

Alignement de séquences

1. Présentation du sujet

On dispose de deux chaînes de caractères : A , qui vaut `INFORMATIQUE`, et B , qui vaut `NUMERIQUE`. On aimerait mettre ces deux chaînes de caractères en correspondance de la manière suivante :

- On place les 2 chaînes l'une en dessous de l'autre ;
- Si les premiers caractères des deux chaînes coïncident, alors on passe aux caractères suivants ;
- Sinon, on va ajouter un trou dans une des deux chaînes, symbolisé par un - et on passe aux caractères suivants.

Voici un exemple d'alignement optimal :



Dans cette situation on a besoin de 9 tirets, pas moins.

L'objectif est d'aligner le maximum de lettres (donc de mettre le moins de - possible). Ce n'est pas un problème simple, surtout quand les chaînes sont longues, comme pour les séquences d'ADN par exemple :

```
TTCACCAGAAAAG- -ACACGGTAGTTA-CGAG- -TCCAATATT-GTTAA- - -ACC- -G
TTCA- C- GAAAA- AGTA-ACGG- -G- - -CCGA-TCTCCAATA- -AG- T- -GCGACCGAG
```

2. Résolution par une méthode récursive

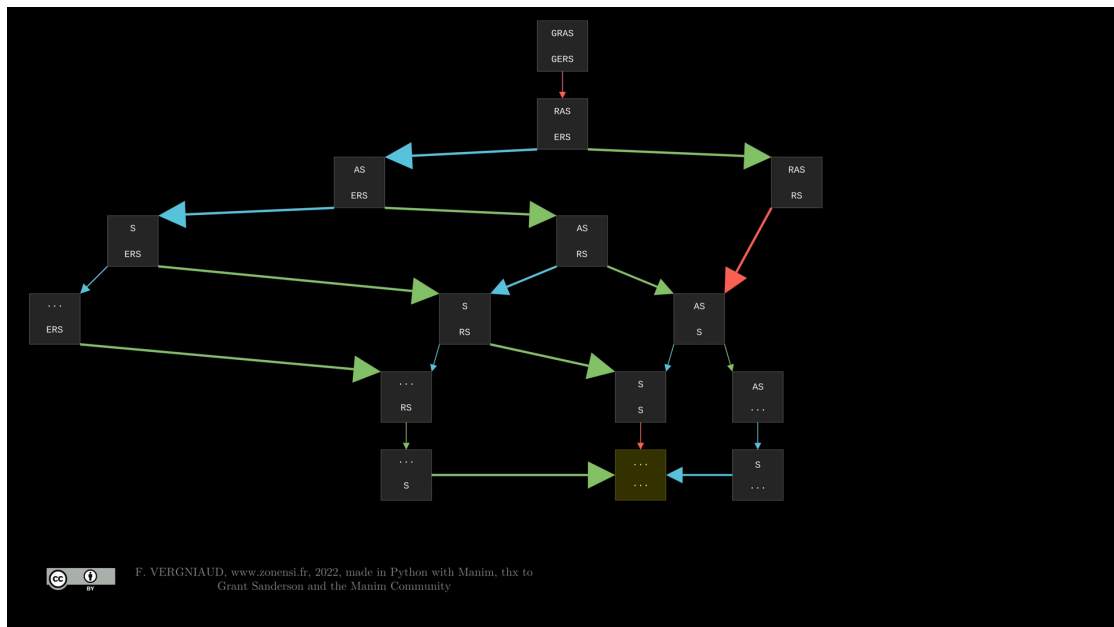
2.1. Principes

Le principe est présenté dans la vidéo suivante :

Pour les mots GRAS et GERS, l'arbre obtenu est le suivant :



Après application d'une méthode dynamique (**Top Down**) (c'est-à-dire récursive avec mémoïsation), on obtient le graphe suivant :



2.2. Code Python

? Code sans memoization

Compléter le code de la fonction suivante :

```
def align_seq_rec(a : str, b : str) -> tuple:
    """ renvoie un alignement optimal pour les chaines a t b
    sous la forme d'un tuple dont :
    -le premier terme correspond à la chaine a avec les tirets insérés au bon endroit ;
    -le second terme correspond à la chaine b avec les tirets insérés au bon endroit ;
    - le troisième terme correspond au nombre total de tirets insérés.
    """
    if len(a) == 0 and len(b) == 0 :
        return (... , ... , 0)
    elif len(a) == 0 :
        return ("", ... , ...)
    elif len(b) == 0 :
        return (... , "...", ...)
    elif a[0] == b[0] :
        S = align_seq_rec(... , ...)
        return (a[0]+S[0], ... , ...)
    else :
        S1 = align_seq_rec(a, b[1:])
        S2 = align_seq_rec(a[1:], b)
        if S1[2]<=S2[2] :
            return (... , ... , 1+S1[2])
        else :
            return (a[0]+S2[0], "-"+S2[1], ...)
```

