

T.UDC-251

ALGORITMOS GENÉTICOS GENERALIZADOS:  
VARIACIONES SOBRE UN TEMA

María Teresa Iglesias Otero

Octubre, 1997

Universidad de La Coruña

ALGORITMOS GENÉTICOS GENERALIZADOS:

VARIACIONES SOBRE UN TEMA

Maria Teresa Iglesias Otero

Octubre, 1997

Directores: Dr. D. Alain Verschoren

Dra. Dña. Concepción Vidal Martín

A Aurora, mi madre

# Índice General

<b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>1 Algoritmos Genéticos y Optimización</b>	<b>15</b>
1.1 Métodos clásicos de optimización . . . . .	15
1.2 Evolución y Algoritmos Genéticos . . . . .	18
<b>2 Sobre el Teorema de los Esquemas</b>	<b>25</b>
2.1 ¿Por qué funcionan los algoritmos genéticos? . . . . .	25
2.2 Un Teorema de los Esquemas Fuzzy . . . . .	31
2.3 El Teorema de los Esquemas en espacios medibles . . . . .	34
<b>3 Funciones difíciles de optimizar</b>	<b>41</b>
3.1 Funciones decepcionantes . . . . .	41
3.2 Epistasis sobre alfabetos binarios . . . . .	47
3.3 Valores extremos de la epistasis . . . . .	52
<b>4 Epistasis sobre alfabetos no binarios</b>	<b>57</b>
4.1 Las representaciones n-arias y la epistasis . . . . .	57
4.2 Epistasis normalizada . . . . .	64
4.3 Valores extremos de la epistasis normalizada . . . . .	73
4.4 Funciones de ajuste con epistasis máxima . . . . .	80
<b>5 Funciones de peso</b>	<b>89</b>
5.1 Epistasis en las funciones de peso . . . . .	89
5.2 Valores extremos de la epistasis normalizada . . . . .	97
5.3 Funciones de peso en alfabetos ternarios . . . . .	110
<b>Bibliografía</b>	<b>135</b>



# Introducción

En esta memoria analizamos algunos hechos relativos a una subclase de procesos adaptativos, aquellos basados en el principio de la evolución de las especies (la supervivencia del más fuerte): los algoritmos genéticos

Las primeras descripciones técnicas y definiciones de adaptación provienen de la biología. En este contexto, la adaptación designa cualquier proceso en el cual una estructura va modificándose de forma progresiva para lograr el comportamiento óptimo en su entorno. Tales estructuras pueden ser desde una proteína hasta el cerebro humano. Una observación cuidadosa de la evolución sufrida por esas estructuras revela generalmente un conjunto básico de modificadores estructurales u operadores, cuyas acciones reiteradas conducen a las modificaciones observadas.

Los procesos adaptativos desempeñan un papel decisivo en campos tan diferentes como la psicología, la economía, la inteligencia artificial, o en las técnicas de muestreo. Básicamente, son procesos de optimización, pero es difícil aglutinarlos y unificar su estudio, porque las estructuras modificables son complejas y su comportamiento es incierto. A menudo, interacciones no aditivas (epistasia o no linealidad) hacen imposible determinar el comportamiento de un todo a partir del estudio de sus partes aisladamente. Estas dificultades suscitan un verdadero problema al analista; sin embargo, el proceso adaptativo biológico las maneja de forma rutinaria.

Es un hecho familiar que cada organismo es una amalgama de características determinadas por los genes de sus cromosomas. Cada gen tiene varias formas—alelos— que originan diferencias en el conjunto de las características asociadas a ese gen. Hay decenas de miles de genes en los cromosomas de un vertebrado, cada uno de los cuales tiene varios alelos. El conjunto de cromosomas, obtenidos de todas las posibles combinaciones de, por ejemplo, diez mil genes es de  $2^{10.000} \simeq 10^{3.000}$  estructuras, (suponiendo dos alelos por cada uno de los genes). Incluso una población enorme, pongamos de diez billones

de individuos, contiene sólo una minúscula fracción de esas posibilidades. Este enorme número de posibilidades genéticas—genotipos— es un indicador de la complejidad de los sistemas naturales. Sin embargo, la complejidad básica de estos sistemas se debe a las interacciones entre los genes. Varios genes pueden determinar conjuntamente una característica dada en un individuo, y diferentes alelos de un mismo gen pueden producir proteínas relacionadas entre sí, que, a su vez, provocan variaciones en las características asociadas a ese gen. Todo esto aumenta considerablemente la complejidad del sistema. Pero la mayor complejidad aparece cuando los efectos de diferentes enzimas (catalizadores biológicos de las proteínas) no son aditivos; fenómeno éste que se conoce como epistasis. La idea básica es que cada alelo depende fuertemente de los demás alelos, de forma que cambios pequeños en alguno de ellos pueden originar efectos importantes. Es decir el fenotipo resultante depende de manera determinante de estos efectos epistáticos.

Por todo lo anterior, para modelar estos sistemas adaptativos naturales mediante los algoritmos genéticos, es necesario extraer y generalizar los factores fundamentales de los procesos biológicos. Entre esas generalizaciones destacan el concepto de esquema, que se corresponde con un conjunto de genes que interactúan, la generalización de los operadores genéticos tales como el cruce o la mutación y la abstracción al campo computacional del fenómeno de la epistasis.

Los algoritmos genéticos vienen siendo desarrollados por John Holland y sus colegas de la Universidad de Michigan desde finales de los años sesenta. Las consecuencias más importantes de sus investigaciones han sido fundamentalmente abstraer y explicar el proceso adaptativo de los sistemas naturales, y diseñar software para sistemas artificiales que imitan los mecanismos fundamentales de actuación de tales sistemas.

La primera monografía sobre este tema es *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, publicada por Holland en 1975. En ella se sientan las bases teóricas que fundamentan el desarrollo, desde el punto de vista computacional, de la teoría de los algoritmos genéticos; abstrayendo los conceptos de genética natural y aplicándolos a la economía, el reconocimiento de patrones y la teoría de juegos.

Posteriores investigaciones han establecido la validez de los algoritmos genéticos en la optimización de funciones (éste será nuestro ámbito de estudio) y las aplicaciones de control. Recientemente han incrementado sus campos de acción a áreas que van desde el diseño de circuitos integrados y

redes neuronales al diseño de turbinas en aviación, por ejemplo.

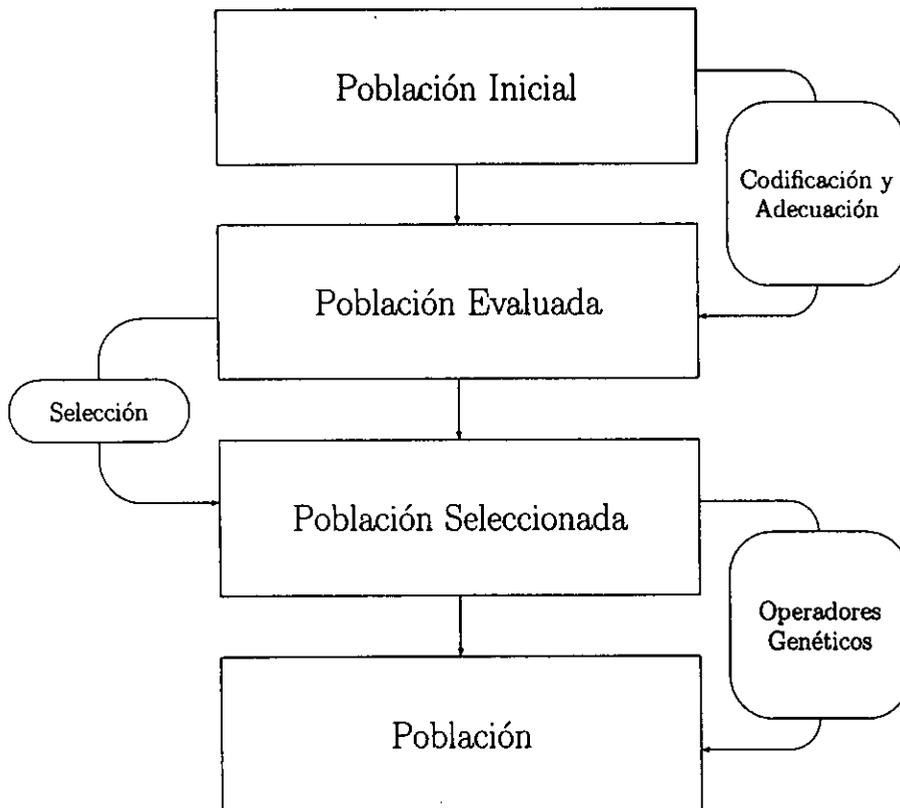
La razón del número creciente de aplicaciones es clara: estos algoritmos son computacionalmente sencillos y sin embargo poderosos. No están limitados por suposiciones restrictivas sobre el espacio de búsqueda (relacionadas con la continuidad, la existencia de derivadas,...). Además, les apoya fuertemente el rápido crecimiento en la capacidad computacional de las máquinas de procesamiento paralelo; ya que, los algoritmos genéticos trabajan con poblaciones (i.e., subconjuntos del espacio de búsqueda) y, por ende, son adecuados para ejecutarse sobre computadores con gran número de procesadores.

Para que los algoritmos genéticos aventajen a los métodos tradicionales de optimización funcional, en cuanto a la robustez, deberán diferenciarse de éstos en aspectos fundamentales. En efecto, los algoritmos genéticos son diferentes en cuatro aspectos:

1. trabajan con una codificación de un conjunto de parámetros, no con los parámetros mismos,
2. realizan la búsqueda sobre un conjunto de puntos, no en un único punto.
3. utilizan la información que les proporcionan las evaluaciones de la función objetivo, no derivadas ni ningún otro conocimiento auxiliar, y por último,
4. usan reglas de transición probabilísticas, no deterministas.

El principal logro de la combinación de los puntos anteriores ha sido el equilibrio entre la eficiencia y la eficacia necesarias para resolver diferentes y complejos problemas; algunos de los cuales, como el problema del viajante, no admite soluciones tradicionales.

El siguiente diagrama muestra un esquema de funcionamiento de un algoritmo genético:



La ejecución del algoritmo comienza con la generación, usualmente de forma aleatoria, de una población inicial de individuos  $P(0)$ —posibles soluciones del problema a tratar—, que, generalmente, se codifican en cadenas binarias de longitud fija. Lo que sigue es un proceso iterativo de actuación que podemos resumir así: durante la iteración  $t$  el algoritmo genético cuenta con una población de soluciones potenciales  $P(t)$  (los cromosomas o vectores). Cada cromosoma se evalúa por medio de la función a optimizar—función de ajuste—para medir su idoneidad; entonces se seleccionan los individuos más idóneos. Algunos de los miembros de esta nueva población sufren alteraciones, debidas a la acción de los operadores genéticos (cruce y/o mutación), para formar nuevas soluciones que constituyen una nueva generación. El proceso se repite hasta alcanzar una cierta condición de parada.

Al análisis del funcionamiento general de los algoritmos genéticos y su comparación con los métodos tradicionales de optimización, junto con la

introducción de la terminología usual en este campo (extraída de la genética), dedicamos el primer capítulo de esta memoria.

El segundo capítulo resume los conceptos básicos que permiten establecer las bases teóricas del funcionamiento de los algoritmos genéticos. Se introducen las nociones de esquema, orden y longitud de definición de los esquemas; conceptos éstos sobre los que se analiza el comportamiento de la selección y los operadores genéticos, y que desembocan en el teorema fundamental de los algoritmos genéticos: el teorema de los esquemas, establecido por Holland en 1975 en [14].

Holland observó que los “mejores” individuos guardaban entre sí ciertas similitudes y formalizó esta idea bajo la noción de esquema. Observó además que, a medida que el proceso de búsqueda y selección avanza, los “mejores” cromosomas persisten en mayor número en la población. Por su parte, los que se mantienen en la media estabilizan su presencia y, por último, los “peores” desaparecen. Así pues, los esquemas son patrones que permiten explotar esos “parecidos” entre los cromosomas, con el fin de mejorar las direcciones de búsqueda del algoritmo.

El teorema de los esquemas es la justificación teórica más importante del funcionamiento de los algoritmos genéticos. Afirma este teorema que el número de esquemas cortos, de bajo orden e idoneidad alta crece exponencialmente en las sucesivas generaciones del algoritmo. Este tipo de esquemas se caracterizan por ser menos susceptibles a los operadores genéticos. El teorema de los esquemas se estudia con detalle en la sección 2.1, en la que también se introduce la hipótesis de los building blocks (o bloques constructivos).

La generalización del concepto de esquema de Holland, realizada por Vose en [31], condujo directamente a la cuestión suscitada durante bastante tiempo en relación con la existencia de otras estructuras (además de los esquemas clásicos), que verificasen el teorema de los esquemas. Además de los predicados arbitrarios introducidos por Vose, en [30] se consideran los esquemas como subconjuntos difusos (fuzzy) del espacio de búsqueda en el que trabaja el algoritmo, y se demuestra que empleando ese punto de vista (más general a efectos prácticos), se verifica una versión apropiada del teorema de los esquemas. Un resumen de los hechos más importantes concernientes a este estudio lo constituye el segundo epígrafe de este capítulo.

En el último epígrafe del capítulo 2, generalizamos los resultados de [30], desarrollados en la sección 2.2, al caso de poblaciones no necesariamente finitas (en el caso no fuzzy). Trabajamos con espacios de búsqueda y poblaciones

que son conjuntos medibles, con funciones de ajuste integrables, y operadores estocásticos y obtenemos una conveniente versión del teorema de los esquemas en este ámbito. Los contenidos de este epígrafe han sido publicados en los proceedings de la International Conference on Intelligent Technologies in Human-Related Sciences (ITHURS'96) celebrada en León en julio de 1996 (ver [15]).

Aun siendo el resultado teórico más importante, el teorema de los esquemas sufre algunas carencias significativas. Las conclusiones que se derivan de él (en relación a los esquemas más apropiados para dirigir la búsqueda del óptimo) se refieren a los esquemas presentes en la población. Esto es, no proporciona información sobre nuevas estructuras. En particular, este teorema no permite predecir qué zonas del espacio de búsqueda va a investigar el algoritmo en los pasos siguientes. De este modo, el algoritmo fuerza la búsqueda sobre determinados subconjuntos de la población; de forma que, aunque se introduzcan nuevos esquemas (como consecuencia de mutaciones, por ejemplo) éstos difícilmente van a desplazar a esos subconjuntos. Es decir, hay ocasiones en las que los bloques constructivos parecen violar el teorema de los esquemas y el problema resulta “difícil” para el algoritmo.

Estas situaciones han dado en llamarse, al igual que las funciones que las originan, decepcionantes. De hecho, Goldberg en su libro *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, expone un ejemplo de una función que viola la hipótesis de los building blocks; presentando así el problema más sencillo que puede causar la situación de decepción: el problema decepcionante mínimo—MDP—.

Al análisis de las razones por las cuales una función puede resultar difícil de optimizar por un algoritmo genético dedicamos el capítulo 3.

Aun cuando se suele identificar dificultad con decepción, éste no es un término suficientemente uniformizado por los investigadores en este campo. Existen otras acepciones de la decepción, basadas en el concepto de competición entre esquemas introducido por Whitley. El análisis de la decepción constituye el epígrafe 3.1. En él se exponen algunos ejemplos de funciones, definidas por medio de esquemas cortos de orden bajo que, sin embargo, presentan gran dificultad para los algoritmos genéticos. Estos hechos han llevado a los investigadores a la conclusión de que algunas otras características de la función deben desempeñar un papel importante en el análisis de la dificultad de una función. Van Hove propone medir la “mayor o menor” linealidad de la función, utilizando el concepto de epistasis sugerido (de forma intuitiva)

por Rawlins. Rawlins habla de epistasis cero o mínima si cada bit es independiente de todos los demás. En el otro extremo, (si ningún subconjunto propio de genes es independiente de ningún otro) se dice que la epistasis es máxima.

En 1991 Davidor abstrae la idea fundamental del concepto genético de epistasis y lo formula en términos matemáticos. Posteriormente, Van Hove lo reescribe de forma más compacta en [26].

Desde 1995 se ha venido estudiando con detalle la epistasis de funciones de ajuste, definidas sobre espacios de búsqueda codificados binariamente. [22], [23], [25], [26], [27] y [28] son algunos de los trabajos desarrollados sobre el tema. Los aspectos más importantes de ellos se resumen en los epígrafes 3.2 y 3.3 de esta memoria. Concretamente, seguimos el esquema del análisis realizado por Suys y Verschoren en [25], en donde, haciendo uso de [27] y [28], se reinterpreta la definición de epistasis de una forma más elegante y manejable y se explotan técnicas matriciales para un estudio exhaustivo de este concepto.

Teniendo en cuenta la idea que subyace al concepto de epistasis, si  $r$  es un número real positivo, es claro que las funciones  $f$  y  $rf$  deben tener la misma epistasis, por lo que se requiere una normalización del concepto. Esto les lleva a definir la epistasis normalizada  $\varepsilon^*(f)$  de una función  $f$ . Además, un estudio algebraico detallado conduce a la completa caracterización de las funciones no negativas con epistasis normalizada extrema. En el caso de la epistasis mínima, se llega a que la función debe ser de la forma  $f = \sum_{i=0}^{l-1} g_i$  siendo  $g_i$  una función que depende únicamente del  $i$ -ésimo bit, recuperando de esta forma la idea original de Rawlins. Por otra parte, el valor máximo de la epistasis  $1 - \frac{1}{2^{l-1}}$  se alcanza cuando

$$\mathbf{f} = \mathbf{q}_i^l = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_i \\ \mathbf{e}_{2^{l-1}-i} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2^l},$$

( $0 \leq i \leq 2^{l-1} - 1$ ), donde  $\{\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_{2^{l-1}-1}\}$  es la base canónica de  $\mathbb{R}^{2^{l-1}}$ .

El capítulo 3 se completa con la inclusión de un ejemplo de función valuada positiva, que, siendo fácil de optimizar a través de un algoritmo genético, sin embargo contiene decepción. Una vez codificada en cadenas de diez bits, calculamos su epistasis normalizada y obtenemos que ésta es muy baja ( $\simeq 0.029$ ) en relación al valor máximo posible ( $\simeq 0.998$ ). Por otra parte, comprobamos que es decepcionante de orden 5; por lo que en este caso, la epistasis mide mejor la dificultad de la función de lo que lo hace la decepción.

El capítulo cuatro lo hemos estructurado en cuatro secciones. La primera de ellas comienza analizando las ventajas e inconvenientes tanto de la representación binaria de los datos, como de la no binaria.

El resultado de aplicar un algoritmo genético a la resolución de un problema depende de la elección adecuada de la función a optimizar, los operadores que van a actuar y de la codificación de la población. Aunque la representación binaria de los elementos de la población es la más utilizada, hay ocasiones en las que no es la más acertada para determinados problemas; en especial cuando se pierde información debido al empleo de esa representación. Estas y otras consideraciones, sobre el número y la calidad de los esquemas presentes en la población (en relación con la codificación efectuada), llevan a Field a concluir en [9] que no es defendible la supremacía de la representación binaria frente a la no binaria dependiendo, la idoneidad de la misma, del problema en cuestión. Field unifica el estudio de las representaciones binarias y no binarias, bajo la denominación “multary representations”. Nosotros hablaremos de representaciones  $n$ -arias para indicar que la codificación se realiza sobre alfabetos de  $n$  elementos.

En este ámbito, generalizamos el concepto de epistasis de una función  $f$ , definida sobre cadenas  $s$  de longitud  $l$ , cuyos alelos son de cardinalidad  $n$  (i.e.:  $s \in \Omega_n = \{0, 1, \dots, n-1\}^l$ ):

$$\varepsilon_{n,l}(s) = f(s) - \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{n^{l-1}} \sum_{t \in \Omega_{i,s_i}} f(t) + \frac{l-1}{n^l} \sum_{t \in \Omega_n} f(t)$$

Definimos la epistasis global de  $f$  como

$$\varepsilon_{n,l}(f) = \sqrt{\sum_{s \in \Omega_n} \varepsilon_{n,l}^2(s)}$$

y, al igual que sucedía en el caso binario, la anterior definición se puede reescribir en forma matricial como:

$$\varepsilon_{n,l}(f) = \|\mathbf{f} - \mathbf{E}_{n,l}\mathbf{f}\|$$

donde  $\mathbf{E}_{n,l} = (e_{ij})$  es la matriz cuadrada  $n^l$ -dimensional cuyos coeficientes siguen ahora la fórmula:

$$e_{ij} = \frac{1}{n^l} ((n-1)l + 1 - nd_{n,(i,j)}^l),$$

donde  $d_{n,(i,j)}$  es la distancia Hamming entre las representaciones en base  $n$  de  $i$  y  $j$ .

Continuando con un esquema de estudio paralelo al realizado en [25] en el caso binario, el siguiente paso es normalizar este concepto de epistasis, lo que constituye el segundo epígrafe del cuarto capítulo. Comienza esta sección analizando algunas propiedades algebraicas de la matriz  $\mathbf{G}_{n,l} = n^l \mathbf{E}_{n,l}$  que nos permiten demostrar la idempotencia de  $\mathbf{E}_{n,l}$ . Ello nos conduce a nuestra generalización de la definición de epistasis normalizada:

$$\varepsilon_{n,l}^*(f) = \varepsilon_{n,l}^2 \left( \frac{f}{\|f\|} \right) = \frac{{}^t f (\mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}) f}{{}^t f f} = \cos^2(f, \mathbf{F}_{n,l} f),$$

donde  $\mathbf{F}_{n,l} = \mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}$  es una proyección ortogonal. Entonces,  $0 \leq \varepsilon_{n,l}^*(f) \leq 1$ , para cualquier función  $f$ .

La expresión anterior nos permite interpretar geoméricamente la definición de epistasis normalizada como una 2-forma fundamental sobre  $\mathbb{R}^{n^l}$ .

Utilizando la descomposición de la matriz  $\mathbf{G}_{n,l}$ , en términos de  $\mathbf{G}_{n-1,l}$ , en bloques matriciales demostramos que los autovalores de  $\mathbf{E}_{n,l}$  son 0 y 1; y que si,  $V_{n,0}^l$  y  $V_{n,1}^l$  denotan los subespacios invariantes asociados a 0 y 1 respectivamente, entonces  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 0$  (respectivamente  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 1$ ) si, y sólo si,  $f \in V_{n,1}^l$  (resp.  $f \in V_{n,0}^l$ ).

El epígrafe 4.3, tal y como su título indica, lo dedicamos al estudio de los valores extremos de la epistasis normalizada.

De acuerdo con el estudio algebraico realizado en la sección anterior, y analizando algunas propiedades de las componentes de la matriz  $\mathbf{G}_{n,l}$ , obtenemos que la epistasis normalizada mínima (i.e.: nula) se tiene exactamente cuando  $f = \sum_{i=0}^{l-1} g_i$ , siendo  $g_i$  una función que depende únicamente del  $i$ -ésimo bit; recuperando de nuevo la idea original de Rawlins. Por otra parte, el valor máximo de la epistasis es ahora  $1 - \frac{1}{n^{l-1}}$ , para funciones no negativas; y se alcanza cuando

$$f = \mathbf{q}_{i_0 \dots i_{n-1}}^{n,l} = \frac{\sqrt{n}}{n} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{i_0} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{i_{n-1}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n^l},$$

donde  $\{\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_{n^{l-1}-1}\}$  es la base canónica de  $\mathbb{R}^{n^{l-1}}$ , y  $0 \leq i_0, \dots, i_{n-1} \leq n^{l-1} - 1$  es una familia de índices que verifican:

$$\text{a) } \sum_{r=0}^{n-1} i_r = \frac{n}{2}(n^{l-1} - 1),$$

$$\text{b) } d_{n-1, (i_r, i_s)}^l = l - 1 \text{ para cualquier } 0 \leq r \neq s \leq n - 1.$$

Geoméricamente, las funciones objetivo con estos vectores asociados, son aquellas funciones con  $n$  picos situados en  $n$  cadenas con distancia máxima entre ellas. En particular, si  $n = l = 2$  obtenemos los vectores  $\mathbf{q}_i^l$  del caso binario.

Esta caracterización de las funciones de ajuste con epistasis máxima constituye el último epígrafe de este capítulo.

Parte de los contenidos de este capítulo se han recogido en el artículo *Multary Epistasis* (ver [16]).

El capítulo 5 es el último capítulo de esta memoria. Lo hemos titulado “Funciones de peso” pues en él detenemos nuestro estudio en aquellas funciones cuyas imágenes sobre cadenas de longitud  $l$  (ya sean de alelos binarios o no binarios) dependen únicamente de los alelos que intervienen y no de la colocación de los mismos en la cadena. Así pues, el valor sobre una cadena depende del “peso” de cada uno de los alelos presentes.

En el caso binario, las funciones de peso se caracterizan porque sus imágenes dependen del número de unos en la cadena, no de la posición de los mismos. Así, si  $l = 3$ , tendríamos que una función  $f$  de este tipo valdría lo mismo sobre las cadenas 100, 010, 001, por ejemplo.

Estas funciones se conocen como “unitation functions”; y son interesantes ya que reducen la dimensión del problema de  $2^l$  a  $l + 1$  valores distintos. Además, una vez analizada la decepción para ellas, los resultados se pueden extender a otras funciones.

Nosotros, generalizamos este concepto a alfabetos de  $n$  elementos, y calculamos su epistasis, tanto en el caso binario como en el ternario. Por secciones el capítulo se estructura como sigue: Los dos primeros epígrafes abordan el estudio de la epistasis normalizada y sus valores extremos para alfabetos binarios. En 5.1 escribimos la epistasis de las funciones de peso como:

$$\varepsilon_i^*(f) = 1 - \frac{1}{2^i} \frac{{}^t \mathbf{h} \mathbf{B}_i \mathbf{h}}{\|\mathbf{f}\|^2}$$

donde  $\mathbf{h}$  es el vector de  $\mathbb{R}^{l+1}$  definido por  $h_k = f_m$  si el número de 1's de la representación binaria de  $m$  es  $k$ .

Por otra parte, la matriz  $\mathbf{B}_l$  tiene como coeficientes

$$b_{pq}^l = \binom{l}{p} \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right).$$

En el epígrafe 5.2 estudiamos el comportamiento de este tipo de funciones en relación con la epistasis mínima y máxima; observamos que el valor máximo de la epistasis se alcanza sobre las funciones de peso, y caracterizamos aquellas que, tomando valores no negativos, tienen epistasis mínima. En concreto, nosotros obtenemos que, una función de peso sobre un alfabeto binario tiene epistasis nula, si y sólo si, su vector asociado  $\mathbf{h}$  es de la forma

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} lh_{l-1} - (l-1)h_l \\ \vdots \\ 2h_{l-1} - h_l \\ h_{l-1} \\ h_l \end{pmatrix}.$$

El tercer epígrafe lo dedicamos al caso ternario. Ahora las funciones de peso reducen el conjunto imagen de un número total de  $3^l$  valores distintos a un máximo de  $\mathcal{CR}(3, l)$ . Entonces el vector  $\mathbf{h}$  asociado a una función  $f$  tendrá ahora  $\binom{l+2}{l}$  componentes.

Sobre alfabetos de tres elementos realizamos en 5.3 un estudio paralelo al de las secciones 5.1 y 5.2; y obtenemos que la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}$ , en términos de la cual escribimos ahora la expresión de  $\varepsilon_{3,l}^*(f)$ , tiene como coeficientes

$$(b_{3,l})_{pq} = \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right),$$

donde  $k, r, s, t \in \mathbb{N}$  verifican ciertas condiciones.

El epígrafe se completa con el análisis de los valores extremos de la epistasis normalizada, concluyendo con la caracterización de las funciones de peso con epistasis nula. Tales funciones están determinadas por

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ (1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2 \\ \vdots \\ (1-l)h_0 + lh_2 \end{pmatrix},$$

donde la componente  $p$ -ésima  $h_p$  de  $\mathbf{h}$ , con  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ , es

$$h_p = (1 - k)h_0 + (k - r)h_1 + rh_2.$$

Concluye el capítulo con el cálculo explícito de la epistasis de una función de peso que se caracteriza porque no contiene decepción de ningún orden y, sin embargo, es difícil de optimizar para un algoritmo genético. Nosotros obtenemos valores altos de su epistasis, incluso en el caso más desfavorable—cuando  $l = 2$ —.

De nuevo, al igual que sucedía en el epígrafe 3.3, estamos ante otro ejemplo en el que la epistasis mide mejor la dificultad de la función de lo que lo hace la decepción.

Las secciones 5.1 y 5.2 constituyen parte de los contenidos de [17].

## Agradecimientos

En primer lugar deseo agradecer al profesor Dr. D. Alain Verschoren, de la Universidad de R.U.C.A., la posibilidad que me ha brindado de realizar este trabajo. Ha sido para mí una fuente de estímulo intelectual y de constante aprendizaje. Sus continuos ánimos, su innato optimismo y su disponibilidad durante todo el desarrollo de este estudio han sido fundamentales para que éste haya llegado a buen fin.

La profesora Dra. Dña. Concepción Vidal Martín ha aceptado codirigir este trabajo. He podido contar siempre con su amistad y su apoyo. Mi especial reconocimiento por ello, así como por sus orientaciones en la supervisión de esta memoria.

Quiero recordar aquí a mis compañeros del Departamento de Matemáticas, por sus constantes muestras de apoyo; con especial agradecimiento al profesor D. José Luis Mosquera González y al profesor Dr. D. Manuel Antonio Presedo Quindimil por sus comentarios, sus sugerencias, y su paciente y valiosa ayuda en la edición de este texto.

Por último, debo mencionar que, este trabajo ha sido sufragado, parcialmente, por el proyecto XUGA13101-A96 de la Xunta de Galicia, y por la Universidad de La Coruña, a través del proyecto de investigación “Algoritmos Genéticos y Optimización. Aplicaciones Económicas”; cuyo investigador principal, el profesor Dr. D. Miguel Angel López López, me ha mostrado su ayuda incondicional a lo largo de estos años.

# Capítulo 1

## Algoritmos Genéticos y Optimización

### 1.1 Métodos clásicos de optimización

En estos últimos años han adquirido gran importancia los algoritmos que imitan a los mecanismos de la naturaleza para resolver problemas. Algunos de los más importantes son las redes de neuronas artificiales, los autómatas celulares y los algoritmos de evolución.

En términos generales, las redes de neuronas simulan el sistema nervioso y los autómatas celulares modelizan la cooperación entre diferentes células, mientras que los algoritmos evolutivos se inspiran en el proceso biológico de la evolución de las especies.

Los algoritmos genéticos (en adelante AG's) son un tipo particular de algoritmos de evolución cuya aplicación ha resultado provechosa en problemas muy diversos y en muy diferentes ámbitos, como son el problema de dibujar grafos dirigidos (bajo ciertos criterios estéticos), la programación de tareas (*Scheduling*) o el problema de dividir un grupo de  $n$  objetos en  $k$  categorías (*Partitioning*), por ejemplo. (Para más detalles ver [21]). Sin embargo, su utilidad principal es la optimización de funciones.

En el campo de la optimización funcional los métodos de búsqueda de la mejor solución se pueden agrupar en tres tipos: basados en el cálculo o analíticos, enumerativos y aleatorios. Dentro de los primeros podemos distinguir aquellos que, generalmente, buscan extremos resolviendo un conjunto

de ecuaciones (en general) no lineales resultantes del estudio de las raíces del gradiente de la función objetivo. (Esto es la generalización al caso multidimensional del estudio, de las raíces de la derivada, en una variable para obtener los puntos críticos de una función). Para funciones derivables, los posibles extremos se encuentran entre los puntos donde las pendientes de las tangentes en todas direcciones son cero. Por otra parte, el método directo más simple se basa en la búsqueda de la solución óptima moviéndose siempre en la dirección en la que el cambio de la función es más rápido. Esta técnica, que se conoce como “*hill climbing*”, es una sencilla regla de búsqueda que depende de la evaluación en ciertos puntos de la función a optimizar, pero es la misma para todas las funciones. Sin embargo, a la sencillez del método hay que contraponer dos problemas destacables: el primero de ellos es la facilidad con la que este algoritmo puede caer atrapado en un extremo local; el segundo es el mal comportamiento del método en zonas constantes de la función (las llamadas “mesetas”).

Para mitigar estos problemas, la mayoría de las técnicas de optimización hacen uso de propiedades explícitas de la función con la que trabajan. Por ejemplo, la “*programación lineal*” exige que tanto la función como las condiciones adicionales sean lineales. A pesar de esta limitación la programación lineal posee un amplio campo de aplicación. Para otras técnicas, como la de los *multiplicadores de Lagrange*, además de sufrir alguna restricción el dominio de las funciones, éstas deben ser al menos derivables. Además, los óptimos hallados son locales.

Los métodos analíticos han sido estudiados extensamente. A pesar de ello, unos por su carácter local, otros por su dependencia de ciertas derivadas, u otras limitaciones, no siempre son aplicables en la práctica. Muchas situaciones, en problemas concretos, poco o nada tienen que ver con la noción de derivada y la “suavidad” que ella implica. Una sencilla muestra la tenemos en el gráfico de un electrocardiograma, por ejemplo. Estas técnicas son por tanto insuficientemente robustas en ciertos dominios. Por otra parte, existen muy pocas técnicas para funciones no continuas. Esto nos lleva a considerar otros métodos como el del *enrejado*, probablemente el más sencillo para funciones con dominio de definición  $\mathbb{R}^n$ . Se basa esta técnica en la construcción de una red rectangular evaluando la función a optimizar en cada una de las intersecciones de la red. Obviamente, es válido desde el punto de vista práctico, sólo para problemas de dimensiones pequeñas. (Con vistas a mejorar el método, se podría utilizar la información obtenida en eva-

luaciones previas, para dirigir la búsqueda). Éste es un ejemplo de método de tipo enumerativo.

Este tipo de técnicas se basan en una idea simple y directa: en un espacio de búsqueda finito o infinito (pero discretizado) el algoritmo actúa evaluando la función en cada punto del espacio, un punto cada vez. Aunque la simplicidad de este tipo de métodos es atractiva (la enumeración es una clase de búsqueda “muy humana” cuando el número de posibilidades es pequeño), tales técnicas deben desecharse por su falta de eficiencia. Muchos espacios de búsqueda son demasiado grandes para efectuar una búsqueda punto a punto con costes aceptables desde el punto de vista práctico.

En cuanto a los algoritmos de búsqueda aleatoria, éstos han logrado incrementar su popularidad como resultado del reconocimiento de los defectos de los métodos analíticos y enumerativos. Sin embargo, ellos también pecan de falta de eficiencia.

Otro método ampliamente difundido es el método de *Simulated annealing* (SA). Generalmente se expone como un algoritmo de minimización (la adaptación a la maximización es trivial).

Para aplicar un SA se determina un entorno dentro del espacio de búsqueda, y se escoge un punto  $\alpha$  en ese entorno, de forma aleatoria. A continuación se elige, aleatoriamente también, un punto  $\beta$  en ese entorno y se evalúa la función objetivo  $f$  en ambos puntos. Si  $f(\beta) < f(\alpha)$ , entonces  $\beta$  reemplaza a  $\alpha$ . Si, por el contrario,  $\beta$  es peor que  $\alpha$  en nuestro camino hacia el mínimo, entonces el nuevo elemento  $\beta$  se acepta con una probabilidad  $\exp(-(f(\beta) - f(\alpha))/p)$ , donde  $p$  es una variable elegida por el usuario. La selección de nuevos elementos se repite hasta que el cambio en las evaluaciones de  $f$  no es significativo para los requisitos del problema. En cada paso, el valor de la variable  $p$  se reduce, y el proceso se repite con el nuevo valor de  $p$ . El algoritmo termina cuando  $p$  es muy “pequeña”.

Esta técnica, aunque recuerda a la búsqueda directa efectuada por el método *hill climbing*, se diferencia de aquel en que utiliza cierta aleatoriedad en la determinación de la dirección a explorar, para evitar caer atrapado en un óptimo local, además de hacer uso de las evaluaciones previas. Como veremos más adelante, los AG's combinan estas ideas para dirigir la búsqueda del óptimo.

La razón del creciente interés por los AG's es que éstos permiten resolver problemas muy complejos, de grandes dimensiones, de forma rápida y

eficiente. Para esa clase de problemas, tales como el conocido *problema del viajante* o TSP (*Traveling Salesman Problem*), no existen soluciones tradicionales. La única forma en que habían sido abordados, hasta ahora, es por medios heurísticos. Pero éstos no proporcionan ninguna información sobre la calidad de la solución obtenida, es decir, no indican cuán buena es esa solución en relación con todas las posibles. Además, como ya se ha comentado, cuando las dimensiones del problema aumentan, no son operativos desde el punto de vista práctico.

Como veremos más adelante, un algoritmo genético es un método de búsqueda *global y robusto*. Global porque la búsqueda se realiza sobre el conjunto de todas las posibles soluciones, y robusto porque cambios pequeños en el problema muy raramente causan la divergencia del algoritmo.

