

**ІІТМО**  
**Библиотека оптимизации**  
**графовых структур**  
**GOLEM**

Ямщикова Любовь,  
yamlyubov@gmail.com

# Графы в различных областях

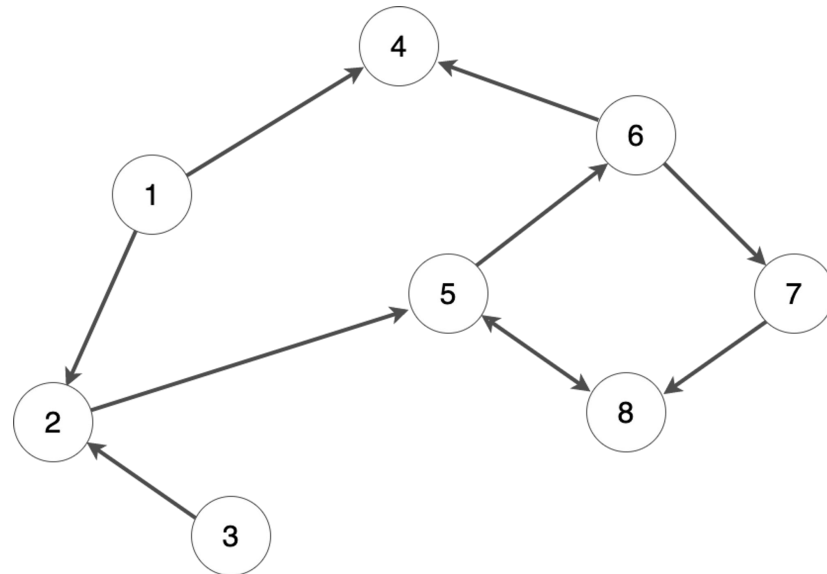
Задачи для графов:

- Оптимизируем топологию
- Оптимизируем свойства/атрибуты вершин и ребер
- И то, и другое
- Генерируем графы
- Проводим комбинаторную оптимизацию

В виде графа можно представить:

- Байесовские сети
- Пайплайны машинного обучения
- Нейронные сети
- Молекулы
- Дифференциальные уравнения
- Физические модели

и т.д.



# Применение GOLEM

**GOLEM** может быть применен к задачам:

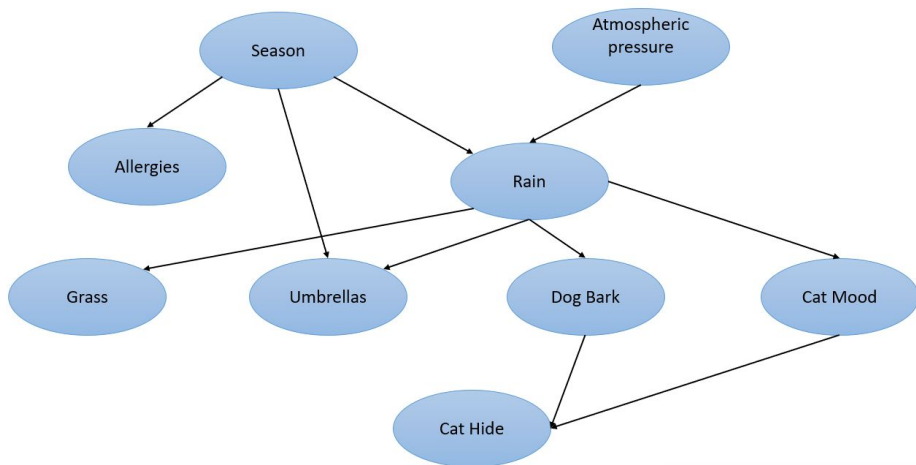
- представимым в виде **направленных графов**
- имеющим четко определенную **метрику качества**



