Algorithmische Bioinformatik

Knuth-Morris-Pratt Algorithmus

„Natürliche“ Erweiterung des naiven Matching

Ulf Leser

Wissensmanagement in der Bioinformatik

Ziele

- Verständnis des Knuth-Morris-Pratt Algorithmus inklusive Korrektheitsbeweis
- Erkennen der Äquivalenz zu einem (bestimmten) Automaten
- Vorbereitung des Aho-Corasick Algorithmus als Erweiterung auf mehrere Pattern

Inhalt dieser Vorlesung

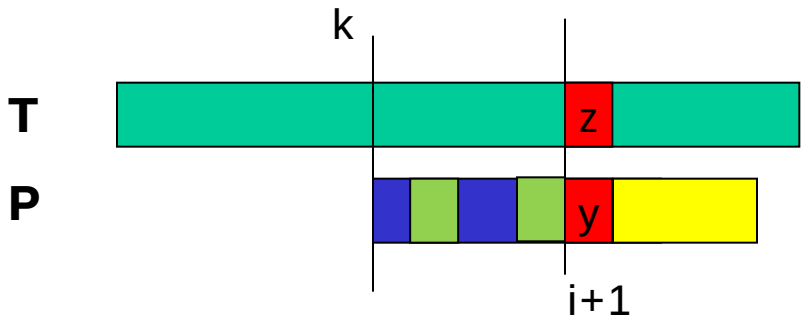
- Knuth-Morris-Pratt
- Korrektheit und Komplexität
- Patternmatching mit Automaten
- Vergleich mit anderen Algorithmen

Knuth Morris Prath

- Knuth, Donald E., James H. Morris, Jr, and Vaughan R. Pratt. "Fast pattern matching in strings." *SIAM journal on computing* 6.2 (1977): 323-350.
- Noch ein Klassiker
- Intuitive Erweiterung des naiven Algorithmus
  - Läuft auch von links nach rechts
  - Nutzt aber aus, wenn man beim Matchen lernt – durch Preprocessing
- Schöner Beweis der Korrektheit
- Erweiterung zum Matching mit mehrerer Pattern
  - Nächste Stunde: Aho-Corasick

Grundidee

- Sei P mit T an Startposition k aligniert
- Bei Mismatch an Position i+1 gilt: T[k..k+i-1] = P[1..i]



  - Kommt ein (langes) Suffix von P[.. i] vorher in P vor?
  - Wenn ja: Schiebe möglichst weit (äussere Schleife)
  - Und vergleiche dieses Suffix nicht nochmal (innere Schleife)

```
abcxabcgedsc
abcxabcde
      abcxabcde
```

Definitionen

- Definition
  - *Sei sp_i die Länge des längsten echten Suffix von P[1..i], das mit einem Präfix von P matched*
  - *Sei sp_i' die Länge des längsten echten Suffix von P[1..i], das mit einem Präfix von P matched und für das zusätzlich gilt: $P[i+1] \neq P[sp_i+1]$*
- Beispiel

```
P:      abcaeabcabd
sp_i:   00010123420
        abca
        abcaeab
        abcaeabc
        abcaeabca
```

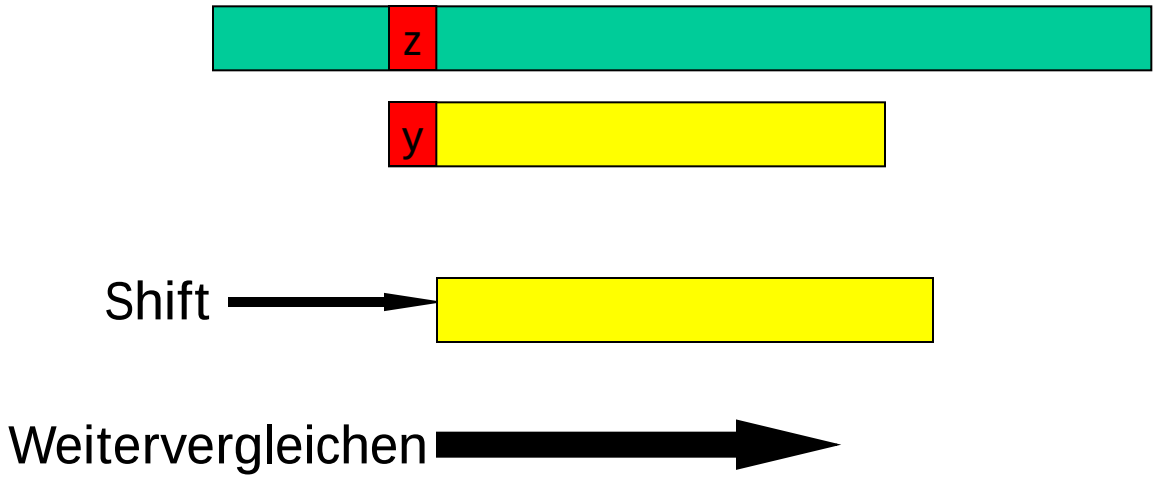
```
P:      abcaeabcabd
sp_i:   00010123420
sp_i':  00010000420

        abcaeabc
        abcaeabcab
```

