Algoritmos Genéticos

Módulo 4 : Técnicas computacionales avanzadas para modelar fenómenos sociales Concentración en Economía Aplicada y Ciencia de Datos ITESM

18 de abril de 2024



(ロト (個) (注) (注) 注 り(()

1/37

Algoritmos genéticos

- Un Algoritmo Genético es una meta-heurística de optimización basada en los principios de la genética y la selección natural (La Rocca, 2022, p. 628).
- Incorporan procesos de adaptación basados en mecanismos de la evolución natural:
 - ► Teoría de la herencia,
 - ► Selección natural.
- Explotan los principios de la selección natural, esto es, de qué tan bien un organismo se adapta a su ambiente, sobrevive y genera descendencia.

(ITESM)

Algoritmos genéticos

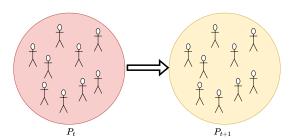
Los algoritmos genéticos presentan un balance adecuado entre

- Explotación, ¿cómo utilizamos la solución ya conocida para construir una mejor solución?
- Exploración del espacio de búsqueda de posibles soluciones.

Este balance lo logran por los mecanismos de selección de los individuos de la población en función a su aptitud y del operador genetico de cruza, para el caso de la **explotación**, mientras que para la **exploración** la base es el operador de mutación.

Algoritmos genéticos

- Un algoritmo genético simula la dinámica de una población genética.
- En este proceso se genera una base de conocimientos en función de la forma cómo los individuos se adaptan al medio al cual se enfrentan (el problema a resolver).
- La población se va modificando de acuerdo a la probabilidad de selección para contribuir en la generación de una nueva generación de la población.



4/37

En este contexto ¿Qué significa la adaptación?

5/37

Flake (2000) resalta tres atributos de los Sistemas Adaptativos Complejos (CAS)

- Multiplicidad de agentes: agentes que se desenvuelven en una estructura o entorno de interacción. Emergencia.
- Retroalimentación : relaciones agente ↔ agente o agente ↔ entorno. Resultado : fenómenos no lineales y coevolución entre variables.
- Adaptación: La adaptación involucra una transformación progresiva de los individuos. La adaptación hace al sistema relativamente eficiente en la medida que la especialización y la existencia de variantes permiten a una especie sobrevivir.

6/37

Behaviour and the Origin of Organisms (Egbert et al., 2023)

Origins of Life and Evolution of Biospheres (2023) 53:87–112 https://doi.org/10.1007/s11084-023-09635-0

RESEARCH



Behaviour and the Origin of Organisms

 $\label{eq:matthew} {\sf Matthew Egbert^{1,2}} \cdot {\sf Martin \ M. Hanczyc^3} \cdot {\sf Inman \ Harvey^4} \cdot {\sf Nathaniel \ Virgo^5} \cdot \\ {\sf Emily \ C. \ Parke^{2,6}} \cdot {\sf Tom \ Froese}^7 \cdot {\sf Hiroki \ Sayama^8} \cdot {\sf Alexandra \ S. \ Penn^9} \cdot {\sf Stuart \ Bartlett^{10}} \\$

Received: 24 November 2022 / Accepted: 3 March 2023 / Published online: 11 May 2023 © The Author(s) 2023

Abstract

It is common in origins of life research to view the first stages of life as the passive result of particular environmental conditions. This paper considers the alternative possibility: that the antecedents of life were already actively regulating their environment to maintain the conditions necessary for their own persistence. In support of this proposal, we describe 'viability-based behaviour': a way that simple entities can adaptively regulate their environment in response to their health, and in so doing, increase the likelihood of their survival. Drawing on empirical investigations of simple self-preserving abiological systems, we argue that these viability-based behaviours are simple enough to precede neo-Darwinian evolution. We also explain how their operation can reduce the demanding requirements that mainstream theories place upon the environment(s) in which life emerged.

 $\textbf{Keywords} \ \ Origins \ of \ life \cdot Behaviour \cdot Viability\text{-based behaviour} \cdot Dissipative \ structures \cdot Early \ behaviour$

- 4 ロ ト 4 個 ト 4 差 ト 4 差 ト 2 を 9 Q (C)

7/37

Elementos generales de un algoritmo genético

- Codificación de la población.
- Decodificación de la población.
- Selección de individuos.
- Reproducción de individuos.

