Matrices et vertèbres

INFORMATIQUE COMMUNE - Devoir n° 3 - Olivier Reynet

A Parenthésage optimal

a Position du problème

Soit une matrice A de n lignes et m colonnes. On note a_{ij} un élément de la matrice A :

$$a_{ij} \text{ avec } \begin{cases} 0 \leqslant i \leqslant n-1 \\ 0 \leqslant j \leqslant m-1 \end{cases}$$

Dans cette section, on considère trois matrices :

- A de dimensions $n \times m$ et ses éléments a_{ij}
- B de dimensions $m \times p$ et ses éléments b_{ij}
- C de dimensions $p \times q$ et ses éléments c_{ij}

Le produit matriciel est une opération associative :

$$ABC = A(BC) = (AB)C \tag{1}$$

On peut donc décomposer ce calcul du produit de trois matrices de deux manières en fonction de la position des parenthèses.

En Python, on choisit de représenter une matrice comme une liste à n éléments, chaque élément de cette liste étant une liste de m nombres, c'est-à-dire qu'une matrice est une liste de liste.

A1. Écrire une fonction de signature `zeros_matrice(n,m)—> list[list[int]]` qui renvoie une matrice de taille $n \times m$ ne contenant que des zéros.

A2. Écrire une fonction de signature `dimensions(M)` dont le paramètre est une matrice et qui renvoie sa dimension sous la forme d'un tuple d'entiers (nombre de lignes, nombre de colonnes).

A3. On pose $P = AB$. Donner l'expression de l'élément p_{ij} de P en fonction de ceux de A et B.

A4. Écrire une fonction de signature `produit(A,B)` qui renvoie le produit des matrices `A` et `B`. On garantira par une assertion la faisabilité du calcul.

A5. Quel est le nombre de multiplications nécessaires pour calculer P en fonction de n, m et p ?

A6. Combien de multiplications sont-elles nécessaires pour calculer $A(BC)$ avec $n = 10, m = 100, p = 5$, $q = 50$? Même question pour calculer $(AB)C$. Conclure.

b Optimisation du produit de plusieurs matrices

Pour un produit de n matrices, on se propose de trouver le parenthésage qui minimise le nombre de multiplications d'éléments.

Soit une suite (A_i) de n matrices telles que la matrice A_i a pour dimensions $d_i \times d_{i+1}$ avec $0 \leqslant i < n$. Ainsi, le produit $A_0 A_1 \dots A_{n-1}$ est défini et a pour dimensions $d_0 \times d_n$. L'objectif est de déterminer le

parenthésage optimal. On désigne ce nombre minimum de multiplications par *le coût optimal du produit*.

On définit les notations suivantes :

- $\Pi(i,j)$ désigne le produit matriciel $A_i A_{i+1} \dots A_j$ avec $0 \leqslant i \leqslant j < n$ et $\Pi(i,i) = A_i$.
- $S(i,j)$ désigne le coût optimal du produit $\Pi(i,j)$.

A7. Si n est grand, le nombre de parenthésages possibles du produit de n matrices est de l'ordre du nombre de Catalan de rang n, c'est-à-dire $C_n \sim \frac{4^n}{n^{3/2}\sqrt{\pi}}$. Conclure.

A8. Justifiez l'existence d'un coût optimal pour tout produit $\Pi(i,j)$.

A9. Montrez que, si un parenthésage optimal pour $\Pi(i,j)$ conduit à calculer le produit de $\Pi(i,k)$ par $\Pi(k+1,j)$ avec $i \leqslant k < j$, alors les parenthésages de $\Pi(i,k)$ et $\Pi(k+1,j)$ induits par celui de $\Pi(i,j)$ sont optimaux.

Le principe de Bellman permet de conclure que :

$$S(i,j) = \begin{cases} +\infty & \text{si } i > j \\ 0 & \text{si } i = j < n \\ \min\limits_{i \leqslant k < j} \left(S(i,k) + S(k+1,j) + d_i d_{k+1} d_{j+1} \right) & \text{si } i < j < n \end{cases} \tag{3}$$

A10. Justifier l'équation 3 dans chaque cas.

A11. Écrire une fonction de signature `pdyn_par(d)` qui renvoie, pour une liste `d` des dimensions des matrices, le coût optimal du produit des matrices de 0 à $n-1$ ainsi que l'indice de découpage optimal sous la forme d'un tuple. Cette fonction procède de manière itérative en complétant un tableau **de haut en bas**. Dessiner la relation de récurrence sur le tableau peut vous aider à programmer l'ordre de sa complétion. On pourra utiliser l'objet `inf` qui représente l'infini de la bibliothèque `math`, pourvu que l'importation soit correcte. L'utilisation de la fonction `min` n'est **pas** autorisée.

