Anagrammes et réactions

INFORMATIQUE COMMUNE - Devoir nº 1 - Olivier Reynet

A Réactions dynamiques

a Optimisation d'un processus de synthèse chimique

Vous êtes un chimiste travaillant sur l'optimisation d'un processus de synthèse chimique pour produire un nouveau composé. Vous disposez d'une quantité limitée de réactif principal, soit 100 g, et vous devez choisir les réactions secondaires à inclure dans le processus.

Chaque réaction secondaire nécessite une certaine quantité du réactif principal et contribue à améliorer la pureté du produit final. Votre objectif est de maximiser la pureté du composé en choisissant les réactions à réaliser, tout en respectant la quantité limitée de réactif principal disponible. Une réaction secondaire ne peut être appliquée qu'une seule fois, pour des raisons logistiques. On fait l'hypothèse que les gains en pourcentage sont additifs.

b Quelles réactions inclure?

Voici les réactions secondaires disponibles :

Réaction secondaire	Consommation de réactif (g)	Gain en pureté (%)
Catalyse par ajout d'un métal	20	15
Réaction de précipitation	30	25
Filtration par adsorption	10	10
Réaction enzymatique	40	35
Purification par distillation	25	20
Réaction redox	15	12
Chromatographie	35	30
Réaction acide-base	20	18

Quantité totale de réactif disponible : 100 g

c Problème:

Choisir les réactions secondaires à réaliser de sorte que la **consommation totale de réactif principal ne dépasse pas 100 g** et que le **gain en pureté** du produit final soit maximal.

R En Python, on choisit de représenter les réactions secondaires par une liste de tuples (gain, poids), où gain représente le gain en pureté dû à la réaction secondaire et poids le poids nécessaire de réactif principal pour réaliser cette réaction.

A1. Proposer une stratégie gloutonne pour résoudre ce problème et l'expliquer en français.

- **A2**. Écrire une fonction de signature glouton(reactions, pmax) qui renvoie le gain en pureté obtenu en appliquant la stratégie précédente. On pourra réutiliser la fonction insert_sort de la partie B, en expliquant ce qu'il faudrait modifier afin de pouvoir l'utiliser correctement.
- **A3**. On cherche maintenant à trouver la solution optimale à ce problème. On désigne par S(n, p) la pureté totale maximale que l'on peut obtenir en choisissant les n premières réactions secondaires et une limite de p grammes de réactif principal. On notera :
 - g_n le gain de pureté liée à la réaction secondaire n,
 - p_n la quantité de réactif principal nécessaire pour la réaction secondaire n.

On dispose de la récurrence suivante :

$$S(n,p) = \begin{cases} 0 & \text{si } n = 0 \text{ ou si } p = 0 \\ \max(g_n + S(n-1, p - p_n), S(n-1, p)) & \text{si } p_n \leq p \\ S(n-1, p) & \text{si } p_n > p \end{cases}$$
 (1)

Interpréter en français cette relation de récurrence.

- **A4.** Écrire une fonction de signature pdyn_asc(reactions, pmax) qui renvoie la solution optimale au problème avec n réactions secondaires possibles et un poids de réactif principal maximum de pmax. Cette fonction procède de manière ascendante, impérativement en complétant un tableau.
- A5. Écrire une fonction de signature mem(n, pmax, S) qui renvoie la solution optimale au problème avec n réactions secondaires possibles et un poids de réactif principal maximum de pmax. Cette fonction procède de manière descendante en utilisant la mémoïsation dans un dictionnaire S.
- **A6**. Sachant qu'il est possible d'atteindre les 88% de gain en pureté avec 100g de réactif, l'approche gloutonne est-elle optimale? Quelles réactions devez-vous inclure dans le processus de synthèse pour obtenir le produit le plus pur possible tout en respectant la quantité limitée de réactif?
- A7. Écrire une fonction de signature select_reactions(S: list[list[int]]) -> (int, list): qui renvoie les réactions secondaires sélectionnées d'après le tableau s créé par la programmation dynamique ascendante. Pour cela, il suffit de partir de la case contenant la solution et de parcourir le tableau ligne par ligne en descendant pour retrouver les réactions sélectionnées.

B Anagrammes

Soient deux chaînes de caractères a et b. On cherche à savoir si ces deux chaînes sont anagrammes l'une de l'autre.