## 1.2 Evolución y Algoritmos Genéticos

### Evolución

Durante el siglo pasado los científicos se plantearon el problema de nuestra existencia en relación con el origen de la vida. En 1858 Charles Darwin y Alfred Wallace, de forma independiente, plantearon sus ideas sobre la selección natural de las especies; una explicación científica, simple y elegante de la complejidad y variedad de la naturaleza.

En la actualidad los investigadores en Inteligencia Artificial tratan el mismo problema pero a la inversa. Esto es, intentan responder a la pregunta ¿cómo encontrar soluciones a problemas complejos?. Una dirección a seguir es tomar prestadas las ideas de la selección natural y usarlas para resolver estos problemas.

Darwin observó que, usualmente, los organismos generan muchos descendientes, pero sus poblaciones, de las que cabría esperar que crecieran exponencialmente, tienden a estabilizarse a un tamaño constante. Teniendo en cuenta que los organismos de cualquier población presentan características individuales, él concluyó que las “fuerzas” que actúan en la población, enfermedades, depredación, etc, determinan la supervivencia de los especímenes mejor relacionados con su entorno. Como tales supervivientes se pueden reproducir, las características que les ayudaron a sobrevivir pasarían a sus descendientes. Recíprocamente, sus defectos no pasarán y, al cabo del tiempo

desaparecerán de la especie. En esencia, la evolución por la selección natural de las especies se basa en la acumulación de pequeños cambios positivos en la población.

Descubrimientos posteriores en Genética han proporcionado una explicación sobre la forma en la que las características diferenciadoras de los individuos pasan de padres a hijos. Los organismos surgen inicialmente de una célula que contiene el ADN (*ácido desoxirribonucleico*), portador de las "instrucciones" necesarias para construir el organismo completo. El ácido desoxirribonucleico es, sin ninguna duda, la molécula más importante de la vida. En el ADN se encuentra la información que determina la estructura de las proteínas, así como las instrucciones para el crecimiento, desarrollo y diferenciación celular [8]. En las células el ADN se encuentra en forma de bastones enrollados denominados *chromosomas*.

El ADN [18] es una larga cadena de moléculas llamadas *nucleótidos* y sus "tiras" contienen la información necesaria para construir las *proteínas*. Hay una sencilla correspondencia entre una cadena de ADN y la proteína que produce. Las proteínas forman la mayor parte de la sustancia física del organismo y controlan muchos de los procesos químicos internos; así que el ADN indirectamente, (a través de las proteínas), codifica las características del organismo resultante. En ocasiones la relación es simple. El color de ojos, por ejemplo, está determinado por una única proteína; otras características, tales como el peso, son mucho más complejas.

Aunque el entorno en el que vive un organismo juega un papel importante en cómo éste se desarrolla, hay una relación entre su material genético (genotipo) y sus características físicas (fenotipo). La sección de ADN que produce una característica se llama *gen* y el lugar que ocupa un gen en un cromosoma se denomina *locus genético*. Los diferentes nucleótidos que se incluyen en esa sección de ADN, esto es, las distintas formas del gen que ocupa ese locus, se conocen como *alelos*. Pongamos un ejemplo, hay un gen para el color de ojos con alelos azul y marrón.

Las características de los individuos pasan de padres a hijos sencillamente porque el ADN pasa de padres a hijos. Esto conlleva la importante consecuencia de que las características adquiridas en vida, tales como las cicatrices (por accidente, por ejemplo), no serán heredadas por los descendientes.

Por supuesto, es necesario disponer de un mecanismo por el cual surjan nuevas características en un individuo. El método más sencillo es la *muta-*

ción, por el cual los nucleótidos cambian (unas veces se añaden otros, y en ocasiones se eliminan). La mutación puede ser consecuencia por ejemplo de un error en la copia del ADN al formarse una nueva célula, o por efecto del ambiente en el que se desarrolla el organismo (las radiaciones químicas, por ejemplo, pueden producir mutaciones).

La mutación puede ocurrir en todos los organismos pero en aquellos que se reproducen sexualmente podemos considerar además el proceso por el que, tomando ADN de dos individuos y seleccionando partes de cada uno de ellos para formar un nuevo ADN, las características de los organismos se mezclan. De esta forma, características diferentes, buenas, en dos especímenes distintos pueden reunirse en un único individuo vía la reproducción sexual. Desde luego, el recíproco también es cierto: malas combinaciones pueden sumarse, y buenas combinaciones romperse. Sin embargo, cuando son las buenas características las que concurren en un individuo entonces proporcionan mayor facilidad para la supervivencia y la continuación de las mismas en las generaciones siguientes.

La anterior descripción no pretende ser más que una rápida, y en consecuencia muy simplificada, introducción al mundo de la Genética. En realidad, la vida es mucho más complicada. Sin embargo, el fin primordial de esta somera exposición es introducir los elementos genéticos de la selección natural de las especies que sean importantes para entender los algoritmos de evolución. El proceso de la evolución natural es una fuerte motivación para los algoritmos genéticos y evolutivos, pero no puede usarse como justificación de su capacidad para resolver problemas con efectividad. Para que estos algoritmos se puedan considerar alternativa seria de otros métodos de búsqueda, tales como el *Simulated annealing* por ejemplo, es imprescindible que se sustenten en una teoría rigurosa. Podemos, pues, considerar la Genética y el proceso de evolución de las especies como una fuente de ideas que tomar prestadas y poder desarrollar en el campo de los algoritmos genéticos.

## Algoritmos Genéticos

Los algoritmos genéticos simulan procesos evolutivos. Como consecuencia de la descripción anterior parece importante destacar algunos hechos intrínsecos a la evolución:

- \* Hay una población de organismos determinados por un código genético.
- \* Algunos de esos organismos son “mejores” que otros, en el sentido de que se adaptan mejor al medio en el que se desarrollan.

\* La información genética transmitida a los hijos está formada por partes de la información genética de los padres, no exenta a posibles, aunque raras, mutaciones.

En un algoritmo genético, el entorno es el problema a resolver y los organismos las posibles soluciones al mismo. Para poder aplicar un algoritmo genético a un problema deben determinarse:

- a) una codificación genética para el problema, y
- b) una *función de ajuste* que asigne un valor a cada individuo de acuerdo con su comportamiento en su medio; es decir, de acuerdo con su idoneidad.

Los AG's tradicionales manejan cadenas de símbolos de longitud fija llamadas *cromosomas*. Asociado a cada una de sus posiciones en la cadena hay un *gen*. Un gen es, simplemente, un conjunto de símbolos, cada uno de los cuales puede aparecer en una posición particular de la cadena. Esos símbolos que constituyen un gen se llaman *alelos*.

La asignación de un código genético a un problema está determinado por la longitud de las cadenas y los genes que las constituyen (lo que se conoce como problema de representación) y por la correspondencia entre las cadenas y las posibles soluciones del problema.

Por lo que se refiere a los alelos estos pueden ser representados por cualquier símbolo, sin embargo por conveniencia práctica se suelen utilizar, para representarlos, los números naturales. El número de símbolos que pueden representar a un gen se llama *cardinalidad del gen*.

En cuanto a la dinámica de la actuación de los AG's veremos que son una metáfora del proceso de selección natural de las especies: una población de individuos con mejores cualidades para la supervivencia crecen y se reproducen.

El algoritmo genético opera a partir de una población de tamaño determinado, inicialmente constituida por cadenas generadas aleatoriamente. Las cadenas se evalúan y se produce el proceso de selección. La selección escoge cadenas de la población, para su recombinación, con una probabilidad proporcional a su idoneidad. La recombinación que actúa sobre los pares de cadenas seleccionados se compone básicamente de dos operaciones el *cruce* y la *mutación* y los descendientes creados se incorporan a la nueva población. El ciclo de producción de una nueva población mediante la selección, el cruce y la mutación constituye una *generación*.

El cruce es la parte de la recombinación en la que los alelos de los padres se mezclan. La forma tradicional de cruce es aquella en la que se selecciona un punto entre dos posiciones determinadas en las cadenas, se rompen las cadenas padres y se intercambian. Este proceso se aplica con una cierta probabilidad fija llamada *probabilidad de cruce*. Otro parámetro del funcionamiento del AG es la *probabilidad de mutación*, bajo la que los alelos toman diferentes valores. Esta probabilidad suele tener un valor generalmente pequeño (0.01 o 0.001) manteniendo la idea intuitiva de que una mutación no es un hecho corriente.

La siguiente figura muestra el proceso de cruce y mutación actuando sobre las cadenas “padres”. Se ha escogido como lugar de cruce el situado entre el tercero y cuarto bit; la mutación se efectúa sobre los bits de las posiciones segunda y sexta:

<i>Padres</i>	<i>Cruce</i>	<i>Mutación</i>	<i>Hijos</i>
0000000	000 1111	00 <u>0</u> 11 <u>1</u> 1	0101101
1111111	111 0000	1 <u>1</u> 10 <u>0</u> 0	1010010

El algoritmo genético termina cuando se alcanza una cierta condición de parada. Podría actuar durante un número fijo de generaciones o bien hasta obtener una cadena con una idoneidad superior a un nivel de control prefijado.

Por otra parte, hay una gran variedad de decisiones a tomar antes de implementar y ejecutar un AG. En primer lugar está el problema, ya mencionado, de encontrar una buena representación para los datos. Este es un aspecto fundamental en la aplicación de los AG's. Una representación inadecuada de los datos repercutirá en una disminución de la eficacia o eficiencia del algoritmo. Aunque la codificación binaria es la de uso más extendido, cadenas sobre otros alfabetos, además de estructuras tales como grafos o árboles, se han utilizado también con éxito en algunas aplicaciones.

En segundo lugar, existen distintos métodos de selección que poder elegir. En [4] los autores comparan analíticamente el comportamiento de la reproducción proporcionada, la selección de ranking, la selección “tournament” y la selección “steady-state”.

Después de la selección llega la recombinación. La primera cuestión es qué tipo de operador cruce utilizar. Aunque el cruce es un operador inspirado en un proceso biológico tiene, sin embargo, algunos inconvenientes.

Como muestra de ello tomemos el conocido *problema del viajante*, que conceptualmente es muy simple: un viajante debe visitar todas y cada una de las ciudades en su territorio exactamente una vez y retornar al punto de partida. Dado el coste del viaje entre ellas, se plantea cuál debe ser el itinerario de menor coste. Particularicemos, por ejemplo, al caso de nueve ciudades a recorrer. Si representamos cada una de ellas por un número del uno al nueve, una posible solución la constituirá un vector de nueve componentes. El vector (2,4,8,9,3,1,7,6,5) representa entonces el itinerario que partiendo de la ciudad número 2 llega a la número 5 atravesando las siete restantes, para volver a continuación a la ciudad de partida, la número 2. Esta representación no soporta al operador de cruce clásico: basta tomar dos vectores (2,3,7,9,8,1,5,4,6) y (5,7,6,9,1,2,4,3,8) y señalar como punto de corte “entre la quinta y sexta componente”. El resultado serían los vectores (2,3,7,9,8,2,4,3,8) y (5,7,6,9,1,2,5,4,6) que no cumplen los requisitos del problema (son descendientes “ilegales”). Esto se subsana introduciendo una variante del operador cruce, como el operador PMX (*partially mapped crossover*), propuesto por Goldberg y Lingle, que construye un descendiente eligiendo una secuencia de un recorrido completo, de un padre y preserva el orden y la posición del número máximo posible de ciudades del otro padre. (Para un estudio más detallado ver [21]).

En el siguiente capítulo volveremos sobre el operador cruce y algunas de sus variantes. Bástenos por ahora analizar otro argumento que diferencia los dos operadores de la recombinación. Existe una “asimetría” entre la mutación y el cruce: el efecto de la mutación depende de la longitud del cromosoma y el del cruce no. Por ejemplo, si la probabilidad de mutación es  $p_m=0.01$ , y la longitud de un cromosoma es 100, el número esperado de bits mutados en ese cromosoma es 1. En cambio, si la longitud del cromosoma fuese 1000, el número esperado de mutaciones sería 10. Sin embargo, en ambos casos, el operador cruce clásico combinará dos cadenas de padres cruzando los alelos a partir de un punto de cruce dado, sin tener en cuenta la longitud de las cadenas.

Como ya se ha apuntado, el proceso evolutivo no es una explicación de porqué funcionan los algoritmos genéticos, y en consecuencia es necesario añadir rigor a la discusión de su actuación. En cierto sentido, el procedimiento general de funcionamiento de un AG no está interesado en las cadenas como entes en sí mismos, ya que las similitudes entre cromosomas de idoneidad alta pueden guiar la búsqueda de la solución mejor. Cabe pues,

preguntarse cómo se entiende esa “similitud” entre cadenas. La respuesta a esta cuestión la proporciona el concepto de *esquema* que se abordará en el capítulo siguiente, y sobre el que se asienta la base teórica del funcionamiento de los algoritmos genéticos.

## Capítulo 2

# Sobre el Teorema de los Esquemas

### 2.1 ¿Por qué funcionan los algoritmos genéticos?

Con vistas a proporcionar una descripción más precisa del funcionamiento de los algoritmos genéticos, introducimos en primer lugar alguna terminología y notación básicas.

Comencemos por denotar por  $D$  al conjunto de todos los posibles organismos, esto es, el espacio total en el cual se efectuará la búsqueda. Los elementos de  $D$  tienen una codificación genética, representada por una aplicación inyectiva  $C:D \rightarrow A^l$ . Por simplicidad, en este epígrafe tomaremos como alfabeto  $A = \{0, 1\}$ ; y también por simplicidad supondremos que  $|D| = 2^l$ . Esta codificación la realiza el usuario y es de vital importancia para el funcionamiento del algoritmo. Por razones obvias los elementos del alfabeto se denominan bits y los cromosomas cadenas binarias. A lo largo de todo el texto los bits se numerarán de derecha a izquierda y de 0 a  $l-1$ . El conjunto de índices  $\{0, \dots, l-1\}$  se representará por  $I$ . Una cadena  $s \in A^l$  se representará por  $s = s_{l-1} \dots s_1 s_0$ . Mantendremos este convenio sobre todas las cadenas, incluso en casos más generales, cuando el *alfabeto* considerado no sea binario (como sucederá en los capítulos 4 y 5 de esta memoria). Por esta razón,  $A$  denotará el alfabeto, sea binario o no, utilizado en la codificación del espacio de búsqueda. Por analogía con sus homónimos genéticos, los elementos de  $A$

se llaman *alelos*. En tanto no se especifique lo contrario  $A^l = \Omega$ .

Sea  $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  la función que evaluará los elementos de la población (en el contexto de la evolución genética representa al entorno y en el campo de la optimización  $f$  será la función objetivo, es decir, la función a optimizar).  $f$  se conoce como *función de ajuste* o función de *idoneidad*, que mide la adaptación, (“bondad”, o adecuación) de los cromosomas a la población.

Para un mejor conocimiento sobre la forma en que actúan los AG introducimos ahora el concepto de *esquema*. Los esquemas son interesantes porque son exactamente los subconjuntos de  $\Omega$  que se obtienen cruzando los elementos de subconjuntos arbitrarios de  $\Omega$  entre sí (ver [26], [33]).

Un *esquema* describe a un subconjunto de cadenas con similitudes en ciertas posiciones. Holland [14] sugiere esta definición al observar que individuos con cierto “parecido” (que luego precisaremos) persistirán de generación en generación.

Consideremos el símbolo “#” para indicar que una posición dada de una cadena puede estar determinada, indistintamente, por los alelos 0 o 1. Entonces, añadiendo el carácter # al alfabeto binario, en el nuevo alfabeto  $A = \{0, 1, \#\}$  se define un esquema como una cadena de elementos de  $A$ . Más precisamente, un *esquema* de longitud  $l$  es una cadena de longitud  $l$  de 1's, 0's y #'s. Esto determina un único subconjunto de  $\{0, 1\}^l$ :

$$S(\sigma) = \{s \in \{0, 1\}^l; \text{si } \sigma_i \neq \# \text{ entonces } s_i = \sigma_i\}$$

Por ejemplo,  $\sigma = 00\#\#\#11$  se corresponde con

$$S(\sigma) = \{000011, 000111, 001011, 001111\}$$

Obviamente habrá  $3^l$  esquemas diferentes de longitud  $l$ . En general para alfabetos de  $n$  elementos habrá  $(n+1)^l$  esquemas. Por otra parte, en una población de  $N$  miembros hay a lo sumo  $2^l \cdot N$  esquemas, puesto que cada cadena pertenece a  $2^l$  esquemas. Esto da una idea de la magnitud de información que procesa un algoritmo genético. Sin embargo, los esquemas no son todos iguales; algunos son más específicos que otros, y debemos hacer una distinción entre ellos. Consideremos por ejemplo los esquemas  $01011\#1$  y  $1\#\#\#\#0$ . El primero tiene más definida la “similitud” entre las cadenas que lo representan que el segundo. La cuantificación de estas ideas se realiza considerando los conceptos de *orden* y *longitud de definición* de un esquema.

El *orden* de un esquema  $\sigma$ ,  $o(\sigma)$ , es el número de alelos definidos en él (esto es, el número de caracteres que no son #). Por ejemplo,  $o(1####0)=2$ . La *longitud de definición*,  $\delta(\sigma)$ , es la distancia entre el primero y el último de los alelos especificados. ( $\delta(1####0)=6$ ).

Estos valores son útiles para determinar la probabilidad con la que un esquema sobrevive a la recombinación. En concreto, el orden informa sobre la probabilidad de que el esquema sea destruido por la mutación (mayor orden significa más facilidad de sufrir mutación en uno de los alelos fijos). La longitud de definición, por el contrario, proporciona información sobre la posibilidad de destrucción del esquema por medio de un cruce: a mayor longitud de un esquema mayor probabilidad de destrucción. Pongamos un ejemplo: consideremos los esquemas  $\sigma_1 = ###01##$  y  $\sigma_2 = #0####1$ . Mientras para el primero ( $\delta(\sigma_1) = 1$ ) sólo es posible su destrucción mediante un cruce si éste se efectúa entre las posiciones cuarta y quinta del cromosoma, en el caso de  $\sigma_2$  basta escoger como lugar de cruce cualquier posición posterior a la segunda ( $\delta(\sigma_2) = 5$ ).

Sin embargo, el efecto del cruce es complicado. En algunos casos particulares, podría permanecer la estructura de un esquema, incluso después de sufrir un cruce; bastaría que el esquema existiese en ambas cadenas padres, por ejemplo.

Obviamente, la probabilidad de supervivencia de un esquema depende de la probabilidades de actuación de los operadores de mutación y cruce, pero de lo anteriormente expuesto, parece que, a pesar de que la recombinación destruye las cadenas, los esquemas cortos y de bajo orden permanecerán. De esta forma, si un esquema contiene "buenas" cadenas, i.e. cadenas con idoneidad alta (por encima de la media), esas cadenas serán seleccionadas con mayor frecuencia y generarán una nueva población con más cadenas que sigan la estructura del esquema. Así, es probable que el esquema se mezcle con otros buenos esquemas para formar individuos mejores.

Sin embargo, este argumento podría fallar. Imaginemos un esquema  $\sigma$  que tiende a aparecer en cadenas pobres. Estas cadenas no serán seleccionadas con demasiada frecuencia y la influencia del esquema en la población decrecerá hasta desaparecer. Pero, podría suceder que ese esquema  $\sigma$  combinado con otro  $\sigma'$  proporcionase buenos individuos. El esquema  $\sigma$  no sería tan malo, después de todo, pero el AG lo ha hecho desaparecer. Si los esquemas son cortos y de bajo orden es improbable que situaciones como la

expuesta sucedan. Por el contrario, para esquemas más largos o de orden mayor es menos probable que se combinen y más probable que se rompan por el proceso de recombinación.

Examinemos con un poco más de detalle el efecto de la reproducción en el número esperado de esquemas en la población. Supongamos que en la generación  $t$  hay  $m$  ejemplares de un esquema particular que forman parte de la población  $P(t)$ . (En realidad  $m=m(\sigma, t)$  pues es posible que en diferentes generaciones haya cantidades diferentes de cadenas que siguen el esquema  $\sigma$ ). Durante la reproducción, un cromosoma es copiado cero, una o más veces de acuerdo con su idoneidad; o más exactamente, es seleccionado con una probabilidad  $\frac{f(s)}{\sum_{s \in P(t)} f(s)}$ . Si se parte de una población de tamaño  $n$ , entonces el número esperado de representantes del esquema  $\sigma$  en el paso  $t+1$  será:

$$\mathbf{E}(m(\sigma, t+1)) = m(\sigma, t) \cdot n \cdot \frac{f(\sigma)}{\sum_{s \in P(t)} f(s)},$$

donde  $\mathbf{E}$  denota el operador esperanza y  $f(\sigma)$  es la idoneidad media de las cadenas del esquema  $\sigma$  que lo representan en la generación  $t$ -ésima, (i.e.: mide la "bondad" de esos elementos del esquema). Si  $\bar{f}$  denota el ajuste medio de la población completa, es decir,  $\bar{f} = \frac{1}{n} \sum_{s \in P(t)} f(s)$ , entonces claramente:

$$\mathbf{E}(m(\sigma, t+1)) = m(\sigma, t) \cdot \frac{f(\sigma)}{\bar{f}}$$

lo que significa que esquemas presentes en la población y con idoneidad superior a la media de la población aumentarán su número de representantes en la generación siguiente, mientras por el contrario, esquemas con "adecuación" por debajo de la media perderán representantes.

Ahora bien, copiando estructuras ya existentes en la población no se exploran nuevas regiones del espacio de búsqueda. Es necesario pues introducir el efecto de los operadores cruce y mutación.

Dado que un esquema sobrevive cuando la posición donde se ha de realizar el cruce no está entre el primero y el último alelo fijos, la probabilidad de que no sobreviva a un cruce no es otra que  $\frac{\delta(\sigma)}{l-1}$ . Si el cruce actúa de

manera aleatoria con una probabilidad  $p_c$ , entonces una cota inferior para la probabilidad de supervivencia del esquema es:

$$p \geq 1 - p_c \cdot \frac{\delta(\sigma)}{l-1};$$

el efecto combinado de la selección y el cruce transforman la ecuación de crecimiento en

$$\mathbf{E}(m(\sigma, t+1)) \geq m(\sigma, t) \cdot \frac{f(\sigma)}{\bar{f}} \cdot \left[ 1 - p_c \cdot \frac{\delta(\sigma)}{l-1} \right].$$

De nuevo el significado es claro: el número de representantes del esquema aumenta o disminuye dependiendo de dos factores, la relación entre la bondad del esquema y la bondad media de la población, y la longitud de definición del esquema.

El último operador a considerar es la mutación. Para que un esquema sobreviva a la mutación todos sus alelos fijos deben permanecer en la estructura mutada. Si  $p_m$  denota la probabilidad de alterar aleatoriamente una posición cualquiera, entonces la probabilidad de supervivencia del esquema será  $(1 - p_m)^{o(\sigma)}$ . Como en general  $p_m \ll 1$ , esa probabilidad se puede aproximar por la expresión  $1 - o(\sigma) \cdot p_m$ , y en consecuencia:

$$\mathbf{E}(m(\sigma, t+1)) \geq m(\sigma, t) \cdot \frac{f(\sigma)}{\bar{f}} \cdot \left[ 1 - p_c \cdot \frac{\delta(\sigma)}{l-1} \right] \cdot [1 - o(\sigma) \cdot p_m].$$

Despreciando los términos con valores muy pequeños se obtiene la expresión del *Teorema Fundamental de los Algoritmos Genéticos* o *Teorema de los Esquemas*:

$$\mathbf{E}(m(\sigma, t+1)) \geq m(\sigma, t) \cdot \frac{f(\sigma)}{\bar{f}} \cdot \left[ 1 - p_c \cdot \frac{\delta(\sigma)}{l-1} - o(\sigma) \cdot p_m \right],$$

cuya interpretación se puede resumir como sigue: Esquemas cortos, de orden bajo y con idoneidad por encima de la media, incrementan el número de representantes en las generaciones sucesivas de un algoritmo genético.

Como parecen jugar un papel tan importante, a este tipo de esquemas se les ha dado un nombre especial los "*building blocks*". Nombre que a su

vez identifica la llamada “*Hipótesis de los Building Blocks*”: los algoritmos genéticos alcanzan un comportamiento óptimo a través de la yuxtaposición de esquemas cortos, de orden bajo y con idoneidad alta.

El Teorema de los Esquemas es una explicación intuitiva de cómo un algoritmo genético procesa los esquemas presentes en la población. Sin embargo, es incapaz de predecir las áreas de búsqueda que el algoritmo investigará después. Nótese que la media  $f(\sigma)$  utilizada en el Teorema de los Esquemas, es la media del esquema  $\sigma$  sobre la población de la generación  $t$ -ésima; por tanto, no proporciona ninguna referencia a nuevos esquemas introducidos por medio de cruces o mutaciones. Es decir, no informa sobre qué nuevos esquemas (no presentes previamente en la población) seleccionará el algoritmo en las generaciones venideras.

En este sentido, Grefenstette, en [13], es muy crítico con las conclusiones poco precisas que, del teorema de los esquemas, se incluyen en numerosos artículos; indicando que pueden conducir a interpretaciones erróneas si éstas se toman como base del análisis de la teoría operacional de los algoritmos genéticos. Concretamente, Grefenstette afirma:

*“... el teorema del esquema describe el crecimiento esperado de un hiperplano, para una única generación, basado en el ajuste medio de los representantes del hiperplano presentes en la población. Después de una serie de generaciones, la adecuación media observada de un hiperplano no refleja, necesariamente, el ajuste medio estático del hiperplano”.*

Aquí, el ajuste medio estático significa la idoneidad media calculada sobre todas las cadenas que siguen el esquema; y es por tanto independiente del número de representantes que el esquema pueda tener en la población en cualquier momento.

En particular, esta limitación, del teorema de los esquemas, se pone de manifiesto, entre otros casos, cuando se produce una *convergencia colateral*; fenómeno éste que se refiere al caso en el que la población converge a diferentes ritmos, a dos hiperplanos que poseen representantes comunes. En estas situaciones, no es posible estimar el ajuste medio estático de los esquemas utilizando la información presente en la población actual.

## 2.2 Un Teorema de los Esquemas Fuzzy

La noción de esquema, introducida en el epígrafe anterior, es la de los esquemas clásicos, definidos originalmente por Holland (ver [14]) añadiendo  $\#$  al alfabeto binario. Como se indica en [1] una cuestión abierta durante bastante tiempo ha sido saber si otros conjuntos, además de los esquemas de Holland, bajo operadores apropiados se comportarían de acuerdo con el teorema del esquema. En [1], Battle y Vose responden a esta cuestión afirmativamente mediante transformaciones matriciales e isomorfismos. Los resultados de [1] se pueden considerar como un ejemplo explícito de una construcción más general debida a Vose [31] que generalizó la noción de esquema a “*predicados arbitrarios*”.

El punto de vista adoptado por Vose en [31] es que un esquema  $\sigma$  se puede interpretar como un predicado en el sentido de que si  $s \in \Omega$ , diremos que  $\sigma(s) = V$  (verdad) si, y sólo si,  $s$  y  $\sigma$  coinciden en todas las posiciones distintas de  $\#$  en  $\sigma$ . (Se dice que  $s$  representa a  $\sigma$ ). Esto equivale a identificar  $\sigma$  con el subconjunto de  $\Omega$  de todas las cadenas  $s \in A^l$  tales que  $\sigma(s) = V$ . La generalización propuesta en [31] es considerar que los esquemas puedan ser predicados arbitrarios o subconjuntos de  $\Omega$ . Además Vose prueba el teorema del esquema en este caso.

En [30] los autores avanzan un paso más. Aunque se ha visto que el uso de predicados arbitrarios como esquemas es una herramienta adecuada de trabajo, las aplicaciones prácticas requieren una situación un poco más general. En realidad, la función de ajuste sobre  $\Omega = A^l$ , generalmente, asocia a las cadenas una medida, obtenida experimentalmente, con una cierta cantidad de vaguedad y errores de medida. Esto implica que los valores extremos de  $f$  podrían no ser determinados correctamente, sino sólo aproximados. Esto tiene especial importancia si se desea indicar las razones estructurales por las cuales el conjunto  $H$  de soluciones es óptimo. De hecho, como mucho, sólo es posible conjeturar o aproximar la probabilidad de que un cromosoma pretenezca a  $H$ , i.e., podría considerarse  $H$  como un “*subconjunto difuso*” de  $\Omega$ .

Verschoren y Van Hove en [30] desarrollan este enfoque introduciendo el uso de estos esquemas difusos. Como indicación de su utilidad, los autores demuestran que este tipo de esquemas satisfacen una apropiada versión del teorema de los esquemas.

Para ello en primer lugar consideran un universo (finito o infinito, aunque en la práctica será generalmente  $\Omega = \{0,1\}^l$ ).

Un esquema difuso  $H$  se define como un subconjunto difuso de  $\Omega$ , i.e., una aplicación  $H: \Omega \rightarrow [0,1]$  (ver [31]). (Si  $H$  toma sólo los valores 0 y 1 nos encontramos en el caso clásico). En realidad el valor de  $H$  sobre una cadena indica el “grado” de pertenencia de la cadena a  $H$ .

En este contexto, una población  $P$  será un *multiconjunto* finito de  $\Omega$  (los elementos pueden estar repetidos). Entonces  $|H|_P = \sum_{p \in P} H(p)$  cuenta los elementos de  $P$  que pertenecen a  $H$ , incluyendo sus multiplicidades. Para una función de ajuste  $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ , y para cualquier esquema difuso  $H$  de  $\Omega$ , se define ([30])

$$f_P(H) = \frac{1}{|H|_P} \sum_{p \in P} H(p) \cdot f(p)$$

(siendo  $f_P(H) = 0$ , si  $|H|_P = 0$ ). En particular si  $H = \Omega$  entonces  $f_P(H) = f_P(\Omega)$  denota la idoneidad media de la población  $P$ .

Considerando una población modificable  $A(t)$ , donde  $t$  se puede tomar como un parámetro discreto de tiempo, los autores denotan por  $m(H, t)$  al número de elementos de la población que “pertenecen” a  $H$  en el instante  $t$ , y definen la idoneidad de  $H$  como:

$$f(H, t) = \frac{1}{m(H, t)} \cdot \sum_{p \in A(t)} H(p) \cdot f(p) = f_{A(t)}(H)$$

(en particular  $f(\Omega, t) = \frac{1}{m(\Omega, t)} \sum_{p \in A(t)} f(p)$ ).

El siguiente paso es suponer que la población  $A(t) \subseteq \Omega$  se transforma por la aplicación de algunos operadores genéticos. En particular, ellos se restringen a la selección y el cruce.

Dado que el operador selección escoge cadenas de la población  $A(t)$  con una probabilidad proporcional a su idoneidad, se sigue que, para cualquier esquema fuzzy  $H$ :

$$E(m(H, t+1)) = \sum_{p \in A(t)} H(p) \cdot \frac{f(p)}{f(\Omega, t)} = \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} \cdot m(H, t)$$

donde  $\mathbf{E}$  denota, de nuevo, el operador esperanza.

Para poder introducir el operador cruce, dada una cadena  $p=p_1\dots p_l$ , se selecciona a continuación una segunda cadena  $q=q_1\dots q_l$  y una posición de cruce aleatoria  $1 < z \leq l$ . Como la probabilidad  $\pi_{p,q}$  de selección de un cierto par  $(p, q)$  de cadenas de  $A(t)$ , es

$$\pi_{p,q} = \frac{f(p)}{m(\Omega, t) \cdot f(\Omega, t)} \cdot \frac{f(q)}{m(\Omega, t) \cdot f(\Omega, t)},$$

se generan entonces dos nuevas cadenas  $p_1\dots p_{z-1}q_z\dots q_l$  y  $q_1\dots q_{z-1}p_z\dots p_l$  una de las cuales, denotada por  $p \otimes q$  reemplazará a  $p$ . Sea ahora  $\tau_H(p, q)$  la probabilidad de que  $p \otimes q$  pertenezca al esquema  $H$ , entonces

$$\tau_H(p, q) = \sum_{r \in X(p, q)} \frac{H(r)}{|X(p, q)|},$$

donde  $X(p, q)$  es el multiconjunto de posibles descendientes que se podrían producir aplicando el cruce a  $p$  y  $q$ . En consecuencia:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(m(H, t + 1)) &= m(\Omega, t) \cdot \frac{\sum_{p,q} f(p) \cdot f(q)}{(m(\Omega, t) \cdot f(\Omega, t))^2} (1 - p_c) \frac{H(p) + H(q)}{2} \\ &+ m(\Omega, t) \cdot \frac{\sum_{p,q} f(p) \cdot f(q)}{(m(\Omega, t) \cdot f(\Omega, t))^2} p_c \cdot \tau_H(p, q) \end{aligned}$$

donde  $p_c$  es la probabilidad con la que actúa el operador cruce.

Operando en la expresión anterior, se obtiene la siguiente versión del Teorema de los Esquemas, para los esquemas difusos:

**Teorema 2.1** ([30]).- *Para cualquier esquema fuzzy  $H$  en  $\Omega$ :*

$$\mathbf{E}(m(H, t + 1)) \geq m(\Omega, t) \cdot \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} \cdot (1 - p_c \cdot \alpha(H, t)),$$

donde

$$\alpha(H, t) = \sum_p \frac{H(p)f(p)}{m(H, t)(f(H, t))} \cdot \sum_q \frac{f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} (1 - \tau_H(p, q))$$

$\alpha(H, t)$  se interpreta como la “probabilidad” de que ningún hijo resultante del cruce de un elemento de  $A(t)$  y de  $A(t) \cap H$  pertenezca a  $H$ .

Claramente, si se aplica también el operador mutación con una probabilidad  $p_m$ , este resultado se transformará en:

$$\mathbf{E}(m(H, t + 1)) \geq m(\Omega, t) \cdot \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} \cdot (1 - p_c \cdot \alpha(H, t)) \cdot (1 - p_m \cdot \beta(H, t)),$$

donde  $\beta(H, t)$  tiene en cuenta el efecto mutación.

Esto implica que si  $f(H, t) \geq f(\Omega, t)$  se espera que se incremente el número de representantes de  $H$  en la siguiente generación si  $\alpha(H, t)$  y  $\beta(H, t)$  son pequeños, en el caso de un universo finito. Esto ocurrirá si el esquema es corto y de orden bajo. De nuevo, esquemas de esas características y altamente adecuados persisten de generación en generación.

## 2.3 El Teorema de los Esquemas en espacios medibles

En este epígrafe nos proponemos generalizar, a poblaciones no necesariamente finitas en el caso no fuzzy, los resultados obtenidos en [30]. Aunque algunos modelos se han conseguido ya con aplicaciones interesantes, las poblaciones seguían siendo discretas. Nosotros adoptaremos un punto de vista diferente trabajando con espacios de búsqueda y poblaciones que son conjuntos medibles (por ejemplo  $\Omega = \mathbb{R}^n$ ). La función de ajuste será una función integrable mientras el operador de cruce es un operador estocástico en dos variables y con valores en  $\Omega$ . De este modo, si  $\Omega$  está dotado de una métrica podemos tener en cuenta la distancia entre dos puntos si queremos obtener nuevos puntos. Más concretamente:

Sea  $\Omega$  un espacio medible, por ejemplo  $\mathbb{R}^n$ , y sea  $P \subseteq \Omega$  un subconjunto medible de  $\Omega$  que llamaremos población. Nuestra función de idoneidad será una función acotada, integrable:

$$f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

y que toma únicamente valores positivos.

### 2.3. EL TEOREMA DE LOS ESQUEMAS EN ESPACIOS MEDIBLES 35

Cualquier subconjunto medible  $H \subseteq \Omega$  será un esquema y lo identificaremos con su función característica:

$$H : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$$

definida como

$$H(p) = \begin{cases} 1 & \text{si } p \in H \\ 0 & \text{si } p \notin H \end{cases}$$

que será una función integrable.

Fijemos momentáneamente una población  $P$  y sea

$$|H|_P = \int_P H(\omega) d\omega = \mu(H \cap P),$$

donde  $\mu$  es una medida en  $\Omega$ . Podemos definir

$$f_P(H) = \begin{cases} \frac{1}{|H|_P} \cdot \int_P H(\omega) \cdot f(\omega) d\omega & \text{si } |H|_P \neq 0 \\ 0 & \text{si } |H|_P = 0 \end{cases}$$

En otras palabras,

$$\mu(H \cap P) \cdot f_P(H) = \int_{H \cap P} f(\omega) d\omega.$$

Supongamos ahora que nuestra población depende de un parámetro discreto  $t$ , i.e.,  $P = A(t) \subseteq \Omega$ , entonces denotaremos

$$m(H, t) = |H|_{A(t)} = \int_{A(t)} H(\omega) d\omega = \mu(H \cap A(t))$$

y

$$f(H, t) = f_{A(t)}(H).$$

Si  $m(H, t) \neq 0$ , tenemos:

$$f(H, t) = \frac{\int_{A(t)} H(\omega) f(\omega) d\omega}{\int_{A(t)} H(\omega) d\omega}$$

Sea  $\eta$  el operador selección que escoge elementos de  $\Omega$  con una probabilidad de ser seleccionados proporcional a su idoneidad. En nuestras hipótesis de trabajo, este operador transforma subconjuntos medibles en subconjuntos medibles. Como

$$m(H, t+1) = \int_{A(t+1)} H(\omega) d\omega$$

se sigue que

$$\mathbf{E}(m(H, t+1)) = \frac{1}{f(\Omega, t)} \int_{A(t)} H(\omega) f(\omega) d\omega = \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} m(H, t).$$

donde  $\mathbf{E}$  denota, como antes, el operador esperanza.

