
Вычислительные регуляторные сети

Ю.Р. Цой

Томский политехнический университет

Томск

2007

Введение

Адаптация и механизмы адаптации в живой природе одни из важнейших вопросов естествознания.

Адаптация тесно связана с понятиями: изменчивость, эволюция, самоорганизация

Вопросы:

1. Что обеспечивает адаптацию организмов?
(полинуклеотидные последовательности, окружающая среда)
2. Как возникли механизмы адаптации? (точно не известно)
3. Можно ли придумать аналог для искусственных систем?
(точно не известно)

Введение

Для понимания адаптации необходимо моделировать **открытые системы**, так как в таких системах можно более полно рассматривать возникновение новых, непредусмотренных изначально видов взаимодействий в парах «**объект-среда**» и «**объект-объект**».

Данная работа – попытка автора создать **основу для исследования адаптации и реализации адаптивных систем**, а также **попытка осмыслить, в каком направлении развиваются эволюционные вычисления**.

Каверзные вопросы

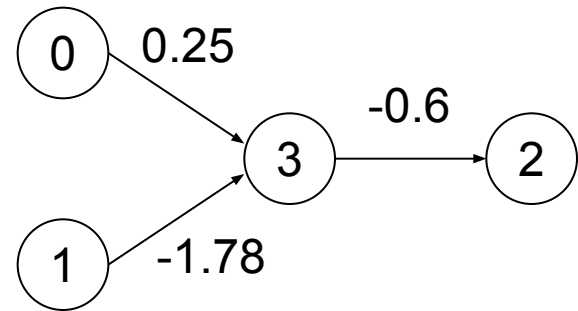
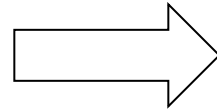
Действительно ли нейроэволюционный (НЭ) алгоритм используется для поиска только искусственной нейронной сети (ИНС)?

Когда можно сказать, что закодированное в хромосоме решение представляет именно ИНС, а не что-нибудь другое?

Пример (алгоритм NEvA)

Хромосома:

0->3 (0.25)
1->3 (-1.78)
3->2 (-0.6)



Является ли этот граф ИНС?

Ответ зависит от интерпретации графа!

Действительно ли НЭ алгоритм используется для поиска только ИНС? Ответ зависит от интерпретации декодированного решения!

Вывод (промежуточный)

Можно разработать **эволюционный алгоритм для поиска графов в общем виде** и этот алгоритм потенциально будет применим к очень широкому кругу задач.

... И НОВЫЕ ВОПРОСЫ

1. Как облегчить разработку такого алгоритма?
2. Как кодировать решение, если необходимо найти очень большой граф? (количество вершин порядка 10^4 и более)

Проблемы поиска очень больших графов

1. Прямое кодирование информации о графе требует **много памяти**.
2. **Сложность модификации графа и поиска решения**. Использование элементарных операций (добавление/удаление вершин и ребер) не позволяет осуществлять быстрый поиск, а применение более сложных специфичных операций затруднено ввиду желаемой «общности» алгоритма.

Что если... ?

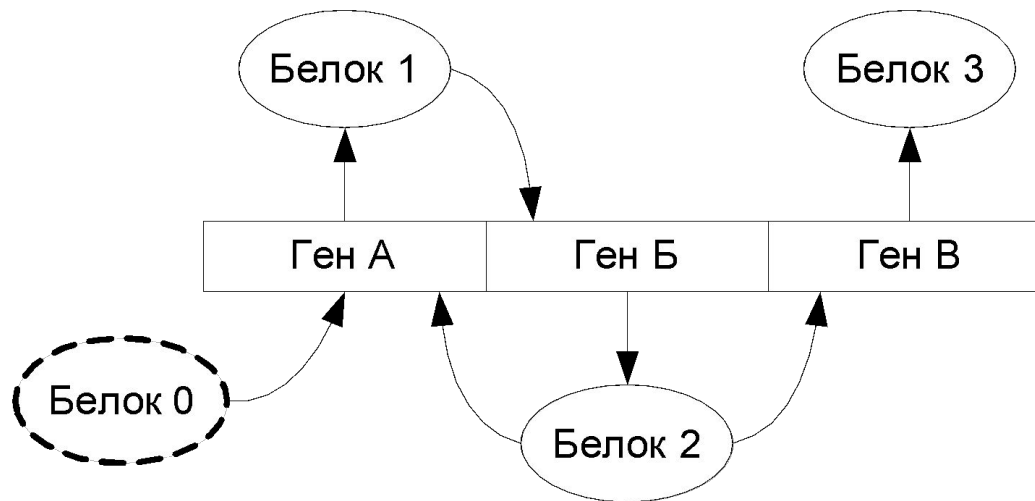
Возможным решением этих проблем является использование генетического кодирования, более компактного, чем прямое представление графа, и допускающего как существенные, так и незначительные изменения структуры сети при использовании элементарных операций над этой сетью.

