

Projekt Eureka: programowanie genetyczne jako metoda odkrywania wiedzy

29/11/2019

Julian Zubek



Tło: moda na algorytmy ewolucyjne?

W ostatnich latach w uczeniu maszynowym dominują głębokie sieci neuronowe uczone metodami gradientowymi.

Algorytmy ewolucyjne (w tym genetyczne) umożliwiają inny sposób nauki modelu.

Chellapilla, K., Fogel, D. (2000). Anaconda defeats Hoyle 6-0: A case study competing an evolved checkers program against commercially available software.

Salimans, T., Ho, J., Chen, X., Sidor, S. & Sutskever, I. (2017). Evolution Strategies as a Scalable Alternative to Reinforcement Learning.

Such, FP, Madhavan, V, Conti, E, Lehman, J, Stanley, KO, Clune, J. (2018). Deep neuroevolution: genetic algorithms are a competitive alternative for training deep neural networks for reinforcement learning.

Wilson, D., Cussat-Blanc, S., Luga, H. and Miller, J. (2018). Evolving simple programs for playing Atari games.

Hipoteza: lepszy dostęp do klastrów obliczeniowych umożliwia wykorzystanie algorytmów ewolucyjnych w dużej skali.

Programowanie genetyczne

- Alan Turing, 1950 (teoria)
- John Holland, 1975 (teoria)
- Richard Forsyth, 1981 (aplikacja)
- Michael Cramer, 1985 (publikacja)
- Dirk Dickmanns, Jürgen Schmidhuber, Andreas Winklhofer, 1987 (publikacja)
- John Koza, 1988 (patent)



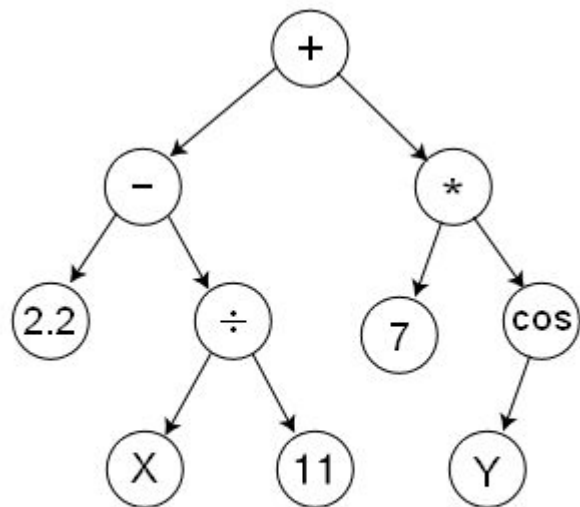
1. Zainicjuj **genotypy** populacji początkowej.
2. Dokonaj oceny **fenotypów** osobników (ewaluacja).
3. Wybierz najlepsze osobniki do reprodukcji (selekcja).
4. Wygeneruj nowe pokolenie stosując operatory krzyżowania (łącznie **genotypów** rodziców) oraz mutacji (losowe zmiany w **genotypie**).
5. Idź do 2.

Genotyp – struktura programu

Fenotyp – działanie programu (w konkretnych warunkach!)

Funkcja oceny – funkcja ewaluująca fenotyp

Reprezentacja programu (genotyp)



$$\left(2.2 - \left(\frac{X}{11} \right) \right) + \left(7 * \cos(Y) \right)$$

Regresja symboliczna -- programowanie genetyczne ograniczone do formuł matematycznych (reprezentowanych jako drzewa).

Krzyżowanie: wymiana losowych poddrzew pomiędzy rodzicami.

Mutacja: wprowadzanie i usuwanie węzłów, zmiana wartości, zmiana operacji.

