

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده برق و کامپیوتر

**بررسی الگوریتم‌های موجود برای مسئله کوتاه ترین ابرتوالی مشترک و ارائه
الگوریتمی بهبود یافته برای آن**

پایان‌نامه کارشناسی ارشد مهندسی کامپیوتر- هوش مصنوعی

فاطمه بحری

استاد راهنما

دکتر سید رسول موسوی



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده برق و کامپیوتر

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی مهندسی کامپیوتر- هوش مصنوعی خانم فاطمه بحری تحت عنوان

بررسی الگوریتم‌های موجود برای مسئله کوتاه ترین ابرتوالی مشترک و ارائه الگوریتمی بهبود
یافته برای آن

در تاریخ ۱۳۸۹/۱۲/۲۵ توسط کمیته‌ی تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

دکتر سید رسول موسوی

۱- استاد راهنمای پایان نامه

دکتر مازیار پالهنگ

۲- استاد داور

دکتر عبدالرضا میرزائی

۳- استاد داور

دکتر سید محمود مدرس هاشمی

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده

نخستین سپاس به پیشگاه حضرت دوست، که هر چه داریم از اوست.

صمیمانه‌ترین سپاس‌ها را تقدیم می‌کنم به همسر مهربانم به خاطر همدلی‌ها، همراهی‌ها و کمک‌های بی دریغش ، به پدر و مادر عزیزم که تا ابد و امداد رحبت‌شان هستم و به برادران بسیار عزیزم، علیرضا و امیرمحمد. از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر موسوی که همواره در مراحل انجام پژوهش از راهنمایی‌های ارزنده ایشان برخوردار بوده‌ام، کمال تشکر و سپاس را دارم.

از اساتید گران‌قدرتی که در دوران تحصیل افتخار شاگردی‌شان را داشته‌ام، به‌ویژه جناب آقای دکتر صدری متشرکرم.

از همه دوستانم که در طول مقطع کارشناسی ارشد در محضرشان بودم و این مدت از زندگیم را به دورانی دوست‌داشتمنی تبدیل کردند، به‌ویژه خانم‌ها مهندس عموزادی، پاکیزه، احمدی، طباطبا، رزاقی، ایمانی، بابائی و رمضانی کمال تشکر را دارم.

و در پایان از همدلی دوستان همیشه همراهم فاطی، مليحه، شکوه، فرزان، نیلوفر، مهناز، مطهره و بهناز سپاس‌گزارم.

کلیهی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،
ابتكارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این
پایان‌نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان
است.

تقدیم به پدر و مادر عزیزتر از جانم
به پاس مهر بی دریغشان

و تقدیم به
مهربانم، همراهم، عزیزم
همسرم

محمد

فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
..... هشت	فهرست مطالب
..... ۱	چکیده
	فصل اول: مقدمه
..... ۲	۱- مقدمه
..... ۳	۲-۱ تعریف مسئله SCS
..... ۴	۳-۱ کاربردهای مسئله SCS
..... ۶	۴-۱ ساختار پایاننامه
	فصل دوم: مروری بر الگوریتم های موجود برای مسئله SCS
..... ۷	۱-۲ مقدمه
..... ۸	۲-۲ الگوریتم های دقیق
..... ۹	۱-۲-۲ الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS با دو رشته ورودی
..... ۱۰	۲-۲-۲ الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS با n رشته ورودی
..... ۱۲	۳-۲ الگوریتم های مکاشفه ای ساده
..... ۱۳	۱-۳-۲ الگوریتم ادغام اکثریت
..... ۱۳	۲-۳-۲ الگوریتم ادغام اکثریت وزن دار
..... ۱۴	۳-۳-۲ الگوریتم ادغام اکثریت آینده نگر
..... ۱۵	۴-۳-۲ الگوریتم های حریصانه و مسابقه
..... ۱۶	۵-۳-۲ الگوریتم PBS
..... ۱۷	۴-۲ الگوریتم های مکاشفه ای مخصوص رشته های DNA
..... ۱۷	۱-۴-۲ الگوریتم کمترین ارتفاع و الگوریتم مجموع ارتفاعات
..... ۱۸	۲-۴-۲ الگوریتم پس پردازش آینده نگر
..... ۱۹	۳-۴-۲ الگوریتم هابل-موریس-وینکلر
..... ۱۹	۵-۲ الگوریتم های فرامکاشفه ای
..... ۱۹	۱-۵-۲ الگوریتم ژنتیک بر مبنای مکاشفه
..... ۲۰	۲-۵-۲ الگوریتم ژنتیک چند هدفه
..... ۲۰	۳-۵-۲ الگوریتم ممتیک
..... ۲۱	۴-۵-۲ POEMS
..... ۲۳	۵-۵-۲ الگوریتم گروه مورچه ها
..... ۲۳	۶-۵-۲ روش های تکاملی جرمیه کننده و اصلاح کننده
..... ۲۴	۷-۵-۲ الگوریتم ترکیبی MA-BS
..... ۲۶	۶-۲ الگوریتم های تقریبی
..... ۲۶	۱-۶-۲ الگوریتم الفبا
..... ۲۶	۲-۶-۲ الگوریتم تقریبی A*
..... ۲۷	۳-۶-۲ الگوریتم کاهش-بسط
..... ۳۰	۴-۶-۲ الگوریتم DR
..... ۳۱	۷-۲ نتیجه گیری
	فصل سوم: الگوریتم دقیق * پیشنهادی

