

Proiectarea evolutivă a rețelelor neuronale

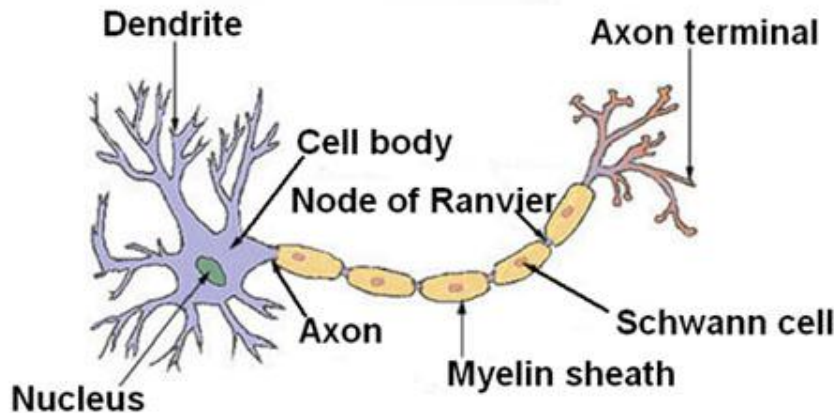
- ❑ Rețele neuronale
- ❑ Motivație
- ❑ Determinarea evolutivă a ponderilor (antrenare evolutivă)
- ❑ Determinarea evolutivă a arhitecturii
- ❑ Determinarea evolutivă a regulilor de învățare

Retele neuronale – modelul biologic

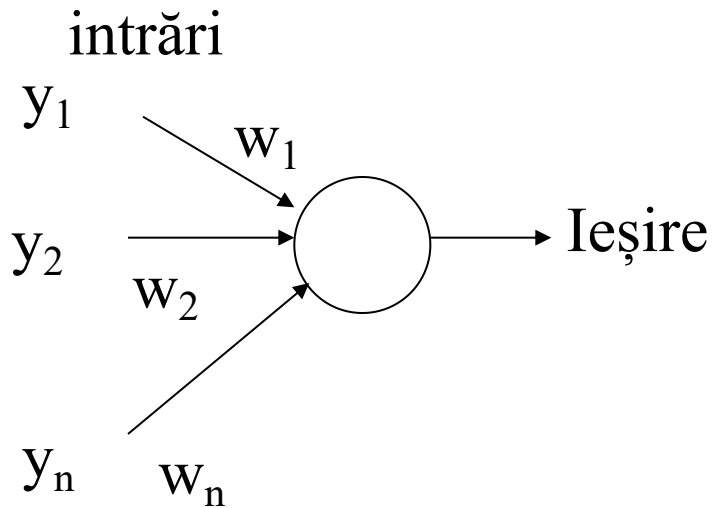
Creierul uman

cca 10^{10} neuroni, cca 10^{14} interconexiuni

Structure of a Typical Neuron



Rețele neuronale artificiale



w_1, w_2, \dots :
Ponderi
numerice
atașate
conexiunilor

Rețea neuronală artificială = ansamblu de unități simple de prelucrare (neuroni) interconectate

Unitate funcțională: mai multe intrări, o ieșire (model computațional simplificat al neuronului)

Notații:

semnale de intrare: y_1, y_2, \dots, y_n

ponderi sinaptice: w_1, w_2, \dots, w_n

(modelează permeabilitatea sinaptică)

prag: b (sau w_0)

(modelează pragul de activare al neuronului)

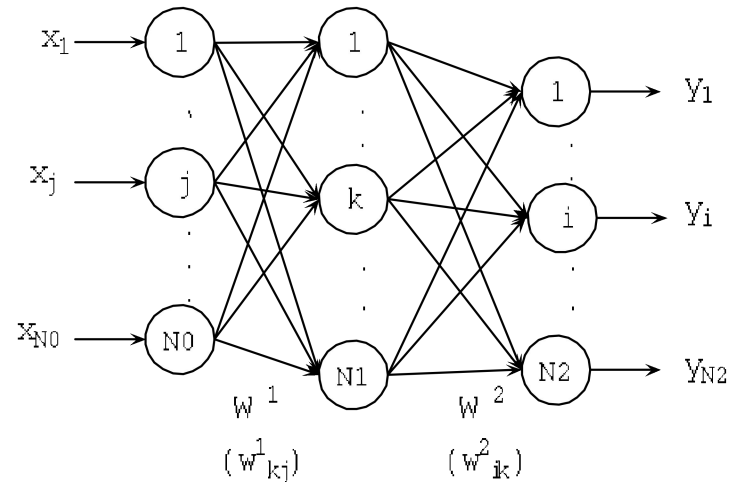
ieșire: y

Obs: Toate valorile sunt numere reale

Rețele neuronale artificiale

Structura unei rețele neuronale artificiale:

- **Arhitectura:** modul de interconectare între unități
- **Funcționare:** modul de calcul al semnalului de ieșire
- **Antrenare:** modul de determinare a parametrilor ajustabili



$$y_i = f \left(\sum_{k=0}^{N1} w_{ik}^2 f \left(\sum_{j=0}^{N0} w_{kj}^1 x_j \right) \right), \quad i = \overline{1, N2}$$

Rețea feedforward cu un nivel ascuns

Rețele neuronale artificiale

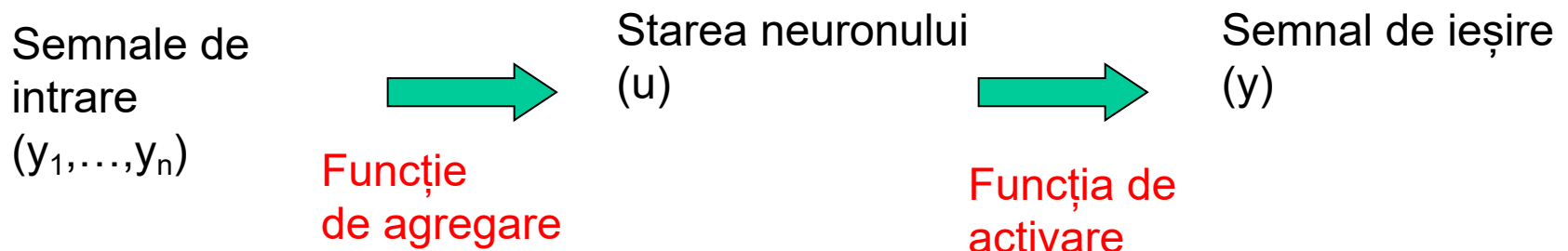
Proiectarea unei rețele pentru rezolvarea unei probleme presupune:

- **Alegerea arhitecturii:**
 - număr de nivele
 - număr de unități pe fiecare nivel
 - mod de interconectare (topologie)
 - funcții de activare
- **Antrenarea:** determinarea valorilor ponderilor pornind de la setul de antrenare folosind un algoritm de învățare
- **Validarea rețelei:** analiza comportării rețelei pentru date ce nu fac parte din setul de antrenare

Unități funcționale

Generarea semnalului de ieșire:

- Se “combină” semnalele de intrare utilizând ponderile sinaptice și pragul de activare
 - Valoarea obținută modelează potențialul local al neuronului
 - Combinarea semnalelor de intrare în unitate se realizează printr-o **funcție de agregare** (integrare)
- Se generează semnalul de ieșire aplicând o **funcție de activare** (transfer)
 - corespunde generării impulsurilor de-a lungul axonului



