

# АЛГОРИТМЫ ПОРОЖДЕНИЯ СУПЕРПОЗИЦИЙ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ <sup>1</sup>

Г. И. Рудой <sup>2</sup>

## Аннотация

В работе исследуется алгоритм индуктивного порождения допустимых существенно нелинейных моделей. Предлагается алгоритм, порождающий все возможные суперпозиции заданной сложности за конечное число шагов, и приводится его теоретическое обоснование. Приводятся результаты вычислительного эксперимента, включающего индуктивное порождение набора моделей с целью выбора оптимальной модели нелинейной регрессии.

**Ключевые слова:** *символьная регрессия, нелинейные модели, индуктивное порождение, сложность моделей.*

## 1 Введение

В ряде приложений [1, 2] возникает задача восстановления некоторой функциональной зависимости по набору известных данных. При этом предполагается, что эксперт должен иметь возможность проинтерпретировать полученную модель в контексте предметной области.

Одним из методов, позволяющих получать интерпретируемые модели, является символьная регрессия [3–6], согласно которой известные данные приближаются некоторой математической формулой, например,  $\sin x^2 + 2x$  или  $\log x - \frac{e^x}{x}$ . Эти формулы являются произвольными суперпозициями функций из некоторого заданного набора. Одна из возможных реализаций этого метода предложена Джоном Коза [7, 8], использовавшим эволюционные алгоритмы для реализации символьной регрессии. Иван Зелинка предложил дальнейшее развитие этой идеи [9], получившее название аналитического программирования.

Алгоритм построения требуемой математической модели в аналитическом программировании выглядит следующим образом: дан набор примитивных функций, из которых можно строить различные формулы (например, степенная функция,  $+$ ,  $\sin$ ,  $\tan$ ). Начальный набор формул строится либо произвольным образом, либо на базе некоторых предположений эксперта. Затем на каждом шаге производится оценка каждой из формул согласно функции ошибки либо другого функционала качества [10]. На базе этой оценки у некоторой части формул случайным образом заменяется одна элементарная функция на другую (например,  $\sin$  на  $\cos$  или  $+$  на  $\times$ ), а у некоторой другой части происходит взаимный попарный обмен подвыражениями.

Получаемая формула является математической моделью исследуемого процесса или явления — то есть, это математическое отношение, описывающее основные закономерности, присущие этому явлению [11].

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №10-07-00422.

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт, rudoy@forecsys.ru

Целью настоящей работы является теоретическое обоснование алгоритмов индуктивного порождения моделей и анализ этих алгоритмов. Одним из основных результатов является доказательство их корректности, то есть, способности породить искомую формулу.

Алгоритм индуктивного порождения моделей, сформулированный в настоящей работе, свободен от некоторых типичных проблем предложенных ранее методов, упомянутых, например, в [9], в том числе:

- Порождение рекурсивных суперпозиций, суперпозиций, содержащих несоответствующее используемым функциям число аргументов, и т. д. (в предложенном алгоритме эти проблемы не возникают по построению).
- Несовпадение области определения некоторой примитивной функции и области значений ее аргументов (возможно, тоже некоторых суперпозиций).
- Порождение слишком сложных суперпозиций.

Во второй части работы формально поставлена задача построения алгоритма индуктивного порождения моделей. Затем, в третьей части, строится искомый алгоритм для частного случая беспараметрических моделей и доказывается его корректность, а затем алгоритм обобщается на случай моделей, имеющих параметры. В четвертой части оценивается количество порожденных предложенным алгоритмом моделей на каждой итерации. В пятой части предлагается метод выбора допустимых моделей из множества всех порожденных моделей. В шестой части описываются вспомогательные технические приемы, использованные в практическом алгоритме порождения моделей, описанном в седьмой части. Результаты вычислительного эксперимента приведены в восьмой части настоящей работы.

## 2 Постановка задачи

Пусть дана выборка:

$$D = \{(\mathbf{x}_i, y_i) \mid i \in \{1, \dots, N\}, \mathbf{x}_i \in \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^n, y_i \in \mathbb{Y} \subset \mathbb{R}\},$$

где  $f^*$  — некоторая фиксированная неизвестная функция,  $N$  — число элементов выборки,  $\mathbf{x}_i$  — вектор значений аргументов функции  $f^*$  для  $i$ -ого элемента выборки (независимых переменных),  $y_i$  — значение функции  $f^*$  в точке  $x_i$  (зависимая переменная),  $\mathbb{X}$  — множество значений независимых переменных, лежащее в  $\mathbb{R}^n$ ,  $\mathbb{Y}$  — множество значений зависимой переменной.

Требуется выбрать параметрическую функцию  $f : \Omega \times \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$  из порождаемого множества  $\mathcal{F} = \{f_r\}$ , где  $\Omega$  — пространство параметров, доставляющую минимум некоторому заданному функционалу ошибки  $S$ .

То есть, для множества всех суперпозиций

$$\mathcal{F} = \{f_r \mid f_r : (\omega, \mathbf{x}) \mapsto y \in \mathbb{Y}, r \in \mathbb{N}\},$$

требуется найти такой индекс  $\hat{r}$ , что функция  $f_r$  среди всех  $f \in \mathcal{F}$  доставляет минимум функционалу качества  $S$  при данной регрессионной выборке  $D$ :

$$\hat{r} = \arg \min_{r \in \mathbb{N}} S(f_r \mid \hat{\omega}_r, D), \quad (1)$$

где  $\hat{\omega}_r$  — оптимальный вектор параметров функции  $f_r$  для каждой  $f \in \mathcal{F}$  при данной регрессионной выборке  $D$ :

$$\hat{\omega}_r = \arg \min_{\omega \in \Omega} S(\omega \mid f_r, D). \quad (2)$$

Сформулируем также постановку теоретической задачи. Для этого сначала введем понятие суперпозиции функций.

