

研究性学习结题报告书

2020 年 11 月 11 日

课题名称 用信息方法研究遗传学问题

课题负责人 杨景云

课题成员 blablabla

指导教师 李丽华老师

所在班级 高二 (9) 班

摘要

高中生物中有关基因遗传的计算问题一直是学习中的难点。本文从高中生物中的常见问题切入，建立一个计算遗传学中表现型比例，基因型比例和最优杂交方案的数学模型并提出了高效求解该模型的算法。本文通过对基因片段二进制编码后，引入集合幂级数来表示基因片段出现次数。根据遗传学基本定律，产生配子和配子结合的过程就是集合幂级数的不同形式卷积。进而用快速莫比乌斯变换和快速沃尔什变换算法在很低的算法时间复杂度内求解该问题。该模型得出了手工求解表现型和基因型比例的通用方法，以及基于用计算机高效求解的算法。文章最后，根据此模型求解了实际应用中的若干个问题。

目录

1	引言	3
2	文献综述	3
3	约定	4
4	模型中的关键概念	4
4.1	基因集合	4
4.2	对于集合元素的标号	4
4.3	集合到向量的转化	4
4.4	基因片段	4
4.5	基因片段的运算	4
4.6	生成函数 (Generating function)	5
4.7	基因片段生成函数	5
4.8	基因片段生成函数的系列运算	5
4.9	基因片段生成函数的应用	5
4.10	表现型集合	6
4.11	表现型映射	6
4.12	表现型映射的性质	6
4.13	计算个体的表现型	6
4.14	卷积	6
4.15	卷积与生成函数运算的联系	6
5	只有显隐性情况群体自由交配的计算	7
5.1	配子生成函数的求法	7
5.2	基因片段生成函数的求法	12
6	只有显隐性情况群体自由交配的计算的推广	16
6.1	共显性问题	16
6.2	复等位基因问题	16
7	集合卷积的进一步优化	17
7.1	定义	17
7.2	每维取 max 的 FWT	17
7.3	喷瓜问题的快速算法	18
7.4	任意操作符的 FWT 问题	18
7.5	o 运算需要满足的性质	20
7.6	不进位加法的 FWT	21
7.7	共显性问题的快速算法	22

1 引言

高中生物中的遗传学问题一直是学习中的难点。由于缺少既高效又通用的方法，很容易在复杂的表现型比例，基因型比例的计算中出错。同时，在设计杂交方案等具有综合性的问题中也会遇到困难。而本文试图通过引入如生成函数等更高级的数学工具，以及计算机方法来探索新的求解方法。

我们提出的数学建模思路来源于一个出现在教辅书上的经典问题 [1]: 基因型为 AaBB 的个体自交，但含有 a 基因的个体有 $\frac{1}{2}$ 的几率不能存活。给出的解法 [2]: 含有 A 基因的配子的概率为 $\frac{2}{3}$ ，含有 a 基因的配子的概率为 $\frac{1}{3}$ 。如果把不同配子看成多项式的系数，基因型看做指数，那么杂交过程就可以看成多项式乘法。 $(\frac{2}{3}x^A + \frac{1}{3}x^a)(\frac{1}{2}x^B + \frac{1}{2}x^B = 2\frac{2}{3}x^{AB} + \frac{1}{3}x^{aB}$ 那么两种基因型的比例就是 2 : 1. 这种方法将生物学问题转化成纯粹的数学问题，但引入算式的部分缺乏严谨性。本文将运用这种方法的思想，将这种算式抽象化为集合幂级数。通过将 AB 这样的基因集合定义为广义的指数，将模型在数学上严格化，进而得到通用的手工求解做法。

更重要的是，随着基因片段长度的增加，这种方法计算的复杂度会大大增加。这时我们就可以引入计算机手段来求解该问题。如果直接模拟多项式的乘法过程，算法时间复杂度依然很高。此时就需要运用能求解集合幂级数卷积的高效算法：快速沃尔什变换 (Fast Walsh Transform,FWT) 和快速莫比乌斯变换 (Fast Mobius Transform,FMT)。

2 文献综述

19 世纪末，遗传学的基本定律已经由孟德尔 (Gregor Johann Mendel)，摩尔根 (Thomas Hunt Morgan) 等人提出，并在细胞学研究中证明。基因的分离定律 (Law of Segregation) 和自由组合定律 (Free Combination Law of Gene Independent Assortment) 使得遗传学中的出现频率问题可以用组合数学计算。[3]

作为组合数学的高效工具，生成函数 (Generating Function, 又称母函数) 最初由棣莫弗 (Abraham De Moivre) 提出，最初是用于求线性递推数列的通项公式。[4] 生成函数将数列的下标作为指数，下标对应的值作为系数，就可以把数列问题转化为代数上的形式幂级数运算。在求解组合数学问题中，只需把数列定义为组合问题在不同规模下的方案数即可。[5]。将集合定义为广义的指数，就可以得到集合幂级数，可以求解下标为集合的数列，进而求解和集合有关的组合数学问题。

这样，我们已经有了有一套成熟的数列理论来求解相关的组合数学问题。但是，要使用计算机来处理幂级数的运算，需要更高效的算法。1965 年 James Cooley 与 John Tukey 提出的快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform,FFT) [6] 可以在 $\mathcal{O}(n \log n)$ 的时间复杂度内处理下标为正整数的多项式卷积。1976 年出现了可以求解集合为下标的算法（子集卷积），即快速沃尔什变换 (Fast Walsh Transform,FWT) [7]。沃尔什变换利用分治的思想和 Hadamard 矩阵加速了求解过程 [8]。2007 年 Andreas Björklund 总结了前人的工作，用 Möbius 变换和反演计算在任意环中进行加法和乘法的子集卷积，得到了 $\mathcal{O}(m^2 2^m)$ 的子集卷积，对 $\mathcal{O}(3^m)$ 的传统算法进行了改进。具体来说，如果输入函数的整数范围为 $[-M, M] \cap \mathbb{Z}$ ，则它们的子集卷积可以用 $\mathcal{O}(2^m \log M)$ 时间求解。还利用矩阵解决了高维子集卷积问题 [9]。这些算法已经足够我们进行基因相关的组合计数。

