Assignment 1, Bioinformatica

Davide Cozzi, 829827

Indice

1	esercizio 1	2
	1.1 Versione 1	2
	1.2 Versione 2	7
2	Esercizio 2	10
3	Esercizio 3	18
4	Esercizio 4	21

Capitolo 1

esercizio 1

1.1 Versione 1

Si assumano stringhe su $\Sigma = \{a, c, g, t, A, C, G, T\}$ indicizzate a partire dalla posizione 0, per comodità.

L'algoritmo si divide in due parti:

- 1. divisione in "token" delle due stringhe. A partire da ogni stringa si ottiene un vettore di sottostringhe di uguali caratteri
- 2. confronto dei due vettori di sottostringhe

Si procede specificando che:

- length(X) restituisce la lunghezza di X, che sia una stringa o un vettore
- push(X,Y) effettua l'operazione di push di Y nel vettore/stringa X
- string(Y) effettua il cast di Y a string
- Y[i,e] specifica la sottostringa di Y che va dall'indice i incluso all'indice e incluso
- lowercase(Y) porta Y in lowercase

Si ha quindi la prima parte dell'algoritmo, che effettua la divisione in "token".

Esempio 1. Vediamo un esempio di input e output della funzione Splitter.

```
• input: "aaataaaggggcccctttttttttttttttcc"
```

```
• output: ["aaa", "t", "aaa", "gggg", "ccccc", "tttttttttttttttttt", "cc"]
```

Si ha quindi lo pseudocodice:

Algorithm 1 Algoritmo per lo split in "token" delle stringhe

```
function Splitter(s)
   result \leftarrow [\ ]
   n \leftarrow length(s)
   last\_mismatch \leftarrow 0
   if n == 1 then
       push(result, string(s[0]))
       return result
   end if
   tmp \leftarrow ""
   for i \leftarrow 0 to n do
       if i > 0 and s[i-1] \neq s[i] then
           push(result, tmp)
           tmp \leftarrow ""
       end if
       push(tmp, s[i])
       if i == (n-1) then
           push(result, tmp)
       end if
   end for
   return result
end function
```

Una volta ottenuto il vettore dei "token" delle due sequenze in input basta confrontare i due vettori.

Prima di vedere il confronto si specifica che:

- le due sequenze vengono trasformate in lowercase per praticità
- si assume che le due sequenze non possono essere stringhe vuote ε

Fatte queste assunzioni si può fare ancora un ultima osservazione prima di procedere con l'algoritmo. Qualora i due vettori prodotti dalla funzione

Splitter fossero di lunghezza diversa allora l'algoritmo non potrà in nessun caso dire che ci sia stata un"'infezione" in quanto si assume che non ci siano né gaps né inserimenti. In altri termini qualora i due vettori siano di diversa cardinalità sicuramente, con queste premesse, non è avvenuta alcuna infezione. Vediamo ora le altre casistiche. Si itera contemporaneamente sull'elemento i-esimo dei due vettori e:

- se i due elementi i-esimi presentano il primo carattere diverso allora, date le premesse, si specifica che non può essere avvenuta un'infezione
- se i due elementi i-esimi presentano il primo carattere uguale allora si procede confrontando i due elementi i-esimi (si assuma X vettore relativo alla "sequenza originale" e Y vettore relativo alla sequenze che si vuole dimostrare l'eventuale infezione):
 - se il primo carattere è "a" allora la lunghezza di Y[i] deve essere minore o uguale a 5 volte quella di X[i], in quanto per ogni "a" in X[i] posso avere al più 5 "a" in Y[i]
 - se il primo carattere è "t" allora la lunghezza di Y[i] deve essere minore o uguale a 10 volte quella di X[i], in quanto per ogni "t" in X[i] posso avere al più 10 "t" in Y[i]
 - se il primo carattere è "c" o "g" allora la lunghezza di Y[i] deve essere maggiore o uguale di quella di X[i], in quanto per ogni "c" o "g" in in X[i] posso avere un numero indefinito di "c" o "g" in Y[i]

