



Neuroevolution mit MPI

Analyse und Optimierung von NEAT für ein
verteiltes System

Masterthesis

zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science (M.Sc.)
im Studiengang Angewandte Informatik
an der Hochschule Flensburg

Simon Hauck

Matrikelnummer: 660158

Erstprüfer: Prof. Dr. rer. nat. Tim Aschmoneit
Zweitprüfer: Prof. Dr. rer. nat. Torben Wallbaum

31. August 2020

Neuroevolutionäre Algorithmen sind ein mögliches Optimierungsverfahren für neuronale Netze. Abhängig von dem verwendeten Algorithmus können die Gewichte der Verbindungen im Netz und die Struktur entwickelt und optimiert werden.

Der Optimierungsprozess ist, unabhängig vom Verfahren, sehr aufwändig und dementsprechend zeit- und rechenintensiv. Für eine schnellere Durchführung des Trainingsprozesses bieten sich Algorithmen an, die gut parallelisierbar sind. Die benötigte Ausführungszeit dieser kann durch Hinzufügen weiterer Rechenknoten mit geringem Aufwand maßgeblich reduziert werden.

Neuroevolutionäre Algorithmen bieten sich aufgrund der Verfahrensweise und der vielen unabhängigen neuronalen Netzen für eine parallele Ausführung an.

In dieser Arbeit wird, stellvertretend für neuroevolutionäre Algorithmen, der *NeuroEvolution of Augmenting Topologies* (NEAT) Algorithmus betrachtet. Dieser wurde im Jahr 2002 veröffentlicht und ist im Vergleich zu den damals bekannten Algorithmen besonders effizient. Zudem dient der Algorithmus als Grundlage für viele Erweiterungen. Die erhaltenen Ergebnisse dieser Arbeit lassen sich somit gut auf ebendiese Erweiterungen übertragen. Im ersten Schritt dieser Arbeit wird die Laufzeit des NEAT Algorithmus mit verschiedenen Optimierungsaufgaben analysiert. Mit den erhaltenen Ergebnissen wird eine parallelisierte Implementierung erstellt. Diese führt mit unterschiedlich vielen Rechenknoten dieselben Optimierungsaufgaben durch. Am Ende dieser Arbeit werden die Ergebnisse von beiden Implementierungen verglichen.

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Ziel der Arbeit	1
1.3	Struktur der Arbeit	1
2	Grundlagen	2
2.1	Neuronale Netze	2
2.1.1	Biologische neuronale Netze	2
2.1.2	Künstliche neuronale Netze	5
2.1.3	Das Neuron	6
2.1.4	Netzstrukturen	8
2.1.5	Optimierungsmöglichkeiten	10
2.1.6	Lernen in neuronalen Netzen TODO CHANGE TITLE	11
2.1.7	Backpropagation Algorithmus	13
2.2	Evolutionäre Algorithmen	13
2.2.1	Biologische Evolutionäre Konzepte	14
2.2.2	Evolutionäre Algorithmen	16
2.2.3	Neuroevolution	22
2.2.4	Neuroevolution im Vergleich	27
2.2.5	TWEANN?	29
2.2.6	Competing Convention Problem	29
2.3	NeuroEvolution of Augmenting Topologies	29
2.3.1	Kodierung	29
2.3.2	Mutation	30
2.3.3	Reproduktion	31
2.3.4	Spezies	33
2.3.5	Starten mit einer minimalen Struktur	34
2.4	MPI	35
2.4.1	Kommunikationsarten in MPI	35
2.4.2	Beowulf - Cluster	35
2.4.3	Ahmdals Law?	35
3	Softwarearchitektur und Implementierung	36
3.1	Anforderungen	36
3.2	Softwarearchitektur	36

4	Analyse	37
4.1	Testsetup	37
4.2	Validierung der Funktionalität	37
4.3	Optimierungsprobleme	37
4.4	Erkenntnisse	37
5	Optimierung	38
5.1	Parallelisierungsstrategien	38
5.2	Implementierung	38
5.3	Testsetup	38
5.4	Evaluation	38
5.5	Ergebnisse	38
6	Zusammenfassung und Ausblick	39
	Quellenverzeichnis	40
	Eidesstattliche Erklärung	43

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Abbildung einer Nervenzelle, Quelle [1].	4
2.2	Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp	30
2.3	Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp	31
2.4	Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp	32

Akronymverzeichnis

NEAT	<i>NeuroEvolution of Augmenting Topologies</i>
KNN	Künstliche neuronale Netze
PNS	Periphere Nervensystem
ZNS	Zentrale Nervensystem
tanh	Tangens Hyperbolicus
TWEANN	<i>Topology and Weight Evolving Artificial Neural Network</i>
MDP	<i>Markov Decision Processes</i>
EA	Evolutionäre Algorithmen

1 Motivation

1.1 Problemstellung

1.2 Ziel der Arbeit

1.3 Struktur der Arbeit

2 Grundlagen

2.1 Neuronale Netze

Klassische Algorithmen in der Informatik beschreiben, mit welchen Schritten ein spezielles Problem gelöst werden kann. In vielen Anwendungsfällen, wie zum Beispiel beim Sortieren einer Liste, verwenden Computersysteme diese und lösen das gegebene Problem schneller und effizienter als es Menschen möglich ist. Dennoch gibt es Aufgaben, die von Menschen ohne Aufwand gelöst werden, aber Computersysteme vor große Herausforderungen stellen. Hierzu zählt unter anderem die Klassifizierung von Bildern. Ein Mensch kann zum Beispiel Bilder von Hunden und Katzen unabhängig von Blickwinkel und Bildqualität unterscheiden beziehungsweise richtig zuordnen. Trotzdem lassen sich für solche Probleme keine klassischen Algorithmen finden, da die Lösung von vielen subtilen Faktoren abhängig ist [1].

In vielen dieser Aufgabenfelder werden Künstliche neuronale Netze (KNN) eingesetzt, welche von biologischen neuronalen Netzen inspiriert sind und zum Forschungsgebiet des maschinellen Lernens gehören. Auch wenn die KNN heute aktuell sind und viel Aufmerksamkeit erhalten, ist die Grundlage die Arbeit von McCulloch und Pitts, welche 1943 ein einfaches neuronales Netz mit Schwellwerten entwickelt haben. Dies ermöglicht die Berechnung von logischen und arithmetischen Funktionen [2]. In den folgenden Jahrzehnten wurde die Funktionsweise der neuronalen Netze weiterentwickelt und der Einsatz in verschiedenen Aufgabenfeldern ermöglicht. Hierzu zählen neben der Klassifizierung von Bildern [3] unter anderem das Erkennen und die Interpretation von Sprache [4], [5] sowie das selbständige Lösen von Computer- und Gesellschaftsspielen [6], [7].

In diesem Kapitel wird zuerst ...

2.1.1 Biologische neuronale Netze

Wie bereits beschrieben, orientiert sich das Fachgebiet der KNN an den erfolgreichen biologischen neuronalen Netzen, wie zum Beispiel dem menschlichen Gehirn [1]. In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften betrachtet, die das Vorbild erfolgreich machen und für die KNN übernommen werden sollen. Im Zuge dessen wird ein grober Überblick über die Struktur und Funktionsweise des menschlichen Gehirns gegeben.

Jede Sekunde erfassen die Rezeptoren des menschlichen Körpers unzählige Reize, wie zum Beispiel Licht, Druck, Temperatur und Töne. Die Reize werden anschließend elektrisch oder chemisch kodiert und über Nervenbahnen an das Gehirn geleitet, welches die Aufgabe hat, diese zu filtern, zu verarbeiten und entsprechend zu reagieren. Als Reaktion können

zum Beispiel Signale an entsprechende Muskeln oder Drüsen gesendet werden [8].

Bevor im nächsten Kapitel die Funktionsweise des Gehirns näher betrachtet wird, werden hier zunächst drei Eigenschaften beschrieben, die klassische Algorithmen entweder nicht besitzen oder nur schwer umsetzen können, aber für biologische neuronale Netze keine Herausforderung sind. Ziel ist es, diese mit den KNN umzusetzen [1].

1. Fähigkeit zu Lernen

Das menschliche Gehirn ist nicht wie ein klassischer Algorithmus für seine Aufgaben programmiert. Stattdessen besitzt es die Fähigkeit, durch Nachahmen oder Ausprobieren zu lernen [1]. Dafür wird das angestrebte Ergebnis mit dem tatsächlich erzielten verglichen und das Verhalten entsprechend angepasst. Dies ermöglicht es Menschen, verschiedene Aufgabengebiete erfolgreich zu lösen und sich ändernden Anforderungen anzupassen.

2. Fähigkeit zur Generalisierung

Allerdings kann nicht jedes mögliche Szenario für ein Aufgabenfeld durch Ausprobieren oder Beobachtung gelernt werden. Trotzdem trifft das Gehirn in den meisten Situationen plausible Lösungen, da es die Fähigkeit zur Generalisierung besitzt [1]. Das bedeutet, dass viele Situationen bereits bekannten Problemen zugeordnet werden können, mithilfe derer eine passende Verhaltensstrategie ausgewählt wird.

3. Toleranz gegenüber Fehlern

Die Fähigkeit zu Generalisieren erlaubt auch eine hohe Fehlertoleranz gegenüber verrauschten Daten. Bei oben genanntem Beispiel der Klassifizierung von Bildern kann ein Teil des Bildes fehlen oder unscharf sein, trotzdem kann das abgebildete Motiv richtig zugeordnet werden.

Struktur des menschlichen Gehirns

Das Forschungsgebiet der Neurowissenschaften befasst sich unter anderem mit dem menschlichen Gehirn, dessen Funktionsweise auch heute noch nicht vollständig erforscht ist. Dennoch ist schon seit 1861 durch die Arbeit von Paul Broca bekannt, dass es im menschlichen Gehirn verschiedene Regionen mit unterschiedlichen Aufgaben gibt [9]. Zum Beispiel wird das sogenannte Kleinhirn (Cerebellum) für einen Großteil der motorischen Koordination verwendet, während an das Großhirn (Telencephalon) unter anderem visuelle Reize geleitet werden [1]. Trotz der unterschiedlichen Aufgaben haben alle Bereiche des Gehirns einen gemeinsamen Grundbaustein, die sogenannten Neuronen [9]. Im Folgenden wird der Aufbau und die Funktionsweise von diesen oberflächlich im Bezug zu den später vorgestellten künstlichen Neuronen betrachtet. Für einen vollständigen Überblick und eine genaue Beschreibung der Vorgänge wird auf entsprechende Fachliteratur verwiesen.

Das menschliche Gehirn besitzt ungefähr 10^{11} einzelne Neuronen, deren schematischer Aufbau in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Jedes Neuron besitzt einen Zellkern, der sich im Zellkörper (Soma) befindet. Von dem Zellkörper gehen mehrere Fasern aus, die Dendriten genannt werden [9]. An diesen befinden sich Synapsen, welche als Übertragungsstelle fungieren und elektrische oder chemische Signale von Rezeptoren oder anderen Neuronen



Abbildung 2.1: Schematische Abbildung einer Nervenzelle, Quelle [1].

empfangen [1]. Typischerweise empfängt ein Neuron Signale von 2000 bis 10.000 anderen Nervenzellen [10].

Synapsen, die elektrische Signale empfangen, haben eine starke, direkte, nicht regulierbare Verbindung vom Sender zum Empfänger. Diese sind für hart kodierte Verhaltensmechanismen nützlich, wie zum Beispiel den Fluchtreflex. Die chemische Synapse hingegen ist nicht direkt mit dem Sender verbunden, sondern durch den synaptischen Spalt getrennt [1]. Zur Übertragung eines elektrischen Signals wird dieses auf der präsynaptischen Seite in ein chemisches Signal kodiert, indem Neurotransmitter freigesetzt werden. Diese können über den synaptischen Spalt übertragen und anschließend auf der postsynaptischen Seite wieder in ein elektrisches Signal kodiert werden. Ein großer Vorteil dieser Übertragungsart ist die Regulierbarkeit [1]. Verschiedene Neurotransmitter können unterschiedliche Effekte auf das Neuron haben, beispielsweise anregend (exzitatorisch) oder hemmend (inhibitorisch) [11]. Zusätzlich kann die Menge der freigesetzten Neurotransmitter die Stärke des Signals beeinflussen [1]. Langfristig gesehen können auch neue Verbindungen entstehen oder alte aufgelöst werden. Es wird angenommen, dass dies die Grundlage des Lernens im menschlichen Gehirn ist [9].

Sowohl die erregenden als auch hemmenden Signale werden über die Dendriten an den Axonhügel weitergeleitet, welcher sich zwischen dem Soma und dem Axon befindet. Dort werden die Signale akkumuliert. Wird bei diesem Vorgang ein gewisser Schwellwert überschritten, wird ein elektrischer Impuls erzeugt, der über das Axon weitergeleitet wird [11]. Das Axon ist typischerweise 1cm, in Ausnahmen sogar bis zu einem 1m lang und wird von der Myelinscheide umgeben, die unter anderem Schutz vor mechanischer Überbeanspruchung bietet [9]. Zusammen mit den Ranvierschen Schnürringen ermöglicht diese zudem eine schnellere Weiterleitung des Aktionspotenzials [11]. Das Axon endet mit dem sogenannten Endknopf, auch Axonterminal genannt. Dieses ist mit den Synapsen von anderen Neuronen verbunden und setzt beim Eintreffen eines Signals die Neurotransmitter frei und überträgt somit das Signal [11]. Typischerweise gibt ein einzelnes Neuron

sein Signal an 1000 bis 10.000 anderen Neuronen weiter, in Extremfällen sogar an bis zu 150.000 andere Neuronen [10], die alle parallel arbeiten. So entsteht ein sehr großes und leistungsfähiges neuronales Netz.

2.1.2 Künstliche neuronale Netze

KNN sind ein mathematisches Modell, das im Vergleich zum biologischen Vorbild stark vereinfacht und idealisiert ist. Trotzdem können unterschiedliche mathematische Funktionen abgebildet werden. In diesem Kapitel werden die grundsätzliche Funktionsweise sowie die einzelnen Komponenten der KNN vorgestellt.

Betrachtet man ein KNN als Blackbox (TODO REFERENZ BILD), gibt es eine Menge an Eingabewerten, die in einem Eingabevektor kodiert sind und eine Menge an Ausgaben, die in einem Ausgabevektor kodiert sind [12]. Die Eingaben werden im Falle der KNN nicht durch Rezeptoren erfasst sondern durch ein Optimierungsproblem gegeben. Der Ausgabevektor soll das gewünschte Ergebnis enthalten. Die Interpretation von diesem variiert je nach Optimierungsproblem und Netzarchitektur.

Betrachtet man die Struktur der KNN sind einige Ähnlichkeiten zum biologischen Vorbild erkennbar. Diese werden im folgenden genauer betrachtet [10]:

1. Neuronen

Ähnlich zu den biologischen neuronalen Netzen, besteht auch das KNN aus vielen Neuronen [10]. Dies sind einfache Recheneinheiten, die primitive Funktionen bestimmen können [12] und deren genaue Funktionsweise in Kapitel 2.1.3 erläutert wird. Vorweggenommen sei, dass ein Neuron mehrere Eingabewerte besitzt, welche gewichtet sind und akkumuliert werden. Hierbei entsteht ein skalarer Ausgabewert, der den Aktivierungsgrad des Neurons repräsentiert und von anderen Neuronen als Eingabe verwendet werden kann [1].

