Algorithmische Bioinformatik

Boyer-Moore Algorithmus

Ulf Leser

Wissensmanagement in der Bioinformatik

Inhalt dieser Vorlesung

- Boyer-Moore Algorithmus
  - Bad Character und Good Suffix Rule
  - Preprocessing
  - Beispiel
- Erweiterung zum linearen Worst-Case
- Varianten

Boyer-Moore Algorithmus

- R.S. Boyer /J.S. Moore. „A Fast String Searching Algorithm“, Communications of the ACM, 1977
- Grundidee
  - Alignierung der Strings wie in naivem Algorithmus
    - Äußere Schleife
    - BM: P springt beim Schieben weiter als 1, wenn möglich
  - Vergleich von P mit Substring in T
    - Innere Schleife – im Original-BM unverändert nur umgedreht
    - Linearer Worst-Case: Nicht immer am Anfang von P starten
- Wir beginnen mit der Original-Variante
  - Die ist O(m*n) im Worst Case

Gerüst des Algorithmus

- Anordnung der Strings P und T
  - Erstes Zeichen von P „unter" dem ersten von T
- Matche P und sein Gegenüber in T von rechts nach links
  - Also T[n] mit P[n], dann T[n-1] mit P[n-1], …
  - Bei Mismatch oder Match für ganz P
    - Verschiebe P um k Zeichen nach rechts
    - Wieder von rechts nach links matchen
- Wie wird „k" berechnet?
  - Bad Character Rule
  - Good Suffix Rule

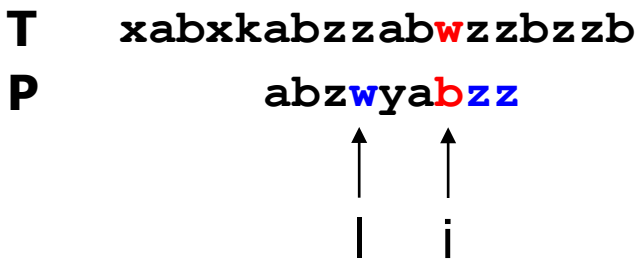
Bad Character Rule

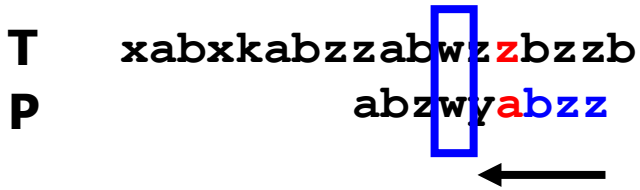
- Beobachtung
  - Es sei gerade P[n] mit T[j] aligniert; j≥n
  - Sei der erste Mismatch an Position i von P
    - Also nach n-i Matches
  - Sei x das Zeichen an Position j-n+i in T
    - Das den Mismatch ausgelöst hat
  - Welches sind Kandidaten für einen Match mit x in P?
    - Fall 1: x kommt in P nicht vor: Schiebe P um i Zeichen nach rechts
      - Wir springen bis an die Position nach dem x in T

Wie weit können wir jetzt schieben ?

Bad Character Rule 2

- Beobachtung
  - Es sei gerade P[n] mit T[j] aligniert; j≥n
  - Sei der erste Mismatch an Position i von P
  - Sei x das Zeichen an Position j-n+i in T
  - Sei l das am weitesten rechts liegende Vorkommen von x in P
  - Welches sind Kandidaten für einen Match mit x in P?
    - Fall 1: x kommt in P nicht vor: Schiebe P um i Zeichen nach rechts
    - Fall 2: l<i. Also kommt x in P nur vor i vor – verschiebe P um i-l Zeichen

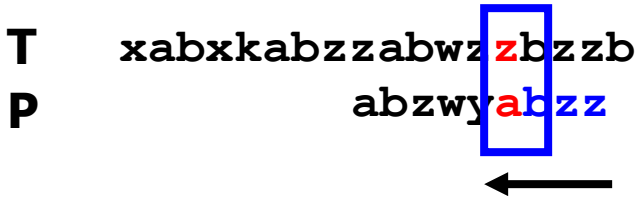




Wie weit können wir jetzt schieben ?

Bad Character Rule 3

- Beobachtung
  - Es sei gerade P[n] mit T[j] aligniert; j≥n
  - Sei der erste Mismatch an Position i von P
  - Sei x das Zeichen an Position j-n+i in T
  - Sei l das am weitesten rechts liegende Vorkommen von x in P
  - Welches sind Kandidaten für einen Match mit x in P?
    - Fall 1: x kommt in P nicht vor: Schiebe P um i Zeichen nach rechts
    - Fall 2: l<i. x kommt in P nur vor i vor – verschiebe P um i-l Zeichen
    - Fall 3: l>i. Das nützt uns (erst mal) nichts



- „z" gibt es auch rechts von i
- Was kann man noch machen?

