Elementi di Bioinformatica

Gianluca Della Vedova

Univ. Milano–Bicocca
https://gianluca.dellavedova.org

23 ottobre 2023

Pattern matching su suffix array

Occorrenza P in T

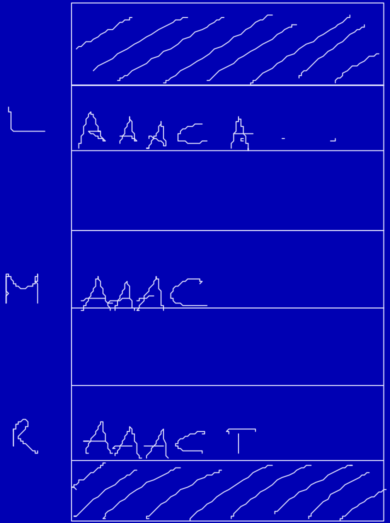
Suffissi di T che iniziano con P

Ricerca in SA

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

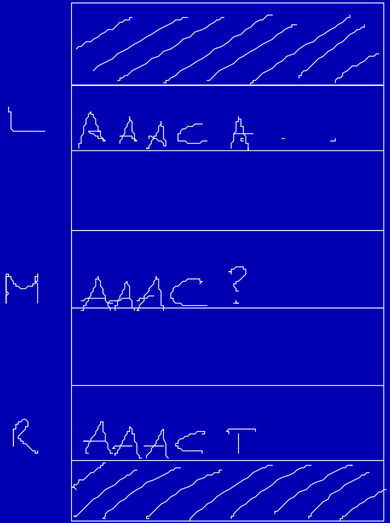
Accelerante 1

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



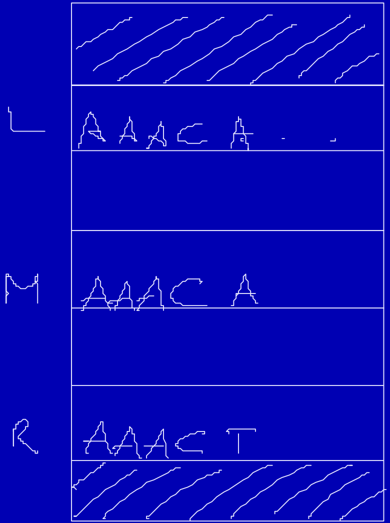
Accelerante 1

- 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



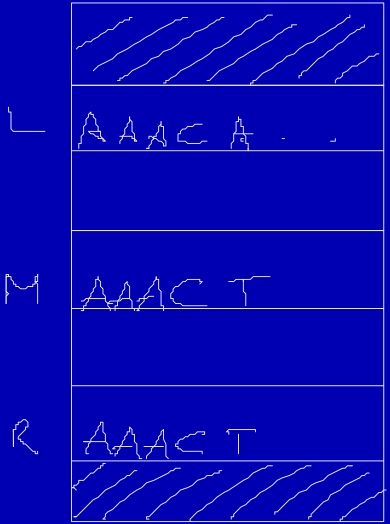
Accelerante 1

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



Accelerante 1

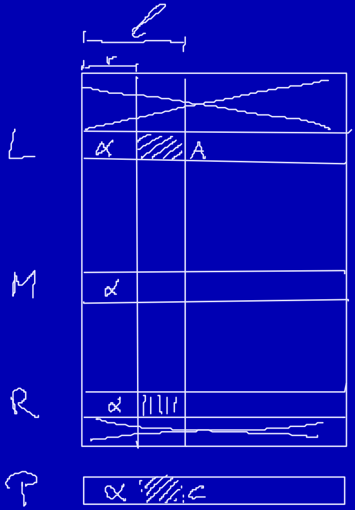
- Intervallo $SA(L, R)$ di SA
- Elemento mediano M
- Tutti i suffissi in $SA(L, R)$ iniziano con uno stesso prefisso lungo $\text{Lcp}(SA[L], SA[R])$
- Non confrontare con i primi $\text{Lcp}(SA[L], SA[R])$ caratteri



