Краткий конспект

Лекция 4. Суффиксные деревья версия 0.1(draft)

<u>Д. Ищенко</u>* Б. Коварский* И. Алтухов* Д. Алексеев* $7 \ \text{марта}, \ 2016$

 * М Φ ТИ

1 Задача поиска к мотивов в геноме

Вернемся к задаче поиска мотива m в геноме g. В лекции о Z-алгоритме мы выяснили, что ее можно решить за линейное время O(|m|+|g|), где |m| - длина мотива, |g| - длина генома. Представим, что необходимо найти k различных мотивов в геноме g. Используя предыдущий метод, мы будем конструировать «Z-ящики» для каждой объединенной строки m\$g и производить поиск. Соответственно временная сложность алгоритма вырастет до O(k(|m|+|g|)), в виду того, что $|m| \ll |g|$, сложность - O(k|g|).

В реальных задачах k может иметь достаточно большое значение, например, при картировании ридов (коротких последовательностей) на референсный геном, значения k могут быть порядка 10^6-10^8 . Возникает необходимость оптимизации алгоритма. В этой лекции мы рассмотрим такую конструкцию, как суффиксное дерево и покажем, как с помощью него решить задачу поиска мотива и несколько других задач, существенно уменьшив временную сложность вычислений относительно Z-алгоритма.

2 Суффиксное дерево

По аналогии с ранее введенными префиксами строки S длиной n, назовем kым суффиксом строки S ее подстроку, начинающуюся с k-го и заканчивающуюся последним символом: S[k..n]. Например, для строки TATATG все множетсво суффиксов будет представлять из себя:

- 1: TATATG
- 2: ATATG
- 3: TATG
- 4: ATG
- 5: TG
- 6: G

Отметим, что количество всех суффиксов строки S равно ее длине, а также тот факт, что полная строка также является суффиксом самой себя (первый суффикс).

Введем понятие суффиксного дерева. В общем виде – это древовидный граф с набором вершин и ребер, создающийся из всех суффиксов последовательности S. В графе к каждому ребру приписана «метка», соответствующая некоторой подстроке из S. Двигаясь по ребрам от выделенной вершины суффиксного дерева, называемой корнем, к одному из листьев дерева (вершине, к которой ведет только

одно ребро) и соединяя последовально «метки» ребер в одну последовательность, в конечном итоге мы получаем один из суффиксов исходной последовательности S. Неформально процесс создания суффиксного дерева можно описать следующим образом:

- (i) допишем в конец последовательности S символ, не встречающийся в самой последовательности, например: \$, тем самым получим последовательность $S^* = S\$$
- (ii) возьмем все суффиксы последовательности S^* , «закрепим» их начала в одной вершине, называемой корнем дерева (Рис. 1), в «концы» суффиксов поместим вершины и соединим их ребрами с корнем дерева. Вершины пронумеруем от 1 до n, ребрам припишем «метки» равные соответствующим суффиксам.
- (iii) «склеим» ребра с совпадающими началами, объединив их общую часть в одно ребро и «ответвив» от новой внутренней вершины несовпадающие части. Образованный граф представляет из себя суффиксное дерево для последовательности S^* .

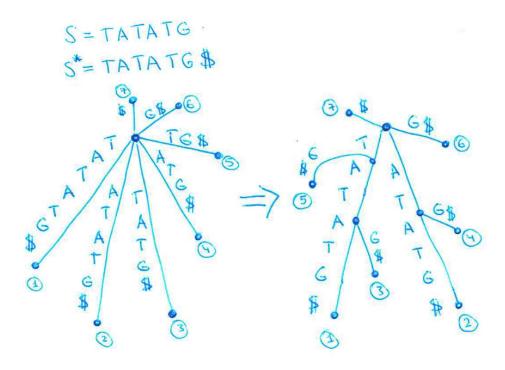


Рис. 1: Создание суффиксного дерева для последовательности S.

