



TANDEM RÉSZSZTRINGEK DETEKTÁLÁSA NEURÁLIS HÁLÓ ALKALMAZÁSÁVAL

KOVÁCS LÁSZLÓ

Miskolci Egyetem, Magyarország
Informatikai Intézet

laszlo.kovacs@uni-miskolc.hu

POLONKAI DÁVID

Miskolci Egyetem, Magyarország
Informatikai Intézet

david.polonkai2@gmail.com

Absztrakt. A sztringek és a listák alapvető szerepet játszanak az adatstruktúrák között. A sztringekhez kapcsolódóan az egyik központi művelet az egy adott mintára illeszkedő részek keresése. A részsstring mintakeresés egyik speciális típusa az ismétlődő részek meghatározása. Ez a feladat kiemelkedő fontosságú többek között a biológiában (gének vizsgálata) vagy a folyamatmodellezésben (ciklusok keresése). A cikk a hagyományos, direkt mintakeresési módszerek egy sajátos alternatíváját mutatja be, amely a neurális hálók alkalmazásán alapszik. A kidolgozott módszerrel végzett összehasonlító elemzések azt mutatják, hogy a neurális háló alapú módszerek elsősorban a közelítő keresések esetén bizonyulnak hatékony megoldásnak.

Kulcsszavak: mintaillesztés, részsstring keresés, neurális hálók

1. Bevezetés

A sztringek több területen játszanak alapvető szerepet, mint például a génkutatásban [1], a szabadszöveges dokumentumok elemzésében vagy a folyamatbányászatban [2]. A szekvenciák esetében a mintaalapú rész keresés mellett kiemelt szerepű az ismétlődések feltárása is. A szövegben egy szakasz ismételt megjelenésének azon esetét, amikor a szakasz duplikálódik, tandem részsstringeknek is nevezik. A tandem részsstringek feltárása több különböző módon és eszközzel valósulhat meg. A hagyományos illesztésalapú megoldásoknak is több típusa létezik, kezdve a naív módszertől a hatékony rekurzív módszerekig széles a módszerpaletta. Ebben a palettában viszont nem találunk neurális

hálós módszereket. A jelen cikk fő feladata a neurális háló alapú megoldások lehetőségeinek az elemzése és ennek keretében egy megoldási változat bemutatása. A javasolt rendszer a sztringet egy kétdimenziós mátrixra vetíti le, majd egy CNN háló segítségével osztályozza ezen képet, hogy hol tartalmaz ismétlődő szakaszokat a mátrix.

A feladat formálisan egy adott ABC halmaz A esetén a következőképp fogalmazható meg. Az ABC elemeinek egy véges sorozatát nevezzük sztringnek:

$$s = a_1, a_2, \dots, a_m, a_i \in A$$

Egy

$$s' = a'_1, a'_2, \dots, a'_k$$

sztring részhalmaza s -nek, ha

$$\exists i : a_i = a'_1, \dots, a_{i+j-1} = a'_j, \dots, a_{i+k-1} = a'_k$$

Egy s' részszttring tandem részszttring, ha

$$\exists i : a_i = a_{i+k} = a'_1, \dots, a_{i+j-1} = a_{i+k+j-1} = a'_j, \dots, a_{i+k-1} = a_{i+2k-1} = a'_k.$$

2. Mintaillesztés-alapú módszerek

Az ismétlődő részszttring szakaszok meghatározásának triviális módszere egy egymásba ágyazott ciklus, melyben a külső ciklus a ciklusmag kezdő pozícióját hordozza, a belső ciklus a mag hosszát jelöli. Ez alapján egy N hosszú sztringnél $O(N^2)$ ciklusmagjelölt kerül tesztelésre. A tesztelés során megnézzük, hogy ismétlődik-e az aktuális magjelölt. A teljes vizsgálat így az $O(N^3)$ költségig is felmehet. Mivel az egyes biológiai alkalmazásokban igen hosszú szekvenciákat kell vizsgálni és a hosszabb sztringek esetén a triviális megoldás már nem alkalmazható, több javaslat is született a ciklusmagok hatékonyabb detektálására.

Az egyik első megoldás az időbeli hatékonyság növelésére a [3] publikációban bemutatott javaslat. A kidolgozott algoritmus az induló sztringet elemi darabokra bontja. Ezt követően a szomszédos részek összefűzésével hosszabb részekre lépünk tovább. A kidolgozott CONCATENATE függvény ezen részszttringeket átvizsgálva a fellelt ismétlődő mintákat begyűjti. A módszer végrehajtási költsége $O(N \log N)$.

