Rapport du Projet LU3IN003

ZHOU runlin 28717281

MA peiran 28717249

Introduction:

Le but de ce projet porte est un problème de génomique : l'alignement de séquences.

D'un point de vue biologique, il s'agit de mesurer la similarité entre deux séquences d'ADN, que l'on voit simplement comme des suites de nucléotides.

D'un point de vue informatique, les séquences de nucléotides sont vues comme des mots sur **l'alphabet {A,T,G,C}**. On s'intéresse d'abord à un *algorithme naïf*, puis à un algorithme de *programmation dynamique*. On utilise la méthode diviser pour régner pour améliorer la complexité spatiale de ces algorithmes.

Nous présenterons notre réalisation de l'algorithme en plusieurs parties.

Le problème d'alignement de séquences (Ex 2):

Question 1:

Soit $(\overline{xu}, \overline{yv})$ est un alignement de (xu, yv) ssi

$$\begin{array}{l} \text{(i) } \pi(\overline{xu}) = xu \\ \text{(ii) } \pi(\overline{yv}) = yv \\ \text{(iii) } |\overline{xu}| = |\overline{yv}| \\ \text{(iv) } \forall i \in [1,...,|\overline{xu}|], \overline{xu}_i \neq - \ ou \ \overline{yv}_i \neq - \end{array}$$

Nous pouvons facilement déduire que :

- $\pi(\overline{x}\overline{u}) = \pi(\overline{x}) * \pi(\overline{u}) = xu$
- $\pi(\overline{yv}) = \pi(\overline{y}) * \pi(\overline{v}) = yv$
- $|\overline{x}\overline{u}| = |\overline{x}| + |\overline{u}|$, car $(\overline{x}, \overline{y})$ et $(\overline{u}, \overline{v})$ sont respectivement des alignements de (x, y) et (u, v), donc on a $|\overline{x}| + |\overline{u}| = |\overline{y}| + |\overline{v}| = |\overline{y}v|$
- Car $(\overline{x},\overline{y})$ et $(\overline{u},\overline{v})$ sont respectivement des alignements de (x,y) et (u,v), donc on a $\forall i\in [1,...,|\overline{x}|], \overline{x}_i \neq -$ ou $\overline{y}_i \neq -$ et $\forall i\in [1,...,|\overline{u}|], \overline{u}_i \neq -$ ou $\overline{v}_i \neq -$, on ajoute les deux conditions emsemble. Et on a $\forall i\in [1,...,|\overline{xu}|], \overline{xu}_i \neq -$ ou $\overline{yv}_i \neq -$

Donc, $(\overline{xu}, \overline{yv})$ est bien que un alignement de (xu, yv)

Question 2:

Si $(\overline{x},\overline{y})$ est un alignment de (x,y), on a $\forall i\in [1,...,|\overline{x}|], \overline{x}_i \neq -$ ou $\ \overline{y}_1 \neq -$ donc la longueur maximale est |x|+|y|

Algorithmes pour l'alignement de séquences (Ex 3) :

Programmation naive:

Question 3:

Nous pouvons convertir le problème en sélectionnant k dans n + k positions comme '-', donc le nombre de mot est C^n_{n+k}

Question 4:

Soit $k \in [0, m]$ (l'intervalle étant choisi de manière à ne pas dépasser le nombre maximum de gaps, déterminé à la question (2)).

On suppose que l'on ajoute k gaps à x pour former une chaîne \overline{x} de longueur n+k. Alors les alignements $(\overline{x},\overline{y})$ de (x,y) seront exactement les alignements construits en ajoutant n+k-m gaps à y à des indices i tels que $\overline{x}_i \neq -$.

Les alignements sont donc en bijection avec les parties à n+k-m éléments de [1,n] : il y en a C^n_{n+k-m} , en notant qu'on a bien $0 \le n+k-m \le n$.

Soit A_k l'ensemble des alignements produits en ajoutant k gaps à x, et A l'ensemble des alignements de (x,y). On a :

$$|A| = \sum_{i=0}^{m} |A_i| = \sum_{i=0}^{m} C_{n+i}^i * C_{n+i}^{n+i-m}$$

Pour $\lvert x \rvert = 15$ et $\lvert y \rvert = 10$, on calcule 298,199,265 alignements.

Question 5:

Soit la compelxité de énumérer un alignement de (x, y) est O(1).