Для описания такой кодировки и алгоритма, работающего с ней, будем использовать следующие понятия:

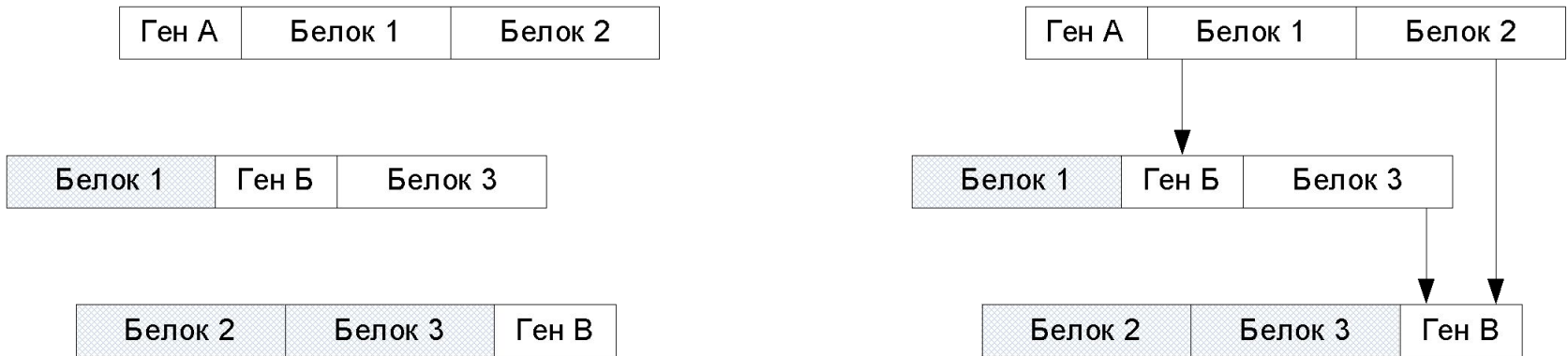
- Генные регуляторные сети
- Безмасштабные сети

Генные регуляторные сети

Генная регуляторная сеть (gene regulatory network) - набор взаимодействующих сегментов (генов) ДНК в клетке.

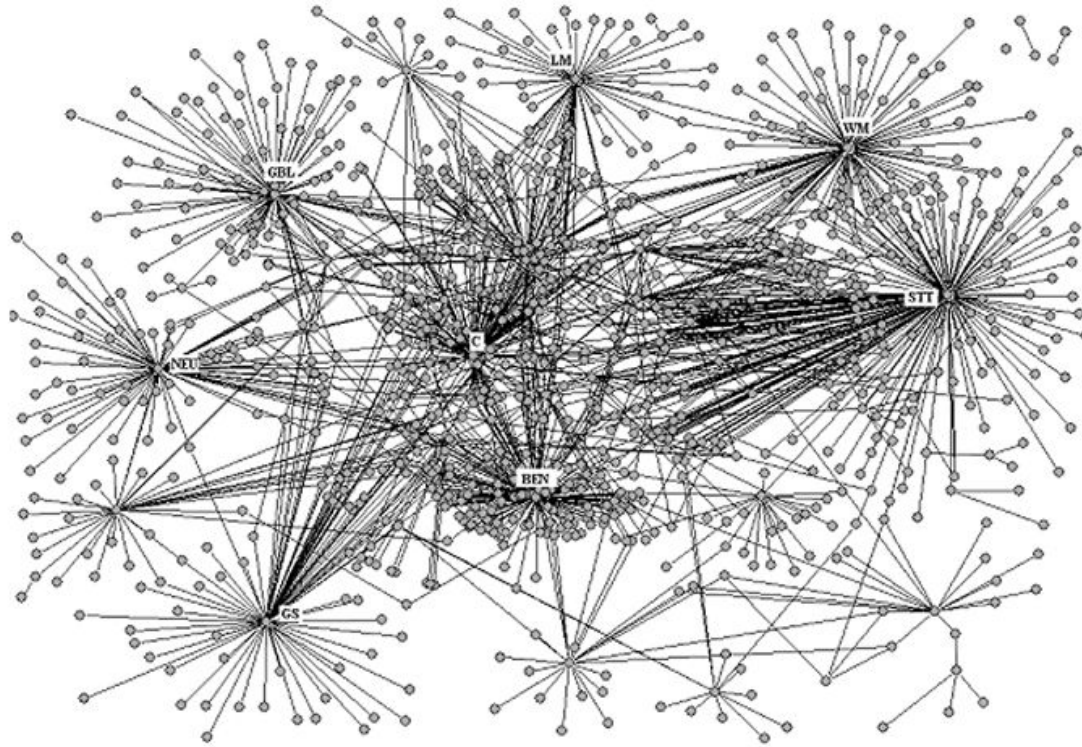


Неявное «связывание» генов



Интересным свойством ГРС является то, что в ГРС отсутствует понятие «связи», как самостоятельной единицы. Если пренебречь конечной скоростью распределения вещества в пространстве, то для связывания двух генов необходимо и достаточно, чтобы один ген производил некоторый белок, а другой ген этот белок использовал.

Безмасштабные сети



Граф владельцев акций компаний на Фондовой Бирже Нью-Йорка, 2001 г.
(вершины – компании, ребра – владение не менее 5% акций)
Источник: Caldarelli G. The Structure of Biological and Social Systems // SIAM News, Volume 37, Number 3, April 2004.

Цой Ю. Р. Вычислительные регуляторные сети.
«Нейроинформатика – 2008», г. Москва.

Безмасштабные сети

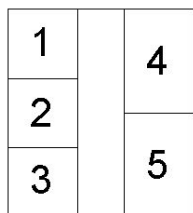
Другие примеры:

1. Интернет.
2. Социальные сети.
3. Сети химических реакций.
4. Сети соавторства в научных публикациях.
5. Экологические сети (отношение «хищник-жертва»).
6. и др.