3 约定

真值运算符 若 $[]$ 内表达式为真，则是 1，否则是 0。

4 模型中的关键概念

[3]

4.1 基因集合

我们用 \mathbb{G} 来表示基因集合。

对于只有显隐性的情况，基因集合由一系列大写字母和小写字母组成，大写字母表示显性，小写字母表示隐性。对于只有两对等位基因 A, B 的情况， $\mathbb{G} = \{A, B, a, b\}$ 。

对于另一些更复杂的情况，拿喷瓜举例，基因集合可以写作 $\mathbb{G} = \{g^-, g^+, G\}$ 。

4.2 对于集合元素的标号

创建基因集合到 $\{1, 2, \dots, |\mathbb{G}|\}$ 的映射 $f: \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{Z}$ ，称为基因的标号，基因的顺序就是标号的顺序。

容易发现其有逆运算 f' 。

4.3 集合到向量的转化

一个集合 S 可以转化为一个 $|S|$ 维向量 v ，其中 $v_i = [f'(i) \in S]$ 。

若基因集合为 $\{A, B\}$ ， A 标号为 1， B 标号为 2，那么集合 $\{A\}$ 可以转化为 $(1, 0)$ ，集合 $\{A, B\}$ 可以转化为 $(1, 1)$ 。

4.4 基因片段

基因片段是一个向量。记基因片段组成的集合为 \mathbb{P} 。

配子基因片段

我们用 \vec{G} 来表示配子基因片段。

我们可以将一个具有 k 个基因的配子用一个 k 维向量 $\{a_i\}$ 表示，其中 $a_i \in \mathbb{G}$ 。

个体基因片段

我们用 \vec{I} 来表示个体基因片段。

我们可以将一个具有 k 对等位基因的个体用一个 k 维向量 $\{(l_i, r_i)\}$ 表示，其中 $l_i, r_i \in \mathbb{G}$ 。

4.5 基因片段的运算

加法运算

对于 $L, R \in \mathbb{P}$ ，而且 L, R 同为配子基因片段或个体基因片段，定义加法运算为两基因片段的有序拼接。

如 $(A, C) + (B) = (A, B, C)$ 、 $((A, a), (B, b)) + ((C, C)) = ((A, a), (B, b), (C, C))$ 。

结合运算

对于 $L, R \in \mathbb{P}$, 而且 L, R 同为配子基因片段, 而且长度相等, 定义结合运算为按位有序结合:

$$(L \oplus R)_i = (\max(L_i, R_i), \min(L_i, R_i))$$

\max, \min 为取序号较大/较小者。排序可以根据生物中通用的表示方法来定义。

如 $(A, b) + (a, B) = ((A, a), (B, b))$ 。

4.6 生成函数 (Generating function)

定义:

$$A = \sum_i a_i x^i$$

是序列 $\{a_i\}$ 的生成函数。

我们不关心 x 的取值和级数是否收敛, 把 x 作为形式, 只关心系数 a_i 。

4.7 基因片段生成函数

定义:

$$A = \sum_{i \in \mathbb{P}} a_i x^i$$

是序列 $\{a_i\}$ 的基因片段生成函数。

4.8 基因片段生成函数的系列运算

乘法运算

$$x^L \times x^R = x^{L+R}$$

结合乘法运算

$$x^L \otimes x^R = x^{L \oplus R}$$

4.9 基因片段生成函数的应用

求基因型为 $AaBB$ 的个体产生的配子数量比

构造生成函数:

$$\begin{aligned} G &= \left(\frac{1}{2}x^A + \frac{1}{2}x^a\right)\left(\frac{1}{2}x^B + \frac{1}{2}x^B\right) \\ &= \frac{1}{2}x^{AB} + \frac{1}{2}x^{aB} \end{aligned}$$

即配子数量比为 $AB : aB = 1 : 1$ 。

求其自交后个体的基因型比例

构造生成函数：

$$\begin{aligned} I &= G \otimes G \\ &= \frac{1}{4}x^{AABB} + \frac{1}{2}x^{AaBB} + \frac{1}{4}x^{aaBB} \end{aligned}$$

即基因型数量比为 $AABB : AaBB : aaBB = 1 : 2 : 1$ 。

4.10 表现型集合

定义 \mathbb{E} 为表现型集合，一般地， $\mathbb{E} = \mathbb{G}$ 。

4.11 表现型映射

我们创建映射： $\exp : \mathbb{G} \times \mathbb{G} \rightarrow \mathbb{E}$ ，对于一对等位基因 $l, r \in G$ 使得 $\exp(l, r)$ 为这个个体的表现型。

比如 $\exp(A, a) = A$ ， $\exp(a, a) = a$ 。

4.12 表现型映射的性质

- $\exp(i, j) = \exp(j, i)$ 。
- $\exp(i, i) = i$ 。

4.13 计算个体的表现型

个体的表现型可以用一个 k 维向量 \vec{E} 表示，其中：

$$\vec{E}_i = \exp(\vec{I}_i)$$

4.14 卷积

给定环 R 上的 n 维向量 $\vec{A} = \{a_i\}, \vec{B} = \{b_i\}$ 和下标运算 \circ ，设 $C = \{c_i\} = A * B$ ，则满足：

$$c_i = \sum_{j,k} [j \circ k = i] a_j b_k$$

称 C 为 A 和 B 关于 \circ 的离散卷积，以下简称卷积。

记 $C = A *_\circ B$ ，如果不引起混淆，简记为 $C = A * B$ ，其中 $*$ 为卷积算子。

若 $\circ = +$ ，就是我们熟悉的多项式乘法运算。

4.15 卷积与生成函数运算的联系

若满足运算 $x^L \times x^R = x^{L \circ R}$ ，那么生成函数 $F = \sum f_i x^i$ 的乘法：

$$H = F \times G$$

和卷积 $\vec{F} = \{f_i\}, \vec{G} = \{g_i\}, \vec{H} = \vec{F} * \vec{G} = \{h_i\}$ 等价。

