# Spark 平台实现 Smith-Waterman 算法

陈允文, 车丹丹

2018 年 9 月 6 日

## 1 概要

本报告主要讲了如何在 Spark 平台上实现 Smith-Waterman 算法. 首先, 介绍了基本的 SW 算法: SW 算法是对两条序列进行比对, 得到局部最优比对. 当查询某条序列与数据库中的哪些序列的相似度最大的时候 (1 vs n), 我们就需要做 n 次比对, 这是一个相当耗时的工作, 因此我们可以想到利用 Spark 平台, 将数据库中的序列分割到不同的结点, 并行的进行比对 (与 mapreduce 中的 map 过程相似), 最后再把所有比对的结果汇总 (reduce 过程), 这样就可以大幅度的减少比对时间.

## 2 Smith-Waterman

设要比对的两序列为 $A = a_1a_2 \dots a_n$ 和 $B = b_1b_2 \dots b_n$, 其中 $n$,$m$ 分别代表 $A$,$B$ 的长度.

### 2.1 确定置换矩阵和空位罚分方法

在本实验中, 我们采用 BLOSUM50 作为置换矩阵, 空位延伸罚分模型作为空位罚分的计算方式. 空位延伸罚分就是当存在连续的多个空位的时候, 我们加重开头的空位的罚分权重, 降低后续的空位的罚分的权重, 使得序列比对更具有生物学意义. 例如当有连续 k 个空位的时候罚分可以表示成 $W_k = u(k-1) + v$, 本实验中 $u = 1, v = 5$.

- $s(a, b)$ 表示元素 $a$,$b$ 之间的相似得分, 可以通过访问置换矩阵的 $(a, b)$ 元素得到.

- 长度为 $k$ 的空位罚分.

### 2.2 生成得分矩阵

1. 创建得分矩阵 $M_{(n+1,m+1)}$, 初始化其首行首列.$M_{k0} = M_{0l} = 0, (0 \leq k \leq n, 0 \leq l \leq m)$

2. 从左到右, 从上到下对矩阵的剩余部分按如下公式进行填充.

$$M_{i,j} = max \begin{cases} M_{i-1,j-1} + s(a_i, b_j), \\ max_{k \geq 1}\{M_{i-k,j} - W_k\}, \quad \text{其中}(1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m). \\ max_{l \geq 1}\{M_{i,j-l} - W_l\}, \\ 0 \end{cases}$$

### 2.3 回溯

1. 找到得分矩阵中的最大元素 $M_{i0,j0}$,

2. 然后找出 $\max\{M_{i0,j0-1}, M_{i0-1,j0}, M_{i0-1,j0-1}\}$, 并记录下来新的坐标为 $(i_{new}, j_{new})$

3. 对新的坐标,$i_0 := i_{new}, j_0 := j_{new}$, 执行上一步. 直到遇到矩阵中的 0 元素.

4. 根据回溯的坐标, 对应上序列, 就可以得到比对之后的两个序列的相似子序列.

## 3 Spark

### 3.1 安装

直接下载然后解压就可以了. 版本是 spark-2.3.1-bin-hadoop2.7. Download Spark 然后是要配置环境,Spark/conf/目录下新建一个 spark-env.sh 文件, 并写入以下内容:

```
SPARK_WORKER_CORE=5
SPARK_WORKER_INSTANCES=5
```