# Графы в различных областях

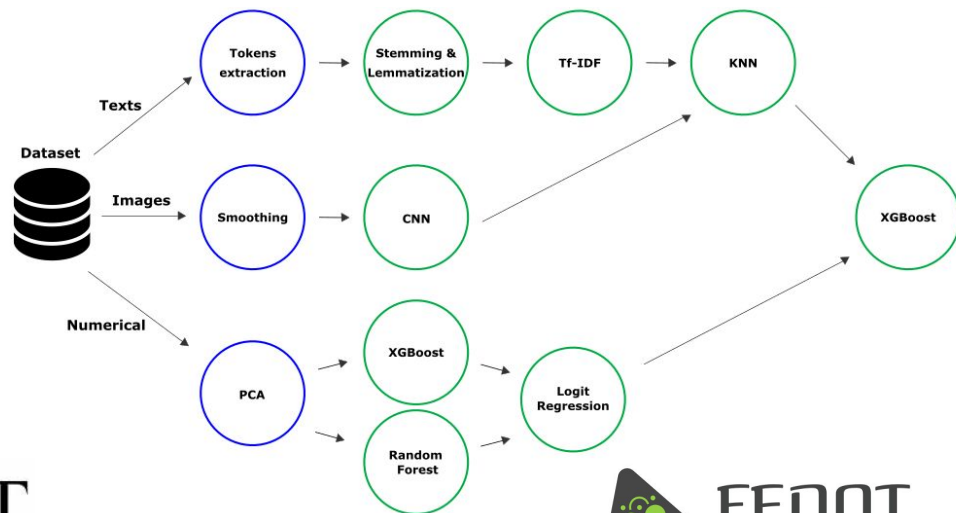
## Bayesian Networks

- нода ~ одна из переменных
- граф ~ байесовская сеть



## AutoML Pipelines

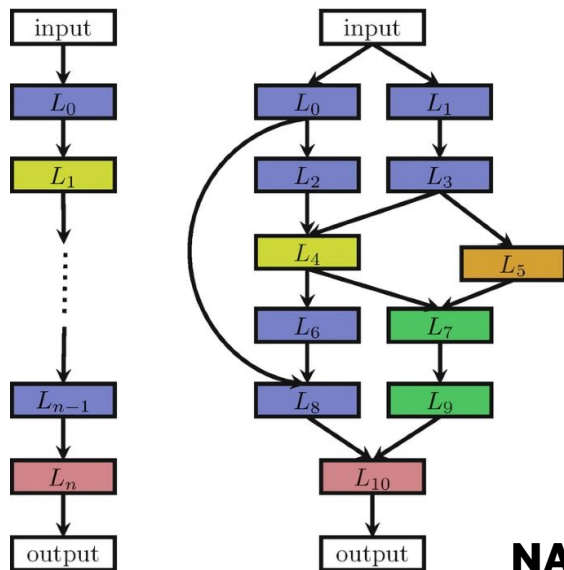
- нода ~ один из алгоритмов ML
- граф ~ сложный ансамбль



# Графы в различных областях

## Neural Architecture Search

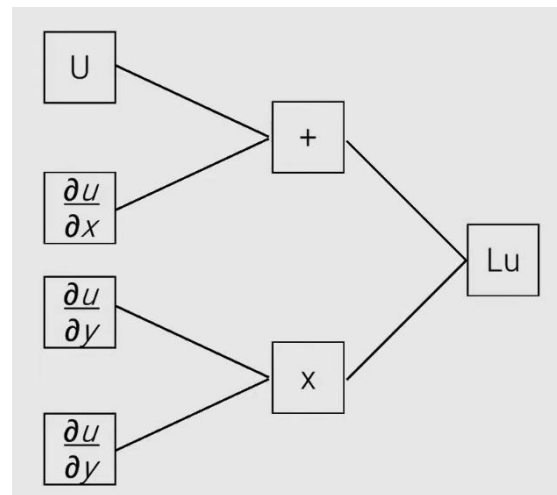
- нода ~ слой нейронной сети
- граф ~ вся нейронная сеть



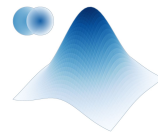
**NAS-FEDOT**

## Equation Discovery

- нода ~ мат. операция или дифф. оператор
- граф ~ дифф. уравнение



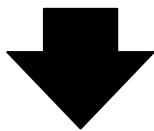
$\frac{EP}{\partial E}$



# GOLEM: Graph Optimization and Learning by Evolutionary Methods

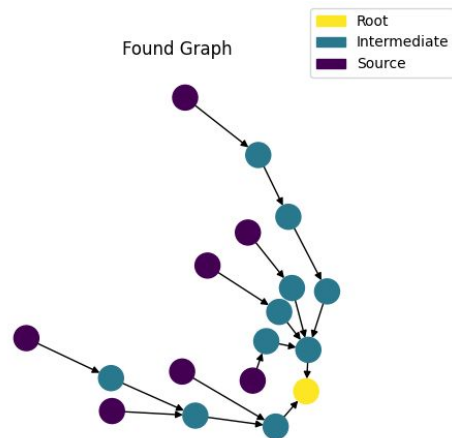
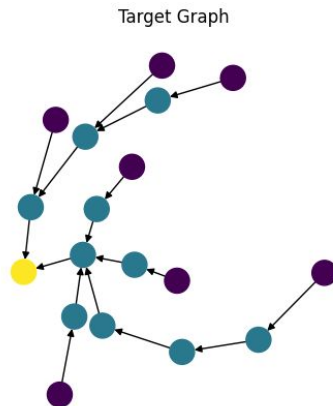
Методы из предметных областей:

- Специфичность
- Закрытость графовых представлений
- Закрытость алгоритмов



GOLEM:

- + Универсальность
- + Открытое и естественное графовое представление
- + Расширяемость



## Основные возможности **GOLEM**:

- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов)
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей

## Основные возможности **GOLEM**:

- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов)
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей



## Основные возможности **GOLEM**:

- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов).
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией.
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность.
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации.
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей.

## Основные возможности **GOLEM**:

- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов)
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей

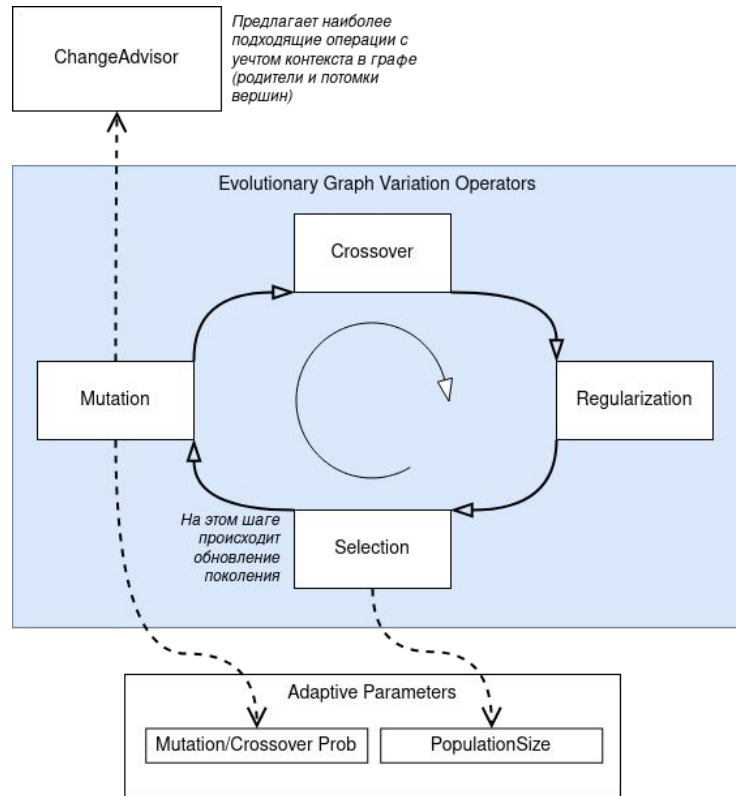
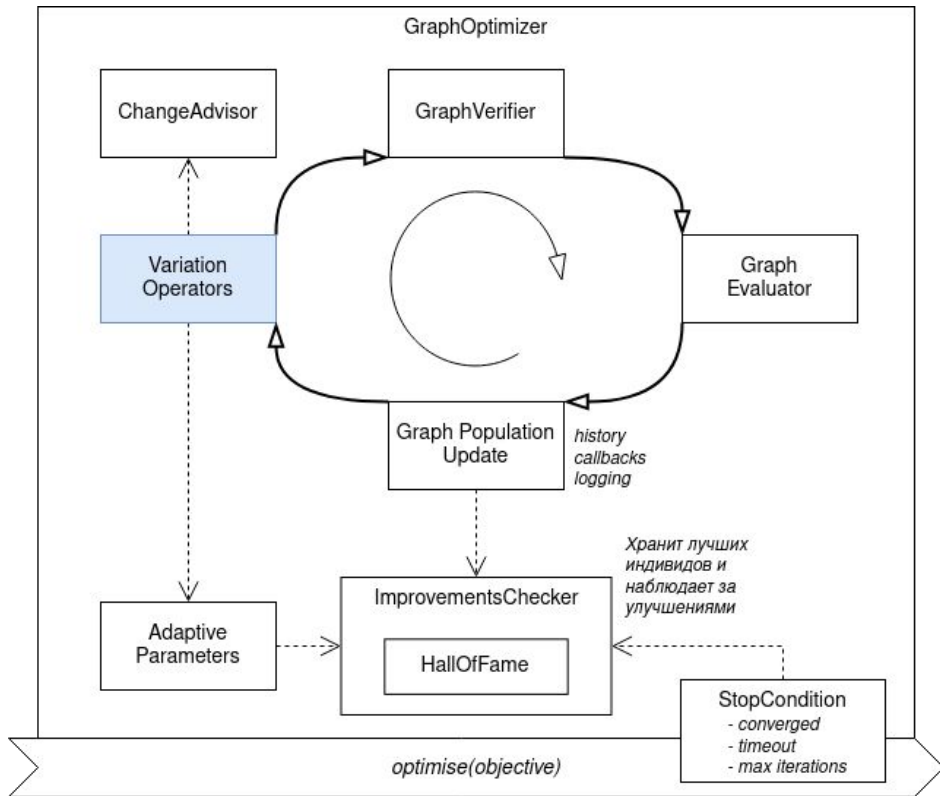
## Основные возможности **GOLEM**:

- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов)
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей

## Основные возможности **GOLEM**:

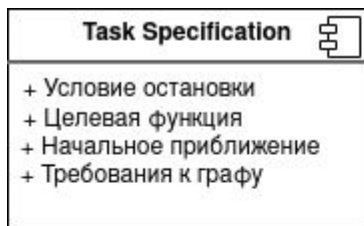
- **Оптимизация структуры графа и его свойств** (атрибутов узлов)
- **Метаэвристические методы** (в основном эволюционные), применимые к любой задаче с четко заданной целевой функцией
- **Многоцелевая оптимизация**, которая может учитывать как качество, так и сложность
- Оптимизация с поддержкой **произвольных ограничений**
- **Расширяемость** для новых предметных областей
- **Интерпретируемость** благодаря метаэвристике, структурированным моделям и инструментам визуализации
- **Воспроизводимость** благодаря подробной истории оптимизации и сериализации моделей

# Основные компоненты GOLEM: Оптимизатор

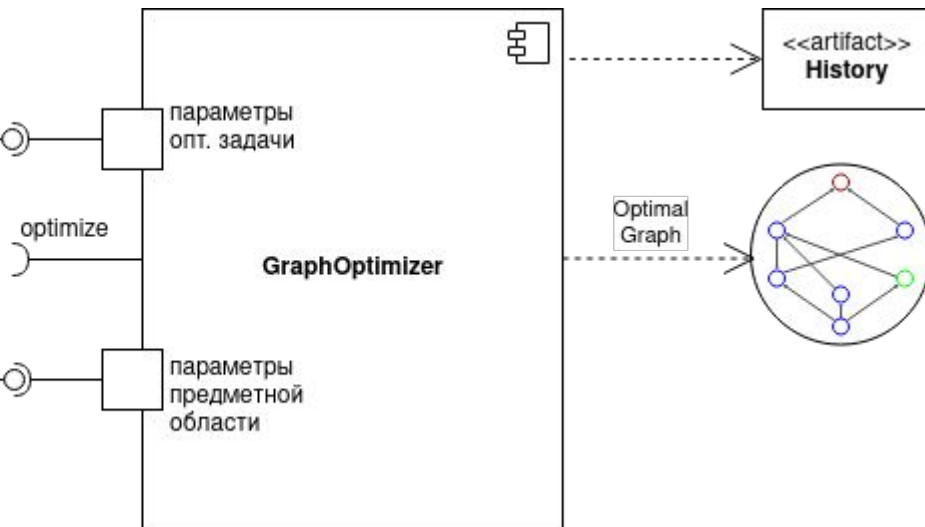


# Основные компоненты GOLEM: Настройка оптимизатора

Настройка задачи



Специализация предметной области и расширение



# Как настроить GOLEM для своей задачи?

Нужно определить:

1. Операции, из которых строится граф
2. Представление графа
3. Целевую функцию
4. Параметры оптимизации и требования к итоговым графам
  - а. размер поколения, вероятности мутации и т.д.
  - б. например, максимальная ширина и глубина графа
5. (Опционально) Специфичные правила верификации
6. (Опционально) Специфичные операторы для графов (например, особые мутации)



# Направления исследований и задач

- Исследование модификаций основного эволюционного оптимизатора
- Реализация других оптимизаторов (PSO, Ant Colony, Simulated Annealing etc.) и гибридных подходов
- Применение фреймворка к новым типам задач:
  - генерация графов (например, молекулярных)
  - конечных автоматов (например, для игровых ситуаций)
  - ...





**Спасибо  
за внимание!**

**ITMO** *re than a*  
**UNIVERSITY**

Ямщикова Любовь,  
yamlyubov@gmail.com