2. Gerichtete gewichtete Verbindungen

Wie im vorherigen Punkt angedeutet, sind Neuronen über gerichtete Verbindungen miteinander vernetzt. Der Aktivierungszustand eines Neurons wird entsprechend der Verbindungen an die Zielneuronen weitergegeben, welche diesen Wert als Eingabe verarbeiten. Wie bei den biologischen neuronalen Netzen auch, können Eingaben unterschiedlich stark anregend und hemmend wirken. Dies wird bei den KNN über Gewichte in den Verbindungen realisiert [10].

3. Struktur und Gewichte

Der Ausgabevektor eines KNN ist abhängig von der Struktur des Netzwerkes und der Gewichte in den einzelnen Verbindungen. Für das erfolgreiche Lösen eines Optimierungsproblems muss ein KNN die richtige Kombination aus Neuronen, Netzwerkstruktur und gewichteten Verbindungen besitzen. Diese müssen durch Lernverfahren bestimmt werden, auf die in Kapitel 2.1.5 näher eingegangen wird.

Trotz der vorgestellten Ähnlichkeiten gibt es sehr viele Unterschiede zwischen den biologischen neuronalen Netzen und den KNN. Beispiel hierfür ist der Größenunterschied. Das menschliche Gehirn mit seinen 10^{11} Neuronen besitzt pro Neuron ungefähr 10^4 Verbindungen, während die meisten KNN nur 10^2 bis 10^4 Neuronen mit insgesamt 10^5 Verbindungen besitzen. Auch werden keine chemischen Effekte, die auf benachbarte Neuronen wirken, sowie zeitliche und räumliche Lokalitätsprinzipien beachtet [10]. Aus diesen Gründen sind die KNN keine Nachbildung der biologischen neuronalen Netzen sondern verwenden diese nur als Inspiration.

2.1.3 Das Neuron

In diesem Kapitel wird die Funktionsweise der einzelnen Neuronen betrachtet. Hierfür werden drei Phasen vorgestellt, in denen die Ausgabe eines einzelnen Neurons berechnet wird. Betrachtet man ein KNN, führen typischerweise mehrere Verbindungen zu einem Neuron j , welche von den Neuronen i_1, i_2, \dots, i_n ausgehen [1]. Dieses ist schematisch in Abbildung (TODO ABBILDUNG EINFÜGEN) dargestellt.

Propagierungsfunktion

Die Ausgabewerte $o_{i_1}, o_{i_2}, \dots, o_{i_n}$ der Neuronen i_1, i_2, \dots, i_n werden als Eingabewerte für das Neuron j verwendet. Für jeden Eingabewert existiert ein entsprechendes Gewicht w_1, w_2, \dots, w_n [1]. Somit repräsentiert w_{ij} das Gewicht für die Verbindung von Neuron i zu Neuron j [10]. Die Propagierungsfunktion f_{prop} berechnet die Netzeingabe net_j , welche in der nächsten Phase weiterverwendet wird [1].

$$net_j = f_{prop}(o_1, o_2, \dots, o_n, i_1, i_2, \dots, i_n)$$

Die meist verwendete Propagierungsfunktion, welche auch in den späteren Beispielen genutzt wird, ist die gewichtete Summe. Hierbei werden, entsprechend der Formel, die Werte o_i mit dem entsprechenden Gewicht w_i multipliziert und aufsummiert [1]:

$$net_j = \sum_i (o_i \cdot w_{i,j})$$

Aktivierungsfunktion

Der Aktivierungszustand $a_j(t)$ gibt den Grad der Aktivierung von Neuron j zum Zeitpunkt t an [10]. Ein neuer Aktivierungszustand zum Zeitpunkt $t + 1$ wird mit der Aktivierungsfunktion f_{act} berechnet. Diese berücksichtigt nicht nur die Netzeingabe $net_j(t)$ sondern auch den vorherigen Aktivierungszustand $a_j(t)$ und den Schwellwert Θ der Aktivierungsfunktion [10]. Ein Schwellwert Θ_j , auch Bias genannt, ist dem Neuron j zugeordnet und gibt die Stelle an, an welcher die Aktivierungsfunktion die größte Steigung hat [1]. Somit kann die Berechnung der Aktivierung $a_j(t + 1)$ durch folgende Formel ausgedrückt werden [10]:

$$a_j(t + 1) = f_{act}(a_j(t), net_j, \Theta_j)$$

Bei der Berechnung kommt dem Schwellwert Θ eine besondere Bedeutung zu. Oftmals verwenden einige oder alle Neuronen eines KNN dieselbe Aktivierungsfunktion, die Schwellwerte hingegen unterscheiden sich je nach Neuron. Des Weiteren sei angemerkt, dass die vorherige Aktivierung $a_j(t)$ je nach Netzstruktur oft nicht bei der Berechnung berücksichtigt wird [1]. Zudem wird in der Praxis bei Verwendung der gewichteten Summe als Propagierungsfunktion der Schwellwert eines Neurons oft schon in der ersten Phase miteinbezogen. Hierdurch ändert sich die Berechnung der Netzeingabe zu $net_j = \sum_i (o_i \cdot w_{i,j}) - \Theta_j$. Bei der Berechnung der Aktivierungsfunktion gilt dann $\Theta_j = 0$.

Je nach Anwendungsgebiet können verschiedene Aktivierungsfunktionen mit unterschiedlichen Eigenschaften eingesetzt werden, von denen vier in Abbildung (TODO ABBILDUNG) dargestellt sind. Im Folgenden wird angenommen, dass $\Theta_j = 0$ ist.

Das einfachste Beispiel für eine Aktivierungsfunktion ist die sogenannte binäre Schwellwertfunktion, welche abhängig vom Schwellwert Θ nur die Werte 0 und 1 zurückgeben kann [1]. Die Formel hierfür ist:

$$f_{act}(net_j) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } net_j \geq 0 \\ 0 & \text{wenn } net_j < 0 \end{cases}$$

Allerdings ist für diese Funktion der Wert der Ableitung immer 0 außer an dem Schwellwert, an welchem sie nicht differenzierbar ist [1]. Diese Eigenschaften machen sie ungeeignet für bestimmte Lernverfahren, wie zum Beispiel den Backpropagation Algorithmus, auf den in Kapitel 2.1.5 kurz eingegangen wird [1].

Dieses Problem kann durch die Verwendung einer Sigmoidfunktion gelöst werden. Zwei bekannte Beispiele für Sigmoidfunktionen sind die logistische Funktion und der Tangens Hyperbolicus (\tanh) [13]. Die logistische Funktion kann Werte von 0 bis 1 annehmen und durch einen entsprechenden Parameter T bezüglich der x-Achse gestreckt und gestaucht werden [1]. Berechnet wird sie mit:

$$f_{act}(net_j) = \frac{1}{1 + e^{-T \cdot net_j}}$$

Allerdings können neuronale Netze je nach Verfahren schneller optimiert werden, wenn das durchschnittliche Gewicht aller Verbindungen nahe 0 ist. In diesem Fall ist die \tanh Funktion besser geeignet, da sie Werte zwischen -1 und 1 annehmen kann [13]. Das letzte hier vorgestellte Beispiel ist die sogenannte *Rectifier* Funktion. Diese wird oft in Zusammenhang mit dem Backpropagation Algorithmus erfolgreich eingesetzt und erzielt mit diesem schneller bessere Optimierungsergebnisse [14]. Berechnet wird sie mit:

$$f_{act}(net_j) = \max(0, net_j)$$

Ausgabefunktion

Die Ausgabefunktion f_{out} berechnet die Ausgabe o_j von Neuron j . Als Eingabewert wird die Aktivierung a_j verwendet [10]. Somit ist die Funktion definiert mit:

$$o_j = f_{out}(a_j)$$

Ähnlich wie die Aktivierungsfunktion ist die Ausgabefunktion in der Praxis meistens global für alle Neuronen definiert. Zudem wird oft die Identitätsfunktion verwendet. In diesem Fall gilt $o_j = a_j$ [1]. Dies gilt auch für die später vorgestellten Beispiele. Ist die Ausgabe o_j berechnet, kann sie als Eingabewert für andere verbundene Neuronen dienen.

2.1.4 Netzstrukturen

Aus dem vorherigen Kapitel ist dargestellt, dass die Gewichte einen großen Einfluss auf das Ergebnis eines einzelnen Neurons haben. Der Ausgabevektor eines KNN wird neben den Gewichten auch von der Anzahl an Neuronen sowie deren Verbindungsstruktur beeinflusst. Je nach Optimierungsproblem können unterschiedliche Varianten eingesetzt werden, welche in diesem Kapitel genauer vorgestellt werden.

Typischerweise besitzt jedes KNN Eingabe- und Ausgabeneuronen. Optional kann ein KNN beliebig viele verdeckte Neuronen enthalten. Diese werden auch als *Input*-, *Output*- und *Hidden*-Neuronen bezeichnet [10]. Die Anzahl der Eingabe- und Ausgabeneuronen ist abhängig von der Größe des Eingabe- bzw. Ausgabevektors. Für jedes Element in den Vektoren gibt es ein entsprechendes Neuron (TODO ABBILDUNG). Bei vielen Netzstrukturen werden die Neuronen des KNN verschiedenen Schichten zugeordnet. In der ersten Schicht befinden sich die Eingabeneuronen und in der letzten die Ausgabeneuronen. Dazwischen befinden sich n Schichten mit verdeckten Neuronen [10].

Bei der Berechnung eines KNN werden zuerst die Werte des Eingabevektors in die entsprechenden Eingabeneuronen gesetzt. Anschließend werden alle Neuronen in einer bestimmten Reihenfolge aktiviert bzw. berechnet. Zuletzt bilden die Werte der Ausgabeneuronen den Ausgabevektor. Die verdeckten Neuronen befinden sich zwischen den Eingabe- und Ausgabeneuronen und werden so genannt, da ihr Ausgabewert nur ein Zwischenergebnis ist und vor dem Anwender verborgen bleibt. Trotzdem sind sie ein elementarer Bestandteil der KNN und bestimmen maßgeblich dessen Leistungsfähigkeit. Beispielweise kann ein KNN, welches nur aus *Input*- und *Output*-Neuronen besteht nur eine lineare Funktion nachbilden. Ein KNN mit einer ausreichend großen verdeckten Schicht kann jede beliebige kontinuierliche Funktion darstellen. Mit zwei Schichten kann ein KNN sogar jede unstetige mathematische Funktion mit beliebiger Genauigkeit abbilden [9].

Je nach Art des Verbindungsmusters zwischen den Neuronen werden KNN einer von zwei Gruppen zugeordnet. Die erste Gruppe enthält Netze ohne Rückkopplung, wel-

che auch *feedforward*-Netze genannt werden. Die zweite Gruppe sind die sogenannten *recurrent*-Netze, zu welchen KNN mit Rückkopplungen gehören [10].

Netze ohne Rückkopplung

Die Definition der *feedforward*-Netze ist einfach: Es darf keine Verbindung von einem Neuron j ausgehen, welche wieder zu sich selbst führt. Dabei ist es irrelevant, ob eine direkte oder indirekte Verbindung über Zwischenneuronen besteht. Somit entsteht ein azyklischer Graph [10] und das KNN kann infolgedessen keinen internen Zustand besitzen. Für die gleiche Eingabe wird immer dasselbe Ergebnis berechnet. Innerhalb dieser Kategorie gibt es zwei Untergruppen, die ebenenweise verbundenen KNN und die KNN, welche über sogenannte *shortcut* Verbindungen verfügen.

Bei den rein ebenenweise verbundenen KNN stammen die Eingabewerte eines Neurons immer aus der vorherigen Schicht. Der berechnete Ausgabewert eines Neurons wird nur an die Neuronen der nächsten Schicht weitergeleitet [10]. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung (TODO ABBILDUNG) dargestellt.

Im Gegensatz dazu stehen die KNN mit *shortcut* Verbindungen. Eine *shortcut* Verbindung kann eine oder mehrere Schichten überspringen. Für gewisse Optimierungsprobleme, unter anderem für das in Kapitel (TODO CHAPTER) dargestellte Beispiel, können so kleinere KNN erzeugt werden [10].

Netze mit Rückkopplung

Netze mit Rückkopplung werden oft auch in Schichten dargestellt. Allerdings kann ein KNN sich je nach Art selbst beeinflussen, indem Zyklen in der Berechnung entstehen, wodurch das Zwischenspeichern von Werten ermöglicht wird [9]. Somit wird das Ergebnis sowohl durch die Eingabewerte des KNN, als auch durch die vorherigen Berechnungen beeinflusst [15]. Wie auch bei den *feedforward*-Netzen, können auch die Netze mit Rückkopplung je nach Verbindungsart verschiedenen Untergruppen zugeordnet werden [10].

1. Bei KNN mit direkter Rückkopplung können Neuronen Verbindungen zu sich selbst haben (TODO ABBILDUNG). Dadurch können sie ihre Aktivierung verstärken oder abschwächen [10].
2. Netze mit einer indirekten Rückkopplung erlauben im Gegensatz zu den *feedforward*-Netzen auch Verbindungen in die vorherige Schicht (TODO ABBILDUNG) [10]. Wie bei der direkten Rückkopplung kann sich ein Neuron j selbst beeinflussen, wenn es seinen Ausgabewert an ein Neuron i der nächsten Schicht weiterleitet, welches eine Rückkopplung zu j hat [1].
3. KNN mit lateralen Rückkopplungen erlauben Verbindungen von Neuronen innerhalb einer Schicht (TODO ABBILDUNG), welche hemmend oder aktivierend wirken können. Oft entsteht dabei ein *Winner-Takes-All*-Schema, da das beste Neuron alle anderen hemmt und sich selbst aktiviert [1].

4. Bei den vollständig verbundenen Netzen darf ein Neuron zu jedem anderen eine Verbindung besitzen sein. Ein Sonderfall sind hier die sogenannten Hopfield-Netze. Bei diesen müssen die Neuronen zu jedem andere eine Verbindung besitzen mit Ausnahme zu sich selbst (direkte Rückkopplung). Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung (TODO ABBILDUNG) dargestellt [1].

2.1.5 Optimierungsmöglichkeiten

In den vorherigen Kapiteln wurde aufgezeigt, dass das erfolgreiche Lösen eines Optimierungsproblems mit einem KNN von vielen Faktoren abhängig ist. In der Praxis ist es bei komplexe Aufgaben nicht möglich, diese manuell zu bestimmen. Aus diesem Grund muss ein Optimierungsverfahren, welches auch als Lernverfahren bezeichnet wird, angewendet werden. Ziel von diesem ist, einen Teil oder alle Parameter des KNN durch einen Algorithmus automatisch zu bestimmen. Typischerweise ist das Lernverfahren unabhängig von dem eigentlichen Optimierungsproblem und kann daher in verschiedenen Bereichen ohne großen zusätzlichen Aufwand eingesetzt werden.