۳۲	۱-۳ مقدمه.....
۳۳	۲-۳ الگوریتم جستجوی سطحی.....
۳۴	۱-۲-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد در الگوریتم جستجوی سطحی.....
۳۶	۲-۲-۳ استفاده از هرس غالبانه در الگوریتم جستجوی سطحی.....
۳۷	۳-۲-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد و هرس غالبانه در الگوریتم جستجوی سطحی.....
۳۸	۳-۳ الگوریتم جستجوی عمقی.....
۳۹	۱-۳-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد در الگوریتم جستجوی عمقی.....
۴۰	۲-۳-۳ استفاده از هرس غالبانه در الگوریتم جستجوی عمقی.....
۴۱	۳-۳-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد و هرس غالبانه در الگوریتم جستجوی عمقی.....
۴۲	۴-۳ الگوریتم A^*
۴۳	۱-۴-۳ توابع تخمین مکاشفه ای استفاده شده.....
۴۶	۲-۴-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد در الگوریتم A^*
۴۷	۳-۴-۳ استفاده از هرس غالبانه در الگوریتم A^*
۴۸	۴-۴-۳ استفاده از راهبرد شاخه و حد و هرس غالبانه در الگوریتم A^*
۴۹	۵-۳ نتیجه گیری.....
	فصل چهارم: الگوریتم مکاشفه ای پیشنهادی و رویه پس پردازش ارائه شده
۵۰	۱-۴ مقدمه.....
۵۱	۲-۴ الگوریتم IBS-SCS.....
۵۲	۱-۲-۴ شرح قدم به قدم الگوریتم IBS-SCS.....
۵۳	۲-۲-۴ مکاشفه پیشنهادی.....
۵۶	۳-۲-۴ بررسی پیچیدگی زمانی الگوریتم.....
۵۷	۳-۴ رویه پس پردازش.....
۵۷	۱-۳-۴ رویه کاهش الگوریتم DR.....
۵۹	۲-۳-۴ رویه پس پردازش پیشنهادی.....
۶۰	۳-۳-۴ تفاوت های رویه پس پردازش پیشنهادی و رویه کاهش DR.....
۶۰	۴-۴ نتیجه گیری.....
	فصل پنجم: ارزیابی نتایج
۶۲	۱-۵ مقدمه.....
۶۳	۲-۵ نتایج الگوریتم A^* ارائه شده.....
۶۴	۱-۲-۵ مقایسه نسخه های مختلف الگوریتم جستجوی سطحی.....
۶۶	۲-۲-۵ مقایسه نسخه های مختلف الگوریتم جستجوی عمقی.....
۶۷	۳-۲-۵ مقایسه نسخه های مختلف ارائه شده الگوریتم A^*
۷۲	۴-۲-۵ مقایسه الگوریتم A^* پیشنهادی با الگوریتم های جستجوی سطحی و جستجوی عمقی.....
۷۵	۵-۲-۵ مقایسه الگوریتم A^* پیشنهادی با الگوریتم برنامه نویسی پویا.....
۷۵	۳-۵ نتایج الگوریتم IBS-SCS.....
۷۶	۱-۳-۵ مقایسه الگوریتم IBS-SCS با الگوریتم DR. نه.....
۸۳	۲-۳-۵ مقایسه الگوریتم IBS-SCS با الگوریتم های MA-BS و PBS و
۸۷	۴-۵ نتایج رویه پس پردازش پیشنهاد شده.....
۸۸	۱-۴-۵ مقایسه نتایج بر روی مجموعه داده تصادفی.....
۸۹	۲-۴-۵ مقایسه نتایج بر روی مجموعه داده واقعی.....
۹۰	۵-۵ نتیجه گیری.....

فصل ششم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۹۱.....	۱-۶ نتیجه گیری
۹۲.....	۲-۶ راهکارهای آینده
۹۱.....	مراجع

چکیده

مسئله کوتاهترین ابرتوالی مشترک (SCS) از مسائل مهم بهینه‌سازی ترکیبیاتی است. مجموعه‌ای از رشته‌ها به عنوان ورودی به مسئله SCS داده می‌شود و این مسئله به دنبال رشته ای می‌گردد که ابرتوالی تمام رشته‌ها بوده و دارای کوتاهترین طول ممکن باشد. ابرتوالی یک رشته، از درج صفر یا تعداد بیشتری نماد در هر مکان از رشته مورد نظر به دست می‌آید. این مسئله در زمینه‌های مختلفی از جمله فشرده‌سازی داده، بهینه‌سازی پرسش در پایگاه داده‌ها، طرح‌ریزی و زیست‌اطلاعات کاربرد دارد. یکی از کاربردهای مهم این مسئله در زیست‌اطلاعات، کاهش زمان، هزینه و خطا در ساخت یکی از انواع ریزآرایه‌های DNA می‌باشد. ریزآرایه‌های DNA ابزارهای مفیدی هستند که در دسته بندی ژن‌ها، تشخیص ژن‌ها، تصویر سازی بیان ژنی و آشکارسازی SNP، کاربرد دارند.

