实验报告

- 实验报告
 - 0 1. 解题思路
 - 1.1 INS 片段插入
 - 1.2 DEL 片段缺失
 - 1.3 DUP 片段串联重复
 - 1.4 INV 染色体倒位
 - 1.5 TRA 染色体间异位
 - 2. 运行代码

1. 解题思路

本题的本质其实就是找出两个字符串的最小编辑距离,因此很容易联想到用于找出最长公共子序列(Longest Common Subsequence, LCS)的动态规划解法,这部分详见 src/utils/utils.cpp 中函数 FuzzyCompare 的部分实现。

然而,朴素动态规划解法的时间复杂度和空间复杂度均为 O(mn),其中 m,n 表示两个字符串的长度。对于题目中 $m,n\approx 10^6$ 的规模来说,未免还是太大了。因此我的第一个思路是,将原字符串分成一个个片段,然后对每个片段逐一进行比较。这里片段的大小可以通过调整配置文件 $\operatorname{Src/utils/config.h}$ 中的 $\operatorname{CHUNK_SIZE}$ 字段进行修改。如此,时间复杂度和空间复杂度均降低到 $O(k\max(m,n))$,其中 k 表示片段的长度。当 k 较小时,可以有效降低时间的开销。

当然,朴素动态规划解法还是有点慢了。本解法最后实现的核心算法是基于贪心算法的 Myers' Diff Algorithm,时间复杂度和空间复杂度均为 O(d(m+n)),其中 d 表示两个字符串之间的编辑距离。本题中,两个字符串大体上是相同的,差别的数量最多只有 $50\times 1000\times 2=10^5$ 量级,当然实际上要比这个更小。在进行了分段优化后,期望时间复杂度和空间复杂度降低到 O(dk)。具体代码可参见 src/common/dna.cpp 中函数 Dna::FindDeltasChunk 的实现,对 Myers' Diff Algorithm 的详解可参考这篇文章 [1]。

Myers' Diff Algorithm 最终可以找到原字符串 ref 基础上所有的缺失片段和插入片段,接下来我们要考虑的是如何将它们转化为题目需求的 SV 类型。

1.1 INS - 片段插入

在 Myers' Diff Algorithm 中,我们会维护当前处理的字符所在的位置 (x,y)。其中 x 表示字符在原字符串 ref 中的位置,y 表示字符在修改字符串 sv 中的位置。我们记录节点在图中经过的路径 ^[2],其中在 x 轴上向右移动即表示删除字符,在 y 轴上向下移动即表示插入字符,沿对角线向右下移动即表示不作修改,跳到下一字符。

因此,将所有向下移动路径的起点和终点保存下来,即可作为 INS 类型的 SV 片段。

然而,在实现中会遇到一个问题。由于很多时候插入 / 删除的片段中会包含和后续字符相同的字符,因此原 Myers' Diff Algorithm 得到的路径往往是不连续的,即新增几个字符、跳过几个字符、又新增几个字符。这不符合题目中 SV 片段长度 $l\in[50,1000]$ 的要求。

这里我们的解决方案分为两部分:

首先,我们修改了 Myers' Diff Algorithm 中的部分逻辑。当节点沿着对角线向右下方移动结束(即跳过所有相同的字符)后,立即进行一次对 snake 长度的判断。其中,snake 表示节点沿对角线移动的距离。如果 snake 的长度小于 SNAKE_MIN_LEN 的值(可在配置文件中调整),即表示连续的相同字符数量没有超过设定的阈值,则将节点移回对角线的起点,本轮不进行跳过字符。如此,即可防止出现频繁的抖动,确保 SV 片段基本上是完整的片段。参见 src/common/dna.cpp:148。

其次,我们在保存 SV 片段时进行一次判定。如果在之前保存的同类型 SV 片段中,包含与当前片段**大 致**重叠或临近的片段,那么我们就将这两个片段进行合并(当然,对于过长的临近片段不会进行合并)。如此,即可确保不会出现 SV 片段的碎片。参见 src/common/dna_delta.cpp 中函数 DnaDelta::Combine 和 DnaMultiDelta::Combine 的实现,重点在于 src/common/range.cpp 中函数 FuzzyCompare 的实现。