Zusammengenommen

- Definition
  Gegeben P. Dann sei R(x) für alle $x \in \Sigma$ definiert als:
  - *R(x) = 0, wenn $x \notin P$*
  - *Sonst: R(x) = „Position des am weitesten rechts liegenden Auftretens von x in P"*
- Platz: O(|Σ|); Berechnung: O(n) (wie?)
- Damit
  - Sei i die Position des ersten Mismatch in P
  - Sei x das Zeichen in T an der entsprechenden Position
  - Verschiebe P um max(1, i - R(x))
- Problem: Bei kleinem Alphabet (DNA) wird es meistens Auftreten von x rechts von i geben

Extended Bad Character Rule

- Verschiebe zum rechtesten x in P, das links von i liegt

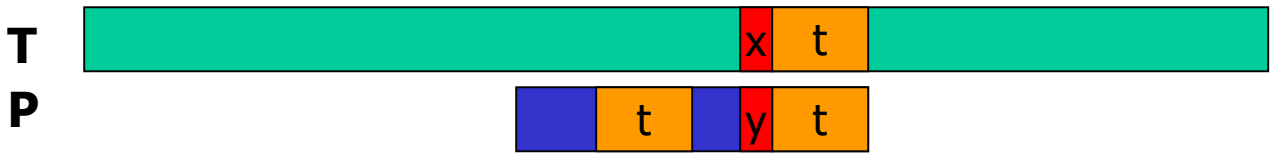
- Benötigt relative Positionen
  - Für jede Position i und jedes Zeichen x: Merke Position des am weitesten rechts aber links von i liegenden Vorkommen von x
  - Array [n,|Σ|] => konstanter Lookup, aber Platzverbrauch O(n*|Σ|)
  - Listen für jedes Zeichen mit Positionen; linearer Platz O(n), aber was kostet der Lookup?

Zusammenfassung (E)BCR

- Leicht zu berechnen, sehr gut bei größeren Alphabeten
  - Natürliche Sprache, chinesisch, …
- Keine Reduktion der Worst-Case Komplexität im Vergleich zu naivem Algorithmus

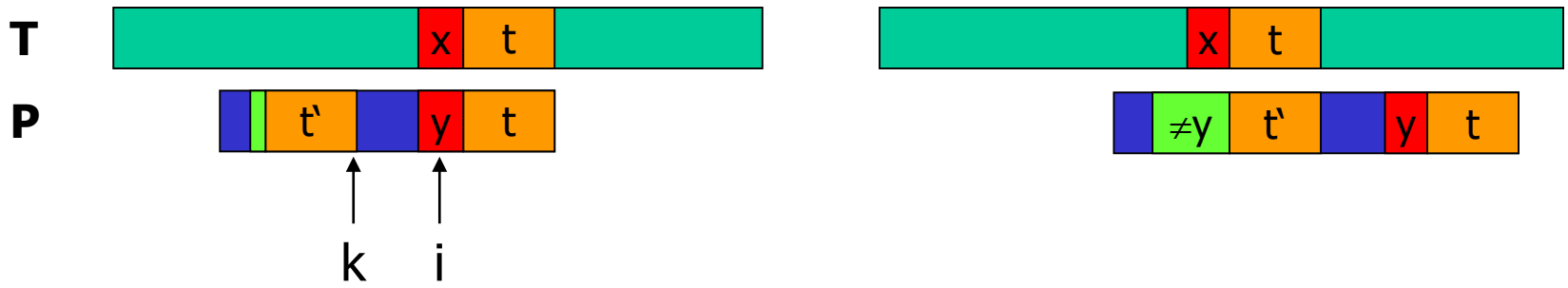
Good-Suffix Rule

- Bad Character Rule sucht nach dem ersten Mismatch
- Bis dahin haben wir aber schon ein (eventuell recht langes) matchendes Suffix von P gefunden
- Wenn wir nach rechts schieben, muss dieses Suffix noch mal (in P) vorkommen, um einen Match mit dem Gegenstück in T zu haben
- Preprocessing: Vorkommen von Suffixen von P in P



Fall 1

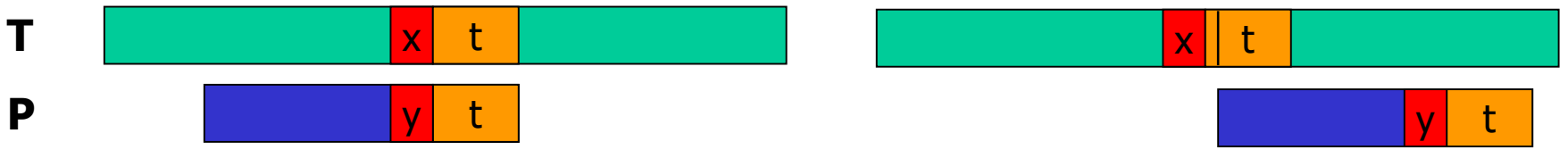
- Sei i des Position in P des ersten Mismatches (von rechts)
- Sei k das rechte Ende des am weitesten rechts liegenden Vorkommen von t in P mit k<n und P[k-|t|] ≠ P[n-|t|] (‚y‘)
  - Existiert kein solches Vorkommen von t in P, dann sei k=0
- Dann
  - Wenn k≠0: Verschiebe P um n-k



- Warum fordert man nicht P[k-|t|]=‚x‘ ?

