未決定文字列における一意単語の検索の困難さ

Dominik Köppl 1 and Jannik Olbrich 2

1: 山梨大学. 2: University of Ulm



🔍 山梨県若手研究者奨励事業費補助金 2291 による助成研究

$$\widetilde{\mathcal{T}}=A\left\{egin{array}{c}A\\C\end{array}
ight\}C\left\{egin{array}{c}G\\A\end{array}
ight\}$$
,一意単語: AA, CC, CA, G

一意単語

定義 (一意単語 = unique word)

- T: 文字列, Σ: アルファベット
- T の一意単語 X: 文字列 T 中に 部分文字列として丁度 1 回出現す る文字列

例

- $T = AACAC, \Sigma = \{A, C\}$
- MUSs: AA, AC

定義 (最小一意単語 = MUS (minimum unique substring))

- X: 一意単語
- X は最小一意単語 : $\Leftrightarrow X$ のすべての真の部分文字列が T 中に少なくとも 2 回出現

未決定文字列

定義

- 任意の位置に複数の代替文字を 持つ
- 位置を記号と呼ぶ
- $ightharpoonup \widetilde{T}$: 未決定文字列
 - lacksquare $\widetilde{T}[i] \subset \Sigma$

例

IUPAC 表記法は DNA や RNA 配列における未決定の核酸を表現、例:

■ R は A または G

 $\widetilde{\mathcal{T}} = A \left\{ egin{aligned} A \ C \end{array} \right\} C \left\{ egin{aligned} G \ A \end{array}
ight\} \ \mathcal{L}(\widetilde{\mathcal{T}}) = \left\{ ext{AACG, AACA, ACC<u>G, ACCA}
ight\} \end{array}$ </u>

 $lacksymbol{ ilde{T}}$: 未決定文字列の例

$$lacktriangle$$
 $\mathcal{L}(\widetilde{T})$: \widetilde{T} の言語

lacktriangle $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ は \widetilde{T} で表現されている文字

列の集合

未決定文字列の MUS

定義 (一意単語)

- \mathbf{T} : 未決定文字列
- **■** \widetilde{T} の一意単語 X:
- riangle 少なくても一つの $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ の文字

る文字列

列中に出現riangle すべての $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ の文字列中に部分文字列として最大 1 回出現す

 $\widetilde{\mathcal{T}} = \mathtt{A} \left\{ egin{matrix} \mathtt{A} \\ \mathtt{C} \end{smallmatrix}
ight\} \mathtt{C} \left\{ egin{matrix} \mathtt{G} \\ \mathtt{A} \end{smallmatrix}
ight\}$

 $\mathcal{L}(\widetilde{T}) = \{ \text{AACG}, \text{AACA}, \text{ACCG}, \text{ACCA} \}$

MUS: AA, CC, AC, CA, G

定義 (MUS)

■ X: 一意単語

N X は最小一意単語 : $\Leftrightarrow X$ のすべての真の部分文字列が少なくても一つの $\mathcal{L}(\widetilde{T})$ の文字列中に少なくとも 2 回出現

計算量

- 単純な文字列: $\mathcal{O}(n)$ 時間 Pei+'13
- 連超圧縮された文字列: $\mathcal{O}(m \lg m)$ 時間 Mieno+'16
- 未決定文字列: NP 完全 (一つの MUS の検索だけ)

ただし

- m は入力文字列の連超圧縮サイズ
- lacktriangle 注意: $|\widetilde{T}|=n$ としても、 $|\mathcal{L}(\widetilde{S})|=\Omega(2^n)$ になる可能がある

例:

$$\widetilde{\mathcal{T}} = \left\{ egin{aligned} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{aligned} \right\} \left\{ egin{aligned} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{aligned} \right\} \left\{ egin{aligned} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{aligned} \right\} \cdots$$

問題 (k-一意単語問題)

- $lacksymbol{\blacksquare}$ 入力: 未決定文字列 \widetilde{S} と整数 k
- 出力: 長さが k の一意単語が S に存在するかどうか
- k-一意単語問題は判定問題
- 判定問題の答えは Yes・No