Si ha quindi il seguente pseudocodice dell'algoritmo, che ritorna \top o \bot a seconda che sia possibile che seq2 sia una versione infettata di seq1:

Algorithm 2 algoritmo di verifica dell'infezione

```
function CheckInfection(seq1, seq2)
   if length(seq1) == 0 or length(seq2) == 0 then
       return \perp
   end if
    vecseq1 \leftarrow Splitter(lowercase(seq1))
   vecseq2 \leftarrow Splitter(lowercase(seq2))
    check \leftarrow \top
   if length(vecseq1) \neq length(vecseq2) then
       return \perp
    end if
    j \leftarrow length(vecseg1)
   for i \leftarrow 0 to j do
       if vseq1[i][0] \neq vseq2[i][0] or \neg check then
           return \perp
       end if
       if vecseg1[i][0] == 'a' then
           check \leftarrow (length(vecseq2[i]) \leq 5 \cdot length(vecseq1[i]))
       else if vecseq1[i][0] == 't' then
           check \leftarrow (length(vecseq2[i]) \leq 10 \cdot length(vecseq1[i]))
       else
           check \leftarrow (length(vecseq2[i]) \ge length(vecseq1[i]))
       end if
    end for
   return check
end function
```

Esempio 2. Qualche esempio:

- input: "ATAGCTC" e
 "AAATAAAGGGGCCCCTTTTTTTCC"
- output: \top

infatti (si usano i colori per rappresentare i vari "token" dei vettori):

ATAGCTC AAATAAAGGGGCCCCCTTTTTTTCC

Avendo che tutti i vincoli sono rispettati.

D'altro canto vediamo un esempio in cui non si può dire di avere una mutazione:

- input: "ATAGCTC" e
 "AAATAAAAAAGGGGCCCCCTTTTTTTCC"
- output: \bot

infatti (si usano i colori per rappresentare i vari "token" dei vettori):

$ATAGCTC\\AAATAAAAAAGGGGCCCCCTTTTTTTCC$

Avendo che il terzo "token" della prima stringa è A mentre quello della seconda stringa è AAAAAA, avendo che viene rotto il vincolo per il quale per ogni A posso avere al più 5 A nella mutazione.
Un altro esempio in cui non si può dire di avere una mutazione è:

- input: "ATAGCTC" e
 "AAACCTAAAAAAGGGGCCCCCTTTTTTT"
- $output: \bot$

infatti (si usano i colori per rappresentare i vari "token" dei vettori):

$ATAGCTC\\AAACCTAAAAAAGGGGCCCCCTTTTTTT$

In quanto i due secondi "token", T e CC, corrispondono a caratteri diversi.

1.2 Versione 2

Si assumano stringhe su $\Sigma = \{a, c, g, t, A, C, G, T\}$ indicizzate a partire dalla posizione 0, per comodità.

Indico anche una versione intuitivamente più semplice. In questo caso si scorre la sequenze che si suppone essere originale, tenendo conto dei caratteri uguali ripetuti. Appena si ha un cambio di carattere si verifica se nella sequenza che si vuole dimostrare essere una mutazione di quella originale si ha una corretta sequenza di caratteri secondo la specifica. Si ha che:

- per comodità le sequenze sono riportate in lowercase e si assume che, in presenza di anche solo una sequenza nulla, l'algoritmo restituisce \bot
- seq1 e seq2 sono rispettivamente la sequenza originale al sequenza che si vuole dimostrare essere la mutazione
- co e cm sono le variabili che ogni volta accumulano il conteggio dei caratteri uguali consecutivi rispettivamente sulla sequenza originale e su quella che si suppone mutata
- i e j sono rispettivamente gli indici per la prima e per la seconda sequenza

