# Une nouvelle heuristique pour l'alignement de motifs 2D par programmation dynamique

Émilie Chanoni, Thierry Lecroq et Alexandre Pauchet
Emilie.Chanoni@univ-rouen.fr, Thierry.Lecroq@univ-rouen.fr,
Alexandre.Pauchet@insa-rouen.fr

Psychologie et Neurosciences de la Cognition et de l'Affectivité (EA 4306)
Laboratoire d'Informatique, de Traitement de l'Information et des Systèmes (EA 4108)
Université de Rouen & INSA-Rouen

Journees Francophones de Plani cation, Decision et Apprentissage pour la conduite des systemes
19 { 20 juin 2008 { Metz

# Plan

# Plan

# Alignement de séquences

## Alignements deux à deux

- utilises pour comparer 2 sequences $x$ (de longueur $m$) et $y$ (de longueur $n$)
- comment transformer $x$ en $y$ ?
- largement utilises en bioinformatique
- constituent un moyen pour visualiser les ressemblances entre 2 sequences
- bases sur des notions de distance ou de similarite
- calcules par programmation dynamique en $O(mn)$

## 2 types

- globaux
- locaux (algorithme de Smith et Waterman, 1981)

# Alignement de séquences

## Exemple

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| A | C | G | — | — | A |
| A | T | G | C | T | A |

est un alignement de ACGA et ATGCTA.

Une solution peut egalement être donnee sous forme de script d'edition comme suit :

| Operation | Sequence resultat |
|---|---|
| substitution de A par A | A |
| substitution de C par T | AT |
| substitution de G par G | ATG |
| insertion de C | ATGC |
| insertion de T | ATGCT |
| substitution de A par A | ATGCTA |

# Alignements locaux

## 3 opérations d'édition

- substitution d'un symbole de $x$ a une position donnee par un symbole de $y$
- suppression d'un symbole de $x$ a une position donnee
- insertion d'un symbole de $y$ dans $x$ a une position donnee

## Scores

- $Sub(a, b)$ : score de la substitution du symbole $a$ par le symbole $b$
- $Del(a)$ : score de la suppression du symbole $a$
- $Ins(a)$ : score d'insertion du symbole $a$

# Mesure de similarité

## Mesure de similarité globale

$$d(x, y) = \max\{\text{score de } \gamma \mid \gamma \in \Gamma_{x,y}\}$$

ou :

- $\Gamma_{x,y}$ : ensemble de toutes les suites d'operations d'edition qui transforment $x$ en $y$
- le score d'un element $\gamma \in \Gamma_{x,y}$ est la somme des scores de ses operations d'edition elementaires

## Score d'édition

$s(x, y) =$ similarite maximale entre un segment de $x$ et un segment de $y$

# Programmation dynamique

$t[i,j] = s(x[0\,..\,i], y[0\,..\,j])$ pour $i = 0, \ldots, m-1$ et $j = 0, \ldots, n-1$

$s(x,y) = \max\{t[i,j]\}$

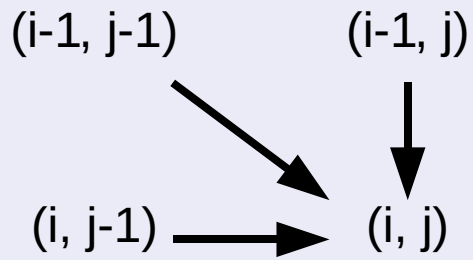
## Formules de récurrence

$$
\begin{aligned}
t[-1,-1] &= 0\,, \\
t[i,-1] &= 0\,, \\
t[-1,j] &= 0\,, \\
t[i,j] &= \max \begin{cases} t[i-1,j-1] + \mathit{Sub}(x[i], y[j])\,, \\ t[i-1,j] + \mathit{Del}(x[i])\,, \\ t[i,j-1] + \mathit{Ins}(y[j])\,, \\ 0 \end{cases}
\end{aligned}
$$

pour $i = 0, 1, \ldots, m-1$ et $j = 0, 1, \ldots, n-1$

# Programmation dynamique

La valeur a la position $(i, j)$ de la table $t$ ne depend que des valeurs aux 3 positions voisines :




Un alignement optimal (de score maximal) peut être produit en e ectuant un trace arriere des calculs des valeurs de la table $t$ a partir de la position maximale jusqu'a une position de valeur $0$.