تا به حال الگوریتم‌های دقیق برنامه‌نویسی پویا و شاخه‌وحدت برای حل مسئله SCS ارائه شده‌اند، اما این مسئله هنگامی که تعداد رشته‌ها بیشتر از ۲ باشد یک مسئله NP-Hard می‌باشد، بنابراین تاکنون راه حل بهینه ای که در زمان چندجمله‌ای قابل اجرا باشد برای آن ارائه نشده است و در عمل الگوریتم‌های دقیق برای نمونه‌های بزرگ این مسئله قابل اجرا نیستند. به همین دلیل، اکثر الگوریتم‌های موجود برای حل این مسئله غیر دقیق می‌باشند، بدین معنی که این الگوریتم‌ها از شرط بهینگی پاسخ چشم‌پوشی کرده و سعی می‌کنند که جوابی نزدیک به بهینه در زمانی معقول به دست آورند. تا به حال الگوریتم‌های غیردقیق مختلفی از انواع الگوریتم‌های تقریبی، مکاشفه‌ای ساده و فرامکاشفه‌ای برای مسئله SCS ارائه شده‌اند. الگوریتم‌های تقریبی الگوریتم‌هایی هستند که جواب حاصل از آنها نسبت به جواب بهینه از حدی که با نسبت تقریب مشخص می‌شود، بدتر نمی‌باشد. الگوریتم‌های مکاشفه‌ای ساده و فرامکاشفه‌ای تقسیم می‌شوند. برای حل مسئله کوتاهترین ابرتوالی مشترک تا به حال از الگوریتم‌های مکاشفه‌ای ساده و فرامکاشفه‌ای مختلفی استفاده شده است. تعدادی از این الگوریتم‌های مکاشفه‌ای به طور خاص برای رشته‌های DNA طراحی شده‌اند.

در این پایان نامه یک الگوریتم دقیق^{*} ارائه شده و برای آن توابع مکاشفه‌ای مختلفی بررسی شده است و در نهایت یکتابع مکاشفه‌ای ترکیبی ارائه شده که با تخمین حدی دقیق‌تر، از سایر توابع مکاشفه‌ای بهتر عمل می‌کند. در این الگوریتم برای کاهش فضای جستجو و در نتیجه کاهش زمان اجرا از راهبرد شاخه و حد و همچنین ایده هرس غالبانه استفاده شده است. با مقایسه این الگوریتم با دیگر الگوریتم‌های دقیق موجود، مشخص شد که الگوریتم ارائه شده منجر به کاهش قابل ملاحظه‌ای در فضای جستجو شده و دارای زمان اجرای بهتری می‌باشد.

همچنین یک الگوریتم مکاشفه‌ای به همراه یک رویه پس پردازش در این پایان نامه ارائه شده است. این الگوریتم مکاشفه‌ای یک الگوریتم جستجوی پرتوی محلی است که مکاشفه‌ای می‌تنی بر روابط بازگشتی را به کار گرفته و با استفاده از برنامه‌نویسی پویا یک آرایه از مقادیر احتمالاتی به صورت برنامه‌نویسی پویا تولید می‌کند که برای محاسبه سریع‌تر مقادیر مکاشفه‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد. همچنین این الگوریتم با استفاده از ایده هرس غالبانه فضای جستجو را هرس می‌کند. این الگوریتم با سه الگوریتم برتر اخیر بر روی رشته‌های تصادفی و واقعی مقایسه شده و نتایجی بهتر هم از نظر زمان اجرا و هم طول جواب به دست آورده است. رویه پس پردازش ارائه شده را نیز می‌توان بر روی هر پاسخ غیر بهینه از یک نمونه مسئله SCS، اجرا کرد. این رویه با کاهش طول جواب موجود در حلقه‌ای تکرارشونده، جواب کوتاهتری که همچنان ابرتوالی مشترک رشته‌های ورودی می‌باشد، ارائه می‌کند. نتایج به دست آمده مشخص می‌کند که این رویه پس پردازش نسبت به رویه پس پردازش موجود، در زمان اجرای یکسان، دارای کیفیت جواب بهتری می‌باشد.

کلمات کلیدی: ۱- کوتاهترین ابرتوالی مشترک ۲- الگوریتم‌های مکاشفه‌ای ۳- الگوریتم^{*} A ۴- جستجوی پرنوی محلی

فصل اول

مقدمه

مسئله کوتاه ترین ابر توالی مشترک^۱ (SCS) از جمله مسائل مهم بهینه سازی ترکیباتی^۲ است. این مسئله باستی کوتاه ترین رشته ای را بیابد که ابرتوالی هر کدام از رشته های ورودی باشد. ابرتوالی رشته x رشته ای است که با اضافه کردن صفر یا تعداد بیشتری نماد، در هر مکان دلخواه از رشته x به دست می آید. برای مثال کوتاه ترین ابرتوالی مشترک سه رشته $GATTG$, $CGATG$ و $TCGCA$, رشته $TCGCATTGC$ می باشد.

