ n; u++)
    for (v=1; v ≤ n; v++)
      { temp = distanzi-1[u][i] + distanzi-1[i][v];
      distanzi[u][v] = (distanzi-1[u][v] > temp) ?
      temp : distanzi-1[u][v]; }  

```

Die Berechnung von $\text{distanz}_i[u][v]$ ist jetzt wesentlich schneller.
Laufzeit insgesamt $\blacktriangleright = O(n^3)$.

- Aber $O(n^3)$ Speicherplatz inakzeptabel.
- Es ist stets $\text{distanz}_{i-1}[u][i] = \text{distanz}_i[u][i]$ sowie $\text{distanz}_{i-1}[i][v] = \text{distanz}_i[i][v]$.
- Wir können die Abhängigkeit von i unterschlagen. \blacktriangleright

```
for (i=1; i ≤ n; i++)  
  for (u=1; u ≤ n; u++)  
    for (v=1; v ≤ n; v++)  
      {temp = A[u][i] + A[i][v];  
       A[u][v] = (A[u][v] > temp) ? temp : A[u][v]; }
```

Für Graphen mit n Knoten und m Kanten:

Bellman-Ford

- **Vorteile:** Arbeitet sogar in (asynchronen) verteilten System korrekt. (Wichtig für Internet Anwendungen)
Relativ schnell, wenn Distanz-Werte sich selten ändern.
- **Nachteile:** Lausige worst case Laufzeit $O(n^2 \cdot m)$.
Reagiert selbst bei kleinen Änderungen der Kantenlängen sehr träge.

Floyd

- **Vorteile:** Schneller als Bellman-Ford mit Laufzeit $O(n^3)$.
- **Nachteile:** Langsamer als Dijkstra für schlanke Graphen.
Kann nicht in (asynchronen) verteilten Systemen eingesetzt werden.

Das paarweise Alignment

Für **DNA-Sequenzen**, **RNA-Sequenzen** und **Proteine**: die Ähnlichkeit von Sequenzen impliziert „häufig“ ihre funktionale Ähnlichkeit.

DNA-Sequenzen, RNA-Sequenzen und Proteine entsprechen in ihrer Primärstruktur Strings über einem vier- bzw. 20(21)-elementigem Alphabet (Nukleotide bzw. Aminosäuren):

Führe eine Ähnlichkeitsanalyse von zwei Strings durch.

- Sei Σ eine endliche Menge, das Alphabet.
- Für $n \in \mathbb{N}$ ist Σ^n die Menge der Strings über Σ der Länge n .
- $\Sigma^* = \bigcup_{n=0}^{\infty} \Sigma^n$ ist die Menge aller Strings über Σ .
- Für einen String $w \in \Sigma^*$ ist w_i der i te Buchstabe von w .
- ϵ bezeichnet das Blankensymbol.

Ähnlichkeitsanalyse

Strings $u^*, v^* \in (\Sigma \cup \{-\})^*$ bilden ein **Alignment** der Strings $u, v \in \Sigma^*$ genau dann, wenn

- u (bzw. v) durch Entfernen der Blanksymbole aus u^* (bzw. v^*) entsteht und
- u^*, v^* dieselbe Länge besitzen.

Das paarweise globale Alignment Problem für Strings u, v und ein Ähnlichkeitsmaß

$$d : (\Sigma \cup \{-\}) \times (\Sigma \cup \{-\}) \rightarrow \mathbb{R}$$

Das Ziel: Bestimme ein Alignment u^*, v^* mit maximaler „Übereinstimmung“

$$q(u^*, v^*) = \sum_i d(u_i^*, v_i^*).$$

Ein Beispiel: Die Strings

$u = GCTGATATAGCT$

$v = GGGTGATTAGCT$

besitzen das Alignment

$u^* = -GCTGATATAGCT$

$v^* = GGGTGAT-TAGCT$

Wie könnte v aus u durch „Punktmutationen“ entstanden sein?