# Alignements locaux

## Exemple

$Sub(a, a) = 2$, $Sub(a, b) = -1$ et $Del(a) = Ins(a) = -2$

| $T$ | $j$ | $-1$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $i$ | | $y[j]$ | Z | A | T | G | C | T | A | W |
| $-1$ | $x[i]$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | X | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| 2 | C | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 2 | 2 | 0 | 1 |
| 3 | G | 0 | 0 | 0 | 0 | 3 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 4 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | 1 | 2 | 0 | 3 | 1 |
| 5 | Y | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 2 | 2 |

# Alignements locaux

## Exemple

$Sub(a, a) = 2$, $Sub(a, b) = -1$ et $Del(a) = Ins(a) = -2$

| $T$ | $j$ | $-1$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $i$ | | $y[j]$ | Z | A | T | G | C | T | A | W |
| $-1$ | $x[i]$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | X | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| 2 | C | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 2 | 2 | 0 | 1 |
| 3 | G | 0 | 0 | 0 | 0 | 3 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 4 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | 1 | 2 | 0 | 3 | 1 |
| 5 | Y | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 2 | 2 |

# Alignements locaux

## Exemple

$Sub(a, a) = 2$, $Sub(a, b) = -1$ et $Del(a) = Ins(a) = -2$

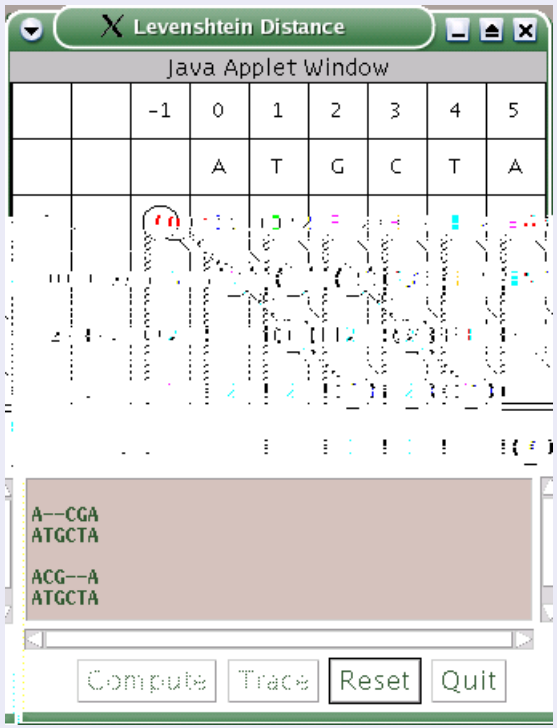
| $T$ | $j$ | $-1$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $i$ | | $y[j]$ | Z | A | T | G | C | T | A | W |
| $-1$ | $x[i]$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | X | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | **0** | 0 | 0 | 2 | 0 |
| 2 | C | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | **2** | 2 | 0 | 1 |
| 3 | G | 0 | 0 | 0 | 0 | 3 | 1 | **1** | 0 | 0 |
| 4 | A | 0 | 0 | 2 | 0 | 1 | 2 | 0 | **3** | 1 |
| 5 | Y | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 2 | 2 |

