GA & DNN

Jan Sołtysik

24 kwietnia 2020

Spis treści

1 Wstęp

2 Wprowadzenie teoretyczne

2.1 Algorytm Genetyczny

Algorytmy genetyczne są to algorytmy poszukiwania zainspirowane mechanizmem doboru naturalnego oraz dziedziczności. Łączą w sobie zasadę przeżycia najlepiej przystosowanych osobników z systematyczną, choć zrandomizowaną wymianą informacji wprowadzoną przez operatory genetyczne takie jak krzyżowanie i mutacja, które również zainspirowane są przyrodą. W każdym pokoleniu powstaje nowy zespół sztucznych organizmów, utworzonych z połączenia fragmentów najlepiej przystosowanych przedstawicieli poprzedniego pokolenia. Oprócz tego sporadycznie wyporóbowuje się nową część składową. Element losowości nie oznacza że algorytmy genetyczne sprowadzają się do zwykłego błądzenia przypadkowego. Dzięki wykorzystaniu przeszłych doświadczeń algorytm określa nowy obszar poszukiwań o spodziewanej podwyższonej wydajności. Algorytm genetyczny jest przykładem procedury używającej wyboru losowego jako "przewodnika" w wysoce ukierunkowanym poszukiwaniu w zakodowanej przestrzeni rozwiązań [3].

Poniżej znajduję się podstawowy algorytm genetyczny przedstawiony w postaci pseudokodu [1]:

Algorithm 1: Podstawowy Algorytm genetyczny

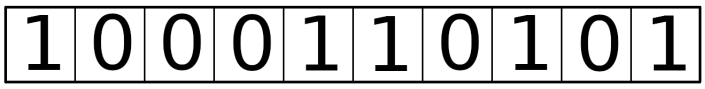
Input: Funkcja oceny $f(\mathbf{x})$
Data: $\mathbf{x}_i(t)$ - i-ty osobnik z generacji nr. t(najczęściej reprezentowany jako ciąg znaków),
n_x - wymiar każdego osobnika
Output: Wektor $\hat{\mathbf{x}}$ dla którego $f(\hat{\mathbf{x}})$ jest lokalnym minimum
Niech $t = 0$ będzie licznikiem generacji. Wygeneruj n_x - wymiarową populację $\mathcal{C}(0)$, składającą się z n osobników.
while *Warunek końcowy nie jest prawdziwy* **do**
  Oblicz przystosowanie, $f(\mathbf{x}_i(t))$ każdego osobnika $\mathbf{x}_i(t)$ z populacji.
  W celu stworzenia potomstwa do najlepiej przystosowanych osobników zastosuj operatory genetyczne np. krzyżowanie i mutacja.
  Z nowo powstałych osobników stwórz nową populację $\mathcal{C}(t+1)$.
  Przejdź do nowej generacji. $t = t + 1$.
end

2.1.1 Podstawowa reprezentacja

Jednym z następstw inspiracji biologicznych AG jest słownictwo zaczerpnięte z genetyki którym będę się posługiwać w tej pracy. Osobniki występujące w populacji nazywane są **chromosomami** lub **genomami**. Idąc dalej w terminologii biologicznej chromosom składa się z **genów**, które mogą występować w pewnej zadanej liczbie odmian, zwaną **allelami**, wyodrębnia się również umiejscowienie genu - **locus**. Materiał genetyczny składa się zazwyczaj z jednego lub więcej chromosomów, zespół ten nazywamy **genotypem**[3]. Poniższa tabela przedstawia używane przeze mnie odpowiedniki:

Genetyka	Algorytmy Genetyczne
chromosom/genom	osobnik w populacji
gen	składowe osobnika
allel	możliwe warianty składowych
locus	pozycja składowej
genotyp	zespół osobników

W elementarnym AG **genom** reprezentujemy za pomocą ciągów bitów, więc **genami** będą pojedyncze bity. Poniżej znajduję się przykładowy genom:



Rysunek 1: Przykładowy genom o długości 10.

Transformacja naszego problemu do opisu w postaci ciągów binarnych jest często bardzo trudne, a czasami wręcz niemożliwa. Lecz trud ten jest opłacalny ponieważ dla tak opisanych genomów mamy zdefiniowane operatory genetyczne które wykonując proste obliczenia zbliżają nasze osobniki do optymalnego rozwiązania.

2.1.2 Selekcja

Jest to etap algorytmu w którym oceniamy osobników przy pomocy funkcji określonej przez rozwiązywany przez nas problem, a następnie lepiej ocenione chromosomy mają większe prawdopodobieństwo aby zostały poddane operatorom genetycznym. Aby opisać ten proces musimy zdefiniować przedstawioną w **Algorytmie 1** funkcję oceny f.
Funkcja oceny/przystosowania f jest obliczana dla każdego osobnika i pozwala nam porównać które genomy są najlepiej przystosowane do zadania które optymalizujemy.
Najprostszym przykładem będzie zadanie znalezienia maximum funkcji $f(x_1, ..., x_n)$ gdzie $n \in \mathbb{N}^+$, wtedy funkcja przystosowania będzie równa wartości funkcji f, im większa wartość f tym osobnik jest lepiej przystosowany.

Istnieje wiele metod selekcji lecz zdecydowanie najpopularniejszą jest **metoda ruletki** w której prawdopodobieństwo p_i wybrania i-tego genomu do reprodukcji kolejnego pokolenia jest proporcjonalne do wartości funkcji przystosowania i jest równe:

$$p_i = \frac{f_i}{\sum_{j=1}^{N} f_j} \tag{1}$$

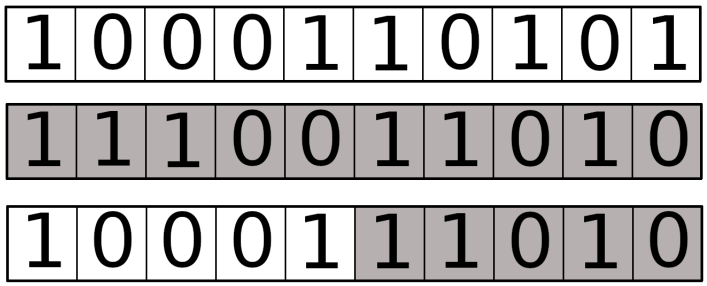
gdzie:
f_i - wartość funkcji oceny dla i-tego genomu, N - rozmiar populacji.

2.1.3 Krzyżowanie

Jednym z dwóch podstawowych operacji wykonywanych w celu stworzenia potomstwa obecnej populacji jest **krzyżowanie**, które inspiruję się rozmnażaniem płciowym w biologi [4].

