# String matching: Árboles de sufijos

Algoritmia para problemas difíciles 15-12-15 Elvira Mayordomo



## Contenido

- El problema de string matching
- Árboles de sufijos
- Algoritmos de propósito general
- Vectores de sufijos ???



### Referencias

- H.J. Böckenhauer, D. Bongartz: Algorithmic aspects of bioinformatics. Springer, 2007.
- D. Gusfield: Algorithms on Strings, Trees, and Sequences. Cambridge University Press, 1997.
- T.H. Cormen, C.E. Leiserson, R.L. Rivest,
   C. Stein: *Introduction to Algorithms* (3rd ed.). MIT Press, 2009.



## El problema del string matching

 Consiste en encontrar un string (corto), el patrón, como substring de un string (largo), el texto



## Dominios de aplicación

- Inumerables: procesado de información (text mining), robótica (visión, etc), bioinformática, etc
- Por ejemplo en bioinformática lo más frecuente es buscar un fragmento nuevo de DNA (un gen) en una colección de secuencias
- En este caso permitimos un cierto error, pero el pattern matching exacto es una subrutina



## Enunciado del problema ...

- Entrada: Dos strings  $t = t_1 ... t_n$ ,  $p = p_1 ... p_m$  sobre  $\Sigma$
- Salida: El conjunto de posiciones de t donde aparece p, es decir,

```
I \subseteq \{1,..., n-m+1\}
tales que i \in I sii t_i ... t_{i+m-1} = p
```

## w

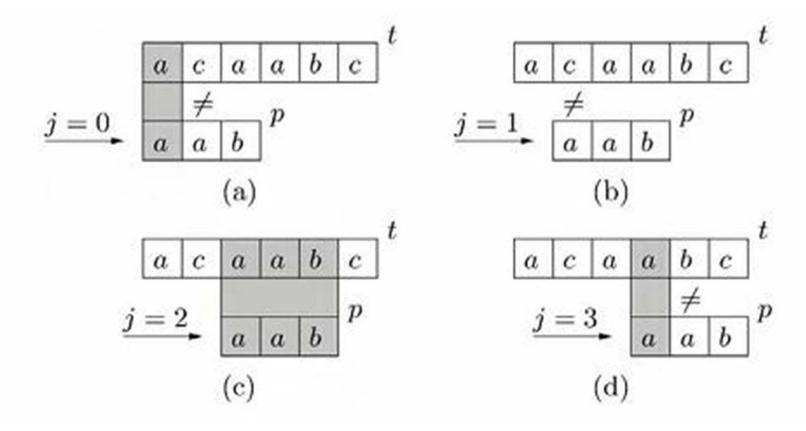
## Algoritmo inocente ...

```
StringMatching( patrón p=p_1...p_m, texto t=t_1...t_n)
```

```
I:=vacío for j:=0 to n-m do i:=1 while p_i = t_{j+i} and i \le m do i:=i+1 if i=m+1 then \{p_1 \dots p_m = t_{j+1} \dots t_{j+m}\} añadir(I,j+1\}
```

Resultado / (El conjunto / de posiciones, donde empieza una ocurrencia de p como substring de t)

# Ejemplo ...





## Algoritmo inocente ...

- ¿Complejidad?
- ¿Casos peores?

 Buscamos mejorar esto explotando la estructura del patrón

t= ababb p=abb



## Resto de métodos

- Preprocesar el texto (árboles de sufijos)
- Preprocesar el patrón



## Distintos casos

- Dependiendo del caso se puede buscar el mismo patrón en muchos textos o distintos patrones en el mismo texto
- Por ejemplo buscar la misma mutación en muchos pacientes o todas las mutaciones que tiene un paciente
- Veremos primero árboles de sufijos para buscar distintos patrones en el mismo texto, luego algoritmos para el mismo patrón en muchos textos



## Contenido

- El problema de string matching
- Árboles de sufijos
- Algoritmos de propósito general
- Vectores de sufijos ??



# Árboles de sufijos

- Se trata de preprocesar el texto
- Esto es útil cuando se quieren encontrar muchos patrones en el mismo texto (por ejemplo, muchos genes en el mismo DNA)