Napjainkban a leghatékonyabb algoritmusok már $O(N)$ költségű megoldást is el tudnak érni [4] [5]. Az algoritmus egy rekurzív feldolgozást végez a beérkező sztringen. Az első szinten kettébontja a sztringet, majd meghatározza, hogy van-e olyan részszttring-ismétlődés, amely metszi a felvett vágásvonalat. Az ilyen típusú tandem sztringek feltárása után a két sztring feltéren külön-külön rekurzívan elvégzi az oda tartozó tandem részek feltárását.

3. CNN alapú módszer

A CNN neurális hálók alkalmazása az 1980-as években fejlődött ki [6]. A háló szerkezetét és működését tekintve biológiai eredetű [7]. A CNN azaz Konvolúciós Neurális Hálók a hagyományos hálók közötti különbség, hogy a hagyományos neuronrétegeken kívül úgynevezett konvolúciós rétegeket is tartalmaznak. A konvolúciós rétegek szűrőablakokat visznek végig a mátrixon. A szűrőablak tekinthető egy $n \times n$ -es mátrixként, amit elhelyezünk a kiszámítandó adat mátrixán. A művelet következő lépésében az egyes értékeket összeszorozzuk, majd összeadjuk őket. Ezt követően az ablakmátrixot eltoljuk egy egységgel. A műveletsort megismétljük a teljes adatmátrixra. Ezen ablakmátrix mérete tetszőleges lehet. A tanítás előtt a szűrőablak értékei tetszőlegesek. A tanítási folyamat alatt a szűrőablak értékei úgy változnak, hogy megtanuljanak kiemelni egy lényeges információt a mátrixból. A konvolúciós rétegeket általában egy pooling réteg követi, amely a konvolúció által készített mátrix dimenzióját csökkenti valamilyen módon. A konvolúcióhoz hasonlóan egy meghatározott ablakmérettel végighalad a mátrixon és az ablakban található értékeket képi le valamilyen függvény segítségével, általában a maximumkiválasztás vagy az átlagolás használatos a CNN-ek esetében. Napjainkban egyre több területen alkalmazzák a konvolúciós neurális hálókat. A legnagyobb felhasználási területe a képfeldolgozás [8][9]. Azonban hatékonyságuk olyan magas a képfeldolgozásban, hogy gyakran más problémakörökre is alkalmazzák az adatok képpé transzformálásával [10]. Jelen cikkben ezzel a problémával is fogunk foglalkozni, hiszen az adataink lineáris sztringszekvenciák.

A neurális háló tanításához nagy mennyiségű példaadatra van szükség, ezért egy adathalmaz-generátort készítettünk. A generátor feladata olyan sztringek generálása, amelyben található ismétlődés, és amelyekben nem jelenik meg ismétlődés. Ismétlődés alatt azonban nemcsak az egyetlen karakter ismétlődését kell generálnunk, hanem a több karakterből álló ismétlődő alszekvenciákat is készítenünk kell a CNN megfelelő minőségű jóslása érdekében. Azonban nem lehet tetszőlegesen hosszú ismétlődő szakaszokat választani, ha az ismétlődést tartalmazó sztringrész hossza adott. Egy $s, m = |s|$ sztring esetében, csak abban az esetben lehet egy j hosszú tandem részsstring helyes, ha az ismétlődő részsstring hossza i és igaz, hogy $j \bmod i = 0$ és $j < m$. A generátor, ezért mindenképp a megadott m esetén kiszámítja a lehetséges j és i értékeket. Ezt követően egy próbadobás segítségével a generátor eldönti, hogy ismétlődést tartalmazó sztringet, vagy ismétlődésmentes sztringet generál az adott ciklusban.

Ha ismétlődésmenteset, akkor úgy generáljuk a karaktereket, hogy ne lehessen

véletlen ismétlődés. Ha ismétlődő résszel rendelkező sztringet, először meghatározzuk az ismétlődés pozícióját és az ismétlődő rész hosszát, majd az ismétlődés pozíciójáig az előző módon generáljuk a szekvenciát. Az ismétlődő részt elérve kiválasztjuk az ismétlődő részsstringben használatos karakterszekvenciát és egymás után összefűzünk $\lfloor \frac{j}{i} \rfloor$ darabot a karakterszekvenciából. A maradék részét a sztringnek ismétlődésmentesen generáljuk.