Przykładowa **funkcja oceny:**

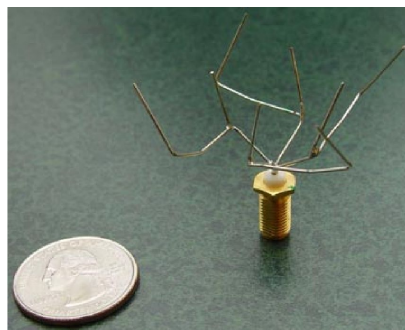
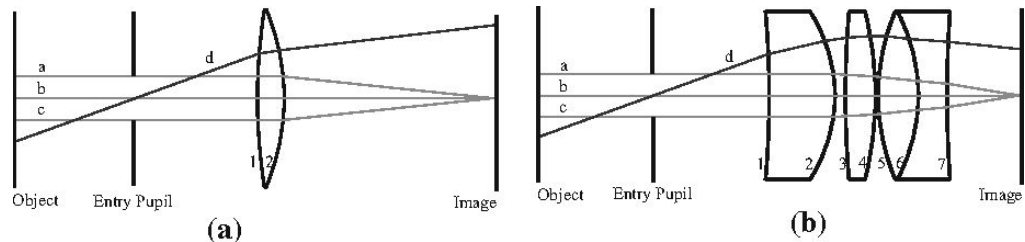
$$1/N \sum_i |f(x_i) - y_i|$$

gdzie $f(x_i)$ -- wartość wyewoluowanej funkcji w x_i , y_i -- zmierzona wartość w x_i

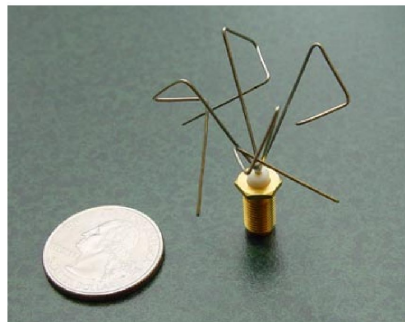
Sukcesy programowania genetycznego

Koza, J.R. (2010) Human-competitive results produced by genetic programming

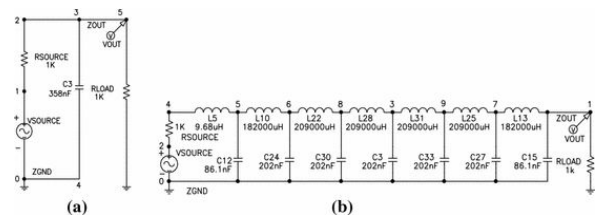
76 wyników aplikacyjnych konkurencyjnych względem rozwiązań zaprojektowanych przez człowieka



(a)



(b)

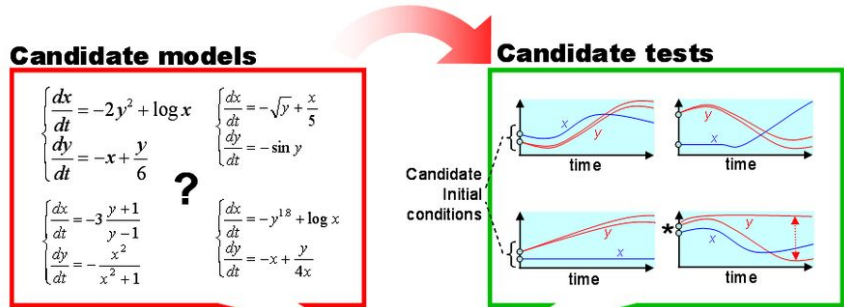


Wyzwania programowania genetycznego



1. Duże wymagania obliczeniowe/długi czas ewolucji
 - Zwłaszcza gdy ewaluacja wymaga symulacji lub interakcji programu ze środowiskiem.
2. Tendencja do nadmiernego dopasowania (niepraktyczne rozwiązania).
3. Mała przejrzystość znajdowanych rozwiązań.

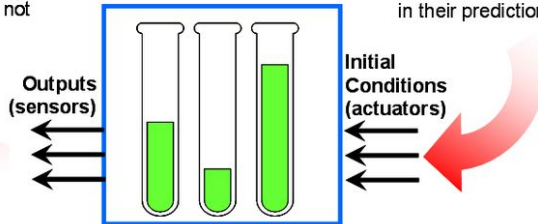
Automatyzacja wnioskowania naukowego?



b The inference process generates several *different* candidate symbolic models that match sensor data collected while performing previous tests. It does not know which model is correct.

