

АДАПТАЦІЯ АЛГОРИТМУ NEAT ДЛЯ КОМПЛЕКСНИХ ЗАДАЧ З ДОПОМОГОЮ QUALITY DIVERSITY

Ігор Лях¹, Василь Морохович², Василь Кут³, Василь Вакульчак⁴, Дмитро Майор⁵

ДВНЗ “Ужгородський національний університет”,
кафедра інформатики та фізико-математичних дисциплін, Ужгород, Україна

¹igor.lyah@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0001-5417-9403

²vasyl.morokhovych@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0002-4939-6566

³vasyl.kut@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-00001-5267-311X

⁴vasyl.vakulchak@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0001-6037-8978

⁵mayor4090@gmail.com, ORCID 0009-0006-1188-6320

© Лях І., Морохович В., Кут В., Вакульчак В., Майор Д., 2024

Розглянуто сутність алгоритму NEAT (NeuroEvolution of Augmenting Topologies) для розв’язання задач оптимізації нейронних мереж і еволюції їхніх топологій. Здійснено огляд поточного стану використання NEAT і його пристосувань у дослідженнях еволюційного обчислення. Обґрунтовано необхідність підходу Quality Diversity (QD) для підвищення різноманітності та якості розв’язків у комплексних задачах. Описано концепцію QD та її вплив на пошук інноваційних рішень у межах різнопланових пошукових просторів. Описано застосування ViE-NEAT, який поєднує переваги виживання найпридатніших рішень із принципом підтримки різноманітності. Зіставлено основні аспекти ViE-NEAT із традиційним NEAT, проаналізовано переваги використання алгоритму виживаності порівняно з конкурентними методами. Докладно описано алгоритм MAP-Elites, який демонструє альтернативний підхід до пошуку розв’язків із забезпеченням багатоманітності “освітленого” простору ознак, що можна інтегрувати з NEAT для формування диверсифікованої популяції рішень. Основну увагу приділено методології інтеграції NEAT з MAP-Elites алгоритмами для створення адаптованої стратегії пошуку. Із урахуванням базових принципів NEAT визначено можливості його розширення для ефективного розв’язання нових задач, які не обмежені традиційними параметричними просторами. Проаналізовано результати, що демонструють ефективність використання адаптованого алгоритму NEAT порівняно з традиційними підходами до еволюції нейронних мереж.

Ключові слова: NeuroEvolution of Augmenting Topologies (NEAT); Quality Diversity (QD); ViE-NEAT; MAP-Elites; оптимізація нейромереж; еволюційні алгоритми.

Постановка проблеми

Алгоритм NEAT, який запропонували Кеннет О. Стенлі (англ. Kenneth O. Stanley) та його колеги у 2002 р., вже деякий час поступається сучаснішим генетичним алгоритмам в задачах еволюційної оптимізації [6]. Його відносна простота та орієнтованість на відбір найпристосованіших індивідів можуть допускати передчасну конвергенцію до локальних оптимумів, особливо у великих та складних просторах пошуку. На відміну від NeuroEvolution of Augmenting Topologies, Quality Diversity алгоритми, такі як MAP-Elites, спрямовані на збереження різноманітності у популяції, що дає змогу експлуатувати різноманітні ніші у просторі можливих рішень і приводить до

знаходження несподіваних та інноваційних рішень [3]. Проте стратегії поєднання NEAT з QD алгоритмами дотепер належно не досліджено, що й спонукало нас до виконання цього дослідження.

Аналіз останніх досліджень та публікацій

Наявні дослідження стверджують, що алгоритм NEAT має потенціал у задачах навчання з підкріпленням. Однак у складних багатовимірних та мультифункціональних задачах, де необхідно дослідити велику кількість потенційних рішень і знайти компроміс між різними цілями, стає зрозумілою перевага алгоритмів, орієнтованих на різноманіття, а саме: MAP-Elites, Novelty search with NEAT і ViE-NEAT [2, 5, 6]. Допускають, що результати дослідження можуть виявити певний потенціал. Наприклад, у завданні досягнення мети ViE-NEAT є продуктивнішим, ніж MAP-Elites, тому що він здатний знаходити рішення, максимально адаптовані до конкретних умов [2]. Покращення NEAT за допомогою алгоритму пошуку новизни (*The Search of Novelty*) також дає позитивні результати [5].