Некоторые **предпосылки** к существованию безмасштабных сетей:

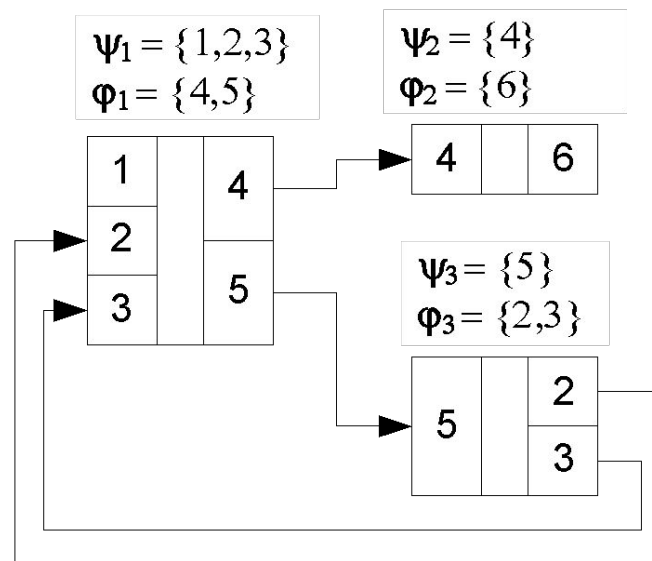
1. Различная способность узлов к образованию связей.
2. Неоднородность распределения информации.

Вычислительная регуляторная сеть (ВРС)



$\Psi = \{1,2,3\}$
 $\Phi = \{4,5\}$

узел



сеть

Каждый узел имеет наборы входных и выходных сигналов с уникальными идентификаторами. Два узла называются связанными, если идентификаторы выходных сигналов одного узла совпадают с идентификаторами входных сигналов другого узла.

Вычислительная регуляторная сеть (ВРС)

Каждому узлу поставлена в соответствие функция

$$f_i(t)$$

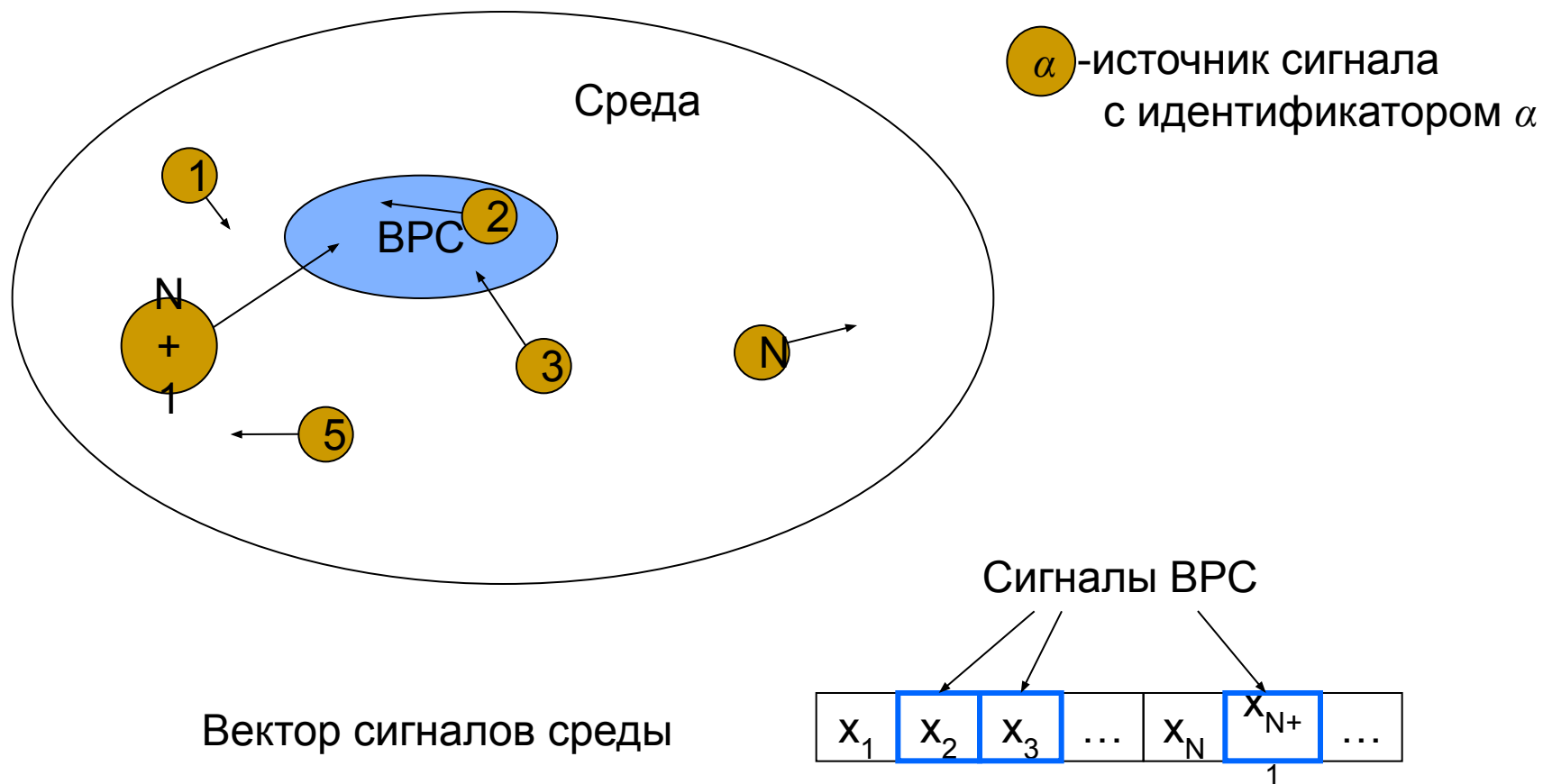
Выходной сигнал с идентификатором α для i -го узла:

$$x_{\alpha,i}(t) = f_i(\mathbf{x}_i(t), \mathbf{w}, \phi_i, v_{i,k})$$

Полагаем, что РС находится в некоторой среде, в которой могут присутствовать некоторые сигналы независимо от состояния РС. Правило обновления сигналов среды:

$$x_{\alpha}(t+1) = g(x_{\alpha}) + \sum_i x_{\alpha,i}(t)$$

Вычислительная регуляторная сеть (ВРС)