مسئله SCS برای ۲ رشته ورودی در زمان چند جمله ای به صورت بهینه [۱] حل می شود، اما هنگامی که تعداد رشته های ورودی بیشتر از ۲ باشد، این مسئله NP-Hard می باشد [۴-۲]. این مسئله حتی در حالت های محدودشده ای که اندازه الفبا ۲ می باشد و یا طول همه رشته ها ۲ می باشد، نیز NP-Hard باقی می ماند [۷-۲]. تا به حال الگوریتم های بهینه ای که برای مسائل NP-Hard ارائه شده اند، بر حسب اندازه ورودی مسئله، دارای زمان اجرایی نمایی می باشند [۸] که این موضوع در مورد مسئله SCS نیز صادق است. الگوریتم های دقیقی که تا به حال برای مسئله SCS ارائه شده اند، الگوریتم برنامه نویسی پویا [۹, ۴] و الگوریتم های شاخه و حد، می باشند. برای حل این مسئله، الگوریتم های غیر دقیق متعددی از انواع تقریبی، مکاشفه ای ساده و فرامکاشفه ای ارائه شده است که در فصل دوم به تفصیل، مورد مطالعه قرار می گیرند.

¹ Shortest Common Supersequence

² Combinatorial optimization

۲-۱ تعریف مسئله SCS

اگر s یک رشته باشد، طول آن با $|s| = m$ نمایش داده می شود. $(k:s)$ برای نمایش k امین نماد رشته s استفاده می شود، که k مقداری بین ۱ و m می باشد. رشته ای که از نماد j ام تا k ام رشته s به دست می آید به طوری که $s(j:k) \leq j$ ، با نماد $(j:k:s)$ نمایش داده می شود، بنابراین برای نمایش رشته شامل k نماد ابتدایی s ، از نماد $(1:k:s)$ استفاده می شود. برای نمایش الحق دو رشته از نماد $+s$ استفاده می شود، برای مثال رشته x از الحق دو رشته x_1 و x_2 به دست می آید: $x = x_1 + x_2$.

فرض کنیم s_1 و s_2 دو رشته باشند و $A_1 = \{i \mid i \in N, i \leq |s_1|\}$ و $A_2 = \{i \mid i \in N, i \leq |s_2|\}$ که مجموعه اعداد صحیح بزرگتر از صفر است. رشته s_2 ابرتوالی رشته s_1 است یا به بیان نمادین $s_2 \prec s_1$ ، اگر یک تابع یک به یک همانند g از A_1 به A_2 وجود داشته باشد به طوری که:

$$\begin{aligned} \forall k \in A_1, s_1(k) &= s_2(g(k)) \\ \forall k, k' \in A_1, k < k' &\Rightarrow g(k) < g(k') \end{aligned} \quad 1-1$$

تابع g لزوماً یکتا نیست و احتمال دارد چندین تابع که این شرط را برآورده کند، وجود داشته باشد. هر رشته، ابرتوالی رشته تهی - که رشته ای به طول صفر است - محسوب می شود. همچنین در صورتی که رشته s_2 ابرتوالی رشته s_1 باشد، می توان گفت که رشته s_1 زیرتوالی رشته s_2 می باشد.

فرض می شود که x یک رشته و S یک مجموعه غیر تهی از رشته ها می باشد. اگر $x \prec S$ ، $\forall s_i \in S, s_i \prec x$ آن گاه x ابرتوالی مجموعه رشته S است یا به بیانی نمادین $x \prec S$. مسئله کوچکترین ابرتوالی مشترک به این صورت تعریف می شود؛ با توجه به یک مجموعه رشته S داده شده، باید رشته x با طول کمینه یافته شود به طوری که $x \prec S$. اگر تنها یک رشته به عنوان ورودی داده شود، منظور این است که S دارای فقط یک رشته است. الفبایی که رشته های ورودی بر روی آن تعریف شده اند با \sum نمایش داده می شود؛ فرض می کنیم که $\sum |s_i| = n$. از n برای نمایش تعداد رشته های ورودی استفاده می کنیم، به عبارتی دیگر $|S| = n$. از آنجایی که برای $n=2$ مسئله SCS در زمان خطی حل می شود، فرض می کنیم که $n > 2$ می باشد.