Ein Lernverfahren kann theoretisch auf vier verschiedene Arten die Eigenschaften eines KNN optimieren [10]. Diese sind im Folgenden kurz zusammenfasst.

1. **Modifizieren der Verbindungsgewichte:**

Die Gewichte der einzelnen Verbindungen werden in der Praxis von allen Lernverfahren optimiert [10]. Gründe hierfür sind, dass ein Netzwerke mehrere Millionen Verbindungen besitzen kann, welche unmöglich manuell optimiert werden können und dass die Gewichte entscheidend für die erfolgreiche Optimierung sind.

2. **Modifizieren der Schwellwerte:**

Die Schwellwerte der Neuronen werden wie die Gewichte von den meisten Lernverfahren optimiert. In der Praxis ist der hierbei verwendete Vorgang oft identisch mit der Gewichtsoptimierung. Dies ist möglich, wenn, wie in einigen Implementierungen umgesetzt, die Schwellwerte durch Gewichte repräsentiert werden. Hierzu wird einem KNN ein sogenanntes *Bias*-Neuron hinzugefügt, welches immer den Wert 1 hat. Von diesem gehen Verbindungen zu allen Neuronen aus. Der Schwellwert Θ_j von einem Neuron j wird durch das Gewicht $w_{\Theta j}$ repräsentiert. Dieses ist der eingehenden Verbindung vom *Bias*-Neuron zugeordnet, sodass gilt $1 \cdot w_{\Theta j} = \Theta_j$. Somit muss bei der Berechnung eines Neurons der Schwellwert nicht mehr explizit miteinbezogen werden, sondern wird im Rahmen der Propagierungsfunktion indirekt mit den anderen gewichteten Eingaben verarbeitet. Bezüglich der Optimierung wird die Verbindung zum *Bias*-Neuron wie andere gewichtete Verbindungen behandelt [10].

3. **Hinzufügen und Entfernen von Verbindungen oder Neuronen:**

Das Hinzufügen beziehungsweise Entfernen von Verbindungen und Neuronen ist im Vergleich zu den bereits vorgestellten Möglichkeiten aufwändig und in der Umsetzung schwieriger. Daher wird es von vielen bekannten Algorithmen nicht

implementiert. Bei diesen muss die Struktur mithilfe von Expertenwissen oder Erfahrung festgelegt werden [16], andernfalls muss eine geeignete Struktur experimentell ermittelt werden. Da dieses Vorgehen nicht effizient ist, gibt es dennoch einige Algorithmen, welche diese Art der Optimierung umsetzen. Diese gehören häufig zu der Klasse der evolutionären Algorithmen, auf welche in Kapitel (TODO REFF!!) genauer eingegangen wird [1].

4. Ändern der Propagierungs-, Aktivierungs- und Ausgabefunktion:

Die Optimierung der verwendeten Propagierungs-, Aktivierungs- und Ausgabefunktion ist theoretisch möglich, dennoch ist die Umsetzung in der Praxis nicht sehr verbreitet [10]. Auch in dieser Arbeit werden diese Funktionen nicht durch einen Algorithmus angepasst und werden daher nicht weiter betrachtet.

2.1.6 Lernen in neuronalen Netzen TODO CHANGE TITLE

In Kapitel 2.1.5 sind Optimierungsmöglichkeiten aufgelistet, welche von einem Lernverfahren, in der sogenannten Trainingsphase des KNN, angepasst werden können. Ziel ist, dass am Ende dieser Phase der Ausgabevektor des KNN dem gewünschten Ergebnis entspricht. Voraussetzung hierfür ist, dass das gewünschte Ergebnis erkennbar ist [10]. Bei den Lernverfahren wird grundsätzlich zwischen dem überwachten, unüberwachten und bestärkenden Lernen unterschieden, welche unterschiedliche Arten des Lernens für verschiedene Aufgabenstellungen repräsentieren. Im Folgenden wird ein Überblick über diese gegeben. Für eine genaue Beschreibung und die dazugehörigen Algorithmen wird auf entsprechende Fachliteratur verwiesen.

Überwachtes Lernen

Das überwachte Lernen, auch *supervised learning* genannt, wird häufig mit dem Backpropagation Algorithmus und seinen Derivaten umgesetzt und beruht auf bekannten Beispielen, welche durch einen externen "Lehrer" gegeben sind [10]. Dabei müssen die Beispieldaten in großer Anzahl schon vor dem Lernvorgang vorhanden sein und den Eingabevektor sowie den gewünschten Ausgabevektor des KNN enthalten [10]. Beispiel hierfür ist die Klassifizierung von Hunde- und Katzenbildern. Für jedes Bild muss der Eingabevektor bekannt sein, welcher aus den einzelnen Pixeln besteht sowie der Ausgabevektor, der in diesem Fall angibt ob ein Hund oder eine Katze abgebildet ist. In der sogenannten Trainingsphase, in welcher unter anderem die Gewichte optimiert werden, berechnet das KNN die Ausgabewerte für die in den Beispielen enthaltenen Eingabevektoren. Das erhaltene Ergebnis wird direkt mit dem gewünschten Wert verglichen. Entsprechend der Differenzen werden die Parameter des KNN angepasst [1]. Ziel dieses Vorgangs ist, dass Muster aus den Beispieldaten extrahiert werden. Dadurch soll nicht nur für bekannte Beispiele die korrekte Lösung angegeben werden, sondern auch für ähnliche, unbekannte Eingabedaten, sodass die Eigenschaft der Generalisierung gegeben ist [10]. Dies wird überprüft, indem die Beispieldaten in Trainings- und Testdaten unterteilt werden. Die Trainingsphase wird nur mit den Trainingsdaten durchgeführt, sodass die

Testdaten dem KNN unbekannt sind. Ist diese Phase abgeschlossen, zum Beispiel weil das KNN eine gute Genauigkeit erreicht hat, werden die Testdaten zur Validierung eingesetzt. Hierbei wird überprüft, ob das KNN auch für unbekannte Eingabevektoren die richtigen Ergebnisse berechnet [1]. Diese Art des Lernens ist im Vergleich zu den anderen Varianten sehr schnell, da zum Beispiel die Gewichte direkt so angepasst werden können, dass sie das gewünschte Ergebnis erzeugen [10]. Allerdings kann das Verfahren nicht in jeder Situation angewendet werden. Liegen keine Beispiele vor, kann das KNN nicht trainiert werden. Sind die Beispieldaten fehlerhaft oder verrauscht kann das Training langsam, nicht zufriedenstellend oder unmöglich sein.

Unüberwachtes Lernen

Beim unüberwachten Lernen, im Englischen *unsupervised learning* genannt, gibt es ebenfalls Beispieldaten, allerdings enthalten diese nur den Eingabevektor und keine gewünschten Ausgabewerte. Ziel solcher Lernverfahren ist, die Eingabedaten verschiedenen Gruppen zuzuordnen, wobei sich ähnliche Eingabevektoren in derselben Gruppe befinden sollen [10]. An dieser Stelle wird die Funktionsweise wieder mit dem Beispiel der Hunden- und Katzenbildern aus dem vorherigen Kapitel verdeutlicht. Durch das Lernverfahren werden dem KNN die Bilder aus den Beispieldaten gegeben. In diesem Fall ist aber nicht bekannt, welches Tier sich auf einem Bild befindet. Das KNN soll selbständig erkennen, dass es sich um zwei Arten von Tieren handelt und diese richtig zuordnen. Ein solches Verfahren kann einige Vorteile gegenüber dem überwachten Lernen bieten [17]. Zum Beispiel müssen vor dem Training keine Beispieldaten mit Ausgabevektoren vorliegen, welche teilweise sehr teuer und aufwändig zu erstellen sind. Des Weiteren kann je nach Algorithmus die Anzahl an Gruppen automatisch zugewiesen werden. So können auch unterschwellige Muster die Zuweisung beeinflussen, die nicht von einem Menschen erkannt werden würden [17].

Bestärkendes Lernen

Die letzte Klasse ist das bestärkende Lernen, auch *reinforcement learning* genannt. Typischerweise wird diese Art des Lernens in dynamischen Umgebungen eingesetzt, in welcher ein sogenannter Agent mit einer Umgebung interagiert. Ein hierfür häufig genanntes Beispiel ist ein Problem des *Markov Decision Processes* (MDP), welches in Abbildung (TODO ABBILDUNG) dargestellt ist und anhand dessen im Folgenden das bestärkende Lernen beschrieben ist [18].

Zwei wichtige Grundkomponenten von MDPs sind der Agent und die Umgebung. Der aktuelle Zustand der Umgebung zu einem Zeitpunkt t wird durch die Variable S_t repräsentiert. Ist die Umgebung zum Beispiel ein Computerspiel, könnte S_t unter anderem die aktuelle Position sowie Zielkoordinaten enthalten. Der Zustand S_t steht dem Agenten zur Verfügung, der daraufhin eine Aktion A_t ausführt. Als Basis hierfür kann ein KNN dienen, welches als Eingabevektor den aktuellen Zustand verwendet und einen Ausgabevektor mit der gewählten Aktion erzeugt. Die verfügbaren Aktionen sind je nach System abhängig.

So können zum Beispiel bei der Steuerung von Robotern sowohl direkte Steuersignale für die Motoren ausgegeben werden als auch high-level Entscheidungen wie zum Beispiel die Bewegungsrichtung. Nach Ausführung der Aktion wird der Zustand der Umgebung entsprechend angepasst und ein neuer Zustand S_{t+1} entsteht [18], für den der Agent eine neue Aktion auswählen kann. Zusätzlich wird eine Belohnung, auch als *reward* bezeichnet, vergeben. Dies ist ein numerischer Wert, der angibt, wie richtig oder falsch die gewählte Aktion war [10]. Eine richtige Aktion zeichnet sich dadurch aus, dass sie den Agenten näher an sein gewünschtes Ziel bringt. Im zuvor genannten Beispiel des Computerspiels ist der *reward* größer, wenn der Agent die Distanz zum Ziel verringert und kleiner bzw. negativ, wenn der Agent sich wieder entfernt. Ziel eines Optimierungsalgorithmus ist, die Summe der erhaltenen Belohnungen zu maximieren. Hierdurch ergeben sich komplexe Anforderungen an das Lernverfahren. Bei der Entscheidung, welche Aktion A_t bei einem Zustand S_t den meisten Erfolg verspricht, muss sowohl die direkte als auch zukünftige Belohnungen berücksichtigt werden [18]. Dies ist notwendig, da ein Agent viele Aktionen in derselben sich ändernden Umgebung ausführt und eine Entscheidung Auswirkungen auf die Zukunft hat. Somit kann es bei vielen Optimierungsproblemen lohnenswert sein, zur Schaffung einer besseren Ausgangslage zuerst eine schlechte Belohnung in Kauf zu nehmen, sodass im weiteren Verlauf größere Belohnungen erreicht werden können. Eine weitere Herausforderung für solche Algorithmen ist, dass ein Gleichgewicht zwischen dem Nutzen von Erfahrung und Ausprobieren gefunden werden muss. Möglichst hohe Belohnung kann ein Agent nur erhalten, wenn er bekannte Entscheidungen trifft, die in der Vergangenheit erfolgreich waren. Allerdings müssen auch neue unbekannte Aktionen ausgewählt werden, da diese unter Umständen besser sein können. Für ein gutes Lernverfahren ist es notwendig, eine Kombination aus beidem zu ermöglichen [18].

Bestärkendes Lernen ist für viele Bereiche notwendig und Algorithmen haben beeindruckende Ergebnisse erzielt. Dennoch gibt es auch einen großen Nachteil. Die Laufzeit ist zum Beispiel im Vergleich zum überwachten Lernen sehr langsam. Grund hierfür ist, dass eine niedrige Belohnung keine Aussage darüber trifft, wie zum Beispiel die Gewichte für eine Verbesserung verändert werden müssten. Somit kann das Anpassen sowohl positiv als auch negativ für den Agenten sein [10].

2.1.7 Backpropagation Algorithmus

???

2.2 Evolutionäre Algorithmen

Für die Optimierung von KNN können verschiedene Algorithmen eingesetzt werden. Der in Kapitel (TODO Kapitel) vorgestellte Backpropagation Algorithmus ist hierbei nur ein Beispiel. In dieser Arbeit wird ein Verfahren eingesetzt, welches in Kapitel 2.3 vorgestellt wird und zur Gruppe der neuroevolutionären Algorithmen gehört, welche auf den sogenannten Evolutionären Algorithmen (EA) basieren. Zu diesen gehören eine Vielzahl von

unterschiedlichen Verfahren, welche dennoch einige gemeinsame Grundprinzipien haben. Ziel von diesen ist, eine möglichst gute Näherungslösung für ein Optimierungsproblem zu finden. Umgesetzt wird dies mit einer simulierten Evolution, welche durch das biologische Pendant inspiriert ist [19].

Im Folgenden ..

2.2.1 Biologische Evolutionäre Konzepte

Einer der bedeutendsten Wissenschaftler in Bezug auf die Evolutionstheorie ist Charles Darwin, welcher 1859 mit seiner Arbeit *On the Origin of Species by Means of Natural Selection* einen wichtigen Grundbaustein gelegt hat [9]. Theoretisch wird bei Betrachtung der Evolution zwischen unbelebten Systemen und lebenden Organismen unterschieden [19]. Da die EA von Letzteren inspiriert sind, wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit nur auf diese Bezug genommen.

Die später vorgestellten EA übernehmen aus der Biologie verschiedene Begriffe, wie zum Beispiel Population, Individuum, Genotyp, Phänotyp, Selektion, Rekombination und Mutation. Diese werden im Folgenden aus Sicht des biologischen Vorbilds betrachtet. Die Erklärungen in dieser Arbeit sind stark vereinfacht und es werden zudem nur die konzeptionellen Prinzipien betrachtet. Der genaue biologische Ablauf ist für diese Arbeit nicht relevant.

Eine Population setzt sich aus vielen unterschiedlichen und unabhängigen Individuen zusammen, welche alle zur selben Art gehören. Eine Art ist hierbei so definiert, dass die einzelnen Individuen einen gemeinsamen Genpool teilen und sich miteinander paaren können. Jedes Individuum besitzt ein Genom, welches das genetische Erbgut enthält. Dieses besteht aus mehreren Chromosomen, die wiederum mehrere Gene besitzen [19]. Hierbei kann ein Gen, welches zum Beispiel für die Fell- bzw. Haarfarbe des Individuums verantwortlich ist, verschiedene Werte annehmen. Jede dieser Ausprägungen, in diesem Fall schwarze und braune Haare, werden als Allel bezeichnet [19]. Somit ist das Genom der Bauplan für ein Individuum und bestimmt maßgeblich dessen Erscheinungsbild [11]. Der Phänotyp wird durch das Genom beeinflusst und beschreibt die tatsächlichen, äußerlich feststellbaren Ausprägungen der einzelnen Gene [19]. Allerdings kann der Phänotyp auch durch die Umwelt beeinflusst werden [11]. Die Kombination aus Genom und Phänotyp bildet das bereits vorgestellte Individuum.

