Sekwencjonowanie łańcuchów DNA z błędami negatywnymi i pozytywnymi

Autor: *Mateusz Oleszek, nr. 144608*

Ogólny opis

Algorytm bazuje na koncepcji Profesora Jacka Błażewicza

Wygeneruj graf skierowany pełny gdzie wierzchołki to oligonukleotydów. A każda krawędź pomiędzy nimi ma koszt zależny od stopnia pokrycia pomiędzy nimi, równy *l-k*. Gdzie *l* to długość oligonukleotydów a k ilość pokrywających się aminokwasów. Krawedzię będą więc miały koszty 1 do *L*.

Sekwencja genomu powstanie ze znalezionej ścieżki we grafie. Poszukiwana jest ścieżka próbująca balansować dwa parametry, jak najmniejszy koszt wynikający z przejścia ścieżki i największy zysk pochodzący z odwiedzenia jak największą ilość wierzchołków, przy jednoczesnym ograniczeniu kosztu sekwencji nie większym niż *N-l* (w przeciwnym razie długość sekwencji byłaby większa niż *N*)

Jest ona znajdowana przez rozwiązanie selektywnego problemu komiwojażera, przy wykorzystaniu algorytmu genetycznego. Algorytm genetyczny bierze pewną losową pólę rozwiązań, wybiera z nich te najlepsze według pewnej funkcji zysku (w naszym przypadku biorącej pod uwagę koszt ścieżki i zysk z odwiedzonych wierzchołków), a następnie na ich podstawie poprzez różne modyfikacje (rozmnażanie i mutacje) tworzy nowy zestaw potencjalnych rozwiązań. Nadzieją jest, że z kolejnymi iteracjami uda się znajdować coraz lepsze rozwiązania.

Terminologia:

- rodzic/dziecko: potencjalne rozwiązanie problemu komiwojażera, reprezentowany jako uszeregowana lista kolejnych wierzchołków ścieżki.
- populacja: zbiór potencjalnych rozwiązań.

Kroki algorytmu genetycznego

1. Wygenerowanie inicjalnej populacji o wielkości *S*
2. Przez *i* iteracji:
    1. Wybór najlepszego odsetka populacji jako rodziców
    2. Rozmnażanie rodziców poprzez krzyżówki w celu wygenerowaniu zbioru nowych dzieci o wielkości *S*
    3. Mutacja dzieci
    4. Stworzenie nowej populacji na podstawie zmutowanych dzieci

Generowanie inicjalnej populacji

Dzieje się to za pomocą Greedy Search po wierzchołkach. Jest wybierany losowy początkowy, a następne dobierane kolejne z najniższymi kosztami tak długo jak długość ścieżki jest pod limitem.

Wybór najlepszego odsetka populacji

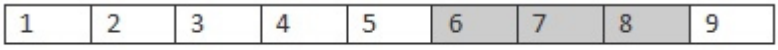
Każda sekwencja w populacji dostaje ocenę w postaci wzoru $|\frac{W-W_{min}}{W_{max}-W_{min}}|$ który będzie dawał wyniki z przedziału <0;1>. W to liczba wierzchołków w ścieżce, $Wmin$,$Wmax$ to są odpowiednio największa i najmniejsza liczba wierzchołków w ścieżkach z obecnej populacji. Ocena jest interpolacją liniową między nimi. Nie uwzględniam w niej kosztu ścieżki, jako że w algorytmie jest dopełniany podczas rozmnażania.

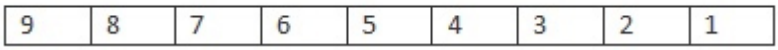
Te oceny są wykorzystywane jako wagi przy wybieraniu losowych $S*sel$ rodziców z populacji. Gdzie sel to selektywność z wartością w przedziale (0;1))

Sposób krzyżowania populacji

- Dopóki nie zostanie stworzona nowa populacja o wielkości S:
    - Z pewnym prawdopodobieństwem zajdzie jedno z dwóch wydarzeń:
        1. Losowy rodzic zostanie bezpośrednio przeniesiony do dzieci
        2. nowe dziecko zostanie stworzone przez krzyżówkę 2 losowo wybranych rodziców. Krzyżówka działa na zasadzie wybrania pewnej ciągłej podścieżki w jednym dziecku, zostawieniu tylko jej i usunięciu reszty, i wypełnieniem tej reszty przed i po podścieżką elementami z drugiego dziecka, w tej kolejności w jakiej tam występują. Jeśli po krzyżówce koszt ścieżki jest wyższy niż akceptowalny będzie ona powtarzana do skutku lub ustalonej ilości powtórzeń.

Rodzice:





Dzieci:

Sposób mutacji

Każde dziecko ma pewne prawdopodobieństwo przejścia mutacji. Jeśli tak się stanie może się wydarzyć jedna z 3 rzeczy.

1. 2 losowe wierzchołki zostaną zamienione ze sobą miejscami
2. Zostanie dodany losowy wierzchołek w losowym miejscu w ścieżce.

Jeśli po mutacji koszt ścieżki wzrósłby ponad limit inne mutacje będą po kolei powtarzane w pętli aż nie powstanie akceptowalna (albo do ustalonej granicy powtórzeń)

Wnioski

Niestety po przeprowadzeniu wielu prób z różnymi wartościami wielkości populacji, iteracjami i parametrami odpowiadającymi za prawdopodobieństwo zajścia krzyżówki i mutacji inicjalna populacja powstała z zachłannego szukania ścieżki w grafie miała w sobie ścieżkę która, obejmowała największą liczbę wierzchołków niż kolejne mutacje.

Źródła i inspiracje

1. https://jaketae.github.io/study/genetic-algorithm/
2. https://towardsdatascience.com/evolution-of-a-salesman-a-complete-genetic-algorithm-tutorial-for-python-6fe5d2b3ca35
3. https://www.theprojectspot.com/tutorial-post/applying-a-genetic-algorithm-to-the-travelling-salesman-problem/5