Symbolic Regression

Matheus Cândido Teixeira*

Departamento de Ciências da Computação - UFMG

12 de setembro de 2020

1 Introdução

A regressão simbólica (RS) é utilizada para resolver o problema de *curve fitting*. Para isso, um conjunto de amostras é fornecido, e o resultado é uma função que possui o menor erro entre os pontos amostrados e o valor dela nesses pontos.

Há diversos métodos de aplicar a regressão simbólica [Jin et al., 2019]. Uma delas é utilizando programação genética (GP, do inglês *Genetic Programming*) [Poli et al., 2008]. A GP é semelhante ao Algoritmo Genético (GA, do inglês *Genetic Algorithm*) no que tange os operadores genéticos, pois ambos definem operadores de inicialização, seleção, cruzamento, mutação e *fitness*.

Na literatura, há diversas possíveis implementações dos operadores de GP. Por exemplo, na fase de geração de indivíduos, que podem ser gerados utilizando o método *full* ou *grow*. No primeiro método, o indivíduo é complemente gerado, isto é, todos os seus nós são preenchidos, enquanto que no último, não há essa necessidade. Na prática, é comum haver a combinação dos dois métodos, denominado *ramped half-and-half* [Poli et al., 2008], onde parte da população é gerada usando um dos método e o restante utilizando o outro. A seguir é apresentado as alternativas comuns para o desenvolvimento de cada operador.

Os operadores de seleção são os mesmos dos utilizados em GA: *roulette whell* e *k-tournament*. O primeiro seleciona o indivíduo com probabilidade proporcional a *fitness* do indivíduo, ou seja, se a fitness de um indivíduo for f_k em uma população com N indivíduos, a probabilidade dele ser selecionado é igual a $p(k) = f_k / \sum_{i=0}^{N} f_i$. O outro método é o *k-tournament*, que amostra k indivíduos aleatóriamente e seleciona o indivíduo com maior *fitness* nesse grupo. A diferença entre esses algoritmos está na pressão seletiva imposta aos indivíduos. Porém Poli et al. [2008] informa que o método *k-Tournament* é o mais comum.

O operador de cruzamento (ou *crossover*) mais comum é denominado troca de sub-árvore. Esse operador funciona da seguinte maneira: dois indivíduos (I_1 e I_2, respectivamente) são selecionados da população utilizando o operador de seleção, após isso, para cada indivíduo, é escolhido um ponto aleatório (p_1 e p_2) e um novo indivíduo é gerado pela junção da árvore I_1 sem a sub-árvore com raíz no ponto p_1 com a sub-árvore extraida do I_2 com raíz em p_2.

No caso do operador de mutação há diversas alternativas, entre elas estam a mutação de um ponto e mutação de sub-árvore. O primeiro método, percorre todo o indivíduo muda o gene com uma probabilidade p_{op}. O segundo método, seleciona um ponto aleatório na árvore e, a partir desse ponto, uma sub-árvore é gerada aleatóriamente. Note que no primeiro método há duas probabilidades envolvidas: (1) a probabilidade de ocorrer mutação (p_m) e (2) a probabilidade de haver mutação em cada nó (p_{op}), caso o indivíduo tenha sido selecionado para mutação.

O último operador é o cálculo da *fitness*. Como a regressão simbólica busca minimizar o erro entre função gerada é os pontos amostrais, é comum utilizar o erro (a diferença entre o ponto e o resultado da função nesse ponto) como a forma de mensurar a adequação do indivíduo. Portanto, a *fitness* pode ser calculada como a somatória do erro absoluto (MAE), somatória do quadrado do erro (MSE) ou raíz quadrada da somatória do quadrado do erro (RMSE) entre a função gerado e

*matheuscandido2009@gmail.com

os pontos amostrais fornecidos, onde as equações são fornecidas a seguir:

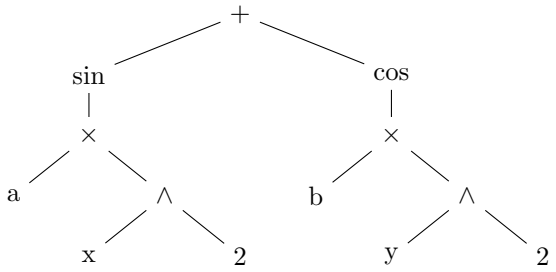
$$\text{MAE} = \sum_{i}^{N} |y - \hat{y}|$$

$$\text{MSE} = \sum_{i}^{N} (y - \hat{y})^2$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\sum_{i}^{N} (y - \hat{y})^2} = \sqrt{\text{MSE}}$$

Outro aspecto importanto em GP é a representação dos indivíduos, que podem ser representados linearmente ou em árvore. Ambas as representações possuem vantagens, porém é mais comum a implementação em árvore. Juntamente com a representação é importante definir os conjuntos de valores que eles podem assumir. A escolha do conjunto de funções e operadores devem atender a três restrições: Suficiência, Parcimônia e Fechamento [1].