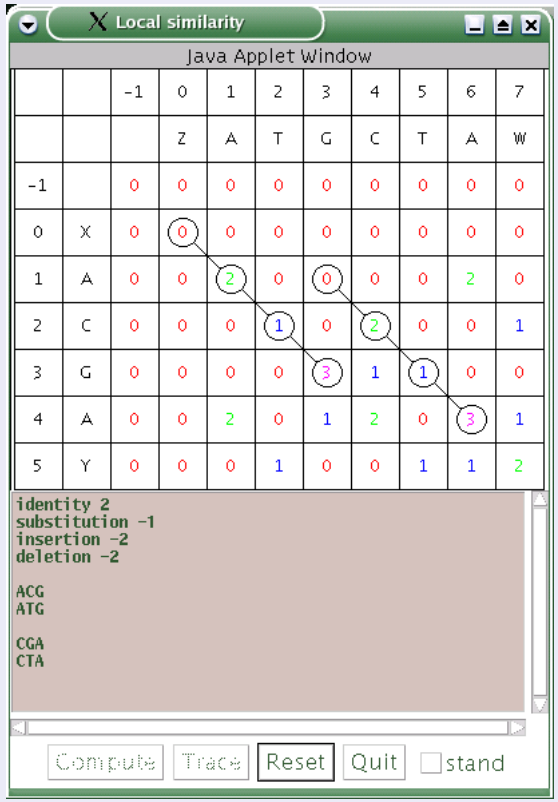
C G A
C T A

# Comparaison de séquences

## Sur le web

http://monge.univ-mlv.fr/~lecroq/seqcomp



# Plan

# 2D

| $X$ | 0 | 1 | 2 |
|---|---|---|---|
| 0 | A | B | C |
| 1 | D | E | F |
| 2 | G | H | I |
| 3 | J | K | L |

$|X| = m_1 \times n_1$

| $Y$ | 0 | 1 |
|---|---|---|
| 0 | E | C |
| 1 | H | I |
| 2 | K | L |

$|Y| = m_2 \times n_2$

# Travaux précédents


K. Krithivasan and R. Sitalakshmi

E cient two-dimensional pattern matching in the presence of errors

*Information Sciences*, 43(3), 169{184, 1987

R. Baeza-Yates

Similarity in Two-Dimensional Strings

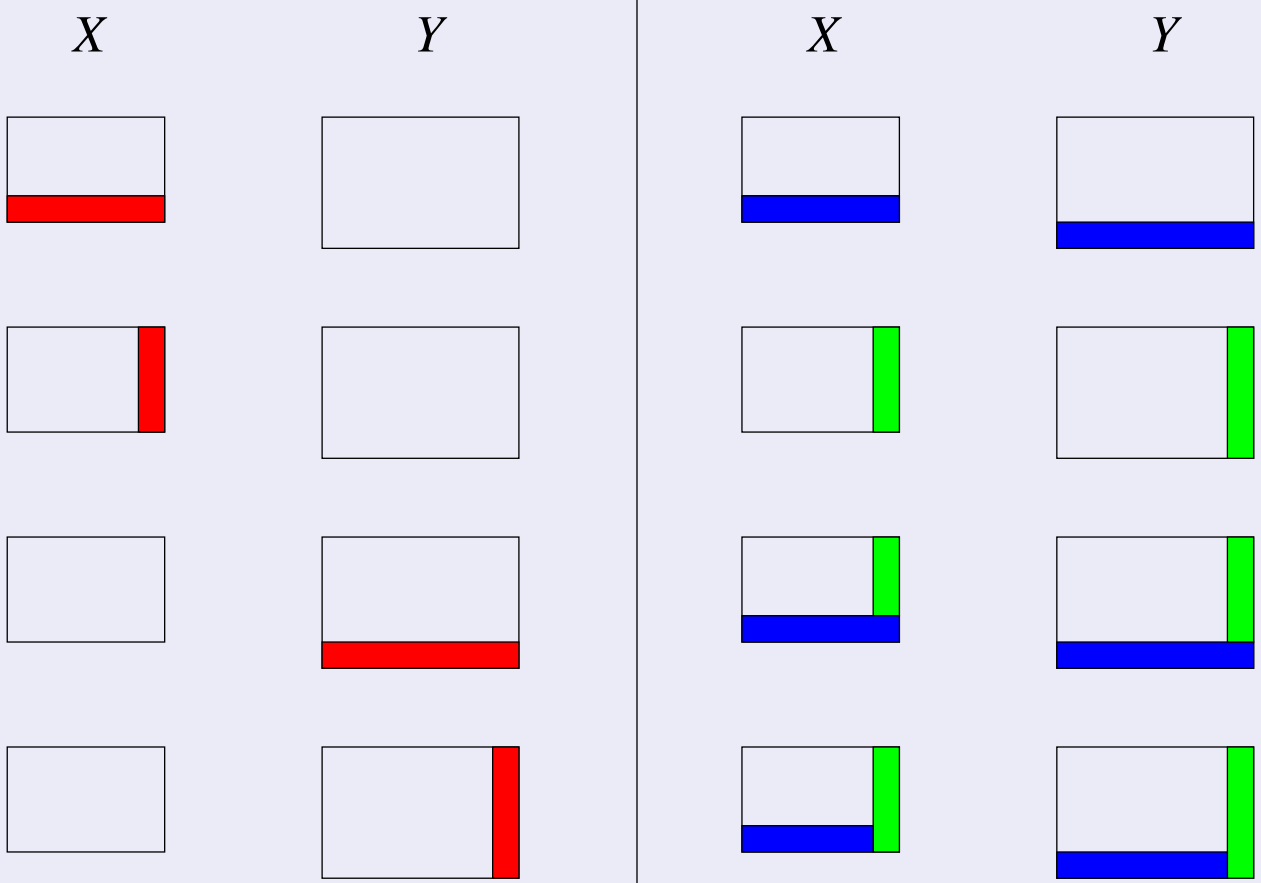
COCOON, LNCS 1449, 319{328, 1998

A. Arslan

A Largest Common $d$-Dimensional Subsequence of Two $d$-Dimensional Strings

FCT, LNCS 4639, 40{51, 2007

# 2D : Alignements globaux



# 2D : Alignements globaux

## 4 tables de dimension 2

- $D_R[i,j]$ est le score de la suppression du pre xe de longueur $j+1$ de la ligne $i$ de $X$,
- $D_C[i,j]$ est le score de la suppression du pre xe de longueur $i+1$ de la colonne $j$ de $X$,
- $I_R[i,j]$ est le score de l'insertion du pre xe de longueur $j+1$ de la ligne $i$ de $Y$ et
- $I_C[i,j]$ est le score de l'insertion du pre xe de longueur $i+1$ de la colonne $j$ de $Y$.

