Алгоритмы порождения допустимых суперпозиций существенно нелинейных моделей

Г. И. РУДОЙ

Аннотация. При восстановлении нелинейной регрессии предлагается рассмотреть набор индуктивно порожденных моделей с целью выбора оптимальной модели. В работе исследуются индуктивные алгоритмы порождения допустимых существенно нелинейных моделей. Предлагается алгоритм, порождающий все возможные суперпозиции заданной сложности за конечное число шагов. В вычислительном эксперименте приводятся результаты для задачи моделирования волатильности опционов.

1. Введение

В ряде приложений [1] [2] [3] возникает задача восстановления регрессии по набору измеренных данных с условием возможности проинтерпретировать полученные данные экспертом.

Одним из методов, позволяющих получать интерпретируемые модели, является символьная регрессия [4] [5], в ходе которой измеренные данные приближаются некоторой математической формулой, например $\sin x^2 + 2x$ или $\log x - \frac{e^x}{x}$. Одна из возможных реализаций этого метода предложена Джоном Коза [6] [7], использовавшим эволюционные алгоритмы для реализации символьной регрессии. Иван Зелинка предложил дальнейшее развитие этой идеи [8], получившее название аналитического программирования.

Фактически, получаемая математическая формула является математической моделью [9] исследуемого процесса или явления, то есть, это математическое отношение, описывающее основные закономерности, присущие этому явлению.

Алгоритм построения требуемой математической модели 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 [1] функционала качества. На базе этой оценки у некоторой части формул случайным образом заменяется одна элементарная функция на другую (например, sin на cos или + на ×), а у некоторой другой части происходит взаимный попарный обмен подвыражениями в формулах.

Key words and phrases. Символьная регрессия, индуктивное порождение нелинейных моделей.

Научный руководитель В. В. Стрижов.

[1] Сходу не нашел публикаций на тему использования других функционалов. Похоже, у Владиславлевой что-то было, но пока не могу сослаться на что-то конкретное.

Среди возможных путей улучшения качества символьной регрессии — анализ информативности различных признаков. Например, в ходе работы эволюционного алгоритма можно выявлять, какие из параметров слабо влияют на качество получающейся формулы, и либо убирать их совсем, либо обеспечивать неслучайность замены элементарных функций или обмена поддеревьев с целью замены этих параметров на другие в предположении, что они, возможно, окажутся более информативными.

Целью данной работы является теоретическое обоснование алгоритмов индуктивного порождения моделей и анализ этих алгоритмов.

Другим вопросом, возникающим при применении подобных эволюционных алгоритмов, является их принципиальная теоретическая корректность: способен ли вообще такой алгоритм породить искомую формулу.

В части 2 данной работы формально поставлена задача построения алгоритма индуктивного порождения моделей. Затем, в части 3 строится искомый алгоритм для частного случая непараметризованных моделей и доказывается его корректность, а затем алгоритм обобщается на случай моделей, имеющих параметры. В части 4 описываются вспомогательные технические приемы, использованные в практическом алгоритме порождения моделей, описанном в части 5.

2. Постановка задачи

2.1. **Алгоритмическая часть.** Пусть дан набор $(\mathbf{x_i}, y_i) \mid i \in \{1, \ldots, N\}, \mathbf{x_i} \in R^n, y_i \in R$. Предполагается, что $\mathbf{y} \in \mathcal{N}$ [2].

Требуется построить аналитическую функцию $f : R^n \to R$ из заданного множества элементарных функций G и доставляющую минимум некоторому функционалу ошибки.