- Exemple 1 Exemples d'anagrammes. En français on trouve notamment :
 - raper et parei
 - aspirine et parisien
 - dispute et stupide
 - · engrais et graines

On rappelle que la fonction ord(c: str) -> int renvoie un nombre entier sur 8 bits qui code un caractère en machine. On note que ord('a') vaut 97, ord('b') vaut 98 et ainsi de suite dans l'ordre alphabétique.

- R On ne considère par la suite que des mots composés de caractères **standards**, c'est-à-dire des mots sans signes de ponctuation, chiffres ou lettres diacritiques comme les accents ou la cédille. Par ailleurs, on suppose que tous les mots sont écrits en **minuscules**.
- **B1**. Écrire une fonction de signature indice(c : str) -> int qui renvoie l'indice de la lettre c dans l'alphabet. On numérote les lettres à partir de 0 comme tout bon informaticien.

a Résolution par tri

Une première méthode pour résoudre le problème est de trier selon l'ordre lexicographique les deux mots : s'ils sont anagrammes l'un de l'autre, alors les trier résulte en une même séquence de lettres. Il suffit alors de comparer cette séquence.

- **B2**. Écrire une fonction de signature to_list(ch: str)—> list[int] qui renvoie la liste des indices des lettres d'une chaîne de caractères. Par exemple, to_list('aspirine') revoie [0, 18, 15, 8, 17, 8, 13, 4].
 - Grâce à cette fonction, un mot peut être représenté par une liste d'entier.
- **B3**. Écrire une fonction de signature insert_sort(w: list[int]) qui tri la liste d'entiers w en utilisant le tri par insertion en programmation impérative, c'est-à-dire non récursivement. Cette fonction trie la liste en place, c'est-à-dire qu'elle ne crée pas une nouvelle liste pour stocker le résultat du tri.
- **B4.** Écrire une fonction de signature compare(w1: list[int], w2: list[int]) -> bool qui teste si deux listes sont identiques. Au début de la fonction, on s'assurera par une assertion que les deux listes possèdent la même longueur. L'usage de l'opérateur == pour comparer deux listes n'est pas autorisé.
- **B5**. Écrire une fonction de signature tc_anagrammes (m1:str , m2: str)—> bool qui teste si deux mots sont anagrammes l'un de l'autre. On utilisera les fonctions précédentes.
- **B6**. Quelle est la complexité de la fonction $tc_{anagrammes}$ dans le pire des cas? On notera n la longueur des deux mots qu'on supposera identique. Justifier votre réponse.
- **B7**. En utilisant un autre tri générique, pourrait-on améliorer la complextié de tc_anagrammes dans le pire des cas? Justifier votre réponse.
- **B8**. Pourrait-on utiliser le tri par comptage et si oui quelle serait la complexité de tc_anagrammes? Justifier votre réponse.

b Résolution par comptage et dictionnaire

On déduit de la question précédente une autre méthode qui consiste à compter le nombre d'occurences de chaque lettre des mots : si ce décompte est identique, alors les mots sont anagrammes l'un de l'autre. On se propose d'utiliser un dictionnaire et de réaliser ce comptage de la manière suivante :

- 1. Créer un dictionnaire vide.
- 2. Compter les lettres du premier mot (remplir le dictionnaire)
- 3. Parcourir les lettres du deuxième mot :
 - (a) Si la lettre n'est pas présente dans le dictionnaire, renvoyer faux.
 - (b) Sinon, décrémenter le nombre d'occurrences de cette lettre. S'il n'y a plus aucune occurence de la lettre, effacer l'entrée associée à la lettre dans le dictionnaire.
- 4. Renvoyer vrai si le dictionnaire est vide, faux sinon.

- (R)
- La syntaxe pour effacer une entrée associée à la clef key d'un dictionnaire d est del d[key].
- **B9**. Écrire une fonction de signature dc_anagrammes(m1 : str, m2 : str)—> bool qui teste si deux mots sont anagrammes l'un de l'autre en utilisant la méthode décrite ci-dessus. En début de fonction, on vérifiera par une assertion que les deux mots ont la même longueur.
- **B10**. Quelle est la complexité de la fonction dc_anagrammes dans le pire de cas? Justifier votre réponse, en tenant compte du fait que tester si un dictionnaire est vide s'effectue en temps constant.