In poche parole si itera sulla sequenza originale, aggiornando di volta in volta il contatore relativo finché si ha lo stesso carattere. Nel momento in cui si ha un cambiamento o si è arrivato all'ultimo carattere della sequenza si ferma il conteggio e si verifica il conteggio sulla seconda sequenza (anche in questo caso facendo attenzione a non andare out of bounds). Qualora la seconda sequenza presenti, all'indice a cui si è arrivati con l'algoritmo, un carattere diverso da quello della prima si può restituire \bot . Controllando la seconda sequenza si aggiorna il rispettivo contatore e l'indice. Una volta che anche sulla seconda sequenza si ha un cambio di carattere o si è arrivati alla fine si confrontano i due contatori secondo le specifiche (ad esempio se nella stringa originale avevo due "a" consecutive ne posso avere al più 10 in quella che si vuole verificare essere la mutazione). Finito questo controllo si azzerano i contatori e si verifica che, qualora la sequenza originale sia stata visitata interamente, anche la seconda sia conclusa. In caso contrario si restituisce \bot .

Si ha quindi il seguente pseudocodice.

Algorithm 3 algoritmo di verifica dell'infezione, seconda versione

```
function CheckInfection(seq1, seq2)
    m \leftarrow length(seq1)
    n \leftarrow length(seg2)
    if m == 0 or n == 0 then
        return \perp
    end if
    seq1 \leftarrow lowercase(seq1)
    seq2 \leftarrow lowercase(seq2)
    co \leftarrow 0
    cm \leftarrow 0
    j \leftarrow 0
    for i \leftarrow 0 to m do
        co \leftarrow co + 1
        if i == n-1 or seq1[i] \neq seq[i+1 then
            if seq1[i] \neq seq2[j] then
                 return \perp
            end if
             while j \neq n-1 and seq2[j] == seq2[j+1] do
                 cm \leftarrow cm + 1
                 j \leftarrow j + 1
             end while
             cm \leftarrow cm + 1
             j \leftarrow j + 1
            if seq1[i] == 'a' and cm \leq 5 \cdot co then
                 check \leftarrow \top
             else if seq1[i] == 't' and cm \le 10 \cdot co then
                 check \leftarrow \top
             else if (seq1[i] == 'c' \text{ or } seq1[i] == 'g') \text{ and } cm \geq co \text{ then}
                 check \leftarrow \top
             else
                 return \perp
             end if
            co \leftarrow 0
            cm \leftarrow 0
            if i == m-1 and j \neq n then
                 return \perp
            end if
        end if
    end for
    return check
end function
```

Dal punto di vista pratico questo secondo algoritmo evita la fase di preprocessing vista nel primo algoritmo con la funzione Splitter. Anziché avere a priori le sottostringhe di cui confrontare le lunghezze tiene conto di volta in volta dei caratteri uguali consecutivi, confrontando i contatori (motivo per cui anche gli esempi possono essere riadattati anche a questa seconda versione). Dal punto di vista computazionale, assumendo che la funzione length abbia costo lineare si ha in entrambi i casi un tempo quadratico nel caso peggiore, anche se si potrebbe fare uno studio più approfondito.

Capitolo 2

Esercizio 2

Si assumano stringhe su $\Sigma = \{a, c, g, t, A, C, G, T\}$ (anche se come nell'esercizio precedente poi si procederà con il lowercase) indicizzate a partire dalla posizione 0, per comodità.