Fall 2

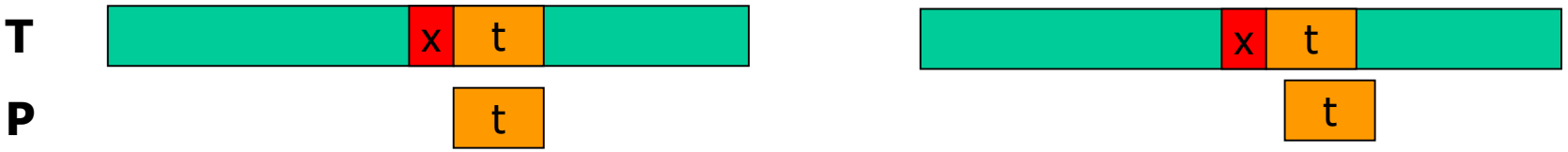
- Dann
  - Wenn k≠0: Verschiebe P um n-k
  - Wenn k=0 und P≠t: Verschiebe P um n-|t|+1



- Man kann unter Umständen weiter verschieben
  - Was müssten wir dazu wissen?

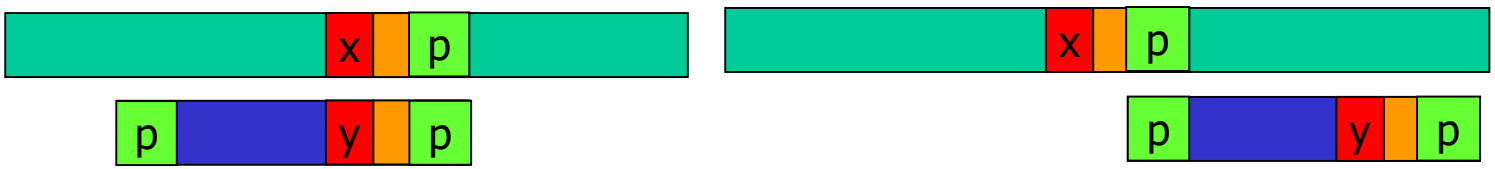
Fall 3

- Dann
  - Wenn k≠0: Verschiebe P um n-k
  - Wenn k=0 und P≠t: Verschiebe P um n-|t|+1
  - Wenn k=0 und P=t: Verschiebe P um 1



Hinweis

- Was heißt „... unter Umständen weiter...“?
  - Betrachte das längste Präfix von P, das auch Suffix von P ist (p)
  - Muss kürzer als t sein
  - Ist im voraus berechenbar



- Details: Siehe Gusfield, l'(i)-Werte

Beispiel

- Das Worst-case Beispiel der BCR läuft jetzt (mit dem „unter Umständen“ Trick) in linearer Zeit

Komplexität

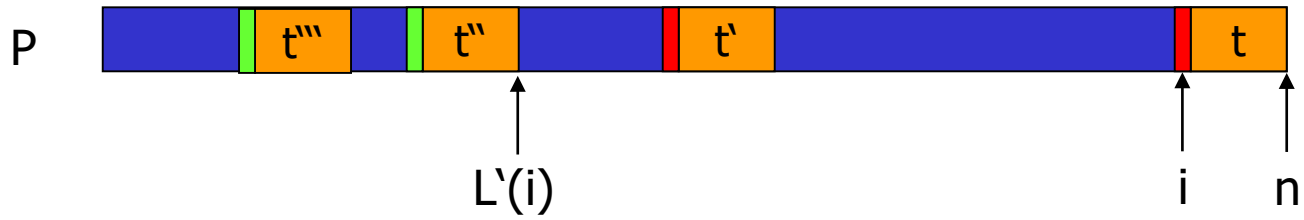
- Aber: Worst Case ist weiterhin O(m*n)
- Aber: Man erwartet nur O(m/c) Zeichenvergleiche
  - c hängt ab von $|\Sigma|$, Häufigkeitsverteilung von Zeichen, etc.
  - P wird oft um viele Zeichen auf einmal verschoben
  - Submatches (t) sind meistens kurz – kurze innere Schleifen
  - Gerade für natürliche Sprache ist BM sehr schnell
    - Wegen der relativ grossen Alphabete