Если множество значений  $\mathbb{Y}_i$  функции  $f_i$  содержится в области определения  $\mathbb{X}_{i+1}$  функции  $f_{i+1}$ , то есть

$$f_i : \mathbb{X}_i \rightarrow \mathbb{Y}_i \subset \mathbb{X}_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, \theta - 1,$$

то функция

$$f_\theta \circ f_{\theta-1} \circ \dots \circ f_1, \quad \theta \geq 2,$$

определяемая равенством

$$(f_\theta \circ f_{\theta-1} \circ \dots \circ f_1)(\mathbf{x}) = f_\theta(f_{\theta-1}(\dots(f_1(\mathbf{x})))), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{X}_1,$$

называется *сложной функцией* [12] или *суперпозицией функций*  $f_1, f_2, \dots, f_\theta$ .

Таким образом, получаем

**Определение 1.** *Суперпозиция функций — функция, представленная как композиция нескольких функций.*

Пусть  $G = \{g_1, \dots, g_l\}$  — множество данных порождающих функций, а именно, для каждой  $g_i \in G$  заданы:

- сама функция  $g_i$  (например,  $\sin$ ,  $\cos$ ,  $\times$ ),
- аргументность функции и порядок следования аргументов,
- домен ( $\text{dom} g_i$ ) и кодомен ( $\text{cod} g_i$ ) функции,
- область определения  $\mathcal{D}g_i \subset \text{dom} g_i$  и область значений  $\mathcal{E}g_i \subset \text{cod} g_i$ .

Требуется построить упомянутую функцию  $f$  как суперпозицию порождающих функций из заданного множества  $G$ .

Поясним различие между последними двумя пунктами. Например,  $\text{dom} f$  показывает, значения из какого множества принимает функция  $f$  (целые числа, действительные числа, декартово произведение целых чисел и  $\{0, 1\}$ , и т. п.). Область определения

же показывает, на каких значениях из  $\text{dom } f$  функция  $f$  определена и имеет смысл. Так, для функции  $f(x_1, x_2) = \log_{x_1} x_2$ :

$$\text{dom } f = \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

$$\text{cod } f = \mathbb{R},$$

$$\mathcal{D}f = \{(x_1, x_2) \mid x_1 \in (0; 1) \cup (1; +\infty), x_2 \in (0; +\infty)\},$$

$$\mathcal{E}f = (-\infty; +\infty).$$

Требуется также:

- построить алгоритм  $\mathfrak{A}$ , за конечное число итераций порождающий любую конечную суперпозицию данных примитивных функций,
- указать способ проверки изоморфности двух суперпозиций.

Заметим, что мы не требуем для примитивных функций свойства их непорождаемости в наиболее общей формулировке типа принципиальной невозможности породить в ходе работы искомого алгоритма суперпозицию, изоморфную некоторой функции из  $G$ . Такое требование является слишком ограничивающим. В частности, невозможно было бы иметь в  $G$  одновременно, например, функции  $\text{id}$ ,  $\exp$  и  $\log$ , так как  $\text{id} \equiv \log \circ \exp$ .

В дальнейшем будем также считать, что суперпозиция, соответствующая единственной свободной переменной ( $f(\mathbf{x}) = x_i$ ), эквивалентна функции вида  $\text{id}x_i$ .

### 3 Алгоритм индуктивного порождения допустимых суперпозиций

Условимся считать, что каждой суперпозиции  $f$  сопоставлено дерево  $\Gamma_f$ , эквивалентное этой суперпозиции и строящееся следующим образом:

- В вершинах  $V_i$  дерева  $\Gamma_f$  находятся соответствующие порождающие функции  $g_s, s = s(i)$ .
- Число дочерних вершин у некоторой вершины  $V_i$  равно арности соответствующей функции  $g_s$ .
- Порядок смежных некоторой вершине  $V_i$  вершин соответствует порядку аргументов соответствующей функции  $g_{s(i)}$ .
- В листьях дерева  $\Gamma_f$  находятся свободные переменные  $x_i$  либо числовые параметры  $\omega_i$ .
- Порядок вершин  $V_i$  в смысле уровня вершин определяет порядок вычисления примитивных функций: дерево вычисляется снизу вверх. То есть, сначала подставляются конкретные значения свободных переменных, затем вычисляются значения в вершинах, все дочерние вершины которых — свободные переменные, и так далее до тех пор, пока не останется единственная вершина, бывшая корнем дерева. Она и содержит результат соответствующего выражения.

Таким образом, вычисление значения выражения  $f$  в некоторой точке с данным вектором параметров  $\omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_\eta\}$  эквивалентно подстановке соответствующих значений свободных переменных  $x_i$  и параметров  $\omega_i$  в дерево  $\Gamma_f$ , где  $x_i$  — компоненты вектора признакового описания объекта  $\mathbf{x}$ .

Заметим важное свойство таких деревьев: каждое поддерево  $\Gamma_f^i$  дерева  $\Gamma_f$ , соответствующее вершине  $V_i$ , также соответствует некоторой суперпозиции, являющейся составляющей исходной суперпозиции  $f$ .

Для примера рассмотрим дерево, соответствующее суперпозиции  $f = \sin(\ln x_1) + \frac{x_2^3}{2}$  (см. рис 1).

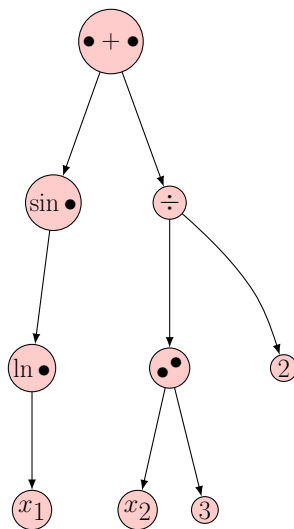


Рис. 1: Дерево выражения  $\sin(\ln x_1) + \frac{x_2^3}{2}$

Здесь точками обозначены аргументы функций. Как видно, корнем дерева является вершина, соответствующая операции сложения, которая должна быть выполнена в последнюю очередь. Операция сложения имеет два различных поддерева, соответствующих двум аргументам этой операции. Заметим также, что здесь не использованы операции типа «разделить на два» или «возвести в куб». Вместо этого используются операции деления и возведения в степень в общем виде, а в данном конкретном дереве соответствующие аргументы зафиксированы соответствующими константами.