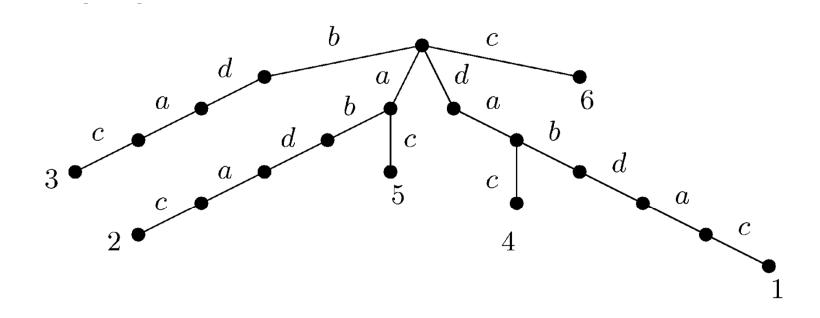


# Árboles de sufijos

- El patrón p ocurre en t cuando p es el prefijo de un sufijo de t
- Se trata de calcular y almacenar eficientemente los sufijos de t



## Ejemplo ...



**Fig. 4.5.** A simple suffix tree for the text t = dabdac

# M

## Definición

- Dado un string t=t<sub>1</sub>...t<sub>n</sub>, un árbol sufijo simple es un árbol dirigido T<sub>t</sub>=(V,E) con una raiz r que cumple
  - 1. El árbol tiene n hojas con etiquetas 1, ..., n. (La etiqueta i corresponde al sufijo t<sub>i</sub>...t<sub>n</sub>)
  - Las aristas del árbol están etiquetadas con letras del alfabeto
  - Todas las aristas de salida de un nodo tienen letras diferentes
  - El camino de la raiz a la hoja i tiene etiquetas t<sub>i</sub>...t<sub>n</sub>



## ¿Funciona siempre?

¿Qué pasa con cadada?

Hay sufijos que son prefijos de otros sufijos ...

Para evitarlo se construye el árbol de t\$

## M

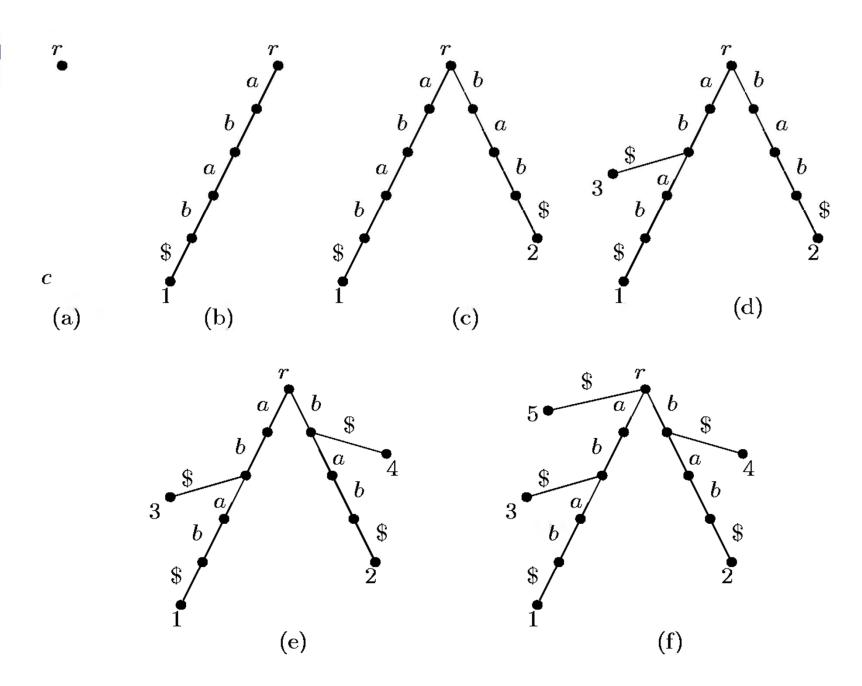
## Construcción simple

```
ÁrbolSufijos(t=t_1...t_n)

t':=t$
T:= árbol con raiz r
for i:=0 to n do
   {insertar t_i...t_n$ en el árbol T}
   Empezando en la raiz buscar un camino máximo t_i...t_j
        terminando en el nodo x

Añadir al árbol los nodos correspondientes a t_{j+1}...t_n$ como camino a partir de x con etiquetas t_{j+1}...t_n$, etiquetando la hoja con i
```

Resultado T (El árbol de sufijos de  $t_1 ... t_n$ \$)



**Fig. 4.6.** The construction of a simple suffix tree for the text abab\$ using Algorithm 4.7



## String matching

- Si tenemos el árbol de sufijos de t, ¿cuánto cuesta encontrar si p es substring de t?
- ¿y todas las apariciones de p como substring de t?