Le nombre de alignment de (x,y) est $\sum_{i=0}^m C_{n+i}^i * C_{n+i-m}^n$, avec |x|=n et |y|=m.

$$|A| = \sum_{i=0}^m C_{n+i}^i * C_n^{n+i-m} = \sum_{i=0}^m rac{(n+i)!}{n!i!} * rac{(n+i)!}{m!(n+i-m)!}$$

Donc, la complexité est en O(m * n!)

Et pour déduire un alignement de coût minimal, on a besion de rechercher le nombre minimal dans la liste de coût des alignments, qui a la même complexité d'énumeration.

Question 6:

Estimation de complexité spatiale :

Selon l'algorithme poser dans le sujet, on peut déduire que le nombre de programme à traiter au maximum (dans le pire cas) est n+m. En même temp, il y a 6 variables stockées dans chaque itération de boucle. On suppose que la complexité en mémoire pour les 6 variables est en O(k), donc en totale, la complexité spatiale est O(k(n+m)).

Évaluer la performance :

Selon la résultat qu'on obtenu, la taille d'instance au maximum est 12.

```
(base) zhourunlin@zhoudemacbook-pro codes % python3 testTache1.py
distance de TATATGAGTC et TATTT : 10

Time taken for execute dist_naif : 0.03053903579711914
distance de TGGGTGCTAT et GGGGTTCTAT : 8

Time taken for execute dist_naif : 5.945109605789185
distance de AACTGTCTTT et AACTGTTTT : 2

Time taken for execute dist_naif : 2.3081109523773193
distance de CTGGAAAGTGCG et CTGAACTGG : 9

Time taken for execute dist_naif : 10.387193202972412
distance de GCTTAACTAACGA et GCATAACTCAGA : 9

Time taken for execute dist_naif : 432.54401898384094
```

Ensuit, on exécute la commande ./python3 Tache1.py & (hangup) pour voir la consommation de mémoire dans *Moniteur d'activité*



Programmation dynamique

Question 7:

Comme $\pi(\overline{u})=x$ et $\pi(\overline{v})=y$, on a $\overline{u}_l\in\{-,x_i\}$ et $\overline{v}_l\in\{-,v_i\}$. En particulier,

- si $\overline{u}_l=-$, alors $\overline{v}_l=y_j$;
- ullet si $\overline{v}_l=-$, alors $\overline{u}_l=x_i$ et
- si u_l et v_l sont différents de alors ils valent respectivement x_i et y_j .

Question 8:

On note $u=(\overline{u}_i)_{i=1}^{l-1}$ et $v=(\overline{v}_i)_{i=1}^{l-1}$

- Si $\overline{u}_l = -$, alors $C(\overline{u}, \overline{v}) = c_{ins} + C(u, v)$.
- Si $\overline{v}_l = -$, alors $C(\overline{u}, \overline{v}) = c_{d\acute{e}l} + C(u, v)$.
- Sinon, $C(\overline{u}, \overline{v}) = c_{sub}(\overline{u}_l, \overline{v}_l) + C(u, v)$.

Question 9:

Comme les distances sont positives, par croissance de la somme il suffit d'optimiser la distance de manière gloutonne en appliquant une transformation de coût minimal au dernier caractère. Plus précisément :

- Si i=0 ou j=0 alors D(i,j)=0
- Sinon
 - \circ Si $x_i=y_j$ alors D(i,j)=D(i-1,j-1) (comme $c_{sub}(x_i,y_j)=0$, le meilleur choix est fait en laissant les deux caractères).
 - Sinon, $D(i,j) = min\{c_{d\acute{e}l} + D(i-1,j), c_{ins} + D(i,j-1), c_{sub}(x_i,y_j) + D(i-1,j-1)\}$. Comme on ne peut pas mettre de gap au même endroit, on a le choix entre consommer x_i (dans quel cas on place un gap à y, induisant le coût $c_{d\acute{e}l}$)

et consommer y_j (dans quel cas on place un gap à x, induisant le coût $c_i ns$) ou consommer x_i et y_j (cas traité à l'étape précédente).

Plus généralement, on a la relation de récurrence $C(i,j) = min\{c_{d\acute{e}l} + D(i-1,j), c_{ins} + D(i,j-1), c_{sub}(x_i,y_j) + D(i-1,j-1)\}.$

Question 10:

On a $D(0,0)=d(\varepsilon,\varepsilon)$. Par la borne supérieure sur la longueur des alignements trouvée plus haut, le seul alignement de $(\varepsilon,\varepsilon)$ est vide, donc de coût nul : D(0,0)=0.