Формулювання цілі статті

Мета статті – розроблення ефективної методики адаптації алгоритму NEAT з використанням принципів QD для забезпечення балансу між експлорацією та експлуатацією рішень під час розв’язування комплексних задач. У межах дослідження вивчено підходи QD алгоритмів і розроблено модифікації до NEAT, які адаптовані для збільшення розмаїтості та покращення якості вирішення завдань.

Виклад основного матеріалу

Алгоритм *NeuroEvolution of Augmenting Topologies* – один із передових методів у еволюційних стратегіях для оптимізації нейромереж за допомогою одночасної еволюції їх ваг і структури. Особливість NEAT полягає в його здатності до виявлення ключових нейронів і з’єднань, а також в ефективному кросовері різноманітних генотипів нейромереж. Цей механізм забезпечує, що тільки найадаптивніші індивіди передають свої особливості наступним поколінням [6].

Якщо класичний NEAT зосереджений переважно на оптимізації, то *Quality Diversity* алгоритми розширюють сферу застосування, підтримуючи різноманіття популяції за допомогою експлорації нових, навіть менш оптимальних ніш. Такі алгоритми, як MAP-Elites, заохочують до збереження унікальних індивідів, оскільки кожен може бути оптимальним в своєму контексті. MAP-Elites забезпечує “освітлення” простору можливих рішень, що дає більший огляд потенційних розв’язків, які знаходять за допомогою масового паралельного пошуку [4].

Однією з останніх розробок в області QD та NEAT алгоритмів є ViE-NEAT, який використовує принципи виживання (*Viability Evolution*) для відбору індивідів. Замість того, щоб покладатися тільки на функцію оцінки як критерій успіху, ViE-NEAT робить акцент на здатності індивіда досягати певних порогових значень виживаності, що дає йому змогу адаптуватися й існувати в різних середовищах. Такий підхід сприяє як появі нових оригінальних рішень, так і збереженню їх різноманітності.

В алгоритмі ViE-NEAT застосовано певні обмеження на різні параметри, які потребують оптимізації. Наприклад, для робототехніки це може бути швидкість виконання завдання, енерго-ефективність, зменшення кількості непотрібних рухів та інші обмеження, характерні для завдання. На кожній ітерації алгоритму обмеження заданих параметрів збільшуються так, щоб вилучити частину найгірших рішень (рис. 1). У результаті певної кількості ітерацій отримують деяку кількість різноманітних і оптимізованих за різними параметрами рішень [2].

Прикладом очевиднішої інтеграції QD-алгоритмів з NEAT є використання алгоритму пошуку новизни (*The Search for Novelty*) з NEAT.

Еволюційні алгоритми, такі як NEAT, добре підходять для використання пошуку новизни, оскільки популяція, яка є центральною для таких алгоритмів, природно охоплює широкий діапазон

поведінки, що розширюється. Насправді відстеження новизни потребує незначних змін у будь-якому еволюційному алгоритмі, окрім заміни функції відповідності функцією новизни.

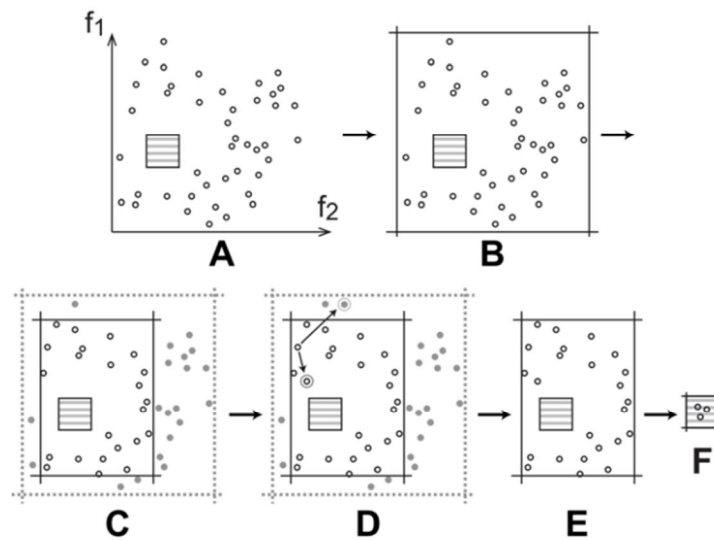


Рис. 1. Аналіз роботи алгоритму ViE-NEAT [2]

Функція новизни вимірює, наскільки одне рішення відрізняється від сукупності інших, заохочуючи генерацію унікальних розв’язків. Ключова ідея така: замість винагороди за досягнення мети алгоритм пошуку новизни винагороджує відхилення від попередньої поведінки, тому для цього потрібно вимірювати новизну [5].