## String matching

- Saber si p está en t cuesta tiempo O(|p|)
- Encontrar todas las ocurrencias de p en t puede ser muy largo dependiendo del tamaño del subárbol con raiz p

■ Ejemplo: t=a<sup>n</sup>b<sup>n</sup>c

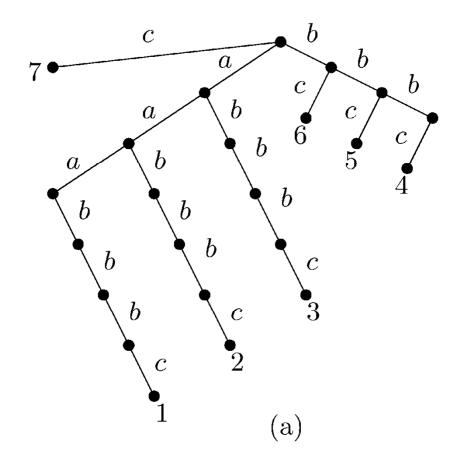


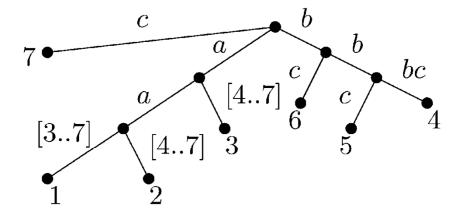
# Árboles de sufijos compactos

- Podemos eliminar los nodos con un solo hijo ... poniendo strings como etiquetas
- No tenemos que escribir las etiquetas

■ En lugar de una etiqueta de k símbolos (ocupa k·log( $|\Sigma|$ )) usamos los dos índices en el texto (ocupa 2·logn)







(b)

# M

## Definición formal

- Dado un string  $t=t_1...t_n$ , un árbol sufijo compacto es un árbol dirigido  $T_t=(V,E)$  con una raiz r que cumple
  - 1. El árbol tiene n hojas con etiquetas 1, ..., n. (La etiqueta i corresponde al sufijo t<sub>i</sub>...t<sub>n</sub>)
  - 2. Cada vértice interior tiene al menos dos hijos
  - Las aristas del árbol están etiquetadas con substrings de t (representadas tal cual o con los índices de inicio y final en el texto)
  - 4. Todas las aristas de salida de un nodo empiezan por letras diferentes
  - El camino de la raiz a la hoja i tiene etiquetas t<sub>i</sub>...t<sub>n</sub>



## Tamaño de un a. sufijo compacto

- Como tiene n hojas y todos los nodos interiores tienen al menos 2 hijos ...
  - □ Hay un máximo de n-1 nodos interiores
  - □ En total 2n-1 nodos
- Codificar un nodo cuesta como máximo 2 logn bits
- En total O(n logn)



## Notación en el algoritmo

- Si x es un nodo del árbol sufijo compacto:
  - □ pathlabel(x) es la concatenación de las etiquetas desde la raiz a x
  - $\Box$  depth(x) = |pathlabel(x)|
- Si x es un nodo del árbol sufijo:
  - □ Pos(x) es la mínima etiqueta de una hoja del subárbol de raiz x

## 100

## Construcción compacta (1)

```
ÁrbolSufijosCompacto(t = t_1 ... t_n)

T:= ÁrbolSufijos(t);

{Eliminar los nodos de grado 2}

X:= nodos de grado 2 de T;

While not EsVacío(X) do

Elegir x en X con hijo z, padre y

Reemplazar (y,x), (x,z) por (y,z) con etiqueta label(y,z) = label(y,x) label(x,z)

Borrar x
```

. . .

## M

## Construcción compacta (2)

```
ÁrbolSufijosCompacto(t = t_1 ... t_n)
   {Comprimir las etiquetas largas}
   For (x,y) arista do
        If label(x,y) >= \log(n-|\Sigma|) then
          {Reemplazar la etiqueta por los números de posición}
          label'(x,y) = (Pos(y)+depth(x), Pos(y)+depth(x)+|label(x,y)|-1);
   label=label'
Resultado T (El árbol de sufijos compacto de t_1...t_n$)
```



## Coste de la construcción

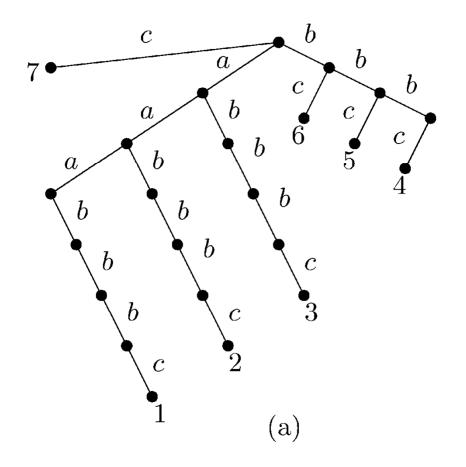
- Como el árbol sufijo inicial puede ser de tamaño O(n²) el tiempo es O(n²)
- Hay métodos de construcción del árbol sufijo compacto sin pasar por el inicial que tardan O(n log n)
- Como el tamaño del árbol es O(n log n) esto es lo mínimo posible ...

