

Corso Intelligenza Artificiale
Algoritmi Genetici (GA)
Esperimenti da realizzare nel Laboratorio Virtuale *Evolution*
Ottimizzazione di strutture molecolare 2D e 3D con algoritmi evolutivi

1. The cube 27H

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	HHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHH
Initial popolation	300
Number of generation	500
Elitism	No
Optimal fitness	-28

Results	Experiments									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Highest score	-26	-25	-28	-26	-28	-28	-26	-28	-28	-25
Final score	-25	-25	-25	-25	-24*	-28**	-25	-26	-28***	-25
Final average Rg	1.5177	1.5198	1.6631	1.6825	1.6129	1.4974	1.5148	1.4370	1.4142	1.5637
Final average Dmax	4.1231	4.1231	4.9367	4.9526	4.7186	4.1130	4.2259	3.7416	3.4641	4.0979

*: No convergenza.

****:** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazioni e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

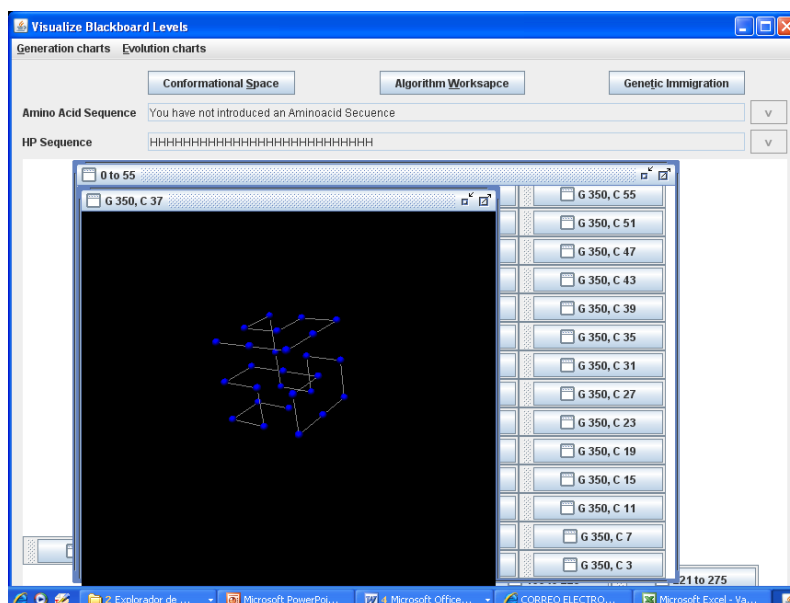
Highest score										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	-20	-21	-19	-21	-24	-20	-18	-19	-20	-23
200	-23	-25	-23	-21	-22	-21	-21	-21	-25	-23
300	-25	-25	-25	-25	-25	-25	-24	-26	-26	-25
400	-25	-25	-25	-25	-25	-25	-25	-26	-28	-25
500	-25	-25	-25	-25	-24	-28	-25	-26	-28	-25

	Average Rg									
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	2.3667	2.2530	2.3465	2.3273	2.2480	2.2711	2.2693	2.2730	2.3123	2.1946
200	2.1682	1.9623	2.2229	2.2176	2.0692	2.2186	2.1664	2.2640	1.9075	2.0034
300	1.7834	1.7063	1.8395	2.0637	1.8168	1.8575	1.9210	1.9418	1.5610	1.6779
400	1.6102	1.5200	1.7524	2.0057	1.7349	1.6961	1.6482	1.5176	1.4257	1.5752
500	1.5177	1.5198	1.6631	1.6825	1.6129	1.4974	1.5148	1.4370	1.4142	1.5637

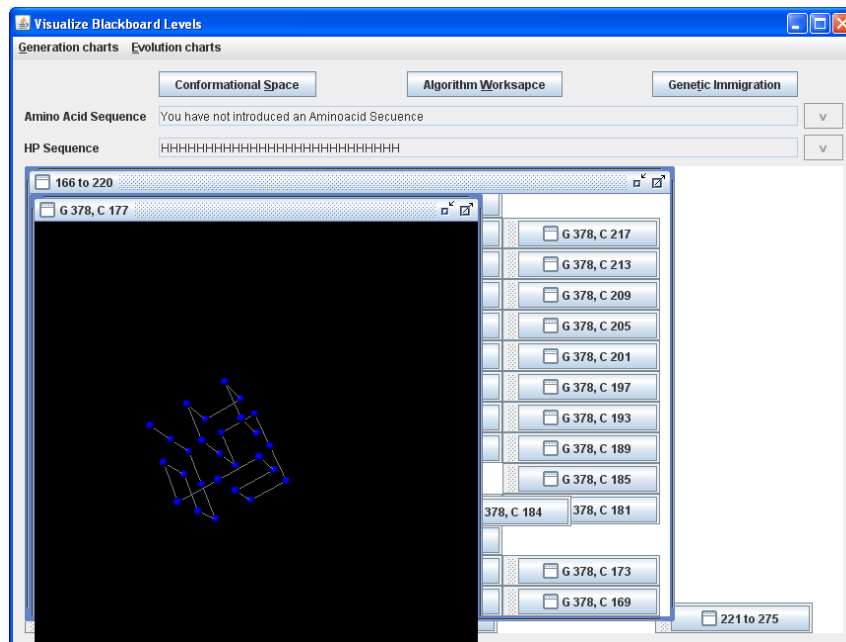
Gen./Run:	Average Dmax									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	6.9365	6.5349	6.7437	6.8606	6.4879	6.7009	6.6853	6.6273	6.8236	6.3292
200	6.3098	5.8019	6.4401	6.4463	6.0772	6.3732	6.2838	6.5469	5.5815	5.8769
300	5.3484	5.0219	5.5261	6.0306	5.3896	5.4975	5.6301	5.7440	4.5563	4.8467
400	4.5434	4.1287	5.2108	5.9169	5.1925	5.0276	4.8369	4.3518	3.5407	4.3257
500	4.1231	4.1231	4.9367	4.9526	4.7186	4.1130	4.2259	3.7416	3.4641	4.0979