Nachdem im vorherigen Absatz die grundlegenden Begriffe bezüglich einzelner Individuen erläutert wurden, soll jetzt mit Bezug auf die Evolution die Population als Ganzes betrachtet werden. Die heute existierende Vielfalt an Tier- und Pflanzenarten hat sich über viele Millionen Jahren entwickelt. Der genaue Ursprung, wie die ersten Lebewesen mit Stoffwechselprozessen entstanden sind, ist dennoch unbekannt. Bezüglich der Evolution stellt sich die Frage, wie sich das genetische Material im Laufe der Zeit ändern kann. Hierfür sind fünf Faktoren zu nennen [19].

1. Der erste und wichtigste Faktor sind zufällige Mutationen. Hierbei entstehen beim Vervielfältigen des genetischen Erbguts, zum Beispiel bei der Fortpflanzung, Fehler gemacht, die zu zufälligen Änderungen führen. Hierdurch kann beispielsweise ein neues Allel entstehen, welches zu einer neuen, bisher nicht vorhandenen Haar- bzw. Fellfarbe führt [19].
2. Der zweite Faktor betrifft die Selektion. Damit verschiedene Allele langfristig ähnlich häufig in der Population vorkommen, müssen mehrere Faktoren zutreffen. Ein Faktor ist die Überlebenschance der verschiedenen Individuen in der Umwelt, die sogenannte Umweltselektion [19]. Eine auffällige Fellfarbe kann zum Beispiel ein Nachteil sein, da diese von den natürlichen Feinden leichter entdeckt wird. Da diese Individuen häufiger gefressen werden, haben sie eine geringere Chance zur Fortpflanzung und es somit möglich, dass das genetische Material verloren geht. Doch nicht nur die Umweltselektion hat einen Einfluss auf die Anzahl der Nachkommen. Hierfür sind ebenfalls die erfolgreiche Partnersuche sowie Fortpflanzungsrate verantwortlich [19].
3. Besonders in kleinen Populationen kann der Tod einzelner Individuen große Auswirkungen auf das Verhältnis der unterschiedlichen Allele haben. Hierbei können durch Zufall einzelne Allele komplett verloren gehen und die nachfolgenden Generationen stark beeinflusst werden. In diesem Fall spricht man von Gendrift. Der Effekt hiervon ist bei größeren Populationen vernachlässigbar [19].
4. Wie bereits beschrieben, sollen sich Individuen einer Art fortpflanzen können. Doch es kommt auch vor, dass Individuen einer Art abwandern und sich an zwei räumlich getrennten Orten weiterentwickeln. Kommt es zu einem späteren Zeitpunkt wieder zu einer Zuwanderung können die neu entwickelten Gene die Population maßgeblich verändern. Dieser Effekt wird auch Genfluss genannt [19].
5. Der letzte Faktor ist die Rekombination. Bezüglich der biologischen Evolution beschreibt dies den Vorgang der sexuellen Paarung zweier Individuen, sodass ein oder mehrere Nachkommen erzeugt werden. Dabei wird das Erbgut für diese aus einer Kombination der Elterngenome erstellt. Somit handelt es sich aus Sicht der klassischen Evolutionslehre nicht um einen Evaluationsfaktor, da nur Bekanntes neu kombiniert wird und keine neuen Gene oder Allele entstehen. Dennoch wird die Rekombination heute meistens als Evaluationsfaktor genannt. Grund hierfür ist, dass die einzelnen Gene nicht wie lange in der Populationsgenetik angenommen komplett unabhängig voneinander sind, sondern stattdessen stark vernetzt sind und viel Einfluss aufeinander haben. So können auch bei der Kombination von bekannten Genotypen neue phänotypische Eigenschaften entstehen [19].

Durch die vorgestellten Arten der Evolution kann sich eine Population verschiedensten Umweltsituationen anpassen und gegenüber konkurrierenden Arten behaupten. Beispiel hierfür sind Bakterien, welche Resistenzen gegen bestimmte Antibiotika entwickeln. Während anfänglich nur wenige Individuen die Resistenz besitzen, wird diese aufgrund

der hohe Verbreitung von Bakterien schnell an Nachkommen weitergegeben und ist nach kurzer Zeit in der ganzen Population vorhanden.

2.2.2 Evolutionäre Algorithmen

Im vorherigen Kapitel ist die biologische Evolution vorgestellt, durch die eine Vielzahl von unterschiedlichen Lebensformen entstanden ist, die sich sehr gut an ihre jeweilige Umwelt angepasst haben. Da dieses Vorgehen in der Biologie sehr erfolgreich ist, wurden schon im Jahr 1950 erste Versuche durchgeführt, dies auf Computersysteme zu übertragen. Hierbei wird eine bedeutend vereinfachte künstliche Evolution simuliert mit dem Ziel, ein Optimierungsproblem zu lösen [19]. Heute gibt es eine Vielzahl von verschiedenen Algorithmen, die unterschiedliche Aspekte der Evolution imitieren. Im Folgenden werden die Grundkomponenten vorgestellt und verschiedene beispielhafte Umsetzungsmöglichkeiten aufgezeigt.

Genotyp und Phänotyp

Wie bei der biologischen Evolution gibt es bei den EA Individuen, welche durch ein Genom und einen Phänotyp definiert sind [19]. Das Genom enthält alle Informationen die nötig sind, um den Phänotypen des Individuums zu erstellen. Die eigentliche Form des Phänotyps ist abhängig vom gegebenen Optimierungsproblem und kann je nach Einsatzszenario unterschiedlich umgesetzt sein [20]. Die Repräsentation des Genoms ist in vielen klassischen Algorithmen binär. In diesen Fällen wird das Genom durch einen Vektor x von der Länge l repräsentiert, welcher nur aus den Werten 0 und 1 besteht, somit gilt $x = (x_1, x_2, \dots, x_l) \in \{0, 1\}^l$ [20]. Allerdings kann diese Art der Kodierung nicht ausreichend sein. In diesen Fällen kann der Vektor auch natürliche, ganze oder rationale Zahlen enthalten [20]. Grundsätzlich sind diese Arten der Repräsentationen nur als Beispiele zu verstehen. Jeder Algorithmus kann die Repräsentation der Genome anpassen, sodass es für das Verfahren zuträglich ist. In Kapitel 2.3.1 wird die in dieser Arbeit verwendete Art der Kodierung vorgestellt.

Optimierungsproblem

Wie bereits beschrieben, ist es das Ziel von EA, Optimierungsprobleme zu lösen. Diese können aus vielen verschiedenen Bereichen wie Forschung, Wirtschaft sowie Industrie kommen [19] und unterschiedliche Anforderungen haben. Grundsätzlich muss jedes Optimierungsproblem aus einem dreier Tupel (Ω, f, \succ) bestehen [19]. Die Variable Ω repräsentiert dabei den Suchraum, also jeden möglichen Lösungsansatz. Dieser wird typischerweise mit einem Individuum und dessen Genom bzw. Phänotyp getestet. Die Funktion f ist definiert als $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und bewertet jeden Lösungsansatz aus dem Suchraum und weist diesem einen reellen Wert zu [19]. Dieser wird auch als Güte- bzw. Fitnesswert bezeichnet. Der letzte Teil des Optimierungsproblems ist eine Vergleichsrelation $\succ \in \{<, >\}$, welche angibt, ob es das Ziel, ist ein Minimum oder Maximum in der Fitnessfunktion zu finden [19]. Im Kontext von EA wird meistens das Maximum

gesucht, so auch in dieser Arbeit. Daher wird im Weiteren stets angenommen, dass die Maximierung des erreichten Fitnesswertes das Ziel ist.

Bei allen Optimierungsproblemen ist die Fitnessfunktion ein elementarer Bestandteil. Nur diese Funktion gibt dem Algorithmus ein Feedback, wie gut oder schlecht eine Lösung ist. Mithilfe dieser Funktion muss jeder EA ableiten, in welche Richtung eine Optimierung sich entwickeln soll, um möglichst effizient eine Lösung zu finden [19]. Aus diesem Grund ist die erste Anforderung an eine solche Funktion, dass sie keine absolute sondern eine graduelle Bewertung der verschiedenen Lösungsansätze bietet [19]. Beispiel für eine absolute Bewertung ist, wenn die Fitnessfunktion für eine Lösung den Wert 1 liefert, wenn das Optimierungsproblem gelöst ist und andernfalls den Wert 0. In diesem Fall kann nicht festgestellt werden, welche Änderungen der Suchparameter erfolgversprechend sind, somit ist es auch nicht möglich, diese gezielt zu ändern. Infolgedessen müssen mehr Lösungsansätze aus dem Suchraum getestet werden, was den Rechenaufwand und die benötigte Zeit erhöht. Des weiteren muss die Fitnessfunktion möglichst vollständig die Ziele des Optimierungsproblems abbilden. Andernfalls kann zwar durch den Algorithmus das Ergebnis der Fitnessfunktion maximiert werden, aber die hierdurch gefundene Lösung enthält nicht die vom Anwender gewünschten Eigenschaften [19].

Ablauf evolutionärer Algorithmen

Aus den vorherigen Kapiteln ist ersichtlich, dass Individuen aus einem Genotyp sowie Phänotyp bestehen und dass diese versuchen, ein Optimierungsproblem zu lösen. Die Aufgabe eines evolutionären Algorithmus ist es, die Individuen langfristig so anzupassen, dass sie bessere Fitnesswerte in dem Optimierungsproblem erzielen und dementsprechend eine gute Lösung finden. Hierzu werden die aus der Biologie bekannten Verfahren Selektion, Rekombination und Mutation eingesetzt. Bevor in den weiteren Kapiteln verschiedene Umsetzungen beispielhaft vorgestellt werden, wird in diesem Abschnitt der grundlegende Ablauf von EA erläutert.

Abbildung (TODO ABBILDUNG) zeigt den beispielhaften Ablauf von EA, wobei die Phasen Evaluation, Selektion, Mutation und Rekombination die größte Bedeutung haben. Bevor der eigentliche Programmablauf starten kann, muss eine erste initiale Population erzeugt werden. Wie in der biologischen Evolution, besteht diese auch in diesem Fall aus mehreren unabhängigen Individuen [20]. Im Gegensatz zum biologischen Vorbild verwenden die meisten Algorithmen eine feste Populationsgröße, da ansonsten die später benötigte Evaluationszeit und der damit verbundene Rechenaufwand stark ansteigen könnte [20]. Die für die Individuen benötigten Genome werden zufällig erstellt [19], wobei je nach Algorithmus verschiedene Zufallsverteilungen genutzt werden können.

Danach beginnt die Evaluationsphase mit der initialen Population [20]. Hierfür wird der Phänotyp für jedes Individuum mit dem entsprechenden Genom gebildet. Jeder von diesen stellt eine mögliche Lösung für das gegebene Optimierungsproblem dar. Wie im vorherigen Kapitel beschrieben, muss dieses eine Fitnessfunktion enthalten, mit welcher jeder Phänotyp bewertet wird. An dieser Stelle soll nochmals hervorgehoben werden,

dass die Gesamtheit aller Gene den Phänotyp bestimmen und daher keine Bewertung der einzelnen Gene möglich ist [20]. Die Evaluationsphase endet, wenn für alle Phänotypen ein Fitnesswert ermittelt ist. Der nächste Schritt ist die Überprüfung einer Abbruchbedingung. Trifft diese zu, wird die Ausführung des Algorithmus abgebrochen und das Genome des besten Individuums als Ergebnis zurückgegeben [19]. Je nach Umsetzung der Abbruchbedingung kann zum Beispiel überprüft werden, ob ein gewisser Fitnesswert überschritten und somit eine Lösung mit der gewünschten Genauigkeit bzw. Korrektheit gefunden wurde oder ob eine vorher definierte maximale Ausführungszeit überschritten ist.

Die Abbruchbedingung wird zu Beginn mit sehr hoher Wehrrscheinlicht nicht erfüllt sein, da die Genome nur zufällig erstellt sind und bisher kein Lernprozess durchgeführt wurde. In diesem Fall werden die Phasen Selektion, Rekombination und Mutation durchgeführt [20]. Diese werden in den folgenden Kapiteln ausführlich erläutert, daher wird in diesem Abschnitt nur ein kurzer Überblick gegeben. In der ersten Phase, der Selektion, wird auf Basis des erhaltenen Fitnesswertes für jedes Individuum festgelegt, ob und wenn ja wie viele Nachkommen dieses erzeugen darf [19]. Bei der Rekombination werden die tatsächlichen Nachkommen erzeugt. Typischerweise werden zwei, in machen Fällen auch mehr Individuen als Elterngenome ausgewählt und gekreuzt. Bei diesem Vorgang wird das genetische Material, welches in den Genomen der Eltern-Individuen enthalten ist, gemischt und an das neu erstellte Kind-Individuum übertragen. Das Ziel dieser Operation ist, dass das Kind immer einen Teil der Gene von beiden Eltern erhält und somit auch Eigenschaft von beiden vereint. Langfristig sollen sich durch ein solches Verfahren nur die besten Gene durchsetzen [19]. Die letzte Phase ist die Mutation. In diesem Schritt besteht für jedes neu erstellte Individuum die Wahrscheinlichkeit, dass ein kleiner Teil des Genoms zufällig abgeändert wird [21]. Die Art der Mutation ist hierbei abhängig von der Umsetzung des Genotypen und dem Algorithmus. Bezüglich der drei Phasen muss verdeutlicht werden, dass die Selektion auf Basis des Phänotypen mit dem Fitnesswert erfolgt, die Rekombination und Mutation hingegen auf Basis des Genotypen. Somit können keine Eigenschaften, die im Phänotyp gespeichert sind auf die Nachkommen übertragen werden [20].

Nach Abschluss dieser drei Phasen sind die neuen Individuen fertig erstellt. Da, wie bereits in diesem Kapitel beschrieben, die Populationsgröße meistens begrenzt ist, wird an dieser Stelle typischerweise die Elterngeneration komplett entfernt und durch dieselbe Anzahl an Nachkommen ersetzt [19]. Allerdings gibt es auch andere Ansätze, bei denen nicht so viele neue Individuen gleichzeitig erstellt werden und diese dann direkt in die bestehende Population integriert werden können [22]. Die neue Population mit den neuen Individuen durchläuft dieselben Schritte wie die vorherige Population. Ein kompletter Durchlauf des vorgestellten Zyklus wird als eine Generation bezeichnet [19]. Häufig wird die neu erstellte Population daher auch als neue Generation bezeichnet.