3.1. Előfeldolgozás

Mivel jelen cikkben a tandem részsstringek megtalálása a feladatunk, amelyek lineáris egydimenziós adatok, ezeket át kell alakítanunk CNN számára értelmezhető mátrixformátumra. Az előfeldolgozással, mátrixos formátumra alakítással kapcsolatos követelmények:

- A tandem részsstringek jellegzetesen jelenjenek meg a mátrixon.
- A bemenetet minél kisebb dimenziójúra csökkentsük.
- A neurális háló egy hosszúságú sztringben minden lehetséges tandem részsstringet megtalálhasson.

Az általunk használt megoldás egy egyértelmű leképezést jelent. A teljes $s = a_1, a_2, \dots, a_m$; $a_i \in A$ sztringet egy $m \times m$ mátrixszá alakítjuk. Az M egyezsmátrixban egy elemet az $i, j \in \mathbb{N}_0$ számokkal azonosítunk. Az $M[i, j] = 0$, ha $a_i \neq a_j$, $M[i, j] = 1$, ha $a_i = a_j$.

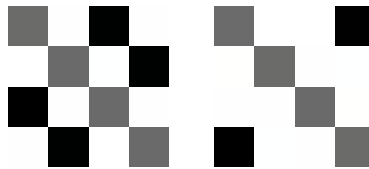
Például (1 táblázat):

1. táblázat. Egyezsmátrix

	a	l	a	l
a	1	0	1	0
l	0	1	0	1
a	1	0	1	0
l	0	1	0	1

	a	l	m	a
a	1	0	0	1
l	0	1	0	0
m	0	0	1	0
a	1	0	0	1

Ha az előbb bemutatott táblázatot képként fogjuk fel (1 ábra):



1. ábra. Egyezsmátrix képként

Az ismétlődés a képen a főátlóval párhuzamos pixelsorként jelenik meg. Ezen megoldás segítségével a CNN könnyedén felismerheti az ismétlődéseket. A mátrix előállítását a főátlóra való szimmetrikusságának kihasználásával lehet optimalizálni, így a számítási költség a felére csökken.

A probléma azonban, hogy egy m hosszú sztring esetében m^2 lesz a neurális háló bemeneti neuronjainak száma. Így viszonylag hamar elérjük a hardveres korlátainkat a CNN tanítása vagy ismétlődéskeresés alatt. A probléma megoldására különböző redukciós megoldásokat dolgoztunk ki:

- Bitmap
- Átlag
- Reduct

A Bitmap egy olyan leképzés, amely a mátrixban egy $n \times n$ almátrixot, ahol $n < m$, egy valós számmal helyettesítünk. Az $n \times n$ -es mátrixot, mint n^2 hosszúságú szekvenciát fogjuk fel, és a belőlük megalkotott bináris szám 10-es számrendszerbeli értékét elosztjuk a $2^{n^2} - 1$ számmal. Az így kapott 0 és 1 közötti értéket adjuk a neurális hálónak. Ez a megoldás azért ideális, mert így visszakaphatjuk az eredeti értéket is. Mégis képesek vagyunk vele $n = 2$ esetén a felére csökkenteni a memóriaigényét a neurális hálónak. Például adott az alábbi $n = 2$ almátrix

1	0
0	1

, melyet 1001-ként fogjuk fel, ami 10-es számrendszerben 9. A behelyettesítendő érték pedig $9/(2^{2^2} - 1) = 0,6$.

Az Átlag módszer a szekvencia mátrixból egy $n \times n$ -es almátrix értékeit átlagolja, majd a mátrixban az átlag értékével helyettesíti az $n \times n$ -es részt. A fellebb bemutatott példa esetében ez az érték $\frac{1+0+1+0}{4} = 0,5$. Ezzel a módszerrel is n -ed részére csökkenthetjük a memóriaigényét a rétegeknek. Mind az átlagolós, mind a bitmap alapú módszernél a mátrixból nem átlapoltan vesszük a mintákat, mint a hagyományos konvolúció vagy pooling esetében, hanem a mintavételezési ablak ablakméretének megfelelő egységet fog mozogni minden irányba.