هر کدام از رشته های ورودی مسئله را با حرف s کوچک نشان می دهیم که با زیرنویس ۱ تا n مشخص شده اند یعنی $\{s_1, \dots, s_n\} = S$. از نماد m_i برای نمایش طول s_i استفاده می شود یعنی $|s_i| = m_i$. فرض می شود که $m_i > 0, i = 1, \dots, n$ یعنی هر رشته ورودی حداقل شامل یک نماد می باشد. نماد m نشان دهنده مقدار بیشینه طول رشته های ورودی است یا به عبارتی $m = \max\{m_i, i = 1, \dots, n\}$. از نماد x (شاید همراه با زیرنویس) برای نمایش یک جواب نامزد^۱ استفاده می شود. جواب نامزد x ، جواب نهایی^۱ نامیده می شود

¹ Candidate solution

اگر x ابرتوالی تمام رشته های ورودی باشد، در غیر این صورت جواب جزئی^۳ نامیده می شود. یک جواب نامزد نهایی در صورتی بهینه است که هیچ جواب نامزد نهایی دیگری با طولی کوتاه تر وجود نداشته باشد.

اگر x یک جواب نامزد جزئی باشد، $p_i(x)$ نشان دهنده ماکریم عدد صحیح ممکن k است به طوری که $x \prec s_i(1:k)$ ، به بیانی دیگر $s_i(1:k)$ نشان دهنده بلندترین زیررشته از ابتدای رشته s_i است که توسط x پوشش داده شده است و $p_i(x)$ نشانگر طول این رشته است. رشته ای که از حذف کردن $p_i(x)$ کاراکتر اول رشته s_i به دست می آید، $r_i(x)$ یا به عبارتی دیگر باقیمانده رشته s_i نامیده می شود. $R(x)$ مجموعه تمام باقیمانده های رشته های ورودی است، یعنی $\{r_i(x), i=1,\dots,n\}$. شکل ۱-۱ مثالی برای مشخص شدن نماد $p_i(x)$ و $r_i(x)$ ارائه می کند.

$x = b c a b$		
$s_1 = b c a \underbrace{d c f d c}_{r_1(x)}$	$s_2 = c a b \underbrace{a a f d c}_{r_2(x)}$	$s_3 = b a \underbrace{c d d f c d}_{r_3(x)}$
$p_1(x) = 3$	$p_2(x) = 3$	$p_3(x) = 2$

شکل ۱-۱- مثالی از $p_i(x)$ و $r_i(x)$ برای جواب جزئی x و سه رشته ورودی s_1 و s_2 و s_3

۳-۱ کاربردهای مسئله SCS

مسئله SCS در زمینه های مختلفی از جمله فشرده سازی داده^۴ [۱۰]، بهینه سازی پرسش^۵ در پایگاه داده ها [۱۱، ۱۲]، طرح ریزی^۶ [۱۳] و زیست اطلاعات^۷ [۱۴-۱۸] کاربرد دارد. زیست اطلاعات، شاخه ای از علم است که دو شاخه ای علوم کامپیوتر و زیست شناسی را به یکدیگر متصل می کند. یکی از کاربردهای این مسئله در زمینه زیست اطلاعات، مربوط به تولید نوعی ریزآرایه DNA^۸ می باشد. ریزآرایه های DNA شامل هزاران مکان هستند، که هر کدام از آن ها حاوی تعداد زیادی از یک توالی خاص DNA است و در دسته بندی ژن ها^۹، تصویر سازی بیان ژنی^{۱۰}، آشکارسازی SNP^{۱۱}، تشخیص ژن ها^{۱۲} و تشخیص بیماری ها کاربرد دارند [۱۹، ۲۰]. ریزآرایه

¹ Final solution

² Partial solution

³ Data compression

⁴ Query optimization

⁵ Planning

⁶ Bioinformatics

⁷ DNA microarray

⁸ Gene clustering

⁹ Gene expression profiling

¹⁰ Single Nucleotide Polymorphism detection

¹¹ Gene identification

های DNA، به دو نوع ریزآرایه cDNA و ریزآرایه اولیگونوکلئوتید^۱ تقسیم می شوند. ریزآرایه های اولیگونوکلئوتید هزینه ساخت بیشتری دارند، اما در آن ها پیوند متقطع^۲ کمتر رخ می دهد [۲۱] و به همین دلیل دقیق تر می باشند. این نوع ریزآرایه برای تشخیص چندریختی^۳ می تواند به کار رود [۱۹]. ریزآرایه های اولیگونوکلئوتید معمولاً به روش لیتوگرافی نوری^۴ تولید می شوند [۲۲]. در این روش، در هر قدم، یک نوکلئوتید به بعضی از مکان های ریزآرایه اضافه می شود و به انتهای توالی آن مکان، الحاق می شود. نوکلئوتید واحد سازنده اسیدهای نوکلئیک می باشد و بنا به نوعش با یکی از نمادهای^۵ A, C^۶, G^۷ یا T^۸ نمایش داده می شود. برای اضافه کردن نوکلئوتید در هر دور، یک نقاب^۹ برای محافظت از مکان هایی از ریزآرایه که نبایستی اشعه فرابنفش را دریافت کنند، استفاده می شود. اشعه فرابنفش در مکان های بدون نقاب نفوذ کرده و اولیگونوکلئوتید را در آنجا فعال می کند [۱۹]. هزینه ساخت نقاب های مورد استفاده در این روش بالا می باشد و بنابراین کاهش مراحل تولید ریزآرایه، به کاهش هزینه ساخت و البته کاهش زمان مورد نیاز برای ساخت ریزآرایه منجر می شود. به دلیل این که پوشاندن مکان های ریزآرایه با نقاب، بدون خطا نمی باشد، با کاهش مراحل می توان به کاهش خطا در ساخت ریزآرایه نیز کمک کرد. مسئله یافتن کمترین مراحل مورد نیاز برای ساخت ریزآرایه ای از تعدادی توالی DNA را می توان با مسئله SCS مدل کرد، به این صورت که هر توالی DNA به عنوان یک رشته ورودی در نظر گرفته شود. کوتاه ترین ابر توالی مشترک این رشته ها، ترتیب اضافه کردن نوکلئوتیدها را (که منجر به کمترین مراحل ساخت می شود) نمایش می دهد. بنابراین استفاده از مسئله SCS موجب کاهش هزینه، زمان و خطا در ساخت ریزآرایه های اولیگونوکلئوتید می شود [۱۵-۱۷].

