パラメタ化 Burrows-Wheeler 変換の拡張

Eric Osterkamp (University of Münster)

クップルドミニク(山梨大学)

研究背景

パターン照合問題

• *T*: テキスト

• P: パターン

• 目的: T の中に P の出現位置を検索する

⇔ つまり、 P とマッチする T の部分文字列を数えたい

パターン照合の例

- Σ:アルファベット,例: Σ= {a, b}
- *T* = ababbaababba
- *P* = abb
- *T* [3..5] = *T* [9..11] = abb = *P* とマッチする
- 問題: Tの中にPは何回出現するの?

p マッチ [Baker '93]

パターン照合問題のひとつの一般化はパラメタ化

- そのときアルファベット Σ は2つのアルファベット Σ_s と Σ_p から成り立つ
- $\Sigma := \Sigma_s \cup \Sigma_p$ ただし、 $\Sigma_s \cap \Sigma_p = \emptyset$
 - Σ_s を定数アルファベット (static) と
 - Σ_p をパラメタ化アルファベット (parameterized) を呼ぶ

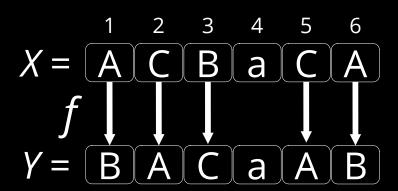
p マッチ [Baker '93]

- $\Sigma := \Sigma_s \cup \Sigma_p$ ただし、 $\Sigma_s \cap \Sigma_p = \emptyset$
- 2つ文字列 X, Y は p マッチするのは、以下の状況を満たす $f: \Sigma_p \to \Sigma_p$ の順列が存在する
 - -|X| = |Y|(X と Y は同じ長さ)
 - X[i] ∈ Σ_s の場合、X[i] = Y[i]
 - $-X[i] \in \Sigma_p$ の場合、X[i] = f(Y[i])
- そのとき、X=pY を書く

p マッチの例

例

- $\Sigma_s = \{a\}, \Sigma_p = \{A, B, C\}$
- X = ACBaCA
- Y = BACaAB



• $f: A \mapsto B, B \mapsto C, C \mapsto A$ によって $X =_p Y$

パラメタ化パターン照合問題 (PPM)

- $T[1..n], P[1..m] \in \Sigma^*$
- n は T の長さ、m は P の長さ
- すべて T[i..i+|P|-1]=pP を満たすテキスト位置 i ∈ [1..n] の個数を求める (count query)
 (ただし各位置に対して、新しい順列 f を選べる)
- パラメタ化パターン照合問題を PPM (parameterized pattern matching) で省略する

パラメタ化パターン照合問題 (PPM)

- 例: $\Sigma_s = \{a,b\}, \Sigma_p = \{A,B\}$
- T = ABbBAbAaABBA
- P = ABb
- T[1..3] = T[5..7] = ABb = P とpマッチする

$$T = A B b a B A b A$$

$$f_1 = id$$

$$f_2 \downarrow \downarrow f$$

$$P = A B b A B b$$

$$f_2 \downarrow A B b$$

$$f_2 \colon A \mapsto B, B \mapsto A$$

PPM の既存研究

データ構造 PPM 時間 引用

suffix tree $O(m \log \sigma)$ [Baker '93]

suffix array $O(m + \log n)$ [Deguchi + '08]

position heap $O(m \log \sigma + m\sigma_p)$ [Diptarama+ 17]

suffix tray $O(m + \log \sigma)$ [Fujisato + 21]

DAWG $O(m \log \sigma)$ [Nakashima+ 22]

 $\sigma_p := |\Sigma_p|$

n:= |T|, テキストの長さ

m: |P|, パターンの長さ

すべてのデータ構造の 領域は

O(n log n) ビット

既存研究:省メモリー

- パラメタ化 Burrows-Wheeler transform (pBWT) [Ganguly+'17]
 - *n* lg σ + O(*n*) ビット領域
 - O(*m* log σ) 時間で PPM を計算できる
- pBWT の簡略化 [Kim, Cho '21]
 - 2*n* lg σ + O(*n*) ビット領域
 - 入力のビット表現について線形的な領域を取る

PPM の応用

万能な応用:

- 情報検索
- ソフトウェアのメンテナンス
- 剽窃の検出
- 遺伝子構造の解析

応用:重複のコードを発見

下記は X11 のソースコードの2つ場所: [Baker '97] *pmin++ = *pmax++; *pmin++ = *pmax++; copy_number(&pmin,&pmax, copy number(&pmin,&pmax, pfh->min bounds.left, pfi->min bounds.lbearing, pfi->max_bounds.rbearing); pfh->max_bounds.left); *pmin++ = *pmax++; *pmin++ = *pmax++; Σ_p = {pfi, pfh, lbearing, rbearing, ...} を文字列アル ファベットに見なすと f は以下のように左側を右側へ写像できる: • pfi → pfh

• Ibearing → left

rbearing → right

<u>応用:バイオインフォマティクス</u>

- RNA の塩基対関係
- *X* = AUGCAUC
- Y = CGAUCGU
- $\bullet \ f(X) = Y$

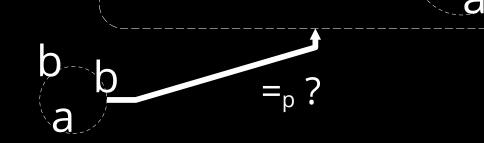
f:

[Shibuya' 04]

- $\bullet A \mapsto C$
- $U \mapsto G$,
- C → U,
- $\bullet G \mapsto A$
- しかし、RNA で円形のパターン照合する希望がある!