Por exemplo, para uma árvore com um conjunto de funções F: $\{\sin(\cdot), \cos(\cdot)\}$, com um conjunto de operadores $S : \{\times, +, -, \div\}$, uma possível árvore, cuja expressão é $\sin(ax^2) + \cos(by^2)$, onde a e b são constantes numéricas e x e y são variáveis independentes, é:



Neste trabalho, o GP é utilizado para resolver o problema da RS. Os detalhes e parâmetros da implementação são apresentados nas próximas seções. Para mensurar a eficiência, o algoritmo é aplicado a 2 dataset, o primeiro é um dataset para teste, que possui uma versão pura e outra com raídos aleatórios. O outro dataset é um real e contém 8 colunas de *features* e uma representando a resposta.

O restante deste relatório é dividido em 3 seções: (1) A seção de metodologia apresenta os detalhes e escolhas de implementação e design de projeto. (2) A seção de experimentos apresenta os resultados obtidos do treinamento do algoritmo nos datasets. (3) Por fim, a seção de conclusão analisa os resultados obtidos da seção de experimentos.

2 Metodologia

Nesta seção é descrito os datelhes de implementação e as decisões de design aplicadas neste projeto. A descrição e detalhes são apresentados na ordem: representação dos indivíduos, métodos de geração de indivíduos, métodos de seleção, operador de crossover, operador de mutação, operador de reprodução, eletismo e mecânismos de controle (ou de parada).

2.1 Reprentação dos indivíduos

A representação dos indivíduos impacta diretamente na performance do sistema e na expressividade dos invidívuos. Portanto, a princípio é apresentado como o genótipo do indivíduo é definido e como ele é codificado.

Os indivíduos em GP são representados por árvores sintáticas, que possuem nós e terminais. Os nós são operadores aritméticos ou funções e os terminais são constantes ou variáveis. O conjunto de

[1] Suficiência significa que é possível expressar uma solução para o problema utilizando o conjunto de operadores fornecido. Fechamento significa que os operadores devem suportar todos os resultados dos demais. Parcimônia significa que o conjunto de operadores não deve conter elementos desnecessários para representar os indivíduos.

nós e terminais juntos formam o *primitive set* do GP [Poli et al., 2008]. Neste sistema o conjunto de funções são as funções trigonométricas (sin, cos e tan) e o logaritmo com bases diferentes (log e $\log 10$). Para a geração de constantes, inicialmente foi testado o seguinte método: gerar valores aleatórios utilizando uma distribuição multimodal. A escolha desse método se deve ao fato que muitas funções matemáticas possuem contantes no intervalo $[-1, +1]$, porém os resultados iniciais demonstraram que essa abordagem era problemática pois muitos valores de dimensões não proporcionais ao do dataset eram geradas. Para contorna esse problema, foi adotado uma abordagem mais simples: gerar constantes aleatóriamente no intervalo de 0 a 255 e o fenótipo é igual a $-10 + 20/256 \cdot \texttt{constante}$, ou seja, um valor real no intervalo $[-10, 10)$. As variáveis são geradas aleatóriamente, onde um número inteiro no intervalo $(0, N]$, onde N deve ser menor ou igual ao número de colunas do dateset menos um, ou seja, se há 10 colunas de *features* e uma que representa a variável de resposta, então N deve ser igual ao número de *features* ou menor.

Outro aspecto importante na representação dos indivíduos é que eles são geralmente representados por uma estrutura de árvore. A literatura define diversas estruturas de árvores, como árvores binárias, B-*tree*, entre outras. Um problema na representação utilizando esses tipos de árvores é a indireção, que pode afetar a performance do sistema [Faria et al., 2013], portanto, para evitar os efeitos da indireção de ponteiros, os indivíduos são representados utilizando *Heaps*, que são árvores especializadas. Nesse tipo de estrutura, os ponteiro são implicitamente substituídos por índices. O nó à esquerda está na posição $2n + 1$ do vetor e o nó à direita está na posição $2n + 2$. Outra vantagem no uso de *Heaps* está no fato dos dados serem armazenados linearmente, o que reduz os efeitos do *cache miss*, causado por dados espalhados na memória.

O sistema é flexível na escolha da profundidade máxima que um indivíduo (representado por uma árvore) possui e permite ao usuário especificar qualquer profundidade aos indivíduos. Um fator que pode ser vantajoso é que o espaço ocupado por um indivíduo é determinístico, ou seja, se a profundidade for de l, então a quantidade de nós nessa profundidade é 2^l. A quantidade total de nós que um indivíduo possui é igual a $\sum_{l=0}^{L} 2^l = 2^L - 1$, onde L é a profundidade máxima da árvore. Portanto, para uma população com N indivíduos e profundidade máxima L, há $N \times (2^L - 1) \times \texttt{sizeof(nó)}$ bytes ocupados.