5 只有显隐性情况群体自由交配的计算

参考 2.9 中做法，我们分步计算。

1. 对于第 i 个个体，求配子生成函数 G_i 。
2. 计算 $G = \sum_{i=1}^n G_i$ 。
3. 计算 $I = G \otimes G$,

5.1 配子生成函数的求法

将基因片段对应到一个二进制数，如 $\mathbf{AB} = (11)_2 = 3, \mathbf{aB} = (01)_2 = 1$ 。

朴素求法

模拟生成配子的过程，每次生成一个长度为 k 的二进制数，若第 i 位为 0，则选择第 i 对等位基因的其中一个，否则选择另一个。

拿 \mathbf{AaBB} 举例：

表 1: 配子计算表	
选择的二进制数	得到的配子
00	\mathbf{AB}
01	\mathbf{AB}
10	\mathbf{aB}
11	\mathbf{aB}

生成二进制数的时间复杂度为 $\mathcal{O}(2^k)$ ，而计算配子的时间复杂度为 $\mathcal{O}(k)$ 。

所以总时间复杂度是 $\mathcal{O}(k2^k)$ ，对于 n 个个体都计算一次，时间复杂度为 $\mathcal{O}(nk2^k)$ ，是不能接受的。

快速做法 1

考虑维护配子出现次数函数 f ，一开始为 x^{None} ，考虑每次加入一对基因， f 的变化。假设它变为 f' 。

若加入的基因是一对显性基因，如 \mathbf{AA} ，那么 $f'(x \times 2 + 1) = 2f(x)$ 。

若加入的基因是一个显性和一个隐形基因，如 \mathbf{Aa} ，那么 $f'(x \times 2 + 1) = f(x), f'(x \times 2) = f(x)$ 。

若加入的基因是一对隐性基因，如 \mathbf{aa} ，那么 $f'(x \times 2) = 2f(x)$ 。

加入 k 等位基因，每次都 $\mathcal{O}(2^k)$ 计算，时间复杂度和上面没有区别，看似没有优化。

但是程序处理时，加入到第 i 个等位基因时，可以只用考虑 $0 \sim 2^i$ 的函数值，总时间复杂度是 $\mathcal{O}(\sum_{i=1}^k 2^i) = \mathcal{O}(2^k)$ ，可以将一个 k 优化掉。

对于 n 个个体都计算一次，时间复杂度为 $\mathcal{O}(n2^k)$ ，比较快速。

快速做法 2

当 n 比较大时, k 相对比较小时, $\mathcal{O}(n2^k)$ 是不能接受的, 我们要求出一种和 n 无关的做法。

首先, 我们需要引入 Trie 树, 它由下列部分组成:

1. 字符集 Σ Trie 树只能输入属于字符集的字符。
2. 状态集合 Q 状态集合相当于 Trie 树的节点 (node)。
3. 起始状态 $start$ 起始状态是 Trie 树的根 (root)。
4. 结束状态集合 F $F \subseteq Q$, 是特殊的状态。
5. 转移函数 δ 转移状态是接受两个参数返回一个值的函数, 第一个参数和返回值都是一个状态, 第二个参数是一个字符。特别地, 若没有定义, 返回值为 `null`; 且 $\delta(\text{null}, c) = \text{null}$ 。转移函数相当于 Trie 树节点之间的边 (edge)。

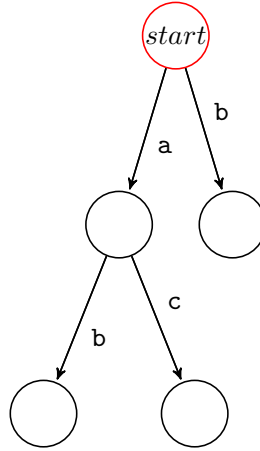
我们可以定义广义转移函数, 令其第二个参数可以接受一个字符串 s , 它是递归定义的:

$$\delta(v, s) = \delta(\delta(v, s_1), s_2 \dots s_{|s|})$$

给定字符串集 S , 其中每一个元素的都是字符串, 由这些元素建立起的 Trie 树满足:

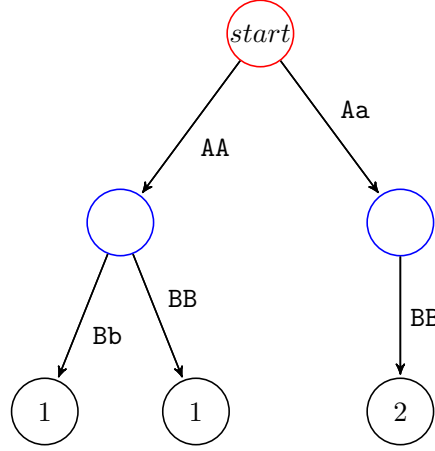
1. $\forall s \in S, \delta(start, s) \in F$ 。
2. $\forall s \notin S, \delta(start, s) \notin F$ 。

由字符集 $\{a, ab, ac, b\}$ 建立起的 Trie 树如图所示:



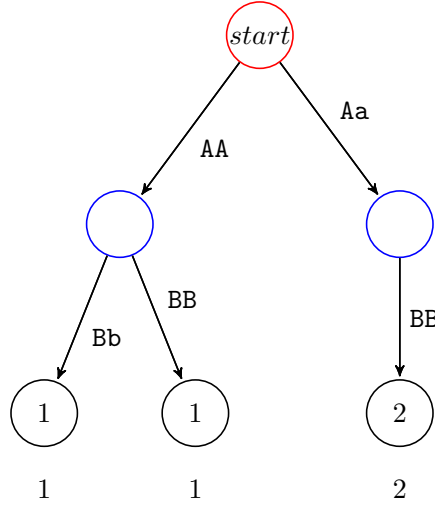
其中红色节点代表起始状态, 黑色节点代表结束状态。

如何利用 Trie 树的结构，来求解配子生成函数，我们可以定义字符集 $\Sigma = \{AA, Aa, aa, BB, Bb, bb, \dots\}$ 。这是一棵插入了 AABb, AABb, AaBB, AaBB 的 Trie 树¹。



程序实现时，我们从最底端开始递推，一直递推到第一层，我们的递推必须有初状态和递推公式。

我们首先来看初状态，节点 v 的初状态就是 cnt_v ，代表有多少种对应的基因型，为了便于理解，我们在图上节点旁标注初状态：



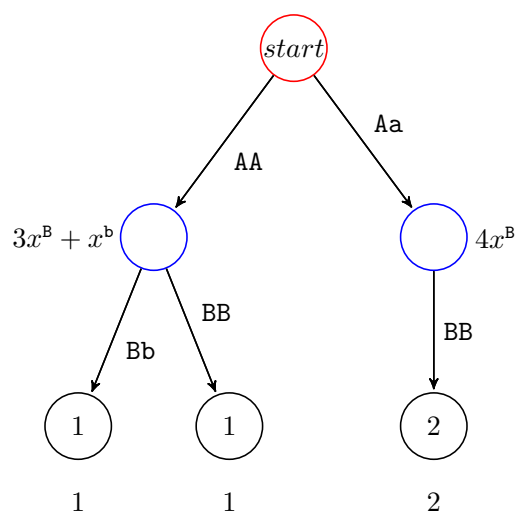
我们再来看递推公式，设根节点的配子生成函数为 F ，而它的三个子节点的配子生成函数为 f_{aa}, f_{Aa}, f_{AA} （如果不存在设为 0），那么有递推式：

$$\begin{aligned} F &= (x^a + x^a)f_{aa} + (x^A + x^a)f_{Aa} + (x^A + x^A)f_{AA} \\ &= x^a(f_{aa} \times 2 + f_{Aa}) + x^A(f_{AA} \times 2 + f_{Aa}) \end{aligned}$$

注意这里使用 **Aa** 这对等位基因只是为了方便表述，事实上，这个递推式对任意一对等位基因都是成立的。

¹我们在结束节点 v 标记一个值 cnt_v ，代表有多少字符串 s 使得 $\delta(start, s) = v$ 。

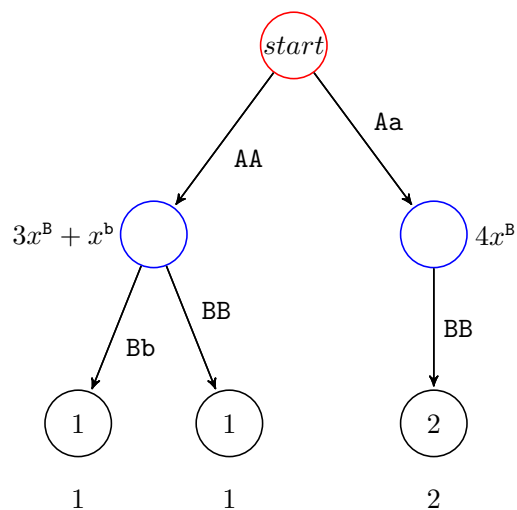
有了初状态和递推公式，就可以通过程序递推到根节点，求解出整个种群的配子生成函数的和。
递推到第二层



递推到第一层

$$F(x) = x^A(2 \times (3x^B + x^b) + 4x^B) + x^a(4x^B)$$

$$= 4x^{aB} + 2x^{Ab} + 10x^{AB}$$



容易发现此做法的最坏时间复杂度为：

$$\mathcal{T}(i) = 3 \times \mathcal{T}(i-1) + \mathcal{O}(2^i)$$

其中：

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(k) &= \mathcal{O}\left(\sum_{i=0}^k 2^i \times 3^{k-i}\right) \\ &= \mathcal{O}\left(\left(\sum_{i=0}^k \left(\frac{3}{2}\right)^i\right) \times 2^k\right) \\ &= \mathcal{O}\left(\left(\frac{\left(\frac{3}{2}\right)^{k+1} - 1}{\frac{3}{2} - 1}\right) \times 2^k\right) \\ &= \mathcal{O}(3^{k+1} - 2^{k+1}) \\ &= \mathcal{O}(3^k - 2^k)\end{aligned}$$

实际上，因为节点数可能不满，程序运行时间可能比理论更优。

回顾与总结

我们从模拟手算配子的过程开始，不断地运用配子生成函数的性质，进行优化，我们还巧妙地利用了 Trie 树的树形结构，压缩了无关状态，使得程序在时空复杂度上俱优。

并且，我们针对两种不同的情况，即 n 比较小， k 比较大的情况和 n 比较大， k 比较小的情况，各提出了一种快速做法。这也提示我们，想到一种做法不能马上停止，而是针对不同的数据范围，分析这种做法的优劣，并且针对其他的数据范围提出新的做法，这才能使我们的做法趋于完备和高效。