8/37

Algoritmos Genéticos vs Algoritmos tradicionales de optimización

Genéticos

- Tratan el problema como una caja negra (no requieren información a priori del problema).
- Sólo requieren evaluar la función.
- La búsqueda se realiza en una población de soluciones posibles, logrando con ello reducir la probabilidad de caer en óptimos locales.
- Emplea reglas de transición probabilísticas.

Tradicionales

- Necesitan información del problema, como derivadas, gradientes, hessianos, etc.
- Trabajan punto a punto para determinar el siguiente punto a analizar, ocasionando llegar a óptimos locales.
- Emplea reglas determinísticas.
- Necesita partir de un punto factible.

9/37

Factores que afectan el desempeño del algoritmo

Convergencia:

- Presión selectiva: buscar en regiones del espacio de búsqueda que son prometedoras. Esto se logra mediante el cruzamiento de los individuos con mejor aptitud.
- Esto es necesario para que la búsqueda no sea aleatorio.

• Diversidad de la población:

- Evita una convergencia prematura.
- ▶ La carencia de la diversidad se traduce en que todos los individuos son iguales, llevando a un proceso de explotación no adecuado, llevando así a óptimos locales.

10 / 37

Un Algoritmo Genético Binario se caracteriza por contar con un mecanismo de selección de los individuos más aptos de la población, los cuales contribuirán en la generación de la siguiente generación, y del uso de los operadores de cruza y mutación.

 Generación de la población inicial.

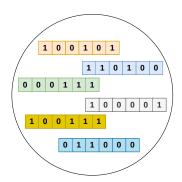


Figura: Generación de la población: se parte de individuos representados como cadenas de *m* bits, los cuales pueden ser generados de forma aleatoria.

11/37

Un Algoritmo Genético Binario se caracteriza por contar con un mecanismo de selección de los individuos más aptos de la población, los cuales contribuirán en la generación de la siguiente generación, y del uso de los operadores de cruza y mutación.

- Generación de la población inicial.
- Evaluación de Fitness.

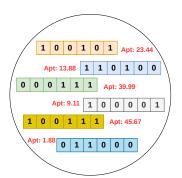


Figura: Se evalúa cada individuo con respecto al problema a resolver y se le asigna una medida llamada fitness o aptitud que es un valor numérico de qué tan bueno es el individuo para resolver el problema

4 D > 4 B > 4 B > 4 B >

Un Algoritmo Genético Binario se caracteriza por contar con un mecanismo de selección de los individuos más aptos de la población, los cuales contribuirán en la generación de la siguiente generación, y del uso de los operadores de cruza y mutación.

- Generación de la población inicial.
- Evaluación de Fitness.
- Selección

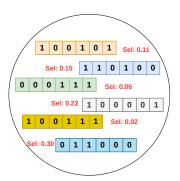


Figura: Se calculan las probabilidades de selección de los individuos de acuerdo a su valor de fitnes para escoger a los individuos que contribuirán a en la generación de la nueva población

Un Algoritmo Genético Binario se caracteriza por contar con un mecanismo de selección de los individuos más aptos de la población, los cuales contribuirán en la generación de la siguiente generación, y del uso de los operadores de cruza y mutación.

- Generación de la población inicial.
- Evaluación de Fitness.
- Selección
- Cruza y Mutación

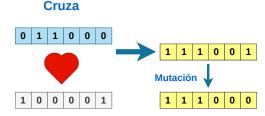


Figura: Se aplican los operadores genéticos de cruza y mutación a cada pareja seleccionada de la generación presente hasta que se crean n nuevos individuos. La generación actual es reemplazada por completo por la generación nueva

(ITESM) 18 de abril de 2024 14 / 37

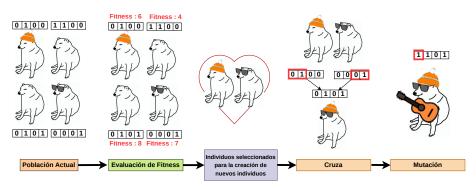


Figura: Elementos de un Algoritmo Genético Binario (simple)

(ITESM) 18 de abril de 2024 15 / 37



Figura: Elementos de un Algoritmo Genético Binario (simple)

(ITESM) 18 de abril de 2024 16 / 37

Selección

En la selección se escogen a los individuos que cuentan con las mejores condiciones para contribuir en la formación de la siguiente generación. Algunos métodos de selección son:

- Reproducción proporcional o Método de la ruleta:
 - Muestreo determinístico.
 - Muestreo aleatorio.
- Torneo:
 - Con substitución.
 - Sin substitución.

