Обзор GOLEM

Владимир Латыпов

09-02-2024

NSS Lab ITMO

Дисклеймер: презентация больше адаптирована для рассказа с периодическим переходом на демонстрацию экрана со статьями, issues или кодом, но на свой страх и риск можно и попробовать её читать без докладчика.

История появления

Изначально была библиотека `FEDOT` для AutoML, основана на pipeline-ах ≈произвольной структуры (dag), поиск происходит посредством эволюции. Но алгоритм графовой оптимизации оказался полезен и для кучи других задач, в т.ч. проектов лаборатории:

- BAMT (Bayesian AutoML Tool)
- NAS (Neural Architecture Search)
- GEFEST (**G**enerative Evolution For Encoded STructures)
- пользовательские применения (коллаборация с химической лабораторией, например — btw полезный подход)

Поэтому было решено выделить эту часть в отдельную библиотеку — GOLEM.

Возможности FEDOT

		STREAMLINE	Auto-Keras	H20-3 AutoML	MLme	LAMA	FEDOT	FLAML	ALIRO	PYCARET	Auto-Gluon	MLIJAR-supervised	Ludwig	TPOT	Auto-Sklearn	Auto-PyTorch	GAMA	Hyperopt-sklearn	Auto-WEKA	RECIPE	ML-PLan	TransmogrifAI	MLBox	Xcessiv	Auto_ML
Target	Binary Classification	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES
	MultiClass Classification	NO	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES		YES	YES	YES	YES	YES
	Regression	NO	YES	YES	NO	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	YES	NO	YES	YES	YES	YES	YES
	Multi-Task	NO	YES	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	YES	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO
	Multi-Label	NO	NO	NO	NO	NO	NO		NO	NO	NO	NO	NO	NO	YES	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO
	Clustering	NO	NO	NO	NO	NO	YES	NO	NO	YES	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO
	Anomoly Detection	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	YES	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO

Глобально про алгоритм

> Структура — сложный гиперпараметр, так у самого задания структуры нет фиксированной структуры...

Использует эволюцию для оптимизации над графами, в том числе — многокритериальной. Предоставляет многие стаднартные операторы, есть интерфей для добавления пользовательских.

Операторы

Глобально — то, что приоткрывает нам чёрноящиковость представления генома и преобразует одни геномы в другие.

Эволюция — последовательное применение этих операторов.

Ожидается их «семантичность»: например, то, что мы можем получать небольшие изменения структуры с точки зрения задачи ⟶ это отражается и на значениях фитнесс функции.

Пример несемантичности: если кодировать вещественнозначные решения битами, получится плохо.

Мутации

Мутации и кроссовер учитывают `GraphGenerationRequirements`, а также `GraphVerifier`.

Мутации, семантические для графов:

- Заменить аттрибут каждой ноды с заданной вероятность на то, что сгенерирует `NodeFactory` и так, как посоветует `ChangeAdvisor` (например, в химии некоторые связи невозможны)
- Добавление ребра между случайными нодами
- Вставка случайной ноды в разрыв ребра
- Заменить/выбросить ноду
- Заменить поддерево ноды на случайное
- ...пользовательские, особенно семантические

Кроссовер

- Замена случайных поддеревьев
- Нахождение структурно эквивалентных подграфов и замена случайных нод или поддеревьев в них
- Смена родителями с аналогичной нодой в другом графе
- … пользовательские

Селекция

1. Tournament(fraction): каждый раз из группы размера $\approx$ population_size $*$ fraction выбирается лучший в итоговую популяцию и убирается из кандидатов.
2. SPEA-2

   Strength — количество особей, которые доминирует заданная:

   $$S(\boldsymbol{i}) = \left|\left\{\boldsymbol{j} \mid \boldsymbol{j} \in P_t + \overline{P_t} \wedge \boldsymbol{i} \succ \boldsymbol{j}\right\}\right|$$

   Тогда назначаем raw fitness-ом сумму strengths всех, кого особь доминирует (то есть особо выгодно доминировать крутых):

   $$R(\boldsymbol{i}) = \sum_{\boldsymbol{j} \in P_t + \overline{P_t}, \boldsymbol{i} \succ \boldsymbol{j}} S(\boldsymbol{j})$$

Но ещё хотим учитывать разнообразие. Про пространство оптимизации в общем случае ничего не знаем, поэтому считаем разнообразие в пространстве objective functions:

$$R(i) = \frac{1}{\sigma_i^k + 2}$$

, где σ_i^k — расстояние k-го ближайшего среди популяции + архива, а k выбирают $\sqrt{N + \overline{N}}$

- Селекция новой популяции: производим селекцию турниром по F с заменой (участников турнира убираем из кандидатов)
- Селекция архива: выбираем недоминированных, но если не соответствует целевому размеру:

