Elementi di Bioinformatica

UniShare

Davide Cozzi
@dlcgold

Indice

1 Introduzione **2**

2 Introduzione alla Bioinformatica **3**
2.1 Bit-Parallel 3
2.1.1 Algoritmo Dömölki/Baeza-Yates 4

Capitolo 1

Introduzione

Questi appunti sono presi a lezione. Per quanto sia stata fatta una revisione è altamente probabile (praticamente certo) che possano contenere errori, sia di stampa che di vero e proprio contenuto. Per eventuali proposte di correzione effettuare una pull request. Link: `https://github.com/dlcgold/Appunti`.
Grazie mille e buono studio!

Capitolo 2

Introduzione alla Bioinformatica

Un po' di notazione per le stringhe:

- **simbolo:** $T[i]$
- **stringa:** $T[1]T[2][n]$
- **sottostringa:** $T[i:j]$
- **prefisso:** $T[:j] = T[1:j]$ (inclusi gli estremi)
- **suffisso:** $T[i:] = T[i:|T|]$ (inclusi gli estremi)
- **concatenazione:** $T_1 \cdot T_2 = T_1T_2$

In bioinformatica si lavora soprattutto con le stringhe, implementando algoritmi, per esempio, di pattern matching. Nel pattern maching si ha un testo T come input e un pattern P (solitamente di cardinalità minore all'input) da ricercare. Si cerca tutte le occorrenze di P in T. L'algoritmo banale prevede due cicli innestati e ha complessità $O(nm)$ con n lunghezza di T e m lunghezza di P. Il minimo di complessità sarebbe $O(n+m)$ (è il **lower bound**). Si ragiona anche sulla costante implicita della notazione O-Grande cercando di capire quale sia effettivamente l'algoritmo migliore con la quantità di dati che si deve usare. Bisogna quindi bilanciare pratica e teoria.

2.1 Bit-Parallel

È un algoritmo veloce in pratica ma poco performante a livello teorico, infatti ha complessità $O(nm)$.

for $i = 1 \rightarrow n$ **do**
  $trovato \leftarrow true$
  for $j = 1 \rightarrow m$ **do**
    if $T[1 + j - 1] <> P[j]$ **then**
      $trovato \leftarrow false$
    end if
  end for
  if $trovato$ **then**
    $print(i)$
  end if
end for

Questo algoritmo è facilmente eseguibile dall'hardware del pc.
In generale si hanno **algoritmi numerici** che trattano i numeri e gli **algoritmi simbolici** che manipolano testi.
Si hanno poi gli **algoritmi semi-numerici** che trattano i numeri secondo la loro rappresentazione binaria, manipolando quest'ultima con *or* $\vee$, *and wedge*, *xor* $\oplus$, *left-shift* $<<$ *e right-shift* $>>$. Ricordiamo che il left shift sposta di k posizioni a sinistra i bit, scartandone k in testa e aggiumgendo altrettanti zeri in coda (lo shift a destra sposta a destra, scarta in coda e aggiunge zeri in testa). Queste sono operazioni bitwise e sono mappate direttamente sull'hardware, rendendo tutto estremamente efficiente.

2.1.1 Algoritmo Dömölki/Baeza-Yates

Questo algoritmo viene anche chiamato **algoritmo shift-and o anche bit parallel string matching**.
Si definisce una stringa T, di cardinalità n in input e un pattern P di cardinalità m.
Si costruisce una matrice M *ipotetica*, di dimensione $n \times m$, con un indice i per P e uno j per T dove:

$$M(i,j) = 1 \; sse \; P[:j] = T[j - i + 1 : j],\; 0 \leq i \leq m,\; 0 \leq j \leq n$$

Quindi $M(i,j) = 1$ sse i primi i caratteri del pattern sono uguali alla sottostring lunga i in posizione $j - i + 1$ del testo.
Questa matrice è veloce da costruire e si ha:

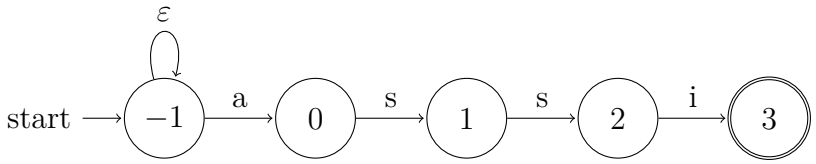
$$M(m,\cdot) = 1,\; M(0,\cdot) = 1,\; M(\cdot,0) = 0$$

$$M(i,j) = 1 \; sse \; M(i = 1, j = 1) \; AND \; P[i] = T[j]$$

la prima riga saranno tutti 1 ($M(0,\cdot) = 1$) in quanto la stringa vuota c'è sempre mentre la prima colonna saranno tutti 0 ($M(\cdot,0) = 0$) in quanto un testo vuoto non matcha mai con una stringa non vuota.
Quindi la matrice avrà 1 solo se i primi caratteri del pattern $P[i]$ sono uguali alla porzione di testo $= T[j-i+1:j]$. Ma in posizione $M(i-1,j-1)$ mi accorgo che ho 1 se ho un match anche con un carattere in meno di P e T. Qindi se $M(i-1,j-1) = 0$ lo sarà anche $M(i,j)$. Se invece $M(i-1,j-1) = 1$ devo controllare solo il carattere $P[i]$ e $T[j]$ e vedere se $P[i] = T[j]$. Ovvero, avendo $P = assi$ e $T = apassi$ si avrebbe (omettendo la prima riga e la prima colonna in quanto banali):

	j	1	2	3	4	5	6
i		a	p	a	s	s	i
1	a	1	0	1	0	0	0
2	s	0	0	0	1	0	0
3	s	0	0	0	0	1	0
4	i	0	0	0	0	0	1

Con un automa non deterministico sarebbe:



La matrice la costruisco con due cicli e controllo solo l'ultima riga ma il guadagno non si ha a livello di complessità, in quanto sempre $O(nm)$, ma dall'architettura a 64bit della cpu. Con una word della cpu posso memorizzare una colonna intera, in quanto vista come numero binario. Ora lavoro in parallelo su più bit, con un algoritmo **bit-parallel**, facendo ogni volta 64 confronti tra binari. In questo modo crolla la costante moltiplicativa nell'O-grande.
Ma come passo da una colonna $C[j]$ a una $C[j-1]$? Con questi step:

- la colonna $C[j]$ corrisponde al right shift della colonna $C[j-1]$
- aggiungo 1 in prima posizione per compensare lo shift
- faccio l'AND con $U[T[j]]$, che è un array binario lungo come il pattern dove ho un binario con 1 se è il carattere di riferimento:

P=abca
U[a]=1001
U[b]=0100
U[c]=0010

- ragiono sul word size ω in caso di pattern più grandi di 64bit.

ottengo:

C[j]=((C[j-1])»1)|(1«(ω-1)&U[T[j]])

Sapendo una colonna della matrice voglio calcolare la colonna seguente. Quindi $M[i,j] = M[i-1,j-1]\ AND\ P[i] = T[j]$ (per esempio, $M[1,j] = TRUE\ AND\ (p[i] = T[j])$) Cioè conta solo il confronto dei caratteri. In pratica con lo shift sposto in basso di uno la colonna e faccio il confronto.
Ogni 1 nell'ultima riga corrisponde ad un'occorrenza.
Però si ha il limite dei 64bit di lunghezza del pattern e l'uso di più word comporta il riporto sulla colonna seguente, fattore che si complica all'aumentare della lunghezza del pattern, soprattutto se arbitraria. Abbiamo inoltre il vantaggio di non avere branch if/else.