Em conclusão, os indivíduos são representados como árvore no ponto de vista semântico e como vetor contíguo na memória. Espera-se que com essa estrutura haja um ganho na performance devido a redução dos efeitos da indireção e por conseguência de *cache miss*.

2.2 Operadores de Geração

A literatura de define vários operadores de geração de indivíduos, como o método *Full*, *Grow* e a combinação de ambos, denominado *Ramped Half-and-Half*. O método *Full*, gerada um indivíduo preenchendo todos os seus nós. O método *Grow*, em contraste com o método anterior, preenche um usuário não necessariamente preenchendo todos os nós. Por fim, o último método gera individuos utilizando os dois métodos anteriores, com 50% de probabilidade para ambos [Poli et al., 2008].

Nessa implementação, há suporte para os três tipos de geração. O método *Full* é gerado iterativamente, preenchendo os $L - 1$ niveis da árvore do indívido com funções ou operadores e a última camada com terminais (constantes ou variáveis). O método *Grow* é gerado com uma função recursiva, que escolhe um operador ou função como raíz e utiliza uma função de distribuição uniforme para decidir se avança ou não mais um nível em cada ramo da árvore, isto é, o filho à esquerda ou à direita. Já o método *Ramped Half-and-Half* utiliza também uma função de distruibuição uniforme para decidir qual dos dois métodos utilizar.

2.3 Operadores de Seleção

Dois operadores de seleção que são frequentemente utilizados são o *Roulette Wheel* e o *k-Tournament*. O primeiro método seleciona algum indivíduo da população com probabilidade proporcional a sua *fitness*, isto é, $p(i) = f_i / \sum_{k=0}^{N} f_k$. Já o último método amostra k indivíduos aleatoriamente e seleciona o indivíduo que possui a maior *fitness* dessa amostragem. O método *Tournament* possui a vantagem de permitir o ajuste da pressão seletiva aplicada, onde valores menores de k geram baixa pressão seletiva ao passo que grandes valores de k aumentam a pressão seletiva [Baeck, 1994].

Na aplicação desenvolvida é possível utilizar ambos os métodos de seleção. Para o *k-Tournament* também é possível especificar o valor de k. Essa flexibilidade facilita os testes e a escolha do valor adequado para o parâmetro, que ajusta a pressão seletiva da seleção e, assim, na interfere na convergência da população.

2.4 Operadores de *Crossover*

A operação de *crossover* utiliza o operador de seleção para a escolha de dois indivíduos para que eles possam reproduzir. A reprodução depende de dois fatores: a probabilidade de *crossover* (p_c) e o método de *crossover*. Uma método comum para realizar esse evento é denominado troca de sub-árvore, onde duas árvores são selecionadas utilizando os operadores de seleção e para cada árvore um ponto é selecionado aleatóriamente. Para uma árvore, o pai, a sub-árvore com raíz no ponto selecionado é removido e no lugar é inserido a sub-árvore com raíz no ponto selecionado na outra árvore, a mãe. A escolha do ponto que determina a raíz da sub-árvore é feaita aleatóriamente, porém , na implementação do algoritmo, a escolha desses pontos é feita de tal modo que a soma da profundidade da árvore pai da raíz até o ponto selecionado com a profundidade da sub-árvore oriunda dá árvore mãe não seja maior de que o comprimento máximo que um indivíduo pode possuir.

No que tange a implementação, o parâmetro p_c pode assumir qualquer valor no intervalo $(0, 1)$. A decisão desse parâmetro pode alterar o valor dos operadores de mutação (p_m) e do operador de reprodução (p_r). A forma como a probabilidade deles pode ser ajustada automaticamente em situações específicas é descrito na seção Ajuste Inteligente de Parâmetros.

2.5 Operadores de Mutação

A literatura define os operadores de dois tipos de operadores de mutação: mutação de sub-árvore e *one-point mutation* (OPM) [Poli et al., 2008]. No primeiro método um ponto é escolhido aleatóriamente na árvore e, a partir desse ponto, uma sub-árvore é gerada aleatóriamente. No algoritmo implementado, o método de geração da sub-árvore é o mesmo empregado no método *grow* de geração (veja Seção 2.2). O outro método de mutação é o OPM. Esse método é aplicado sobre todos os nós e terminais da árvore do indivíduo, onde há a probabilidade de p_op de haver mutação nesse nó. A mutação em um nó específico ocorre alterando o elemento contido nele por outro da mesma classe, por exemplo, em um nó contendo a função sin, a OPM pode alterá-lo para tan, ou seja, manteve a classe (uma função), porém alterou o elemento contido no nó.

Na implementação, ambos os métodos possuem igual probabilidade de serem empregados (50%-50%, respectivamente), porém no caso do OPM a probabilidade de mutação de cada nós é especificado separadamente e é possível controlar o valor dessa probabilidade através da constante p_op, que controla a probabilidade de OPM.

