

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені Ігоря СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ
ІНСТИТУТ

Кафедра математичного моделювання та аналізу даних

«До захисту допущено»

В.о. завідувача кафедри

_____ Ганна ЯЙЛИМОВА

«___» _____ 2024 р.

Дипломна робота
на здобуття ступеня бакалавра

зі спеціальності: 113 Прикладна математика
на тему: «Порівняння багаточарового перцептронів та $(1 + \lambda)$ -
еволюційного алгоритму для задач класифікації»

Виконав: студент 4 курсу, групи ФІ-02
Харь Дмитро Федорович

Керівник: асистент кафедри ММАД Яворський О.А. _____

Рецензент: звання, степінь, посада Прізвище І.П. _____

Засвідчую, що у цій дипломній
роботі немає запозичень з праць
інших авторів без відповідних
посилань.

Студент _____

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені Ігоря СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ
ІНСТИТУТ

Кафедра математичного моделювання та аналізу даних

Рівень вищої освіти — перший (бакалаврський)
Спеціальність (освітня програма) — 113 Прикладна математика,
ОПП «Математичні методи моделювання, розпізнавання образів та
комп'ютерного зору»

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри

_____ Ганна ЯЙЛИМОВА

«__» _____ 2024 р.

ЗАВДАННЯ
на дипломну роботу

Студент: Харь Дмитро Федорович

1. Тема роботи: *«Порівняння багатошарового перцептронну та $(1 + \lambda)$ -еволюційного алгоритму для задач класифікації»*,

керівник: асистент кафедри ММАД Яворський О.А.,

затверджені наказом по університету №__ від «__» _____ 2024 р.

2. Термін подання студентом роботи: «__» _____ 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи:

4. Зміст роботи: *Порівняльний аналіз багатошарового перцептронну (англ. MLP, Multilayer Perceptron) з оптимізаційними алгоритмами в основі яких градієнтний спуск, MLP з оптимізаційним алгоритмом в основі якого одноточкова мутація та $(1 + \lambda)$ -еволюційного алгоритму з кодуванням генетичного програмування (англ. $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, $(1 + \lambda)$ -evolutionary algorithm with genetic programming encoding), на прикладі задач бінарної та мультикласової класифікації табличних даних та картинок.*

5. Перелік ілюстративного матеріалу: *«Презентація доповіді»*

6. Дата видачі завдання: 05 вересня 2023 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання дипломної роботи	Термін виконання	Примітка
1	Узгодження теми роботи із науковим керівником	листопад- грудень 2023 р.	Виконано
2	Огляд та опрацювання опублікованих джерел за тематикою дослідження	грудень 2023 р - лютий 2024 р.	Виконано
3	Написання програмного забезпечення та проведення дослідження	березень-квітень 2024 р.	Виконано
4	Оформлення та опис результатів	травень 2024 р.	Виконано
5	Написання та оформлення дипломної роботи	травень-червень 2024 р.	Виконано
6	Отримання рекомендації до захисту	08.06.2024	Виконано

Студент

_____ Харь Д.Ф.

Керівник

_____ Яворський О.А.

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота містить: 54 стор., 7 рисунків, 14 таблиць, 38 джерел.

У даній роботі розглядаються методи для вирішення задач класифікації, а саме: MLP, який використовує оптимізаційні алгоритми в основі яких градієнтний спуск, MLP, який використовує оптимізаційний алгоритм на основі одноточкової мутації та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding. Ці методи порівнювались на задачах бінарної та мультикласової класифікації табличних даних та картинок.

У ході дослідження було встановлено, що всі три методи здатні досягти однакових метрик у всіх задачах. Найшвидшу збіжність до цих метрик продемонстрував MLP з використанням градієнтного спуску. Тим не менш, $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding виділився завдяки здатності легко адаптуватись до умов задачі. Цей метод дозволяє обирати кількість нащадків і регулювати експресивність індивідів, що надає можливість зосередити пошук рішень у конкретних областях простору рішень. Такий підхід є особливо корисним, коли потрібно зосередитися на важливих регіонах пошуку для вдосконалення рішень.

МАШИННЕ НАВЧАННЯ, ЕВОЛЮЦІЙНІ АЛГОРИТМИ,
ГЕНЕТИЧНЕ ПРОГРАМУВАННЯ, МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ,
ЕКСПРЕСИВНІ КОДУВАННЯ

ABSTRACT

This work considers methods for solving classification problems, namely: MLP, which uses optimization algorithms based on gradient descent, MLP, which uses an optimization algorithm based on one-point mutation, and $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding. These methods were compared in the tasks of binary and multiclass classification of tabular data and pictures.

During the research, it was established that all three methods are able to achieve the same metrics in all tasks. The fastest convergence to these metrics was demonstrated by MLP using gradient descent. Nevertheless, $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding stood out due to its ability to easily adapt to the task conditions. This method allows you to choose the number of offsprings and regulate the expressiveness of individuals, which makes it possible to focus the search for solutions in specific areas of the solution space. This approach is particularly useful when focusing on important search regions to improve solutions.

MACHINE LEARNING, EVOLUTIONARY ALGORITHMS,
GENETIC PROGRAMMING, OPTIMIZATION METHODS, EXPRESSIVE
ENCODINGS

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень, скорочень і термінів	7
Вступ.....	9
1 Методи та підходи вирішення задач класифікації	11
1.1 Задача класифікації: визначення, види	11
1.2 Способи вирішення задачі класифікації.....	12
1.3 Метрики оцінки якості моделей та функції втрат, для задач класифікації	13
1.4 Процес навчання моделей для задач класифікації.....	16
1.5 Огляд суміжних робіт	19
Висновки до розділу 1.....	23
2 Аналіз інструментів для проведення дослідження	24
2.1 Використані інструменти та ресурси	24
2.2 Опис використаних наборів даних	25
2.3 Попередня обробка даних.....	27
Висновки до розділу 2.....	30
3 Побудова моделей та оцінка методів.....	31
3.1 Детальний опис моделей та підбір гіперпараметрів моделей	31
3.2 Навчання моделей та порівняльний аналіз результатів	34
Висновки до розділу 3.....	48
Висновки	50

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

ML — машинне навчання (англ. Machine Learning)

MLP — багатошаровий перцептрон (англ. Multilayer Perceptron)

EA — еволюційний алгоритм (англ. Evolutionary Algorithm)

GP — генетичне програмування (англ. Genetic Programming)

Adam — адаптивна оцінка моменту (англ. Adaptive Moment Estimation)

$(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding — еволюційний алгоритм, який може використовуватися для вирішення задач класифікації (англ. $(1 + \lambda)$ -Evolutionary Algorithm with Genetic Programming encodings).

MLP with gradient descent — багатошаровий перцептрон, який використовує метод на основі градієнтного спуску, в якості оптимізаційного алгоритму.

MLP with single-point mutation — багатошаровий перцептрон, який використовує одноточкову мутацію, в якості оптимізаційного алгоритму.

Фітнес-функція — це функція $F : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$, яка ставить у відповідність представлення рішення S на дійсне число f .

Індивід — I в еволюційних алгоритмах визначається як пара $I = (S, f)$, де S є представленням рішення в просторі рішень \mathcal{S} , природа S залежить від конкретної проблеми та може варіюватися в широких межах, від двійкових рядків, дійсних векторів, дерев до більш складних структур даних, f — це значення фітнес-функції, пов'язане з індивідом, кількісно оцінюючи якість індивіда як рішення цільової проблеми.

Популяція — P визначається як множина індивідів $P = \{I_1, I_2, \dots, I_N\}$, де кожен окремий I_i є варіантом вирішення розв'язуваної проблеми.

Кросинговер — C , є бінарною функцією, яка бере два індивіди з

популяції як вхідні дані та створює одного або більше нащадків, потенційно включаючи генетичний матеріал від обох батьків. Формально це можна виразити так: $C : (I_i, I_j) \rightarrow (I_{i'}, I_{j'})$, де I_i і I_j є батьківськими індивідами, кожен з яких містить представлення рішення та значення фітнес-функції, $I_{i'}$ і $I_{j'}$ є індивідами-нащадками, отриманими в результаті операції кросинговеру.

Мутація — це функція $M : I \rightarrow I'$, де I — оригінальний індивід, I' є мутованим індивідом з потенційно зміненим представленням рішення S' і відповідним новим значенням фітнес-функції f' , яка застосовує стохастичну модифікацію до індивіду, що потенційно призводить до появи нового варіанту рішення.

Контрольованість у контексті $(1 + \lambda)$ -еволюційного алгоритму з генетичним програмуванням — визначається як здатність алгоритму дозволяти користувачу точно регулювати його параметри (наприклад, кількість нащадків λ і стратегії мутації), щоб оптимізувати процес пошуку рішення та адаптувати його під специфічні умови задачі.

Precision — це метрика, яка визначає відношення кількості правильно класифікованих позитивних прикладів до загальної кількості прикладів, що були класифіковані як позитивні.

Recall — це метрика, яка визначає відношення кількості правильно класифікованих позитивних прикладів до загальної кількості справді позитивних прикладів.

F1-score — це гармонійне середнє між precision та recall.

Expressive Encodings — експресивне кодування.

ВСТУП

Актуальність дослідження. Використання класифікаційних задач має широкий спектр застосування в різних сферах наукових досліджень та практичних областях. Наприклад, важливо класифікувати, чи особа є носієм певного захворювання, спираючись на рентгенівські знімки або аналізи крові. Алгоритми, які вирішують задачі класифікації, дозволяють робити дешеві та швидкі попередні аналізи для того, щоб дізнатися чи є людина хворою. Існують різні підходи до вирішення задач класифікації, але вони часто мають низьку контрольованість. Тому є потреба у дослідженні алгоритмів, щоб перевірити, чи надають вони більшу гнучкість в контролюванні гіперпараметрів для більш детального пошуку по певним областям простору рішень та можливість краще адаптуватися до поточної задачі.

Метою дослідження є пошук оптимального методу вирішення задач бінарної та багатокласової класифікації табличних даних та зображень серед методів MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation, $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding.

Об'єктом дослідження є якісна поведінка MLP та $(1 + \lambda)$ -еволюційних алгоритмів для задачі бінарної та мультикласової класифікації.

Предметом дослідження є методи вирішення задач бінарної та багатокласової класифікації, зокрема точність, швидкість та збіжність цих методів для табличних даних та зображень на основі алгоритмів MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding.

Наукова новизна полягає в дослідженні та порівнянні алгоритмів MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation, $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding на прикладі задач бінарної та мультикласової класифікації.

Практичне значення результатів полягає в використанні

перелічених вище методів, для задачі класифікації, для покращення контрольованості і збереженню такої ж точності та швидкості, як і в класичних методах.

1 МЕТОДИ ТА ПІДХОДИ ВИРІШЕННЯ ЗАДАЧ КЛАСИФІКАЦІЇ

В даному розділі наведені основні теоретичні відомості про об'єкт дослідження та огляд суміжних робіт у даному напрямку досліджень.

1.1 Задача класифікації: визначення, види

Класифікація – це процес віднесення об'єкту до певного класу на основі його характеристик, серед заздалегідь встановленої множини класів. Класифікація може бути бінарною, багатокласовою, багатомітковою, ієрархічною та інші. Бінарна класифікація – це класифікація, при якій кожному об'єкту обирається клас з наперед визначеної множини класів, потужність якої дорівнює двом; багатокласова класифікація – це класифікація, коли кожному об'єкту обирається група з наперед визначеної множини груп в якій може знаходитися довільна кількість груп. В поточній роботі ми зосередимося на бінарній та багатокласовій класифікації.

