Blum et al., Liniowa aproksymacja najkrótszego wspólnego nadsłowa, algorytm 3-przybliżony

Michał Zwonek

June 2020

Wprowadzenie

Mając na wejściu słowa $S = \{s_1, ..., s_m\}$, takie, że żadne z nich nie zawiera żadnego innego w całości, możemy poszukać wspólnego nadsłowo s dla danego zbioru S.

Najprostszym przykładem może być słowo $s=s_1s_2...s_m$. Jednakże, tak uzyskane nadsłowo będzie niepotrzebnie długie.

Jako, że problem ten ma duże znaczenie praktyczne (w sekwencjonowaniu DNA) naturalnym jest próba znalezienia najkrótszego wspólnego nadsłowa.

Oczywistym podejściem jest następujący algorytm zachłanny. Po kolei łącz słowa mające największą część wspólną nachodzącą na siebie określaną jako *overlap*. Rób tak, aż do uzyskania jednego słowa. Postawiona jest hipoteza, że takie podejście ma współczynnik aproksymacji równy 2, ale przed opublikowaniem pracy przez Blum et al. nie było wiadome, czy taki algorytm jest w ogóle liniową aproksymacją. Okazuje się, że ten algorytm (określać będziemy go poprzez **GREEDY**) ma współczynnik aproksymacji co najwyżej 4.

Ponadto Blum et al. zaprezentowali alternatywny algorytm, nazywany **TGREEDY**, dla którego udowodnili, że jest on 3-aproksymacyjny. Sam problem znalezienia najkrótszego wspólnego nadsłowa jest NP trudny.

W pierwszej sekcji przedstawimy podstawowe definicje i notacje, a w kolejnych algorytm **MGREEDY**, a w następynej sekcji algorytm **TGREEDY** wykorzystujący algorytm **MGREEDY** by uzyskać pożądany współczynnik aproksymacji. W ostatniej sekcji postaramy się udzielić odpowiedzi na pytanie, który z tych dwóch algorytmów jest lepszy?

Podstawowe definicje

Mając dwa niekoniecznie różne słowa s=uv, t=vw, takie, że u, w są niepuste, a v maksymalnej długości, mianem overlap'u słów s, t określamy v. Długośc overlap'u słów s, t oznaczamy jako ov(s,t)=|v|. Zauważmy, że dla s=t overlap jest maksymalnym właściwym prefikso-sufiksem.

Ponadto u nazwiemy prefiksem słowa s względem słowa t i oznaczymy poprzez pref(s,t) = u. Odległością między s, a t nazwiemy d(s,t) = |pref(s,t)|.

Wtedy słowo postaci uvw = pref(s,t)t jest najkrótszym nadsłowem s i t o długości d(s,t)+|t|=|s|+|t|-ov(s,t). Takie słowo będziemy też określali jako $merge\ słów\ s\ i\ t$. Dla słów $s_i,s_j\in S$ będziemy używali pref(i,j),d(i,j),ov(i,j) zamiast $pref(s_i,s_j),d(s_i,s_j),ov(s_i,s_j)$.

Mając słowa $s_{i_1}, s_{i_2}, ..., s_{i_r}$ zdefiniujemy $s = \langle s_{i_1}, ..., s_{i_r} \rangle$ jako $s = pref(i_1, i_2)...pref(i_{r-1}, i_r)s_{i_r}$, czyli najkrótsze słowo, w którym słowa $s_{i_1}, ..., s_{i_r}$ pojawiają się dokładnie w tej kolejności.

Określmy s_{i_1} poprzez first(s) oraz s_{i_r} poprzez last(s).

W trakcie algorytmu **GREEDY**, a także **MGREEDY** następujący niezmiennik jest zachowany.

Lemat 1. W dowolnym momencie algorytmu **GREEDY** w aktualnie przetwarzanym zbiorze słów dla każdych dwóch różnych słów s,t z tego zbioru jest, że first(s) ani last(s) nie jest podsłowom słowa t.

Proof. Udowodnimy lemat dla first(s), dowód dla last(s) jest zupełnie analogiczny.

Początkowo first(s) = last(s) = s dla każdego słowa s w aktualnym zbiorze. Załóżmy, że niezmiennik jest w pewnym momencie naruszony poprzez złączenie dwóch słów t_1, t_2 w słowo $t = \langle t_1, t_2 \rangle$, czyli, że t ma first(s) jako podsłowo. Wtedy wiemy, że t = ufirst(s)v dla jakichś u, v. Skoro first(s) nie może być podsłowem t_1 ani t_2 (założenie o zbiorze S), to $|first(s)| > ov(t_1, t_2)$ oraz $|u| < d(t_1, t_2)$. Czyli, $ov(t_1, s) > ov(t_1, t_2)$, co daje nam sprzeczność z faktem, że $ov(t_1, t_2)$ jest największym.