Proiectarea evolutivă a rețelelor neuronale

Motivație. Proiectarea unei rețele neuronale presupune

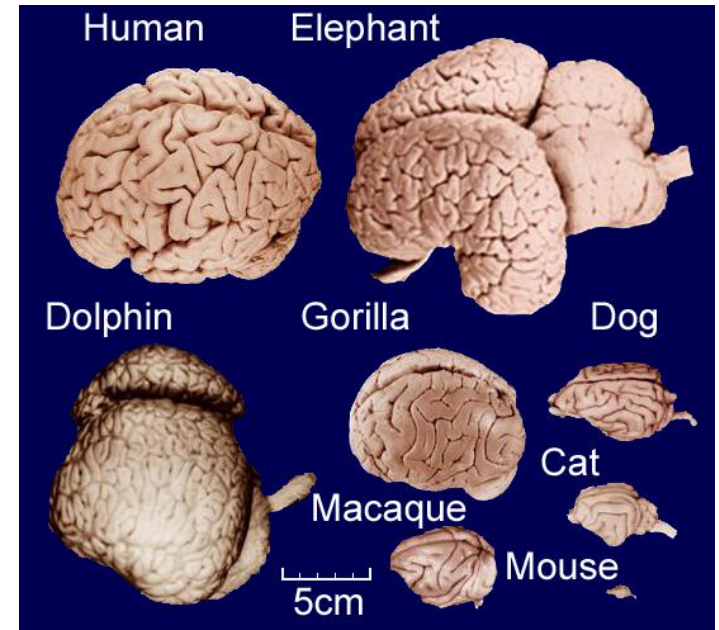
- ❑ **Stabilirea arhitecturii rețelei** (număr unități funcționale + mod de interconectare+funcții de activare)
 - ❑ Influențează abilitatea rețelei de a rezolva problema
 - ❑ Presupune încercarea mai multor variante (abordare de tip trial and error)

- ❑ **Determinarea valorilor parametrilor ajustabili (antrenare)**
 - ❑ Este o problemă de optimizare = determinarea parametrilor care minimizează eroarea pe setul de antrenare/validare
 - ❑ Metodele clasice (ex: BackPropagation) întâmpină dificultăți:
 - ❑ Dacă funcțiile de activare nu sunt diferențiabile
 - ❑ Se pot bloca în optime locale

Proiectarea evolutivă a rețelelor neuronale

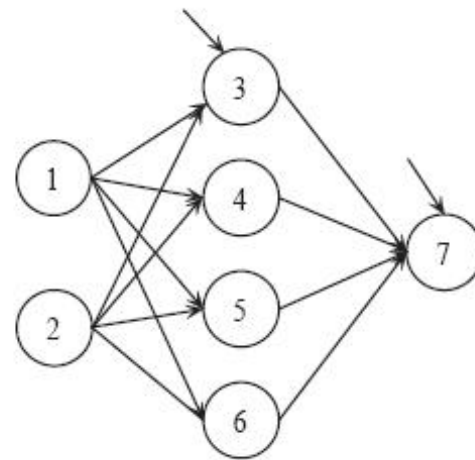
Idee: utilizarea unui proces de evoluție

- inspirată de dezvoltarea biologică a creierului
- sistemul nu este proiectat în mod explicit ci structura sa este determinată printr-un proces de evoluție la care participă o populație de rețele neuronale descrise codificate
 - Genotip = codificarea rețelei (descriere structurală)
 - Fenotip = rețeaua propriu-zisă, care poate fi simulată (descriere funcțională)



Antrenare evolutivă

- Se referă la determinarea ponderilor unei rețele neuronale cu arhitectură fixată rezolvând problema minimizării unei funcții de eroare pe setul de antrenare folosind un algoritm evolutiv



- Set de parametri: ponderi sinaptice și praguri

Set antrenare : $\{(x^1, d^1), \dots, (x^L, d^L)\}$

$$\text{Funcție eroare : } E(W) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (d^l - y^l)^2 \quad W = \{w_{31}, w_{32}, w_{30}, w_{41}, w_{42}, w_{40}, \dots, w_{70}, w_{73}, \dots, w_{76}\}$$

Antrenare evolutivă

Algoritm evolutiv:

- ❑ **Codificare:** vector de parametri cu valori reale ce conține toate ponderile conexiunilor din rețea (similar cu strategiile evolutive)
- ❑ **Operatori evolutivi:** specifici strategiilor evolutive (ex: recombinare convexă și mutație prin perturbație aleatoare)
- ❑ **Evaluare elemente:** calcul funcție de eroare pe setul de antrenare; un element e cu atât mai bun cu cât valoarea erorii pe setul de antrenare este mai mică

Antrenare evolutivă

Aplicabilitate:

- ❑ In cazul rețelelor cu funcții de transfer nederivabile (algoritmul BackPropagation nu poate fi aplicat)
- ❑ In cazul rețelelor recurente antrenate supervizat (algoritmul Backpropagation nu poate fi aplicat întrucât nu există o dependență explicită între semnalul de ieșire și cel de intrare, astfel că nu pot fi calculate derivatele parțiale necesare aplicării algoritmului)

Dezavantaje:

- ❑ antrenarea evolutivă este mai costisitoare din punct de vedere computațional decât cea neevolutivă
- ❑ Este adecvată pentru explorarea spațiului ponderilor, fiind mai puțin adecvată pentru căutarea locală

Antrenare evolutivă

Varianta hibride:

- Antrenarea inițială cu o strategie evolutivă
- Rafinarea valorilor parametrilor folosind un algoritm de optimizare locala (e.g. BackPropagation – dacă natura problemei permite)

Pregătirea (pre-procesarea) setului de antrenare (filtrarea în manieră evolutivă a setului de antrenare):

- Selecția atributelor
- Selecția exemplilor

Antrenare evolutivă

Selecția atributelor (în cazul problemelor de clasificare):

- Motivație: dacă numărul de atribute este mare rețeaua conține multe unități de intrare iar antrenarea poate deveni mai dificilă
- este importantă în cazul datelor ce conțin multe atribute dintre care unele sunt irelevante pentru procesul de clasificare
- se selectează atributele relevante pentru procesul de clasificare
- În cazul unor date inițiale conținând N atribute se folosește o codificare binară în care un element este setat pe 0 dacă atributul corespunzător nu trebuie selectat și pe 1 dacă atributul trebuie selectat
- Elementele populației se evaluează prin antrenarea rețelei pentru setul de antrenare astfel filtrat (antrenarea se face cu un algoritm adecvat problemei – nu neapărat evolutiv)

Antrenare evolutivă

Exemplu: identificarea persoanelor cu risc de boli cardiovasculare

Set total de attribute:

(vârsta, greutate, înălțime, indice masă corporală, tensiune arterială, colesterol, glicemie)

Element al populației: (1,0,0,1,1,1,0)

Subset corespunzator de attribute:

(vârsta, indice masa corporală, tensiune arteriala, colesterol)

Evaluare: se antrenează rețeaua folosind subsetul de attribute selectat și se calculează scorul proporțional cu acuratețea clasificării

Observație:

- tehnica se poate utiliza și la antrenarea altor clasificatoare (ex: Nearest-Neighbor)
- Este cunoscută sub denumirea de “wrapper based attribute selection”

Antrenare evolutivă

Selecția exemplilor din setul de antrenare

- Motivație: dacă setul de antrenare este mare procesul de învățare devine mai costisitor și se poate ajunge la supraantrenare
- Este un proces de selecție similar celui anterior dar de această dată se efectuează la nivelul elementelor din setul de antrenare
- Codificarea adecvată este cea binară (similar cu cea de la selecția atributelor)
- Evaluarea elementelor constă în antrenarea rețelei (folosind o metodă adecvată de antrenare) pentru subsetul de exemple corespunzător elementului

Evoluția arhitecturii

Metode neevolutive de adaptare a arhitecturii:

- ❑ Constructive (“growing networks”)
 - ❑ Se pornește de la o rețea de dimensiune mică
 - ❑ Dacă procesul de antrenare stagnează se adaugă o nouă unitate
 - ❑ Asimilarea noii unități se realizează prin antrenarea în primă fază doar a ponderilor asociate ei (celelalte rămânând fixate)

- ❑ Distructive (“pruning networks”)
 - ❑ Se pornește de la o rețea de dimensiune mare
 - ❑ Se elimină conexiuni/unități care nu influențează procesul de antrenare

Evoluția arhitecturii

Evoluția arhitecturii se poate realiza la unul sau mai multe dintre nivelele :

- Stabilirea numărului de unități
- Stabilirea modului de interconectare
- Alegerea tipului de funcție de transfer

Modalități de codificare:

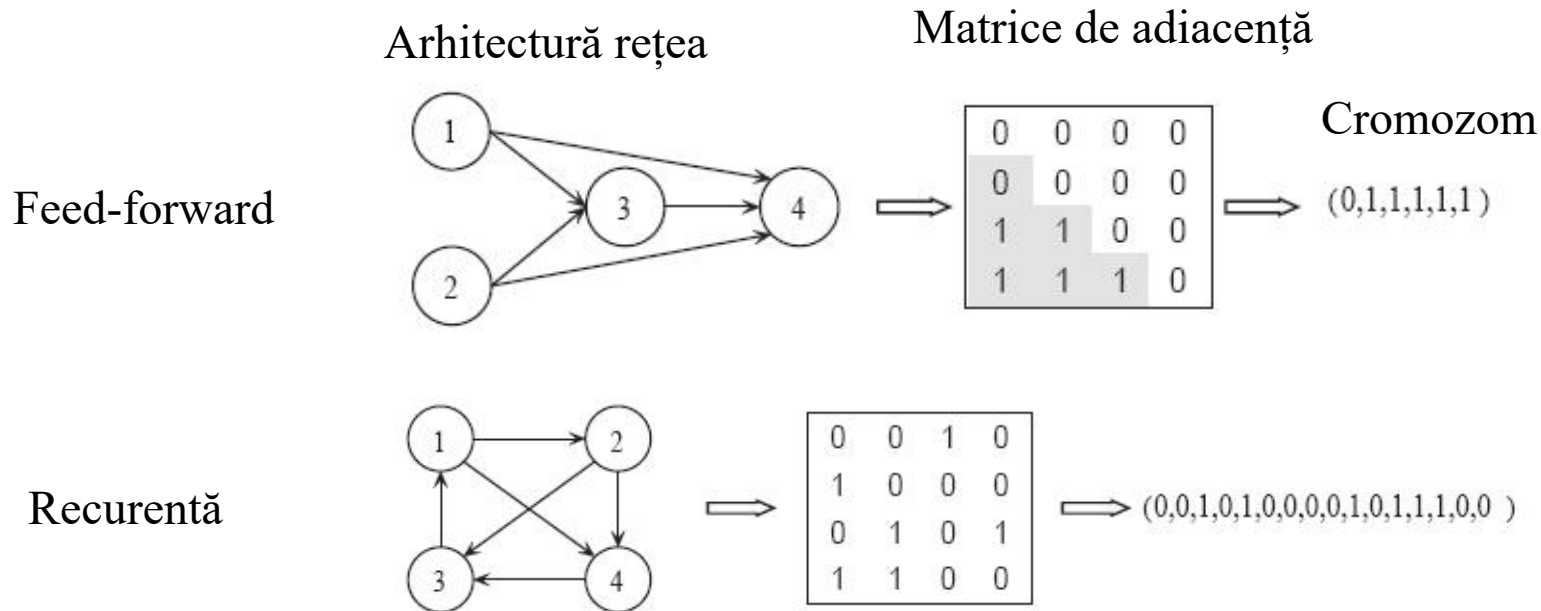
- Codificare directă
- Codificare indirectă

Evoluția arhitecturii

Codificare directă: fiecare element al rețelei se regăsește direct în codificare

- Arhitectura rețelei = graf orientat
- Rețeaua se codifica prin matricea de adiacență a grafului

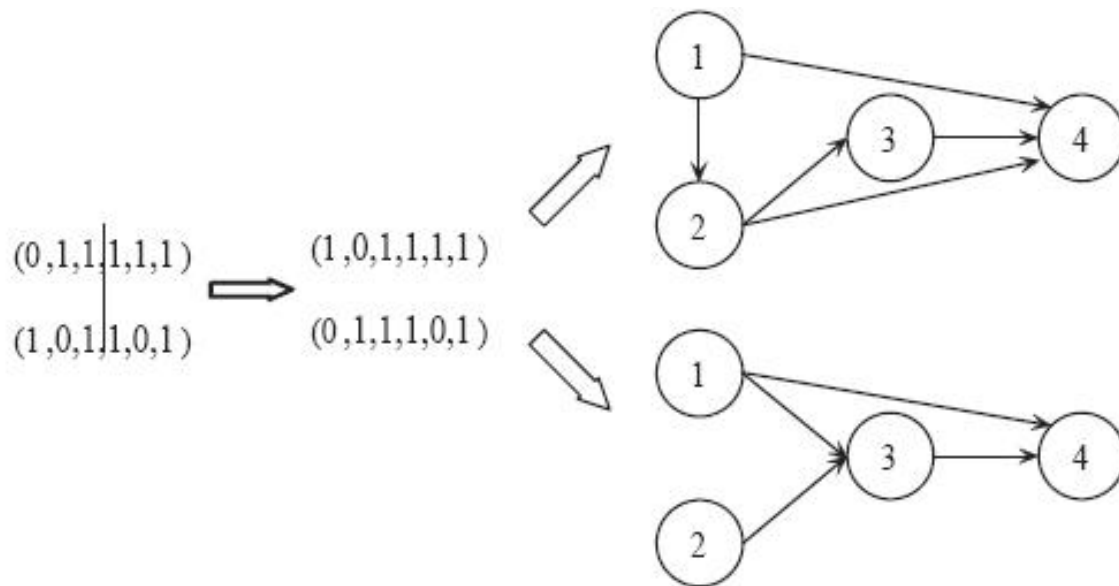
Obs. In cazul rețelelor feedforward unitățile pot fi numerotate astfel încât unitatea i primește semnale doar de la unități j cu $j < i$ => matrice inferior triunghiulară



Evoluția arhitecturii

Operatori de variație pentru modificarea conexiunilor (număr de unități fixat):