به عنوان مثالی دیگر از کاربرد SCS می توان به طراحی خط تولیدی که در آن قطعات مختلفی تولید می شوند، اشاره کرد. برای تولید یک قطعه لازم است دنباله ای از عمل ها که به نوع آن قطعه بستگی دارد بر روی آن صورت بگیرد. خط تولید نیز بایستی به صورت دنباله ای از دستگاه ها طراحی شود، که هر دستگاه قابلیت انجام فقط یک عمل را بر روی قطعه ها دارد. این مسئله با استفاده از مسئله SCS مدل می شود، به این صورت که دنباله عملیات مورد نیاز برای هر قطعه، یک رشته ورودی در نظر گرفته می شود و کوتاه ترین ابر توالی

¹ Oligonucleotide

² Cross hybridization

³ Polymorphism

⁴ Photolithography

⁵ Adenine

⁶ Cytosine

⁷ Guanine

⁸ Thymine

⁹ Mask

مشترک این رشته‌ها، کوتاه‌ترین دنباله از دستگاه ها را مشخص می کند که تمام قطعات با این دنباله از دستگاه ها می توانند تولید شوند.

۴-۱ ساختار پایان‌نامه

در این تحقیق، یک الگوریتم دقیق A^* پیشنهاد شده است و به منظور هرس فضای جستجو و کاهش زمان اجرا، در آن از راهبرد شاخه و حد و نیز هرس غالبانه^۱ استفاده شده است. در این الگوریتم از توابع مکاشفه ای مختلفی استفاده شده است و در نهایت یک تابع مکاشفه ای ترکیبی ارائه شده است که نسبت به بقیه توابع مکاشفه ای نتایج بهتری به دست می آورد. الگوریتم A^* مطرح شده، نسبت به سایر الگوریتم های دقیق از جمله برنامه نویسی پویا دارای زمان اجرای بهتری می باشد.

همچنین در تحقیق ارائه شده، یک الگوریتم غیر دقیق مکاشفه ای به نام IBS-SCS برای مسئله ارائه شده است. الگوریتم IBS-SCS یک الگوریتم جستجوی پرتوی محلی^۲ می باشد که از مکاشفه ای جدید مبتنی بر روابط بازگشتی و نیز هرس غالبانه برای کاهش فضای جستجو استفاده می کند. این الگوریتم در مقایسه با بهترین الگوریتم های غیر دقیق برای SCS (که الگوریتم های DR [۲۳]، PBS [۲۴] و MA-BS [۲۵] می باشند) نتایج بهتری در مدت زمان اجرای کمتر به دست می آورد. همچنین یک رویه پس پردازش پیشنهاد شده است که با اجرای این رویه پس پردازش بر روی جواب به دست آمده از هر الگوریتم غیر دقیق حل SCS، جواب کوتاه تری به دست می آید. رویه پس پردازش پیشنهاد شده از مرحله کاهش در الگوریتم DR [۲۳] الهام گرفته شده است و نسبت به آن در زمان اجرای یکسان، نتایج بهتری کسب می کند.

ساختار این پایان نامه بدین ترتیب است: در فصل دوم مروری بر الگوریتم هایی که تا به حال برای مسئله SCS ارائه شده اند، صورت می گیرد. سپس در فصل سوم الگوریتم A^* پیشنهادی ارائه می گردد. الگوریتم مکاشفه ای IBS-SCS و رویه پس پردازش پیشنهادی در فصل چهارم به تفصیل بیان می گردند. در فصل پنجم ابتدا نتایج الگوریتم A^* با الگوریتم های دقیق پیاده سازی شده مقایسه شده، سپس نتایج الگوریتم IBS-SCS با بهترین الگوریتم های موجود مقایسه شده و در پایان مقایسه ای بین نتایج رویه پس پردازش پیشنهادی و رویه کاهش الگوریتم DR صورت می گیرد. در فصل ششم نیز جمع بندی این تحقیق و پیشنهاداتی برای آینده ارائه می شود.