这样以来,我们能够基本保证 INS 类型 SV 片段的正确性。

1.2 DEL - 片段缺失

基本同 INS 类型,区别在于 INS 类型保存向下移动的路径,DEL 类型则保存向右移动的路径。

1.3 DUP - 片段串联重复

在得到所有 INS 和 DEL 类型 SV 片段的基础上, 我们从中识别出剩下 3 种 SV 类型。

对于 DUP 类型,我们遍历所有的 INS 类型片段 [start, end),比较此片段字符串 SV[start'...end'](已预先保存)与其插入位置前面的字符串 REF[2*start-end...start] 是 否**大致**相同。如果是,则将此片段的类型修改为 DUP 类型。参见 src/common/dna.cpp 中函数 Dna::FindDupDeltas 的实现。

关于两个字符串的比较,我们进行两种判定:

- 1. 找出**最长公共子串**(Longest Common Substring)的长度,计算其覆盖率
- 2. 找出**最长公共子序列**(Longest Common Subsequence)的长度,计算其覆盖率

其中任意一个判定达到标准,即认为两个字符串大致相同,具体可参见 src/utils/utils.cpp 中函数 FuzzyCompare 的实现。这样可以尽可能应对 SV 片段重叠、SV 片段少量出错或未知等问题,提高算法 鲁棒性。

1.4 INV - 染色体倒位

对于 INV 类型,我们遍历同染色体下的所有 INS 和 DEL 类型片段,找出其中**大致**相邻且大小**大致**相同的 INS 和 DEL 类型片段,将其中 INS 类型片段的位置修改为与 DEL 类型片段对齐(只是为了和要求的输出格式相符),然后对其代表的字符串进行比较。字符串的比较方式同 DUP 类型中的描述,区别在于其中一个字符串要进行反向互补操作,即先进行反转,再逐位将 A, T 互换、 C, G 互换。如果字符串基本匹配,则移除对应的 INS 和 DEL 类型片段,新增一个 INV 类型片段。参见src/common/dna.cpp 中函数 Dna::FindInvDeltas 的实现。

1.5 TRA - 染色体间异位

TRA 类型类似于 INV 类型,我们遍历所有染色体的 INS 和 DEL 类型片段,找出每条染色体中**大致**相邻且大小**大致**相同的片段,分别放入一个 INS / DEL 缓存,然后移除。然后,我们遍历 INS 和 DEL 缓存,找出其中**大致**相邻且大小**大致**相同的 INS 和 DEL 类型片段,然后对其代表的字符串进行比较。字符串的比较方式同 DUP 类型中的描述。如果字符串基本匹配,则新增一个 TRA 类型片段。最后将未匹配的缓存中的片段放回原处。参见 src/common/dna.cpp 中函数 Dna::FindTraDeltas 的实现。

2. 运行代码

本项目使用 C++17 实现,要求使用 gcc 版本 > 7.0,或 clang 版本 > 5.0。本项目已于 macOS Catalina 10.15.7 + clang 12.0.0 (x86_64) 环境下通过测试,task 1 数据生成的 sv.bed 文件位于 tests/test_1/sv.bed 。

为了方便进行编译,本项目利用 GNU Make 编写了编译脚本。执行 make 即可构建项目,执行 make run 即可启动算法程序。Makefile 中默认使用 clang++ 作为编译器,如需改动,可以在 Makefile 文件中对应修改。Windows 环境下,推荐使用 Windows Subsystem for Linux (WSL) 或 Mingw-w64。

- 1. Investigating Myers' diff algorithm: Part 1 of 2 CodeProject ←
- 2. LCS 并不唯一,我们只保存找到的第一条;实现中,需要在每次发生编辑操作(节点移动到了其他 k-line 上)时保存当前 LCS 的快照,用于在最后进行回溯,这也是空间复杂度 O(d(m+n))的实际来源。 \hookleftarrow