例

$$\widetilde{\mathcal{T}} = \mathtt{A} \left\{ egin{matrix} \mathtt{A} \\ \mathtt{C} \end{smallmatrix}
ight\} \mathtt{C} \left\{ egin{matrix} \mathtt{G} \\ \mathtt{A} \end{smallmatrix}
ight\}$$

$$\mathcal{L}(\widetilde{\mathcal{T}}) = \{\mathtt{AACG},\mathtt{AACA},\mathtt{ACCG},\mathtt{ACCA}\}$$

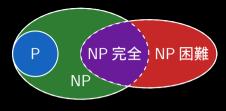
$$k = 1$$
: Yes: G

$$k = 2$$
: Yes: CA

$$k \ge 3$$
: No

問題 (k-一意単語問題)

- 入力: 未決定文字列 g と整数 k
- 出力: 長さが k の一意単語が \widetilde{S} に存在するかどうか
- k-一意単語問題は判定問題
- 判定問題の答えは Yes・No



方針

- 一意単語問題 ∈ NP を証明
- 一意単語問題 ∈ NP 困難 を証明
- ⇒ 一意単語問題 ∈ NP 完全

NP 問題

定義 (クラス NP)

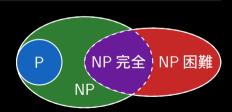
- 問題 M は以下の条件を満たすと、NP の要素となる
- 入力に対する正しい出力が Yes であるとき、それを多項式時間で検証するための証拠が存在

問題 (証明検証)

■ X: 文字列, $\widetilde{S}:$ 未決定文字列

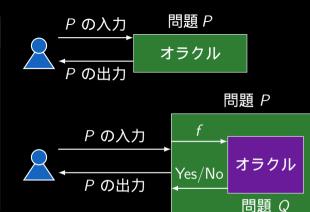
⇒ 一意単語問題 は NP 問題

- \blacksquare X は \widetilde{S} の MUS の一つかどうか
 - X が \widetilde{S} に何回出現するか、多項式時間で判断 Abrahamson'87
 - $lacksymbol{\square}$ X のすべての部分文字列の個数は $\mathcal{O}(n^2)$
 - 証明検証問題を多項式時間で解ける



定義 (Karp の帰着方法)

- 入力:判定問題 *P* と *Q*、多項式 時間アルゴリズム *f*
- **■** $f(P O \lambda D) = Q O \lambda D$
- *P* の入力 *S* が *P* の Yes 入力 ⇔ f(S) は *Q* の Yes 入力
- その際、 *P が Q* に多項式時間多
 - 、その際、*P* が Q に多項式 対一帰着可能であると言う



補題

- P は NP困難
- *P* が *Q* に多項式時間多対一帰着可能
- \Rightarrow Q も NP困難

- lacktriangle 一意単語問題 は NP 困難 だと証明したい \Rightarrow Q= 一意単語問題
- P = 3-SAT とする

定義 (3-SAT 判定問題)

入力:

- 連言標準形(CNF: conjunctive normal form)の式 F
- *F* は一連の節 *C_i* を連言 (AND) で結合
- 各節 C_i は3つのリテラルの選言である
- *n* 個の変数 *x*₁,...,*x*_n が順序付け
- 出力:論理式全体の値を真にするような真偽値 x₁,..., があるかどうか
 - 3-SAT 判定問題は NP 困難 Karp'72

例:

- 変数 *x*₁, *x*₂, *x*₃, *x*₄
- $C_1 = x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3$
- $C_2 = \neg x_1 \lor x_2 \lor \neg x_4$
- $C_3 = x_2 \lor x_3 \lor \neg x_4$
- $\blacksquare F = C_1 \wedge C_2 \wedge C_3$
- 出力: Yes:
 - $x_1 = x_2 =$ 真
- $\Rightarrow F = \mathbf{\bar{p}}$