**Алгоритм порождения суперпозиций.** Сначала определим понятие *глубины суперпозиции*:

**Определение 2.** Глубина суперпозиции  $f$  — максимальная глубина дерева  $\Gamma_f$ .

Теперь опишем итеративный алгоритм  $\mathfrak{A}^*$ , порождающий суперпозиции, не содержащие параметров. Описанный алгоритм породит любую суперпозицию конечной глубины за конечное число шагов.

Пусть дано множество примитивных функций  $G = \{g_1, \dots, g_l\}$  и множество свободных переменных  $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ . Для удобства будем исходить из предположения, что множество  $G$  состоит только из унарных и бинарных функций, и разделим его соответствующим образом на два подмножества:  $G = G_b \cup G_u \mid G_b = \{g_{b_1}, \dots, g_{b_k}\}, G_u = \{g_{u_1}, \dots, g_{u_l}\}$ , где  $G_b$  — множество всех бинарных функций, а  $G_u$  — множество всех унарных функций из  $G$ . Потребуем также наличия  $\text{id}$  в  $G_b$ .

**Алгоритм 1.** Алгоритм  $\mathfrak{A}^*$  итеративного порождения суперпозиций.

1. Перед первым шагом зададим начальные значения множества  $\mathcal{F}_0$  и вспомогательного индексного множества  $\mathcal{I}$ , служащего для запоминания, на какой итерации впервые встречена каждая суперпозиция:

$$\mathcal{F}_0 = X,$$

$$\mathcal{I} = \{(x, 0) \mid x \in X\}.$$

2. Для множества  $\mathcal{F}_i$  построим вспомогательное множество  $U_i$ , состоящее из суперпозиций, полученных в результате применения функций  $g_u \in G_u$  к элементам  $\mathcal{F}_i$ :

$$U_i = \{g_u \circ f \mid g_u \in G_u, f \in \mathcal{F}_i\}.$$

3. Аналогичным образом построим вспомогательное множество  $B_i$  для бинарных функций  $g_b \in G_b$ :

$$B_i = \{g_b \circ (f, h) \mid g_b \in G_b, f, h \in \mathcal{F}_i\}.$$

4. Обозначим  $\mathcal{F}_{i+1} = \mathcal{F}_i \cup U_i \cup B_i$ .

5. Для каждой суперпозиции  $f$  из  $\mathcal{F}_{i+1}$  добавим пару  $(f, i+1)$  в множество  $\mathcal{I}_f$ , если суперпозиция  $f$  еще там не присутствует.

6. Перейдем к следующей итерации, п. 2.

Тогда  $\mathcal{F} = \bigcup_{i=0}^{\infty} \mathcal{F}_i$  — множество всех возможных суперпозиций конечной длины, которые можно построить из данного множества примитивных функций.

Вспомогательное множество  $\mathcal{I}$  позволяет запоминать, на какой итерации была впервые встречена каждая суперпозиция. Это необходимо, так как каждая суперпозиция, впервые порожденная на  $i$ -ой итерации, будет порождена также и на любой итерации после  $i$ . Одной из возможностей избежать необходимости в этом множестве является построение  $\mathcal{F}_{i+1}$  как  $\mathcal{F}_{i+1} = U_i \cup B_i$  (без  $\mathcal{F}_i$ ), а множества  $U_i$  и  $B_i$  строить следующим образом:

$$U_i = \{g_u \circ f \mid g_u \in G_u, f \in \bigcup_{j=0}^i \mathcal{F}_j\},$$

$$B_i = \{g_b \circ (f, h) \mid g_b \in G_b, f, h \in \bigcup_{j=0}^i \mathcal{F}_j\}.$$

Алгоритм  $\mathfrak{A}^*$  очевидным образом обобщается на случай, когда множество  $G$  содержит функции произвольной (но конечной) арности. Действительно, для такого обобщения достаточно строить аналогичным образом вспомогательные множества для этих функций, а именно: для множества функций  $G_n$  арности  $n$  построим вспомогательное множество  $H_i^n$  вида:

$$H_i^n = \{g \circ (f_1, f_2, \dots, f_n) \mid g \in G_n, f_j \in \mathcal{F}_i\}.$$

В этих обозначениях  $U_i \equiv H_i^1$ , а  $B_i \equiv H_i^2$ .

Тогда множество  $\mathcal{F}_{i+1} = \mathcal{F}_i \cup_{n=0}^{n_{\max}} H_i^n$ , где  $n_{\max}$  — максимальное значение арности функций из  $G$ .

**Теорема 1.** *Алгоритм  $\mathfrak{A}^*$  действительно породит любую конечную суперпозицию за конечное число шагов.*

*Доказательство.* Чтобы убедиться в этом, найдем номер итерации, на котором будет порождена некоторая произвольная конечная суперпозиция  $f$ . Чтобы найти этот номер, пронумеруем вершины графа  $\Gamma_f$  по следующим правилам:

- Если это вершина со свободной переменной, то она имеет номер 0.
- Если вершина  $V$  соответствует унарной функции, то она имеет номер  $i + 1$ , где  $i$  — номер дочерней для этой функции вершины.
- Если вершина  $V$  соответствует бинарной функции, то она имеет номер  $i + 1$ , где  $i = \max(l, r)$ , а  $l$  и  $r$  — номера, соответственно, первой и второй дочерней вершины.

Нумеруя вершины графа  $\Gamma_f$  таким образом, мы получим номер вершины, соответствующей корню графа. Это и будет номером итерации, на которой получена суперпозиция  $f$ .