Si fanno le seguenti assunzioni:

- si assume che le mutazione siano solo cambi di base, non avendo quindi inserzioni o delezioni
- si assume che, non avendo inserzioni o delezioni, le due sequenze siano di egual lunghezza per poter avere un input valido per l'algoritmo
- si assume che si può avere una mutazione solo dopo almeno 5 basi non mutate
- si assume che la prima base della sequenza può mutare
- si assume che le sequenze siano tali per cui il loro *kmer-set* coincida con il loro *spettro*. In altri termini le sequenze sono tali per cui si hanno solo *kmer* univoci

In base alle assunzioni precedenti si può anche assumere che, calcolati i due spettri, che sono spettri senza ripetizioni, relativi alle due sequenze, si abbia che essi siano di cardinalità uguale. Per verificare che il kmer-set sia della stessa cardinalità dello spettro basta verificare che, assumendo kmers il kmer-set (calcolato per un certo k) di una certa sequenza seq, non valga:

$$length(kmers) \neq length(seq) - (k-1)$$

Procediamo quindi descrivendo l'idea dietro l'algoritmo. L'idea principale è quella di calcolare i kmer di una lunghezza k non causale e di evitare confronti

inutili. Assumendo di avere che una mutazione è possibile sse almeno le 5 basi precedenti non sono mutazioni, in quanto dopo una mutazione abbiamo assunto esserci almeno 5 basi non mutate, sono di fronte ad un caso "limite" del tipo:

MBBBBB**M**

Indicando con M le mutazioni e con B le basi non mutate. Ne segue immediatamente che kmer calcolati con k=6 sono i kmer di cardinalità massima tali per cui posso avere al più una singola mutazione per kmer.

Indicando con seq1 la sequenza di riferimento e con seq2 la sequenza mutata si ha quindi che, per le assunzioni fatte, posso fare un confronto "1:1" dei kmer-set, sapendo che essi sono di cardinalità uguale.

Si noti però che un confronto diretto sarebbe "inutile" in quanto, avendo sicuramente almeno 5 basi non mutate dopo una mutazione posso saltare il confronto di 5 kmer, in quanto tutti e 5 aggiungerebbero in coda una base sicuramente non mutata. Inoltre, per le assunzioni fatte, è possibile anche solo confrontare, di volta in volta, i due simboli finali dei due kmer e non i kmer interi in quanto tutto il prefisso del kmer, che termina in penultima posizione della stringa, è stato già verificato negli step precedenti. Qualora il simbolo finale sia diverso si è di fronte ad una mutazione e, avendo kmer-set di uguale cardinalità e quindi confrontando sempre i due kmer i-esimi, è possibile risalire all'indice della mutazione basandosi su tale i e sulla lunghezza dei kmer, quindi 6.

Una volta individuata la mutazione si procede a salvare in una struttura adeguata le seguenti informazioni:

- base presente nella seguenza di riferimento, b1
- base mutata presente nella seconda sequenza, b2
- indice della mutazione, i

In merito si assume che newMutation(b1, b2, i) restituisca una mutazione con le specifiche indicate come argomento.

Bisogna fare un'ultima osservazione. Si è assunto che la primissima base possa subire mutazione. Si verifica quindi se le due basi iniziali siano diverse e, qualora lo fossero, si aggiunge la mutazione e ci si sposta ai due *kmer* di posizione 1 nei due *kmer-set*, sapendo che essi non conterranno sicuramente la prima base delle rispettive sequenze e quindi, per le assunzioni fatte, continueranno a contenere al più una mutazione, nell'ultimo carattere. Dopo questa osservazione si procede regolarmente con l'algoritmo.

Per praticità l'algoritmo restituisce una tupla contenente:

- 1. il vettore delle mutazioni
- 2. un booleano che segnala se i vincoli del problema sono stati tutti rispettati

Quindi si hanno vari casi:

- un vettore di mutazioni non nullo (in tal caso sicuramente il booleano presenta ⊤)
- un vettore di mutazioni nullo e in tal caso:
 - se il booleano è ⊤ significa che le due sequenze rispettano tutti i vincoli ma non si hanno mutazioni
 - se il booleano è \perp significa che qualche vincolo è stato infranto, ovvero stringhe di lunghezza diversa, stringhe nulle e stringhe che prevedono kmer non univoci

L'assunzione di avere distanza 5 tra ogni mutazione non viene verificata e viene assunta come assioma.

