Mini-Projet d'Algorithmique

VALETTE Manon – BEN KIRANE Malik

Novembre 2016

Table des matières

1 Partie théorique

Partie 1

Question 1.1 On peut énumérer tous les sous-ensembles C_k de paires (x_i, y_j) pour deux séquences $X = (x_i)_{1\leq i\leq d}$ et $Y = (y_i)_{1\leq i\leq d}$ et tester si ce sont des alignements. Il y a d^2 paires possibles, soit la paire est dans C_k, soit elle ne l'est pas, ce qui nous donne 2^{d^2} sous-ensembles C_k à tester.

Question 1.2 Soit M un alignement de X et Y. Supposons que $(x_m, y_n) \notin M$ et qu'il existe $i \leq m, j \leq n$ tels que $(x_i, y_n) \in M$ et $(x_m, y_j) \in M$ (i.e. x_m et y_n apparaissent dans M). Nécessairement $i < m$ et $j < n$ puisque x_m et y_n apparaissent au plus une fois. De plus comme il n'y a pas de croisement dans M et que $i < m$, on a $n < j$. Contradiction.

Notation Par abus, pour un alignement M de deux séquences $X = (x_i)_{1\leq i\leq m}$ et $Y = (y_j)_{1\leq j\leq n}$, on notera $x_k \in M$ lorsqu'il existe j, tel que $(x_k, y_j) \in M$, symétriquement on pourra aussi écrire $y_l \in M$, et on déduit les négations respectives.

Question 1.3 Les trois cas de figures suivants se déduisent de la réflexion précédente :
- $x_m \notin M$
- $y_n \notin M$
- $(x_m, y_n) \in M$

Notation Pour un alignement M de deux séquences $X = (x_i)_{1\leq i\leq m}$ et $Y = (y_i)_{1\leq i\leq n}$. On note $M_{i,j}$ le sous-alignement $\left\{(x_k, y_l) \in M \mid k \leq i,\ l \leq j\right\}$. On convient que $M = M_{m,n}$. Il est évident que $M_{i,j}$ est un alignement de ses sous-séquences correspondantes i.e. $(x_k)_{k\leq i}$ et $(y_l)_{l\leq j}$.

Question 1.4 Considérons M^* un alignement de coût minimal des séquences $(x_i)_{1\leq i\leq m}$ et $(y_j)_{1\leq j\leq n}$. Un tel alignement existe puisque l'ensemble des alignements pour une séquence donnée est fini.

1. lorsque $\underline{(x_m, y_n) \in M^*}$

$$F(m,n) = f(M^*) = \underbrace{\sum_{(x_i,y_j)\in M^*_{m-1,n-1}} \delta_{x_iy_j} + \sum_{x_i\notin M^*_{m-1,n-1}} \delta_{gap} + \sum_{y_j\notin M^*_{m-1,n-1}} \delta_{gap}}_{f(M^*_{m-1,n-1})} + \delta_{x_my_n}.$$

Or $M^*_{m-1,n-1}$ est de coût minimal pour ses sous-séquences correspondantes. Donc :

$$F(m,n) = F(m-1,n-1) + \delta_{x_my_n}.$$

2. lorsque $\underline{x_m \notin M^*}$, $M^*_{m-1,n}$ est optimal pour ses sous-séquences correspondantes. Donc :

$$F(m,n) = F(m-1,n) + \delta_{gap}$$

3. lorsque $\underline{y_n \notin M^*}$, de même $M^*_{m,n-1}$ est optimal et :

$$F(m,n) = F(m,n-1) + \delta_{gap}$$

Question 1.5 Afin d'optimiser le coût d'un alignement il suffit de prendre la plus petite valeur des trois cas de figures. Soit pour $i \geq 1,\ j \geq 1$:

$$F(i,j) = min\Big\{F(i-1,j-1) + \delta_{x_iy_j},\ F(i-1,j) + \delta_{gap},\ F(i,j-1) + \delta_{gap}\Big\}$$

Question 1.6 Soit $i \in \{1 \dots m\}$. Tout alignement $M_{i,0}$ est vide. Donc,

$$F(i,0) = \underbrace{\sum_{(x_i,y_j)\in M^*_{i,0}} \delta_{x_iy_j} + \sum_{y_j\notin M^*_{i,0}} \delta_{gap}}_{=0} + \sum_{x_i\notin M^*_{i,0}} \delta_{gap} = i\delta_{gap}.$$

Par symétrie, $F(0,j) = j\delta_{gap}$ pour tout $j \in \{1 \dots n\}$.

