Representação Interação-Transformação para Regressão Simbólica

Prof. Fabricio Olivetti de França

Federal University of ABC
Center for Mathematics, Computation and Cognition (CMCC)
Heuristics, Analysis and Learning Laboratory (HAL)

12 de Julho de 2018

UFABC

CMCC
Centro de Matemática, Computação e Cognição
Center for Mathematics, Computation and Cognition

Topics

Introdução

Análise de Regressão

Análise de Regressão estuda a relação entre **variáveis dependentes** (y) e uma ou mais **variáveis independentes** ($\mathbf{x}$)

Função de Regressão

O objetivo é encontrar uma função $\hat{f}(\mathbf{x})$ tal que:

$$\begin{aligned} \underset{\hat{f}(\mathbf{x})}{\text{minimize}} \quad & \|\epsilon\|^2 \\ \text{subject to} \quad & \hat{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \epsilon. \end{aligned}$$

Função de Regressão

A maioria dos algoritmos usam uma forma fixa $\hat{f}(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ e ajustam apenas os parâmetros livres $\mathbf{w}$.

Regressão Linear

Assume uma relação na forma de combinação linear das variáveis:

$$\hat{f}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}.$$

Regressão Linear

- É fácil de entender o impacto da mudança de valor de uma variável: uma mudança no valor de x_1 altera a saída do sistema em w_1.
- Limitado a relações lineares.

Perceptron de Múltiplas Camadas

O Perceptron de múltiplas camadas, em sua forma com apenas uma camada escondida, ajusta a função:

$$\hat{f}(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w_2} \cdot g(\mathbf{w_1} \cdot \mathbf{x}).$$

sendo g uma *função de ativação*.

Perceptron de Múltiplas Camadas

- É um **aproximador universal**
- Apesar de ser uma forma fechada, é possível *evoluir* sua topologia podendo ser considerado um misto de forma fechada e livre.
- Qual o significado de $tanh(tanh(tanh(tanh(tanh(...?$

Regressão Simbólica

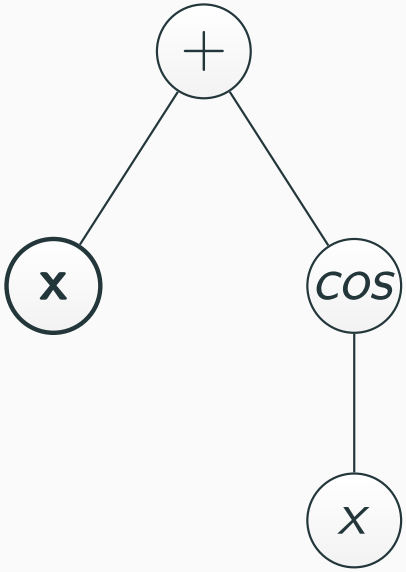
Regressão Simbólica busca pela forma da função e os valores ótimos dos parâmetros livres ao mesmo tempo que minimize o erro de aproximação.

Como objetivo secundário, busca também pela função mais simples possível.

Programação Genética

- Algoritmos Evolutivos: Genetic Programming, Gene Expression, etc.
- Exploram todo o espaço de busca de funções.
- Árvores de Expressão, representação linear, gramática, etc.

