未決定文字列における一意単語の検索の困難さ

Dominik Köppl [1] and Jannik Olbrich [2]

[1]: 山梨大学, [2]: University of Ulm

山梨県若手研究者奨励事業費補助金 2291 による助成研究

$\widetilde{T} = \mathtt{A}\left\{\begin{matrix}\mathtt{A}\\ \mathtt{C}\end{matrix}\right\}\mathtt{C}\left\{\begin{matrix}\mathtt{G}\\ \mathtt{A}\end{matrix}\right\}$, 一意単語: AA, CC, CA, G

第 201 回アルゴリズム研究発表会 [AL4]

一意単語

定義 (一意単語 = unique word)

- T: 文字列, Σ: アルファベット
- T の一意単語 X: 文字列 T 中に部分文字列として丁度 1 回出現する文字列

例

- $T = \mathtt{AACAC}$, $\Sigma = \{\mathtt{A}, \mathtt{C}\}$
- MUSs: $\mathtt{AA}$, $\mathtt{CA}$, $\mathtt{AC}$

定義 (最小一意単語 = MUS (minimum unique substring))

- X : 一意単語
- X は最小一意単語 $:\Leftrightarrow$ X のすべての真の部分文字列が T 中に少なくとも 2 回出現

未決定文字列

定義

- 任意の位置に複数の代替文字を持つ
- 位置を記号と呼ぶ

- $\tilde{T}$: 未決定文字列
- $\tilde{T}[i] \subset \Sigma$

例

IUPAC 表記法は DNA や RNA 配列における未決定の核酸を表現、例：

- R は A または G
- N は任意の核酸

$$\tilde{T} = \mathtt{A} \begin{Bmatrix} \mathtt{A} \\ \mathtt{C} \end{Bmatrix} \mathtt{C} \begin{Bmatrix} \mathtt{G} \\ \mathtt{A} \end{Bmatrix}$$

$$\mathcal{L}(\tilde{T}) = \{\mathtt{AACG}, \mathtt{AACA}, \mathtt{ACCG}, \mathtt{ACCA}\}$$

- $\tilde{T}$: 未決定文字列の例
- $\mathcal{L}(\tilde{T})$: $\tilde{T}$ の言語
- $\mathcal{L}(\tilde{T})$ は $\tilde{T}$ で表現されている文字列の集合

未決定文字列の MUS

定義 (一意単語)

- $\widetilde{T}$: 未決定文字列
- $\widetilde{T}$ の一意単語 X: すべての $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ の文字列中に部分文字列として丁度 1 回出現する文字列

$$\widetilde{T} = \mathtt{A}\begin{Bmatrix}\mathtt{A}\\\mathtt{C}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{G}\\\mathtt{A}\end{Bmatrix}$$

$$\mathcal{L}(\widetilde{T}) = \{\mathtt{AACG}, \mathtt{AACA}, \mathtt{ACCG}, \mathtt{ACCA}\}$$

MUS: $\mathtt{AA}$, $\mathtt{CC}$, $\mathtt{AC}$, $\mathtt{CA}$, $\mathtt{G}$

定義 (MUS)

- X : 一意単語
- X は最小一意単語 $:\Leftrightarrow$ X のすべての真の部分文字列が任意の $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ の文字列中に少なくとも 2 回出現

計算量

- 単純な文字列： $\mathcal{O}(n)$ 時間 Pei+'13
- 連超圧縮された文字列： $\mathcal{O}(m \lg m)$ 時間 Mieno+'16
- 未決定文字列： NP 完全 (一つの MUS の検索だけ)

ただし

- m は入力文字列の連超圧縮サイズ
- 注意： $|\widetilde{T}| = n$ としても、 $|\mathcal{L}(\widetilde{S})| = \Omega(2^n)$ になる可能性がある

例：

$$\widetilde{T} = \begin{Bmatrix} \mathtt{a} \\ \mathtt{b} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathtt{a} \\ \mathtt{b} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathtt{a} \\ \mathtt{b} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathtt{a} \\ \mathtt{b} \end{Bmatrix} \cdots$$

問題 (k-一意単語問題)