1.1. Results

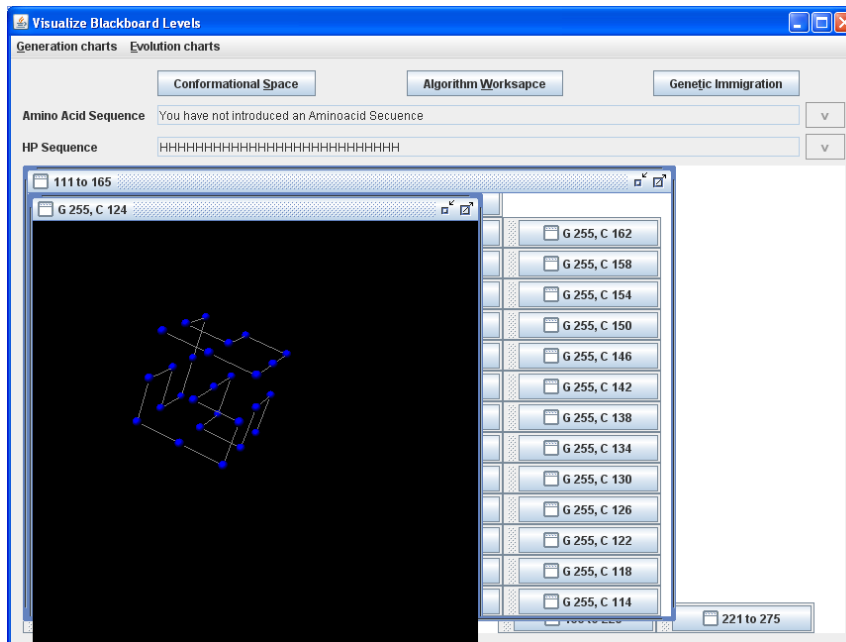
Experiment number: 3, Fitness value: -28, Rg: 1.4141, Dmax: 3.4641



Experiment number: 3, Fitness value: -28, Rg: 1.4142, Dmax: 3.4641



Experiment number: 5, Fitness value: -28, Rg: 1.4142, Dmax: 3.4641



2. The palindromic cube 27 HP

Parameter	Value
Algoritmo	Simple
HP sequence	HHPHHHPHHHPHHHPHHHPHHHPHH
Initial population	300
Number of generation	500
Elitism	Yes
Optimal fitness	-24

Results	Experiments									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Highest score	-21	-22	-21	-20	-19	-20	-20	-20	-21	-19
Final score	-19	-22	-20	-19	-19	-18	-17	-20	-21	-19
Final average Rg	1.6686	1.4511	1.6522	1.5464	1.6549	1.4866	1.6409	1.5625	1.4748	1.5713
Final average Dmax	4.7668	3.7416	4.7192	4.2136	4.9199	4.1231	4.9173	4.3886	4.0187	4.2426

*: No convergenza.