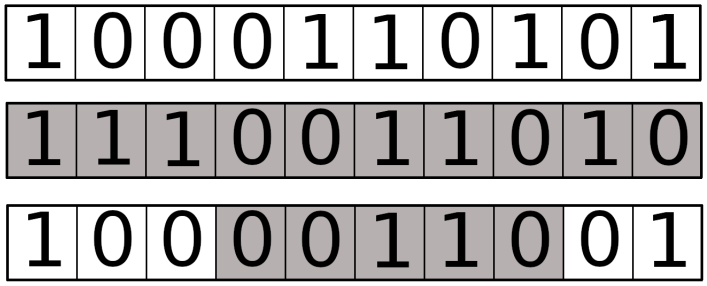
W literaturze możemy znaleźć wiele rodzajów tej operacji, poniżej znajdują się najpopularniejsze odmiany:

- **Krzyżowanie jednopunktowe**:
  W tej odmianie potomka tworzymy z dwóch wybranych przez selekcję rodziców a następnie losujemy liczbę naturalną l ze zbioru $\{0, 1, \ldots, n_x\}$. Potomek wartości na pierwszych $l + 1$ pozycjach przyjmuje geny pierwszego rodzica a na pozostałych z drugiego rodzica.



Rysunek 2: Krzyżowanie jednopunktowe, gdzie $n_x = 10$ i $l = 5$.

- **Krzyżowanie dwupunktowe**:
  Sposób ten jest zbliżony do opisanego wyżej lecz zamiast jednego punktu losujemy dwie liczby naturalne l_1, l_2 ze zbioru $\{0, 1, \ldots, n_x\}$, gdzie $l_1 < l_2$. Potomek natomiast przyjmuje wartości z pierwszego rodzica poza elementami na pozycjach od l_1 do $l_2 - 1$ gdzie wstawiamy elementy z drugiego.



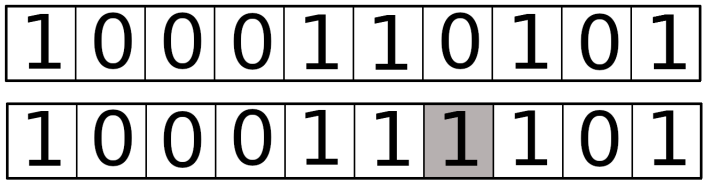
Rysunek 3: Krzyżowanie dwupunktowe, gdzie $n_x = 10$, $l_1 = 4$ i $l_2 = 7$.

  Krzyżowania tego rodzaju można uogólnić na operacje gdzie losujemy k-punktów a potomek naprzemiennie pobiera wartości z rodziców.

- **Krzyżowanie równomierne**:
  Potomek jest również tworzony przy pomocy dwóch rodziców gdzie każdy jego element jest wybierany losowo z pierwszego lub drugiego rodzica z jednakowym prawdopodobieństwem (lub wybranym innym stosunkiem prawdopodobieństw).

2.1.4 Mutacja

Operator ten w klasycznej wersji algorytmu polega na zamianie zadanej wartości genu (0 na 1 lub 1 na 0) z bardzo małym prawdopodobieństwem σ_m(np. 0.2%).



Rysunek 4: Podstawowa mutacja dla genomu o $n_x = 10$ i wylosowanej pozycji 6.

2.2 Sztuczne Sieci Neuronowe

Podobnie jak dla Algorytmów Genetycznych, inspiracją dla Sztucznych Sieci Neuronowych (SSN) byłą biologia a dokładniej budowa neuronów naturalnych znajdujących się w ciele człowieka. Sztuczne sieci neuronowe zostały wymyślone już w w pierwszej połowie XX wieku, lecz dopiero w ostatnich latach dzięki rozwojowi technologi oraz dostępności do olbrzymiej ilości danych mogliśmy zacząć używać ich pełnego potencjału. SSN są przykładem techniki **uczenia nadzorowanego** tzn. podczas uczenia sieci podajemy mu dane ze znanymi wynikami i poprzez porównywanie wygenerowanych wyników z rzeczywistymi nasza sieć uczy się generować poprawne wyniki.

2.2.1 Perceptron

Perceptron to najprostsza architektura SSN. Jednostki na wyjściach/wejściach nazywane są **neuronami**. Na neuronach wejściowych podawane są liczby oraz każde połączenie ma przypisaną wagę natomiast wyjście perceptronu jest obliczane przez wyliczenie ważonej sumy sygnałów wejściowych:

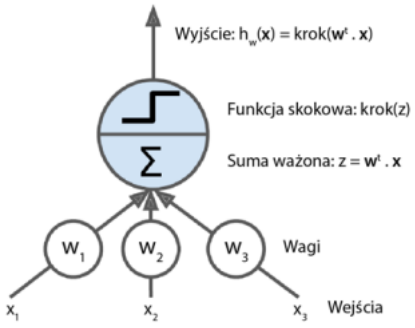
$$z = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i = \mathbf{w}^T \mathbf{x} \tag{2}$$

gdzie:
w_i - waga połączenia pomiędzy i-tym neuronem wejściowym a j-tym wyjściowym,
x_i - i-ta wartość wejściowa.

Następnie wynik otrzymany w (2) jest poddawany **funkcji skoku**, gdzie najczęściej jest ona równa **funkcji Hraviside'a** lub **signum** które są równe:

$$\text{Heaviside}(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ 1, & z \geqslant 0 \end{cases} \quad \text{sgn}(z) = \begin{cases} -1, & z < 0 \\ 0, & z = 0 \\ 1, & z > 0 \end{cases}$$

Nazywane są one **funkcjami aktywacji**.



Rysunek 5: Schemat perceptronu z jednym neuronem wyjściowym i trzema wejściowymi [2]

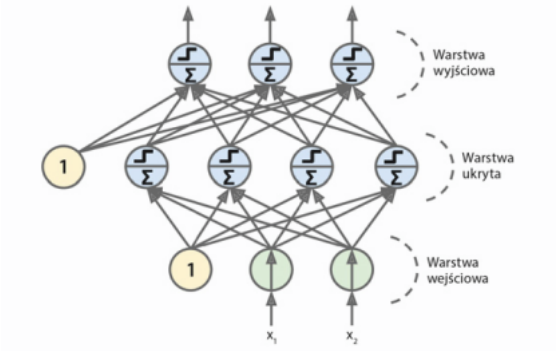
Lecz aby na wyjściu otrzymywać oczekiwane wyniki musimy najpierw perceptron wytrenować. Proces ten polega na modyfikacji wag na podstawie porównanie wyniku oczekiwanego z wynikiem otrzymanym. Wagi są aktualizowane według wzoru [2]:

$$w_{ij} = w_{ij} + \eta(y_j - \hat{y_j})x_i \tag{3}$$

gdzie:
w_{ij} - waga połączenia pomiędzy i-tym neuronem wejściowym a j-tym wyjściowym,
$\hat{y_j}$ - otrzymany wynik na j-tym wyjściu,
y_j - docelowy wynik j-tego neuronu,
η - współczynnik uczenia.
Perceptron jednak nie nadaje się do skomplikowanych zadań ponieważ przez swoją prostą budowę jest jedynie zdolny do klasyfikowania danych które są liniowo separowalne.

