Эвристики локальных улучшений для некоторых задач регрессии и классификации

Захаров А. О.

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН (Омский филиал)

DICR-2022

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-71-10015.

Задачи оптимизации с древовидным представлением решений

- задачи построения нелинейных моделей (математических выражений, функций, алгоритмов, программ) на основе заданных экспериментальных данных, множества переменных, базовых функций и операций
- синтез решающих деревьев
- идентификация паттернов в семействах белков и других биопоследовательностей

Генетическое программирование

В алгоритме генетического программирования популяция деревьев итеративно преобразуется посредством операторов воспроизведения, аналогичных процессам селекции, кроссинговера (рекомбинации), мутации и локальных улучшений в живой природе и социумах[a].

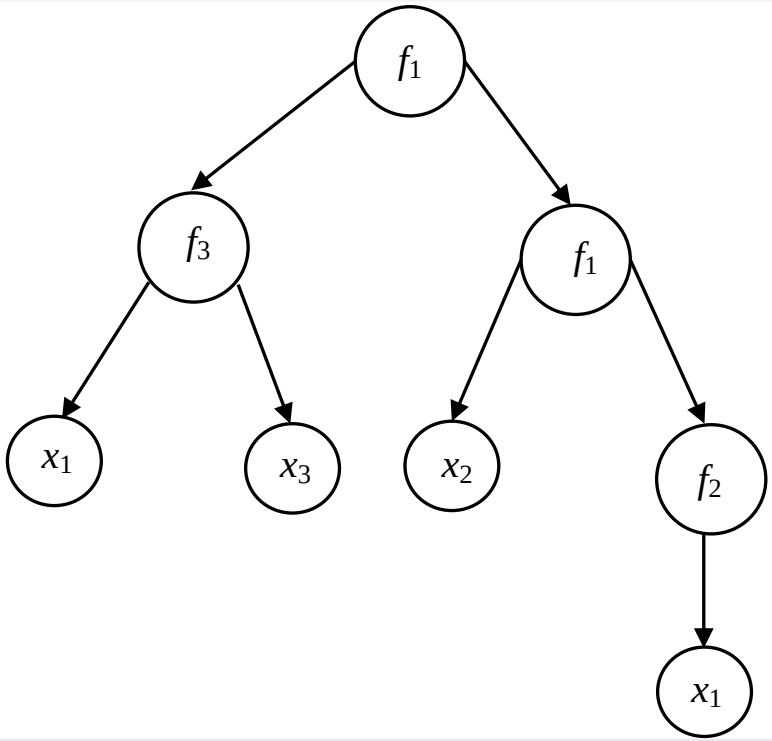
[a] Koza J.R., Poli R.: Genetic programming (2005)

Литература

1. 1. Koza J.R., Poli R. (2005) Genetic Programming. In: Burke E.K., Kendall G. (eds) Search Methodologies. Springer, Boston, MA.
2. Poli, R., Page, J. Solving High-Order Boolean Parity Problems with Smooth Uniform Crossover, Sub-Machine Code GP and Demes. Genetic Programming and Evolvable Machines 1, 37-56 (2000).
3. Langdon, W.B. Size Fair and Homologous Tree Crossovers for Tree Genetic Programming. Genetic Programming and Evolvable Machines 1, 95-119 (2000).
4. Poli, R., Page, J. Solving High-Order Boolean Parity Problems with Smooth Uniform Crossover, Sub-Machine Code GP and Demes. Genetic Programming and Evolvable Machines 1, 37-56 (2000).
5. Moraglio A., Krawiec K., Johnson C.G. (2012) Geometric Semantic Genetic Programming. PPSN 2012. Lecture Notes in Computer Science, vol 7491. Springer, Berlin, Heidelberg.