2.6 Operador de Reprodução

Quando a probabilidade de *crossover* e de mutação somadas é menor do que 100%, algebricamente expresso por $p_c + p_m < 1$, entra em ação o operador de reprodução, que basicamente seleciona indivíduos da população utilizando o operador de seleção selecionado até que a próxima geração atinja o tamanho máximo da população.

Esse parâmetro pode ser ajustado na aplicação através do parâmetro p_r, e, dessa forma, os operadores de mutação (p_m) e de *crossover* (p_c) são ajustados automaticamente.

2.7 Eletismo

Após a geração da próxima geração de indivíduos há duas possibilidades: descartar a população anterior ou manter os indivíduos da população anterior com a nova população e selecionar os que possuem maior *fitness* em ambas as populações. Essa última abordagem é denominada eletismo.

O sistema desenvolvido permite que a aplicação do eletismo seja controlado pelo parâmetro, que indica se deve ou não ocorrer eletismo.

2.8 *Fitness*

A *Fitness* determina o quão adaptado um indivíduo está e é utilizada para comparação entre os indivíduos. A função para calcular a *fitness* está relacionada ao problema, e, no caso da RS, algumas formas de mensurar a *fitness* de um indivíduos são o erro médio absoluto (MAE), o error médio quadrado (MSE) e a raiz do erro médio quadrado (RMSE). Independente da métrica utilizada para calcular a *fitness*, o objetivo é minimizar o erro.

Na implementação desenvolvida todas as três métricas descritas estão disponíveis e fica a critério do usuário a escolha de qual métrica de erro utilizar.

2.9 Ajuste Inteligente de Parâmetros

As probabilidades de *crossover* (p_c), de mutação (p_m) e de reprodução (p_r) estão relacionadas através da seguinte equação:

$$p_c + p_m + p_r = 1 \tag{1}$$

Geralmente, é comum atribuir valores altos para p_c e mais baixos p_m, porém quando eles não somam a 1, o operador de reprodução p_r é atribuido ao complemento, de tal forma que a equação 1 é satisfeita.

Outra forma de controle ocorre quando o usuário atribui um valor para p_r, neste caso, os valores de p_c e p_m são ajustado para que a soma deles resulte em $1 - p_r$. Quando isso ocorre, a proporção relativa entre eles é mantida, isto é:

$$p_c = \frac{p_c}{p_c + p_m} \times (1 - p_r) \qquad p_m = \frac{p_m}{p_c + p_m} \times (1 - p_r)$$

2.10 Ambiente para Testes

Devido ao fato da GP tomar decisões aleatóriamente, o resultado pode variar entre execuções. Para alcançar um grau de confiança nos resultados obtidos, é necessário repetir os testes diversas vezes. Para isso, o sistema implementado possui suporte para testes.

Para testar os alguns parâmetro o usuário deve fornecer um arquivo `*.csv`, onde cada linha deve conter uma lista de números inteiros que são utilizados como *seeds* para o geradores de números aleatórios. O gerador utilizado na implementação é o `32-bit Mersenne Twister`. Os testes são repetidos para cada linha contida no arquivo contendo as *seeds*.

Após a bateria de testes, o sistema retorna um relatório contendo a média e o desvio padrão das seguintes estatísticas de cada geração: menor, maior, média, mediana, desvio padrão, variância da *fitness* da população, quantidade de indivíduos melhores que a média da população anterior e a quantidade de indivíduos únicos na população. Esse relatório pode ser salvo em um arquivo `*.csv`, caso o usuário forneça o nome do arquivo de destino através da opção `-o [nome-do-arquivo]`.

2.11 Desempenho

Conforme mencionado nas seções anteriores, as escolhas da representação dos indivíduos foi feita tendo em vista a performance do sistema. Um fator a ser explorado é a performance do sistema com a introdução de paralelismo.

2.12 Compilação

A implementação do algoritmo foi feita em `C++`. A compilação pode ser complexa devido a quantidade de dependêcias em bibliotecas para leitura de arquivos `*.csv` e *parser* dos argumentos. Para contornar essa complexidade, o CMake foi utilizado para gerar o projeto de modo que o sistema utilize o compilador `C++` disponível no sistema. Outro aspecto importante é que o código depende da *standard* 17 da linguagem, portanto é necessário que o compilador ofereça suporte a essa especificação da linguagem. O sistema foi testado utilizando os compiladores GNU GCC 10.0.1 e o MSVC19, ambos os compiladores foram capazes de compilar o sistema. Os comandos necessários para compilar e executar o programa no Linux ou Windows podem ser vistos no Código 1 ou Código 2, respectivamente.

Listing 1: Comandos para compilar no Linux

```
mkdir bin && cd bin
cmake .. && cmake --build .
cd src
./sreg [parametros]
```

Listing 2: Comandos para compilar no Windows

```
mkdir bin
cd bin
cmake ..
cmake --build .
cd src/Debug/
sreg.exe [parametros]
```

Os parâmetros que o sistema suporta são apresentados na Tabela 1. Os parâmetros que não possuem argumentos são aqueles que aceitam um intervalo númerico (inteiro ou real), não necessitam de argumentos ou aceitam uma string, como nome de arquivo, por exemplo.

