

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ЭВОЛЮЦИОННЫХ И РОЕВЫХ АЛГОРИТМОВ

А. В. Чепурнов^{1,*}, *Н. М. Ершов*^{1,2,**}

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

² Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

Работа посвящена построению рекомендательной системы для анализа эффективности алгоритмов решения крупноразмерных задач многомерной оптимизации. Рассматриваются несколько существующих систем выбора наиболее эффективных алгоритмов, использующих решающие деревья. Предлагается подход прогнозирования эффективности, основанный на проведении статистического анализа гибридными методами фильтрации данных, приводится сравнение описанных методов.

The paper is devoted to the construction of a recommendation system for analyzing the effectiveness of algorithms for solving large-scale multidimensional optimization problems. Several existing systems for selecting the most efficient algorithms using decision trees are considered. An approach to predicting efficiency is proposed, based on statistical analysis using hybrid data filtering methods, and a comparison of the described methods is provided.

PACS: 89.20.Ff; 07.05.Tr

ВВЕДЕНИЕ

Крупноразмерные задачи оптимизации характеризуются тысячами или десятками тысяч параметров оптимизации, причем какая-либо дополнительная информация о ландшафте целевой функции оптимизации и его свойствах может быть неизвестна. Такие задачи возникают в широком спектре направлений машинного обучения и других прикладных областях [1]. При этом целевая функция может предполагать необходимость численного моделирования некоторых явлений, поэтому сам процесс ее вычисления может быть весьма ресурсозатратным. Как правило, при решении данных задач стремятся найти наилучшее решение, не превышая «бюджет» целевой функции, — некоторое ограничение на количество ее вычислений.

* E-mail: andvch@ya.ru

** E-mail: ershovnm@gmail.com

За последнее десятилетие интерес к обозначенному направлению исследований возрос, и на сегодня уже разработано множество алгоритмов оптимизации, многие из которых обладают быстрой сходимостью к качественным решениям для некоторых классов таких задач. Тем не менее эти алгоритмы обычно обладают низкой обобщаемостью на широкие классы задач. Это связано с общеизвестной проблемой «проклятия размерности» — пространство решений задач экспоненциально возрастает с увеличением размерности, а свойства функции могут существенно изменяться. В связи с этим возникают сложности при выборе наиболее эффективного алгоритма оптимизации и его гиперпараметров для решения поставленной задачи с определенным бюджетом. Цель нашего исследования — разработка метода, который позволил бы прогнозировать эффективность работы таких алгоритмов.

ОБЗОР СУЩЕСТВУЮЩИХ МЕТОДОВ ВЫБОРА АЛГОРИТМА

Для решения данных задач широко используются эвристические эволюционные и роевые алгоритмы (GA, BF, ABC, DF, PSO, CSO) [2], основанные на принципах биологической эволюции и поведенческих признаках. Такие алгоритмы предполагают последовательное выполнение над множеством потенциальных решений некоторых операторов, таких как размножение, мутация и отбор (в случае генетических алгоритмов).

Получение максимально полной информации об эффективности работы алгоритмов требует проведения их тестирования на широком наборе тестовых задач. В настоящее время существуют различные бенчмарки для проведения таких тестов (см., например, [3, 4]). В результате работы подобных систем определяются оценки, по которым составляются ранжированные списки эффективности алгоритмов на разных классах задач из тестовых наборов. Однако такие результаты не позволяют ответить на вопрос, какие алгоритмы будут наиболее эффективны при решении новых задач. К тому же неясно, как в этом случае следует классифицировать крупноразмерные задачи.

Для практического решения данной проблемы разрабатываются универсальные оптимизаторы, которые во время выполнения перебирают алгоритмы оптимизации, пытаясь наиболее продуктивно использовать бюджет целевой функции. Наиболее заметными из них являются оптимизаторы Shiwa [5] и его улучшенная версия ABBO [6]. Эти системы работают по одинаковому принципу на основе двух этапов выбора алгоритмов — пассивного и активного. На пассивном этапе выбирается определенное подмножество алгоритмов по известным параметрам и характеристикам задачи. На активном этапе выбранные алгоритмы запускаются для оптимизации задачи, их сходимость динамически сравнивается, наименее эффективные алгоритмы останавливаются.

Недостатком такого подхода является использование фиксированного дерева решений для пассивного выбора, которое составлено разработчи-

ками оптимизаторов на основе экспериментальных данных. Так, для задач с размерностью более 2000 оптимизатор Shiwa ограничивает область рассматриваемых алгоритмов методами, базирующимися на дифференциальной эволюции, без учета разнообразия свойств таких задач. АВВО имеет большее число условий и демонстрирует лучшие результаты, однако решение все равно принимается только исходя из информации о типе задачи, размерности, доступном бюджете целевой функции и, возможно, дополнительных известных параметрах.