Inhalt dieser Vorlesung

- Boyer-Moore Algorithmus
  - Bad Character und Good Suffix Rule
  - Preprocessing für GSR
  - Beispiel
- Erweiterung zum linearen Worst-Case
- Weitere Algorithmen

Preprocessing

- Woher wissen wir, wo und ob t in P noch vorkommt?
- Gesucht: Zu jedem Suffix t von P den am weitesten rechts liegenden Endpunkt (L‘(i)) eines weiteren Vorkommens von t in P
- Definition
  Sei *L‘(i) der größte Wert für den gilt:*
  - *Bedingung 1:* $P[L'(i)-|t|+1 .. L'(i)] = P[i+1..n]$ *(suffix)*
  - *Bedingung 2:* $L'(i) < n$ *(good suffix)*
  - *Bedingung 3:* $P[L'(i)-|t|] \neq P[i]$ *(strong good suffix)*
  - *L‘(i) = 0, falls kein solcher Teilstring existiert*



Anders gesagt

- Gesucht: Zu jedem Suffix von P suchen wir den nächsten (von rechts nach links) identischen Substring von P, den man nicht weiter nach links verlängern kann
- Erinnerung Z-Boxen: „… zu jedem Präfix von P alle identischen Substrings von P (von links nach rechts), die man nicht weiter verlängern kann …“
- Das GSR-Preprocessing ist also (fast) eine „invertierte“ Z-Box Berechnung
  - Unterschied: Es kann viele Präfix-Substring Paare geben /Z-Boxen gleicher Länge), wir suchen aber nur eines davon

Zwischenschritt

- Definition
  Sei *N(j) die Länge des längsten Suffix von P[1..j], das auch Suffix von P ist*
- Beispiel

```
      dcabcabdabdab
N(j)=0002002005000
```

- j ist also potentiell das gesuchte rechte Ende eines t
- Berechnung: Z-Boxen auf umgedrehtem P (=P^r)

Ableitung von L‘(i) aus N(j)

- N(j) geben die Länge von längsten Suffixen an, die links von j in P vorkommen
- L‘(i) sucht das am weitesten rechts liegende Auftreten von Suffixen der Länge n-i
  - i gibt die Länge des Suffixes vor, nach dem wir suchen
  - Suffix darf sich nicht verlängern lassen, sonst hätten wir bei Schieben von P wieder denselben Mismatch
- Damit ist L‘(i) der größte Wert j für den gilt: N(j)=n-i+1
  - Alle Positionen mit N(j)=n-i+1 stehen für ein (nicht verlängerbares) Suffix der gewünschten Länge
  - Davon interessiert uns das am weitesten rechts liegende
  - Und das entspricht dem größten j

Beispiel

```
      1234567890123
      dcabcabdabdab
N(j)=0002002005000
```

- Suchen wir L‘(i=12)
  - Also das Suffix „ab“
  - Zeichen vor diesem „ab“ darf nicht „d“ sein
  - Das sind alle Positionen j mit N(j)=2=n-i+2
    - Denn dort liegt ein längstes Suffix der Länge 2
  - Davon das „rechteste“ ist unser Treffer
  - Also: L‘(12) = 7

Zusammen: Preprocessing

- Gegeben: P
  - Berechne N-Werte durch Z-Box auf P^r
  - Berechne L'-Werte durch

```
for i=1 to n
       L'(i):= 0;
for j=1 to n-1
       i := n-N(j)+1;
       if (i≤n) then L'(i) := j;
end for;
```

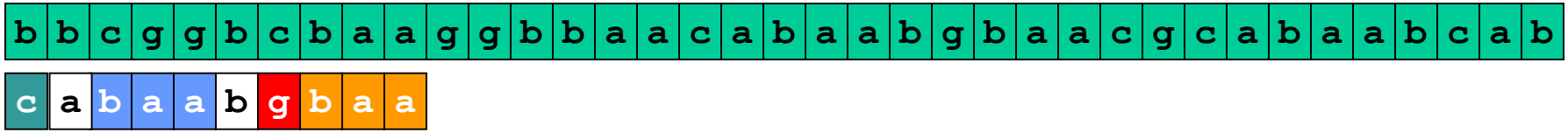
N(j)=n-i+1

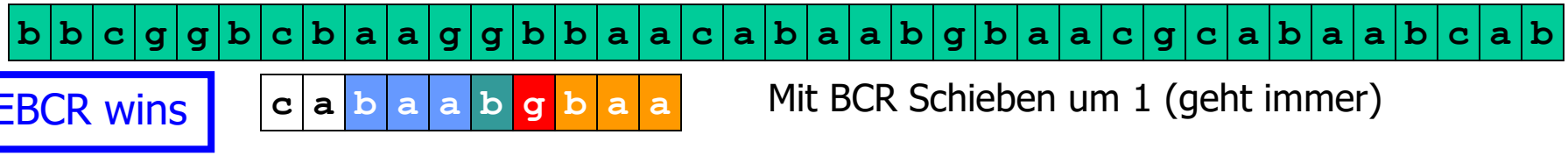
- Komplexität: O(n)
  - Z-Box ist O(n)
  - L'-Werte ist O(n)