↳ Слишком большой: truncat-им по фитнессу (раз недоминированные, эквивалентно, по плотности): на каждому шагу убираем лексикографически меньшего по вектору расстояний до k-го ближайшего:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{i} \leq_d \boldsymbol{j} \quad :\Leftrightarrow \quad & \forall\, 0 < k < |\overline{\boldsymbol{P}}_{t+1}| \;:\; \sigma^k_{\boldsymbol{i}} = \sigma^k_{\boldsymbol{j}} \quad \vee \\ & \exists\, 0 < k < |\overline{\boldsymbol{P}}_{t+1}| \;:\; \left[\left(\forall\, 0 < l < k \;:\; \sigma^l_{\boldsymbol{i}} = \sigma^l_{\boldsymbol{j}} \right) \wedge \; \sigma^k_{\boldsymbol{i}} < \sigma^k_{\boldsymbol{j}} \right] \end{aligned}$$

↳ Слишком маленький: добавляем оставшихся сортировкой по фитнессу.

«Регуляризация»

Тоже пытается минимизировать сложность моделей (по умолчанию — отключен): рассматривает все валидные и уникальные поддеревья и выбирает среди родителей и детей лучших (эти поддеревья проще и хорошо, если они окажутся не хуже родителей)

Inheritance(Genetic scheme)

- `generational`: новая популяция занимает место старой $(\mu, \lambda), \mu = \lambda$
- `steady-state`: каждый раз добавляем по одному — $(\mu + 1)$
- `parameter-free`: $(\mu + x) - x$ растёт, если давно не было улучшений ($\Rightarrow$ нужно увеличивать exploration)

Регулятор репродукции (Population → Population)

Есть min_size, max_size; некоторые операторы вероятностны и не всегда генерируют подходящие под `GraphRequirements` графы: он пробует применять операторы несколько раз + изучает, сколько в среднем процентов успешны.

Elitism

Поддерживать HallOfFame, во внеочередном подярке добавлять individual-ов оттуда.

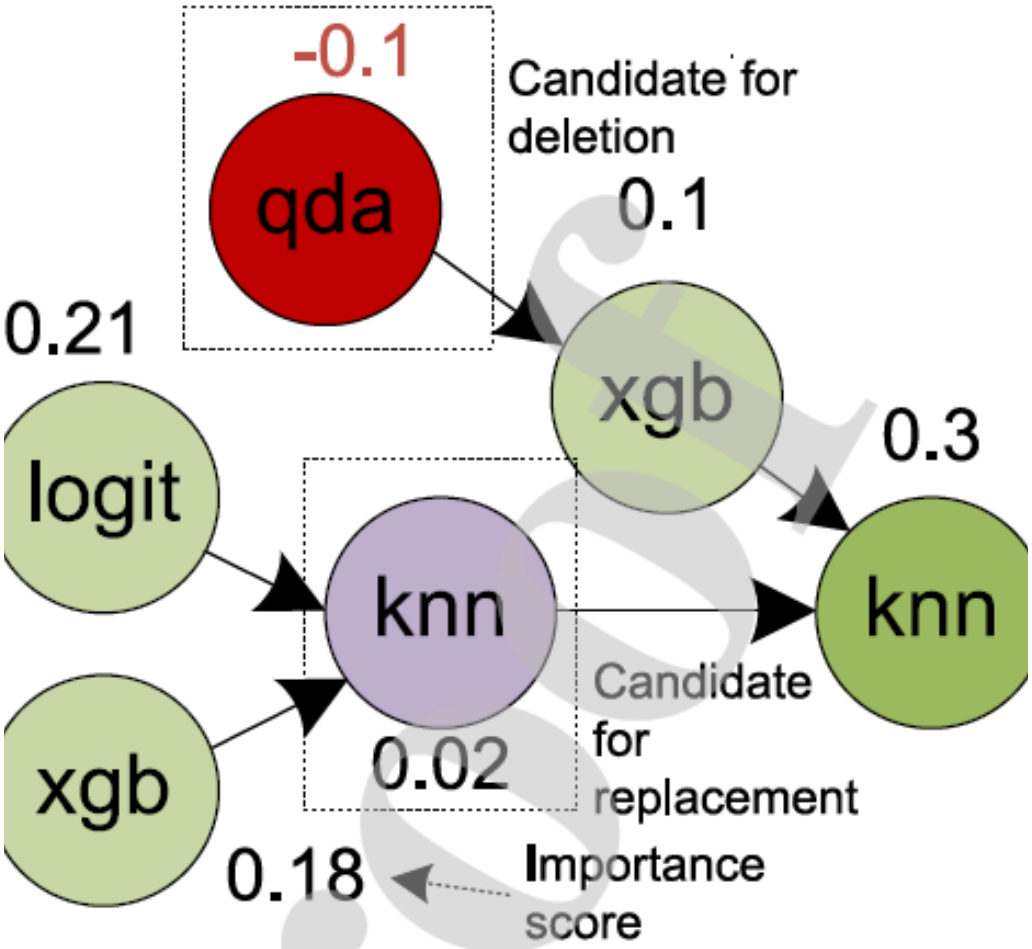
Откуда торчат уши FEDOT

Тюнинг

По увеличению эффекитвности, но уменьшению качества:

- Одновременно все ноды
- По очереди с пересчётом
- По очереди без пересчёта

Sensitivity analysis



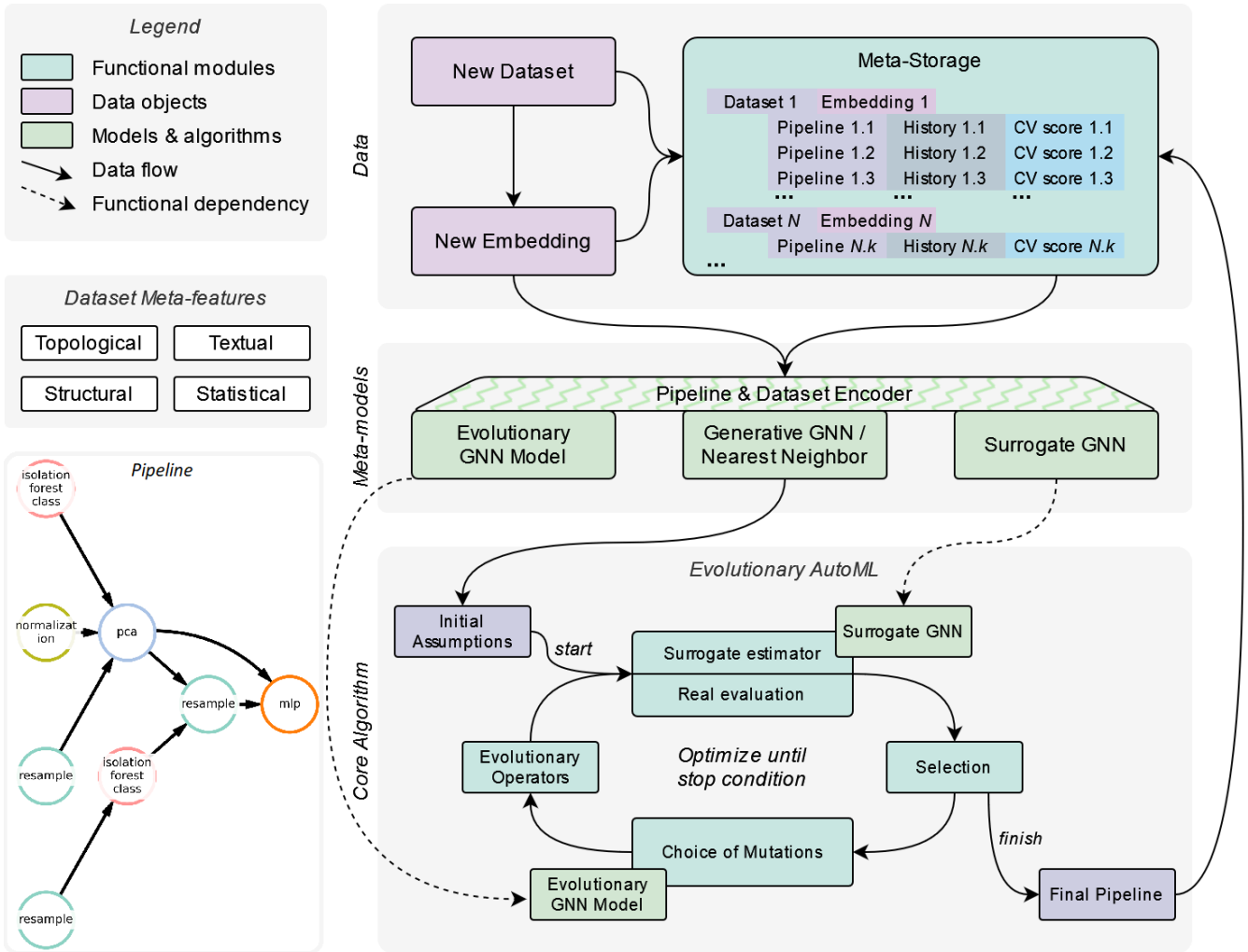
- Для экспертной оценки конечного продукта
- Назначают скоры полезности, пробуя разные локальные изменения