**: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazioni e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

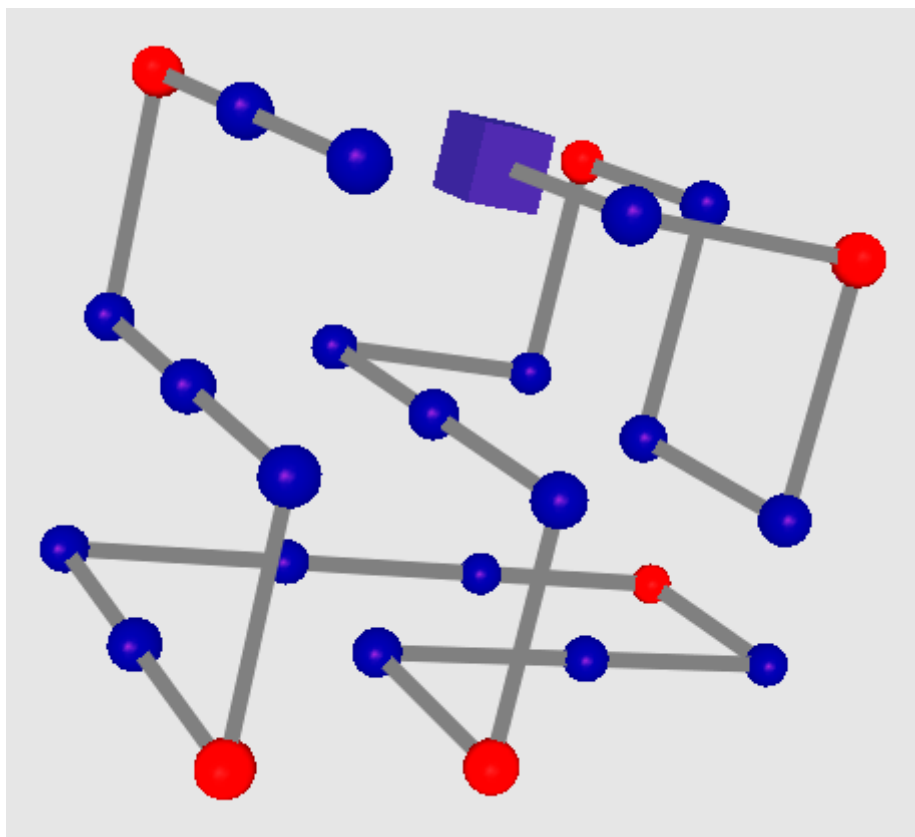
Dmax: Maximal diameter

Highest score										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	-17	-14	-18	-17	-16	-17	-17	-15	-17	-16
200	-20	-18	-18	-20	-19	-18	-16	-19	-19	-18
300	-20	-21	-18	-20	-19	-18	-19	-20	-20	-19
400	-19	-21	-18	-20	-19	-18	-21	-20	-19	-19
500	-19	-19	-18	-20	-18	-18	-21	-20	-19	-19

Average Rg										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	2.1979	2.2876	2.0499	2.1050	2.1914	2.2185	2.2152	2.2126	2.1593	2.2553
200	1.5494	2.1904	1.7990	1.9115	1.8583	1.8911	2.1433	1.8884	1.9587	1.8275
300	1.5246	1.8811	1.5850	1.6077	1.6606	1.6365	1.8970	1.5700	1.6198	1.6637
400	1.5156	1.7065	1.5649	1.4976	1.6118	1.6484	1.6772	1.5141	1.5484	1.6577
500	1.5147	1.6492	1.5595	1.4943	1.5656	1.6605	1.5128	1.5078	1.5484	1.6478

Average Dmax										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	6.4797	6.7303	5.9810	6.1757	6.4280	6.4960	6.4908	6.4612	6.2683	6.6719
200	4.2239	6.3833	5.4157	5.7022	5.4916	5.6627	6.3355	5.5716	5.9333	5.3262
300	4.1278	5.5065	4.4169	4.4346	4.7790	4.8883	5.7071	4.3480	4.4993	4.7994
400	4.1231	4.9020	4.2617	4.1231	4.6211	5.0088	4.8805	3.8479	4.2426	4.8546
500	4.1231	4.4980	4.2470	4.1231	4.3045	5.0883	4.1277	3.7786	4.2426	4.7189

A near optimal configuration for the palindromic cube 27 HP (fitness = -22)



Parameter	Value
Algoritmo	Simple
HP sequence	HHPHHHPHHHPHHHPHHHPHHHPHH
Initial population	300
Number of generation	500
Elitism	No
Optimal fitness	-24

Results	Experiments									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Highest score	-19	-19	-18	-20	-18	-18	-18	-19	-17	-20
Final score	-19	-19	-17	-20	-16	-17	-17	-18	-16	-19
Final average Rg	1.1189	1.0709	1.1059	1.1028	1.1492	1.1179	1.1444	1.17	1.0738	1.0534
Final average Dmax	4.3461	3.7417	4.3411	4.3589	4.4721	4.5826	5.099	4.899	3.7417	4.1231

*: No convergenza.