Question 11:

Soit $u\in \Sigma *$ de longueur j. Par un argument sur les longueurs, le seul alignement possible de (ε,u) (respectivement (u,ε)) est (-,u) (respectivement (u,-)). On a ainsi $C(0,j)=jc_{ins}$ et $C(i,0)=ic_{d\acute{e}l}$.

Question 12:

```
def DIST_1(x, y):
   n <- |X|
    m <- |Y|
    return DIST_1_REC(x, y, i, j)
def DIST_1_REC(x, y, n, m):
    if i=0 and j=0, then:
    if i=0, then:
        return j * C_ins
    if j=0, then:
        return i * C_dél
    a <- DIST_1_REC(x, y, i-1, j) + C_ins
    b \leftarrow DIST_1_REC(x, y, i, j-1) + C_del
    c \leftarrow DIST_1_REC(x, y, i-1, j-1) + COUT(x, y, i, j)
    return min{a, b, c}
def COUT(x, y, i, j):
    #le cout de l'operation substitution
    if x[i] = y[j], then:
        return 0
    if ( (x[i]=A \text{ and } y[i]=T) or
         (x[i]=T \text{ and } y[i]=A) \text{ or }
         (x[i]=G \text{ and } y[i]=C) \text{ or }
         (x[i]=C \text{ and } y[i]=G) ), then:
        return 3
    return 4
```

Question 13:

Le programme se termine en cas de i=0 ou j=0, donc le nombre d'itération est i+j au maximum. En conséquence, la complexité de spatiale est en O(i+j).

Question 14:

On peut présenter la fonction **DIST_1()** en forme de A(n), avec A(n) est la nombre de nœuds dans l'arbre récursive.

Donc, on a :
$$A(i+j)=2A(i+j-1)+A(i+j-2)+1$$
 On introduit $A'(n)$, et on peut déduit que : $A'(i+j)=2A'(i+j-1)+A'(i+j-2)$

Le polynôme caractéristique est : r^2-2r-1 , et la racine positive est : $r=1+\sqrt{2}$ Car chaque l'appelle a une complexité de O(1). donc la complexité est $O((1+\sqrt{2})^{i+j})$ en total.

Question 15:

- Si j>0 et $D(i,j)=D(i,j-1)+C_{ins}$, nous pouvons dire que $x_i=_$, cela signifie que nous effectuons une opération d'insertion ici. Alors $\forall (\overline{s},\overline{t})\in Al^*(i,j-1), (\overline{s}\cdot -,\overline{t}\cdot y_i)\in Al^*(i,j)$
- Si i>0 et $D(i,j)=D(i-1,j)+C_{del}$, nous pouvons dire que $y_j=$ _, cela signifie que nous effectuons une opération de suppression ici. Alors $\forall (\overline{s},\overline{t})\in Al^*(i-1,j), (\overline{s}\cdot x_i,\overline{t}\cdot -)\in Al^*(i,j)$
- Si $D(i,j)=D(i-1,j-1)+C_{sub}(x_i,y_j)$, nous pouvons dire que $x_i=$ _ et $y_j=$ _, cela signifie que nous effectuons une opération de substitution ici. Alors $\forall (\overline{s},\overline{t})\in Al^*(i-1,j-1), (\overline{s}\cdot x_i,\overline{t}\cdot y_i)\in Al^*(i,j)$

Question 16:

```
def SOL_1(T, x, y):
   n <- |x|
   m <- |y|
   return SOL_1_REC(T, x, y, n, m)
def SOL_1_REC(T, x, y, i, j):
   if i=0 and j=0, then:
       return (" ", " ")
   if i=0, then:
       return ("_"*j, y[1, ..., j])
   if j=0, then:
       return (x[1, ..., i], "_"*i)
   a = T[i-1][j-1] + C_sub(i,j)
   b = T[i-1][j] + C_ins
   c = T[i][j-1] + C_del
   if a=T[i][j], then:
       al_x, al_y = SOL_1_REC(T, x, y, i-l, j-1)
       return (al_x + x[i], al_y + y[j])
   if b=T[i][j], then:
       al_x, al_y = SOL_1_REC(T, x, y, i-l, j)
       return (al_x + x[i], al_y + "_")
   al_x,al_j = SOL_1_REC(T, x, y, i, j-1)
        return (al_x + "_", al_y + y[i])
```

Question 17:

Nous l'avons déjà déduit, la complexité de **DIST_1()** est $O((1+\sqrt{2})^{i+j})$. Comme **SOL_1()** est similaire en structure au **DIST_1()**, donc la complexité est $O((1+\sqrt{2})^{i+j})$.