- 入力： 未決定文字列 $\widetilde{S}$ と整数 k
- 出力： 長さが最大 k の一意単語が $\widetilde{S}$ に存在するかどうか

- k-一意単語問題は判定問題
- 判定問題の答えは Yes・No

例

$$\widetilde{T} = \mathtt{A}\begin{Bmatrix}\mathtt{A}\\ \mathtt{C}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{G}\\ \mathtt{A}\end{Bmatrix}$$

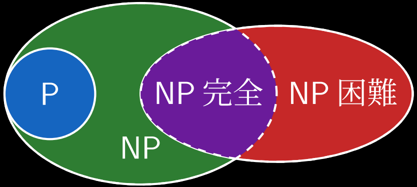
$$\mathcal{L}(\widetilde{T}) = \{\mathtt{AACG}, \mathtt{AACA}, \mathtt{ACCG}, \mathtt{ACCA}\}$$

- $k = 1$: Yes: $\mathtt{G}$
- $k = 2$: Yes: $\mathtt{CA}$
- $k \geq 3$: No

問題 (k-一意単語問題)

- 入力： 未決定文字列 $\tilde{S}$ と整数 k
- 出力： 長さが最大 k の一意単語が $\tilde{S}$ に存在するかどうか

- k-一意単語問題は判定問題
- 判定問題の答えは Yes・No



方針

- 一意単語問題 $\in$ NP を証明
- 一意単語問題 $\in$ NP 困難 を証明

$\Rightarrow$ 一意単語問題 $\in$ NP 完全

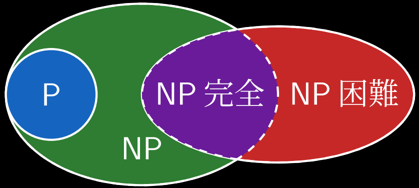
NP 問題

定義 (クラス NP)

- 問題 M は以下の条件を満たすと、NP の要素となる
- 入力に対する正しい出力が Yes であるとき、それを多項式時間で検証するための証拠が存在

問題 (証明検証)

- X: 文字列, $\tilde{S}$: 未決定文字列
- X は $\tilde{S}$ の MUS の一つかどうか

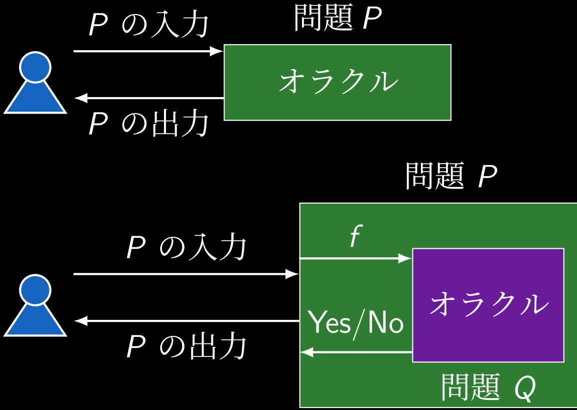


- X が $\tilde{S}$ に何回出現するか、多項式時間で判断 Abrahamson'87
- X のすべての部分文字列の個数は $O(n^2)$
- 証明検証問題を多項式時間で解ける

$\Rightarrow$ 一意単語問題 は NP 問題

定義 (Karp の帰着方法)

- 入力：判定問題 P と Q、多項式時間アルゴリズム f
- $f(P\text{ の入力}) = Q\text{ の入力}$
- P の入力 S が P の Yes 入力 $\Leftrightarrow$ $f(S)$ は Q の Yes 入力
- その際、P が Q に多項式時間多対一帰着可能であると言う



補題

- P は NP 困難
- P が Q に多項式時間多対一帰着可能

$\Rightarrow$ Q も NP 困難

- 一意単語問題 は NP 困難 だと証明したい $\Rightarrow Q =$ 一意単語問題
- $P =$ 3-SAT とする

定義 (3-SAT 判定問題)

入力:

- 連言標準形（CNF: conjunctive normal form）の式 F
- F は一連の節 C_i を連言（AND）で結合
- 各節 C_i は 3 つのリテラルの選言である
- n 個の変数 $x_1, \ldots, x_n$ が順序付け