Question 1.7 On convient que l'on dispose de la primitive `MIN` renvoyant la valeur minimale d'un n-uplet. On convient aussi d'une primitive `creerMatrice(N,M,V)` qui initialise une matrice de taille $N \times M$ à valeurs uniques `V` et dont les indices sont compris entre `[0,0]` et `[N-1,M-1]`.

L'approche, ici, est de type programmation dynamique : `MEMO-COUT1` ne calcule `C[i,j]` ($F(i,j)$) que s'il n'a pas été calculé précédemment. `COUT1` appelle `MEMO-COUT1` $m \times n$ fois soit une compléxité temporelle en $\Theta(mn)$. Cette mémoïsation nous donne une complexité spatiale en $\Theta(mn)$.

La matrice `P` correspond aux pénalités de correspondances $\delta_{x_iy_j}$ et `d-gap` à la pénalité δ_{gap}.

```
MEMO-COUT1(C : Matrice(m,n), P : Matrice(m,n), d-gap, i, j)
  SI C[i,j] < 0 ALORS
    RETOURNER MIN(MEMO-COUT1(C, i-1, j-1) + P[i,j],
                  MEMO-COUT1(C, i-1, j) + d-gap,
                  MEMO-COUT1(C, i, j-1) + d-gap)
  SINON RETOURNER C[i,j]

COUT1(P : Matrice(m,n), d-gap)
  C <- creerMatrice(m+1,n+1,-1)
  C[0,0] <- 0
  POUR i = 1..m FAIRE
    C[i,0] <- i * d-gap
  POUR j = 1..n FAIRE
    C[0,j] <- j * d-gap
  POUR i = 1..m FAIRE
    POUR j = 1..n FAIRE
      C[i,j] = MEMO-COUT1(C, P, d-gap, i, j)
  RETOURNER C[m,n]
```

Remarque L'appel récursif de `MEMO-COUT1` dans la procédure qui porte le même nom est en pratique inutile vu que l'on suppose que dans l'itération des appels à cette procédure (dans `COUT1`) que `C[i-1,j-1]`, `C[i-1,j]` et `C[i,j-1]` ont déjà étés calculés ou intilitialisés.

Question 1.8 On dispose des `C[i,j]` : matrice globale des coûts des sous-alignements optimaux $M^*_{i,j}$. La liste de paires `M`, intialisée à la liste vide au début de l'algorithme est construite récursivement par `REC-SOL1`. Elle correspond à un alignement optimal pour la fonction coût f.

`P` et `d-gap` ont la même sémantique qu'à la question 1.7.

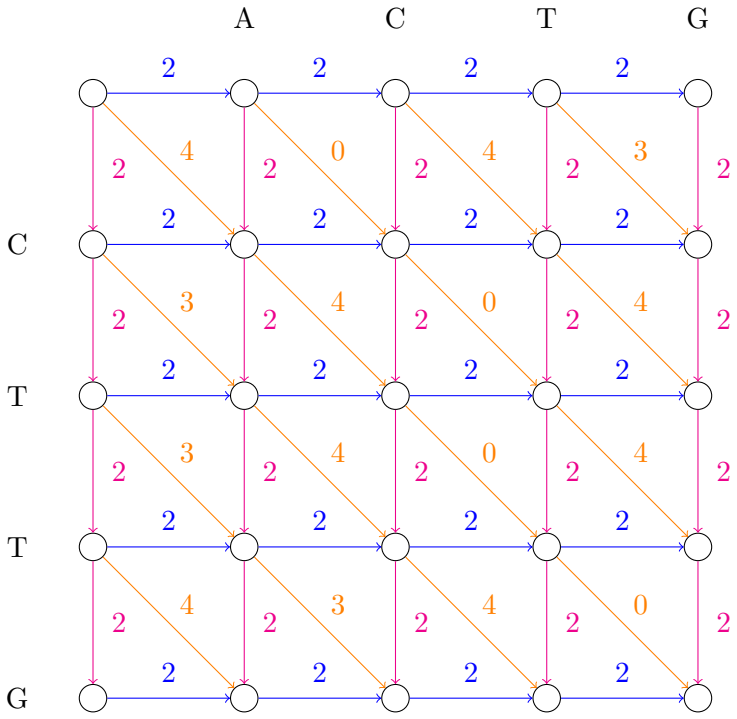
```
REC-SOL1(M : liste de paires, i, j, P, d-gap)
  SI i = 0 OU j = 0 ALORS TERMINER
  SI C[i,j] = C[i-1,j-1] + P[i,j] ALORS
    M.append((i,j))
    REC-SOL1(M, i-1, j-1, P, d-gap)
  SINON SI C[i,j] = C[i-1,j] + d-gap ALORS
    REC-SOL1(M, i-1, j, P, d-gap)
  SINON REC-SOL1(M, i, j-1, P, d-gap)

SOL1(m, n, P, d-gap)
  M <- creerListeVide()
  REC-SOL1(M, m, n, P, d-gap)
  RETOURNER M
```