Задача класифікації зустрічається в багатьох сферах, наприклад: медицина (діагностика раку на основі зображень МРТ), фінанси (класифікація позичальників як «надійних» чи «ризикованих» на основі їхньої кредитної історії), роздрібна торгівля (класифікація покупців за типами покупок для надання персоналізованих знижок), транспорт (розрізнення між легковими авто, вантажівками та мотоциклами на дорозі), освіта (ідентифікація студентів, яким потрібна додаткова допомога в певних предметах), безпека (класифікація електронних листів як «безпечні», «спам» або «фішинг»), біотехнології (розпізнавання мутацій, що спричиняють хвороби).

1.2 Способи вирішення задачі класифікації

Існує декілька способів для вирішення задачі класифікації: класичні статистичні методи (наприклад, логістична регресія [25]), алгоритми ML (наприклад, метод k -найближчих сусідів [9]), глибинне навчання (за допомогою нейронних мереж), а також задачу класифікації можна вирішувати за допомогою генетичних алгоритмів.

Обчислювальним об'єктом в глибинному навчанні є нейронна мережа. Існують різноманітні типи нейронних мереж, але ми будемо їх розглядати на прикладі MLP [28], оскільки саме його ми використовуємо для експериментів. MLP складається з шарів нейронів. Кожен нейрон в шарі, приймає вхідні дані з попереднього шару та обчислює вихідний сигнал, який передається наступному шару. Формально штучний нейрон можна описати наступним чином:

$$a = f \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b \right) \quad (1.1)$$

де x_1, x_2, \dots, x_n — вхідні сигнали до нейрону; w_1, w_2, \dots, w_n — ваги, що призначені для кожного вхідного сигналу; b — зміщення (англ. bias), що додається до суми зважених вхідних сигналів; f — активаційна функція, яка має наступні властивості: нелінійність, диференційовність, неперервність, монотонність.

В нейронній мережі може бути довільна кількість шарів та в кожному шарі може бути довільна кількість нейронів. Будь яка feed-forward нейронна мережа працює за наступним принципом: на вхід кожному нейрону в кожному шарі приходить сигнал з попереднього шару і кожний нейрон генерує вихід. На вхід першого шару мережі подаються безпосередньо дані. Загалом схема нейронної мережі може виглядати наступним чином (рисунок 1.1).

Далі розглянемо генетичні алгоритми для вирішення задач класифікації. Обчислювальним об'єктом в генетичних алгоритмах є

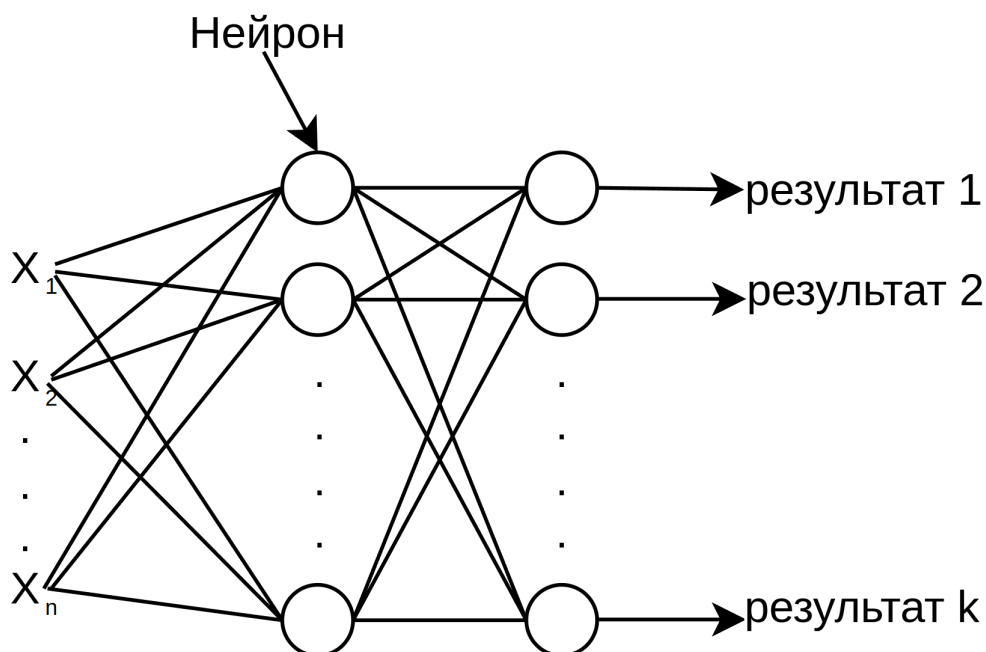


Рисунок 1.1 – Загальна архітектура повнозв’язної нейронної мережі

індивід (див. Перелік умовних позначень, скорочень і термінів). Індивід може бути представлений різними способами, але ми будемо розглядати представлення, яке найчастіше використовується в GP, а саме – дерево (приклад дерева – рисунок 1.2). В якості внутрішніх вузлів в дереві можуть бути функції будь якої арності, а в якості листків – ознаки (англ. features) вхідних даних, константи або змінні.

1.3 Метрики оцінки якості моделей та функції втрат, для задач класифікації

Існують різноманітні метрики для оцінювання якості моделі, наприклад точність (англ. accuracy) [21], precision [21], recall [29], f1-score [33]. Формально ці метрики можна записати наступним чином (таблиця 1.1).

Основна метрика, що використовується для загальної оцінки якості моделі, — це ассурасу. Ця метрика є найбільш інформативною, коли класи в даних розподілені рівномірно. Проте, в умовах сильного дисбалансу класів

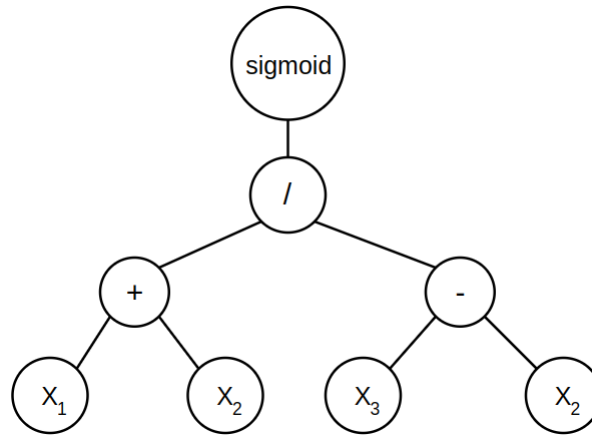


Рисунок 1.2 – Представлення індивіду у вигляді дерева, який отримує на вхід три ознаки: X_1 , X_2 , X_3 та обраховує наступну функцію, яка залежить від цих ознак - $sigmoid\left(\frac{X_1+X_2}{X_3-X_2}\right)$, де $sigmoid(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$

Метрика	Формула
Accuracy	$\frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$
Precision	$\frac{TP}{TP+FP}$
Recall	$\frac{TP}{TP+FN}$
F1-Score	$2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$

Таблиця 1.1 – Формули основних метрик якості класифікаційних моделей

ассурасу може давати неправильну оцінку ефективності моделі, оскільки вона не враховує важливість того, як саме модель помиляється. Тобто, вона не розрізняє помилки типу false positive та false negative.

Наприклад, якщо в датасеті всього 100 прикладів, 90 з яких мають клас 1, а інші — клас 0, то в такому випадку, якщо наша модель зробить передбачення для всіх прикладів — 1, то метрика ассурасу буде дорівнювати 0.9, тобто мати доволі високе значення. Але, насправді, модель взагалі не може передбачити клас 0. Це є критичним в діагностиці хвороб, де випадків з хворобами менше, але дуже важливо передбачити всі з них. Для прикладу, якщо людина хвора раком, то така модель буде завжди передбачувати, що людина не має раку (false negative помилка),

через це людина може пізно звернутися до лікаря для лікування цього. Метрика accuracy не враховує, чи є помилки false positive або false negative, що може призводити до серйозних наслідків у критично важливих застосуваннях.

Precision краще використовувати, коли важливіше знизити кількість помилково позитивних результатів. Наприклад, у медичних тестах або в системах, де вартість помилки дуже висока.

Recall є ключовою метрикою, коли важливо виявити всі можливі позитивні випадки. Це критично для ситуацій, де пропуск позитивних результатів може мати серйозні наслідки, наприклад, в системах раннього виявлення захворювань.

F1-score використовується для оцінки балансу між precision та recall. Ця метрика особливо корисна, коли потрібно врахувати обидві ці характеристики одночасно, наприклад, у контексті інформаційного пошуку та класифікації текстів, де немає явної переваги між помилково позитивними та помилково негативними результатами.

Вибір метрики для конкретної задачі залежить від самої задачі, але гарною практикою є розрахунок одразу декількох метрик, для того, щоб бачити повну картину.

Функції втрат використовуються під час навчання моделей, щоб оптимізувати параметри моделі з метою мінімізації різниці між прогнозованими результатами та дійсними даними. Такі функції кількісно оцінюють помилки моделі та на основі значень такої функції оновлюються параметри моделі. Функцій втрат також існує велика кількість, але ми наведемо приклад двох функцій, одна з яких використовується для бінарної класифікації – бінарна крос-ентропія [31], а інша для багатокласової класифікації – крос-ентропія [20]. Бінарна крос-ентропія та крос-ентропія виражаються наступними формулами:

$$\text{binary cross entropy loss} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i \log(p_i) + (1 - y_i) \log(1 - p_i)) \quad (1.2)$$

$$\text{cross entropy loss} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M y_{ij} \log(p_{ij}) \quad (1.3)$$

де N – кількість спостережень у наборі даних, M – кількість можливих класів, y_i – фактична мітка класу для i -го спостереження, y_{ij} – бінарний індикатор, який показує чи належить i -те спостереження до класу j , p_i – прогнозована ймовірність, що спостереження i належить до класу з міткою 1, p_{ij} – прогнозована ймовірність, що i -те спостереження належить до класу j , \log – натуральний логарифм.

1.4 Процес навчання моделей для задач класифікації

В цьому підрозділі ми розглянемо, як відбувається процес навчання MLP та генетичного алгоритму.

Почнемо розгляд з процесу навчання MLP. Останній шар в нейронній мережі розраховує вихідний сигнал. У випадку бінарної класифікації це буде одне значення для кожного вхідного прикладу з даних, яке буде відображати ймовірність того, що поточний приклад належить до класу 1. У випадку багатокласової класифікації, для кожного вхідного прикладу будуть розраховуватись n – значень, де n – це кількість можливих класів. Ці значення будуть відображати ймовірність того, що поточний приклад належить до класу i . Після того, як були розраховані ймовірності належності прикладів до класу/класів, використовуючи значення цих ймовірностей розраховуються функції втрат за формулами 1.2, 1.3 для бінарної та багатокласової класифікації відповідно. Наступний крок є ключовим у навчанні MLP – зворотне поширення помилки. Зворотне поширення помилки полягає в обчисленні градієнтів функції втрат по відношенню до кожного вагового коефіцієнту в мережі, використовуючи правило ланцюгового диференціювання. Обчислені градієнти використовуються для оновлення ваг у напрямку, що зменшує помилку (зазвичай за допомогою методу градієнтного спуску,

або його варіантів, наприклад, Adam [16]). Описаний вище процес повторюється ітеративно певну кількість разів, або поки не буде виконана умова завершення.