KMP im Überblick

- Algorithmus
  - Preprocessing von P: Berechne sp_i und sp_i‘
  - Matching von links nach rechts
  - Bei Match – weiter nach rechts matchen
  - Bei Mismatch (an Position i+1 in P) oder komplettem Match
    - Schiebe P um … (Länge durch sp_i‘ und i bestimmt - gleich)
    - Weitervergleichen ab … (gleich)
- Zwei Gewinne gegenüber naivem Matching
  - Schiebt P oft um mehr als eine Position
  - Vergleiche starten meistens bei sp_i‘+1 (und nicht bei 1)

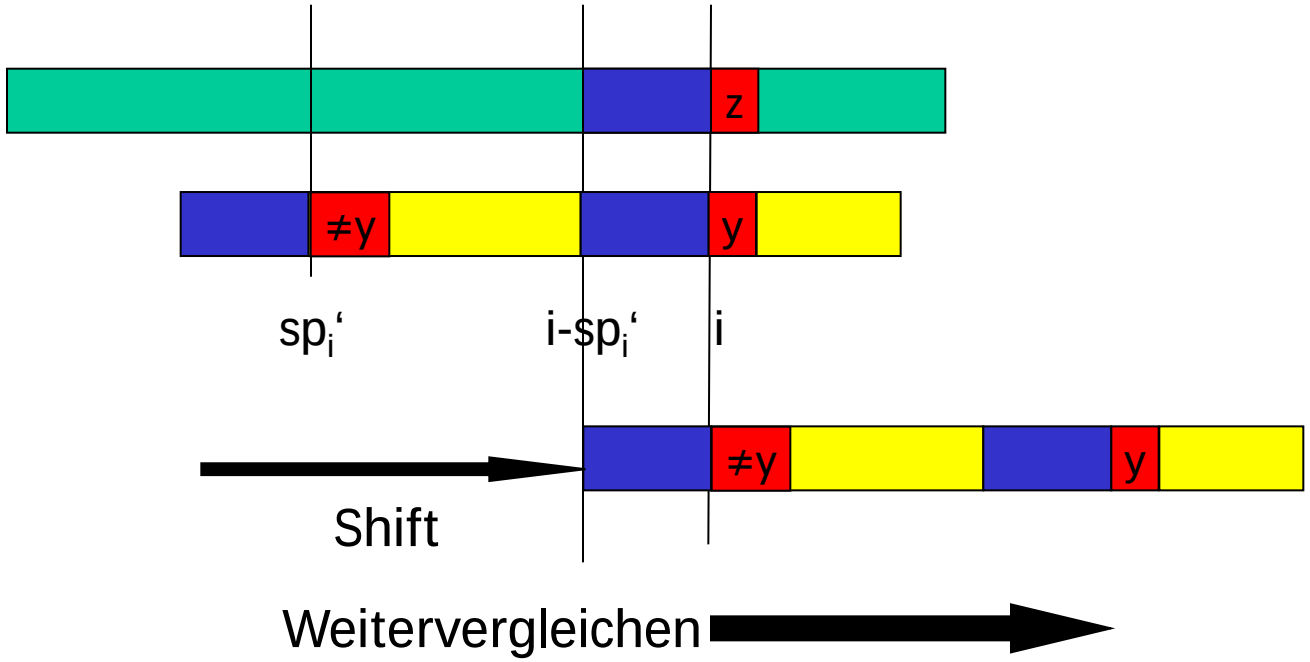
Shift Regel 1

- Wenn P[1] und T[k] sofort mismatchen
  - Schiebe P um ein Zeichen nach rechts
  - Vergleiche weiter ab P[1]