***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

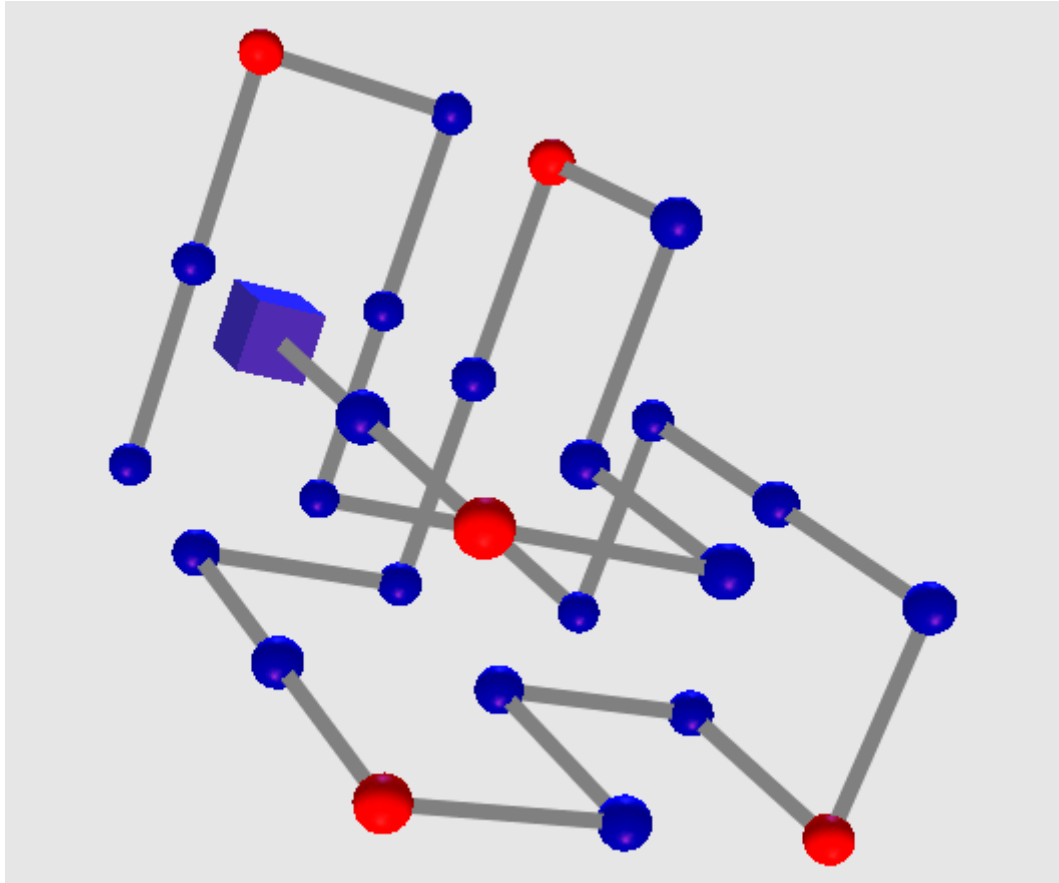
Dmax: Maximal diameter

Highest score										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	-18	-17	-15	-16	-15	-16	-16	-18	-13	-17
200	-19	-19	-18	-20	-16	-17	-17	-18	-16	-19
300	-19	-19	-17	-20	-16	-17	-17	-18	-16	-19
400	-19	-19	-17	-20	-16	-18	-17	-18	-16	-19
500	-19	-19	-17	-20	-16	-17	-17	-18	-16	-19

Average Rg										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	1.3183	1.4752	1.5874	1.5102	1.5213	1.4353	1.5304	1.3849	1.6039	1.4539
200	1.2091	1.2444	1.1825	1.187	1.1994	1.275	1.2833	1.1899	1.3539	1.1235
300	1.2311	1.0747	1.1166	1.1159	1.1567	1.1738	1.1539	1.1818	1.1349	1.0632
400	1.1339	1.0709	1.1113	1.1029	1.1515	1.1251	1.1502	1.1704	1.0711	1.0534
500	1.1189	1.0709	1.1059	1.1028	1.1492	1.1179	1.1444	1.17	1.0738	1.0534

Average Dmax										
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100	5.606	6.0841	6.7405	6.1388	6.3298	6.0722	6.2933	5.8671	6.6226	6.0796
200	5.0975	5.0841	4.906	4.8938	4.9022	5.4577	5.4612	4.9044	5.6467	4.3851
300	5.0827	3.7417	4.3005	4.4437	4.4959	4.8476	5.1129	4.899	4.2706	4.1231
400	4.3737	3.7417	4.3085	4.3589	4.4721	4.5803	5.099	4.899	3.7417	4.1231
500	4.3461	3.7417	4.3411	4.3589	4.4721	4.5826	5.099	4.899	3.7417	4.1231

A near optimal configuration for the palindromic cube 27 HP
(fitness = -19)



3. The palindromic cube 27HP

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	HHPHPHPHHHHPHHPHHHHPHHPHH
Initial population	300
Number of generation	500
Elitism	No: 50% Yes: 50%
Optimal fitness	-21

[illegible]

*: No convergenza.

****:** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

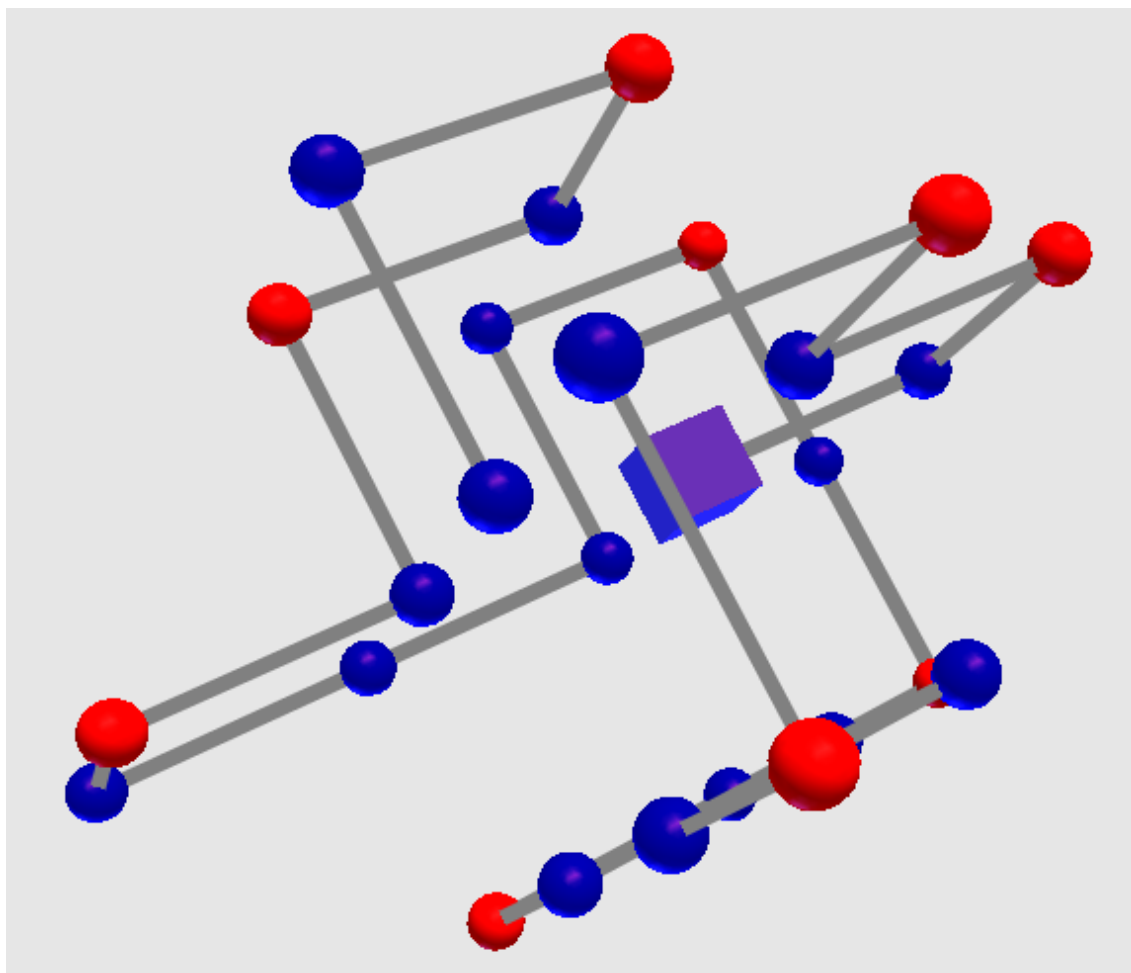
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

A near optimal configuration for the palindromic cube 27 H18P9
(fitness = -18)



4.1. $H_2P_4H_2P_4H_2P_4H_2P_4H$

Parameter	Value
Algortihm	
HP sequence	H ₂ P ₄ H ₂ P ₄ H ₂ P ₄ H ₂ P ₄ H
Initial popolation	200
Number of generation	500
Elitism	No
Other parameters	
Optimal fitness	-8

[illegible]

*: No convergenza.

** : Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

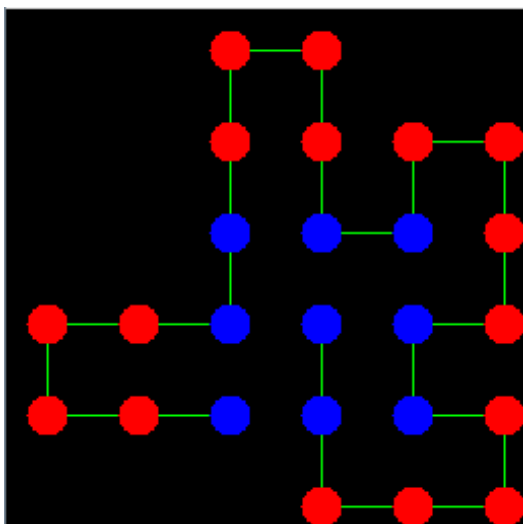
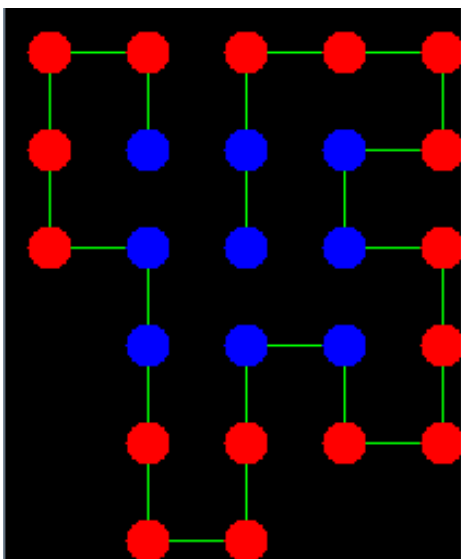
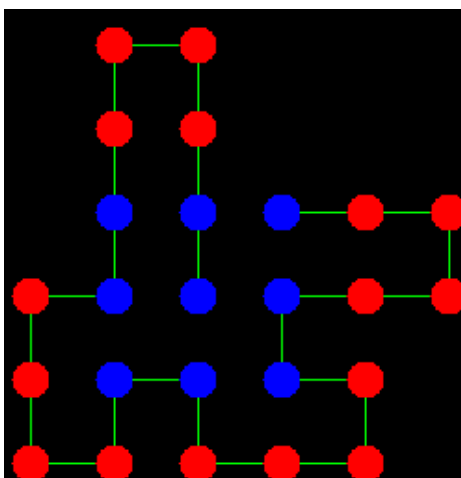
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazioni e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structures for 2D 25 $\text{H}_2\text{P}_4\text{H}_2\text{P}_4\text{H}_2\text{P}_4\text{H}_2\text{P}_4\text{H}$
(fitness = -8)