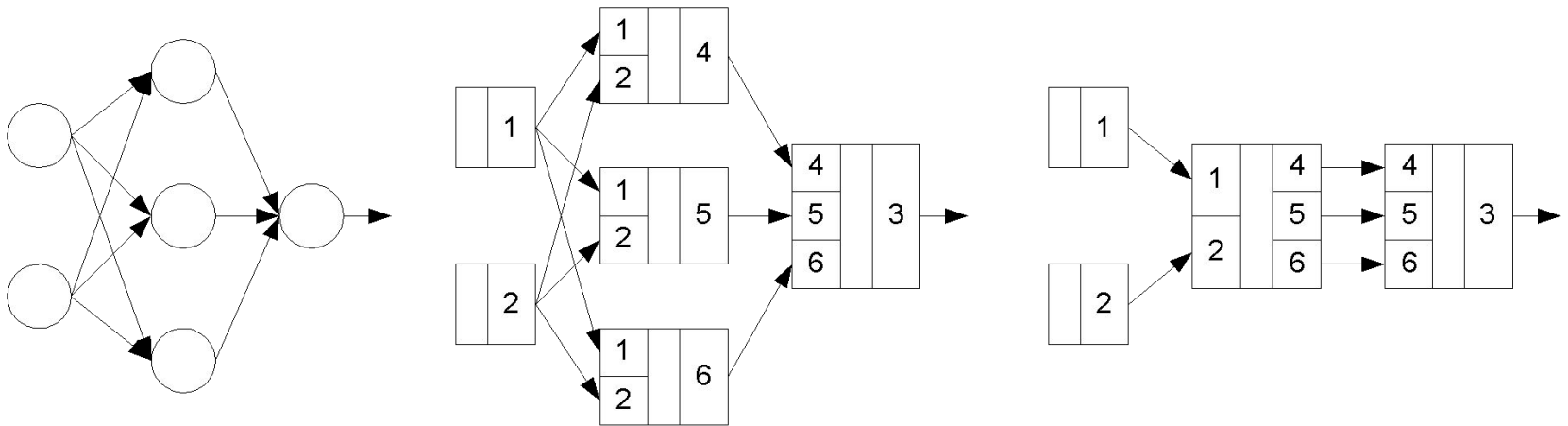


Особенности ВРС

- Неявная связанность узлов за счет использования узлами сигналов с одинаковыми идентификаторами.
- Возможность существования множественных связей между двумя узлами.
- Функционирование в некоторой среде, в которой могут присутствовать как сигналы, отличные от входных и выходных для данной ВРС, так и другие ВРС.

ВРС и ИНС

Если в узлах ВРС используются функции активации нейронов, то ВРС можно рассматривать как аналог ИНС с точки зрения вычисляемых функций, поскольку, всегда существует прямое и обратное преобразование ВРС в ИНС.



Исходя из этого можно утверждать, что при определенных условиях ВРС являются **универсальными аппроксиматорами**, и **эквивалентны машинам Тьюринга**.

Алгоритм эволюции ВРС (SARN – Self-Adaptive Regulatory Network)

Особь включает в себя:

1. Информацию об узлах ВРС и их параметрах (тип узла, идентификаторы входных и выходных сигналов, веса сигналов и др.)
2. Вектор параметров мутации
3. Вектор истории мутаций

Применяется турнирная селекция

Используется только оператор мутации

Реализация алгоритма (open-source): <http://qai.narod.ru/ecw/>

Операторы модификации (мутации) ВРС

- Оператор изменения веса входного сигнала узла.
- Оператор изменения веса выходного сигнала узла.
- Оператор изменения величины спонтанной активности узла.
- Оператор изменения типа узла.
- Оператор изменения идентификатора входного сигнала узла.
- Оператор изменения идентификатора выходного сигнала узла.
- Оператор включения/выключения узла.
- Оператор добавления/удаления входного сигнала узла.
- Оператор добавления/удаления выходного сигнала узла.
- Оператор добавления/удаления узла.
- Оператор расщепления узла.

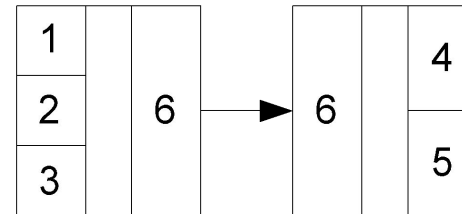
Каждому оператору соответствует свой параметр мутации m_i

Пример работы оператора расщепления узла

Оператор предназначен для последовательного разделения узла и добавления новых идентификаторов сигналов с существующую сеть.