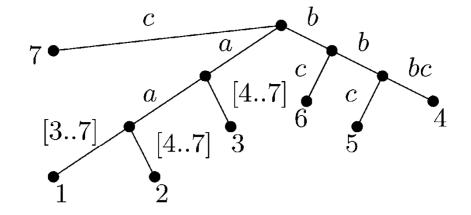


# String matching usando árboles de sufijos compactos

- Buscamos un patrón p en un texto t
- Tenemos que encontrar un nodo x del árbol de forma que el camino de la raiz a x sea p ó bien tenga p como prefijo
- Las apariciones de p en t nos las dan las hojas del subárbol de x







(b)

## M

# StringMatching(1)

```
StringMatching(t = t_1 ... t_n, p = p_1 ... p_m)

(1) T:= ÁrbolSufijosCompacto (t);

(2) {Inicialización}

x:= raiz(T); {vértice actual}

i:=1; {posición actual en p}

found:=false;

possible:=true;
```



# StringMatching(2)

```
While not found and possible
     (3a) {buscar una arista desde x con label empezando en p_i}
     fitting:=false;
     U:= hijos de x;
     While not fitting and not esVacío(U) do
              Elegir v en U
              If label(x,v) = p_i a then
                       fitting:=true
                       mylabel:=label(x,v)
              else if label(x,v)=[k..l] and t_k = p_i then
                       fitting:=true
                       l'=min(l, k+m-i)
                       mylabel:= t_k \dots t_{l'}
                       {leer la parte necesaria de la etiqueta}
              borrar(v,U)
```

# StringMatching(3)

While not found and possible

```
(3b) {Comparar mylabel con la parte de p por encontrar}
If (p_i \dots p_m) no es prefijo de mylabel) and (mylabel no es prefijo de p_i
... p_m) then
     possible := false {p no aparece en t}
else if mylabel es prefijo de p_i \dots p_m then
     X:=V
     i:=i+|mylabel|
else \{p_i \dots p_m \text{ es prefijo de mylabel}\}
     X:=V
     found := true
(4) if found then
     Calcular el conjunto I de las etiquetas de hojas en el subárbol
     de raiz x (búsqueda en profundidad)
```

Resultado / (El conjunto / de posiciones, donde empieza una ocurrencia de *p* como substring de *t*)



## Complejidad

#### 3(a)

- Si sólo hay que atravesar etiquetas no comprimidas (abab) para encontrar un patrón p=p<sub>1</sub>...p<sub>m</sub> basta tiempo |Σ|m
- Si hay que pasar por alguna etiqueta "comprimida" [2..5] eso quiere decir que la etiqueta corresponde a un fragmento largo (si no no se hubiera comprimido), a un fragmento de tamaño Ω(log n). Luego eso sólo puede ocurrir m/log n veces
- Leer cada fragmento comprimido cuesta como mucho |Σ|log n



## Complejidad

- 3(b) cuesta tiempo m en total
- Atravesar el subárbol encontrado cuesta
   O(k) si p ocurre k veces en t

El algoritmo completo cuesta
 O(n logn + m |Σ|+k)



### Contenido

- El problema de string matching
- Árboles de sufijos
- Algoritmos de propósito general
- Vectores de sufijos ???

# w

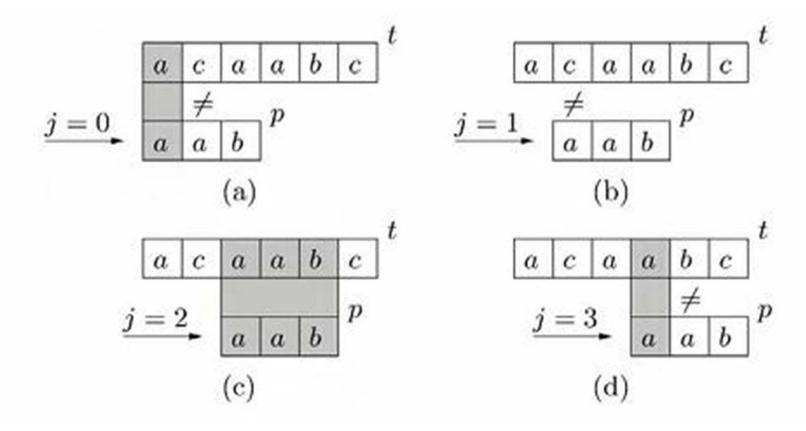
# Algoritmo inocente ...

```
StringMatching( patrón p=p_1...p_m, texto t=t_1...t_n)
```

```
I:=vacío for j:=0 to n-m do i:=1 while p_i = t_{j+i} and i \le m do i:=i+1 if i=m+1 then \{p_1 \dots p_m = t_{j+1} \dots t_{j+m}\} añadir(I,j+1\}
```

Resultado / (El conjunto / de posiciones, donde empieza una ocurrencia de p como substring de t)

# Ejemplo ...





# Algoritmo inocente ...

- ¿Complejidad?
- ¿Casos peores?