Представление решений

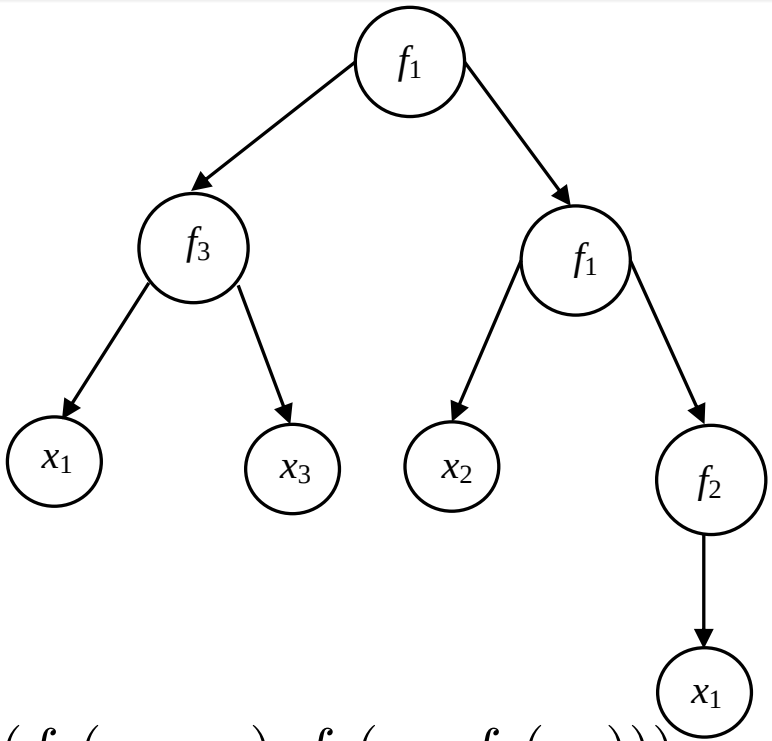
Функциональное дерево $T = (V, E)$,
Листья из множества $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_m\}$,
Вершины из множества базовых функций $\mathcal{F} = \{f_1, f_2, \ldots, f_k\}$



$X = \{x_1, x_2, x_3\}$,
$\mathcal{F} = \{f_1, f_2, f_3\}$

Задача оптимизации

Вход: набор пар $\{(\bar{x}^i, y^i)\}$,
$\bar{x}^i = (\bar{x}^i_1, \ldots, \bar{x}^i_m)$, $i = 1, \ldots, n$. n - объем обучающий выборки
Целевая функция $g(T) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - T(\bar{x}^i_m))^2$,
$T(\bar{x}^i)$ - значение функционала на дереве T в $\bar{x}^i$



$$T(x_1, x_2, x_3) = f_1(f_3(x_1, x_3), f_1(x_2, f_2(x_1)))$$

Эволюционные алгоритмы (генетическое программирование)

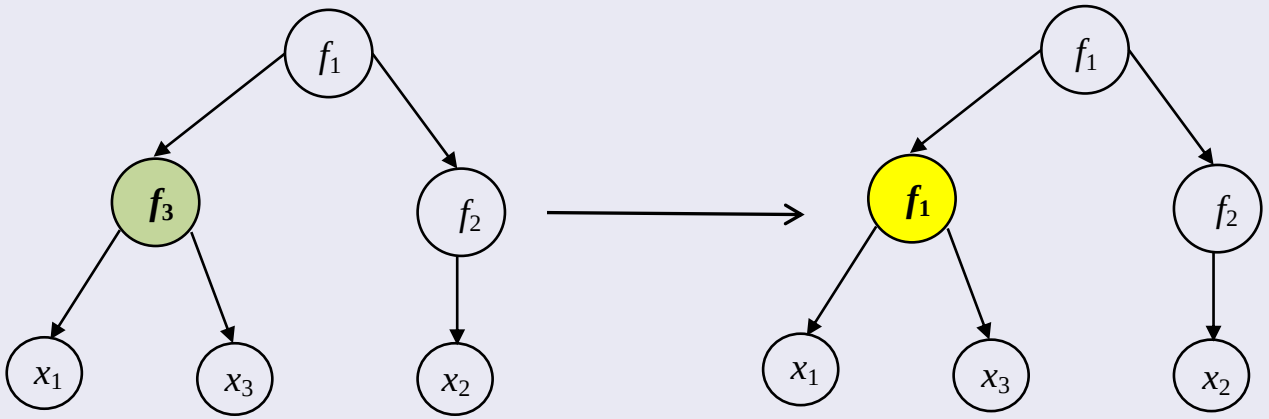
Основной принцип работы ЭА основан на компьютерном моделировании процесса эволюции с учетом факторов изменчивости, наследования и отбора наиболее приспособленных особей.