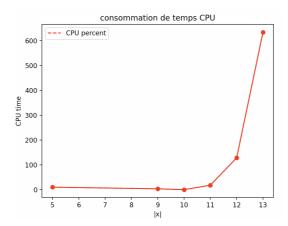
Pour la création de tableau, on a besoin de rappelle **DIST_1()** n*m fois, et après on crée le tableau, on exécute **SOL_1()**. Donc, la complexité est $O(nm(1+\sqrt{2})^{i+j}+(1+\sqrt{2})^{i+j})=O(nm(1+\sqrt{2})^{i+j})$

Question 18:

En combinant les algorithmes **DIST_1()** et **SOL_1()**, la complexité spatiale est la maximum de la complexité spatiale des deux algorithmes. En total, la complexité est O(i+j).

Test de performance du code :

La bibliothèque <u>psutil</u> a été utilisée pour obtenir le pourcentage d'utilisation du CPU et de la mémoire pendant l'exécution du code. Après des pré-expériences, nous avons conclu que lorsque |x| est supérieur à 13, l'exécution de **prog_dyn()** prendra plus de 10 minutes. Enfin, nous avons obtenu les traces suivantes sur les données qu'on obtenue :



Après tracer le graphe, on execute les commandes sur le terminal avec $|x|=10^3$, 10^4 , et $5*10^4$. Et on a \cdot

	Nom du processus	^	Mémoire	Threads	Ports	PID	Utilisateur
python3.9			580,9 Mo	2	27	6909	zhourunlin
python3.9			4,79 Go	2	27	6908	zhourunlin
python3.9			791,0 Mo	2	27	6910	zhourunlin

|x|=1000 pid = 6909; |x|=10000 pid = 69010; |x|=100000 pid = 6908

Amélioration de la complexité spatiale du calcul de la distance

Question 19:

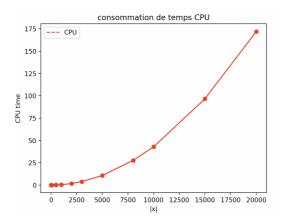
Quand on a:

 $T[i][j] = min\{T[i-1][j] + C_{ins}, T[i][j-1] + C_{del}, T[i-1][j-1] + C_{sub}[i-1][j-1]\} \\ \text{donc} \\ \text{quand on souhaite calculer } T[i][j], \\ \text{il suffit de prendre les valeurs dans des cases de coordonnée } (i,j-1), \\ (i-1,j-1), \\ (i-1,j) \\ \text{qui sont se située dans des lignes } i \\ \text{et } i-1$

Question 20:

Test de performance du code :

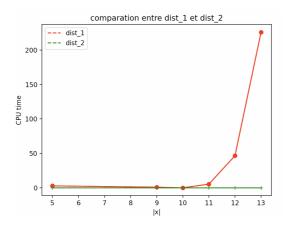
Après des pré-expériences, nous avons conclu que lorsque |x| est supérieur à 50000 (environs 3000s), l'exécution de **DIST_2()** prendra plus de 10 minutes. Enfin, nous avons obtenu les traces suivantes sur les données qu'on obtenue :



Après tracer le graphe, on execute les commandes sur le terminal avec $|x|=10^3$ et 10^4 . Et on a:

	Nom du processus	^	Mémoire	Threads	Ports	PID	Utilisateur
python3.9			50,5 Mo	2	27	3718	zhourunlin
python3.9			71,9 Mo	2	27	3719	zhourunlin
	pid 3718: x :	= 1000; pid 3719	: x = 10000;				

Comparaison entre DIST_1() et DIST_2() :



Amélioration de la complexité spatiale du calcul d'un alignement optimal par la méthode "diviser pour régner"

Question 21:

```
det mot_gaps(k):
    s <- ""
    for i de 1 à k, faire:
        s <- s+"_"
    return k</pre>
```

Question 22:

Question 23:

$$egin{aligned} x &= djwaaa; \, x_1 = djw; \, x_2 = aaa \ y &= aaadjw; \, y_1 = aaa; \, y_2 = djw \ D(x_1,y_1) &= 18 & inom{djw_---}{--aaa} \ D(x_2,y_2) &= 18 & inom{aaa_---}{--djw} \ D(x,y) &= 18
eq D(x_1,y_1) + D(x_2,y_2) & inom{djwaaaa_----}{--aaadjw} \end{aligned}$$