5.2 基因片段生成函数的求法

我们想求出一个基因片段生成函数乘法的快速实现。

朴素做法

考虑朴素地实现 (1) 中的卷积，时间复杂度为 $\mathcal{O}(4^k)$ ，是不能接受的。

优化的第一步

我们发现 对于只有显隐性情况的基因片段生成函数，可以转化为集合生成函数。而且集合生成函数已经存在快速算法。

集合生成函数

可以使用符号：

$$f = \sum_{S \subseteq U} f_S x^S$$

来表示一个集合生成函数。

这里我们定义算子 $\circ = \cup$ ，即： $x^L \times x^R = x^{L \cup R}$ 。

容易发现集合生成函数的乘法运算恰好为集合并卷积，即：

$$h_S = \sum_L \sum_R [(L \cup R) = S] f_L g_R$$

基因片段生成函数到集合生成函数的转换

定义全集 U 是： $\{A, B, \dots\}$ 。

我们将基因片段中的显性基因抽取出来，形成一个集合，如 $ABc \Rightarrow \{A, B\}$ 。

这样发现集合并卷积刚好符合“显性基因克制隐形基因”的条件，因为只要某一位有对应的显性基因，那么个体就表现为显性，可以结合集合运算表来理解：

表 2: 集合运算表

\cup	$\{A\}$	\emptyset
$\{A\}$	$\{A\}$	$\{A\}$
\emptyset	$\{A\}$	\emptyset

集合生成函数的快速卷积算法：FWT

仿照 FFT 的思路，我们求出 f 的一种变换 \hat{f} ，使得 $f * g = h \Rightarrow \hat{f}_i \times \hat{g}_i = \hat{h}_i$ ，即将系数表示法转化为点值表示法。

我们给出关于集合并卷积的 FWT 运算，即快速莫比乌斯变换。

$$\hat{f}_S = \sum_{T \subseteq S} f_T$$

证明：

$$\begin{aligned}
\hat{h}_S &= \sum_L \sum_R [(L \cup R) \subseteq S] f_L g_R \\
&= \sum_L \sum_R [L \subseteq S] [R \subseteq S] f_L g_R \\
&= \sum_L [L \subseteq S] f_L \sum_R [R \subseteq S] g_R \\
&= \hat{f}_S \hat{g}_S
\end{aligned}$$

我们求出 \hat{h}_S 后，当然需要将 \hat{h} 转化为 h ，于是需要反演运算：

$$f_S = \sum_{T \subseteq S} (-1)^{|S|-|T|} \hat{f}_T$$

由容斥原理可以证明。

朴素的变换和反演的实现

枚举 T 和 S ，并且判断是否 $T \subseteq S$ ，时间复杂度 $\mathcal{O}(4^k)$ ，没有太大的变化。

经过优化的变换和反演的实现

通过程序精细实现，能够以 $\mathcal{O}(2^{|S|})$ 的时间复杂度枚举 S 的子集。

如果对于所有的 $S \subseteq U$ ，都这样枚举子集 T ，时间复杂度为：

$$\mathcal{O}\left(\sum_{i=0}^k \binom{k}{i} 2^i\right) = \mathcal{O}(3^k)$$

比朴素做法稍有进步。

进一步优化的变换和反演的实现

我们使用递推的思路，推导出 \hat{f}_S 。

设 $\hat{f}_S^{(i)} = \sum_{T \subseteq S} [(S \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i\}] f_T$ ， $\hat{f}_S^{(n)}$ 即是目标序列。

首先有 $\hat{f}_S^{(0)} = f_S$ ，因为只有当 $S \setminus T$ 为空集时，才能属于空集。

对于所有 $i \notin S$ 的 S ，满足：

$$\begin{cases} \hat{f}_S^{(i)} = \hat{f}_S^{(i-1)} \\ \hat{f}_{S \cup \{i\}}^{(i)} = \hat{f}_S^{(i-1)} + \hat{f}_{S \cup \{i\}}^{(i-1)} \end{cases}$$

我们解释一下两个式子，对于第一个式子：

$$\begin{aligned}
\hat{f}_S^{(i)} &= \sum_{T \subseteq S} [(S \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i\}] f_T \\
&= \sum_{T \subseteq S} [(S \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i-1\}] f_T \\
&= \hat{f}_S^{(i-1)}
\end{aligned}$$

对于第二个式子：

$$\begin{aligned}
\hat{f}_{S \cup \{i\}}^{(i)} &= \sum_{T \subseteq (S \cup \{i\})} [(S \cup \{i\}) \setminus T] \subseteq \{1, \dots, i\} f_T \\
&= \sum_{T \subseteq (S \cup \{i\}) \text{ and } i \notin T} [((S \cup \{i\}) \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i\}] f_T + \sum_{T \subseteq (S \cup \{i\}) \text{ and } i \in T} [((S \cup \{i\}) \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i-1\}] f_T \\
&= \sum_{T \subseteq S \text{ and } i \notin T} [(S \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i-1\}] f_T + \sum_{T \subseteq (S \cup \{i\}) \text{ and } i \in T} [((S \cup \{i\}) \setminus T) \subseteq \{1, \dots, i-1\}] f_T \\
&= \hat{f}_S^{(i-1)} + \hat{f}_{S \cup \{i\}}^{(i-1)}
\end{aligned}$$

这样，我们 $\mathcal{O}(n2^n)$ 求出 \hat{f}_S, \hat{g}_S ，按位乘，然后再反演回去即可。

快速莫比乌斯变换和反演的伪代码实现

算法 1 快速莫比乌斯变换

输入：集合幂级数 F

输出： F 的莫比乌斯变换

```

1: function FASTMOBIUSTRANSFORM( $F$ )
2:   for  $i \leftarrow 1$  to  $n$  do
3:     for all  $S \subseteq U \setminus \{i\}$  do
4:        $f_{S \cup \{i\}} \leftarrow f_{S \cup \{i\}} + f_S$ 
5:     end for
6:   end for
7:   return  $F$ 
8: end function

```

算法 2 快速莫比乌斯反演

输入：集合幂级数 F

输出： f 的莫比乌斯反演

```

1: function FASTMOBIUSINVERSION( $F$ )
2:   for  $i \leftarrow 1$  to  $n$  do
3:     for all  $S \subseteq U \setminus \{i\}$  do
4:        $f_{S \cup \{i\}} \leftarrow f_{S \cup \{i\}} - f_S$ 
5:     end for
6:   end for
7:   return  $F$ 
8: end function