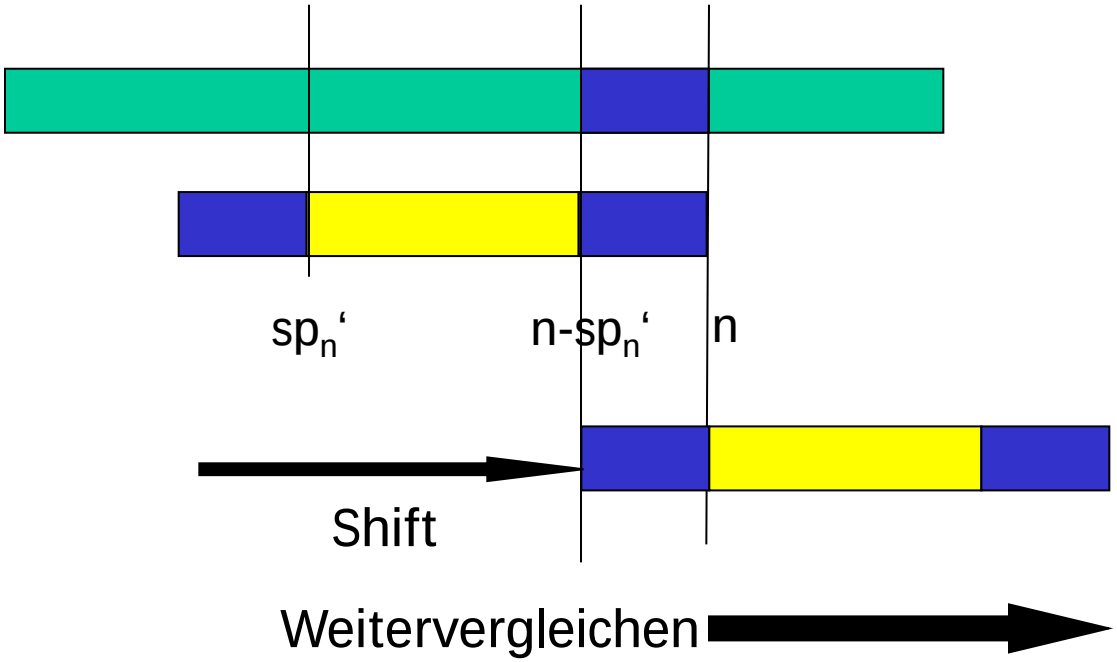
Shift Regel 2

- Wenn bei i+1 in P der erste Mismatch vorkommt
  - Schiebe P um $i\text{-}sp_i'$ Positionen nach rechts
  - Vergleiche weiter ab $P[sp_i'+1]$



Shift Regel 3

- Wenn ein kompletter Match gefunden wird
  - Schiebe P um n-sp_n‘ Positionen nach rechts
  - Vergleiche weiter ab P[sp_n‘+1]



Warum sp_i‘ (und nicht sp_i)?

- Sind beide korrekt?
  - Sei $sp_i \neq sp_i$‘ für ein i und bei i+1 tritt Mismatch auf
  - Dann ist $P[i+1] \neq T[k+i+1]$
  - Wegen $sp_i \neq sp_i$‘ gilt: $P[i+1] = P[sp_i+1]$
  - Der Vergleich $P[sp_i+1]$ mit $T[k+i+1]$ ist sicher ein Mismatch
- Beobachtung
  - Es gilt: sp_i‘ $\leq sp_i$
    - Präfixe, die sp_i genügen, sind mindestens solange wie Präfixe für sp_i‘
  - Man schiebt um i - sp_i‘
  - Also: sp_i‘ erlaubt längere Verschiebungen als sp_i

Inhalt dieser Vorlesung

- Knuth-Morris-Pratt
- Korrektheit und Komplexität
- Patternmatching mit Automaten
- Vergleich mit anderen Algorithmen

Korrektheit der Shift-Regel

- Was passiert bei Vorkommen des Präfix zwischen dem Präfix und dem Suffix vor dem Mismatch?
- Versuchen wir mal

...BZZZBCBCEBBZZEFFGAA
BZZZBCBDD

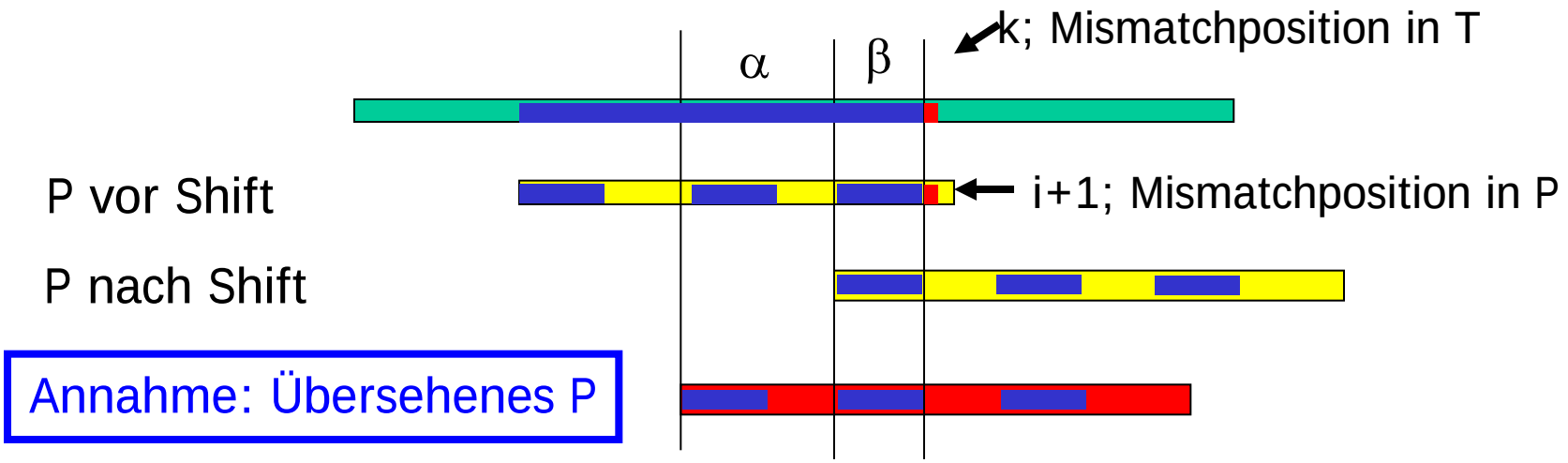
  - Zwei Substrings (B) matchen mit dem Suffix vor dem Mismatch und werden mit unterschiedlichen Zeichen (Z bzw. C) fortgesetzt
  - Mittleres B erzeugt (hier) keinen Match