2.2.2 Wielowarstwoa Sieć Neuronowa

Ograniczenia perceptronu można wyeliminować tworząc SSN z wielu warstw perceptronów. SSN tego typu nazywamy **perceptronem wielowarstwowym**, który jest złożony z **warstwy wejściowej**, co najmniej jednej **warstwy ukrytej** (jako wejście przyjmują one wyjście poprzedniej warstwy a ich wyjście propagowane do kolejnej jako wejście) ostatnią warstwę nazywamy **warstwą wyjściową**. Dodatkowo w każdej warstwie znajduję się **neuron obciążający**, którego zadaniem jest wysyłanie na wejście następnej warstwy wartości 1. Ilość neuronów w warstwie wejściowej i wyjściowej jest określana przez zestaw danych na których sieć ma pracować np. jeśli zadaniem sieci jest rozpoznawanie ręcznie pisanych cyfr to na wyjściu powinno znaleźć się 10 neuronów a na wejściu każdy neuron powinien odpowiadać jednemu pikselowi wczytanego obrazu. SSN która zawiera co najmniej dwie warstwy ukryte nazywamy **głęboką siecią neuronową** (GSN) [2].



Rysunek 6: Perceptron wielowarstwowy z jedną warstwą ukrytą [2].

Zaproponowana w wzorze (3) metoda uczenia perceptronu nie zadziała w przypadku sieci wielowarstwowej. Najpopularniejszą metodą uczenia sieci neuronowych jest **wsteczna propagacja**. Cały proces możemy przedstawić za pomocą kroków:

Algorithm 2: Procedura uczenia wielowarstwowej SSN.

1. Wybór parametrów sieci (liczba warstw, liczba neuronów w warstwach itd.)
2. Wagi inicjujemy losowo.
3. Dla każdego neuronu obliczany jest błąd równy różnicy pomiędzy otrzymanym wynikiem $\hat{\mathbf{y}}$ a wartością oczekiwaną $\mathbf{y}$.
4. Błędy propagowane są do poprzednich warstw.
5. Modyfikacja wag na podstawie wartości błędu.
6. Powtarzaj od **3** dla kolejnych wektorów uczących.
7. Skończ algorytm jeśli przekroczymy ustaloną liczbę epok, lub średni błąd przestanie zauważalnie maleć.

Średni błąd może być przestawiony przez wzór:

$$d = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y})^2 \tag{4}$$

Podczas aktualizowania wag wybieramy te wartości dla których średni błąd jest najmniejszy, możemy je znaleźć np. używając metodę gradientu prostego przy użyciu odwrotnego różniczkowania automatycznego.

2.2.3 Funkcje aktywacyjne

Aby powyższy algorytm przebiegał prawidłowo zamiast funkcji skokowej/signum wprowadzono inne funkcje aktywacji, ponieważ funkcje używane w przypadku pojedynczego perceptronu są złożone jedynie z płaskich segmentów, co uniemożliwia korzystać z gradientu. Poniżej znajdują się najczęściej używane **funkcje aktywacji** w SSN:

- **funkcja logistyczna**:
  W każdym punkcie ma zdefiniowaną pochodną niezerową, dzięki czemu algorytm gradientu prostego może na każdym etapie uzyskiwać lepsze wyniki. Jest ona używana w warstwie wyjściowej jeśli zadaniem naszej sieci jest klasyfikacja obiektów na przynależność do dwóch rozłącznych klas. Dodatkowo jest to funkcja używana przez neurony naturalne przez co uważana była za najlepszą funkcję aktywacyjną, lecz jak pokazała praktyka w przypadku SSN inne funkcje sprawują się lepiej. Przyjmuje ona wartości z zakresu $(0, 1)$.

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \tag{5}$$

- **funkcja tangensa hiperbolicznego**:
  Jest S - kształtna, ciągła i różniczkowalna, podobnie jak funkcja logistyczna, ale zakres wartości wynosi $(-1, 1)$ a nie $(0, 1)$ ja w przypadku funkcji logistycznej σ.

$$\tanh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \tag{6}$$

- **funkcja ReLU**:
  Jest ciągłą, ale nieróżniczkowalna dla $z = 0$. W praktyce jednak spisuje się znakomicie dodatkowo jest bardzo szybko obliczana. Aktualnie jest ona oraz jej odmiany są najczęściej używanymi funkcjami aktywacji dla warstw ukrytych i wejściowej.

$$ReLU(z) = \max(0, z) \tag{7}$$

- **funkcja softmax**:
  Używana jest ona w warstwie wyjściowej jeśli nasza sieć ma obliczać prawdopodobieństwa przynależności otrzymywanych obiektów do klas (jest ich więcej niż 2 i wszystkie prawdopodobieństwa mają się sumować do 1). Model najpierw oblicza dla każdej klasy - k:

$$s_k(\mathbf{x}) = \left(\mathbf{w}^{(k)}\right)^T \mathbf{x} \tag{8}$$

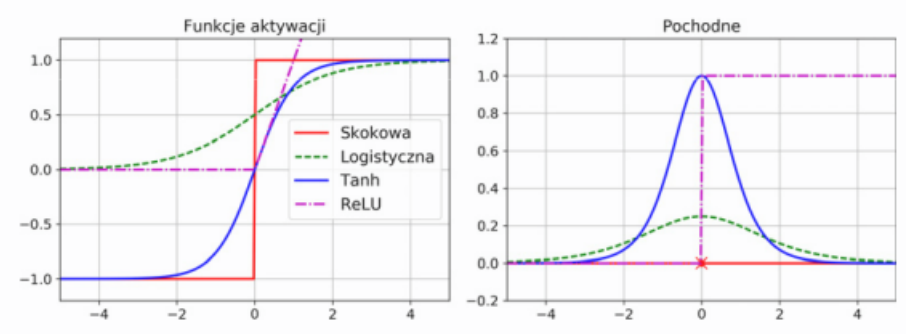
  gdzie: $\mathbf{w}^{(k)}$ - wyspecjalizowany wektor wag dla klasy k.
  Po wyliczeniu $s_k(\mathbf{x})$ dla każdej klasy, obliczane jest odpowiednio znormalizowane prawdopodobieństwo przynależności danej próbki do klasy k:

$$p_k = \frac{\exp\left(s_k(\mathbf{x})\right)}{\sum_{i=1}^{K} \exp\left(s_i(\mathbf{x})\right)} \tag{9}$$

  gdzie: K - liczba klas.
  Model prognozuje klasę o najwyższym prawdopodobieństwie:

$$\hat{y} = \underset{k}{\operatorname{argmax}}(p_k) \tag{10}$$

  Gdzie funkcja **argmax** zwraca indeks klasy dla której wartość p_k jest największa.