```

求解表现型生成函数的伪代码实现

算法 3 求解表现型生成函数

输入：配子生成函数 G

输出：表现型生成函数 E

```

1: function GETEXPRESSIONTYPE( $G$ )
2:    $G = \text{FastMobiusTransform}(G)$ 
3:   for all  $S \subseteq U$  do
4:      $g_S = g_S \times g_S$ 
5:   end for
6:    $H = \text{FastMobiusInversion}(G)$ 
7:   return  $H$ 
8: end function

```

此算法对于求解手算求解自由交配问题的启示

有两种基因型分别为 $AaBb$ 和 $Aabb$ 的个体，分别占比 $\frac{1}{3}$ 和 $\frac{2}{3}$ ，求解自由交配后的表现型比例。

1. 首先求解配子生成函数 G 。

$$\begin{aligned}
 G &= G_1 + G_2 \\
 &= \frac{1}{3} \times \left(\frac{1}{4}x^{ab} + \frac{1}{4}x^{Ab} + \frac{1}{4}x^{aB} + \frac{1}{4}x^{AB} \right) + \frac{2}{3} \times \left(\frac{1}{2}x^{ab} + \frac{1}{2}x^{Ab} \right) \\
 &= \frac{5}{12}x^{ab} + \frac{5}{12}x^{Ab} + \frac{1}{12}x^{aB} + \frac{1}{12}x^{AB}
 \end{aligned}$$

2. 再转化为集合幂级数。

$$F = \frac{5}{12}x^{\emptyset} + \frac{5}{12}x^{\{A\}} + \frac{1}{12}x^{\{B\}} + \frac{1}{12}x^{\{A,B\}}$$

3. 对它做莫比乌斯变换。

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{5}{12}x^{\emptyset} + \frac{5+5}{12}x^{\{A\}} + \frac{1+5}{12}x^{\{B\}} + \frac{1+5+1+5}{12}x^{\{A,B\}} \\
 &= \frac{5}{12}x^{\emptyset} + \frac{10}{12}x^{\{A\}} + \frac{6}{12}x^{\{B\}} + \frac{12}{12}x^{\{A,B\}}
 \end{aligned}$$

4. 每一项都做平方。

$$F = \frac{25}{144}x^{\emptyset} + \frac{100}{144}x^{\{A\}} + \frac{36}{144}x^{\{B\}} + \frac{144}{144}x^{\{A,B\}}$$

5. 做莫比乌斯反演。

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{25}{144}x^{\emptyset} + \frac{100-25}{144}x^{\{A\}} + \frac{36-25}{144}x^{\{B\}} + \frac{144-100-36+25}{144}x^{\{A,B\}} \\
 &= \frac{25}{144}x^{\emptyset} + \frac{75}{144}x^{\{A\}} + \frac{11}{144}x^{\{B\}} + \frac{33}{144}x^{\{A,B\}}
 \end{aligned}$$

6. 即表现型比例 $ab : Ab : aB : AB = 25 : 75 : 11 : 33$ 。

6 只有显隐性情况群体自由交配的计算的推广

6.1 共显性问题

有的时候一对等位基因对应的不只有一对相对性状, 而有更复杂的情况。

例如有一种花卉, 基因型为 AA 时表现为红色, 基因型为 Aa 时表现为粉色, 基因型为 aa 时表现为白色。

表 3: 共显性表现型表

exp	A	a
A	A	Aa
a	Aa	a

我们将基因片段中的显性和隐性基因抽取出来, 形成一个集合, 如 $ABc \Rightarrow \{A, B, c\}$, 对这样的集合作集合合并卷积, 也可以理解为把一对等位基因拆成两位, $A \Rightarrow 10$, $a \Rightarrow 01$ 。

容易发现这样做的时间复杂度为 $\mathcal{O}(2k \times 2^{2k}) = \mathcal{O}(2k \times 4^k)$, 和朴素做法差不多, 是不可接受的。

6.2 复等位基因问题

一对相对形状由多个等位基因决定。

例如喷瓜的性别由等位基因 g^-, g^+, G 决定, 其中:

表 4: 喷瓜表现型表

exp	g^-	g^+	G
g^-	g^-	g^+	G
g^+	g^+	g^+	G
G	G	G	G

容易发现, 这些等位基因构成一个偏序集, 我们发现若 $g^- \leq g^+ \leq G$, 则 exp 运算对应 \max 运算。

将 g^-, g^+, G 编码成为 00, 01, 10, 那么容易看出:

表 5: 编码运算表

or	00(g^-)	01(g^+)	10(G)
00(g^-)	00(g^-)	01(g^+)	10(G)
01(g^+)	01(g^+)	01(g^+)	11(G)
10(G)	10(G)	11(G)	10(G)

发现 11, 10 都对应 G, 而 00 对应 g^- , 01 对应 g^+ 。我们在程序实现时最后一步处理一下即可。

容易发现这样做的时间复杂度还是 $\mathcal{O}(2k \times 2^{2k}) = \mathcal{O}(2k \times 4^k)$, 和朴素做法差不多, 是不可接受的。

7 集合卷积的进一步优化

以上两个问题在只运用集合并卷积的情况下，都没有较低时间复杂度的算法，下面，我们引入高维 FWT，并且逐渐探寻 FWT 的一般式。

7.1 定义

定义生成函数 $F = \sum f_S x^S$ ，其中 S 不再是一个集合，而是一个每维可以取 $0, \dots, k-1$ 的向量。

7.2 每维取 max 的 FWT

容易看出，当 $k = 2$ ，而且：

$$0 \circ 0 = 0$$

$$1 \circ 0 = 1$$

$$0 \circ 1 = 1$$

$$1 \circ 1 = 1$$

那么，这就对应了集合并卷积。

这里，我们不再讨论集合并卷积，而是考虑更加一般的形式，即 $\circ = \max$ 时的情形。

定义：

$$\hat{f}[x^S] = \sum [S \circ T = S] f_T$$

容易发现：

$$\hat{h}_S = \sum_L \sum_R [S \circ (L \circ R) = S] f_L \times g_R$$

由于：

$$\max(a, \max(b, c)) = a \Leftrightarrow \max(a, b) = a \text{ and } \max(a, c) = a$$