Vediamo quindi prima lo pseudocodice e poi qualche esempio.

Esplicitiamo prima la funzione getKmers che, data una sequenza seq e un intero k, restituisce un vettore di stringhe, che per le assunzioni è sia il kmer set che lo spettro, mantenendo l'ordine, quindi il kmer che nel vettore ha indice i è il kmer che inizia all'indice i della sequenza. Quest'ultimo ragionamento è possibile solo grazie alle assunzioni fatte: kmer non univoci non permetterebbero questo. Con s[i,j] si intende la sottostringa di s dall'indice i all'indice j inclusi. Con s[i,j] si intende il suffisso di s che inizia all'indice i.

Algorithm 4 Funzione di calcolo dei kmer

```
function GETKMERS(seq, k)
kmers \leftarrow [\ ]
while length(seq) \geq k do
push(kmers, seq[0, k-1])
seqgetsseq[1,]
end while
return \ kmers
end function
```

Si noti che la funzione consuma la sequenza ma potrebbe essere facilmente editato l'algoritmo per evitare questa cosa.

Passiamo ora allo pseudocodice principale.

Algorithm 5

```
function CheckMutation(seq1, seq2)
   if length(seq1) \neq length(seq2) then
       return ([],\perp)
   end if
   if length(seq1) == 0 or length(seq2) == 0 then
       return ([],\perp)
   end if
   muts \leftarrow [\ ]
   i \leftarrow 0
   n \leftarrow length(seq1)
   seq1 \leftarrow lowercase(seq1)
   seq2 \leftarrow lowercase(seq2)
   if seq1[0] \neq seq2[0] then
       push(muts, newMutation(seq1[0], seq2[0], 0))
       i \leftarrow index + 1
   end if
   kmers1 \leftarrow getKmers(seq1,6)
   kmers2 \leftarrow getKmers(seq2,6)
   if length(kmers1) \neq n - (k-1) or length(kmers2) \neq n - (k-1) then
       return ([\ ], \bot)
   end if
   while i < length(kmers1) do
       if kmers1[i][5] \neq kmers2[i][5] then
           push(muts, newMutation(kmers1[i][5], kmers2[i][5], (k-1)+i)) \\
           i \leftarrow i + k
       else
           i \leftarrow i + 1
       end if
   end while
   return (muts, \top)
end function
```

Dove con i teniamo traccia dei kmer da confrontare, eventualmente saltando i confronti superflui sopra descritti.

Vediamo quindi qualche esempio.

Esempio 3. Siano date in input:

- $\bullet \quad at ctt g cattac c g c c c ca at c$
- $\bullet \ \ atcttacattaccgtcccaacc$

Le due sequenze rispettano tutte le assunzioni.

Calcolati i kmer si procede con il confronto, sapendo che le due sequenze iniziano con la stessa base. L'indice dell'enumerazione corrisponde all'indice i dell'algoritmo.

- 0. confronto "atettg" con "atetta". Ho un mismatch tra gli ultimi simboli "g" e "a", che sono all'indice 5 essendo noi al kmer di indice 0 (si ha infatti (6 1) + 0 = 5). Aggiungo quindi la mutazione (g,a,5) e aggiorno l'indice al valore i + 6, ovvero, in questo caso, 6. Salto quindi tutti i confronti e riparto dal 6
- 1. confronto "tettge" con "tettae"
- 2. confronto "cttgca" con "cttaca"
- 3. confronto "ttqcat" con "ttacat"
- 4. confronto "tqcatt" con "tacatt"
- 5. confronto "qcatta" con "acatta"
- 6. confronto "cattac" con "cattac". Non ho mismatch quindi faccio i+1 e basta and and a l confronto successivo
- 7. confronto "attacc" con "attacc". Non ho mismatch quindi faccio i+1 e basta andando al confronto successivo
- 8. confronto "ttaccg" con "ttaccg". Non ho mismatch quindi faccio i+1 e basta andando al confronto successivo
- 9. confronto "taccgc" con "taccgt". Ho un mismatch tra gli ultimi simboli "c" e "t", che sono all'indice 14 essendo noi al kmer di indice 9 (si ha infatti (6 1) + 9 = 14). Aggiungo quindi la mutazione (c,t,14) e aggiorno l'indice al valore i+6, ovvero, in questo caso, 15. Salto quindi tutti i confronti e riparto dal 15
- 10. confronto "accgcc" con "accgtc"

