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.

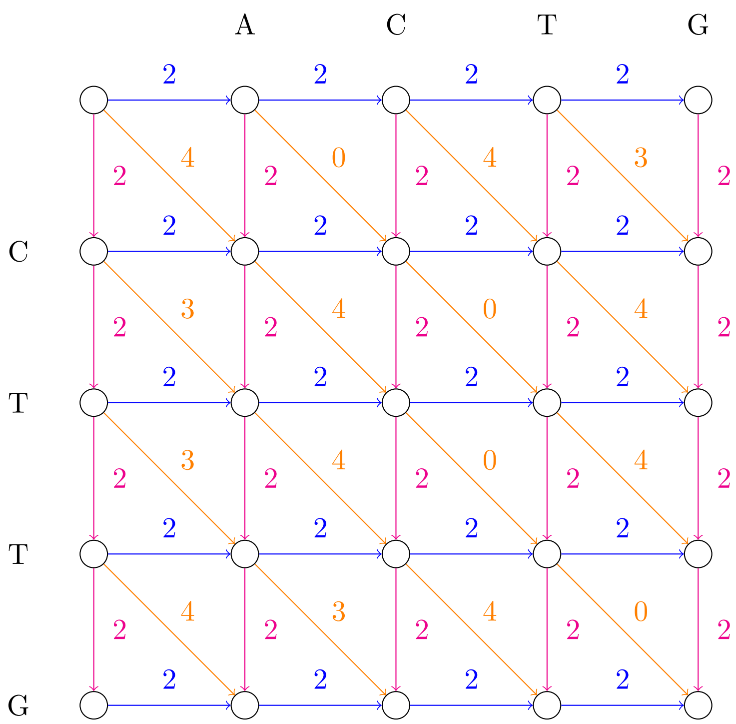
```
REC-SOL1(M : liste de paires, i, j, P, d-gap)
  SI i = 0 OU j = 0 ALORS TERMINER
  SI C[i,j] = C[i-1,j-1] + P[i,j] ALORS
    M.append((i,j))
    REC-SOL1(M, i-1, j-1, P, d-gap)
  SINON SI C[i,j] = C[i-1,j] + d-gap ALORS
    REC-SOL1(M, i-1, j, P, d-gap)
  SINON REC-SOL1(M, i, j-1, P, d-gap)

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

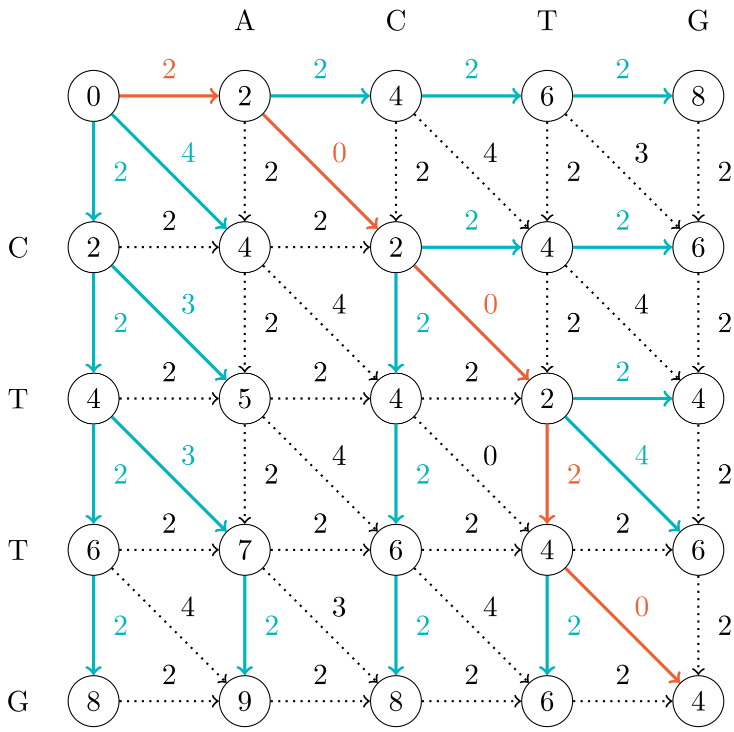
Question 2.1 Ci-dessous le graphe correspondant à l'exemple proposé.