4.2. $\text{H}_4\text{PH}_5\text{PH}_5\text{PH}_5\text{PH}_2$

Parameter	Value
Algorithm	
HP sequence	H ₄ PH ₅ PH ₅ PH ₅ PH ₂
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-16

[illegible]

*: No convergenza.

**:: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

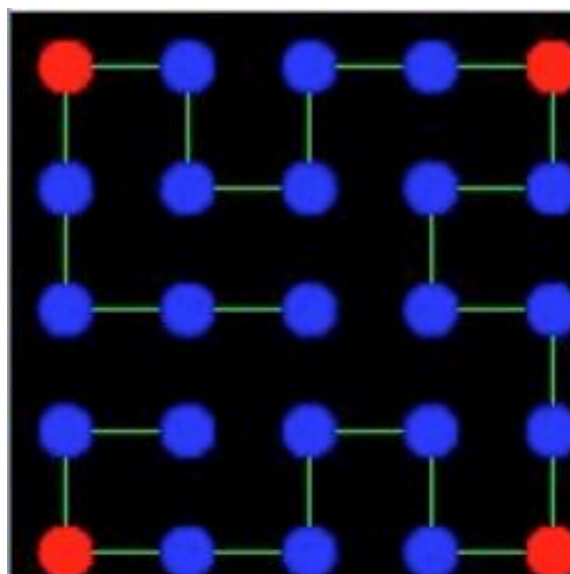
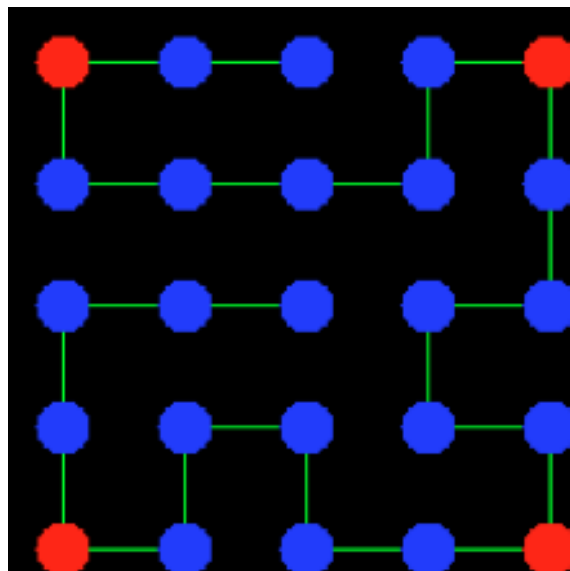
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structures for 2D 25 $\text{H}_4\text{PH}_5\text{PH}_5\text{PH}_5\text{PH}_2$
(fitness = -16)



4.3. $\text{H}_2\text{P}\text{H}\text{P}_2\text{H}_2\text{P}\text{H}\text{P}_2\text{H}_2\text{P}\text{H}\text{P}_2\text{H}_2\text{P}\text{H}\text{P}_2\text{H}$

Parameter	Value
Algorithm	
HP sequence	H ₂ PHP ₂ H ₂ PHP ₂ H ₂ PHP ₂ H ₂ PHP ₂ H
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-12

[illegible]

*: No convergenza.

**:: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

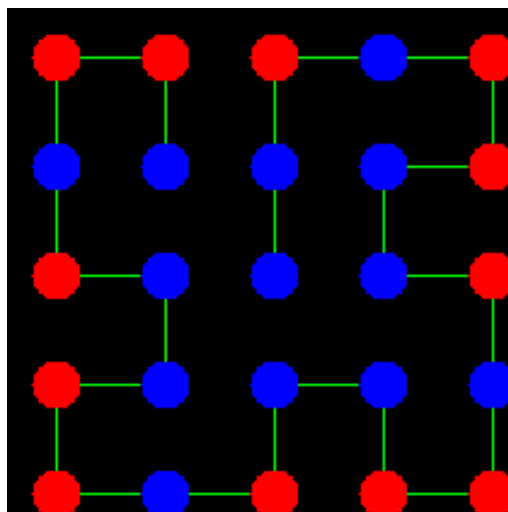
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structures for 2D 25 $\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2$
 (fitness = -12)



5.1. 2D HP sequence: 18-mer HHHPHPHPPHPPHPPH

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	HHH PH PH PPH PH PPH PPH
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-9

[illegible]

*: No convergenza.

** : Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

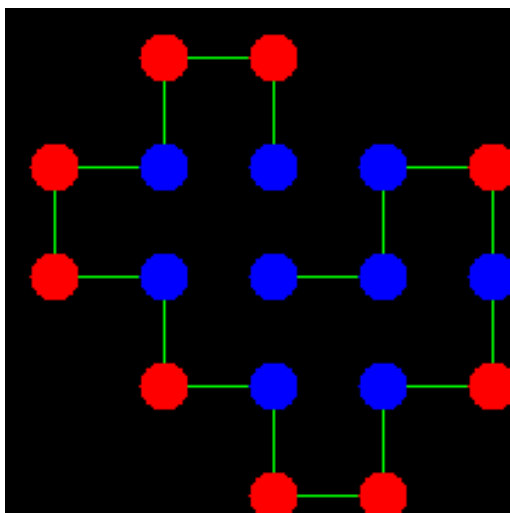
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structure for 2D 18 **H****H****H****P****H****P****H****P****P****H****P****H****P****P****H****P****P****H**
(fitness = -9)



5.2. 2D HP sequence: 18-mer PHPHHHPPPHHHHPPHH

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	H P H P H H H P P P H H H H P P H H
Initial popolation	200
Number of generation	500
Elitism	
Optimal fitness	-8

[illegible]

*: No convergenza.

** : Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

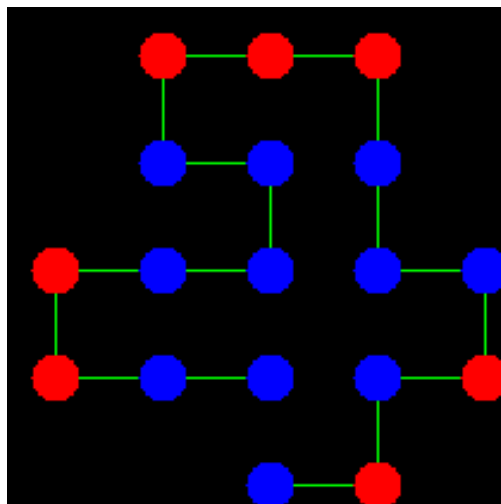
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structure for 2D 18 **H****P****H****P****H****H****P****P****H****H****H****P****P****H****H**
(fitness = -8)



5.3. 2D HP sequence: 20-mer PHPPHPPHHPPHHPPHPPHP

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	P H P P H P P H H P P H H P P H P P H P
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-8

[illegible]

*: No convergenza.

****:** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

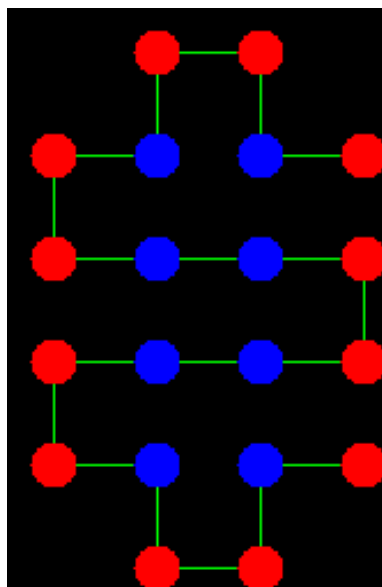
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structure for 2D 20 **PHPPHPPHHPPHHPPPHPPH**
(fitness = -8)



5.4. 2D HP sequence: 20-mer HHHPPHPHPHPHPHPHPHPH

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	HHHPHPHPHPHPHPHPHPH
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-10

[illegible]

*: No convergenza.

****:** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

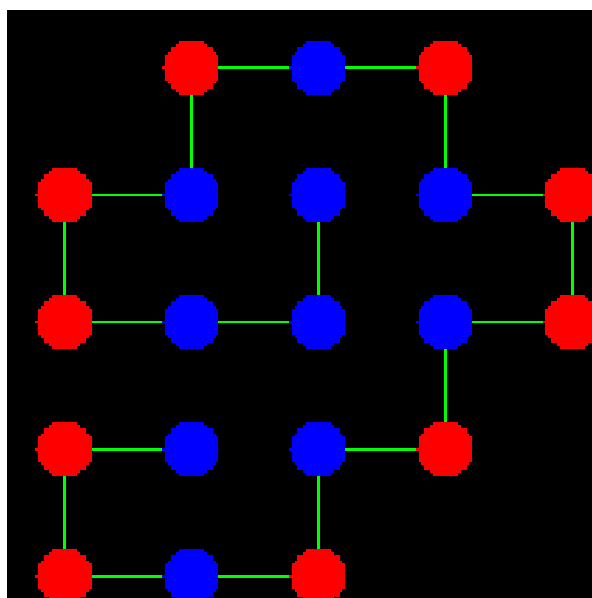
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

Optimal structure for 2D 20 **HHHPPHPPHPPHPPHPPH**
(fitness = -10)



6. The 2D HP-36 problem:
P3H2P2H2P5H7P2H2P4H2P2HP2

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	P3H2P2H2P5H7P2H2P4H2P2HP2
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-14

[illegible]

*: No convergenza.

** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

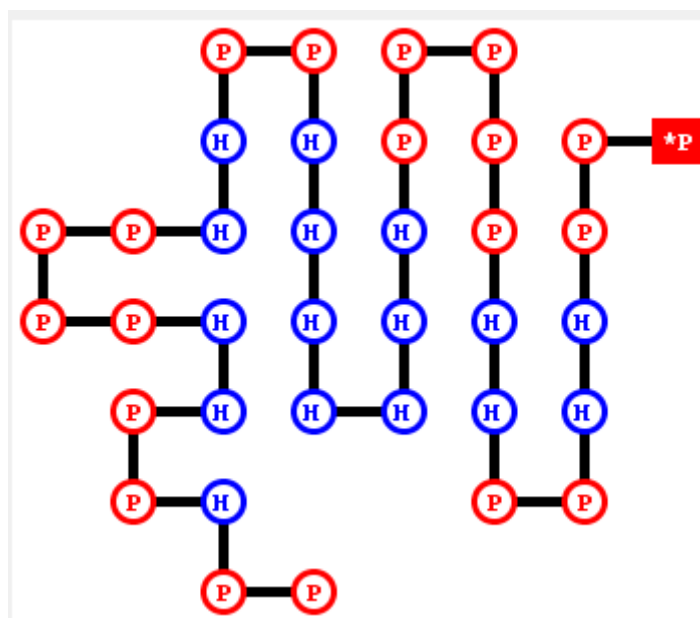
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

A near optimal configuration for 2D HP-36 problem with fitness = -12



7. The 2D HP-48 problem: P2H(P2H2)2P5H10P6(H2P2)2HP2H5

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	P2H(P2H2)2P5H10P6(H2P2)2HP2H5
Initial popolation	
Number of generation	
Elitism	
Optimal fitness	-23

[illegible]

*: No convergenza.

****:** Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 50 generazioni, anche se non si è raggiunta la convergenza.

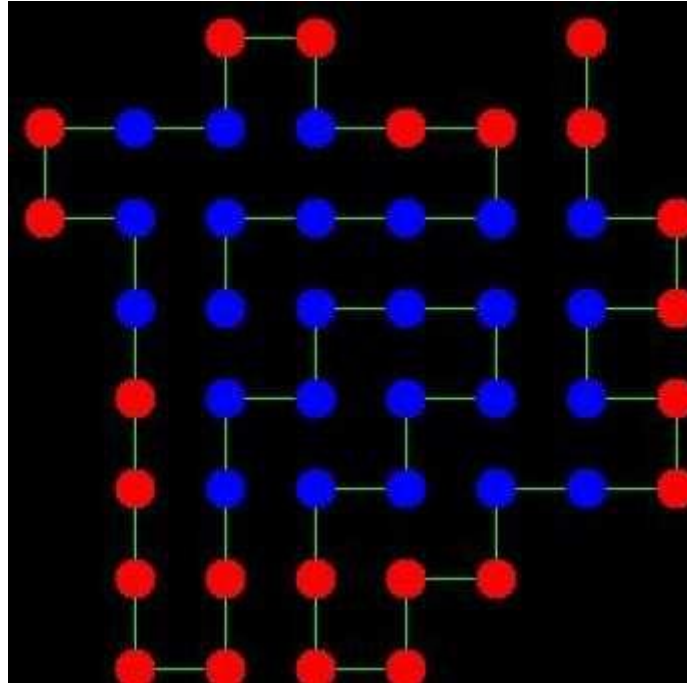
***: Il valore ottimo persiste attraverso le ultime 100 generazione e si raggiunge la convergenza.

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

[illegible][illegible]

**A near optimal configuration for 2D HP-48 problem
(fitness = -22)**



8. Progetto finale per il tema Algoritmi genetici: the 3D HP-48 problems

Formare dei piccoli gruppi di lavoro.
Scegliere uno dei seguenti argomenti:

- i. H4PH2PH5P2HP2H2P2HP6HP2HP3HP2H2P2H3PH (optimal fitness = -34)
- ii. P2HP3HPH4P2H4PH2PH3P2(HP)2HP2HP6H2PH2PH (optimal fitness = -32)
- iii. PHP4HPH3PHPH4PH2PH2P3HPHP3H3(P2H2)2P3H (optimal fitness = -32)

Per la sequenza scelta realizzare una proposta di progetto che consideri i parametri, gli esperimenti e i risultati attesi che si elencano di seguito:

8.1.

Parameter	Value
Algorithm	Simple
HP sequence	
Initial popolation	200
Number of generation	500
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-34

8.2.

Results	Experiments									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Highest score										
Final score										
Final average Rg										
Final average Dmax										

Rg: Radius of gyration
Dmax: Maximal diameter

8.3.

[illegible]

8.4.

[illegible]

8.5. Near optimal configurations for 3D HP-48 problem

8.6.

Parameter	Value
Algorithm	RankGA
HP sequence	
Initial population	200
Number of generation	500
Elitism	
Other parameters	
Optimal fitness	-34

8.7.

[illegible]

Rg: Radius of gyration

Dmax: Maximal diameter

8.8.

[illegible]

8.9.

	Average Rg									
Gen./Run:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
100										
200										
300										
400										
500										

8.10. Near optimal configurations for 3D HP-48 problem