Tabela 1: Parâmetros do Sistema

Parâmetro	Comando	Argumentos	Exemplo
Arquivo de entrada	1º parâmetro		`./sreg ../data/concrete.csv`
Ajuda	`-h`, `--help`		`-h`
Relatório	`-o`, `--output`		`-o report.csv`
# de variáveis	`-n`, `--variables`		`-n 8`
Tamanho da população	`--population-size`		`--population-size 500`
Limite de gerações	`--max-generation`		`--max-generation 100`
Método de geração	`--generation-method`	ramped-hh, full, grow	`--generation-method ramped-hh`
Profundidade da árvore	`--max-depth`		`--max-depth 7`
Método de seleção	`--selection-method`	roulette, tournament	`--selection-method tournament`
k (tamanho do torneio)	`-k`, `--k-tournament`		`-k 7`
Prob. *crossover*	`-pc`, `--prob-crossover`		`-pc 0.9`
Prob. mutação	`-pm`, `--prob-mutation`		`-pm 0.05`
Métrica de erro	`--error-metric`	mae, mse, rmse	`--error-metric rmse`
Fitness threshold	`--fitness-threshold`		`--fitness-threshold 0.001`
Eletismo	`-E`, `--eletism`		`-E`
Seeds	`--seeds`		`--seeds ../data/seeds.csv`

3 Experimentos

Nesta seção é apresentado resultados dos experimentos realizados. Os resultados apresentados são estatísticas geradas a partir da execução do sistema diversas vezes alterando as *seeds* do gerador pseudo-aleatório. São fornecidos para o teste 31 sementes, cada uma contendo 20 números inteiros gerados aleatóriamente. Ao aplicar o mesmo conjunto de sementes, os resultados devem ser reproduzíveis.

3.1 Dataset Experiamental

Este dataset possui uma versão sem ruído e uma versão ruidosa de uma função matemática desconhecida. O algoritmo será aplicado em ambas as versões. Esse dataset foi escolhido pois simula um fenômeno físico hipotético, no qual a regressão simbólica pode ser aplicada para gerar uma função algébrica para ele.

O primeiro teste tem o objetivo de identificar qual o tamanho da população que atinge o melhor valor de *fitness* em média. Para isso, o tamanho da população é variado e os demais parâmetros são mantidos constantes. Os valores testados variam de uma população pequena (50 indivíduos) até uma população grande (500 indivíduos). Os resultados estam presentes na Figura 1a, onde é possível verificar que a qualidade da *fitness* aumenta proporcinalmente em relação ao tamanho da população. Como cada indivíduo evolui de modo independente, o espaço de soluções é explorado

conforme a quantidade de indivíduos aumenta, fato que é demonstrado na figura. Pelo fato da população com 500 indivíduos ter a melhor solução, os próximos testes tem o tamanho da população fixa em 500 indivíduos.

Os próximos parâmetros a serem variados são a probabilidade de *crossover* e de mutação. Como os eles estão diretamente relacionados, eles devem ser variados de modo proporcional. Esses parâmetros têm impacto na *exploration* e *explotation* da solução. O *crossover* faz com que as melhores soluções sejam combinadas para gerar soluções aperfeiçoadas, enquanto que a mutação faz que novos indivíduos sejam gerados, trazendo novidade para a população. No caso do GP, o *crossover* tem impacto semelhante ao da mutação, pois não há contexto envolvido, o que faz que os indivíduos não necessariamente leve a indivíduos melhores que os pais. A Figura 1b demonstra esse efeito. A população gerada com a probabilidade de *crossover* mais elevada atige máximos locais e permanece neles, enquanto que as populaçõeos com maior taxa de mutação explora novas soluções com maior frequência e, eventualmente, encontra soluções melhores. Com base nos resultados obtidos, os próximos experimentos são realizados mantendo-se $p_c = 60\%$ e $p_m = 30\%$.