Иными словами, для любой суперпозиции мы можем указать конкретный номер итерации, на котором она будет получена, что и требовалось.  $\square$

В предложенных ранее методах построения суперпозиций [9] необходимо было самостоятельно следить за тем, чтобы в ходе работы алгоритма не возникало «заключенных» суперпозиций типа  $f(x, y) = g(f(x, y), x, y)$ . Заметим, что в предложенном алгоритме  $\mathfrak{A}^*$  такие суперпозиции не могут возникнуть по построению.

**Порождение моделей с параметрами.** Алгоритм  $\mathfrak{A}^*$  в таком виде не позволяет получать выражения, содержащие численные параметры  $\omega$  суперпозиции  $f(\omega, \mathbf{x})$ . Покажем, однако, на примере конструирования множеств  $U_i$  и  $B_i$ , как исходный алгоритм  $\mathfrak{A}^*$  может быть расширен путем введения параметров:

$$U_i = g_u \circ (\alpha f + \beta),$$

$$B_i = g_b \circ (\alpha f + \beta, \psi h + \phi).$$

Будем обозначать этот расширенный алгоритм как  $\mathfrak{A}$ . Здесь параметры  $\alpha, \beta$  зависят только от комбинации  $g_u, f$  (или  $g_b, f, h$  для  $\alpha, \beta, \psi, \phi$ ). Соответственно, для упрощения их индексы опущены. Иными словами, мы предполагаем, что каждая суперпозиция из предыдущих итераций входит в следующую, будучи умноженной на некоторой коэффициент и с константной поправкой.

Очевидно, при таком добавлении параметров  $\alpha, \beta, \psi, \phi$  мы не изменяем мощности получившегося множества суперпозиций, поэтому алгоритм и выводы из него остаются корректными. В частности, исходный алгоритм является частным случаем данного при  $\alpha \equiv \psi \equiv 1, \beta \equiv \phi \equiv 0$ .

Переменные  $\alpha, \beta, \psi, \phi$  являются параметрами модели. В практических приложениях можно оптимизировать значения этих параметров у получившихся суперпозиций, например, алгоритмом Левенберга-Марквардта [13, 14].

Заметим также, что такая модификация алгоритма позволяет нам получить единицу, например, для построения суперпозиций типа  $\frac{1}{x}: 1 = \alpha \text{ id } x + \beta \mid \alpha = 0, \beta = 1$ .

Отдельно подчеркнем, что параметры  $\omega$  у различных суперпозиций различны. Однако, так как каждый из параметров зависит только от соответствующей комбинации функций, к которым он относится, конкретные значения параметров не учитываются при поиске одинаковых суперпозиций. Иными словами, при тестировании суперпозиций на равенство сравниваются лишь структуры соответствующих им деревьев и значения в узлах, соответствующих функциям и свободным переменным.

Заметим, что и этот алгоритм очевидным образом обобщается на случай множества  $G$ , содержащего функции произвольной ариности.

#### 4 Количество возможных суперпозиций

Оценим количество суперпозиций, получаемых после каждой итерации алгоритма  $\mathfrak{A}$ . Очевидно, с учетом вышеупомянутых оговорок касательно сравнения параметризованных суперпозиций, это количество равно количеству для алгоритма  $\mathfrak{A}^*$ .

Итак, пусть дано  $n$  независимых переменных:  $|X| = n$ , а мощность множества  $G$  распишем через мощности его подмножеств функций соответствующей ариности:  $|G_1| = l_1, |G_2| = l_2, \dots, |G_p| = l_p$ . На нулевой итерации имеем  $P_0 = n$  суперпозиций.

На первой итерации дополнительно порождается:

$$P_1 = l_1 n + l_2 n^2 + \dots + l_p n^p = \sum_{i=1}^p l_i P_0^i,$$

и суммарное число суперпозиций после первой итерации:

$$\hat{P}_1 = P_1 + P_0 = \sum_{i=1}^p l_i P_0^i + P_0.$$

Как было замечено ранее, суперпозиции, порожденные на  $k$ -ой итерации, будут также порождены и на любой следующей после  $k$  итерации, поэтому суммарное число



суперпозиций после второй итерации будет равно:

$$\hat{P}_2 = \sum_{i=1}^p l_i \hat{P}_1^i.$$

И вообще, после  $k$ -ой итерации будет порождено:

$$\hat{P}_k = \sum_{j=1}^p l_j \hat{P}_{k-1}^j.$$

Оценим порядок роста количества функций, порожденных после  $k$ -ой итерации.

**Теорема 2.** Пусть в множестве примитивных функций  $G$  содержится  $l_p$  функций арности  $p > 1$  и ни одной функции арности  $p + k \mid k > 0$ , и имеется  $n > 1$  независимых переменных. Тогда справедлива следующая оценка количества суперпозиций, порожденных алгоритмом  $\mathfrak{A}$  после  $k$ -ой итерации:

$$|\mathcal{F}_k| = \mathcal{O}(l_p^{\sum_{i=0}^{k-1} p^i} n^{p^k}).$$

*Доказательство.* Оценим сначала порядок роста для случая, когда есть лишь одна  $m$ -арная функция и  $n$  свободных переменных.

После первой итерации алгоритма будет порождено  $n^m + n$  суперпозиций. После второй —  $(n^m + n)^m + n^m + n$ , что можно оценить как  $(n^m)^m = n^{m^2}$ . И вообще, после  $k$ -ой итерации количество суперпозиций можно оценить как  $n^{m^k}$ .

Видно, что для оценки скорости роста количества порожденных суперпозиций можно учитывать только функции с наибольшей арностью.

