Elementi di Bioinformatica

Gianluca Della Vedova

Univ. Milano-Bicocca http://gianluca.dellavedova.org

22 ottobre 2018

Trie

- Albero
- Query: parola ∈ dizionario
- archi etichettati
- Percorso radice-foglia = parola

Dizionario

ABRACADABRA ARRAY

Trie

- Albero
- Query: parola ∈ dizionario
- archi etichettati
- Percorso radice-foglia = parola

Dizionario

ABRACADABRA ARRAY



Trie

- Albero
- Query: parola ∈ dizionario
- archi etichettati
- Percorso radice-foglia = parola

Dizionario

ABRACADABRA

ARRAY

ABRA



Terminatore

\$ non appartiene all'alfabeto

Terminatore

\$ non appartiene all'alfabeto

Dizionario

ABRACADABRA\$

ARRAY\$

ABRA\$

Terminatore

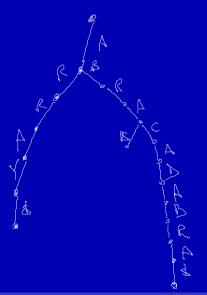
\$ non appartiene all'alfabeto

Dizionario

ABRACADABRA\$

ARRAY\$

ABRA\$



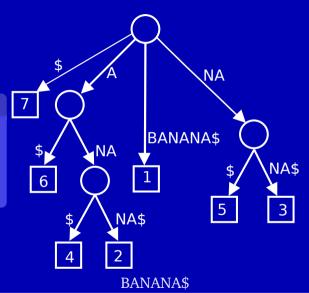
Definizione

■ Trie compatto di tutti i suffissi di *T*\$

- Trie compatto di tutti i suffissi di *T*\$
- Le etichette degli archi uscenti da *x* iniziano con simboli diversi

- Trie compatto di tutti i suffissi di *T*\$
- Le etichette degli archi uscenti da *x* iniziano con simboli diversi
- suffissi ⇔ percorso radice-foglia

- Trie compatto di tutti i suffissi di *T*\$
- Le etichette degli archi uscenti da *x* iniziano con simboli diversi
- \blacksquare suffissi \Leftrightarrow percorso radice-foglia



Suffix tree 2: Definizione

- foglie etichettata con posizione inizio suffisso
- \blacksquare path-label(x): concatenazione etichette
- string-depth(x): lunghezza path-label(x)
- Pattern matching = visita

Problem:

Spazio $O(n^2)$

Suffix tree 2: Definizione

- foglie etichettata con posizione inizio suffisso
- \blacksquare path-label(x): concatenazione etichette
- string-depth(x): lunghezza path-label(x)
- Pattern matching = visita

Problemi

- Spazio $O(n^2)$
- Puntatori al testo (posizioni)

Suffix tree 2: Definizione

- foglie etichettata con posizione inizio suffisso
- \blacksquare path-label(x): concatenazione etichette
- string-depth(x): lunghezza path-label(x)
- Pattern matching = visita

Problemi

- Spazio $O(n^2)$
- Puntatori al testo (posizioni)
- Spazio 20*n* bytes

Definizione

Array dei suffissi in ordine lessicografico

- Array dei suffissi in ordine lessicografico
- Posizioni iniziali del suffisso nell'array

- Array dei suffissi in ordine lessicografico
- Posizioni iniziali del suffisso nell'array
- Spazio 4n bytes

- Array dei suffissi in ordine lessicografico
- Posizioni iniziali del suffisso nell'array
- Spazio 4n bytes
- Lcp[i]: lunghezza prefisso comune SA[i], SA[i+1]

Definizione

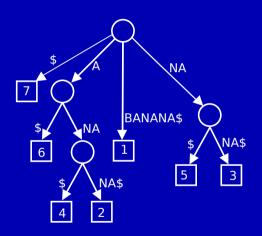
- Array dei suffissi in ordine lessicografico
- Posizioni iniziali del suffisso nell'array
- Spazio 4*n* bytes
- Lcp[i]: lunghezza prefisso comune SA[i], SA[i+1]

BANANAS

i	1	2	3	4	5	6	7
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp	0	1	3	0	0	2	