Programação Genética

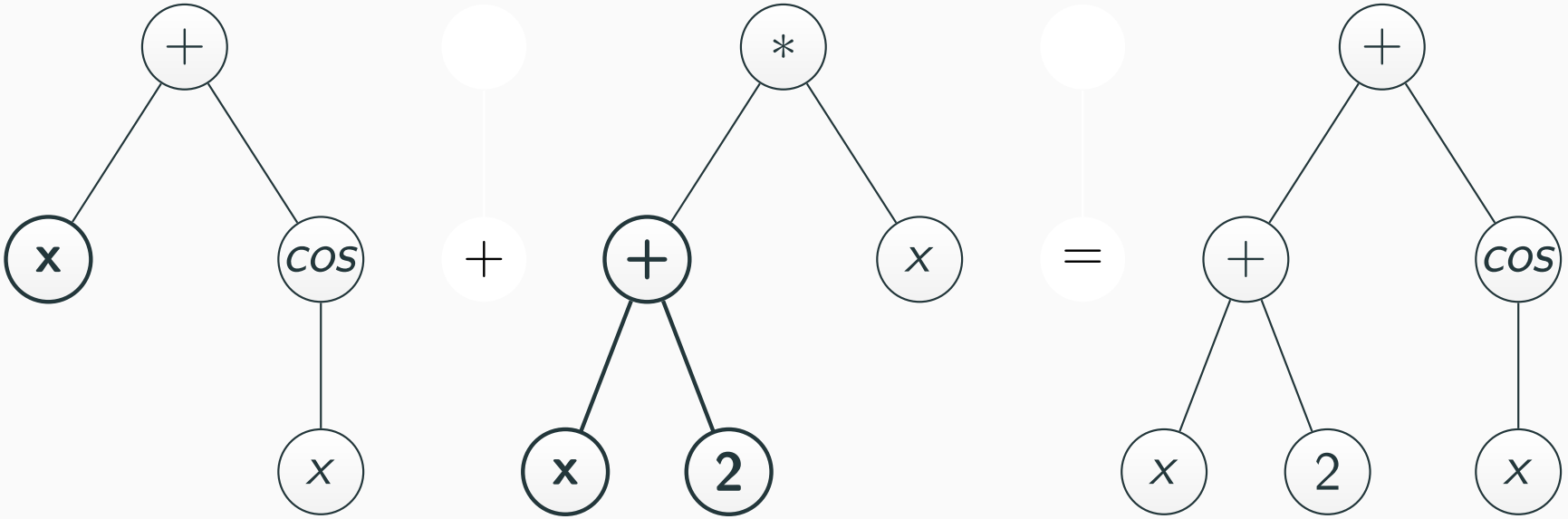


Programação Genética

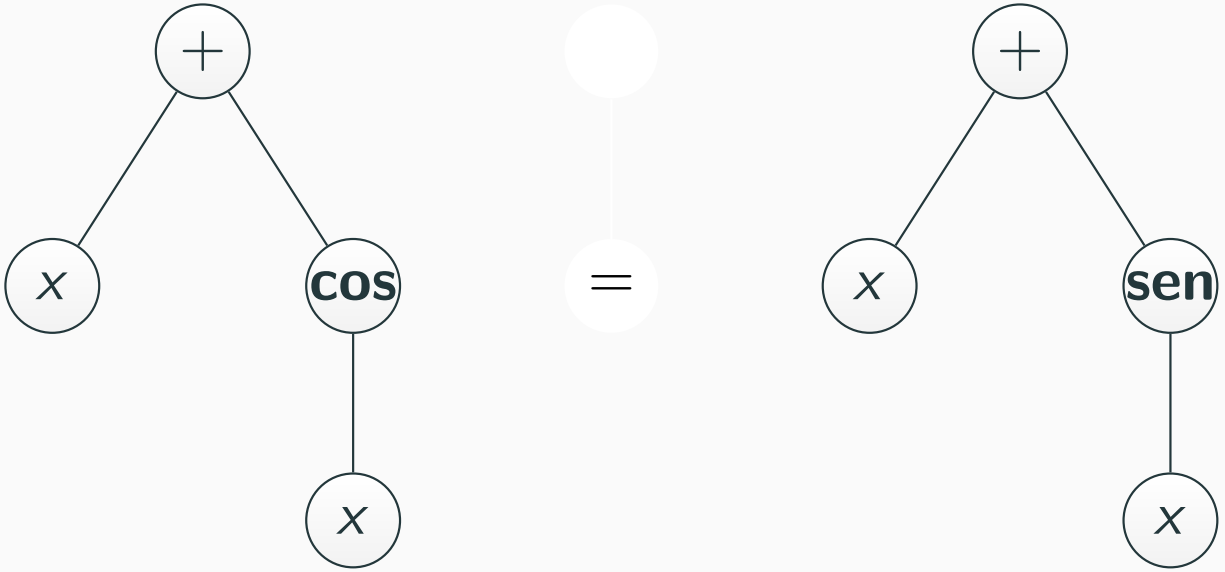
```
p = arvoresAleatorias()

PG p | convergiu p = p
     | otherwise   = do
                       p'  <- crossover(p)
                       p'' <- mutacao(p')
                       PG (selecao(p''))
```

Crossover



Mutação



Programação Genética

Problemas:

- Espaço de busca enorme e não suave.
- Uma pequena mudança na árvore de expressão (genótipo) pode levar a uma mudança enorme no comportamento da função de regressão (fenótipo).
- Muitos ótimos locais e globais (expressões equivalentes)

Regressão Simbólica

Exemplo:

$$f(x) = \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \frac{x^7}{5040}$$

$$f(x) = \frac{16x(\pi - x)}{5\pi^2 - 4x(\pi - x)}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sin(\mathbf{x}).$$

Programação Genética

Soluções:

- Introduzir uma medida de complexidade no objetivo (penalização ou multi-objetivo).
- Espaço de busca restrito.

Transformação-Interação

Transformação-Interação

Restringe a forma da função como uma **combinação linear** da aplicação de diferentes **funções de transformação** em **interações** das variáveis originais.

Transformação-Interação

Essencialmente esse padrão de função:

$$\hat{f}(x) = \sum_i w_i \cdot t_i(p_i(x))$$

$$p(x) = \prod_{i=1}^{d} x_i^{k_i}$$

$$t_i = \{id, \sin, \cos, \tan, \sqrt{}, \log, \ldots\}$$

Transformação-Interação

Descrito como um tipo de dado algébrico:

```
IT x          = 0
              | Weight * (Term x) + (IT x)

Term x        = Trans (Inter x)

Trans         = a -> a

Inter x:xs = 1
              | x^s * Inter xs
```

Essencialmente uma lista ligada de termos...

Transformação-Interação

Expressões válidas:

- $5.1 \cdot x_1 + 0.2 \cdot x_2$
- $3.5 \sin\left(x_1^2 \cdot x_2\right) + 5 \log\left(x_2^3 / x_1\right)$

Transformação-Interação

Expressões inválidas:

- $\tanh(\tanh(\tanh(w \cdot x)))$
- $\sin(x_1^2 + x_2)/x_3$

Transformação-Interação

A complexidade pode ser ainda mais controlada incluindo restrições de número máximo de termos e valor máximo dos expoentes das interações.

Pode ser generalizada para qualquer outra tarefa de Programação Genética (expressões booleanas, árvores de decisão, síntese de programas).