Схема алгоритма

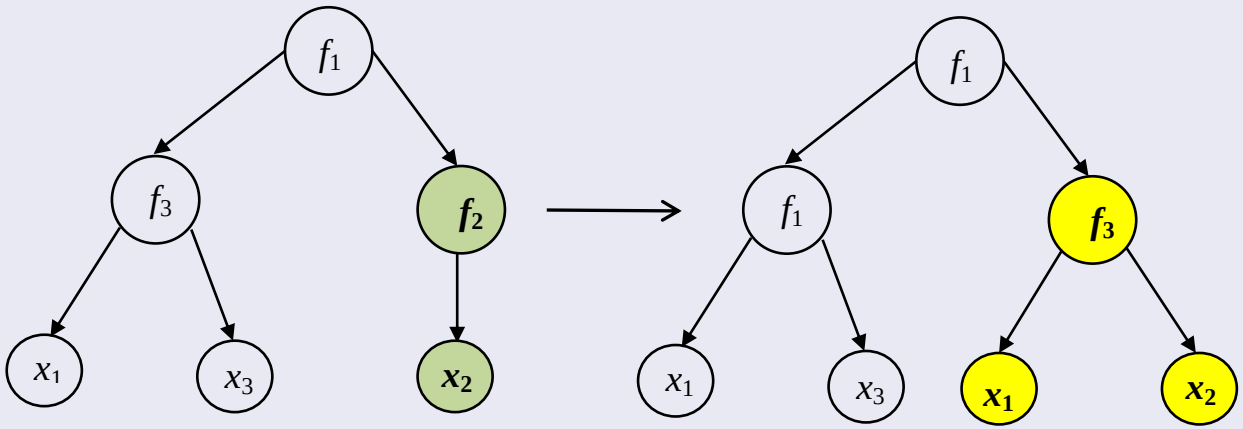
1. Построить начальную популяцию.
2. Повторять шаги 2.1-2.4 пока не выполнен критерий остановки:
   2.1 Выбрать двух родителей $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2$ из текущей популяции.
   2.2 Применить мутацию к $\mathbf{T}_1$ и $\mathbf{T}_2$ с вероятностью p_m. Получить $\mathbf{T'}_1$ и $\mathbf{T'}_2$
   2.3 Построить потомка $\mathbf{T}'$ с помощью скрещивания $\mathbf{T}'_1$ и $\mathbf{T}'_2$.
   2.4 Заменить $\mathbf{T}'$ одну из «худших» особей в популяции.
3. Вернуть в качестве результата лучшее по целевой функции дерево за все время работы алгоритма.