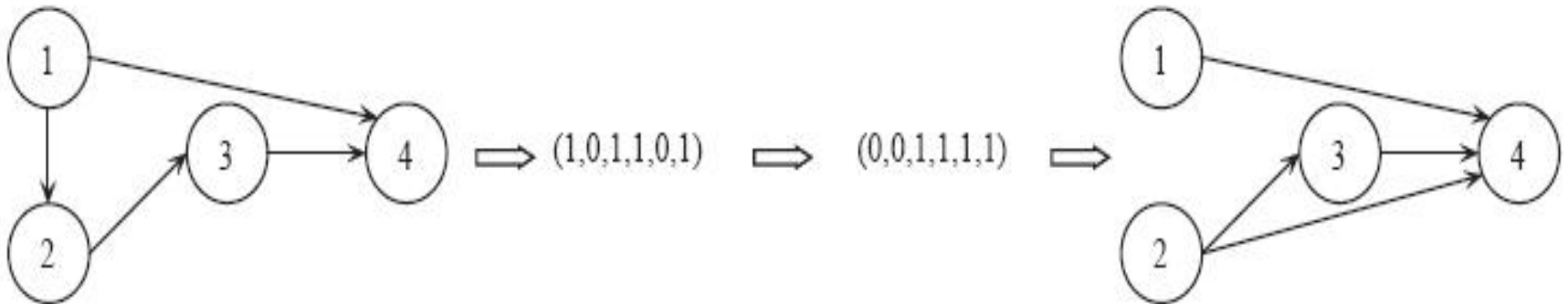
- Incrucișare specifică algoritmilor genetici



Evoluția arhitecturii

Operatori de variație pentru modificarea conexiunilor (număr de unități fixat):

- Mutație specifică algoritmilor genetici



Evoluția arhitecturii

Evoluția numărului de unități și a conexiunilor

Ipoteza: N – număr maxim de unități

Codificare:

- Vector binar cu N elemente
 - 0: unitate inactivă
 - 1: unitate activă
- Matrice de adiacență $N \times N$ asociată conexiunilor dintre unități
 - Pentru un element nul din vectorul cu unități linia și coloana corespunzătoare sunt ignorate

Evoluția arhitecturii

Evoluția tipului de funcție de activare:

Codificare:

- Vector cu N elemente
 - 0: unitate inactivă
 - 1: unitate activă cu funcție de activare de tip 1 (ex: tanh)
 - 2: unitate activă cu funcție de activare de tip 2 (ex: logistică)
 - 3: unitate activă cu funcție de activare de tip 3 (ex: liniară)

Evoluția ponderilor

- Matricea de adiacență se înlocuiește cu matricea de ponderi
 - 0: conexiune inexistentă
 - $\neq 0$: valoarea ponderii

Evoluția arhitecturii

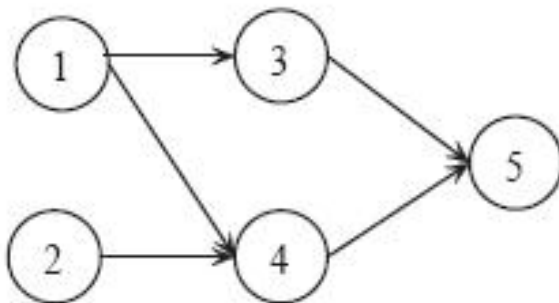
Evaluarea elementelor:

- Se antrenează rețeaua (folosind un algoritm evolutiv sau unul clasic)
- Se estimează eroarea pe setul de antrenare (E_a)
- Se estimează eroarea pe setul de validare (E_v)
- Valoarea scorului (funcției de adecvare) este invers proporțională cu:
 - Eroarea pe setul de antrenare
 - Eroarea pe setul de validare
 - Dimensiunea rețelei (numărul de parametri ce intervin în rețea) – în felul acesta sunt favorizate rețelele de dimensiune mică

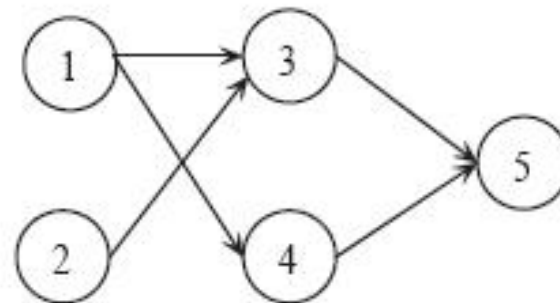
Evoluția arhitecturii

Dezavantaje ale codificării directe:

- Nu este scalabilă (pentru rețele de dimensiuni mari conduce la elemente de dimensiuni mari)
- Poate conduce la codificări diferite care corespund aceleiași arhitecturi (problema permutării) – redundanță fenotipică care limitează puterea de explorare a algoritmului (vezi exemplul de mai jos)
- Nu este adecvată pentru descrierea rețelelor neuronale modulare (în care porțiuni din rețea se repetă)



(0,1,0,1,1,0,0,0,1,1)



(0,1,1,1,0,0,0,0,1,1)

Evoluția arhitecturii

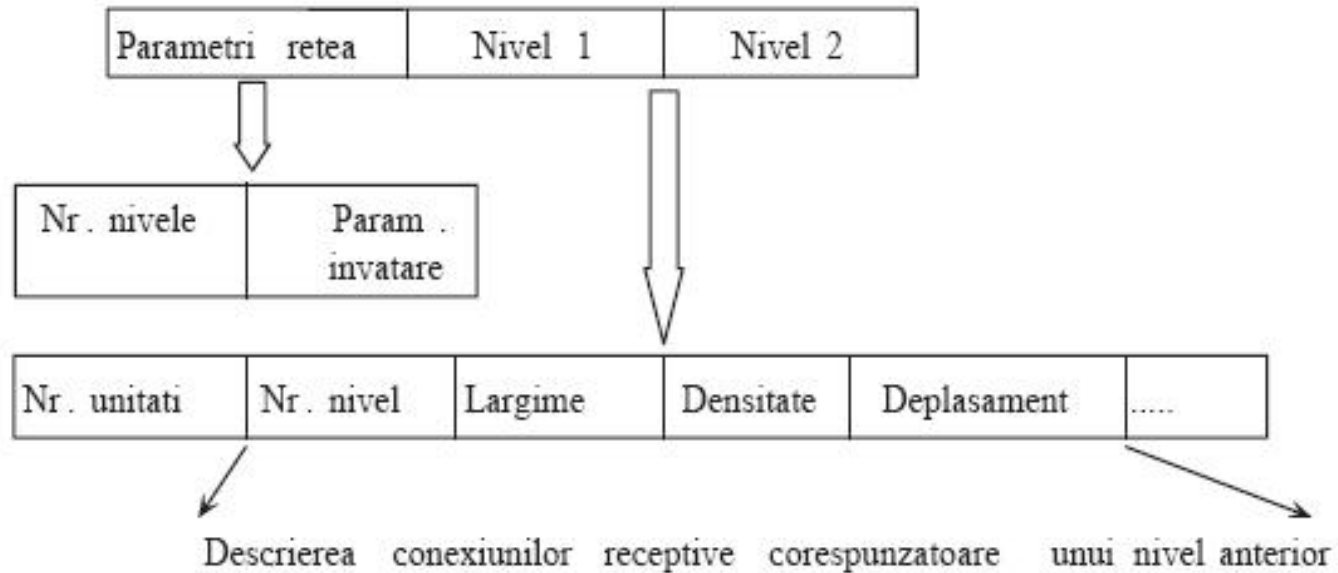
Codificare indirectă:

- mai plauzibilă dpdv biologic – ADN-ul nu codifică explicit fiecare celula din organism ci doar modul în care se sintetizează proteinele
- Codificare parametrică
 - Rețeaua e descrisă de un set de caracteristici asociate arhitecturii (un fel de amprentă)
 - Caz particular (arhitectură parțial stabilită): rețele cu un singur nivel de unități ascunse și conectivitate standard. În acest caz singura caracteristică variabilă este numărul de unități de pe nivelul ascuns
 - La evaluarea unui element al populației trebuie instanțiată o rețea și antrenată (folosind un algoritm clasic sau unul evolutiv)
- Codificare prin reguli de dezvoltare

Evolutia arhitecturii

Codificare indirectă:

- Codificare parametrică



Instanțierea unei rețele: stabilirea aleatoare a conexiunilor în conformitate cu parametrii specificați în descriere

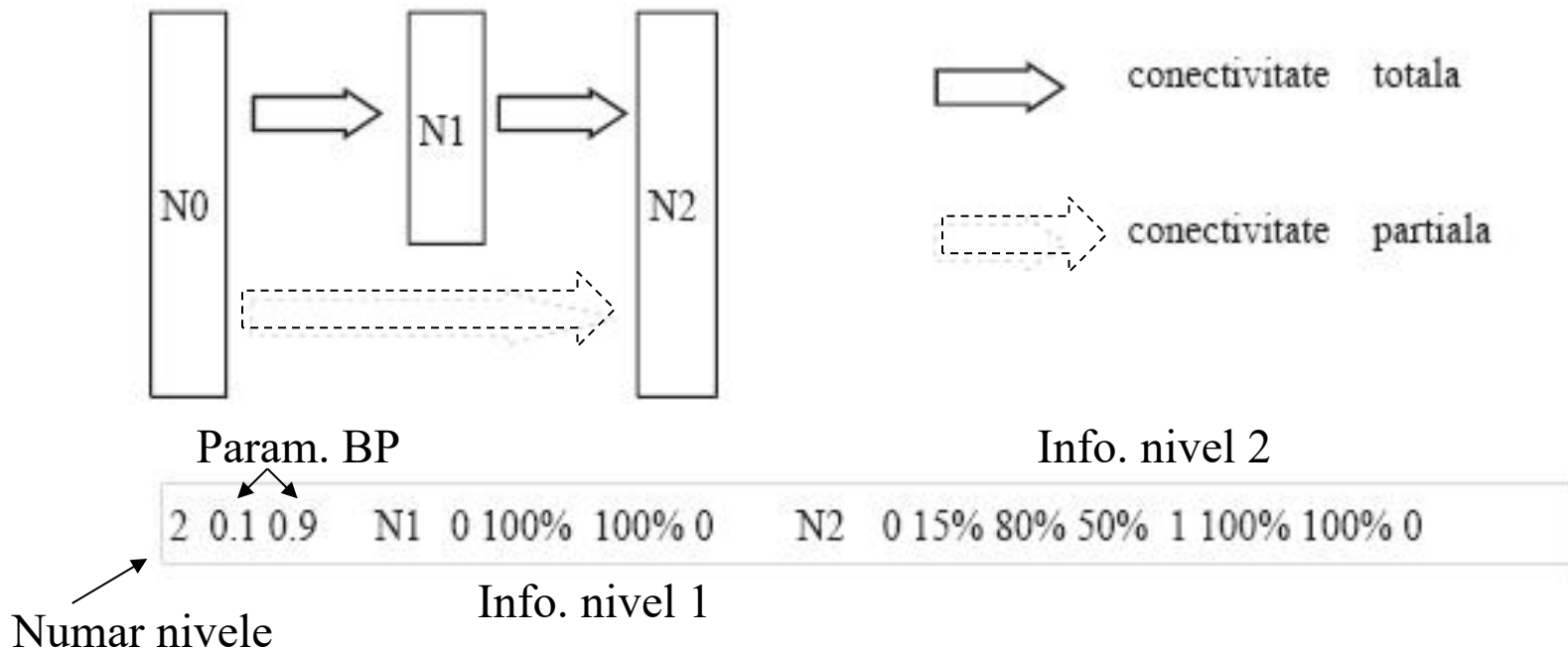
Evoluția arhitecturii

Exemplu:

Operatori:

Mutație: modificarea caracteristicilor rețelei

Recombinare: combinarea caracteristicilor nivelelor



Evoluția arhitecturii

Reguli de dezvoltare a arhitecturii (similar cu Grammar Evolution) :

Structura generala a unei reguli:

$$sn \rightarrow \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix}$$

Exemple de reguli:

$$S \rightarrow \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad A \rightarrow \begin{pmatrix} a & a \\ a & a \end{pmatrix}, \quad B \rightarrow \begin{pmatrix} b & b \\ b & a \end{pmatrix}, \quad C \rightarrow \begin{pmatrix} b & a \\ a & c \end{pmatrix}, \quad D \rightarrow \begin{pmatrix} a & d \\ a & d \end{pmatrix},$$
$$a \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad c \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad d \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Structura unui element al populației:

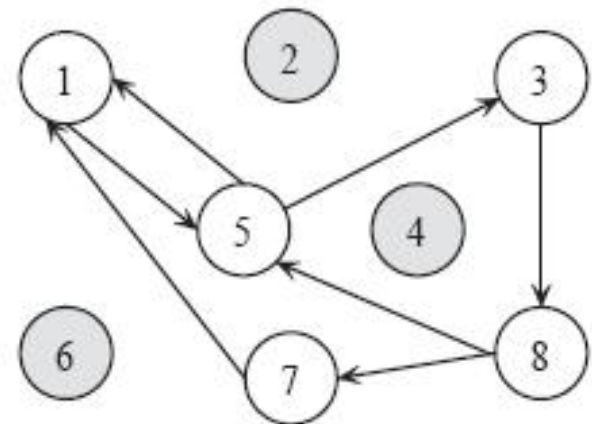
(A, B, C, D, a, a, a, a, b, b, b, a, b, a, a, c, a, d, a, d, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0)

Evoluția arhitecturii

Exemplu de derivare a unei arhitecturi:

$$S \rightarrow \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a & a & b & b \\ a & a & b & a \\ b & a & a & d \\ a & c & a & d \end{pmatrix} \rightarrow$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



Evoluția arhitecturii

Dezavantaj al evoluției separate a arhitecturii:

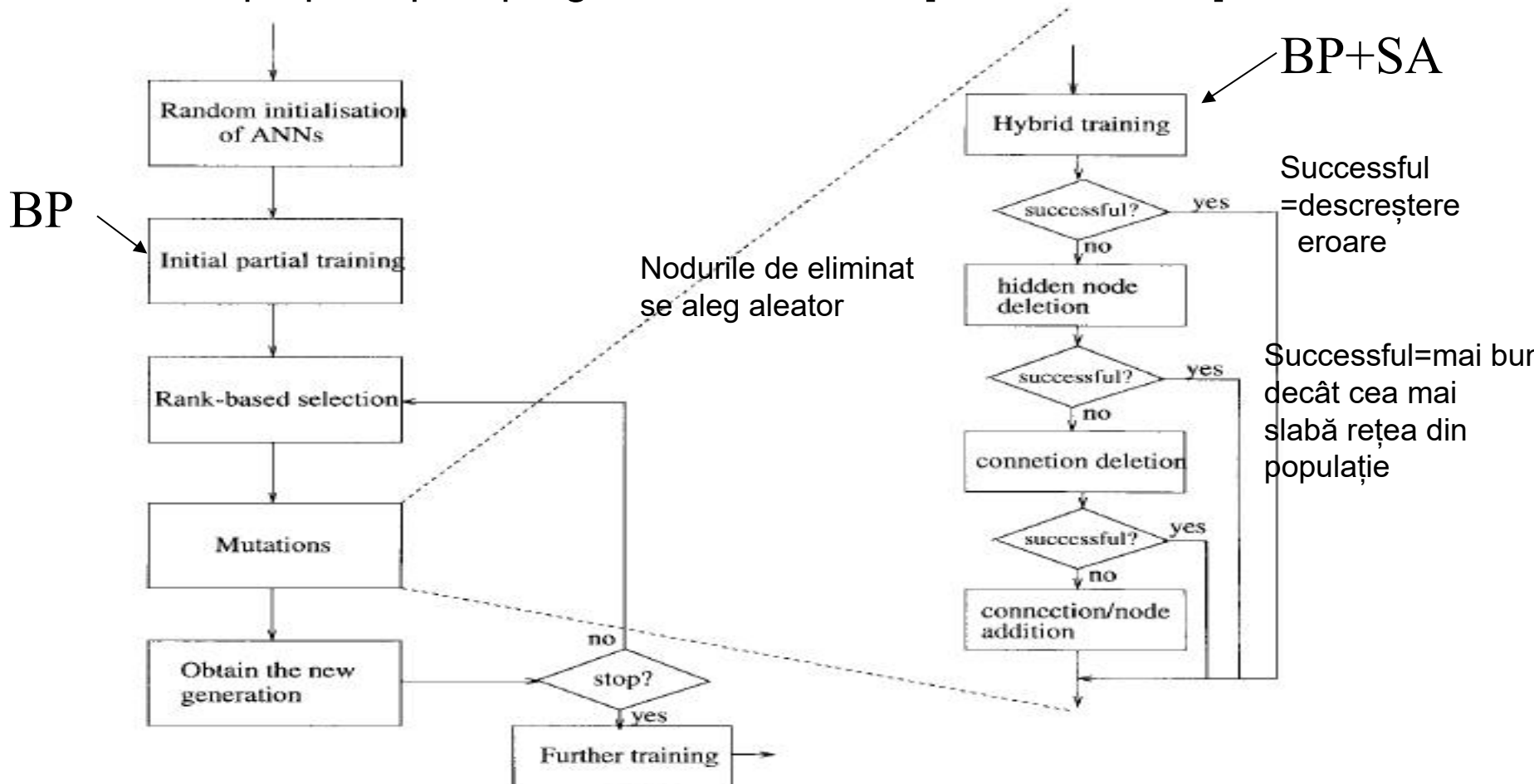
- Ca urmare a antrenării pornind de la valori inițiale aleatoare se obțin estimări afectate de zgomot al fitness-ului corespunzător unei arhitecturi

Soluții:

- Antrenarea de mai multe ori a aceleiași arhitecturi și calculul fitness-ului mediu => costuri mari
- Evoluția simultană a arhitecturii și ponderilor (asigură o corespondență 1 la 1 a genotipului (codificarea arhitecturii) și a fenotipului (rețeaua antrenată))

EPNet

Exemplu: EPNet = proiectare evolutivă rețele neuronale feedforward bazată pe principiile programării evolutive [Xin Yao, 1996]

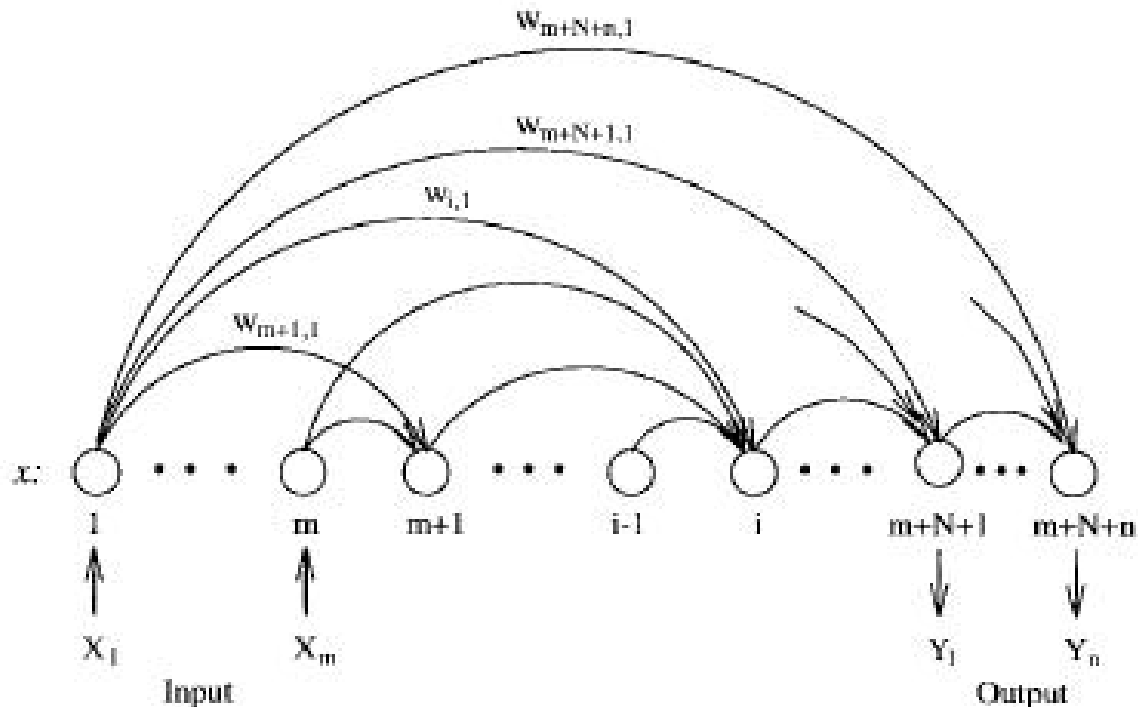


EPNet

Codificarea rețelei:

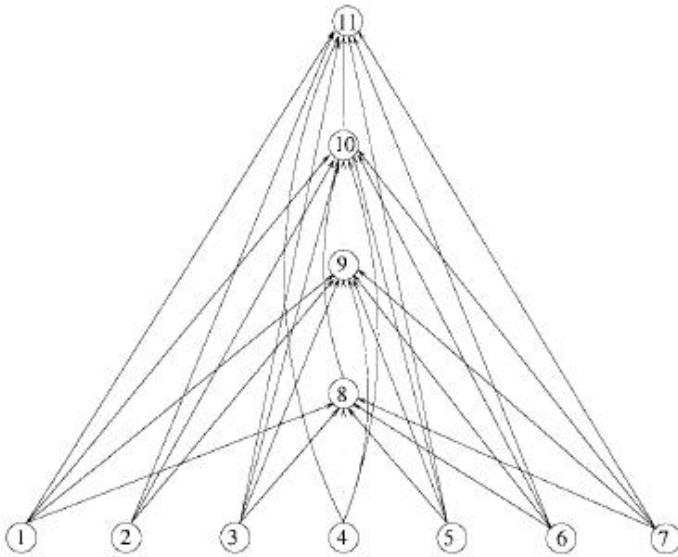
lista de noduri ascunse (tabel binar cu $lg = \text{nr. maxim de noduri ascunse}$) +
matrice de conectivitate +
matrice de ponderi

Interpretare: fiecare nod (neuron), cu exceptia primilor m (neuronii de intrare) este conectat cu toate nodurile anterioare

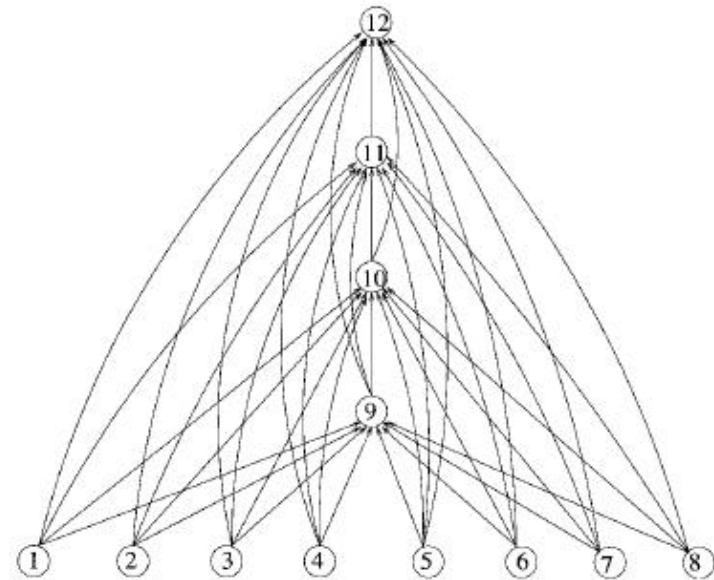


EPNet

Exemple de arhitecturi generate folosind EPNet pentru problema parității (generalizare XOR)



n=7



n=8

NEAT

NEAT = NeuroEvolution of Augmenting Topologies
(<http://nn.cs.utexas.edu/?neat>)

Implementare Python

- <http://neat-python.readthedocs.io/en/latest>
- Codificare directă:
 - Lista cu noduri (unități funcționale)
 - Tip nod: intrare, ascuns, ieșire, nod fictiv (pt specificarea pragului)
 - Lista cu conexiuni
 - Nod intrare (identificator nod)
 - Nod ieșire
 - Valoare pondere asociată conexiunii
 - Bit activare (0 – conexiune inactivă, 1- conexiune activă)
 - Indicator de inovare

NEAT

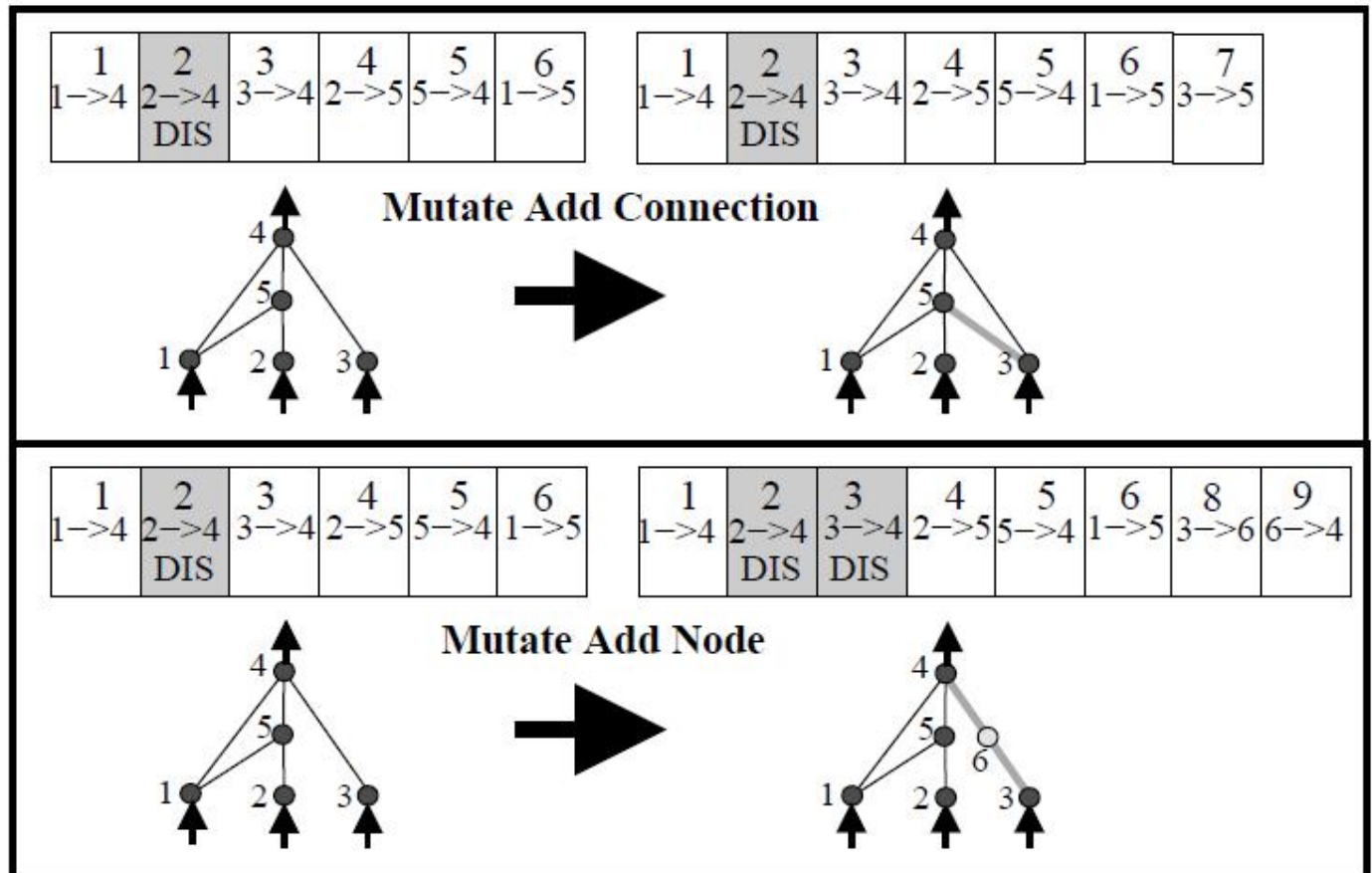
NEAT = NeuroEvolution of Augmenting Topologies

(<http://nn.cs.utexas.edu/?neat>)