Por lo que respecta al cruce, éste será un operador estocástico en dos variables:

$$\chi : \Omega \times \Omega \rightarrow \Omega,$$

que, para cada par de elementos  $p, q \in \Omega$ , asigna un nuevo elemento  $p \otimes q \in \Omega$  y que también lleva subconjuntos medibles en subconjuntos medibles. Un ejemplo podría ser el operador:

$$\chi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

$$(p, q) \mapsto \alpha p + (1 - \alpha)q,$$

donde  $\alpha$  sigue una distribución normal de media 0.5 y desviación típica nula. Por otra parte, la probabilidad de seleccionar una pareja  $(p, q) \in A(t) \times A(t)$  es

$$\frac{f(p)}{\int_{A(t)} f(\omega) d\omega} \cdot \frac{f(q)}{\int_{A(t)} f(\omega) d\omega} = \frac{f(p)f(q)}{(f(\Omega, t)m(\Omega, t))^2}$$

Denotemos por  $\tau_H(p, q)$  la probabilidad de que, al cruzar  $p$  y  $q$ , el resultado pertenezca a  $H$ , y supongamos que la aplicación

$$\tau_H : \Omega \times \Omega \rightarrow [0, 1]$$

es integrable. Entonces la probabilidad de obtener un elemento de  $H$  partiendo de un par cualquiera  $(p, q) \in A(t) \times A(t)$  después de actuar la selección y el cruce está dada por:

$$\gamma(p, q) = p_c \tau_H(p, q) + \frac{1 - p_c}{2} \cdot (H(p) + H(q)),$$

### 2.3. EL TEOREMA DE LOS ESQUEMAS EN ESPACIOS MEDIBLES 37

donde  $p_c$  es la probabilidad de aplicar el operador cruce.

Así, es fácil ver que  $\mathbf{E}(m(H, t + 1)) = A + B$ , con

$$A = p'_c \frac{1}{f(\Omega, t)} \int \int_{A(t) \times A(t)} \frac{(H(p) + H(q))f(p)f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} dpdq$$

donde  $p'_c = \frac{1-p_c}{2}$  y con

$$B = \frac{p_c}{f(\Omega, t)} \int \int_{A(t) \times A(t)} \tau_H(p, q) \cdot \frac{f(p)f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} dpdq.$$

Para calcular el término A, haremos una primera suposición (\*): el conjunto de discontinuidades de la aplicación

$$A(t) \times A(t) \rightarrow R$$

$$(p, q) \mapsto (Hf)(p)f(q)$$

tiene medida cero. Aquí  $Hf$  está definida sobre  $A(t)$  por

$$(Hf)(p) = \begin{cases} f(p) & \text{si } p \in H \cap A(t) \\ 0 & \text{si } p \notin H \end{cases}$$

Si el conjunto de discontinuidades de  $f$  tiene medida nula (en particular, si  $f$  es continua) entonces  $Hf$  es continua, excepto, posiblemente, en la frontera de  $H \cap A(t)$  y en las discontinuidades de  $f$ , así que nuestra suposición se mantiene.

Claramente,

$$A = p'_c \frac{2}{f(\Omega, t)} \int \int_{A(t) \times A(t)} \frac{H(p)f(p)f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} dpdq$$

lo que se puede reescribir de la forma

$$\frac{1-p_c}{f(\Omega, t)} \int_{A(t)} H(p)f(p) \cdot \left( \int_{A(t)} \frac{f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} dq \right) dp$$

y como

$$\int_{A(t)} \frac{f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} dq = 1$$

respectivamente

$$\int_{A(t)} H(p)f(p)dp = f(H, t)m(H, t),$$

nosotros tenemos

$$A = (1 - p_c) \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} m(H, t).$$

Para calcular el término  $B$  hagamos una segunda suposición (\*\*): la función

$$A(t) \times A(t) \rightarrow R$$

$$(p, q) \mapsto f(p)f(q)\tau_H(p, q)$$

tiene a lo sumo un conjunto de discontinuidades de medida nula. Considerando

$$\gamma_{A(t)}(p, f) = \int_{A(t)} \frac{f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} \tau_H(p, q) dq$$

nosotros tenemos ahora que

$$\begin{aligned} B &= \frac{p_c}{f(\Omega, t)} \int_{A(t)} f(p) \cdot \gamma_{A(t)}(p, f) dp \geq \frac{p_c}{f(\Omega, t)} \int_{A(t)} H(p) \cdot f(p) \cdot \gamma_{A(t)}(p, f) dp \\ &= p_c \cdot \frac{m(H, t)f(H, t)}{f(\Omega, t)} \int_{A(t)} \frac{H(p) \cdot f(p) \cdot \gamma_{A(t)}(p, f) dp}{m(H, t)f(H, t)} dp. \end{aligned}$$

Denotemos ahora por  $\theta_H(pq) = 1 - \tau_H(p, q)$ , y definamos

$$\gamma'_{A(t)}(p, f) = \int_{A(t)} \frac{f(q)}{m(\Omega, t)f(\Omega, t)} \cdot \theta_H(p, q) dq = 1 - \gamma_{A(t)}(p, f).$$

Entonces

$$B \geq p_c \cdot \frac{m(H, t) f(H, t)}{f(\Omega, t)} \times \left( 1 - \int_{A(t)} \frac{H(p) f(p)}{m(H, t) f(H, t)} \cdot \gamma_{A(t)}(p, f) dp \right).$$

Por último, supongamos que las dos condiciones (\*) y (\*\*) se satisfacen. Combinando los cálculos anteriores obtenemos finalmente:

**Teorema 2. 2** (Teorema “global” de los Esquemas).-

$$\mathbf{E}(m(H, t + 1)) \geq m(H, t) \cdot \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} \cdot (1 - p_c \cdot \alpha(H, t)),$$

con

$$\alpha(H, t) = \int_{A(t)} \frac{H(p) f(p)}{m(\Omega, t) f(\Omega, t)} \gamma_{A(t)}(p, f) dp.$$

Este último término se puede interpretar como la “probabilidad” de que ningún descendiente de elementos de  $H$  mediante la acción del operador cruce pertenezca a  $H$ , i.e., la probabilidad de que ningún hijo obtenido cruzando elementos de  $H \cap A(t)$  y de  $A(t)$  pertenezca a  $H$ . (Se ha comprobado que para el operador de cruce mencionado antes,  $\alpha(H, t)$  toma valores pequeños).

Por otra parte, si considerásemos además la acción del operador mutación, con una probabilidad  $p_m$  por ejemplo, un argumento similar al anteriormente desarrollado proporcionaría una versión algo más general del Teorema de los Esquemas afirmando que

$$\mathbf{E}(m(H, t + 1)) \geq m(H, t) \cdot \frac{f(H, t)}{f(\Omega, t)} \cdot (1 - p_c \cdot \alpha(H, t) - p_m \cdot \beta(H, t)),$$

para una función  $\beta(H, t)$  apropiada, que dependerá de la población  $A(t)$  y de la información estructural de  $H$ .

Las explicaciones estandar sobre el funcionamiento de los AG's, abordadas en este capítulo, se basan en la hipótesis de que los “building blocks” se combinan para formar mejores cromosomas. Esta afirmación parece razonable y, de hecho, existe un gran número de aplicaciones, desarrolladas empíricamente de acuerdo con ella, para muy diferentes problemas. Sin embargo, también es verdad que algunos problemas “violan” la hipótesis de los bloques. Algunos esquemas cortos y de bajo orden pueden engañar al algoritmo y hacerle converger a soluciones subóptimas. Este fenómeno se denomina *Decepción* y a él nos referiremos de nuevo en el inicio del tercer capítulo.



# Capítulo 3

## Funciones difíciles de optimizar

### 3.1 Funciones decepcionantes

A pesar de que se han realizado muchos intentos para describir la clase de funciones para las cuales un algoritmo clásico actúa bien, sin embargo, estas tentativas no han resultado muy satisfactorias. Se han propuesto varias definiciones de funciones decepcionantes, todas ellas basadas en la hipótesis de los “building blocks”.

Desafortunadamente, algunas funciones que deberían ser difíciles de optimizar de acuerdo con estas definiciones son fáciles y viceversa. Grosso modo, una función es decepcionante cuando existen esquemas cortos, de bajo orden, con alta idoneidad, que no proporcionan la solución óptima.

En este epígrafe analizaremos dos situaciones sorprendentes que demuestran lo mucho que todavía se desconoce acerca del funcionamiento de los algoritmos genéticos. Consideraremos en primer lugar el problema más simple que podría causarle a un AG la divergencia del óptimo global (ver [12]). Para hacer esto deberemos contar con bloques cortos y de orden bajo que dirijan incorrectamente al algoritmo hacia esquemas más largos, de orden mayor (subóptimos). El problema más pequeño que puede tener tal decepción es un problema de dos bits, conocido como *problema decepcionante mínimo* o *MDP (Minimal Deceptive Problem)*. En líneas generales su planteamiento es el siguiente:

Supongamos que tenemos el siguiente conjunto de cuatro esquemas de

orden dos

$$\begin{aligned} s_{00} &= \#\#0\#\#\#0\#, \\ s_{01} &= \#\#0\#\#\#1\#, \\ s_{10} &= \#\#1\#\#\#0\#, \\ s_{11} &= \#\#1\#\#\#1\# \end{aligned}$$

con valores de adecuación media, para una cierta función  $f$ ,  $f_{00}$ ,  $f_{01}$ ,  $f_{10}$  y  $f_{11}$  respectivamente. Para fijar criterios, supongamos que  $f_{11}$  es el óptimo global; es decir,  $f_{11} > f_{00}$ ,  $f_{11} > f_{01}$  y  $f_{11} > f_{10}$ . Introduzcamos ahora el elemento de decepción: se desea que uno (o ambos) de los esquemas subóptimos de orden 1 sean mejores que el óptimo de orden 1, lo que matemáticamente se representa por una (o ambas) de las condiciones  $f(0\#) > f(1\#)$ ,  $f(\#0) > f(\#1)$ . (Por simplicidad se han omitido los alelos de los esquemas que no son fijos). De las expresiones anteriores se deduce que

$$\begin{aligned} f(00) + f(01) &> f(10) + f(11) \\ f(00) + f(10) &> f(01) + f(11), \end{aligned}$$

inecuaciones que son incompatibles. Tomemos una de ellas, por ejemplo la primera. Esa inecuación, junto con el hecho de que  $f_{11}$  es el óptimo conducen a una clasificación del problema en dos tipos distintos del MDP (figuras 2.1 y 2.2 [11])

$$\text{Tipo I : } f_{01} > f_{00}$$

$$\text{Tipo II : } f_{00} \geq f_{01}$$

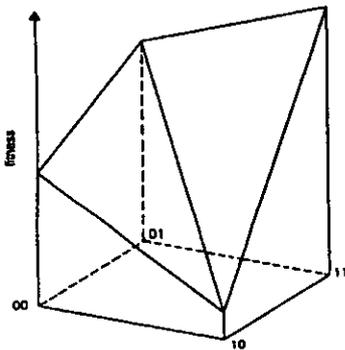


Fig. 2.1 MDP (Tipo I)

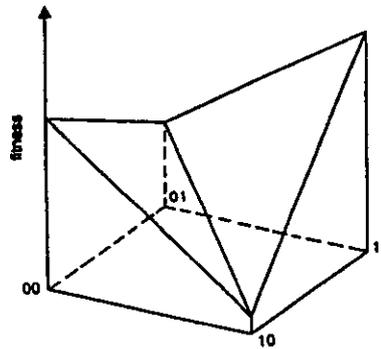


Fig. 2.2 MDP (Tipo II)

A pesar del empeño puesto en engañar al AG, sorprende el hecho de que este problema decepcionante no es un problema difícil (*hard problem*) puesto que, generalmente, el algoritmo no diverge del óptimo global. Las figuras 2.3, 2.4 y 2.5 representan diversas situaciones correspondientes a los tipos I y II del MDP. La figura 2.3 muestra cómo el problema de tipo I no es difícil para el algoritmo. (Este resultado se puede generalizar a cualquier problema de tipo I que tenga inicialmente representantes de los cuatro esquemas [ver [12)]).

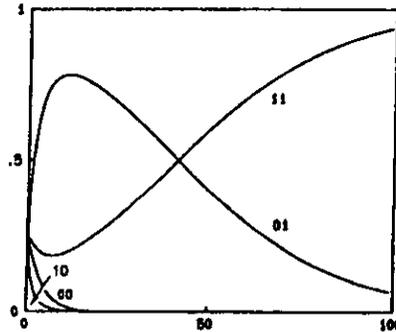


Fig. 2.3 (Tipo I)

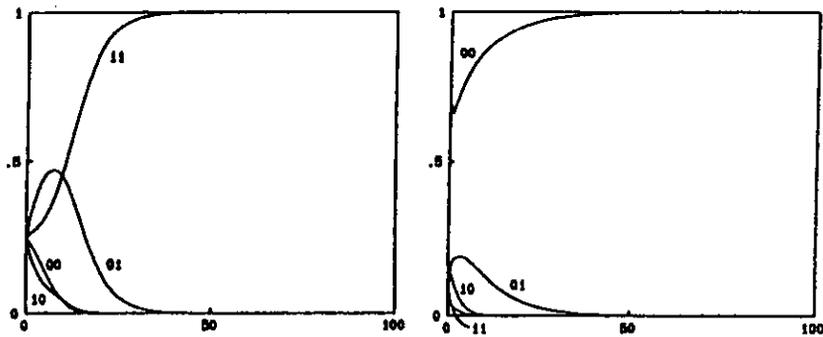


Fig. 2.4 (Tipo II, convergente) Fig. 2.5 (Tipo II, divergente)

Las figuras 2.4 y 2.5 reflejan situaciones muy distintas de problemas del tipo II. Mientras en la primera de ellas, y a pesar de la decepción inicial, el problema converge al óptimo, en la última figura se puede observar la convergencia a un subóptimo, la segunda mejor solución.

Otro resultado sorprendente en relación a este tema lo proporcionan las funciones *Royal Road* (*RR*). Éstas son un conjunto de funciones que deberían ser fáciles de optimizar por los AG's (de acuerdo con la interpretación

“cándida” del teorema de los esquemas). Se construyen asignando valores de idoneidad altos a las cadenas que pertenecen a ciertos esquemas predefinidos que deberían servir de vía fácil (*camino real*) que dirija al algoritmo hacia el máximo de esas funciones. Para definir esos esquemas denotemos por  $\alpha^{(n)}$  una cadena  $\alpha\alpha\dots\alpha$  de  $n$  copias de  $\alpha \in \{0, 1, \#\}$ ; y consideremos los siguientes esquemas [26]:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= 1^{(8)}\#^{(56)} \\ \sigma_2 &= \#^{(8)}1^{(8)}\#^{(48)} \\ \sigma_3 &= \#^{(16)}1^{(8)}\#^{(40)} \\ \sigma_4 &= \#^{(24)}1^{(8)}\#^{(32)} \\ \sigma_5 &= \#^{(32)}1^{(8)}\#^{(24)} \\ \sigma_6 &= \#^{(40)}1^{(8)}\#^{(16)} \\ \sigma_7 &= \#^{(48)}1^{(8)}\#^{(8)} \\ \sigma_8 &= \#^{(56)}1^{(8)}\end{aligned}$$

a cada uno de los cuales le asignamos un valor  $c_i$  igual al número de 1's en los alelos fijos, esto es:  $c_i = 8$  ( $i = 1\dots 8$ ).

Esto define una función  $\mathfrak{R}_1 : \Omega = \{0, 1\}^{64} \rightarrow \mathbb{R}$ , la primera función  $RR$ , que asigna a cada  $s \in \Omega$  la suma sobre todos los  $c_i$  para los cuales  $s$  es un elemento de  $\sigma_i$ , es decir,  $\mathfrak{R}_1(s) = \sum_{i: s \in \sigma_i} c_i$ . Así, por ejemplo,  $\mathfrak{R}_1(1^{(8)}0^{(56)}) = 8$  mientras que  $\mathfrak{R}_1(1^{(16)}0^{(48)}) = 16$ .

La segunda función,  $\mathfrak{R}_2$ , se define de forma similar a la primera, a partir de los esquemas:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= 1^{(8)}\#^{(56)} \\ \sigma_2 &= \#^{(8)}1^{(8)}\#^{(48)} \\ \sigma_3 &= \#^{(16)}1^{(8)}\#^{(40)} \\ \sigma_4 &= \#^{(24)}1^{(8)}\#^{(32)} \\ \sigma_5 &= \#^{(32)}1^{(8)}\#^{(24)} \\ \sigma_6 &= \#^{(40)}1^{(8)}\#^{(16)} \\ \sigma_7 &= \#^{(48)}1^{(8)}\#^{(8)} \\ \sigma_8 &= \#^{(56)}1^{(8)} \\ \sigma_9 &= 1^{(16)}\#^{(48)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{10} &= \#^{(16)}1^{(16)}\#^{(32)} \\
\sigma_{11} &= \#^{(32)}1^{(16)}\#^{(16)} \\
\sigma_{12} &= \#^{(48)}1^{(16)} \\
\sigma_{13} &= 1^{(32)}\#^{(32)} \\
\sigma_{14} &= \#^{(32)}1^{(32)}
\end{aligned}$$

Obviamente, el máximo de ambas funciones es la cadena  $s = 1^{(64)} \in \Omega$ . Es razonable esperar que estas dos funciones sean fáciles para los AG's, porque están definidas por medio de esquemas cortos, de orden bajo, que se pueden utilizar como un camino directo hacia la solución óptima. Además, la función  $\mathfrak{R}_2$  debería ser más fácil que  $\mathfrak{R}_1$  ya que proporciona más información (hay más esquemas en la definición). Sin embargo, Forrest y Mitchell [10] demuestran que no es este el caso. Más aún, comparando el comportamiento sobre ambas funciones, en [10] se muestra que  $\mathfrak{R}_1$  es realmente más sencilla que  $\mathfrak{R}_2$ . Por otra parte, como veremos a continuación, estas funciones no contienen decepción.

Como se ha comentado ya, el concepto de decepción no está precisado suficientemente en la bibliografía desarrollada sobre el tema. Aunque el término "función decepcionante" se utiliza frecuentemente para describir funciones difíciles de optimizar por un AG, ésta no es la única acepción admitida. Una de las definiciones consistente con la mayoría de las restantes es la propuesta por Whitley [34] que se basa en el concepto de esquemas competitivos.

Dos esquemas se dice que son *competitivos* cuando los bits definidos de ambos están en las mismas posiciones, pero al menos uno de los valores de esos bits es diferente. Es decir,  $\sigma$  y  $\tau$  son competitivos si  $\sigma_i = \# \Leftrightarrow \tau_i = \#$  y  $\exists i \in \{j; \sigma_j \neq \#\} : \sigma_i \neq \tau_i$ . Nótese que el conjunto de todos los esquemas con un número fijo de bits determinados, define una partición en  $A^l$ . Por ejemplo, los esquemas  $0\#0\#\dots\#$ ,  $0\#1\#\dots\#$ ,  $1\#0\#\dots\#$ ,  $1\#1\#\dots\#$ , definen claramente una partición. Por otra parte, se llama orden de una partición al número de posiciones, en las cadenas del esquema, con alelos distintos del carácter  $\#$  (la partición del ejemplo anterior es de orden dos); y se dice que una partición *subsume* a una partición  $P'$  si cada esquema de  $P'$  es un subconjunto de un esquema de  $P$ . Pongamos un ejemplo: la partición  $P = \{\#\#0, \#\#1\}$  subsume a la partición  $P' = \{\#00, \#01, \#10, \#11\}$ .

**Definición 3.1.**([34]).- Una función  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  contiene decepción si existen dos particiones  $P$  y  $P'$ ,  $P'$  de orden mayor que  $P$  y subsumida por  $P$ ,

tales que el esquema ganador de  $P'$  tiene al menos un bit, entre las posiciones de bits definidos y comunes a  $P$  y  $P'$ , cuyo valor difiere del valor del bit correspondiente en el ganador de  $P$ .

Aquí, el término “ganador” de una partición se refiere al esquema de esa partición con adecuación media más alta entre todos los esquemas de dicha partición.

Por otra parte, un conjunto de esquemas  $T$  conduce a un esquema dado  $s$  si  $S(s) \subseteq S(t)$ , para todo  $t \in T$ . Además, una función  $f$  se dice completamente decepcionante de orden  $N$  si, y sólo si, para cualquier partición  $P$  de orden  $N$ , los ganadores de todas las particiones de órdenes menores, que subsumen a  $P$ , conducen a un esquema en  $P$  distinto del ganador. Este esquema se denomina *atractor decepcionante* (o simplemente *atractor*).

Ahora se puede ver fácilmente que las funciones Royal Road no contienen decepción. En efecto, tomemos por ejemplo la función  $\mathfrak{R}_1$  (análogo razonamiento serviría para  $\mathfrak{R}_2$ ). Si  $\sigma$  es un esquema cualquiera en  $\Omega$ , entonces la adecuación media del esquema es  $f(\sigma) = \frac{8}{|\sigma|} \sum_i |\sigma \cap s_i|$ , donde la suma se extiende a todos los esquemas que definen a la función Royal Road. Consideremos la partición  $P$  formada por todos los esquemas competitivos con  $\sigma$ . El ganador de esa competición  $\tau$  será el esquema que tenga un 1 en cada posición definida. Cualquier otro esquema  $\xi$  de  $P$  tendrá al menos un cero. Por la forma de los esquemas que definen a la función, siempre existirá un  $s_i$  que tenga un 1 en la posición donde  $\xi$  tenga un cero. Así, la intersección  $\xi \cap s_i$  es vacía, y la idoneidad media del esquema  $\xi$  es menor que la de  $\tau$ .

Se deduce entonces que el ganador de cualquier partición entre esquemas competitivos es aquel que no contiene ningún cero. Si ahora se consideran dos particiones  $P$  y  $P'$ ,  $P'$  subsumida por  $P$ , y  $\tau$  y  $\tau'$  denotan los ganadores de  $P$  y  $P'$  respectivamente, entonces el conjunto  $S(\tau')$  de los esquemas definidos por  $\tau'$  es un subconjunto del conjunto  $S(\tau)$  definido por  $\tau$ , y en consecuencia la función no contiene decepción. (Para más detalles ver [34], [26]).

Estos resultados sugieren una posible causa de la dificultad de una función para un AG, la no linealidad en la representación de esa función.

Hemos dedicado esta sección a ejemplificar las dificultades existentes con el concepto de funciones decepcionantes. De lo expuesto en este epígrafe, es claro que parecen importantes también otras propiedades de las funciones objetivo. Como candidata a analizar, Van Hove en [26] propone una medida de

la “mayor o menor linealidad” de una función, la *epistasis*, que introducimos a continuación.

## 3.2 Epistasis sobre alfabetos binarios

Como la mayoría de los conceptos en el campo de los AG's el término *epistasis* deriva de su homónimo en Genética. En ese contexto un gen, o un par de genes, se dice epistático a otro gen cuando el primero enmascara el efecto (fenotípico) del segundo (ver [8]). De nuevo, y como en otros muchos casos relacionados con los algoritmos genéticos, el concepto de epistasis se ha simplificado y adaptado al contexto de los AG's hasta tal punto que guarda escasa similitud con su correspondiente biológico.

En el contexto de los algoritmos genéticos la epistasis surgió como una idea intuitiva. En [23], Rawlins comenta:

*“...Vemos que existen dos extremos en el comportamiento de la función objetivo:*

- *Epistasis cero.* En este caso cada gen es independiente de cualquier otro gen. [...] Está claro que esta situación puede ocurrir sólo cuando la función objetivo se puede expresar como una combinación lineal de funciones, que dependen, cada una de ellas de un gen.

- *Epistasis máxima.* En este caso ningún subconjunto de genes es independiente de cualquier otro gen. Cada gen depende de los demás por su idoneidad.[...]. Esta situación es equivalente a que la función objetivo sea una función arbitraria.”

Sin embargo, la primera definición formal de epistasis se debe a Davidor ([2]). En [2] el autor define el ajuste medio de un alelo del alfabeto binario,  $a \in A = \{0, 1\}$ , situado en la posición  $i$ -ésima ( $i \in I$ ), sobre una población  $P$ , como

$$f(a, i) = \frac{1}{N_i(a)} \sum_{s \in P_{i,a}} f(s)$$

Aquí  $P_{i,a}$  es el multiconjunto de todas las cadenas de  $P$  que tienen el alelo  $a$  en la posición  $i$ , y  $N_i(a) = |P_{i,a}|$  es el número de elementos de  $P_{i,a}$ .

El valor de exceso del alelo se define como:

$$E_i(a) = f(a, i) - \bar{f},$$

donde  $\bar{f}$  es la idoneidad media de la población.

Para una cadena  $s \in A^l$ , el valor de exceso génico es:

$$\tilde{E}(s) = \sum_{i=0}^{l-1} E_i(s_i).$$

y su valor génico previsto se define como

$$\tilde{f}(s) = \tilde{E}(s) + \bar{f}$$

Finalmente, la epistasis de una cadena  $s$  es:

$$\varepsilon(s) = f(s) - \tilde{f}(s).$$

Van Hove, en [26], reescribe la definición de Davidor en una única fórmula. Así, para una cadena  $s = s_{l-1} \dots s_0$  se define su epistasis  $\varepsilon_{P,f}(s)$ , con respecto a la población  $P \subseteq \Omega$ ,  $|P| = N$ , como:

$$\varepsilon_{P,f}(s) = f(s) - \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{N_i(s_i)} \sum_{t \in P_i, s_i} f(t) + \frac{l-1}{N} \sum_{t \in P} f(t).$$

En particular si  $P = \Omega$ , i.e.,  $N = 2^l$ , entonces

$$\varepsilon(s) = \varepsilon_{\Omega}(s) = f(s) - \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{2^{l-1}} \sum_{t \in \Omega_i, s_i} f(t) + \frac{l-1}{2^l} \sum_{t \in \Omega} f(t).$$

De nuevo en [26] encontramos que, utilizando notación matricial, es posible reescribir la definición de  $\varepsilon(s)$ . Para ello, Van Hove define los vectores

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} \varepsilon(00\dots00) \\ \varepsilon(00\dots01) \\ \vdots \\ \varepsilon(11\dots11) \end{pmatrix}$$

y

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f(00\dots 00) \\ f(00\dots 01) \\ \vdots \\ f(11\dots 11) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_{2^l-1} \end{pmatrix}.$$

Entonces, claramente

$$\mathbf{e} = \mathbf{f} - \mathbf{E}_l \mathbf{f},$$

donde  $\mathbf{E}_l = (e_{ij}) \in \mathbb{R}^{2^l} \times \mathbb{R}^{2^l}$  ( $0 \leq i, j \leq 2^l - 1$ ), con  $e_{ij} = \frac{1}{2^l}(l + 1 - 2d_{ij})$ . Aquí  $d_{ij}$  es la distancia Hamming entre  $i$  y  $j$  (i.e., el número de bits en los cuales las representaciones binarias de  $i$  y  $j$  difieren, ver [29])

Entonces se define la *epistasia global* de  $f$ :

$$\varepsilon(f) := \sqrt{\sum_{s \in \Omega^l} \varepsilon^2(s)} = \|\mathbf{e}\|.$$

Se ha demostrado en [28] que  $\mathbf{E}_l$  es idempotente, de lo que se sigue fácilmente, teniendo en cuenta que  $\mathbf{E}_l$  es simétrica, que  $\varepsilon_l^2(f) = {}^t \mathbf{F}_l \mathbf{f}$ , donde  $\mathbf{F}_l = \mathbf{I}_l - \mathbf{E}_l$ , con  $\mathbf{I}_l$  la matriz identidad de dimensión  $2^l$ . La demostración de este hecho que aparece en [28] es bastante técnica. En [25] se puede encontrar un enfoque más directo, de la siguiente forma:

En primer lugar se define  $\mathbf{G}_l = 2^l \cdot \mathbf{E}_l \in M_{2^l}(\mathbb{Z})$ , i.e.:  $\mathbf{G}_l = (g_{ij})$ , con  $g_{ij} = l + 1 - 2d_{ij}$ , para todo  $0 \leq i, j \leq 2^l - 1$ . Por otra parte, denotando

$$\mathbf{U}_{l-1} = \begin{pmatrix} 1 \cdots 1 \\ \vdots \cdots \vdots \\ 1 \cdots 1 \end{pmatrix} \in M_{2^{l-1}}(\mathbb{Z}),$$

y utilizando que

$$\mathbf{G}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1} \\ \mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1} \end{pmatrix},$$

se prueba que, para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\mathbf{G}_l^2 = 2^l \cdot \mathbf{G}_l$ .

Como  $\mathbf{G}_l \in M_{2^l}(\mathbb{Z})$  es simétrica sólo tiene autovalores reales. No es difícil entonces ver que los autovalores son 0 y  $2^l$ ; y que  $\mathbf{E}_l$  es idempotente. (Además los autovalores de  $\mathbf{E}_l$  son 0 y 1).

El propósito de los autores en [25] es estudiar cuantitativamente la noción de epistasis con vistas a caracterizar completamente las funciones objetivo (sobre alfabetos binarios) con valores de epistasis extremos.

Para ello, es necesario primeramente describir los espacios de autovectores de  $\mathbf{G}_l$  (y  $\mathbf{E}_l$ ). Sean  $V_0^l$  y  $V_1^l$  los espacios de autovectores en  $\mathbb{R}^{2^l}$  correspondientes a los autovalores 0 y  $2^l$  respectivamente (o, equivalentemente, a 0 y 1 como autovalores de  $\mathbf{E}_l$ ). Entonces  $\mathbb{R}^{2^l} = V_0^l \oplus V_1^l$  y como  $V_0^l = \ker(\mathbf{G}_l)$  (respectivamente  $V_1^l = \text{Im}(\mathbf{G}_l)$ ), y  $\text{rang}(\mathbf{G}_l) = l + 1$  (para más detalles ver [25]) entonces  $\dim V_0^l = 2^l - l - 1$  y  $\dim V_1^l = l + 1$ .

Además se puede describir explícitamente una base ortogonal para  $V_1^l$ : Sea  $\mathbf{v}_0^0 = 1$  y supóngase construido ya inductivamente el conjunto  $\{\mathbf{v}_0^{l-1}, \dots, \mathbf{v}_{l-1}^{l-1}\} \subseteq \mathbb{R}^{2^{l-1}}$ . Entonces se considera el conjunto  $\{\mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_l^l\} \subseteq \mathbb{R}^{2^l}$  definido por:

$$\mathbf{v}_k^l = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_k^{l-1} \\ \mathbf{v}_k^{l-1} \end{pmatrix}, \text{ con } 0 \leq k \leq l-1$$

y

$$\mathbf{v}_l^l = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ -\mathbf{e}_{l-1} \end{pmatrix}, \text{ donde } \mathbf{e}_{l-1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2^{l-1}}.$$

Por ejemplo, si  $l = 1$ ,

$$\mathbf{v}_0^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_1^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

y si  $l = 2$ ,

$$\mathbf{v}_0^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_1^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Entonces:

**Proposición 3.2** ([25]).- *Con las notaciones previas, para cualquier entero positivo  $l$ , el conjunto  $\{\mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_l^l\}$  es una base ortogonal de  $V_1^l$ .*

Volvamos un momento sobre la idea que originó el concepto de epistasis. En vista del hecho de que  $f$  y  $rf$  deben tener las mismas relaciones de dependencia entre los bits, para cualquier número real  $r$ , debería suceder que  $\varepsilon(rf) = \varepsilon(f)$ , lo que conlleva una “normalización” de la epistasis.

**Definición 3.3** ([25]).- *La epistasis normalizada de  $f$  (o  $\mathbf{f}$ ) es:*

$$\varepsilon_i^*(f) = \varepsilon_i^2\left(\frac{f}{\|\mathbf{f}\|}\right) = \frac{\varepsilon_i^2(f)}{\|\mathbf{f}\|^2} = \frac{{}^t\mathbf{f}(\mathbf{I}_l - \mathbf{E}_l)\mathbf{f}}{{}^t\mathbf{f}\mathbf{f}} = \cos^2(\mathbf{f}, \mathbf{F}_l\mathbf{f}),$$

donde  $\mathbf{F}_l = \mathbf{I}_l - \mathbf{E}_l$  es una proyección ortogonal (ya que es idempotente y simétrica). Se sigue que  $0 \leq \varepsilon_i^*(f) \leq 1$ .

**Nota.-** En su tesis doctoral Van Hove propone como definición de epistasis normalizada de  $f$

$$\varepsilon_N(f) = \cos^2(\mathbf{f}, \mathbf{E}_l\mathbf{f}) = \frac{{}^t\mathbf{f}\mathbf{E}_l\mathbf{f}}{{}^t\mathbf{f}\mathbf{f}}.$$

Obsérvese que  $\varepsilon_N(f)$  invierte la escala de valores de  $\varepsilon_l(f)$ , ( $\varepsilon_N(f) = 1$  cuando  $\varepsilon_l(f) = 0$ ). En realidad la normalización  $\varepsilon_N(f)$  de Van Hove y la posteriormente propuesta en [25],  $\varepsilon_i^*(f)$ , miden esencialmente lo mismo; de hecho, ambas se relacionan por la ecuación  $\varepsilon_i^*(f) = 1 - \varepsilon_N(f)$ . En lo que sigue, cuando nos refiramos a la epistasis normalizada de una función  $f$  se entenderá la normalización en el sentido de [25],  $\varepsilon_i^*(f)$ .

Por otra parte volviendo a la definición anterior, se deduce claramente de ella que  $\varepsilon_i^*(f) = 0$  si, y sólo si,  $\mathbf{f} \in V_1^l$  (respectivamente  $\varepsilon_i^*(f) = 1$  si, y sólo si,  $\mathbf{f} \in V_0^l$ ).

Nótese que los valores máximo (resp. mínimo) de  $\varepsilon_i^*(f)$  se corresponden con los valores mínimo (resp. máximo) de  $\gamma_l(f) = {}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_l\mathbf{f}$ , con  $\|\mathbf{f}\| = 1$ , donde, desde luego,  $0 \leq \gamma_l(f) \leq 2^l$ .

Al estudio de esos valores extremos se dedica el último epígrafe de este capítulo.

### 3.3 Valores extremos de la epistasis

En primer lugar, tal y como se establece en [25], el valor mínimo teórico de la epistasis normalizada  $\varepsilon_l^*(f) = 0$  efectivamente se alcanza. Si  $l = 1$ , cualquier  $f \in \mathbb{R}^2$ , con  $\|f\| = 1$ , verifica que  $\gamma_l(f) = 2$ . Si  $l > 1$ , basta considerar  $f = 2^{-l} \cdot e_l$ . Entonces  $\|f\| = 1$  y

$$\gamma_l(f) = {}^t f G_l f = 2^{-l} \sum_{i,j=0}^{2^l-1} g_{ij} = 2^{-l} \sum_{i=0}^{2^l-1} \sum_{j=0}^{2^l-1-1} (g_{ij} + g_{i\hat{j}}) = 2.$$

Aquí se ha utilizado que  $g_{ij} + g_{i\hat{j}} = 2$ , ( $0 \leq i, j \leq 2^l - 1$ ), y donde  $\hat{j} = 2^l - 1 - j$  (para más detalles ver [25]).

Se ha demostrado en [27] y [28] que  $\varepsilon_l^*(f) = 0$  si, y sólo si,  $f$  tiene epistasis mínima en el sentido de Rawlins ([24]); es decir, cuando  $f(s) = \sum_{i=0}^{l-1} g_i(s)$ , donde  $g_i$  depende sólo del  $i$ -ésimo bit  $s_i$  de  $s$ . En [25] se desarrolla una demostración más sencilla de este hecho, que se puede resumir como sigue:

En primer lugar se definen, para  $0 \leq i \leq l - 1$ , las funciones

$$\begin{aligned} h_i^l &: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \\ s &\rightarrow h_i^l(s) = \begin{cases} 1 & \text{si } s_i = 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \end{aligned}$$

y  $\mathbf{h}_i^l$  sus correspondientes vectores de  $\mathbb{R}^{2^l}$ . (El vector  $\mathbf{e}_l \in \mathbb{R}^{2^l}$  corresponderá a la función constante de valor 1). Entonces un argumento por inducción demuestra que  $\{\mathbf{h}_0^l, \dots, \mathbf{h}_{l-1}^l, \mathbf{e}_l\}$  es una base para  $V_1^l$ .