方針

- 線形量を取る未決定文字列 g で F の反対を表現
- lacktriangle つまり、 C_i を満たさない真偽を \widetilde{S} の長さn の部分文字列で表現
- lacktriangle 長さ n のすべての可能な部分文字列を \widetilde{S} で列挙
- \Rightarrow F が充足する割り当てを持つ \Leftrightarrow \widetilde{S} 中に長さは n を持つ MUS がある



$$T_i$$
の定義

任意節 $C_i = (\ell_a \vee \ell_b \vee \ell_c)$ に対して:

$$igc 0$$
 だだし $\ell_i=\mathsf{x}_i$

$$lacksquare$$
 $lacksquare$ $lacksquare$ $lacksquare$ $lacksquare$ $lacksquare$ $lacksquare$ $lacksquare$

■ 変数: *x*₁, *x*₂, *x*₃, *x*₄ $C_i = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3)$

 $T_j = \left\{ 0 \right\} \left\{ 1 \right\} \left\{ 0 \right\} \left\{ 0 \right\}$

 $lacksymbol{
u} egin{aligned} lackbol{v}_i &= egin{aligned} 0 & extit{だだし} \ \ell_i &= x_i \ 1 & extit{だだし} \ \ell_i &\neq x_i \end{aligned}$

 $\widetilde{T}_{j} = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}^{a-1} \left\{ v_{a} \right\} \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}^{b-a-1} \left\{ v_{b} \right\} \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}^{c-b-1} \left\{ v_{c} \right\} \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right\}^{n-c}.$

例

Sの定義

$$\widetilde{\mathcal{S}} = \widetilde{\mathcal{T}_1} \left\{ \$ \right\} \ldots \left\{ \$ \right\} \widetilde{\mathcal{T}_m} \left\{ \$ \right\} \left\{ egin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array}
ight\}^n \left\{ \$ \right\} \left\{ egin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array}
ight\}^{n-1} \left\{ \$ \right\} \left\{ egin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array}
ight\}^{n-1}.$$

$$\Rightarrow \widetilde{S}$$
 は $\mathcal{O}(\mathit{nm})$ の記号を持つ

$$lacksymbol{lack} \mid \widetilde{S}[i] \mid \leq 3 \Rightarrow \widetilde{S}$$
 は F を $\mathcal{O}(\mathit{nm})$ 領域で表現

例

$$T_j$$
 は n の記号を持つ S_j は $O(nm)$ の記号を持つ

 $F = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_3 \vee x_4),$ $\widetilde{S} = \{0\}\{1\}\{0\}\{0\}\{0\}\{1\}\{0\}\{1\}\{0\}\{1\}\{0\}\{1\}\{0\}\}\}$

例の MUS

$$F = (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_3 \vee x_4),$$

$$\widetilde{S} = \{0\} \{1\} \{0\} {0 \} \{5\} \{0\} \{1\} \{0\} \{1\} \{0\} \{\$\} {0 \} \{5\} \{5\} \{0\} \{5\} \{5\} \{0\} \}^3 \{\$\} \{0\} \}^3.$$

1000 は MUS (特に、最短の MUS):

- 1000 は (x₁ = 1, x₂ = x₃ = x₄ = 0) を表現
- すべての長さ4以下のバイナリー文字列は出現
- \blacksquare 長さ3のすべてのバイナリー部分文字列が \widetilde{S} に2回出現
- lacktriangle 長さ4の部分文字列はlacktriangle を含むと、 \widetilde{S} に2回出現

帰着定理

$$\widetilde{\mathcal{S}} = \widetilde{\mathcal{T}_1} \left\{ \$
ight\} \ldots \left\{ \$
ight\} \widetilde{\mathcal{T}_m} \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^n \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1} \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1}, \Sigma = \left\{ 0, 1, \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1} \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1} \left\{ \$
ight\}^{n-1} \left\{$$

定理

F が充足する割り当てが持つ \Leftrightarrow \tilde{S} 中に長さは n を持つ MUS がある

- 長さが最大 n-1 のすべてのバイナリー部分文字列が \widetilde{S} 中に 2 回出現
- ⇒ 一意単語は少なくとも長さ n を持つ
- 任意長さ n を持つ \$ を含む文字列が最後の 4 つの記号にも出現
- ⇒ 長さ n の MUS は \$ を含むことができない

帰着定理の証明: 必要条件 (⇒)

$$\widetilde{\mathcal{S}} = \widetilde{\mathcal{T}_1} \left\{ \$
ight\} \ldots \left\{ \$
ight\} \widetilde{\mathcal{T}_m} \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^n \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1} \left\{ \$
ight\} \left\{ egin{matrix} 0 \ 1 \end{matrix}
ight\}^{n-1}, \Sigma = \left\{ 0, 1, \$
ight\}$$

定理

F が充足する割り当てが持つ \Leftrightarrow \widetilde{S} 中に長さは n を持つ MUS がある

証明. 仮定: CNF を充足する割り当てがある.