- Füge G an Position 1 in u hinzu,
- ersetze C in Position 3 durch G und
- lösche A in Position 8.

Alignments sollen also die „Mutationsdistanz“ zwischen zwei Strings messen.

Unsere Frage an das Orakel: Was sind die letzten Buchstaben u_N^* und v_N^* eines optimalen Alignments u^* und v^* ?

- **Fall 1:** $u_N^* \neq -$ und $v_N^* \neq -$. Problem zurückgeführt auf ein optimales Alignment von u und v nach Streichen des jeweilig letzten Buchstabens.
- **Fall 2:** $u_N^* = -$ und $v_N^* \neq -$. Problem zurückgeführt auf ein optimales Alignment von u und v nach Streichen des letzten Buchstabens von v .
- **Fall 3:** $u_N^* \neq -$ und $v_N^* = -$. Problem zurückgeführt auf ein optimales Alignment von u und v , nach Streichen des letzten Buchstabens von u .

Die Teilprobleme

Wir werden stets von einem **optimalen** Alignment für u und v auf ein **optimales** Alignment für **Präfixe** von u und v geführt.

Deshalb führen wir die Teilprobleme „Bestimme $D(i, j)$ “ ein mit

$D(i, j)$ = der Wert eines optimalen Alignments für die Präfixe $u_1 \cdots u_i$ und $v_1 \cdots v_j$.

Eine Lösung der trivialen Teilprobleme:

$$D(i, 0) = \sum_{k=1}^i d(u_k, -) \quad \text{und} \quad D(0, j) = \sum_{k=1}^j d(-, v_k),$$

denn wir müssen ausschließlich Buchstaben löschen bzw. hinzufügen.

Die Rekursionsgleichungen

- **Fall 1:** $u_i^* \neq -$ und $v_j^* \neq -$

$$D(i, j) = D(i - 1, j - 1) + d(u_i, v_j),$$

- **Fall 2:** $u_i^* = -$ und $v_j^* \neq -$

$$D(i, j) = D(i, j - 1) + d(-, v_j),$$

- **Fall 3:** $u_i^* \neq -$ und $v_j^* = -$

$$D(i, j) = D(i - 1, j) + d(u_i, -)$$

und wir erhalten die Rekursionsgleichungen

$$D(i, j) = \max \left\{ \begin{aligned} &D(i - 1, j - 1) + d(u_i, v_j), \\ &D(i, j - 1) + d(-, v_j), \\ &D(i - 1, j) + d(u_i, -) \end{aligned} \right\}.$$

Das Programm

Der String u habe n und der String v habe m Buchstaben.

(1) // **Initialisierung.**

$$D(0, 0) = 0;$$

for ($i = 1; i \leq n; i++$)

$$D(i, 0) = \sum_{k=1}^i d(u_k, -);$$

for ($j = 1; j \leq m; j++$)

$$D(0, j) = \sum_{k=1}^j d(-, v_k);$$

(2) // **Iteration.**

for ($i = 1; i \leq n; i++$)

for ($j = 1; j \leq m; j++$)

$$D(i, j) = \max\{ D(i-1, j-1) + d(u_i, v_j), \\ D(i, j-1) + d(-, v_j), \\ D(i-1, j) + d(u_i, -) \}.$$

Wie schnell wird das Alignment für Strings der Größen n und m berechnet?

- (1) $\Theta(n + m)$
- (2) $\Theta((\min\{n, m\})^2)$
- (3) $\Theta(n \cdot m)$
- (4) $\Theta((\max\{n, m\})^2)$
- (5) $\Theta(n^m)$

Auflösung: (3) $\Theta(n \cdot m)$

Das globale Alignment für zwei Strings der Längen n und m wird in Zeit höchstens $O(n \cdot m)$ bestimmt.