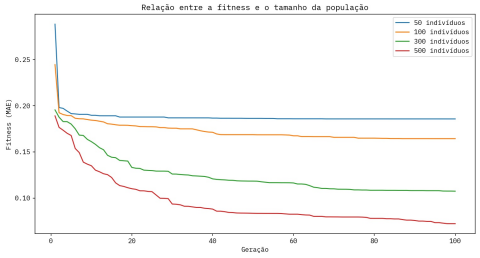
Outro aspecto importante é a pressão seletiva imposta à população. Uma das formas de controlar a pressão seletiva é configurando o método de seleção. Para o caso do método *k-tournament*, a pressão seletiva pode ser controlada através do parâmetro k, que representa a quantidade de indivíduos que são selecionados para o torneio, onde o indivíduo que possui a melhor *fitness* (a maior para um problema o maximização ou a menor para um problema de minimização) é retornado. Os valores maiores de k aumentam a pressão seletiva, pois a probabilidade dos indivíduos que possuem valoers maiores de *fitness* serem selecionados é maior, e, consequentemente, indivíduos com *fitness* menores tem menor probabilidade de serem selecionados para cruzamento. A consequência disso é que há a possíbilidade de indíviduos que atinjam máximos/mínimos locais sejam selecionados com maior frequência e levem a população para uma convergência prematura para um ótimo local. Os efeitos da variação do parâmetro k na população pode ser visto na Figura 1c. Como a figura indica, as populações como o tamanho do torneio maior possuem uma queda da *fitness* abrupta no começo, porém estagnam com o passar das gerações, pois indivíduos que atingem máximos locais dominam a população e exploram as melhores soluções já encontradas ao invés de buscar novas. Por outro lado, a população com o tamanho do torneio pequeno tem a convergência inicial baixa, porém ao explorar o espaço de soluções entra soluções melhores do que as soluções encontradas em população com o tamanho do torneio grande. Um fator importante a ser considerado é que o eletismo está ativado, portanto más soluções não têm grande impacto na melhor solução, porém sem eletismo o tamanho do torneio pode levar a populações que não convirjam devido a baixa pressão seletiva. Para os demais teste, o tamanho do torneio é mantido em $k = 3$.

O último parâmetro explorado é o efeito do eletismo que pode afetar a convergência ou não da população conforme mencionado acima. O eletismo evita que soluções boas sejam perdidas e garante que elas serão mantidas caso novas soluções melhores do que as atuais não sejam encontradas, porém pode levar a convergência pematura, uma vez que soluções ótimas locais são mantidas e pouco espaço é dado a novas soluções. Os resultados da presença do eletismo na população fica evidente analisando a *fitness* da população com e sem o efeito do eletismo, conforme apresentado na Figura 1d. Na figura é possível ver que sem o eletismo, não há convergência. Esse efeito está relacionado a baixa pressão seletiva do parâmetro k do método de seleção, pois a pressão seletiva é baixa e soluções ótimas encontradas durante a exploração do espaço de busca não são mantidas na população.

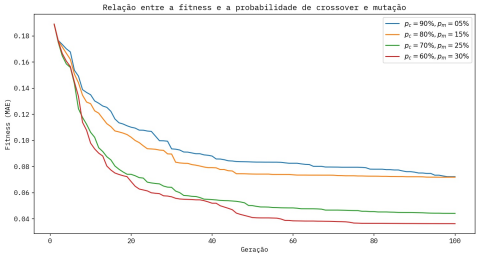
Agora, para verificar a robustez do sistema, a mesma abordagem é aplicada ao dataset com ruído para verificar a capacidade de adaptação do algoritmo. Os resultados são semelhantes aos obtidos no dataset sem ruídos até a seleção do parâmetro k, onde o torneio muito pequeno faz com que a população não convirja. O valor do torneio que retornou atingiu o melhor valor para a *fitness* foi $k = 7$. Outro teste feito foi do efeito do eletismo na população e os resultados indicam que a presença ou ausência do eletismo não altera significativamente a *fitness* da população, isso se deve ao tamanho do torneio, que gera um aumento da pressão seletiva entre os indivíduos independente da presença de eletismo. A Figura 2 apresenta esses resultados.

Um exemplo de solução gerada para o dataset com ruídos (direita) e sem ruídos (esquerda) pelo algoritmo pode ser vista abaixo, onde o erro médio absoluto foi de 0.0352019 e 0.000256972, respectivamente:

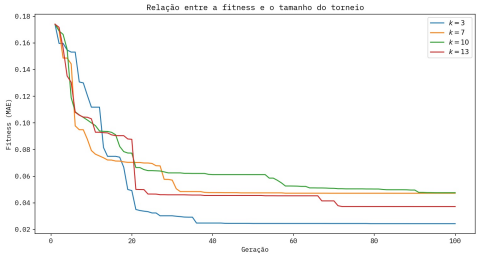
Figura 1: Resultados da *fitness*



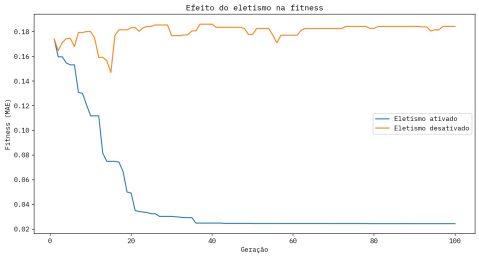
(a) Tamanho da população



(b) Probabilidade de *crossover* e mutação

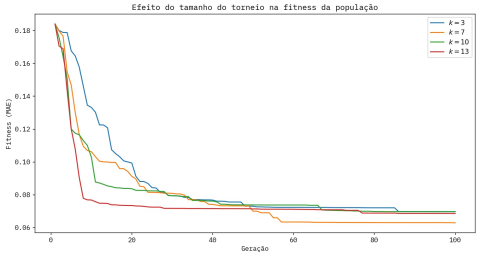


(c) Tamanho do torneio

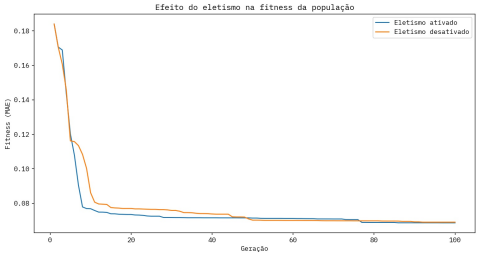


(d) Efeito do eletismo

Figura 2: Resultados para o dataset com ruídos



(a) Efeito do tamanho do torneio na população



(b) Efeito do eletismo na população

$$\frac{\frac{1}{x+x} + \frac{1}{(7.5-x-5.625/x)}}{4.453125 - (\sqrt{\sqrt{x}} - (\sqrt{5.234375} + \frac{1}{7.5}))} + x$$

$$x + \frac{\frac{\frac{1}{x} \cdot \frac{1}{-7.1875}}{\frac{1}{7.109375 - 2.890625}} - (\frac{1}{x} \cdot \frac{1}{-8.359375}) \cdot \frac{1}{x/x}}{4.765625}$$

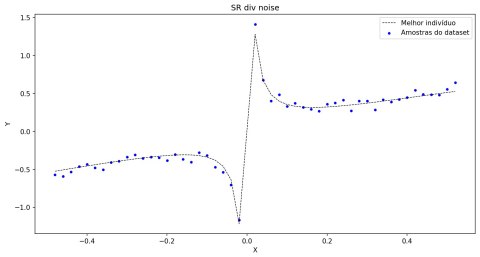
A Figura 3b demostra a aproximação da solução gerado com os dados contidos no dataset com ruídos e a Figura 3a demonstra o melhor indivíduo para o dataset sem ruídos. Em ambas as figuras, os pontos do dataset são representados por pontos (azuis ou vermelhos) e a aproximação é representada por uma curva tracejada preta. Como é possível verificar, a curva gerada é uma boa aproximação para os dados do dataset, validando-se assim os resultados da aplicação.

3.2 Dataset Real

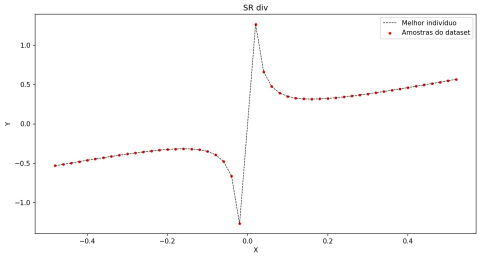
Neste experimento, o sistema é testado com um dataset que contêm dados sobre concreto. Este dataset contêm 9 colunas. Portanto, a regressão utiliza até 8 diferentes variáveis. O procedimento para encontrar o conjunto de parâmetros que resulta na melhor *fitness* é: (1) identificar o tamanho da população, (2) identificar a probabilidade de mutação e de *crossover*, (3) identificar o tamanho do torneio (k) e (4) identificar o efeito da ausência de eletismo.

Para executar os experimentos, quando um deles é variado, os demais permanecem constantes.

Figura 3: Demonstração de indivíduos gerados com ou sem ruído no dataset



(a) Melhor indivíduo gerado (com ruído)



(b) Melhor indivíduo gerado (sem ruído)

Os valores iniciais dos parâmetros são: 8 variáveis independentes, profundidade da árvore igual 7, limite de gerações igual a 100, eletismo ativado, probabilidade de *crossover* igual a 90%, probabilidade de mutação igual a 5%, probabilidade de reprodução igual a 5%, 10 funções, 5 operadores e constantes variando de -10 a +10.

Para identificar o tamanho da população, os seguintes valores foram testados: 50, 100, 300 e 500. Espera-se que com o aumento do tamanho da população haja um aumento da qualidade da *fitness*, pois há mais *exporation* e *explotation* do que com uma população menor. Os resultados para cada população pode ser vista na Figura 4a. A melhor *fitness* é atingida quando o tamanho da população é máximo, o que é justificado pelo argumento apresentado acima. A população pequena não explora o espaço de soluções, por isso a *fitness* (erro médio absoluto) não reduz significativamente, ao passo que, quando a população aumenta o espaço explorado também aumenta e soluções melhores são encontradas. Para os demais experimentos, o tamanho da população é fixado em 500 indivíduos.