Операторы мутации для деревьев

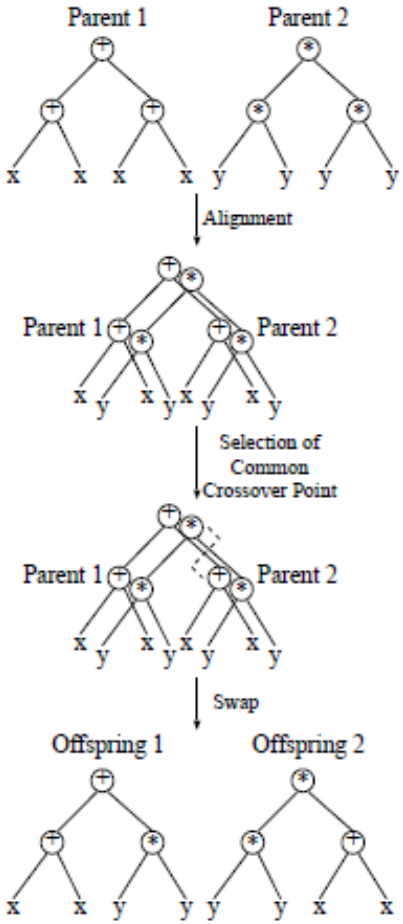
Точечная мутация



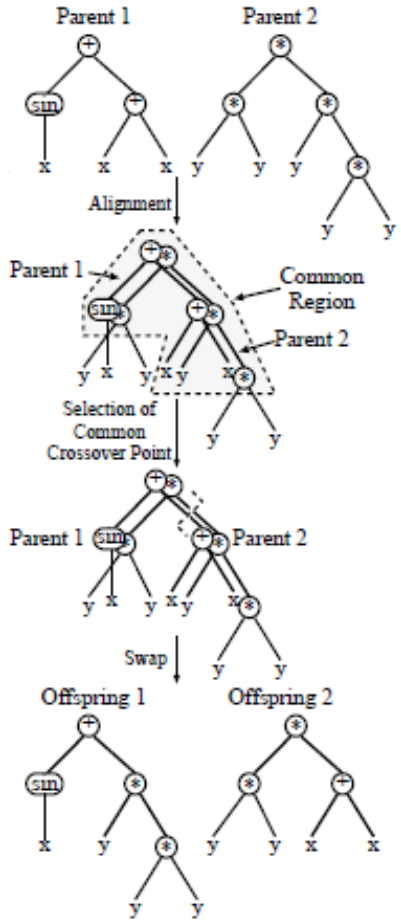
Замена поддерева



Одноточечный кроссинговер на деревьях



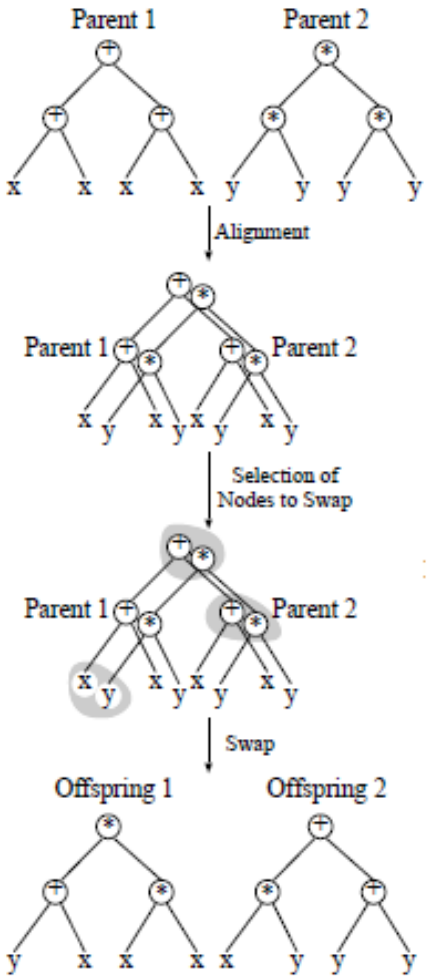
идентичная форма



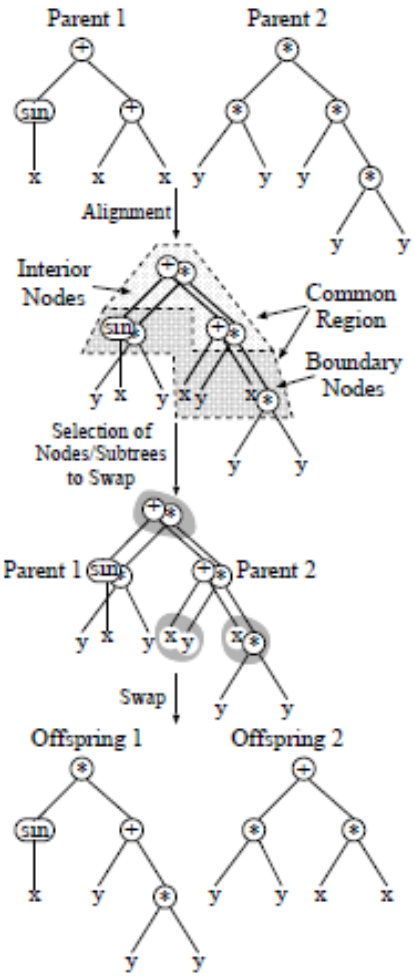
общий случай

Poli R., Langdon W.B. On the search properties of different crossover operators in genetic programming (1998)

Равномерный кроссинговер на деревьях



идентичная форма



общий случай

Poli R., Page J. Solving high-order Boolean parity problems with smooth uniform crossover, sub-machine code GP and demes (2000)

Задача оптимальной рекомбинации (ЗОР)

Определение основано на свойстве передачи генов.[1]

Задача оптимальной рекомбинации

[a] **Дано:** индивидуальная задача комбинаторной оптимизации I с множеством допустимых решений Sol и два родительских решения
$\mathbf{p}^1 = (p_1^1, \ldots, p_l^1), \mathbf{p}^2 = (p_1^2, \ldots, p_l^2)$ из Sol.
Найти: допустимое решение (потомка) $\mathbf{p}' \in \mathrm{Sol}$ такое что

1. $p'_j = p_j^1$ или $p'_j = p_j^2 \quad \forall\ j = 1, \ldots, l,$
2. для каждого $\bar{\mathbf{p}} \in \mathrm{Sol}$ такого что $\bar{\mathbf{p}}_j = p_j^1$ или $\bar{\mathbf{p}}_j = p_j^2\ \forall\ j$ имеет место

$$f(\mathbf{p}') \leq f(\bar{\mathbf{p}})$$

(в случае задачи на минимум).