出力：論理式全体の値を真にするような真偽値 $x_1, \ldots, x_n$ があるかどうか

3-SAT 判定問題は NP 困難 Karp'72

例：

- 変数 x_1, x_2, x_3, x_4
- $C_1 = x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3$
- $C_2 = \neg x_1 \vee x_2 \vee \neg x_4$
- $C_3 = x_2 \vee x_3 \vee \neg x_4$
- $F = C_1 \wedge C_2 \wedge C_3$

出力： Yes:

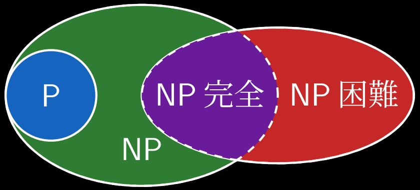
- $x_1 = x_2 =$ 真

$\Rightarrow F =$ 真

方針

- 線形量を取る未決定文字列 $\tilde{S}$ で F の反対を表現
- つまり、C_i を満たさない真偽を $\tilde{S}$ の長さ n の部分文字列で表現
- 長さ n のすべての可能な部分文字列を $\tilde{S}$ で列挙

$\Rightarrow$ F が充足する割り当てを持つ $\Leftrightarrow$ $\tilde{S}$ 中に長さは n を持つ MUS がある



$\widetilde{T}_j$ の定義

任意節 $C_j = (\ell_a \vee \ell_b \vee \ell_c)$ に対して：

- ℓ_i が変数 x_i のリテラル
- $v_i = \begin{cases} 0 & \text{ただし } \ell_i = x_i \\ 1 & \text{ただし } \ell_i \neq x_i \end{cases}$
- 以下の未決定文字列 $\widetilde{T}_j$ を定義

$$\widetilde{T}_j = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}^{a-1} \{ v_a \} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}^{b-a-1} \{ v_b \} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}^{c-b-1} \{ v_c \} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}^{n-c}.$$

例

- 変数: x_1, x_2, x_3, x_4
- $C_j = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3)$
- $T_j = \{0\}\{1\}\{0\}\begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$

$\widetilde{S}$ の定義

$$\widetilde{S} = \widetilde{T_1}\,\{\$\}\dots\{\$\}\,\widetilde{T_m}\,\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^n\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}.$$

- $\widetilde{T_j}$ は n の記号を持つ

$\Rightarrow$ $\widetilde{S}$ は $\mathcal{O}(nm)$ の記号を持つ

- $|\widetilde{S}[i]| \leq 3 \Rightarrow \widetilde{S}$ は F を $\mathcal{O}(nm)$ 領域で表現

例

$$F = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_3 \vee x_4),$$

$$\widetilde{S} = \{0\}\{1\}\{0\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}\{0\}\{1\}\{0\}\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^4\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^3\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^3.$$

例の MUS

$$F = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_3 \vee x_4),$$

$$\widetilde{S} = \{0\}\{1\}\{0\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}\{0\}\{1\}\{0\}\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^4\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^3\{\$\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^3.$$

1000 は MUS (特に、最短の MUS):

- 1000 は $(x_1 = 1, x_2 = x_3 = x_4 = 0)$ を表現
- すべての長さ 4 以下のバイナリー文字列は出現
- 長さ 3 のすべてのバイナリー部分文字列が $\widetilde{S}$ に 2 回出現
- 長さ 4 の部分文字列は \$ を含むと、 $\widetilde{S}$ に 2 回出現

帰着定理

$$\tilde{S} = \widetilde{T_1}\,\{\,\$\,\}\ldots\{\,\$\,\}\,\widetilde{T_m}\,\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n}\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}, \Sigma = \{0, 1, \$\}$$