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

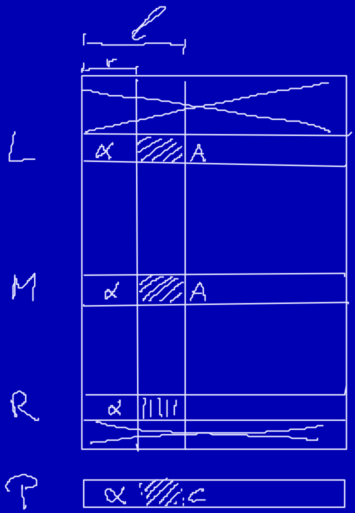
Accelerante 2



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

1. Caso 1: $l > r$

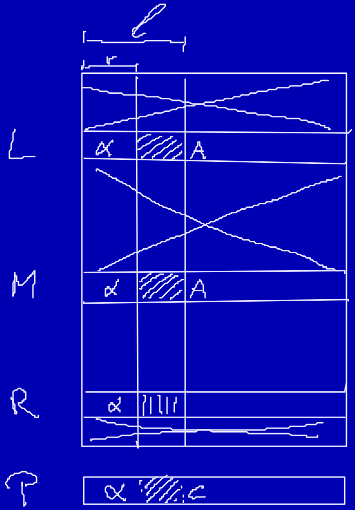
Accelerante 2



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

1. Caso 1: $l > r$
   - $\text{Lcp}(L, M) > l$

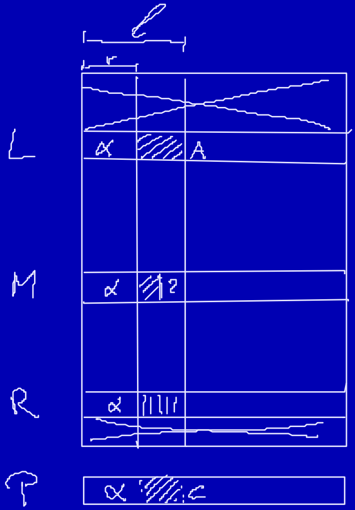
Accelerante 2



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

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

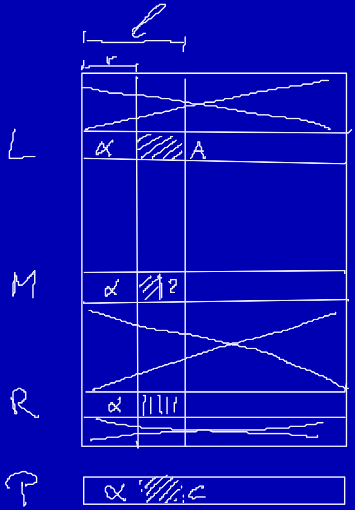
Accelerante 2



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

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

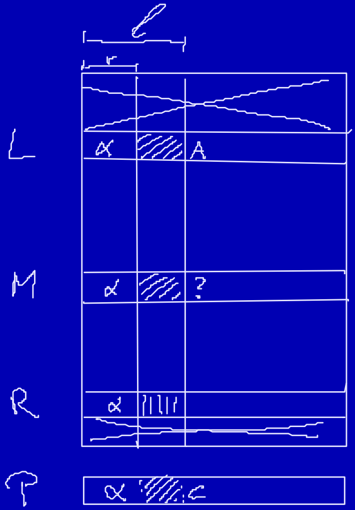
Accelerante 2



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

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

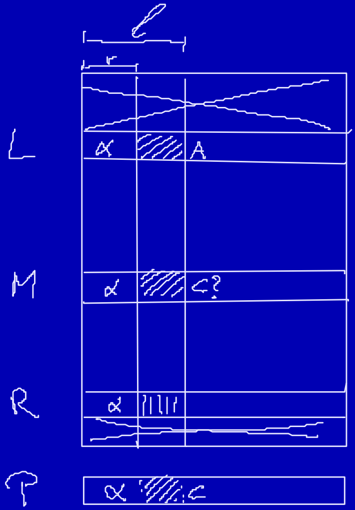
Accelerante 2



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

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

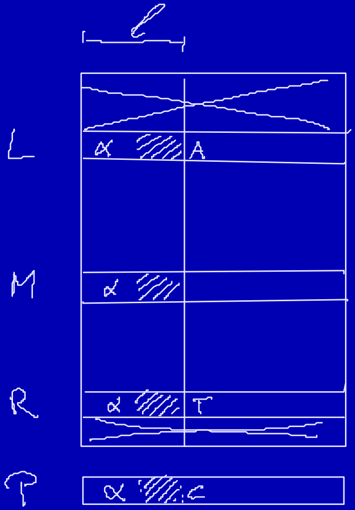
Accelerante 2



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

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

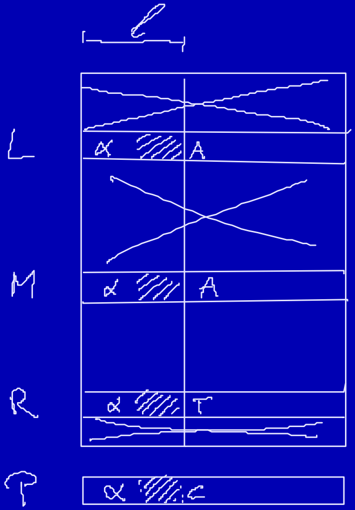
Accelerante 2



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

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

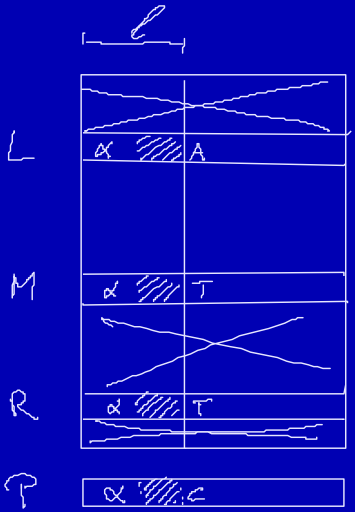