Комбінація алгоритмів MAP-Elites і NEAT – потужний підхід до навчання нейромереж з урахуванням різноманітності розв’язків та оптимізації їх архітектур. MAP-Elites – еволюційний підхід, який поєднує QD алгоритми з мережею дво- або багатовимірних “елітних” карт. Ці карти використовують для збереження найкращих рішень у кожній клітині простору параметрів. Основними перевагами MAP-Elites є здатність знайти широкий спектр розв’язків, що відображають різноманітність рішень для конкретно поставленого завдання (рис. 2).

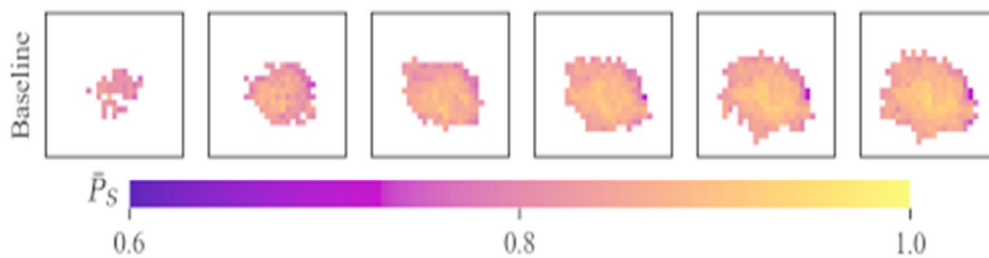


Рис. 2. Приклад візуалізації заповнення поведінкового простору алгоритмом MAP-Elites у процесі навчання [4]

NEAT, з іншого боку, є еволюційним алгоритмом, який дає змогу генерувати та оптимізувати структуру нейромереж. Через механізми зростання, розширення та збереження історії еволюції, NEAT забезпечує пошук оптимального набору параметрів і архітектур нейромереж для досягнення ефективної продуктивності [3].

Об’єднання MAP-Elites з NEAT дає змогу поєднати ці два еволюційних підходи, створюючи ефективніший та гнучкіший алгоритм навчання нейромереж. Алгоритм починається з початкової

популяції нейромереж, які випробовують та оцінюють за певними метриками. Розв'язки з кращими результатами розміщують відповідно до їх характеристик у клітинки карти MAP-Elites.

Еволюційний процес починається з використання NEAT для створення перших геномів. В експерименті кількість початкових рішень встановлено на 150. На кожній ітерації нові рішення генеруються за допомогою генетичних операторів, таких як схрещення та мутація, відповідно до певних правил. В експерименті генерується 150 нових розв'язків. Кожне рішення генерують, вибираючи два наявні та використовуючи генетичні оператори. Згенеровані рішення перевіряють та оцінюють за допомогою фітнес-функції, а потім поміщають відповідно до їх ефективності в карту MAP-Elites. На наступному кроці відбувається порівняння з “елітними” розв'язками та можливі заміни, якщо нові рішення будуть кращими.

Цей процес повторюється ітераційно, даючи змогу знайти оптимальний набір параметрів і топології нейронної мережі для вирішення складних завдань. Завдяки поєднанню MAP-Elites з NEAT можна досягти ефективної еволюції нейронних мереж із оптимальною структурою та продуктивністю, зберігаючи різноманітність рішень.

Узагальнимо: об'єднання MAP-Elites з NEAT створює потужний підхід для навчання нейромереж, який поєднує ефективну генерацію “елітних” розв'язків та збереження їх різноманітності в картах MAP-Elites з оптимізацією структури нейромереж за допомогою алгоритму NEAT. Цей підхід може знайти широкий спектр ефективних розв'язків для складних задач і відкрити нові можливості для розвитку нейроеволюції.

Після інтеграції MAP-Elites з NEAT необхідно об'єктивно виміряти ефективність розв'язання задач. У експерименті продемонстровано ефективність використання Map-Elites з NEAT для пошуку рішення проблеми знаходження результату виконання операції XOR над двома вхідними бітами. Завдання було вибрано через високу продуктивність NEAT у цьому завданні, і, відповідно, зроблено спробу показати, що за ідеальних для NEAT умов поєднання MAP-Elites з NEAT забезпечує покращення.

