SVEUČILIŠTE U ZAGREBU FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA

DOKUMENTACIJA

Računanje najduljeg zajedničkog prefiksa temeljeno na BWT

Silvestar Badak, Tomislav Gudelj, Domagoj Vukadin Voditelj: doc. dr. sc. Mirjana Domazet-Lošo

SADRŽAJ

1.	Uvod	1					
2.	Strukture podataka i algoritmi	2					
	2.1. Sufiksno polje	2					
	2.2. Burrows-Wheelerova transformacija - BWT	3					
	2.3. Binarno stablo valića	3					
	2.4. Algoritmi	6					
	2.4.1. Algoritam 1	6					
	2.4.2. Algoritam 2	7					
3.	Eksperimenti i rezultati	8					
4.	Zaključak						
5.	Literatura						
6.	Sažetak	11					

1. Uvod

Bioinformatika je grana računarstva koja proučava specifične algoritme i strukture podataka kako bi ih mogli primijeniti u području biologije živih bića. Gen je osnovna jedinica nasljeđivanja u živim organizmima. Sastavni je dio DNA i sastoji se od niza nukleotida (*dušična baza - A,C,G,T, šećera i fosfatne skupine*). Kodirana mRNA dobivena iz gena procesom transkripcije služi za sintezu proteina (*procesom translacije*) koji se sastoje od niza aminokiselina. Proteini obavljaju mnogobrojne funkcije unutar živih bića (*npr. ubrzavaju metaboličke reakcije, služe za transport molekula, umnažanje i prepisivanje DNA, itd.*). Jedan od najpoznatijih proteina je hemoglobin koji je odgovoran za prijenos atoma kisika u krv.[3]

Prilikom procesa razmnožavanja živih bića, jedna mala mutacija, tj. promjena jednog nukleotida može rezultirati ozbiljnim posljedicama i obilježiti cijeli životni vijek nastalog organizma. Neke se bolesti uzrokovane mutacijom gena i naslijeđenim genima mogu predvidjeti iz ljudske DNA, koja je jedinstveni identifikator svakog organizma. Sekvenciranjem genoma, skupa svih gena nekog organizma, dobivamo sveukupnu nasljednu informaciju organizma. Genomi su izrazito veliki i nemoguće ih je analizirati bez korištenja računalnih programa, tj. strojeva za analizu. Algoritmi i strukture podataka koji su proizašli iz bioinformatičke znanosti sastavni su dijelovi tih programa i omogućavaju nam da u razumnom vremenu dobijemo informaciju koju želimo. Jedan od takvih programa koji se koristi u analizi genoma je **računanje najduljeg zajedničkog prefiksa temeljeno na Burrows-Wheelerovoj transformaciji** što je tema ovog projekta. U nastavku slijedi opis korištenih algoritama i struktura podataka.

2. Strukture podataka i algoritmi

Računanje najduljeg zajedničkog prefiksa izračunatih sufiksa ulaznog niza - LCP u razumnom vremenu može se obaviti na sljedeći način:

- 1. određivanjem sufiksnog polja SA ulaznog niza S
- 2. računanjem Burrows-Wheelerove transformacije BWT koristeći SA
- 3. izgradnjom **binarnog stabla valića** nad novim nizom S' = BWT(S)
- 4. implementacijom funkcije **rang** nad binarnim stablom valića koja se koristi u **algoritmu 1**
- 5. konstrukcijom LCP polja algoritmom 2 koji poziva metodu getIntervals algoritma 1

2.1. Sufiksno polje

Sufiksno polje je polje indeksa leksikografski poredanih sufiksa nekog niza S. Na primjer, neka je zadan ulazni niz $S = "el_anele_lepanelen"$ koji je kao primjer naveden u [1]. Abeceda ovog niza je leksikografski poredan skup znakova sadržan u $S - \sum = \{\$, _, a, e, l, n, p\}$. Na kraj niza dodajemo jedinstveni znak \$. Leksikografski poredani sufiksi navedenog niza su:

- 1. \$
- 2. _anele_lepanelen\$
- 3. _lepanelen\$
- 4. anele_lepanelen\$
- 5. anelen\$
- 6. e_lepanelen\$
- 7. el_anele_lepanelen\$
- 8. ele_lepanelen\$
- 9. *elen*\$
- 10. en\$
- 11. epanelen\$
- 12. *l_anele_lepanelen*\$
- 13. le_lepanelen\$
- 14. *len*\$

- 15. lepanelen\$
- 16. *n*\$
- 17. nele_lepanelen\$
- 18. *nelen*\$
- 19. panelen\$

Sufiksno polje SA je polje indeksa ulaznog niza kojim započinju gore navedeni sufiksi. Slijedno tome vrijedi SA = [18, 2, 8, 3, 12, 7, 0, 5, 14, 16, 10, 1, 6, 15, 9, 17, 4, 13, 11].[1]

2.2. Burrows-Wheelerova transformacija - BWT

Burrows-Wheelerova transformacija je transformacija ulaznog teksta koja rezultira sažimanjem istoga. Može se odrediti na dva načina definirana u [3]:

- 1. izravno iz ulaznog niza (rotacijom ulaznog niza S)
- 2. preko sufiksnog polja SA(S)

U ovom projektu koristi se drugi način u kojem za ulaz $S = "el_anele_lepanelen"$ kao rezultat dobivamo $S' = BWT(S) = "nle_pl\$nnlleee_eaae"$ na sljedeći način:

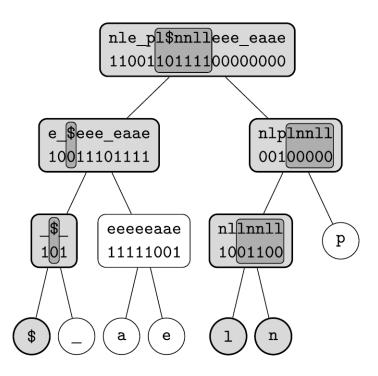
$$BWT[i] = \begin{cases} S[SA[i] - 1], & \text{ako } \forall i (SA[i] \neq 0) \\ \$, & \text{inače} \end{cases}$$
 (2.1)

2.3. Binarno stablo valića

Binarno stablo valića (engl. Binary Wavelet Tree) je struktura podataka novijeg vremena koja nudi rješenja mnogim problemima iz različitih domena kao što su analiza nizova znakova, računalna geometrija i kompresija podataka. Kao ulaz prima niz znakova S koji je sadržan od znakova abecede Σ . Omogućava viši stupanj entropije i podržava različite funkcije koje manipuliraju nad ulaznim nizom S značajno brže nego neke klasične funkcije istog izlaza. [4]

Stablo valića podržava tri vrste upita: **pristup** (*engl. access*), **rang** (*engl. rank*) i **odabir** (*engl. select*). Funkcija access(p) vraća znak c koji se nalazi na poziciji p, $rank_p(c)$ broj pojavljivanja znaka c do pozicije p uključivo, $select_c(o)$ poziciju znaka c nakon o pojavljivanja. U ovom se projektu koristi samo funkcija rang o kojoj će biti rečeno nešto više u nastavku.[4] Primjer stabla valića dan je na slici 2.1. Za konstrukciju čvorova stabla korišten je pseudokod na slici 2.2.

Svaki čvor sadrži vektor bitova koji predstavlja trenutni niz dobiven iz prethodnog čvora i definiran je abecedom $\sum^{[l..r]}$, gdje l i r predstavljaju indekse početka i završetka podabecede u početnoj abecedi $\sum^{[0..\sigma]}$ koja pripada korijenu stabla i gdje je σ indeks zadnjeg znaka u nizu. Nekom znaku dodjeljujemo vrijednost 0 ako se nalazi u intervalu [l..m] unutar podabecede trenutnog čvora koja sadrži znakove zastupljene samo u tom čvoru, gdje je $m=\frac{\lfloor l+r\rfloor}{2}$, inače 1 ako se pak nalazi u intervalu [m+1..r]. Čvorovi se granaju u dva smjera: lijevo - svi znakovi koji su dobili vrijednost 0 i desno - svi znakovi koji su dobili vrijednost 1, zajedno sa svojim podabecedama. Grananje prestaje kad se u čvoru nalazi samo jedan bit (niz istih bitova), odnosno kad je vrijednost tog čvora jednoznačna (samo jedan znak). Taj se čvor naziva list. Listova je onoliko koliko abeceda sadrži znakova.[1]



Slika 2.1: Binarno stablo valića nad nizom $S' = BWT(S) = "nle_pl\$nnlleee_eaae"$. Slika preuzeta iz [1].

Algorithm 1 Construction of nodes in the Wavelet Tree

```
function ConstructNode(S, \Sigma)
    if |\Sigma| = 1 or |S| = 0 then
        return Self
    end if
    (\Sigma_{left}, \Sigma_{right}) \leftarrow \Sigma
    SplitChar \leftarrow \Sigma_{left}[\sigma_{left}]
    for all c in S do
        if c > \text{SplitChar then}
             S_{right}. Append(c)
             Self.Bitmap.Append(1)
             S_{left}. Append(c)
             Self.Bitmap.Append(0)
    RightNode \leftarrow ConstructNode(S_{right}, \Sigma_{right})
    LeftNode \leftarrow ConstructNode(S_{left}, \Sigma_{left})
    return Self
end function
```

Slika 2.2: Pseudokod za izgradnju stabla valića. Slika preuzeta iz [4].