A12. Discuter de la complexité de la fonction `pdyn_par` en relation avec le calcul matriciel. Est-ce un calcul préalable pertinent et si oui sous quelles conditions ?

A13. Écrire une fonction récursive de signature `rec_par(d, i, j, memo)` qui produit le même résultat que `pdyn_par`. Le paramètre `memo` permet d'effectuer la mémoïsation. Pour résoudre le problème, la fonction est invoquée comme suit : `c = rec_par(d,0, len(d)-2, {})`.

B Vertèbres et apprentissage

a Analyse des données

Un jeu de données sur les différentes configurations de vertèbres chez l'être humain a été constitué patiemment et mis à disposition des chercheurs. Pour un nombre N de patients, 6 attributs biomécaniques ont été mesurés :

1. l'angle d'incidence du bassin en degrés,
2. l'angle d'orientation du bassin en degrés,
3. l'angle de lordose lombaire en degrés,
4. la pente du sacrum en degrés,
5. le rayon du bassin en mm,
6. la distance algébrique de glissement de spondylolisthésis en mm.

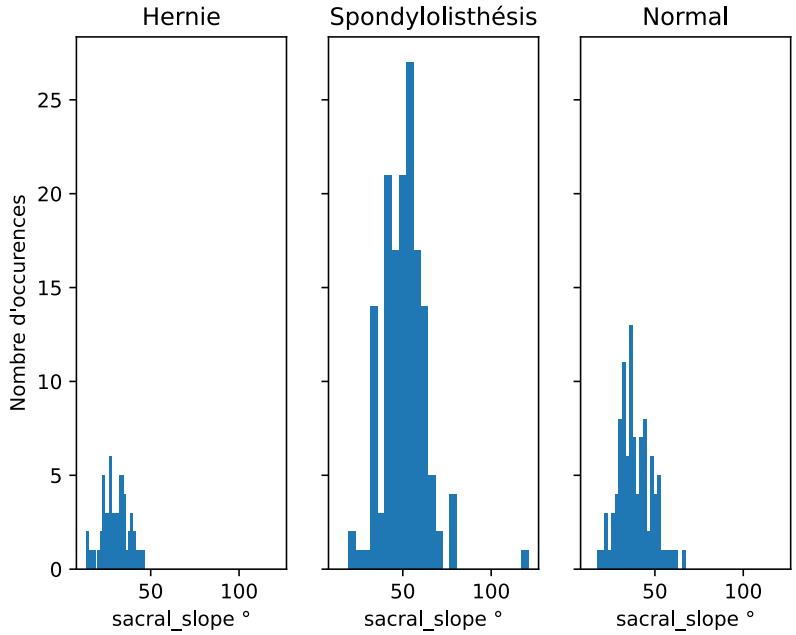


FIGURE 1 – Histogramme des données selon la pente du sacrum et les différentes classes

Le premières lignes du tableau des données sont représentées ci-dessous. La dernière colonne représente le diagnostic posé par le médecin :

0 hernie discale,

1 spondylolisthésis,

2 normal.

pelvic_incidence	pelvic_tilt	lumbar_lordosis_angle	sacral_slope	pelvic_radius	degree_1	class
57.28	15.14	63.99	42.13	116.73	30.34	1
63.02	22.55	39.60	40.47	98.67	-0.25	0
63.95	16.06	63.12	47.89	142.36	6.29	2
39.05	10.06	25.01	28.99	114.40	4.56	0
59.72	7.724	55.34	52.00	125.17	3.23	2
68.83	22.21	50.09	46.63	105.98	-3.53	0
63.40	14.11	48.13	49.28	111.91	31.78	1
41.18	5.792	42.86	35.39	103.34	27.66	1
89.83	22.63	90.56	67.19	100.50	3.040	2

TABLE 1 – Données médicales pour l'apprentissage automatique

B14. Dans l'optique d'un apprentissage automatique, on a tracé deux figures pour analyser les paramètres. Quelles conclusions simples sur le jeu de données peut-on tirer des figures 1 et 2 ?

B15. Expliquer pourquoi on peut utiliser la méthode des K plus proches voisins sur ces données et quelle opération résulte de cette utilisation.