A continuación se consideran las funciones  $g_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  que dependen únicamente del  $i$ -ésimo bit, esto es:

$$g_i(s) = \begin{cases} a_i & \text{si } s_i = 1 \\ b_i & \text{si } s_i = 0 \end{cases},$$

y se reescriben como  $a_i h_i^l + b_i(e_l - h_i^l)$ , ( $i = 0, \dots, l$ ).

Claramente, si  $f$  tiene epistasis mínima en el sentido de [24] entonces  $f \in V_1^l$ , es decir,  $\varepsilon_l^*(f) = 0$ .

Recíprocamente, si  $\mathbf{f} \in V_1^l$  entonces

$$f = \sum_{i=0}^{l-1} \alpha_i h_i^l + \beta e_l = \sum_{i=0}^{l-1} g_i$$

donde  $g_0 = (\alpha_0 + \beta)h_0^l + \beta(e_l - h_0^l)$  y  $g_i = \alpha_i h_i^l$ , para  $1 \leq i \leq l-1$ .

Centrémonos ahora en el valor máximo de  $\varepsilon_i^*(f)$ . De nuevo en [25] se demuestra el siguiente resultado

**Proposición.3.4 .-** *Para cualquier entero positivo  $l$  y para cualquier función valuada positiva  $f$  con  $\|\mathbf{f}\| = 1$ , se verifica:*

$$\varepsilon_i^*(f) \leq 1 - \frac{1}{2^{l-1}}$$

(equivalentemente, el valor mínimo de  $\gamma_l(f)$  es 2).

La demostración utiliza la igualdad  ${}^t\mathbf{S}\mathbf{G}_l\mathbf{S}=\mathbf{D}$ , donde  $\mathbf{D}$  es una matriz diagonal cuya diagonal principal está compuesta por los autovalores de  $\mathbf{G}_l$  (contando sus multiplicidades) y  $\mathbf{S}$  es una matriz ortogonal de autovectores unitarios de  $\mathbf{G}_l$ . En particular, se pueden escoger los vectores  $2^{-\frac{l}{2}}\mathbf{v}_i$  ( $i = 0, \dots, l$ ), de la sección 3.2, como las  $l + 1$  primeras columnas de  $\mathbf{S}$ . Así:

$$\gamma_l(f) = {}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_l\mathbf{f} = {}^t\mathbf{f}\mathbf{S}\mathbf{D}{}^t\mathbf{S}\mathbf{f} = \sum_{i=0}^l (\mathbf{v}_i\mathbf{f})^2,$$

y, si ahora se considera

$$\widehat{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix} f_0 + f_{2^l-1} \\ \vdots \\ f_{2^{l-1}-1} + f_{2^l-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2^{l-1}},$$

( $\|\widehat{\mathbf{f}}\|^2 = a \geq 1$ ) entonces, por construcción,

$$\gamma_l(f) = \gamma(f_0, \dots, f_{2^l-1}) = \gamma_l(\widehat{\mathbf{f}}) + ((f_0 + \dots + f_{2^l-1}) - (f_{2^{l-1}-1} + \dots + f_{2^l-1}))^2.$$

Además para la función  $f' = \frac{1}{a}\widehat{f}$ , con vector asociado unitario, se cumple la desigualdad  $\gamma_l(f') \leq \gamma_l(f)$ .

La demostración finaliza con un razonamiento por reducción al absurdo. Se supone que para algún entero positivo  $l$ , y para alguna función positiva  $f$  con  $\|f\| = 1$ ,  $\gamma_l(f) < 2$ , entonces  $\gamma_{l-1}(\widehat{f}) \leq \gamma_l(f) < 2$ , y en particular,  $\gamma_{l-1}(f') = \frac{1}{a^2} \gamma_{l-1}(\widehat{f}) < 2$ .

Repitiendo este procedimiento se encontraría alguna función  $f$  positiva con  $\|f\| = 1$ , tal que  $\gamma_1(f) < 2$  lo que es imposible (como se ha comentado al inicio de este epígrafe) ya que, para cualquier función  $f$

$$\gamma_1(f) = {}^t f G_1 f = 2 \cdot {}^t f \mathbf{1} f = 2 \|f\|^2 = 2.$$

Por otra parte, este máximo teórico para las funciones positivas, con vector asociado normalizado, se alcanza. Basta considerar

$$f = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$$

Este ejemplo es, esencialmente, el único. De hecho:

**Proposición 3.5** ([25]).- *Para cualquier  $l \geq 2$  y para cualquier función positiva  $f \in \mathbb{R}^{2^l}$  con  $\|f\| = 1$ , equivalen:*

1.  $\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{1}{2^{l-1}}$ ;
2. existe algún  $0 \leq i \leq 2^{l-1} - 1$  tal que  $f = \mathbf{q}_i^l$ , donde  $\mathbf{q}_i^l \in \mathbb{R}^{2^l}$  está dada por  $(\mathbf{q}_i^l)_i = (\mathbf{q}_i^l)_{\widehat{i}} = \frac{\sqrt{2}}{2}$ , y  $(\mathbf{q}_i^l)_j = 0$  si  $j \neq i, \widehat{i}$ , (con  $\widehat{i} = 2^l - 1 - i$ ).

A continuación calcularemos, la epistasis sobre una función concreta, para la cual analizamos también su decepción.

Nuestro propósito es reforzar nuestra inicial apuesta por la epistasis como indicador de la dificultad de las funciones. Ello es debido no sólo a los resultados inesperados a que ha dado lugar el estudio de las funciones Royal

Road o las funciones Tanese en cuanto a su decepción; (resultados que, como hemos indicado, han conllevado un estudio más exhaustivo, por parte de distintos investigadores, del estimador propuesto por Davidor). Además, Grefenstette en [13] afirma que la existencia de decepción no es necesaria ni suficiente para que un problema sea difícil para los AG's. El ejemplo que mostramos a continuación, parece indicar que la epistasis podría ayudar a medir mejor la dificultad, al menos para algunas funciones.

Nos inspiramos en la función con la que Grefenstette (en [13]) muestra la existencia de funciones que, a pesar de ser decepcionantes, son fáciles de optimizar. Por razones de economía computacional, modificamos "ligeramente" la función de Grefenstette; sin embargo, esa modificación no añade dificultad alguna al ejemplo. Nuestra propuesta es la función definida sobre  $[0, 1] \times [0, 1]$  por:

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{2}x_1^2 + 5x_2^2 & \text{si } x_2 < 0.99 \\ (1 - x_1)^2 + 5x_2^2 & \text{si } x_2 \geq 0.99 \end{cases}$$

cuyo valor máximo se alcanza en el par  $(0, 1)$ .

Si codificamos en cadenas binarias de longitud 10 (cinco bits para cada variable), se comprueba que

$$\varepsilon_{10}^*(f) = 1 - \frac{t\mathbf{f}G_{10}\mathbf{f}}{2^{10} \|\mathbf{f}\|^2} = 0.029350$$

siendo el valor máximo teórico, en este caso, 0.998047. Como se observa, el valor de la epistasis es muy bajo en relación al máximo que se podría llegar a alcanzar. Por otra parte, se puede demostrar que la función es completamente decepcionante de orden 5, siendo su atractor el esquema  $\sigma = 11111#####$ .

Antes de acometer el estudio de la epistasis sobre alfabetos no binarios, al que dedicamos el capítulo siguiente, indiquemos que recientemente Naudts y Verschoren en [23] han examinado la relación existente entre epistasis y decepción (en alfabetos binarios), haciendo especial énfasis en su mutua interrelación; y han probado que, aunque estas propiedades son esencialmente independientes, pueden reforzarse mutuamente. En particular, en [23] se demuestra que la epistasis es la responsable del diferente comportamiento que, ante la convergencia al óptimo global, muestran los tipos I y II del MDP. Concretamente, se comprueba que, para un conjunto fijo de valores  $f_{00}$ ,  $f_{01}$ ,  $f_{10}$  y  $f_{11}$  (considerando este último como el valor máximo), la epistasis normalizada  $\varepsilon^*(f)$  sólo puede tomar tres valores diferentes  $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$ . Además,

los autores demuestran que en el caso de la epistasis más baja,  $\varepsilon_1$ , no puede haber decepción. Siempre que existe decepción, entonces la epistasis permite diferenciar entre los dos tipos de M.D.P.: el tipo I se tiene para el valor intermedio de epistasis, mientras que el tipo II ocurre cuando la epistasis alcanza el mayor valor de los tres.

# Capítulo 4

## Epistasis sobre alfabetos no binarios

### 4.1 Las representaciones n-arias y la epistasis

#### Representación binaria versus no binaria

Parte del poder de los algoritmos genéticos se fundamenta en la forma de representar los datos, ya que la representación mediante cadenas binarias los hace ampliamente aplicables. Sin embargo, hay ocasiones en las que los operadores genéticos clásicos no son adecuados pues no son internos. Por ejemplo, si necesitamos codificar cinco elementos de forma binaria, serán precisas cadenas de tres bits. Como tres bits permiten representar hasta un total de ocho elementos, podría ocurrir que cruzando dos individuos se obtuviesen descendientes “*ilegales*”; o bien mutando un bit de un individuo de la población se podría obtener una de las tres cadenas que no representen a ningún elemento de la población.

Por otra parte, para algunos tipos de problemas en los que intervienen estructuras tales como grafos, árboles, etc., la codificación binaria destruye información importante para el problema. Pensemos por ejemplo en una matriz

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix}$$

que se podría codificar fácilmente por una cadena de doce genes, concatenando sus filas (o sus columnas):

$$(a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{14}, a_{21}, a_{22}, a_{23}, a_{24}, a_{31}, a_{32}, a_{33}, a_{34}).$$

Esta codificación, sin embargo, ignora el hecho de que  $a_{11}$  y  $a_{12}$  eran adyacentes en la matriz; por contra,  $a_{24}$  y  $a_{31}$  lo son ahora, cuando antes estaban distantes. El problema de la codificación de imágenes es otro ejemplo en el que se pone de manifiesto la importancia de establecer una representación apropiada de los datos.

Para remediar estos problemas, durante los últimos años se han considerado diversas variantes de los algoritmos genéticos. Wright en [36] aborda el problema de la optimización de funciones con parámetros reales. Considera que codificando cada variable de forma binaria (o con la codificación de Gray) se puede interpretar el operador cruce con uno o  $k$  puntos de corte, (siendo el valor de  $k$  pequeño en relación al número de parámetros), como una operación de cruce sobre el vector de parámetros reales más una perturbación de alguno de los parámetros. Propone entonces un AG que maneja vectores de números reales como cromosomas, parámetros reales como genes y números reales como alelos; interpreta el concepto de esquemas y muestra que, en este ámbito, el teorema de los esquemas de Holland se verifica.

El TSP es otro ejemplo en el que la codificación binaria no es la más apropiada. Como ya hemos comentado en el capítulo 1, la representación por medio de números naturales, ciclos o permutaciones, unida a ciertas variantes de los operadores genéticos clásicos, es más acertada. De hecho, en los últimos años han surgido diferentes operadores de reordenación, entre los que se encuentra el operador *inversión* que al igual que la mutación es un operador unario. La inversión simple selecciona dos puntos en el cromosoma como puntos de corte, y en la subcadena limitada por esos dos puntos se invierten sus elementos. Tal inversión aplicada al TSP garantiza que el nuevo cromosoma es un recorrido completo por todas las ciudades, en las condiciones del problema. También para este operador inversor, Holland en [14] formula una modificación del teorema de los esquemas incluyendo sus efectos.

Veamos otro ejemplo. Supongamos que el Sr. X desea abrir un comercio de ropa. El comerciante analiza distintas posibilidades con vistas a obtener los mayores beneficios. Esos beneficios dependerán del precio al que venda la

ropa, lo cual a su vez depende de factores como la calidad de los materiales empleados en su confección, el precio del mayorista, el tipo de artículo,...

La elección del tipo de ropa es importante y complicada. Hay cinco clases de ropa que el empresario toma en consideración. Se diferencian en el precio y en los posibles clientes a los que va dirigida, así como en el margen de ganancias de las mismas. Estos cinco tipos son: prendas de deporte, ropa interior, ropa de calle, trajes de noche y vestuario tradicional de la región.

Los destinatarios de la mercancía son otro punto importante a considerar. El comerciante duda entre dedicar la tienda al público femenino solamente, o por el contrario centrarse en ropa masculina, o quizá ambas posibilidades; incluso considera la opción de ropa de adultos y niños.

Otra cuestión importante es la cantidad de prendas por talla de las que deberá disponer. Supongamos, para este ejemplo, que el comerciante limita esa cantidad en seis piezas por modelo y talla, como máximo.

Con estas tres variables en mente (tipo de ropa, futuro mercado de ventas, y número de prendas por talla), nuestro empresario pretende analizar sus beneficios empleando un algoritmo genético.

El primer paso en la aplicación de un AG es idear una adecuada representación del problema. Hay una elección obvia para codificar el tipo de ropa, un gen de cardinalidad cinco. Podría pensarse en una representación binaria pero entonces debería codificarse esa característica empleando cadenas de tres genes binarios. Sin embargo, en casos como éste, en los que el espacio de búsqueda no es potencia de dos, por las razones ya comentadas, se considera que una representación no binaria es la elección más acertada.

La codificación del tipo de clientela es menos obvia. Un gen de cardinalidad cuatro podría servir, pero también podría codificarse utilizando dos genes binarios. La mejor elección depende de las propiedades de la función de ajuste. Supongamos que nuestro empresario opta por un gen de cardinalidad cuatro.

Finalmente, queda la cuestión de la cantidad de ejemplares de un modelo, por talla. En este caso, se elige codificar esta característica por medio de un gen de cardinalidad seis.

Así las cosas, la representación del problema de nuestro hipotético comerciante se puede expresar por un vector de tres componentes  $\langle 5,4,6 \rangle$ , donde cada componente representa la cardinalidad del gen correspondiente a

la primera, segunda y tercera cuestiones, respectivamente. En consecuencia, cada individuo de la población será una cadena de tres genes, cada uno de los cuales tendrá 5, 4 y 6 valores distintos posibles, dependiendo de su posición.

Los ejemplos anteriores, son una muestra de que la elección del tipo de representación al diseñar un AG no es un problema trivial. Para hacer posible que los algoritmos genéticos se apliquen a un amplio rango de problemas, parece necesario introducir otras estructuras además de las cadenas binarias.

Esta idea, se ve reforzada por el estudio desarrollado por Paul Field en su tesis [9]. Uno de los puntos claves de ese estudio es el análisis de las ventajas e inconvenientes de utilizar representaciones no binarias en la codificación de un problema.

Field cuestiona la supremacía de la representación binaria frente a la no binaria, sosteniendo que la distinción entre ambos tipos es improcedente. Tal afirmación se fundamenta en la discusión de dos importantes argumentos, defensores de las representaciones binarias: el argumento sobre la “cantidad de esquemas” (*the quantity of schemata argument*) y el de la “cobertura alélica” (*the allele coverage argument*). Detengámonos con algo más de detalle en estas ideas.

Mientras el término “representación binaria” es universalmente entendido como sinónimo de las codificaciones que representan a las soluciones mediante cadenas binarias de longitud fija, el término “no binaria” significa, generalmente, que las soluciones se representan por medio de cadenas de longitud fija que contienen alelos, algunos de los cuales (o todos) no son binarios. Otra interpretación es considerarla como una codificación en cadenas binarias de longitud variable.

En cuanto a la disyuntiva entre los dos tipos de representaciones, Goldberg en [12] señala que una representación binaria tiene más esquemas que otra no binaria equivalente (es decir, con el mismo número de elementos en la población). Por ejemplo,  $\Omega = \{0, 1, 2, 3\}$  tiene sólo cinco esquemas  $\{0, 1, 2, 3, \#\}$  mientras que, sobre las cadenas binarias de  $\Omega = \{0, 1\}^2$ , hay nueve esquemas  $\{00, 01, 10, 11, \#0, \#1, 0\#, 1\#, \#\#\}$ . Como el AG trabaja procesando esquemas, sin duda, cuantos más esquemas haya más información tendrá el algoritmo y debería funcionar mejor. Sin embargo, ya hemos visto que algunos esquemas pueden engañar al AG. En [9] se propone el reemplazamiento de varios genes por un gen de cardinalidad mayor. Esta nueva representación actuará “congelando” ciertos esquemas, de forma que, si un

AG tiende a destruir esquemas vitales para su funcionamiento (por ser de un orden, o una longitud, más grande), se frenará su destrucción, impidiendo que desaparezcan mediante el cruce, y asegurando una menor susceptibilidad a la mutación.

Por lo que respecta al argumento de la cobertura alélica, éste se refiere a la proporción estimada de todos los genes en una población aleatoria. La idea básica es que cuanto más alta es la cardinalidad de un gen menor es la probabilidad de que todos los alelos aparezcan en una población aleatoria, (el caso extremo se tiene cuando se considera una población de tamaño menor a la cardinalidad del gen).

El problema de carecer de algunos alelos desde la población inicial es que debemos esperar a que la mutación los introduzca. Mientras tal cosa sucede, el AG actúa sin la información inherente a esos alelos. Si alelos de ciertas posiciones poseen efectos positivos al combinarse con esos alelos perdidos, esas consecuencias positivas también se perderán. Sin embargo, la validez de este argumento se cuestiona en [9] en base al efecto “congelador” de los esquemas, afirmando que:

*“...la comparación entre alelos binarios y no binarios es errónea. En lugar de hablar de alelos no binarios, deberían considerarse como esquemas congeladores, en cuyo caso el problema de la cobertura de los alelos desaparece, porque el número estimado de esquemas distintos y el número esperado de alelos no binarios distintos es el mismo”.*

El análisis anterior podría resumirse diciendo que una representación binaria tiene más esquemas que una no binaria pero, si esos esquemas contienen información que engaña al algoritmo, entonces son de poca utilidad. Por el contrario, una representación no binaria tendrá algunos esquemas menos, pero pueden ser de mejor calidad.

En [9] se concluye afirmando:

*“...a efectos prácticos la mejor representación a emplear depende del problema [...] ambas son útiles por lo que deberían usarse, tanto las binarias como las no binarias, en situaciones prácticas”.* Afirmación que se apoya en los resultados empíricos obtenidos (para más detalles ver [9]).

Consecuente con esa filosofía, Field introduce el término “*multary*” que reúne las representaciones binaria y no binaria. Se utiliza para describir las representaciones basadas en cadenas de genes de longitud fija cuyos alelos toman un conjunto finito de valores.

En esta memoria, hacemos nuestro el término *multary* y la interpretación que encierra, y lo traducimos por “representación  $n$ -aria” ( $n$  denota el cardinal del conjunto de valores que toman los genes). El caso binario es entonces un caso particular de la representación  $n$ -aria, cuando  $n=2$ .

Para fijar criterios, denotaremos por  $A = \{0, 1, \dots, n-1\}$  su alfabeto, (generalización natural del alfabeto binario).  $\Omega_n$  (o  $\Omega$  si no existe ambigüedad) denotará, como hasta ahora, el espacio total  $A^l$  sobre el que se define la codificación,  $f : D \mapsto \Omega$  la función pertinente en cada caso y  $\#$  denotará una posición en la que cualquiera de los valores de los  $n$  alelos es posible.

### Epistasis sobre un alfabeto $n$ -ario

La amplia aceptación de la que ha gozado la representación binaria en la comunidad científica ha traído como consecuencia el desarrollo de un estudio más detallado sobre el funcionamiento de los AG's que emplean esa codificación. Un ejemplo de ello es el estudio realizado sobre la epistasis en [3], [23], [25], [26], [27] y [28] como indicador de la dificultad de las funciones que actúan sobre alfabetos binarios, frente al caso no binario (no considerado hasta el momento). Por ello, en lo que resta del capítulo generalizaremos la noción de epistasis normalizada  $\varepsilon_{n,l}^*(f)$  para una función  $f$  sobre un alfabeto  $n$ -ario cuyo valor máximo (o mínimo) deseamos encontrar. Además, analizamos sus propiedades más importantes que nos conducirán a la caracterización de las funciones objetivo con epistasis normalizada máxima y mínima.

En lo que sigue, mantendremos las notaciones introducidas en el cuarto capítulo de esta memoria, y en consecuencia  $f$  denotará ahora la aplicación valuada positiva,  $f : \Omega_n \rightarrow \mathbb{R}^+$ , que deseamos optimizar. La definición de epistasis debida a Davidor, (y expuesta en la sección 3.2 de esta memoria), para el caso binario, se puede extender a un alfabeto de  $n$  elementos sin variar su significado. Los conceptos de ajuste medio de un alelo, valor de exceso alélico, valor de exceso génico, valor génico previsto y epistasis de una cadena, se mantienen independientemente de que el alfabeto sea  $\{0, 1\}$  o  $\{0, 1, \dots, n-1\}$ . En consecuencia, siguiendo las ideas desarrolladas por Davidor en [2] y por Van Hove en [26], para el caso binario, podemos definir, para una cadena  $s \in \Omega_n$ , su epistasis  $\varepsilon_{P,f}(s)$  con respecto a una población  $P \subseteq \Omega_n$ , como

$$\varepsilon_{P,f}(s) = f(s) - \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{N_i(s_i)} \sum_{t \in P_{i,s_i}} f(t) + \frac{l-1}{|P|} \sum_{t \in P} f(t)$$

A lo largo del capítulo consideraremos que  $P = \Omega_n$ , por lo que  $|P| = n^l$ , y la ecuación anterior se convierte en

$$\varepsilon_{n,l}(s) = \varepsilon_{\Omega_n, f}(s) = f(s) - \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{n^{l-1}} \sum_{t \in \Omega_{i, s_i}} f(t) + \frac{l-1}{n^l} \sum_{t \in \Omega_n} f(t).$$

que se conoce como *epistasis global de la cadena s*.

**Definición 4.1.-** La epistasis global de  $f$  es

$$\varepsilon_{n,l}(f) := \sqrt{\sum_{s \in \Omega_n} \varepsilon_{n,l}^2(s)}$$

Al igual que en [25], [27] y [28], la definición anterior se puede reescribir en términos matriciales. Para ello, consideremos los vectores

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{n,l}(00\dots 00) \\ \varepsilon_{n,l}(00\dots 01) \\ \vdots \\ \varepsilon_{n,l}((n-1)^{(l)}) \end{pmatrix}$$

y

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f(00\dots 00) \\ f(00\dots 01) \\ \vdots \\ f((n-1)^{(l)}) \end{pmatrix},$$

donde  $(n-1)^{(l)}$  es la cadena  $(n-1)\dots(n-1)$  de longitud  $l$ . Emplearemos también la notación  $f_0, \dots, f_{n^l-1}$  para  $f(00\dots 00), \dots, f((n-1)^{(l)})$ , es decir

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_{n^l-1} \end{pmatrix}.$$

Sea ahora, para cada  $0 \leq i, j \leq n^l - 1$ ,

$$e_{n,ij}^l = \frac{1}{n^l} ((n^l - 1)l + 1 - nd_{ij}),$$

donde  $d_{ij}^l$  (o  $d_{n,(i,j)}^l$  si existiese ambigüedad) es la distancia de Hamming ( $n$ -aria) entre las representaciones  $n$ -arias de  $i$  y  $j$ . Por ejemplo, como las representaciones ternarias de 16 y de 24 son respectivamente 121 y 220, tendremos que  $d_{3,(16,24)}^3 = 2$ .

Denotemos por  $\mathbf{E}_{n,l}$  la matriz cuadrada  $n^l$ -dimensional, con coeficientes racionales,  $(e_{n,ij}^l)$ . Entonces tenemos que

$$\mathbf{e} = \mathbf{f} - \mathbf{E}_{n,l}\mathbf{f}$$

y la epistasis global de  $f$  es entonces

$$\varepsilon_{n,l}(f) = \|\mathbf{e}\| = \|\mathbf{f} - \mathbf{E}_{n,l}\mathbf{f}\|.$$

## 4.2 Epistasis normalizada

De la definición anterior se deduce que  $\varepsilon_{n,l}(rf) = |r|\varepsilon_{n,l}(f)$ , ( $\forall r \in \mathbb{R}$ ). En consecuencia, para poder utilizar la noción de epistasis como un indicador de la dificultad que encierra una función objetivo para un AG, es necesario (tal y como se comentó ya en el capítulo anterior para el caso binario) normalizar ese concepto. Con este fin analizamos a continuación la idempotencia de la matriz  $\mathbf{E}_{n,l}$ . Para ello, consideramos en primer lugar la matriz cuadrada, con coeficientes enteros,  $\mathbf{G}_{n,l} = n^l\mathbf{E}_{n,l}$ , i.e., para cada  $0 \leq i, j \leq n^l - 1$ ,

$$\mathbf{G}_{n,l} = (g_{n,ij}^l) = (n - 1)l + 1 - nd_{n,(i,j)}^l.$$

Por simplicidad, siempre que no haya ambigüedad escribiremos  $g_{ij}$  (respectivamente  $e_{ij}$ ) en lugar de  $g_{n,ij}^l$  (respectivamente  $e_{n,ij}^l$ ).

El siguiente lema nos será muy útil:

**Lema 4.2.-** Para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\mathbf{G}_{n,l}$  es:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_{n,l-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,l-1} & \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} \\ \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} & \mathbf{G}_{n,l-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,l-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} & \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,l-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,l-1} \end{pmatrix}$$

donde, para cualquier entero positivo  $k$ ,  $\mathbf{U}_{n,k}$  es la matriz  $n^k$ -dimensional

$$\mathbf{U}_{n,k} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

**Demostración.-** Las cadenas de longitud  $l$  a las que da lugar el alfabeto de  $n$  elementos,  $A = \{0, 1, \dots, n-1\}$ , se pueden dividir en  $n$  subclases, cada una de las cuales está determinada por el dígito que ocupa la posición  $l$ . Esta subdivisión nos permite considerar a  $\mathbf{G}_{n,\ell}$  como una matriz compuesta de  $n^2$  submatrices  $\tilde{\mathbf{G}}_{pq}$  tales que

$$\mathbf{G}_{n,\ell} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{G}}_{00} & \cdots & \tilde{\mathbf{G}}_{0,n-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{\mathbf{G}}_{n-1,0} & \cdots & \tilde{\mathbf{G}}_{n-1,n-1} \end{pmatrix},$$

con  $\tilde{\mathbf{G}}_{pq} = (g_{n,ij}^l)$ , donde  $i$ , respectivamente  $j$ , varía sobre los elementos de  $A^l$  con el dígito  $p$ , respectivamente  $q$ , en la posición  $l$ -ésima.

Entonces, para cada  $0 \leq p \leq n^l - 1$ ,  $\tilde{\mathbf{G}}_{pp} = \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1}$ . En efecto,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{G}}_{pp} &= (g_{n,ij}^l) = ((n-1)l + 1 - nd_{n,(i,j)}^l) \\ &= ((n-1)(l-1) + 1 - nd_{n,(i,j)}^l + (n-1)) \\ &= ((n-1)(l-1) + 1 - nd_{n,(i,j)}^{l-1} + (n-1)) \\ &= \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1}, \end{aligned}$$

ya que, en este caso, se verifica siempre  $d_{n,(i,j)}^l = d_{n,(i,j)}^{l-1}$ . (Hemos denotado, igual que antes, por  $d_{n,(i,j)}^l$  la distancia entre las representaciones de  $i$  y  $j$  (de longitud  $l$ ), en el alfabeto  $A$ ;  $d_{n,(i,j)}^{l-1}$  representa entonces la distancia Hamming entre los vectores de longitud  $l-1$  obtenidos de los anteriores eliminando el  $l$ -ésimo "bit").

Fuera de la diagonal, esto es, para  $0 \leq p \neq q \leq n-1$ , tenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{G}}_{pq} &= (g_{n,ij}^l) = ((n-1)l + 1 - nd_{n,(i,j)}^l) \\ &= ((n-1)(l-1) + 1 - nd_{n,(i,j)}^l + (n-1)) \\ &= ((n-1)(l-1) + 1 - n(d_{n,(i,j)}^{l-1} + 1) + (n-1)) \\ &= \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1}, \end{aligned}$$

ya que ahora, siempre tenemos que  $d_{n,(i,j)}^l = d_{n,(i,j)}^{l-1} + 1$ .  $\square$

Como consecuencia de este lema obtenemos:

**Corolario 4.3.-** Para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\mathbf{G}_{n,\ell}^2 = n^l \mathbf{G}_{n,\ell}$ .

**Demostración.-** Para  $l = 0$ , y  $l = 1$  la afirmación claramente es cierta, puesto que  $\mathbf{G}_{0,\ell} = (1)$ , y  $\mathbf{G}_{1,\ell} = n\mathbf{I}_n$  ( $\mathbf{I}_n$  denota la matriz identidad  $n$ -dimensional). El caso general se demuestra utilizando un argumento de inducción, junto con el lema anterior y la igualdad  $\mathbf{U}_{n,l}^2 = n^l \mathbf{U}_{n,l}$ , como  $\mathbf{G}_{n,\ell}^2$  es

$$\left( \begin{array}{cccc} \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} \\ \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} \end{array} \right)^2,$$

los elementos de la diagonal son entonces de la forma

$$\begin{aligned} & [\mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1}]^2 + (n-1) [\mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1}]^2 \\ &= n\mathbf{G}_{n,\ell-1}^2 + (n^2 - n)\mathbf{U}_{n,\ell-1}^2 \\ &= n^l [\mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1}], \end{aligned}$$

y las submatrices situadas fuera de la diagonal son

$$\begin{aligned} & 2[\mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1}][\mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1}] + (n-2)[\mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1}]^2 \\ &= n\mathbf{G}_{n,\ell-1}^2 - n\mathbf{U}_{n,\ell-1}^2 = n^l [\mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1}], \end{aligned}$$

lo que finaliza la demostración.  $\square$

Nótese que este resultado implica que los autovalores de  $\mathbf{G}_{n,\ell}$  son 0 y  $n^l$ . De hecho, como  $\mathbf{G}_{n,\ell}$  es una matriz real simétrica, sus autovalores son todos reales. Por otra parte, si  $\mathbf{v}$  es un autovector asociado a un autovalor  $\lambda$  de  $\mathbf{G}_{n,\ell}$ , es decir,  $\mathbf{G}_{n,\ell}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ , entonces

$$n^l \lambda \mathbf{v} = n^l \mathbf{G}_{n,\ell} \mathbf{v} = \mathbf{G}_{n,\ell}^2 \mathbf{v} = \lambda^2 \mathbf{v}.$$

En consecuencia,  $\lambda = 0$ , o  $\lambda = n^l$ , como habíamos afirmado.

**Corolario 4.4.-** Para cualquier entero positivo  $l$  la matriz  $\mathbf{E}_{n,l}$  es idempotente. En particular, sus autovalores son 0 y 1.

**Demostración.-** Se sigue inmediatamente de  $\mathbf{G}_{n,l} = n^l \mathbf{E}_{n,l}$  y del corolario anterior.  $\square$

Ahora estamos en condiciones de generalizar el concepto de epistasis normalizada para un alfabeto no binario.

**Definición 4.5.-** La epistasis normalizada de una función de ajuste  $f$  es:

$$\varepsilon_{n,l}^*(f) = \varepsilon_{n,l}^2\left(\frac{f}{\|f\|}\right) = \frac{\varepsilon_{n,l}^2(f)}{\|f\|^2} = \frac{{}^t f (\mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}) f}{{}^t f f} = \cos^2(f, \mathbf{F}_{n,l} f),$$

donde  $\mathbf{F}_{n,l} = \mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}$  es una proyección ortogonal (por ser idempotente y simétrica). Se sigue entonces que  $0 \leq \varepsilon_{n,l}^*(f) \leq 1$  para cualquier función  $f$ .

Para poder caracterizar las funciones con valores extremos de epistasis normalizada, nos proponemos a continuación determinar los espacios de autovectores de  $\mathbf{G}_{n,l}$  (y de  $\mathbf{E}_{n,l}$ ), para lo cual debemos calcular primero su rango.

**Lema 4.6.-** Para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\text{rang}(\mathbf{G}_{n,l}) = (n-1)l + 1$ .

**Demostración.-** Argumentemos de nuevo por inducción en  $l$ . Para  $l = 1$  la afirmación es obvia. Por otra parte, utilizando el lema 4.1, mediante operaciones elementales se reduce la matriz  $\mathbf{G}_{n,l}$  a la forma

$$\begin{pmatrix} n\mathbf{G}_{n,l-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{U}_{n,\ell-1} \end{pmatrix}$$

en consecuencia,

$$\begin{aligned} \text{rang}(\mathbf{G}_{n,l}) &= \text{rang}(\mathbf{G}_{n,l-1}) + (n-1)\text{rang}(\mathbf{U}_{n,\ell-1}) \\ &= ((n-1)(l-1) + 1) + (n-1) = (n-1)l + 1, \end{aligned}$$

lo que prueba la afirmación.  $\square$

Denotemos por  $V_{n,0}^l$  y  $V_{n,1}^l$  los espacios de autovectores en  $\mathbb{R}^{n^l}$  correspondientes a los autovalores 0 y  $n^l$ , respectivamente, de  $\mathbf{G}_{n,l}$  (o, equivalentemente, correspondientes a los autovalores 0 y 1 de  $\mathbf{E}_{n,l}$ ). Entonces  $\mathbb{R}^{n^l} = V_{n,0}^l \oplus V_{n,1}^l$ , y como  $V_{n,0}^l = \ker(\mathbf{G}_{n,l})$ , respectivamente  $V_{n,1}^l = \text{Im}(\mathbf{G}_{n,l})$ , entonces es claro que

$$\dim(V_{n,0}^l) = n^l - (n - 1)l - 1$$

y

$$\dim(V_{n,1}^l) = (n - 1)l + 1.$$

Se puede construir explícitamente una base ortogonal para  $V_{n,1}^l$  de la forma siguiente: comencemos con el vector  $\mathbf{v}_0^0 = \mathbf{1}$  y supongamos ya construido inductivamente un conjunto

$$\left\{ \mathbf{v}_0^{l-1}, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)(l-1)}^{l-1} \right\} \subseteq \mathbb{R}^{n^{l-1}}$$

construímos ahora un nuevo conjunto

$$\left\{ \mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)l}^l \right\} \subseteq \mathbb{R}^{n^l}$$

donde

$$\mathbf{v}_k^l = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_k^{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^{l-1} \end{pmatrix}$$

para  $0 \leq k \leq (n - 1)(l - 1)$  y donde  $\mathbf{v}_{(n-1)(l-1)+1}^l, \mathbf{v}_{(n-1)(l-1)+2}^l, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)l}^l$  son

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ -\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -2\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -(n-1)\mathbf{e}_{l-1} \end{pmatrix},$$

con

$$\mathbf{e}_{l-1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{y} \quad \mathbf{0}_{l-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

en  $\mathbb{R}^{n^{l-1}}$ .

Así por ejemplo, si consideramos  $n = 3$  y  $l = 1$ , entonces

$$\mathbf{v}_0^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_1^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_2^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix},$$

y si  $n = 3$  y  $l = 2$ ,

$$\mathbf{v}_0^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_1^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_2^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_3^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_4^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Ahora, podemos probar:

**Proposición 4.7.-** *Con las notaciones previas, para cualquier entero positivo  $l$ , el conjunto  $\{\mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)l}^l\}$  es una base ortogonal para  $V_{n,1}^l$ .*

**Demostración.-** Para  $l = 1$  es fácil ver que, debido a su forma, los  $n$  vectores

$$\mathbf{v}_0^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_1^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{v}_{n-1}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ -(n-1) \end{pmatrix}$$

son ortogonales. Supongamos que la afirmación de la proposición se verifica para las longitudes  $0, \dots, l-1$ , y probémosla para las cadenas de longitud  $l$ . En ese caso, si  $0 \leq k \neq k' \leq (n-1)(l-1)$ , la hipótesis de inducción garantiza que  ${}^t\mathbf{v}_k^l \mathbf{v}_{k'}^l = 0$ . Por otra parte, si  $0 \leq k \leq (n-1)(l-1) < k' \leq (n-1)l$ ,

entonces

$${}^t\mathbf{v}_k^l \mathbf{v}_{k'}^l = ( {}^t\mathbf{v}_k^{l-1} \quad , \dots , \quad {}^t\mathbf{v}_k^{l-1} ) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -i\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix} = i {}^t\mathbf{v}_k^{l-1} \mathbf{e}_{l-1} - i {}^t\mathbf{v}_k^{l-1} \mathbf{e}_{l-1} = 0.$$

Finalmente, si  $(n-1)(l-1) + 1 \leq k \neq k' \leq (n-1)l$ , entonces

$${}^t\mathbf{v}_k^l \mathbf{v}_{k'}^l = ( {}^t\mathbf{e}_{l-1} \quad , \dots , \quad {}^t\mathbf{e}_{l-1}, \quad -i {}^t\mathbf{e}_{l-1}, \quad {}^t\mathbf{0}_{l-1} \quad , \dots , \quad {}^t\mathbf{0}_{l-1} ) \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -j\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix} = 0.$$

Como los vectores  $\mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)l}^l$  son claramente un conjunto de  $(n-1)l+1$  ( $= \dim(V_{n,1}^l$ ) vectores independientes, para completar la demostración sólo resta comprobar que todos ellos pertenecen a  $V_{n,1}^l$ .

