# Mini-Projet d'Algorithmique

VALETTE Manon – BEN KIRANE Malik

Novembre 2016

## 1 Partie théorique

### Partie 1

**Question 1.1** On peut énumérer tous les 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 se sont des alignements. Il y a $d^2$ paires possibles, soit la paires est dans $C_k$, soit elle ne l'est pas, ce qui nous donne $2^{d^2}$ sous-ensembles $C_k$ 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 $i < m$, $n < j$. Contradiction.

**Notation** Par abus, pour un alignement $M$ de deux séquences $X = (x_i)_{0\leq i\leq m}$ et $Y = (x_j)_{0\leq j\leq n}$, 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 $\Big\{(x_k, y_l) \in M \mid k \leq i,\ l \leq j\Big\}$. 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 $\underline{(x_m, y_n) \in M^*}$

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

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

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

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

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

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

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

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 valeur unique `V` et dont les indicices sont compris entre `[0,0]` et `[N-1,M-1]`.

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

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

```
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]
```

**Question 1.8** On dispose des `C[i,j]` : matrice gloable des coûts des sous-alignements optimaux $M^*_{i,j}$. La liste de paire `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.

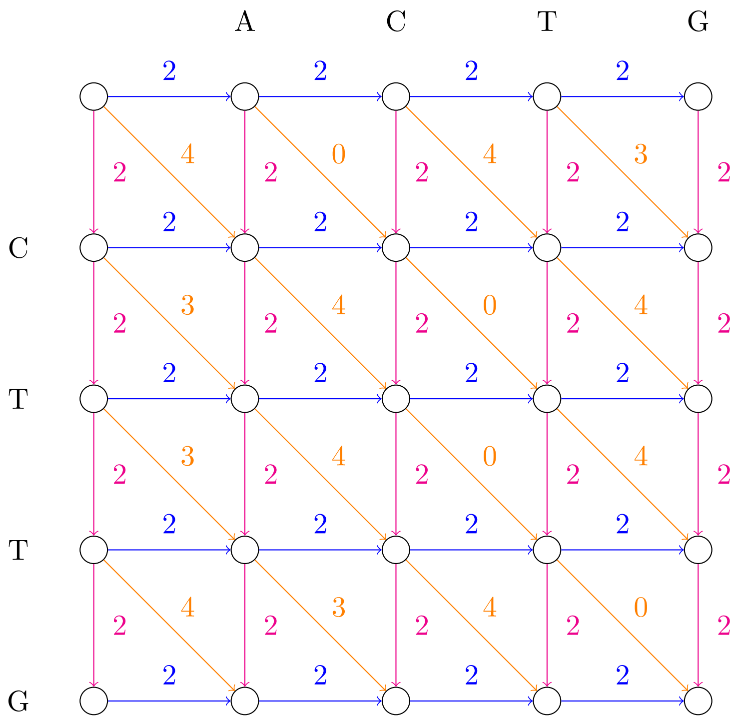
```
REC-SOL1(M : liste de paires, i, j, P, d-gap)
  SI i = 0 OU j = 0 ALORS TERMINER
  SI C[i,j] = C[i-1,j-1] + P[i,j] ALORS
    M.append((i,j))
    REC-SOL1(M, i-1, j-1, P, d-gap)
  SINON SI C[i,j] = C[i-1,j] + d-gap ALORS
    REC-SOL1(M, i-1, j, P, d-gap)
  SINON REC-SOL1(M, i, j-1, P, d-gap)

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

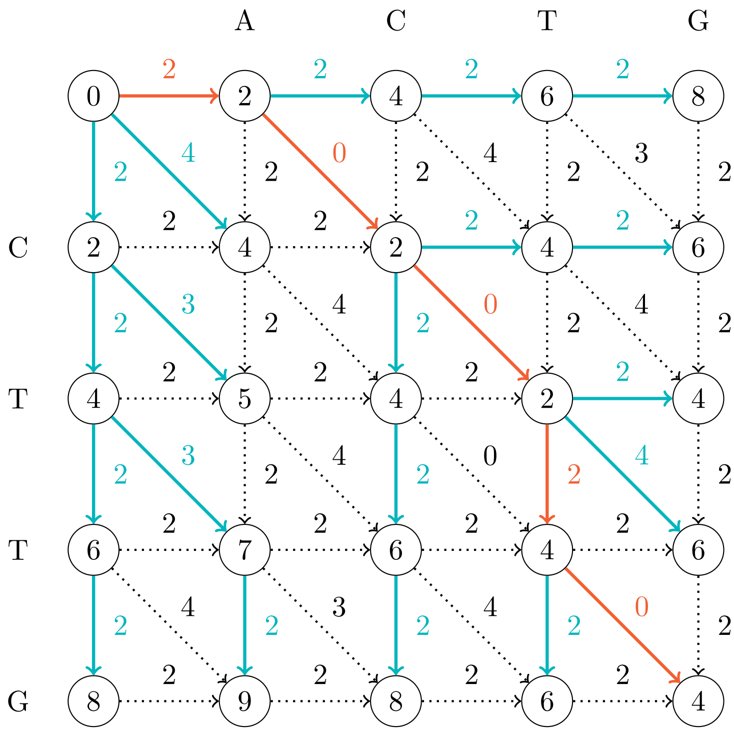