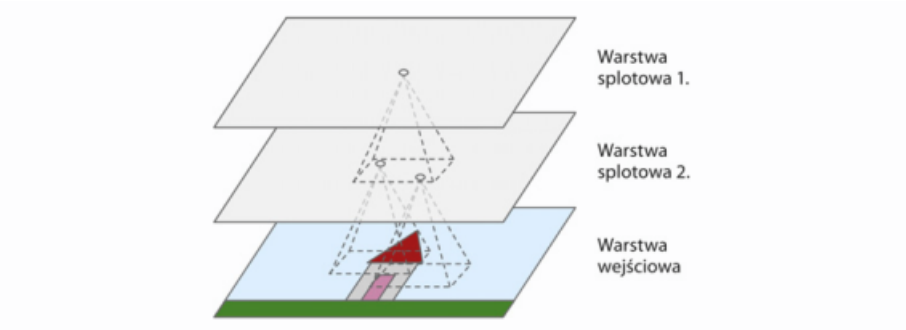


Rysunek 7: Funkcje aktywacyjne i ich pochodne. [2]

2.2.4 Inne rodzaje warstw SSN.

W SSN oprócz **warstw gęstych** tzn. gdzie każdy neuron w i-tej warstwie jest połączony z wszystkimi neuronami znajdującymi się w warstwie nr. $i+1$, używane są warstwy innego typu które pomagają siecią osiągać lepsze wyniki. Oto kilka przykładowych warstw:

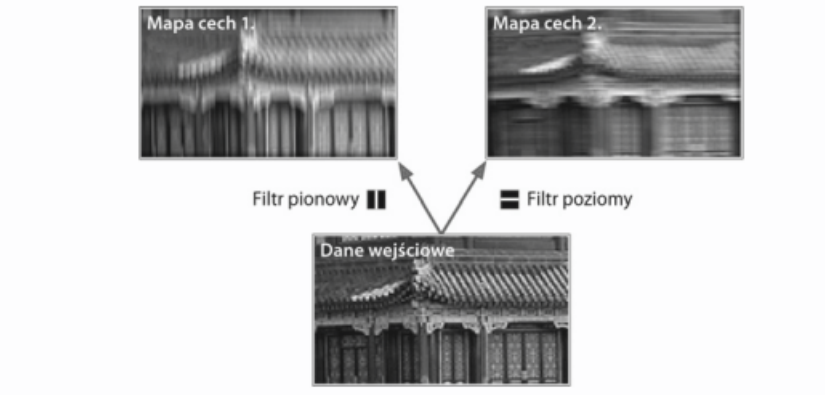
- **warstwa splotowa**: Używane są one w zadaniach wizualnych. Neurony w pierwszej warstwie splotowej nie są połączone z każdym pikselem obrazu wejściowego, lecz wyłącznie z pikselami znajdującymi się w ich polu recepcyjnym.



Rysunek 8: Warstwy CNN z prostokątnymi lokalnymi polami recepcyjnymi [2].

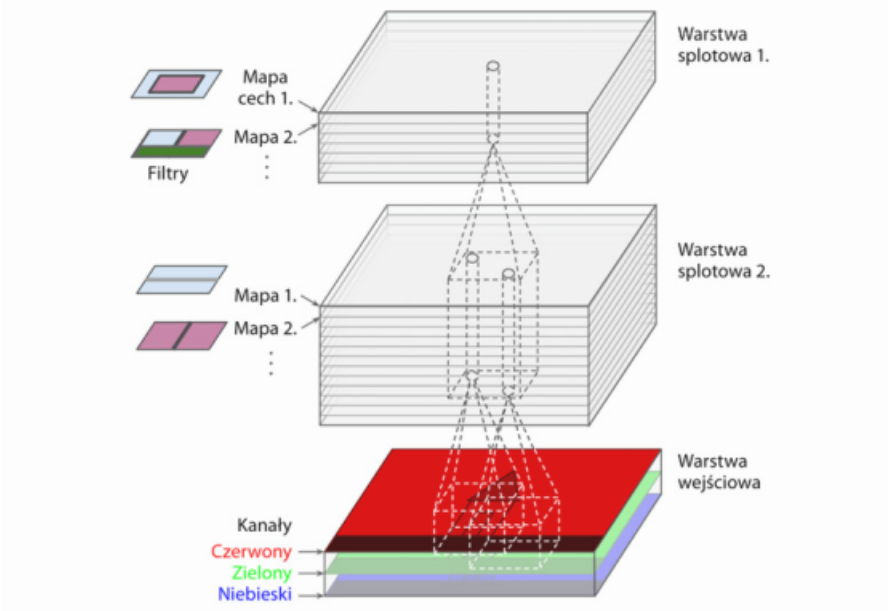
Dzięki powyższej strukturze sieć może koncentrować się na ogólnych cechach w pierwszej warstwie ukrytej, następnie łączyć je w bardziej złożone kształty w kolejnych warstwach. Ogólnie neuron znajdujący się w i-tym wierszu oraz j-tej kolumnie danej warstwy jest połączony z wyjściami neuronów poprzedniej warstwy zlokalizowanymi w rzędach od $i \cdot s_h$ do $i \cdot s_h + f_h - 1$ i kolumnach od $j \cdot s_w$ do $j \cdot s_w + f_w - 1$ gdzie: f_w/f_h - szerokość/wysokość pola recepcyjnego, s_h, s_w definiują wartość **kroków** odpowiednio w kolumnach i rzędach. **Krokiem** nazywamy odległość pomiędzy dwoma kolejnymi polami recepcyjnymi. Aby uzyskać takie same wymiary dla każdej warstwy najczęściej dodawane są zera wokół wejść.

Wagi neuronu mogą być przedstawione jako niewielki obraz o rozmiarze pola recepcyjnego, tak zwane **filtry**. Przykładowo filtrem może być macierz wypełniona zerami oprócz środkowej kolumny zawierającej jedynki, neurony posiadające taki filtr będą ignorować wszystkie elementy oprócz tych które znajdują się w środkowej linii.



Rysunek 9: Dwie mapy cech otrzymane przy pomocy dwóch różnych filtrów [2].