Unser Ansatz kann auch für andere Alignment Varianten wie

- das semi-globale Alignment und
- das lokale Alignment

benutzt werden.

Unser Algorithmus ist zu langsam für die Suche in großen Datenbanken langer Strings:

Heuristiken wie **BLAST** oder **FASTA** werden verwendet.

Die RNA-Sekundärstruktur

- Während die Doppelhelix der DNA aus zwei komplementären Strängen mit den komplementären Basenpaaren (A, T) und (G, C) besteht, besitzt die RNA nur einen einzigen Strang.
- Wichtig für die Funktionalität eines RNA Moleküls ist seine *Sekundärstruktur*:

Der Strang des RNA Moleküls faltet sich, um Bindungen zwischen den komplementären Basen $\{A, U\}$ und $\{C, G\}$ einzugehen.

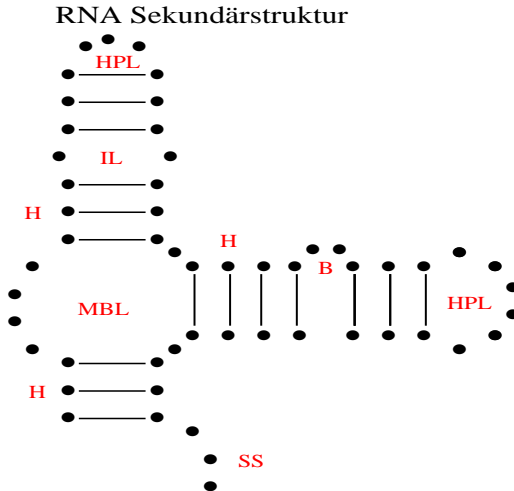
Das Ziel: Bestimme die Sekundärstruktur der Primärstruktur

$$R \in \{A, C, G, U\}^n.$$

Welche Eigenschaften hat die Sekundärstruktur?

Die RNA-Sekundärstruktur: Ein Beispiel

(www.zib.de/MDGroup/temp/lecture/I5/p_secondary/rna_second.pdf)



B bulge, H helix, HPL hairpin loop, IL internal loop, MBL multibranch loop or junction, SS single strand

„Formalisierung“ der Sekundärstruktur

$R \in \{A, C, G, U\}^n$ sei die **Primärstruktur** eines RNA Moleküls.

Eine Menge $P \subseteq \{ \{i, j\} \mid 1 \leq i \neq j \leq n \}$ von Paarmengen ist eine **Sekundärstruktur**, falls:


- Für jedes Paar $\{i, j\} \in P$ gilt $|i - j| \geq 5$.
 - ▶ **Bindungen nur ab Distanz 5**: Sonst knickt die Faltung zu „scharf ab“.
- Die Paare in P bilden ein **Matching**. Jede Position $i \in \{1, \dots, n\}$ gehört zu höchstens einem Paar in P .
- Paare in P entsprechen komplementären Basen. Für jedes Paar $(i, j) \in P$ ist entweder $\{R_i, R_j\} = \{A, U\}$ oder $\{R_i, R_j\} = \{C, G\}$.
- Die Faltung besitzt **keine „Überkreuzungen“**:
 - ▶ Wenn $\{i, j\} \in P$ (für $i < j$) und $(k, l) \in P$ (für $k < l$),
 - ▶ dann ist $i < k < j < l$ ausgeschlossen. ▶

Die obigen Eigenschaften werden von den „meisten“ RNA-Molekülen angenommen.

- **Annahme:** Der String R faltet sich, um die Anzahl der Bindungen zu maximieren.
- **Das Ziel:** Bestimme eine Sekundärstruktur $P \subseteq \{ \{i, j\} \mid 1 \leq i \neq j \leq n \}$ mit **maximaler Anzahl Bindungen**.

Unsere Frage an das Orakel:

- Besitzt eine optimale Faltung eine Bindung für die letzte Position?