...BZZZBCBCEBBZZEFFGAA
BZZZBCBDD

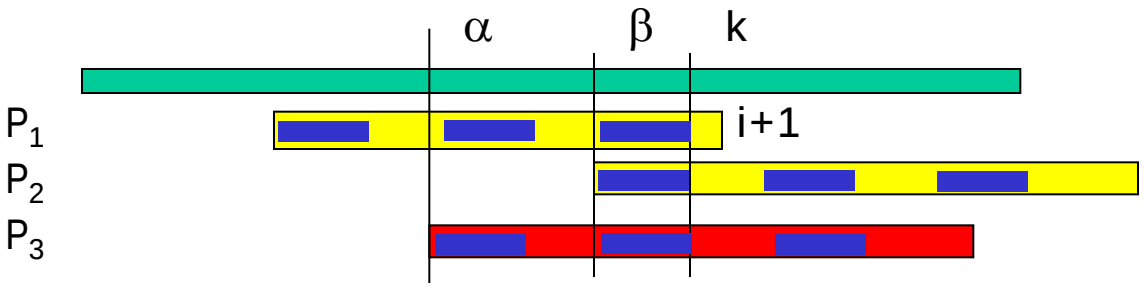
- ... aber kann das nicht auch mal klappen?

Beweis

- Theorem
  - *Die Shift-Regel verschiebt nie soweit, dass ein Vorkommen von P in T übersehen wird*
- Beweis
  - Wenn das anders wäre, hätten wir ...

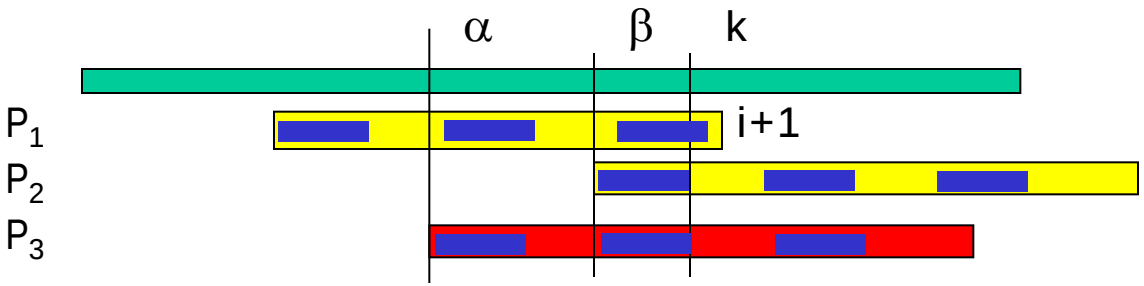


Beweis 2



- Wir zeigen Widerspruch zur Definition von sp_i‘
  - β ist Präfix von P; $|\beta| = sp_i$‘
  - P_1 und P_3 matchen mit T bis k-1; also ist
    - $\alpha\beta$ Suffix von P[1..i] (in P_1)
    - $\alpha\beta$ Präfix von P (in P_3)
  - Das Zeichen nach $\alpha\beta$ in P_1 ist ein Mismatch: $P[i+1] \neq T[k]$
    - Weil P_3 matched, muss aber $P[|\alpha\beta|+1]=T[k]$ sein
    - Also müsste gelten: $P[i+1] \neq P[|\alpha\beta|+1]$

Beweis 3



- Weiterhin muss gelten $|\alpha|>0$
  - sonst ist $P_2=P_3$ und wir haben nichts übersehen
- Damit
  - $\alpha\beta$ ist Präfix von P
  - $\alpha\beta$ ist Suffix von P[1..i]
  - $P[i+1] \neq P[|\alpha\beta|+1]$
  - $|\alpha\beta| > |\beta| = sp_i'$
- $\alpha\beta$ erfüllt alle Voraussetzungen für sp_i', ist aber länger
- Widerspruch zur Definition von sp_i'