Selektion

Bei EA werden viele Individuen eingesetzt, um verschiedene Lösungsansätze gleichzeitig zu betrachten. In der Phase der Selektion wird bestimmt, welche Individuen als Elternteil für die nächste Generation ausgewählt werden und wie viele Nachkommen ihnen zustehen. Bei einem solchen Auswahlverfahren ist zwischen zwei grundlegenden Umsetzungen zu unterscheiden. Entweder kann allen Individuen einer Generation dieselbe Menge an Nachkommen zugewiesen werden oder die Anzahl ist abhängig von dem erreichten Fitnesswert. Typischerweise wird die zweite Variante in EA verwendet, welche auch als fitnessproportionale Selektion bezeichnet wird. Die erste Variante erzeugt keinen Selektionsdruck, da die Individuen unabhängig von ihrer Leistung Nachkommen zugewiesen bekommen. Bei der zweiten Variante werden Individuen mit höheren Fitnesswerten bevorzugt, mit dem Ziel, dass sich die positiven Eigenschaften der erfolgreichen Individuen durchsetzen und schlechte aussterben. Dennoch ist es nicht das Ziel, nur die allerbesten Genome als Elternteile auszuwählen. Wäre dies der Fall, würde die Population sehr schnell konvergieren, ihre Vielfalt verlieren und nur noch ähnliche Lösungsansätze bieten. Somit wird es unwahrscheinlich, dass neue unbekannte, aber eventuell bessere Lösungsstrategien gefunden werden [19].

Der genaue Selektionsvorgang, wie er mit Algorithmus dieser Arbeit umgesetzt ist, wird in Kapitel 2.3.4 erläutert. Im Folgenden werden zwei verschiedene Varianten der fitnessproportionalen Verfahren vorgestellt, die in anderen Algorithmen als Selektionsfunktion verwendet werden. Bei diesen wird die Anzahl an Nachkommen durch den jeweils erreichten Fitnesswert beeinflusst [19].

1. Probabilistische Selektion:

Einer der bekanntesten Umsetzungen ist die probabilistische Selektion, welche grundsätzlich einfach zu implementieren ist. Im ersten Schritt werden die erreichten Fitnesswerte f der einzelnen Individuen i in der Population P aufsummiert. Im zweiten Schritt wird für jedes Individuum j die Wahrscheinlichkeit $Pr[j]$ berechnet, welche angibt, wie groß die Chance ist, dass dieses als Elternteil ausgewählt wird. Hierzu muss der erhaltene Fitnesswert durch die bereits berechnete Summe geteilt werden. Somit ergibt sich die Formel $Pr[j] = \frac{f_j}{\sum_{i \in P} f_i}$. Diese Art der Selektion ist in vielen Anwendungsfällen sehr erfolgreich. Allerdings kann es vorkommen, dass zum Beispiel bei sehr hohen Fitnesswerten die prozentualen Unterschiede zwischen guten und schlechten Individuen sehr gering sind und infolgedessen der Selektionsvorteil für gute Lösungen niedrig ist. Ein möglicher Lösungsansatz besteht in der Skalierung der Fitnesswerte, sodass auch bei hohen Durchschnittswerten kleine Steigerungen einen evolutionären Vorteil bieten [19]. Ein weiterer Lösungsansatz ist die Verwendung der rangbasierten Selektion, welche im Folgenden vorgestellt wird.

2. Rangbasierte Selektion:

Bei der rangbasierten Selektion ist der tatsächlich erhaltene Fitnesswert nicht von Bedeutung. Die Individuen werden bezüglich ihrer Fitness geordnet. Das

beste Individuum erhält die größte und das schlechteste Individuum die geringste Wahrscheinlichkeit, als Elternteil ausgewählt zu werden [19].

Sind die Wahrscheinlichkeiten für alle Individuen berechnet, ist im letzten Schritt festzulegen, welche Genome tatsächlich als Elternteile ausgewählt werden und wie viele Nachkommen diese erzeugen. Bei der fitnessproportionalen Selektion wird hierfür ein Zufallsgenerator benötigt, welcher basierend auf den Wahrscheinlichkeiten die Elterngenome auswählt. Dies wird häufig mit einem Roulette-Rad veranschaulicht. Die Felder am Rand der Scheibe entsprechen den verschiedenen Individuen und die Größe ist proportional zur berechneten Wahrscheinlichkeit. Für jedes auszuwählende Elternindividuum wird der Zeiger zufällig gedreht und das Individuum entsprechend zu dem gewählten Feld wird verwendet (TODO ABBILDUNG). Dieses Verfahren kann einen Nachteil haben. Obwohl das beste Individuum die höchste Wahrscheinlichkeit hat, als Elternteil ausgewählt zu werden, kann es auf Basis des Zufalls dazu kommen, dass dieses nicht verwendet wird. Da typischerweise die Population am Ende des Evolutionszyklus ersetzt wird, würde das genetische Material dieses Individuums verloren gehen [19].

Um einen solchen Verlust zu verhindern, kann bei der Selektion zusätzlich ein sogenannter Elitismus verwendet werden. Hierbei wird typischerweise der Genotyp des besten Individuums ausgewählt, kopiert und unverändert wieder in die nächste Generation eingesetzt [23]. Zu Beachten ist hierbei, dass im weiteren Verlauf ein Nachkomme weniger produziert wird um eine konstante Populationsgröße zu garantieren.

Rekombination

Die Phase der Rekombination wird auch als *Crossover* bezeichnet und findet nach der Selektion statt. Die Aufgabe von dieser ist, die ausgewählten Elternindividuen zu nutzen um neue Nachkommen zu erstellen. Typischerweise werden zwei, in einigen Fällen noch mehr Elternteile kombiniert um mindestens ein Kind-Individuum zu erzeugen [19]. Die Rekombination gilt als eine der wichtigsten Phasen, da die Nachkommen tendenziell bessere Ergebnisse erzielen sollen als die Elternteile [9]. Wie auch bei anderen Phasen der EA gibt es verschiedene Arten der Umsetzung, die als kombinierende, interpolierende und extrapolierende Selektion bezeichnet werden [19]. Die bekannteste dieser drei Varianten ist die kombinierende Selektion, welche sowohl in dieser Arbeit als auch in vielen anderen Algorithmen verwendet wird. Die beiden Alternativen werden bedeutend seltener gewählt und sind auch in der Literatur oft nicht erwähnt. Dennoch werden im Folgenden alle Varianten kurz vorgestellt.

Die kombinierende Rekombination ist stark von der Biologie inspiriert. Bei diesem Vorgang werden die Genome der Elternteile zuerst nebeneinander aufgereiht. Im zweiten Schritt wird zufällig entschieden, welcher Abschnitt von welchem Elternteil für das Genom des Nachkommen verwendet werden sollen [19]. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass große Informationsblöcke, welche unabhängig voneinander optimiert wurden und sinnvolle Funktionen realisieren, von den Elternteilen geerbt werden können [9]. Der

aus der Rekombination entstehenden Nachkomme kann hierdurch einen Vorteil bei der Evaluation besitzen und letztendlich eine bessere Lösung für das Optimierungsproblem bieten. Da diese Art der Rekombination keine neuen Gene erstellt bzw. bestehende modifiziert, ist der Erfolg abhängig davon, ob die Population eine gewisse Diversität bietet, sodass bei der Rekombination tatsächlich verschiedene Gene kombiniert werden können [19]. In der praktischen Umsetzung muss zuletzt noch entschieden werden, an welchen Stellen eine Rekombination möglich ist [21]. Bei der uniformen Rekombination wird für jedes einzelne Gen unabhängig zufällig entschieden, von welchem Elternteil es übernommen wird [19]. Allerdings gibt es auch andere Umsetzungen, bei denen die Gene in Gruppen eingeteilt werden und dann zwischen diesen zufällig entschieden wird.

Bei der interpolierenden Rekombination, werden die einzelnen Gene nicht direkt von einem Elternteil übernommen, stattdessen werden sie gemischt, sodass ein neuer Wert entsteht, der sich zwischen den Werten der Elternteile befindet. Im Gegensatz zur kombinierenden Selektion, welche versucht die Diversität zu erhalten, wird diese hierbei deutlich verringert. Aus diesem Grund ist es notwendig, dass zu Beginn eine Population mit einer großen Diversität vorhanden ist, sodass der Suchraum des Optimierungsproblems ausgiebig überprüft wird. Ein Beispiel für eine solche technische Umsetzung ist die sogenannte Arithmetische-Rekombination, welche für reellwertig repräsentierte Genome verwendet werden kann. Angenommen die Werte A_i und B_i repräsentieren die Gene der Eltern A und B , dann wird für jedes Gen i eine Zufallszahl u zwischen 0 und 1 gewürfelt. Das Gen C_i des Nachkommen C wird dann berechnet mit $C_i = u \cdot A_i + (1 - u) \cdot B_i$ [19].

Die letzte Variante ist die extrapolierende Rekombination, welche mit mehreren Elternteilen versucht, eine Prognose darüber abzugeben, wo im Lösungsraum eine Steigerung des Fitnesswertes möglich ist und dementsprechend versucht die Genome der Nachkommen zu ändern. Somit kann diese Art der Rekombination auch neue Gene erstellen. Ein solches Verfahren hat allerdings zwei Nachteile. Um eine Prognose abzugeben, ist es erstens nötig ein Grundwissen über den Lösungsraum zu haben, zweitens besteht die Gefahr, dass die vorgegebene Richtung nicht korrekt und die Funktion danach nicht fähig ist, eine systematische Suche durchzuführen [19].

Mutation

Der letzte Schritt bevor die bestehende Population durch die neu erstellten Individuen ersetzt wird ist typischerweise die Mutation. Allerdings ist die Funktionsweise und Relevanz von dieser Phase stark abhängig von der verwendeten Kodierung und dem eigentlichen Algorithmus [19]. Zum Beispiel wird in Quelle [23] gar keine Reproduktion verwendet und die Optimierung wird nur mithilfe der Mutation umgesetzt während in anderen Quellen, wie zum Beispiel in [24], diese Phase als untergeordnet beschrieben wird welche nur selten eingesetzt werden sollte.

Wird die Mutation häufig verwendet erfüllt sie zwei Aufgaben. Das erste Ziel ist die Feinabstimmung der einzelnen Individuen, sodass das tatsächliche Optimum so genau

wie möglich erreicht wird. Das zweite Ziel ist die Erforschung des Suchraums, welche stichprobenartig durchgeführt wird und das Ziel hat, ein besseres Optimum zu finden [19]. Wird die Mutation selten eingesetzt, müssen die Funktionen Feinabstimmung und Erforschung durch andere Komponenten, wie zum Beispiel der Rekombination, durchgeführt werden. In diesem Fall ist es das Ziel der Mutation neue Diversität in die Population zu bringen beziehungsweise diese zu erhalten [19]. Denn wie bereits im vorherigen Kapitel beschrieben, ist vor allem bei der viel verwendeten kombinieren Rekombination, die Diversität sehr wichtig, allerdings wird diese meistens durch die Rekombination selbst verringert.

Da die Umsetzung der Mutation sowohl von der Kodierung und dem Algorithmus abhängt, gibt es keine Empfehlungen, welche Implementierung besonders viele Vorteile bietet. Im Folgenden werden zwei mögliche Beispiele vorgestellt, wobei das erste für Individuen mit einer binären und das zweite für reellwertigen Repräsentation angewendet werden kann [19]. Die einfachste Mutation ist die Binäre-Mutation, welche für Genome mit einer binären Repräsentation verwendet werden kann. Bei der Mutation wird für jedes Bit eine Zufallszahl u zwischen 0 und 1 gewürfelt. Ist diese kleiner als die festgelegte Mutationswahrscheinlichkeit p_m , dann wird das Bit invertiert. Sind die Individuen durch reellwertige Zahlen repräsentiert ist die sogenannte Gauss-Mutation eine mögliche Umsetzung. Bei dieser wird für jedes Gen eine Zufallszahl basierend auf einer Gauss-Verteilung gewählt, wobei eine zuvor festgelegte Standardabweichung σ die Verteilung beeinflusst. Die hierdurch erhaltene Zahl wird dann auf den bereits bestehenden Wert addiert [19].

2.2.3 Neuroevolution

Wie im vorherigen Kapitel erläutert, sind EA Verfahren um möglichst gute Näherungslösungen für verschiedene Optimierungsprobleme zu finden. Für die in Kapitel 2.1 vorgestellten KNN wird ein Verfahren benötigt, welches die verschiedenen anpassbaren Parameter optimiert. Es ist dementsprechend möglich, die evolutionären Prinzipien zur Optimierung von KNN einzusetzen. Dies wird als Neuroevolution bezeichnet [25]. Algorithmen dieser Art sind somit eine Alternative zu den klassischen Verfahren wie zum Beispiel dem Backpropagation Algorithmus [26].

Im Vergleich zu diesem haben neuroevolutionäre Verfahren sowohl Vor- als Nachteile, welche ausführlich in Kapitel (TODO Kapite) beschrieben werden. Trotzdem soll ein großer Vorteil bereits hier genannt sein. Das Ziel von den meisten neuroevolutionären Algorithmen ist das Optimieren von Verbindungsgewichten und Schwellwerten. Einige Verfahren versuchen zusätzlich die Struktur bzw. Topologie des KNN zu optimieren, sodass diese nicht mehr manuell durch einen Entwickler festgelegt werden muss. Wie in Kapitel 2.1.4 beschrieben, ist die Topologie ein entscheidender Faktor und kann das erfolgreiche Lösen maßgeblich beeinflussen. Diese Algorithmen werden als *Topology and Weight Evolving Artificial Neural Network* (TWEANN) Verfahren bezeichnet [27].

Auch der in Kapitel 2.3 vorgestellte Algorithmus optimiert sowohl die Topologie als

auch die Gewichte eines KNN. Im Folgenden wird der Ablauf von neuroevolutionären Algorithmen vorgestellt und die Besonderheiten erläutert. Danach wird auf die Vor- und Nachteile eingegangen.

Ablauf Neuroevolution

Der Grundsätzlich Ablauf von neuroevolutionären Algorithmen ist fast identisch zu den klassischen EA. Auch bei diesen gibt es eine Population, welche aus verschiedenen Individuen bestehen, die einen Genotyp und Phänotyp besitzen. Letzteres besteht bei der Neuroevolution aus einem KNN, welches durch den Genotyp kodiert ist. Auch die Definition des Optimierungsproblems ist identisch zu der Erklärung in Kapitel 2.2.2. Ein Phänotyp, in diesem Fall ein KNN, versucht das Optimierungsproblem zu lösen und erhält hierdurch einen Fitnesswert, welcher angibt wie gut oder schlecht die Lösung ist. Wenn dieser Wert für alle Mitglieder einer Population berechnet ist, beginnen die Phasen Selektion, Rekombination und Mutation. Hierdurch werden neue Individuen mit neuen Genotypen und Phänotypen erstellt welche dann die vorherige Population ersetzen. Dieser Zyklus wird solange wiederholt, bis eine Abbruchbedingung erreicht ist. Natürlich ist es möglich, dass die praktische Umsetzung je nach Algorithmus angepasst wird. Einige grundlegende Anpassungen werden in den Folgenden Abschnitten erläutert. Wie die angesprochenen Punkte von dem in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus umgesetzt werden, wird in Kapitel 2.3 erläutert.

