Geração de genes candidatos com as Generative Adversarial Networks (GAN's)

Resumo:

Com os dados do Ecoli, a gente faz um processado para que eles fiquem em um intervalo de [-1 até 1], isso para que a rede façã bem seus operações e possa convergir, depois, a GAN é treinada com os dados reais e os dados gerados pelo gerador (dados fake). A gente chega a um ponto de conversão com uma perda de 0.69, tendo em conta que a perda desejada é 0.5.

Metodología:

A figura 1 mostra a metodología empregada para poder gerar os genes candidatos. Para poder mostrar as distribuições dos dados, a gente fiz um PCA (*Principal Component Analysis*) de 2 componentes para poder mostrar eles em um gráfico. A figura 1 mostra a os candidatos *fake* os quales têm uma distribuição semelhante a dristribuição real.

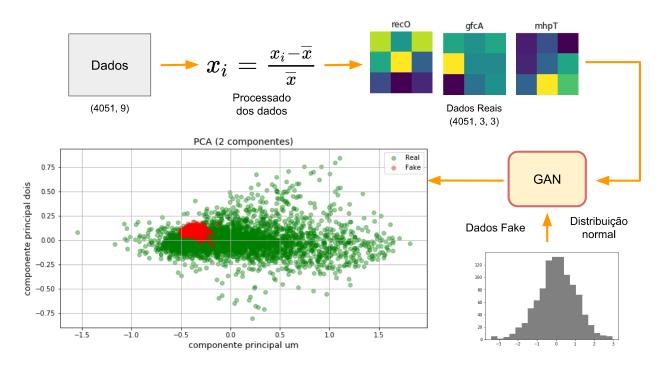


Figura 1. Metodología empregada.

A figura 2 mostra a arquitetura da rede geradora e também a arquitetura da rede discriminadora, se pode ver que a rede Geradora tem quatro camadas, as três primeiras com a função retificadora ReLu, a primeira camada tem 16 neurônios, a segunda camada tem 32 neurônios e assim até chegar a gerar assim uma saída de (*None*, 3, 3, 1), onde *None* é o número de exemplos gerados. Por outro lado, a rede Discriminadora, tem quatro camadas também, com as 2 primeiras camadas com a função retificadora ReLu, gerando assim uma saída com um só valor, se é real ou não.

Rede geradora

| | • | |
|---------------------------|-----------------|---------|
| Layer (type) | Output Shape | Param # |
| dense_9 (Dense) | (None, 16) | 1616 |
| leaky_re_lu_6 (LeakyReLU) | (None, 16) | 0 |
| dense_10 (Dense) | (None, 32) | 544 |
| leaky_re_lu_7 (LeakyReLU) | (None, 32) | Θ |
| dense_11 (Dense) | (None, 64) | 2112 |
| leaky_re_lu_8 (LeakyReLU) | (None, 64) | 0 |
| dense_12 (Dense) | (None, 9) | 585 |
| reshape_2 (Reshape) | (None, 3, 3, 1) | 0 |
| | | |

Total params: 4,857 Trainable params: 4,857 Non-trainable params: 0

Rede discriminadora

| Layer (type) | Output Shape | Param # |
|----------------------------|------------------|---------|
| dense_13 (Dense) | (None, 3, 3, 64) | 128 |
| leaky_re_lu_9 (LeakyReLU) | (None, 3, 3, 64) | 0 |
| dense_14 (Dense) | (None, 3, 3, 32) | 2080 |
| leaky_re_lu_10 (LeakyReLU) | (None, 3, 3, 32) | 0 |
| dense_15 (Dense) | (None, 3, 3, 16) | 528 |
| flatten_2 (Flatten) | (None, 144) | 0 |
| dense_16 (Dense) | (None, 1) | 145 |

Total params: 5,762 Trainable params: 2,881 Non-trainable params: 2,881

Figura 2. Arquitetura da rede.

Resultados:

A rede foi trenada com 300 *epochs* e com um *batch size* de 16 exemplos, ela levou 3.52 minutos de treinamento, a figura 3 mostra a perda da GAN, tanto do Gerador como do Discriminador por *epochs*, mostrando que a rede converge com uma perda de 0.69.

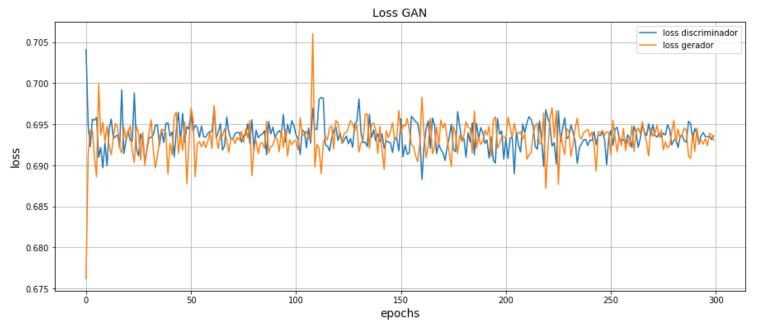


Figura 3. Perda da rede GAN.

Por último, são gerados genes *fake*, e através do PCA com 2 componentes é gerado o gráfico de distribuição para poder ver se a distribuição gerada pelo gerador é semelhante a os dados reais. A figura 4 mostra essa comparação.

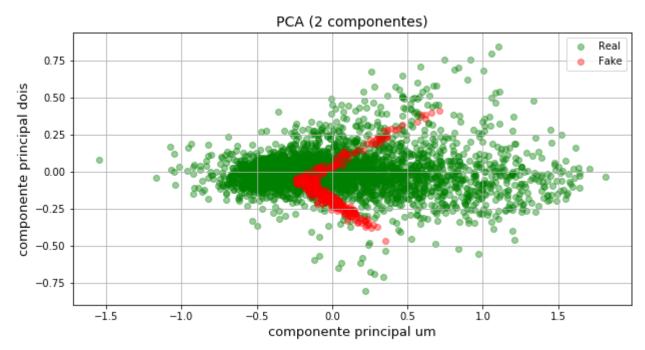


Figura 4. Comparação nas distribuições.