`REC-SOL1(m,n)` à une complexité temporelle en $O(\max(m,n))$. Globalement cela nous donne toujours une complexité en $\Theta(mn)$. La complexité spatiale globale ne varie pas non plus ($\Theta(mn)$) pusique `M` occupe asymptotiquement au plus $O(m+n)$ espace.

Partie 2

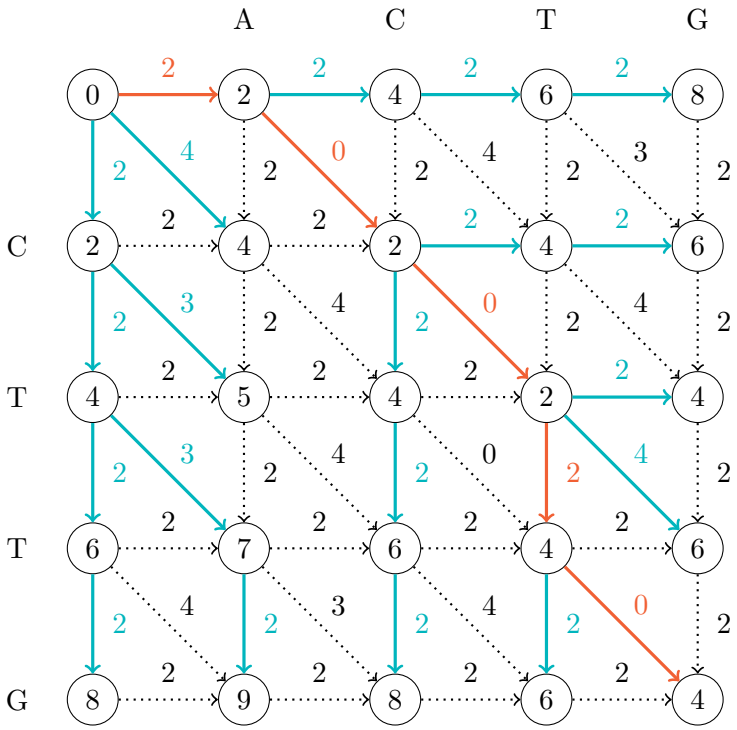
Question 2.1 Ci-dessous le graphe correspondant à l'exemple proposé.



Question 2.2 (facultatif)

Question 2.3 Pour déterminer un plus court chemin de $(0,0)$ à (m,n) dans G_{XY}, on peut utiliser l'algorithme de Dijkstra, dont la complexité est en $O((N)\log M)$ (pour un graphe à N sommets et M arcs).

L'arborescence des plus courts chemins obtenue avec l'algorithme de *Dijjstra* appliqué au graphe obtenu à la question 2.1 est représentée sur la figure ci-après par les arcs colorés, dont ceux en rouge constituent un plus court chemin de $(0,0)$ à (m,n).



L'alignement optimal correspondant (de cot 4) est donc :

–	A	C	T	–	G
–	–	C	T	T	G

Question 2.4 La complexité spatiale ne varie pas de celle proposée par l'algorithme de la partie 1, soit $\Theta(nm)$, l'algorithme de *Dijkstra* nous donne une arborescence des chemins de coûts minimum en $O(nm\log(nm))$ pour notre problème ($N = nm$ et $M = (n-1)(m-1) + n(m-1) + m(n-1)$ avec les notations de la question 2.3), soit une moins bonne complexité temporelle qu'à la partie 1.