Inference Process

c The inference process generates several possible new candidate tests that disambiguate competing models (make them disagree in their predictions).



a The inference process physically performs an experiment by setting initial conditions, perturbing the hidden system and recording time series of its behavior. Initially, this experiment is random; subsequently, it is the best test generated in step c.

Projekt Eureka

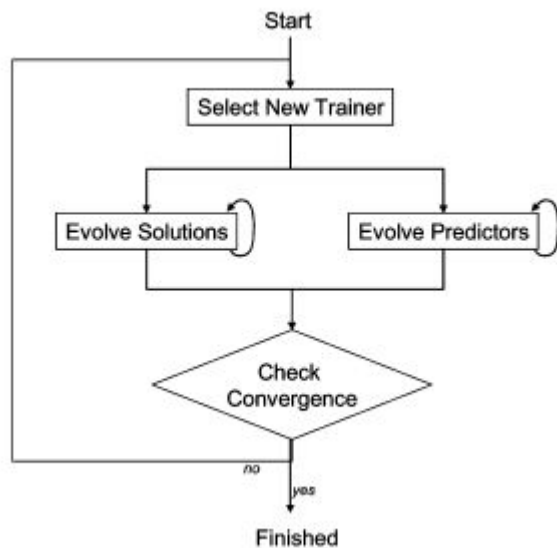
Josh Bongard
Michael Schmidt
Hod Lipson

Automatyzacja wnioskowania naukowego?



MD Schmidt, H Lipson (2009). Distilling Free-Form Natural Laws from Experimental Data

Koewolucja rozwiązań i funkcji oceny



Rozwiązanie (s , *solution*) nie jest oceniane w oparciu o cały zbiór danych, a jedynie wybrane punkty. Predyktor (p , *predictor*) to zbiór takich punktów.

$$s^* = \arg \max_s p_{\text{best}}(s)$$

Predyktory ewoluują równolegle w oparciu o osobną funkcję oceny opartą na trenerach. Trenerem (t , *trainer*) jest wybrane rozwiązanie.

$$p^* = \arg \min_p 1/N \sum_i |\text{fitness}(t_i) - p(t_i)|$$

Trenerzy to najbardziej ambiwalentne ze znalezionych rozwiązań:

$$t^* = \arg \max_s 1/N \sum_i (p_i(s) - p_{\text{avg}}(s))^2$$

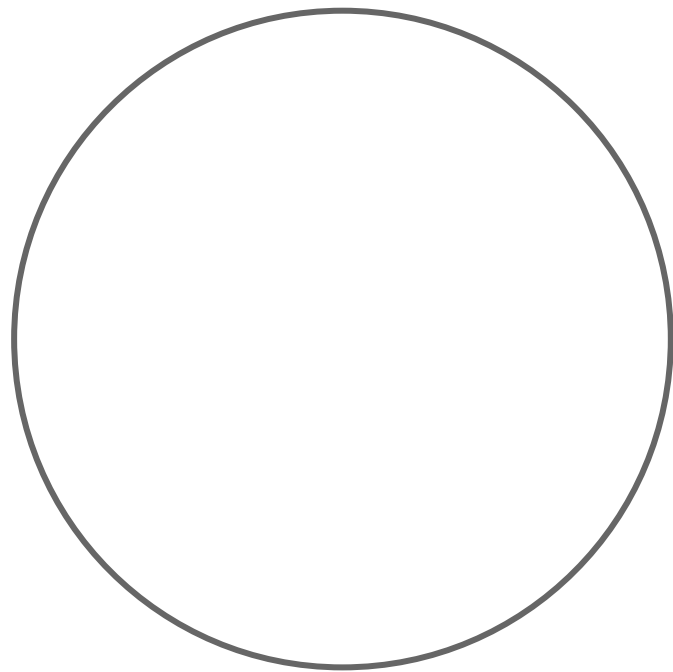
Koewolucja rozwiązań i funkcji oceny

Liczne zalety

- Funkcja oceny adaptuje się do problemów, z jakimi aktualnie boryka się populacja.
- Ewaluacja rozwiązania wymaga mniej obliczeń.
- Znajdowane rozwiązania są zwykle prostsze.
- Znacząco zredukowana tendencja do nadmiernego dopasowania.