A Reduct módszer esetében a hasonló szomszédokat keressük meg és nagyobb értéket adunk a mátrixban azoknak a csoportosításoknak, ahol az almátrix főátlója 1 értékű.

4. Kísérletek

A cikk célja összehasonlítani a naív tandem részsstring-keresést és a CNN alapú tandem részsstring-keresést. Jelen esetben a következő tényezőket vizsgáltuk:

- Pontosság
- Megoldáshoz szükséges idő
- Erőforrásigény

Fontos megjegyezni, hogy a megoldáshoz szükséges idő alatt a CNN jóslási idejét tekintjük.

4.1. CNN architektúra paraméterezése

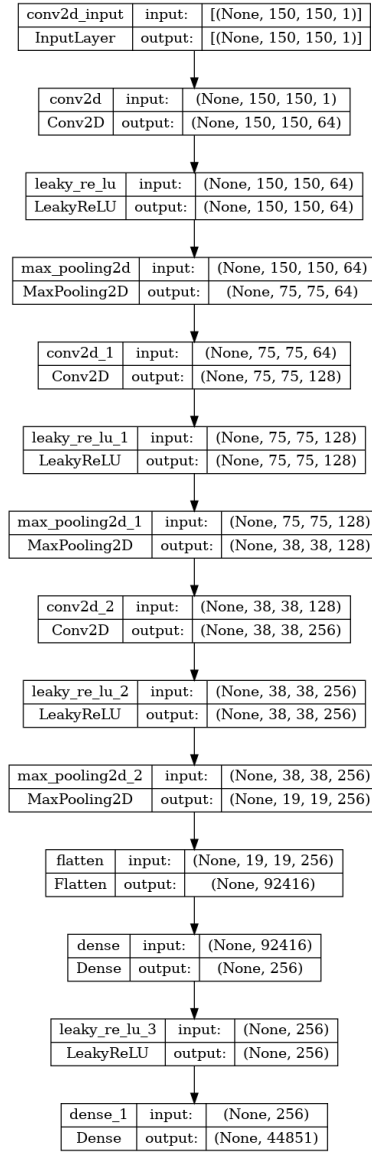
Az cikkben bemutatott módszer által használt konvolúciós neurális háló egyszerű szerkezetű. A háló elkészítéséhez az egyszerűség és a számunkra szükséges könyvtárak elérhetősége miatt a Python nyelvet választottuk. A Keras keretrendszer segítségével sikerült könnyedén felépíteni a neurális hálót és tanítani azt. Bemeneti rétegeinek a száma m^2 . 3 konvolúciós egység követi egymást, amelyet teljesen kapcsolt (dense) rétegek követnek. A konvolúciós egységek a *Conv2D* rétegeket használják fel. Ez a réteg egyszerre több szűrőt használ fel a képen. Az első konvolúciós egységben a szűrők száma 64, a másodikban 128, majd az utolsó egységben 256. Az ablakméret minden esetben 3×3 -as. A felhasznált aktivációs függvény a konvolúciós egységekben a LeakyReLU, melynek képlete:

$$f(x) = \begin{cases} \alpha * x & \text{ha } x < 0 \\ x & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$

Esetünkben $\alpha = 0.1$. Ezt követi egy konvolúciós egységben egy 2×2 -es méretű maximum pooling, amely csökkenti az adat dimenzióját. Végül két *Dense* réteg segítségével hozzuk létre a megoldást. Veszteségfüggvénynek a kereszt-entrópiát használtuk, softmax aktivációs függvénnyel. A tanító függvény az Adam a cikkben bemutatott háló esetében. A 2 példában látható neurális háló bemeneti sztring hossza $m = 150$ volt. Látható, hogy a konvolúció miatt a belső rétegek száma is nagy marad, ezért is fontos a redukció az előfeldolgozás esetében.

4.2. Futtatási konfiguráció

A teszteket egy Nvidia GPU-val szerelt gépen futtattuk 16 GB videómemoóriával. A naív tesztek a CPU-n futottak.