# 2D : Alignements globaux

## 2 tables de dimension 4

- $R[i,j,k,\ell] = d(X[i,0\,..\,j], Y[k,0\,..\,\ell])$
- $C[i,j,k,\ell] = d(X[0\,..\,i,j], Y[0\,..\,k,\ell])$

- $R[i,j,k,\ell]$ : score entre le pre xe de longueur $j+1$ de la ligne $i$ de $X$ et le pre xe de longueur $\ell+1$ de la ligne $k$ de $Y$.
- $C[i,j,k,\ell]$ : score entre le pre xe de longueur $i+1$ de la colonne $j$ de $X$ et le pre xe de longueur $k+1$ de la colonne $\ell$ de $Y$.

# 2D : Alignements globaux

$$T[i,j,k,\ell] = \max \begin{cases} T[i-1,j,k,\ell] + D_R[X[i,0\,..\,j]] \\ T[i,j-1,k,\ell] + D_C[X[0\,..\,i,j]] \\ T[i,j,k-1,\ell] + I_R[Y[k,0\,..\,\ell]] \\ T[i,j,k,\ell-1] + I_C[Y[0\,..\,k,\ell]] \\ T[i-1,j,k-1,\ell] + R[i,j,k,\ell] \\ T[i,j-1,k,\ell-1] + C[i,j,k,\ell] \\ T[i-1,j-1,k-1,\ell-1] + C[i,j-1,k,\ell-1] + R[i,j,k,\ell] \\ T[i-1,j-1,k-1,\ell-1] + C[i,j,k,\ell] + R[i-1,j,k-1,\ell] \end{cases}$$

# 2D : Alignements globaux

## Exemple

$X$

| | | |
|---|---|---|
| A | B | C |
| D | E | F |
| G | H | I |
| J | K | L |

$Y$

| | |
|---|---|
| E | C |
| H | I |
| K | L |

# 2D : Alignements globaux

Un alignement global entre 2 motifs rectangulaires de taille respective $M = m_1 \times n_1$ et $N = m_2 \times n_2$ peut être calcule en temps et espace $O(M \times N)$.