 Buscamos mejorar esto explotando la estructura del patrón

t= ababb p=abb



### Resto de métodos

- Preprocesar el patrón
- Preprocesar el texto (árboles de sufijos)



### Resto de métodos

- Vamos a ver por encima dos métodos clásicos: string matching automata y Boyer-Moore
- Los dos son algoritmos clásicos interesantes que por lo menos hay que conocer ...



# Preprocesar el patrón: String matching automata

- Una solución en la que una vez preprocesado p en tiempo O(|p|·|Σ|) resolvemos el problema en una sola pasada de t
- Usa autómatas finitos ...

# M

# Autómata finito (DFA)

Un DFA es una 5-tupla (Q,  $\Sigma$ , q<sub>0</sub>, $\delta$ , F) donde:

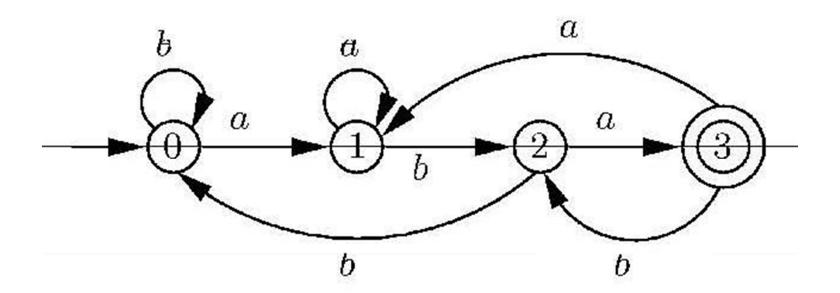
- 1) Q : conjunto de estados
- 2)  $\Sigma$ : alfabeto de entrada
- 4)  $q_0 \in Q$ : estado inicial
- 3)  $\delta$ : función de transición

$$\delta: \mathbf{Q} \times \Sigma \rightarrow \mathbf{Q}$$

5) F ⊆ Q : conjunto de estados finales (o de aceptación)



# Ejemplo de autómata



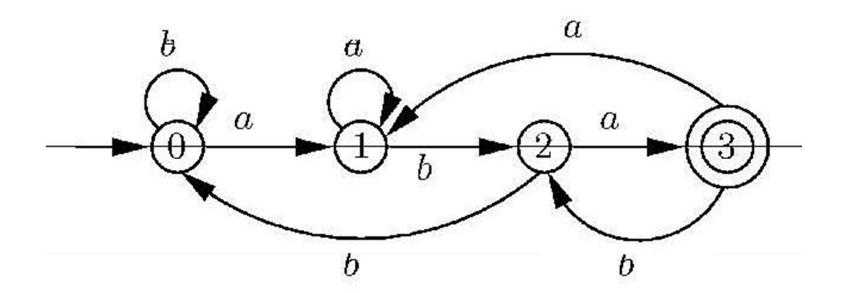


# String matching automata

Dado un patrón p=p<sub>1</sub>. . .p<sub>m</sub> construimos un autómata que acepte los textos con sufijo p (es decir, los textos que acaban en p)



# Ejemplo p=aba



t= bababaa

Cada vez que encuentro aba llego al estado final 3



# String matching con autómata

```
StringMatching(t = t_1 \dots t_n, p = p_1 \dots p_m)

Calcular M_p el autómata para p (M_p = (Q, \Sigma, q_0, \delta, F))
q = q_0; l = vacio;

For i:=0 to n do
q := \delta (q, t_i)
If esFinal(q) then l := a \tilde{n} a dir(q, l)

Resultado l
```



# Complejidad

- Construir el autómata (no visto):  $O(|\Sigma| \cdot m)$
- String matching: O(n)



## Enunciado del problema ...

- Entrada: Dos strings  $t = t_1 ... t_n$ ,  $p = p_1 ... p_m$  sobre  $\Sigma$
- Salida: El conjunto de posiciones de t donde aparece p, es decir, l ⊆ {1,..., n-m+1} tales que i∈ l sii t<sub>i</sub> ... t<sub>i+m-1</sub> =p