Genotyp und Phänotyp

Eine Komponente die auf jeden Fall angepasst werden muss, ist der Genotyp. Dieser muss alle optimierbaren Parameter für den Phänotyp kodieren. Typischerweise umfasst dies die Struktur des Netzes, die Gewichte der Verbindungen sowie die Schwellwerte [27]. Die Propagierungs-, Aktivierungs- und Ausgabefunktion müssen nur enthalten sein, wenn diese ebenfalls durch den EA angepasst werden. Hierdurch ergibt sich die Frage, wie diese Informationen im Genom kodiert werden sollen, sodass auch eine erfolgreiche Durchführung der Rekombinations- und Mutationsphase möglich ist.

Grundsätzlich gibt es zwei verschiedene Kodierungsansätze, die ein Algorithmus verwenden kann. Diese werden als direkte und indirekte Kodierung bezeichnet. Bei einer direkten Kodierung wird im Genom jede einzelne Verbindung und jedes Neuron explizit spezifiziert, sodass diese einfach im Phänotyp übernommen werden können. Diese Art der Kodierung wird sehr häufig verwendet, da sie einfach zu implementieren ist und auch die Rekombination und Mutation damit gut umsetzbar sind. Die Alternative ist die indirekte Kodierung. Diese spezifiziert Regeln, die angeben wie aus einem Genom ein KNN erstellt werden soll. Der Vorteil hiervon ist, dass nicht jede Verbindung und jedes Neuron einzeln kodiert werden müssen und die Repräsentation dementsprechend kompakter ist und somit weniger Rechenkapazität zur Speicherung benötigt wird [27]. Nachteil von dieser Methode ist, dass die Rekombination und Mutation komplexer umzusetzen sind. Im Folgenden wird nur noch auf die direkte Kodierung Bezug genommen, da diese in dieser

Arbeit verwendet wird.

Theoretisch kann für eine direkte Kodierung des Genoms, wie bei klassischen EA, eine binäre Repräsentation verwendet werden. Umsetzbar wäre dies mit einer Matrix, welche für jede mögliche Verbindung angibt ob diese besteht oder nicht. Allerdings hat eine solche Kodierung einige Nachteile, weswegen sie für diesen Anwendungsfall eher ungeeignet ist. Ein Grund ist der benötigte Speicherplatz für ein einzelnes Genom. Die Matrix enthält für ein KNN mit n Neuronen insgesamt n^2 Einträge für die möglichen Verbindungen [27]. Für große neuronale Netze skaliert dieser Ansatz schlecht.

Alternativ ist hierzu eine Graphen-Kodierung, welche auch von vielen TWEANN Algorithmen verwendet wird. Eine mögliche Umsetzung hiervon ist in der Arbeit [28] von Pujol und Poli vorgestellt. Bei diesen besteht die Kodierung aus zwei Teilen. Der erste Teil beschreibt die Struktur des Graphen beziehungsweise des KNN während der zweite Teil ein linearer Vektor ist, welcher die Neuronen und Verbindungen enthält. In dieser Arbeit wird eine weitere Variante verwendet, welche ausführlich in Kapitel 2.3.1 erläutert wird.

Rekombination

Chronologisch gesehen, findet die Selektion vor der Rekombination statt und würde an dieser vorgestellt werden. Da sich diese Phase nicht ändert, wird im Folgenden direkt mit der Rekombination fortgefahren. Prinzipiell ist das Verfahren dasselbe wie in Kapitel 2.2.2. Die Selektion hat zwei Elterngenome ausgewählt und diese werden im Rahmen der Rekombination zu einem neuen Genom kombiniert. Typischerweise würde bei diesem Vorgang zufällig entschieden, welche Verbindung von welchem Elternteil übernommen werden soll. Das Ziel ist, einen KNN zu erzeugen, welches in den meisten Fällen die positiven Eigenschaften der Eltern erbt und somit insgesamt besser wird. Eine Schwierigkeit die hierbei, im Bezug zu Neuroevolution entstehen kann wird als das *Competing Conventions* Problem bezeichnet [27].

Der Begriff *Competing Conventions* beschreibt ein Phänomen, bei dem mehrere KNN dieselbe Lösung für ein Optimierungsproblem bieten, aber sich die Repräsentationen der Genome trotzdem unterscheiden. Ein solches Beispiel ist in Abbildung (TODO Abbildung) dargestellt. Die beiden KNN besitzen je drei verdeckte Neuronen (4, 5, 6) mit den dazugehörigen Verbindungen in den Farben blau (B), rot (R) und grün (G). Die tatsächlichen Gewichte sind hierbei nicht von Interesse und werden deshalb für eine bessere Übersichtlichkeit durch die Farben repräsentiert. Das erste KNN kann beispielsweise durch den Vektor (B, R, G) und das zweite durch (G, R, B) kodiert werden. Es wird hierbei angenommen, dass in der Kodierung die einzelnen Gewichte für alle Verbindungen enthalten sind.

Wie aus der Abbildung zu Erkennen ist, sind die beiden KNN symmetrisch und produzieren in Folge dessen für dieselbe Eingabe auch dasselbe Ergebnis. Dennoch unterscheiden

sich die Genotypen bezüglich ihrer Kodierung. Werden diese beiden KNN durch die Selektion ausgewählt um einen Nachkommen zu erzeugen, wird das *Competing Conventions* Phänomen wahrscheinlich zu einem Problem führen.

Wie bei traditionellen EA wird auch bei der Neuroevolution typischerweise zufällig entschieden, von welchem Elternteil welches Gen übernommen werden soll. Angenommen, es werden die ersten beiden Gene von dem linken Elternteil übernommen und das letzte vom rechten, dann wäre das daraus resultierende neue Genom kodiert mit (B, R, B). Es ist ersichtlich, dass bei diesem Vorgang 1/3 der Informationen verloren gegangen sind beziehungsweise nicht vererbt wurde. Dies ist in den meisten Fällen ein großes Problem, da der fehlende Teil mit hoher Wahrscheinlichkeit einen notwendigen Beitrag für eine Lösungsansatz kodiert hat, der das Elterngenom erfolgreich gemacht hat. Aus diesem Grund wird das neu erstellte Individuum wahrscheinlich weniger erfolgreich sein als seine Elternindividuen sein, erhält einen dementsprechend niedrigeren Fitnesswert und wird letztendlich aussterben [27]. Tritt dieser Fall nur bei einem einzelnen Genom in einer Population auf, sind die Auswirkungen in vielen Fällen vernachlässigbar. Allerdings gibt es für ein KNN mit x verdeckten Neuronen in einer Schicht $x!$ viele Kombinationsmöglichkeit dieselbe Lösung durch unterschiedliche Genome zu repräsentieren [27]. Somit ist die Wahrscheinlichkeit, dass das *Competing Conventions* Problem eintritt relativ hoch. Die Folgen sind, dass entweder viel Rechenzeit für Genome verwendet wird, die mit hoher Wahrscheinlichkeit keine besseren Lösungen bereit stellen und dadurch das Optimierungsverfahren bedeutend länger benötigt, oder dass das Verfahren scheitert, da keine ausreichend gute Lösung gefunden werden kann.

Bei den TWEANN Algorithmen ist das *Competing Conventions* Problem noch größer [27]. Wie bereits beschrieben, versuchen diese auch die Struktur des KNN zu optimieren und können im Zuge dessen neue Neuronen und Verbindungen hinzufügen. Im nächsten Kapitel wird hierauf genauer eingegangen. An dieser Stelle sei vorweg genommen, dass im Laufe des Optimierungsverfahrens eine Population mit unterschiedlichen Strukturen und Topologien entstehen kann. Hierbei stellt sich die Frage, wie unterschiedliche KNN rekombiniert werden können, wenn die Genome unterschiedlich groß sind und nicht zuzuordnen ist, welche Gene der Eltern rekombiniert werden können. Dies ist die schwierigste Form des *Competing Conventions* Problems [27]. Wie der in dieser Arbeit verwendete Algorithmus dieses Problem löst, ist in Kapitel 2.3 erläutert.

Mutation

Neuroevolutionäre Algorithmen setzen in der Regel die Mutation häufig ein. Hierbei wird zwischen zwei Arten unterschieden. Bei der ersten Art werden nur die Verbindungsgewichte und Schwellwerte mutiert. Hierfür kann die bereits in Kapitel 2.2.2 vorgestellte Gauss-Mutation verwendet werden, wobei der erhaltene Zufallswert auf das Gewicht bzw. den Schwellwert addiert wird [29]. Die zweite Art verändert die Topologie und wird als strukturelle Mutation bezeichnet. Diese Art wird somit nur für die TWEANN Verfahren benötigt, welche neue Neuronen und Verbindungen dem KNN hinzuzufügen können [27].

Das eigentliche Hinzufügen von neuen Strukturen ist technisch einfach umzusetzen. Zum Beispiel kann eine neue Verbindung mit einem zufälligen Gewicht jederzeit zwei zuvor nicht verbundene Neuronen verknüpfen. Allerdings wird hierdurch der Fitnesswert in den meisten Fällen initial sinken, da es unwahrscheinlich ist, dass eine zufällige Struktur eine nützliche Funktionalität oder Teillösung bietet. In Folge dessen sinkt auch die Chance, dass das Genom bei der Selektion in der nächsten Generation als Elternteil ausgewählt wird und die neue Struktur an die Nachkommen vererbt wird. So kommt es häufig vor, dass die strukturellen Innovationen direkt in den nächsten Generation verloren gehen, auch wenn sie für eine erfolgreiche Lösung nötig wären. Die daraus resultierende Herausforderung für TWEANN Verfahren ist, neue Innovationen am Anfang zu schützen, sodass der Algorithmus diese optimieren kann. Nur so ist es möglich, neue Strukturen langfristig in die Population zu integrieren [27].

Eine mögliche Lösung hierfür ist in der Arbeit von Angeline, Saunders und Pollack vorgestellt. Hierbei werden neue Neuronen ohne jegliche Verbindungen in das KNN eingefügt, während neue Verbindungen initial das Gewicht 0 haben. Die so hinzugefügten Strukturen haben anfänglich keinen Effekt auf das KNN. Ziel hiervon ist, dass der Fitnesswert nicht absinkt und sich die Strukturen im Laufe von mehreren Generation selbstständig entwickeln [30]. Diese Umsetzung ist nicht ideal, da die Strukturen unter Umständen nicht richtig in das KNN integriert werden aber trotzdem die benötigte Rechenkapazität erhöhen [27].

Der in Kapitel 2.3 vorgestellte Algorithmus verfolgt einen anderen Ansatz, bei dem ähnliche KNN einer Spezies zugeordnet werden. Ein Individuum soll nicht mehr mit der ganzen Population konkurrieren, sondern nur mit denen seiner Spezies. Dies wird auch als *niching* bezeichnet. Eine neue große strukturelle Mutation würde einer neuen Spezies zugeordnet und kann innerhalb dieser entwickelt und optimiert werden. Hierfür wird eine Kompatibilitätsfunktion benötigt, welche bestimmen kann, ob ein Genom einer Spezies zugehörig ist. Die Umsetzung von dieser Funktion, wird durch das *Competing Conventions* Problem erschwert [27]. In Kapitel 2.3.4 wird hierauf genauer eingegangen.

Initiale Population

Die initiale Population der ersten Generation enthält zufällig erstellte KNN. Die hierfür benötigten Verbindungsgewichte und Schwellwerte werden häufig zufällig mithilfe einer Gauss-Verteilung gewählt [29]. Die Wahl der initialen Topologie kann sich aber stark unterscheiden. Bei den neuroevolutionären Algorithmen, welche nur die Verbindungsgewichte und Schwellwerte optimieren, wird diese zu Beginn einmalig für alle KNN festgelegt und ändert sich auch nicht im Lauf des Verfahrens.

Bei den TWEANN Algorithmen hingegen, können verschiedene initiale Topologien verwendet werden, welche unter anderem die Laufzeit des Algorithmus stark beeinflussen können. Viele dieser Algorithmen erstellen zu Beginn verschiedene zufällig gewählte

Topologien, mit dem Ziel Diversität in die Population zu bringen. Ein Nachteil dieser Strategie ist, dass hierbei ungeeignete KNN entstehen können, bei denen beispielsweise nicht alle Eingabeneuronen mit allen Ausgabeneuronen verbunden sind. Zudem ergibt sich in diesem Fall noch ein weiteres Problem [27]. Grundsätzlich ist es sinnvoll, die kleinst mögliche Struktur zu wählen, die trotzdem einen mit größeren KNN vergleichbaren Fitnesswert für ein Optimierungsproblem erzielt [31]. Diese hat, im Vergleich zu größeren Strukturen, weniger anpassbare Parameter, was generell die benötigte Optimierungszeit reduziert. Wenn die Topologien zufällig erstellt sind, werden hierbei viele unnötige Strukturen enthalten sein, was zu einem größeren Suchraum führt und die Laufzeit des Optimierungsverfahrens erhöht [27].

In einem solchen Fall muss das Optimierungsverfahren versuchen die Größe des KNN aktiv zu minimieren. Ein Ansatz hiervon ist in der Arbeit von Zhang und Mühlenbein beschrieben, in welcher die Größe des KNN den Fitnesswert beeinflusst. In diesem Fall haben kleinere KNN bei gleicher Performance im Optimierungsproblem einen größeren Fitnesswert und dementsprechend eine größere Chance bei der Selektion ausgewählt zu werden. Das endgültige Ziel hiervon ist, dass langfristig nur die benötigten Strukturen enthalten sind [31]. Auch wenn die zugrunde liegende Idee gut ist, kann es in der Praxis schwierig sein zu entscheiden, wie viel Einfluss die Größe des KNN tatsächlich auf den Fitnesswert haben soll [27].

Eine weiterer Lösungsansatz ist das Starten mit einer minimalen Struktur, sodass das KNN zu Beginn gar keine verdeckten Neuronen besitzt. Neue Strukturen werden nur integriert, wenn sie einen höheren Fitnesswert ermöglichen. Der Vorteil von dieser Strategie ist, dass keine Rechenzeit verwendet werden muss um unnötige Strukturen zu entfernen und zusätzlich die Anzahl an anpassbaren Parametern gering ist [27].

2.2.4 Neuroevolution im Vergleich

Grundsätzlich wächst das Interesse an neuroevolutionäre Algorithmen und in vielen Anwendungsfällen sind bereits gute Ergebnisse, auch im Vergleich mit anderen Ansätzen, erzielt worden [25]. Trotzdem werden Algorithmen dieser Art oft mit Skepsis betrachtet [25] und weniger eingesetzt als gradientenbasierte Verfahren beispielsweise der Backpropagation Algorithmus. Daher wird in vielen Arbeiten, wie zum Beispiel in [21, 25, 23, 26], ein Vergleich zwischen auf Gradienten basierenden Verfahren und neuroevolutionären Algorithmen gemacht. In diesem Kapitel werden einige Vor- und Nachteile vorgestellt die häufig in diesem Zusammenhang genannt werden.