# 2D : Alignements locaux

| $X$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | U | U | U | U | U |
| 1 | U | A | B | C | U |
| 2 | U | D | E | F | U |
| 3 | U | G | H | I | U |
| 4 | U | J | K | L | U |
| 5 | U | U | U | U | U |

$|X| = m_1 \times n_1$

| $Y$ | 0 | 1 | 2 | 3 |
|---|---|---|---|---|
| 0 | V | V | V | V |
| 1 | V | E | C | V |
| 2 | V | H | I | V |
| 3 | V | K | L | V |
| 4 | V | V | V | V |

$|Y| = m_2 \times n_2$

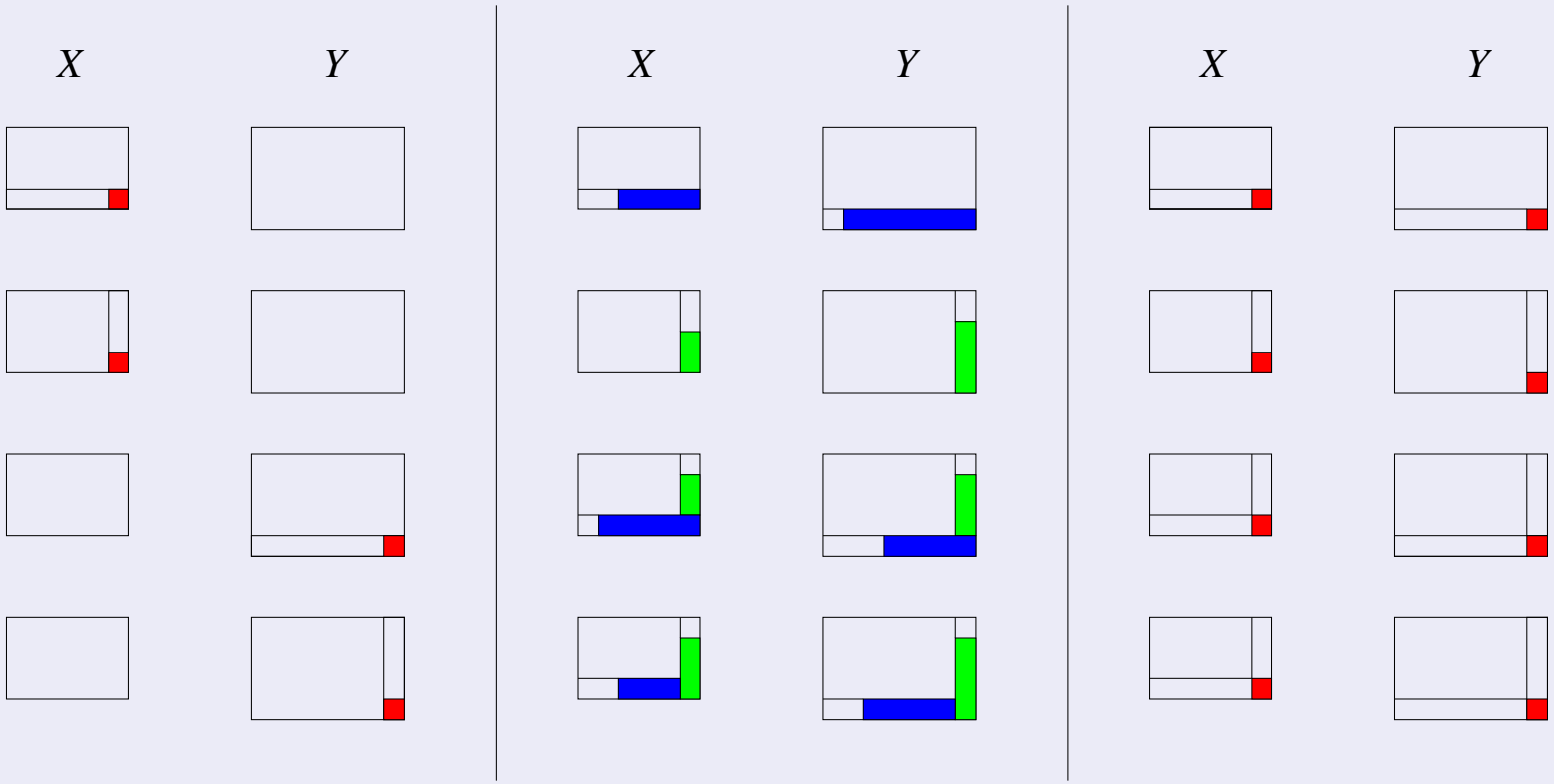
# 2D : Alignements locaux

## 2 tables de dimension 4

- $R_S[i,j,k,\ell] = s(X[i,0\,..\,j], Y[k,0\,..\,\ell])$
- $C_S[i,j,k,\ell] = s(X[0\,..\,i,j], Y[0\,..\,k,\ell])$

- $R_S[i,j,k,\ell]$ : similarite maximale entre un su xe du pre xe de longueur $j+1$ de la ligne $i$ de $X$ et un su xe du pre xe de longueur $\ell+1$ de la ligne $k$ de $Y$
- $C_S[i,j,k,\ell]$ : similarite maximale entre un su xe du pre xe de longueur $i+1$ de la colonne $j$ de $X$ et un su xe du pre xe de longueur $k+1$ de la colonne $\ell$ de $Y$

# 2D : Alignements locaux



# 2D : Alignements locaux

$$r = R_S[i, j, k, \ell], \qquad c = C_S[i, j, k, \ell]$$

$$r' = R_S[i \quad 1, j, k \quad 1, \ell], \qquad c' = C_S[i, j \quad 1, k, \ell \quad 1]$$

**Formule de récurrence**

$$T[i, j, k, \ell] = \max \begin{cases} T[i \quad 1, j, k, \ell] + \mathit{Del}[X[i, j]] \\ T[i, j \quad 1, k, \ell] + \mathit{Del}[X[i, j]] \\ T[i, j, k \quad 1, \ell] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]] \\ T[i, j, k, \ell \quad 1] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]] \\ T[i \quad 1, j, k \quad 1, \ell] + (r \text{ si } r \neq 0 \text{ sinon } \mathit{Del}[X[i, j]] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]]) \\ T[i, j \quad 1, k, \ell \quad 1] + (c \text{ si } c \neq 0 \text{ sinon } \mathit{Del}[X[i, j]] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]]) \\ T[i \quad 1, j \quad 1, k \quad 1, \ell \quad 1] + (c' + r \text{ si } c', r \neq 0 \text{ sinon } \mathit{Del}[X[i, j]] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]]) \\ T[i \quad 1, j \quad 1, k \quad 1, \ell \quad 1] + (c + r' \text{ si } c, r' \neq 0 \text{ sinon } \mathit{Del}[X[i, j]] + \mathit{Ins}[Y[k, \ell]]) \\ 0 \end{cases}$$

# 2D : Alignements locaux

## Exemple

$X$

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| U | U | U | U | U |
| U | A | B | C | U |
| U | D | E | F | U |
| U | G | H | I | U |
| U | J | K | L | U |
| U | U | U | U | U |

$Y$

| | | | |
|---|---|---|---|
| V | V | V | V |
| V | E | C | V |
| V | H | I | V |
| V | K | L | V |
| V | V | V | V |

# 2D : Alignements locaux

Un alignement local entre 2 motifs rectangulaires de taille respective $M = m_1 \times n_1$ et $N = m_2 \times n_2$ peut être calcule en temps et espace $O(M \times N)$.

# Plan

# Expérimentation

- Dialogues entre parents et enfants de 4 ans lors de la narration de 2 histoires enfantines (A et B)
- Chaque enonce est retranscrit et code selon une grille [Chanoni 2004]
- Un enonce correspond a une ligne
- Une matrice de substitution (*Sub*) a ete speci  quement construite

b7-BABAR

⋮

25 Pb7 t'inquiète pas
26 Pb7 on va la retrouver ta couronne
27 Pb7 t'inquiéte pas
28 Pb7 donc là ils se cachent
29 Pb7 ils cherchent
30 Pb7 qui pourrait avoir pris la couronne
31 b7 elle dedans, elle est dedans la couronne
32 Pb7 donc ils suspectent plein de monde, Cornélius, Céleste, la vieille dame
33 Pb7 qui a bien pu prendre la couronne ?
34 b7 la couronne elle est dedans
35 Pb7 tu crois ? !
36 b7 oui
37 Pb7 mais Babar il ne sait pas qu'elle est dedans
38 Pb7 donc il se dit que c'est une bombe, la couronne
39 Pb7 ou je ne sais quoi ?