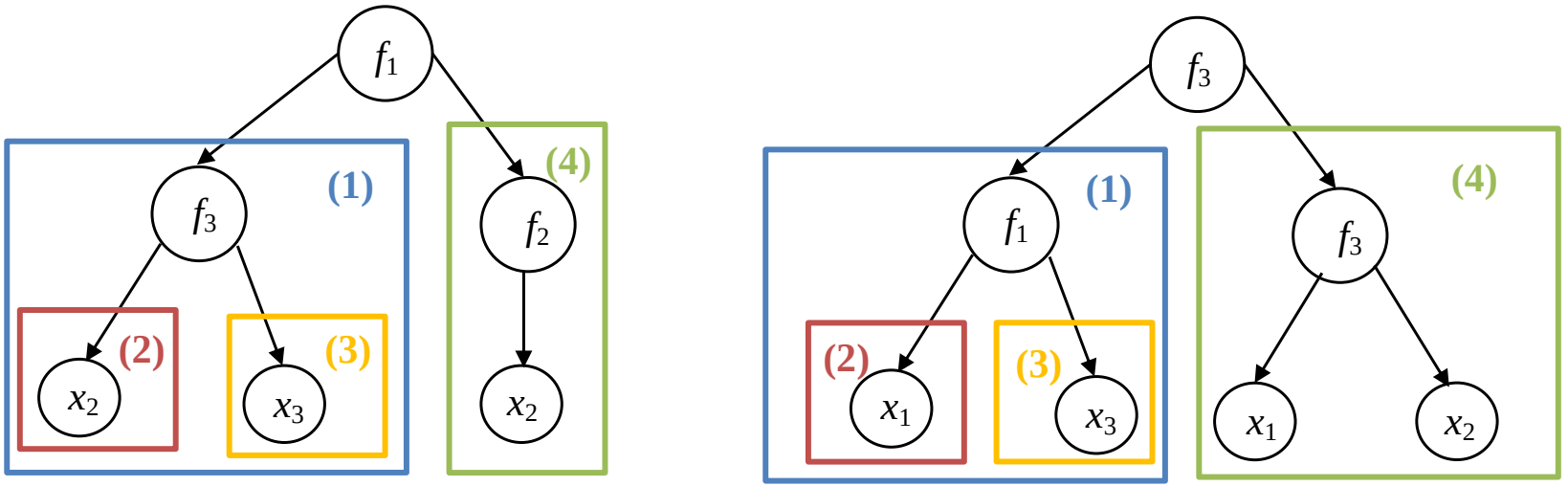
---

[a] A.V. Eremeev, J.V. Kovalenko. Optimal recombination in genetic algorithms for combinatorial optimization problems (2014)

---

[1] Radcliffe, N.J.: The algebra of genetic algorithms (1994)

ЗОР на деревьях



Рассматриваемые виды скрещивания:

Одноточечный кроссинговер: 4 варианта - (1), (2), (3), (4).
Строгий кроссинговер: 3 варианта - (2), (3), (4).
Равномерный (строгий) кроссинговер, 2^3 вариантов - комбинации из (2), (3), (4).

Эксперимент на булевых деревьях

Деревья $T = (V, E)$

Листья $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_m\}$, $x_i \in \{0, 1\}$, $i = 1, 2, \ldots, m$.
Базовые функции $\mathcal{F} = \{\wedge, \vee, \neg\wedge, \neg\vee\}$.

Тестовые данные

1. Even-parity
2. Мультиплексор (3-MUX, 6-MUX, 11-MUX)
3. Случайно сгенерированные значения

even-parity:

0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	1
0	1	1	0
1	0	0	1
1	0	1	0
1	1	0	0
1	1	1	1

3-MUX:

0	0	0	0
0	0	1	0
0	1	0	1
0	1	1	1
1	0	0	0
1	0	1	1
1	1	0	0
1	1	1	1

Эксперимент на булевых деревьях

Начальная популяция: метод Full глубины d
Турнирная селекция
Мутация: замена поддерева (SUBTREE)
LS: first improvement с неполным просмотром окрестности, SUBTREE
Кроссинговер:
OPT_STR_SINGLE_POINT, OPT_SINGLE_POINT, RAND_STR_SINGLE_POINT, RAND_SINGLE_POINT, OPT_STR_UNIFORM