Тепер розглянемо процес навчання генетичного алгоритму. Першим кроком ініціалізується популяція (див. Перелік умовних позначень, скорочень і термінів) індивідів. Ініціалізація індивідів може відбуватися як повністю випадковим чином, так і з наперед заданими конкретними структурами індивідів. Для кожного індивіду в популяції розраховується фітнес-функція (див. Перелік умовних позначень, скорочень і термінів), яка вимірює як добре індивід вирішує поставлену задачу. Для задач бінарної та багатокласової класифікації в якості фітнес функції використовуються формули 1.2 та 1.3, в цьому випадку, чим менше буде значення фітнес-функцій тим краще індивід буде пристосований до поточної задачі. Після того, як для кожного індивіду були розраховані фітнес-функції, за допомогою методу відбору обираються індивіди, які будуть брати участь у створенні наступного покоління. Існує багато методів відбору, ось декілька прикладів: рулетковий відбір [17], турнірний відбір [7] (випадковим чином обирається групка індивідів з усієї популяції і з цієї групки для репродукції обирається той індивід у якого найкраща фітнес функція), стабільний відбір (англ. Steady State Selection) [6]. Далі для генерації наступного покоління, до відібраних індивідів застосовується операція кросинговеру (див. Перелік умовних позначень, скорочень і термінів). Обрані індивіди розбиваються на пари і обмінюються частинами своїх хромосом для створення нових індивідів. Цей процес є стохастичним, тобто які саме частини хромосом будуть обмінюватись визначається випадковим чином. До поширених методів кросинговеру відносяться одноточковий кросинговер [27] та багатоточковий кросинговер [35]. При одноточковому кросинговері геноми обох батьків розділяються в одній випадково обраній точці, а потім їх сегменти обмінюються місцями. Багатоточковий кросинговер включає декілька таких точок, що дозволяє формувати потомство з ще більшою

генетичною різноманітністю. Після кросинговеру, гени нових індивідів можуть випадково змінюватись з певною, зазвичай низькою, ймовірністю – цей процес називається мутацією (див. Перелік умовних позначень, скорочень і термінів) (приклад застосування оператора мутації: рисунок 1.3). Мутація має двосторонній вплив: з одного боку, вона запобігає стагнації популяції у локальному оптимумі, вносячи нові варіації в генетичний матеріал; з іншого боку, занадто різка мутація може призвести до втрати досягнутого оптимуму. Створенні індивіди заміщують деяких, або всіх індивідів в поточній популяції, в залежності від методу відбору. Описаний вище процес повторюється певну кількість поколінь, або поки не буде досягнуто задовільне значення фітнес-функції.

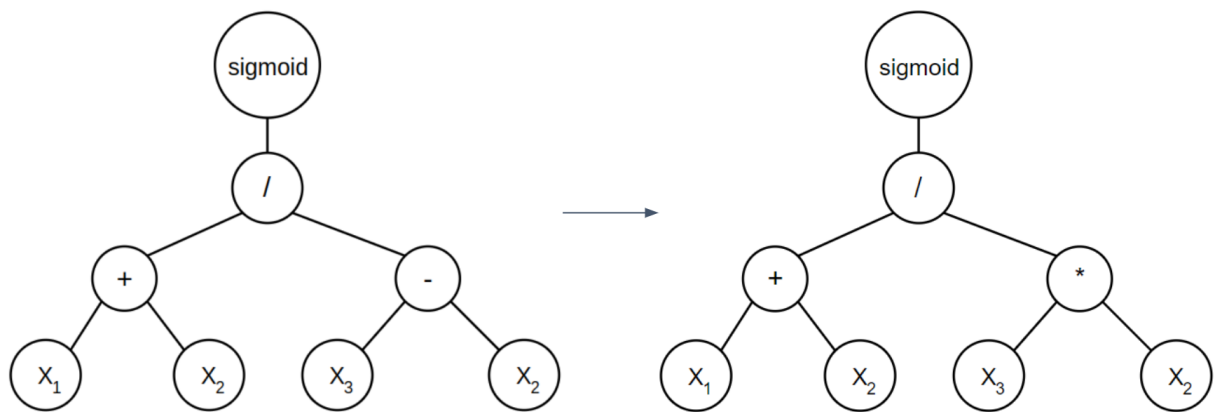


Рисунок 1.3 – Застосування оператора мутації до індивіда, який представлений у вигляді дерева

Важливим кроком під час навчання моделей є розділення даних на тренувальну та тестувальну вибірки. Тренувальна вибірка використовується для оновлення ваг моделі, у випадку MLP, та генерацію нових поколінь, у випадку генетичного алгоритму. Градієнти, у випадку MLP, розраховуються використовуючи значення функції втрат, яка була отримана в результаті роботи MLP, який отримав на вході тренувальну вибірку. Фітнес-функції для індивідів, у випадку генетичного алгоритму, також розраховуються використовуючи тільки тренувальну вибірку. Тестувальна вибірка використовується для оцінки якості моделі під час

навчання, для того, щоб можна було відслідковувати в який момент почнеться перенавчання (англ. overfit) і використовувати ті параметри моделі, які вона мала до початку перенавчання, це значно покращить узагальнювальну здатність моделей. Важливо зазначити, що тестувальна вибірка ніяким чином не впливає на оновлення параметрів моделей.

1.5 Огляд суміжних робіт

Як вже було описано в розділі 1.2 існують наступні методи вирішення задач класифікації: класичні статистичні методи, методи ML, методи глибинного навчання та генетичні алгоритми.

Статистичні методи добре підходять в тих випадках, коли нам важлива інтерпретованість результатів. Прикладом такого методу може бути логістична регресія. Логістична регресія – це статистичний метод, який використовується для задачі бінарної класифікації. Метод базується на логістичній функції, яка оцінює ймовірності приналежності спостережень до однієї з двох категорій. Основною перевагою логістичної регресії є її здатність працювати з даними, де таргетна змінна обмежена інтервалом $[0,1]$, через що цей метод є ідеальним для задач бінарної класифікації. Крім того, модель легко інтерпретувати, оскільки коефіцієнти моделі можуть бути представлені у вигляді шансів (англ. odds ratios). Застосування логістичної регресії виявилось ефективним у багатьох областях, включаючи медицину для діагностики захворювань, в банківській справі для оцінки кредитного ризику, а також в соціальних науках для аналізу виборчих перегонів.

Однією з найважливіших областей застосування статистичних методів у медицині є прогнозування серцево-судинних захворювань. Логістична регресія часто використовується для аналізу ймовірності розвитку цих захворювань на основі різних ризикових факторів, таких як вік, кров'яний тиск, холестерин, куріння, сімейний анамнез та інші. В роботі Hosmer і Lemeshow [13], метод логістичної регресії було застосовано

для визначення ймовірності настання серцевих нападів у пацієнтів на основі їхнього медичного анамнезу. Модель включала незалежні змінні, які були вибрані на основі клінічного досвіду та попередніх досліджень. Кожен з цих факторів був оцінений на його зв'язок з ризиком розвитку хвороби, і коефіцієнти моделі були інтерпретовані через шансові співвідношення, що дозволило медичним працівникам краще розуміти ризики. Зокрема, було встановлено, що високий кров'яний тиск та високий рівень холестерину значно підвищують шанси на розвиток серцевих захворювань, в той час як регулярні фізичні вправи та здоровий раціон харчування зменшують ці шанси. Ці висновки допомогли лікарям сформулювати профілактичні рекомендації та лікувальні стратегії для пацієнтів з підвищеним ризиком серцевих захворювань. Такий підхід підкреслює значення логістичної регресії не тільки як аналітичного інструменту, але й як засобу для підтримки клінічних рішень у медицині.

Методи ML, такі як k -найближчих сусідів (англ. k -Nearest Neighbors, knn), залишаються одними з найпопулярніших через їхню простоту та ефективність у багатьох випадках. У статті Guo і співавторів [10] досліджено модифікований підхід до методу knn, який використовується для класифікації даних у складних застосуваннях, таких як веб-майнінг. У цій статті автори фокусуються на застосуванні цього методу для класифікації великих наборів даних, де традиційні методи knn часто зазнають труднощів через велику обчислювальну складність і залежність від вибору оптимального значення параметра k . Автори пропонують новий метод – kNNModel [10], який автоматизує вибір k і використовує передбачувальну модель для підвищення ефективності класифікації. Цей підхід передбачає попереднє моделювання даних за допомогою визначення представників кожної класифікаційної категорії на основі тренувального набору даних. Представники, визначені методом, є центрами кластерів, що представляють групи схожих за характеристиками екземплярів. Свій підхід автори тестують на даних з репозиторію UCI [14] (University of

California Irvine). Використовуючи kNNModel, автори провели експерименти, які показали значне покращення в точності класифікації в порівнянні зі стандартним методом knn, особливо в умовах, де потрібно ефективно обробляти великі обсяги даних. Одним з ключових результатів експерименту є те, що застосування моделі kNNModel дозволило значно скоротити час обчислень, необхідний для класифікації нових екземплярів, завдяки використанню попередньо підготовлених представників замість повторного обчислення відстаней до всіх точок даних.

Дослідження Soliman та Abd-elaziem [34] розглядає використання MLP для спеціалізованої задачі класифікації зірок за їхніми спектральними характеристиками. MLP, варіант нейронної мережі, який добре підходить для пошуку нелінійних залежностей в даних, як-от аналіз астрофізичних даних, де потрібно розпізнавати складні взаємозв'язки між характеристиками. У цьому дослідженні використовувались дані з понад 100,000 спостережень, кожне з яких містить 18 ознак, таких як інтенсивність на різних довжинах хвиль. Ці особливості були використані для тренування MLP з метою класифікації об'єктів на галактики та зорі. MLP, яке було застосоване в дослідженні, містило кілька прихованих шарів, що дозволяло моделі ефективно вивчити складні патерни у даних. Ефективність класифікації, яку продемонструвала модель, склала 97%. Такий високий показник точності підкреслює здатність MLP ефективно обробляти великі обсяги складних даних та виділяти критично важливі особливості для розпізнавання патернів. Для оптимізації процесу тренування та досягнення максимальної точності було протестовано декілька оптимізаторів, серед яких Adagrad [5] показав найкращі результати з найвищою валідаційною точністю. Ці результати не тільки демонструють потенціал MLP для вирішення астрофізичних задач класифікації, але й вказують на можливість його застосування в інших сферах, де потрібне швидке та ефективне рішення аналогічних задач. Завдяки такому дослідженню, можливо підвищити ефективність використання астрономічних даних та

покращити розуміння структури та еволюції космосу.

Існує теорема Цибенка, яка стверджує наступне: Штучна нейронна мережа прямого зв'язку (англ. feed-forward neural network) може апроксимувати будь-яку неперервну функцію багатьох змінних з будь-якою точністю. Однак на практиці це часто не так. Іноді збіжності до бажаних метрик надто довго чекати, а іноді якість даних не дозволяє до них зійтися. Але з іншої сторони існують також інші універсальні апроксиматори – генетичні алгоритми. Тому у далі ми розглянемо вплив експресивних кодувань на ефективність генетичних алгоритмів.

Основою для даного аналізу є стаття «Simple Genetic Operators are Universal Approximators of Probability Distributions (and other Advantages of Expressive Encodings)» авторів Elliot Meyerson, Xin Qiu та Risto Miikkulainen [22], яка досліджує можливості генетичних алгоритмів завдяки їхнім expressive encodings (за формальним означенням можна звернутися до [22, Definition 1, стор. 3]). В цій статті описуються переваги використання expressive encodings у ЕА. Головна ідея полягає в тому, що такі encodings дозволяють ЕА ефективно знаходити рішення у складних середовищах, дозволяючи простим генетичним операторам [22, підрозділ 2.2.3, стор. 3] апроксимувати будь-який розподіл ймовірностей фенотипів потомства [22, розділ 2.1, стор. 2]. До переваг expressive encodings також відносяться: прискорення конвергенції, тобто такі encodings можуть забезпечити надекспоненційне прискорення конвергенції, а також зменшення потреби в ручному налаштуванні, завдяки expressive encodings немає потреби у складному ручному налаштуванні операторів для кожної окремої задачі. В даній статті наводяться теореми 4.2 [22, Theorem 4.2] та 4.4 [22, Theorem 4.4], в яких йдеться про те, що GP є expressive encodings для одноточкової мутації та що MLP з сигмоїдною функцією активації також є expressive encodings для одноточкової мутації. Автори статті розглядають алгоритм $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding (псевдокод алгоритму можна знайти [22, Appendix B, стор. 12]) для вирішення проблем DFC [22, Problem 1, стор. 6], RFC [22, Problem 2, стор. 7] та LBAP [22, Problem 3,

стор. 7]. Саме цим дослідженням ми надихнулись та порівняли методи MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для задач бінарної та багатокласової класифікації табличних даних та зображень.