Рассмотрим теперь случай, когда имеется не одна функция арности  $m$ , а  $l_m$  таких функций. Тогда на первой итерации порождается  $l_m n^m + n$  суперпозиций, на второй:

$$l_m (l_m n^m + n)^m + l_m n^m + n \approx l_m^{m+1} n^{m^2},$$

на третьей, с учетом этого приближения:

$$l_m (l_m^{m+1} n^{m^2})^m = l_m l_m^{m(m+1)} n^{m^3} = l_m^{m^2+m+1} n^{m^3}.$$

И вообще, скорость роста количества порожденных суперпозиций можно оценить как:

$$|\mathcal{F}_k| = \mathcal{O}(l_m^{\sum_{i=0}^{k-1} m^i} n^{m^k}).$$

Таким образом, получаем оценку в общем случае, когда в множестве  $G$  содержится  $l_p$  функций арности  $p$  и ни одной функции арности  $p + k \mid k > 0$ :

$$|\mathcal{F}_k| = \mathcal{O}(l_p^{\sum_{i=0}^{k-1} p^i} n^{p^k}).$$

□

## 5 Множество допустимых суперпозиций

Предложенный выше алгоритм позволяет получить действительно все возможные суперпозиции, однако, не все они будут пригодны в практических приложениях: например,  $\ln x$  имеет смысл только при  $x > 0$ , а  $\frac{x}{0}$  не имеет смысла вообще никогда. Выражения типа  $\frac{x}{\sin x}$  имеют смысл только при  $x \neq \pi k$ .

Таким образом, необходимо введение понятия множества *допустимых* суперпозиций — то есть, таких суперпозиций, которые в условиях данной задачи корректны.

**Определение 3.** *Допустимая суперпозиция  $f$  — такая суперпозиция, значение которой определено для любой комбинации значений свободных переменных, область значений  $\mathbb{X}$  которых определяется конкретной задачей,  $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^n$  где  $n$  — число свободных переменных.*

Одним из способов построения только допустимых суперпозиций является модификация предложенного алгоритма таким образом, чтобы отслеживать совместность областей определения и областей значения соответствующих функций в ходе построения суперпозиций. Для свободных переменных это, в свою очередь, означает необходимость задания областей значений  $\mathbb{X}$  пользователем при решении конкретных задач.

Заметим, что, хотя теоретически возможно выводить допустимость выражений вида  $\frac{x}{\sin x}$  исходя из заданных условий на свободную переменную (например, что  $x \in (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$ ), в общем случае это потребует решения неравенств в общем виде, что вычислительно неэффективно.

Таким образом, можно сформулировать очевидное *достаточное условие недопустимости* суперпозиции:

**Определение 4.** *Достаточное условие недопустимости суперпозиции  $f$ : в соответствующем дереве  $\Gamma_f$  хотя бы одна вершина  $V_i$  имеет хотя бы одну дочернюю вершину  $V_j$  такую, что область значений функции  $g_{s(j)}$  шире, чем область определения функции  $g_{s(i)}$ :*

$$\exists i, j : V_i \in \Gamma_f, V_j \in \Gamma_f \wedge \exists \kappa : \kappa \in \mathcal{E}_{g_{s(j)}} \wedge \kappa \notin \mathcal{D}_{g_{s(i)}}.$$

Говоря, что область значений функции  $f$  шире области определения функции  $g$ , мы имеем ввиду, что существует по крайней мере одно значение функции  $f$ , не входящее в область определения функции  $g$ .

Подчеркнем, что, хотя свободные переменные могут принимать, например, все значения из  $\mathbb{R}$ , выбором множества  $\mathbb{X}$  можно обеспечить возможность использования их в качестве аргументов функций с более узкой, чем  $\mathbb{R}$ , но не менее узкой, чем  $\mathbb{X}$ , областью определения, если это не противоречит данной регрессионной выборке.

Для построения множества допустимых суперпозиций достаточно построить множество всех возможных суперпозиций при помощи алгоритма  $\mathcal{A}$ , а затем удалить из этого множества все суперпозиции, не удовлетворяющие сформулированному признаку.

## 6 Алгоритм итеративного стохастического порождения суперпозиций

Несмотря на то, что построенный ранее итеративный алгоритм  $\mathcal{A}$  порождения суперпозиций позволяет получить за конечное число шагов произвольную суперпозицию, для практических применений он непригоден в связи с чрезмерной вычислительной сложностью, как и любой алгоритм, реализующий полный перебор. Вместо него предлагается использовать стохастические алгоритмы и ряд эвристик, позволяющих на практике получать за приемлемое время результаты, удовлетворяющие заранее заданным условиям. В данном разделе описывается практически реализуемый вариант алгоритма  $\mathcal{A}$ , который и был использован в вычислительном эксперименте.

Сначала опишем вспомогательный алгоритм случайного порождения суперпозиции:

**Алгоритм 2.** *Алгоритм случайного порождения суперпозиции  $\mathcal{RF}$ .*

*Вход:*

- Набор пороговых значений  $0 < \xi_1 < \xi_2 < \xi_3 < 1$ .
- Максимальная глубина порождаемой суперпозиции  $Td$ .

Алгоритм работает следующим образом. Генерируется случайное число  $\xi$  на интервале  $(0; 1)$ , и рассматриваются следующие случаи:

- $\xi \leq \xi_1$ : результатом алгоритма является некоторая случайно выбранная свободная переменная.
- $\xi_1 < \xi \leq \xi_2$ : результатом алгоритма является числовой параметр.
- $\xi_2 < \xi \leq \xi_3$ : результатом алгоритма является некоторая случайно выбранная унарная функция, для определения аргумента которой данный алгоритм рекурсивно запускается еще раз.
- $\xi_3 < \xi$ : результатом алгоритма является некоторая случайно выбранная бинарная функция, аргументы которой порождаются аналогичным образом.

При этом порождение тривиальных суперпозиций (свободных переменных и параметров) запрещено: на самом первом шаге пороговые значения масштабируются таким образом, чтобы всегда порождалась унарная или бинарная функция. Аналогично при превышении значения  $Td$  пороговые значения масштабируются таким образом, чтобы был порожден узел, соответствующий свободной переменной или параметру, и алгоритм завершился.