⋮

b9-BABAR

⋮

7 Pb9 même son ami Zéphir la cherche partout avec sa loupe
8 Pb9 mais où est elle donc passée
9 Pb9 Babar remarque Cornélius donner un paquet à l'intrus
10 Pb9 Qu'est ce qui peut y avoir dedans ?
11 Pb9 mais qui est donc cet individu masqué
12 Pb9 qui a volé la couronne
13 Pb9 Babar la démasque !
14 Pb9 c'est la reine céleste !
15 Pb9 il se pose bien des questions
16 Pb9 pourquoi donc la reine Céleste s'est déguisée.
17 Pb9 Babar va donc chez la vieille dame lui demander
18 b9 oui
19 Pb9 la vieille dame ne veut pas qu'il rentre !
20 Pb9 mais derrière se cachait
21 Pb9 pour lui une surprise en réalité
22 Pb9 puis Babar rentra chez lui

⋮

b7-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 24 | a | [ | { | ) | ] |
| 25 | A | P | E | ) | ] |
| 26 | A | P | B | ) | ] |
| 27 | a | [ | { | ) | ] |
| 28 | q | [ | { | ) | ] |
| 29 | a | [ | { | ) | ] |
| 30 | A | P | Y | C | J |
| 31 | q | [ | { | ) | ] |
| 32 | a | [ | { | ) | ] |
| 33 | Q | H | K | ) | ] |
| 34 | a | [ | { | ) | ] |
| 35 | A | P | N | O | J |
| 36 | A | P | N | C | J |
| 37 | A | R | N | ) | ] |
| 38 | a | [ | { | ) | ] |

b9-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 8 | q | [ | { | ) | ] |
| 9 | A | P | B | ) | ] |
| 10 | q | [ | { | ) | ] |
| 11 | q | [ | { | ) | ] |
| 12 | q | [ | { | ) | ] |
| 13 | A | P | B | ) | ] |
| 14 | a | [ | { | ) | ] |
| 15 | A | P | N | ) | ] |
| 16 | q | [ | { | ) | ] |
| 17 | a | [ | { | ) | ] |
| 18 | a | [ | { | ) | ] |
| 19 | A | P | V | ) | ] |
| 20 | A | P | B | O | J |
| 21 | A | P | S | O | J |
| 22 | a | [ | { | ) | ] |
| 23 | a | [ | { | ) | ] |

b7-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 24 | a | [ | { | ) | ] |
| 25 | A | P | E | ) | ] |
| 26 | A | **P** | **B** | ) | ] |
| 27 | a | [ | { | ) | ] |
| 28 | q | [ | { | ) | ] |
| 29 | a | [ | { | ) | ] |
| 30 | A | **P** | **Y** | C | J |
| 31 | q | [ | { | ) | ] |
| 32 | a | [ | { | ) | ] |
| 33 | Q | **H** | **K** | ) | ] |
| 34 | a | [ | { | ) | ] |
| 35 | A | **P** | **N** | **O** | **J** |
| 36 | A | **P** | **N** | **C** | **J** |
| 37 | A | **R** | **N** | ) | ] |
| 38 | a | [ | { | ) | ] |

b9-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 8 | q | [ | { | ) | ] |
| 9 | A | **P** | **B** | ) | ] |
| 10 | q | [ | { | ) | ] |
| 11 | q | [ | { | ) | ] |
| 12 | q | [ | { | ) | ] |
| 13 | A | **P** | **B** | ) | ] |
| 14 | a | [ | { | ) | ] |
| 15 | A | **P** | **N** | ) | ] |
| 16 | q | [ | { | ) | ] |
| 17 | a | [ | { | ) | ] |
| 18 | a | [ | { | ) | ] |
| 19 | A | **P** | **V** | ) | ] |
| 20 | A | **P** | **B** | **O** | **J** |
| 21 | A | **P** | **S** | **O** | **J** |
| 22 | a | [ | { | ) | ] |
| 23 | a | [ | { | ) | ] |