Accelerante 2



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

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: $l = r$
   - $Lcp(L, M) > l$

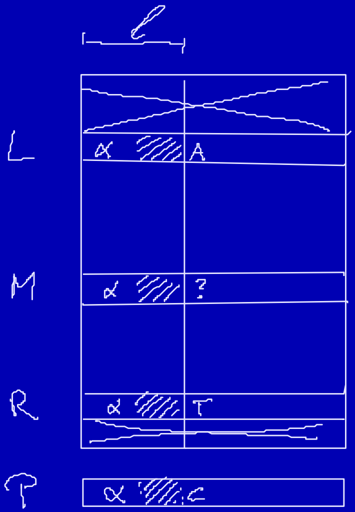
Accelerante 2



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

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

Accelerante 2



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

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: $l = r$
   - $Lcp(L, M) > l$
   - $Lcp(M, R) > l$
   - $Lcp(L, M) = Lcp(M, R) = l$

Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

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

Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

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

Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

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

Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

- 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 $\lceil \log_2 n \rceil$: $R = L + 1$, $Lcp(h, h+1)$

Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

- 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 $\lceil \log_2 n \rceil$: $R = L + 1$, $Lcp(h, h+1)$
- Iterazione $\lceil \log_2 n \rceil - 1$: aggrego i risultati dell'iterazione $\lceil \log_2 n \rceil$

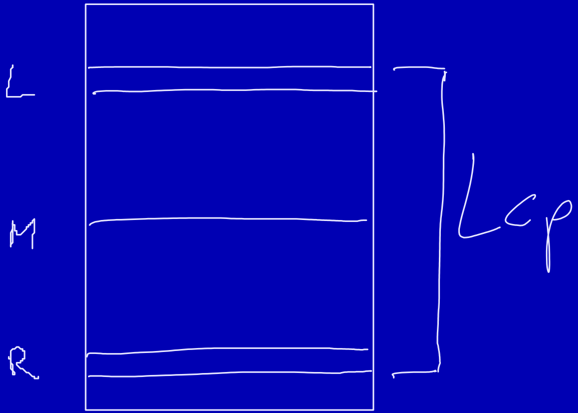
Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