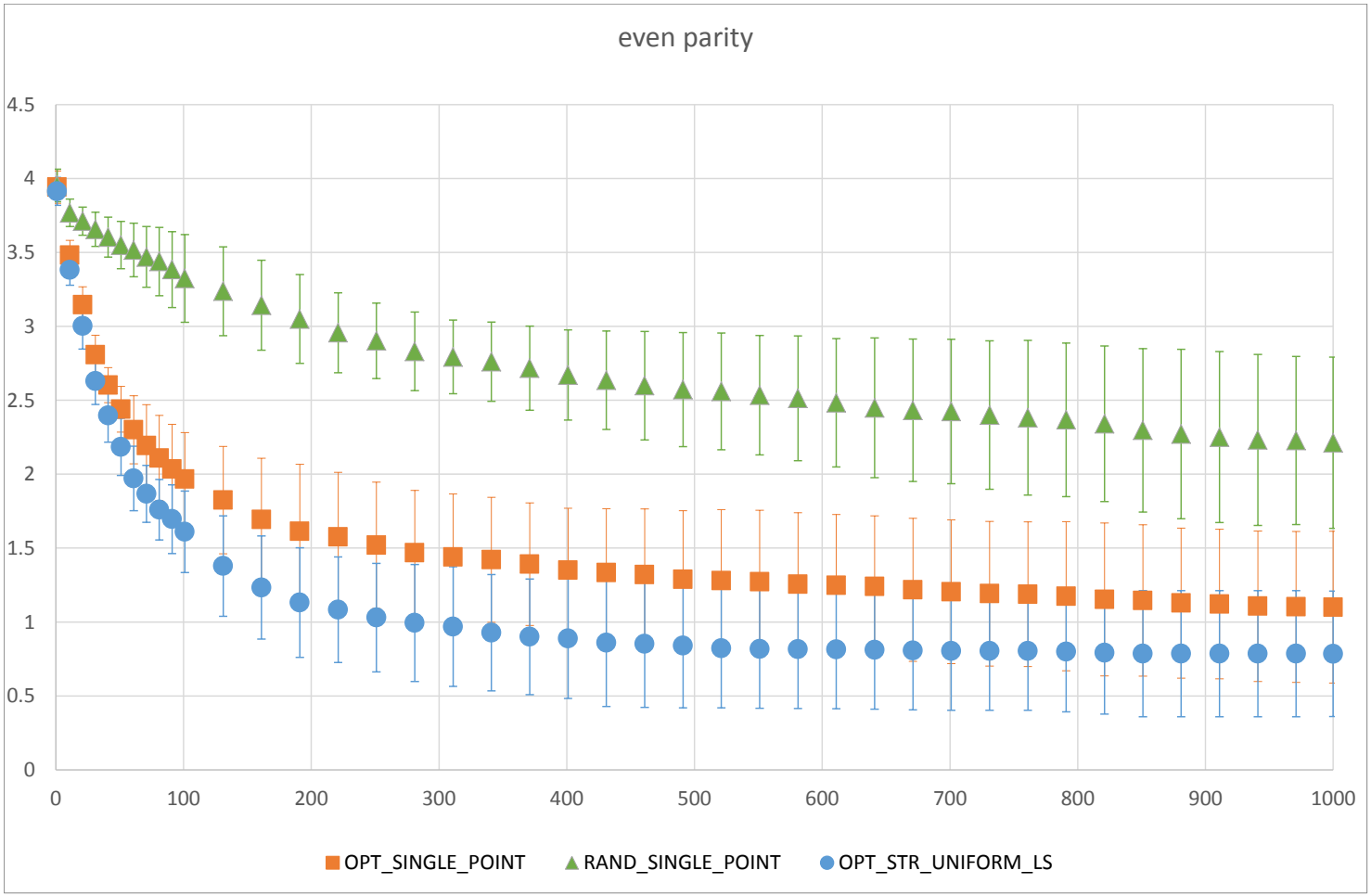
Схемы экспериментов

1. SUBTREE + OPT_STR_SINGLE_POINT
2. SUBTREE + OPT_SINGLE_POINT
3. SUBTREE + RAND_STR_SINGLE_POINT
4. SUBTREE + RAND_SINGLE_POINT
5. LS (SUBTREE) + OPT_STR_UNIFORM