Проект под кодовым названием ~~GAMLET~~ <anonymized>

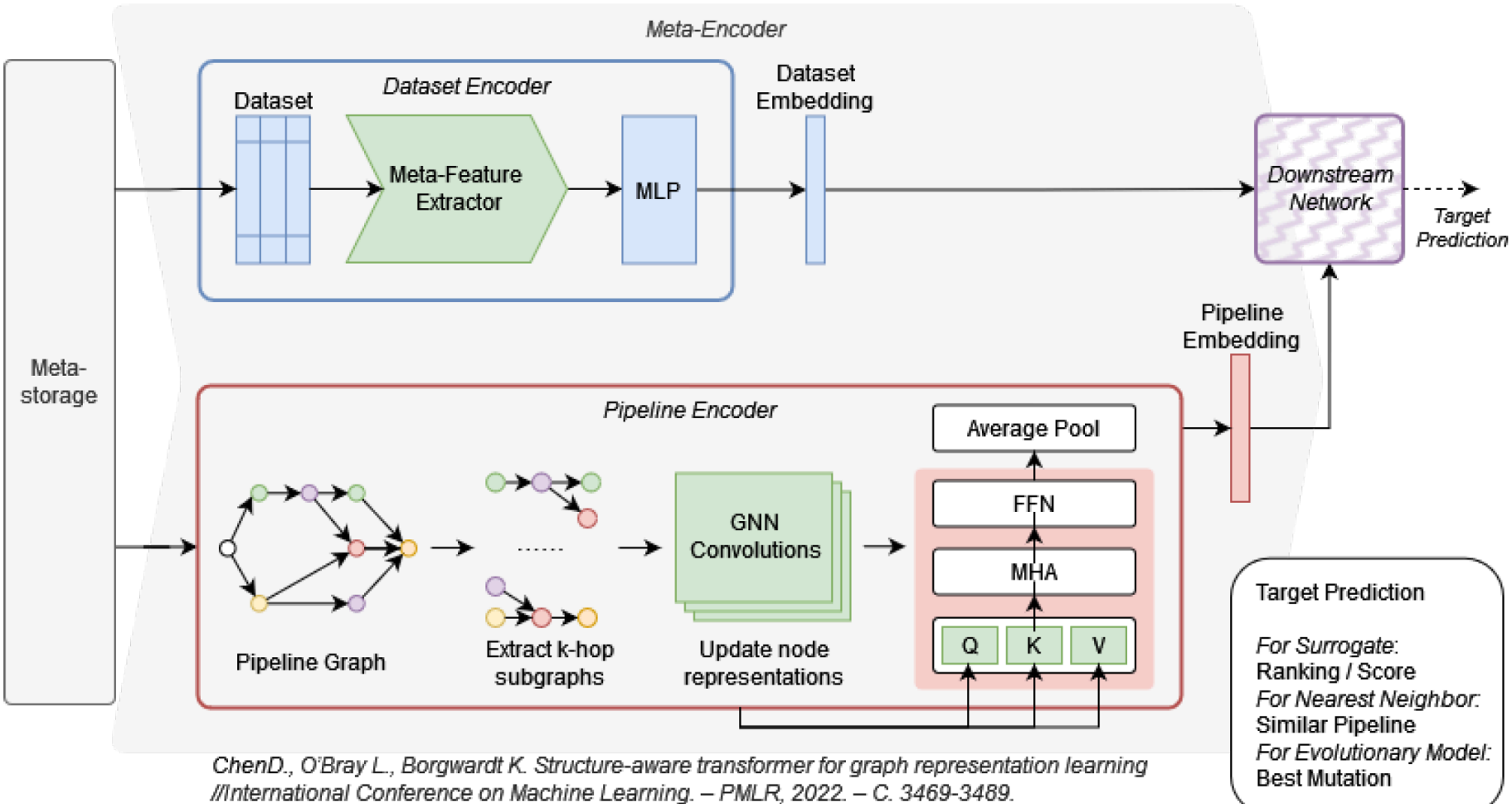
Глобально: втыкаем в разные места эволюции ML модели:

- Где мы точно не знаем, какой вариант лучше и поэтому выбираем случайный
- Где вычисление занимает очень много времени, и можно настроить аппроксиматор для его ускорения.

Общая схема


Legend
Functional modules
Data objects
Models & algorithms
Data flow
Functional dependency
Dataset Meta-features
Topological
Textual
Structural
Statistical
Pipeline
isolation forest class
normalizat ion
pca
resample
mlp
resample
isolation forest class
resample
Data
New Dataset
New Embedding
Meta-Storage
Dataset 1
Embedding 1
Pipeline 1.1
History 1.1
CV score 1.1
Pipeline 1.2
History 1.2
CV score 1.2
Pipeline 1.3
History 1.3
CV score 1.3
Dataset N
Embedding N
Pipeline N.k
History N.k
CV score N.k
Meta-models
Pipeline & Dataset Encoder
Evolutionary GNN Model
Generative GNN / Nearest Neighbor
Surrogate GNN
Core Algorithm
Evolutionary AutoML
Initial Assumptions
start
Surrogate GNN
Surrogate estimator
Real evaluation
Evolutionary Operators
Optimize until stop condition
Selection
finish
Choice of Mutations
Evolutionary GNN Model
Final Pipeline

Расширенный эмбеддинг для трёх задач:



ChenD., O'Bray L., Borgwardt K. Structure-aware transformer for graph representation learning //International Conference on Machine Learning. – PMLR, 2022. – С. 3469-3489.

Адаптивность

`OperatorAgent`: интерфейс подборщика мутаций, по умолчанию — `RandomAgent`, но может обучаться. Получается задача multi-armed bandit или contextual MAB.