1		4
2		
3		5

Исходный узел



Результат работы оператора

Вероятность $P(i)$ выбора i -го узла сети зависит от степени d_i его связанности

$$P(i) = \begin{cases} \frac{d_i + \gamma}{\sum_k (d_k + \gamma)}, & m > 0 \\ \frac{d_{\max} - d_i + \gamma}{\sum_k (d_{\max} - d_k + \gamma)}, & m \leq 0 \end{cases}$$

Выбор оператора мутации

Вероятность мутации $P_m = \begin{cases} 1, & \bar{m} > 1 \\ \bar{m}, & \bar{m} \leq 1 \end{cases}$, где $\bar{m} = \frac{\beta}{11} \sum_k |m_k|$

Вероятность выбора k -го оператора пропорциональна величине

$$\frac{|m_k|}{\sum_k |m_k|}$$

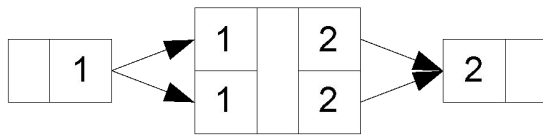
Правило обновления параметров мутации:

$$m_k(t+1) = \left(\frac{1}{11} + \frac{\chi_i}{\sum_i \chi_i} \right) \xi_G$$

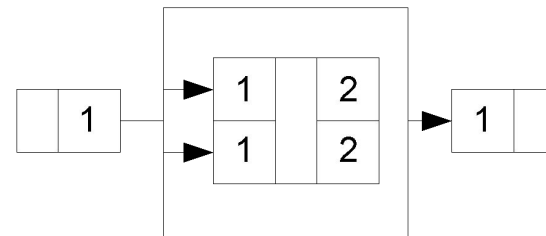
χ_i - количество мутаций i -го типа, имевших место для данной особи, начиная с самого первого поколения.

Эффекты мутации

Несмотря на элементарность действий, осуществляемых многими из вышеперечисленных операторов, эффект может носить значительный характер для всей ВРС, поскольку эти операторы влияют не только на структуру ВРС (локальный эффект), но и на характеристики сигналов (глобальный эффект), распространяемых по ВРС.



До мутации



После мутации

Эксперименты

Функции, вычисляемые в узлах ВРС

$$S_0 = a(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + \phi)$$

Задачи:

1. Исключающее ИЛИ
2. Proben1 (card1, diabetes1, glass1, heart1, horse1, thyroid1)

Целевая функция: $z = e + c(N) + \varepsilon, z \rightarrow \min$

- среднеквадратичная ошибка

$$e = \frac{1}{N_T N_O} \sum_{i,j} (x_i^{(j)} - y_i^{(j)})^2$$

- сложность сети

$$c(N) = 0.001 \log N + 0.001$$

- среднее изменение энергии сигналов

$$\varepsilon = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^{N_T} \sum_{t=1}^{\tau} \sum_{\alpha=N_I+1}^{N_I+N_O} |x_{\alpha}(t) - x_{\alpha}(t-1)|$$

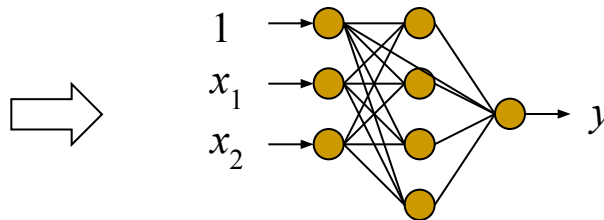
№	Формула
1	$x_{\alpha} = \begin{cases} 1, & S_0 + v_k > 0 \\ -1, & S_0 + v_k \leq 0 \end{cases}$
2	$x_{\alpha} = \frac{1 - \exp(-2(S_0 + v_k))}{1 + \exp(-2(S_0 + v_k))}$
3	$x_{\alpha} = \begin{cases} 1, & S_0 + v_k > 1 \\ S_0 + v_k, & S_0 + v_k \in [-1; 1] \\ -1, & S_0 + v_k < -1 \end{cases}$
4	$x_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(S_0 - v_k)^2}{2}\right)$
5	$x_{\alpha} = \sin(S_0 + v_k)$

Эксперименты: ХОР

	SARN	NEvA	ПГА*	ЭГА*	ОРИ*
$\langle N_{FE} \rangle$	4612,53	7693,7	1261,99	711,97	619,7
СКО	2594,07	3577,98	2427,72	890,27	407,70
Неудачи	0	0	0	0	0
$\langle N_H \rangle$	6,89 **	7,67	8		
$\langle N_C \rangle$	2,74***	15,35	17		

* Для алгоритмов ПГА (Простой ГА), ЭГА (ГА с Элитизмом) и ОРИ (ОР с Инерционностью)

Структура ИНС:
«2-4-1»

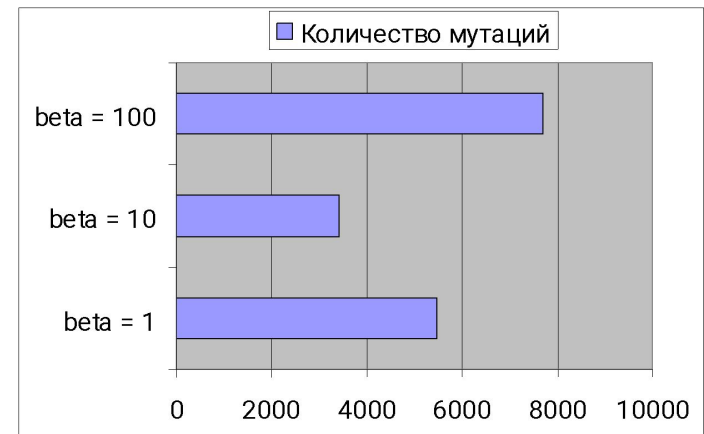
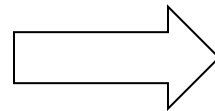