Висновки до розділу 1

У цьому розділі ми розглянули задачі бінарної та багатокласової класифікації, їх типи та методи вирішення. Ми описали класичні статистичні методи, алгоритми машинного навчання, глибоке навчання та генетичні алгоритми.

Ми дослідили метрики оцінювання якості моделей: accuracy, precision, recall, f1-score та функції втрат: бінарна крос-ентропія, крос-ентропія, які використовуються для оптимізації моделей.

Проаналізували процес навчання моделей, включаючи розділення даних на тренувальну та тестувальну вибірки, градієнтний спуск для MLP та еволюційні методи для генетичних алгоритмів.

Провели огляд суміжних робіт: логістична регресія для прогнозування серцево-судинних захворювань, метод k-найближчих сусідів для класифікації веб-даних та MLP для класифікації астрономічних об'єктів.

Підкреслили важливість інтерпретованості моделей та баланс між точністю та зрозумілістю результатів у критичних сферах. Звернули увагу на вплив експресивних кодувань на ефективність генетичних алгоритмів.

2 АНАЛІЗ ІНСТРУМЕНТІВ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ДОСЛІДЖЕННЯ

В даному розділі наведено огляд основних інструментів та методів аналізу та попередньої обробки даних, також ми зазначимо використані інструменти та ресурси для моделювання.

2.1 Використані інструменти та ресурси

Проаналізувавши різноманітні сервіси, які надають доступ до даних, в якості вебресурсу з даними ми використовуємо вебсайт <https://www.kaggle.com/datasets>. Kaggle – це платформа для змагань з ML, яка також надає великий каталог відкритих наборів даних для різноманітних задач, включаючи класифікацію, регресію та кластеризацію. Набори даних на kaggle часто добре документовані та попередньо оброблені, що дозволяє швидко приступити до експериментів.

В якості мови програмування для вирішення задач ML було вибрано Python v3.11 [37] завдяки його ефективності та гнучкості. Основними бібліотеками для створення моделей стали Dear v1.4 [8] та scikit-learn v1.4 [24].

Dear — це спеціалізована бібліотека для ЕА, що включає інструменти для генетичних алгоритмів, еволюційних стратегій та інших ЕА методів. Вона надає інтерфейс для налаштування та запуску еволюційних експериментів, дозволяє маніпулювати популяціями, здійснювати відбір, кросинговер та мутації, і підтримує паралельні обчислення. В цьому дослідженні використовується $(1 + \lambda)$ -ЕА with GP encoding, з турнірним відбором та одноточковою мутацією. Буде проведено аналіз впливу гіперпараметрів, таких як значення λ та глибина дерева, на якість рішень та швидкість конвергенції алгоритму.

Scikit-learn — це популярна бібліотека для ML, яка надає інструменти для класифікації, регресії, кластеризації, зниження розмірності та попередньої обробки даних. Вона забезпечує уніфікований інтерфейс для побудови та оцінки моделей ML. В даному дослідженні scikit-learn буде використовуватись для підготовки даних, вибору ознак, побудови та оцінки моделей класифікації, зокрема з використанням алгоритму MLP. Оцінка результатів класифікації здійснюватиметься за метриками accuracy, precision, recall та f1-score.

Також були використані бібліотеки pandas [36] для обробки даних, optuna [1] для оптимізації гіперпараметрів моделей, та torch [23] з torchvision [19] для обробки зображень і створення ембедінгів.

Для доступу до даних обрано вебсайт <https://www.kaggle.com/datasets>, що надає великий каталог відкритих наборів даних, добре документованих та попередньо оброблених, що дозволяє швидко приступити до експериментів.

2.2 Опис використаних наборів даних

В даній роботі використовувалися наступні набори даних:

- Pima Indians Diabetes Database [26] – це набір даних, який використовується для задач бінарної класифікації табличних даних в області біомедичних досліджень. Цей датасет був зібраний Національним інститутом діабету, шлункових і ниркових захворювань США. Набір даних містить інформацію про жінок з племені Піма, що проживають в Арізоні, та включає показники здоров'я, які можуть впливати на розвиток діабету. Датасет складається з 768 зразків, кожен з яких має 8 вхідних ознак і два вихідних класи, які вказують на наявність або відсутність діабету. Всі ознаки числові, що дозволяє легко використовувати їх у ML. Датасет складається з наступних ознак: Pregnancies – кількість вагітностей у жінки; Glucose – рівень глюкози у плазмі крові через 2 години після навантажувального тесту; Blood

Pressure – діастолічний артеріальний тиск; Skin Thickness – товщина шкірної складки трицепса; Insulin – рівень інсуліну у сироватці крові; BMI – індекс маси тіла; Diabetes Pedigree Function – функція родооводу діабету (враховує генетичну спадковість); Age – вік пацієнта; цільова змінна: Outcome – наявність діабету (0 - відсутній, 1 - наявний). Цей датасет має збалансовані класи.

– Human Activity Recognition with Smartphones [3] – це набір даних, який використовується для задач багатокласової класифікації табличних даних в області розпізнавання людської діяльності. Цей датасет був зібраний за допомогою вбудованих акселерометрів та гіроскопів смартфонів, що носили на поясі 30 учасників. Дані записувалися під час виконання різних фізичних активностей, включаючи ходьбу, підйом та спуск по сходах, сидіння, стояння та лежання. Датасет складається з 10 299 зразків, кожен з яких має 562 вхідні ознаки, що представляють різні статистичні та перетворені значення з сигналів акселерометра і гіроскопа, такі як середнє значення, стандартне відхилення, максимальні та мінімальні значення, а також частотні перетворення. Всі ознаки числові. Датасет складається з наступних ознак: Body Acceleration – лінійне прискорення тіла в осях X, Y та Z; Total Acceleration – загальне прискорення тіла в осях X, Y та Z; Body Gyroscope – кутова швидкість тіла в осях X, Y та Z; Jerk Signals – похідні лінійного прискорення та кутової швидкості; Magnitude of these three-dimensional signals – величина сигналів прискорення та гіроскопа; Frequency domain features – перетворені у частотну область сигнали за допомогою швидкого перетворення Фур'є; цільова змінна: Activity – тип фізичної активності, виконуваної учасником (наприклад, walking, walking upstairs, walking downstairs, sitting, standing, laying). Цей датасет є збалансованим і добре підходить для задач класифікації, оскільки містить різноманітні фізичні активності.

– Chest X-Ray Images (Pneumonia) [15] – це набір даних, який використовується для задач бінарної та багатокласової класифікації

зображень у медичних дослідженнях. Цей датасет містить рентгенівські знімки грудної клітки пацієнтів з пневмонією (вірусною або бактеріальною) та без неї. Дані були зібрані для сприяння розвитку моделей ML, здатних автоматично виявляти пневмонію на рентгенівських знімках. Датасет складається з 5 840 зображень, які розділені на дві категорії: Train та Test. Кожна категорія містить зображення, позначені як «Pneumonia» або «Normal», або якщо розглядати задачу, як багатокласову класифікацію, то «Pneumonia» розділяється на «Virus» та «Bacteria». Цей датасет надає великі можливості для досліджень у сфері медичної діагностики за допомогою глибинного навчання, дозволяючи розробляти моделі, які можуть автоматично ідентифікувати захворювання на основі рентгенівських знімків.

Ці три набори даних представляють різноманітні задачі класифікації, включаючи бінарну класифікацію табличних даних, багатокласову класифікацію табличних даних, бінарну класифікацію зображень та багатокласову класифікацію зображень. Це дозволяє комплексно оцінити ефективність методів і моделей у різних доменах застосування ML.

2.3 Попередня обробка даних

Як вже зазначалося в даній роботі використовується три набори даних, а саме: Pima Indians Diabetes Database, Human Activity Recognition with Smartphones та Chest X-Ray Images (Pneumonia). Для кожного набору даних була застосована своя попередня обробка. Далі ми наведемо, які методи обробки були застосовані до кожного набору.

Почнемо розгляд з Pima Indians Diabetes Database. Першим кроком попередньої обробки була заміна нульових значень, які зустрічаються у деяких ознаках (Pregnancies, Glucose, BloodPressure, SkinThickness, Insulin, BMI, DiabetesPedigreeFunction, Age) на відсутні значення (nan). Це дозволяє уникнути впливу невірних даних на подальший аналіз. Далі,

для кожної ознаки, у якій були відсутні значення, було обчислено медіанні значення для груп з позитивним та негативним результатом по діабету (Outcome). Відсутні значення заповнювалися відповідно до медіанної величини для відповідної групи.

Після цього було проведено обробку змінної Insulin для видалення викидів. Викиди визначалися за допомогою методу Interquartile Range Technique [11]. Наступним кроком було виявлення та видалення викидів за допомогою методу Local Outlier Factor [4]. Цей метод використовує локальну щільність сусідів для визначення аномалій. Після розрахунку негативного фактору аномалії для кожного зразка, було визначено порогове значення, і видалено ті зразки, які мали значення нижче цього порогу.

Після видалення аномалій дані були розділені на ознаки та мітки. Вибірки було поділено на тренувальний та тестовий набори даних у пропорції 80:20. Потім, для тренувального та тестового наборів даних було проведено стандартизацію ознак шляхом видалення середнього значення та масштабування до одиничної дисперсії. В результаті ми отримали оброблений датасет, який будемо використовувати для порівняння моделей для задачі бінарної класифікації табличних даних.

Наступну попередню обробку опишемо для набору даних Human Activity Recognition with Smartphones. Для цього набору даних було застосовано наступні методи попередньої обробки. По-перше, дані було розділено на тренувальну та тестову вибірки, кожна з яких містила відповідні дані для тренування та тестування моделей. Після завантаження датасетів для тренування та тестування, було застосовано LabelEncoder для кодування міток активностей (Activity) у числовий формат. Наступним кроком було розділення даних на ознаки та мітки для тренувальних і тестових вибірок. Далі було проведено випадкове перемішування тренувальних та тестових даних для уникнення впливу можливого порядку даних на результати навчання моделей. Для покращення роботи моделей було проведено стандартизацію ознак

шляхом видалення середнього значення та масштабування до одиничної дисперсії. Цей процес дозволяє моделі краще адаптуватися до даних, які мають різний масштаб. В результаті попередньої обробки ми отримали стандартизовані та перемішані тренувальні та тестові набори даних, готові до подальшого використання у моделюванні.

Нарешті, розглянемо попередню обробку даних для набору даних Chest X-Ray Images (Pneumonia). Для цього набору даних було застосовано наступні методи попередньої обробки. По-перше, дані були завантажені та організовані у вигляді класів, де кожне зображення має відповідну мітку (0 – нормальний, 1 – бактеріальна пневмонія, 2 – вірусна пневмонія). Як зазначалося ми використали цей датасет для бінарної та багатокласової класифікації, для бінарної, відповідно, класи бактеріальна та вірусна пневмонії були об'єднані в один клас – пневмонія, а для багатокласової використовувалися класи нормальний, бактеріальна пневмонія та вірусна пневмонія.