SymTree

Heurística simples para encontrar uma expressão IT:

```
symtree x leaves | stop      = best leaves
                 | otherwise = symtree x leaves'
  where
    leaves' = [expand leaf | leaf <- leaves]

symtree x [linearRegression x]
```

SymTree

```
expand leaf = expand' leaf terms
  where terms = interaction leaf U transformation leaf

expand' leaf terms = node : expand' leaf leftover
  where (node, leftover) = greedySearch leaf terms
```

SymTree - Passo a Passo

Supondo uma base de dados com 2 variáveis: $x = \{x_1, x_2\}$, iniciamos com uma Regressão Linear:

$$it = w_1 \cdot id(x_1^1 \cdot x_2^0) + w_2 \cdot id(x_1^0 \cdot x_2^1)$$

SymTree

Criamos novos termos através das interações positivas e negativas entre todos os pares de termos:

$$t_1 = id(x_1^1 \cdot x_2^1)$$
$$t_2 = id(x_1^1 \cdot x_2^{-1})$$
$$t_3 = id(x_1^{-1} \cdot x_2^1)$$

E criamos mais termos com a substituição da função de transformação de cada termo:

$$
\begin{aligned}
t_4 &= \sqrt{x_1^1 \cdot x_2^0} \\
t_5 &= \sin(x_1^1 \cdot x_2^0) \\
t_6 &= \sqrt{x_1^0 \cdot x_2^1} \\
t_7 &= \sin\left(x_1^0 \cdot x_2^1\right)
\end{aligned}
$$

Finalmente, aplicamos uma heurística para criar diversas expressões IT como a combinação dos novos termos:

$$it1 = w_1 \cdot id(x_1^1 \cdot x_2^0) + w_2 \cdot id(x_1^0 \cdot x_2^1) + w_3 \cdot \sqrt{x_1^0 \cdot x_2^1}$$

$$it2 = w_1 \cdot \sin(x_1^0 \cdot x_2^1) + w_2 \cdot \sqrt{x_1^1 \cdot x_2^0}$$

$$\ldots$$

SymTree

Em (de França, 2018)[1] esse algoritmo se mostrou melhor do que diversas abordagens na maioria das bases de *benchmark*.

[1] de Franca, Fabricio Olivetti. "A Greedy Search Tree Heuristic for Symbolic Regression." Information Sciences (2018).

Resultados

Function	expressible
$F_1 = x^3 + x^2 + 5 * x$	Y
$F_2 = x^4 + x^3 + x^2 + x$	Y
$F_3 = x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x$	Y
$F_4 = x^6 + x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x$	Y
$F_5 = sin(x^2)cos(x) - 1$	N
$F_6 = sin(x) + sin(x + x^2)$	N
$F_7 = log(x + 1) + log(x^2 + 1)$	Y
$F_8 = 5 * \sqrt{\|x\|}$	Y

Resultados

Function	expressible
$F_9 = sin(x) + sin(y^2)$	Y
$F_{10} = 6sin(x)cos(y)$	N
$F_{11} = 2 - 2.1cos(9.8x)sin(1.3w)$	N
$F_{12} = \frac{e^{-(x-1)^2}}{1.2+(y-2.5)^2}$	N
$F_{13} = \frac{10}{5+\sum_{i=1..5}(x_i-3)^2}$	N
$F_{14} = x_1x_2x_3x_4x_5$	Y
$F_{15} = \frac{x^6}{x^3+x^2+1}$	N
$F_{16} = \frac{x}{1-\log(x^2+x+1)}$	N
$F_{17} = 100 + \log(x^2) + 5\sqrt{(}\|x\|)$	Y

Resultados

Algoritmos para comparação:

- Regressão Linear (LR)
- Regressão Polinomial (PF)
- Gradient Tree Boosting (GB)
- *neat*-GP
- Evolutionary Feature Synthesis

Resultados

algorithm	LR	PF	GB	*neat*-GP	EFS	SymTree
F1	17.48	0.00	0.49	108.91	6.43	*0.00*
F2	131.99	0.00	1.83	284.70	6.62	*0.00*
F3	483.36	0.00	8.52	1025.46	32.50	*0.00*
F4	2823.94	247.72	58.39	813.25	47.55	**0.00**
F5	0.32	0.30	0.03	0.65	0.25	0.23
F6	0.79	0.60	0.07	1.95	0.57	0.58
F7	0.02	0.00	0.00	0.58	0.01	*0.00*
F8	2.22	0.56	0.03	0.95	0.14	**0.00**
F9	0.78	0.58	0.18	4.45	0.24	**0.00**

Resultados

algorithm	LR	PF	GB	*neat*-GP	EFS	SymTree
F10	2.26	2.05	0.95	8.74	1.88	**0.72**
F11	0.81	0.83	0.86	2.91	0.85	0.82
F12	0.06	0.06	0.01	2.00	0.04	0.06
F13	0.06	0.04	0.03	1.41	0.05	*0.03*
F14	61.26	0.00	71.87	3.62	90.50	*0.00*
F15	22.41	8.63	7.00	188.11	12.57	*8.88*
F16	5.21	5.82	5.50	6.26	6.71	*6.31*
F17	3.88	1.34	0.11	3.78	0.26	**0.00**

Lab Assistant

Lab Assistant

Objetivo: prova de conceito do algoritmo SymTree como uma ferramenta prática de análise de regressão.

Ferramenta web *client-side* desenvolvida com HTML + JavaScript.