Перечислим некоторые свойства суффиксного дерева:

- (i) Количество листьев дерева равно количеству суффиксов последовательности S^* .
- (ii) Каждый узел в дереве, кроме корневого, имеет ровно один родительский узел.
- (iii) Двигаясь по ребрам от корня дерева к одному из *листьев* и объединяя метки соответствующих ребер в одну последовательность, последняя будет соответствовать одному из $cy\phi\phi u\kappa cos$ последовательности S^* .
- (iv) Двигаясь по ребрам от корня дерева к одной из *внутренних вершин* дерева и объединяя метки соответствующих ребер в одну последовательность, последняя будет соответствовать некоторой nodcmpoke из S^* .
- (v) Для любой подстроки S^* можно найти соответсвующий ей путь от корня дерева, причем, путь не обязательно завершается в вершине дерева, а может быть заверешен в середине одного из ребер.
- (vi) Метки ребер выходящих из корня или любой внутренней вершины отличаются первыми символами (иначе они были бы склеены в одно ребро). Следовательно из любой вершины не может выходить больше $\sigma+1$ ребер, где σ размер алфавита (количество разных символов, для нуклеотидной последовательности $\sigma=4$).
- (vii) Если общее число вершин в дереве равно N, то число ребер: (N-1). Предположим, что мы построили для последовательности S суффиксное дерево, как с помощью него определить количество вхождений мотива p в строку S?

3 Алгоритм посроения $O(n^2)$

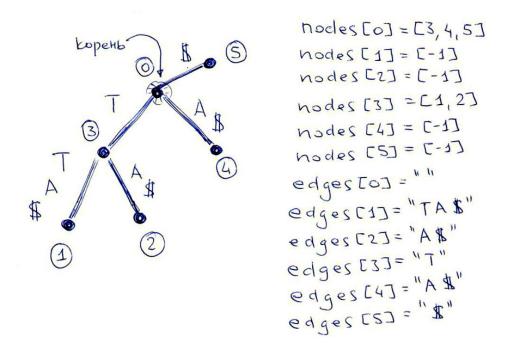


Рис. 2: Пример массивов nodes и edges для дерева последовательности TTA\$.

```
1: procedure TreeCreation(S)
 2:
        S = S + "\$"
 3:
        nodes \leftarrow [[1], [-1]]
        edges \leftarrow [```, S]
 4:
        for i \leftarrow 1, len(S) do
 5:
            suf \leftarrow S[i..len(S)]
 6:
 7:
            j \leftarrow 0
            cur \quad node \leftarrow 0
 8:
            to \quad node \leftarrow -1
 9:
            isAdded \leftarrow False
10:
            \mathbf{while} not is Added \mathbf{do}
11:
                for k in nodes[cur\_node] do
12:
                    if suf[j] = edges[k][0] then
13:
14:
                        to \quad node \leftarrow k
                    end if
15:
                end for
16:
                if to\_node = -1 then
17:
18:
                                                             ⊳ Добавляем новый лист и ребро
                    isAdded \leftarrow True
19:
                else
20:
                    for p \leftarrow 1, len(edges[to node]) do
21:
                        if suf[j+p]! = edges[to node][p] then
22:
                                         ⊳ Добавляем новый лист и внутреннюю вершину
23:
                            isAdded \leftarrow True
24:
                            break
25:
                        end if
26:
                    end for
27:
                    j \leftarrow j + len(edges[to\_node])
28:
                    cur \quad node = to \quad node
29:
                end if
30:
            end while
31:
        end for
32:
        return [nodes, edges]
33:
34: end procedure
```

4 Поиск в глубину

```
Решаем задачу поиска мотива, как посчитать количество вхождений?
1: procedure LeavesCount(i, nodes)
      if nodes[i][0] = -1 then
         return 1
3:
      end if
4:
      lCount \leftarrow 0
5:
      for k in nodes[i] do
6:
         lCount = lCount + LeavesCount(k, nodes)
7:
      end for
8:
      return lCount
9:
10: end procedure
```

5 Какие еще задачи можно решить с помощью дерева

Поиск повтора, поиск максимальной общей подстроки, нечеткий поиск.

6 Ссылки