- 11. confronto "ccgccc" con "ccgtcc"
- 12. confronto "cgcccc" con "cgtccc"
- 13. confronto "geccca" con "gtecca"
- 14. confronto "ccccaa" con "tcccaa"
- 15. confronto "cccaat" con "cccaac". Ho un mismatch tra gli ultimi simboli "t" e "c", che sono all'indice 20 essendo noi al kmer di indice 15 (si ha infatti (6 1) + 15 = 20). Aggiungo quindi la mutazione (t,c,20) e aggiorno l'indice al valore i+6, ovvero, in questo caso, 26. Essendo l'indice maggiore stretto della cardinalità del kmer-set, interrompo l'esecuzione, sapendo che comunque non potrei avere in ogni caso ulteriori mutazioni
- 16. confronto "ccaate" con "ccaace"

Esempio 4. Più brevemente vediamo un altro input:

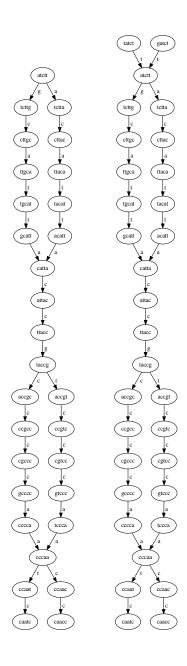
- $\bullet \quad tatcttg cattaccgccccaatc$
- qatcttacattaccqtcccaacc

In questo casi si noti come la prima base non combaci, si procede quindi salvando la mutazione (t,g,0) e facendo iniziare il confronto tra i kmer di indice 1, ovvero "atcttg" e "atctta", proseguendo poi come nell'esempio precedente.

Per pura curiosità si può fare anche un piccolo ragionamento ulteriore. Con le assunzioni date si può costruire un **grafo di De Brujin** delle due stringhe e vedere che non si hanno cicli, non essendoci *kmer* non univoci all'interno di ciascuna stringa. Le mutazioni possono essere quindi viste come le coppie di caratteri che etichettano l'inizio di una **bubble** nel grafo, ovvero le etichette degli archi di un nodo che ha due archi uscenti, Vista l'essenza di cicli, si ha che il primo *kmer* calcolato per ciascuna delle due sequenze (potrebbero essere due diversi) è un nodo privo di archi entranti, essendo quindi un nodo *source*, e l'ultimo nodo calcolato per ciascuna delle due sequenze (potrebbero essere due diversi) è un nodo privo di archi uscenti, essendo un nodo *sink*. È quindi possibile ragionare in modo analogo a sopra, saltando il confronto tra i *kmer* di nodi che formano i due rami di una **bubble** e tenendo conto del numero di nodi per l'indice della mutazione.

Qualora si abbia una mutazione nella prima base allora si avranno due nodi privi di archi entranti che puntano però allo stesso nodo. Si procede quindi aggiungendo la prima base come mutazione e proseguendo con il ragionamento visto sopra a partire da questo nodo a cui puntano.

A seguire i due grafi relativi ai due esempi, dove è possibile verificare quanto detto. Si noti che senza ulteriori assunzioni si perde esplicita referenza di quale base che muta appartiene alla sequenza di riferimento o a quella mutata, ma un controllo per capirlo è facilmente eseguibile usando l'indice.