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 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

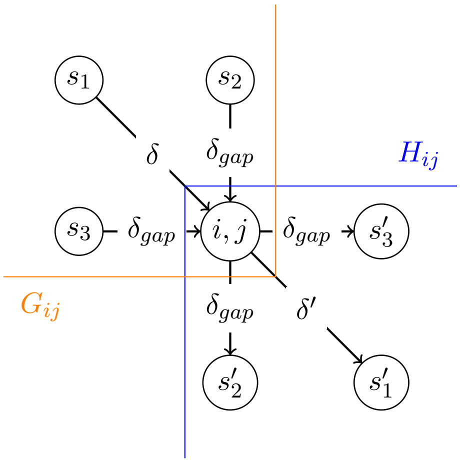
- Pour $1 \leq i \leq m-1$ et $1 \leq j \leq n-1$ et deux séquences X et Y, on note G_{ij} (resp. H_{ij}) le sous-graphe de G_{XY} induit par le sous-ensemble de sommets $\{(k,l) \mid k \leq i \text{ et } l \leq j\}$ (resp. $\{(k,l) \mid k \geq i \text{ et } l \geq j\}$). On remarque que l'on a $G_{ij} \cap H_{ij} = (\{(i,j)\}, \{\})$.
- 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.

$$
\begin{aligned}
d_{G_{XY}}(m,n) &= d_{G_{ij}}(i,j) + \sum_{k=0}^{l-1} c_{H_{ij}}(s_{h_k}, s_{h_{k+1}}) &\quad (1)\\
&= d_{G_{ij}}(i,j) + d_{H_{ij}}(m,n) &\quad (2)\\
&= g(i,j) + h(i,j) &\quad (3)
\end{aligned}
$$



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 :

$$\begin{array}{c|c} X2a, Y2b & \Theta(1) \\ Y2a, F2a & \Theta(n) \\ X2b, F2b & \Theta(m) \end{array}$$

— 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 $O(m + n)$.

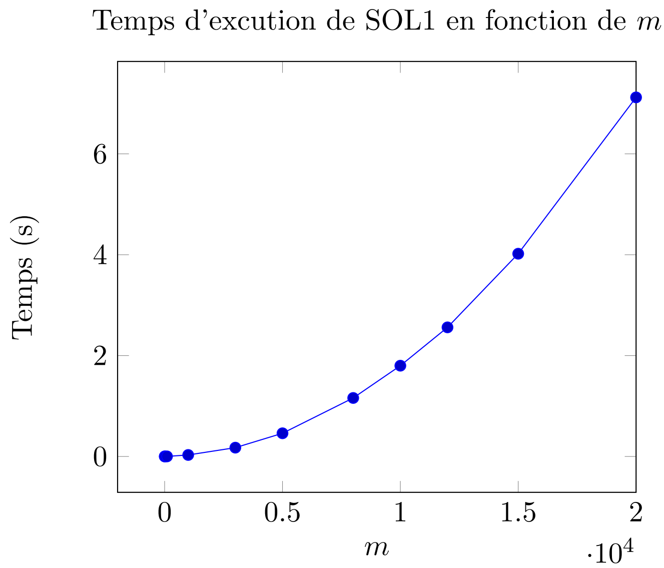
2 Mise en oeuvre

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.



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 facilité la lecture du code et de sa réutilisation, le langage choisi dans cette partie est `JAVA`. On peut dans un premier temps être perplexe 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'écarte pas trop de la version `i-c`. Cependant, il me reste bien entendu à améliorer le code et à le tester sur de plus grandes instance. Dans cette première phase d'implémentation, une importance particulière à été donnée à la modularité et 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 attribués à des couples de nucléotides données, avec notamment un format de fichier facilitant les test.

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.