有：

$$[(S \circ (L \circ R)) = S] = [(S \circ L) = S][(S \circ R) = S]$$

得：

$$\begin{aligned} \hat{h}_S &= \sum_L \sum_R [(S \circ L) = S][(S \circ R) = S] f_L \times g_R \\ &= \sum_L [(S \circ L) = S] f_L \times \sum_R [(S \circ R) = S] g_R \\ &= \hat{f}_S \times \hat{g}_S \end{aligned}$$

那么，我们在 FWT 的 k 个向量中，取前缀和即可，如果是反演的话，相邻做差即可。

7.3 喷瓜问题的快速算法

通过上述算法，将 g^- 对应到 0， g^+ 对应到 1， G 对应到 2，我们就可以解决上述的喷瓜问题，时间复杂度为 $\mathcal{O}(n \times 3^n)$ 。

7.4 任意操作符的 FWT 问题

容易发现，每次 FWT，都是在对其他位相同，而某一位分别为 $0, \dots, k-1$ 的 k 个向量对应的下标做矩阵乘法。

如集合并卷积的矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

集合交卷积²的矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

集合对称差卷积³的矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

上述 \max 卷积的矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

而反演则是乘对应的逆矩阵。

我们设矩阵为：

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & a_{0,2} & \cdots & a_{0,k-1} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,k-1} \\ a_{2,0} & a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,k-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k-1,0} & a_{k-1,1} & a_{k-1,2} & \cdots & a_{k-1,k-1} \end{bmatrix}$$

由于 FWT 按位独立，对于某一维分析，有：

²运算符为 and 运算

³运算符为 xor 运算

$$\left(\begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{k-1} \end{bmatrix} \times \mathbf{M} \right) \cdot \left(\begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{k-1} \end{bmatrix} \times \mathbf{M} \right) = \begin{bmatrix} h_0 \\ h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_{k-1} \end{bmatrix} \times \mathbf{M}$$

其中 \cdot 代表“按位乘”，即：

$$\begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{k-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \times g_0 \\ f_1 \times g_1 \\ f_2 \times g_2 \\ \vdots \\ f_{k-1} \times g_{k-1} \end{bmatrix}$$

由于 $h_i = \sum_{j,k} [j \circ k = i] f_j \times g_k$ ，枚举每个 i ，对于每个 $f_j \times g_k$ 分析，容易列出方程：

$$a_{i,j} \times a_{i,k} = a_{i,j \circ k}$$

发现不管对于哪个 i ，方程都是一样的，去掉 i ，我们就只用解方程 $a_j \times a_k = a_{j \circ k}$ 。

如，当 \circ 运算为取 or 的时候，有：

$$\begin{cases} a_0 \times a_0 = a_0 \\ a_1 \times a_0 = a_1 \\ a_0 \times a_1 = a_1 \\ a_1 \times a_1 = a_1 \end{cases}$$

我们解出两组解：

$$\begin{cases} a_0 = 1 \\ a_1 = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} a_0 = 1 \\ a_1 = 1 \end{cases}$$

于是可以这样安排我们的矩阵：

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

为什么不能这样这样安排：

$$\mathbf{M}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_4 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

原因是，这两个矩阵都没有对应的逆矩阵，求逆矩阵可以再列出一个方程，然后解出 x_0, x_1 。（可以注意到求解方程的意义正好对应了 FWT 逆操作的意义）

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 = b_0 \\ a_{1,0}x_0 + a_{1,1}x_1 = b_1 \end{cases}$$

拿 \mathbf{M}_1 举例，有：

$$\begin{cases} x_0 = b_1 \\ x_0 + x_1 = b_2 \end{cases}$$

那么显然：

$$\begin{cases} x_0 = b_1 \\ x_1 = b_2 - b_1 \end{cases}$$

于是其逆矩阵就是：

$$\mathbf{M}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

而对于 \mathbf{M}_3 来说，有：

$$\begin{cases} x_0 = b_1 \\ x_0 = b_2 \end{cases}$$

显然不合法。于是不能使用 \mathbf{M}_3 这个矩阵。

这样，我们解出矩阵 \mathbf{M} ，然后求出逆矩阵 \mathbf{M}^{-1} ，就可以解决任意操作符 \circ 的 FWT 问题。

7.5 \circ 运算需要满足的性质

由于：

$$a_j \times a_k = a_{j \circ k}$$

有：

$$a_{j \circ k} = a_j \times a_k = a_k \times a_j = a_{k \circ j}$$

$$a_{j \circ (k \circ l)} = a_j \times a_{k \circ l} = a_j \times a_k \times a_l = a_{j \circ k} \times a_l = a_{(j \circ k) \circ l}$$

于是 \circ 运算必须满足交换律和结合律。

7.6 不进位加法的 FWT

我们定义不进位加法 \oplus_p 运算，为：

$$a \oplus_p b = \begin{cases} a + b & (0 \leq a + b \leq p - 1) \\ a + b - p & (p \leq a + b \leq 2p - 2) \end{cases}$$

容易发现，其矩阵系数 a 满足：

$$a_{i,j} \times a_{i,k} = a_{i,j \oplus_p k}$$

这里，我们发现，这组方程的特解即是：

$$a_{i,j} = \omega_p^j$$

因为单位根运算满足：

$$\omega_p^k = \omega_p^{k+p}$$

$$\omega_p^{i+j} = \omega_p^i \times \omega_p^j$$

进而发现，方程有 p 组解，第 i 组解（从 0 开始编号）为：

$$a_{i,j} = \omega_p^{j \times i}$$

那么我们可以列出矩阵：

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega_p^1 & \omega_p^2 & \cdots & \omega_p^{p-1} \\ 1 & \omega_p^2 & \omega_p^4 & \cdots & \omega_p^{2(p-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega_p^{p-1} & \omega_p^{2(p-1)} & \cdots & \omega_p^{(p-1)(p-1)} \end{bmatrix}$$