2.2. **Теоретическая часть.** Пусть $G = \{g_1, \ldots, g_{n_g}\}$ — множество данных примитивных функций. Требуется:

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

3. Пути решения задачи: теоретическая часть

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

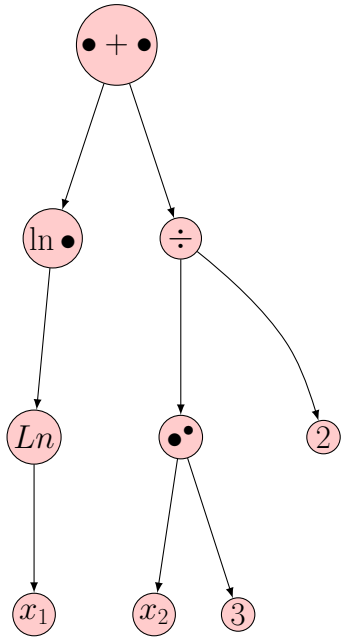
- В вершинах дерева находятся соответствующие примитивные функции.
- Число дочерних вершин у некоторой вершины равно арности соответствующей функции, а их порядок (в смысле обхода в глубину) соответствует порядку аргументов соответствующей функции.
- В листьях дерева находятся свободные переменные.

[2] А правда, зачем?

- Порядок вершин в смысле уровня относительно корня дерева 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, содержащая результат выражения.

Таким образом, вычисление значения суперпозиции в некоторой точке эквивалентно подстановке соответствующих значений свободных переменных в граф выражения.

Для примера рассмотрим граф, соответствующий суперпозиции $\sin(\ln x_1) + \frac{x_2^3}{2}$:



3.1. **Алгоритм порождения суперпозиций.** Итак, пусть дано множество примитивных функций $G = \{g_1, \ldots, g_{n_g}\}$ и множество свободных переменных $X = \{x_1, \ldots, x_{n_x}\}$. Сначала опишем итеративный алгоритм, позволяющий за конечное число итераций построить суперпозицию произвольной наперед заданной длины. Для удобства будем исходить из предположения, что множество G состоит только из унарных и бинарных функций, и разделим его соответствующим образом на два подмножества: $G = G_b \cup G_u \mid G_b = \{g_{b_1}, \ldots, g_{b_k}\}, G_u = \{g_{u_1}, \ldots, g_{u_l}\}$, где G_b — множество всех бинарных функций, а G_u — множество всех унарных функций из G. Потребуем также наличия id в G_b.

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

(1) Инициализируем вспомогательное множество $\mathcal{I}_f = \{(x, 0) \mid x \in X\}$.
(2) Инициализируем множество $\mathcal{F}_0 = X$.

(3) Для множества $\mathcal{F}_i$ построим вспомогательное множество U_i, состоящее из результатов применения функций из G_u к элементам $\mathcal{F}_i$:

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

(4) Аналогичным образом построим вспомогательное множество B_i для бинарных функций:

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

(5) Обозначим $\mathcal{F}_{i+1} = \mathcal{F}_i \cup U_i \cup B_i$.
(6) 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.
(7) Перейдем к следующей итерации.

Тогда $\mathcal{F} = \cup_0^\infty \mathcal{F}_i$ — множество всех возможных суперпозиций конечной длины, построимых из данного множества примитивных функций.

Вспомогательное множество $\mathcal{I}_f$ позволяет запоминать, на какой итерации была впервые встречена данная суперпозиция. Это необходимо, так как каждая суперпозиция, впервые порожденная на i-ой итерации, будет порождена еще раз и на любой итерации после i.

Алгоритм $\mathfrak{A}$ очевидным образом обобщается на множество G, содержащее функции произвольной (но имеющей конечный верхний предел) арности. Действительно, для такого обобщения достаточно строить аналогичным образом вспомогательные множества для этих функций.

Утверждение 1. *Алгоритм $\mathfrak{A}$ корректен: любую конечную суперпозицию он действительно породит за конечное число шагов.*

Доказательство. Чтобы убедиться в этом, найдем номер итерации, на котором будет порождена некоторая произвольная конечная суперпозиция f. Для этого достаточно представить суперпозицию f в виде соответствующего графа Γ_f и рекурсивно пройти от вершин к листьям, составляя цепочку соотношений на номера итераций по следующим правилам:

- Если вершина, полученная на i-ой итерации — унарная функция, то это функция от выражения, полученного на $(i-1)$-ой итерации.
- Если вершина, полученная на i-ой шаге — бинарная функция, то это функция от двух выражений, как минимум одно из которых получено на $(i-1)$-ой итерации, а другое — на $(i-1)$-ой или ранее.
- Если это узел со свободной переменной, то он получен на нулевой итерации.