- Wenn ja, mit welcher Position i wird die Bindung eingegangen?

Angenommen eine optimale Sekundärstruktur P_{opt} enthält das Paar $\{i, n\}$. Dann zerfällt P_{opt} in zwei **optimale** Sekundärstrukturen: 

- die Sekundärstruktur für den Präfix von R zu den Positionen $1, \dots, i - 1$ und
- die Sekundärstruktur für den Suffix von R zu den Positionen $i + 1, \dots, n - 1$.

Die Teilprobleme und ihre Rekursionsgleichungen

Die Idee:

Berechne optimale Sekundärstrukturen für alle **Teilstrings** von R .

Wir definieren deshalb die Teilprobleme

$D(i, j)$ = Die Größe einer optimalen Sekundärstruktur für den Teilstring $R_i \cdots R_j$.

- **Fall 1:** j gehört zu keinem Paar in P_{opt} . Es ist $D(i, j) = D(i, j - 1)$.
- **Fall 2:** Ein Paar (k, j) gehört zu P_{opt} .
Dann ist $D(i, j) = D(i, k - 1) + 1 + D(k + 1, j - 1)$.
 - ▶ Aber wir kennen k nicht!
 - ▶ Kein Problem, maximiere über alle $i < k \leq j - 5$.

Die Rekursionsgleichungen

Das Paar (k, j) heißt **wählbar**, falls

- $i \leq k \leq j - 5$: Keine zu scharfen Knicke und
- $\{R_k, R_j\} = \{A, U\}$ oder $\{R_k, R_j\} = \{C, G\}$:
Wir fordern komplementäre Basen.

Die Rekursionsgleichungen:

$$D(i, j) = \max_{k, (k, j) \text{ ist wählbar}} \{D(i, k - 1) + D(k + 1, j - 1) + 1, D(i, j - 1)\}$$

Die Intervallgrenzen $(i, k - 1)$ und $(k + 1, j - 1)$ sichern die Matching-Eigenschaft:

Weder k noch j treten in einem weiteren Paar auf.

- (1) for ($l = 1; l \leq 4; l++$)
 for ($i = 1; i \leq n - l; i++$)
 Setze $D(i, i + l) = 0$; // $D(i, i + l) = 0$ für $l \leq 4$.
- (2) for ($l = 5; l \leq n - 1; l++$)
 // l beschreibt die Länge des Teilstrings.
 for ($i = 1; i \leq n - l; i++$)
 // i ist die erste Position des Teilstrings und $j = i + l$ die letzte.

$$j = i + l$$
$$D(i, j) = \max_{k, (k, j) \text{ ist wählbar}} \{D(i, k - 1) + D(k + 1, j - 1) + 1, D(i, j - 1)\}$$

Wie schnell kann die RNA Sekundärstruktur für Stringgröße n berechnet werden?

- (1) $\Theta(n)$
- (2) $\Theta(n^2)$
- (3) $\Theta(n^3)$
- (4) $\Theta(n^4)$
- (5) $\Theta(n^5)$

Auflösung: (3)

Die Laufzeit ist $O(n^3)$, denn jedes der n^2 Teilprobleme kann in Zeit $O(n)$ gelöst werden.

- Der zentrale Schritt ist der Entwurf einer Hierarchie von Teilproblemen.
 - ▶ Der Orakel-Ansatz: Wir befragen ein Orakel über eine optimale Lösung und tasten uns sukzessive an die optimale Lösung heran.
Aber Achtung: Wir müssen unsere Fragen selbst beantworten.
- Was war unsere jeweils erste Frage?
 - ▶ Für das **gewichtete Intervall Scheduling**: Wird die Aufgabe mit spätester Terminierungszeit ausgewählt oder nicht?
 - ▶ Für **kürzeste Wege-Probleme**: Wird Knoten n durchlaufen ? (Floyd) Welche Kante wird als erste gewählt (TSP und Bellman-Ford)?