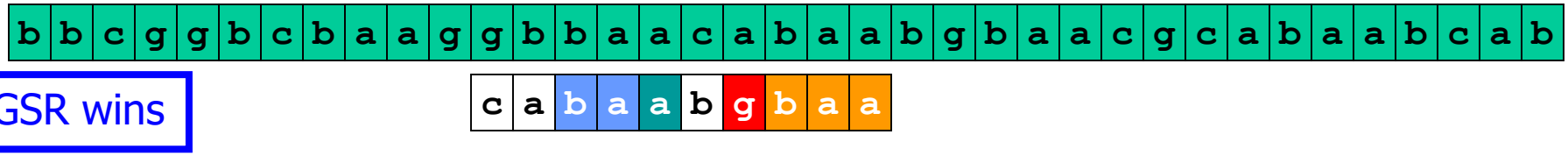
Boyer-Moore

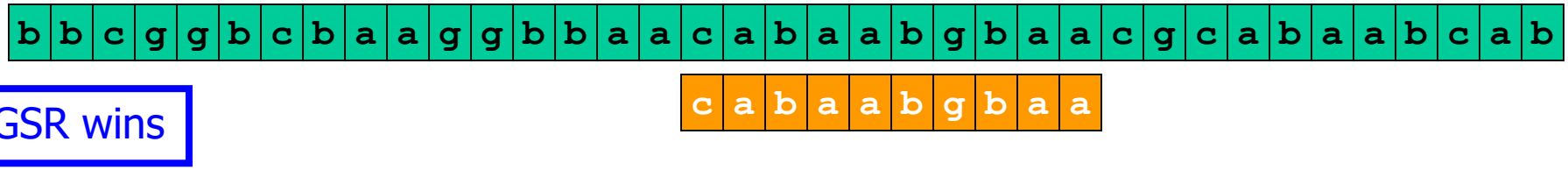
```
compute L'(i);
compute R(x) for each x∈Σ;                          // Simple BCR
k := n;                                             // Runs thru T
while (k<=m) do
        align P with T with right end k;
        match P and T from right to left until
                mismatch:       Compute shift s1 using BCR and R(x);
                                Compute shift s2 using GSR and L'(i);
                                k := k+ max(s1, s2);
                P matched:      print k;
                                k := k + 1;             // Could be impr.
end while;
```

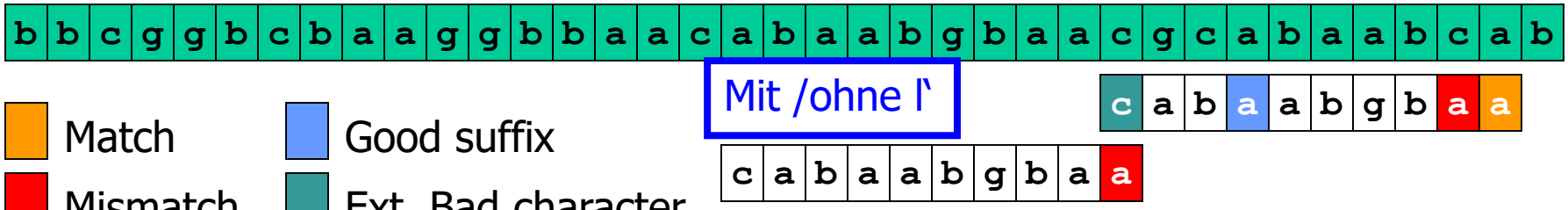
Beispiel mit EBCR











Inhalt dieser Vorlesung

- Boyer-Moore Algorithmus
  - Bad Character und Good Suffix Rule
  - Preprocessing
  - Beispiel
- Erweiterung zum linearen Worst-Case
- Varianten