? Code avec memoization

A partir de la fonction précédente, créer une fonction `align_seq_rec_memo` qui utilisera une sous-fonction récursive `compute` prenant trois arguments `a`, `b` et `memo`, où `memo` est un dictionnaire dont les clés sont les couples `(a, b)` et les valeurs les tuples `(c, d, n)`, où :

- `c` représente la chaine `a` avec les tirets nécessaires à l'alignement avec `b` ;
- `d` représente la chaine `b` avec les tirets nécessaires à l'alignement avec `a` ;
- `n` représente le nombre total de tirets.

?

Comparaison en temps des deux fonction

Exécuter le code suivant :

```
import time

X = "TTCACCAGAAAAGAACACGGTAGTTACGAGTCCAATATTGTTAAACCG"
Y = "TTCACGAAAAGTAACGGGCCGATCTCCAATAAGTGCGACCGAG"
for i in range(1,min(len(X), len(Y))) :

    start = time.time()
    print(align_seq_rec(X[:i], Y[:i]))
    print(f"----> Sans mémoization : {time.time() - start}")
    start = time.time()
    print(align_seq_rec_memo(X[:i], Y[:i]))
    print(f"----> Avec mémoization : {time.time() - start}")
```

3. Résolution par une méthode itérative

3.1. Activité débranchée

Considérons les deux chaines de caractères `GENOME` et `ENORME`. Afin de chercher le nombre minimal d'insertion à effectuer, nous allons compléter le tableau suivant, avec la convention suivante : à l'intersection de la colonne `N` et de la première ligne `E` se trouve le nombre minimal d'insertion nécessaire pour aligner les chaines `EN` et `GE`, c'est-à-dire 2 tirets. Par convention la première ligne et la première colonne correspondent à une chaine vide.

	-	E	N	O	R	M	E
-							
G							
E							
N							
O							
M							
E							

Question

Enoncé

En quoi la méthode ci-dessus est-elle une méthode itérative (Bottom Up) ?

Réponse

1. Pour compléter le tableau, on va commencer par compléter la première ligne et la première colonne. Par exemple, la case de la première ligne correspondant à l'intersection de R et de - doit contenir le nombre minimal de tirets nécessaire pour aligner ENOR avec une chaîne vide, c'est-à-dire 4.

	-	E	N	O	R	M	E
-	0	1	2	3	4	5	6
G	1						
E	2						
N	3						
O	4						
M	5						
E	6						

E	N	O	R
-	-	-	-

2. Pour compléter ensuite le reste du tableau, il faut concevoir deux cas différents :

- a. Soit la case correspond aux deux même lettres, comme dans l'exemple ci-dessous :

	-	E	N	O	R	M	E
-	0	1	2	3	4	5	6
G	1	2	3	4	5	6	7
E	2	1	2	3	4	5	6
N	3	2	1	2	3	4	5
O	4	3	2	1			
M							
E							

-	E	N	O
G	E	N	O

Le meilleur alignement de ENO et de GENO contient autant de tirets que le meilleur alignement de EN et de GEN, donc ici 1.

- b. Soit les deux lettre sont différentes, et on peut considérer deux situations :

	-	E	N	O	R	M	E
-	0	1	2	3	4	5	6
G	1	2	3	4	5	6	7
E	2	1	2	3	4	5	6
N	3	2	1				
O							
M							
E							

-	E	N	O	-
G	E	-	-	N

On considère la case comme étant une de l'alignement de ENO et GE , qui contenait 3 tirets, vers l'alignement de ENO et GEN , qui en contiendra donc **un de plus**, soit 4.

	-	E	N	O	R	M	E
-	0	1	2	3	4	5	6
G	1	2	3	4	5	6	7
E	2	1	2	3	4	5	6
N	3	2	1				
O							
M							
E							

-	E	N	O
G	E	N	-

On considère la case comme étant une de l'alignement de EN et GEN , qui contenait 1 unique tiret, vers l'alignement de ENO et GEN , qui en contiendra donc **un de plus**, soit 2.

Comme nous cherchons un alignement minimisant le nombre de tirets, on va alors compléter la case avec la valeur 2, provenant de la situation de droite ci-dessus.

3. On termine alors de compléter le tableau :

	-	E	N	O	R	M	E
-	0	1	2	3	4	5	6
G	1	2	3	4	5	6	7
E	2	1	2	3	4	5	6
N	3	2	1	2	3	4	5
O	4	3	2	1	2	3	4
M	5	4	3	2	3	2	3
E	6	5	4	3	4	3	2

3.2. Application en Python

L'activité est disponible sous la forme d'un [notebook capytale](#)