Remarque On aurais très bien pu utiliser l'agorithme de *Bellman* vu que le graphe est sans circuits. Ainsi on aurait une compléxité temporelle en $O(nm)$ pour notre problème ($(N+M)$ pour un graphe à N sommets et M arcs). La complexité temporelle est préférable à celle de l'algorithme de Dijkstra, cependant c'est la même complexité qu'à la partie 1.

Partie 3

Question 3.1 Si on compare deux séquences de longueurs d identiques (pire cas), les algorithmes des parties précédentes ont besoin à une constante près (1 octet) de d^2 espace mémoire que l'on note T_{mem} (en octet), soit $T_{mem} = d^2$ ou $d = \sqrt{T_{mem}}$. Le tableau ci-dessous nous donne quelques applications numériques.

$T_{mem} =$	8Go	16Go	32Go
$d \approx$	89K	126K	179K

Question 3.2 On convient que l'on dispose d'un algorithme `P(i,j)`, cachant une structure de données spécifique, donnant les pénalités de correspondances $\delta_{x_i y_j}$ tel qu'en complexité spatiale, il ne dépend que de la taille des alphabets utilisés pour coder les séquences $X = (x_i)_{0 \leq i \leq m}$ et $Y = (y_j)_{0 \leq j \leq n}$ que l'on souhaite comparer. Entre autres, on ne stocke pas les pénalités de correspondances nulles.

Pour `COUT2`, on est toujours sur une approche type programmation dynamique : le calcul de $F(i, j)$ par l'algorithme auxiliaire `MEMO-COUT2` ne se fait que s'il n'a pas déjà été fait, l'argument `l` qui est passé en argument indique laquelle des deux lignes $i - 1$ (`l=0`) ou i (`l=1` par exemple) est nécessaire pour le calcul de $F(i, j)$.

L'algorithme auxiliaire `MAJ-MEMO`, auquel on passe en argument des références aux tableaux de mémoïsation, fait la transition avec la paire de lignes suivante.

```
MAJ-MEMO(T0, T1, i)
  T0 <- T1
  T1[0] <- i * d-gap
  POUR j = 1..n FAIRE
    T1[j] = -1

MEMO-COUT2(T0, T1, l, i, j)
  SI l = 0 ALORS RETOURNER T0[j]
  SI T1[j] < 0 ALORS
    RETOURNER MIN(MEMO-COUT2(T0, T1, 0, i, j-1) + P(i,j),
                  MEMO-COUT2(T0, T1, 1, i, j-1) + d-gap,
                  MEMO-COUT2(T0, T1, 0, i, j) + d-gap)
  SINON RETOURNER T1[j]

COUT2(i, j)
  T0[0..j] : tableau
  T1[0..j] : tableau
  T0[0] = 0
  T1[0] = d-gap
  POUR l = 1..j FAIRE
    T0[l] = l * d-gap
  POUR l = 1..i FAIRE
    T1[l] = -1
  POUR k = 1..i FAIRE
    POUR l = 1..j FAIRE
      MEMO-COUT2(T0, T1, 1, k, l)
    MAJ-MEMO(T0, T1, k+1)
  RETOURNER T1[j]
```

La complexité temporelle de `COUT2(i,j)` est la même que celle de `COUT1(i,j)` *i.e.* $\Theta(ij)$. Cependant, si on note $cs(P(i,j))$ la complexité spatiale de `P`, la complexité spatiale de `COUT2(i,j)` est en $\Theta(j + cs(P(i,j)))$. En supposant que $cs(P(i,j))$ est asymptotiquement majorée par σ^2 avec σ la taille de l'alphabet utilisé pour encoder nos séquences, et que σ^2 est majoré par j ce qui est une hypothése convenable avec les hypothéses faites sur la complexité spatiale de `P` et la taille des séquences à comparer, `COUT2(i,j)` est en $O(j)$.

Remarque Même remarque qu'à la question 1.7.

