

УДК 519.6

САМОНСТРАИВАЮЩИЙСЯ ЭВОЛЮЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТНЫХ МОДЕЛЕЙ

Полонская Я.С. (Университет ИТМО), Никитин Н.О. (Университет ИТМО)
Научный руководитель – к.т.н., доцент Калюжная А.В.
(Университет ИТМО)

Аннотация. В данной работе предлагается самонастраивающийся многокритериальный эволюционный подход к автоматизации подбора архитектуры композитных математических моделей, основанных на данных. Алгоритм адаптирует значения гиперпараметров на протяжении всей эволюции без необходимости задания их вручную. Экспериментальные исследования на задачах классификации подтвердили эффективность данного подхода. В качестве критериев оптимизации композитных моделей использовалась метрика качества (ROC-AUC) и метрика сложности структуры модели (время затраченное на настройку модели).

Введение. Разработка математических моделей, управляемых данными, является довольно актуальным направлением исследований в современной науке о данных. До недавнего времени успешные модели машинного обучения проектировались специалистами вручную. Однако этот метод требует выполнения множества рутинных операций и повторения экспериментов, что обычно является дорогостоящей в вычислительном отношении процедурой, которая не всегда приводит к успеху. Целью поиска архитектуры модели является достижение соответствующих значений различных критериев (например, качества моделирования) одновременно удовлетворив заданным ограничениям (например, связанные со временем). Во многих случаях невозможно максимизировать все критерии одновременно, что приводит к многокритериальной проблеме оптимизации. Помимо этого, хорошо известно, что эволюционные подходы успешно применяются ко многим реальным задачам оптимизации, но их эффективность в значительной степени зависит от выбора правильных гиперпараметров, в связи с этим мы модифицировали стандартную эволюционную схему с помощью эвристики самоконфигурации для большего количества гиперпараметров эволюционного алгоритма.

Основная часть. Предлагаемая реализация оптимизатора структуры композитных моделей основана на алгоритме генетического программирования (ГП). В отличие от многих других алгоритмов, генетическое программирование позволяет нам использовать высокоуровневую постановку задачи. Он находит композитную модель (или несколько моделей-кандидатов в многоцелевом случае) для определенной задачи машинного обучения из заранее определенного набора доступных моделей.

На первом шаге своей работы алгоритм инициализирует популяцию цепочек со случайной структурой, затем несколько моделей в популяции выбираются в качестве родителей с использованием предпочтительного метода селекции и далее каждая новая модель (потомок) получается путем скрещивания двух родителей с помощью оператора кроссовера и некоторые мутируют посредством оператора мутации. Каждый оператор имеет вероятность выполнения, которая может быть статической или динамической в зависимости от выбранной эволюционной схемы. После создания структуры дочерней модели она обучается с использованием обучающей выборки, оценивается с помощью тестовой выборки и добавляется к новой генеральной совокупности. Эти манипуляции выполняются в течение нескольких поколений, пока не будут выполнены критерии останова (в качестве которых могут выступать: достижение заданного количества поколений эволюционного алгоритма, достижение временного ограничения и т. д.).

Предложенная нами многокритериальная схема эволюции с самонастройкой гиперпараметров использует стационарную схему эволюции (называемую так же $\mu + \lambda$), но размер популяции (μ) изменяется во время эволюции, по последовательности Фибоначчи, а размер потомства (λ) всегда является предыдущим числом последовательности относительно μ . Вероятность выполнения операторов скрещивания и мутации также изменяется в зависимости от разнообразия популяции. Также мы реализовали эвристическую адаптацию глубины цепочек, что позволяет избежать слишком сложных индивидов. Работа алгоритма всегда начинается с цепочек малой глубиной, и, если в течение нескольких поколений цели не улучшаются ограничение на глубину увеличивается.

Выводы. В работе мы предлагаем подход самонастройки, который можно эффективно использовать без дополнительной метаоптимизации, что критически важно для приложения в решениях, связанных с автоматическим машинным обучением, поскольку позволяет достичь большей степени автоматизации. Результаты экспериментов подтверждают, что предложенный эволюционный подход позволяет достичь стабильного преимущества перед другими различными однокритериальными и многокритериальными реализациями. Композитные модели, найденные с помощью предложенного подхода, более эффективны и менее сложны в соответствии с различными тестами. Предлагаемый подход не ограничивается проблемой проектирования композитных моделей и может применяться как часть различных решений автоматического моделирования (например, для поиска архитектур нейронных сетей и т. д.).

Полонская Я.С. (автор)

Калюжная А.В. (научный руководитель)