Зображення були перетворені до розміру 224x224 пікселів і конвертовані в градації сірого для уніфікації формату. Для екстракції ознак було використано попередньо натреновану модель ResNet-50 [12] без останнього повнозв'язного шару. Модель була завантажена зі збережених ваг (які ми самі натренували використовуючи цей же набір даних) та використана для отримання векторів ознак зображень. Далі, для обробки отриманих векторів ознак, було застосовано стандартизацію ознак шляхом видалення середнього значення та масштабування до одиничної дисперсії. Для зменшення розмірності та збереження 99% варіативності даних було застосовано метод Principal Component Analysis [18]. В результаті ми отримали оброблені вектори ознак, готові до подальшого використання у моделюванні.

Висновки до розділу 2

У цьому розділі проаналізовано інструменти та методи обробки даних. Джерелом даних був Kaggle. Використано Python 3.11 з бібліотеками Dear 1.4 для еволюційних алгоритмів і scikit-learn 1.4 для машинного навчання.

Для набору даних Pima Indians Diabetes Database проведено заміну нульових значень, заповнення відсутніх медіанними величинами, видалення викидів і стандартизацію ознак.

Для Human Activity Recognition with Smartphones виконано кодування міток активностей, перемішування даних і стандартизацію ознак.

Для Chest X-Ray Images (Pneumonia) змінено розмір зображень, конвертовано в градації сірого, використано модель ResNet-50 для екстракції ознак, стандартизацію та зменшення розмірності.

Додамо, що усі методи тренувалися на комп'ютері, який має наступні обчислювальні ресурси: процесор – AMD Ryzen 5 3600 6-Core Processor, оперативна пам'ять – 32GB DDR4.

3 ПОБУДОВА МОДЕЛЕЙ ТА ОЦІНКА МЕТОДІВ

У цьому розділі описано налаштування гіперпараметрів моделей MLP та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, а також порівняння їхньої ефективності на основі метрик accuracy, precision, recall та f1-score. Моделі перевірялися на різних наборах даних для задач бінарної та багатокласової класифікації.

3.1 Детальний опис моделей та підбір гіперпараметрів моделей

Як вже було зазначено в даній роботі ми сфокусувалися на тестуванні моделей MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encodings. Принцип тренування MLP with gradient descent ми описали в розділі 1.4, тому в цьому розділі ми опишемо детально процес навчання моделей MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding.

MLP with single-point mutation використовує оптимізаційний алгоритм, який працює наступним чином: на кожній епосі випадковим чином обирається значення однієї ваги з усієї нейронної мережі – w_{ij} та до нього додається значення випадкової величини, яка має нормальний розподіл з нульовим математичним сподіванням та певним значенням дисперсії. Після цього розраховується функція втрат з оновленими вагами, якщо її значення стало менше, ніж було з початковими вагами на поточній епосі, то ваги зберігаються і процес переходить на наступну епоху, якщо функція втрат збільшилася, то повертаються ваги, які були до додавання значення випадкової величини і відбувається перехід на наступну епоху. Цей процес повторюється задану кількість епох. У вигляді псевдокоду це можна записати як:

Algorithm 3.1 MLP with single-point mutation

```

1: Вибір випадкового вагового коефіцієнта:  $w_{ij}$ 
2:  $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 
3:  $w_{ij} \leftarrow w_{ij} + \epsilon$ 
4: if  $loss_{new} < loss_{old}$  then
5:    $w_{ij} \leftarrow w_{ij}$ 
6: else
7:    $w_{ij} \leftarrow w_{ij} - \epsilon$ 
8: end if

```

Метод $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding описується наступним чином. Першим кроком ініціалізується індивід, в нашому випадку індивідом є дерево у якого в якості внутрішніх вузлів – функції, які мають арність 2, а в якості листків – ознаки датасету або константи з набору: $1, 0, -1, e, \pi$. Для цього індивіду розраховується фітнес-функція. Після того, як була розрахована фітнес-функція для створеного індивіду, він мутує λ разів, таким чином ми отримуємо λ нових індивідів. Мутація в даному випадку відбувається наступним чином: випадково обирається один вузол з усього індивіду і його значення замінюється на якесь інше випадкове, валідне значення (у випадку внутрішніх вузлів – значення замінюється на якусь іншу функцію, а у випадку листків на якусь іншу ознаку, або константу). Після цього ми розраховуємо фітнес-функції для усіх новостворених індивідів і обираємо індивід, який має найменше значення фітнес-функції. Цей індивід далі виступає в ролі батька на наступних ітераціях. У вигляді псевдокоду це можна представити як:

Algorithm 3.2 $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding

```

1:  $x_0 \leftarrow$  випадковий початковий генотип
2: while не виконано do
3:   for  $i \in 1, \dots, \lambda$  do
4:      $x_i \leftarrow$  мутація( $x_0$ )
5:   end for
6:   for  $i \in 1, \dots, \lambda$  do
7:     if  $f(x_i) < f(x_0)$  then
8:        $x_0 \leftarrow x_i$ 
9:     end if
10:  end for
11: end while

```

Тепер після того, як ми описали, як в нашому випадку працюють алгоритми, перейдемо до процесу підбору оптимальних гіперпараметрів.

Процес вибору гіперпараметрів є важливим кроком в тренуванні моделей, оскільки від них значно залежить швидкість конвергенції та якість моделей. Тому в цій частині ми опишемо, процес за яким відбувається підбір гіперпараметрів для різних задач та моделей, а також які саме гіперпараметри виявилися оптимальними і які ми використовуємо.

Почнемо розгляд з задач класифікації та моделі MLP with gradient descent. Для підбору гіперпараметрів для цієї моделі ми використовували бібліотеку optuna, яка дозволяє проводити байєсівську оптимізацію [32]. Для цього ми задали простір гіперпараметрів по якому проводився пошук оптимальних з них за 1000 ітерацій. Оптимальні гіперпараметри для кожної задачі можна подивитися у таблиці 3.1.

Гіперпараметри	Задачі			
	Бінарна класифікація табличних даних	Бінарна класифікація зображень	Багатокласова класифікація табличних даних	Багатокласова класифікація зображень
hidden_layer_sizes	(10, 15, 10)	(15, 20, 15)	(10, 10)	(10, 10)
activation	tanh	tanh	logistic	tanh
solver	sgd	sgd	sgd	sgd
alpha	0.0009	0.0054	0.0001	0.0001
learning_rate_init	0.004	0.002	0.008	0.001
learning_rate	adaptive	invscaling	adaptive	invscaling
batch_size	32	256	64	128
tol	0.00002	0.00033	0.00023	0.00003

Таблиця 3.1 – Оптимальні гіперпараметри для моделі MLP with gradient descent

Для пошуку оптимальних гіперпараметрів моделі MLP with single-point mutation також було застосовану байєсівську оптимізацію за 1000 ітерацій. В результаті ми отримали оптимальні гіперпараметри, які можна подивитися у таблиці 3.2.

Останньою моделлю для якої ми шукали оптимальні параметри є $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding. Процес пошуку такий же самий як і для вище наведених моделей. Відповідні результати наводяться у таблиці 3.3.

Гіперпараметри	Задачі			
	Бінарна класифікація табличних даних	Бінарна класифікація зображень	Багатокласова класифікація табличних даних	Багатокласова класифікація зображень
hidden_layer_sizes	(10, 15, 20, 15, 10)	(15, 20, 15)	()	(10, 10)
scale_for_mutation	0.5	0.1	0.1	0.1

Таблиця 3.2 – Оптимальні гіперпараметри для моделі MLP with single-point mutation

Гіперпараметри	Задачі			
	Бінарна класифікація табличних даних	Бінарна класифікація зображень	Багатокласова класифікація табличних даних	Багатокласова класифікація зображень
tree_depth	3	6	6	8
λ	3	5	3	5

Таблиця 3.3 – Оптимальні гіперпараметри для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding

Таким чином після того, як ми отримали оптимальні гіперпараметри для усіх моделей можна переходити до процесу тренування та аналізу результатів.

3.2 Навчання моделей та порівняльний аналіз результатів

Для тренування моделей ми використовуємо функції 1.2 та 1.3 в якості функцій втрат для MLP та фітнес-функцій для $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для бінарної та багатокласової класифікацій відповідно. Таким чином наші моделі вчать мінімізувати ці функції, оскільки чим менше значення цих функцій тим більш правильний результат ми отримуємо на виході моделі. Справді, підставивши в ці функції значення $y_i = 1$ та ймовірність $p_i = 1$, отримаємо: $1 \log(1) + (1 - 1) \log(1 - 1) = 0$. Це відповідає випадку, коли справжня мітка для поточного прикладу дорівнює 1, і модель на виході дає ймовірність 1, що поточний приклад належить до класу 1. Аналогічно, якщо підставити значення $y_i = 0$ та

ймовірність $p_i = 0$, отримаємо: $0 \log(0) + (1 - 0) \log(1 - 0) = 0$. Це відповідає випадку, коли справжня мітка для поточного прикладу дорівнює 0, і модель на виході дає ймовірність 0, що поточний приклад належить до класу 1. Для функції втрат для багатокласової класифікації подібна підстановка тільки з кількістю класів більше 2 також покаже, що функція втрат буде дорівнювати 0. Ці приклади показують, що якщо модель правильно передбачила результат для прикладу, то значення функції втрат дорівнює 0.

Для оцінки якості моделей ми використовували метрики зазначені в таблиці 1.1. Ми розібрали підбір оптимальних метрик для різних моделей у розділі 1.3. Зазначимо, як видно з формул цих метрик чим ближче кожна з них до 1, тим якісніша модель. У випадку асигасу, якщо доданок у знаменнику, а саме $FP + FN$, дорівнює 0, це означає, що наша модель не дає жодного неправильного передбачення. У такому випадку чисельник і знаменник будуть рівними, а значення асигасу буде дорівнювати 1. Для метрик precision та recall, якщо доданки у знаменнику, а саме FP та FN , дорівнюють 0, це означає, що наша модель не дає жодного неправильного результату. Тоді чисельники і знаменники відповідних формул будуть рівними між собою, а значення метрик precision та recall будуть дорівнювати 1. Щодо останньої метрики, f1-score, підставимо в формулу $2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$ найкращі показники для precision та recall, а саме 1 та 1. Отримаємо $2 \times \frac{1 \times 1}{1 + 1}$. Таким чином, значення метрики f1-score буде також дорівнювати 1.

Володіючи детальною інформацією про метрики та функції втрат перейдемо до тренування моделей. Почнемо розгляд з задачі бінарної класифікації табличних даних, як вже зазначалося в розділі 2.2 для цього ми використовували датасет Pima Indians Diabetes Database. Оптимальні гіперпараметри для усіх трьох моделей наведені у попередньому розділі. Зазначимо, що MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding тренувалися протягом 150, 6000 та 50 епох відповідно. Після тренування ми отримали результати для моделі MLP

with gradient descent, які наведені у таблиці 3.4, для моделі MLP with single-point mutation – у таблиці 3.5, для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding – у таблиці 3.6. Результуючі метрики на найкращій ітерації для усіх трьох моделей показані в таблиці 3.7. Графіки зміни функцій втрат для кожної моделі наведені на рисунку 3.1

№	t	L_{train}	L_{test}
50	0.2210	0.3327	0.3624
100	0.4406	0.2843	0.3302
134	0.5883	0.2627	0.3236
150	0.6578	0.2552	0.3244

Таблиця 3.4 – Результати моделі MLP with gradient descent для задачі бінарної класифікації табличних даних. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

№	t	L_{train}	L_{test}
1000	1.6075	0.6145	0.6068
2000	3.1348	0.4003	0.3845
3000	4.6372	0.3476	0.3700
4000	6.1426	0.3096	0.3476
5000	7.6502	0.2899	0.3331
5377	8.2214	0.2805	0.3203
6000	9.1574	0.2712	0.3370

Таблиця 3.5 – Результати моделі MLP with single-point mutation для задачі бінарної класифікації табличних даних. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

Як видно з цих даних, усі три моделі можуть досягти приблизно однакових метрик, найкращі результати моделі MLP with gradient descent,

№	t	L_{train}	L_{test}
10	0.1342	0.5605	0.5855
20	0.2827	0.4760	0.4793
30	0.4323	0.4660	0.4867
40	0.5820	0.4493	0.4671
44	0.6418	0.4056	0.4131
50	0.7326	0.4056	0.4131

Таблиця 3.6 – Результати моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для задачі бінарної класифікації табличних даних. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

	MLP with gradient descent	MLP with single-point mutation	$(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding
Accuracy	0.8421	0.8618	0.8882
Precision	0.7121	0.8000	0.8148
Recall	0.9038	0.7843	0.8627
F1-score	0.7966	0.7921	0.8381

Таблиця 3.7 – Метрики на найкращій ітерації кожної моделі для задачі бінарної класифікації табличних даних

MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding мали після 134, 5377 та 44 епох відповідно, але якщо говорити в термінах часу, то на цих даних найкраще себе показали моделі MLP with gradient descent та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, час роботи, яких склав 0.5883 та 0.6418 секунд відповідно, в той час, як алгоритму MLP with single-point mutation знадобилось значно більше часу, щоб зійтися до таких же метрик – 8.2214 секунд.