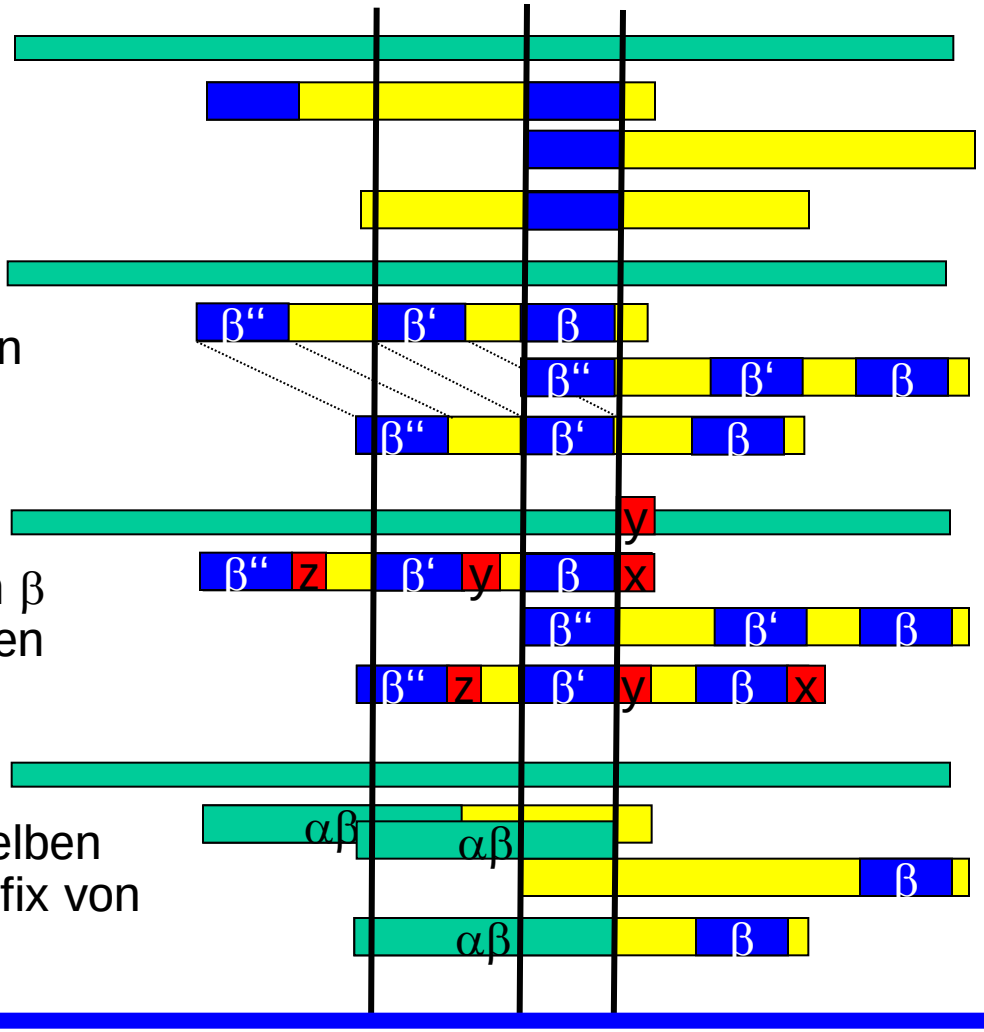
Mehrere β

Ausgangssituation

Sei β‘ das mittlere Vorkommen von β zwischen β und β“

Weil P3 matcht, müssen nach β und β‘ unterschiedliche Zeichen kommen (x≠y)

P1 und P3 matchen tw. denselben Teilstring in T; αβ ist also Präfix von P und Suffix von P[1...i]



Wenn es also ein β‘ gibt, das zu einem Match führen würde, dann muss es wegen der Überlappung in T ein längeres Präfix/Suffix geben

Komplexität von KMP

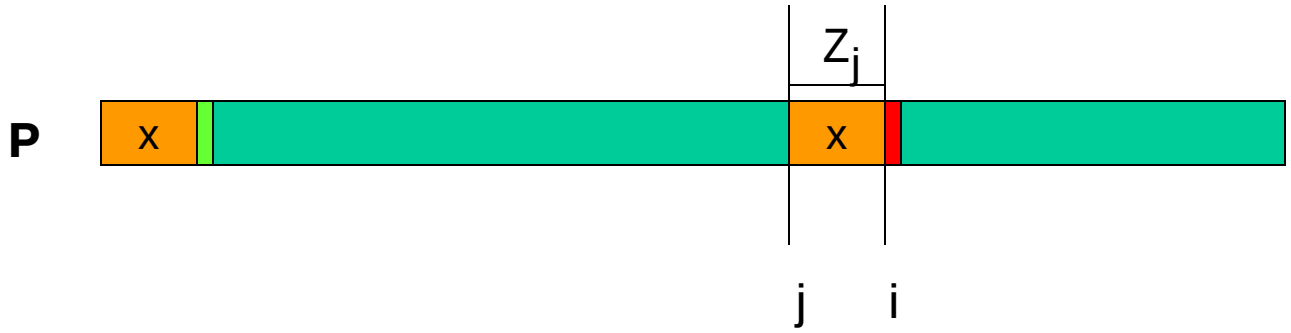
- Theorem
  - *Die Suchphase des KMP benötigt höchstens 2m Zeichenvergleiche, ist als O(m)*
- Beweis
  - Mismatches
    - Pro Phase gibt es maximal einen Mismatch
    - Es gibt m Phasen, also maximal m Mismatches
  - Matches
    - Jedes Compare beginnt in T entweder
      - ... am letzten Zeichen des letzten Vergleichs (bei Mismatch), oder
      - ... am Zeichen rechts vom letzten Zeichen des letzten Vergleichs (bei vollständigem Match)
    - Damit wird kein Zeichen mehr als einmal positiv verglichen