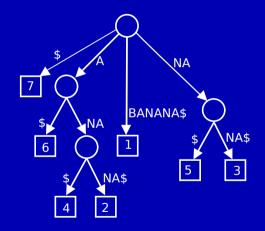
Da Suffix tree a Suffix array

■ Visita depth-first di *ST*



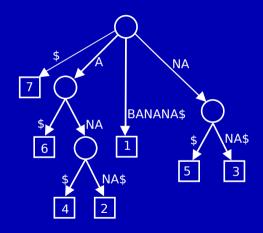
Da Suffix tree a Suffix array

- Visita depth-first di *ST*
- archi uscenti di ogni nodo in ordine lessicografico



Da Suffix tree a Suffix array

- Visita depth-first di *ST*
- archi uscenti di ogni nodo in ordine lessicografico
- Lcp[i] = string-depth di lca(i, i + 1)



Lcp = 0: partizione SA

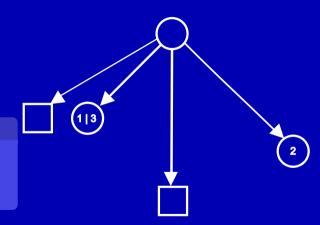
BANANA\$

i	0	1	2	3	4	5	6
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp	0	1	3	0	0	2	

- Lcp = 0: partizione SA
- corrispondono ai figli della radice

BANANAS

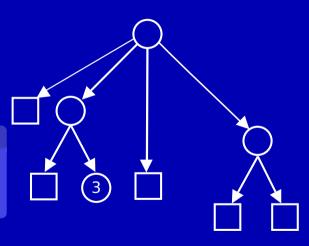
i	0	1	2	3	4	5	6
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp	0	1	3	0	0	2	-



- Lcp = 0: partizione SA
- corrispondono ai figli della radice
- ricorsione prendendo i numeri minimi

BANANA\$

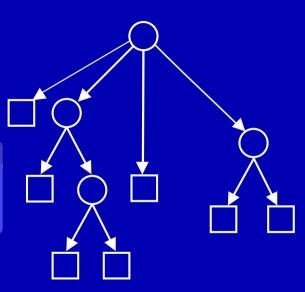
i	0	1	2	3	4	5	6
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp							



- Lcp = 0: partizione SA
- corrispondono ai figli della radice
- ricorsione prendendo i numeri minimi

BANANA\$

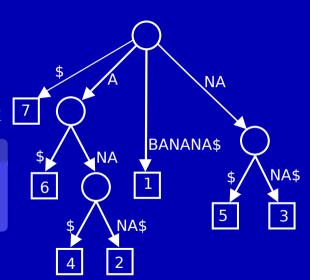
i	0	1	2	3	4	5	6
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp	0	1	3	0	0	2	-



- Lcp = 0: partizione SA
- corrispondono ai figli della radice
- ricorsione prendendo i numeri minimi

BANANAS

i	0	1	2	3	4	5	6
SA	7	6	4	2	1	5	3
Lcp	0	1	3	0	0	2	-



Due stringhe s_1 e s_2

■ Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe

- Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe
- $ST(s_1\$_1s_2\$_2)$

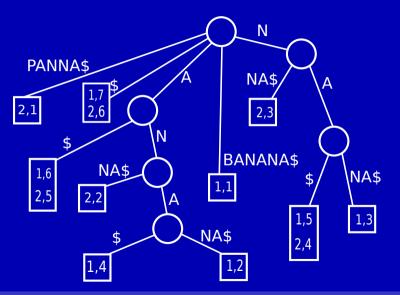
- Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe
- $ST(s_1\$_1s_2\$_2)$
- Nodo x con foglie di s_1 e s_2

- Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe
- $ST(s_1\$_1s_2\$_2)$
- Nodo x con foglie di s_1 e s_2
- Sottostringa di s_1 e s_2

- Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe
- $ST(s_1\$_1s_2\$_2)$
- Nodo x con foglie di s_1 e s_2
- Sottostringa di s_1 e s_2
- $ST(s_1\$s_2\$)$

- Suffix tree generalizzato = insieme di stringhe
- $ST(s_1\$_1s_2\$_2)$
- Nodo x con foglie di s_1 e s_2
- Sottostringa di s_1 e s_2
- $ST(s_1\$s_2\$)$
- Max string-depth