В ходе работы предлагаемого алгоритма каждой суперпозиции  $f$  ставится в соответствие ее *качество*  $Q_f$  (будем также говорить, что суперпозиция *оценивается*), рассчитываемое исходя из функции ошибки  $S_f$  этой суперпозиции на выборке  $D$  и ее сложности  $C_f$  — числа узлов в соответствующем графе  $\Gamma_f$ , по следующей формуле:

$$Q_f = \frac{1}{1 + S_f} \left( \alpha \hat{Q} + \frac{1 - \alpha \hat{Q}}{1 + \exp(C_f - \tau)} \right), \quad (3)$$

где  $\hat{Q}$  — минимальная приспособленность суперпозиции из критерия останова,  $\alpha$  — некоторый коэффициент,  $0 \ll \alpha < 1$ , а  $\tau$  — коэффициент, характеризующий желаемую сложность модели. Второй множитель в (3) выполняет роль штрафа за слишком большую сложность суперпозиции, что подавляет эффект переобучения.

Таким образом, чем лучше результаты суперпозиции, тем ближе значение ее приспособленности к 1, и, наоборот, чем хуже — тем ближе к 0.

Итак, теперь опишем сам алгоритм:

**Алгоритм 3.** *Итеративный алгоритм стохастического порождения суперпозиций.*

*Вход:*

- Множество порождающих функций  $G$ , состоящее только из унарных и бинарных функций.
- Регрессионная выборка  $D$ .
- $N_{max}$  — максимальное число одновременно рассматриваемых суперпозиций.
- $I_{max}$  — максимальное число итераций алгоритма.
- $\gamma_{mut}$  — доля суперпозиций, подверженных случайной замене узлов их деревьев.
- $\gamma_{cross}$  — доля суперпозиций, для которых выполняется случайный обмен поддеревьями.
- Прочие параметры, используемые в (3) и алгоритме 2.

1. Инициализируется упорядоченный набор  $\mathcal{X}_f$  суперпозиций. А именно, порождается  $N_{max}$  суперпозиций алгоритмом 2.
2. Оптимизируются параметры  $\omega$  суперпозиций из  $\mathcal{X}_f$  алгоритмом Левенберга-Марквардта.
3. Вычисляется значение  $Q_f$  для каждой еще не оцененной суперпозиции  $f$  из  $\mathcal{X}_f$ : для нее рассчитывается значение функции ошибки  $S_f$  согласно (4) на выборке  $D$ , и ставится в соответствие значение  $Q_f$  в соответствии с (3). Для суперпозиций, при вычислении  $Q_f$  которых была хотя бы раз получена ошибка вычислений из-за несовпадения областей определений и значений, принимается  $Q_f = -\infty$ .
4. Набор суперпозиций  $\mathcal{X}_f$  сортируется согласно их приспособленности.
5. Наименее приспособленные суперпозиции удаляются из массива  $\mathcal{X}_f$  до тех пор, пока его размер не станет равен  $N_{max}$ .

6. Отбирается некоторая часть  $\gamma_{mut}$  наименее приспособленных суперпозиций из  $\mathcal{X}_f$ . У этой части происходит случайная замена одной функции или свободной переменной на другую: генерируются две случайные величины, одна из которых служит для выбора вершины дерева  $\Gamma_f$ , которую предстоит изменить, а другая — для выбора нового элемента для этой вершины. Замена такова, чтобы сохранилась структура суперпозиции, а именно: в случае замены функции сохраняется аргументность, а свободная переменная заменяется только на другую свободную переменную. При этом исходные суперпозиции сохраняются в массиве  $\mathcal{X}_f$ .
7. Повторяются шаги 3 – 4.
8. Производится случайный обмен поддеревьями у  $\gamma_{cross}$  наиболее приспособленных суперпозиций. Вершины, соответствующие этим поддеревьям, выбираются случайным образом. При этом исходные суперпозиции сохраняются в массиве  $\mathcal{X}_f$ .
9. Повторяются шаги 2 – 4.
10. Проверяются условия останова: если либо число итераций больше  $I_{max}$ , либо в массиве  $\mathcal{X}_f$  есть хотя бы одна суперпозиция с приспособленностью больше, чем  $\hat{Q}$ , то алгоритм останавливается, и результатом является наиболее приспособленная суперпозиция, иначе осуществляется переход к шагу 2.

## 7 Вычислительный эксперимент

В вычислительном эксперименте восстанавливается регрессионная зависимость волатильности опциона от его стоимости и сроков исполнения [15, 16]. Используются исторические данные о волатильности опционов Brent Crude Oil. Срок действия опциона — полгода, с 02.01.2001 по 26.06.2001, тип — право на продажу базового инструмента. Базовым инструментом в данном случае является нефть. Использовались ежедневные цены закрытия опциона и базового инструмента.

В качестве функционала качества  $S$  используется сумма квадратов регрессионных остатков:

$$S(\omega, f, D) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(\omega, \mathbf{x}_i))^2, \text{ при } (\mathbf{x}_i, y_i) \in D. \quad (4)$$

Данный инструмент имеет низкую волатильность, вследствие чего среди данных нет выбросов. В данных имеются пропуски, так как опционы с ценами, далекими от цен базового инструмента, не торговались сразу после выпуска опционов.

В ходе предобработки данных выяснено, что для больших значений волатильности зависимость принимает существенно неоднозначный характер, поэтому для облегчения аналитического описания моделировалась зависимость цены от волатильности и времени.

$i$	Суперпозиция	$S_f$	$C_f$
9	$\left(\frac{1.36}{xy}\right)^{0.48}$	$\approx 0.0182$	7
14	$(15.8y + \arcsin y)^{-0.48}$	$\approx 0.0208$	8
13	$(yx^{0.882} + \arcsin y)^{-0.482}$	$\approx 0.0178$	10
8	$0.125 \frac{y}{(y^2)^{0.8+y}}$	$\approx 0.0171$	11
14	$\frac{\frac{3.86 \cdot 10^{11} + y}{y \frac{1.227 \cdot 10^{11}}{xy} - 2.46 \cdot 10^8}}{y \cos \left( \frac{-5.89 \cdot 10^{-3} + y}{\frac{y - 5.47 \cdot 10^{-3}}{y \cos y}} \right)}$	$\approx 0.0092$	42

Таблица 1: Результаты вычислительного эксперимента

Использованные параметры алгоритма 3:  $N_{max} = 200$ ,  $I_{max} = 50$ ,  $\hat{Q} = 0.95$ ,  $\tau = 10$ ,  $\alpha = 0.05$ ,  $\gamma_{mut} = \frac{1}{3}$ ,  $\gamma_{cross} = \frac{1}{3}$ . При отсутствии улучшения результатов в течение нескольких итераций подряд алгоритм 3 также завершался.