Capitolo 3

Esercizio 3

La distanza di Hamming tra due stringhe, che si assumono di uguale lunghezza, è il numero di indici per i quali i due caratteri associati sulle due stringhe sono diversi. È quindi un conteggio delle sostituzioni necessarie per passare da una stringa all'altra.

Ipotizzando di voler studiare la distanza di Hamming tra due sequenze tramite la griglia estesa si può ipotizzare di ragionare solo in termini di una delle due sequenze, ovvero considerare i pesi degli archi in ottica di una sola delle due sequenze, come in figura 3.1. Si associano quindi i seguenti pesi:

- w(diagonale) = 0
- w(verticale) = 0
- w(orizzontale) = 1

o, in modo speculare se si vuole ragionare sull'altra sequenza:

- w(diagonale) = 0
- w(verticale) = 1
- w(orizzontale) = 0

Dove, in entrambi i casi, gli archi diagonali rappresentano un match mentre, a seconda, gli archi verticali o quelli orizzontali tengono conto dei mismatch. A questo punto si cerca il cammino di peso minimo che parte dal nodo source, posto in alto a sinistra, e arriva al nodo sink, posto in basso a destra. Essendo il nodo sink in posizione (n, n), assumendo le due sequenze lunghe n, garantisco che, calcolando il cammino che parte dal nodo source (0, 0) e arriva in quel nodo, si abbia il valore della distanza di Hamming, che prevede stringhe

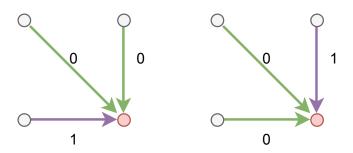
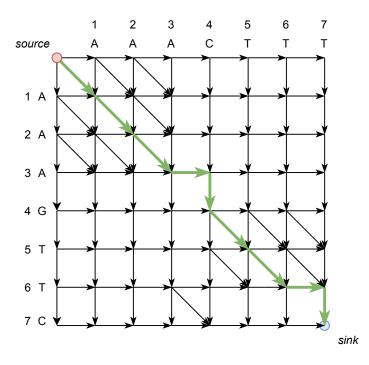


Figura 3.1: Rappresentazione grafica dei pesi degli archi.

di ugual lunghezza. I vari valori degli altri nodi sono da considerarsi "temporanei" e non rappresentanti una distanza di Hamming. Potenzialmente però tutti e soli i nodi (i,i), con $i \in [1,n)$, oltre quindi al nodo sink, potrebbero essere i nodi di fine di potenziali cammini dal source per calcolare la distanza di Hamming tra le sottostringhe di lunghezza i delle due stringhe in input. Prendendo, ad esempio, in input:

- AAAGTTC
- AAACTTT

Si ha un cammino minimo (non l'unico), assumendo costo degli archi in orizzontale pari a 1 e in verticale pari a 0, del tipo:



Dove in verde è segnato il cammino minimo scelto. Avendo solo due archi orizzontali, che ricordiamo avere peso 1 mentre gli altri hanno peso nullo, possiamo concludere che la distanza di Hamming tra le due stringhe è pari a 2.

Per il ragionamento fatto sopra, se mi fermassi in (3,3), per i=3, avrei la distanza di Hamming tra AAA e AAA. Il cammino dal source a (3,3) è formato da sole diagonali e quindi ha costo 0, che è appunto al distanza di Hamming tra le due sottostringhe.

Capitolo 4

Esercizio 4

Il problema della **longest common substring** si pone l'obiettivo di estrarre, a partire da due stringhe di lunghezza arbitraria, anche non uguale, la sottostringa, comune ad entrambe, più lunga.

Dal punto di vista della griglia si assegnano i seguenti pesi (come da figura 4.1):

- w(diagonale) = 1
- w(verticale) = -i
- w(orizzontale) = -j

Dove gli archi diagonali rappresentano un match ed i e j sono gli indici che scorrono le due stringhe, ovvero rispettivamente sulle righe e sulle colonne. Si assume che i nodi abbiano valore $x \geq 0$ quindi qualora si ottenga un valore negativo come risultato dopo l'attraversamento dell'arco viene messo il valore 0.