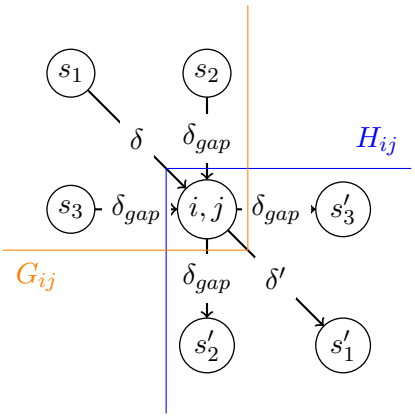
Question 3.3 `COUT2` suit le même principe que `COUT1` en translatant le problème au sous-graphe induit par le sous-ensemble de sommets $\{(k,l) \mid i \leq k \leq m \text{ et } j \leq l \leq n\}$.

```
COUT2BIS(i, j, m, n)
  T0[0..n-j] : tableau
  T1[0..n-j] : tableau
  T0[0] <- 0
  T1[0] <- d-gap
  POUR l = 1..n-j FAIRE
    T1[l] <- l * d-gap
  POUR k = 1..m-i FAIRE
    POUR l = 1..n-j FAIRE
      MEMO-COUT2(T0, T1, 1, k, l)
    MAJ-MEMO(T0, T1, k)
  RETOURNER T1[n-j]
```

Notations

- Pour $1 \leq i \leq m-1$ et $1 \leq j \leq n-1$ et deux séquences X et Y, on note G_{ij} (resp. H_{ij}) le sous-graphe de G_{XY} induit par le sous-ensemble de sommets $\{(k,l) \mid k \leq i \text{ et } l \leq j\}$ (resp. $\{(k,l) \mid k \geq i \text{ et } l \geq j\}$). On remarque que l'on a $G_{ij} \cap H_{ij} = (\{(i,j)\}, \{\})$.
- Pour un graphe $G = (S, A)$ orienté, valué et $s_o, s \in S$, on note $d_{G_{s_0}}(s)$ le coût du plus court chemin de s_o à s, et c_G la fonction valuation de G.
- Pour simplifier les notations, on pose $d_{G_{XY}} = d_{G_{XY}(0,0)}$, $d_{G_{ij}} = d_{G_{ij}(0,0)}$ et $d_{H_{ij}} = d_{H_{ij}(i,j)}$. On remarque que $g(i,j) = d_{G_{i,j}}((i,j))$ et $h(i,j) = d_{H_{ij}}((m,n))$

Question 3.4 Les cas où $(i,j) = (0,0)$ ou (m,n) sont triviaux. Soit $1 \leq i \leq m-1$ et $1 \leq j \leq n-1$ tels qu'un plus court chemin de $(0,0)$ à (m,n) dans G_{XY} passe par le sommet (i,j). Il existe $(s_{g_0} = (0,0), \ldots, s_{g_{l'}} = (i,j))$ un plus court chemin de $(0,0)$ à (i,j) dans G_{ij} et $(s_{h_0} = (i,j), \ldots, s_{h_l} = (m,n))$ un plus court chemin de (i,j) à (m,n) dans H_{ij}.



Les sommets $s_1, s_2, s_3,$ (resp. s'_1, s'_2, s'_3) représentés sur la figure ci-dessus sont les seuls prédécesseurs (resp. successeurs) de (i,j) dans G_{XY}. Si on note $((0,0), \ldots, s, (i,j), s', \ldots, (m,n))$ un plus court chemin de $(0,0)$ à (m,n) passant par (i,j) dans G_{XY}, on a nécessairement $s \in \{s_1, s_2, s_3\}$ et $s' \in \{s'_1, s'_2, s'_3\}$.

On peut alors – en utilisant les notations introduites – facilement montrer par récurrence finie sur $k \in \{0 \ldots l\}$ l'équation (1). Les équations (2) et (3) se déduisent alors simplement en interprétant les notations.

$$d_{G_{XY}}(m,n) = d_{G_{ij}}(i,j) + \sum_{k=0}^{l-1} c_{H_{ij}}(s_{h_k}, s_{h_{k+1}}) \tag{1}$$

$$= d_{G_{ij}}(i,j) + d_{H_{ij}}(m,n) \tag{2}$$

$$= g(i,j) + h(i,j) \tag{3}$$

Question 3.5 Listons les complexités spatiales de l'ensemble des structures de données mises en jeu par `SOL2(0,0,m,n)`.

— Structures intrinsèques :

$X2a, Y2b$	$\Theta(1)$
$Y2a, F2a$	$\Theta(n)$
$X2b, F2b$	$\Theta(m)$

— Les appels de `SOL1` sur $X2a$ et $Y2a$ avec $F2a$ ont une complexité spatiale en $\Theta(n)$.
— Les appels de `SOL1` sur $X2b$ et $Y2b$ avec $F2b$ ont une complexité spatiale en $\Theta(m)$.
— Un pire appel en termes de mémoire de `COUT2` se fait pour $i = 0$ et $j = \lceil \frac{m-n}{2} \rceil$. Soit une compléxité spatiale en $O\big(max(m,n)\big)$ (étape 1).
— De même pour la complexité spatiale de `COUT2BIS`.