SymTree no seu Browser! Alimente com dados, receba uma expressão matemática em troca!

https://galdeia.github.io/

Lab Assistant

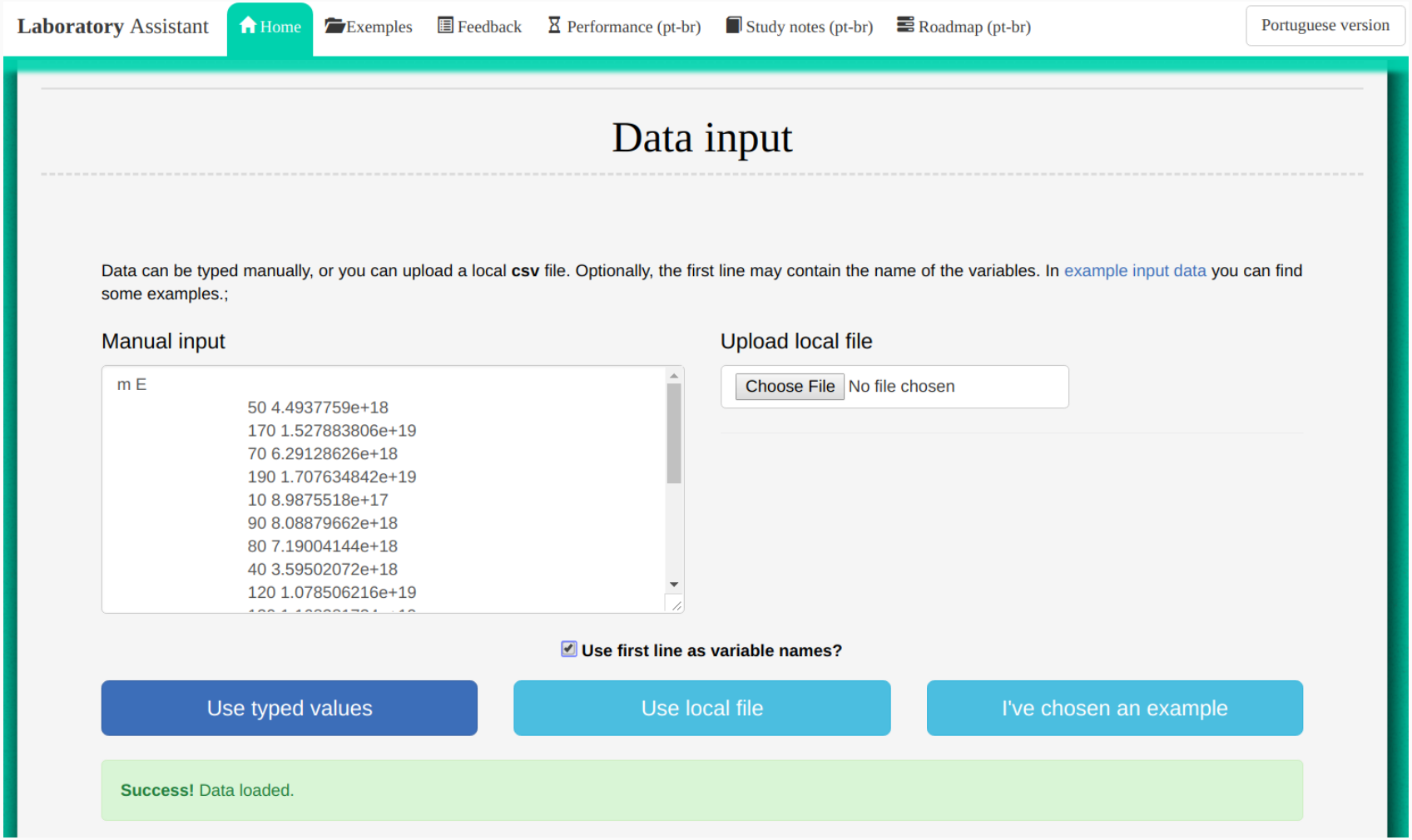


Figura 1: Main Interface

Lab Assistant

Vertical pressure variation:

$\Delta P = \rho \cdot g_{(m/s)} \cdot \Delta h$

ρ	Δh	ΔP
95	40	37266.6
40	35	13729.8
90	50	44131.5
85	15	12503.925
30	85	25007.85
15	65	9561.825
60	25	14710.5
55	60	32363.1
0	45	0.0
20	80	15691.2
5	75	3677.625
80	55	43150.8
65	30	19123.65
10	10	980.7
25	90	22065.75
50	20	9807.0
45	70	30892.05
70	95	65216.55

Mass-energy equivalence:

$E = m \cdot c^2$

m	E
50	4.4937759e+18
170	1.527883806e+19
70	6.29128626e+18
190	1.707634842e+19
10	8.9875518e+17
90	8.08879662e+18
80	7.19004144e+18
40	3.59502072e+18
120	1.078506216e+19
130	1.168381734e+19
180	1.617759324e+19
110	9.88630698e+18
30	2.69626554e+18
160	1.438008288e+19
20	1.79751036e+18
140	1.258257252e+19
150	1.34813277e+19
100	8.9875518e+18

Moment of inertia in a rectangle:

$I_x = (1/12) \cdot b \cdot h^3$

b	h	I_x
90	30	202500.0
10	75	351562.5
170	85	8700104.16667
150	10	12500.0
70	25	91145.8333333
60	80	2560000.0
120	95	8573750.0
40	65	915416.666667
30	15	8437.5
50	45	379687.5
20	40	106666.666667
180	90	10935000.0
100	70	2858333.33333
160	55	2218333.33333
80	60	1440000.0
110	50	1145833.33333
190	35	678854.166667
140	20	93333.3333333