BM mit linearem Worst-Case

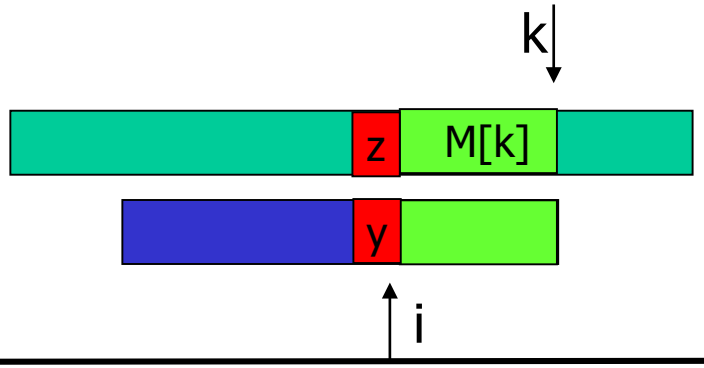
- Apostolico, Giancarlo (1986). "The Boyer-Moore-Galil string searching strategies revisited" *SIAM Journal on Computing*
- Stellt sicher, dass jedes Zeichen in T maximal einen Match erzeugt
- Das reicht zum linearen Worst Case (Beweis analog Z-Box)
  - Nach jedem Mismatch schieben wir um mindestens 1
  - Also gibt es insgesamt maximal m Mismatches
  - Außerdem maximal m Matches (siehe oben)
  - Also ist der Algorithmus O(m)

Vorarbeiten

- Erinnerung: N(j) ist die Länge des längsten Suffix von P[1..j], das auch Suffix von P ist
- Boyer-Moore Grundgerüst: Shift/compare Phasen
  - Eine Phase besteht aus Verschieben von P (shift) und Matchen von rechts nach links bis Mismatch oder vollständiger Match (compare)
    - Wir werden nur beim Matchen sparen – shifts sind unverändert
  - Dann Shift berechnen und nächste Phase starten, bis Ende von T erreicht

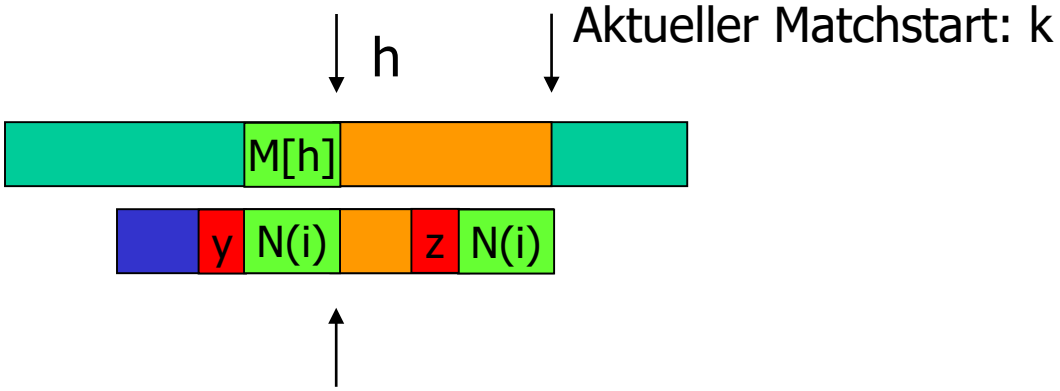
M: Suffixe matchen Suffixe

- Sei M ein Array int[m], initialisiert mit -1
  - Wir beginnen eine Phase
  - Sei k das rechte Ende von P in T
  - Wir matchen nach links
  - Sei i die Position des Mismatches in P
  - Dann matched das Suffix von P der Länge n-i mit einem Suffix des Substrings T[..k]
    - P[i+1..]=T[k-n+i..k]
  - Die Länge merken wir uns in M[k]



M: Suffixe matchen Suffixe

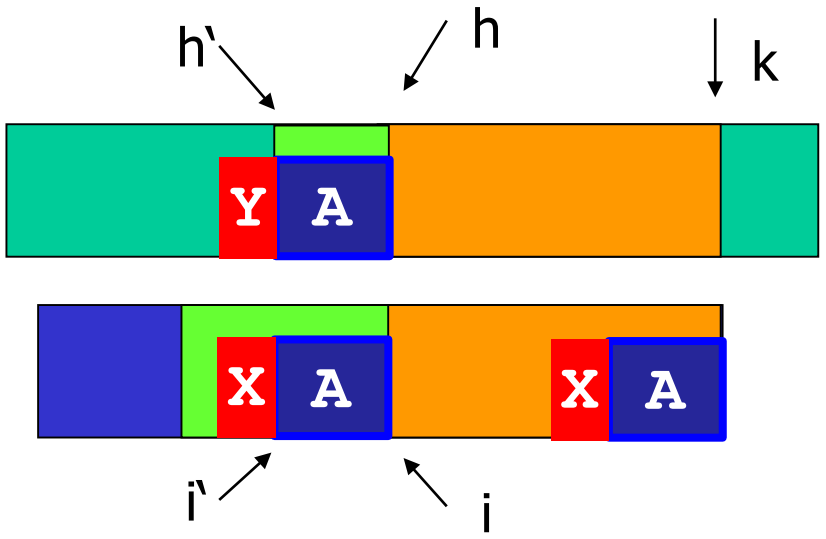
- M wird wie folgt benutzt
  - Später vergleichen wir M[h] und N(i)
    - N(i) sind Suffixe von P in P
    - M[h] sind Suffixe von P in T
    - Da wir immer nach links vergleichen, aber nach rechts schieben, kennen wir in einer Phase an Position k schon viele M[i] Werte mit i<k