De nuevo argumentaremos por inducción en  $l$ . Para  $l = 1$ , la afirmación es directa de un sencillo cálculo. Supuesto que se verifica para las longitudes  $0, \dots, l-1$ , la comprobaremos para la longitud  $l$ . En primer lugar, si  $0 \leq k \leq (n-1)(l-1)$ , entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{n,l} \mathbf{v}_k^l &= \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{n,l-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,l-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,l-1} - \mathbf{U}_{n,l-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,l-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_k^{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^{l-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} n\mathbf{G}_{n,l-1} \mathbf{v}_k^{l-1} \\ \vdots \\ n\mathbf{G}_{n,l-1} \mathbf{v}_k^{l-1} \end{pmatrix} = n \cdot n^{l-1} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_k^{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^{l-1} \end{pmatrix} = n^l \mathbf{v}_k^l. \end{aligned}$$

Por otra parte, si  $k = (n-1)(l-1) + i$  con  $1 \leq i \leq n-1$ , entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{n,l} \mathbf{v}_k^l &= \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -i\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix} \\ &= n \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{n,\ell-1}\mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{n,\ell-1}\mathbf{e}_{l-1} \\ -i\mathbf{U}_{n,\ell-1}\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix} = n \cdot n^{l-1} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ -i\mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix} = n^l \mathbf{v}_k^l. \end{aligned}$$

Esto finaliza la demostración.  $\square$

Ya hemos visto que  $0 \leq \varepsilon_{n,l}^*(f) \leq 1$ ; ahora, y como consecuencia de los resultados anteriores,  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 0$  (respectivamente  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 1$ ) equivale a que  $\mathbf{f} \in V_{n,1}^l$  (respectivamente  $\mathbf{f} \in V_{n,0}^l$ ). Así, por ejemplo, si  $n = 3$  y  $l = 2$ ,  $\mathbf{f} \in V_{3,1}^2$  si, y sólo si,  $\mathbf{f}$  pertenece al espacio vectorial generado por los vectores

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ -2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

lo que equivale a

$$f_{01} + f_{02} + f_{10} + f_{12} + f_{20} + f_{21} = 2(f_{00} + f_{11} + f_{22}).$$

Finalizamos esta sección dando una “interpretación geométrica” de la epistasis normalizada de una función. Para ello necesitamos algunos conceptos de Álgebra Lineal y Geometría de superficies, que resumimos a continuación.

Sea  $V$  un espacio vectorial real, y  $b : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  una forma bilineal, simétrica.  $b$  define unívocamente una forma cuadrática

$$\begin{aligned} q & : V \rightarrow \mathbb{R} \\ v & \rightsquigarrow q(v) = b(v, v) \end{aligned}$$

(De lo que se deduce que  $q(v) = {}^t v \mathbf{B} v$  siendo  $\mathbf{B}$  la matriz asociada a la aplicación  $b$ , respecto de una base).

En particular, si  $V = \mathbb{R}^{n^t}$  y  $b$  es el producto escalar sobre  $\mathbb{R}^{n^t}$

$$\begin{aligned} b & : \mathbb{R}^{n^t} \times \mathbb{R}^{n^t} \rightarrow \mathbb{R} \\ (v, w) & \rightsquigarrow b(v, w) = \langle v, w \rangle = {}^t v w \end{aligned}$$

entonces la forma cuadrática  $q$  se llama (en teoría de superficies) *Primera Forma Fundamental* en  $\mathbb{R}^{n^t}$ , y si la denotamos por  $\mathcal{I}_1$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1 & : \mathbb{R}^{n^t} \rightarrow \mathbb{R} \\ v & \rightsquigarrow \mathcal{I}_1(v) = \langle v, v \rangle = {}^t v v = \|v\|^2 \end{aligned}$$

es definida positiva.

Por otra parte, fijado un espacio vectorial real  $V$  y una aplicación bilineal  $b : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ , una aplicación lineal  $\varphi : V \rightarrow V$  se dice que es *autoadjunta* si para cualesquiera  $v, w \in V$ , se verifica

$$b(v, \varphi(w)) = b(\varphi(v), w)$$

Un ejemplo de aplicación autoadjunta en  $V = \mathbb{R}^{n^t}$ , con  $b = \langle -, - \rangle$ , es

$$\begin{aligned} \varphi & : \mathbb{R}^{n^t} \rightarrow \mathbb{R}^{n^t} \\ v & \rightsquigarrow \varphi(v) = \mathbf{F}_{n,t} v = (\mathbf{I}_{n,t} - \mathbf{E}_{n,t})v \end{aligned}$$

Toda aplicación lineal autoadjunta tiene asociada una forma cuadrática

$$\begin{aligned} \tilde{q} & : V \rightarrow \mathbb{R} \\ v & \rightsquigarrow \tilde{q}(v) = b(v, \varphi(v)) \end{aligned}$$

que se conoce como *Segunda Forma Fundamental* y que denotaremos por  $\mathcal{I}_2$ .

Volviendo a nuestro ejemplo anterior, la segunda forma fundamental asociada a  $\varphi$  es:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2 & : \mathbb{R}^{n^l} \rightarrow \mathbb{R} \\ v & \rightsquigarrow \mathcal{I}_2(v) = \langle v, \mathbf{F}_{n,l}v \rangle = {}^t v \mathbf{F}_{n,l} v \end{aligned}$$

Es claro entonces que

$$\varepsilon_{n,l}^*(f) = \varepsilon_{n,l}^2 \left( \frac{f}{\|f\|} \right) = \frac{{}^t f (\mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}) f}{{}^t f f} = \frac{{}^t f \mathbf{F}_{n,l} f}{{}^t f f} = \frac{\mathcal{I}_2(f)}{\mathcal{I}_1(f)} = \mathcal{I}_2 \left( \frac{f}{\|f\|} \right)$$

**Nota.-** En teoría de superficies, dada una superficie  $M$  y un punto  $p \in M$ , para cualquier vector  $v$  del plano tangente a  $M$  en el punto  $p$ ,  $(T_p(M))$ , el cociente  $\frac{\mathcal{I}_2(v)}{\mathcal{I}_1(v)} = \mathcal{I}_2 \left( \frac{v}{\|v\|} \right)$ , donde  $\mathcal{I}_2$  es la forma cuadrática determinada por la aplicación opuesta a la de Weingarten, se llama *curvatura normal* de la superficie  $M$  en el punto  $p$ , e indica cuánto y cómo se “curva” la superficie en los alrededores del punto  $p$ . Los autovalores de la aplicación autoadjunta se llaman *curvaturas principales* de  $M$  en  $p$  (y las rectas que generan se conocen como *direcciones principales*). Además, esos autovalores son los valores extremos que puede tomar  $\mathcal{I}_2$  en el conjunto  $\{v \in T_p(M) : \|v\| = 1\}$  (para más detalles ver [6], por ejemplo).

En nuestro ámbito,  $M = \mathbb{R}^{n^l}$  y  $T_p(M) = \mathbb{R}^{n^l}$  ( $\forall p \in \mathbb{R}^{n^l}$ ); las “curvaturas principales” son aquí los autovalores de la matriz  $\mathbf{F}_{n,l} = \mathbf{I}_{n,l} - \mathbf{E}_{n,l}$ , es decir, 0 y 1 (i.e.: los autovalores de  $\mathbf{E}_{n,l}$ ); y en consecuencia, esos son los valores extremos que puede tomar  $\mathcal{I}_2$  sobre la esfera  $\{f \in \mathbb{R}^{n^l} : \|f\| = 1\}$ . Por último, las “direcciones principales” serán aquí los espacios de autovectores asociados a los autovalores 0 y 1, esto es  $V_{n,0}^l$  y  $V_{n,1}^l$ .

### 4.3 Valores extremos de la epistasis normalizada

En este epígrafe, tal y como su título indica, nos ocuparemos de analizar los valores extremos de la epistasis normalizada, relacionándolos con la noción de epistasis mínima y máxima dada por Rawlins en [24].

En primer lugar, nótese que los valores máximo (respectivamente mínimo) de  $\varepsilon_{n,l}^*(f)$  se corresponden con los valores mínimos (resp.máximos) de  $\gamma_{n,l}(f) = {}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_{n,l}\mathbf{f}$ , con  $\|\mathbf{f}\| = 1$ . En particular  $0 \leq \gamma_{n,l}(f) \leq n^l$ .

Además, si particularizamos al caso en que  $l = 1$ , entonces  $\dim(V_{n,1}^1) = n$ , y por tanto,  $V_{n,1}^1 = \mathbb{R}^n$ . En consecuencia, para cualquier  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$  con  $\|\mathbf{f}\| = 1$ , se verifica

$$\gamma_{n,1}(f) = {}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_{n,1}\mathbf{f} = (f_0, \dots, f_{n-1}) \begin{pmatrix} n & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_{n-1} \end{pmatrix} = n \sum_{i=0}^{n-1} f_i^2 = n.$$

En el caso general, es decir, si  $l > 1$ , haremos uso del siguiente lema:

**Lema 4.8.-** *Para cualquier entero positivo  $l$ , se verifica:*

$$\sum_{i,j} g_{n,ij}^l = n^{2l}.$$

**Demostración.-** Aplicaremos la inducción en  $l$ . Para  $l = 1$ ,  $\mathbf{G}_{n,1} = n\mathbf{I}_n$ , así que el resultado es correcto. Supongamos ahora, que se verifica también para las longitudes  $1, \dots, l - 1$  y lo probaremos para la longitud  $l$ . Para ello, basta utilizar el lema 4.2; entonces es obvio que

$$\sum_{i,j} g_{n,ij}^l = n^2 \sum_{i,j} g_{n,ij}^{l-1} = n^2 \cdot n^{2(l-1)} = n^{2l},$$

como queríamos.  $\square$

Consideremos ahora el vector

$$\mathbf{f}' = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \end{pmatrix}$$

y sea  $\mathbf{f} = \frac{\mathbf{f}'}{\|\mathbf{f}'\|}$ , entonces podemos afirmar que  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 0$ ; lo que demuestra que el valor mínimo, teórico, de la epistasis normalizada se alcanza. En

efecto:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{n,i}(f) &= {}^t \mathbf{f} \mathbf{G}_{n,i} \mathbf{f} = \frac{1}{\|\mathbf{f}'\|^2} {}^t \mathbf{f}' \mathbf{G}_{n,i} \mathbf{f}' \\
 &= \frac{1}{2n^{l-1}} {}^t \mathbf{f}' \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,\ell-1} - \mathbf{U}_{n,\ell-1} & \cdots & \mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-1)\mathbf{U}_{n,\ell-1} \end{pmatrix} \mathbf{f}' \\
 &= 2 \frac{1}{2n^{l-1}} {}^t \mathbf{e}_{l-1} (2\mathbf{G}_{n,\ell-1} + (n-2)\mathbf{U}_{n,\ell-1}) \mathbf{e}_{l-1} \\
 &= \frac{1}{n^{l-1}} (2 \sum_{i,j} g_{n,ij}^{l-1} + (n-2) \sum_{i,j} u_{n,ij}^{l-1}) \\
 &= \frac{1}{n^{l-1}} (2n^{2(l-1)} + (n-2)n^{2(l-1)}) = n^l.
 \end{aligned}$$

Corno ya hemos comentado en el capítulo anterior, se ha demostrado en [27] y [28] que (para un alfabeto binario)  $\varepsilon_{2,i}^*(f) = 0$  cuando la función  $f$  tiene epistasia mínima en el sentido de [24]. Nosotros extendemos ahora ese resultado para un alfabeto de  $n$  elementos. Para ello, definimos, para cada  $0 \leq i \leq l-1$ , y  $1 \leq j \leq n-1$ , las funciones

$$\begin{aligned}
 h_{n,(i,j)}^l &: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \\
 s &= s_{l-1} \cdots s_0 \mapsto h_{n,(i,j)}^l(s) = \begin{cases} 1 & \text{si } s_i = j \\ 0 & \text{si } s_i \neq j \end{cases}
 \end{aligned}$$

y denotamos su vector correspondiente en  $\mathbb{R}^{n^l}$  por  $\mathbf{h}_{n,(i,j)}^l$ . Entonces, claramente, tenemos que, para cualquier  $0 \leq i \leq l-2$

$$\mathbf{h}_{n,(i,j)}^l = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{n,(i,j)}^{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{h}_{n,(i,j)}^{l-1} \end{pmatrix}$$

mientras que

$$\mathbf{h}_{n,(l-1,1)}^l = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix}, \mathbf{h}_{n,(l-1,2)}^l = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{h}_{n,(l-1,n-1)}^l = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{e}_{l-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n^l}.$$

**Lema 4.9.-** *Los vectores del conjunto*

$$\{\mathbf{e}_l, \mathbf{h}_{n,(i,j)}^l : 0 \leq i \leq l-1, 1 \leq j \leq n-1\}$$

*son linealmente independientes.*

**Demostración.-** Supongamos que

$$\sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,1} \mathbf{h}_{n,(i,1)}^l + \sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,2} \mathbf{h}_{n,(i,2)}^l + \cdots + \sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,n-1} \mathbf{h}_{n,(i,n-1)}^l + \beta \mathbf{e}_l = \mathbf{0}_l,$$

y denotemos por  $g$  la correspondiente función real sobre  $\Omega_n$

$$\sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,1} h_{n,(i,1)}^l + \sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,2} h_{n,(i,2)}^l + \cdots + \sum_{i=0}^{l-1} \alpha_{i,n-1} h_{n,(i,n-1)}^l + \beta e_l,$$

donde  $e_l$  denota la función constante igual a 1. Entonces, claramente  $\beta = g(0) = 0$ . Además, para cada  $1 \leq j \leq n-1$ , y para cada  $0 \leq i \leq l-1$ , tenemos

$$0 = g(jn^i) = \sum_{k=0}^{l-1} \alpha_{k,j} h_{n,(k,j)}^l(jn^i) + \beta = \alpha_{i,j}$$

lo que demuestra el lema.  $\square$

Por otra parte, un razonamiento similar al utilizado en la proposición 4.7 demuestra que tanto los vectores  $\mathbf{h}_{n,(i,j)}^l$  como  $\mathbf{e}_l$  pertenecen a  $V_{n,1}^l$ , lo que significa que constituyen una base para ese espacio vectorial. Ahora estamos en condiciones de probar

**Teorema 4.10.-** *Para cualquier función de ajuste  $f$  sobre  $\Omega_n$ , equivalen:*

1.  *$f$  tiene epistasia mínima, i.e.:  $f = \sum_{i=0}^{l-1} g_i$  para algunas funciones de adecuación  $g_i$ , que dependen sólo del  $i$ -ésimo bit;*

2.  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 0$ .

**Demostración.-** En primer lugar, si  $f$  tiene epistasia mínima, es decir, si

$f = \sum_{i=0}^{l-1} g_i$ , donde  $g_i$  depende sólo del  $i$ -ésimo bit, entonces  $f \in V_{n,1}^l$ , y en consecuencia  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 0$ . Para demostrar esta afirmación bastará ver que se verifica para cada uno de los vectores  $\mathbf{g}_i$  asociados a las funciones  $g_i$ . Denotemos por  $a_{ij}$  el valor común  $g_i(s)$  de todas las cadenas cuyo  $i$ -ésimo bit es igual a  $j$  ( $1 \leq j \leq n-1$ ), entonces

$$g_i = \sum_{j=1}^{n-1} a_{ij} h_{n,(i,j)}^l + a_{i0}(e_l - h_{n,(i,1)}^l - \dots - h_{n,(i,n-1)}^l),$$

así que  $\mathbf{g}_i \in \langle \mathbf{h}_{n,(i,j)}^l, \mathbf{e}_l \rangle = V_{n,1}^l$ .

Recíprocamente, si  $f \in V_{n,1}^l$ , entonces

$$\mathbf{f} = \sum_{i,j} \alpha_{ij} \mathbf{h}_{n,(i,j)}^l + \beta \mathbf{e}_l = \sum_{i=0}^{l-1} \left( \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{ij} \mathbf{h}_{n,(i,j)}^l \right) + \beta \mathbf{e}_l = \sum_{i=0}^{l-1} \mathbf{g}_i,$$

donde

$$\mathbf{g}_0 = (\alpha_{01} + \beta) \mathbf{h}_{n,(0,1)}^l + \beta(\mathbf{e}_l - \mathbf{h}_{n,(0,1)}^l) + \sum_{j=2}^{n-1} \alpha_{0j} \mathbf{h}_{n,(0,j)}^l$$

y

$$\mathbf{g}_i = \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{ij} \mathbf{h}_{n,(i,j)}^l$$

con  $1 \leq i \leq l-1$ .  $\square$

En cuanto al valor máximo de  $\varepsilon_{n,l}^*(f)$  ya hemos indicado que  $\varepsilon_{n,l}^*(f) \leq 1$ , y también que ese valor máximo se alcanza para cualquier  $f \in V_{n,0}^l$ . En lo que resta de sección, nosotros trabajaremos con una restricción añadida, consideraremos que todas las coordenadas de  $\mathbf{f}$  son positivas, lo que equivale a decir que la función de ajuste  $f$  asociada a  $\mathbf{f}$  es una función valuada positiva, sobre  $\Omega_n$ . En estas condiciones, demostraremos que el valor máximo teórico no se alcanza, siendo el máximo real alcanzado  $1 - \frac{1}{n^{l-1}}$  (equivalentemente, el valor mínimo de  $\gamma_{n,l}(f)$ , con  $\|\mathbf{f}\| = 1$ , es  $n$ ). En lo que sigue nos dedicaremos a comprobar este hecho.

Primeramente mostramos que, efectivamente,  $\gamma_{n,l}(f) = n$ , para ciertas funciones de adecuación. Para ello, consideremos el vector  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{n^l}$ , dado por

$${}^t \mathbf{f} = (\alpha, 0, \dots, 0, \alpha, 0, \dots, 0, \alpha),$$

donde  $\alpha = \sqrt{n}/n$  aparece en las posiciones  $i \frac{n^l-1}{n-1}$ , con  $0 \leq i \leq n-1$ . Por construcción, obviamente  $\|\mathbf{f}\| = 1$ . Además, si  $m$  denota el cociente  $\frac{n^l-1}{n-1}$ , tenemos

$$\begin{aligned} \gamma_{n,l}(f) &= {}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_{n,l}\mathbf{f} \\ &= \alpha^2((g_{00} + g_{0m} + \cdots + g_{0,n^l-1}) + (g_{m0} + \cdots + g_{m,n^l-1}) \\ &\quad + \cdots + (g_{n^l-1,0} + \cdots + g_{n^l-1,n^l-1})) \\ &= \frac{1}{n}((g_{00} + g_{mm} + \cdots + g_{n^l-1,n^l-1}) + 2(g_{0m} + \cdots + g_{(n-2)m,m})) \\ &= \frac{1}{n}(ng_{00} + 2 \sum_{i < j} g_{im,jm}). \end{aligned}$$

donde cada uno de los  $g_{im,jm}$  tiene el mismo valor  $(n-1)l + 1 - nl$  (ya que hay  $\binom{n}{2}$  pares  $(im, jm)$  y sobre cada uno de ellos  $d(im, jm) = l$ ). Así pues, un sencillo cálculo muestra que, tal y como habíamos afirmado,  $\gamma_{n,l}(f) = n$ .

**Teorema 4.11.-** *Para cualquier entero positivo  $l$  y para cualquier función objetivo  $f$  valuada positiva, con vector asociado unitario ( $\|\mathbf{f}\| = 1$ ), tenemos:*

$$\varepsilon_{n,l}^*(f) \leq 1 - \frac{1}{n^{l-1}}$$

**Demostración.-** Como la matriz  $\mathbf{G}_{n,l}$  es simétrica, existe una matriz ortogonal  $\mathbf{S}$  que la diagonaliza, es decir, que verifica que  ${}^t\mathbf{S}\mathbf{G}_{n,l}\mathbf{S} = \mathbf{D}$  es una matriz diagonal, cuya diagonal principal está constituida por los autovalores de  $\mathbf{G}_{n,l}$  (teniendo en cuenta sus multiplicidades). Entonces, podemos suponer que

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} n^l \mathbf{I}_{(n-1)l+1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Denotemos por  $\mathbf{g}$  el vector  ${}^t\mathbf{S}\mathbf{f}$ . Entonces,  $\gamma_{n,l}(f) = n^l \sum_{i=0}^{(n-1)l} g_i^2$ . La matriz  $\mathbf{S}$  se puede construir formando sus columnas con una base ortonormal de autovectores asociados a  $\mathbf{G}_{n,l}$ . En particular, las  $(n-1)l + 1$  primeras columnas pueden elegirse como la ortonormalización de los vectores  $\mathbf{v}_0^l, \dots, \mathbf{v}_{(n-1)l}^l$  de la proposición 4.1. Sea pues, la base ortonormal

$$\{\mathbf{w}_0^l, \dots, \mathbf{w}_{(n-1)(l-1)}^l, \mathbf{z}_1^l, \dots, \mathbf{z}_{n-1}^l\}$$

de  $V_{n,1}^l$ , donde  $\mathbf{w}_k^l = n^{-l/2} \mathbf{v}_k^l$  para  $0 \leq k \leq (n-1)(l-1)$  y donde  $\mathbf{z}_i^l = (i^2 + i)^{-1/2} n^{(1-l)/2} \mathbf{v}_{(n-1)l+i}^l$  con  $1 \leq i \leq n-1$ .

Podemos comprobar que:

$$\begin{aligned} \gamma_{n,l}(f) &= \gamma_{n,l}(f_0, \dots, f_{n^l-1}) \\ &= n^l \sum_{k=0}^{(n-1)(l-1)} ({}^t \mathbf{w}_k^l \mathbf{f})^2 + n^l \sum_{i=1}^{n-1} ({}^t \mathbf{z}_i^l \mathbf{f})^2 \\ &= n^l (n^{-l/2})^2 \sum_{k=0}^{(n-1)(l-1)} ({}^t \mathbf{v}_k^l \mathbf{f})^2 + n^l (n^{(1-l)/2})^2 \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i(i+1)} ({}^t \mathbf{v}_{(n-1)l+i}^l \mathbf{f})^2. \end{aligned}$$

Por construcción, obtenemos que

$$\begin{aligned} &\gamma_{n,l}(f_0, \dots, f_{n^l-1}) \\ &= \gamma_{n,l-1}(f_0 + f_{n^l-1} + \dots + f_{(n-1)n^{l-1}}, \dots, f_{n^{l-1}-1} + \dots + f_{n^l-1}) \\ &\quad + n \left( \frac{1}{2} ((f_0 + \dots + f_{n^{l-1}-1}) - (f_{n^{l-1}} + \dots + f_{2n^{l-1}-1}))^2 \right. \\ &\quad + \frac{1}{2 \cdot 3} ((f_0 + \dots + f_{n^{l-1}-1}) + (f_{n^{l-1}} + \dots + f_{2n^{l-1}-1}) - 2(f_{2n^{l-1}} + \dots + f_{3n^{l-1}-1}))^2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad \left. + \frac{1}{(n-1)n} ((f_0 + \dots + f_{n^{l-1}-1}) + \dots - (n-1)(f_{(n-1)n^{l-1}} + \dots + f_{n^l-1}))^2 \right). \end{aligned}$$

Denotemos

$$\widehat{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix} f_0 + f_{n^l-1} + \dots + f_{(n-1)n^{l-1}} \\ \vdots \\ f_i + f_{n^{l-1}+i} + \dots + f_{(n-1)n^{l-1}+i} \\ \vdots \\ f_{n^{l-1}-1} + \dots + f_{n^l-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n^{l-1}},$$

entonces

$$\begin{aligned} \|\widehat{\mathbf{f}}\| &= (f_0 + \dots + f_{(n-1)n^{l-1}})^2 + \dots + (f_{n^{l-1}-1} + \dots + f_{n^l-1})^2 \\ &= f_0^2 + \dots + f_{n^l-1}^2 + 2(f_0 f_{n^l-1} + \dots + f_{n^{l-1}-1} f_{n^l-1}) \\ &= a^2, \end{aligned}$$

para algún  $a \geq 1$ .

Sea  $f' = \frac{1}{a}\widehat{f}$ , entonces  $\|f'\| = 1$  y

$$\gamma_{n,l-1}(f') = \gamma_{n,l-1}\left(\frac{1}{a}\widehat{f}\right) = \frac{1}{a^2}\gamma_{n,l-1}(\widehat{f}).$$

Ahora, supongamos que para algún entero positivo  $l$ ,  $\gamma_{n,l}(f) < n$ , para alguna función  $f$  con  $\|f\| = 1$ . Entonces

$$\begin{aligned} \gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) &\leq \gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{n}{i(i+1)} ((f_0 + \cdots + f_{n^{l-1}-1}) + \cdots \\ &\quad - (i-1)(f_{(i-1)n^{l-1}} + \cdots + f_{in^{l-1}-1}))^2 \\ &= \gamma_{n,l}(f) < n. \end{aligned}$$

En particular, de lo anterior se deduce que

$$\gamma_{n,l-1}(f') = \frac{1}{a^2}\gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) < \frac{n}{a^2} \leq n.$$

Repetiendo este proceso, llegaríamos a que, para alguna función  $f$ , con  $\|f\| = 1$ ,  $\gamma_{n,1}(f) < n$ . Sin embargo, esto es imposible, ya que  $\gamma_{n,1}$  toma constantemente el valor  $n$  sobre las funciones de ajuste normalizadas (como se puede demostrar fácilmente). Esto contradice nuestra suposición y completa la demostración del teorema.  $\square$

## 4.4 Funciones de ajuste con epistasis máxima

Ya hemos indicado en el epígrafe anterior que  $n$  es el valor mínimo de  $\gamma_{n,l}$ , correspondiente a la epistasis normalizada máxima, y que éste se alcanza. Finalizaremos este capítulo resolviendo el problema de caracterizar completamente la clase de funciones de adecuación  $f$  para las cuales  $\gamma_{n,l}(f) = n$ .

Fijemos un entero positivo  $l \geq 2$  y consideremos índices  $0 \leq i_0, \dots, i_{n-1} \leq n^{l-1} - 1$ , distintos dos a dos, y cumpliendo las dos condiciones siguientes:

1.  $\sum_{r=0}^{n-1} i_r = \frac{n}{2}(n^{l-1} - 1)$ ,
2.  $d(i_r, i_s) = l - 1$ , para  $0 \leq r \neq s \leq n - 1$ .

**Definición 4.12.-** Para cada una de tales familias de índices  $i_0, \dots, i_{n-1}$ ,

definimos los vectores

$$\mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l} = \frac{\sqrt{n}}{n} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{i_0} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{i_{n-1}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n^l},$$

donde  $\{\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_{n^l-1}\}$  es la base canónica de  $\mathbb{R}^{n^l}$ .

Por ejemplo, si  $n = l = 2$ , entonces, necesariamente, tenemos  $\{i_0, i_1\} = \{0, 1\}$ , y

$$\mathbf{q}_{0,1}^{2,2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_{1,0}^{2,2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

En general, todavía en los alfabetos binarios, las familias de índices empleados en la definición 4.12 verificarán  $0 \leq i_0, i_1 \leq 2^{l-1} - 1$ , con  $i_0 + i_1 = 2^{l-1} - 1$  (lo que implica que  $d(i_0, i_1) = l - 1$ , y los vectores serán

$$\mathbf{q}_{k, 2^{l-1}-k}^{2,l} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2^l}$$

donde sus componentes no nulas ocupan las posiciones  $k$  y  $2^l - k - 1$ .

Como un ejemplo de un alfabeto no binario, consideremos el caso  $n = 3$ ,

$l = 2$ . Entonces  $\{i_0, i_1, i_2\} = \{0, 1, 2\}$ , y por ejemplo,

$$\mathbf{q}_{012}^{3,2} = \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_{102}^{3,2} = \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Se pueden interpretar las funciones objetivo correspondientes a los vectores  $\mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l}$  como funciones con  $n$  picos situados en las imágenes de las cadenas con distancia Hamming máxima entre ellas. Por otra parte, conjuntos de índices como los utilizados en la definición anterior se pueden encontrar siempre, basta considerar

$$i_r = r \frac{n^{l-1} - 1}{n - 1}$$

con  $0 \leq r \leq n - 1$ .

El siguiente resultado responde al propósito de este epígrafe:

**Teorema 4.13.-** *Para cualquier entero  $l \geq 2$  y para cualquier vector de componentes no negativas  $f \in \mathbb{R}^{n^l}$ , con  $\|f\| = 1$ , las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

1.  $\varepsilon_{n,l}^*(f) = 1 - \frac{1}{n^{l-1}}$ ,
2.  $f = \mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l}$  para un apropiado conjunto de índices  $0 \leq i_0, \dots, i_{n-1} \leq n^{l-1} - 1$ .

**Demostración.-** Comencemos probando que la segunda afirmación implica la primera. Escogiendo adecuadamente los índices  $i_0, \dots, i_{n-1}$ , tenemos

$$\gamma_{n,l}(f) = {}^t \mathbf{f} \mathbf{G}_{n,l} \mathbf{f} = \left(\frac{\sqrt{n}}{n}\right)^2 ({}^t \mathbf{e}_{i_0}, \dots, {}^t \mathbf{e}_{i_{n-1}}) \mathbf{G}_{n,l} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{i_0} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{i_{n-1}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{n} ({}^t e_{i_0}, \dots, {}^t e_{i_{n-1}}) \begin{pmatrix} g_{0,i_0} + g_{0,n^{t-1}+i_1} + \dots + g_{0,(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}} \\ \vdots \\ g_{n^{t-1},i_0} + \dots + g_{n^{t-1},(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{n} \{ (g_{i_0,i_0} + \dots + g_{i_0,(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) + \dots \\
&\quad \dots + (g_{(n-1)n^{t-1}+i_{n-1},i_0} + \dots + g_{(n-1)n^{t-1}+i_{n-1},(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) \} \\
&= \frac{1}{n} \{ n g_{0,0} + 2((g_{i_0,n^{t-1}+i_1} + \dots + g_{i_0,(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) + \dots \\
&\quad \dots + (g_{(n-2)n^{t-1}+i_{n-2},(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}})) \} \\
&= \frac{1}{n} \{ n((n-1)l+1) \\
&\quad + 2\{(n-1)((n-1)l+1) - n(d_{i_0,n^{t-1}+i_1} + \dots + d_{i_0,(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) \\
&\quad + (n-2)((n-1)l+1) - n(d_{n^{t-1}+i_1,2n^{t-1}+i_2} + \dots + d_{n^{t-1}+i_1,(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) \\
&\quad \dots + 1((n-1)l+1) - n d_{(n-2)n^{t-1}+i_{n-2},(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}} \} \} \\
&= \frac{1}{n} \{ ((n-1)l+1)n^2 - 2n(d_{i_0,n^{t-1}+i_1} + \dots + d_{(n-2)n^{t-1}+i_{n-2},(n-1)n^{t-1}+i_{n-1}}) \} \\
&= n((n-1)l+1) - 2 \binom{n}{2} l = n,
\end{aligned}$$

lo que prueba nuestra afirmación.

Para demostrar el recíproco, utilizaremos la inducción en  $l$ . Consideremos una función de ajuste  $f$  cuyo vector asociado  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{n^t}$  está normalizado y tiene la propiedad de que  $\gamma_{n,l}(f) = n$ . Con las notaciones anteriores, esto significa que

$$\begin{aligned}
n &= \gamma_{n,l}(f_0, \dots, f_{n^t-1}) \\
&= \gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) + n \left\{ \frac{1}{2} ((f_0 + \dots + f_{n^{t-1}-1}) - (f_{n^{t-1}} + \dots + f_{2n^{t-1}-1}))^2 + \dots \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{n(n-1)} ((f_0 + \dots + f_{n^{t-1}-1}) + \dots - (n-1)(f_{(n-1)n^{t-1}} + \dots + f_{n^t-1}))^2 \right\},
\end{aligned}$$

y en consecuencia

$$\gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) \leq \gamma_{n,l}(f).$$

Además, si consideramos de nuevo  $f' = \frac{\widehat{f}}{\|\widehat{f}\|}$ ,

$$\gamma_{n,l-1}(f') = \frac{1}{\|\widehat{f}\|^2} \gamma_{n,l-1}(\widehat{f}) \leq \frac{1}{\|\widehat{f}\|^2} \gamma_{n,l}(f) \leq \frac{n}{\|\widehat{f}\|^2} \leq n,$$

lo que conduce a que  $\gamma_{n,l-1}(f') = n$ , como consecuencia del teorema 4.11. También se obtiene que  $\|\widehat{\mathbf{f}}\| = 1$ . Entonces,  $\widehat{\mathbf{f}} = \mathbf{f}'$  y  $\gamma_{n,l-1}(\widehat{\mathbf{f}}) = n$  lo que significa que se verifican las siguientes identidades:

$$\begin{aligned} f_0 + \cdots + f_{n^l-1} &= f_{n^l-1} + \cdots + f_{2n^{l-1}-1} \\ &= \cdots \\ &= f_{(n-1)n^{l-1}} + \cdots + f_{n^l-1}. \end{aligned}$$

Por otra parte, como  $\|\widehat{\mathbf{f}}\| = \|\mathbf{f}\| = 1$ , tenemos también:

$$\begin{aligned} f_0 f_{n^l-1} &= \cdots = f_0 f_{(n-1)n^{l-1}} = \cdots = f_{(n-2)n^{l-1}} f_{(n-1)n^{l-1}} = 0 \\ &\vdots \\ f_i f_{n^l-1+i} &= \cdots = f_i f_{(n-1)n^{l-1}+i} = \cdots = f_{(n-2)n^{l-1}+i} f_{(n-1)n^{l-1}+i} = 0 \\ &\vdots \\ f_{n^l-1-1} f_{2n^{l-1}-1} &= \cdots = f_{n^l-1-1} f_{n^l-1} = \cdots = f_{(n-1)n^{l-1}-1} f_{n^l-1} = 0 \end{aligned}$$

En particular, si  $l = 2$  y  $\gamma_2(f_0, \dots, f_{n^2-1}) = n = \gamma_1(\widehat{\mathbf{f}})$ , entonces las ecuaciones anteriores se reducen a:

$$\begin{aligned} f_0 + \cdots + f_{n^2-1} &= f_n + \cdots + f_{2n-1} \\ &= \cdots \\ &= f_{(n-1)n} + \cdots + f_{n^2-1}. \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} f_0 f_n &= \cdots = f_{(n-2)n} f_{(n-1)n} = 0 \\ &\vdots \\ f_{n-1} f_{2n-1} &= \cdots = f_{(n-1)n-1} f_{n^2-1} = 0 \end{aligned}$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones se obtiene fácilmente que

$$\mathbf{f} = \frac{\sqrt{n}}{n} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{\sigma(0)} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{\sigma(n-1)} \end{pmatrix} = \mathbf{q}_{\sigma(0)\dots\sigma(n-1)}^2 \in \mathbb{R}^{n^2},$$

donde  $\sigma$  es una permutación de  $\{0, \dots, n-1\}$  y  $\{\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_{n-1}\}$  es la base canónica de  $\mathbb{R}^n$ . Desde luego, si  $0 \leq r \neq s \leq n-1$ , entonces  $\sigma(r) \neq \sigma(s)$  y

$$\sum_{r=0}^{n-1} \sigma(r) = \sum_{r=0}^{n-1} r = \frac{n}{2}(n-1),$$

así que los índices  $\sigma(0), \dots, \sigma(n-1)$  satisfacen las condiciones requeridas.