ОПИСАНИЕ ПРЕДЛАГАЕМОГО МЕТОДА

Для преодоления этой проблемы предлагается использовать методы статистического анализа и прогнозировать оценки эффективности работы алгоритмов для задач по уже известным оценкам. Под оценками будем подразумевать нормированное в интервал $(0, 1)$ значение целевой функции наилучшего результата работы алгоритма. Тогда при сравнении двух алгоритмов большая оценка обозначает, что данный алгоритм нашел лучшее решение задачи при заданных ограничениях, чем другой. Если рассматривать матрицу R , где r_{ij} — оценка алгоритма i с определенными параметрами для задачи j с определенной размерностью и бюджетом, а некоторая доля элементов α помечена неизвестными, то прогнозирование эффективности сводится к предсказанию значений элементов разреженной матрицы.

Если известны однотипные задачи с уже вычисленными оценками, то можно находить неизвестные оценки путем их усреднения для алгоритма или семейства алгоритмов. Другой подход — предсказывать значения методами рекомендательных систем. Мы рассматриваем классическую матричную факторизацию и ранжирующую модель факторизации, основанную на минимизации ошибки для триплетов векторов (learning to rank) [7].

При таком подходе имеет место проблема «холодного старта», когда для новых задач еще нет никаких данных, поэтому требуется пассивно выбрать алгоритмы для нахождения первых оценок. В этих целях полезно, чтобы это были максимально разные по своим характеристикам алгоритмы. Было установлено, что алгоритмы хорошо поддаются кластеризации по известным оценкам различными методами, выявляющими схожие кластеры алгоритмов [8]. Поэтому предлагается выбирать для нахождения начальных оценок эффективности алгоритмы, являющиеся центроидами разных кластеров метода k -средних.

Для оценки точности методов решено использовать ранговую ошибку и процент неправильно отранжированных пар алгоритмов (среднее арифметическое этих значений для всех задач), поскольку важно спрогнозировать, какой из алгоритмов более эффективно решит указанную задачу, а не пытаться предсказать конкретные значения оценок.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Из-за большого количества вычислений, требуемых для сбора статистики, была разработана собственная реализация на языке C++. С ее помощью было проведено более 40 000 тестовых запусков эволюционных и роевых алгоритмов на кластере IBM Polus. В качестве задач использовались классические тестовые аналитические функции, а также некоторые модельные задачи машинного обучения (обучение автоэнкодеров) и визуализации графов (оптимальная укладка дерева на плоскости). Размерность задач варьировалась от 10 до 5000, бюджет на количество вычислений целевой функции — от 10 000 до 100 000.

В найденной матрице R помечалось неизвестными α случайных оценок (равномерное зашумление), после чего их значения предсказывались указанными методами. Посчитанные ранговые ошибки указаны в таблице. Приведены наилучшие результаты матричной факторизации с количеством признаков $K = 20$.

Ранговая ошибка и доля неправильно оранжированных пар для исследуемых подходов

Доля α неизвестных оценок, %	Усреднение оценок	Матричная факторизация	Ранжирующая модель
25	0,46 (28%)	0,39 (20%)	0,37 (19%)
50	0,61 (41%)	0,47 (24%)	0,47 (21%)
75	0,84 (46%)	0,62 (33%)	0,59 (31%)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные результаты демонстрируют преимущество методов матричной факторизации при прогнозировании эффективности по сравнению с усреднением оценок. Исследование позволяет сделать вывод, что включение в систему алгоритмов и задач из бенчмарка Nevergrad и расширение используемой статистики может улучшить предсказание эффективности для крупноразмерных задач. Также предполагается, что применение гибридных методов рекомендаций для усовершенствования модели прогнозирования эффективности позволит снизить ранговую ошибку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wang L., Fonseca R., Tian Y. Learning Search Space Partition for Black-Box Optimization Using Monte Carlo Tree Search // Adv. Neur. Inform. Proces. Syst. 2020. V. 33. P. 19511–19522.
2. Sloss A.N., Gustafson S. 2019 Evolutionary Algorithms Review // Genetic Programming Theory and Practice XVII. 2020. P. 307–344.

3. *Hansen N. et al.* COCO: A Platform for Comparing Continuous Optimizers in a Black-Box Setting // *Optimization Meth. Software.* 2021. V. 36, No. 1. P. 114–144.
4. *Bennet P. et al.* Nevergrad: Black-Box Optimization Platform // *ACM SIGEVOlution.* 2021. V. 14, No. 1. P. 8–15.
5. *Liu J. et al.* Versatile Black-Box Optimization // *Proc. of the 2020 Genetic and Evolutionary Comput. Conf.* 2020. P. 620–628.
6. *Meunier L. et al.* Black-Box Optimization Revisited: Improving Algorithm Selection Wizards through Massive Benchmarking // *IEEE Trans. Evolution. Comput.* 2021. V. 26, No. 3. P. 490–500.
7. *Чепурнов А. В., Ершов Н. М.* Применение методов факторизации при построении рекомендательной системы для решения сложных задач многомерной оптимизации // *Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем: Материалы Всерос. конф. с междунар. участием, Москва, 17–21 апр. 2023 г. М., 2023.* С. 246–249.
8. *Chepurnov A., Ershov N.* Application of Machine Learning Methods for Cross-Classification of Algorithms and Problems of Multivariate Continuous Optimization // *CEUR Workshop Proc.* 2021. P. 163–168.