** Среднее количество узлов; *** Средняя степень узла

Эксперименты: ХОР

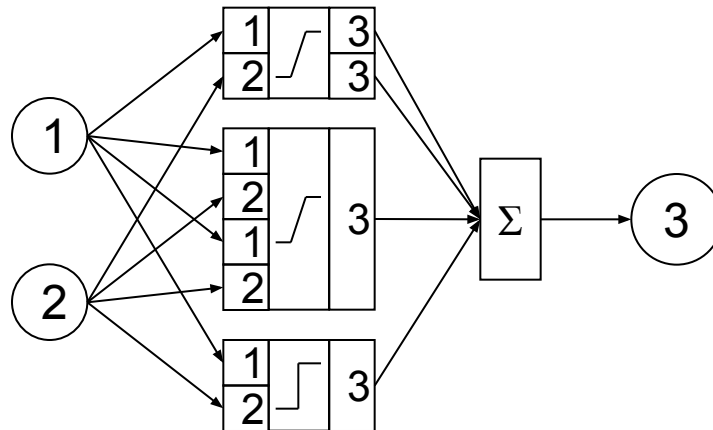
	$\beta = 1$	$\beta = 10$	$\beta = 100$
Количество вычислений целевой функции, N_{FE}	52023,4±49830,61	8355,97±3262,22	4612,53±2594,07
Время поиска, поколения	259,65±197,12	41,4±36,58	22,62±13,02
Время поиска, сек.	3,05±4,20	0,50±0,58	0,32±0,34
Среднее количество узлов	10,03±4,95	8,54±3,60	6,89±2,31
Успешных запусков, %	100%	100%	100%

Количество мутаций в сумме по всем решениям

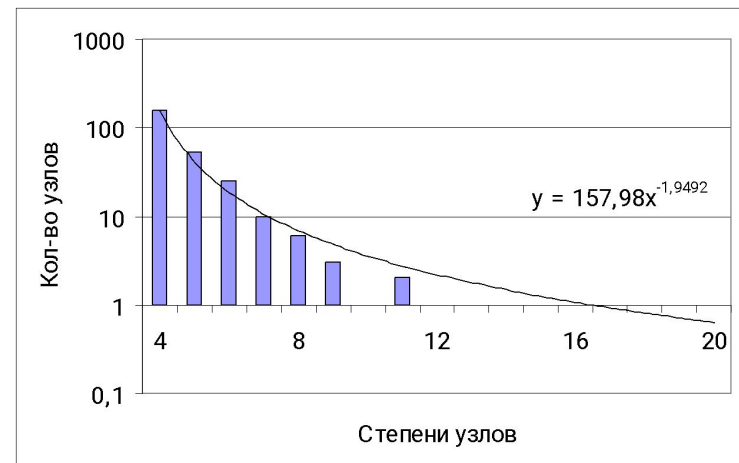


Цой Ю. Р. Вычислительные регуляторные сети.
«Нейроинформатика – 2008», г. Москва.