Lemat ten mówi nam, że algorytm wybierająć dwa słowa s,t o największym ov(s,t) wybiera de facto słowa o największym ov(first(s), last(t)). W wyniku takiego łączenia powstaje słowo $\langle first(s), ..., last(s), first(t), ..., last(t) \rangle$. Możemy, więc powiedzieć, że **GREEDY** porządkuje słowa w ten sposób (dla każdej pary słów porównując ich overlap'y), a następnie znajduje najkrótsze wspólne nadsłowo zawierające te słowa w tej kolejności.

Wprowadzimy teraz pojęcie grafu odległości, który opisuje nam naszą instancję problemu. Mianowicie, $G_S = (V, E)$, gdzie wierzchołkom przypisane są poszczególne słowa z S, a krawędziom będą przypisane słowa pref(i, j) o wadze |pref(i, j)| = d(i, j).

Możemy na takim grafie łatwo stwierdzić, że jest zachowana nierówność: $CYC(G_S) \leq TSP(G_S) \leq OPT(S) - ov(last(s), first(s)) \leq OPT(S)$.

Dzięki temu można pokazać, że znajdując minmialne pokrycie cyklowe $(CYC(G_S))$ możemy skonstruować wspólne nadsłowo o długości co najwyżej $4 \cdot OPT(S)$ poprzez konkatenacje słów wynikających z poszczególnych cyklów w pokryciu cyklowym. Tak opisany algorytm nazywamy **CONCATCYCLES**.

Algorytm MGREEDY

Możemy teraz opisać algorytm MGREEDY.

- 1. Niech S będzie zbiorem słów początkowych, a T zbiorem pustym.
- 2. Dopóki S jest niepusty, wybierz s,t z S maksymalizujące ov(s,t). Dla $s \neq t$, niech $S := (S \setminus \{s,t\}) \cup \{\langle s,t \rangle\}, T := T$. Dla s = t, niech $S := S \setminus \{s\}$, a $T := T \cup \{s\}$.
- 3. Jako wspólne nadsłowo zwróc konkatenację słów ze zbioru T.

Rozważmy teraz graf G'_S , analogiczny jak G_S , ale dla każdej krawędzi mamy jako wagę ov(i,j) zamiast d(i,j). Zauważmy, że dla dowonlego pokrycia cyklowego grafu G_S oraz tego samego pokrycia cyklowego grafu G'_S mamy, że suma wag z pokrycia cyklowego z tych dwóch grafów równa się sumie długości słów w S. Jest tak ponieważ $\forall s, t : ov(s,t) + d(s,t) = |s|$. Czyli maksymalne pokrycie cyklowe grafu G'_S , będzie tożsame z minimalnym pokryciem cyklowym grafu G_S . Okazuje się, że **MGREEDY** łącząc dwa słowa $s \neq t \in S$ w jedno, de facto wybiera krawędź w grafie G'_S między $s_\alpha := last(s)$, a $s_\beta := first(t)$ takie, że $ov(\alpha, \beta)$ jest maksymalne wśród wszystkich wolnych ov(i,j).

Wystarczy teraz tylko pokazać, że taka zachłanna strategia dla tego rodzaju grafu konstruuje pokrycie cyklowe o maksymalnej wadze, co będzie oznaczało, że **MGREEDY** jest niegorszy niż **CONCATCYCLES**, czyli aproksymuje ze współczynnikiem 4. To też pokazali w swojej oryginalnej pracy Blum et al.

Algorytm TGREEDY

Algorytm **TGREEDY** najpierw wykonuje kroki od 1 do 2 z algorytmu **MGREEDY**, a następnie na uzyskanym zbiorze T, który odpowiada maksymalnemu pokryciu cyklowemu grafu G'_S , wykonuje algorytm **GREEDY**. Aby pokazać, że **TGREEDY** ma pożądany współczynnik aproksymacj potrzebujemy wprowadzić parę dodatkowych definicji i lematów.

Definicja 1. Niech \equiv będzie relacją równoważności dla słów, taką, że $s \equiv t \Leftrightarrow \exists u, v : s = uv, t = vu$. Wtedy, jeżeli c to cykl na wierzchołkach (słowach) $i_0, ..., i_r$ to strings(c) jest klasą równoważności $[pref(i_0, i_1)pref(i_1, i_2)...pref(i_{r-1}, i_0)]_{\equiv}$.

Ponadto, $strings(c, i_k)$ zdefiniujemy jako $pref(i_k, i_{k+1})...pref(i_{k-1}, i_k)$, gdzie indeksowanie jest modulo r. Oczywiście, $strings(c, i_k) \in strings(c)$.

