

COMPUTACIÓN BIOLÓGICA

Pedro Isasi¹

¹Departamento de Informática
Universidad Carlos III de Madrid
Avda. de la Universidad, 30. 28911 Leganés (Madrid). Spain
email: isasi@ia.uc3m.es

Presentación

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- **Introducción a los Algoritmos Genéticos**
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- **Algoritmos Genéticos Canónicos**
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- **Ejemplo de Algoritmo Genético**
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- **Características de los Algoritmos Genéticos**
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

Limitaciones de los AGs:

- **La representación:** El espacio de búsqueda sólo se representa mediante cadenas binarias o discretas
- **Las dependencias:** El mecanismo del AGs no considera las posibles de restricciones o dependencias del problema
- **La opacidad:** El AGs sólo está guiado por la aptitud de los individuos, y no incorpora ningún otro conocimiento específico del problema en cuestión
- **La finitud:** el AGs sólo puede trabajar con poblaciones finitas no muy grandes

Problemas de los AGs:

- Pérdida de **variabilidad genética**. **Convergencia prematura**, estancamiento en mínimos locales
- Problema de **epístasis**
- **Paisaje de la función de evaluación** muy abrupto
- Problema de **desorientación** (deception)
- Deriva genética

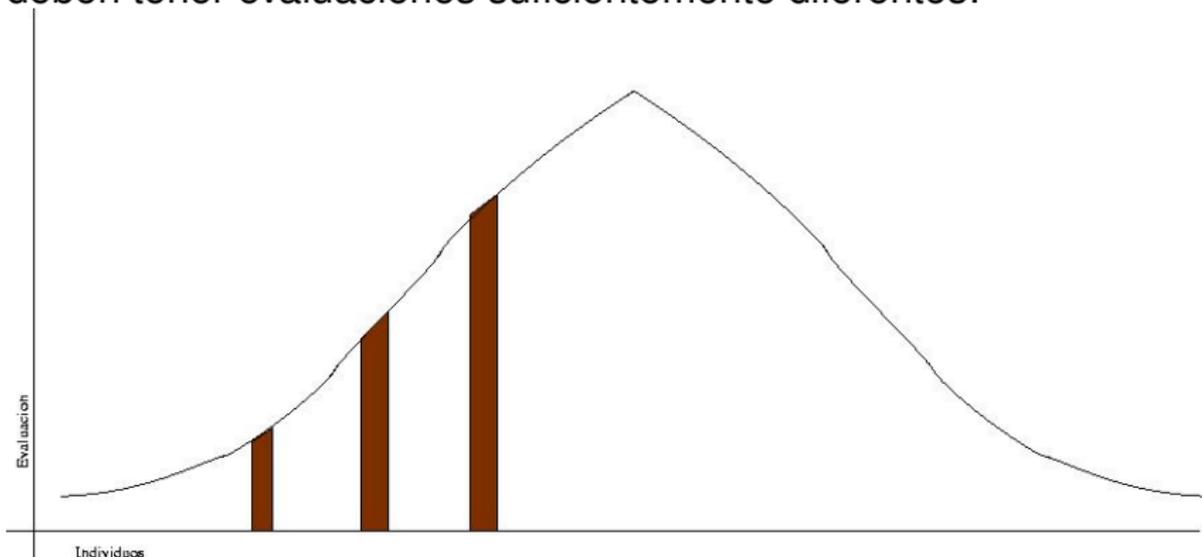
- La generación de nuevos individuos se basa en la recombinación de los ya existentes
- La pérdida de variabilidad genética impide producir soluciones novedosas. Se pierde la capacidad de intercambio de información útil entre los individuos
- La **similitud genética** de los individuos indica el **final** del proceso de **búsqueda**
- Si la pérdida de variabilidad genética se produce en las primeras fases de la evolución se dice que hay **convergencia prematura**
- La convergencia prematura hace que el proceso se estanque en **mínimos locales**
- Es importante evitar la convergencia prematura

