Suffix Arrays

Eine Datenstruktur für Stringalgorithmen

Universität Dortmund, FB Informatik, LS11

Anwendungen

- Kompression: Lempel-Ziv (GIF, PDF,…), Burrows-Wheeler (BZIP2)…
- Bioinformatik: Genom Alignment, Repeatsuche
- Information Retrieval, Datenbanken
- Circular String Linearization in der Chemie

```
CGCTTTA    -CGCTTTA
ACGTT      ACG-TT--
```

Engineering Aspekte

- Praktische Anforderungen: Komplexität kritisch
- Speicherplatzbedarf: Geringer als bisherige Lösungen
- Aber: Konstanten kritisch ➔ Rallye nach impl. Verbesserungen für
  - Speicherplatz
  - Laufzeit Erstellung
  - Laufzeit Suche

Problemstellung

- Suche von Zeichenketten in Zeichenketten
- Hürde: Riesige Datenmengen (Wissensnetze, Bioinformatik)
- Quadratisch viele Substrings – nicht explizit speicherbar (menschl. Genom ca. 3 Mrd. Basenpaare)

klsadjfsdfscsdcdcefwefefefeefefe

Lösungsansatz

- j-ter Suffix S_j von T[0..n] ist T[j.n]

Banana

0 Banana
1 anana
2 nana
3 ana
4 na
5 a

Lösungsansatz

- Lösung für Suche:
  Jeder Teilstring ist Präfix eines Suffix

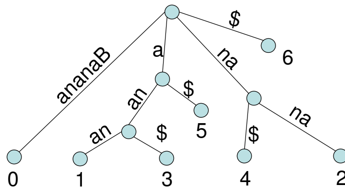
klsadjfsdfscsdcdcefwefefefeefefe$

- Es gibt nur n Suffixe
- Eindeutigkeit: Kein Suffix als Präfix von Suffix: Sentinel $

Suffix Tree (McCreight/Weiner 73)

- Idee: Darstellung aller Suffixe als Baum

Banana



Suffix Tree

- Problem:
  - Bau/Suche linear, Abhängig von Alphabetgröße α
  - Platzbedarf, ca. 15 Byte pro Zeichen
  - Implementierung aufwendig

Suffix Array (Manber/Myers 91)

- Entwicklungsziel: Platzsparend für extrem grosse Datenmengen
- Aufbau damals: *O(nlogn)* worst case
- Heute: Aufbau linear, kleiner Faktor
- Besser als Suffix Tree

Suffix-Array

Sortierung von String-Suffixen

- Ordnung auf Alphabet

Banana

0	Banana	5
1	anana	3
2	nana	1
3	ana	0
4	na	4
5	a	2

Suffix Array SA von s: Integerarray mit
SA[i] = j : Suffix S_j hat Rang i in lexikogr. Ordnung

Suffix Array

Ind	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
T	M	I	S	S	I	S	S	I	P	P	I

SA	10	7	4	1	0	9	8	6	3	5	2

Reverse Array R: SA[R[i]] = i

R	4	3	10	8	2	9	7	1	6	5	0

Suffix Arrays

- Integerarray
- |int|n bytes, Praxis: ~ 4n Byte
- Größe unabhängig von Alphabetgröße α

Algorithmen:
- Aufbau
- Suche
- Anwendungen: Repeat Suche,…

Aufbau

- Sortierung in quadratischer Zeit
- DFS in Suffix Tree, n·α, Baum nötig

Bessere Idee: Divide & Conquer, rekursiv

Aufbau

Schema

- Teile Suffixe in Mengen auf
- Erzeuge Suffixarray für jede Menge
- Merge die erzeugten Arrays

Welche Mengen?
Wie kann man Merge durchführen?

Aufbau

Ideen

- Auswahl und Mergen:
  1. Auswahlmenge ist leicht zu sortieren
  2. Auswahlmenge nützlich für Restsortierung: Suffixstruktur + bekannte Teilsortierung

$T = t_0 t_1 t_2 t_3 \dots$

S_0

S_1

S_2

Aufbau

Linearzeitalgorithmus

- Algorithmus von Kärkkäinen, Sanders, Burkhardt 2004
- Auswahlmengen: Dreiteilung

  $B_k = \{i \in [0,..,n] \mid i \bmod 3 = k\}$

  für k = 0,1,2
- Samplepositionen $C = B_1 \cup B_2$

  Samplesuffixe S_C

Aufbau

Beispiel

- Samplepositionen $i \bmod 3 \neq 0$:

mississippi

1: ississippi
2: ssissippi
4: issippi
5: ssippi
7: ippi
8: ppi
10: i

Samplepositionen C = {1,2,4,5,7,8,10}

Aufbau

Linearzeitalgorithmus

- Erzeuge Suffixarray für C (= 2/3n)
- Sortierung des Restes (i mod 3 = 0):