Эксперименты: XOR

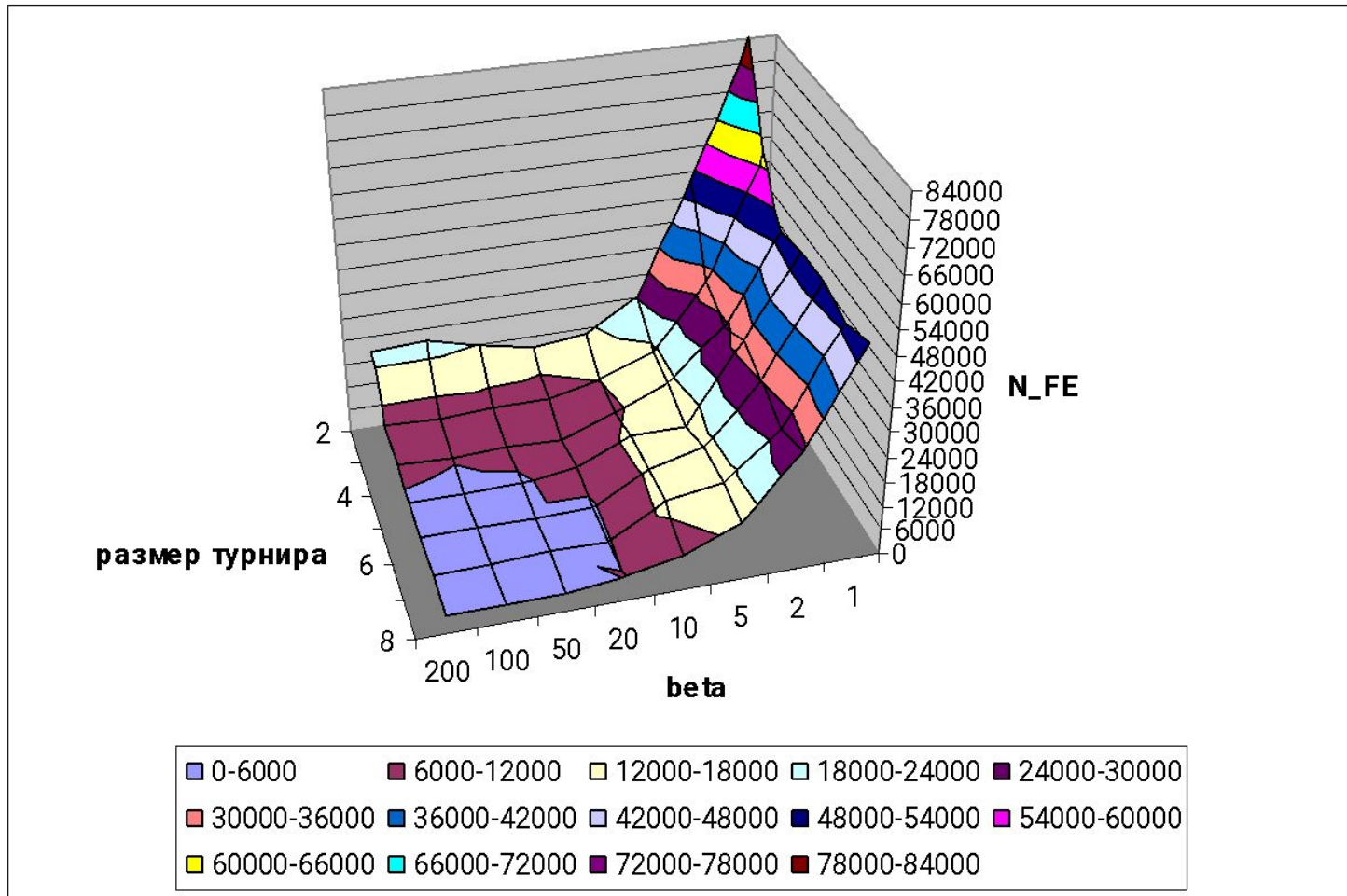


$$\beta = 1$$



$$\beta = 100$$

Эксперименты: XOR



Цой Ю. Р. Вычислительные регуляторные сети.
«Нейроинформатика – 2008», г. Москва.

Эксперименты: Proben1

Название проблемы	Ошибка, SARN	Структура ИНС, SARN, $N : \langle d \rangle$	Ошибка, Proben1 docs	Структура ИНС, Proben1 docs, $N_H : N_C$
Cards1	12,79 %	2 : 54	13,37 %	0 : 102
Diabetes1	34,90 %	1 : 16,111	24,1 %	4 : 24
Glass1	28,30 %	1,5 : 53,8	32,7 %	8 : 120
Heart1	21,74 %	1 : 70,9	19,72 %	8 : 296
Horse1	32,97 %	1,429 : 169,29	29,19 %	4 : 244
Thyroid1	2,11 %	1,3 : 65,6	2,32 %	24 : > 450

N – количество узлов ВРС
 $\langle d \rangle$ – средняя степень узла

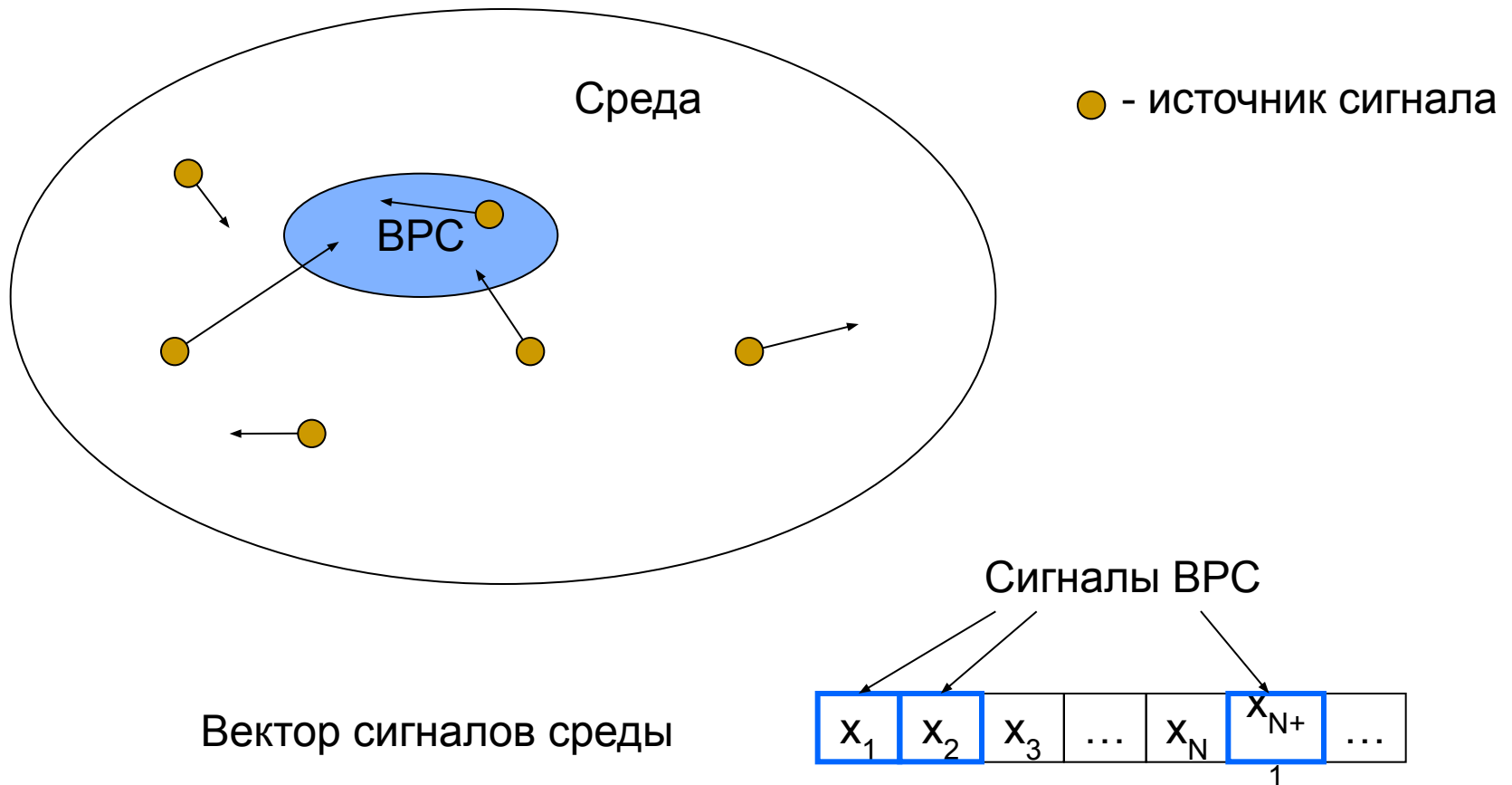
N_H – количество скрытых нейронов ИНС
 N_C – количество связей

Данные предварительных экспериментов

Цой Ю. Р. Вычислительные регуляторные сети.
«Нейроинформатика – 2008», г. Москва.