- 割り当てをビット配列 B[1..n] で表現する
- \blacksquare i 番目のビット B[i] は x_i の真偽値を表現 (偽 = 0、真 = 1)
- B は部分文字列として出現
- lacktriangle B は \widetilde{T}_i に不一致すると、B の割り当てが節が C_i を満たす
- $\Rightarrow B \not = \widetilde{S} \otimes MUS$

帰着定理の証明: 十分条件 (⇐)

$$\widetilde{\mathcal{S}} = \widetilde{\mathcal{T}_1} \left\{\$\right\} \ldots \left\{\$\right\} \widetilde{\mathcal{T}_m} \left\{\$\right\} \left\{egin{array}{c} 0 \ 1 \end{array}
ight\}^n \left\{\$\right\} \left\{egin{array}{c} 0 \ 1 \end{array}
ight\}^{n-1} \left\{\$\right\} \left\{egin{array}{c} 0 \ 1 \end{array}
ight\}^{n-1}, \Sigma = \left\{0, 1, \$\right\}$$

定理

F が充足する割り当てが持つ \Leftrightarrow \tilde{S} 中に長さは n を持つ MUS がある

証明.

- 仮定: CNF を充足できない
- \blacksquare すべての長さ n のビット配列は \widetilde{S} 中に 2 回出現
- $\stackrel{\sim}{\blacksquare}$ に長さ n を持つ一意単語はない

今後の展望

不一致

単純な文字列 未決定文字列 線形 NP 完全 MUS 線形 NP 完全 MAW anti-power Ν 線形 LPF Ν

線形

■ GD-文字列: $\forall i \exists k : \widetilde{S}[i] \subset \Sigma^k$

■ 2ED-文字列: $\widetilde{S}[i] \subset ED-文字列$

: 200番目のアルゴリズム研究会の課題

■ 単純な文字列: S[i] ∈ Σ ■ 未決定文字列: S̃[i] ⊂ Σ

■ ED-文字列: $\widetilde{S}[i] \subset \Sigma^*$

NP 完全 Ν Ν

GD-文字列

<u>ED-文字列</u> 2ED-文字列

NP 完全

文字列の一般化の階段

- 単純な文字列: *T* = AACG
- 未決定文字列: $\widetilde{T} = A \left\{ \frac{A}{C} \right\} C \left\{ \frac{G}{A} \right\}$
- generalized degenerate (GD)-文字列:

$$\widetilde{\mathcal{T}} = \mathtt{A} \left\{ egin{array}{c} \mathtt{AAC} \ \mathtt{CAT} \end{array}
ight\} \mathtt{C} \left\{ egin{array}{c} \mathtt{G} \ \mathtt{T} \end{array}
ight\}$$

elastic-degenerate (ED)-文字列:

$$\widetilde{\mathcal{T}} = \mathtt{A} \left\{ egin{array}{c} \epsilon \\ \mathtt{CAT} \end{array}
ight\} \mathtt{C} \left\{ egin{array}{c} \mathtt{GTCG} \\ \mathtt{T} \end{array}
ight\}$$

$$\widetilde{T} = A \begin{Bmatrix} \epsilon \\ CAT \end{Bmatrix} C \begin{Bmatrix} GICG \\ T \end{Bmatrix}$$

$$2ED-文字列: \widetilde{T} = \begin{Bmatrix} T \begin{Bmatrix} ACT \\ C \end{Bmatrix} A \begin{Bmatrix} T \\ AAG \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon \\ CAT \end{Bmatrix} C \begin{Bmatrix} GTCG \\ T \end{Bmatrix}$$