В качестве контекста используются фичи графов, пытаемся рекомендовать мутации для конкретного графа, обучение происходит «под конкретную задачу» в прошлых прогонах + немного на лету:

- feather_graph ← FEATHER embedding
- nodes_num
- labeled_edges
- operations_quantity
- adjacency_matrix
- none_encoding

Shallow exploration & deep representation

Решают contextual MAB через нейросеть + LinUCB (сйечас пробуют ε-greedy, так как он не сходится полностью, в отличие от UCB, а ведь распределение наград может меняться).

Доказывают, что это обеспечивает $\tilde{O}\left(\sqrt{T}\right)$ regret.

см. статью.

Кроме того, перед этим трансформируют в fitness improvement в credit согласно этой статье: Li, 2014.

Изначальные рекомендации pipleline-ов

Выдаёт nearest neighboors в пространстве embedding-а, либо использует генеративную GNN.

Surrogate model

Pilpeline (без учёта гиперпараметров) embedd-ится (общая часть с адаптивностью) с помощью GNN + attention (была картинка), датасет описывается метапризнаками (перечислены в статье), нужно предсказать, насколько хорошо будет себя вести модель. На практике — лучше получается формулировка с ранжированием (см. статью).

Как это всё обучать

Есть метахранилище, где много историй оптимизации, куча evaluation-ов разных pipleline-ов на разных dataset-ах.

С големом не поставляется, с FEDOT-ом — да.

Перспективы

Выбираются только типы мутаций, а ведь хочется ещё и их параметры (например, вероятности мутаций) — их как раз берём от балды...

Гиперпараметры эволюции всё ещё нужно указывать ручками, а ведь их можно динамически подстраивать.

Кроме того, хочется иметь более широкий контекст в виде эволюционной ситуации для бандита.

Но какой-то inductive bias всё же должен быть.

С другой стороны, есть llm-guided evolution, которая ещё и обладает априорным знанием о пайплайнах и датасетах.

Ближе к коду

Язык: Python. Библиотеки:

- joblib + multiprocessing
- torch + mabwiser + karateclub для контекстуального бандита на GNN

  перемещаемся на демонстрацию экрана с IDE

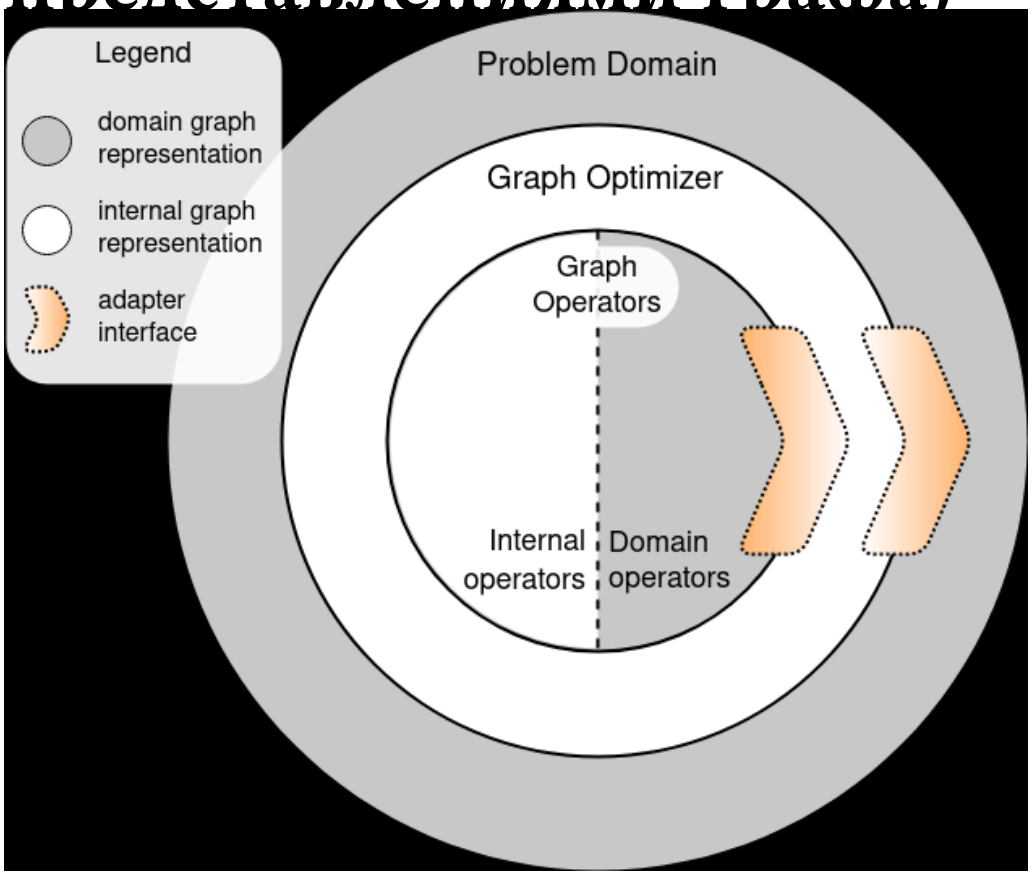
- Package core contains the main classes and scripts.
- Package core.adapter is responsible for transformation between domain graphs and internal graph representation used by optimisers.
- Package core.dag contains classes and algorithms for representation and processing of graphs.