 - ▶ Für das **paarweise Alignment**: Wird der letzte Buchstabe von u gegen den letzten Buchstaben von v oder gegen das Blank-Symbol aligniert?

- Wenn wir die Antwort auf die erste Frage kennen, dann sollte das Auffinden einer optimalen Lösung, im Vergleich zum Ausgangsproblem, ein **ähnliches, aber einfacheres** Problem sein.
- Wir stellen weitere Fragen, da das „Restproblem“ immer noch zu hart sein wird.
 - ▶ Beschreibe die Menge aller insgesamt gestellten Fragen,
 - ▶ oder äquivalent dazu: Formuliere die **Teilprobleme**.
- Stelle die **Rekursionsgleichungen** auf, um alle Fragen zu beantworten, bzw. alle Teilprobleme zu lösen.
 - ▶ Stelle sicher, dass die Anzahl der Teilprobleme nicht zu groß ist
 - ▶ und dass die Teilprobleme ausreichend schnell lösbar sind!

Aber wie stellt man gute Fragen? **Gute Frage!**

Die Lineare Programmierung ist eine sehr mächtige Technik für die Lösung von Optimierungsproblemen.

- Bedingungen werden durch ein System von linearen Ungleichungen definiert.
- Eine optimale Lösung muss alle Ungleichungen erfüllen und eine lineare Zielfunktion optimieren.

Formal:

$$\max \sum_{i=1}^n c_i \cdot x_i \quad \text{so dass} \quad \sum_{j=1}^n a_{i,j} \cdot x_j \leq b_i \quad \text{für } i = 1, \dots, m$$
$$x_1, \dots, x_n \geq 0. \text{ (Web)}$$

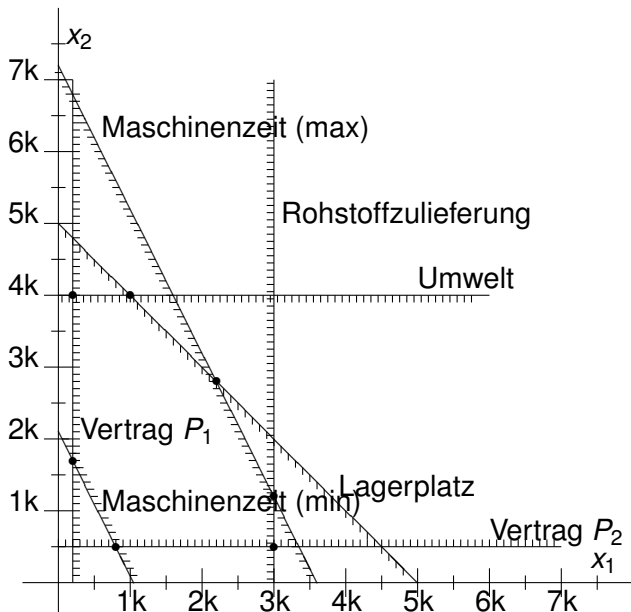
Ein Beispiel

- Ein Unternehmen verfügt über eine Maschine, auf der zwei verschiedene Produkte P_1 und P_2 produziert werden können.
- Eine Einheit von P_1 bringt 7 Euro Gewinn, eine Einheit P_2 bringt 4 Euro. Die Zielfunktion ist $7 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2$.
- Die Produktion einer Einheit von P_1 nimmt die Maschine 4 Minuten in Anspruch, eine Einheit P_2 ist in 2 Minuten fertig. Die Maschine steht im Monat für 240 Stunden, also für 14400 Minuten, zur Verfügung. Wir erhalten die Ungleichung $4 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 \leq 14400$.
- Weitere Bedingungen wie Rohstoffverbrauch, Absatzmöglichkeiten etc. führen auf weitere Ungleichungen.