La complexité spatiale de l'appel `SOL2(0,0,m,n)` est donc bien en $O(m+n)$.

2 Mise en oeuvre

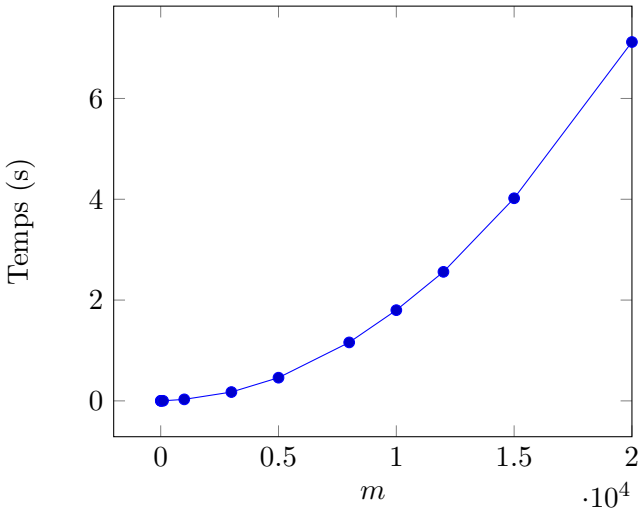
Dans cette partie du rapport, nous ne suivrons pas l'ordre des questions par faute de temps. Nous résumerons plutôt les diffrentes étapes de nos deux implémentation `i-java` (*i.e* implémentation en `JAVA(JDK8)`) et `i-c` (*i.e* implémentation en `C`) et analyserons brièvement quelques résultats.

Nous avons chacun implémenté une version diffénte de `COUT1` et `SOL1`. Nous nous intéresserons à l'implémentation des autres algorithmes et à une analyse plus poussée des résultats dans le temps imparti jusqu'à la soutenance le 28 novembre 2016.

(VALETTE) `i-c`

Les deux fonctions `COUT1` et `SOL1` sont programmées en C et contenues dans le fichier `cout_sol_1.c` (en-tête : `cout_sol_1.h`). Le jeu d'essai est fourni dans le fichier `prod.c`. Le `Makefile` fourni permet de compiler tous les fichiers du projet avec l'utilitaire `make`, sur toute version de `gcc` supportant le standard C11.

Temps d'excution de SOL1 en fonction de m



Pour la fonction `COUT1`, la plus grande valeur de m traitable en un temps raisonnable (environ 7 secondes) est 20 000 (`Inst_20000_64.adn`). Il en est de même pour la fonction `sol1`. (Caractéristiques mémoire : 8Go)

(BEN KIRANE) `i-java`

Avec une volonté de faciliter la lecture du code et sa réutilisation, le langage choisi dans cette partie est `JAVA`. On peut dans un premier temps être perplexe vis-à-vis de la complexité en mémoire et en temps d'un programme orienté objet (OO) mais les premiers essais – je n'ai pas encore testé les instances dont les chaînes font plus de 10 000 nucléotides – sont plutôt satisfaisants et ne s'écartent pas trop de la version `i-c`.

Cependant, il me reste bien entendu à améliorer le code, à le tester sur de plus grandes instances et implémenter les autres algorithmes de la partie théorique (3).

Dans cette première phase d'implémentation, une importance particulière à été donnée à la modularité et à l'articulation des objets manipulés :

instances La classe `PaireDeSequence` permet de manipuler les instances.

pénalités La classe abstraite `AbstractPenalites` et sa première éxtension `PenalitesInteger` permettent de manipuler les pénalités de correspondances attribuées à des couples de nucléotides donnés, avec notamment un format de fichier facilitant les tests.

optimisation La classe abstraite `AbstractCompare` et sa première èxtension `CompareInteger1` permettent de résoudre le problème posé à la première sous-partie de la partie théorique.

tests Les classes `Afficher`, `AfficherPenalites` et `TestCompare1` illustrent les trois points décrits ci-dessus.

Enfin on pourra se référer à la documentation (`i-java/doc`) et aux sources (`i-java/src`) pour mieux comprendre l'implémenation de ce qui à été traité.