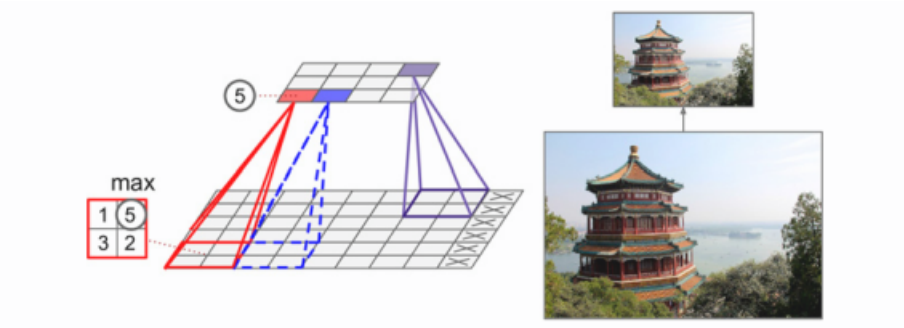
Warstwa wypełniona neuronami o takim samym filtrze nazywamy **mapą cech** która pomaga nam wyszczególnić elementy przypominające użyty filtr. Warstwa splotowa składa się z kilku map cech o identycznych rozmiarach. Każda mapa ma swoje wartości parametrów, dzięki czemu stosując różne filtry warstwa splotowa jest w stanie wykryć wiele cech w dowolnym obszarze obrazu. Dodatkowo obrazy wejściowe składają się również z kilu warstw, po jednej na każdy kanał barw. Zazwyczaj są to trzy kanały - czerwony, zielony i niebieski lub jeden dla obrazów czarno-białych.



Rysunek 10: Warstwa splotowa zawierająca wiele cech, oraz zdjęcie z trzema kanałami barw [2].

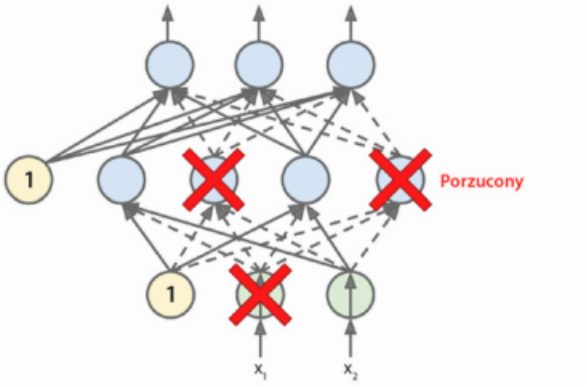
- **warstwa łącząca**: Jej celem jest zmniejszenie obrazu wejściowego w celu zredukowania obciążenia obliczeniowego, wykorzystania pamięci i liczby parametrów. Tak samo jak w warstwach splotowych neurony łączą się z wyjściami określonej liczby neuronów poprzedniej warstwy, które mieszczą się w obszarze pola recepcyjnego. Jednakże warstwa ta nie zawiera

wag, jej zadaniem jest gromadzenie danych przy pomocy funkcji agregacyjnej np. maksymalizującej lub uśredniającej.



Rysunek 11: Maksymalizująca warstwa łącząca, gdzie rozmiar jądra łączącego to 2x2 [2].

- **warstwa porzucania**:
  Warstwa ta dla poprzedniej warstwy aplikuję technikę **porzucania** tzn. że każdy neuron znajdujący się w tej warstwie w poszczególnym przebiegu może zostać całkowicie pominięty w procesie uczenia. Szansa na porzucenie jest hiperparametrem i nazywana jest **współczynnikiem porzucenia**.



Rysunek 12: Przykład porzucania [2].

Istnieje wiele innych rodzajów warstw w SSN (np. rekurencyjne) lecz opisałem tyko warstwy użyte w moim programie. Z tego samego powodu jedyną opisaną przeze mnie architekturą jest **jednokierunkowa sieć neuronowa**(sygnał biegnie w jednym kierunku).

3 Micro - GA dla SSN

SSN posiadają dużą liczbę hiperparametrów i wpływ każdego z nich na efektywność sieci jest zależny od wykonywanego zadania, więc jeżeli wybieramy je ręcznie musimy to robić metodą prób i błędów. Aby użyć AG to tego zadania musimy zmodyfikować jego tradycyjną odmianę. Ponieważ zależy nam na szybkości wykonywanych obliczeń zastosowana została odmiana **micro-GA** gdzie

liczba dozwolonych generacji jest niewielka. Dodatkowo aby przyśpieszyć działanie algorytmu SSN są trenowane przez ograniczoną liczbę epok tzw. **uczenie częściowe**.

Algorithm 3: Zmodyfikowany Algorytm Genetyczny wybierający hiperparametry SSN.

Data: Treningowy i walidacyjny zbiór danych $\mathcal{D}_t$, $\mathcal{D}_v$
Input: Parametry algorytmu.
Output: Najlepiej przystosowana SSN ϕ^*
Niech $t_e = 0$ będzie licznikiem wykonanych przebiegów AG.
Niech $\mathcal{S} = \{\}$ zbiór na najlepsze rozwiązania.
while $t_e < \gamma_r$ **do**
  Niech $t = 0$ będzie licznikiem generacji.
  Stwórz i losowo zainicjalizuj początkową populację $\mathcal{C}(0)$, zawierającą n osobników, gdzie $n \leqslant 10$.
  while $t < \gamma_g \vee$ *warunek wczesnego końca dla* $\mathcal{C}(t)$ *nie jest spełniony* **do**
    Oblicz funkcję przystosowania $f(\phi)$ dla każdego osobnika w populacji.
    Zastąp najgorsze modele w $\mathcal{C}(t)$ najlepszymi modelami $\mathcal{C}(t-1)$.
    Wykonaj selekcję tworząc populację potomstwa $\mathcal{O}(t)$.
    Wykonaj operację krzyżowania i mutacji na osobnikach z $\mathcal{O}(t)$.
    $\mathcal{C}(t+1) = \mathcal{O}(t)$.
    $t = t + 1$.
  end
  Do $\mathcal{S}$ dodaj najlepszego osobnika z poprzedniego przebiegu.
  $t_e = t_e + 1$.
end
Znormalizuj koszt dla każdego modelu w $\mathcal{S}$.
Najlepszym modelem jest osobnik z $\mathcal{S}$ dla którego funkcja przystosowania przyjmuję najniższą wartość.

Poniżej znajduję się lista parametrów powyższego algorytmu oraz użyte dla nich oznaczenia ich rola natomiast zostanie omówiona w kolejnych podrozdziałach.