- Package core.optimisers contains graph optimisers and all related classes (like those representing fitness, individuals, populations, etc.), including optimization history.
- Package core.optimisers.genetic contains genetic (also called evolutionary) graph optimiser and operators (mutation, selection, and so on).
- Package core.utilities contains utilities and data structures used by other modules.
- Package serializers contains class Serializer with required facilities, and is responsible for serialization of project classes (graphs, optimization history, and everything related).

- Package visualisation contains classes that allow to visualise optimization history, graphs, and certain plots useful for analysis.
- Package examples includes several use-cases where you can start to discover how the framework works.
- All unit and integration tests are contained in the test directory.

The sources of the documentation are in the docs directory.

Adapter Subsystem (преобразование между представлениями графа)



- Обычно предметная область имеет своё представление графа (например, из внешней либы): химия, BAMT, FEDOT
- Fitness, операторы
- `@register_native`, e.g. `GraphVerifier`
- Поставляется адаптер к NetworkX
- Сейчас используется внутреннее представление в

виде рукописного графа «на ссылках» в python

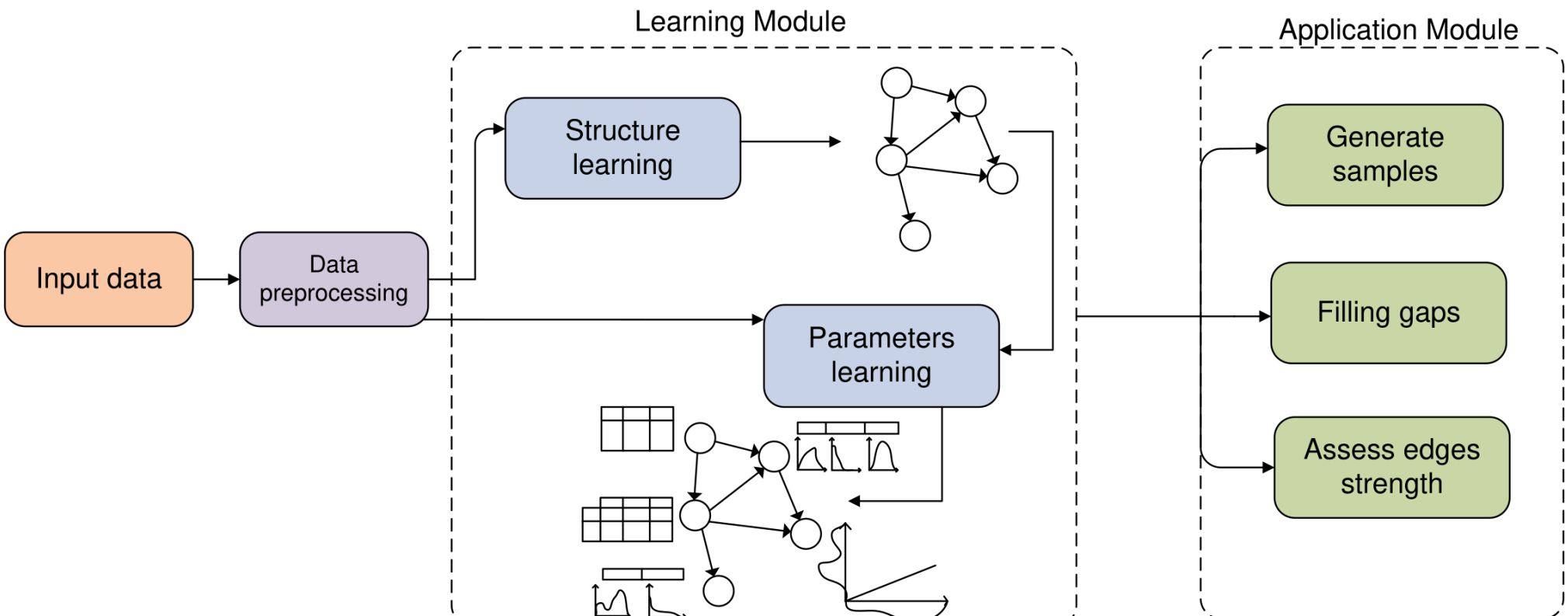
Сериализация

- Pickle (e.g. бандиты)
- json (в т.ч. pipleline-ы в FEDOT)

Issues

перемещаемся на демонстрацию экрана

Пример использования: BAMT



Есть вещественные и непрерывные переменные, от этого зависит процесс обучения. Описано в статье про BAMT: Advanced Approach for Distributions Parameters Learning in Bayesian Networks with Gaussian Mixture Models and Discriminative Models (2023)

Тюнятся в порядке topsort-а DAG-а, для зависимости от дискретной используется CPT, для зависимости непрерывных — линейные, гауссовы зависимости, Gaussian mixture regression.