Preprocessing

- Gesucht: sp_i‘ Werte
- Wir führen das Preprocessing auf Z-Boxen zurück
- Erinnerung (Z-Box)
  - *Sei i>1. Dann ist Z_i die Länge des größten Substrings x in P mit*
    - *x=P[i..i+|x|-1]* *(x startet an Position i in P)*
    - *P[i..i+|x|-1] = P[1..|x|-1]* *(x ist auch Präfix von P)*
  - *x heißt Z-Box von P an Position i mit Länge $Z_i(P)$*

Verwendung der Z-Boxen

- Für alle i suchen wir echte Suffixe von P[1..i], die auch Präfixe von P sind
  - ... und sich nicht verlängern lassen (sp_i‘)
  - Also für jede Position die längste Z-Box, die an ihr endet



Formal

- Theorem
  - *Für $i>1$ sei $j>1$ die am weitesten links stehende Position in P für die gilt: $i=j+Z_j-1$*
  - *Wenn j existiert, dann ist $sp_i'=Z_j=i-j+1$*
  - *Sonst $sp_i'=0$*
- Beweis
  - Wenn j existiert, ist Z_j ein längstes Suffix von P[1..i], das auch Präfix von P ist
    - Sonst wären Z-Boxen falsch berechnet
  - Wenn j nicht existiert, matched kein Suffix von P[1..i] mit einem Präfix von P
  - qed.

Berechnung

```
for i = 1 to n                  // Initialisierung
       sp_i‘ := 0;
end for;
compute Z-Boxes on P;
for j = n downto 2              // Spätere (weiter links) Treffer
       i := j + Z_j - 1;        // überschreiben frühere
       sp_i‘ := Z_j;
end for;
```

- Damit
  - Berechnung Z-Boxen ist O(n)
  - Berechnung sp_i‘ ist O(n)
  - KMP Shift/Compare ist O(m)
- KMP ist O(m+n)

Shift-Regel:
Mismatch bei i+1
Schiebe um i-sp_i‘
Vergleiche ab sp_i‘+1

Beispiel

Pos:	1	2	3	4	5	6	7	8
P:	G	C	A	G	C	T	A	G
sp_i‘:	0	0	0	0	2	0	0	1

Schiebe um 3-0=3
Vergleiche ab 0+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
G C A G C T A G
```

Schiebe um 1
Vergleiche ab 1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
      G C A G C T A G
```

Schiebe um 1
Vergleiche ab 1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
        G C A G C T A G
```

Schiebe um 4-0=4
Vergleiche ab 0+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
            G C A G C T A G
```

Schiebe um 5-2=3
Vergleiche ab 2+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
                G C A G C T A G
```

Shift-Regel:
Mismatch bei i+1
Schiebe um i-sp_i‘
Vergleiche ab sp_i‘+1

Beispiel 2

Pos:	1	2	3	4	5	6	7	8
P:	G	C	A	G	C	T	A	G
sp_i‘:	0	0	0	0	2	0	0	1

Schiebe um 5-2=3
Vergleiche ab 2+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
            G C A G C T A G
```

Schiebe um 2-0=2
Vergleiche ab 0+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
                        G C A G C T A G
```

Schiebe um 8-1=7
Vergleiche ab 1+1

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
                          G C A G C T A G
```

```
G C A T C G C A G G C A G C G C A G C T A G G T
                                        G C ...
```

Kompletter KMP Algorithmus

```
compute sp_i';
h := 1;                 // Next comparison in T
i := 1;                 // Next comparison in P
while h+(n-i)<=m do
        while P[i]=T[h] and i<=n do
                i++;
                h++;
        end while;
        if i=n+1 then           // Match
                print h-n;
        else                    // Mismatch at h/i
                if i=1 then
                        i++;    // First comp. fails – move 1 pos
                        h++;
        end if;
        // Comparison in T will continue at position h
        // Comparison in P will continue after shift
        i:=sp_i-1' +1;          // i is mismatch pos. in P
end while;
```