Результаты эксперимента, even-parity

1000 итераций, 30 запусков

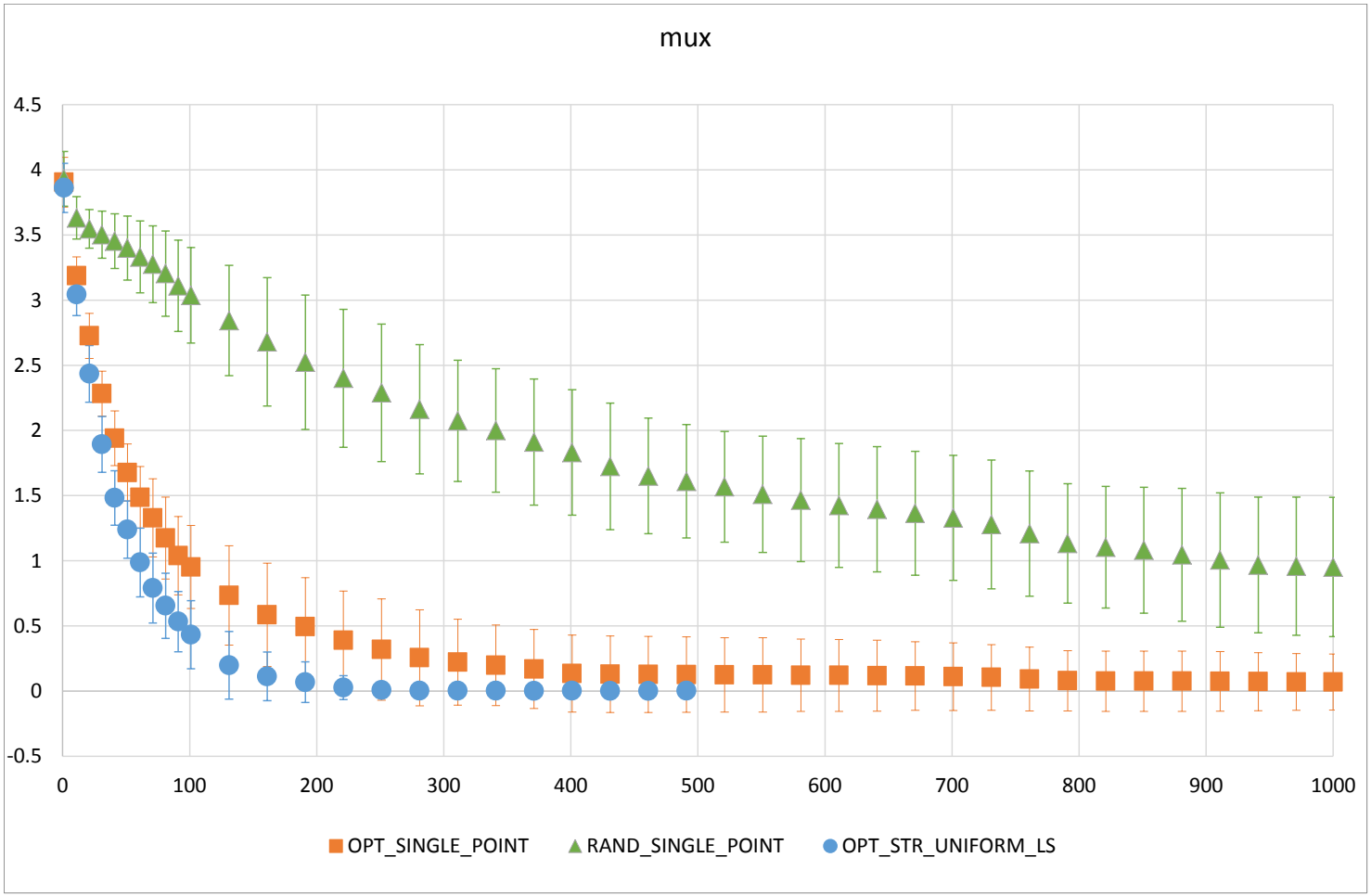
График: среднее значение целевой функции на популяции