- En algún momento de la evolución de un AG puede ocurrir que un individuo o un grupo de ellos obtengan una aptitud notablemente superior a los demás (fases tempranas de la evolución)
- Riesgo de que se produzca una evolución en avalancha:
 - Al incrementar los individuos más aptos su presencia en la población, la diversidad disminuye, ello hace que en la siguiente generación se favorezca aún más a los individuos más aptos hasta que dominan toda la población (superindividuos)
 - Los superindividuos sólo son los más aptos en cierto momento ⇒ Convergencia prematura del AG hacia un subóptimo
 - Este fenómeno puede ser deseable, pero solo en la fase final del proceso

- La heurística de los AGs se fundamenta en la **adyacencia** e **independencia** de la codificación:
 - Individuos genotípicamente parecidos producen fenotipos similares y viceversa
 - No existen interacciones entre los genes, cada uno puede evolucionar de forma independiente
- Si la propiedad de adyacencia no se cumple, el proceso de búsqueda se hace menos heurístico
- Los nuevos individuos se generarán más aleatoriamente cuanto menos se cumpla la propiedad de adyacencia
- Si los genes dependen unos de otros, cuando se cambia el valor de uno, esto repercute en la característica fenotípica de otro. La búsqueda se hace también más aleatoria
- Esto es debido a la teoría de los bloques constructivos
- Cuando esto ocurre se dice que la codificación tiene **epístasis**

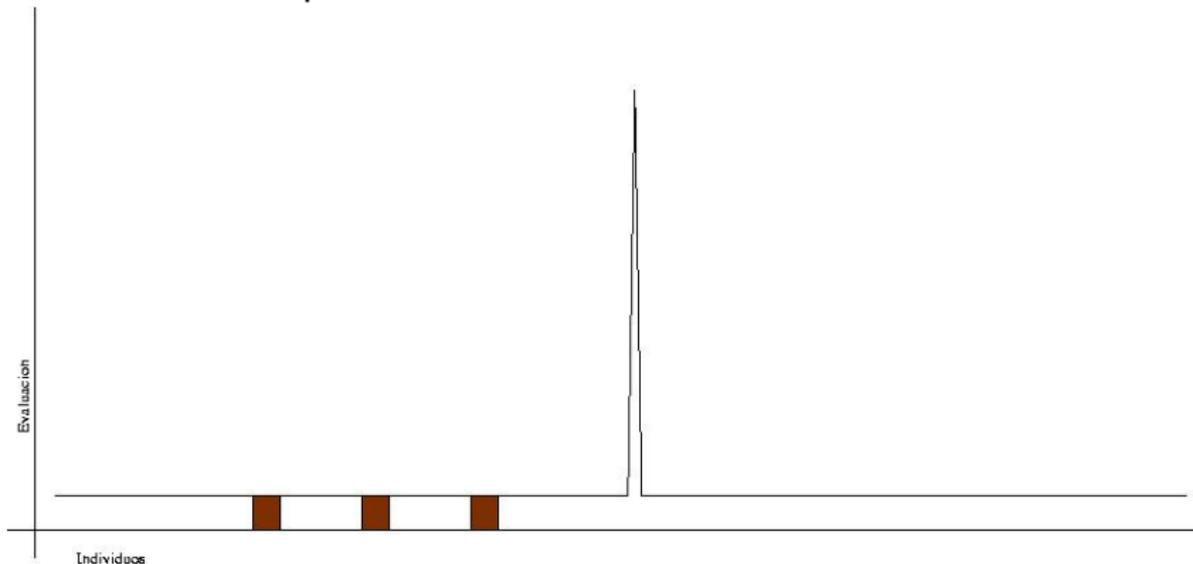
FUNCIÓN DE EVALUACIÓN ABRUPTA

Para que el AGs pueda encontrar una buena solución, los individuos deben tener evaluaciones suficientemente diferentes:



FUNCIÓN DE EVALUACIÓN ABRUPTA

En caso contrario se dice que el paisaje de la función de evaluación es demasiado abrupto:



- La forma de la función de evaluación es muy abrupta, lo que hace que no haya suficiente presión selectiva para aproximarse sucesivamente al óptimo
- No existe nada que dirija a los individuos hacia la dirección correcta, todos los individuos tienen probabilidades similares de sobrevivir
- La búsqueda se convierte en un proceso aleatorio

- Si al combinar dos buenos individuos se producen habitualmente individuos peores que ambos
- La teoría de los bloques constructivos necesita que se generen esquemas privilegiados
- Si bloques constructivos que generan por separado individuos buenos, al combinarse generan individuos peores, se dice que existe desorientación

- Al ser un método estocástico pueden verse favorecidos individuos no demasiado buenos
- Estos individuos ocasionalmente mejores pueden ser realimentados en sucesivas generaciones haciendo converger a la población hacia zonas subóptimas
- Esto tiende a producirse en los primeros pasos de ejecución, cuando los individuos mejores son aún malos
- También se produce por la aparición de superindividuos, que en pocas generaciones abarcan la casi totalidad de la población
- A esto se le conoce con el nombre de deriva genética

- Para controlar la diversidad genética hay que actuar sobre el mecanismo de generación de descendientes
- Cuanto más se favorezca a los más aptos menor variedad se obtendrá, y aumenta el riesgo de perder la información de valor desarrollada por los individuos moderadamente aptos
- Si no se favorece especialmente a los individuos más aptos, se obtendrá más diversidad a costa de hacer las etapas de selección menos eficaces
- A la mayor o menor tendencia a favorecer a los individuos más aptos se le llama presión selectiva

- Lo ideal:
 - En las primeras fases de la evolución poca presión selectiva para que la búsqueda sea lo más global posible. **Exploración**
 - En las últimas fases de la evolución, incrementar la presión selectiva para encontrar cuanto antes la solución. **Explotación**
- La presión selectiva (PS) cuantifica el número esperado de descendientes que generó el mejor individuo de la población:

$$PS = \frac{F_{Max}}{F_{Med}}$$

- Es la relación entre el valor máximo de evaluación de toda la población y el valor medio

- Lo ideal son valores de presión selectiva alrededor de 1,5
- Valores mayores generarán superindividuos, valores menores ralentizarán la búsqueda
- En caso extremo, si $PS = 1$, todos los individuos tienen idéntica evaluación y no existe ninguna presión selectiva
- Para cuantificar la diversidad hay que calcular la frecuencia relativa y calcular su desviación típica:

$$Fr_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^n F_i}$$

$$D = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Fr_i - \bar{Fr})^2}$$

Para controlar la diversidad se puede:

- Controlar el mecanismo de selección.- Introduciendo nuevos operadores tipo torneos
- Cambiando la función de evaluación.- De forma que suavice las diferencias entre los individuos
- Introduciendo mecanismo de control de edades.- Los individuos reducen su aptitud con la edad o simplemente desaparecen

Debe cumplir:

- **Completitud.**- Todas las posibles soluciones deben poder ser representados
- **Coherencia.**- únicamente se deben representar soluciones factibles del problema
- **Uniformidad.**- Todas las soluciones deben estar representados por la misma cantidad de codificaciones
- **Sencillez.**- Debe ser fácil de aplicar el mecanismo de codificación solución individuo
- **Adyacencia.**- Pequeños cambios en los individuos se han de corresponder con pequeños cambios en las soluciones

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- **Métodos de compartición y soluciones múltiples**
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- **Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos**
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN

1 INTRODUCCIÓN

2 ALGORITMOS GENÉTICOS

- Introducción a los Algoritmos Genéticos
- Algoritmos Genéticos Canónicos
- Ejemplo de Algoritmo Genético
- Características de los Algoritmos Genéticos
- Métodos de compartición y soluciones múltiples
- Manejo de restricciones en Algoritmos Genéticos
- Fundamentos de los Algoritmos Genéticos

3 COMPUTACIÓN EVOLUTIVA

4 COMPUTACIÓN CON INSPIRACIÓN BIOLÓGICA

5 BIOLOGÍA Y COMPUTACIÓN