Quando si ha un match quindi il nodo finale ha valore pari a uno più il valore

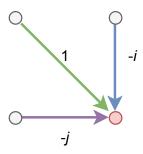


Figura 4.1: Rappresentazione grafica dei pesi degli archi. Si ricorda che nel nodo finale, in rosso, posso comunque avere solo valori ≥ 0

del nodo sorgente dell'arco diagonale.

Si ragiona quindi tenendo traccia del valore massimo raggiungo, tenendo traccia, per una maggior efficienza, anche delle coordinate. Una volta completata la griglia si avrà che il valore massimo corrisponde al nodo sink del cammino composto dalla più lunga sequenza possibile di archi diagonali consecutivi. Qualsiasi altra "operazione", con archi orizzontali o diagonali, comporta infatti una perdita di punteggio e ogni volta che un cammino diagonale termina viene azzerato il punteggio, tramite pesi negativi pesati sugli indici. Azzerando ogni volta si permette di avere la costruzione di un eventuale cammino diagonale che assegna man mano il valore corrispondente alla lunghezza del cammino stesso, avendo che la diagonale pesa 1. Il valore massimo quindi altro non è che la lunghezza della longest common substring. Sapendo che archi diagonali corrispondono a match tra le due sequenze si ottiene che tale cammino corrisponde alla longest common substring.

Volendo si può scegliere di salvare in un vettore i valori massimi qualora coincidano, per ottenere eventuali più longest common substring qualora ce ne siano.

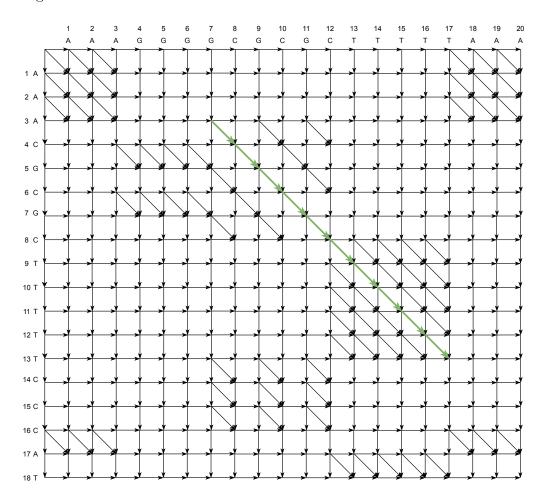
In altri termini si cerca il sottocammino più pesante.

ipotizzando di non "azzerare" ogni volta in caso di mismatch otterrei comunque una griglia dover il nodo massimo mi permetterebbe di risalire la diagonale ritrovando la longest common substring ma tale nodo non potrebbe avere come valore la lunghezza della stessa, in quanto non ricomincerei il conto da 0 ogni volta che creo un nuovo cammino fatto di diagonali. Per ricostruire la longest common substring si parte dal nodo sink, come detto definito dal valore massimo calcolato. Si aggiunge il carattere corrispondente e si risale tutto il cammino diagonale, aggiungendo di volta in volta in testa il carattere letto. Ci si ferma quindi quando non si ha più un nodo il cui punteggio è stato ottenuto tramite un arco diagonale.

Vediamo quindi un esempio pratico. Siano date:

- AAACGCGCTTTTTCCCAT
- AAAGGGGCGCTTTTTAAA

Si costruisce quindi la griglia e si identifica il cammino diagonale più lungo:



Ricostruendo si ha che tale cammino identifica un massimo pari a 10. Il sottocammino più pesante è quindi quello rappresentato in verde. Ipotizzando quindi di poter 'risalire" la dialogale si ricostruisce:

CGCGCTTTTT

che è appunto la longest common substring delle due sequenze in input.