Suffix tree generalizzato



 s_1 : BANANA\$

 s_2 : PANNA\$

Pattern matching su suffix array

Occorrenza P in T

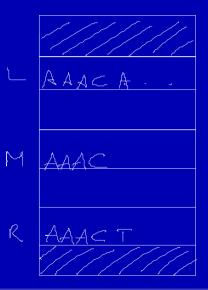
Suffissi di T che iniziano con P

Ricerca in SA

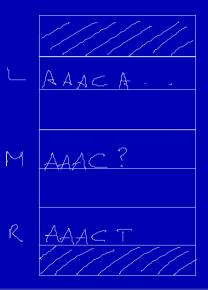
- Ricerca dicotomica
- Tempo $O(m \log n)$ caso pessimo
- Controllare tutto *P* ad ogni iterazione
- $\log_2 n$ iterazioni

Accelerante 1

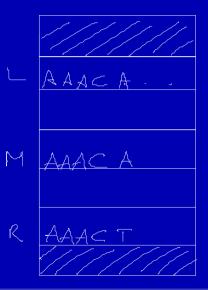
- Intervallo SA(L,R) di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in SA(L,R) iniziano con uno stesso prefisso lungo Lcp(SA[L],SA[R])
- Non confrontare con i primi Lcp(SA[L], SA[R]) caratteri



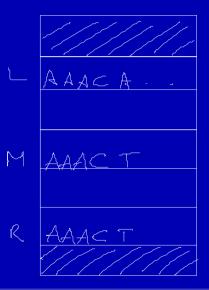
- Intervallo SA(L,R) di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in SA(L,R) iniziano con uno stesso prefisso lungo Lcp(SA[L],SA[R])
- Non confrontare con i primi Lcp(SA[L], SA[R]) caratteri



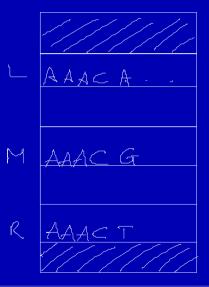
- Intervallo SA(L,R) di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in SA(L,R) iniziano con uno stesso prefisso lungo Lcp(SA[L],SA[R])
- Non confrontare con i primi Lcp(SA[L], SA[R]) caratteri



- Intervallo SA(L,R) di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in SA(L,R) iniziano con uno stesso prefisso lungo Lcp(SA[L],SA[R])
- Non confrontare con i primi Lcp(SA[L], SA[R]) caratteri



- Intervallo SA(L,R) di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in SA(L,R) iniziano con uno stesso prefisso lungo Lcp(SA[L],SA[R])
- Non confrontare con i primi Lcp(SA[L], SA[R]) caratteri

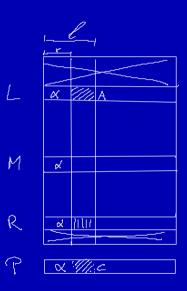


```
l: lcp(L, P); r: Lcp(R, P)
```

1 Caso 1: l > r

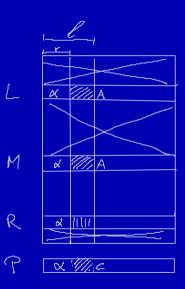
l: lcp(L, P); r: Lcp(R, P)

1 Caso 1: l > r

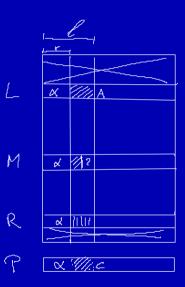


1 Caso 1: l > rLcp(L,M) > lM 2 1/1/ A R X MIC

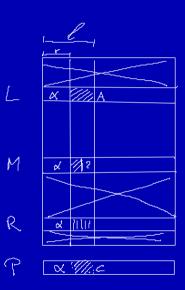
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$



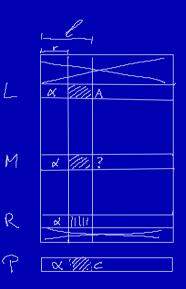
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - Lcp(L,M) < l



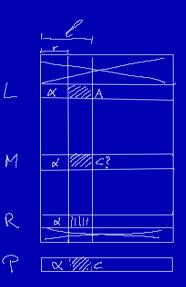
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L,M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M,L)$



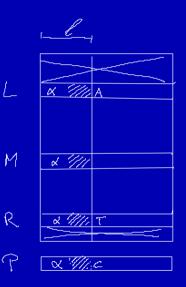
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L,M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M,L)$
 - Lcp(L,M)=l