¹ Dominance pruning

² Local Beam Search

فصل دوم

مرواری بر الگوریتم های موجود برای مسئله SCS

الگوریتم های موجود برای مسئله SCS را می توان به دو دسته دقیق و غیر دقیق تقسیم کرد، که در این فصل مورد مطالعه قرار می گیرند. الگوریتم های دقیق، الگوریتم هایی هستند که مساله را به صورت دقیق حل کرده و پاسخ بهینه مسئله را می یابند. این الگوریتم ها بر روی نمونه های بزرگ از مسائل NP-Hard، قابل اجرا نمی باشند. به همین علت الگوریتم های دقیق برای مسئله SCS به ندرت مورد بررسی قرار گرفته اند. در بخش ۲-۲، این الگوریتم های دقیق مطالعه می شوند.

الگوریتم های غیردقیق با برداشتن شرط بهینگی، در زمان نسبتا مناسب، جوابی نزدیک به بهینه به دست می آورند. الگوریتم های غیردقیق دو دسته هستند. دسته اول الگوریتم های تقریبی می باشند. این الگوریتم ها، تضمین می کنند که جواب آنها نسبت به جواب بهینه از حدی که نسبت تقریب^۱ نام دارد، بدتر نیست. الگوریتم های تقریبی ارائه شده برای مسئله SCS در بخش ۶-۲ مورد مطالعه قرار می گیرند. دسته دوم، الگوریتم های مکاشفه ای نام دارند. این الگوریتم ها، هیچ نسبت تقریبی را تضمین نمی کنند، اما معمولاً جواب های خوبی در زمانی مناسب به دست می آورند. الگوریتم های مکاشفه ای به دو دسته مکاشفه ای ساده و فرا مکاشفه ای تقسیم می شوند. الگوریتم های مکاشفه ای ساده معمولاً از یک تابع حریصانه^۲ استفاده می کنند و با نام حریصانه نیز شناخته

¹ Approximation ratio

² Greedy

می‌شوند. تا به حال تعدادی الگوریتم مکاشفه ای ساده برای مسئله SCS ارائه شده است، که از آن جمله می‌توان به الگوریتم‌های مکاشفه ای ساده ای که برای رشته‌های DNA طراحی شده اند، اشاره کرد. این الگوریتم‌های مکاشفه ای ساده و مکاشفه ای مخصوص رشته‌های DNA به ترتیب در بخش‌های ۳-۲ و ۴-۲، مورد بررسی قرار گرفته‌اند. الگوریتم‌های فرامکاشفه‌ای روش‌های محاسباتی سطح بالایی هستند که به صورت تکراری سعی در بهبود جواب مسئله دارند، ولی یافتن جواب بهینه را تضمین نمی‌کنند. این الگوریتم‌ها در بخش ۵-۲ تشریح شده‌اند.

علاوه بر نسخه اصلی مسئله SCS، تا به حال نسخه‌های خاص از مسئله SCS نیز مورد توجه قرار گرفته‌اند. در [۲۶] برای دو نسخه خاص از مسئله SCS، الگوریتم‌های تقریبی ارائه شده است. در نسخه اول، فرض شده است که تمام رشته‌ها دارای طول ۲ می‌باشند. در نسخه دوم نه تنها فرض شده است همه رشته‌ها دارای طول ۲ می‌باشند، بلکه هر نماد از الفبا در Σ (مجموعه رشته‌های ورودی) حداقل ۳ بار تکرار شده است و برای آن یک الگوریتم با نسبت تقریب $7/6$ ارائه شده است. در [۲۷] نیز حالت محدود شده مسئله SCS که همه رشته‌ها دارای طول ۲ می‌باشند، مورد بررسی قرار گرفته است.

۲-۲ الگوریتم‌های دقیق

در [۴] الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS بیان شده است. همچنین در [۹] به بررسی راه حل‌های دقیق مسئله SCS با استفاده از الگوریتم برنامه نویسی پویا و الگوریتم‌های شاخه و حد پرداخته شده است. الگوریتم‌های برنامه نویسی پویا فقط بر روی تعداد کمی رشته داده شده موفق عمل می‌کنند و در صورت زیاد شدن تعداد رشته‌ها، زمان و فضای حافظه بسیار زیادی نیاز دارند. کوتاه‌ترین ابرتوالی مشترک دو رشته با طول m توسط برنامه نویسی پویا با پیچیدگی زمانی و مکانی $O(m^2)$ محاسبه می‌شود. این الگوریتم مسئله‌ای با n رشته با طول m را با پیچیدگی زمانی و مکانی $O(m^n)$ محاسبه می‌کند [۴]. الگوریتم‌های شاخه و حد نیز به زمان زیادی برای محاسبه جواب بهینه نیاز دارند، مگر آن که اندازه الفبا بسیار کوچک باشد [۹]. در این بخش، ابتدا الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS با دو رشته ورودی و سپس این الگوریتم برای حل مسئله SCS با n رشته ورودی بر اساس [۴] تشریح می‌شود.