Результаты эксперимента, mux

1000 итераций, 30 запусков

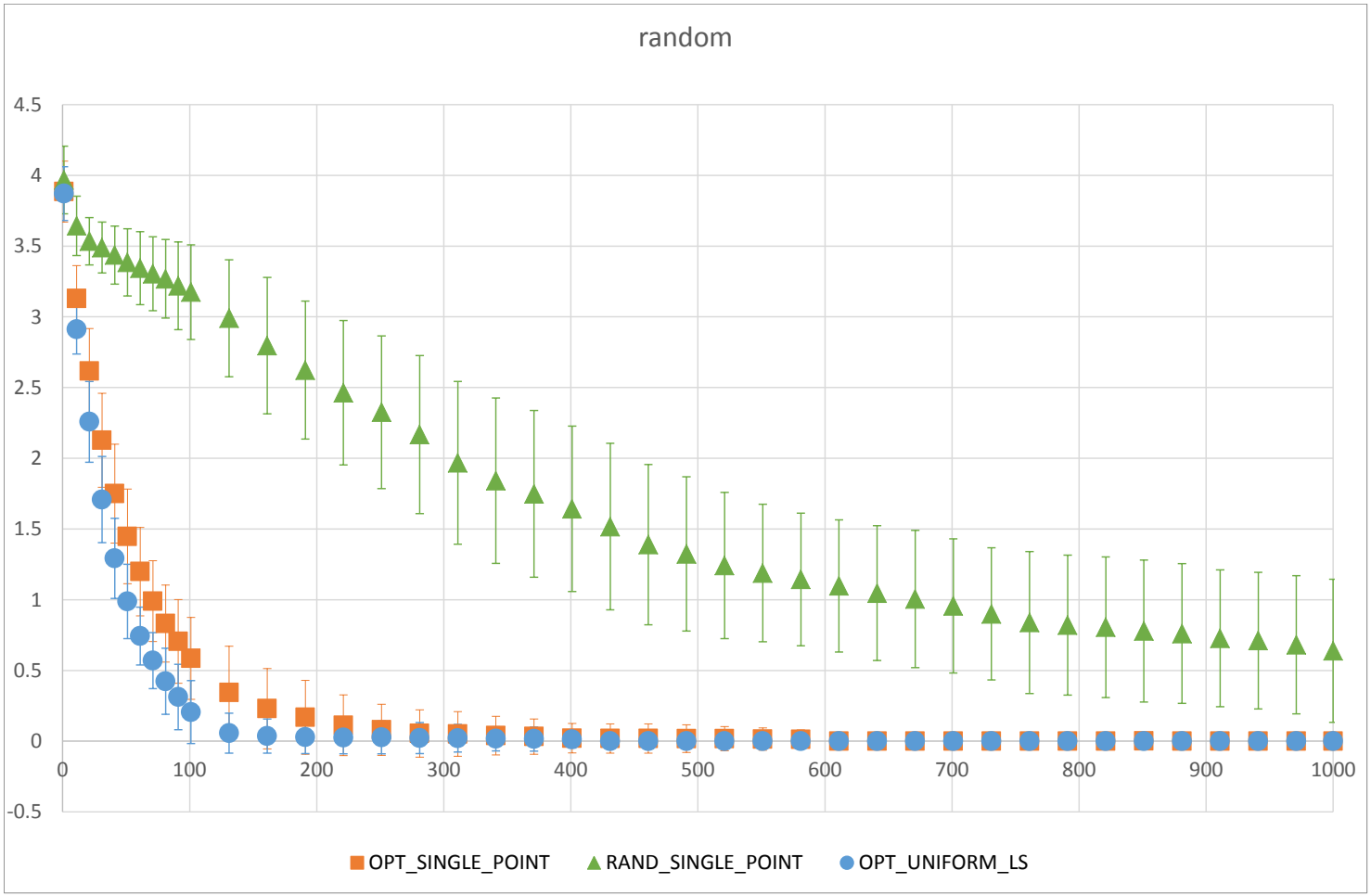
График: среднее значение целевой функции на популяции



Результаты эксперимента, случайным образом

1000 итераций, 30 запусков

График: среднее значение целевой функции на популяции



Рекорд в эксперименте

Доля запусков, в которых получено оптимальное значение целевой функции за равное время работы алгоритма.

	OPT_STR_SNGL	OPT_SNGL	RAND_STR_SNGL	RAND_SNGL	OPT_UNI
even-parity	0 (0.87*)	0.4 (1*)	0 (0.43*)	0 (0.5*)	0.53 (1*)
mux	0.93	1	0.57	0.77	1
rand	0.93	1	0.7	0.83	1

* доля запусков, когда получено значение, отличное на 1 от оптимального

Заключение

1. Рассмотрены задачи оптимизации с представлением решений в виде деревьев. Алгоритм генетического программирования.
2. Исследована задача оптимальной рекомбинации (ЗОР) на деревьях.
3. Проведен вычислительный эксперимент на тестовых задачах с булевыми деревьями и функциями: even-parity, mux, rand. Проанализирована работа рандомизированных и оптимизированных операторов скрещивания.

Спасибо за внимание!