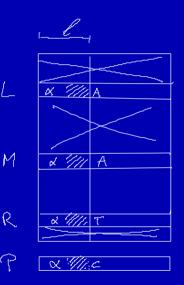
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L,M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M,L)$
 - Lcp(L, M) = l ⇒ confronto P[l+1:], M[l+1:]



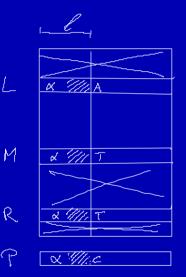
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L,M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M,L)$
 - Lcp(L, M) = l ⇒ confronto P[l+1:], M[l+1:]
- 2 Caso 2: l = r



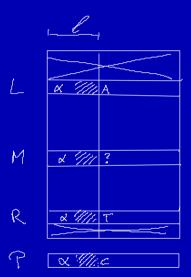
- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L,M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M,L)$
 - Lcp(L, M) = $l \Rightarrow$ confronto P[l+1:], M[l+1:]
- 2 Caso 2: l = r
 - Lcp(L,M) > l



- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L, M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M, L)$
 - Lcp(L, M) = l ⇒ confronto P[l+1:], M[l+1:]
- 2 Caso 2: l = r
 - Lcp(L,M) > l
 - Lcp(M,R) > l



- 1 Caso 1: l > r
 - $Lcp(L,M) > l \Rightarrow L \leftarrow M$
 - $Lcp(L, M) < l \Rightarrow$ $R \leftarrow M, r \leftarrow Lcp(M, L)$
 - Lcp(L, M) = $l \Rightarrow$ confronto P[l+1:], M[l+1:]
- 2 Caso 2: l = r
 - Lcp(L,M) > l
 - Lcp(M,R) > l
 - Lcp(L,M) = Lcp(M,R) = l



Iterazione 1: (L,R) = (1,n)

- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: (L,R) = (1, n/2) oppure (n/2, n)

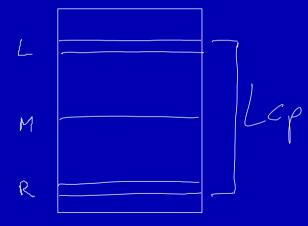
- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: (L,R) = (1,n/2) oppure (n/2,n)
- Iterazione k: $L = h \frac{n}{2^{k-1}}$, $R = (h+1) \frac{n}{2^{k-1}}$

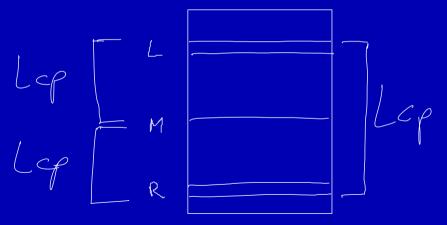
- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: (L,R) = (1,n/2) oppure (n/2,n)
- Iterazione $k: L = h \frac{n}{2^{k-1}}, R = (h+1) \frac{n}{2^{k-1}}$
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$: R = L + 1, Lcp(h, h + 1)

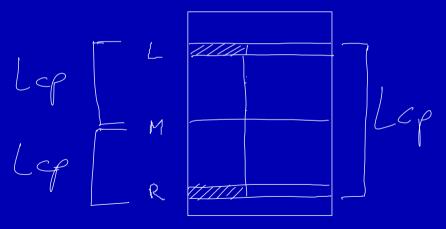
- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: (L,R) = (1, n/2) oppure (n/2, n)
- Iterazione $k: L = h_{\frac{n}{2^{k-1}}}, R = (h+1)\frac{n}{2^{k-1}}$
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$: R = L + 1, Lcp(h, h + 1)
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil 1$: aggrego i risultati dell'iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$

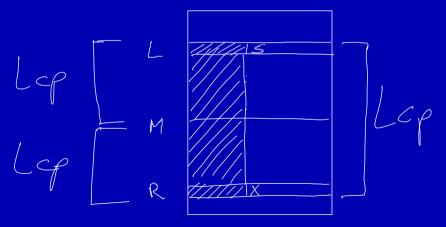
- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: $(L,R) = \overline{(1,n/2)}$ oppure (n/2,n)
- Iterazione $k: L = h \frac{n}{2^{k-1}}, R = (h+1) \frac{n}{2^{k-1}}$
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$: R = L + 1, Lcp(h, h + 1)
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil 1$: aggrego i risultati dell'iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$
- Iterazione k: $Lcp(h\frac{n}{2^{k-1}}, (h+1)\frac{n}{2^{k-1}})$