2. ábra. CNN model

5. Teszteredmények

Minden tesztet 3-szor futtattunk le, majd átlagoltuk az eredményeket. A tesztek 40 és 100 hosszúságú sztringek esetében 10 000 sztringből álltak, a többi esetben 5000 sztringből. A tanító halmazból 80%-ot használtunk fel tanításra,

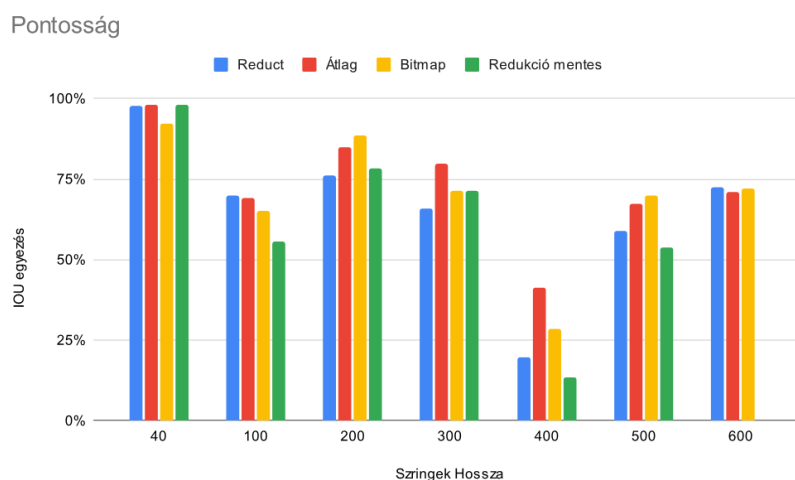
a maradék 20%-ot a hálók pontosságának vizsgálatára, és a megoldási idők vizsgálatára használtuk. Epochok szempontjából több epochkal lefuttattuk a kísérletet:

- 20
- 40
- 100
- kilépési feltételes futtatás (Early Stopping)

A kísérleteket lefuttatuk reduktós módszerekkel és anélkül is. A sztringek hosszai a következőképp alakultak:

- 40
- 100
- 200
- 300
- 400
- 500
- 600

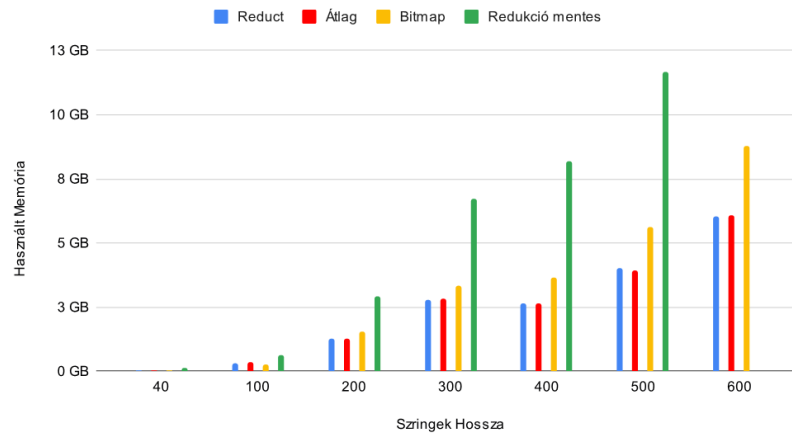
A teszt eredményeket a 3, 4, 5. ábrákban foglaltuk össze.



3. ábra. Pontosság

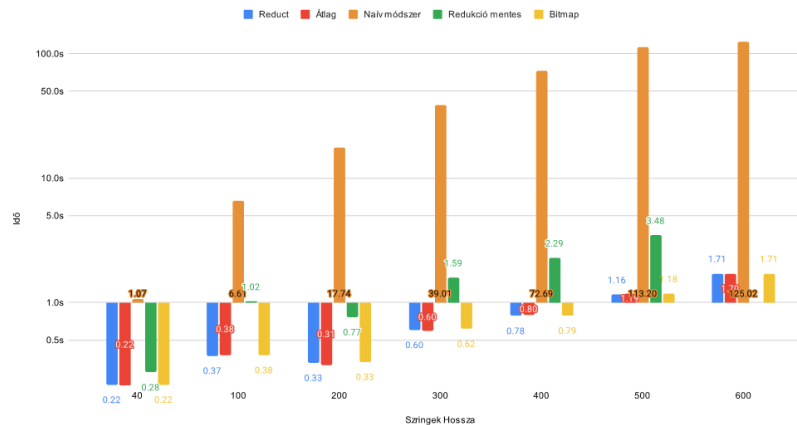
Több ábrán nem látható a reduktiómentes futás a 600 hosszúságú sztringek esetében, ennek oka a videómemóriából való kicsordulás. Látható, hogy a neurális háló pontossága meglehetősen jó. A sztringek hossza nem jelentősen