Details – 1

- Wir beginnen eine Phase an Position k in T
  - Wir schieben wie beim „normalen" Boyer-Moore
  - Wir sparen im Compare-Schritt (innere Schleife optimiert)
- Wir laufen von rechts nach links (h durch T und i durch P)
- Beachte: Nicht alle M[k] werden berechnet, also kann es sein dass M[k']=-1 mit k'<k
- Fall 1: Wenn M[h]=-1 oder M[h]=N(i)=0, dann
  - T[h]=P[i] und i=1: Das ist ein vollständiger Match; beende Phase
  - T[h]=P[i] und i>1: Weiter nach links matchen (h--; i--)
  - T[h]≠P[i]: Kein Match; setze M[k]=k-h; beende Phase

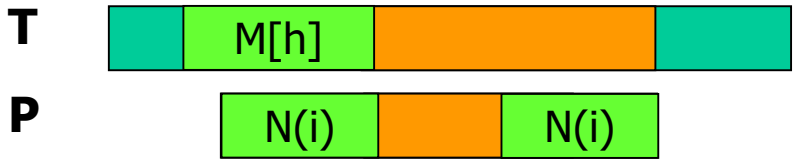
Details – 2



- Fall 2: Wenn M[h] < N(i)
  - Sei h'=k-M[h]+1, i'=i-M[h]+1
  - A = T[h'..h] = P[i'..i]
    - Wegen M[h] bzw. N(i)
    - A ist auch Suffix von P
  - Links von h' bzw. i' kommt
    - Von i': X = P[i'-1]=P[n-M[h]] wegen N(i)>M[h]
    - Von h': Y=T[h'-1] != P[n-M[h]]=X weil M[k] längstes Suffix bis h ist
  - Also sind die nächsten M[h] Vergleiche Matches und danach kommt ein Mismatch
  - Setze M[k] := k-h+M[h]
  - Phase beenden (mit Mismatch)
  - (PS: Gusfield matched ab h' / i' weiter, was nicht notwendig ist)

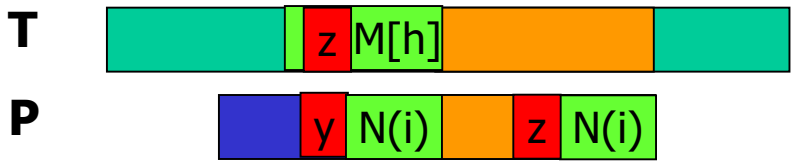
Details – 3

- Fall 3:Wenn M[h] ≥ N(i) und N(i)=i>0
  - In T liegt ein String, der bei h endet,
    - … der länger ist als N(i)
    - … und dessen Suffix mit N(i) matched
    - … und N(i) ist so lang, dass der Teil in P vor i und der Teil nach i (haben wir schon gesehen) zusammen ein kompletter Match sind
  - Vorkommen von P melden
  - Setze M[k] := n
    - Gusfield setzt auf k-h (kürzer ist nie schlimm) wg einfacherem Beweis
  - Phase beenden (mit Match)



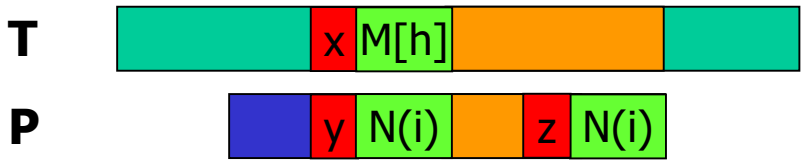
Details – 4

- Wenn M[h] > N(i) und N(i) < i
  - P[i-N(i)+1..] matched mit Substring in T, der an Position h endet
  - Danach kommt garantiert ein Mismatch
    - Denn wegen M[h] kommt ein Zeichen, das mit der Verlängerung des Suffixes von P matched
    - Aber wegen N(i) können wir den Substring in P, der an i endet, nicht weiter nach links mit dem Suffix von P matchen
  - Setze M[k] := k-h+N(i)
  - Phase beenden (mit Mismatch)



Details – 5

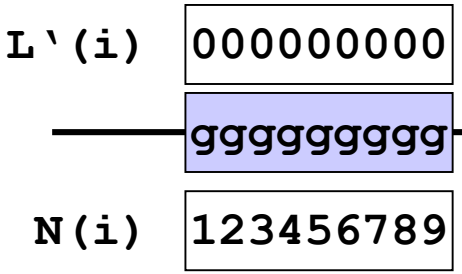
- Wenn M[h]=N(i) und N(i) < i
  - Wir können wieder Matches überspringen
    - Denn P[i-N(i)+1..] matched mit dem Substring in T, der an Position h endet
  - Was danach kommt, wissen wir nicht
  - Sprung: h := h-M[h]; i := i-M[h];
  - Dann weiter nach links matchen
    - Phase läuft weiter