#### Vistos

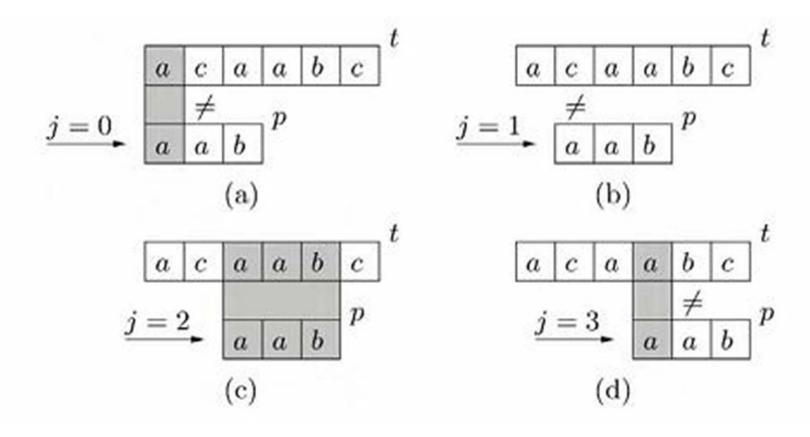
- Algoritmo inocente: O(m·(n-m))
- String matching autómata:
  - $\square O(|\Sigma| \cdot m)$  preprocesamiento del patrón
  - □ O(n) string matching



# Algoritmo de Boyer-Moore

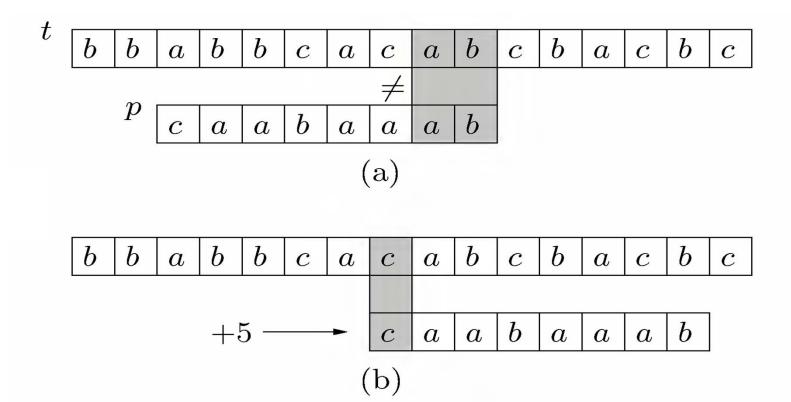
- Se trata de utilizar el algoritmo "inocente": ir moviendo patrón sobre el texto
- Pero ...
  - □ Cada comparación de p<sub>1</sub>...p<sub>m</sub> con t<sub>j+1</sub>...t<sub>j+m</sub> la hacemos empezando por el final
  - □ Si podemos movemos más de una posición la j
- Usa preprocesamiento de p

# Ejemplo del inocente ...



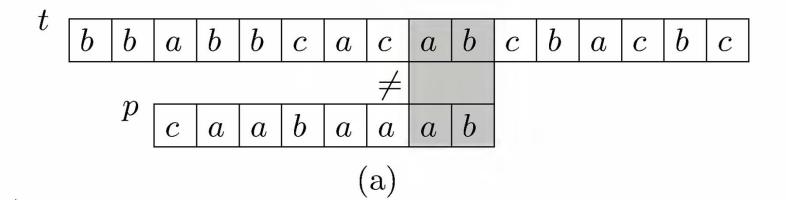
# M

# Boyer-Moore se comporta ...



# M

# Boyer Moore se comporta ...





# Complejidad de Boyer-Moore

- Preprocesamiento  $O(|\Sigma| \cdot m)$
- Caso peor: igual que el inocente O(|Σ|·m+n·m)
- Bastante rápido en la práctica
- Se puede mejorar el preproceso para que el caso peor sea O(n+m)



# Comparando complejidades

Caso peor ...

- Algoritmo inocente O(m·(n-m))
- String matching automata  $O(n+|\Sigma|\cdot m)$
- Boyer-Moore  $O(n+m+|\Sigma|)$

El caso peor del Boyer-Moore ocurre poco Alternativa: el Knuth-Morris-Pratt (mejor en el caso peor, peor en la práctica)



## Separando el preprocesamiento ...

- Algoritmo inocente: O(m·(n-m))
- String matching autómata:
  - $\square$  O( $|\Sigma|$ ·m) preprocesamiento del patrón
  - □ O(n) string matching
- Boyer-Moore
  - $\square O(|\Sigma|+m)$  preprocesamiento del patrón
  - □ O(n) string matching



# Resumen string matching

Encontrar todas las ocurrencias de ... un patrón de tamaño m en un texto de tamaño n

- Algoritmo inocente O(m·(n-m))
- String matching automata  $O(n+|\Sigma|\cdot m)$
- Boyer-Moore O(n+m+ $|\Sigma|$ )
- Árboles de sufijos compactos (k es el número de ocurrencias) O(n logn + m |Σ|+k)