GPU memória használat



4. ábra. GPU memória használat

Megoldás idő



5. ábra. Megoldási idő

befolyásolja a pontosságot a CNN esetében, még így is viszonylag távol vagyunk a 100%-os pontosságtól, de nagy közelséggel megtalálja a CNN a tandem részsztringet. Erőforrásigény tekintetében a redukcióval sikeresen megfeleztük az erőforrásigényeket az egyes futtatások folyamán és a pontosság nem csökkent. A megoldási idő tekintetében körülbelül 100-as nagyságrendű a különbség. Míg a neurális hálós módszer 1 másodpercet igényelt, a naív módszer 100 környéket.

Az epochok számát tekintve érdemes megemlíteni, hogy a 26. epochnál megállt a tanítás azoknál a futtatásoknál, amelyeknél kilépési feltételt alkalmaztunk.

6. Összegzés

tandem részsstring-keresés egy fontos művelet a biológia, kémia és a folyamatelemzés területén. Ugyan napjainkban a klasszikus illesztésalapú módszerek dominálják a területet, érdekes kérdés, hogy mennyire lehetnek hatékonyak a gépi tanulási módszerek ennél a feladatnál. A cikkben ezen vizsgálat keretében bemutatunk egy javasolt CNN alapú architektúrát a tandem részsstringek feltárására. A kidolgozott módszerrel végzett összehasonlító elemzések azt mutatják, hogy a neurális háló alapú módszerek működőképesek és elsősorban a közelítő keresések esetén bizonyulnak hatékony megoldásnak.

Irodalomjegyzék

- [1] CHEN, J. and LEE, C.: Finding all tandem arrays in dna sequences. In *23rd Workshop on Combinatorial Mathematics and Computation Theory*, 2006.
- [2] DAKIC, D., SLADOJEVIC, S., LOLIC, T., and STEFANOVIC, D.: Process mining possibilities and challenges: a case study. In *IEEE 17th International Symposium on Intelligent Systems and Informatics*, 2019, pp. 161–166, URL <https://doi.org/10.1109/SISY47553.2019.9111591>.
- [3] MAIN, M. and LORENTZ, R.: An $o(n \log n)$ algorithm for finding repetitions in a string. *Journal Algorithms*, **5**, (1984), pp. 422–432.
- [4] AMIR, A., BONEH, I., CHARALAMPOPOULOS, P., and KONDRATOVSKY, E.: Repetition detection in a dynamic string. In *27th Annual European Symposium on Algorithms*, 2019.
- [5] CROCHEMORE, M., ILIOPOULOS, C., KUBICA, M., RADOSZEWSKI, J., RYTTER, W., and WALLEN, T.: Extracting powers and periods in a word from its runs structure. *Theor. Comput. Sci.*, (521), (2014), pp. 29–41, URL <https://doi.org/10.1016/j.tcs.2013.11.018>.
- [6] FUKUSHIMA, K. and MIYAKE, S.: Neocognitron: A self-organizing neural network model for a mechanism of visual pattern recognition. In *Competition and cooperation in neural nets*, pp. 267–285, Springer, 1982, URL https://doi.org/10.1007/978-3-642-46466-9_18.
- [7] FUKUSHIMA, K.: Neocognitron. *Scholarpedia*, **2**(1), URL <http://doi.org/10.4249/scholarpedia.1717>.
- [8] DENKER, J., GARDNER, W., GRAF, H., HENDERSON, D., HOWARD, R., HUBBARD, W., JACKEL, L. D., BAIRD, H., and GUYON, I.: Neural network recognizer for hand-written zip code digits. In *Advances in neural information processing systems*, vol. 1, 1988, pp. 323–331.
- [9] CIRESAN, D. C., MEIER, U., MASCI, J., GAMBARDILLA, L. M., and SCHMIDHUBER, J.: Flexible, high performance convolutional neural networks for

image classification. In *Twenty-second international joint conference on artificial intelligence*, 2011.

- [10] SHARMA, A., VANS, E., SHIGEMIZU, D., BOROEVICH, K. A., and TSUNODA, T.: Deepinsight: A methodology to transform a non-image data to an image for convolution neural network architecture. *Scientific reports*, **9**(1), (2019), pp. 1–7, URL <https://doi.org/10.1038/s41598-019-47765-6>.