Funkcija rang implementirana je koristeći pseudokod na slici 2.3. Rekurzivna je i efikasno računa broj pojavljivanja znaka do nekog indeksa. Uzmemo li za primjer ulazni niz $S' = BWT(S) = "nle_pl\$nnlleee_eaae"$ te nakon konstrukcije stabla pozovemo $rank_p(c)$, vrijednost ćemo dobiti na sljedeći način:

- 1. provjeravamo kojoj skupini (0 ili 1) pripada dani znak
- funkcijom BinaryRank računamo broj pojavljivanja dobivene skupine iz 1. do danog indeksa u trenutnom čvoru, odnosno indeks koji tražimo za dijete u koje prelazimo
- 3. ovisno koju smo skupinu dobili u 1. prelazimo u lijevo, odnosno desno dijete
- 4. ponavljamo od 1. do 3. sve dok 5. nije zadovoljeno
- kada dođemo do čvora u kojem postoji samo jedan znak rezultat je novoizračunati indeks u prethodnom čvoru plus jedan - povratak iz rekurzija

```
Algorithm 2 Rank of character c until position p

function Rank(c, p)

if Self.IsLeaf then

return p

end if

CharBit \leftarrow bit representing c in bitmap of current node

o \leftarrow BINARYRANK(CharBit, p)

if CharBit = 1 then

Rank \leftarrow RightChildNode.Rank(c, o)

else

Rank \leftarrow LeftChildNode.Rank(c, o)

end if

return Rank

end function
```

Slika 2.3: Pseudokod funkcije rang. Slika preuzeta iz [4].

Na primjer $rank_9('n')$. Prvi ulazak rezultira novim indeksom 6 i prelazimo u desno dijete (jer 'n' pripada skupini 1 u prvoj podabecedi). Drugi ulazak rezultira novim indeksom 5 te prelazimo u lijevo dijete. Kod trećeg ulaska novi indeks je 2, prelazimo u desno dijete. Desno dijete je jednoznačno i zadovoljen je uvjet 4. te dobivamo rezultat: index + 1 = 2 + 1 = 3.

2.4. Algoritmi

Neke analize nizova zahtijevaju polje najdužih zajedničkih prefiksa (*engl. longest common prefix array - LCP*). Polje sadržava duljine najdužih zajedničkih prefiksa između svih parova koji su uzastopno poredani u sufiksnom polju. Primjer izračunatog LCP polja prikazan je na slici 2.4.

i	SA	LCP	BWT	$S_{SA[i]}$
1	19	-1	n	\$
2	3	0	1	_anele_lepanelen\$
3	9	1	е	_lepanelen\$
4	4	0	-	anele_lepanelen\$
5	13	5	p	anelen\$
6	8	0	1	e_lepanelen\$
7	1	1	\$	el_anele_lepanelen\$
8	6	2	n	ele_lepanelen\$
9	15	3	n	elen\$
10	17	1	1	en\$
11	11	1	1	epanelen\$
12	2	0	е	l_anele_lepanelen\$
13	7	1	е	le_lepanelen\$
14	16	2	е	len\$
15	10	2	-	lepanelen\$
16	18	0	е	n\$
17	5	1	a	nele_lepanelen\$
18	14	4	a	nelen\$
19	12	0	е	panelen\$
20		-1		

Slika 2.4: Sufiksno polje (SA), BWT niz i LCP polje. Slika preuzeta iz [1].

U ovom radu obrađuje se implementacija LCP polja temeljena na BWT transformaciji. Prema radu[1] najlošije vrijeme izvođenja algoritma je $O(n \log \sigma)$. Algoritmi 1 i 2 za izračunavanje LCP polja objašnjeni su u nastavku.

2.4.1. Algoritam 1

Feragina i Manzini u članku[2] pokazuju kako je moguće pretraživati uzorke u sufiksnom polju unazad znak po znak bez spremanja sufiksnog polja u memoriju. Neka je ω ϵ Σ i ω podniz od S. Za ω -interval [i...j] u sufiksnom polju SA niza S (ω je prefiks

svih sufiksa u sufiksnom polju $S_{SA[k]}$ za sve $i \leq k \leq j$), funkcija backwardSearch(c, [i..j]) vraća $c\omega$ -interval [C[c] + Occ(c, i-1) + 1...C[c] + Occ(c, j)] gdje je C[c] ukupni broj pojavljivanja znakova u S koji su strogo leksikografski manji od c, a Occ(c, i) je broj pojavljivanja znaka c u BWT transformaciji u intervalu [1..i].

2.4.2. Algoritam 2

3. Eksperimenti i rezultati

Broj	Implementacija	Binarno stablo
znakova	Simona Goga [s]	valića [s]
100	0.037231	Х
1,000	0.030089	X
10,000	0.022991	X
100,000	0.03929	X
1,000,000	0.223351	x

Tablica 3.1: Brzine izvođenja

asd

4. Zaključak

Zaključak.

5. Literatura

- [1] Timo Beller, Simon Gog, Enno Ohlebusch, i Thomas Schnattinger. *Computing the longest common prefix array based on the Burrows–Wheeler transform*, svezak 18, stranice 22 31. 2013. doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.jda.2012. 07.007. URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570866712001104. Selected papers from the 18th International Symposium on String Processing and Information Retrieval (SPIRE 2011).
- [2] Manzini G. Ferragina, P. Opportunistic data structures with applications. *IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, stranice 390 398, 2000.
- [3] Mile Šikić i Mirjana Domazet-Lošo. Bioinformatika. 1nd izdanju, 2013.
- [4] Jan H. Knudsen i Roland L. Pedersen. *Engineering Rank and Select Queries on Wavelet Trees*. 2015.

6. Sažetak

Sažetak.