Для експерименту використано реалізацію алгоритмів NEAT та MAP-Elites з NEAT на мові програмування Python для навчання нейромереж із обчисленням XOR двох бітів. Функцію оцінки визначено за формулою:

$$f = 4 - \sum_{i=1}^4 (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (1)$$

де y_i – вихід нейромережі ($y_i \in [0; 1]$), \hat{y}_i – правильна відповідь (0 або 1) залежно від вхідних даних.

Початкова кількість рішень становила 150 одиниць, кожна ітерація генерувалася новими розв'язками за допомогою операторів мутації та кросоверу NEAT. Загалом виконано 128 ітерацій обох алгоритмів. Для забезпечення достовірності та уникнення випадкових відхилень результатів експеримент повторили 1024 рази, а також розрахували середнє значення функції оцінки для кожної ітерації обох алгоритмів.

Згідно з дослідженням (рис. 3) можна зазначити, що використання поєднання MAP-Elites та NEAT забезпечило покращення результатів за меншої кількості ітерацій. Отримані дані свідчать, що цей підхід виявляється ефективнішим, не лише надаючи кращі результати, але й пропонуючи оптимальніші рішення порівняно із NEAT.

Використання таких алгоритмів може стати особливо корисним в робототехніці, де потрібно швидко та ефективно навчати роботів адаптуватися до змінних умов навколишнього середовища. MAP-Elites з NEAT істотно пришвидшить роботу в практичних задачах завдяки його здатності до автоматизованої еволюції нейромережі, що дасть змогу моделювати складні зв'язки та оптимізувати їхню архітектуру. Прикладами практичних задач, для яких MAP-Elites з NEAT може бути корисним, є керування рухом роботів, навчання роботів виконувати завдання в умовах, що постійно змінюються, а також розроблення систем штучного інтелекту для автономних транспортних засобів.

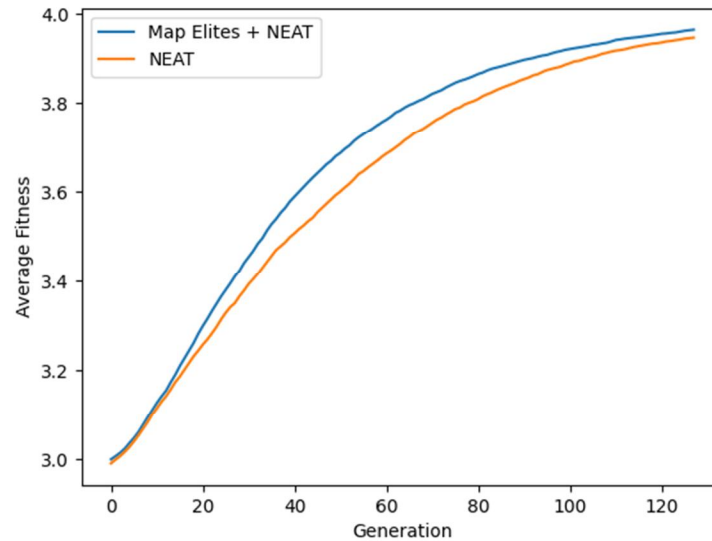


Рис. 3. Результати експерименту (*Generation* – генерація або ж ітерація; *Average Fitness* – середній результат функції оцінки за результатами 1024 експериментів)

Висновки

У статті запропоновано методику адаптації алгоритму NEAT до комплексних задач за допомогою QD алгоритмів. Методика охоплює застосування концепції NEAT та алгоритм MAP-Elites, що разом формують сильний і гнучкий інструментарій для генерації широкого спектра рішень. ViE-NEAT також розглянуто як спробу впровадження подібного рішення, він показав великий потенціал таких алгоритмів. У результаті цей підхід відкриває шлях до створення ефективних та адаптивних систем в різних сферах, серед яких робототехніка, автоматизація і медичне моделювання для вибору правильних та оптимальних стратегій лікування. Адаптований NEAT з QD алгоритмами є одним із перспективних напрямів у сучасних дослідженнях інтелектуальних систем та являє собою потужний інструмент для подальших інновацій і практичного застосування.