# M

#### Resumen ...

- Algoritmo inocente: O(m·(n-m))
- String matching autómata:
  - $\square$  O( $|\Sigma|$ ·m) preprocesamiento del patrón
  - □ O(n) string matching
- Boyer-Moore
  - $\square$  O( $|\Sigma|$ +m) preprocesamiento del patrón
  - □ O(n) string matching
- Árboles de sufijos
  - □ O(n logn) preprocesamiento del texto
  - $\square$  O(m  $|\Sigma|+k$ ) string matching



#### Resumen

Encontrar todas las ocurrencias de ... un patrón de tamaño m en **N textos** de tamaño n

- Algoritmo inocente O(N·m·(n-m))
- String matching automata  $O(N \cdot n + |\Sigma| \cdot m)$
- Boyer-Moore  $O(|\Sigma| \cdot m + n \cdot m \cdot N)$ ,  $O(n \cdot N + m + |\Sigma|)$
- Árboles de sufijos compactos (k es el número máximo de ocurrencias)
   O(N·n·logn +N·m·|Σ|+N·k)

Lo mejor: preprocesamiento de patrón (autómata o BM)



#### Resumen

Encontrar todas las ocurrencias de ...

M patrones de tamaño m en un texto de tamaño n

- Algoritmo inocente O(M·m·(n-m))
- String matching automata  $O(n\cdot M+|\Sigma|\cdot m\cdot M)$
- Boyer-Moore  $O(|\Sigma| \cdot m \cdot M + n \cdot m \cdot M)$ ,  $O(n \cdot M + m \cdot M + |\Sigma|)$
- Árboles de sufijos compactos (k es el número total de ocurrencias)
   O(n logn + m·|Σ|·M +k)

Lo mejor: preprocesamiento de texto (árboles de sufijos)



### Contenido

- El problema de string matching
- Árboles de sufijos
- Algoritmos de propósito general
- Vectores de sufijos ??



# Vectores de sufijos

- Hemos visto la utilidad de los árboles de sufijos
- Ahora nos planteamos guardar los sufijos en un vector, ordenados alfabéticamente (lexicográficamente)

Ejemplo: s=ababbabbb



### Definición

■ El vector de sufijos de un string s es

$$A(s)=(j_1, ..., j_n)$$

tal que el orden alfabético de los sufijos es  $s[j_1,n] < s[j_2,n] < ... < s[j_n,n]$ 



# String matching con vectores de sufijos

- Para encontrar todas las ocurrencias de un patrón p en un texto t contando con el vector de sufijos de t
- Usar búsqueda dicotómica para encontrar el primer y último sufijo de t que empiezan por p

# M

#### Algorithm 4.12 String matching using a suffix array

Input: A text t and a pattern p over an ordered alphabet  $\Sigma$ , and a suffix array  $\mathcal{A}(t)$  for the text t.

- 1. Use binary search to find the first position i and the last position j in the suffix array such that p starts as a substring in t at positions  $\mathcal{A}(t)[i]$  and  $\mathcal{A}(t)[j]$ .
- 2.  $I := \{ \mathcal{A}(t)[i], \mathcal{A}(t)[i+1], \dots, \mathcal{A}(t)[j] \}.$

Output: The set I of all positions, where p starts as a substring in t.

Coste: O(m log n +k) donde k es el número de ocurrencias



## ¿Cuánto cuesta construir el vector?

- Se usa el algoritmo "skew" o sesgo basado en ordenación
- Cuesta tiempo O(n)

Veamos las ideas prales ...



# Radix sort para strings

- Podemos ordenar alfabéticamente n strings de longitud d sobre un alfabeto de k símbolos en tiempo O((n+k)d)
- Para ello ordenamos de forma estable según cada una de las posiciones de la 1 a la d

# Ŋ.

### Ordenar n valores de 0 a k

#### Algorithm 4.13 Counting Sort

Input: An array A = (A(1), ..., A(n)) of integers from the range  $\{0, ..., k\}$ .

1. Counter initialization:

for 
$$i := 0$$
 to  $k$  do  $c(i) := 0$ 

2. Count the number of elements of each type:

for 
$$j := 1$$
 to  $n$  do  $c(A(j)) := c(A(j)) + 1$ 

3. Count the number of elements less or equal to i:

for 
$$i := 1$$
 to  $k$  do  $c(i) := c(i) + c(i-1)$ 

4. Calculate the position of each element in the sorted array:

for 
$$j := n$$
 downto 1 do
$$B(c(A(j))) := A(j)$$

$$c(A(j)) := c(A(j)) - 1$$

Output: The sorted array  $B = (B(1), \dots, B(n))$ .