Проаналізувавши графіки б та в рисунку 3.1 можна помітити, що функції втрат в певні моменти виходять на плато, з цього можна зробити висновок, що при поточній реалізації моделі MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding мають недолік через який вони застрягають надовго в одній точці. Таким чином, для того, щоб це

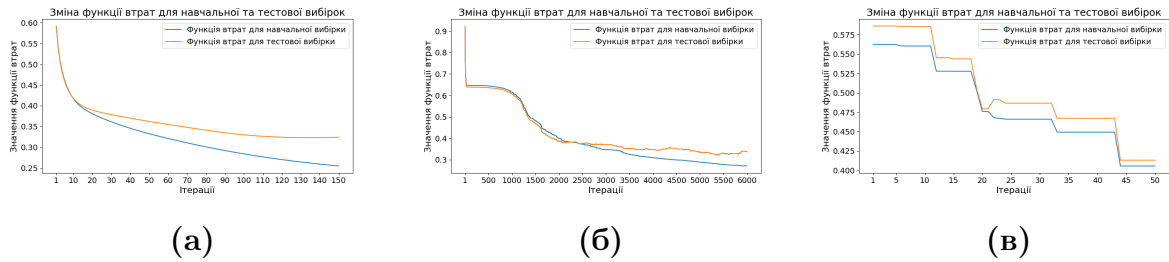


Рисунок 3.1 – Графіки залежності функцій втрат від кількості ітерацій для методів: (а) MLP with gradient descent, (б) MLP with single-point mutation, (в) $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, для задачі бінарної класифікації табличних даних

покращити потрібно додати прискорення. Для моделі MLP with single-point mutation прискорення може бути у вигляді збільшення значення дисперсії, при умові, що функція втрат довго не змінюється, або на кожній ітерації замість того, щоб додавати певне випадкове значення з нормального розподілу до значення вагів одного нейрону, потрібно додавати його до ваг декількох нейронів. Для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding застрягання в певній точці можна позбутися шляхом збільшення значення λ . Як тільки функція втрат не змінюється певну кількість ітерацій, то збільшується значення λ , через що буде відбуватися більш широкий пошук по простору рішень.

Тепер перейдемо до задачі бінарної класифікації зображень. Як ми вже згадували у розділі 2.2 для цього ми використовували датасет Chest X-Ray Images (Pneumonia). Оптимальні гіперпараметри для усіх трьох моделей наведені у попередньому розділі. Зазначимо, що моделі тренувалися протягом 80, 6000 та 5000 епох відповідно. Після тренування ми отримали результати для моделі MLP with gradient descent, які можна подивитися в таблиці 3.8, для моделі MLP with single-point mutation – у таблиці 3.9, для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding – у таблиці 3.10. Результуючі метрики на найкращій ітерації для усіх трьох моделей знаходяться в таблиці 3.11. Графіки зміни функцій втрат для кожної моделі показані на рисунку 3.2.

№	t	L_{train}	L_{test}
20	0.4934	0.1398	0.1529
40	0.9766	0.1280	0.1480
60	1.4950	0.1203	0.1466
69	1.7166	0.1175	0.1462
80	1.9720	0.1143	0.1465

Таблиця 3.8 – Результати моделі MLP with gradient descent для задачі бінарної класифікації зображень. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

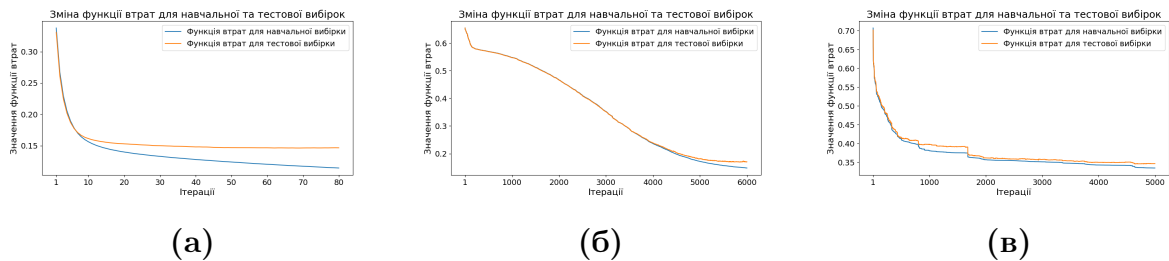


Рисунок 3.2 – Графіки залежності функцій втрат від кількості ітерацій для методів: (а) MLP with gradient descent, (б) MLP with single-point mutation, (в) $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, для задачі бінарної класифікації зображень

З цих результатів можна бачити, що усі три моделі досягають приблизно однакових метрик. Найкращі результати моделі MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding мали після 69, 5855 та 4645 епох відповідно, але якщо проаналізувати часову складову результатів, то видно, що модель MLP with gradient descent має доволі гарні результати, а саме найкращий показник функції втрат на тестовій вибірці до якого модель зійшлась за 1.7166 секунду, в той час, як моделі MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding зійшлись до приблизно таких же показників за значно більший час, а саме 46.5702 та 3452.8294 секунд відповідно.

№	t	L_{train}	L_{test}
1000	7.9608	0.5482	0.5476
2000	16.1285	0.4668	0.4662
3000	24.144	0.3523	0.3514
4000	32.0257	0.2365	0.2388
5000	39.8537	0.1721	0.1810
5855	46.5702	0.1506	0.1696
6000	47.7299	0.1480	0.1703

Таблиця 3.9 – Результати моделі MLP with single-point mutation для задачі бінарної класифікації зображень. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

На графіках б та в рисунку 3.2 також можна помітити, що є певні плато в які моделі ненадовго потрапляли, таким чином це ще раз підтверджує необхідність модифікації цих алгоритмів, оскільки наразі вони мають цей недолік.

Розглянемо задачу багатокласової класифікації табличних даних. Як вже згадувалося, для цього ми використовували датасет Human Activity Recognition with Smartphones. Оптимальні гіперпараметри для усіх трьох моделей наведені у попередньому розділі. Моделі тренувалися протягом 100, 40000 та 15000 епох відповідно.

Результати для моделі MLP with gradient descent показують, що після 100 епох вона досягла оптимальних значень метрик, за 5.6244 секунд. Для моделі MLP with single-point mutation оптимальні значення були досягнуті після 30355 епох за 301.4574 секунду. Модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding досягла найкращих результатів після 13151 епох за 98058.2898 секунди. Результуючі метрики на найкращій ітерації для усіх трьох моделей представлені в таблиці 3.12. Графіки зміни функцій втрат для кожної моделі представлені на рисунку 3.3.

З цих результатів можна бачити, що моделі MLP with gradient descent та MLP with single-point mutation показали трохи кращі

№	t	L_{train}	L_{test}
1000	741.6011	0.3804	0.3976
2000	1486.1856	0.3565	0.3615
3000	2231.7867	0.3510	0.3575
4000	2976.1662	0.3426	0.3495
4645	3452.8294	0.3367	0.3452
5000	3716.5586	0.3346	0.3465

Таблиця 3.10 – Результати моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для задачі бінарної класифікації зображень. № – номер епохи, t – час тренування (секунди), L_{train} – функція втрат на тренувальному наборі даних, L_{test} – функція втрат на тестовому наборі даних

	MLP with gradient descent	MLP with single-point mutation	$(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding
Accuracy	0.9582	0.9539	0.9312
Precision	0.9681	0.9665	0.9622
Recall	0.9754	0.9709	0.9432
F1-score	0.9716	0.9687	0.9526

Таблиця 3.11 – Метрики на найкращій ітерації кожної моделі для задачі бінарної класифікації зображень

результати за $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, але метод $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding виділився легкістю контролювання, оскільки для покращення його метрик нам потрібно просто збільшити експресивність кодувань, а саме збільшити значення гіперпараметрів `tree_depth`, або λ , в той час, щоб покращити значення метрик методів MLP with gradient descent та MLP with single-point mutation нам потрібно робити оптимізацію гіперпараметрів, у першому випадку нам потрібно буде підбирати параметри, які наведені у таблиці 3.1, а для другого випадку потрібно буде підбирати значення гіперпараметрів з таблиці 3.2. Якщо проаналізувати часову складову результатів, то видно, що модель MLP with gradient descent має значно кращі результати, ніж два інші методи, в той час, як модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding має значно більший час

	MLP with gradient descent	MLP with single-point mutation	$(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding
Accuracy	0.9389	0.9532	0.8992
Precision	0.9409	0.9540	0.9024
Recall	0.9363	0.9520	0.8964
F1-score	0.9386	0.9530	0.8994

Таблиця 3.12 – Метрики на найкращій ітерації кожної моделі для задачі багатокласової класифікації табличних даних

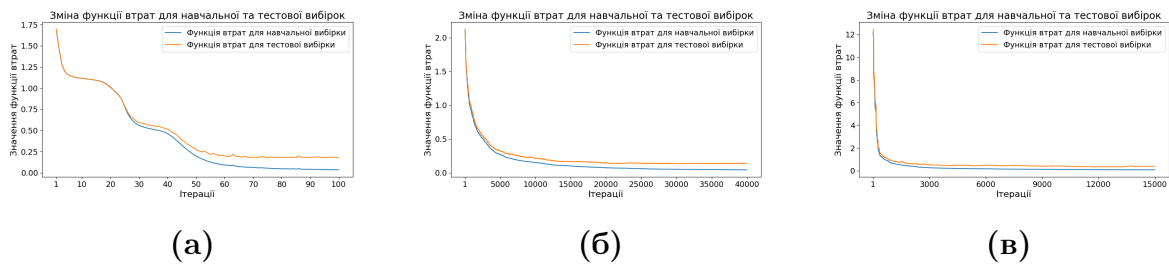


Рисунок 3.3 – Графіки залежності функцій втрат від кількості ітерацій для методів: (а) MLP with gradient descent, (б) MLP with single-point mutation, (в) $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, для задачі багатокласової класифікації табличних даних

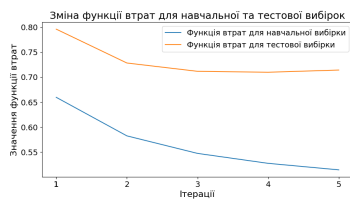
тренування, а саме 98058.2898 секунди.

Перейдемо до останньої задачі для якої ми робили порівняння моделей – багатокласової класифікації зображень з використанням датасету Chest X-Ray Images (Pneumonia). Зазначимо, що моделі тренувалися протягом 4, 4000 та 3000 епох відповідно.