円形のパターン照合 (CPM)

- *T* = {ab, bba, baa, abba }
- $P_1 = abb$ $(=_c T [3..5] =_c T [9..11]$



=c は円形的に一致する ことを示す (c:circular)

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ a & b & b & a \\ P_1 & a & b & b \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 \\ b & a & a & a & b & b & a \\ P_1 & a & b & b & a \end{bmatrix}$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ b & b & a & a & b & b \\ a & b & b & a & b & b \end{bmatrix}$$

CPM の既存研究

CPM の索引構造

σ:=|Σ|, アルファベットのサイズ n:= |T|, テキストの長さ

m: |*P*|, パターンの長さ

一つのテキスト [Booth '80]

データ構造

CPM 時間

引用

suffix automaton

 $O(m \log \sigma)$

[Lothaire '05]

suffix tree

 $O(m \log n)$

[Iliopoulos, Rahman

'08]

suffix tree

 $O(m \log \sigma)$

[Jin, Adjeroh '11]

suffix array

 $O(m \log n)$

[Iliopoulos+'17]

すべてのデータ構造の領域は O(n log n) ビット

CPM count の既存研究

- 複数のテキストに対して CPM 照合
- extended BWT [Mantaci+ '07]
 - 領域・時間は不明

- d: テキストの個数
- n: すべてのテキストの 文字の個数の総和

- circular BWT [Hon+ '11]
 - n log σ (1+ o(1)) + O(n) + O(d log n) ビット
 - O(m log σ) 時間で CPM count

今回の話題

CPM n PPM =円形のパラメタ化パターン照合問題

複数のテキストに対して CPM n PPM を計算

$$T = \begin{bmatrix} A & A & b & A & B \\ B & B & A & A & A \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} A & B & B & A & A & A \\ A & B & B & A & A & A \end{bmatrix}$$
₁₇

円形のパラメタ化パターン照合:例

• *T* = {AB, bBA, bAa, ABBA}

BAABBABAB

• P = BAA $(=_{cp} T [9..11] =_{cp} T [11..12] T [9])$



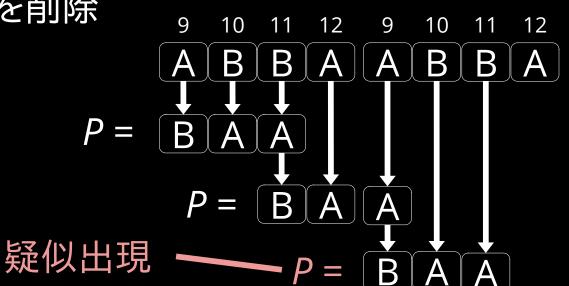
$$T = A B$$
 $B A$
 $D B A$
 $D B$

本研究の方針

- [Kim, Cho '21] の pBWT を CPM 問題に拡張する
- CPM 問題の方針: P を円形的にテキスト T の中に検索したい場合は、
 - 1)厳密パターン照合を連結 T·T を行ったあと、
 - 2)数えすぎた出現を削除

例:

- *T* = ABBA
- $\bullet P = BAA$



pBWT から epBWT までへ

pBWT をよりわかりやすく定義するため、 2つの文字列の符号化を提案する

- 1) prev 符号化 〈 T 〉 [Baker '93]
- 2) 橋本符号化 « T » [Hashimoto+ '22]

prev 符号化〈T〉

- prev 符号化〈T〉は任意の文字列 T に対して、すべての Σρ の文字を前の出現の距離に変更するただし、最差の出現を∞で変更
- 〈 *T* 〉[*i*] = *T*[*i*] ただし、*T*[*i*] ∈ Σ_s の場合
- 〈 *T* 〉[*i*] = ℓ , *T*[*i*] ∈ Σ_p ∧ *T*[*i* ℓ] = *T*[*i*] ∧ *T*[*i*] ∉ T[*i* ℓ + 1..i 1] の場合
- 〈 T 〉[i] = ∞ (そのほか)

T = ABbBAbAaABBA

例: < T> = $\infty \times b24b2a2613$

 $<\pi$ 2... $> = \infty b2 \infty b2 a2613$

橋本符号化 «T»

- «*T*»[*i*] = *T*[*i*] ただし、*T*[*i*] ∈ Σ_s の場合
- $\mbox{"$T$}[i] = c$ ただし、 $T[i] \in \Sigma_p$ かつ $(T \cdot T)[j] = T[i]$ を満たす最小 $j \in [i+1..]$ として $(T \cdot T)[i..j]$ の中に出現する異なる Σ_p の文字の個数は c
- 例: T = ABbBAbAaABBA,
 «T» = 21b21b1a2121
 «T[2..]» = 1b21b1a2122

定理: $X =_p Y \Leftrightarrow \langle X \rangle = \langle Y \rangle \Leftrightarrow \langle X \rangle = \langle Y \rangle$

pBWT

- RA:[1..*n*] → [1..*n*] 順列:〈*T*[RA[1]..]〉 ≺ 〈*T*[RA[2]..]〉 ≺ ... ≺ 〈*T*[RA[*n*]..]〉
- pBWT[i] := «T [RA[i]..] · T [1..RA[i] 1]»[n] は 長さ n を持つ文字列
- 観察: pBWT で CPM を行いたい場合、«T» の
 変わりに «T·T» を索引しても良い
- 素朴な方法は領域を2倍増やす!

σ:=|Σ|, アルファベットのサイズ

n:= |T|, テキストの長さ

m: |*P*|, パターンの長さ

まとめ

- CPM n PPM 問題について索引構造 epBWT を提案 した
- 2*n* lg σ + O(*n*) ビット領域
- O(*m* log σ) 時間で CPM n PPM count を計算できる 方針
- [Kim, Cho '21] の pBWT に基づいて
- 順列 RA の変わりに [Mantaci+'07] の extended BWT の順序でソートする