Figura 2: Main Interface

Lab Assistant

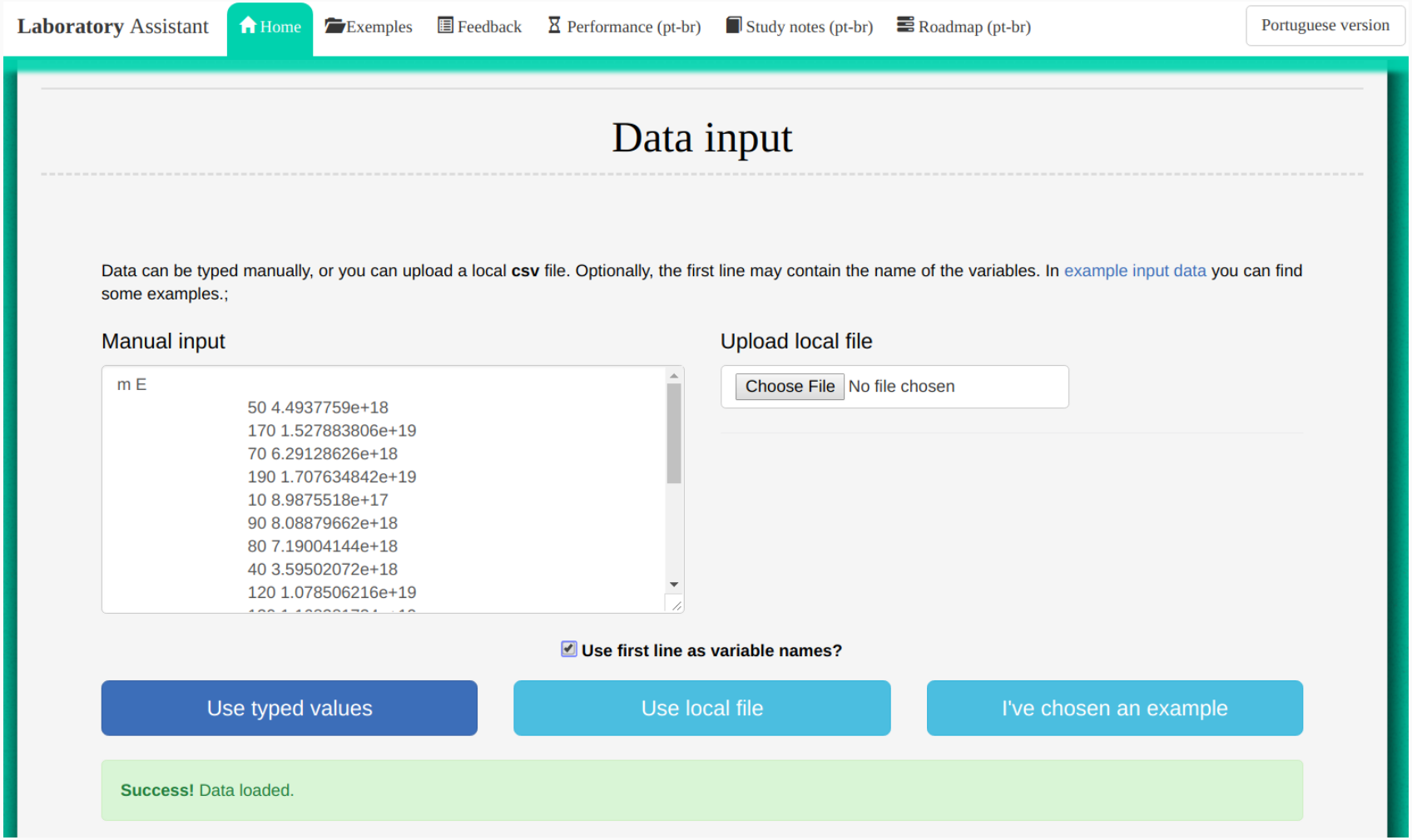


Figura 3: Main Interface

Lab Assistant

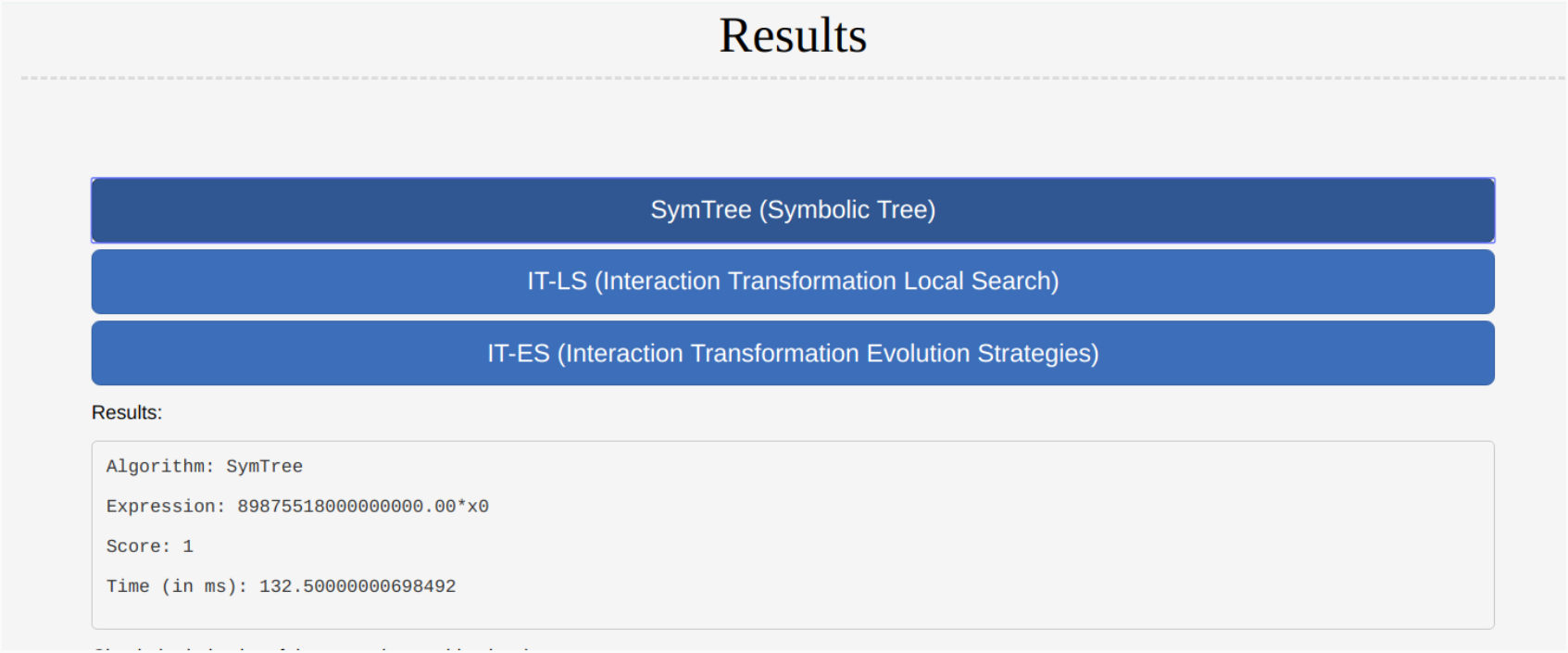


Figura 4: Main Interface

Lab Assistant

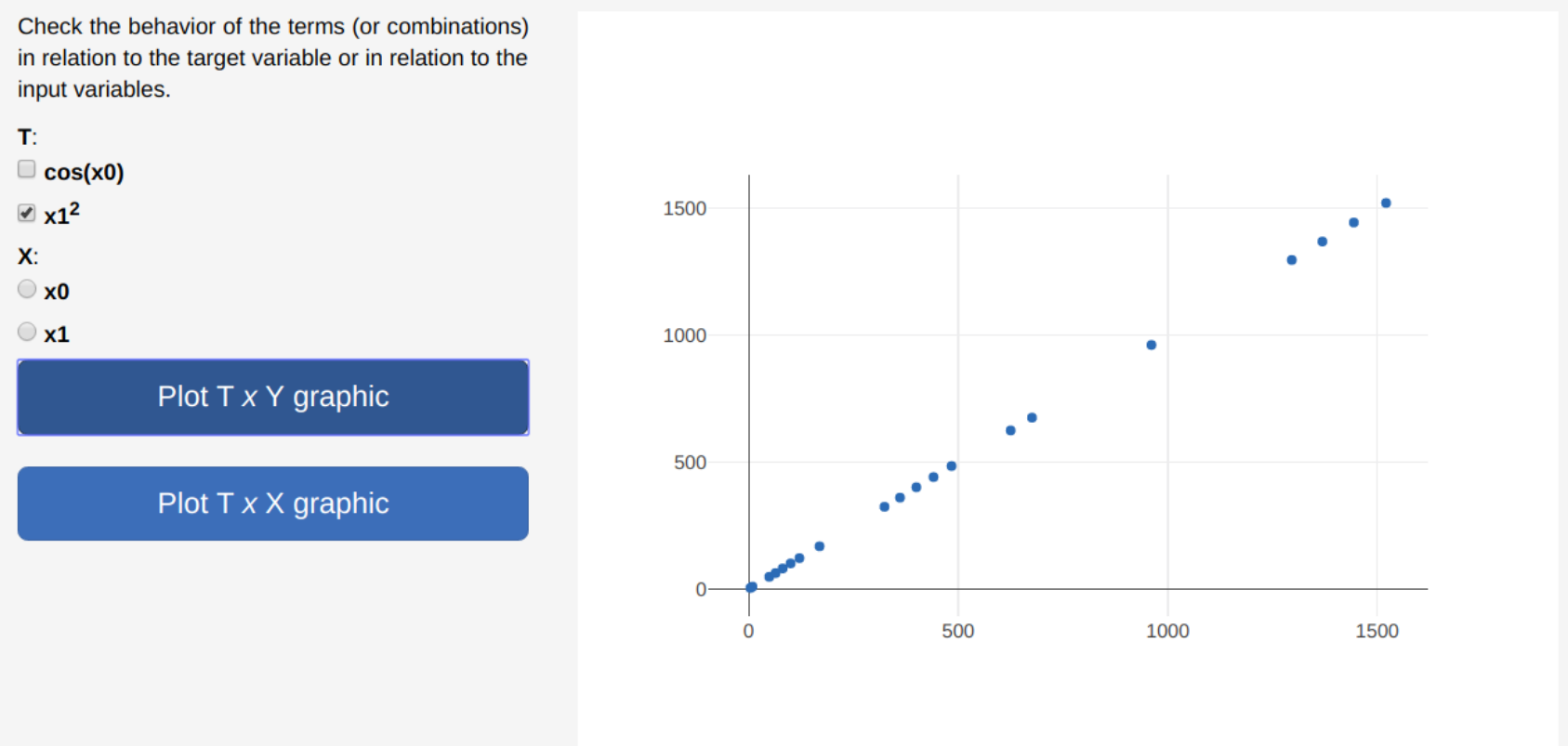


Figura 5: Main Interface

Lab Assistant

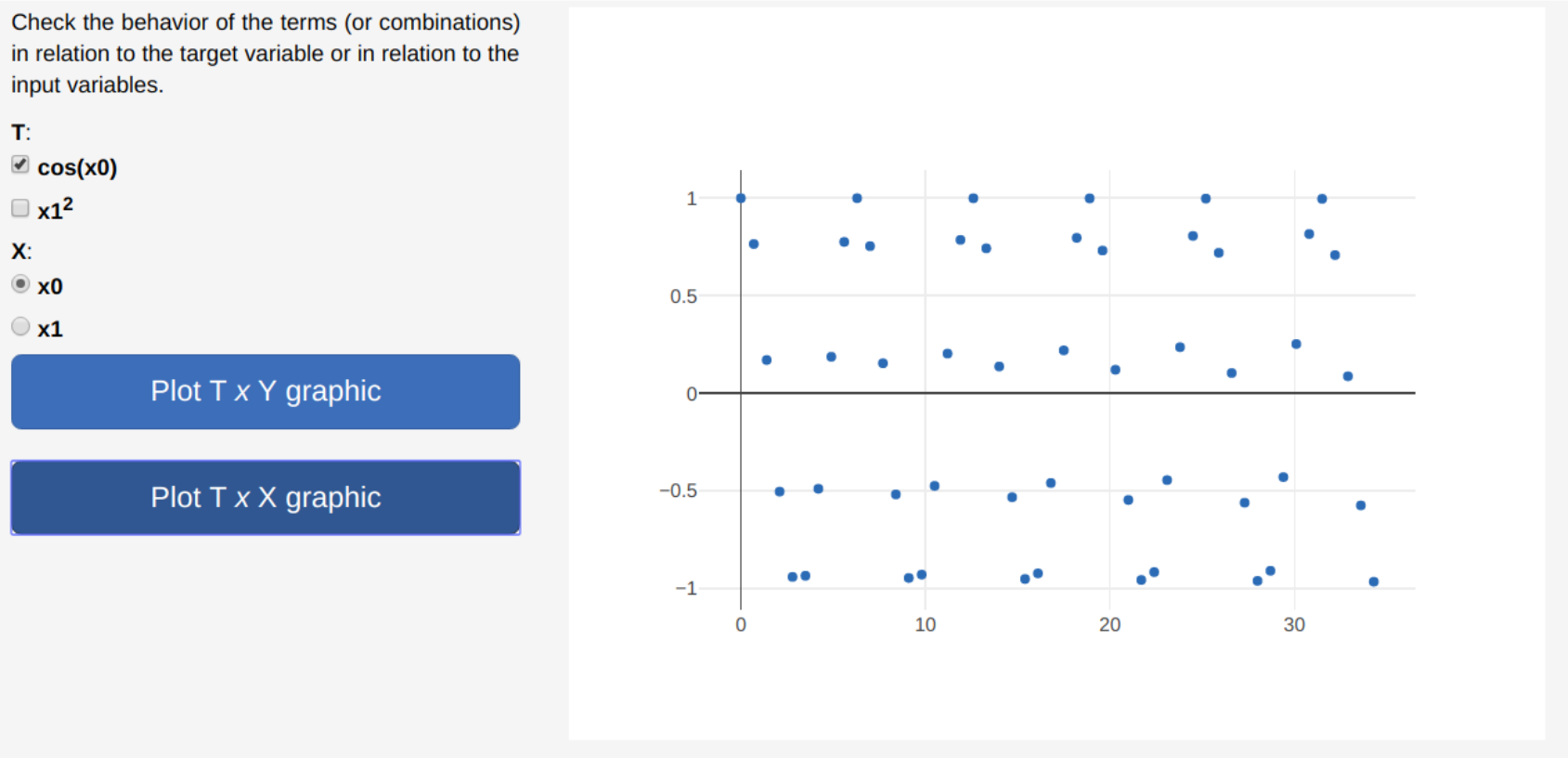


Figura 6: Main Interface

IT-LS and IT-ES

Além do algoritmo SymTree, o LabAssistant também possui implementação de uma busca local (IT-LS) e uma Estratégia Evolutiva (IT-ES) para gerar expressões IT, porém essas ainda estão em fase de ajuste.

Compared to Eureqa

Lab Assistant	Eureqa
Interpreted	Compiled
Compatible Browsers	GUI (Windows, Linux, OSX)
Small data	Large data
No pre-processing	Pre-processing, function set, parameters
Single-core	Multicore and Cloud Computing
2 different plots	9 different plots
Free	Commercial use only

Experimentos

Método

- 20 equações diferentes da Física e da Engenharia
  - 14 delas podem ser representadas na forma de uma expressão IT
- 30 execuções de cada algoritmo
- Comparação com o Eureqa
- Score $= \frac{1}{1+MAE}$

Eureqa

- Sem nenhum pré-processamento (assim como o Lab Assistant)
- Com um tempo de execução total de 3 minutos (mais do que o necessário pelo Lab Assistant)