Supongamos ahora que nuestra afirmación es cierta para las longitudes  $2, 3, \dots, l-1$ . La comprobaremos para la longitud  $l$ . Consideremos una función  $f$  normalizada sobre las cadenas de longitud  $l$  y supongamos que  $\gamma_{n,l}(f) = n$ . Entonces, por inducción,

$$\widehat{\mathbf{f}} = \mathbf{f}' = \mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l} \in \mathbb{R}^{n^{l-1}},$$

para ciertos índices  $0 \leq i_0, \dots, i_{n-1} \leq n^{l-2} - 1$ , con la propiedad de que  $d(i_r, i_s) = l-1$  para  $r \neq s$  y  $\sum_{r=0}^{n-1} i_r = \frac{n}{2}(n^{l-2} - 1)$ . De la definición de  $\widehat{\mathbf{f}} = \mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l}$ , se sigue que sus componentes no nulas están en las filas  $kn^{l-2} + i_k$  ( $0 \leq k \leq n-1$ ), cuya expresión, para cualquier  $k$  es:

$$f_{kn^{l-2} + i_k} + f_{n^{l-1} + (kn^{l-2} + i_k)} + \dots + f_{(n-1)n^{l-1} + (kn^{l-2} + i_k)} = \frac{\sqrt{n}}{n}.$$

Por otra parte, los sistemas de ecuaciones anteriores, aplicados a  $\widehat{\mathbf{f}} = \mathbf{q}_{i_0, \dots, i_{n-1}}^{n,l}$  se reducen a:

$$\begin{aligned} f_{i_0} + f_{n^{l-2} + i_1} + \dots + f_{(n-1)n^{l-2} + i_{n-1}} &= \dots = \\ &= f_{(n-1)n^{l-1} + i_0} + f_{(n-1)n^{l-1} + (n^{l-2} + i_1)} + \dots + f_{(n-1)n^{l-1} + ((n-1)n^{l-2} + i_{n-1})} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} f_{i_0} f_{n^{l-1} + i_0} &= \dots = \\ &= f_{i_0} f_{(n-1)n^{l-1} + i_0} = \dots = \\ &\vdots \\ &= f_{(n-2)n^{l-1} + i_0} f_{(n-1)n^{l-1} + i_0} = \dots = 0 \\ &\vdots \\ f_{(n-1)n^{l-2} + i_{n-1}} f_{n^{l-1} + ((n-1)n^{l-2} + i_{n-1})} &= \dots = \\ &= f_{(n-1)n^{l-2} + i_{n-1}} f_{(n-1)n^{l-1} + ((n-1)n^{l-2} + i_{n-1})} = \dots = \\ &= f_{(n-2)n^{l-1} + ((n-1)n^{l-2} + i_{n-1})} f_{(n-1)n^{l-1} + ((n-1)n^{l-2} + i_{n-1})} = 0 \end{aligned}$$

Ahora, denotando por  $x_j^k = f_{jn^{l-1} + kn^{l-2} + i_k}$  para cualesquiera  $0 \leq j, k \leq n-1$ , los sistemas anteriores de ecuaciones equivalen a:

$$(a) \begin{cases} x_0^0 + x_1^0 + \dots + x_{n-1}^0 = \frac{\sqrt{n}}{n} \\ \vdots \\ x_0^{n-1} + x_1^{n-1} + \dots + x_{n-1}^{n-1} = \frac{\sqrt{n}}{n} \end{cases}$$



donde  $\widehat{i}_j = pn^{l-2} + i_p$  para algunos índices  $i_p$ , de tal forma que los índices  $0 \leq \widehat{i}_0, \dots, \widehat{i}_{n-1} \leq n^{l-1} - 1$  son distintos dos a dos y además

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{n-1} \widehat{i}_r &= \sum_{r=0}^{n-1} i_r + \sum_{r=0}^{n-1} rn^{l-2} \\ &= \frac{n}{2}(n^{l-2} - 1) + n^{l-2} \left( \frac{n(n-1)}{2} \right) \\ &= \frac{n}{2}(n^{l-1} - 1) \end{aligned}$$

y

$$d(\widehat{i}_j, \widehat{i}_k) = d(pn^{l-2} + i_p, qn^{l-2} + i_q) = 1 + d(i_p, i_q) = 1 + (l-1) = l.$$

Esto completa la demostración.  $\square$

Interpretemos brevemente este resultado. Lo haremos en el caso binario, por simplicidad. En este caso, el valor máximo de la epistasia normalizada es  $1 - \frac{1}{2^{l-1}}$  y ese valor lo alcanzan las funciones de ajuste que son nulas siempre, excepto para dos puntos con distancia Hamming máxima entre ellos (por ejemplo  $0 \dots 0$  y  $1 \dots 1$ ) y con el mismo valor de adecuación. Tal y como se explica en [16] aunque a primera vista parezca extraño que esas funciones sean más difíciles de optimizar que la función de Dirac (que tiene un único pico en  $1 \dots 1$ , por ejemplo), sin embargo, se debe tener en cuenta que el máximo  $m$  de la función de Dirac es más estable que los dos máximos  $m_1$ ,  $m_2$  de “nuestras” funciones, en el sentido siguiente.

Una vez que se halla el máximo  $m$ , el AG continuará seleccionándolo con una probabilidad alta, debido a su alta adecuación. Combinado con otros puntos, por ejemplo por medio de un cruce, se perderá con bastante probabilidad. Pero, por otra parte, el cruce casi siempre utilizará dos copias de  $m$ , de nuevo debido a su alta idoneidad, y esto no sólo le permitirá sobrevivir, sino que incluso aumentará su proporción en la población.

En el caso de “nuestras” funciones, las cosas son algo distintas ya que  $m_1$  y  $m_2$  tienen igual probabilidad de ser seleccionadas, desde el momento en que se encuentren en la población. Si sólo se encuentra  $m_1$  en la población inicial (o mediante búsqueda aleatoria) y si  $m_2$  tarda “un tiempo suficientemente largo” en ser hallada, el máximo  $m_1$  tenderá a dominar, de forma similar a la función de Dirac. No obstante, si  $m_2$  está presente en igual proporción

que  $m_1$ , las copias de ambos puntos tendrán la misma probabilidad de ser seleccionados (probabilidad, que por otra parte es alta). El cruce entre ambos los destruirá, dirigiendo al AG lejos de esos máximos.

Desde luego, en las situaciones prácticas, esto es, cuando  $l$  es relativamente grande, ambas funciones tienen la misma epistasis normalizada (aproximadamente igual a 1), y el resultado anterior es de interés principalmente teórico.

En [16] se analiza el comportamiento de algunas funciones Royal Road, comparándolas con las funciones del teorema 4.13. Se calcula su epistasis normalizada y se observa que estas últimas toman los valores más altos. Concretamente, se considera la generalización de las funciones de Forrest y Mitchell dada, en [22], a partir de los esquemas

$$H_i^{n,m} = \#^{(2^m i)} 1^{(2^m)} \#^{(2^n - 2^m(i+1))},$$

que se definen, para cualesquiera enteros positivos  $n \leq m$  y  $0 \leq i \leq 2^{n-m} - 1$ . Entonces, se denota por  $R_m^n$  la función de ajuste que actúa, sobre cadenas  $s$  de longitud  $2^n$ , por  $R_m^n(s) = 2^m c_{n,m}(s)$ , donde  $c_{n,m}(s)$  representa el número de esquemas  $H_i^{n,m}$  a los cuales pertenece  $s$ . En particular,  $R_0^n$  es una función lineal, y  $R_n^n$  es la función de Dirac con un único pico en  $11 \dots 11$ .

Como medida de la dificultad, que tiene el algoritmo para optimizar las funciones, se considera, en [16], el número medio de generaciones,  $G(f)$ , necesarias para que se cumplan las tres condiciones siguientes:

- al menos un elemento de la población tenga idoneidad máxima,
- la adecuación media de la población sea superior al 90% de la idoneidad máxima,
- la desviación estándar tenga un valor menor o igual que el 5% de la media.

La siguiente tabla muestra los resultados, obtenidos experimentalmente, al trabajar con cadenas binarias de longitud  $l = 4$ , y con una población de tamaño 200:

$f$	$G(f)$	$\varepsilon^*(f)$
$R_0^2$	7	0.00
$R_1^2$	8	0.20
$R_2^2$	13	0.69
$c$	20	0.87

( $c$  denota la función que es nula en todo punto excepto en 0000 y 1111).

# Capítulo 5

## Funciones de peso

### 5.1 Epistasis en las funciones de peso

Como su título indica, en este capítulo nos restringiremos al análisis de las funciones de peso. Las funciones de peso, también conocidas en la bibliografía como “*unitation functions*” son aquellas funciones de ajuste (definidas sobre alfabetos binarios) cuyo valor sobre una cadena depende sólo del número de bits de la cadena iguales a 1, y no de la posición de los mismos.<sup>1</sup>

Así las cosas, sobre cadenas binarias de longitud  $l$ , este tipo de funciones puede tomar sólo (y como máximo)  $l+1$  valores diferentes, en contraste con los  $2^l$  valores que toma, en general, una función de ajuste arbitraria. Esta reducción en el número de valores hace a las funciones de peso más fáciles de estudiar. De hecho, Deb y Goldberg han analizado con éxito su decepción en [5]. Nosotros nos centraremos ahora en el cálculo explícito de su epistasis.

Para una cadena  $s = s_{l-1} \dots s_0 \in \Omega = \{0, 1\}^l$ , denotemos por  $u(s)$  la distancia Hamming de  $s$  a la cadena nula, es decir,  $u(s)$  es el número de bits de la cadena con valor 1. Es claro entonces que, si  $f$  denota una función de peso, definida sobre  $\Omega$ ,

$$f(s_{l-1}, \dots, s_0) = f(u(s)) = f(0 \dots 0 \overbrace{1 \dots 1}^u) = \dots = f(\overbrace{1 \dots 1}^u 0 \dots 0)$$

---

<sup>1</sup>En el tercer epígrafe se generaliza este concepto para alfabetos no binarios

Situados en este contexto, consideremos el vector

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} f(0\dots 00) \\ f(0\dots 01) \\ f(0\dots 11) \\ \vdots \\ f(01\dots 1) \\ f(11\dots 1) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{l+1},$$

que denotaremos también por

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \\ \vdots \\ h_l \end{pmatrix}.$$

Claramente la función  $f$  está completamente determinada por el vector  $\mathbf{h}$ , por lo que tiene sentido intentar hallar una matriz  $\mathbf{B}_l$  que verifique

$${}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_l\mathbf{f} = {}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_l\mathbf{h},$$

pues entonces, la definición de epistasis normalizada  $\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{1}{2^l} \frac{{}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_l\mathbf{f}}{\|\mathbf{f}\|^2}$  se simplifica a

$$\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{1}{2^l} \frac{{}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_l\mathbf{h}}{\sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p^2}$$

Para hallar la matriz  $\mathbf{B}_l$ , definimos inductivamente para cualquier entero positivo  $l > 1$  la matriz  $2^l \times (l+1)$ -dimensional  $\mathbf{A}_l$  por

$$\mathbf{A}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix}$$

donde, como siempre,  $\mathbf{0}_l$  denota el vector nulo en  $\mathbb{R}^{2^l}$  y  $\mathbf{A}_1$  es la matriz identidad dos-dimensional. Es fácil ver entonces que  $\mathbf{f} = \mathbf{A}_l\mathbf{h}$

De esta última relación, se sigue directamente que  $\mathbf{B}_l = {}^t\mathbf{A}_l\mathbf{G}_l\mathbf{A}_l$ . Usaremos esta relación para calcular  $\mathbf{B}_l = (b_{pq}^l)$  explícitamente. Para ello, debemos

hacer notar, que si denotamos por  $\mathbf{O}_l$  la matriz  $2^l \times (l+1)$ -dimensional, con todas sus componentes nulas, entonces, podemos reescribir  $\mathbf{A}_l$  en la forma:

$$\mathbf{A}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{O}_{l-1} \\ \mathbf{O}_{l-1} & \mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix}$$

y, empleando la fórmula de inducción para  $\mathbf{G}_l$ , vista en el capítulo 3,

$$\mathbf{G}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1} \\ \mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1} \end{pmatrix},$$

nosotros obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_l &= {}^t \mathbf{A}_l \mathbf{G}_l \mathbf{A}_l \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t \mathbf{0}_l \\ {}^t \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t \mathbf{A}_{l-1} (\mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1}) \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}_{l-1} (\mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1}) \mathbf{A}_{l-1} \\ {}^t \mathbf{A}_{l-1} (\mathbf{G}_{l-1} - \mathbf{U}_{l-1}) \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}_{l-1} (\mathbf{G}_{l-1} + \mathbf{U}_{l-1}) \mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{B}'_l + \mathbf{B}''_l \end{aligned}$$

con

$$\mathbf{B}'_l = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t \mathbf{0}_l \\ {}^t \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{l-1} \mathbf{A}_{l-1} & -{}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{l-1} \mathbf{A}_{l-1} \\ -{}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{l-1} \mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix}$$

y

$$\mathbf{B}''_l = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t \mathbf{0}_l \\ {}^t \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{l-1} & \mathbf{B}_{l-1} \\ \mathbf{B}_{l-1} & \mathbf{B}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix}.$$

Para poder hallar la matriz  $\mathbf{B}'_l$  necesitamos:

**Lema 5.1.-** Para cualquier entero positivo  $l$ , se define

$$\mathbf{C}_l = (c_{pq}) = {}^t \mathbf{A}_l \mathbf{U}_l \mathbf{A}_l.$$

Entonces, para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq l$ , nosotros tenemos

$$c_{pq} = \binom{l}{p} \binom{l}{q}.$$

**Demostración.-** Argumentemos por inducción en  $l$ . Para  $l = 1$ , la matriz  $\mathbf{A}_l$  es, como ya hemos comentado, la matriz identidad dos-dimensional, entonces

la afirmación es cierta. Supongamos que lo es también para las longitudes  $1, \dots, l-1$  y la probaremos para la longitud  $l$ . Para esto, introducimos el vector

$$\mathbf{v}_l = \begin{pmatrix} \binom{l}{0} \\ \vdots \\ \binom{l}{l} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{l+1}$$

Entonces, se verifica:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_l &= {}^t\mathbf{A}_l \mathbf{U}_l \mathbf{A}_l \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t\mathbf{A}_{l-1} & {}^t\mathbf{O}_{l-1} \\ {}^t\mathbf{O}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{U}_{l-1} \\ \mathbf{U}_{l-1} & \mathbf{U}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{O}_{l-1} \\ \mathbf{O}_{l-1} & \mathbf{A}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{l-1} & \mathbf{C}_{l-1} \\ \mathbf{C}_{l-1} & \mathbf{C}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{v}_{l-1} \end{pmatrix} ({}^t\mathbf{v}_{l-1}, {}^t\mathbf{v}_{l-1}) \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \end{aligned}$$

y como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{v}_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \binom{l-1}{0} \\ \binom{l-1}{1} + \binom{l-1}{0} \\ \vdots \\ \binom{l-1}{l-1} + \binom{l-1}{l-2} \\ \binom{l-1}{l-1} \end{pmatrix} = \mathbf{v}_l$$

encontramos que  $\mathbf{C}_l = \mathbf{v}_l \cdot {}^t\mathbf{v}_l$ , lo que prueba la afirmación.  $\square$

Usando el resultado anterior, podemos escribir

$$\begin{aligned} \mathbf{B}'_l &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{l-1} & -\mathbf{C}_{l-1} \\ -\mathbf{C}_{l-1} & \mathbf{C}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ -\mathbf{v}_{l-1} \end{pmatrix} ({}^t\mathbf{v}_{l-1}, -{}^t\mathbf{v}_{l-1}) \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

y como se puede comprobar fácilmente que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ -\mathbf{v}_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \binom{l}{0} \\ \binom{l}{1} \frac{l-2}{l} \\ \vdots \\ \binom{l}{p} \frac{l-2p}{l} \\ \vdots \\ -\binom{l}{l} \end{pmatrix}$$

entonces encontramos que

$$\mathbf{B}'_l = (b'_{l,pq}) = \left( \binom{l}{p} \binom{l}{q} \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right)$$

El siguiente resultado calcula la matriz  $\mathbf{B}''_l = (b''_{l,pq})$  :

**Proposición 5.2.-** Las componentes  $b''_{l,pq}$  de la matriz  $\mathbf{B}''_l$  están determinadas por:

1.  $b''_{l,00} = b_{00}^{l-1}$ ,  $b''_{l,uu} = b_{l-1,l-1}^{l-1}$ ,  $b''_{l,0l} = b_{0,l-1}^{l-1}$ ;
2. si  $1 \leq q \leq l-1$ , entonces  $b''_{l,0q} = b_{0q}^{l-1} + b_{0,q-1}^{l-1}$  y  $b''_{l,lq} = b_{l-1,q}^{l-1} + b_{l-1,q-1}^{l-1}$ ;
3. si  $1 \leq p, q \leq l-1$ , entonces  $b''_{l,pq} = b_{pq}^{l-1} + b_{p,q-1}^{l-1} + b_{p-1,q}^{l-1} + b_{p-1,q-1}^{l-1}$ .

**Demostración.-** Las igualdades anteriores se obtienen de calcular explícitamente

$$\mathbf{B}''_l = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & {}^t\mathbf{0}_l \\ {}^t\mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{l-1} & \mathbf{B}_{l-1} \\ \mathbf{B}_{l-1} & \mathbf{B}_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0}_l \\ \mathbf{0}_l & \mathbf{I}_l \end{pmatrix}.$$

De los resultados anteriores y del hecho de que  $\mathbf{B}_l = \mathbf{B}'_l + \mathbf{B}''_l$ , se sigue ahora trivialmente:

**Corolario 5.3.-** Las componentes  $b^l_{pq}$  de la matriz  $\mathbf{B}_l$  están determinadas por:

1.  $b^l_{00} = b^l_{ll} = l + 1$  resp.  $b^l_{0l} = b^l_{l0} = 1 - l$ ;

2. si  $1 \leq q \leq l-1$ , entonces

$$b_{0q}^l = b_{0q}^{l-1} + b_{0,q-1}^{l-1} + \binom{l}{q} \frac{l-2q}{l}$$

resp.

$$b_{lq}^l = b_{l-1,q}^{l-1} + b_{l-1,q-1}^{l-1} - \binom{l}{q} \frac{l-2q}{l};$$

3. si  $1 \leq p, q \leq l-1$ , entonces

$$b_{pq}^l = b_{p,q}^{l-1} + b_{p-1,q}^{l-1} + b_{p,q-1}^{l-1} + b_{p-1,q-1}^{l-1} + \binom{l}{p} \binom{l}{q} \frac{l-2p}{l} \frac{l-2q}{l}.$$

Podemos probar entonces:

**Teorema 5.4.-** Para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq l$ , la componente  $b_{pq}^l$  de la matriz  $\mathbf{B}_l$  está dada por

$$b_{pq}^l = \binom{l}{p} \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right).$$

**Demostración.-** Para  $b_{00}^l$ ,  $b_{0l}^l$ ,  $b_{l0}^l$ , y  $b_{ll}^l$ , la comprobación es directa de las expresiones del corolario anterior. El resultado sobre los elementos de la primera fila de  $\mathbf{B}_l$ , con  $1 \leq q \leq l-1$ , se obtiene fijando  $p = 0$  y argumentando por inducción en  $l$ . En el caso  $l = 1$  la afirmación es trivialmente cierta. Supongamos que se verifica para las longitudes  $1, 2, \dots, l-1$  y comprobémosla para  $l$ .

Por el corolario anterior:

$$\begin{aligned} b_{0q}^l &= b_{0q}^{l-1} + b_{0,q-1}^{l-1} + \binom{l}{q} \frac{l-2q}{l} \\ &= \binom{l-1}{q} (l-2q) + \binom{l-1}{q-1} (l-2q+2) + \binom{l}{q} \frac{l-2q}{l} \\ &= \left\{ \binom{l-1}{q} + \binom{l-1}{q-1} \right\} (l-2q) + \binom{l}{q} \left( \frac{2q}{l} + \frac{l-2q}{l} \right) \\ &= \binom{l}{q} (1+l-2q) \end{aligned}$$

La demostración para los elementos de la forma  $b_{iq}^l$ , con  $1 \leq q \leq l-1$ , es análoga a la anterior.

Por último, consideremos los elementos  $b_{pq}^l$  de la matriz  $\mathbf{B}_l$ , con  $1 \leq p, q \leq l-1$ . De nuevo un argumento por inducción en  $l$  nos proporcionará el resultado deseado. En efecto, para  $l=2$ ,  $b_{11}^2 = 4$ , y la afirmación es cierta. Supuesto que se cumple también para  $2, 3, \dots, l-1$ , la demostramos para  $l$ . De la expresión del apartado 3 del corolario 5.3, se tiene que

$$\begin{aligned} b_{pq}^l &= \binom{l-1}{p} \binom{l-1}{q} + \binom{l-1}{p} \binom{l-1}{q} \frac{(l-1-2p)(l-1-2q)}{l-1} \\ &+ \binom{l-1}{p-1} \binom{l-1}{q} + \binom{l-1}{p-1} \binom{l-1}{q} \frac{(l-2p+1)(l-1-2q)}{l-1} \\ &+ \binom{l-1}{p} \binom{l-1}{q-1} + \binom{l-1}{p} \binom{l-1}{q-1} \frac{(l-1-2p)(l-2q+1)}{l-1} \\ &+ \binom{l-1}{p-1} \binom{l-1}{q-1} + \binom{l-1}{p-1} \binom{l-1}{q-1} \frac{(l-2p+1)(l-2q+1)}{l-1} \\ &+ \binom{l}{p} \binom{l}{q} \frac{(l-2p)(l-2q)}{l^2} \end{aligned}$$

y así, agrupando los términos convenientemente, se llega a

$$\begin{aligned} b_{pq}^l &= \binom{l}{p} \binom{l}{q} + \binom{l}{p} \binom{l}{q} \frac{(l-2p)(l-2q)}{l-1} + \binom{l}{p} \binom{l}{q} \frac{(l-2p)(l-2q)}{l^2} \\ &+ \frac{l-2p}{l-1} \binom{l}{p} \left\{ \binom{l-1}{q-1} - \binom{l-1}{q} \right\} + \frac{l-2q}{l-1} \binom{l}{q} \left\{ \binom{l-1}{p-1} - \binom{l-1}{p} \right\} \\ &+ \frac{1}{l-1} \left\{ \binom{l-1}{q-1} - \binom{l-1}{q} \right\} \left\{ \binom{l-1}{p-1} - \binom{l-1}{p} \right\} \\ &= \binom{l}{p} \binom{l}{q} + \binom{l}{p} \binom{l}{q} (l-2p)(l-2q) \left\{ \frac{1}{l-1} - \frac{2}{l(l-1)} + \frac{1}{(l-1)l^2} + \frac{1}{l^2} \right\} \\ &= \binom{l}{p} \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) \end{aligned}$$

como queríamos.  $\square$

**Nota.** Se puede obtener una prueba más directa del teorema anterior que se basa en los siguientes hechos:

La igualdad del punto 3 del corolario 5.3 se puede reescribir así:

$$b_{pq}^l = \sum_{i,j=0}^1 b_{p-i,q-j}^{l-1} + \left( \binom{l-1}{p} - \binom{l-1}{p-1} \right) \left( \binom{l-1}{q} - \binom{l-1}{q-1} \right).$$

Iterando se obtiene que

$$b_{pq}^l = \binom{l}{p} \binom{l}{q} b_{00}^0 + \sum_{r=0}^{l-1} B_{rp}^l B_{rq}^l$$

donde

$$B_{rp}^l = A_{rp}^l - A_{r,p-1}^l,$$

con

$$A_{rp}^l = \sum_{i=0}^r \binom{r}{i} \binom{l-r-1}{p-i}$$

Entonces, es fácil ver que, para cualquier  $r < l$ , tenemos

$$A_{rp}^l = \binom{l-1}{p},$$

de lo cual se sigue que

$$B_{rp}^l = \binom{l-1}{p} - \binom{l-1}{p-1}$$

lo que completa la afirmación.

Nótese que los resultados anteriores implican que  $\mathbf{B}_l$  es simétrica y que  $b_{pq}^l = b_{l-p,l-q}^l$ , para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq l$ .

## 5.2 Valores extremos de la epistasis normalizada

Como ya se ha indicado, para cualquier función de ajuste  $f$ , valuada positiva, sobre cadenas binarias de longitud  $l$ ,

$$0 \leq \varepsilon_l^*(f) \leq 1 - \frac{1}{2^{l-1}}.$$

En este epígrafe nos proponemos analizar con un poco más de detalle esos valores extremos, en el caso particular en el que la función de ajuste sea una función de peso. Por lo que respecta al valor máximo, también hemos apuntado ya (ver epígrafe 3.3 de esta memoria), que, la función  $f$  con vector asociado

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix},$$

es tal que  $\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{1}{2^{l-1}}$ , lo que demuestra que el valor máximo de la epistasis normalizada se alcanza sobre las funciones de peso.

Estudiemos ahora el comportamiento de este tipo de funciones en cuanto a la epistasis normalizada mínima. Como consecuencia del estudio realizado en la sección anterior, la expresión de la epistasis normalizada, sobre funciones de peso, se puede formular en términos de la matriz  $\mathbf{B}_l$ , determinada en el teorema 5.4, así:

$$\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{1}{2^l} \frac{{}^t \mathbf{h} \mathbf{B}_l \mathbf{h}}{\|\mathbf{f}\|^2}$$

expresión que, a su vez, se puede reescribir en la forma

$$\varepsilon_l^*(f) = 1 - \frac{(l+1)}{2^l} + \frac{1}{2^{l-1}} \frac{\frac{(l+1)}{2} \|\mathbf{f}\|^2 - \frac{1}{2} {}^t \mathbf{h} \mathbf{B}_l \mathbf{h}}{\|\mathbf{f}\|^2},$$

y teniendo en cuenta que

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p^2,$$

resulta:

$$\varepsilon_i^*(f) = 1 - \frac{(l+1)}{2^l} + \frac{1}{2^{l-1}} \frac{H(h_0, \dots, h_l)}{\sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p^2}$$

donde

$$H(h_0, \dots, h_l) = \frac{1}{2} \sum_{p=0}^l \left( (l+1) \binom{l}{p} - b_{pp}^l \right) h_p^2 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} b_{pq}^l h_p h_q$$

En consecuencia, para hallar los valores extremos de la epistasis normalizada, será suficiente analizar los de la función  $H$ , con la restricción  $\|f\| = 1$ . Para ello, intentaremos encontrar los puntos críticos de la función

$$F(h_0, \dots, h_l, \lambda) = H(h_0, \dots, h_l) + \lambda \left( \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p^2 - 1 \right)$$

utilizando el método de los multiplicadores de Lagrange. Ahora bien, las soluciones del sistema homogéneo de  $(l+1)$ -ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial h_0} &= 2\lambda h_0 - \sum_{q=1}^l b_{0q}^l h_q = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial h_1} &= \left( \binom{l}{1} (l+1+2\lambda) - b_{11}^l \right) h_1 - \sum_{\substack{q=0 \\ q \neq 1}}^l b_{1q}^l h_q = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial F}{\partial h_p} &= \left( \binom{l}{p} (l+1+2\lambda) - b_{pp}^l \right) h_p - \sum_{\substack{q=0 \\ q \neq p}}^l b_{pq}^l h_q = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial F}{\partial h_l} &= 2\lambda h_l - \sum_{p=0}^{l-1} b_{pl}^l h_p = 0 \end{aligned}$$

no son más que los autovectores  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{l+1}$  asociados a los autovalores de la matriz  $\tilde{\mathbf{B}}_l$  cuyos elementos  $\tilde{b}_{pq}^l$  verifican, para cualesquiera  $p, q$  tales que  $0 \leq p, q \leq l$ ,

$$\tilde{b}_{pq}^l = \frac{b_{pq}^l}{\binom{l}{p}}.$$

(Nosotros estamos interesados en aquellos autovectores con componentes  $h_i \geq 0, \forall i$ .)

Para obtener los autovalores de esta matriz  $\tilde{\mathbf{B}}_l$  nos será de utilidad el siguiente resultado:

**Lema 5.5.-** Para cualquier entero positivo  $l$ , se verifica  $\tilde{\mathbf{B}}_l^2 = 2^l \tilde{\mathbf{B}}_l$ .

**Demostración.-** Denotemos por  $\tilde{b}_{pq}^{l2}$  el elemento genérico de la matriz  $\tilde{\mathbf{B}}_l^2$ , entonces

$$\begin{aligned} \tilde{b}_{pq}^{l2} &= \sum_{k=0}^l \tilde{b}_{pk}^l \tilde{b}_{kq}^l \\ &= \sum_{k=0}^l \binom{l}{k} \binom{l}{q} \left(1 + \frac{(l-2p)(l-2k)}{l}\right) \left(1 + \frac{(l-2k)(l-2q)}{l}\right) \\ &= \binom{l}{q} \sum_{k=0}^l \binom{l}{k} (1 + 2l - 2p - 2q + (l-2p)(l-2q)) \\ &\quad + \binom{l}{q} \sum_{k=0}^l k \binom{l}{k} \left(-\frac{2}{l}(2l-2p-2q) - 4\frac{(l-2p)(l-2q)}{l}\right) \\ &\quad + \binom{l}{q} \sum_{k=0}^l k^2 \binom{l}{k} 4\frac{(l-2p)(l-2q)}{l^2} \end{aligned}$$

Ahora, utilizando que

$$\sum_{k=0}^l k \binom{l}{k} = l2^{l-1}$$

y que

$$\sum_{k=0}^l k^2 \binom{l}{k} = l(l+1)2^{l-2}$$

un sencillo cálculo muestra que:

$$\widetilde{b}_{pq}^l = 2^l \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) = 2^l \cdot \widetilde{b}_{pq}^l$$

como queríamos.  $\square$

Este lema implica en particular que los autovalores de  $\widetilde{\mathbf{B}}_l$  son 0 y  $2^l$ . En efecto, si  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{l+1}$  es un autovector, asociado al autovalor  $\alpha$  de  $\widetilde{\mathbf{B}}_l$ , es decir,  $\widetilde{\mathbf{B}}_l \mathbf{v} = \alpha \mathbf{v}$ , entonces

$$2^l \alpha \mathbf{v} = 2^l \widetilde{\mathbf{B}}_l \mathbf{v} = \widetilde{\mathbf{B}}_l^2 \mathbf{v} = \alpha^2 \mathbf{v},$$

y por tanto,  $\alpha$  debe ser 0 o  $2^l$ , como habíamos afirmado.

Calculemos ahora el rango de  $\widetilde{\mathbf{B}}_l$ .

**Lema 5.6.-** Para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\text{rang}(\widetilde{\mathbf{B}}_l) = 2$ .

**Demostración.-** En primer lugar nótese que, de la relación existente entre los elementos de la matriz  $\widetilde{\mathbf{B}}_l$  y los de la matriz  $\mathbf{B}_l$ , se sigue directamente que  $\text{rang}(\widetilde{\mathbf{B}}_l) = \text{rang}(\mathbf{B}_l)$ . Además, para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq l$ ,

$$\begin{aligned} b_{pq}^l &= \binom{l}{p} \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) \\ &= \binom{l}{p} (1-p) \binom{l}{q} (l+1-2q) + \binom{l}{p} \frac{p}{l} \binom{l}{1} \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2)(l-2q)}{l} \right) \\ &= \alpha_p b_{0q}^l + \beta_p b_{1q}^l \end{aligned}$$

con  $\alpha_p = \binom{l}{p} (1-p)$  y  $\beta_p = \binom{l}{p} \frac{p}{l}$ , lo que prueba que  $\text{rang}(\mathbf{B}_l) = 2$ .  $\square$

Si denotamos por  $W_0^l$  y  $W_1^l$  los espacios de autovectores en  $\mathbb{R}^{l+1}$  correspondientes a los autovalores 0 y  $2^l$ , respectivamente, de  $\widetilde{\mathbf{B}}_l$ , entonces  $\mathbb{R}^{l+1} = W_0^l \oplus W_1^l$ , y como  $W_0^l = \ker(\widetilde{\mathbf{B}}_l)$ , respectivamente  $W_1^l = \text{Im}(\widetilde{\mathbf{B}}_l)$ , entonces es claro que  $\dim(W_0^l) = l-1$  y  $\dim(W_1^l) = 2$ . Además, nosotros tenemos:

**Proposición 5.7.-** Los vectores

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} l \\ l-1 \\ \vdots \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ y } \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -(l-1) \\ \vdots \\ -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

constituyen una base para  $W_1^l$ .

**Demostración.-** Como  $\mathbf{v}_1$  y  $\mathbf{v}_2$  son linealmente independientes, será suficiente demostrar que son elementos de  $W_1^l$ . En efecto:

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{B}}_l \mathbf{v}_1)_p &= \sum_{q=0}^l \tilde{b}_{pq}(l-q) = \sum_{q=0}^l \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) (l-q) \\ &= \sum_{q=0}^l \binom{l}{q} (l^2 + l - 2pl) + \sum_{q=0}^l q \binom{l}{q} (6p - 3l - 1) + \sum_{q=0}^l q^2 \binom{l}{q} \left( 2 - \frac{4p}{l} \right) \\ &= 2^l(l-p) = 2^l(\mathbf{v}_1)_p, \end{aligned}$$

para  $0 \leq p \leq l$ .

Un razonamiento análogo prueba que también  $\mathbf{v}_2 \in W_1^l$ .  $\square$

Ahora, podemos probar el siguiente resultado:

**Proposición 5.8.-** Sea  $f$  una función de peso, valuada positiva. Entonces,  $f$  tiene epistasia cero si, y sólo si, su vector asociado  $\mathbf{h}$  es

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} lh_{l-1} - (l-1)h_l \\ \vdots \\ 2h_{l-1} - h_l \\ h_{l-1} \\ h_l \end{pmatrix}$$

con  $h_l < \frac{l}{l-1}h_{l-1}$ .

**Demostración.-** Será suficiente comprobar que  ${}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h} = 2^l \|\mathbf{f}\|^2$ . Para ello desarrollamos, en primer lugar, la expresión de  $\|\mathbf{f}\|^2$ :

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{f}\|^2 &= \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} ((l-p)h_{l-1} - (l-p-1)h_l)^2 \\
&= h_{l-1}^2 \left( l^2 \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} - 2l \sum_{p=0}^l p \binom{l}{p} + \sum_{p=0}^l p^2 \binom{l}{p} \right) \\
&\quad + h_l^2 \left( (l-1)^2 \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} - 2(l-1) \sum_{p=0}^l p \binom{l}{p} + \sum_{p=0}^l p^2 \binom{l}{p} \right) \\
&\quad - 2h_{l-1}h_l \left( l(l-1) \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} + (1-2l) \sum_{p=0}^l p \binom{l}{p} + \sum_{p=0}^l p^2 \binom{l}{p} \right) \\
&= h_{l-1}^2 \left( 2^l \frac{l(l+1)}{4} \right) + h_l^2 \left( 2^l \frac{l^2 - 3l + 4}{4} \right) + h_{l-1}h_l \left( 2^l \frac{l(1-l)}{2} \right)
\end{aligned}$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned}
{}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h} &= \sum_{p=0}^l b_{pp}^l h_p^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l h_p h_q \\
&= \sum_{p=0}^l b_{pp}^l ((l-p)h_{l-1} - (l-p-1)h_l)^2 \\
&\quad + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l ((l-p)h_{l-1} - (l-p-1)h_l) ((l-q)h_{l-1} - (l-q-1)h_l) \\
&= h_{l-1}^2 \left( \sum_{p=0}^l b_{pp}^l (l-p)^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l (l-p)(l-q) \right) \\
&\quad + h_l^2 \left( \sum_{p=0}^l b_{pp}^l (l-p-1)^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l (l-p-1)(l-q-1) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -h_{l-1}h_l \left\{ 2 \sum_{p=0}^l b_{pp}^l (l-p)(l-p-1) \right. \\
 & \left. + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l ((l-p-1)(l-q) + (l-p)(l-q-1)) \right\}
 \end{aligned}$$

Por tanto, para demostrar la proposición bastará comparar los coeficientes de  $h_{l-1}^2$ ,  $h_l^2$  y  $h_l h_{l-1}$  en  $\|\mathbf{f}\|^2$  y en  ${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_l\mathbf{h}$ .

