Co-evolution

https://github.com/aimclub/GOLEM/issues/47

Высокоуровневое описание

Предлагается реализовать кооперативную ко-эволюцию: решение будет собираться по частям из нескольких популяций подграфов.

Разделение на подзадачи

Вероятно, будет несколько фиксированных слотов — каждый для своей популяции и по этой схеме будет собираться итоговый граф. О том, какая именно структура, знает только пользователь GOLEM, поэтому метод сборки передаётся в качестве параметра.

Теоретически, структура соединения слотов тоже может эволюционировать (как отдельная популяция), но это в большинестве случаев дискредитирует идею разделения ответственности \rightarrow специализации популяций. Кроме того, при коэволюции разбиение на подзадачи зачастую осуществляют через анализ статистических взаимосвязей переменных, но в случае графа это не представляется возможным — его структура не фиксирована.

Применение для мультимодальных данных в FEDOT

Одно из полезных применений — работа с мультимодяльными данными в FEDOT: будет происходить эволюция Pipiline-ов, которые объединяются в общий Pipiline, оборачиваясь каждая в AtomizedModel.

Структура общего пайплайна, вероятно, должна быть такой: несколько популяций ответственны за перевод входных данных конкретного типа в промежуточное представление, а после этого ещё одна популяция аггрегирует их, получая ответ.

При этом на соединениях между разными популяциями выделяется «типизация»: нужно, чтобы данные, выдаваемые подграфами одной популяции соответствовали входным другой популяции, соединяющейся с ней в пайплайне. И эти внешние соединения (свои для каждой популяции) получают особенную поддержку в генетических операторах (как входы и выходы в pipeline — только модели с правильным типом входов/выходов могут вставать на это место).

Мотивация

Такое разделение ответственности (разные популяции для разных типов данных + аггрегатор) — максимально естественно и гарантирует высокую степерь независимости задач, выполнямых разными популяцями, а это в точности условие, требующееся для применимости кооперативной коэволюции, поэтому можно ожидать экспоненциального от количества популяций ускорения.

На предметом уровне это будет значить, что особи станут более «прозрачными» и гибкими (их структура будет более точно разложена перед оптимизатором). Соответственно, будет меньше появляться «комплексов» (термин позаимствован у Фрейда...): ситуации, при которой неудачная часть графа остаётся в популяции только потому, что когда-то зацепилась за удачную. Таким образом, зона ответственности будет менее расплывчатой.

Генетические операторы

Для оценки особи нужно протестировать, «как она себя ведёт в комбинации с особями из других популяций», пробуя разные комбинации.

Проводится несколько испытаний, каждое из которых — оценка фитнесса всего графа, собранного из каких-то обоей разных популяций. Выбирать испытания нужно, чтобы:

- Каждая особь поучаствовала в достаточном количестве испытаний
- Отдавалось предпочтение более точной оценки fitness-а у лучших особей

При этом нужно быть более чувствительным к лучшим значениям, чем усреднение. В пределе — максимум.

Классический подход к выбору collaborator-ов — k-fold. Однако практика показывает, что максимум для фиксированного индивида почти всегда достигается на одном из лучших членов каждой из остальных популяций, поэтому, вероятно, стоит использовать подход iCCEA: поддерживать архив этих лучших представителей (похожую задачу решает GloryHall HallOfFame, только ещё нужно учитывать расстояние между особями).

Когда fitness особей оценён, формирование новой популяции происходит одним из стандатных методов.

Для оценки хода оптимизации используется external fitness — в случае кооперативной коэволюции это fitness лучшей комбинации из текущих популяций.

Diversity Maintenance (Niching)

- подход, в котором отдельно наказывается за отсутствие разнообрзия (здесь описаны основные методы: https://www.intechopen.com/chapters/8533).

Измерение разнообразия

В случае графов измерять разнообразие можно с помощью аппроксимации Graph edit distance — сама задача NP полная, но есть аппроксимации за ≈линейное время (В целом, обычно бо'льшая часть времени — вычисление фитнесса, так что можем позволить) Кроме структуры, вероятно, нужно использовать пользовательскую информацию для нахождения расстояния.

Можно использовать информацию о хронологии эволюции: как напрямую учитывать родословеную при селекции, так и помогать GED находить оптимальное решение.

Как влиять на ход эволюции

Предлагается использовать один из классических подходов, описанных, например, в Essentials of metaheuristics. Глобально, есть два пути:

- Модификация fitness
- Учитывать на уровне селекции

Область применения

Как минимум — параметр разнообразия полезно мониторить, чтобы не действовать вслепую.

Кроме того, имея метрику и рычажок для её увеличения/уменьшения (в некотором смысле — exploration vs. exploitation), логично вручить их адаптирующему агенту.

Что уже реализовано

На данный момент ведётся работа над минимизацией дубликатов: https://github.com/aimclub/GOLEM/issues/89, что можно назвать частным случаем поддержки разнообразия, а для оценки разнообразия используются метрики, не использующие графовую структур до конца (сравниваются скалярные параметры графов).