SPARK_WORKER_MEMORY=6g

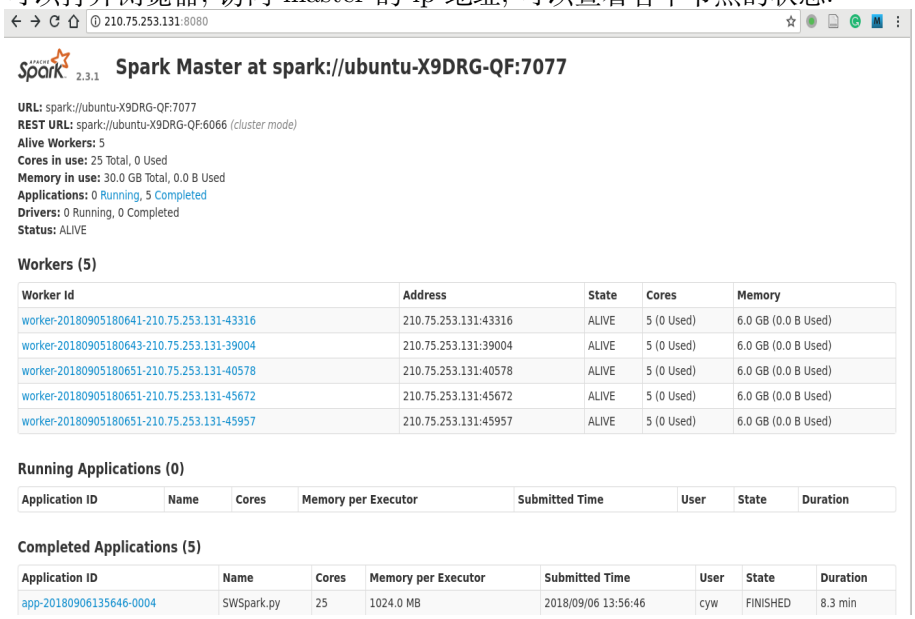
分别定义了每个 worker 的核数,worker 的数量, 以及每个 worker 的内存, 其中的数字可以依据实际情况进行修改.

## 3.2 使用

我们使用的是 standalone 模式来模拟一个集群. 在 Spark 的文件夹里输入以下命令即可:

```
./sbin/start-master.sh
./sbin/start-slaves.sh spark://127.0.1.1:7077
./bin/spark-submit --master spark://127.0.1.1:7077 SWSpark.py
```

可以打开浏览器, 访问 master 的 ip 地址, 可以查看各个节点的状态:




## 3.3 RDD

RDD(Resilient Distributed Dataset, 弹性式分布数据集) 是 Spark 的对数据的核心抽象. Spark 对数据的所有操作不外乎创建 RDD, 转化 RDD 以及调用 RDD 操作进行求值. 而在这一切的背后,Spark 会自动将 RDD 分发

到集群上, 并将操作并行化执行. 对于这次实验, 我们将 db.file 读入 Spark 作为一个 RDD 实例, 然后 Spark 就能自动将 db.file 中的文件分发到集群上, 并行化执行操作.

# 4 核心代码

下面是核心代码:

```
# python code
0. sub_mat = MatrixInfo.blosum50
1. db = sc.textFile('db.file')
2. db = db.map(lambda x: x.split(','))
3. query = sc.textFile('query.file')
4. query = query.collect()[0]
5. aligned = db.map(lambda x:alignment(dbs=x,query=query))
6. aligned =aligned.sortBy(lamdba x:x[1],ascending=False)
```

第 0 行: 把 BLOSUM50 作为置换矩阵
第 1-4 行: 读入蛋白质数据库序列和查询序列
第 5 行: 使用 Smith-Waterman 算法对序列进行比对, 其中的 alignment 是在外部定义好的 SW 算法
第 6 行: 将序列按得分从高到低进行排序

# 5 实验结果

为了验证 spark 的准确性, 我们准备了两个实验, 一是利用前边提到的配置, 在 spark 平台运行 Smith-Waterman 算法; 另一个是则是完全单机, 使用纯粹的 python 编程语言, 运行 Smith-Waterman 算法, 最后我们都取了前 7 个结果 (3,5 都只是前 7 的一个真子集) 进行比较, 来确定 spark 平台的准确性.

### 5.1 集群

| | | |
|---|---|---|
| **0** | UniRef100_Q91G54 | 445.0 |
| **1** | UniRef100_Q197F3 | 112.0 |
| **2** | UniRef100_Q6GZX4 | 100.0 |
| **3** | UniRef100_Q91G57 | 93.0 |
| **4** | UniRef100_Q197D2 | 90.0 |
| **5** | UniRef100_Q197E9 | 87.0 |
| **6** | UniRef100_Q91G88 | 85.0 |

### 5.2 单机

| | | |
|---|---|---|
| **0** | 'UniRef100_Q91G54' | 445.0 |
| **1** | 'UniRef100_Q197F3' | 112.0 |
| **2** | 'UniRef100_Q6GZX4' | 100.0 |
| **3** | 'UniRef100_Q91G57' | 93.0 |
| **4** | 'UniRef100_Q197D2' | 90.0 |
| **5** | 'UniRef100_Q197E9' | 87.0 |
| **6** | 'UniRef100_Q91G88' | 85.0 |

通过对比我们发现,spark 平台的分布式运行出来的结果与单机情况下运行出来的结果一致.