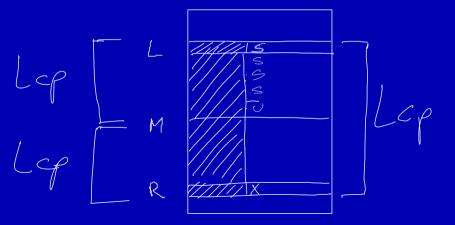
- Iterazione 1: (L,R) = (1,n)
- Iterazione 2: (L,R) = (1,n/2) oppure (n/2,n)
- Iterazione $k: L = h \frac{n}{2^{k-1}}, R = (h+1) \frac{n}{2^{k-1}}$
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$: R = L + 1, Lcp(h, h + 1)
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil 1$: aggrego i risultati dell'iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$
- Iterazione k: $Lcp(h\frac{n}{2^{k-1}}, (h+1)\frac{n}{2^{k-1}})$
- $t = \frac{n}{2^k}, Lcp(2ht+1,(2h+2)t)) = \min\{Lcp(2ht+1,(2h+1)t), Lcp((2h+1)t+1,(2h+2)t), Lcp((2h+1)t,(2h+1)t+1)\}$











Passaggio da *s* a *z* deve esistere

Acceleranti 2: Osservazione

Tempo per trovare un'occorrenza

Acceleranti 2: Osservazione

- Tempo per trovare un'occorrenza
- Tempo per trovare tutte le occorrenze?

Acceleranti 2: Osservazione

- Tempo per trovare un'occorrenza
- Tempo per trovare tutte le occorrenze?
- O(n+m+k), per k occorrenze

Costruzione suffix array: nuovo alfabeto

- Alfabeto Σ con σ simboli, testo T lungo n
- Aggrego triple di caratteri
- Alfabeto Σ^3 con σ^3 simboli, testo lungo n/3
- $T_1 = (T[1], T[2], T[3]) \cdots (T[3i+1], T[3i+2], T[3i+3]) \cdots$ $T_2 = (T[2], T[3], T[4]) \cdots (T[3i+2], T[3i+3], T[3i+4]) \cdots$ $T_0 = (T[3], T[4], T[5]) \cdots (T[3i], T[3i+1], T[3i+2]) \cdots$
- suffissi $(T) \Leftrightarrow \bigcup_{i=0,1,2} \text{suffissi}(T_i)$

Costruzione suffix array: ricorsione

- 1 Ricorsione su T_0T_1
- 2 suffissi $(T_0T_1) \Leftrightarrow \text{suffissi}(T_0)$, suffissi (T_1)
- suffissi $(T_0T_1) \Leftrightarrow \text{suffissi}(T_2)$
- $T_2[i:] \approx T[3i+2:]$
- 5 $T[3i+2:] = T[3i+2]T[3i+3:] = T[3i+2]T_0[i+1:]$
- $_{\mathbf{6}}$ suffissi(T_{0}) ordinati
- 7 Radix sort
- 8 Fusione suffissi (T_0T_1) , suffissi (T_2)

Costruzione suffix array: fusione

Confronto suffisso di T_0 e T_2

- $T_0[i:] <=> T_2[j:]$
- $T[3i:] \le T[3j+2:]$
- $T[3i]T[3i+1:] \le T[3j+2]T[3j+3:]$
- 4 $T[3i]T_1[i:] \le T[3j+2]T_0[j+1:]$

Costruzione suffix array: fusione

Confronto suffisso di T_1 e T_2

- $T_1[i:] <=> T_2[j:]$
- $T[3i+1:] \le T[3j+2:]$
- $T[3i+1]T[3i+2:] \le T[3j+2]T[3j+3:]$
- T[3i+1]T[3i+2]T[3i+3:] <=> T[3j+2]T[3j+3]T[3j+4:]
- 5 $T[3i+1]T[3i+2]T_0[i+1:] \le T[3j+2]T[3j+3]T_1[j+1:]$