(ITESM)

Reproducción proporcional o Método de la ruleta

Los individuos son seleccionados con una probabilidad proporcional a su valor relativo de fitness con respecto al total de la población.

La probabilidad de selección p_i de un individuo en la generación t está dada por la siguiente expresión:

$$p_i(t) = \frac{f_i(t)}{\sum_{j=1}^n f_j(t)}$$
 (1)

Donde $f_i(t)$ es el valor de fitness del individuo i en el tiempo t.

18 / 37

Ejemplo

Individuo	Fitness	Proporción relativa
А	8	7 %
В	12	11 %
С	27	24 %
D	4	3 %
E	45	40 %
F	17	15 %
Total	113	100 %

Cuadro: Valores de fitness individuales

Ejemplo

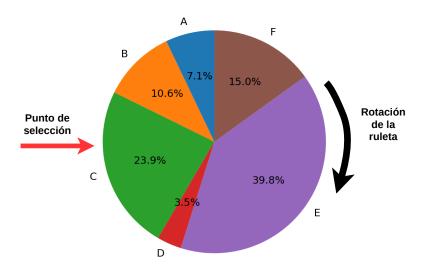


Figura: Método de selección de ruleta

Muestreo estocástico universal

- Se utiliza la misma ruleta así como las mismas proporciones de los individuos, pero en vez de usar un sólo punto de selección, la ruleta se gira una sola vez y se realizan múltiples puntos de selección que se encuentran igualmente espaciados en la ruleta.
- Los individuos son escogidos al mismo tiempo.
- Este método previene que individuos con valores altos de fitness acaparen la selección para la reproducción de la siguiente generación al ser escogidos una y otra vez.

21/37

Muestreo estocástico universal

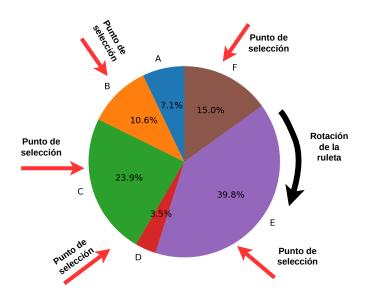


Figura: Muestreo estocástico universal

(ITESM) 18 de abril de 2024

22 / 37

Fitness scaling

Fitness scaling aplica una transformación de escalamiento a los valores originales de fitness y los reemplaza con la transofrmación resultante.

Dicha transformacipon mapea los valores originales dentro de un rango deseado mediante a siguiente expresión:

scaled fitness =
$$a \times \text{valor original de fitness} + b$$
 (2)

Donde *a* y *b* son constantes que seleccionamos para lograr el rango deseado de los valores de fitness escalados.

(ITESM) 18 de abril de 2024 23 / 37

Ejemplo

Utilizando los mismos valores de fitness, los mapearemos a un nuevo rango entre 50 y 100.

Calculamos los valores de a y b tomando a los individuos con el valor de finess más bajo y más alto, respectivamente.

- $50 = a \times 4 + b$
- $100 = a \times 45 + b$

Resolviendo el sistema de ecuaciones obtenemos los siguientes valores para a = 1.22 y b = 45.12.

De manera que los valores escalados se pueden calcular con la siguiente expresión:

scaled fitness = $1.22 \times \text{valor original de fitness} + 45.12$

Ejemplo

Individuo	Fitness	Scaled fitness	Proporción relativa
А	8	50	13 %
В	12	60	15 %
С	27	78	19 %
D	4	50	12 %
E	45	100	25 %
F	17	66	16 %
Total	113	404	100 %

Cuadro: Valores de fitness individuales

(ITESM)

Fitness scaling

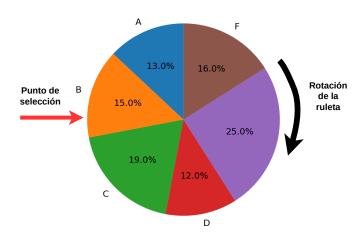


Figura: Fitness scaling

Selección por torneo

- En cada ronda se toman aleatoriamente dos o más individuos de la población, y aquel individuo con la puntaje de fitness más alto gana la contienda y es seleccionado.
- El número de individuos que participan en cada ronda del torneo se denomina tamaño del torneo.
- En la medida que el tamaño del torneo es grande, hay más oportunidades que el mejor individuo participe en las contiendas y las gane, mientras que para un tamaño de torneo pequeño, hay más oportunidades que sean seleccionados los individuos con menor fitness.