Nazwa parametru	Oznaczenie
Współczynnik sprawdzianu krzyżowego	γ_v
Prawdopodobieństwo mutacji	ρ_m
Prawdopodobieństwo dodania warstwy	γ_l
Maksymalna liczba warstw	$\mathcal{A}$
Współczynnik skalowania rozmiaru sieci	α
Rozmiar populacji	n
Rozmiar turnieju	n_t
Dopuszczalne podobne modele	γ_c
Liczba epok treningowych	γ_t
Liczba generacji	γ_g
Liczba eksperymentów	γ_r

3.1 Reprezentacja SSN w AG

Z powodu złożoności SSN musiałem zrezygnować ze standardowej reprezentacji osobników jako ciągi binarne. Użytym przeze mnie modelem jest kodowanie oparte na liście tablic tzn. każda warstwa sieci jest reprezentowana jako tablica w której każde pole ma z góry określone znaczenie. W tej reprezentacji warstwy przyjmują postać:

Typ Warstwy	Liczba Neuronów	Funkcja Aktywacji	Liczba Filtrów	Rozmiar Pola Recepcyjnego	Krok Pola Recepcyjnego	Rozmiar Pola Łączącego	Współczynnik Porzucenia

Rysunek 13: Schemat chromosomu reprezentującego SSN.

Gdzie każde pole może przyjmować pewien zakres wartości:

Nr.	Używane Przez	Wartości
1	Perceptron wielowarstwowy/Sieć splotowa	$x \in \{1, ..., 4\}$
2	Perceptron wielowarstwowy	$8 * x$ dla $x \in \{1, ..., 128\}$
3	Perceptron wielowarstwowy/Sieć splotowa	$x \in \{1, ..., 4\}$
4	Sieć splotowa	$8 * x$ dla $x \in \{1, ..., 64\}$
5	Sieć splotowa	3^x dla $x \in \{1, ..., 6\}$
6	Sieć splotowa	$x \in \{1, ..., 6\}$
7	Sieć splotowa	2^x dla $x \in \{1, ..., 6\}$
8	Perceptron wielowarstwowy/Sieć splotowa	$x \in [0, 1]$

Osobniki więc będą listą takich tablic. Warstwa wejściowa i wyjściowa jest ustalona przez zadanie jakie ma wykonywać sieć np. jeśli trenowana sieć ma rozpoznawać ręcznie pisane cyfry wiemy że w warstwie wyjściowej musi pojawić się 10 neuronów z funkcją aktywacyjną typu softmax. Generując jednak pozostałe warstwy musimy pamiętać że warstwy nie mogą być ułożone losowo (np. nie mogą występować dwie warstwy porzucania po sobie). Poniżej znajdują się odpowiednie mapowania typów warstw i funkcji aktywacji na liczby całkowite oraz odpowiednie zasady łączenia warstw w budowanych osobnikach.

Typ warstwy	Nazwa	Dozwoleni następcy
1	Warstwa Gęsta	1, 4
2	Splotowa	1, 2, 3, 4
3	Łącząca	1, 2
4	Porzucenia	1, 2

Typ funkcji	Nazwa
1	Sigmoid
2	Tangens hiperboliczny
3	ReLU
4	Softmax
5	Liniowa

Dodanie innych typów warstw (np. rekurencyjnych) i funkcji nie powinno być problemem, jedynie trzeba pamiętać o dodaniu odpowiednich zasad budowania dla nich. Przykładowy genomem reprezentującym SSN jest:

[[1, 784, 3, 0, 0, 0, 0, 0], [4, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.54],
[1, 300, 3, 0, 0, 0, 0, 0], [4, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.28],
[1, 100, 3, 0, 0, 0, 0, 0], [1, 10, 4, 0, 0, 0, 0, 0]]

Dekodując powyższy gneom otrzymujemy sieć złożoną z następujących warstw:

Typ warstwy	Liczba Neuronów	Funkcja Aktywacji	Wsp. Porzucenia
Gęsta	784	ReLU	N/A
Porzucanie	N/A	N/A	0.54
Gęsta	300	ReLU	N/A
Porzucanie	N/A	N/A	0.28
Gęsta	100	ReLU	N/A
Gęsta	10	Softmax	N/A

3.2 Generowanie w populacji początkowej

Generując genomy w populacji warstwa pierwsza wyznacza typ SSN(np. jeśli pierwszą warstwą jest warstwa gęsta to sieć będzie perceptronem wielowarstwowym, a jeśli pierwszą warstwą będzie warstwa splotowa sieć będzie siecią splotową). Warstwa wejściowa i wyjściowa dla każdego osobnika jest taka sama ponieważ są one zależne od danych na jakich trenujemy oraz od zadania jakie ma nasza sieć wykonywać (klasyfikacja lub regresja), dlatego w populacji początkowej musimy losowo generować tylko warstwy ukryte. Proces generowania możemy określić przy pomocy pseudokodu:

Algorithm 4: Generowanie populacji początkowej.

Output: Zainicjalizowana populacja początkowa $\mathcal{C}(0)$.
Niech $\mathcal{C}(0)$ oznacza populację początkową wielości n, gdzie chromosomy tej populacji możemy oznaczyć przez $\mathbf{x}_i$.
for *Dla każdego i, gdzie* $1 \leqslant i \leqslant n$ **do**
  Dla wszystkich warstw poza wyjściową (która ma z góry określoną funkcję aktywacji) losujemy funkcję aktywacji f.
  while *Liczba warstw* $\mathbf{x_i} \leqslant \mathcal{A}$ **do**
    Wylosuj typ warstwy a następnie wartości używanych przez nią parametrów.
    Wylosuj liczbę U przy pomocy płaskiego rozkładu prawdopodobieństwa z przedziału $[0, 1]$.
    Oblicz $\rho_l = 1 - \sqrt{1 - U}$.
    if $\rho_l < \gamma_l$ **then**
      Jeśli wygenerowana warstwa jest kompatybilna w warstwą poprzednią dodaj ją do chromosomu.
    else
      Kończymy dodawanie warstw dla $\mathbf{x}_i$.

3.3 Funkcja oceny dla SSN

Celem algorytmu jest znalezienie sieci ϕ^* osiągającej jak najlepszy wynik jednocześnie ograniczając liczbę trenowalnych parametrów, więc jest to problem optymalizacyjny przedstawiony za pomocą wzoru:

$$\min_{\phi} \big(p(\phi), w(\phi)\big) \tag{11}$$

gdzie:
$p(\phi)$ - miara jakości sieci(np. błąd predykcji),
$w(\phi)$ - liczba trenowalnych parametrów zwana **rozmiarem sieci**.
Jeżeli jednak chcielibyśmy znaleźć bezpośrednio rozwiązanie powyższego równania prowadziłoby to do zadania optymalizacji wielokryterialnej. Aby uprościć to zadanie definiujemy funkcję oceny, względem której osobniki w populacji będą porównywane:

$$g(\phi) = (1 - \alpha)p(\phi) + \alpha w(\phi) \tag{12}$$

Jednak powinniśmy jeszcze przeskalować $p(\phi)$, $w(\phi)$ aby ich wartości były podobnego rzędu. Niech $\mathbf{p} = \{p(\phi_1), ..., p(\phi_n)\}$ będzie wektorem ocen aktualnej populacji, wtedy po znormalizowaniu $\mathbf{p}^* = \frac{\mathbf{p}}{||\mathbf{p}||}$ zakres wartości ocen sieci będzie z przedziału $p^*(\phi_i) \in [0, 1]$ dla każdego i. Niech $\mathcal{A}$ oznacza maksymalną liczbę warstw w sieci, oraz $\mathcal{N}$ oznacza maksymalną liczbę neuronów w warstwie wtedy maksymalna wartość rozmiaru sieci jest równa $w(\phi) = \mathcal{N}^2\mathcal{A}$. Ponieważ chcemy aby sieci o podobne rozmiarowi sieci miały podobną wartość $w(\phi)$ dlatego ostatnie trzy cyfry rozmiaru na zera otrzymując $w'(\phi)$. Następnie aby skalami zbliżyć się do wartości ocen w tym celu wyznaczamy $w^*(\phi) = \log_{10} w'(\phi)$ (rozmiaru sieci nie normalizujemy podobnie jak wartości ocen ponieważ chcemy aby różnica w rozmiarze miała większe wpływ na różnice w funkcji ocen), co nam daję wartości rzędu $\log_{10}(\mathcal{N}^2\mathcal{A})$.
Wtedy odpowiednio przeskalowana funkcja oceny wyrażona jest wzorem:

$$g(\phi) = \log_{10}(\mathcal{N}^2\mathcal{A})(1 - \alpha)p^* + \alpha w^*(\phi) \tag{13}$$

3.4 Selekcja

Aby wygenerować n potomków potrzebujemy $2n$ rodziców wybranych z bieżącej populacji. Do tego celu wykonamy odmianę **binarnej selekcji turniejowej**:

Algorithm 5: Binarna selekcja turniejowa dla SSN.

Input: Aktualna generacja $\mathcal{C}(t)$.
Output: Najlepiej przystosowani osobnicy z populacji.
Niech $\mathcal{P}$ - zbiór rodziców.
Wybierz losowo m rodziców gdzie $m < n$.
while *nie wybrano 2n rodziców* **do**
  Porównaj parami wybrane genomy, lepiej przystosowany dodaj do $\mathcal{P}$.

W powyższej procedurze im większa wartość m tym większe jest prawdopodobieństwo wybrania najlepszych osobników jako rodzica.

3.5 Krzyżowanie

Ponieważ standardowe operatory genetyczne nie będą działać dla zmodyfikowanego kodowania genomów, je również trzeba zmodyfikować. Wybranym krzyżowaniem jest zmodyfikowane krzyżowanie dwupunktowe. Wykonując krzyżowanie musimy pamiętać, że nie każda warstwa może występować po każdej innej. Przykładowa dla dwóch rodziców S_1, S_2 po wybraniu punktów (r_1, r_2) z S_1 i (r_3, r_4) z S_4 (gdzie r_i oznacza indeks warstwy), może się stać że warstwa r_3 nie może być zamieniona z warstwą r_1 lub r_4 z r_2 z powodu niekompatybilności z warstwą poprzednią 3.1.

Algorithm 6: Krzyżowanie dwupunktowe dla SSN.

Input: Dwa genomy S_1, S_2.
Output: Nowy potomek S_3.
Losowo wybierz dwa punkty z S_1 gdzie $r_1 \leqslant r_2$.
if $r_1 = r_2$ **then**
  r_2 = len(S_1) - 1
Znajdź wszystkie pary punktów $(r_3, r_4)_i$ w S_2 kompatybilne z (r_1, r_2), gdzie $r_3 < r_4$ i $len(S_1) + (r_4 - r_3) - (r_2 - r_1) < \mathcal{A}$ (sprawdzamy czy nie przekraczamy maksymalnej liczby warstw).
Losowo wybierz jedną z par $(r_3, r_4)_i$.
W S_1 zastąp warstwy z przedziału $[r_1, r_2]$ warstwami z przedziału $[r_3, r_4]$ wzięte z S_2. Nowy genom oznacz jako S_3.
W S_3 zmień w warstwach wziętych z S_2 funkcję aktywacji, na funkcję używaną w warstwach wziętych z S_1.

Operacja ta dla dwóch poniższych chromosomów będzie przebiegać następująco [1]:

$$S_1 = \big[[1,\ 784,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0.54],\\ [1,\ 300,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0.28],\\ [1,\ 100,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [1,\ 10,\ 4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0]\big]$$

$$S_2 = \big[[1,\ 64,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0.22],\\ [1,\ 333,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [1,\ 420,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\\ [1,\ 77,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0.44],\\ [1,\ 10,\ 4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0]\big]$$

Dla $r_1 = 1$ i $r_2 = 3$ zbiór wszystkich możliwych par $(r_3, r_4)_i$ dla S_1 i S_2 wynosi:

$$[(0,2),(0,4),(0,5),(1,2),(1,4),(1,5),(2,4),(2,5),(4,5)]$$

Zakładając że wylosowaliśmy punkty $(2, 4)$ potomek S_3 po wykonanej operacji krzyżowania jest równy:

$$S_3 = \big[[1,\ 784,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [1,\ 333,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\\ [1,\ 420,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [1,\ 77,\ 2,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\\ [1,\ 100,\ 3,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0],\ [1,\ 10,\ 4,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0]\big]$$

Jak widzimy funkcje aktywacji w warstwach pobranych z S_2 zostały zamienione na funkcję używaną w S_1.

3.6 Mutacja

Mimo że mutacja nie jest potrzebna w mikro-AG, została ona dodana aby jeszcze bardziej zróżnicować modele i potencjalnie zwiększyć szanse na otrzymanie lepszych rozwiązań. Zmodyfikowana operacja mutacji jest bardzo podobna do swojej klasycznej wersji. Każdy model z populacji potomków może podlec mutacji przy prawdopodobieństwie ρ_m, wtedy:

- Losowo wybierz jedną z warstw, a następnie zmień jeden z jej używanych parametrów zgodnie z tabelą 3.1.
- Zmień funkcję aktywacji, a następnie skoryguj ją w pozostałych warstwach oprócz ostatniej.
- Dodaj warstwę porzucenia jeśli może ona występować po zmienianej warstwie.[tab]

3.7 Warunek końca

W Algorytmie Genetycznym może dojść do sytuacji w której zmiany w kolejnych pokoleniach są niezauważalne, wtedy bez konsekwencji można zakończyć aktualny przebieg algorytmu. Możemy to zaimplementować definiując odpowiedni warunek końca. Warunek ten można oprzeć na funkcji oceny wiemy jednak że sieci o podobnej strukturze będą miały zbliżone wartości dla tej funkcji. Dlatego warunek końca możemy oprzeć definiując **odległość** między genomami mówiąca nam jak zbliżone są do siebie dwie SSN.
Niech $S^{(i)}$ - oznacza i-tą warstwę sieci S. Wtedy przy założeniu $\text{len}(S_2) \geqslant \text{len}(S_1)$ odległość $d(S_1, S_2)$ miedzy dwoma genomami reprezentującymi SSN możemy obliczyć według algorytmu:

Algorithm 7: Odległość między dwoma SSN.