Definicja 2. Niech w(c), będzie wagą cyklu, czyli $w(c) = |s|, s \in strings(c)$. Dla wygody będziemy pisać, że $s \in c$ zamiast $s \in strings(c)$.

Lemat 2. Niech c_1, c_2 będą dwoma cyklami w minimalnym pokryciu cyklowym C, z $s_1 \in c_1$ oraz $s_2 \in c_2$ Wtedy, $ov(s_1, s_2) \leq w(c_1) + w(c_2)$.

Lemat 3. Nadsłowo $\langle s_{i_0}, ..., s_{i_{r-1}} \rangle$ jest podsłowem $strings(c, i_0)s_{i_0}$.

Twierdzenie. TGREEDY dla zbioru $S = \{s_1, ..., s_m\}$ zwraca nadsłowo s nad S o długości co najwyżej $3 \cdot OPT(S)$.

Proof. Niech n := OPT(S), pokażemy, że $|s| \le 3n$. Niech T będzie zbiorem samo-nachodzących się słów uzyskanych przez **MGREEDY** na S, a C będzie minimalnym pokryciem cyklowym skonstruowanym przez **MGREEDY**. Dla każdego $x \in T$, niech c_x oznacza cykl w C odpowiadający słowie x oraz niech $w_x = w(c_x)$ będzie jego wagą. Dla każdego zbioru słów R niech $||R|| = \sum_{x \in R} |x|$ będzie sumaryczną długością wszystkich słów w zbiorze R. Niech $w = \sum_{x \in T} w_x$. Skoro, $CYC(G_S) \le TSP(G_S) \le OPT(S)$, wiemy że $w \le n$.

Dzięki lematowi 2, wiemy, że kompresja uzyskana w najkrótszym nadsłowie nad T jest mniejsza niż 2w, i.e $||T||-n_T \leq 2w$, gdzie $n_T := OPT(T)$. Ponadto, znanym rezultatem jest (Tarhio i Ukkonen, 1988), że algorytm zachłanny osiąga kompresję ze współczynnikiem 2. Łącząc te dwa wyniki dostajemy, że: $||T||-|s| \geq (||T||-n_T)/2 = ||T||-n_T-(||T||-n_T)/2 \geq ||T||-n_T-w$.

Z tego wynika, że $|s| \leq n_T + w$.

Dla każdego $x \in T$, niech s_{i_x} będzie słowem z cyklu c_x , który jest prefiksem x. Niech $S' = \{s_{i_x} | x \in T\}, n' = OPT(S'), S'' = \{strings(c_x, i_x)s_{i_x} | x \in T\}, n'' = OPT(S'').$

Z lematu 3 wynika, że nadsłowo S'' jest także nadsłowem T, więc $n_T \leq n''$. Dla dowolnej permutacji π prawdą jest, że $|S''_{\pi}| \leq |S'_{\pi}| + \sum_{x \in T} w_x$, więc $n'' \leq n' + w$, gdzie S'_{π}, S''_{π} jest nadsłowem uzyskanym poprzez połączenie słów z S', S'' w kolejności narzuconej przez π .

Wiemy, że $S' \subset S''$, a więc $n' \leq n$. Możemy teraz połączyć te wyniki i dostać, że

$$n_T \le n'' \le n' + w \le n + w$$

Łącząc to z faktem, że $|s| \le n_T + w$ dostajemy, że $|s| \le n + 2w \le 3n$.

Uwagi końcowe

Blum et al. pokazali dodatkowo, że \mathbf{GREEDY} osiąga współczynnik aproksymacji równy 4, ale hipoteza czy ten współczynnik można obniżyć do 2 jest wciąż otwarta. Możnaby się pokusić wysunąć hipotezę, że $\mathbf{TGREEDY}$ jest lepszy niż \mathbf{GREEDY} . Tak nie jest. Są przykłady zbioru S dla których zarówno jeden jak i drugi wypada lepiej.

Dla zbioru $S = \{c(ab)^k, (ab)^{k+1}, (ba)^k c\}$ **TGREEDY** wygeneruje słowo $c(ab)^k ac(ab)^{k+1} a$ o długości n = 4k+6, podczas gdy **GREEDY** zwróci słowo optymalne $c(ab)^{k+1} ac$ o długości n = 2k+5.

Z kolei dla zbioru $S = \{cab^k, ab^kab^ka, b^kdab^{k-1}\}$ **TGREEDY** wygeneruje słowo $cab^kdab^kab^ka$ o długości 3k+6, podczas gdy **GREEDY** wygeneruje słowo $cab^kab^kab^kdab^{k-1}$ długości 4k+5.