Znajdowanie niezmienników

Niezmiennik w układzie fizycznym to często naturalny opis zjawiska (np. w układzie zamkniętym suma energii jest stała).



$$x^2 + y^2 - r^2 = 0$$

Znajdowanie niezmienników

Znajdowanie niezmienników to bardziej odkrywanie struktury (uczenie bez nadzoru) niż przewidywanie (uczenie pod nadzorem).

Jak powinna wyglądać funkcja oceny dla poszukiwania niezmienników?

Naiwna propozycja: $f(x, y) = 0$

Trywialne rozwiązania: $0, x-x, 1/(1000+x^2)$

Propozycja Lipsona i Schmidta: można oprzeć się na cząstkowych pochodnych par zmiennych.

Można obliczyć symbolicznie:

$$\frac{\delta f}{\delta y} := \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dy}, \quad \frac{\delta f}{\delta x} := \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx}; \quad \frac{\delta x}{\delta y} \Big|_{\text{pairing}} := \frac{\delta f}{\delta y} / \frac{\delta f}{\delta x}.$$

Można obliczyć numerycznie:

$$\frac{dx}{dy} := \frac{\dot{x}(t)}{\dot{y}(t)} = \frac{dx(t)/dt}{dy(t)/dt}.$$

Wzór funkcji oceny wykorzystuje obie wartości, ale nie podam go!

Kontrowersje

Hillar C, Sommer F. 2012. Comment on the article “Distilling free-form natural laws from experimental data”.

- Hillar i Sommer udowodnili, że funkcja oceny podana przez Lipsona i Schmidta jest płaska (trywialna)!
- Autorzy prawdopodobnie uzyskali wyniki przypadkiem przy minimalizacji wyrażenia (bez zrozumienia):

$$\frac{\partial f}{\partial y} / \frac{\partial f}{\partial x} \pm \frac{dx}{dt} / \frac{dy}{dt}$$

- Wyrażenie ze znakiem „+” osiąga zero dla przekształceń Hamiltonianu, wyrażenie ze znakiem „-” dla szczególnych przypadków Lagrangianu (prawa dynamiki są „zakodowane” w funkcji celu).
- Hillar i Sommer proponują poprawione funkcje celu dla Hamiltonianu i Lagrangianu.

Science odmówiło publikacji komentarza. Nie wiem nic o tym, żeby Lipson i Schmidt publicznie odnieśli się do zarzutów.

Eureqa

Komercyjne oprogramowania
o zamkniętym kodzie, darmowe do
użytku naukowego.

Stosowane głównie przez firmy do
problemów inżynierskich.

Istnieją publikacje naukowe oparte na
wynikach z Eureqi.

Yoshihara, K., Shahmoradgoli, M., Martínez, E. *et al.* Inferring tumour purity and stromal and immune cell admixture from expression data. *Nat Commun* **4**, 2612 (2013) doi:10.1038/ncomms3612

Kyle W. Willett et al. Galaxy Zoo 2: detailed morphological classifications for 304 122 galaxies from the Sloan Digital Sky Survey, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Volume 435, Issue 4, 11 November 2013, Pages 2835–2860, <https://doi.org/10.1093/mnras/stt1458>

Bruhns, H.; Wolff, M.; Saalberg, Y.; Spohr, K.M. Quantitative Evaluation of Broadband Photoacoustic Spectroscopy in the Infrared with an Optical Parametric Oscillator. *Sensors* 2018, **18**, 3971.

...