Input: Dwa genomy S_1, S_2.
Output: Odległość między S_1 a S_2.
Niech $d = 0$ - odległość między S_1 a S_2.
for *Dla każdego i, gdzie* $1 \leqslant i \leqslant len(S_1)$ **do**
  $d = d + ||S_2^{(i)} - S_1^{(i)}||$.
for *Dla każdego i, gdzie* $len(S_1) < i \leqslant len(S_2)$ **do**
  $d = d + ||S_2^{(i)}||$.

Dla powyższej definicji d jeśli $S_1 = S_2$ to $d(S_1, S_2) = 0$, wiec pozwala nam ona określić stopień podobieństwa dwóch osobników.
Aktualny przebieg AG kończymy więc gdy co najmniej m_c par spełnia $d(S_1, S_2) \leqslant d_t$, gdzie zarówno d_t i m_c są parametrami AG.

4 Implementacja

Do zrealizowania opisanego wyżej AG użyłem języka `python` wraz z biblioteką implementującą wiele operacji numeryczny `numpy`, natomiast do budowania i trenowania sieci neuronowych wykorzystałem popularną bibliotekę `tensorflow`. Aby przyśpieszyć trenowanie sieci wykorzystałem platformę `Google Colab`, gdzie korzystając z popularnej formy `jupyter notebooków` mamy darmowy dostęp przez chmurę do karty graficznej co znacznie przyśpiesza trenowanie SSN, co znacznie skraca czas wykonania naczego algorytmu. Algorytm podzieliłem na cztery programy gdzie każdy wykonuję jedną z funkcji:

- Przechowywanie zasad budowania SSN oraz parametrów potrzebnych do wykonania algorytmu.
- Dla danego chromosomu budowanie sieci przy pomocy biblioteki `tensorflow`, oraz zwrócenie oceny oraz wielkości sieci.
- Implementacja klasy reprezentującej pojedynczy genom gdzie, która ułatwia implementację operację związane z AG.
- Implementacja klasy reprezentującej AG gdzie znajdują się funkcję wykonujące algorytmy opisane w pseudokodach w rozdziale trzecim.

Programy opisane są w poniższych podrozdziałach:

4.1 building_rules.py

Jest to plik pomocniczy który zawiera on typy wyliczeniowe np. `LayerType` zwiększające czytelność kodu, oraz słowniki które:

- opisują maksymalne wartości opisane w tabeli 3.1.
- zawierają reguły budowania sieci podane w tabeli 3.1.
- opisują funkcje aktywacyjne dostępne dla warstwy danego typu.

4.2 building_models.py

Program ten zawiera funkcję które dla każdego chromosomu budują sieci neuronowe przy pomocy biblioteki `tensorflow` która w aktualizacji `2.0` umożliwia budowanie proste modeli przy pomocy modułu `keras` więc poszczególne rodzaje warstw mają swoje gotowe implementację oraz reguły zaimplementowane w wyżej opisanym programie dają nam gwarancję że modele te będą poprawne. Algorytm genetyczny posiada wszystkie potrzebne parametry do przeprowadzenia procesu trenowania i zwrócenia potrzebnych dla niego wartości tzn oceny wydajności sieci oraz liczby trenowalnych parametrów.

4.3 nn_genome.py

W pliku tym znajduję się klasa opakowująca chromosom przy pomocy listy list. Język `python` posiada implementację listy która idealnie nadaję się do AG dla SSN, ponieważ może ona zawierać wartości różnego typu więc może ona np. posiadać jednocześnie pole opisujące liczbę neuronów w warstwie, która jest typu całkowitoliczbowego (`int`), oraz pole opisujące współczynnik porzucenia co jest typu zmiennoprzecinkowego (`float`).

4.4 nn_optimizer.py

W pliku tym znajduję się największa liczba operacji przy pomocy klasy `NNOptimizer` implementujemy cały przebieg AG. Interfejs tej klasy inspirowałem biblioteką implementującą algorytmy uczenia maszynowego `scikit-learn` więc aby przeprowadzić proces poszukiwania optymalnej sieci neuronowej jedyne co musi zrobić użytkownik to stworzyć instancję podanej wyżej klasy do której konstruktora musimy podać typ wykonywanego zadania (klasyfikacja lub regresja) oraz ewentualnie parametry opisane w tabeli 3, lecz nie jest to obowiązkowe ponieważ posiada ona dla nich wartości domyślne, następnie cały algorytm genetyczny oraz finalne wytrenowanie otrzymanej sieci z pełną liczbą epok odbywa się przez wywołanie metody `fit` która pobiera jako argumenty dane oraz oczekiwane wartości. Poniżej przykładowe wywołanie programu:

```
# X, y - wczytane wcześniej dane.
nn_optimizer.NNOptimizer.fit(X, y)
```

Interfejs ten umożliwia rozwiązanie jakiegoś problemu z użyciem uczenia maszynowego nawet jeśli użytkownik nie posiada wiedzy na temat przebiegu algorytmu który dana klasa implementuję.

Aby przyśpieszyć wykonywanie AG możemy w każdej generacji budować i trenować modele przy pomocy programu `building_models.py` równolegle. Jednak trenowanie tylu sieci jednocześnie jest procesem potrzebujących wiele zasobów, więc można tę opcję wyłączyć podając wartość argumentu funkcji `train_parallel=False` wywołując funkcję `fit`. Równoległość zaimplementowałem przy

pomocy wbudowanej biblioteki `python'a multiprocessig` i jej klasy `Pool`, która posiada funkcję `pool` do której jako argumenty mogę podać funkcję budującą i trenującą SSN oraz populację chromosomów, wtedy dla każdego osobnika zostanie utworzony osobny proces i możliwe będzie ich równoległa ewaluacja.

5 Otrzymane wyniki

6 Bibliografia

References

[1] Oliver Schütze David Laredo Yulin Qin and Jian-Qiao Sun. "Automatic Model Selection for Neural Networks". In: (2019).

[2] Aurélien Géron. *Uczenie maszynowe z użyciem Scikit-Learn i TensorFlow*. 2018.

[3] David E. Goldberg. *Algorytmy genetyczne i ich zastosowania*. 1989.

[4] Wikipedia. *Crossover (genetic algorithm)*. https://en.wikipedia.org/wiki/Crossover_(genetic_algorithm).