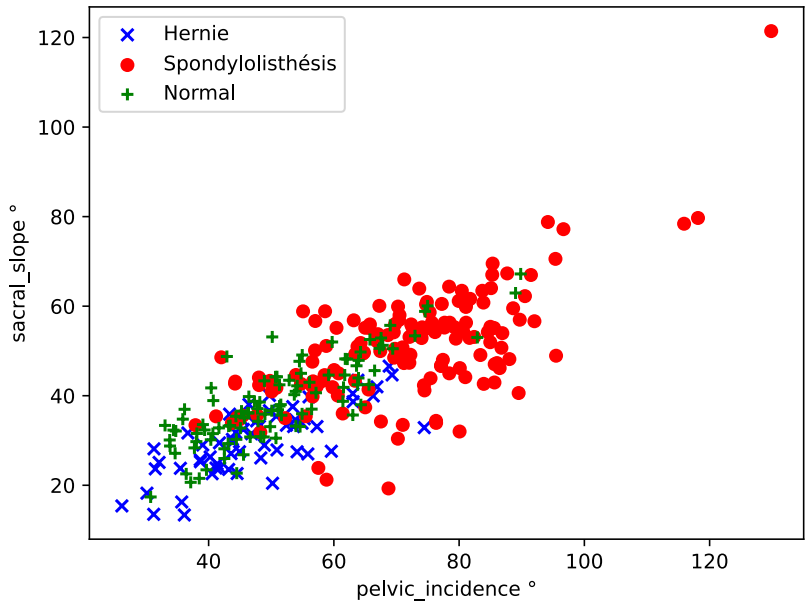


FIGURE 2 – Diagramme de dispersion selon l'orientation du bassin et la pente du sacrum

Une étude statistique des données est effectuée. On remarque que la différence entre l'élément maximal x_{max} et minimal x_{min} d'un attribut x peut varier fortement. Le tableau ci-dessous recense ces différences $x_{max} - x_{min}$ pour chaque attribut :

```
[103.68611919, 55.98681195, 111.7423855, 108.0626349, 92.98846564, 429.60126076]
```

L'angle d'orientation du bassin s'étend sur une échelle de 56 unités, alors que la distance de glissement de spondylolisthésis sur une échelle de 430 unités.

B16. Cette observation peut-elle avoir une conséquence sur le résultat de l'algorithme des K plus proches voisins ? Si oui, expliquer à l'aide d'un dessin sur un exemple simple en 2D quel est le problème.

On dispose des données sous la forme **d'une liste de listes** `E` : chaque sous liste de `E` est une ligne du tableau 1. On souhaite procéder à un changement d'échelle des données afin quelles soient toutes comprises entre 0 et 1. Dans ce but, on fait subir à toutes les données la transformation suivante :

$$x_i = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \tag{4}$$

où x_i est la ième valeur de l'attribut x, x_{min} et x_{max} le minimum et le maximum de l'attribut x.

B17. Expliquer en quoi la structure de données `E` est inadaptée pour effectuer la transformation 4 pour mettre à échelle les données. Un tableau Numpy est-il plus adapté ? Pourquoi ?

On transforme donc la liste de listes `E` en tableau Numpy en utilisant la commande `E = np.array(E)`. Dans la suite, on manipulera donc ce tableau. On rappelle que la syntaxe pour accéder à l'élément d'indice `i` et `j` d'un tableau Numpy 2D `T` est `T[i,j]`.

B18. Écrire une fonction de prototype `scaler(E)` qui renvoie un nouveau tableau de données après application de la transformation 4. On fera attention à appliquer la transformation à tous les attributs

mais **pas** à la classe des données. L'utilisation des fonctions Numpy `max` et `min` est autorisée. Leur manuel est donné ci-dessous. L'usage du calcul élément par élément est fortement conseillé mais pas obligatoire.

```
numpy.max(a, axis) : renvoie le maximum (ndarray ou scalar) d'un tableau ou les maxima selon un axe.
numpy.min(a, axis) : renvoie le minimum (ndarray ou scalar) d'un tableau ou les minima selon un axe.

Exemple :
import numpy as np
a = np.array([[10, 5.5], [43, 1.7]])
amin = np.min(a, 0) # amin vaut  [10.   1.7]
```

b Apprentissage

B19. Dans le cadre de l'algorithme des plus proches voisins, on utilise la fonction `trier` sur la liste `D` des tuples (indice du voisin, distance au voisin) pour l'ordonner du voisin le plus proche au plus éloigné. Compléter les lignes marquées `# 1 à compléter` afin que le tri soit opérationnel en conservant le numéro # pour faciliter la correction.

```
def f(t):
    n = len(t)
    t1, t2 = [], []
    for i in range(n // 2):
        t1.append(t[i])
    for i in range(n // 2, n):
        t2.append(t[i])
    return t1, t2

def g(t1, t2):
    n1, n2 = len(t1), len(t2)
    if n1 == 0:
        return ...   # 1 à compléter
    elif n2 == 0:
        return ...  # 2 à compléter
    elif t1[0][1] < t2[0][1]:
        return [t1[0]] + g(t1[1:], t2)
    else:
        return ...  # 3 à compléter

def trier(t):
    if len(t) < 2:
        return t
    else:
        t1, t2 = f(t)
        return ...  # 4 à compléter
```

B20. Écrire une fonction de signature `k_plus_proches(k, E, X)` qui renvoie les **indices** des k plus proches voisins de `X` dans le jeu des données `E`. L'utilisation de la fonction `numpy.linalg.norm` qui renvoie la norme euclidienne d'un vecteur est autorisée. La création d'une liste `D` des tuples (indice du voisin, distance au voisin) et l'utilisation de la fonction `trier` est obligatoire.

