Université Bordeaux I
U.F.R. Mathématiques et Informatique

Dess ISC
Année 2002-2003

Projet Commun
Algorithmique - Programmation Java

Marie-Noëlle Aimar, Alain Griffault

20 décembre 2002

Molécules organiques

Les molécules organiques sont des éléments de base en biochimie. Pour notre exemple, nous considèrerons qu'une molécule est constituée de deux radicaux liés et qu'un radical ne contient que des atomes carbone (C), oxygène (O) et/ou hydrogène (H).

Un atome de carbone a quatre liaisons, un atome d'oxygène en a deux et un atome d'hydrogène n'en a qu'une. Un Ainsi, un atome d'hydrogène est un radical complet, mais les autre atomes ne sont pas des radicaux. Pour qu'un atome d'oxygène devienne un radical, il doit être lié à un autre radical. Pour qu'un atome de carbone devienne un radical, il doit être lié à trois autres atomes.
Un radical peut être représenté par une chaîne de caractères contenant des `H`, des `O` et des `C`. Dans une telle chaîne, un `O` est suivi de la représentation d'un autre radical et un `C` est suivi des représentations de trois autres radicaux. Ainsi, le radical *méthyle* peut être représenté par `CHHCHHH`, par `CHCHHHH` ou par `CCHHHHH`, selon l'ordre des trois liaisons. Pour faciliter la lecture des descriptions, on se permet de mettre des parenthèses comme ceci : `(CHH(CHHH))`, `(CH(CHHH)H)` et `(C(CHHH)HH)`, mais ces parenthèses sont facultatives.
Une molécule est représentée par deux radicaux successifs. Ainsi, la molécule d'éthane peut être représentée par `H(CHH(CHHH))`, par `(CHHH)(CHHH)` ou par plusieurs autres possibilités.

Travail à réaliser

On se propose de réaliser une machine moléculaire qui simulera la réunion des différents atomes pour construire des radicaux complets. Votre programme devra :

1. générer un ensemble d'atomes contenant des nombres quelconques (aléatoires ou paramètres) d'atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène (vous vous restreindrez toutefois à un nombre global raisonnable).
2. générer avec les atomes à disposition des radicaux complets. Diverses stratégies peuvent être envisagées :
   - fabriquer la molécule la plus grande possible en fonction des atomes disponibles et des contraintes données plus haut.
   - consommer le plus d'atomes pour fabriquer des radicaux complets et des molécules.
   - …
3. afficher les résultats comme des mots sur l'alphabet $\{C, H, O, (,)\}$

Ce travail est à réaliser en deux parties distinctes : un dossier papier et un programme informatique.

Le dossier doit contenir votre analyse du problème, les solutions que vous avez envisagées (même si elles n'ont pas toutes été réalisées dans le programme) et les algorithmes que vous avez choisis. Il doit être le reflet de votre niveau de compréhension du problème à traiter. Vous indiquerez dans ce document où se trouve les sources correspondant au programme.

Votre programme sera évalué sur la qualité du code : organisation claire, utilisation de fonctions partagées sans duplication de code, commentaires et lisibilité de l'ensemble. Une version imprimé du code sera jointe au dossier papier.

Contraintes : le travail est à faire en binôme, et à remettre au plus tard le vendredi 31 janvier 2003 au secrétariat.