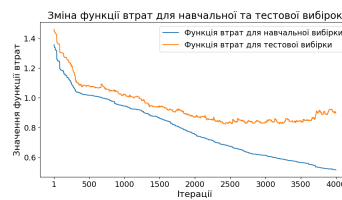
Результати для моделі MLP with gradient descent показують, що після 4 епох вона досягла оптимальних значень метрик, за 0.1965 секунди. Для моделі MLP with single-point mutation оптимальні значення були досягнуті після 3198 епох за 19.0337 секунду. Модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding досягла найкращих результатів після 2382 епохи за 43179.4566 секунди. Результуючі метрики на найкращій ітерації для усіх трьох моделей представлені в таблиці 3.13. Графіки зміни функцій втрат для кожної моделі представлені на рисунку 3.4.

	MLP with gradient descent	MLP with single-point mutation	$(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding
Accuracy	0.7420	0.7356	0.6955
Precision	0.7705	0.7677	0.7195
Recall	0.7037	0.6936	0.6634
F1-score	0.7356	0.7288	0.6903

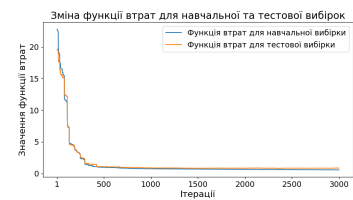
Таблиця 3.13 – Метрики на найкращій ітерації кожної моделі для задачі багатокласової класифікації зображень



(а)



(б)



(в)

Рисунок 3.4 – Графіки залежності функцій втрат від кількості ітерацій для методів: (а) MLP with gradient descent, (б) MLP with single-point mutation, (в) $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, для задачі багатокласової класифікації зображень

З цих результатів можна бачити, що усі три моделі досягають приблизно однакових метрик. Проаналізувавши часову складову результатів видно, що модель MLP with gradient descent має доволі гарні результати, а саме найкращий показник функції втрат на тестовій вибірці до якого модель зійшлась за 0.1965 секунд, в той час, як моделі MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding зійшлись до приблизно таких же показників за значно більший час, а саме 19.0337 та 43179.4566 секунд відповідно.

Провівши експерименти для чотирьох різних задач можна зробити висновок, що усі три методи можуть досягти однаково високих показників, або порівнюваних, але в кожного з методів є свої сильні та слабкі сторони.

Модель MLP with gradient descent має швидкий час збіжності до точки оптимуму в порівнянні з іншими двома методами, але при цьому

таку модель важко контролювати. Оскільки, якщо модель демонструє погані метрики, то ми не можемо точно сказати, як це покращити, чи збільшувати, наприклад, параметр `learning_rate`, чи ні, оскільки через його збільшення модель може перескочити оптимальну точку, а через зменшення, навпаки дуже довго збігатися до неї, тому для того, щоб отримати гарні результати, потрібно проводити оптимізацію гіперпараметрів. Але в той же час, як ми бачили на прикладі класифікації зображень, якщо функція втрат доволі гладка і якщо початкова ініціалізація ваг достатньо вдала, то метод на основі градієнтного спуску доволі швидко збігається до точки оптимуму, це відбувається тому, що в цьому методі оптимізація параметрів моделі (а саме ваг та `bias`) відбувається в усіх напрямках, тобто за одну ітерацію значення кожного з параметрів зміщується в оптимальну сторону, на відміну від методу MLP with single-point mutation, під час якого за одну ітерацію змінюються значення тільки одних ваг, через це модель просто спускається до точки оптимуму одразу по усім осям. Таким чином, можна зробити висновок, що якщо для поточної задачі важлива швидкість навчання моделі, то MLP with gradient descent є гарним вибором, однак, якщо нам важливо мати контроль над моделлю, то краще обрати іншу модель.

Як видно з експериментів модель MLP with single-point mutation більш повільно збігається до точки оптимуму, ніж MLP with gradient descent, але в той же час не надто повільно. Але вона має перевагу в термінах контролювання, ця модель має значно менше гіперпараметрів для оптимізації, всього два: `hidden_layer_sizes` та `scale_for_mutation`. Хоча все одно важко сказати, як саме потрібно змінювати значення цих гіперпараметрів, якщо модель демонструє незадовільний результат, але за рахунок того, що гіперпараметрів значно менше, ніж у моделі MLP with gradient descent, зменшується простір пошуку гіперпараметрів, таким чином ми можемо за n кількість ітерацій пройти більше в глибину і підібрати кращі значення цих параметрів, ніж ми могли б це зробити з

такою ж кількістю ітерацій, але для моделі MLP with gradient descent. Але як вже було зазначено, за одну ітерацію модель потенційно змінює тільки одне значення ваг, при чому це значення може виявитися гіршим, ніж те значення, яке було до цього, через що нове значення не прийметься, тобто за одну ітерацію значення взагалі в результаті може не змінитися, саме через це ця модель може значно довше збігатися до точки оптимуму.

Останньою розглянемо модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding. Як видно з експериментів, а саме з результатів для задач класифікації зображень та задачі багатокласової класифікації табличних даних, модель на цих даних демонструє дуже погані результати в термінах часу. Це відбувається з кількох причин:

- Для задач багатокласової класифікації проблема в тому, що цей алгоритм погано масштабується по відношенню до кількості класів, оскільки для того, щоб отримати передбачення ймовірностей для кількості класів більшу за 2, потрібно, щоб модель на виході давала відповідну кількість чисел, а для цього потрібно використовувати одне дерево на кожний клас. У такому випадку наш індивід складається з декількох дерев, які передбачають ймовірності належності вхідного прикладу до відповідних класів. Кожне з цих дерев повинно бути такої ж глибини, як і у випадку бінарної класифікації. В задачі бінарної класифікації одне дерево відповідає за передбачення ймовірності належності вхідного прикладу до класу 1. Це означає, що ми використовуємо ціле дерево для моделювання залежностей для передбачення одного класу. Під час тренування такого алгоритму ми використовували наступний підхід – на кожній ітерації випадковим чином обирався вузол дерева і значення в ньому замінювалося на якесь інше випадково обране значення, тобто за одну ітерацію дерево вчиться робити кращі передбачення тіяк можна бачитиськи для одного класу, що також значно сповільнює даний алгоритм. Також, чим більший розмір даних (кількість ознак або кількість прикладів), тим довше триває навчання. Це

твердження стосується як алгоритмів MLP with gradient descent, так і MLP with single-point mutation. Але якщо для реалізації алгоритму MLP with gradient descent ми використовували популярну бібліотеку scikit-learn, яка покращувалася багато років ком'юніті та командою розробників, то для реалізації $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding ми скористалися бібліотекою Dear. Ця бібліотека є найпопулярнішою для реалізації генетичних алгоритмів. Однак, оскільки генетичні алгоритми в цілому менш популярні серед ком'юніті порівняно з нейронними мережами, до покращення цієї бібліотеки було докладено значно менше зусиль і часу. Тому під час виконання цього алгоритму частина часу витрачається через можливі неоптимальні рішення в цій бібліотеці.

— Для задачі бінарної класифікації алгоритм досить повільно навчається через те, що деякі методи в бібліотеці, за допомогою якої ми реалізовували алгоритм $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding, гірше оптимізовані для випадку, коли на вході дається велика кількість даних (велика кількість ознак або спостережень).

Але незважаючи на те, що ця модель на великій кількості даних, або для задач багатокласової класифікації може навчатися велику кількість часу, ця модель має свої плюси. По перше, якщо набір даних невеликого розміру та задача – бінарна класифікація, то як ми бачимо в таблиці 3.7 цей алгоритм може показувати такі ж гарні результати в плані метрик, як і MLP.

По-друге, навіть якщо ми маємо великий обсяг даних або перед нами стоїть задача багатокласової класифікації, ми все одно можемо використовувати цей алгоритм. Це можливо, оскільки алгоритм легко контролювати. Якщо він показує погані результати при поточній конфігурації, нам точно відомо, як покращити результати. Для покращення результатів потрібно додати більше експресивності до кодувань. Це можна зробити, збільшивши глибину дерева, що дозволить алгоритму вивчати більш складні залежності в даних та моделювати більш глибокі функції.

Або ж можна збільшити значення параметру λ , що призведе до генерації більшої кількості різноманітних нащадків на кожній ітерації. Це сприятиме більш глибокому пошуку по ознакам в даних. Також можна збільшити обидва параметри одночасно. Однак варто звернути увагу, що збільшення цих параметрів призведе до більшого часу тренування. Збільшення глибини дерева потребує обрахування більшої кількості функцій, а збільшення значення параметру λ вимагає проганяння усіх даних через більшу кількість дерев.

Додатково цей алгоритм має ще одну перевагу, а саме, якщо нам точно відомо, що в наших даних якісь ознаки мають залежність у вигляді певної функції, наприклад додавання, то ми можемо зафіксувати цю відому структуру в дереві і не змінювати її під час навчання, таким чином ми врахуємо цю залежність і вивчимо усі інші залежності між ознаками.

Також до переваг цього алгоритму можна віднести його інтерпретованість для даних низької розмірності. Якщо дані мають невелику кількість ознак, ми можемо навчити цей алгоритм з задовільною швидкістю. Оскільки алгоритм моделює функціональну залежність між різними ознаками, ми отримаємо невелике дерево. Це тому, що для невеликої кількості ознак вистачить дерева з малою глибиною, щоб врахувати усі залежності між ознаками. Таке дерево буде доволі легко інтерпретувати.

Підсумовуючи, даний алгоритм добре підходить для задач де важливо мати контрольованість над процесом навчання, для прикладу, в задачах де наперед відомо про певні залежності в даних, а саме в аналізі медичних даних, де ми можемо знати якісь патофізіологічні залежності, а також, якщо ми маємо дані малої розмірності і при цьому нам важливо бути спроможним інтерпретувати результат роботи алгоритму.

Висновки до розділу 3

У цьому розділі проведено експерименти для порівняння ефективності моделей MLP with gradient descent, MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для задач бінарної та багатокласової класифікації на різних наборах даних. Гіперпараметри налаштовувалися за допомогою байєсівської оптимізації. В ході експериментів було показано наступне.

Для задачі бінарної класифікації табличних даних усі моделі досягли однакових метрик, а саме f1-score для моделі MLP with gradient descent = 0.7966, для моделі MLP with single-point mutation = 0.7921, для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding = 0.8381. Але в термінах часу MLP with gradient descent та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding показали значно кращі результати за MLP with single-point mutation. Модель MLP with gradient descent виявилася на 92.844% швидше за MLP with single-point mutation, а модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding на 92.194%.

Для задачі бінарної класифікації зображень усі моделі показали співставні результати, а саме f1-score для моделі MLP with gradient descent = 0.9716, для моделі MLP with single-point mutation = 0.9687, для моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding = 0.9526. Але в термінах часу значно виграє модель MLP with gradient descent, яка тренувалася на 96.314% швидше за MLP with single-point mutation та на 99.950% швидше за $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding.

Також варто зазначити, що для задач бінарної класифікації на графіках функцій втрат моделей MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding видно, що при поточній реалізації моделі мають недолік, а саме вони в певні моменти виходять на плато. Таким чином для того, щоб це змінити варто додати прискорення, як тільки функція втрат довго не змінюється, або змінюється повільно.

Для задач багатокласової класифікації табличних даних та

картинок також усі моделі досягли однакових результатів: для табличних даних f1-score моделі MLP with gradient descent = 0.9386, моделі MLP with single-point mutation = 0.9530, моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding = 0.8994; для зображень f1-score моделі MLP with gradient descent = 0.7356, моделі MLP with single-point mutation = 0.7288, моделі $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding = 0.6903. Але знову видно, що в термінах часу MLP with gradient descent значно виграє. Він виявився на 98.134% швидше за MLP with single-point mutation та на 99.994% швидше за $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для табличних даних та на 98.968% швидше за MLP with single-point mutation та на 99.999% швидше за $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding для зображень.