Für einen aussagekräftigen Vergleich müssen neuroevolutionäre Algorithmen zuvor noch einer Art des Lernens zugeordnet werden, da sich die Aufgaben und Anwendungsfälle in diesen stark unterscheiden können. Die drei Arten, das überwachte, unüberwachte und bestärkende Lernen sind in Kapitel 2.1.6 vorgestellt. Neuroevolutionäre Algorithmen werden hierbei der letzten Art zugeordnet [26]. Häufig werden hierfür zwei Gründe genannt. Erstens ist es das Ziel von bestärkendem Lernen, den insgesamt erhaltenen

reward zu maximieren [23], was Vergleichbar mit dem Fitnesswert von neuroevolutionären Algorithmen ist. Zweitens haben Sutton und Barto bestärkendes Lernen in ihrer Arbeit als eine Methode beschrieben, welche MDP Probleme lösen kann. Das MDP Problem ist in Kapitel 2.1.6 vorgestellt und beschreibt die Interaktion zwischen einem Agenten und seiner Umgebung. Hierbei kann der Agent als ein Individuum von neuroevolutionären Algorithmen betrachtet werden und die Umgebung als Optimierungsproblem.

Ein grundsätzlicher Vorteil von neuroevolutionären Algorithmen ist, dass durch die vielen unterschiedlichen Individuen unterschiedliche Lösungsansätze überprüft werden können. Dies ermöglicht es den Algorithmen lokale Optima zu überwinden und die Suche nach dem globalen Optimum weiter fortzuführen [21]. Dies kann für gradientenbasierten Verfahren schwierig sein. Ein weiterer Vorteil ist, dass bei neuroevolutionären Algorithmen gar keine Gradienten berechnet werden müssen [21]. Dies kann sehr aufwändig sein, wenn zum Beispiel das KNN viele Rückkopplungen enthält oder unmöglich wenn beispielsweise die binäre Schwellwertfunktion als Aktivierungsfunktion verwendet wird [26]. Für die neuroevolutionären Algorithmen wird die Fitnessfunktion benötigt.

Allerdings kann diese einfache Evaluation zu einem Nachteil werden, wenn beispielsweise das Optimierungsproblem bzw. die Umwelt verschiedene Startzustände hat. So kann ein Individuum mit einem schlechten Lösungsansatz durch Zufall einen einfachen Startzustand erhalten und so unter Umständen einen höheren Fitnesswert erzielen als ein besserer Lösungsansatz von einem anderen Individuum, welches einen ungünstigen Startzustand erhalten hat. Hierdurch werden einige gute Individuen verloren gehen, da diese durch den geringen Fitnesswert nicht von der Selektion ausgewählt werden. Die Fitnessfunktion wird in einem solchen Fall als verrauscht oder *noisy* bezeichnet. Ein möglicher Lösungsansatz hier ist, dass alle Individuen immer denselben Startzustand erhalten. Dies verhindert das vorgestellte Problem, aber es entsteht ein neues. Die Individuen lernen nur eine Lösung für den ausgewählten Startzustand und sind in hoher Wahrscheinlichkeit in anderen, ungünstigeren Startzuständen unbrauchbar. Eine Alternative ist, dass jedes Individuum mehrmals mit verschiedenen Startzuständen getestet wird und der Fitnesswert von allen akkumuliert wird [26]. Nachteil von diesem Ansatz ist, dass sich die Laufzeit linear erhöht je mehr verschiedene Startzustände getestet werden.

Ein weiteres Problem von neuroevolutionären Algorithmen ist die Laufzeit. Das Entwickeln von unterschiedlichen Lösungen durch verschiedene Individuen benötigt viel Rechenzeit [21]. Für eine Population mit beispielsweise 1000 Mitgliedern werden pro Generation 1000 KNN erstellt, von denen mit jedem versucht wird das Optimierungsproblem zu lösen. Die hierfür benötigte Laufzeit ist oft höher als bei gradientenbasierten Verfahren, bei welchen nur ein KNN evaluiert werden muss [26]. Gleichzeitig kann dies aber auch ein großer Vorteil für neuroevolutionäre Algorithmen sein, wie unter anderem in Quelle [23] gezeigt ist. Da die einzelnen Individuen unabhängig voneinander sind, lässt sich die Evaluation von diesen gut parallelisieren [21]. Der Vorteil hiervon ist, dass eine Reduzierung der Ausführungszeit unabhängig von Limitierungen einzelner Prozessoren möglich ist [32]. Das bedeutet, dass im Gegensatz zu sequentiellen Programmen, bei

denen die Ausführungszeit nur durch einen schnelleren Prozessor gesenkt werden kann, die Laufzeit von parallelisierbaren Algorithmen auch durch das Hinzufügen von weiteren Prozessoren verringert werden kann. Dies ist es in vielen Fällen einfacher und kostengünstiger umzusetzen.

Wie erfolgreich eine Parallelisierung sein kann, haben Such u. a. in ihrer Arbeit gezeigt. Hierbei wurde ein KNN zum Lösen von Atari Spielen optimiert. Die hierfür benötigte Trainingszeit mit einem einfachen, parallelisierten neuroevolutionären Algorithmus hat ungefähr vier Stunden gedauert. Verglichen wurde das Ergebnis mit zwei gradientenbasierten Verfahren, welche für ein vergleichbares Ergebnis mehrere Tage Trainingszeit benötigen haben [23]. Dies zeigt die Leistungsfähigkeit von parallelisierten neuroevolutionären Algorithmen.

2.2.5 TWEANN?

2.2.6 Competing Convention Problem

2.3 NeuroEvolution of Augmenting Topologies

Der in dieser Arbeit verwendete Algorithmus heißt *NeuroEvolution of Augmenting Topologies* (NEAT), welcher im Jahr 2002 von Stanley und Miikkulainen vorgestellt wurde. Bei der Veröffentlichung hat NEAT für die meisten Optimierungsprobleme im Vergleich zu anderen Verfahren schneller Lösungen gefunden, obwohl es neben den Gewichten des KNN auch die Struktur optimiert [27]. Somit gehört der Algorithmus zur Gruppe der TWEANN Algorithmen. Heute gilt NEAT immer noch als einer der bekanntesten Vertretern der neuroevolutionären Algorithmen und dient als Basis für viele Erweiterungen wie zum Beispiel HyperNEAT, cgNEAT, ...

Für die guten Ergebnisse sind drei Eigenschaften besonders relevant [27]:

1. Erfolgreiche Reproduktion trotz verschiedener Strukturen
2. Schützen von neuen Innovationen durch verschiedene Spezies
3. Wachsen einer minimalen Struktur

In diesem Kapitel wird die grundsätzliche Funktionsweise von NEAT erläutert, wie sie in der originalen Publikation vorgestellt ist. Wenn nicht anderweitig gekennzeichnet, beziehen sich alle Informationen aus diesem Kapitel auf Quelle [27]. Für eine bessere Lesbarkeit wird in diesem Kapitel auf weitere Zitierungen verzichtet.

2.3.1 Kodierung

NEAT verwendet ein direktes Kodierungsverfahren. Ein Genom enthält, wie in Abbildung (TODO ABBILDUNG) beispielhaft dargestellt, je eine Liste für Neuronen und Verbindungen. Ein Neuron wird durch eine ID identifiziert und enthält den Typ (*Input*,

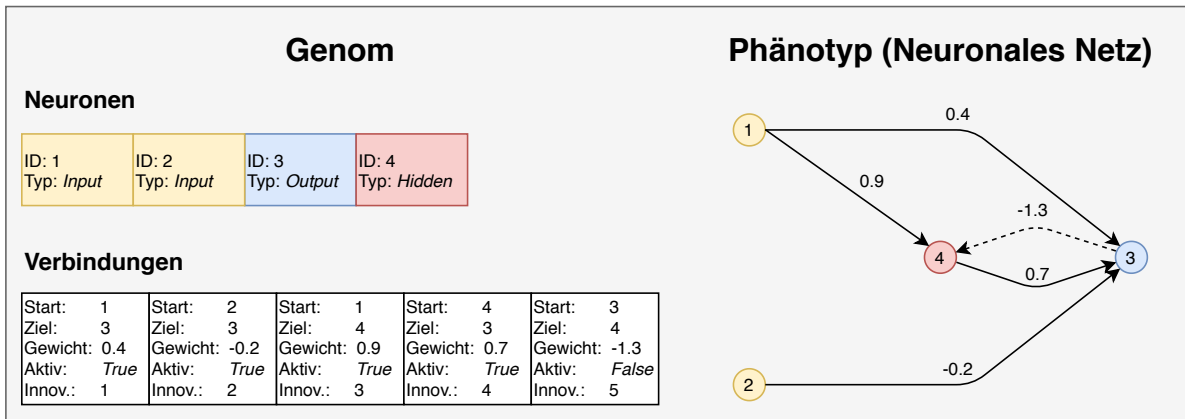


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp

Output, *Hidden*). Eine Verbindung enthält das Start- und Zielneuron, das dazugehörige Gewicht, ein Aktivierungsbit sowie eine Innovationsnummer. Das Aktivierungsbit gibt an, ob die Verbindung im Phänotyp, in diesem Fall dem neuronalen Netz enthalten, ist. Auf die Funktionsweise und Bedeutung der Innovationsnummer wird später genauer eingegangen.

2.3.2 Mutation

Ein Genom kann auf verschiedene Arten mutieren, welche entweder die Struktur des KNN oder die Gewichte der Verbindungen beeinflussen. Die Mutation der Gewichte ist ähnlich zu anderen neuroevolutionären Algorithmen. Für jedes Gewicht besteht eine Wahrscheinlichkeit zur Mutation. In diesem Fall wird das Gewicht entweder leicht abgeändert oder ein neuer zufälliger Wert gewählt.

Strukturelle Mutationen können in zwei verschiedenen Arten auftreten. Bei der ersten wird eine einzelne neue Verbindung dem Genom hinzugefügt. Bei der Auswahl des Start- und Zielneurons ist zu beachten, dass diese nicht bereits über eine solche Verbindung verfügen. Das Gewicht für die neue Verbindung wird zufällig gewählt und das Aktivierungsbit auf *True* gesetzt. Ein Beispiel für diese Mutation ist in Abbildung (TODO ABBILDUNG) dargestellt. Bei der zweiten Art der strukturellen Mutation wird ein neues Neuron das KNN eingefügt. Hierzu wird zu Beginn eine aktive Verbindung con_{ij} zufällig ausgewählt, welche von Neuron i zu Neuron j führt. Anschließend wird ein neues Neuron x zwischen den Neuronen i und j platziert und zwei weitere Verbindungen werden hinzugefügt. Die erste Verbindung con_{ix} führt vom alten Startneuron i zum neu hinzugefügtem und erhält das Gewicht 1. Die zweite Verbindung con_{xj} beginnt bei dem neuen Neuron und endet im dem alten Zielneuron j und erhält dasselbe Gewicht wie die Verbindung con_{ij} . Zuletzt wird die ausgewählte Verbindung con_{ij} deaktiviert, indem das Aktivierungsbit auf *False* gesetzt wird. Diese Art der Mutation reduziert den initialen Effekt des neuen Neurons. So kann es direkt vom KNN verwendet werden, ohne dass die Verbindungsgewichte stark optimiert werden müssen.



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp

2.3.3 Reproduktion

Das Ergebnis der in Kapitel 2.3.2 vorgestellten Mutationen ist eine Population mit verschiedenen Genomen, welche unterschiedliche Gewichte und Strukturen haben können. Dies ist die schwierigste Form des in Kapitel 2.2.6 vorgestellten *competing convention* Problems und macht das Erstellen von Nachkommen besonders schwierig.

NEAT löst dieses Problem, indem es den historischen Ursprung von jeder strukturellen Mutation überwacht. Haben zwei Verbindungen denselben Ursprung, haben sie in der Vergangenheit dieselbe Struktur repräsentiert, auch wenn sie inzwischen unterschiedliche Gewichte haben. Zu diesem Zweck besitzt jede Verbindungen die im Kapitel 2.3.1 erwähnte Innovationsnummer. Jedes Mal, wenn eine neue Verbindung entsteht, wird ein globaler Zähler inkrementiert und der Wert als Innovationsnummer der Verbindung verwendet. Abbildung (TODO ABBOLDUNG) zeigt die Zuweisung beispielhaft. Die erste Mutation, welche nur eine neue Verbindung herstellt, hat die Innovationsnummer X zugewiesen bekommen. Wenn im Folgenden ein neues Neuron mit zwei weiteren Verbindungen hinzugefügt wird, erhalten diese die Nummern Y und Z. Werden Verbindungen von einem Genom in der Reproduktionsphase für die Nachkommen ausgewählt, wird auch die Innovationsnummer übertragen. Somit ist auch bei den nachfolgenden Generationen ersichtlich, was der historische Ursprung einer Verbindung ist. Tritt durch Zufall dieselbe



Abbildung 2.4: Schematische Darstellung von einem Genom mit dazugehörigem Phänotyp

Mutation in einer Generation mehrfach auf, erhalten die neuen Verbindungen dieselben Innovationsnummern. Hierfür müssen alle aufgetretenen Mutation einer Generation zwischengespeichert werden.

Die Innovationsnummern können nicht nur ressourcensparend implementiert werden, sie machen auch das Erzeugen von Nachkommen in der Reproduktionsphase bedeutend einfacher, da beim Kreuzen von zwei Elternteilen keine aufwendige Strukturanalyse erforderlich ist. Abbildung (TODO ABBILDUNG) zeigt beispielhaft, wie ein Nachkommen aus zwei Elterngenomen X und Y entsteht. Die sogenannten *matching genes* sind Verbindungen, deren Innovationsnummern in beiden Elterngenomen vorkommen. Beim Erstellen der Nachkommen wird für jede Verbindung in den *matching genes* zufällig entschieden, aus welchem Elternteil diese übernommen wird. Die sogenannten *disjoint genes* und *excess genes* sind Verbindungen, die nur in einem Elternteil vorkommen. Zu den *disjoint genes* gehören die Verbindungen, deren Innovationsnummer kleiner als die größte Innovationsnummer des zweiten Elterngenoms ist. Die *excess genes* sind Verbindungen, deren Innovationsnummer größer als die höchste Innovationsnummer im anderen Elternteil ist. Beim Erzeugen von Nachkommen werden nur die *excess genes* und *disjoint genes* von dem Elternteil übernommen, welches den höheren Fitnesswert erzielt hat. Haben beide Elternteile den selben Wert, werden die Verbindungen von beiden übernommen. Bei dieser Implementierung wird angenommen, dass der Schwellwert der Neuronen, wie

in Kapitel (TODO KAPITE) erläutert, durch eine Verbindung zu einem Bias-Neuron ausgedrückt wird. Dadurch enthalten die Neuronen keine spezifischen Informationen, die sich zwischen den Elterngenomen unterscheiden. Die Nachkommen übernehmen deshalb immer die Neuronen des Elternteils mit dem größeren Fitnesswert.