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

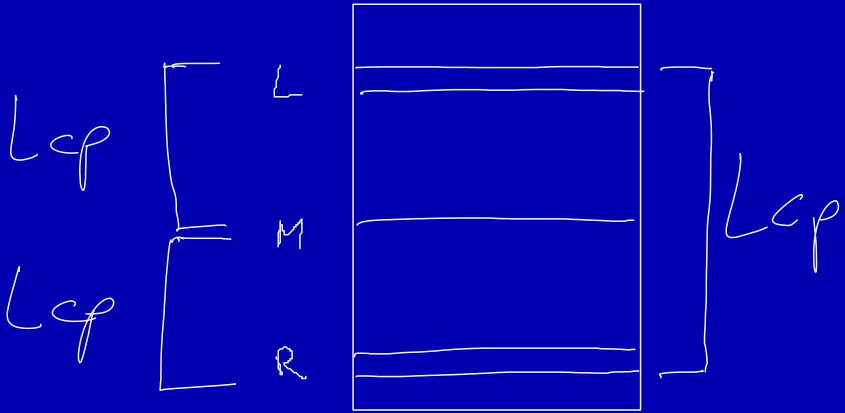
Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo $O(n)$

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

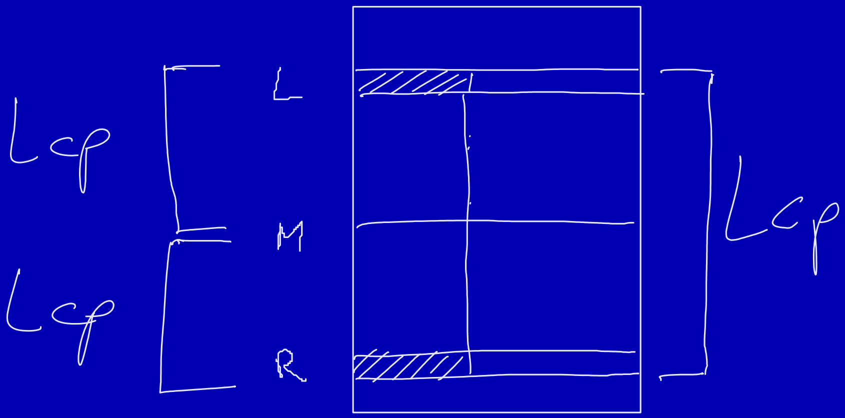
Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo O(n)



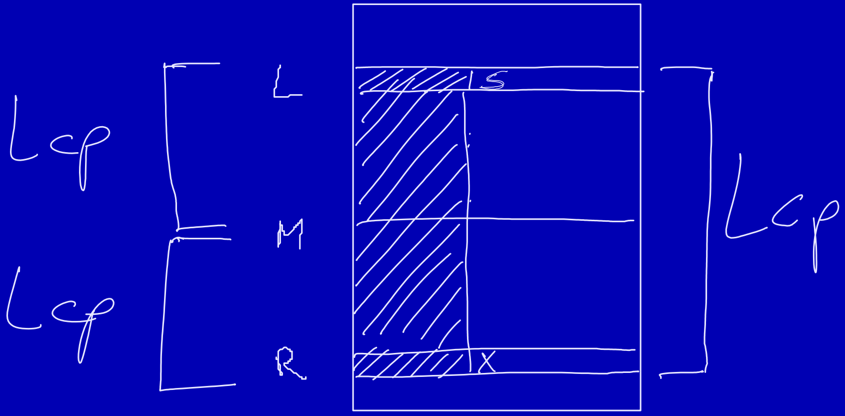
Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo O(n)