При помощи этой цепочки соотношений можно получить номер итерации, на которой суперпозиция f была порождена.

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

Заметим, что алгоритм в таком виде не позволяет получать выражения для численных коэффициентов. Покажем, однако, на примере конструирования множеств U_i и B_i, как исходный алгоритм может быть расширен с учетом таких коэффициентов:

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

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

Здесь коэффициенты α, β 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 неявно предполагаем, что каждая суперпозиция из предыдущих итераций входит в следующую, будучи умноженной на некоторой коэффициент и с константной поправкой.

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

$\alpha, \beta, \psi, \phi$ являются параметрами модели. В практических приложениях можно оптимизировать значения этих параметров у получившихся суперпозиций, например, алгоритмом Левенберга-Марквардта [10] [11].

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

Отдельно подчеркнем, что численные коэффициенты у различных суперпозиций различны. Однако, так как на разных итерациях алгоритма мы можем получить, вообще говоря, одну и ту же суперпозицию с точностью до этих коэффициентов, их необходимо не учитывать при тестировании различных суперпозиций на равенство.

Кроме того, опять же, заметим, что и этот алгоритм очевидным образом обобщается на случай множества G, содержащего функции произвольной арности.

3.2. **Бесконечные суперпозиции.** В предложенных ранее методах [8] построения суперпозиций необходимо было самостоятельно следить за тем, чтобы в ходе работы алгоритма не возникало «зацикленных» суперпозиций типа $f(x, y) = g(f(x, y), x, y)$. Заметим, что в предложенном алгоритме такие суперпозиции не могут возникнуть по построению.

3.3. **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 некоторой задачи корректны.

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 будет, в свою очередь, означать необходимость задания областей значений 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 [3].

3.4. **Множество «минимальных» суперпозиций.** В ходе работы алгоритма могут возникать суперпозиции вида $x + x$ и $2x$, и хотя эти выражения эквивалентны, они представляются различными формулами. Аналогично $x + y$ и $y + x$, отличающиеся порядком следования слагаемых. Таким образом, необходим способ нормализации суперпозиций.

Во-первых, необходимо обеспечивать одинаковый порядок следования операндов, например, упорядочивая их каким-либо образом у коммутирующих бинарных функций.

Во-вторых, необходимо иметь набор правил, позволяющих проверить равенство $x+x$ и $2x$. Иными словами, необходимо иметь набор связей между различными функциями из множества данных примитивных функций. Заметим, что в общем случае эта задача требует введения значительного числа правил и по определению сводится к последовательному переборному их применению к различным подвыражениям суперпозиции.

В связи с этим может оказаться более эффективным иной подход к сравнению суперпозиций: так как по условию практической задачи значения искомой функции даны в конечном числе точек, то для проверки на равенство достаточно вычислить получившиеся суперпозиции в этих точках и сравнить их.[4]

Другим способом, позволяющим избежать разрастания количества правил, может являться использование только «независимых» функций. Например, sin и cos связаны известным тригонометрическим соотношением с точностью до знака, а значит, sin и $\tan = \frac{\sin}{\cos}$ также связаны, как и ряд прочих тригонометрических функций, поэтому предлагается среди примитивных функций оставить лишь sin и стандартные арифметические действия для вывода прочих тригонометрических функций через соответствующие соотношения.

Однако, можно заметить два часто встречающихся шаблона правил, связывающих различные функции:

- Для унарных функций это $f \circ g = h$ (например, $\ln \circ \exp = id$).
- Для бинарных функций это $f(x, g(x, i)) = g(x, s(i))$. Например, $x+xi = x(i+1)$: здесь $f = (+), g = (\times), s(i) = i + 1$.