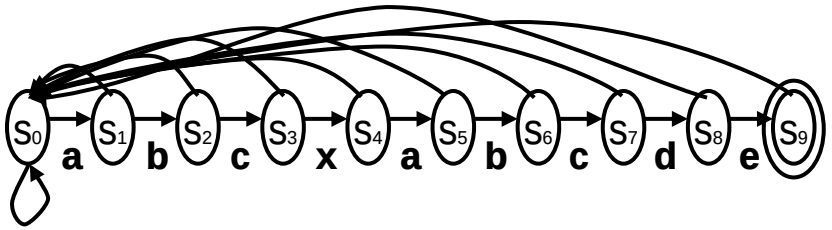
Inhalt dieser Vorlesung

- Knuth-Morris-Pratt
- Korrektheit und Komplexität
- Patternmatching mit Automaten
- Vergleich mit anderen Algorithmen

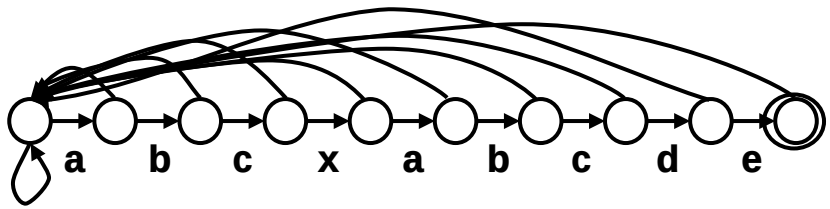
Pattern Matching mit Automaten

- Naiver Algorithmus als DEA
  - Konstruiere einen Automaten A aus dem Pattern
  - A hat n+1 Zustände, nummeriert mit s_i, $0 \leq i \leq n$
  - Jedes s_i mit $i<n$ hat zwei ausgehende Kanten
    - Eine beschriftet mit P[i+1] und führt zu s_{i+1}
    - Eine für alle anderen Symbole und führt zu s_0
    - (Solche Kanten gibt es eigentlich nicht – verkürzte Darstellung)
  - s_n ist einziger akzeptierender Zustand, s_0 ist Startzustand

P = abcxabcde



Matching



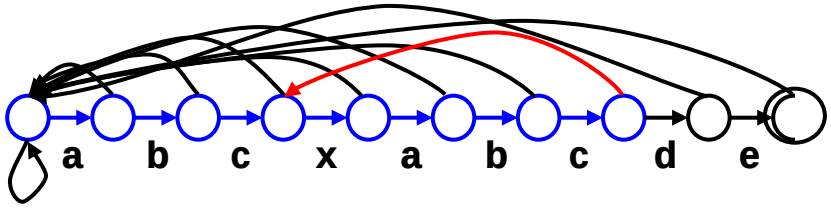
abcxabcgedsc

- **j:=1; s:=Startzustand**
- **while j≤m-n \\ Äußere Schleife**
  - **i:=0;**
  - **while true \\ Innere Schleife**
    - **Gehe von s zu s‘ gemäß T[j+i];**
    - **if s‘=Endzustand: Match;**
    - **if s‘=Start-/ Endzustand: Break;**
    - **i++; s := s‘;**
  - **end while;**
  - **j++;**
- **end while;**

Komplexität:
O(m*n)

Beobachtung

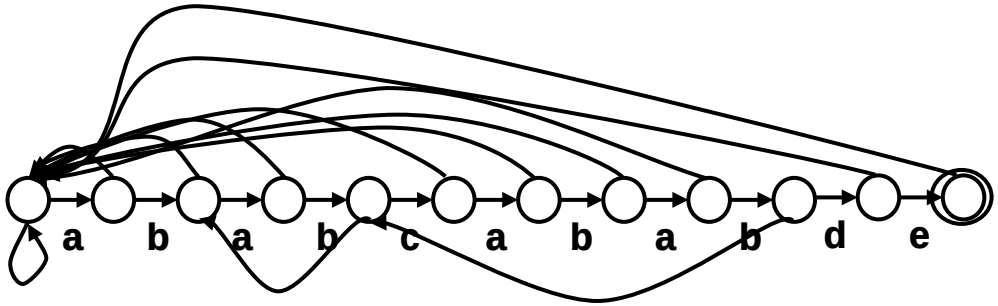
- Statt zum Startzustand zu springen können wir die sp_i‘ Werte ausnutzen
  - Weiter schieben: Bei Mismatch an i+1 springe zum Zustand sp_i‘
  - Niemals doppelt positiv matchen: Nur eine Schleife j




```
j:=1; s:=Startzustand
while j ≤ m-n
    If s hat_kante mit T[j] oder
      s=Startzustand
        j++;
    Gehe von s zu s‘ gemäß T[j];
    if s‘=Endzustand: Match an j-n;
    s := s‘;
end while;
```