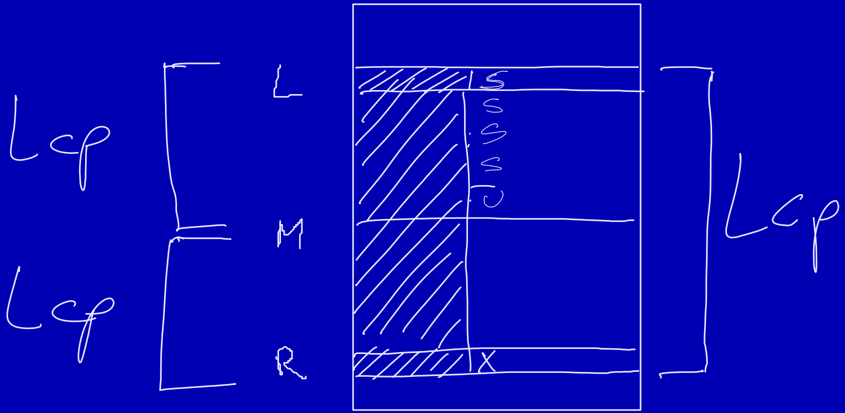
Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo O(n)



Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo O(n)



Accelerante 3: calcolo Lcp in tempo O(n)



Passaggio da s a z deve esistere

Osservazione

- Tempo per trovare un’occorrenza

Osservazione

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

Osservazione

- Tempo per trovare un'occorrenza
- Tempo per trovare tutte le occorrenze?
- $O(n + m + k)$, per k occorrenze | scansione lineare a partire dall'occorrenza trovata

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 $n/3$
- $T_1 = (T[1], T[2], T[3]) \cdots (T[3i+1], T[3i+2], T[3i+3]) \cdots$
  $T_2 = (T[2], T[3], T[4]) \cdots (T[3i+2], T[3i+3], T[3i+4]) \cdots$
  $T_0 = (T[3], T[4], T[5]) \cdots (T[3i], T[3i+1], T[3i+2]) \cdots$
- $\text{suffissi}(T) \Leftrightarrow \bigcup_{i=0,1,2} \text{suffissi}(T_i)$

Costruzione suffix array: ricorsione

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

Costruzione suffix array: fusione

Confronto suffisso di T_0 e T_2

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

Costruzione suffix array: fusione

Confronto suffisso di T_1 e T_2

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

KS

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/`

Sottostringa comune più lunga

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

1. Suffix tree generalizzato

Sottostringa comune più lunga

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

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

Sottostringa comune più lunga

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

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

Sottostringa comune più lunga

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

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
4. $C_x = \bigvee C$ sui figli di C

Sottostringa comune più lunga

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

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
4. $C_x = \bigvee C$ sui figli di C
5. Nodo z, C_z = tutti 1

Sottostringa comune più lunga

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

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
4. $C_x = \bigvee C$ sui figli di C
5. Nodo z, $C_z =$ tutti 1
6. Tempo $O(kn)$

Sottostringa comune più lunga

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

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
4. $C_x = \bigvee C$ sui figli di C
5. Nodo z, C_z = 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:
  1. 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 $\text{lca}(x, y)$ in tempo $O(1)$
- Algoritmo complesso, ma pratico

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

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

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

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

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

1. $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
2. $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
3. $N_x[i] =$ somma dei figli

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

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

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

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

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

1. $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
2. $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
3. $N_x[i]$ = somma dei figli
4. $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i, ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x
5. $N_x[i] = 0 \Rightarrow D_x[i] = 0$
6. $N_x[i] = 1 \Rightarrow D_x[i] = 0$

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

1. $N_x[i]$: numero foglie di s_i discendenti di x
2. $N_x[i] = 0$ o 1 per ogni foglia
3. $N_x[i] =$ somma dei figli
4. $D_x[i]$: numero di consecutive di foglie di s_i, ordinate secondo visita depth-first, discendenti di x
5. $N_x[i] = 0 \Rightarrow D_x[i] = 0$
6. $N_x[i] = 1 \Rightarrow D_x[i] = 0$
7. $N_x[i] \geqslant 1 \Rightarrow D_x[i] = N_x[i] - 1$

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

Arricchimento ST

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

Sottostringa comune più lunga di k stringhe

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. $z \leftarrow lca(x, y)$
  2. $D_z[i] =$
  3. Aggiorna C_z

Licenza d'uso