# Para ordenar n strings ...

- El algoritmo anterior ordena de forma estable n datos de 0 a k
- Lo utilizamos para ordenar, según una posición, n strings sobre un alfabeto de k símbolos



#### Algorithm 4.14 Radix Sort

Input: An array  $A = (a_1, \ldots, a_n)$  of strings of length d in k- letter alphabet

for i := 1 to d do

Sort A according to the *i*-th letter using Algorithm 4.13.

Output: The sorted array.

$$O((n+k)d)$$

# M

## El algoritmo para construir el vector

- Separa los sufijos que tienen longitud múltiplo de 3 (S<sup>0</sup>) del resto (S<sup>1,2</sup>)
- Construye primero A<sup>1,2</sup>, el vector de S<sup>1,2</sup> ordenando sólo las 3 primeras letras de cada sufijo por radix-sort, y si no es suficiente se cambia el alfabeto (cada tres letras viejas es una nueva) y se hace llamada recursiva
- Construye A<sup>0</sup> usando A<sup>1,2</sup>
- Mezcla A<sup>0</sup> y A<sup>1,2</sup>
- Coste O(n log n)

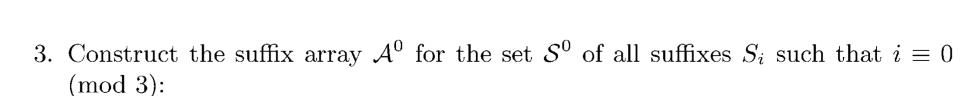
#### Algorithm 4.15 Skew algorithm for constructing a suffix array

Input: A string  $s = s_1 \dots s_n$  over the ordered alphabet  $\{1, \dots, n\}$ .

- 1. Initialization:
  - a) Define  $s_{n+1} := 0$ ,  $s_{n+2} := 0$ , and  $s_{n+3} := 0$ , and let s denote the string  $s_1 \dots s_{n+3}$ .
  - b) Let  $S_i := s_i \dots s_n$  be the *i*-th suffix of s for all  $0 \le i \le n+1$ .
  - c) Let  $k_i = \max\{k \leq n+1 \mid k \equiv i \pmod{3}\}$ , for  $i \in \{1, 2\}$ ; let  $l_i := |\{k \leq n+1 \mid k \equiv i \pmod{3}\}|$ , for  $i \in \{1, 2\}$ .
- 2. Construct the suffix array  $\mathcal{A}^{1,2}$  for the set  $\mathcal{S}^{1,2}$  of all suffixes  $S_i$  such that  $i \not\equiv 0$  (mod 3):
  - a) Let  $t_i := s[i, i+2]$  for all  $0 \le i \le n+1$  such that  $i \not\equiv 0 \pmod{3}$ .
  - b) Sort the triples  $t_i$ , for all  $i \leq \max\{k_1, k_2\}, i \not\equiv 0 \pmod{3}$ , using radix sort (Algorithm 4.14).
  - c) Assign lexicographical names  $t'_i \in \{1, \ldots, \lceil \frac{2}{3}(n+1) \rceil\}$  to the triples, i.e., define the  $t'_i$  such that  $t'_i = t'_j$  if  $t_i = t_j$ , and  $t'_i < t'_j$  if  $t_i \prec_{\text{lex}} t_j$ .
  - d) If all  $t'_i$  are distinct, construct  $\mathcal{A}^{1,2}$  directly from the order of the  $t_i$ ; else, recursively compute the suffix array  $\tilde{\mathcal{A}}$  for the string

$$\tilde{s} = \tilde{s}_1 \dots \tilde{s}_{l_1 + l_2} := t'_1 t'_4 t'_7 \dots t'_{k_1} \cdot t'_2 t'_5 t'_8 \dots t'_{k_2}$$

and construct  $\mathcal{A}^{1,2}$  from  $\tilde{\mathcal{A}}$  by substituting the indices of the  $t_i'$  for the indices of the  $\tilde{s}_j$ .



- a) Represent  $S_i$  by the pair  $(s_i, S_{i+1})$  for all  $1 \le i \le n$  such that  $i \equiv 0 \pmod{3}$ .
- b) Consider the order of  $\mathcal{S}^0$  as given by the order of the second component of its elements in  $\mathcal{A}^{1,2}$ , and sort  $\mathcal{S}^0$  by counting sort (Algorithm 4.13) with respect to the first components.
- 4. Merge the two suffix arrays  $\mathcal{A}^{1,2}$  and  $\mathcal{A}^{0}$  into a suffix array  $\mathcal{A}(s)$ .

Output: The constructed suffix array A(s).