2.3.4 Spezies

Die vorgestellten Arten der Mutation und die erfolgreiche Reproduktion ermöglichen es NEAT, eine Population mit vielen verschiedenen Strukturen zu entwickeln. Dennoch reichen diese Faktoren nicht aus, da in der Praxis neue strukturelle Innovationen nur eine geringe Chance haben, langfristig integriert zu werden und es wahrscheinlicher ist, dass sie nach wenigen Generation aussterben. Die Gründe hierfür sind, dass kleinere KNN schneller optimiert werden können als große und dass das Hinzufügen von neuen Neuronen und Verbindungen den Fitnesswert meistens initial senkt, auch wenn die neuen Strukturen für das erfolgreiche Lösen des Optimierungsproblems notwendig sind. Die Folge ist, dass die kleinen Genome anfänglich bessere Fitnesswerte erzielen, die größeren Genome nicht für die Reproduktion ausgewählt werden wodurch die strukturellen Innovationen wieder verloren gehen.

Das Problem wird von NEAT durch das Einführen von verschiedenen Spezies gelöst. Das Ziel ist, Genome, die sich strukturell ähnlich sind in einer Spezies zu gruppieren. Bei der Auswahl der Elterngenome für die Nachkommen muss ein Genom nicht mehr mit der ganzen Population konkurrieren, sondern nur noch mit den anderen Genomen der eigenen Spezies. Somit sind neue Innovationen erst einmal in ihrer Spezies vor dem Aussterben geschützt und können mit der Zeit optimiert werden. Für die Implementierung eines solchen Verfahrens wird eine Funktion benötigt, die messen kann, wie ähnlich oder unterschiedlich zwei Genome sind. Auch hier kann wie bei der Rekombination auf eine aufwendige Strukturanalyse verzichtet werden, da dies mit den bereits bekannten Innovationsnummern umsetzbar ist. Je mehr *excess genes* und *disjoint genes* zwei Genome besitzen, desto weniger evolutionäre Geschichte teilen sie und sind somit unterschiedlicher. Auch der Gewichtsunterschied ist ein wichtiger Faktor, wie in Kapitel 2.2.6 dargestellt. Die von NEAT verwendete Formel, um die Kompatibilität δ zwischen zwei Genomen zu berechnen, ist im Folgenden abgebildet:

$$\delta = \frac{c_1 E}{N} + \frac{c_2 D}{N} + c_3 \cdot \bar{W}$$

Die Variablen E und D ergeben sich aus der Anzahl an *excess genes* und *disjoint genes*. \bar{W} ist die durchschnittliche Gewichtsdivergenz der *matching genes*. Die Faktoren c_1 , c_2 und c_3 ermöglichen es die Wichtigkeit der einzelnen Komponenten je nach Optimierungsproblem zu justieren. N steht für die Anzahl der Verbindungen im größeren Genom und normalisiert die Anzahl der *excess genes* und *disjoint genes*. Somit ist der Effekt auf den Kompatibilitätswert δ bei einer neuen Verbindung in großen Genomen gering und in kleinen sehr groß. Je nach Konfiguration kann für kleine Genome $N = 1$ gelten.

Die Zuordnung von neu erstellten Genomen zu einer Spezies erfolgt nach der Reproduktions- und Mutationsphase. Hierfür wird eine geordnete Liste mit allen verfügbaren Spezies benötigt. Jede Spezies wird durch ein Genom repräsentiert, welches in der vorherigen Generation ein Mitglied von dieser war. Bei der Zuordnung von einem Genom wird über die Liste der Spezies iteriert und zu jedem Repräsentanten der Kompatibilitätswert δ gebildet. Ist $\delta \leq \delta_t$, wobei δ_t ein konfigurierbarer Schwellwert ist, wird das Genom der Spezies zugeordnet und die Suche abgebrochen. Ist das Genom zu keiner Spezies kompatibel, wird eine neue erstellt und das Genom als Repräsentant gesetzt.

Zum Erhalten von verschiedenen Strukturen muss verhindert werden, dass eine Spezies zu groß wird und die restlichen verdrängt, auch wenn viele der Mitglieder gute Fitnesswerte erzielen. Zusätzlich müssen insbesondere neue Spezies geschützt werden. Diese haben initial wenige Mitglieder und somit eine geringere Chance, als Elterngenome ausgewählt zu werden. Zum Lösen dieses Problems verwendet NEAT sogenanntes *explicit fitness sharing*, welches 1987 von Goldberg, Richardson u. a. in ihrer Arbeit [33] vorgestellt wurde. Jede Spezies bekommt bei der Reproduktion eine Anzahl an Nachkommen zugewiesen, welche proportional zur Fitness f_s der Spezies ist. Diese ergibt sich aus der Summe aller angepassten Fitnesswerte f' der Mitglieder. Der angepasste Fitnesswert f' eines Genoms wird berechnet, indem die erreichte Fitness f durch die Anzahl der Mitgliedern der Spezies geteilt wird. Ziel dieser Maßnahme ist, dass große Spezies im Vergleich zu kleinen benachteiligt werden. Hierdurch werden kleineren erfolgreichen Spezies entsprechend viele Nachkommen zugeordnet. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung xy (TODO ABBILDUNG) dargestellt. Obwohl die zweite Spezies bedeutend weniger, jedoch gute Genome besitzt, werden ihr mehr Nachkommen zugewiesen. Würde die Anzahl der Nachkommen einer Spezies proportional zu der Summe der erreichten Fitnesswerte vergeben, hätte die kleinere Spezies weniger Nachkommen zugewiesen bekommen.

Ist der Fitnesswert f_s von jeder Spezies berechnet und die Nachkommen proportional zugeteilt, beginnt die Reproduktion. Die Elterngenome werden hierfür zufällig aus der Mitgliederliste ausgewählt mit der Einschränkung, dass nur die besten 50% der Genome ausgewählt werden. Sind alle Nachkommen erstellt, wird die ganze Population gelöscht und durch die Nachkommen ersetzt. Diese werden mit dem bereits vorgestellten Verfahren wieder den Spezies zugeordnet.

2.3.5 Starten mit einer minimalen Struktur

Das Ziel von NEAT sowie vieler anderer Optimierungsalgorithmen ist, eine Lösung in kürzester Zeit zu finden. Ein wichtiger Faktor ist hierbei die Größe des KNN. Ein zu großes KNN hat viele modifizierbare Verbindungsgewichte und Schwellwerte, welche nicht zur erfolgreichen Lösung benötigt werden. Trotzdem wird die Laufzeit des Algorithmus erhöht, da auch diese optimiert werden müssen. Ein zu kleines KNN kann, wie in Kapitel (TODO REF XOR) veranschaulicht, unter Umständen nicht in der Lage sein, eine Lösung zu finden. Somit ist die richtige Größe des KNN entscheidend für die

schnelle Optimierung. Für Algorithmen, welche nur die Gewichte eines KNN optimieren, muss diese Struktur von einem Menschen festgelegt werden. Meistens basiert dies auf Expertenwissen oder Erfahrung [16]. Im Gegensatz hierzu stehen die TWEANN Algorithmen, welche selbstständig eine gute Struktur bilden sollen. Diese starten oft mit einer initialen Population mit vielen verschiedenen zufällig erstellten Topologien mit dem Ziel, genetische Diversität zu bieten. Wie in Kapitel 2.2.5 erläutert, ist dies oft ineffizient, da viele Strukturen nicht gebraucht werden und Zeit benötigt wird, diese zu entfernen.

NEAT hingegen startet mit einer Population, bei der alle Genome dieselbe minimale Struktur besitzen. Die entstehenden KNN haben nur *Input*- und *Output*-Neuronen und keine *Hidden*-Neuronen. Jedes *Input*-Neuron besitzt eine Verbindungen zu jedem *Output*-Neuron mit einem zufällig gewählten Gewicht. Neue Strukturen werden durch die vorgestellten Arten der Mutation hinzugefügt, von denen nur diejenigen langfristig integriert werden, welche den Fitnesswert erhöhen. Somit ist die Existenz von jeder Struktur in einem Genom gerechtfertigt. Insgesamt gibt dies NEAT einen Vorteil bezüglich der Evaluationszeit gegenüber anderen TWEANN Algorithmen, da die Anzahl der zu optimierenden Parameter und somit die Dimensionen des Suchraums minimiert sind.

2.4 MPI

2.4.1 Kommunikationsarten in MPI

2.4.2 Beowulf - Cluster

2.4.3 Ahmdals Law?

3 Softwarearchitektur und Implementierung

Architektur und Implementierung, Aufbau, Klassen, Programmablauf

3.1 Anforderungen

3.2 Softwarearchitektur

4 Analyse

4.1 Testsetup

4.2 Validierung der Funktionalität

4.3 Optimierungsprobleme

4.4 Erkenntnisse

5 Optimierung

5.1 Parallelisierungsstrategien

5.2 Implementierung

5.3 Testsetup

5.4 Evaluation

5.5 Ergebnisse

6 Zusammenfassung und Ausblick

Quellenverzeichnis

- [1] David Kriesel. 2008. Ein kleiner überblick über neuronale netze. *Download unter <http://www.dkriesel.com/index.php>*.
- [2] Warren S McCulloch und Walter Pitts. 1943. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, 5, 4, 115–133.
- [3] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever und Geoffrey E Hinton. 2012. Imagenet classification with deep convolutional neural networks. In *Advances in neural information processing systems*, 1097–1105.
- [4] Geoffrey Hinton, Li Deng, Dong Yu, George E Dahl, Abdel-rahman Mohamed, Navdeep Jaitly, Andrew Senior, Vincent Vanhoucke, Patrick Nguyen, Tara N Sainath u. a. 2012. Deep neural networks for acoustic modeling in speech recognition: the shared views of four research groups. *IEEE Signal processing magazine*, 29, 6, 82–97.
- [5] Daniel Andor, Chris Alberti, David Weiss, Aliaksei Severyn, Alessandro Presta, Kuzman Ganchev, Slav Petrov und Michael Collins. 2016. Globally normalized transition-based neural networks. *arXiv preprint arXiv:1603.06042*.
- [6] Volodymyr Mnih, Koray Kavukcuoglu, David Silver, Alex Graves, Ioannis Antonoglou, Daan Wierstra und Martin Riedmiller. 2013. Playing atari with deep reinforcement learning. *arXiv preprint arXiv:1312.5602*.
- [7] David Silver, Aja Huang, Chris J Maddison, Arthur Guez, Laurent Sifre, George Van Den Driessche, Julian Schrittwieser, Ioannis Antonoglou, Veda Panneershelvam, Marc Lanctot u. a. 2016. Mastering the game of go with deep neural networks and tree search. *nature*, 529, 7587, 484.
- [8] Werner Kinnebrock. 2018. *Neuronale Netze: Grundlagen, Anwendungen, Beispiele*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG.
- [9] Stuart Russell und Peter Norvig. 2013. Künstliche intelligenz. ein moderner ansatz, 3. ak. aufl. (2013).
- [10] Andreas Zell. 2003. Simulation neuronaler netze. 4., unveränderte auflage. (2003).
- [11] Clemens Kirschbaum. 2008. *Biopsychologie von A bis Z*. Springer-Verlag.
- [12] Andreas Scherer. 2013. *Neuronale Netze: Grundlagen und Anwendungen*. Springer-Verlag.
- [13] Yann A LeCun, Léon Bottou, Genevieve B Orr und Klaus-Robert Müller. 2012. Efficient backprop. In *Neural networks: Tricks of the trade*. Springer, 9–48.

- [14] Xavier Glorot, Antoine Bordes und Yoshua Bengio. 2011. Deep sparse rectifier neural networks. In *Proceedings of the fourteenth international conference on artificial intelligence and statistics*, 315–323.
- [15] Tsungnan Lin, Bill G Horne und C Lee Giles. 1998. How embedded memory in recurrent neural network architectures helps learning long-term temporal dependencies. *Neural Networks*, 11, 5, 861–868.
- [16] Stanley, Kenneth O. 2017. Neuroevolution: a different kind of deep learning. www.oreilly.com/radar/neuroevolution-a-different-kind-of-deep-learning/. [Online; Abgerufen am 27. Juli 2020]. (2017).
- [17] M. G. H. Omran, A. P. Engelbrecht und A. Salman. 2005. Differential evolution methods for unsupervised image classification. In *2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation*. Band 2, 966–973 Vol. 2.
- [18] Richard S Sutton und Andrew G Barto. 2018. *Reinforcement learning: An introduction*. MIT press.
- [19] Karsten Weicker. 2015. *Evolutionäre Algorithmen*. Springer-Verlag.
- [20] Franz Rothlauf. 2006. *Representations for Genetic and Evolutionary Algorithms*. Springer Berlin Heidelberg.
- [21] Raul Rojas. 1996. *Neural Networks: A Systematic Introduction*. Springer Science & Business Media.
- [22] Kenneth O Stanley, Bobby D Bryant und Risto Miikkulainen. 2005. Real-time neuroevolution in the nero video game. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 9, 6, 653–668.
- [23] Felipe Petroski Such, Vashisht Madhavan, Edoardo Conti, Joel Lehman, Kenneth O. Stanley und Jeff Clune. 2017. Deep neuroevolution: genetic algorithms are a competitive alternative for training deep neural networks for reinforcement learning. (2017). arXiv: 1712.06567 [cs.NE].
- [24] Peter Zöllner-Greer. 2010. *Künstliche Intelligenz: Grundlagen und Anwendungen*. Wächtersbach: Composita Verlag.
- [25] Verena Heidrich-Meisner und Christian Igel. 2009. Neuroevolution strategies for episodic reinforcement learning. *Journal of Algorithms*, 64, 4, 152–168. Special Issue: Reinforcement Learning. ISSN: 0196-6774. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jalgor.2009.04.002>. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196677409000364>.
- [26] Darrell Whitley, Stephen Dominic, Rajarshi Das und Charles W Anderson. 1993. Genetic reinforcement learning for neurocontrol problems. *Machine Learning*, 13, 2-3, 259–284.
- [27] Kenneth O. Stanley und Risto Miikkulainen. 2002. Evolving neural networks through augmenting topologies. *Evolutionary computation*, 10, 2, 99–127.

- [28] João Carlos Figueira Pujol und Riccardo Poli. 1998. Evolving the topology and the weights of neural networks using a dual representation. *Applied Intelligence*, 8, 1, 73–84.
- [29] Alan McIntyre, Matt Kallada, Cesar G. Miguel und Carolina Feher da Silva. [n. d.] Neat-python. <https://github.com/CodeReclaimers/neat-python>. [Online; Abgerufen am 27. August 2020]. ().
- [30] P. J. Angeline, G. M. Saunders und J. B. Pollack. 1994. An evolutionary algorithm that constructs recurrent neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 5, 1, 54–65. ISSN: 1941-0093. DOI: 10.1109/72.265960.
- [31] Byoung-Tak Zhang und Heinz Mühlenbein. 1993. Evolving optimal neural networks using genetic algorithms with occam’s razor. *Complex systems*, 7, 3, 199–220.
- [32] Martina Gorges-Schleuter. 1991. Explicit parallelism of genetic algorithms through population structures. In *Parallel Problem Solving from Nature*. Hans-Paul Schwefel und Reinhard Männer, Herausgeber. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 150–159. ISBN: 978-3-540-70652-6.
- [33] David E Goldberg, Jon Richardson u. a. 1987. Genetic algorithms with sharing for multimodal function optimization. In *Genetic algorithms and their applications: Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms*. Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum, 41–49.

Eidesstattliche Erklärung

This is the beginning