- 1 Juha Kärkkäinen, Peter Sanders and Stefan Burkhardt. Linear work suffix array construction. J. ACM, 53 (6), 2006, pp. 918-936.
- 2 Difference cover (DC) 3
- 3 Stefan Burkhardt and Juha Kärkkäinen. Fast lightweight suffix array construction and checking In Proc. 14th Symposium on Combinatorial Pattern Matching (CPM '03), LNCS 2676, Springer, 2003, pp. 55-69.
 - http://www.stefan-burkhardt.net/CODE/cpm_03.tar.gz
- 4 Yuta Mori. SAIS https://sites.google.com/site/yuta256/

k stringhe $\{s_1, \ldots, s_k\}$

1 Suffix tree generalizzato



- 1 Suffix tree generalizzato
- Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x

- 1 Suffix tree generalizzato
- 2 Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x
- $C_x[i]$: sottoalbero con radice x ha una foglia di s_i

- 1 Suffix tree generalizzato
- 2 Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x
- **3** $C_x[i]$: sottoalbero con radice x ha una foglia di s_i
- $C_x = \bigvee C$ sui figli di C

- 1 Suffix tree generalizzato
- 2 Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x
- **3** $C_x[i]$: sottoalbero con radice x ha una foglia di s_i
- $C_x = \bigvee C$ sui figli di C
- Solution Nodo z, $C_z = \text{tutti } 1$

- 1 Suffix tree generalizzato
- 2 Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x
- $C_x[i]$: sottoalbero con radice x ha una foglia di s_i
- $C_x = \bigvee C \text{ sui figli di } C$
- Solution Nodo z, $C_z = \text{tutti } 1$
- 6 Tempo O(kn)

- 1 Suffix tree generalizzato
- Vettore $C_x[1:k]$ per ogni nodo x
- **3** $C_x[i]$: sottoalbero con radice x ha una foglia di s_i
- $C_x = \bigvee C$ sui figli di C
- Solution Nodo z, $C_z = \text{tutti } 1$
- 6 Tempo O(kn)
- 7 *n*: summa lunghezze $|s_1| + \cdots + |s_k|$

Lowest common ancestor (lca)

Dati albero T e 2 foglie x, y

- z è antenato comune di x, y se z è antenato di entrambi x e y
- z è lca di x, y se:
 - z è antenato comune di x e y
 - 2 nessun discendente di z è antenato comune di x e y

Proprietà

- Preprocessing di T in tempo O(n)
- Calcolo lca(x, y) in tempo O(1)
- Algoritmo complesso, ma pratico

Arricchimento ST

1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x

- **1** $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia

- 1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$

- 1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$
- 4 $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i , ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x

- 1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$
- 4 $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i , ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x



- $\mathbf{1}$ $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$
- 4 $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i , ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x
- $S_{x}[i] = 0 \Rightarrow D_{x}[i] = 0$



- 1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$
- 4 $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i , ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x
- $S_{x}[i] = 0 \Rightarrow D_{x}[i] = 0$
- 6 $N_x[i] = 1 \Rightarrow D_x[i] = 0$
- $N_{\scriptscriptstyle X}[i] \geq 1 \Rightarrow D_{\scriptscriptstyle X}[i] = N_{\scriptscriptstyle X}[i] 1$



- 1 $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
- $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
- $N_x[i] = \text{somma dei figli}$
- 4 $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i , ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x
- 5 $N_x[i] = 0 \Rightarrow D_x[i] = 0$
- 7 $N_x[i] \ge 1 \Rightarrow D_x[i] = N_x[i] 1$
- 8 $N_x[i] D_x[i] = C_x[i]$



Gestione ST

- Visita depth-first di *ST*
- L_i : lista ordinata delle foglie di s_i
- Per ogni coppia x, y consecutiva in L_i
 - 1 $z \leftarrow lca(x, y)$
 - $D_{z}[i] =$
 - 3 Aggiorna C_z

Licenza d'uso

Quest'opera è soggetta alla licenza Creative Commons: Attribuzione-Condividi allo stesso modo 3.0.

https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/ Sei libero di riprodurre, distribuire, comunicare al pubblico, esporre in pubblico, rappresentare, eseguire, recitare e modificare quest'opera alle seguenti condizioni:

- Attribuzione Devi attribuire la paternità dell'opera nei modi indicati dall'autore o da chi ti ha dato l'opera in licenza e in modo tale da non suggerire che essi avallino te o il modo in cui tu usi l'opera.
- Condividi allo stesso modo Se alteri o trasformi quest'opera, o se la usi per crearne un'altra, puoi distribuire l'opera risultante solo con una licenza identica o equivalente a questa.