定理

F が充足する割り当てが持つ $\Leftrightarrow$ $\tilde{S}$ 中に長さは n を持つ MUS がある

- 長さが最大 $n-1$ のすべてのバイナリー部分文字列が $\tilde{S}$ 中に 2 回出現

$\Rightarrow$ 一意単語は少なくとも長さ n を持つ

- 任意長さ n を持つ \$ を含む文字列が最後の 4 つの記号にも出現

$\Rightarrow$ 長さ n の MUS は \$ を含むことができない

帰着定理の証明: 必要条件 ($\Rightarrow$)

$$\widetilde{S} = \widetilde{T_1}\,\{\,\$\,\}\ldots\{\,\$\,\}\,\widetilde{T_m}\,\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n}\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}\{\,\$\,\}\begin{Bmatrix}0\\1\end{Bmatrix}^{n-1}, \Sigma = \{0, 1, \$\}$$

定理

F が充足する割り当てが持つ $\Leftrightarrow$ $\widetilde{S}$ 中に長さは n を持つ MUS がある

証明. 仮定：CNF を充足する割り当てがある.

- 割り当てをビット配列 $B[1..n]$ で表現する
- i 番目のビット $B[i]$ は x_i の真偽値を表現 (偽 $= 0$、真 $= 1$)
- B は部分文字列として出現
- B は $\widetilde{T_i}$ に不一致すると、B の割り当てが節が C_i を満たす

$\Rightarrow$ B は $\widetilde{S}$ の MUS

帰着定理の証明: 十分条件 ($\Leftarrow$)

$$\tilde{S} = \widetilde{T_1}\,\{\,\$\,\}\ldots\{\,\$\,\}\,\widetilde{T_m}\,\{\,\$\,\}\left\{\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\right\}^{n}\{\,\$\,\}\left\{\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\right\}^{n-1}\{\,\$\,\}\left\{\begin{matrix}0\\1\end{matrix}\right\}^{n-1}, \Sigma = \{0, 1, \$\}$$

定理

F が充足する割り当てが持つ $\Leftrightarrow$ $\tilde{S}$ 中に長さは n を持つ MUS がある

証明.

- 仮定：CNF を充足できない
- すべての長さ n のビット配列は $\tilde{S}$ 中に 2 回出現
- $\tilde{S}$ に長さ n を持つ一意単語はない

$\square$

今後の展望

	単純な文字列	未決定文字列	GD-文字列	ED-文字列	2ED-文字列
MUS	線形	NP 完全			
MAW	線形	NP 完全 ※			
anti-power	N	?	NP 完全		
LPF	線形	N	N	NP 完全	
不一致	線形	N	N	?	NP 完全

- 単純な文字列: $S[i] \in \Sigma$
- 未決定文字列: $\tilde{S}[i] \subset \Sigma$
- GD-文字列: $\forall i\ \exists k : \tilde{S}[i] \subset \Sigma^k$
- ED-文字列: $\tilde{S}[i] \subset \Sigma^*$
- 2ED-文字列: $\tilde{S}[i] \subset$ ED-文字列

※：２００番目のアルゴリズム研究会の課題

文字列の一般化の階段

- 単純な文字列: $T = \mathtt{AACG}$
- 未決定文字列: $\widetilde{T} = \mathtt{A}\begin{Bmatrix}\mathtt{A}\\ \mathtt{C}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{G}\\ \mathtt{A}\end{Bmatrix}$
- generalized degenerate (GD)-文字列:

$$\widetilde{T} = \mathtt{A}\begin{Bmatrix}\mathtt{AAC}\\ \mathtt{CAT}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{G}\\ \mathtt{T}\end{Bmatrix}$$

- elastic-degenerate (ED)-文字列:

$$\widetilde{T} = \mathtt{A}\begin{Bmatrix}\epsilon\\ \mathtt{CAT}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{GTCG}\\ \mathtt{T}\end{Bmatrix}$$

- 2ED-文字列: $\widetilde{T} = \begin{Bmatrix} T\begin{Bmatrix}\mathtt{ACT}\\ \mathtt{C}\end{Bmatrix}A \\ A\begin{Bmatrix}\mathtt{T}\\ \mathtt{AAG}\end{Bmatrix}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\epsilon\\ \mathtt{CAT}\end{Bmatrix}\mathtt{C}\begin{Bmatrix}\mathtt{GTCG}\\ \mathtt{T}\end{Bmatrix}$