

Travaux pratiques : Hypergraphes

L'intérêt des formalismes génériques pour la programmation dynamique est qu'ils permettent de séparer l'espace de recherche (alignements, repliements ...) et l'application algorithmique (minimisation, comptage ...). Dans ce TP, nous allons illustrer cette séparation en codant tout d'abord quelques algorithmes génériques vus en cours, puis en construisant des espaces de recherches associés à deux problèmes classiques (Alignement par l'algorithme de Needleman-Wunsch, et repliement avec Nussinov).

hypergraph.py – Une bibliothèque minimale d'hypergraphes

<http://www.lix.polytechnique.fr/~ponty/enseignement/hypergraph.py>

Vous utiliserez une petite bibliothèque permettant de manipuler des hypergraphes :

- Chaque **sommet** est identifié par son **nom**. Celui-ci peut être de n'importe quel type¹, mais devra nécessairement être **unique** et **hashable**².
- Les **sommets** sont créés *à la volée* quand des hyper-arêtes sont créés.
- Un **sommet** s devient *terminal* quand un arc de cardinalité sortante nulle ($s \rightarrow []$) est ajouté au graphe.
- Un **arc** peut être ajouté directement grâce à la méthode `addFArc` de la classe `FGraph`. Les arguments à fournir à cette méthode sont :
 - **origin** : Le nom du sommet à l'origine de l'arc
 - **destinations** : Une liste de noms de sommets destination de l'arc
 - **weight** : Un poids optionnel (Default : 0.0)
 - **type** : Un type optionnel (Default : None)
 Ces données peuvent être récupérées via des méthodes `getOrigin`, `getDestinations`, `getWeights` et `getType` respectivement.
- Les **arcs** ayant pour origine un sommet s donné peuvent être obtenus via la méthode `getOutList` de la classe `FGraph`.

N'hésitez pas à lire les commentaires du code source pour plus d'options disponibles.

Exemple de code

```

1  g = FGraph()
2  g.addFArc(0, [1])
3  g.addFArc(0, [2,3])
4  g.addFArc(1, [])
5  g.addFArc(2, [])
6  g.addFArc(3, [])
7  print g
8  print g.getOutList(1)
9  for e in g.getOutList(0):
10     for name in e.getDestinations():
11         print name

```

Sortie

```

1 Vertices:
2 [0, 1, 2, 3]
3 Arcs:

```

1. C'est mal, je sais, mais bien trop pratique pour pouvoir s'en passer ici. Ne le faites pas à la maison !

2. Cette dernière contrainte n'est pas très limitante, car la plupart des types primitifs (ceux dits *immuables*) sont hashables. En particulier, vous pourrez utiliser des `strings`, `int`, `float` ..., des `tuple`, mais pas des `list` ou `dict` comme nom pour les sommets!!

```

4  0->[1] (w:0.0)
5  0->[2, 3] (w:0.0)
6  1->[] (w:0.0)
7  2->[] (w:0.0)
8  3->[] (w:0.0)
9
10 [1->[] (w:0.0)]
11 1
12 2
13 3

```

La mémoïsation : le rêve du programmeur paresseux ...

On simplifiera l'implémentation des applications en utilisant une **mémoïsation**, terme qui décrit la *mise en cache* automatique par le langage des valeurs retournées par une fonction. L'avantage de cette technique est qu'elle vous évite d'avoir à vous soucier de l'ordre dans les calculs, au prix d'une dégradation (constante, mais non négligeable) des performances.

Comme cette fonction n'est pas présente par défaut en `python`, on a du l'émuler grâce à un `decorator memoize` implémenté au sein du fichier `hypergraph.py`. Plus précisément la fonction de fibonacci calculée **en temps exponentiel** par ce code :

```

1 def fib(n):
2     if n<=1: return 1
3     return fib(n-1)+fib(n-2)

```

sera calculée **en temps linéaire** par ce code :

```

1 from hypergraph import *
2 @memoize
3 def fib(n):
4     if n<=1: return 1
5     return fib(n-1)+fib(n-2)

```

Objectifs du TP

1. Coder dans un fichier `applications.py` une fonction `count(hypergraph,name)`, qui compte les F-chemins originaires d'un sommet `name` dans un hypergraphe `hypergraph`. Vous utiliserez la technique de mémoïsation décrite ci-dessus. Tester votre fonction grâce au code (`testHypergraph` est défini dans `applications.py`) :

```

1 if __name__=="__main__":
2     g = testHypergraph()
3     print count(g,0)
4     # Affiche : 12

```

2. Ajouter une fonction `maximalScore(hypergraph,name)` qui calcule et renvoie une paire `(path,score)`, où `path` est le F-chemin de poids maximal, représenté par une liste de F-Arcs, et `score` le score associé.

```

1 if __name__=="__main__":
2     g = testHypergraph()
3     print maximalScore(g,0)
4     # Affiche : ([0->[2](w:0.0), 2->[5, 7](w:2.0), 5->[](w:1.0),
5     #             7->[](w:0.0)], 3.0)

```

3. Coder dans un fichier `hypergraphNW.py` une fonction `buildAlignmentGraph(seq1,seq2)` qui construit l'hypergraphe associé à l'alignement de deux séquences `seq1` et `seq2`. On utilisera une pénalité de -2 pour les insertions/délétions, de -3 pour les mismatch et un bonus de +2 pour les correspondances. On prendra soin de bien définir les sommets terminaux.
4. Codera une fonction qui affiche, sous la forme d'un alignement classique, le chemin obtenu. On rappelle qu'il est possible d'associer un type à chaque arc, ce qui facilite grandement la mise en forme de l'alignement.
5. Ajouter à `applications.py` une fonction `minimalScore(hypergraph,name)` qui calcule le chemin/score minimal, et coder dans un nouveau fichier `hypergraphNussinov.py` une fonction `buildNussinovGraph(seq)` qui construit l'hypergraphe associé au repliement d'une séquence d'ARN `seq`. On utilisera des énergies de -3/-2/-1 kcal.Mol⁻¹ respectivement pour les paires (G/C,C/G), (A/U,U/A) et (G/U,U/G). Vérifiez votre implémentation sur les exemples du cours numéro 1.
6. Coder une petite fonction permettant la mise en forme de la structure secondaire sous la forme d'une notation bien parenthésée.
7. Ajouter à `applications.py` une fonction `weightedCount(hypergraph,name)` qui implémente le comptage pondéré vu en cours. Ajouter au fichier `hypergraphNussinov.py` une fonction `buildBoltzmannNussinovGraph(seq)` qui construit l'hypergraphe de Nussinov, pondéré par des facteurs de Boltzmann $e^{E/RT}$.
8. Ajouter une fonction de génération aléatoire pondérée `rangGen(hypergraph,name)` qui engendre un F-chemin avec probabilité proportionnelle à son poids, suivant les principes vus en cours. On pourra tester l'absence de biais sur l'hypergraphe renvoyé par la fonction `testHypergraph()`, qui contient exactement 12 chemins.
9. Ajouter enfin à `applications.py` une fonction `arcProba(hypergraph)` qui calcule les probabilités associées à tous les F-arcs de l'hypergraphe `hypergraph`.
10. De part le choix d'implémentation dans `applications.py`, les arcs sont stockés un par un et de façon explicite. La complexité en mémoire des algorithmes est donc égale à celle en temps (et est égale à la taille de l'hypergraphe). Proposez une représentation compacte pour économiser de l'espace.