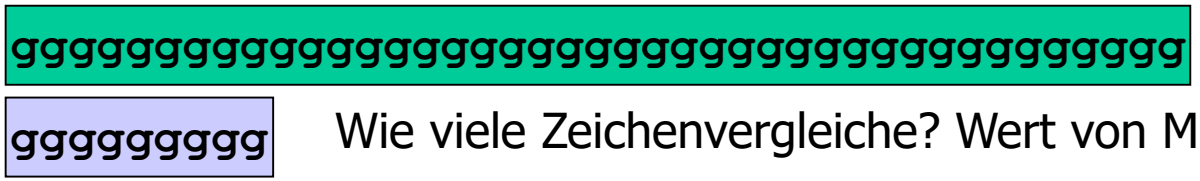
Beweis

- Die Kurzform
  - Matches
    - Zeichen, die wir matchen, führen zur Erhöhung von M[k]
      - Wenn M[h]>0, dann haben wir einen Substring in T schon gesehen und gematched
      - In all diesen Fällen überspringen wir die nächsten M[h] Zeichen oder beenden die Phase
    - Damit insgesamt nur maximal m Matches
  - Mismatches
    - Nach jedem Mismatch beenden wir die Phase

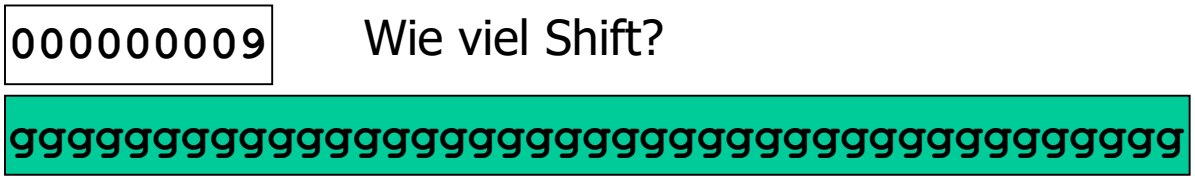
Beispiel



M[9]=9



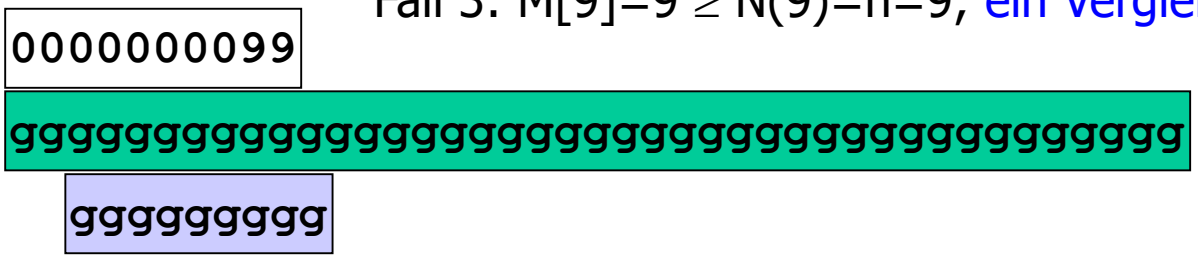
Wie viele Zeichenvergleiche? Wert von M[9]?



Wie viel Shift?

Wie viele Zeichenvergleiche? Wert von M[10]?

Fall 3: M[9]=9 ≥ N(9)=n=9; ein Vergleich, k++, M[10]=n



Inhalt dieser Vorlesung

- Boyer-Moore Algorithmus
  - Bad Character und Good Suffix Rule
  - Preprocessing
  - Beispiel
- Erweiterung zum linearen Worst-Case
- Varianten

Two Faster Variants

- BM-Horspool
  - Drop the good suffix rule which makes algorithm slower in practice
    - Rarely shifts longer than EBCR, needs time to compute the shift
  - Instead of looking at the mismatch character x, always look at the symbol in T aligned to the last position of P
    - Generates longer shifts on average (i is maximal)
- BM-Sunday
  - Instead of looking at the mismatch character x, always look at the symbol in T after the symbol aligned to the last position of P
    - Generates even longer shifts on average
- Details: Navaro, G. and Raffinot, M. (2002). "Flexible Pattern Matching in Strings", Cambridge University Press.

Selbsttest

- Erklären Sie den Boyer-Moore Algorithmus
- Wann ist welche der beiden Regeln besser?
- Wie viel Speicherplatz braucht man für die EBCR?
- An welchen Stellen ändert die Sunday-Variante den Algorithmus?
- Wie kann man Häufigkeiten von Zeichen zu weiteren Optimierungen ausnutzen?
- Welche Häufigkeiten sind dabei entscheidend? Wo sollte man messen?