۱-۲-۱ الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS با دو رشته ورودی

کوتاه ترین ابر توالی مشترک دو رشته x و y توسط برنامه نویسی پویا، در زمان چند جمله‌ای به دست می‌آید. در صورتی که $(j : length(i, j))$ نشان دهنده طول کوتاه ترین ابر توالی مشترک دو رشته $x(1 : i)$ و $y(1 : j)$ باشد، رابطه بازگشتی ۱-۲ زیر برای یافتن کوتاه ترین ابر توالی مشترک دو رشته x و y به کار می‌رود [۴].

$$length(i, j) = \begin{cases} j & \text{if } i = 0 \\ i & \text{if } j = 0 \\ length(i-1, j-1) + 1 & \text{if } i, j > 0, x(i) = y(j) \\ \min\{length(i, j-1) + 1, length(i-1, j) + 1\} & \text{if } i, j > 0, x(i) \neq y(j) \end{cases} \quad 1-2$$

شبه کدهای ۱-۲ و ۲-۲ طریقه یافتن کوتاه ترین ابر توالی مشترک دو رشته x و y را به وسیله رابطه

بازگشتی فوق نشان می‌دهد.

```
find-SCS(x,y)
{
    for(i=0:|x|)
        length(i,0)=i
    for(j=0:|y|)
        length(j,0)=j
    for(i=1:|x|)
        for(j=1:|y|)
            {
                if(x(i)==y(j))
                    {
                        length(i,j)=length(i-1,j-1)+1
                        Previous(i,j)=1
                    }
                else
                    {
                        if(length(i,j-1)<length(i-1,j))
                            {
                                length(i,j)=length(i,j-1)+1
                                Previous(i,j)=2
                            }
                        else
                            {
                                length(i,j)=length(i-1,j)+1
                                Previous(i,j)=3
                            }
                    }
            }
    back-tracking(|x|,|y|)
}
```

شبه کد ۱-۲ - تابع find-SCS برای یافتن SCS دو رشته x و y با برنامه نویسی پویا [۴]

در تابع find-SCS به وسیله برنامه نویسی پویا، طول ابر توالی مشترک x و y در ماتریس $length$ ذخیره می‌شود. البته ماتریس دیگری به نام $previous$ هم با اندازه ماتریس $length$ در نظر گرفته شده است. در عنصر $previous(i, j)$ مشخص می‌شود که برای به دست آوردن $length(i, j)$ ، از کدام یک از عناصر $length(i, j-1)$ و $length(i-1, j)$ استفاده شده است. در پایان که تمام عناصر ماتریس $length$ محاسبه شد، تابع back-tracking با پارامترهای $|x|$ و $|y|$ فرا خوانده می‌شود.

back-tracking(i,j)

```
{
    if(i==0&j==0)
        return SCS;
    If(i==0)
    {
        SCS=y(0:j)+SCS
        return SCS
    }
}
```

شبه کد ۲-۲ - تابع back-tracking برای به دست آوردن SCS با استفاده از ماتریس previous [۴]

```

If(j==0)
{
    SCS=x(0:i)+SCS
    return SCS
}
switch(previous(i,j))
{
    case1:
    {
        SCS=x(i)+SCS // or SCS=y(j)+SCS
        back-tracking(i-1,j-1)
    }
    case2:
    {
        SCS=y(j)+SCS
        back-tracking(i,j-1)
    }
    case3:
    {
        SCS=x(i)+SCS
        back-tracking(i-1,j)
    }
}
}
```

ادامه شبه کد ۲-۲ - تابع back-tracking برای به دست آوردن SCS با استفاده از ماتریس previous [۴]

تابع *back-tracking* یک تابع بازگشتی است که رشته ابرتوالی x و y را با استفاده از مقادیر ماتریس *previous*، به دست می آورد. با توجه به مقدار $previous(i, j)$ ، در فراخوانی $back-tracking(i, j)$ نماد $x(i)$ و یا $y(j)$ به SCS اضافه شده و تابع $back-tracking$ با پارامترهای جدید فراخوانی می شود. هنگامی که j برابر با صفر شود، SCS ابرتوالی رشته y است، بنابراین قسمت باقیمانده از رشته x به SCS الحاق می شود یعنی $SCS = x(0 : i) + SCS$ و مقدار $SCS = y(0 : j) + SCS$ بازگردانده می شود. همین طور هنگامی که i برابر با صفر شود، SCS ابرتوالی رشته x است، بنابراین قسمت باقیمانده از رشته y به SCS الحاق می شود یعنی $SCS = y(0 : j) + SCS$ و مقدار $SCS = y(0 : j)$ بازگردانده می شود. در صورتی که i و j هر دو برابر صفر باشند، ابرتوالی هر دو رشته x و y می باشد و بازگردانده می شود. در بخش بعدی، یافتن ابرتوالی n رشته با روش برنامه نویسی پویا بیان می شود.

۲-۲-۲ الگوریتم برنامه نویسی پویا برای حل مسئله SCS با n رشته ورودی

در [۴] به صورت خلاصه، یافتن ابرتوالی مشترک n رشته با روش برنامه نویسی پویا بیان شده است که در اینجا تشریح می شود. ابتدا بعضی تعاریف و نمادها بیان می شود. فرض می شود که هر یک از رشته های s_i