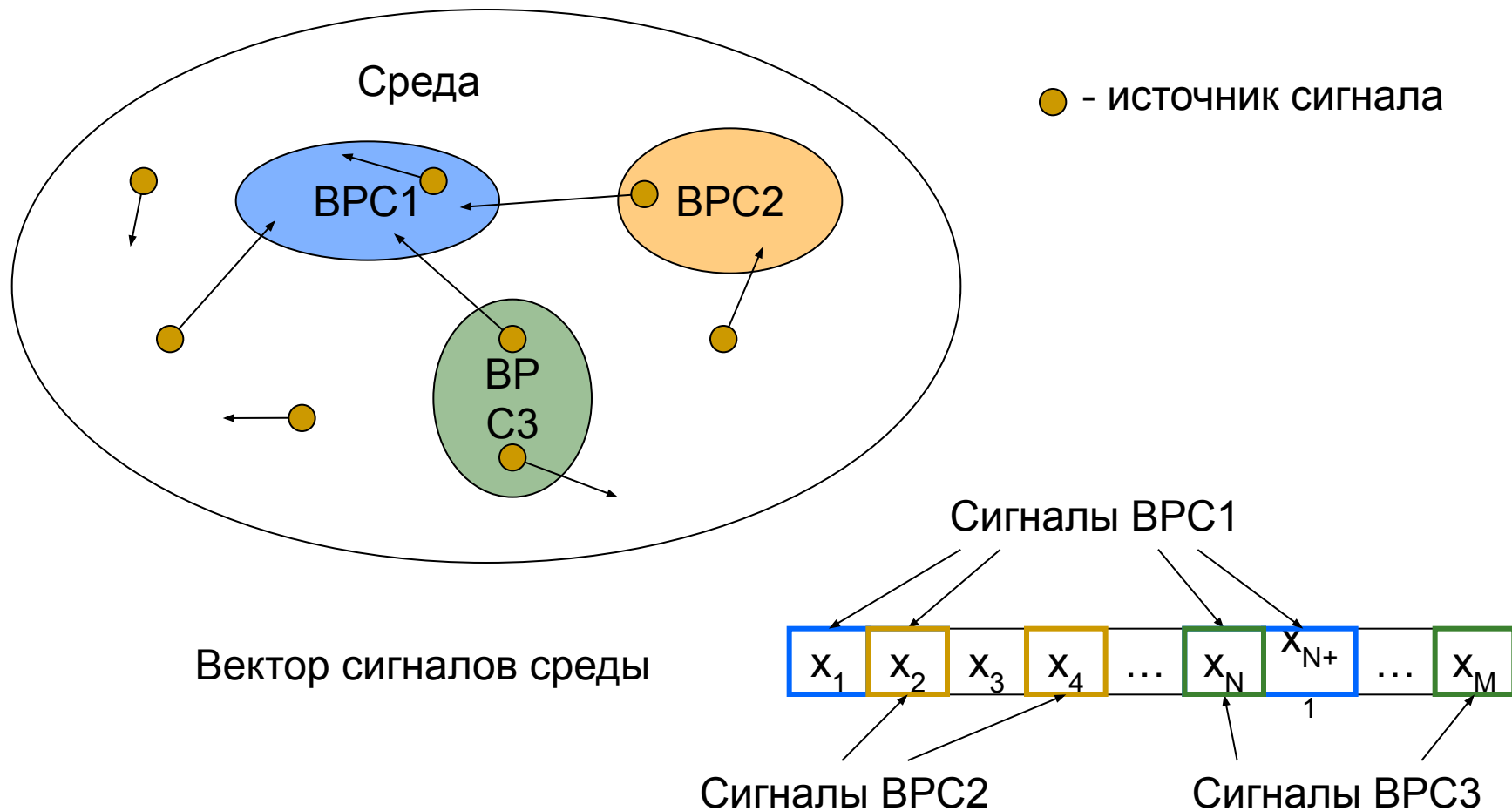
Моделирование открытых систем

Взаимодействие «объект-среда»



Моделирование открытых систем

Взаимодействие «объект-объект»



Заключение

ВРС: Что **нового** при сравнении с ИНС?

1. Другое описание структуры (без описания связей).
2. Элементарные операции (добавление/удаление узлов, изменение весов сигналов и др.) над ВРС могут носить как локальный (точечный), так и глобальный (масштабный) характер.
3. Произвольные функции в узлах сети.
4. Возможность описывать, не меняя кодировки, сетевые структуры с простыми модулями (за счет существования множественных выходов узлов).
5. Изначальная ориентация на «существование» ВРС в некоторой сложной среде.

Заключение

1. Как зависит эволюция структуры ВРС от эволюции вектора \mathbf{m} параметров мутации и от используемых операторов?
2. Можно ли провести содержательную интерпретацию работы ВРС на основании данных об изменении энергии сигналов с течением времени?
3. Каким образом можно регулировать распределение степеней узлов, а также параметра кластеризации ВРС?
4. Можно ли использовать ВРС для решения задач моделирования и оптимизации?

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 06-08-00840).

Спасибо за внимание!

**Цой Ю.Р. Вычислительные
регуляторные сети**