

# Parte de Algoritmos, de la asignatura de Programación Máster de Bioinformática Aleatoriedad y algoritmos aleatorios

Domingo Giménez Cánovas

Departamento de Informática y Sistemas

Universidad de Murcia

<http://dis.um.es/~domingo/algbio.html>

[domingo@um.es](mailto:domingo@um.es)

Aleatoriedad y algoritmos aleatorios

# Contenido

- 1 Aleatoriedad
- 2 Generación de números aleatorios (PERL 7.1 y 7.2)
- 3 Mutación en un ADN (PERL 7.3)
- 4 Generación de cadenas de ADN (PERL 7.4)
- 5 Estadísticas con cadenas de ADN (PERL 7.5)
- 6 Ordenación por Quicksort
- 7 Temas adicionales

- Está en la naturaleza (mutación).
- Generación de valores aleatorios se puede usar para simulación.
- Son necesarias herramientas computacionales para generar valores aleatorios.
- Algoritmos aleatorios realizan operaciones o toman decisiones distintas de forma aleatoria,
  - se pueden utilizar cuando explorar todas las posibilidades no es posible
  - o para tomar una decisión cuando no se sabe cuál es la mejor

- Los lenguajes de programación tienen funciones para generar números aleatorios.
- En realidad son pseudoaleatorios, pues generan una secuencia de números, siempre la misma.
- Empezando por una posición distinta (usando una semilla) se puede simular que es aleatoria.
- La semilla se puede establecer con un evento externo, por ejemplo dependiendo de la hora.

## Ejemplo 7.1 de PERL

→ Ejecutar el programa.

Escribe historias combinando de forma aleatoria partes distintas:

- Almacena una serie de *nombres*, *verbos* y *preposiciones*
- genera aleatoriamente un *nombre*, un *verbo*, un *nombre* y una *preposicion*, y las concatena formando una historia.
- Genera seis historias y pregunta si queremos continuar. Utiliza el bucle `do ... until`, y se acaba cuando lo escrito en la entrada estándar (STDIN) es, desde el principio ( `^` ), una serie de espacios en blanco ( `\s*` ), seguido de ( `q` ), sin diferenciar mayúsculas y minúsculas ( `i` ).

## Ejemplo 7.1 de PERL (continuación)

→ Localizar `srand` en el programa.

Se genera una semilla para la generación aleatoria con la función `srand`:

- `srand(numero)` generará los números aleatorios en las sucesivas llamadas empezando en la posición de la secuencia aleatoria indicada por `numero`.
- Con `srand(time|$$)` se genera la semilla de forma aleatoria:  
`time` devuelve un número que representa el tiempo y con `$$` se concatena (operador `.`) con un número asociado al programa que se está ejecutando.

## Ejemplo 7.1 de PERL (fin)

→ Localizar rand en el programa.

Con sucesivas llamadas a la función rand se generan números aleatorios.

Por ejemplo, `$verbs[int(rand(scalar @verbs))]` se evalúa de dentro a fuera:

- `@verbs` es un array
- `scalar @verbs` devuelve que el array tiene 7 elementos
- `rand(scalar @verbs)` devuelve un número real entre 0 y 7
- con `int(rand(scalar @verbs))` se toma como entero
- y `$verbs[int(rand(scalar @verbs))]` devuelve el elemento (\$) en esa posición del array verbo.

y se puede escribir también `$verbs[int rand scalar @verbs]`  
o `$verbs[rand @verbs]`

## Ejemplo 7.1 de PERL (modificación)

→ Modificar el ejemplo 7.1 para que no se generen historias donde los dos nombres coincidan.

¿Otros cambios?

## Ejemplo 7.2 de PERL

Usa funciones para:

- Seleccionar una posición aleatoria en una cadena de ADN,
- seleccionar aleatoriamente un nucleótido
- y sustituirlo en esa posición de la cadena.

## Ejemplo 7.2: Posición aleatoria en ADN

```
sub randomposition {  
    my($string) = @_;  
    return int rand length $string;  
}
```

Usa `length` para obtener la longitud del `string` que se le pasa, y devuelve una posición aleatoria en él.

## Ejemplo 7.2: Generar un nucleótido

```
sub randomnucleotide {  
    my(@nucs) = @_;  
    return $nucs[rand @nucs];  
}
```

Si se han guardado las cuatro posibilidades en

```
my @nucleotides = ('A', 'C', 'G', 'T');
```

devuelve uno de los cuatro caracteres.