## b7-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 24 | a | [ | { | ) | ] |
| 25 | A | P | E | ) | ] |
| 26 | A | P | B | ) | ] |
| 27 | a | [ | { | ) | ] |
| 28 | q | [ | { | ) | ] |
| 29 | a | [ | { | ) | ] |
| 30 | A | P | Y | C | J |
| 31 | q | [ | { | ) | ] |
| 32 | a | [ | { | ) | ] |
| 33 | Q | H | K | ) | ] |
| 34 | a | [ | { | ) | ] |
| 35 | A | P | N | O | J |
| 36 | A | P | N | C | J |
| 37 | A | R | N | ) | ] |
| 38 | a | [ | { | ) | ] |

## b9-BABAR

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 8 | q | [ | { | ) | ] |
| 9 | A | P | B | ) | ] |
| 10 | q | [ | { | ) | ] |
| 11 | q | [ | { | ) | ] |
| 12 | q | [ | { | ) | ] |
| 13 | A | P | B | ) | ] |
| 14 | a | [ | { | ) | ] |
| 15 | A | P | N | ) | ] |
| 16 | q | [ | { | ) | ] |
| 17 | a | [ | { | | |

b7-BABAR

25 Pb7 t'inquiète pas
26 Pb7 on va la retrouver ta couronne
27 Pb7 t'inquiéte pas
28 Pb7 donc là ils se cachent
29 Pb7 ils cherchent
30 Pb7 qui pourrait avoir pris la couronne
31 b7 elle dedans, elle est dedans la couronne
32 Pb7 donc ils suspectent plein de monde, Cornélius, Céleste, la vieille dame
33 Pb7 qui a bien pu prendre la couronne ?
34 b7 la couronne elle est dedans
35 Pb7 tu crois ? !
36 b7 oui
37 Pb7 mais Babar il ne sait pas qu'elle est dedans
38 Pb7 donc il se dit que c'est une bombe, la couronne
39 Pb7 ou je ne sais quoi ?

b9-BABAR

7 Pb9 même son ami Zéphir la cherche partout avec sa loupe
8 Pb9 mais où est elle donc passée
9 Pb9 Babar remarque Cornélius donner un paquet à l'intrus
10 Pb9 Qu'est ce qui peut y avoir dedans ?
11 Pb9 mais qui est donc cet individu masqué
12 Pb9 qui a volé la couronne
13 Pb9 Babar la démasque !
14 Pb9 c'est la reine céleste !
15 Pb9 il se pose bien des questions
16 Pb9 pourquoi donc la reine Céleste s'est déguisée.
17 Pb9 Babar va donc chez la vieille dame lui demander
18 b9 oui
19 Pb9 la vieille dame ne veut pas qu'il rentre !
20 Pb9 mais derrière se cachait
21 Pb9 pour lui une surprise en réalité
22 Pb9 puis Babar rentra chez lui

# Plan

# Conclusions

- Alignements globaux de motifs 2D
- Alignements locaux de motifs 2D

# Limitations

- Limitation de la taille des chiers/dialogues
- L'algorithme implique des motifs en forme de `L'
- Di culte a de nir un motif `consensuel'

# Questionnements

- Est-il possible d'aligner des motifs 2D en temps sous-quadratique comme pour les sequences [CLZ 2003] ?
- Est-il possible de construire une heuristique telle que BLAST [AGMML 1990] ou FASTA [PL 1988] pour aligner rapidement un motif 2D avec une banque de motifs 2D ?
- Peut-on utiliser des techniques de vecteurs de bits dans le cas de « petits » motifs [Myers 1998] ?

# Perspectives

- Recherche des alignements dans les 4 dimensions (rotations a 90°)
- Validation statistique des motifs trouves
- Recherche des $k$ meilleurs alignements
- Constitution d'une banque de motifs similaires
- Visualisation des alignements en 2D
- Autres applications necessitant la recherche de motifs en 2D