Список літератури

1. Andersson, M. (2022). *How does the performance of NEAT compare to Reinforcement Learning?* KTH Royal Institute of Technology. URL: <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1643563/FULLTEXT01.pdf>.
2. Maesani, A., Fernando, P.-R., Floreano, D. (2014). Artificial Evolution by Viability Rather than Competition, *PLoS ONE*, 9(1), e86831, 1–12. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0086831>.
3. Mouret, J.-B., Clune, J. (2015). Illuminating search spaces by mapping elites. *ArXiv preprint*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1504.04909>.
4. Sfikas, K., Liapis, A., Yannakakis, G.N. (2023). Controllable Exploration of a Design Space via Interactive Quality Diversity, *GECCO'23 Companion: Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, 167–170. <https://doi.org/10.1145/3583133.3590616>.
5. Stanley, K. O., Lehman, J. (2008). Exploiting Open-Endedness to Solve Problems Through the Search for Novelty, *Artificial Life XI*, 329–336. URL: https://eplex.cs.ucf.edu/papers/lehman_alife08.pdf.
6. Stanley, K. O., Miikkulainen, R. (2002). Evolving Neural Networks through Augmenting Topologies, *Evolutionary Computation*, 10(2), 99–127. <https://doi.org/10.1162/106365602320169811>.

References

1. Andersson, M. (2022). *How does the performance of NEAT compare to Reinforcement Learning?* KTH Royal Institute of Technology. URL: <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1643563/FULLTEXT01.pdf>.
2. Maesani, A., Fernando, P.-R., Floreano, D. (2014). Artificial Evolution by Viability Rather than Competition, *PLoS ONE*, 9(1), e86831, 1–12. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0086831>.

3. Mouret, J.-B., Clune, J. (2015). Illuminating search spaces by mapping elites. *ArXiv preprint*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1504.04909>.
4. Sfikas, K., Liapis, A., Yannakakis, G.N. (2023). Controllable Exploration of a Design Space via Interactive Quality Diversity, *GECCO'23 Companion: Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, 167–170. <https://doi.org/10.1145/3583133.3590616>.
5. Stanley, K. O., Lehman, J. (2008). Exploiting Open-Endedness to Solve Problems Through the Search for Novelty, *Artificial Life XI*, 329–336. URL: https://eplex.cs.ucf.edu/papers/lehman_alife08.pdf.
6. Stanley, K. O., Miikkulainen, R. (2002). Evolving Neural Networks through Augmenting Topologies, *Evolutionary Computation*, 10(2), 99–127. <https://doi.org/10.1162/106365602320169811>.

ADAPTATION OF THE NEAT ALGORITHM FOR COMPLEX PROBLEMS WITH THE HELP OF QUALITY DIVERSITY ALGORITHMS

Ihor Liakh¹, Vasyl Morokhovych², Vasyl Kut³, Vasyl Vakulchak⁴, Dmytro Maior⁵

Uzhhorod National University,
Department of Information Sciences and Physics and Mathematics Disciplines, Uzhhorod, Ukraine

¹igor.lyah@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0001-5417-9403

²vasyl.morokhovych@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0002-4939-6566

³vasyl.kut@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-00001-5267-311X

⁴vasyl.vakulchak@uzhnu.edu.ua, ORCID 0000-0001-6037-8978

⁵mayor4090@gmail.com, ORCID 0009-0006-1188-6320

© liakh I., Morokhovych V., Kut V., Vakulchak V., Maior D., 2023

The article discusses the essence of the NEAT (NeuroEvolution of Augmenting Topologies) algorithm in solving problems of neural network optimization and evolution of their topologies. An overview of the current state of use of NEAT and its adaptations in evolutionary computing research is given. The need for the Quality Diversity (QD) approach to increase the diversity and quality of solutions in complex problems is substantiated. The QD concept and its impact on the search for innovative solutions within diverse search spaces are described. The application of ViE-NEAT, which combines the advantages of survival of the fittest solutions with the principle of maintaining diversity, is described. The main aspects of ViE-NEAT are compared with the traditional NEAT, analyzing the advantages of using the survival algorithm in comparison with competitive methods. A detailed description of the MAP-Elites algorithm is given, which demonstrates an alternative approach to finding solutions by ensuring the diversity of the “illuminated” feature space, which can be integrated with NEAT to form a more diversified population of solutions. The main focus is on the methodology of integrating NEAT with MAP-Elites algorithms to create an adapted search strategy. Based on the basic principles of NEAT, the possibilities of its extension for effective solution of new problems that are not limited to traditional parametric spaces are determined. An analysis of the results demonstrating the efficiency of using the adapted NEAT algorithm in comparison with traditional approaches to the evolution of neural networks is presented.

Key words: NeuroEvolution of Augmenting Topologies (NEAT); Quality Diversity (QD); ViE-NEAT; MAP-Elites; neural network optimization; evolutionary algorithms.