## Ejemplo 7.2: Cambiar una posición en la cadena

```
sub mutate {
    my($dna) = @_;
    my(@nucleotides) = ('A', 'C', 'G', 'T');
    # Pick a random position in the DNA
    my($position) = randomposition($dna);
    # Pick a random nucleotide
    my($newbase) = randomnucleotide(@nucleotides);
    # Insert the random nucleotide into the random position in the DNA.
    # The substr arguments mean the following:
    # In the string $dna at position $position change 1 character to
    # the string in $newbase
    substr($dna,$position,1,$newbase);
    return $dna;
}
```

→ Explicar el funcionamiento de la rutina a partir de los comentarios.

→ Ejecutar y entender el funcionamiento del programa completo.

## Ejemplo 7.2 de PERL (modificación)

→ Modificar el ejemplo 7.2:

- Para no cambiar un nucleótido por sí mismo.
- Para cambiar un nucleótido por entre 1 y 4 nucleótidos. El número se genera aleatoriamente y los caracteres también.

## Ejemplo 7.3 de PERL

Con técnica de diseño *top-down* (en el caso anterior se ha usado *bottom-up*):

```
@random_DNA = make_random_DNA_set( $minimum_length,  
$maximum_length, $size_of_set );
```

donde:

```
repeat $size_of_set times:  
    $length = random number between minimum and maximum length  
    $dna = make_random_DNA ( $length );  
    add $dna to @set  
return @set
```

etcétera, se llega al ejemplo 7.3

## Ejemplo 7.3 de PERL

- Identificar la forma en que se ha diseñado el ejemplo 7.3.
- Identificar las funciones reutilizadas.
- Identificar nuevos operadores o funciones.

## Ejemplo 7.3 de PERL (modificación)

→ Modificar el ejemplo 7.3:

- Para que las cadenas que se generen tengan un número par de caracteres.
- Para que en una cadena el número de caracteres de un tipo no exceda en más de uno el número de caracteres de otro tipo.
- Para que en una cadena no se repita tres veces consecutivas en mismo carácter.

## Ejemplo 7.4 de PERL

Se trata de encontrar el porcentaje de coincidencia entre pares de cadenas de ADN de la misma longitud.

→ Implementar un programa que lo haga

→ y, después, compararlo con el ejemplo 7.4 del libro.

# Esquema

Para ordenar un array  $s$ :

Se selecciona un elemento  $e$  del array, y se divide el array en dos subarrays con:

$s_{izq}$  con elementos menores o iguales a  $e$

$s_{der}$  con elementos mayores o iguales a  $e$

y se ordenan recursivamente  $s_{izq}$  y  $s_{der}$

## Esquema con datos en array

```
quicksort(s, izq, der)
  if length(s) != 1
    p=pivotar(s, izq, der)
    quicksort(s, izq, p-1)
    quicksort(s, p+1, der)
```

donde `pivotar` deja un elemento  $e$  en su posición  $p$  una vez se hubiera ordenado el array, deja a la izquierda (entre  $izq$  y  $p - 1$ ) elementos menores o iguales a  $e$ , y a la izquierda (entre  $p + 1$  y  $der$ ) elementos mayores o iguales a  $e$ .

# Pivotaje

```
sub pivotar {  
    my ($array, $low, $high) = @_;  
    my $x = $$array[$high];  
    my $i = $low - 1;  
    for my $j ($low .. $high - 1) {  
        if ($$array[$j] <= $x) {  
            $i++;  
            @$array[$i, $j] = @$array[$j, $i];  
        }  
    }  
    $i++;  
    @$array[$i, $high] = @$array[$high, $i];  
    return $i;  
}
```

Tomado de internet...

→ entender lo que hace y hacerlo funcionar.

## Tiempo de ejecución

- → Obtener el tiempo de ejecución para entradas ordenadas o inversamente ordenadas, para arrays de muchos elementos.
- El problema es que ese es el caso más desfavorable (volveremos sobre esto en el análisis de algoritmos).
- Si se selecciona el pivote de forma aleatoria no tenemos ese caso más desfavorable.
- → Programarlo así y comparar el tiempo de ejecución con la versión anterior.
- → Buscar formas distintas de medir el tiempo de ejecución.

- En el capítulo 12 del libro ALG hay un par de ejemplos de algoritmos aleatorios en bioinformática, pero quedan fuera de los conceptos básicos que estamos viendo en esta introducción a la programación.
- En el libro de Brassard y Bratley hay un capítulo de algoritmos aleatorios (no de bioinformática).