El coeficiente de  $h_{l-1}^2$  en  ${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_l\mathbf{h}$  es:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{p=0}^l b_{pp}^l (l-p)^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l b_{pq}^l (l-p)(l-q) \\
 = & \sum_{p=0}^l \binom{l}{p}^2 (l-p)^2 \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) \\
 & + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}}^l \binom{l}{p} \binom{l}{q} (l-p)(l-q) \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) = \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} (l-p) F_{pq}
 \end{aligned}$$

Si fijamos el término  $p$ -ésimo, entonces:

$$\begin{aligned}
 F_{pq} &= \binom{l}{p} (l-p) \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) + \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l \binom{l}{q} (l-q) \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) \\
 = & \binom{l}{p} (l-p) \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) + l \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l \binom{l}{q} - \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l q \binom{l}{q} \\
 & + \frac{(l-2p)}{l} \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l \binom{l}{q} (l^2 - 3lq + 2q^2) \\
 = & \binom{l}{p} (l-p) \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) + l \left( 2^l - \binom{l}{p} \right) - \left( 2^l \frac{l}{2} - p \binom{l}{p} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(l-2p)}{l} \left( l^2 2^l - 3l \left( 2^l \frac{l}{2} - p \binom{l}{p} \right) + 2 \left( 2^l \frac{l(l+1)}{4} - p^2 \binom{l}{p} \right) \right) \\
& = 2^l(l-p).
\end{aligned}$$

De manera análoga a la anterior, fijando el  $p$ -ésimo término de los coeficientes de  $h_l^2$  (respectivamente de  $h_l h_{l-1}$ ), se obtiene

$$\begin{aligned}
& \binom{l}{p} \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) (l-p-1) + \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) (l-q-1) \\
& = 2^l(l-p-1)
\end{aligned}$$

respectivamente,

$$\begin{aligned}
& 2 \binom{l}{p} (l-p)(l-p-1) \left( 1 + \frac{(l-2p)^2}{l} \right) \\
& - \sum_{\substack{q=0 \\ p \neq q}}^l \binom{l}{q} \left( 1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l} \right) ((l-p)(l-q-1) + (l-q)(l-p-1)) \\
& = 2^l \cdot 2(l-p)(l-p-1)
\end{aligned}$$

lo que completa la demostración.  $\square$

**Nota.** Se puede obtener el vector  $\mathbf{h}$  de la última proposición de una manera más sencilla. Basta tener en cuenta que, como se ha indicado ya (ver [25]), una función  $f$  tiene epistasis cero si, y sólo si,

$$f(s_{l-1}, \dots, s_0) = \sum_{i=0}^{\ell-1} g(i, s_i) = \sum_{i/s_i=0} g(i, 0) + \sum_{j/s_j=1} g(j, 1).$$

En particular, para cualesquiera  $0 \leq i \neq j \leq l-1$

$$f(0 \dots 0 \overset{i}{1} 0 \dots 0) = g(i, 1) + g(j, 0) + \sum_{k \neq i, j} g(k, 0)$$

$$f(0 \dots 0 \overset{j}{1} 0 \dots 0) = g(j, 1) + g(i, 0) + \sum_{k \neq i, j} g(k, 0).$$

Tal y como se apuntó al comienzo del capítulo, en el caso en el que  $f$  sea una función de peso, tenemos además

$$f(s_{l-1}, \dots, s_0) = f(u = u(s))$$

De las dos relaciones anteriores se deduce fácilmente que, si  $f$  es una función con epistasis nula, para cualesquiera  $0 \leq i \neq j \leq l-1$

$$f(0 \dots 0 \overset{i}{1} 0 \dots 0) = f(0 \dots 0 \overset{j}{1} 0 \dots 0)$$

y

$$g(i, 1) - g(i, 0) = g(j, 1) - g(j, 0)$$

es decir

$$g(i, 1) - g(i, 0) = \text{cte} = \beta$$

para  $i = 0, \dots, l-1$ .

En consecuencia,  $\varepsilon_i^*(f) = 0$  equivale a

$$f(s) = f(u(s)) = u(s)\beta + f(0 \dots 0)$$

y, como  $f(s) = f(u(s)) = h_{u(s)}$  con  $u(s) \in \{0, 1, \dots, l\}$ , entonces

$$h_l = l\beta + f(0 \dots 0) \text{ y } h_{l-1} = (l-1)\beta + f(0 \dots 0)$$

De ello se obtiene que

$$\beta = (h_l - h_{l-1}) \text{ y } f(0 \dots 0) = lh_{l-1} - (l-1)h_l.$$

Y por tanto, para  $0 \leq u \leq l$ :

$$h_u = u\beta + f(0 \dots 0) = (l-u)h_{l-1} - (l-u-1)h_l$$

como se quería demostrar.  $\square$

El último resultado de esta sección muestra que los autovectores asociados al autovalor cero no proporcionan soluciones no negativas:

**Proposición 5.9.-** Si  $\mathbf{h} = {}^t(h_0, \dots, h_l) \in W_0^l$ , entonces al menos una de

sus componentes es negativa.

**Demostración.** Si  $\mathbf{h} \in W_0^l$ , entonces  $\mathbf{h} \in \ker(\mathbf{B}_l)$  y el sistema homogéneo  $\mathbf{B}_l \mathbf{h} = \mathbf{0}$  se reduce a:

$$\begin{aligned} b_{00}^l h_0 + b_{01}^l h_1 &= - \sum_{q=2}^l b_{0q}^l h_q \\ b_{10}^l h_0 + b_{11}^l h_1 &= - \sum_{q=2}^l b_{1q}^l h_q, \end{aligned}$$

y, entonces

$$h_1 = -\frac{1}{4l} \sum_{q=2}^l (b_{00}^l b_{1q}^l - b_{01}^l b_{0q}^l) h_q.$$

Ahora bien, para todo  $2 \leq q \leq l$ ,

$$b_{00}^l b_{1q}^l - b_{01}^l b_{0q}^l = 4q \binom{l}{q},$$

y en consecuencia,

$$h_1 = -\frac{1}{l} \sum_{q=2}^l q \binom{l}{q} h_q = - \sum_{q=2}^l \binom{l-1}{q-1} h_q. \quad \square$$

Para concluir este epígrafe calcularemos explícitamente la epistasia sobre una función de peso concreta, para la cual analizamos también su decepción.

Nuestro ejemplo se basa en la función que Grefenstette considera en [13] como muestra de que, a pesar de no ser decepcionante es difícil de optimizar por un algoritmo genético. Dicha función está definida sobre el intervalo  $[0,1]$ , con una codificación binaria por medio de cadenas de longitud  $l$ , así:

$$\tilde{f}(x) = \begin{cases} 2^{l+1} & \text{si } x = 0 \\ x^2 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

En [13] el autor afirma que  $\tilde{f}$  no contiene decepción de ningún orden, por lo que siguiendo la terminología de Vose y Liepins (ver [31]) es una función

“fácil” para los AG’s. Sin embargo, esta función es casi imposible de optimizar. De hecho, Grefenstette afirma:

“...Supongamos que ejecutamos un AG standard sobre  $\tilde{f}$  con una población de tamaño polinomial en  $l$ . Si el óptimo no está en la población inicial, probablemente el algoritmo nunca lo encontrará. Desde luego, debería crearlo un cruce afortunado o una mutación múltiple muy afortunada”.

Para nuestros propósitos, modificaremos la función anterior para convertirla en la función de peso  $f$  definida sobre  $\{0,1\}^l$  por:

$$f(s) = f(u(s)) = \begin{cases} 2^{l+1} & \text{si } u(s) = 0 \\ \left(\frac{u(s)}{l}\right)^2 & \text{si } u(s) > 0 \end{cases}$$

Obviamente, la dificultad para hallar el óptimo global se mantiene. Además, comprobaremos que  $f$  no contiene decepción, mientras que su epistasia es alta.

Para determinar el valor de  $\varepsilon^*(f)$  necesitamos calcular  ${}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h}$  y  $\|\mathbf{f}\|$ . Ahora bien,

$$\begin{aligned} {}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h} &= \sum_{p,q} b_{pq}^l h_p h_q = \sum_{p,q} \binom{l}{p} \binom{l}{q} \left(1 + \frac{(l-2p)(l-2q)}{l}\right) h_p h_q \\ &= \left(\sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p\right)^2 + l \left(\sum_{p=0}^l \binom{l}{p} \left(\frac{l-2p}{l}\right) h_p\right)^2 \\ &= \delta^2 + l\sigma^2 \end{aligned}$$

con

$$\delta = \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p = 2^{l+1} + \frac{1}{l^2} \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} p^2 = 2^{l-2} \left(\frac{9l+1}{l}\right)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma &= \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p - \frac{2}{l} \sum_{p=0}^l p \binom{l}{p} h_p = \delta - \frac{2}{l^3} \sum_{p=0}^l p^3 \binom{l}{p} \\ &= \delta - 2^{l-2} \left(\frac{l+3}{l}\right) = 2^{l-1} \left(\frac{4l-1}{l}\right). \end{aligned}$$

(En las expresiones anteriores se ha utilizado que  $\sum_{p=0}^l p^2 \binom{l}{p} = 2^{l-2}(l^2 + l)$  y que  $\sum_{p=0}^l p^3 \binom{l}{p} = 2^{l-3}(l^3 + 3l^2)$ ).

Entonces

$${}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h} = \delta^2 + l\sigma^2 = 2^{2l-4} \frac{(64l^3 + 49l^2 + 22l + 1)}{l^2}.$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}\|^2 &= \sum_{p=0}^l \binom{l}{p} h_p^2 = 2^{2l+2} + \frac{1}{l^4} \sum_{p=1}^l p^4 \binom{l}{p} \\ &= 2^{2l+2} + \frac{1}{l^4} 2^{l-4} (l^4 + 6l^3 + 3l^2 - 2l) \\ &= 2^{l-4} \left( 2^{l+6} + \frac{l^4 + 6l^3 + 3l^2 - 2l}{l^4} \right). \end{aligned}$$

En consecuencia,

$$\psi_l = \frac{{}^t\mathbf{hB}_l\mathbf{h}}{2^l \|\mathbf{f}\|^2} = \frac{64l^4 + 49l^3 + 22l^2 + l}{(2^{l+6} + 1)l^3 + 6l^2 + 3l - 2},$$

(cuyo límite si  $l \rightarrow \infty$  es cero), y tenemos así que

$$\varepsilon^*(f) = 1 - \psi_l = 1 - \frac{64l^4 + 49l^3 + 22l^2 + l}{(2^{l+6} + 1)l^3 + 6l^2 + 3l - 2}$$

crece a medida que  $l$  aumenta.

La tabla siguiente refleja algunos valores concretos de la epistasis de la función  $f$ :

$l$	$\varepsilon^*(f)$	$\varepsilon_{\max}^*(f)$
2	0.27735	0.5
3	0.5178	0.75
4	0.69750	0.875
5	0.8178	0.9375

Por lo que respecta al análisis de su decepción, se puede comprobar fácilmente que esta función no contiene decepción.

En efecto, siguiendo la definición debida a Whitley, (ver capítulo 3), consideraremos dos particiones  $P$  y  $P'$  de esquemas, tales que  $P$  sea de mayor orden que  $P'$  y además  $P$  subsuma a  $P'$ . Para fijar ideas, denotaremos por  $r$  y  $t$  los órdenes respectivos de  $P$  y  $P'$ . Entonces, podemos representar, sin pérdida de generalidad,  $P$  y  $P'$  por:

$$P = \left\{ \# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^r, \# \dots \# \overbrace{0 \dots 01}^r, \dots, \# \dots \# \overbrace{1 \dots 1}^r \right\}$$

$$P' = \left\{ \# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^t, \# \dots \# \overbrace{0 \dots 01}^t, \dots, \# \dots \# \overbrace{1 \dots 1}^t \right\}.$$

El esquema ganador de  $P$  (respectivamente de  $P'$ ) es  $\# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^r$  (respectivamente  $\# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^t$ ), puesto que  $f(\# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^r)$  es:

$$\frac{1}{l-r} \left( f(0 \dots 0 \overbrace{0 \dots 0}^r) + \binom{l-r}{1} f(0 \dots 01 \overbrace{0 \dots 0}^r) + \dots + f(1 \dots 1 \overbrace{0 \dots 0}^r) \right)$$

$$= \frac{1}{l-r} \left( 2^{l+1} + \binom{l-r}{1} \frac{1}{2} + \dots + \left( \frac{l-r}{l} \right)^2 \right) > f(\# \dots \# \overbrace{i_1 \dots i_r}^r),$$

para cualesquiera  $i_1, \dots, i_r \in \{0, 1\}^r$ , con  $i_1 \dots i_r \neq \overbrace{0 \dots 0}^r$ . De hecho, el esquema  $\# \dots \# \overbrace{1 \dots 1}^r$  sería el caso más desfavorable a considerar en la comparación con  $\# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^r$ . Pero incluso en este caso

$$f(\# \dots \# \overbrace{1 \dots 1}^r)$$

$$= \frac{1}{l-r} \left( f(0 \dots 0 \overbrace{1 \dots 1}^r) + \binom{l-r}{1} f(0 \dots 01 \overbrace{1 \dots 1}^r) + \dots + f(1 \dots 1 \overbrace{1 \dots 1}^r) \right)$$

$$= \frac{1}{l-r} \left( \left( \frac{r}{l} \right)^2 + \binom{l-r}{1} \left( \frac{r+1}{l} \right)^2 + \dots + \left( \frac{l}{l} \right)^2 \right)$$

$$< \frac{1}{l-r} (1 + \binom{l-r}{1} + \dots + \binom{l-r}{l-r}) = \frac{1}{l-r} 2^{l-r} < f(\# \dots \# \overbrace{0 \dots 0}^r)$$

De todo lo anterior, podemos concluir que el esquema ganador de cualquier par de particiones en competición tiene los mismos bits definidos, por lo que  $f$  no contiene decepción de ningún orden.

### 5.3 Funciones de peso en alfabetos ternarios

Para finalizar este capítulo, nos proponemos generalizar los resultados obtenidos en las dos secciones anteriores, abarcando el estudio de las funciones de peso aplicadas a cromosomas no binarios. En este ámbito, una función de peso, definida sobre  $\Omega_n = \{0, 1, \dots, n-1\}^l$ , se caracteriza porque el valor sobre una cadena  $s \in \Omega_n$  será el mismo que sobre cualquier otra obtenida de  $s$  por una permutación entre sus “bits” componentes. Al igual que en el caso binario, se produce un decremento en el número máximo de valores distintos que una función de peso puede tomar, puesto que de un total de  $n^l$  posibles valores en el caso arbitrario, nos encontramos ahora con un máximo de  $\mathcal{CR}(n, l) = \binom{n+l-1}{l}$  valores distintos.

El estudio que abordamos a continuación, se restringe al caso  $n = 3$ , debido fundamentalmente a la complejidad que adquiere la formulación de los resultados que se obtienen.

Comencemos denotando por  $\sigma$  una permutación de orden  $l$  sobre  $\Omega_3 = \{0, 1, 2\}^l$ , i.e.:

$$\begin{aligned} \sigma & : \Omega_3 \rightarrow \Omega_3 \\ s & = s_{l-1} \dots s_0 \mapsto \sigma(s) = s_{i_{l-1}} \dots s_{i_0} \end{aligned}$$

con  $i_0, \dots, i_{l-1} \in \{0, 1, 2\}$  distintos entre si.

Entonces, si  $f : \Omega_3 \rightarrow \mathbb{R}$ , es una función de peso, se tiene que  $f(s) = f(\sigma(s))$ , (para todo  $\sigma$ ). Por ejemplo, si  $l = 4$ , y  $s = 0122$ , entonces

$$\begin{aligned} f(s) & = f(0212) = f(0221) = f(1022) = f(1202) \\ & = f(1220) = f(2012) = f(2021) = f(2102) \\ & = f(2120) = f(2201) = f(2210). \end{aligned}$$

En general, una función  $f$  definida sobre  $\Omega_3$ , podrá tomar, a lo sumo,  $\binom{l+2}{l}$  valores distintos.

Al igual que en el caso binario, podemos considerar el vector

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} f(0 \dots 000) \\ f(0 \dots 001) \\ f(0 \dots 002) \\ f(0 \dots 011) \\ f(0 \dots 012) \\ \vdots \\ f(2 \dots 222) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{\binom{l+2}{l}}$$

asociado a la función  $f$ , y que la determina completamente. Las componentes de  $\mathbf{h}$  las denotaremos por  $h_0, h_1, \dots, h_m$ , con  $m = \binom{l+2}{l} - 1$ .

En lo que sigue, nos proponemos obtener, en primer lugar, la expresión de una matriz  $\mathbf{B}_{3,l}$ , con la propiedad  ${}^t\mathbf{f}\mathbf{G}_{3,l}\mathbf{f} = {}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h}$ , para lo cual, definimos inductivamente, para cualquier entero positivo  $l$ , la matriz  $3^l \times m$ -dimensional,  $\mathbf{A}_l$ , así:

$$\mathbf{A}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{O}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix}, \mathbf{A}'_{l-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}'_{l-2} & \mathbf{O}_{l-2} & \mathbf{0}_{l-2} \\ \mathbf{O}''_{l-2} & \mathbf{A}''_{l-2} & \mathbf{0}_{l-2} \\ \mathbf{O}''_{l-2} & \mathbf{0}_{l-2} & \mathbf{A}''_{l-2} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}''_{l-2} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}''_{l-3} & \mathbf{O}_{l-3} & \mathbf{0}_{l-3} \\ \mathbf{O}'''_{l-3} & \mathbf{A}'''_{l-3} & \mathbf{0}_{l-3} \\ \mathbf{O}'''_{l-3} & \mathbf{0}_{l-3} & \mathbf{A}'''_{l-3} \end{pmatrix} \dots, \mathbf{A}_1^{(l-1)} = \begin{pmatrix} 1 & \overbrace{0 \dots 0}^{l-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde:

\*  $\mathbf{A}_1$  es la matriz identidad 3-dimensional, y la matriz  $\mathbf{A}_{l-i}^{(i)}$  es  $3^{l-i} \times \left(m - \frac{i(i+3)}{2}\right)$ -dimensional. Además, para todo  $1 \leq j \leq l-1$ ,

$$\mathbf{A}_1^{(j)} = \begin{pmatrix} 1 & \overbrace{0 \dots 0}^j & 0 & 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 \dots 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

\*  $\mathbf{O}_{l-i}$  denota la matriz nula,  $3^{l-i} \times l$ -dimensional;  $\mathbf{0}_{l-i}$  es el vector nulo de  $\mathbb{R}^{3^{l-i}}$ , y  $\mathbf{O}_{l-i}^{(i)}$  es la matriz nula,  $3^{l-i} \times i$ -dimensional.

Un cálculo tedioso, aunque no difícil, muestra que  $\mathbf{f} = \mathbf{A}_l \mathbf{h}$ . De esta relación, se sigue entonces que  $\mathbf{B}_{3,l} = {}^t \mathbf{A}_l \mathbf{G}_{3,l} \mathbf{A}_l$ , (lo que, en particular, significa que  $\mathbf{B}_{3,l}$  es una matriz cuadrada de dimensión  $\mathcal{CR}(3, l)$  ).

Para poder describir explícitamente los elementos  $(b_{3,l})_{pq}$  de  $\mathbf{B}_{3,l}$ , denotemos por  $\tilde{\mathbf{O}}_l$  la matriz nula,  $\mathcal{CR}(3, l) \times (l + 1)$ -dimensional, y reescribamos  $\mathbf{A}_l$  en la forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_l &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{O}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3, l-1)} & \tilde{\mathbf{O}}_{l-1} & \tilde{\mathbf{0}}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l & \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3, l)-2} & \tilde{\mathbf{0}}_l \\ \tilde{\mathbf{0}}_l & \tilde{\mathbf{0}}_l & \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3, l)-2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{O}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l, \end{aligned}$$

donde, las submatrices situadas en la diagonal de  $\mathbf{Y}_l$  son las matrices identidad de dimensiones  $\mathcal{CR}(3, l-1)$  y  $\mathcal{CR}(3, l)-2$ ; y  $\tilde{\mathbf{0}}_{l-1}$  y  $\tilde{\mathbf{0}}_l$  denotan los vectores de  $\mathbb{R}^{\mathcal{CR}(3, l-1)}$  y  $\mathbb{R}^{\mathcal{CR}(3, l)-2}$ , respectivamente, con todas sus componentes nulas. Ahora, empleando la fórmula de inducción dada en el lema 4.2 para  $n = 3$ , se tiene que

$$\mathbf{B}_{3,l} = \mathbf{B}'_{3,l} + \mathbf{B}''_{3,l}$$

con:

$$\mathbf{B}'_{3,l} = {}^t \mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} 2 {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & - {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & - {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ - {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & 2 {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & - {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ 2 {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & - {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & 2 {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l,$$

y

$$\mathbf{B}''_{3,l} = {}^t \mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3, l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l.$$

Para hallar la matriz  $\mathbf{B}'_{3,l}$  haremos uso del siguiente resultado:

**Lema 5.9.-** Para cualquier entero positivo  $l$ , se define

$$\mathbf{C}_l = (c_{pq}) = {}^t\mathbf{A}_l \mathbf{U}_{3,l} \mathbf{A}_l.$$

Entonces, para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq CR(3, l) - 1$ , se verifica

$$c_{pq} = \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t},$$

con  $k, r, s, t \in \mathbb{N}$  tales que:

1.  $0 \leq k, r, s, t \leq l$ ,
2.  $\frac{k(k+1)}{2} + r = p$ ,  $\frac{s(s+1)}{2} + t = q$ , siendo  $k$  (respectivamente  $s$ ) el mayor entero que satisface  $\frac{k(k+1)}{2} \leq p$ , (respectivamente  $\frac{s(s+1)}{2} \leq q$ ).

**Demostración.-** Argumentemos por inducción en  $l$ . Para  $l = 1$ , la matriz  $\mathbf{A}_1$  es la matriz identidad tres dimensional y, en consecuencia, la afirmación es cierta. Supongamos que lo es también para las longitudes  $1, 2, \dots, l-1$  y comprobémosla para la longitud  $l$ . Para ello, introducimos los vectores de  $\mathbb{R}^{CR(3,l)}$  y  $\mathbb{R}^{CR(3,l+1)-2}$

$$\begin{aligned} {}^t\mathbf{v}_l &= \left( \binom{l}{0} \binom{0}{0}, \binom{l}{1} \binom{1}{0}, \binom{l}{1} \binom{1}{1}, \binom{l}{2} \binom{2}{0}, \dots, \binom{l}{l} \binom{l}{0}, \dots, \binom{l}{l} \binom{l}{l} \right) \\ {}^t\mathbf{w}_l &= \left( \binom{l}{0} \binom{0}{0}, 0, \binom{l}{1} \binom{1}{0}, \binom{l}{1} \binom{1}{1}, 0, \binom{l}{2} \binom{2}{0}, \dots, 0, \binom{l}{l} \binom{l}{0}, \dots, \binom{l}{l} \binom{l}{l} \right) \end{aligned}$$

Entonces, se verifica que  $\mathbf{C}_l = {}^t\mathbf{A}_l \mathbf{U}_{3,l} \mathbf{A}_l$  es:

$$\begin{aligned} {}^t\mathbf{Y}_l &\begin{pmatrix} {}^t\mathbf{A}_{l-1} & {}^t\mathbf{0}_{l-1} & {}^t\mathbf{0}_{l-1} \\ {}^t\mathbf{0}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} & {}^t\mathbf{0}_{l-1} \\ {}^t\mathbf{0}_{l-1} & {}^t\mathbf{0}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} \\ \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} \\ \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} & \mathbf{U}_{3,l-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} \\ \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{0}_{l-1} & \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\ &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} {}^t\mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t\mathbf{A}_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \\ {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} & {}^t\mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{U}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\ &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} ( {}^t\mathbf{v}_{l-1} \quad {}^t\mathbf{w}_{l-1} \quad {}^t\mathbf{w}_{l-1} ) \mathbf{Y}_l \end{aligned}$$

y como

$$\begin{aligned}
 {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3,l-1)} & {}^t\tilde{\mathbf{0}}_l & {}^t\tilde{\tilde{\mathbf{0}}}_l \\ {}^t\tilde{\mathbf{0}}_{l-1} & \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3,l)-2} & {}^t\tilde{\mathbf{0}}_l \\ {}^t\tilde{\mathbf{0}}_{l-1} & {}^t\tilde{\mathbf{0}}_l & \mathbf{I}_{\mathcal{CR}(3,l)-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \binom{l}{0} \binom{0}{0} \\ \binom{l-1}{1} \binom{1}{0} + \binom{l-1}{0} \binom{0}{0} \\ \binom{l-1}{1} \binom{1}{1} + \binom{l-1}{0} \binom{0}{0} \\ \binom{l-1}{1} \binom{2}{0} + \binom{l-1}{1} \binom{0}{1} \\ \binom{l-1}{2} \binom{2}{1} + \binom{l-1}{1} \binom{1}{1} + \binom{l-1}{1} \binom{1}{0} \\ \vdots \\ \binom{l-1}{l-1} \binom{l-1}{l-1} \end{pmatrix} = \mathbf{v}_l
 \end{aligned}$$

encontramos que  $\mathbf{C}_l = \mathbf{v}_l {}^t\mathbf{v}_l$ , lo que prueba la afirmación.  $\square$

Denotemos ahora por  $\tilde{\mathbf{C}}_{l-1}$  y  $\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1}$  las matrices  ${}^t\mathbf{A}_{l-1}\mathbf{U}_{3,l-1}\mathbf{A}'_{l-1}$  y  ${}^t\mathbf{A}'_{l-1}\mathbf{U}_{3,l-1}\mathbf{A}'_{l-1}$  respectivamente. Entonces, utilizando el resultado anterior, y teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{C}}_{l-1} &= \mathbf{v}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} \\
 \tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1} &= \mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1}
 \end{aligned}$$

podemos escribir

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}'_{3,l} &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} 2\mathbf{C}_{l-1} & -\tilde{\mathbf{C}}_{l-1} & -\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1} \\ -{}^t\tilde{\mathbf{C}}_{l-1} & 2\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1} & -\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1} \\ -{}^t\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{l-1} & -\tilde{\mathbf{C}}_{l-1} & 2\tilde{\mathbf{C}}_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\
 &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} 2\mathbf{v}_{l-1} {}^t\mathbf{v}_{l-1} & -\mathbf{v}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} & -\mathbf{v}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} \\ -\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{v}_{l-1} & 2\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} & -\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} \\ -\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{v}_{l-1} & -\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} & 2\mathbf{w}_{l-1} {}^t\mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\
 &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ -\mathbf{w}_{l-1} \\ \tilde{\tilde{\mathbf{0}}}_l \end{pmatrix} \left( {}^t\mathbf{v}_{l-1}, -{}^t\mathbf{w}_{l-1}, {}^t\tilde{\tilde{\mathbf{0}}}_l \right) \mathbf{Y}_l
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + {}^t Y_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l \\ -\mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} \left( {}^t \mathbf{v}_{l-1}, {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l, -{}^t \mathbf{w}_{l-1} \right) Y_l \\
 & + {}^t Y_l \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{0}}_l \\ -\mathbf{w}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} \left( {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l, -{}^t \mathbf{w}_{l-1}, {}^t \mathbf{w}_{l-1} \right) Y_l \\
 & = (\mathbf{B}'_{3,l})_1 + (\mathbf{B}'_{3,l})_2 + (\mathbf{B}'_{3,l})_3.
 \end{aligned}$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned}
 {}^t Y_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{CR(3,l-1)} & {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l & {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l \\ {}^t \tilde{\mathbf{0}}_{l-1} & \mathbf{I}_{CR(3,l)-2} & {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l \\ {}^t \tilde{\mathbf{0}}_{l-1} & {}^t \tilde{\mathbf{0}}_l & \mathbf{I}_{CR(3,l)-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \binom{l-1}{0} \binom{0}{0} \\ \binom{l-1}{1} \binom{1}{0} - \binom{l-1}{0} \binom{0}{0} \\ \binom{l-1}{1} \binom{1}{1} \\ \binom{l-1}{2} \binom{2}{0} - \binom{l-1}{1} \binom{1}{0} \\ \vdots \\ -\binom{l-1}{l-1} \binom{l-1}{0} \\ \vdots \\ -\binom{l-1}{l-1} \binom{l-1}{l-1} \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Y, teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
 \binom{l-1}{i} \binom{i}{j} - \binom{l-1}{i-1} \binom{i-1}{j} &= \binom{l}{i} \binom{i}{j} \frac{l-2i+j}{l}, \\
 \binom{l-1}{i} \binom{i}{i} &= \binom{l}{i} \binom{i}{i} \frac{l-i}{l}
 \end{aligned}$$

y que

$$-\binom{l-1}{j} \binom{l-1}{l-1} = \binom{l}{l} \binom{l}{j} \frac{j-l}{l},$$

el vector anterior es:

$${}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \binom{l}{0} \\ \binom{l}{1} \binom{l-2}{0} \\ \binom{l}{1} \binom{l-1}{1} \\ \vdots \\ \binom{l}{k} \binom{l-2k+r}{r} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

De manera análoga, utilizando que

$$\begin{aligned} \binom{l-1}{i} \binom{i}{j} - \binom{l-1}{i-1} \binom{i-1}{j-1} &= \binom{l}{i} \binom{i}{j} \frac{l-i-j}{l}, \\ \binom{l-1}{i} \binom{i}{0} &= \binom{l}{i} \binom{i}{0} \frac{l-i}{l} \\ -\binom{l-1}{l-1} \binom{l-1}{j-1} &= \binom{l}{l} \binom{l}{j} \frac{-j}{l}, \end{aligned}$$

respectivamente

$$\begin{aligned} \binom{l-1}{j} \binom{j}{j-1} - \binom{l-1}{j} \binom{j}{j} &= \binom{l}{j+1} \binom{j+1}{j} \frac{j-1}{l}, \\ -\binom{l-1}{j} \binom{j}{0} &= \binom{l}{j+1} \binom{j+1}{0} \frac{-(j+1)}{l} \\ \binom{l-1}{j} \binom{j}{j} &= \binom{l}{j+1} \binom{j+1}{j+1} \frac{j+1}{l}, \end{aligned}$$

se demuestra que

$${}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{l-1} \\ \tilde{\mathbf{0}}_l \\ -\mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \binom{l}{1} \binom{l-1}{0} \\ \vdots \\ \binom{l}{k} \binom{l-k-r}{r} \\ \vdots \\ -1 \end{pmatrix},$$

respectivamente

$${}^t Y_l \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{0}}_l \\ -\mathbf{w}_{l-1} \\ \mathbf{w}_{l-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \binom{l}{1} \binom{l}{0} \frac{(-1)}{l} \\ \binom{l}{1} \binom{l}{10} \frac{1}{l} \\ \vdots \\ \binom{l}{k} \binom{l}{r} \frac{(2r-k)}{l} \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Como consecuencia de todo lo anterior,

$$(\mathbf{B}'_{3,l})_1 = (b'_{pq,1}) = \left( \binom{l}{k} \binom{l}{r} \binom{l}{s} \binom{l}{t} \frac{(l-2k+r)(l-2s+t)}{l^2} \right),$$

$$(\mathbf{B}'_{3,l})_2 = (b'_{pq,2}) = \left( \binom{l}{k} \binom{l}{r} \binom{l}{s} \binom{l}{t} \frac{(l-k-r)(l-s-t)}{l^2} \right),$$

$$(\mathbf{B}'_{3,l})_3 = (b'_{pq,3}) = \left( \binom{l}{k} \binom{l}{r} \binom{l}{s} \binom{l}{t} \frac{(k-2r)(s-2t)}{l^2} \right),$$

con  $k, r, s, t \in \mathbb{N}$  tales que:

1.  $0 \leq k, r, s, t \leq l$ ,
2.  $\frac{k(k+1)}{2} + r = p$ , y  $\frac{s(s+1)}{2} + t = q$ , siendo  $k$  (respectivamente  $s$ ) el mayor entero que satisface  $\frac{k(k+1)}{2} \leq p$ , (respectivamente  $\frac{s(s+1)}{2} \leq q$ ).

Manteniendo estas notaciones, se deduce claramente:

**Proposición 5.10.-** Para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq \mathcal{CR}(3, l) - 1$ , se verifica:

$$\mathbf{B}'_{3,l} = ((b'_{3,l})_{pq}) = \left( \binom{l}{k} \binom{l}{r} \binom{l}{s} \binom{l}{t} \left( \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l^2} \right) \right).$$

**Demostración.-** Se sigue directamente de las expresiones de  $(\mathbf{B}'_{3,l})_1$ ,  $(\mathbf{B}'_{3,l})_2$ , y  $(\mathbf{B}'_{3,l})_3$ .  $\square$

Para obtener la expresión explícita de la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}''$ , consideremos las matrices

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1} &= \left( (\tilde{b}_{3,l-1})_{pq} \right) = {}^t \mathbf{A}_{l-1} \mathbf{G}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1}, \\ \tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} &= \left( (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{pq} \right) = {}^t \mathbf{A}'_{l-1} \mathbf{G}_{3,l-1} \mathbf{A}'_{l-1}\end{aligned}$$

y denotemos por  $\mu$  y  $\eta$ , respectivamente, a  $\mathcal{CR}(3, l-1) - 1$  y  $\mathcal{CR}(3, l) - 3$ , entonces nosotros tenemos:

**Proposición 5.11.-** *Las componentes  $(b_{3,l}'')$  de la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}''$  están determinadas por:*

$$\begin{aligned}1. (b_{3,l}'')_{00} &= (b_{3,l-1})_{00}, (b_{3,l}'')_{01} = (b_{3,l-1})_{01} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{00}, (b_{3,l}'')_{0,\eta+2} = (\tilde{b}_{3,l-1})_{0\eta}, \\ (b_{3,l}'')_{11} &= (b_{3,l-1})_{11} + 2(\tilde{b}_{3,l-1})_{10} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{00}, \\ (b_{3,l}'')_{1,\eta+2} &= (\tilde{b}_{3,l-1})_{1\eta} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{0\eta}, (b_{3,l}'')_{\eta+2,\eta+2} = (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{\eta\eta};\end{aligned}$$

2. si  $2 \leq q \leq \mu$ , entonces

$$\begin{aligned}(b_{3,l}'')_{0q} &= (b_{3,l-1})_{0,q} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2}; \\ (b_{3,l}'')_{1,q} &= (b_{3,l-1})_{1,q} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-2} \\ &\quad + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,0} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{0,q-2}\end{aligned}$$

3. si  $\mu < q \leq \eta + 1$ , entonces

$$\begin{aligned}(b_{3,l}'')_{0q} &= (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2}; \\ (b_{3,l}'')_{1q} &= (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-2} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{0,q-2};\end{aligned}$$

4. si  $2 \leq p \leq \mu$ , entonces

a) si  $p \leq q \leq \mu$ ,

$$\begin{aligned} (b''_{3,l})_{pq} &= (b_{3,l-1})_{pq} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-2} \\ &\quad + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,p-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,p-2} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-1} \\ &\quad + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-2} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-2} \end{aligned}$$

b) si  $\mu < q \leq \eta + 1$ , entonces

$$\begin{aligned} (b''_{3,l})_{pq} &= (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-2} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-1} \\ &\quad + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-2} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-2}; \end{aligned}$$

c)

$$(b''_{3,l})_{p,\eta+2} = (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,\eta} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,\eta} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,\eta};$$

5. a) si  $\mu < p \leq q \leq \eta + 1$ , entonces

$$\begin{aligned} (b''_{3,l})_{pq} &= (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,q-2} \\ &\quad + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-1} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-2,q-2}; \end{aligned}$$

b) si  $\mu < p \leq \eta + 1$ , entonces

$$(b''_{3,l})_{p,\eta+2} = (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1})_{p-1,\eta} + (\tilde{\tilde{b}}_{3,l-1}).$$

**Demostración.-** Para comprobar la veracidad de las relaciones anteriores,

basta tener en cuenta que  $\mathbf{B}_{3,l}''$  se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{3,l}'' &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{3,l-1} & \tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} \\ {}^t\tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}_{3,l-1} \\ {}^t\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}}_{3,l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\ &= {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{3,l-1} & \tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} \\ {}^t\tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1} & \mathbf{O}_\beta & \mathbf{O}_\beta \\ {}^t\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} & \mathbf{O}_\beta & \mathbf{O}_\beta \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l \\ &\quad + {}^t\mathbf{Y}_l \begin{pmatrix} \mathbf{O}_\alpha & \mathbf{O}_{\alpha\beta} & \mathbf{O}_{\alpha\beta} \\ {}^t\mathbf{O}_{\alpha\beta} & \tilde{\tilde{\mathbf{B}}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}_{3,l-1} \\ {}^t\mathbf{O}_{\alpha\beta} & \tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}_{3,l-1} & \tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\mathbf{B}}}}}_{3,l-1} \end{pmatrix} \mathbf{Y}_l, \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{O}_{\alpha\beta}$  denota la matriz nula de dimensión  $(\mathcal{CR}(3, l-1) \times \mathcal{CR}(3, l) - 2)$  y  $\mathbf{O}_\alpha$ , (respectivamente  $\mathbf{O}_\beta$ ) es la matriz cuadrada  $\mathcal{CR}(3, l-1)$ -dimensional (respectivamente  $(\mathcal{CR}(3, l) - 2)$ -dimensional), con todas sus componentes nulas. Entonces un cálculo directo sobre dichas expresiones prueba la proposición.  $\square$

De los resultados anteriores y del hecho de que  $\mathbf{B}_{3,l} = \mathbf{B}'_{3,l} + \mathbf{B}''_{3,l}$ , se sigue trivialmente:

**Corolario 5.12.-** Las componentes  $(b_{3,l})_{pq}$  de la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}$  están determinadas por:

1.