  Für Suffix S_i gilt $S_i = t_i S_{i+1}$
- Wir kennen aber bereits Sortierungsrang für alle solche Suffixe S_{i+1}
- Also für $i,j \in B_0$ Vergleich

  $S_i \leq S_j \Leftrightarrow (t_i, \mathrm{Rang}(S_{i+1})) \leq (t_j, \mathrm{Rang}(S_{j+1}))$

Aufbau

Beispiel

S_C

1: ississippi 4
2: ssissippi
4: issippi 3
5: ssippi
7: ippi 2
8: ppi
10: i 1

S_0

0: m-ississippi (m,4)
3: s-issippi (s, 3)
6: s-ippi (s, 2)
9: p-i (p, 1)

Aufbau

Berechnung für Menge C

C: Positionen i mod 3 = 1,2 TRICK!

Rechnung modulo 3 ➔ Zeichentripel $[t_{i,i+1,i+2}]$

$R_k = [t_{k,k+1,k+2}] \dots [t_{maxB_k, maxB_{k+1}, maxB_{k+2}}]$, k= 1,2
$R = R_1 \oplus R_2$ NOCH MEHR TRICK!

iss iss ipp i$$ ssi ssi ppi

Suffixe in S_C und R entsprechen sich!

S_i entspricht $[t_{i,i+1,i+2}][t_{i+3,i+4,i+5}] \dots$

Aufbau

Berechnung für Menge C

Sortiere Tripel und benenne sie mit Rang

Eindeutig ➔ Suffixsortierung nach erstem Tripel

Nicht eindeutig ➔ Rekursiver Aufruf mit Größe *2/3*

3 3 2 1 5 5 4
iss iss ipp i$$ ssi ssi ppi

➔Rang für Suffixe rang(S_i) für S_C

Laufzeit? *O(n)*

Aufbau

Linearzeitalgorithmus

1. Erzeuge Suffixarray für Positionen i mod 3 ≠ 0
   Rekursiv mit Aufteilung in Problem der Größe 2/3
2. Erzeuge Suffixarray für i mod 3 = 0 unter Benutzung des Arrays aus 1.
3. Merge die zwei Mengen

Wie Merge ausführen?

Aufbau

Konkret: Schritt 3

- Standardmerge mit Durchlauf des Arrays
- Vergleiche $S_i \in S_C$ mit $S_j \in S_{B_0}$
    1. $i \in B_1$: $(t_i, \text{rang}(S_{i+1})) \leq (t_j, \text{rang}(S_{j+1}))$
    2. $i \in B_2$: $(t_i, t_{i+1}, \text{rang}(S_{i+2})) \leq (t_j, t_{j+1}, \text{rang}(S_{j+2}))$

Beispiel Merging

10	7	4	1	8	5	2

0	9	6	3

mississippi

SA	10	7	4	1	0	9	8	6	3	5	2

Aufbau

- Aufbau in *O(n)* Zeit und Platz
- Mehrere Algorithmen mit untersch. Eigenschaften bzgl. Platz/Zeit je nach Eingabe
- External Memory Algorithmen verfügbar
- Komprimierte Suffix Arrays
- Aufbauzeit kann über mehrere Suchen amortisiert werden
- Suche?

Suche in Suffix Arrays

- Matching: Vorkommen von Muster p in String T
- Vorkommen ist Präfix eines Suffix
- Suffixsortierung → Binäre Suche

SA	11	8	5	2	1	10	9	7	4	6	3

mississippi

SA	L	8	5	2	1	M	9	7	4	6	R
	i	i	i	i	m	p	p	s	s	s	s
		p	s	s	i	i	p	i	i	s	s
		p	s	s	s		i	p	s	i	i
		i	i	i	s			p	s	p	s
			p	s	i			i	i	p	s
			p	s	s				p	i	i
			i	i	s				p		p
				p	i				i		p
				p	p						i
				i	p						
					i						

sip < ssi
sip > i
sip > pi

Suche: sip

SA	11	8	5	2	1	L	9	7	M	6	R
	i	i	i	i	m	p	p	s	s	s	s
		p	s	s	i	i	p	i	i	s	s
		p	s	s	s		i	p	s	i	i
		i	i	i	s			p	s	p	s
			p	s	i			i	i	p	s
			p	s	s				p	i	i
			i	i	s				p		p
				p	i				i		p
				p	p						i
				i	p						
					i						

sip < sis

SA	11	8	5	2	1	L	9	M	R	6	3
	i	i	i	i	m	p	p	s	s	s	s
		p	s	s	i	i	p	i	i	s	s
		p	s	s	s		i	p	s	i	i
		i	i	i	s			p	s	p	s
			p	s	i			i	i	p	s
			p	s	s				p	i	i
			i	i	s				p		p
				p	i				i		p
				p	p						i
				i	p						
					i						

1 Vorkommen

sip = sip

SA	11	8	5	2	1	10	9	7	L	M	R
	i	i	i	i	m	p	p	s	s	s	s
		p	s	s	i	i	p	i	i	s	s
		p	s	s	s		i	p	s	i	i
		i	i	i	s			p	s	p	s
			p	s	i			i	i	p	s
			p	s	s				p	i	i
			i	i	s				p		p
				p	i				i		p
				p	p						i
				i	p						
					i						

Suche nach ssi

2 Vorkommen

Suche

- Laufzeit:
  Naiv: *logn* Strings, Länge *m*, linear k Nachbarn suchen
  ➔ *O(m(logn+k))*
- Lange gleiche Präfixe – hohe Laufzeit
- Verbesserung praktisch / theoretisch ?