Results

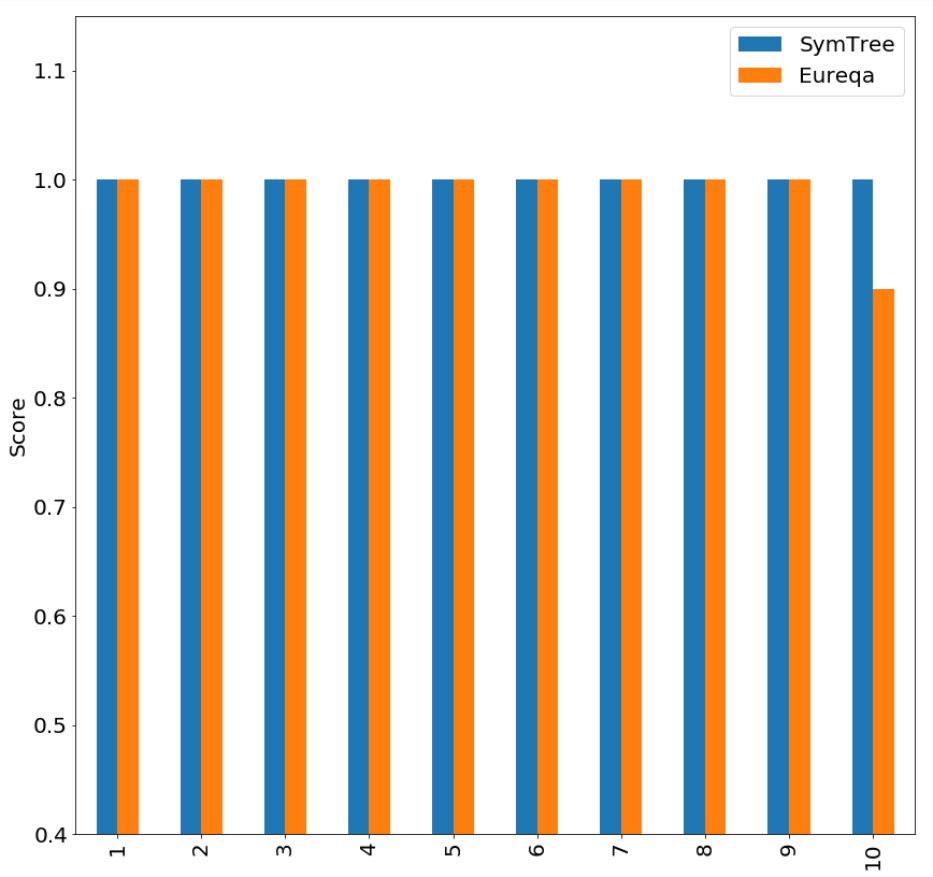


Figura 7: Score for the first 10 functions

Results

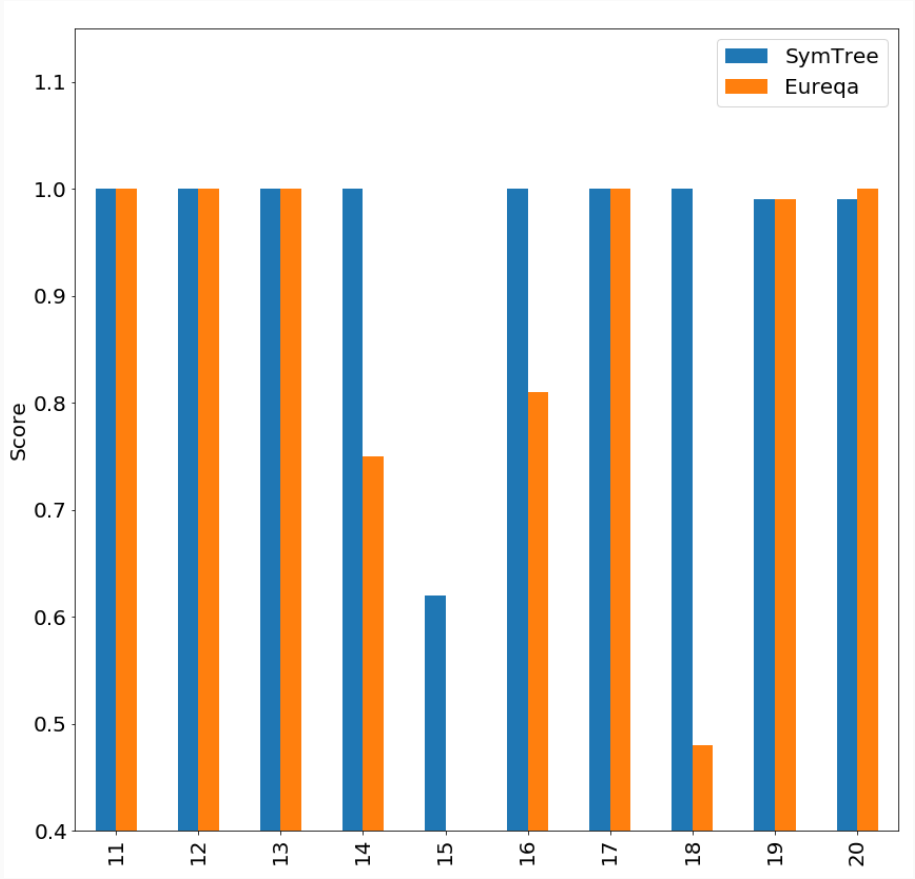


Figura 8: Score for the next 10 functions

Conclusão

Resumo

A representação Interação-Transformação permite definir um espaço de busca de expressões matemáticas simples mas capaz de aproximar diversas bases de dados, sendo competitivo com algoritmos do estado-da-arte de regressão.

Além disso, o algoritmo SymTree é capaz de encontrar uma boa expressão IT com poucas iterações, sendo um algoritmo simples e computacionalmente leve.

Para onde ir?

Muitas possibilidades de estudos futuros:

- Generalizar a representação como uma tipo de dado algébrico
- Utilizar essa representação em outros contextos
- Aumentar o espaço de busca permitindo outras expressões simples ainda não compreendidas
- Criar novos algoritmos de busca para esse espaço de busca
- Muitos outros...

O que estudar?

- Paradigma Funcional de programação
- Haskell
- Teoria das Categorias e dos Tipos
- Análise de Conceitos Formais

Try it!

Você pode testar o algoritmo através do site:

https://galdeia.github.io/

Funciona até mesmo em Smartpones e Tablets!