Komplexeres Beispiel

P = ababcababde

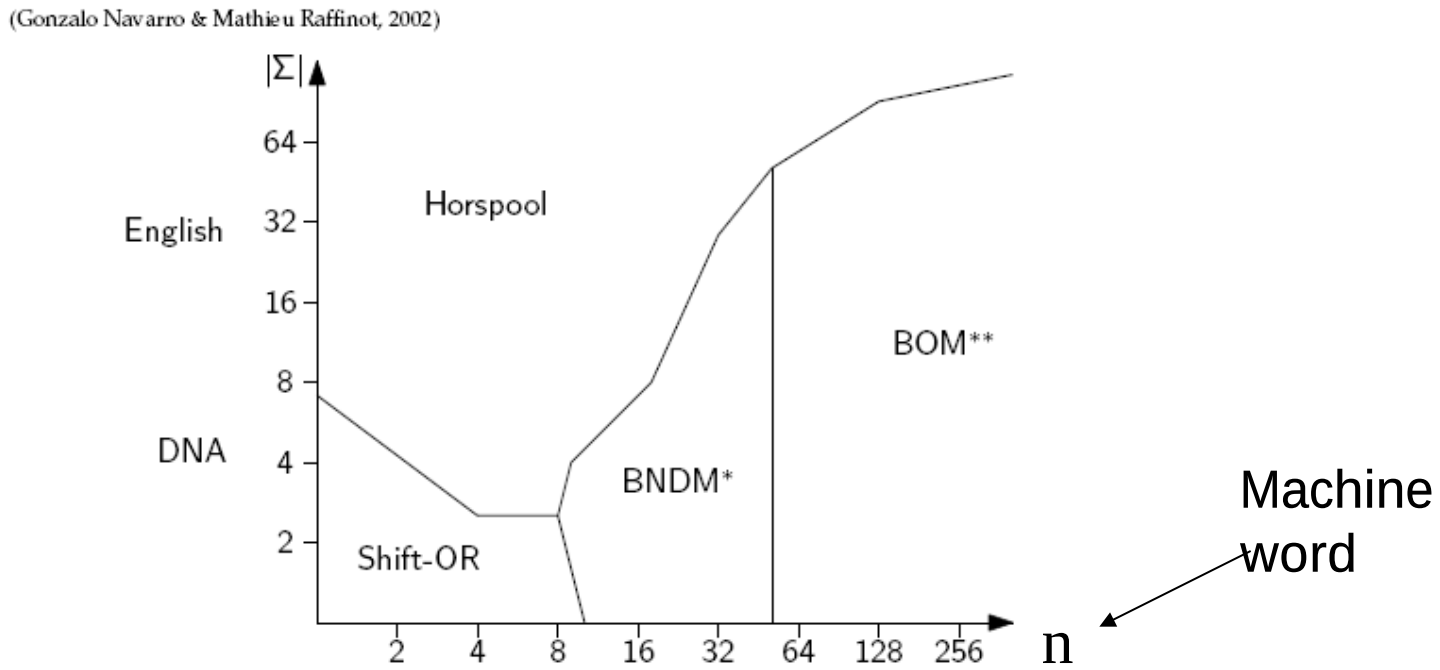


- Übergänge, die durch einen Mismatch beschritten werden, nennt man auch failure links
- Beachte: In einem Schritt können mehrere failure Links hintereinander abgelaufen werden

Vergleich

	Z-Box	Boyer-Moore (Apostolico-Giancarlo)	Knuth-Morris-Pratt
Preprocessing **Suche** **Gesamt**	O(m+n) O(m) O(m+n)	O(n) O(m) O(m+n)	O(n) O(m) O(m+n)
Größe Alphabet	• Praktisch unabhängig von $\|\Sigma\|$	• Je größer, desto besser – EBCR führt zu großen Sprüngen • EBCR greift selten bei kleinen Alphabeten	• Praktisch unabhängig von $\|\Sigma\|$
Bemerkung	• AC und WC Komplexität gleich	• Best Case ist O(m/n)	• AC und WC Komplexität gleich • Erweiterbar auf mehrere Pattern

Empirical Comparison [NR02]



- Shift-OR: Bit-wise parallelization (only small alphabets)
- BNDM: Backward nondeterministic DAWG Matching (automata-based)
- BOM: Backward Oracle Matching (automata-based)

Selbsttest

- Beweisen Sie die Korrektheit des KMP
- Begründen Sie, warum kein Online-Algorithmus weniger als ~m/n Vergleiche benötigen kann
  - Und wie könnte man trotzdem schneller werden?
- Warum darf die GSR nicht wie der KMP zum linksten Vorkommen des „good suffix“ schieben?
- Wie würde dieser Automat aussehen, wenn Sie die sp_i statt den sp_i‘ Werten verwenden?