Направления развития

Источники:

- Issues
- Разговоры с коллективом лаборатории
- Мои рассуждения
- Рекомендации из review к paper по GOLEM-у.

Expressive encodings

- Прямо как в жизни — в геноме кодируется распределение, не просто какой-то конкретный фенотип, а больше информации. Заодно — и, частично, то, как проходит эволюция. Например, генотип мужчины содержит информацию о том, каким бы он мог быть, если бы был женщиной — очень много избыточности, и в этом есть смысл.
- Приближает к положению дел в ML, где используют достаточно абстрактные модели вместо экспертного знания.

Определение выразительной кодировки

> Прообразы любого набора фенотипов, пропущенные через простой оператор, могут симулировать любое веростностное распределение с любой точностью, начиная с некоторого размера генома.

Definition 1 (Expressive Encoding). An encoding $E : X \to Y$ is *expressive* for a simple genetic operator g if, for any set of parent phenotypes $\{y_1, \ldots, y_{n_g}\} = Y_p \subset Y$, any probability density μ over Y, and any $\epsilon > 0$, there exists a set of parent genotypes $\{x_1, \ldots, x_{n_g}\} = X_p \subset X$ such that $E(x_i) = y_i \; \forall \; y_i \in Y_p$, and

$$\left| \Pr\left[E(g(X_p)) = y\right] - \mu(y) \right| < \epsilon \;\; \forall y \in Y. \tag{2}$$

Пример: miracle jump

Стартуем с кучи нулей, хотим знать, можно ли с неисчезающей вероятностью кроссовером получить

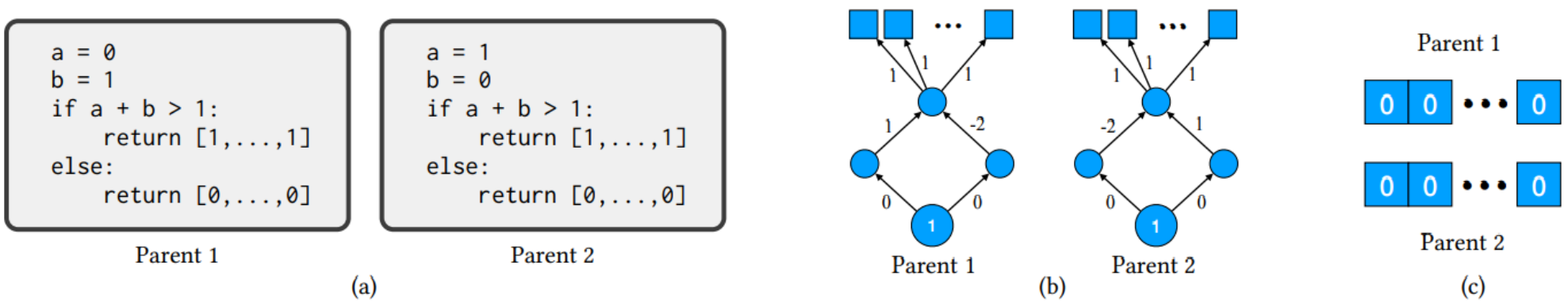


Figure 1: *Miracle Jump Parents.* (a) Two GP parents whose phenotypes are all 0's, but whose crossover has maximal jump (to a child of all 1's) with probability 0.25. They differ only in their values of a and b; the probability is independent of phenotype dimensionality. (b) Two NN parents with this same property; They differ only in the weights in the second layer. (c) Directly encoded parents cannot have this property: If both parents are all 0's, their crossover cannot yield all 1's. This minimal example illustrates how expressive encodings yield high-dimensional structured behavior that direct encodings cannot capture.

Примеры expressive encodings — теоремы про экспрессивность

Complexity — размер генома, требуемый для фиксированного уровня аппроксимации.

THEOREM 4.2. *Genetic programming is an expressive encoding for single-point mutation, with complexity* $O(\frac{mn}{\epsilon})$.

THEOREM 4.4. *Feed-forward neural networks with sigmoid activation are an expressive encoding for single-point mutation, with complexity* $O(\frac{mn}{\epsilon})$.

Definition 2 (E_Ω). Let Ω be any universal function approximator. Define E_Ω to be an encoding whose genotypes are of the form $\omega(\mathbf{a})$, where $\mathbf{a} \in \{0,1\}^L$, and $\omega \in \Omega$ is a function $\omega : \{0,1\}^L \to Y$.

THEOREM 4.5. *E_Ω is an expressive encoding for uniform crossover.*

Преимущества выразительных кодировок

Потом на разных примерах показывают более хорошую асмиптотику expressive encoding-ов по сравнению с direct; про скорость адаптации к меняющейся функции ошибки.

(см. статью)

Выразительные кодировки для графов

В нашем случае кодировкой может быть

- графивые грамматики
- клеточное кодирование
- GNN

с тривиальными мутациями/кроссоверами.