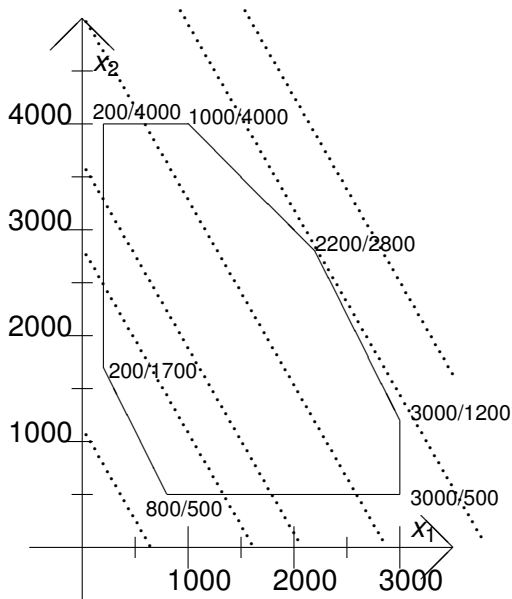
Wie kann eine optimale Lösung bestimmt werden?

Zuerst eine geometrische Interpretation.

Die Ungleichungen



Der Lösungsraum und die Zielfunktion



Man bezeichnet den Lösungsraum auch als **Polytop**.

- Um eine optimale Lösung zu bestimmen, verschiebe die Gerade $7 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2 = 0$ so weit wie möglich „nach oben“.
- Die Gerade wird dann auf eine **Ecke** treffen. (Ecken erfüllen zwei oder mehrere Ungleichungen exakt.)
- Die Situation im **n -dimensionalen** ist ungleich komplizierter, aber es gibt schnelle Algorithmen.
 - ▶ Der Simplex-Algorithmus sucht nach einer optimalen Ecke.
 - ▶ Interior-Point Verfahren durchstossen das Innere des Polytops und sind häufig schneller.

Das Zuordnungsproblem (bipartites Matching)

- n Angestellte und m Aufgaben sind gegeben.
- $k_{i,j}$ ist die Kompetenz des Angestellten i für die Aufgabe j .
- Weise jeder Aufgabe j höchstens einen Angestellten $i(j)$ und jedem Angestellten höchstens eine Aufgabe zu. Maximiere die Kompetenz

$$\sum_{j=1}^m k_{i(j),j}$$

Die Formulierung als ein lineares Program:

$$\max \sum_{i,j} k_{i,j} \cdot x_{i,j} \quad \text{so dass} \quad \sum_i x_{i,j} \leq 1 \text{ für alle Aufgaben } j,$$

$$\sum_j x_{i,j} \leq 1 \text{ für alle Angestellten } i,$$

$$x_{i,j} \geq 0 \text{ für alle } i, j$$

- Wenn $x_{i,j}$ stets entweder 0 oder 1 ist, dann beschreibt x eine legale Zuordnung.
- Im Zuordnungsproblem ist jede Ecke **integral**, das heißt jede Komponente ist ganzzahlig.
 - ▶ Jede Ecke hat nur 0- oder 1-Komponenten.
 - ▶ Die lineare Programmierung löst also das Zuordnungsproblem, wenn wir eine optimale Ecke zum Beispiel mit dem Simplex Algorithmus berechnen.
- Für viele andere Probleme wird es aber **fraktionale** Ecken geben.
 - ▶ **Zentrale Frage:** Wie erhält man aus einer **optimalen fraktionalen** Lösung eine **gute integrale** Lösung?

$$\max \sum_{i=1}^n c_i \cdot x_i \quad \text{so dass} \quad \sum_{j=1}^n a_{i,j} \cdot x_j \leq b_i \quad \text{für } i = 1, \dots, m$$
$$x_1, \dots, x_n \geq 0.$$

Kann man die Bedingung $x_i = 2x_j$ in einem linearen Programm ausdrücken?

- Ja.
- Nein.
- Keine Ahnung

Auflösung: Ja, benutze $x_i - 2x_j \leq 0$ und $-x_i + 2x_j \leq 0$.