[3] А было бы вычислительно эффективно — все равно, похоже, было бы NP-сложной задачей

[4] Кстати, может, можно придумать какой-нибудь оптимальный алгоритм поиска расходящихся точек? Ну или эвристику хотя бы, позволяющую перебирать данные точки не в лоб, а более целенаправленно и позволяя находить точки, в которых значения различаются, более быстро.

В практических приложениях видится целесообразным использование набора правил такого вида вкупе с использованием только «независимых» тригонометрических функций, то есть, по факту, какой-нибудь одной из них и еще одной обратной.

4. Алгоритм Левенберга-Марквардта и мультистарт

Алгоритм Левенберга-Марквардта $\mathfrak{LM}$ предназначен для решения задачи минимизации функции, представляющей из себя сумму квадратичных членов. В частности, он используется для оптимизации параметров нелинейных регрессионных моделей в предположении, что в качестве критерия оптимизации используется среднеквадратичная ошибка модели на обучающей выборке:

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{m} [y_i - f(\mathbf{x_i}, \beta)]^2 \to \min,$$

где β — вектор параметров модели (суперпозиции) f.

$\mathfrak{LM}$ может рассматриваться как комбинация метода Гаусса-Ньютона и метода градиентного спуска.

Перед началом работы алгоритма задается начальный вектор параметров $\beta_{\mathbf{0}}$. На каждой итерации этот вектор заменяется новой оценкой, $\beta + \delta$. Для определения δ используется линейное приближение функции:

$$f(\mathbf{x}, \beta + \delta) \approx f(\mathbf{x}, \beta) + \mathbf{J}\delta,$$

где $\mathbf{J}$ — якобиан функции f в точке β.

Приращение δ в точке β, доставляющей минимум S, равно нулю, поэтому для нахождения последующего значения приращения δ приравняем нулю вектор частных производных S по β. То есть, в векторной нотации:

$$S(\beta + \delta) \approx \|\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta) - \mathbf{J}\delta\|^2$$

.

Дифференциирование по δ и приравнивание нулю приводит к:

$$(\mathbf{J}^T\mathbf{J})\delta = \mathbf{J}^T[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)]$$

.

Левенберг предложил заменить $(\mathbf{J}^T\mathbf{J})$ на $(\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \lambda\mathbf{I})$, где λ — некоторый параметр регуляризации. Марквардт дополнил это предложение с целью более быстрого движения по тем направлениям, где градиент меньше. Для этого вместо $\mathbf{I}$ используется диагональ матрицы $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$, и искомое уравнение на δ выглядит как:

$$(\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \lambda diag(\mathbf{J}^T\mathbf{J}))\delta = \mathbf{J}^T[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)]$$

.

Решая это уравнение, получаем окончательное выражение для δ:

$$\delta = (\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \lambda diag(\mathbf{J}^T\mathbf{J}))^{-1}\mathbf{J}^T[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)]$$

.

Как и всякий подобный алгоритм оптимизации, $\mathfrak{LM}$ находит лишь локальный минимум. Для решения этой проблемы применяется метод *мультистарта*: случайным образом задается несколько начальных приближений, и для каждого из них запускается $\mathfrak{LM}$. Если найдено несколько различных локальных минимумов, то выбирается тот из них, в котором значение $S(\beta)$ меньше всего.

5. Вычислительный эксперимент

5.1. **Алгоритм.** Несмотря на то, что указанный ранее итеративный алгоритм порождения суперпозиций позволяет получить, в принципе, произвольную суперпозицию, для практических применений он непригоден, как и любой алгоритм, реализующий полный перебор, в связи с чрезмерной вычислительной сложностью. Вместо него можно использовать стохастические алгоритмы и ряд эвристик, позволяющих на практике получать за приемлемое время результаты, удовлетворяющие заранее заданным условиям «достаточной пригодности».

В данной работе предлагается следующий алгоритм:

Алгоритм 2. *Алгоритм стохастического порождения суперпозиций.*
Вход:

(1) Множество примитивных функций.
(2) Множество точек обучающей выборки.
(3) N_{max} — максимальное число одновременно рассматриваемых суперпозиций.
(4) I_{max} — максимальное число итераций алгоритма.
(5) F_{min} — минимальная приспособленность суперпозиций.