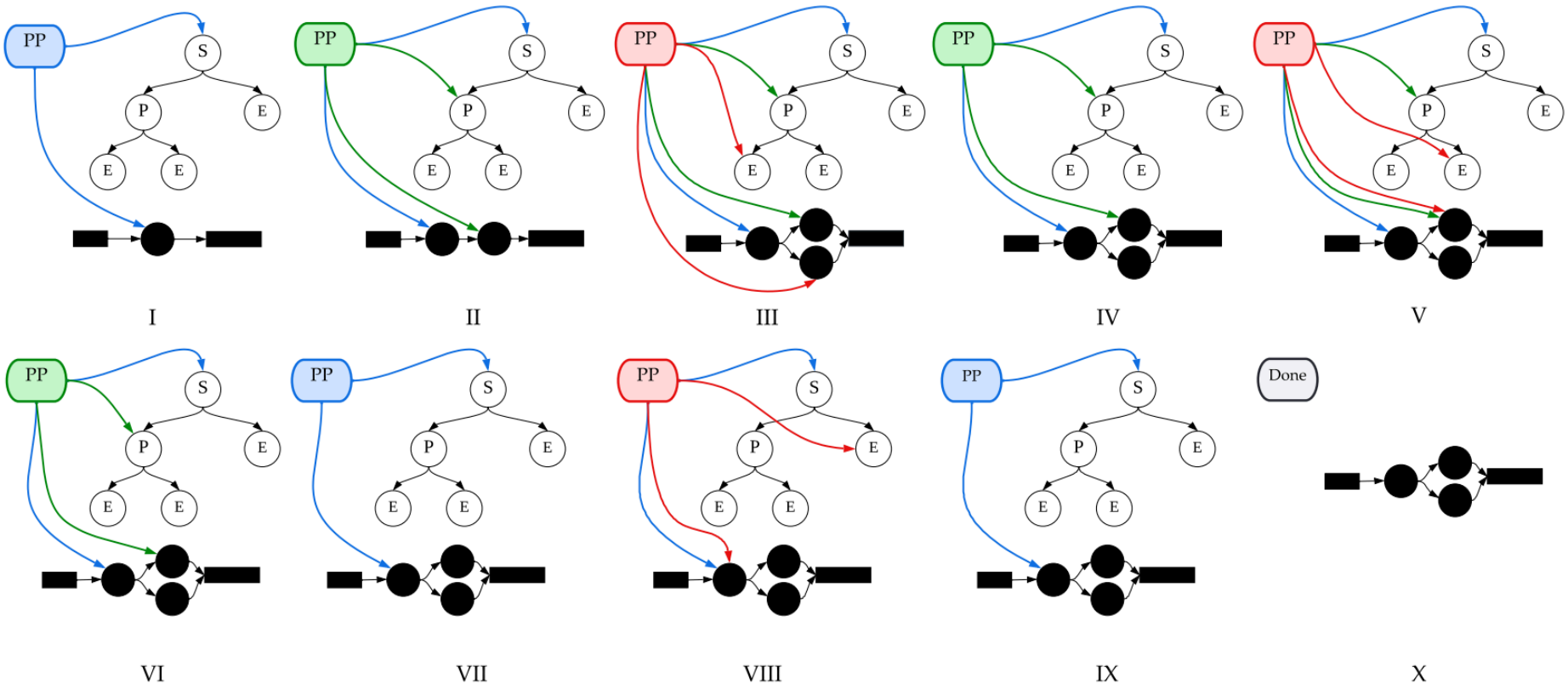


Fig. 3. Growing a neural network from an ancestor network. **PP**=Program Pointers, **S**=Sequential Split, **P**=Parallel Split, **E**=End Terminal.

NOTEARS

Theorem 1. *A matrix $W \in \mathbb{R}^{d\times d}$ is a DAG if and only if*

$$h(W) = \operatorname{tr}\left(e^{W\circ W}\right) - d = 0, \tag{7}$$

where $\circ$ is the Hadamard product and e^A is the matrix exponential of A. Moreover, $h(W)$ has a simple gradient

$$\nabla h(W) = \left(e^{W\circ W}\right)^T \circ 2W, \tag{8}$$

and satisfies all of the desiderata (a)-(d).

$\longrightarrow$ сводим к задаче непрерывной оптимизации; целевая функция и ограничения — дифференцируемы. Решаем с помощью метода расширенной Лагранжианы.

Ограничения:

- Целевая функция должна естественно (дифференцируемо, поменьше константа Липшица, легко вычислима) продолжаться на вещественные веса
- Как задать на пространстве, содержащем категориальные переменные?

Как может совмещаться с GOLEM-ом? Идея: оператор локального улучшения.

Метаэволюция

Пытаемся адаптировать гиперпараметры эволюции (частоту мутаций, размер популяции и т.д.). Похоже на предложение к GAMLET, но теперь эти параметры именно эволюционируют.

см. обзорную статью: Parameter Control in Evolutionary Algorithms: Trends and Challenges

Коэволюция

см. proposal.

Поддержка разнообразия

см. proposal.