Exemple d'utilisation de la fonction `numpy.linalg.norm` :

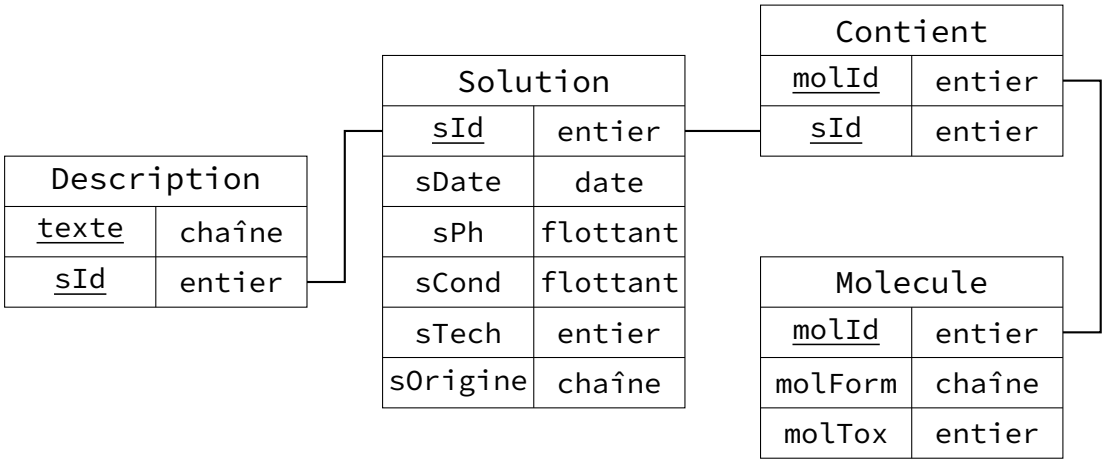
```
a = np.array([1,2,3])
b = np.array([4,5,6])
np.linalg.norm(a-b)
```

```
#  renvoie ——> 5.196152422706632
```

B21. Connaissant le résultat de la fonction précédente, proposer une solution pour déterminer la classe de `X` et l'implémente. Cette fonction possède la signature `classe_majoritaire(V, E, N)`, où `V` est la liste des indices des k plus proches voisins dans `E` et `N` le nombre de classes.

C SQL forever

On dispose d'une base de données répertoriant des solutions pour lesquelles on a testé la présence de certaines molécules plus ou moins toxiques. Cette base données est représentée par le schéma ci-dessous :



La clé primaire de chaque table est formée par les attributs soulignés.

On dispose pour chaque table de la description de ses attributs :

- `Solution` :
  - `sId` : identifiant de la solution,
  - `sDate` : date et heure de l'enregistrement de la solution (on supposera le type `date` compatible avec les opérations de comparaison, le minimum, le maximum),
  - `sPh` : pH de la solution,
  - `sCond` : conductivité de la solution,
  - `sTech` : identifiant du technicien ayant manipulé la solution,
  - `sOrigine` : origine de la solution.
- `Molécule` :
  - `molId` : identifiant de la molécule,
  - `molForm` : formule chimique de la molécule,
  - `molTox` : toxicité de la molécule. Si l'entier vaut 0, la molécule n'est pas toxique. Plus l'entier est grand, plus la toxicité est grande.

Les tables `Contient` et `Description` représentent des relations entre les entités. `Contient` indique que la présence d'une molécule a été détectée dans une solution et `Description` permet au technicien de décrire des éléments complémentaires associés à un solution sous la forme d'un texte.

C22. Dans la base de données décrite ci-dessus, une molécule peut-elle être présente dans plusieurs solutions différentes ? Une molécule peut-elle être contenue plusieurs fois dans la même solution ? Justifier la réponse.

C23. Écrire une requête SQL donnant la formule chimique des molécules présentes dans la base si leur toxicité est strictement supérieure à 10.

C24. Écrire une requête SQL donnant l'identifiant et le pH des solutions dont la date d'enregistrement est **strictement** postérieure à "1/04/2023". Seuls les cinq premiers résultats sont présentés dans l'ordre décroissant de pH.

C25. Écrire une requête affichant les formules des molécules contenues dans les solutions. Le résultat ne contient pas de doublons.

Le degré de toxicité d'une solution est sommairement évalué en faisant la somme des entiers `molTox` de chaque molécule contenue dans une solution.

C26. Écrire une requête donnant l'identifiant d'une solution et son degré de toxicité si celui-ci est strictement supérieur à 10.