- Populația inițială este constituită din arhitecturi simple (doar nivel de intrare și nivel de ieșire)
- Variante de mutație:
 - **Adăugare nod** prin inserare între două noduri conectate: (prin divizarea unei conexiuni existente; conexiunea veche este eliminată iar două noi conexiuni sunt adăugate: cea care intră în noul nod este setată pe 1 iar cea care iese are valoarea care era atașată conexiunii care a fost eliminată)
 - **Adăugare conexiune** între noduri neconectate anterior (ponderea noii conexiuni se setează pe o valoare aleatoare)

NEAT

Exemplu mutație: (K.Stanley, R. Miikulainen – Evolving Neural Networks through Augmenting Topologies, Evol.Comput. 2002)



NEAT

Incrucişare:

doi părinți ---- un urmaş

similară încrucişării uniforme de la algoritmi genetici

Etapa 1: identificarea genelor corespondente din cei doi părinți

- Fiecare genă (corespunzătoare unei conexiuni) are un indicator de inovare (alocat în momentul creării genei respective); valoarea indicatorului de inovare se stabilește pe baza unei variabile globale (asociate rețelei) și care este incrementată de fiecare dată când este adăugată o genă
- Genele din părinți care au același indicator de inovare sunt considerate gene corespondente
- Dacă o genă dintr-un părinte nu are corespondent (genă cu același indicator de inovare) în celălalt părinte atunci este denumită genă disjunctă sau genă în exces

NEAT

Incrucişare:

doi părinți ---- un urmaş

similară încrucişării uniforme de la algoritmi genetici

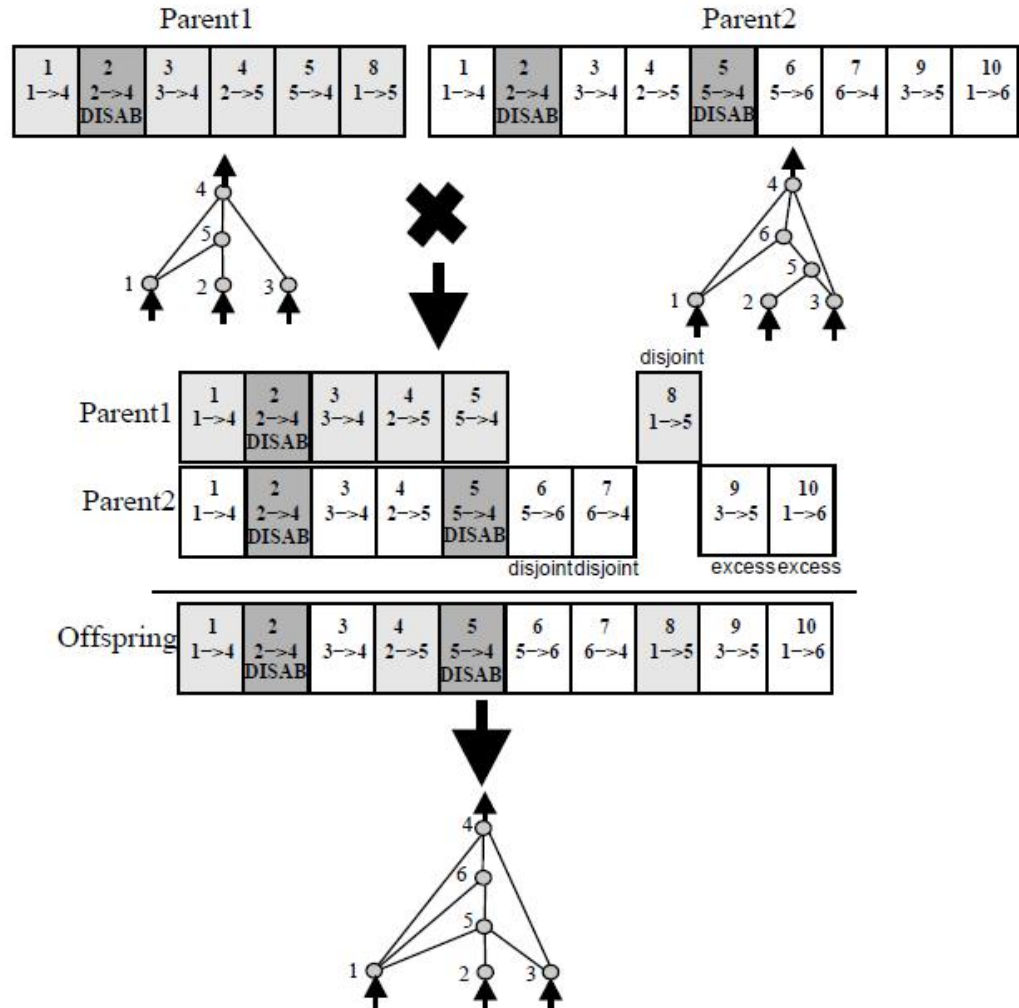
Etapa 2: construirea urmaşului

- Pentru genele corespondente se alege aleator părintele de la care se selectează gena (indicatorul de inovare rămâne neschimbat)
- Pentru genele disjuncte sau în exces se decide dacă se includ în urmaş fie aleator fie pe baza calității părinților (dacă părintele care conține gena e mai bun decât cel care nu o conține atunci gena se include în urmaş, altfel nu se include)

NEAT

Exemplu încrucișare

(Stanley,
Miikulainen,
2002)



NEAT

Observații:

- La un moment dat populația va conține rețele cu arhitecturi diferite
- Pentru a permite noilor arhitecturi să supraviețuiască în populație se utilizează o tehnică de evoluție la nivel de specii (**speciere**) prin care, în procesul de selecție sunt comparate între ele doar rețele având arhitecturi similare)
- Măsura de **similaritate** între două arhitecturi: combinație liniară în care intervin:
 - diferența medie dintre ponderile asociate genelor corespondente (W)
 - numărul de gene disjuncte (D)
 - numărul de gene în exces (E)
$$S = D/N + E/N + W \quad (N = \max\{N_1, N_2\}, N_1, N_2 = \text{nr. gene din cele două rețele})$$
- Selecția se bazează utilizarea unei **funcții de partajare**

Evoluția regulii de învățare

Un algoritm de antrenare descrie un proces iterativ în care la fiecare iterație se ajustează valorile ponderilor

Forma generală a ajustării locale a unei ponderi este

$$w_{ij}(k+1) = \varphi(w_{ij}(k), x_i, y_i, x_j, y_j, \delta_i, \delta_j, \alpha)$$

x_i, x_j – semnale de intrare în unitățile i respectiv j

y_i, y_j – semnale de ieșire din unitățile i respectiv j

α – parametrii de control ai antrenării (ex: rata de învățare)

δ_i, δ_j – semnal de eroare corespunzător unitatii i , respectiv j

Exemplu: ajustare de tip BackPropagation

$$w_{ij}(k+1) = w_{ij}(k) + \eta \delta_i y_j$$

Evolutia regulii de învățare

Elemente care pot fi supuse procesului de evoluție:

- Parametrii algoritmului de antrenare (ex: rata de învățare, coeficientul termenului moment)
- Expresia corespunzătoare regulii de transformare (similar programării genetice)

Evaluarea fiecărui element al populației:

- Antrenarea rețelei pentru fiecare regulă

Dezavantaj: proces extrem de costisitor

Sumar

Structura generală a unui proces de proiectare evolutivă a unei rețele neuronale

Nivele:

- Ponderi
- Reguli de învățare
- Arhitectura

X. Yao, Evolving ANN, 1999