Question 24:

```
def SOL_2(x,y):
  bool=0
```

```
if |y| \ge |x|, then:
    bool=1
    x <-> y #changer le contenue de x, y
if len(x)=1:
   return (x,y)
if len(y)=1:
   return (x, align_letter_word(x,y))
if len(y)=0:
   return (x, mot_gaps(len(x)))
i <- len(x)//2
j <- coupure(x,y,i)</pre>
x1,y1 <- sol_2(x[0:i],y[0:j])
x2,y2 <- sol_2(x[i:],y[j:])
if bool==1:
   return(y1+y2, x1+x2)
return (x1+x2,y1+y2)
```

Question 25:

```
def coupure(x, y, i):
    #cree un tableau comme le graphe dans l'exemple(Page 13)
    T \leftarrow dessiner_T_2(x, y)
    Lc <- [0, 1, ..., |y|]
   Lt <- [0, 0, ...] #un tableau vide et sa taille est |y|
    for p de t+i à |x|, faire :
       for j de 0 à |y|, faire :
            if T[p][j][2] = "<-":
               Lt[j]<-Lt[j-1]
            else if T[p][j][2] = "^|" #vecteur vers haut
               Lt[j]<-Lc[j]
            else:
               Lt[j]<-Lc[j-1]
       Lc<-Lt
    return Lc[|y|]
def dessiner_T_2(x, y):
   \#l'algorithme\ est\ comme\ DIST\_2
   #on a seulemnt besoin de ajouter les vecteur dans le graghe
    n \leftarrow |x|, m \leftarrow |y|
   T <- tab[2][m+1]
                         #T est un tableau vide
                         #type de T : list(list(couple(int,str)))
   #Signification des caractères
    \#N, L, U, LU: none, left, up, left up
    for j de 0 à m+1, faire:
       T[0][j] <- [j*C_ins, N]
   for i de 1 à n+1, faire:
        T[1][0] <- [i*C_del,L]
        for j de 1 à m+1, faire:
            min = min{T[1][j-1]+C_ins,}
                       T[0][j]+C_del,
                       T[0][j-1]+COUT(x, y, i, j) }
            if min=T[1][j-1]+C_ins:
               dir=L
            if min=T[0][j]+C_del:
               dir=U
            else:
               dir=LU
            T[0][j]=[min, dir]
       T[0]<-T[1]
    return T
```

Question 26:

La création de tableau (**dessiner_T_2()**): un tableau de dimension n*m $\rightarrow O(n*m)$

Deux tableaux de dimension m $\rightarrow O(2m)$

Donc, la complexité spatiale de **coupure()** est en O(n*m)

Question 27:

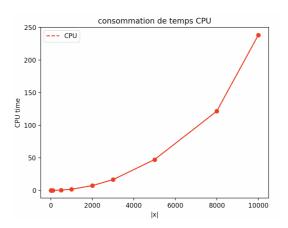
Dans $SOL_2()$, on exécute au plus $\lfloor log_2 |x| \rfloor$ fois. Pour chaque itération, on exécute une fois de coupure(), qui a une complexité spatiale de O(n*m). Donc, en total, la complexité est en $O(n*m*|log_2 n|)$.

Question 28:

Dans la fonction coupure(), on exécute une fois de **dessiner_T_2()** avec une complexité de O(|x|*|y|) et deux boucles fortes. On suppose que |x|=n et |y|=m, donc la complexité des boucles est en O(2nm). On ajoute les deux complexités, en total, c'est O(n*m).

Test de performance du code :

Après des pré-expériences, nous avons conclu que lorsque |x| est supérieur à 13, l'exécution de **prog_dyn()** prendra plus de 10 minutes. Enfin, nous avons obtenu les traces suivantes sur les données qu'on obtenue :



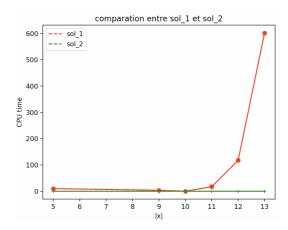
Après tracer le graphe, on execute les commandes sur le terminal avec $|x|=10^3,\,10^4$ et $10^5.$ Et on a:

Nom du processus	^	Mémoire	Threads	Ports	PID	Utilisateur
python3.9		58,6 Mo	2	27	7219	zhourunlin
python3.9		48,4 Mo	2	27	7220	zhourunlin
python3.9		48,5 Mo	2	27	7229	zhourunlin

|x|=1000 pid = 7220; |x|=10000 pid = 7229; |x|=100000 pid = 7219

Question 29:

Comparaison entre SOL_1() et SOL_2():



Une extension : l'alignement local de séquences (Ex 4) :

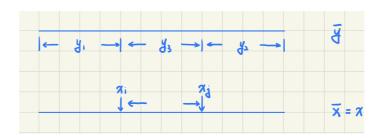
Question 30:

Quand |x| >> |y|, soit $i \in [1, |y|]$ et $j \in [1, |x|]$. Pour tous les i, il existe que $y_i = x_j$. Autrement dit que, y est un facteur de x. Donc, on peut présenter le cout d'alignement comme suivant :

$$Cout = |y| * C_{sub} + (|x| - |y|) * C_{del} \ = (|x| - |y|) * C_{del}$$
 , car $C_{sub} = 0$

Question 31:

Quand |x|>>|y|, selon la définition 4.1, on peut dire que y est un facteur de x. Pour obtenir un alignement de (x,y), on peut dessiner le graphe suivant :

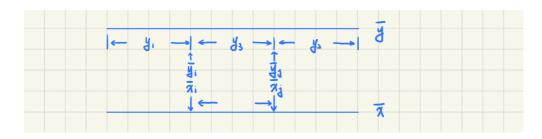


Car |x| est assez grand, \overline{x} est égale à x.

Et pour \overline{y} , nous l'avons divisé en trois parties y_1 , y_2 et y_3 :

Question 30:

Quand |x|<<|y|, pour tous les $i\in[1,|y|]$, il existe un $j\in[1,|x|]$ tel que $y_i=x_j$. Pour trouver un alignement de (x,y). On peut dessiner un graphe suivant :



Car |x| est assez grand, donc $x=\overline{x}$

Pour y, nous le divisons en trois parties : y_1 , y_2 et y_3 .

- Évidement, y_1 et y_2 n'ont pas besoin de aligner, les deux parties sont tout composé par '-'
- Pour $(y_3, x_{[i,j]})$, il est un alignement de $(y, x_{[i,j]})$. Dans la section suivante, nous nous concentrons sur cette partie.

Question 31:

Selon l'algorithme posée par le question, la complexité spatiale est en O(i*j), et la complexité est en $O((1+\sqrt{2})^{i+j})$ en utilisent **SOL_1()**. Cependant, nous rencontrons souvent les situations suivantes, comme le montre l'exemple suivant :

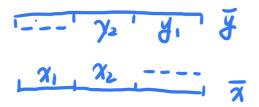
- pour l'exemple b, l'algorithme peut réduire la complexité en grande mesure aux deux dimensions (spatiale et temporelle).
- ullet mais dans l'exemple a (quand $x_{[i,j]}$ est proche que x)
 - o Ce traitement peut conduire à une pression de mémoire élevée
 - \circ En même temps, pour trouver la valeur de i et j corresponde, la complexité est en O(n*m) avec n=|x| et m=|y|. Ce qui peut-être augmenter le temps CPU aussi.

En termes de probabilité, la situation a se produit beaucoup plus souvent que b. En conclusion, ce n'est pas une bonne idée.

Question 32:

Alignement local:

On divise les mots x et y à deux parties x_1, y_1, x_2, y_2 , avec (x_2, y_2) est un meilleur facteur de (x, y). On peut obtenir (x_2, y_2) sur l'appelle de fonction **BEST_SOCRE(x, y)**.



Question 32:

Donc, sur le schéma, on déduire que :

•
$$\overline{x} = x_1 + x_2 + ALL_LOCAL(x_2, y)$$

•
$$\overline{y} = y_1 + y_2 + ALL_LOCAL(x, y_2)$$

- Complexité temporelle est $O(BEST_SOCRE(n,m)) + O(ALL_LOCAL(m\ ou\ n,k))$ avec $n=|x|, m=|y|, k=|x_2|=|y_2|$

Nous ne pouvons pas utiliser la méthode diviser pour régner pour résoudre ce problème, car après avoir divisé le mot en plusieurs parties, il pourrait en résulter que n'existe pas un meilleur facteur de (x,y).