В таблице 1 приведены некоторые из суперпозиций, порожденных в результате работы алгоритма 3, в порядке возрастания их сложности. Указан номер итерации  $i$ , на которой суперпозиция была впервые получена, сама суперпозиция, среднеквадратичная ошибка ( $S_f$ ) и сложность в смысле количества узлов в соответствующем графе выражения. Числовые коэффициенты в приведенных формулах и значения функционала  $S_f$  искусственно округлены до 2 – 3 значащей цифры.

В таблице 2 представлены графы первых двух упомянутых в таблице суперпозиций. На рисунках 2 и 3 отображены изометрическая проекция и проекция на одну из плоскостей для суперпозиции  $\left(\frac{1.36}{xy}\right)^{0.48}$ .

## 8 Заключение

В работе исследованы индуктивные алгоритмы порождения допустимых существенно нелинейных суперпозиций. Предложен переборный алгоритм, порождающий все возможные суперпозиции заданной сложности за конечное число шагов, и приведено его теоретическое обоснование. Сформулированный алгоритм решает некоторые типичные проблемы предложенных ранее методов. Описан стохастический алгоритм индуктивного порождения существенно нелинейных суперпозиций и приведены результаты его применения для задачи моделирования волатильности опционов.

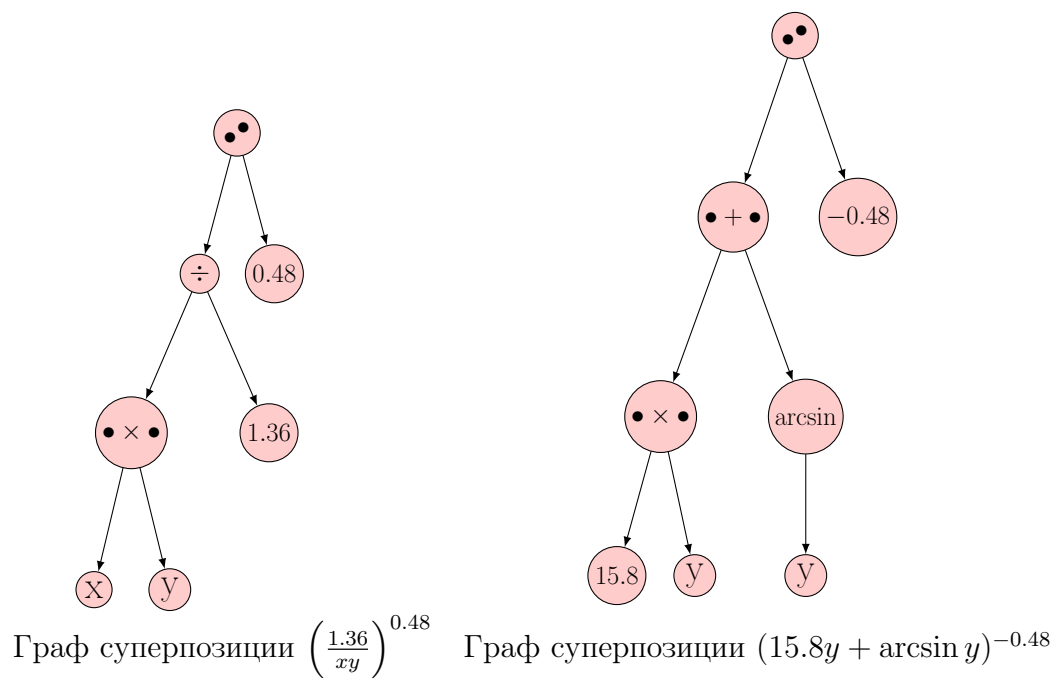


Таблица 2: Графы результирующих суперпозиций

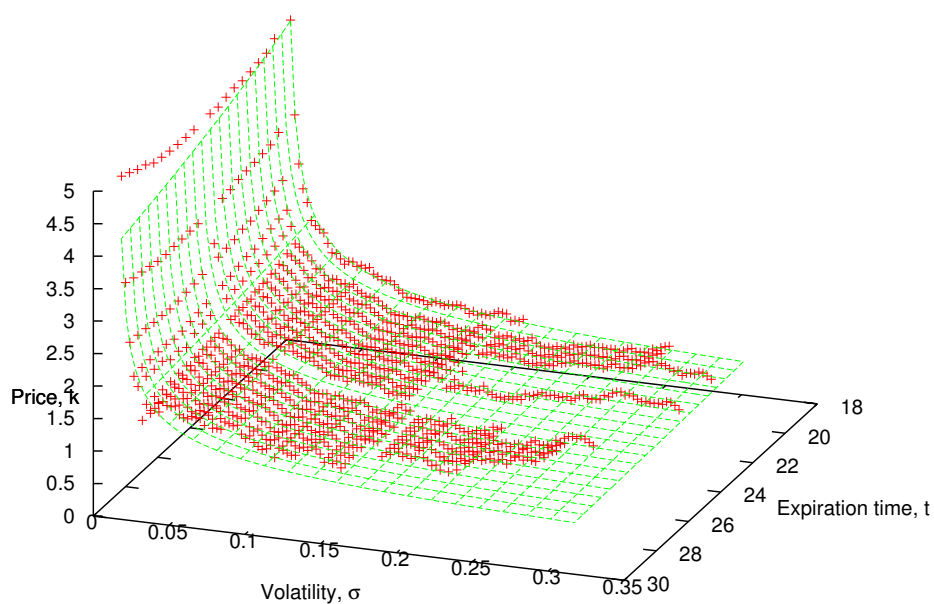


Рис. 2: Изометрическая проекция результирующей суперпозиции

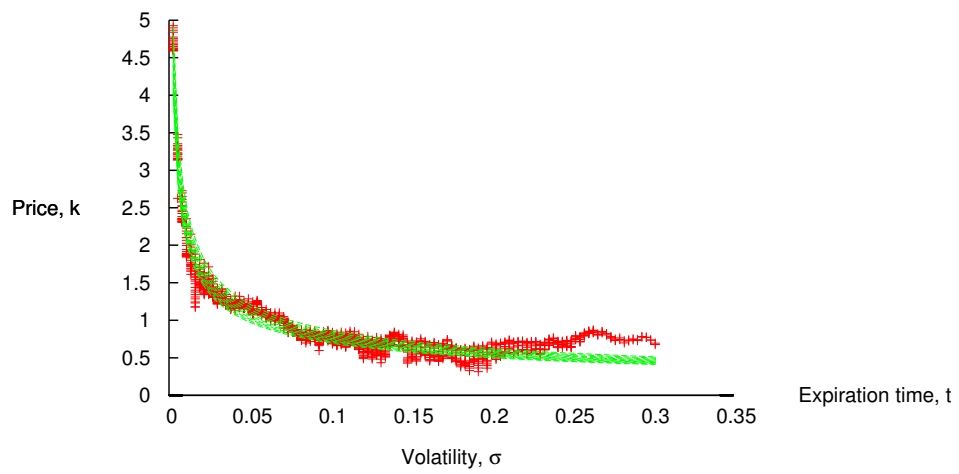


Рис. 3: Проекция результирующей суперпозиции



## Список литературы

- [1] Duffy, J. and Engle-Warnick, J.: *Using symbolic regression to infer strategies from experimental data*. In Chen, Shu Heng (editor): *Evolutionary Computation in Economics and Finance*, volume 100 of *Studies in Fuzziness and Soft Computing*, chapter 4, pages 61–84. Physica Verlag, 2002, ISBN 3-7908-1476-8. <http://www.pitt.edu/~jduffy/docs/Usr.ps>.
- [2] Barmpalexis, P., Kachrimanis, K., Tsakonas, A., and Georgarakis, E.: *Symbolic regression via genetic programming in the optimization of a controlled release pharmaceutical formulation*. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 107(1):75–82, 2011, ISSN 0169-7439. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TFP-523CDG2-4/2/67c4e87b7f04a0e4f5f6fe07a1127ef8>.
- [3] Davidson, J. W., Savic, D. A., and Walters, G. A.: *Symbolic and numerical regression: experiments and applications*. In John, Robert and Birkenhead, Ralph (editors): *Developments in Soft Computing*, pages 175–182, De Montfort University, Leicester, UK, 29-30 6 2000. 2001. Physica Verlag, ISBN 3-7908-1361-3.