**Question 2.1** Ci-dessous le graphe correspondant à l'exemple proposé.



**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 $O((N+M)\log N)$ (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 compléxité 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 compléxité temporelle qu'à la partie 1.

### Partie 3

**Question 3.1** Si on compare deux séquences de longeurs $d$ identiques (pire cas), les algorithmes des parties précédentes ont besoins à une constante prêt (1 octet) de $d^2$ espace mémoire que l'on note $T_{mem}$, soit $d = \sqrt{T_{mem}}$. 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 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 autre 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 passée 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`, auqel 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 $\sigma^2$ avec $\sigma$ la taille de l'alphabet utilisé pour encoder nos séquences, et que $\sigma^2$ est majoré par $j$ qui est une hypothése convenable avec les hypothése faite sur la complexité spatiale de `P` et la taille des séquences à comparé, `COUT2(i,j)` est en $O(j)$.

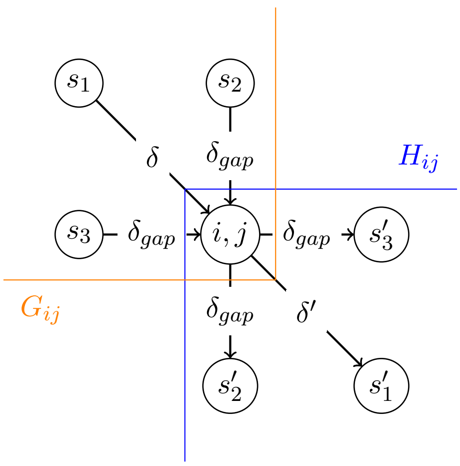
**Question 3.3** `COUT2` suit le même principe que `COUT1` en translatant le problème au sous graphe induit par le sous-ensemble de sommets $\{(k,l) \mid i \le k \le m \text{ et } j \le l \le n\}$.

```
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 $1 \le i \le m-1$ et $1 \le j \le n-1$ et deux séquences $X$ et $Y$, on note $G_{ij}$ (resp. $H_{ij}$) le sous-graphes de $G_{XY}$ induit par le sous-ensemble de sommets $\{(k,l) \mid k \le i \text{ et } l \le j\}$ (resp. $\{(k,l) \mid k \ge i \text{ et } l \ge j\}$). 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 $g(i,j) = d_{G_{i,j}}\big((i,j)\big)$ et $h(i,j) = d_{H_{ij}}\big((m,n)\big)$

**Question 3.4** Les cas ou $(i,j) = (0,0)$ ou $(m,n)$ sont triviaux. Soit $1 \le i \le m-1$ et $1 \le j \le n-1$ tels que 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 prédecesseurs (resp. succeseurs) de $(i,j)$ dans $G_{XY}$. Si on note $((0,0),\dots,s,(i,j),s',\dots,(m,n))$ 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 $k \in \{0 \dots l\}$ l'équation (1). Les équations (2) et (3) se déduisent alors simplement en interprétant les notations.

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

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

— Structures intraséques :

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

— 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 $O(m+n)$.