27 / 37

Ejemplo

Individuo	Fitness	
Α	8	
В	12	
С	27	
D	4	→ F
E	45	
F	17	

Figura: Selección por torneo con tamaño de torneo igual a 3

Cruza o Recombinación

- Es un proceso que genera una recombinación de los alelos mediante el intercambio de segmentos entre pares de cromosomas.
- El operador de cruza es el operador principal en algoritmos genéticos.
- Es usado para combinar la información genética de dos individuos para generar (usualmente dos) nuevos individuos.
- Típicamente el operador de cruza se aplica con una probabilidad realativamente alta, de forma análoga a la vida natural $(\in [0,6,1])$.
- Si **no** se aplica el operador de cruza, ambos individuos seleccionados son clonados directamente para la siguiente generación.

(ITESM) 18 de abril de 2024 29/37

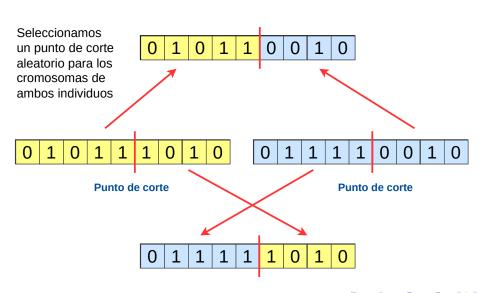
Cruza o Recombinación

El operador de cruza puede ejecutarse en dos pasos:

- Se seleccionan los individuos con algún método de selección.
- Los individuos se combinan con alguno de los siguientes métodos;
 - ► Cruza en un punto.
 - Cruza en dos puntos.
 - Cruza multipunto.
 - Cruza uniforme.

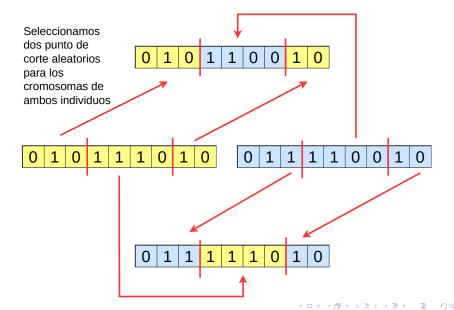
30 / 37

Cruza en un punto



(ITESM) 18 de abril de 2024 31 / 37

Cruza en dos punto



32 / 37

Mutación

- La mutación es el último operador genético en el proceso de creación de la nueva población.
- La mutación puede interpretarse de varias maneras:
 - Un mecanismo para asegurar diversidad en la población.
 - Una protección contra pérdidas prematuras de material genético generado durante la cruza.
 - Permite explorar el espacio de búsqueda, escapar de óptimos locales y evitar la convergencia prematura.
- La mutación es un proceso donde un alelo de un gen es reemplazado aleatoriamente para generar un nuevo cromosoma.
- Al igual que en la vida natural, la mutación aparece con una probabilidad baja.

(ITESM) 18 de abril de 2024 33/37

Mutación

Al igual que en la vida natural, la mutación aparece con una probabilidad baja.

Se ha propuesto que la probabilidad de mutación esté en función de la longitud del cromosoma, *L*, de acuerdo a la siguiente expresión:

Probabilidad de mutación
$$= 0.1 \times \left(\frac{1}{L}\right)$$

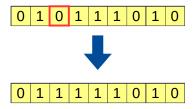
Es decir, en promedio, se estará mutando 1% de la población en un bit.



34 / 37

Flip bit mutation

Se selecciona un gen de forma aleatoria y se reemplaza su valor.

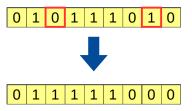


Podemos extenderlo a seleccionar y reemplazar más de un gen.

4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶

Swap mutation

Se seleccionan dos genes de forma aleatoria y se intercambian sus valores.



36 / 37

References I

- Egbert, M., Hanczyc, M. M., Harvey, I., Virgo, N., Parke, E. C., Froese, T., Sayama, H., Penn, A. S., and Bartlett, S. (2023). Behaviour and the origin of organisms. Origins of Life and Evolution of Biospheres, 53(1):87–112.
- Flake, G. W. (2000). The computational beauty of nature: Computer explorations of fractals, chaos, complex systems, and adaptation. MIT press.
- La Rocca, M. (2022). Advanced Algorithms and Data Structures. Manning, first edition.

(ITESM) 18 de abril de 2024 37 / 37