- [4] Sammut, C. and Webb, G. I.: *Symbolic regression*. In Sammut, Claude and Webb, Geoffrey I. (editors): *Encyclopedia of Machine Learning*, page 954. Springer, 2010, ISBN 978-0-387-30768-8. <http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-30164-8>.
- [5] Strijov, V. and Weber, G. W.: *Nonlinear regression model generation using hyperparameter optimization*. *Computers & Mathematics with Applications*, 60(4):981–988, 2010. <http://dx.doi.org/10.1016/j.camwa.2010.03.021>.
- [6] Стрижов, В. В.: *Методы индуктивного порождения регрессионных моделей*. Препринт ВЦ РАН им. А. А. Дородницына. — М., 2008.
- [7] Koza, J. R.: *Genetic programming*. In Williams, J. G. and Kent, A. (editors): *Encyclopedia of Computer Science and Technology*, volume 39, pages 29–43. Marcel-Dekker, 1998. <http://www.genetic-programming.com/jkpdf/encyclopedia1998.pdf>, Supplement 24.
- [8] Koza, J. R.: *Introduction to genetic algorithms*, 1998. <http://citeseer.ist.psu.edu/39917.html>; <http://www.genetic-programming.com/AiGP1INTRO.ps>.
- [9] Zelinka, I., Oplatkova, Z., and Nolle, L.: *Analytic programming — symbolic regression by means of arbitrary evolutionary algorithms*, 2008. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.116.9558>; <http://ducati.doc.ntu.ac.uk/uksim/journal/vol-6/no.9/paper5.pdf>.
- [10] Тырсин, А.Н.: *Об эквивалентности знакового и наименьших модулей методов построения линейных моделей*. *Обзор прикладной и промышленной математики*, 12(4):879–880, 2005.

- [11] Павловский, Ю. Н.: *Имитационные модели и системы*. М.: Фазис, 2000.
- [12] Битюцков, В. И., Войцеховский, М. И., и Иванов, А. Б.: *Математическая энциклопедия*, том 4. М.: Советская Энциклопедия, 1984.
- [13] Marquardt, D. W.: *An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters*. Journal of the Society of Industrial and Applied Mathematics, 11(2):431–441, 1963.
- [14] More, J. J.: *The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory*. In G.A. Watson, Lecture Notes in Mathematics 630, pages 105–116. Springer-Verlag, Berlin, 1978. Cited in Åke Björck’s bibliography on least squares, which is available by anonymous ftp from `math.liu.se` in `pub/references`.
- [15] Daglish, T., Hull, J., and Suo, W.: *Volatility surfaces: Theory, rules of thumb, and empirical evidence*. Quantitative Finance, 7(5):507–524, 2007.
- [16] Стрижов, В. В. и Сологуб, Р. А.: *Индуктивное порождение регрессионных моделей предполагаемой волатильности для опционных торгов*. Вычислительные технологии, 14(5):102–113, 2009.