此矩阵就是范德蒙德矩阵。

我们不加证明地给出它的逆矩阵：

$$\frac{1}{p} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega_p^{-1} & \omega_p^{-2} & \cdots & \omega_p^{-(p-1)} \\ 1 & \omega_p^{-2} & \omega_p^{-4} & \cdots & \omega_p^{-2(p-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega_p^{-(p-1)} & \omega_p^{-2(p-1)} & \cdots & \omega_p^{-(p-1)(p-1)} \end{bmatrix}$$

这样，我们就可以完成模 p 意义下的不进位加法卷积，此算法即多维广义离散傅里叶变换。

具体程序实现，我们可以算出 ω_p^1 即 $\cos \frac{p}{2\pi} + i \sin \frac{p}{2\pi}$ ，如果能用根号形式表示，即： $a + b\sqrt{xi}$ ，我们可以模拟复数 $a + b\sqrt{xi}$ ，其乘法为 $(a + b\sqrt{xi})(c + d\sqrt{xi}) = (ac - bxd) + (ac + bd)\sqrt{xi}$ ，加法为 $(a + b\sqrt{xi}) + (c + d\sqrt{xi}) = (a + b) + (c + d)\sqrt{xi}$ 。

或者, 更加通用地, 我们将长度为 p 的多项式环作为一种数据结构, 假设是 $F = \sum_{i=0}^{p-1} \omega_p^i f_i$, 有: $F \times \omega_p^k = F = \sum_{i=0}^{p-1} \omega_p^i f_{i \oplus k}$, $F \times G = \sum_{i=0}^{p-1} \sum_{j=0}^{p-1} \omega_p^{i \oplus j} f_i \times g_j$ 。

注意, 如果对某个数 mod 取模, 若 p 在 mod 下没有对应的逆, 则不能使用此算法。

多维广义离散傅里叶变换的代码实现:

算法 4 多维广义离散傅里叶变换

输入: 幂级数 f , 单位根 w_p , 操作符 opr 代表正变换还是逆变换。

输出: f 的傅里叶变换

```

1: function FOURIERTRANSFORM( $f, w_p, \text{opr}$ )
2:   if then  $\text{opr} = 1$ 
3:      $M_{i,j} \leftarrow w_p^{(i-1)(j-1)}$ 
4:   else
5:      $M_{i,j} \leftarrow \frac{1}{p} w_p^{-(i-1)(j-1)}$ 
6:   end if
7:   for  $i \leftarrow 1$  to  $n$  do
8:     for The  $p$  vectors satisfying  $1 \cdots p$  on the  $i$ -th bit and the other bits are same. do
9:        $v \leftarrow$  the  $p$  vectors
10:      for  $j \leftarrow 1$  to  $p$  do
11:         $g_j \leftarrow f_{v_j}$ 
12:      end for
13:       $g \leftarrow g \times M$ 
14:      for  $j \leftarrow 1$  to  $p$  do
15:         $f_{v_j} \leftarrow g_j$ 
16:      end for
17:    end for
18:  end for
19:  return  $f$ 
20: end function

```

7.7 共显性问题的快速算法

如果将 A 对应到 1, a 对应到 0, 容易发现:

表 6: 编码运算表

+	1(A)	0(a)
1(A)	2(A)	1(Aa)
0(a)	1(Aa)	0(a)

我们发现 A 对应 2, Aa 对应 1, a 对应 0。

只要使用三次单位根 $\omega_3 = \cos 120^\circ + i \sin 120^\circ$, 即可轻松解决此问题, 时间复杂度是 $\mathcal{O}(n \times 3^n)$ 。

8 纯合致死问题的快速算法

生物界中, 有一些个体会因为显性基因纯合而死亡, 我们假定有 k 对等位基因, 只要其中一对显性纯合, 个体都会胚胎致死, 通过共显性问题的快速做法, 我们可以得到一个时间复杂度为 $\mathcal{O}(n \times 3^n)$ 的做法, 但是这个时间复杂度有些过大。

为了研究这类问题的快速做法, 我们引入 子集卷积。

8.1 子集卷积

参考文献

- [1] 蔡雪燕. 浅谈高中生物概念教学. 新课程 (中), 000(4):P.139–140, 2009.
- [2] 张克芳. 浅析高中生物遗传学习题的解析技巧. 理科考试研究, 20(15):72–72, 2013.
- [3] 葛明德吴相钰, 陈守良. 陈阅增普通生物学. 高等教育出版社, 2009.
- [4] Donald E Knuth. *The Art of Computer Programming, Volume 1, Fascicle 1: MMIX—A RISC Computer for the New Millennium*. Addison-Wesley Professional, 2005.
- [5] Ronald L Graham, Donald E Knuth, Oren Patashnik, and Stanley Liu. Concrete mathematics: a foundation for computer science. *Computers in Physics*, 3(5):106–107, 1989.
- [6] James W Cooley and John W Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex fourier series. *Mathematics of computation*, 19(90):297–301, 1965.
- [7] David K Maslen and Daniel N Rockmore. Generalized ffts—a survey of some recent results. In *Groups and Computation II*, volume 28, pages 183–287. American Mathematical Soc., 1997.
- [8] Don Coppersmith and Shmuel Winograd. Matrix multiplication via arithmetic progressions. In *Proceedings of the nineteenth annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 1–6, 1987.
- [9] Andreas Björklund, Thore Husfeldt, Petteri Kaski, and Mikko Koivisto. Fourier meets möbius: Fast subset convolution. STOC '07, page 67–74, New York, NY, USA, 2007. Association for Computing Machinery.