У підсумку можна сказати, що MLP with gradient descent працює швидше за інші моделі і при цьому має такі ж метрики, як і інші моделі, але з іншої сторони його важче контролювати та він є менш інтерпретованим. MLP with single-point mutation має кращу контрольованість, але повільніше збігається до точки оптимуму. $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding має найкращу контрольованість та інтерпретованість, але значно повільніше навчається.

ВИСНОВКИ

У ході даної роботи ми розглянули теоретичні відомості про задачі класифікації, а саме бінарну та багатокласову класифікацію, а також різні методи їх вирішення. Нами було розглянуто класичні статистичні методи, методи машинного навчання, методи глибинного навчання та генетичні алгоритми, зокрема алгоритм $(1 + \lambda)$ -EA with GP encodings, для вирішення задач класифікації. Додатково ми розглянули детально процес навчання моделей класифікації та метрики, які використовуються для оцінювання ефективності таких методів.

Також ми розглянули процес попередньої обробки даних, пошуку оптимальних гіперпараметрів для якого ми використали байєсівську оптимізацію та провели експерименти, які продемонстрували переваги та недоліки кожного з розглянутих методів.

Було встановлено, що для задач, де найважливішим показником є швидкість навчання, краще використовувати MLP with gradient descent, оскільки він в середньому виявився на 97.835% швидше за модель MLP with single-point mutation та на 99.994% швидше за модель $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding. Якщо ж нам важливі контрольованість та інтерпретованість моделі, особливо при роботі з даними малої розмірності, найкращим вибором буде $(1 + \lambda)$ -EA with GP encodings, але ця модель потребує значно більшого часу для тренування, в середньому ця модель тренувалась 9.8 годин.

Якщо ми хочемо збільшити контрольованість і при цьому не витрачати багато часу на тренування, то краще використати алгоритм MLP with single-point mutation, який в середньому тренувався 1.6 хвилину.

Також хочемо окреслити напрямки можливих майбутніх досліджень: необхідно дослідити можливість додання до операції мутації операцію кросинговеру; необхідно дослідити можливість створення

мутації під час якої структура дерева не буде фіксованою і будуть змінюватись тільки значення вузлів, а структура дерева буде ініціалізуватися спочатку і під час мутації буде обиратися піддерево та замінюватися на інше піддерево згенероване випадковим чином; необхідно додати прискорення, як тільки моделі MLP with single-point mutation та $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding виходять на плато, що може значно покращити швидкість навчання та якість моделі. Також варто спробувати приділити певний час для оптимізації бібліотеки Dear, або ж повністю з нуля реалізувати алгоритм $(1 + \lambda)$ -EA with GP encodings, що також потенційно може значно покращити час навчання цієї моделі.

Додатково, як було зазначено, що $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding дозволяє фіксувати піддерево для збереження відомих залежностей під час навчання, а отже, за аналогією до фізично-інформованих нейронних мереж (англ. PINNs), вказуючи на можливість широкого використання даного підходу. Тому варто порівняти методи $(1 + \lambda)$ -EA with GP encoding та PINNs.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Takuya Akiba та ін. “Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework”. В: *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. 2019.
- [2] N.Sarav anaN та V.Gaya thri. “Performance and Classification Evaluation of J48 Algorithm and Kendall’s Based J48 Algorithm (KNJ48)”. В: *International Journal of Computer Trends and Technology* 59 (2018), с. 73—80. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:69700602>.
- [3] Davide Anguita та ін. “A Public Domain Dataset for Human Activity Recognition Using Smartphones”. В: *21st European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning, ESANN 2013*. Bruges, Belgium, квіт. 2013. URL: <https://www.kaggle.com/datasets/uciml/human-activity-recognition-with-smartphones/data>.
- [4] Markus Breunig та ін. “LOF: Identifying Density-Based Local Outliers.” В: т. 29. Черв. 2000, с. 93—104. DOI: 10.1145/342009.335388.
- [5] John Duchi, Elad Hazan та Yoram Singer. “Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization”. В: *Journal of Machine Learning Research* 12.61 (2011), с. 2121—2159. URL: <http://jmlr.org/papers/v12/duchi11a.html>.
- [6] Juan Durillo та ін. “On the Effect of the Steady-State Selection Scheme in Multi-Objective Genetic Algorithms”. В: т. 5467. Квіт. 2009, с. 183—197. ISBN: 978-3-642-01019-4. DOI: 10.1007/978-3-642-01020-0_18.
- [7] Yongsheng Fang та Jun li. “A Review of Tournament Selection in Genetic Programming”. В: жовт. 2010, с. 181—192. ISBN: 978-3-642-16492-7. DOI: 10.1007/978-3-642-16493-4_19.
- [8] Félix-Antoine Fortin та ін. “DEAP: Evolutionary Algorithms Made Easy”. В: *Journal of Machine Learning Research* 13 (лип. 2012), с. 2171—2175.
- [9] Gongde Guo та ін. “KNN Model-Based Approach in Classification”. В: *On The Move to Meaningful Internet Systems 2003: CoopIS, DOA, and ODBASE*. За ред. Robert Meersman, Zahir Tari та Douglas C. Schmidt. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003, с. 986—996.
- [10] Gongde Guo та ін. “KNN Model-Based Approach in Classification”. В: (серп. 2004).
- [11] Vinutha H P, B. Poornima та B. Sagar. “Detection of Outliers Using Interquartile Range Technique from Intrusion Dataset”. В: січ. 2018, с. 511—518. ISBN: 978-981-10-7562-9. DOI: 10.1007/978-981-10-7563-6_53.
- [12] Kaiming He та ін. “Deep residual learning for image recognition”. В: *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*. 2016, с. 770—778.

- [13] D.W. Hosmer та S. Lemeshow. *Applied Logistic Regression*. Applied Logistic Regression. Wiley, 2004. ISBN: 9780471654025. URL: <https://books.google.com.ua/books?id=Po0RLQ7USIMC>.
- [14] Markelle Kelly, Rachel Longjohn та Kolby Nottingham. *The UCI Machine Learning Repository*. Available at <https://archive.ics.uci.edu>. n.d.
- [15] Daniel Kermany, Kang Zhang та Michael Goldbaum. *Labeled Optical Coherence Tomography (OCT) and Chest X-Ray Images for Classification*. Бep. 2. Січ. 2018. DOI: 10.17632/rsxcbjbr9sj.2. URL: <http://dx.doi.org/10.17632/rsxcbjbr9sj.2>.
- [16] Diederik P Kingma та Jimmy Ba. “Adam: A method for stochastic optimization”. B: *arXiv preprint arXiv:1412.6980* (2014).
- [17] Adam Lipowski та Dorota Lipowska. “Roulette-wheel selection via stochastic acceptance”. B: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 391 (бер. 2011). DOI: 10.1016/j.physa.2011.12.004.
- [18] Andrzej Maćkiewicz та Waldemar Ratajczak. “Principal components analysis (PCA)”. B: *Computers and Geosciences* 19.3 (1993), c. 303—342. ISSN: 0098-3004. DOI: [https://doi.org/10.1016/0098-3004\(93\)90090-R](https://doi.org/10.1016/0098-3004(93)90090-R). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/009830049390090R>.
- [19] TorchVision maintainers та contributors. *TorchVision: PyTorch’s Computer Vision library*. <https://github.com/pytorch/vision>. 2016.
- [20] Anqi Mao, Mehryar Mohri та Yutao Zhong. “Cross-entropy loss functions: Theoretical analysis and applications”. B: *International Conference on Machine Learning*. PMLR. 2023, c. 23803—23828.
- [21] Antonio Menditto, Marina Patriarca та Bertil Magnusson. “Understanding the meaning of accuracy, trueness and precision”. B: *Accreditation and Quality Assurance* 12 (жовт. 2007), c. 45—47. DOI: 10.1007/s00769-006-0191-z.
- [22] Elliot Meyerson, Xin Qiu та Risto Miikkulainen. “Simple genetic operators are universal approximators of probability distributions (and other advantages of expressive encodings)”. B: *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*. 2022, c. 739—748.
- [23] Adam Paszke та ін. “Automatic differentiation in PyTorch”. B: (2017).
- [24] F. Pedregosa та ін. “Scikit-learn: Machine Learning in Python”. B: *Journal of Machine Learning Research* 12 (2011), c. 2825—2830.
- [25] Joanne Peng, Kuk Lee та Gary Ingersoll. “An Introduction to Logistic Regression Analysis and Reporting”. B: *Journal of Educational Research - J EDUC RES* 96 (бер. 2002), c. 3—14. DOI: 10.1080/00220670209598786.
- [26] *Pima Indians Diabetes Database*. URL: <https://www.kaggle.com/datasets/uciml/pima-indians-diabetes-database/data>.

- [27] Riccardo Poli та W. B. Langdon. “Genetic Programming with One-Point Crossover”. В: *Soft Computing in Engineering Design and Manufacturing*. За ред. Р. К. Chawdhry, R. Roy та R. K. Pant. London: Springer London, 1998, с. 180—189.
- [28] Marius-Constantin Popescu та ін. “Multilayer perceptron and neural networks”. В: *WSEAS Transactions on Circuits and Systems* 8 (лип. 2009).
- [29] David Powers та Ailab. “Evaluation: From precision, recall and F-measure to ROC, informedness, markedness and correlation”. В: *J. Mach. Learn. Technol* 2 (січ. 2011), с. 2229—3981. DOI: 10.9735/2229-3981.
- [30] Raul Robu та Holban Stefan. “A genetic algorithm for classification”. В: трав. 2011, с. 52—56.
- [31] Usha Ruby та Vamsidhar Yendapalli. “Binary cross entropy with deep learning technique for Image classification”. В: *International Journal of Advanced Trends in Computer Science and Engineering* 9 (жовт. 2020). DOI: 10.30534/ijatcse/2020/175942020.
- [32] Jasper Snoek, Hugo Larochelle та Ryan P Adams. “Practical bayesian optimization of machine learning algorithms”. В: *Advances in neural information processing systems* 25 (2012).
- [33] Marina Sokolova, Nathalie Japkowicz та Stan Szpakowicz. “Beyond Accuracy, F-Score and ROC: A Family of Discriminant Measures for Performance Evaluation”. В: т. Vol. 4304. Січ. 2006, с. 1015—1021. ISBN: 978-3-540-49787-5. DOI: 10.1007/11941439_114.
- [34] Tamer Soliman та Ayman Abd-elaziem. “A Multi-Layer Perceptron (MLP) Neural Networks for Stellar Classification: A Review of Methods and Results”. В: *International Journal of Advances in Applied Computational Intelligence* 3 (серп. 2023). DOI: 10.54216/IJAACI.030203.
- [35] William M. Spears та Kenneth A. De Jong. “An Analysis of Multi-Point Crossover”. В: за ред. GREGORY J.E. RAWLINS. Т. 1. Foundations of Genetic Algorithms. Elsevier, 1991, с. 301—315. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-050684-5.50022-7>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080506845500227>.
- [36] The pandas development team. *pandas-dev/pandas: Pandas*. Вер. latest. Лют. 2020. DOI: 10.5281/zenodo.3509134. URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.3509134>.
- [37] Guido Van Rossum та Fred L. Drake. *Python 3 Reference Manual*. Scotts Valley, CA: CreateSpace, 2009. ISBN: 1441412697.
- [38] Vikramkumar, B Vijaykumar та Trilochan. “Bayes and Naive Bayes Classifier”. В: 2014. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:10272111>.