Beschleunigung

- Auslassen bekannter Präfixe

L ↓ R ↓

SA	11	8	5	2	1	10	9	7	4	6	3
Gem. Präfix →	i	i	i	i	m	p	p	s	s	s	s
		p	s	s	i	i	p	i	i	s	s
		p	s	s	s		i	p	s	i	i
		i	i	i	s			p	s	p	s
			p	s	i			i	i	p	s
			.	.	.				.	i	.
			.	.	.				.		.

$lcp(S_i, S_j)$ – longest common prefix

Beschleunigung

- $l_{match} = \min(lcp(p, S_{SA[L]}), lcp(p, S_{SA(R)}))$
- $\forall K = L,..,R$:
  $p[1..l_{match}] = T[SA[K] .. SA[K]+l_{match}-1]$
  ➔ Nicht vergleichen

Laufzeitverbesserung:
- Praktisch: Klar
- Theoretisch: Worst-Case? min = 0

➔ keine Verbesserung der asympt. Worst-Case Laufzeit

Praxis: lcp-Werte

Datei	Average	Maximum	Größe
Swissprot	89	7.373	110Mb
Chrom. 22	1.980	200.000	34 Mb
gcc3 src	8.600	856.970	87 Mb

Beschleunigung II

L M R
... ...
+ + + + < ? ? ? ? ? ? ? + + + > ? ?
l→ ←r
Llcp(M)
Rlcp(M)

$lcp(p, S_{SA[M]})$?
Suche links oder rechts von M?

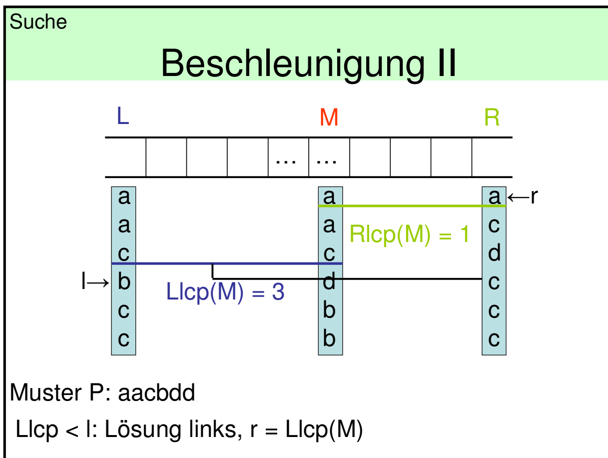
Beschleunigung II

L M R
... ...
a a c b c c a a c d b b a c d c c c
l→ ←r
Rlcp(M) = 1
Llcp(M) = 3

Muster P: aadccc
Llcp > l: Lösung rechts, l bleibt

Suche

Beschleunigung II

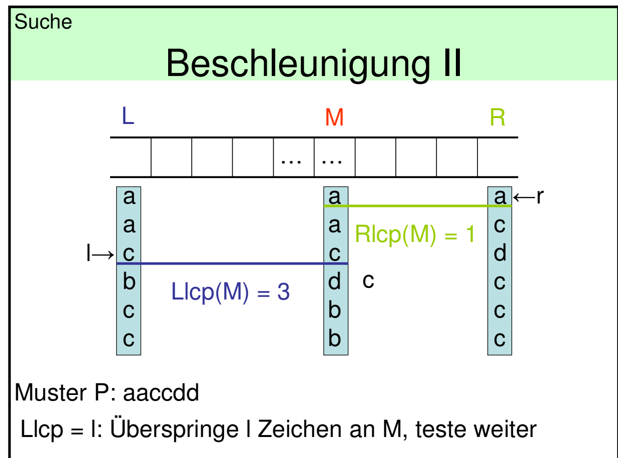


Muster P: aacbdd

Llcp < l: Lösung links, r = Llcp(M)

Suche

Beschleunigung II



Muster P: aaccdd

Llcp = l: Überspringe l Zeichen an M, teste weiter

Suche

Beschleunigung II

Test für max(Llcp, Rlcp) ➔ maximale Schrittweite

Statische Vorberechnung der Llcp/Rlcp-Werte

Laufzeit?

Nicht erfolgreicher Vergleich ➔ Intervallhalbierung

Erfolgreicher Vergleich ➔ Suchindex + 1

Laufzeit: O(m+logn)