(1) Инициализируется начальный массив суперпозиций случайным образом.
(2) Оптимизируются параметры суперпозиций алгоритмом $\mathfrak{LM}$.
(3) Для каждой еще не оцененной суперпозиции f рассчитывается значение функции ошибки S_f на обучающей выборке, и ставится в соответствие значение F_f, характеризующее «приспособленность» суперпозиции f: $F_f = \frac{1}{1+S_f}$. Таким образом, чем лучше результаты суперпозиции, тем ближе значение ее приспособленности к 1, и, наоборот, чем хуже — тем ближе к 0. Если данная суперпозиция точно описывает данные, то значение ее приспособленности в точности равно единице.
(4) Массив суперпозиций сортируется согласно их приспособленности.
(5) Наименее приспособленные суперпозиции удаляются из массива до тех пор, пока его размер не станет равен N_max.
(6) Отбирается некоторая часть наименее приспособленных суперпозиций. У этой части происходит случайная замена одной функции или свободной переменной на другую. Замена такова, чтобы сохранилась структура суперпозиции,

а именно — в случае замены функции сохраняется арность, а свободная переменная заменяется только на другую свободную переменную. При этом исходные суперпозиции сохраняются в множестве.

(7) Повторяются шаги $3-4$.

(8) Производится случайный обмен поддеревьями наиболее приспособленных суперпозиций. При этом исходные суперпозиции сохраняются в массиве.

(9) Повторяются шаги $3-4$.

(10) Проверяются условия останова: если либо число итераций больше I_{max}*, либо в массиве есть хотя бы одна суперпозиция с приспособленностью больше, чем* F_{min}*, то алгоритм останавливается, и результатом является наиболее приспособленная суперпозиция, иначе переход к шагу* 2.

Список литературы

[1] P. Barmpalexis, K. Kachrimanis, A. Tsakonas, and E. Georgarakis. Symbolic regression via genetic programming in the optimization of a controlled release pharmaceutical formulation. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 107(1):75–82, 2011.

[2] Peng Shi and Wei Zhang. A copula regression model for estimating firm efficiency in the insurance industry. *Journal of Applied Statistics*, 38(10):2271–2287, October 2011.

[3] Selen Onel, Abe Zeid, Sagar Kamarthi, and Meredith Hinds Harris. Analysis of risk factors and predictive model for recurrent falls in community dwelling older adults. *Int. J. of Collaborative Enterprise*, 1:359–380, February 01 2011.

[4] J. W. Davidson, D. A. Savic, and G. A. Walters. Symbolic and numerical regression: experiments and applications. In Robert John and Ralph Birkenhead, editors, *Developments in Soft Computing*, pages 175–182, De Montfort University, Leicester, UK, 29-30 June 2000. 2001. Physica Verlag.

[5] Claude Sammut and Geoffrey I. Webb. Symbolic regression. In Claude Sammut and Geoffrey I. Webb, editors, *Encyclopedia of Machine Learning*, page 954. Springer, 2010.

[6] John R. Koza. Genetic programming. In James G. Williams and Allen Kent, editors, *Encyclopedia of Computer Science and Technology*, volume 39, pages 29–43. Marcel-Dekker, 1998. Supplement 24.

[7] John R. Koza. Introduction to genetic algorithms, August 15 1998.

[8] Ivan Zelinka, Zuzana Oplatkova, and Lars Nolle. I. ZELINKA et al: ANALYTICAL PROGRAMMING ... ANALYTIC PROGRAMMING – SYMBOLIC REGRESSION BY MEANS OF ARBITRARY EVOLUTIONARY ALGORITHMS, August 14 2008.

[9] Ю. Н. Павловский. *Имитационные модели и системы.* Фазис, 2000.

[10] D. W. Marquardt. An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. *Journal of the Society of Industrial and Applied Mathematics*, 11(2):431–441, 1963.

[11] J. J. Moré. 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`.

Московский физико-технический институт, ФУПМ, каф. «Интеллектуальные системы»