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{00} &= (b_{3,l})_{\eta+2, \eta+2} = 1 + 2l \\ (b_{3,l})_{01} &= 2l(l-1), \quad (b_{3,l})_{0, \eta+2} = 1 - l; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{11} &= (b_{3,l-1})_{11} + 2(b_{3,l-1})_{01} + (b_{3,l-1})_{00} + (l-2)^2 + (l-1)^2 + 1, \\ (b_{3,l})_{1, \eta+2} &= (b_{3,l-1})_{1\mu} + (b_{3,l-1})_{0\mu} - l; \end{aligned}$$

2. si  $q = \frac{s(s+1)}{2} + t$ , con  $s, t \in \mathbb{N}$ , tales que  $1 \leq s, t \leq l$ , entonces

a) si  $2 \leq q \leq \mu$ , entonces

$$(b_{3,l})_{0q} = (b_{3,l-1})_{0q} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \frac{(2l-3s)}{l}$$

b) si  $\mu < q \leq \eta + 1$ , entonces

$$(b_{3,l})_{0q} = (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \frac{(2l-3s)}{l};$$

3. (con las mismas notaciones que en el punto 2)

a) si  $2 \leq q \leq \mu$ , entonces

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{1q} &= (b_{3,l-1})_{1q} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,0} \\ &\quad + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} \\ &\quad + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( \frac{(l-2)(l-2s+t) + (l-1)(l-s-t) + (s-2t)}{l} \right) \end{aligned}$$

b) si  $\mu < q \leq \eta + 1$ , entonces

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{1q} &= (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{1,q-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} \\ &\quad + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( \frac{(l-2)(l-2s+t) + (l-1)(l-s-t) + (s-2t)}{l} \right) \end{aligned}$$

4. si  $2 \leq p \leq \mu$ ,  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ , con  $k, r \in \mathbb{N}$ , tales que  $1 \leq k, r \leq l$ , entonces

a) si  $p \leq q \leq \mu$ , entonces

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{pq} &= (b_{3,l-1})_{pq} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,p-1} \\ &\quad + (\tilde{b}_{3,l-1})_{q,p-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p-1,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p-1,q-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p-2,q-1} \\ &\quad + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p-2,q-2} + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l^2} \right); \end{aligned}$$

b) si  $\mu < q \leq \eta + 1$ , entonces

$$(b_{3,l})_{pq} = (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p,q-2} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{p-1,q-1}$$

$$\begin{aligned}
& + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-1,q-2} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,q-1} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,q-2} \\
& + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l^2} \right)
\end{aligned}$$

c)

$$(b_{3,l})_{p,\eta+2} = \tilde{(b_{3,l-1})}_{p,\eta} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-1,\eta} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,\eta} + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{(3r-l)}{l}$$

5. si  $\mu < p \leq \eta + 1$ , (con las mismas notaciones que en el punto 4),a) si  $p \leq q \leq \eta + 1$ , entonces

$$\begin{aligned}
(b_{3,l})_{pq} & = \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-1,q-1} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-1,q-2} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,q-1} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,q-2} \\
& + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l^2} \right)
\end{aligned}$$

$$b) \quad (b_{3,l})_{p,\eta+2} = \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-1,\eta} + \tilde{(b_{3,l-1})}_{p-2,\eta} + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{(3r-l)}{l}.$$

Ahora podemos probar:

**Teorema 5.13.-** Para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq CR(3, l) - 1$ , el elemento  $(b_{3,l})_{p,q}$  de la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}$  está dado por

$$(b_{3,l})_{p,q} = \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right),$$

donde,  $k, r, s, t \in \mathbb{N}$ , con  $0 \leq k, r, s, t \leq l$ , son tales que  $\frac{k(k+1)}{2} + r = p$ , y  $\frac{s(s+1)}{2} + t = q$ , siendo  $k$  (respectivamente  $s$ ) el mayor entero que satisface  $\frac{k(k+1)}{2} \leq p$ , (respectivamente  $\frac{s(s+1)}{2} \leq q$ ).

**Demostración.-** Para  $(b_{3,l})_{00}$ ,  $(b_{3,l})_{01}$ ,  $(b_{3,l})_{0,n+2}$  y  $(b_{3,l})_{n+2,n+2}$  la comprobación es directa de las expresiones del corolario anterior. Para  $(b_{3,l})_{11}$  y  $(b_{3,l})_{1,n+2}$  argumentando por inducción en  $l$ , se llega, de una manera sencilla, a la expresión requerida.

Para los demás elementos de la matriz, la comprobación se realiza siguiendo también un razonamiento por inducción en  $l$ . en cada uno de los

distintos casos. Como la técnica es larga, pero no complicada, desarrollaremos sólo los cálculos sobre los elementos de la primera fila de  $\mathbf{B}_{3,l}$  restantes, i.e., los  $(b_{3,l})_{0q}$  con  $q \geq 2$ . (Nótese que esto, en particular, implica que  $k = r = 0$ ). Comenzaremos suponiendo además que  $q \leq \mu$ . Entonces, para  $l = 1$ ,  $(b_{3,1})_{02} = 0$ , y la afirmación es cierta. Supongámosla cierta para las longitudes  $1, 2, \dots, l-1$ , y comprobémosla para  $l$ .

Para ello, fijado  $q = \frac{s(s+1)}{2} + t$ , distinguiremos tres casos, según los valores de  $t$  ( $t = s$ ,  $t = 0$  y  $t \neq s, 0$ ).

i)  $q = \frac{s(s+1)}{2} + s$ , (i.e.:  $t = s$ ), entonces  $q-1 = \frac{s(s+1)}{2} + (s-1)$  y  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} = 0$ .<sup>2</sup> Además,  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} = (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}}$ , con  $\hat{q} = (q-2) - (s-1) = \frac{(s-1)s}{2} + (s-1)$ . Entonces, por el corolario anterior,

$$(b_{3,l})_{0q} = (b_{3,l-1})_{0,q} + (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}} + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \frac{(2l-3s)}{l}$$

Utilizando ahora la hipótesis de inducción en  $l$ ,

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{0q} &= \binom{l-1}{s} (2l-3s-1) + \binom{l-1}{s-1} (2l-3s+2) + \binom{l}{s} \frac{(2l-3s)}{l} \\ &= \binom{l}{s} (2l-3s+1) \\ &= \binom{l}{0} \binom{0}{0} \binom{l}{s} \binom{s}{s} \left( 1 + \frac{l(l-s) + l(l-2s)}{l} \right), \end{aligned}$$

ii)  $q = \frac{s(s+1)}{2}$ , (i.e.:  $t = 0$ ), entonces,  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} = (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}}$ , con  $\hat{q} = \frac{(s-1)s}{2}$  y  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} = 0$ . De nuevo, utilizando el corolario anterior y la hipótesis de inducción en  $l$ , se tiene

$$(b_{3,l})_{0q} = \binom{l}{s} (2l-3s+1);$$

iii)  $q = \frac{s(s+1)}{2} + t$ , con  $t \neq s, 0$ ; entonces,  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} = (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}}$ ; con  $\hat{q} =$

<sup>2</sup>Las columnas de la matriz  $\tilde{\mathbf{B}}_{3,l-1}$  situadas en las posiciones  $\frac{(s+1)(s+2)}{2} - 1$  (con  $s \geq 1$ ) son nulas

$\frac{(s-1)s}{2} + t$  y  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} = (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}}$  donde  $\hat{q} = \frac{(s-1)s}{2} + (t-1) = \hat{q} - 1$ . Entonces, al igual que antes, el corolario 5.12, junto con la hipótesis de inducción, conducen a:

$$\begin{aligned}
 (b_{3,l})_{0q} &= (b_{3,l-1})_{0,q-1} + (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}} + (b_{3,l-1})_{0,\hat{q}-1} + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \frac{(2l-3s)}{l} \\
 &= \binom{l-1}{s} \binom{s}{t} (2l-3s-1) + \binom{l-1}{s-1} \binom{s-1}{t} (2l-3s+2) \\
 &\quad + \binom{l-1}{s-1} \binom{s-1}{t-1} (2l-3s+2) + \binom{l}{s} \binom{s}{t} \frac{(2l-3s)}{l} \\
 &= \binom{l}{s} \binom{s}{t} (2l-3s+1),
 \end{aligned}$$

como queríamos.

Sea ahora  $\mu < q \leq \eta + 1$ . (Entonces,  $l \geq 2$ , y  $q = \frac{l(l+1)}{2} + t$ , con  $0 \leq t \leq l-1$ ). De nuevo usaremos un argumento por inducción en  $l$ . Si  $l = 2$ , como  $\mu = 2$  y  $\eta = 4$ ,  $(b_{3,2})_{03} = -1$  y  $(b_{3,2})_{04} = -2$ , que verifican la fórmula requerida.

Supongamos la afirmación cierta para las longitudes  $2, 3, \dots, l-1$ , y la demostraremos para  $l$ . El corolario 5.12 afirma que, en este caso,

$$(b_{3,l})_{0q} = (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} + (\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} - \binom{l}{t}$$

Pero,  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-1} = (b_{3,l})_{0\hat{q}}$  con  $\hat{q} = \frac{(l-1)l}{2} + t$ , y en consecuencia,  $(\tilde{b}_{3,l-1})_{0,q-2} = (b_{3,l})_{0,\hat{q}-1}$ . Entonces,

$$\begin{aligned}
 (b_{3,l})_{0q} &= (b_{3,l})_{0\hat{q}} + (b_{3,l})_{0,\hat{q}-1} - \binom{l}{t} \\
 &= \left( \binom{l-1}{t} + \binom{l-1}{t-1} \right) (2-l) - \binom{l}{t} \\
 &= \binom{l}{t} (1-l),
 \end{aligned}$$

lo que completa la demostración para los elementos de la primera fila de  $\mathbf{B}_{3,l}$ .

□

## Valores extremos de la epistasis normalizada

Como se ha demostrado en el capítulo anterior, para cualquier función de ajuste  $f$ , valuada positiva, sobre cadenas ternarias de longitud  $l$ ,

$$0 \leq \varepsilon_{3,l}^*(f) \leq 1 - \frac{1}{3^{l-1}}.$$

A continuación analizaremos, con un poco más de detenimiento, estos valores extremos de la epistasis normalizada sobre las funciones de peso.

Por lo que respecta al valor máximo, el teorema 4.13 del epígrafe cuarto del capítulo anterior, caracteriza a las funciones  $f$  con epistasis normalizada máxima; entre éstas se encuentran aquellas cuyo vector asociado es

$${}^t\mathbf{f} = \left( \frac{\sqrt{3}}{3}, 0, \dots, 0, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0, \dots, 0, \frac{\sqrt{3}}{3} \right),$$

donde las componentes no nulas están situadas en las posiciones  $\frac{i(3^l-1)}{2}$ ,  $0 \leq i \leq 2$  (es decir, corresponden a las imágenes de las cadenas  $\underbrace{0 \dots 0}_l$ ,  $\underbrace{1 \dots 1}_l$  y  $\underbrace{2 \dots 2}_l$ ); de lo que se deduce que el valor máximo de la epistasis normalizada se alcanza sobre las funciones de peso.

En cuanto al valor mínimo, desarrollaremos un estudio paralelo al realizado para alfabetos binarios, en la sección anterior de este mismo capítulo.

Como consecuencia de los resultados obtenidos, en relación a la matriz  $\mathbf{B}_{3,l}$ , determinada por el teorema 5.13, se puede formular la expresión de la epistasis normalizada en términos de esa matriz así:

$$\varepsilon_{3,l}^*(f) = 1 - \frac{1}{3^l} \frac{{}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h}}{\|\mathbf{f}\|^2}.$$

Pero, teniendo en cuenta que

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} h_p^2,$$

donde  $k, r \in \mathbb{N}$ , son tales que  $0 \leq k, r \leq l$ , con  $k$  el mayor natural que verifica  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ ; entonces

$$\varepsilon_{3,l}^*(f) = 1 - \frac{(2l+1)}{3^l} + \frac{2}{3^l} \frac{H(h_0, \dots, h_m)}{\sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} h_p^2}$$

donde

$$H(h_0, \dots, h_m) = \frac{1}{2} \left( \sum_{p=0}^m \left( (2l+1) \binom{l}{k} \binom{k}{r} - (b_{3,l})_{pp} \right) h_p^2 - \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} (b_{3,l})_{pq} h_p h_q \right).$$

Para obtener los valores extremos de la epistasis normalizada, analizaremos los de la función

$$F(h_0, \dots, h_m, \lambda) = H(h_0, \dots, h_m) + \lambda \left( \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} h_p^2 - 1 \right)$$

empleando el método de los multiplicadores de Lagrange, el cual proporciona el sistema homogéneo de  $(m+1)$ -ecuaciones:

$$\frac{\partial F}{\partial h_0} = 2\lambda h_0 - \sum_{q=1}^m (b_{3,l})_{0q} h_q = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial h_1} = \left( \binom{l}{1} (2l+1+2\lambda) - (b_{3,l})_{11} \right) h_1 - \sum_{\substack{q=0 \\ q \neq 1}}^m b_{1q} h_q = 0$$

⋮

$$\frac{\partial F}{\partial h_p} = \left( \binom{l}{k} \binom{k}{r} (2l+1+2\lambda) - (b_{3,l})_{pp} \right) h_p - \sum_{\substack{q=0 \\ q \neq p}}^m (b_{3,l})_{pq} h_q = 0$$

⋮

$$\frac{\partial F}{\partial h_m} = 2\lambda h_m - \sum_{p=0}^{m-1} (b_{3,l})_{pm} h_p = 0.$$

cuyas soluciones son los autovectores  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{m+1}$  asociados a los autovalores de la matriz  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$  cuyos elementos  $(\widehat{b}_{3,l})_{pq}$  verifican, para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq$

$m$ ,

$$(\widehat{b}_{3,l})_{pq} = \frac{(b_{3,l})_{pq}}{\binom{l}{k} \binom{l}{r}},$$

con  $k, r \in \mathbb{N}$ , ( $0 \leq k, r \leq l$ ), y  $k$  el mayor natural que verifica  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ . Nosotros estamos interesados en los autovectores con  $h_i \geq 0, \forall i$

Para poder hallar los autovalores de la matriz  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$ , nos serán útiles los dos siguientes resultados:

**Lema 5.14.-** Para cualesquiera enteros  $u, v$  tales que  $0 \leq u, v \leq l$ , si  $z = \frac{u(u+1)}{2} + v$ , se verifican:

$$i) \sum_{z=0}^m \binom{l}{u} \binom{u}{v} = 3^l,$$

$$ii) \sum_{z=0}^m u \binom{l}{u} \binom{u}{v} = 2 \sum_{z=0}^m v \binom{l}{u} \binom{u}{v} = 2l \cdot 3^{l-1},$$

$$iii) \sum_{z=0}^m u^2 \binom{l}{u} \binom{u}{v} = 2l(2l+1)3^{l-2}, \quad \sum_{z=0}^m v^2 \binom{l}{u} \binom{u}{v} = l(l+2)3^{l-2},$$

$$iv) \sum_{z=0}^m uv \binom{l}{u} \binom{u}{v} = l(2l+1)3^{l-2},$$

donde  $m = \mathcal{CR}(3, l) - 1$ .

**Demostración.-** *i)* Como  $(x+1)^l = \sum_{u=0}^l \binom{l}{u} x^u$ , en particular,

$$\begin{aligned} 3^l &= \sum_{u=0}^l \binom{l}{u} 2^u = \sum_{u=0}^l \binom{l}{u} \left( \sum_{v=0}^u \binom{u}{v} \right) \\ &= \binom{l}{0} \binom{0}{0} + \binom{l}{1} \left( \binom{1}{0} + \binom{1}{1} \right) + \dots \\ &\quad + \binom{l}{l} \left( \binom{l}{0} + \binom{l}{1} + \dots + \binom{l}{l} \right) \\ &= \sum_{z=0}^m \binom{l}{u} \binom{u}{v}; \end{aligned}$$

Por otra parte, derivando la función  $\varphi(x) = (x+1)^l$ , y sustituyendo el valor

de la derivada en  $x = 2$ , se obtiene directamente

$$\sum_{z=0}^m u \binom{l}{u} \binom{u}{v} = 2l \cdot 3^{l-1}.$$

Además,

$$\begin{aligned} \sum_{z=0}^m v \binom{l}{u} \binom{u}{v} &= \sum_{u=0}^l \binom{l}{u} \left( \sum_{v=0}^u v \binom{u}{v} \right) = \frac{1}{2} \sum_{u=0}^l u \binom{l}{u} 2^u \\ &= \frac{1}{2} \sum_{u=0}^l u \binom{l}{u} \left( \sum_{v=0}^u \binom{u}{v} \right) = \frac{1}{2} \sum_{z=0}^m u \binom{l}{u} \binom{u}{v}. \end{aligned}$$

Por lo que respecta a las expresiones de iii), la primera de ellas se demuestra calculando la derivada segunda de la función  $\varphi$ , y valuándola en  $x = 2$ , pues:

$$\begin{aligned} l(l-1)3^{l-2} &= \frac{1}{4} \sum_{u=0}^l u(u-1) \binom{l}{u} 2^u \\ &= \frac{1}{4} \left( \sum_{u=0}^l u^2 \binom{l}{u} 2^u - \sum_{u=0}^l u \binom{l}{u} 2^u \right) \end{aligned}$$

entonces, sólo resta utilizar ii) en esta última expresión, para obtener la igualdad deseada.

La segunda expresión de iii) se obtiene de manera directa con un razonamiento análogo al anterior junto con el hecho de que  $\sum_{v=0}^u v^2 \binom{u}{v} = u(u+1)2^{u-2}$ . Por último, iv) se obtiene de la segunda expresión de iii) también de forma directa.

**Lema 5.15.-** Para todo entero positivo  $l$ , se verifica  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}^2 = 3^l \widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$ .

**Demostración.-** Denotemos por  $(\widehat{b}_{3,l})_{pq}^2$  el elemento genérico de la matriz  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}^2$ , entonces

$$(\widehat{b}_{3,l})_{pq}^2 = \sum_{z=0}^m (\widehat{b}_{3,l})_{pz} (\widehat{b}_{3,l})_{zq}$$

ahora, al desarrollar la expresión anterior (haciendo uso del teorema 5.13), y utilizar el lema 5.14, un cálculo largo, pero no difícil, conduce a la igualdad requerida.  $\square$

El lema anterior implica que los autovalores de  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$  son 0 y  $3^l$ . (La comprobación de este hecho es análoga a la realizada en el caso binario en la sección anterior).

Para poder describir el espacio de autovectores de  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$ , calculamos a continuación su rango.

**Lema 5.16.-** Para cualquier entero positivo  $l$ ,  $\text{rang}(\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}) = 3$ .

**Demostración.-** De la relación existente entre los elementos de las matrices  $\mathbf{B}_{3,l}$  y  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$ , se sigue que  $\text{rang}(\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}) = \text{rang}(\mathbf{B}_{3,l})$ . Además, para cualesquiera  $0 \leq p, q \leq \mathcal{CR}(3, l) - 1$ ,

$$(b_{3,l})_{pq} = \alpha_p(b_{3,l})_{0q} + \beta_p(b_{3,l})_{1q} + \gamma_q(b_{3,l})_{2q},$$

con  $\alpha_p, \beta_p, \gamma_q \in \mathbb{R}$ . En efecto, con las notaciones de siempre:

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{pq} &= \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right) \\ &= \binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k) \binom{l}{s} \binom{s}{t} (1+l-3s) \\ &\quad + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{(k-r)}{l} \binom{l}{1} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2)(l-2s+t) + (l-1)(l-s-t) + (s-2t)}{l} \right) \\ &\quad + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{r}{l} \binom{l}{1} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-1)(l-2s+t) + (l-2)(l-s-t) - (s-2t)}{l} \right) \\ &= \binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k)(b_{3,l})_{0q} + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{(k-r)}{l} (b_{3,l})_{1q} + \binom{l}{k} \binom{k}{r} \frac{r}{l} (b_{3,l})_{2q}. \end{aligned}$$

Además,

$$\det \begin{pmatrix} (b_{3,l})_{00} & (b_{3,l})_{01} & (b_{3,l})_{02} \\ (b_{3,l})_{10} & (b_{3,l})_{11} & (b_{3,l})_{12} \\ (b_{3,l})_{20} & (b_{3,l})_{21} & (b_{3,l})_{22} \end{pmatrix} = 27l^2,$$

lo que completa la demostración.  $\square$

Si denotamos por  $W_0^{3,l}$  y  $W_1^{3,l}$  los espacios de autovectores en  $\mathbb{R}^{\binom{l+2}{l}}$  correspondientes a los autovalores 0 y  $3^l$ , respectivamente, de  $\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}$ , entonces  $\mathbb{R}^{\binom{l+2}{l}} = W_0^{3,l} \oplus W_1^{3,l}$ , y como  $W_0^{3,l} = \ker(\widehat{\mathbf{B}}_{3,l})$ , (resp.  $W_1^{3,l} = \text{Im}(\widehat{\mathbf{B}}_{3,l})$ ), entonces es claro que  $\dim(W_0^{3,l}) = \frac{l(l+3)}{2} - 2$ , y  $\dim(W_1^{3,l}) = 3$ . Ahora, nosotros tenemos:

**Proposición 5.17.-** Los vectores  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$ , y  $\mathbf{v}_3$  definidos por

$${}^t\mathbf{v}_1 = \left( 1, 0, 0, -1, -1, -1, -2, -2, -2, -2, \dots, -\overbrace{(l-1), \dots, -(l-1)}^{l+1} \right),$$

$${}^t\mathbf{v}_2 = (0, 1, 0, 2, 1, 0, 3, 2, 1, \dots, 0, l, (l-1), \dots, 2, 1, 0),$$

$${}^t\mathbf{v}_3 = (0, 0, 1, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 3, \dots, 0, 1, 2, \dots, (l-1), l),$$

forman una base para  $W_1^{3,l}$ .

**Demostración.-** Como los tres vectores son claramente linealmente independientes, bastará ver que son elementos de  $W_1^{3,l}$ . Comprobaremos este hecho para el vector  $\mathbf{v}_3$  solamente; un razonamiento similar prueba que los otros dos vectores están en el espacio  $W_1^{3,l}$ .

Nótese en primer lugar que, si  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ , ( $0 \leq k, r \leq l$ ), entonces las componentes  $p$ -ésimas de  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$ , y  $\mathbf{v}_3$  son, respectivamente,  $1 - k$ ,  $k - r$  y  $r$ .

Entonces

$$\begin{aligned} (\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}\mathbf{v}_3)_p &= \sum_{q=0}^m \widehat{b}_{pq}(\mathbf{v}_3)_q = \sum \binom{l}{s} \binom{s}{t} t \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right) \\ &= \sum t \binom{l}{s} \binom{s}{t} + \frac{(l-2k+r)}{l} \sum (lt - 2st + t^2) \binom{l}{s} \binom{s}{t} \\ &\quad + \frac{(l-k-r)}{l} \sum (lt - st - t^2) \binom{l}{s} \binom{s}{t} + \frac{(k-2r)}{l} \sum (st - 2t^2) \binom{l}{s} \binom{s}{t}. \end{aligned}$$

utilizando ahora el lema 5.14 se obtiene fácilmente

$$(\widehat{\mathbf{B}}_{3,l}\mathbf{v}_3)_p = 3^l r = 3^l (\mathbf{v}_3)_p.$$

Finalmente, el siguiente resultado caracteriza las funciones de peso sobre alfabetos ternarios con epistasis mínima:

**Proposición 5.18.-** Sea  $f$  una función de peso, sobre un alfabeto de tres elementos, valuada positiva. Entonces,  $f$  tiene epistasis cero si, y sólo si, su

vector asociado  $\mathbf{h}$  es

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ (1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2 \\ \vdots \\ (1-l)h_0 + lh_2 \end{pmatrix},$$

donde la componente  $p$ -ésima  $h_p$  de  $\mathbf{h}$ , con  $p = \frac{k(k+1)}{2} + r$ , es

$$h_p = (1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2.$$

**Demostración.-** Será suficiente demostrar que  ${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h} = 3^l \|\mathbf{f}\|^2$ . Ahora bien, dado que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}\|^2 &= \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} h_p^2 \\ &= \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} ((1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2)^2 \\ &= h_0^2 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k)^2 + h_1^2 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} (k-r)^2 \\ &\quad + h_2^2 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} r^2 + 2h_0h_1 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k)(k-r) \\ &\quad + 2h_0h_2 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k)r + 2h_1h_2 \sum_{p=0}^m \binom{l}{k} \binom{k}{r} (k-r)r \end{aligned}$$

y que

$${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h} = \sum_{p=0}^m (b_{3,l})_{pp} h_p^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} (b_{3,l})_{pq} h_p h_q$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{p=0}^m (b_{3,l})_{pp} ((1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2)^2 \\
&\quad + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} (b_{3,l})_{pq} ((1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2) ((1-s)h_0 + (s-t)h_1 + th_2)
\end{aligned}$$

donde la componente  $q$ -ésima se ha representado, como siempre, por  $q = \frac{s(s+1)}{2} + t$ , ( $0 \leq s, t \leq l$ ); entonces agrupando los términos de  $\|\mathbf{f}\|^2$  y de  ${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h}$  respecto de los coeficientes de  $h_0^2$ ,  $h_1^2$ ,  $h_2^2$ ,  $h_0h_1$ ,  $h_0h_2$  y  $h_1h_2$ , bastará comparar dichos coeficientes para demostrar la afirmación establecida.

En particular, el coeficiente de  $h_0^2$  en  ${}^t\mathbf{h}\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h}$  es:

$$\begin{aligned}
&\sum_{p=0}^m (b_{3,l})_{pp} (1-k)^2 + \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} (b_{3,l})_{pq} (1-k)(1-s) \\
&= \sum_{p=0}^m \binom{l}{k}^2 \binom{k}{r}^2 \left( 1 + \frac{(l-2k+r)^2 + (l-k-r)^2 + (k-2r)^2}{l} \right) (1-k)^2 \\
&+ \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} \binom{l}{k} \binom{k}{r} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right) (1-k)(1-s)
\end{aligned}$$

Fijando su término  $p$ -ésimo, utilizando el lema 5.14 y extrayendo factor común  $\binom{l}{k} \binom{k}{r} (1-k)$ , se obtiene:

$$\begin{aligned}
&\binom{l}{k} \binom{k}{r} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)^2 + (l-k-r)^2 + (k-2r)^2}{l} \right) (1-k) \\
&+ \sum_{\substack{p,q \\ p \neq q}} \binom{l}{s} \binom{s}{t} \left( 1 + \frac{(l-2k+r)(l-2s+t) + (l-k-r)(l-s-t) + (k-2r)(s-2t)}{l} \right) (1-s) = 3^l (1-k).
\end{aligned}$$

Un razonamiento análogo sirve para comparar los coeficientes de  $h_1^2$ ,  $h_2^2$ ,  $h_0h_1$ ,  $h_0h_2$  y  $h_1h_2$ , lo que completa la demostración.  $\square$

**Nota.** Como sucedía en el caso binario, también aquí se puede obtener el vector  $\mathbf{h}$  de la última proposición de una manera más sencilla. Teniendo en cuenta que, como se ha demostrado ya en el teorema 4.10 del capítulo anterior (ver también [17]), una función  $f$  tiene epistasis cero si, y sólo si,

$$f(s_{l-1}, \dots, s_0) = \sum_{i=0}^{\ell-1} g(i, s_i) = \sum_{i_1/s_{i_1}=0} g(i_1, 0) + \sum_{i_2/s_{i_2}=1} g(i_2, 1) + \sum_{i_3/s_{i_3}=2} g(i_3, 2).$$

y que además en el caso en el que  $f$  sea una función de peso, se tiene

$$f(s_{l-1}, \dots, s_0) = h_p = f(\overbrace{0 \dots 0}^{l-k} 1 \dots 1 \overbrace{2 \dots 2}^r) = \dots = f(\overbrace{2 \dots 2}^r 1 \dots 1 \overbrace{0 \dots 0}^{l-k}),$$

para algún  $p$  ( $0 \leq p \leq \binom{l+2}{l} - 1$ ).

Entonces, se deduce fácilmente que, si  $f$  es una función de peso con epistasis nula, se verifican:

$$\begin{aligned} g(i, 1) - g(i, 0) &= cte = \alpha, \\ g(i, 2) - g(i, 0) &= cte = \beta, \end{aligned}$$

para  $i = 0, \dots, l-1$ . En consecuencia,  $\varepsilon_l^*(f) = 0$  equivale a

$$f(s) = h_p = r\beta + (k-r)\alpha + f(0 \dots 0);$$

en particular,

$$h_0 = f(0 \dots 0), \quad h_1 = \alpha + f(0 \dots 0) \quad \text{y} \quad h_2 = \beta + f(0 \dots 0)$$

Y de ello se obtiene que

$$\alpha = h_1 - h_0 \quad \text{y} \quad \beta = h_2 - h_0$$

Por tanto, para todo  $0 \leq p \leq \binom{l+2}{l} - 1$ :

$$h_p = (1-k)h_0 + (k-r)h_1 + rh_2$$

como se quería demostrar.  $\square$

Por lo que respecta a los autovectores asociados al autovalor cero de  $\mathbf{B}_{3,l}$ , el último resultado de esta sección muestra que algunas de sus componentes son negativas, por lo que no son autovectores del tipo requerido.

**Proposición 5.19.-** Si  $\mathbf{h} = {}^t(h_0, \dots, h_m) \in W_0^{3,l}$ , entonces al menos una componente es negativa.

**Demostración.-** Si  $\mathbf{h} \in W_0^{3,l}$ , entonces  $\mathbf{h} \in \ker(\mathbf{B}_{3,l})$  y el sistema homogéneo  $\mathbf{B}_{3,l}\mathbf{h} = \mathbf{0}$  se reduce a:

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{00}h_0 + (b_{3,l})_{01}h_1 + (b_{3,l})_{02}h_2 &= -\sum_{q=3}^m (b_{3,l})_{0q}h_q \\ (b_{3,l})_{10}h_0 + (b_{3,l})_{11}h_1 + (b_{3,l})_{12}h_2 &= -\sum_{q=3}^l (b_{3,l})_{1q}h_q \\ (b_{3,l})_{20}h_0 + (b_{3,l})_{21}h_1 + (b_{3,l})_{22}h_2 &= -\sum_{q=3}^l (b_{3,l})_{2q}h_q, \end{aligned}$$

que, teniendo en cuenta que,  $\mathbf{B}_{3,l}$  es simétrica, y que  $(b_{3,l})_{01} = (b_{3,l})_{02}$ , y  $(b_{3,l})_{11} = (b_{3,l})_{22}$ , para todo  $l$ , entonces

$$\begin{aligned} h_1 &= \frac{1}{27l^2} \sum_{q=3}^m ((b_{3,l})_{00}(b_{3,l})_{11} - (b_{3,l})_{01}^2) (b_{3,l})_{1q} \\ &\quad + \frac{1}{27l^2} \sum_{q=3}^m ((b_{3,l})_{01}((b_{3,l})_{12} - (b_{3,l})_{11})) (b_{3,l})_{0q} \\ &\quad + \frac{1}{27l^2} \sum_{q=3}^m ((b_{3,l})_{01}^2 - (b_{3,l})_{12}(b_{3,l})_{00}) (b_{3,l})_{2q} \end{aligned}$$

Pero, como para todo  $l$ , se verifican:

$$\begin{aligned} (b_{3,l})_{00}(b_{3,l})_{11} - (b_{3,l})_{01}^2 &= 3l(l+2), \\ (b_{3,l})_{01}((b_{3,l})_{12} - (b_{3,l})_{11}) &= 3l(l-1), \\ (b_{3,l})_{01}^2 - (b_{3,l})_{12}(b_{3,l})_{00} &= 6l^2(1-l); \end{aligned}$$

entonces

$$h_1 = -\frac{1}{l^2} \sum_{q=3}^m (s-t) \binom{l}{s} \binom{s}{t} h_q,$$

con lo que finaliza la demostración.  $\square$

# Bibliografía

- [1] Battle, D.L. y Vose, M.D., *Isomorphisms of Genetic Algorithms*, Foundations of Genetic Algorithms 1. Rawlins, G. J. E. Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 242-251. San Mateo, 1991.
- [2] Davidor, Y., *Epistasis Variance: A Viewpoint on GA-Hardness*, Foundations of Genetic Algorithms 1. Ed. G. J. E. Rawlins, Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 23-35. San Mateo, 1991.
- [3] De Burgos, J., *Álgebra Lineal*. McGraw-Hill/Interam. S.A. Madrid, 1993.
- [4] Deb, K. and Goldberg, D.E., *A Comparative Analysis of Selection Schem. es Used in Genetic Algorithms*, Foundations of Genetic Algorithms 1. Rawlins, G. J. E. Morgan Kaufmann Publishers, pgs.69-93. San Mateo, 1991.
- [5] Deb, K. and Goldberg, D.E., *Analyzing Deception in Trap Functions*, Foundations of Genetic Algorithms 1. Ed. Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 93-108. San Mateo, 1993.
- [6] Do Carmo, M., *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1976.
- [7] Dubois, D, y Prade, H., *Fuzzy Sets and Systems: Theory and Applications*, Academic Press, New York, 1980.
- [8] Farreras, P. y Rozman, C., *Medicina Interna*. Vol. I, 12<sup>a</sup> ed. Ed. Doyma, Barcelona, 1992.
- [9] Field, P., *A multary theory for genetic algorithms: Unifying binary and nonbinary problem representations*, ph. d. thesis, University of London, 1996.

- [10] Forrest, S y Mitchell, M., *Relative building block fitness and the building block hypothesis*, Foundations of Genetic Algorithms 2, ed. L. D. Whitley, Morgan Kaufmann Publishers, pgs.109-126. San Mateo, 1993.
- [11] Goldberg, D.E., *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1989.
- [12] Goldberg, D.E., *Simple Genetic Algorithms and the Minimal Deceptive Problem*. Genetic Algorithms and Simulated Annealing, L. Davis (Ed), Morgan Kaufmann Publishers, 1987.
- [13] Grefenstette, J.J., *Deception Considered Harmful*, Foundations of Genetic Algorithms 2. Ed. Whitley, L.D. Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 75-91. San Mateo, 1993.
- [14] Holland, J.H., *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, 2ªed. Massachusetts Institute of Tecnology, MIT Press Ed.1992
- [15] Iglesias, M.T, Vidal, C. y Verschoren, A., *A Global Approach to Schemata*. International Conference on Intelligent Technologies in Human-Related Sciences (ITHURS'96) Vol. I, pgs.147-152, León, 1996.
- [16] Iglesias, M.T, Vidal, C., Suys, D. y Verschoren, A., *Multary Epistasis*. Enviado para su publicación al Journal of Evolutionary Computation.
- [17] Iglesias, M.T, Vidal, C., Suys, D. y Verschoren, A., *Epistasis and Unitation*. Enviado para su publicación a Computers and A.I..
- [18] Lehninger, A.L., *Curso Breve de Bioquímica*. Ed. Omega, S.A., 1976.
- [19] Liepins, G.E. y Vose, M.D., *Deceptiveness and Genetic Algorithm Dynamics*, Foundations of Genetic Algorithms 1. Ed. Rawlins, G. J. E. Morgan Kaufmann Publishers, pgs.36-50. San Mateo, 1991.
- [20] Marsden, J.E y Tromba, A.J., *Vector Calculus*, 3ªed. Freeman and Company, 1988
- [21] Michalewicz, Z., *Genetic Algorithms+Data Structures=Evolution Programs*, 3ªed. Springer-Verlag, 1996.
- [22] Naudts, B., Suys, D. y Verschoren, A., *Generalized Royal Road functions and their epistasis*, to appear.

- [23] Naudts, B., y Verschoren, A., *Epistasis and deceptivity*. Preprint
- [24] Rawlins, G. J. E., *Foundations of Genetic Algorithms*, Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, 1991.
- [25] D. Suys, D. y Verschoren, A., *Extreme epistasis*, International Conference on Intelligent Technologies in Human-Related Sciences (ITHURS'96) Vol. II, 251-258, León, 1996.
- [26] Van Hove, H., *Representational issues in genetic algorithms*, ph.d. thesis, University of Antwerp, 1995.
- [27] Van Hove, H. y Verschoren, A., *On Epistasis*, *Computers and AI*, 14 (1994) 271-277.
- [28] Van Hove, H. y Verschoren, A., *What is epistasis?*, *Bull. Soc. Math. Belg. Simon Stevin*, to appear.
- [29] Van Lint, J. H., *Introduction to Coding Theory*, Springer Verlag, New York, 1982.
- [30] Verschoren, A. y Van Hove, H., *A Fuzzy Schema Theorem*. Aceptado para su publicación en *Fuzzy sets and systems*.
- [31] Vose, M.D., *Generalizing the notion of schema in genetic algorithms*, *Artificial Intelligence*, Vol.50, pgs.385-396, 1991.
- [32] Vose, M.D., *Modeling Simple Genetic Algorithms*, *Foundations of Genetic Algorithms 2*. Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 63-73. San Mateo, 1993.
- [33] Vose, M.D., *A Critical Examination of the Schema Theorem*. Technical Report, The University of Tennessee, 1995.
- [34] Whitley, L.D., *Fundamental Principles of Deception in Genetic Search*. *Foundations of Genetic Algorithms 1*. Ed. G. J. E. Rawlins, Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 221-241. San Mateo, 1991.
- [35] Whitley, L.D., *Foundations of Genetic Algorithms 2*. Morgan Kaufmann Publishers. San Mateo, 1993.

- [36] Wright, A.H., Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization. Foundations of Genetic Algorithms 1. Ed. G. J. E. Rawlins, Morgan Kaufmann Publishers, pgs. 205-218. San Mateo, 1991.

UNIVERSIDADE DA CORUÑA  
Servicio de Bibliotecas



1700757421