Os próximos parâmetros testados são a probabilidade de *crossover* (p_c) e mutação (p_m). Os resultados anteriores foram executados com $p_c = 90\%$ e $p_m = 5\%$ e são usados como referência para os pares de probabilidades testados: $p_c = 80\%, p_m = 15\%$; $p_c = 70\%, p_m = 25\%$ e $p_c = 60\%, p_m = 30\%$. Conforme citado em diversos trabalhos, em PG, o *crossover* não possui nenhum signifcado semântico e se comporta semenhantes a mutação, portanto, diferentemente do GA, a probabilidade de mutação mais alto deve gerar melhores resultados do que com a probabilidade de *crossover* elevado. Os resultados dos testes estão presentes na Figura 4b, onde é possível verificar que a *fitness* atinge o melhor valor quando a probabilidade de mutação é máximo. Isso se deve ao fato que a mutação leva a maior *exploration* do espaço de solução, por isso a população gerada com alta taxa de mutação obtêm *fitness* menores. Para o próximos testes, os valores $p_c = 70\%$ e $p_m = 25\%$ é mantido.

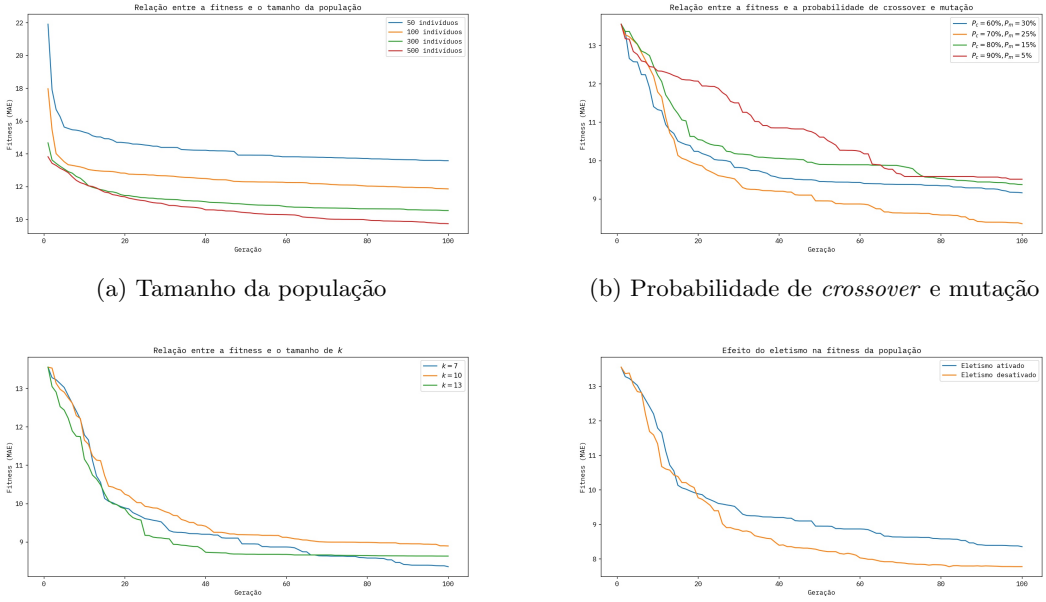
Outro parâmetro explorado é o tamanho do torneio, isto é, o k do método de seleção *k-tournament*. O valor de k tem impacto na pressão seletiva da população. Isso ocorre pois conforme o tamanho do torneio aumenta, mais indivíduos são selecionados para o torneio, aumentando a probabilidade de que indivíduos que estão nas posições iniciais no torneio (os mais bem adaptados; melhores *fitness*) o que faz com eles sejam seleciodados com maior frequência do que os que estão nas posições mais inferiores. Os valores testados para k devem ser proporcionais ao tamanho da população, pois valores muito pequenos gera indivíduos que não convergem. Os seguintes valores são experimentados: $k = 7$, $k = 10$ e $k = 13$. Os resutados do experimentos podem ser vistos na Figura 4c. Os resultados indicam que o melhor valor para o tamanho do torneio para este caso é $k = 7$, pois gera a melhor *fitness*. Como explicado acima, os valores maiores tem a convergência rápida inicialmente, porém são conservadores e não exploram o espaço de solução como os que possuem valores menores. Para os próximo experimento o valor do tamanho do torneio é mantido em $k = 7$.

Por fim, o último parâmetro explorado é a presença ou ausência de eletismo. O eletismo faz com que a melhor solução encontrada (o indivíduos com a melhor *fitness*) seja mantido, porém há redução do espaço de busca, pois novas soluções (indivíduos diferentes) devem competir com indivíduos que atingiram um mínimo (ou máximo) local. O eletismo também pode interferir nos efeitos da mutação e cruzamento geral da população, pois quando dois indivíduos são cruzados ou um indivíduo é mutados, o decendente concorre implicitamente com os pais para a próxima geração. Isso faz com que apenas mutações e cruzamentos que melhorem a *fitness* da população sejam mantidas. Os resultados da presença ou ausência de eletismo estão presentes na Figura 4d.

Os resultados comprovam o que foi citado acima e a ausência de eletismo gerou indivíduos com melhores soluções.

Em resumo, os melhores indivíduos são gerados quando o tamanho da população é 500, a probabilidade de *crossover* é 70%, a probabilidade de mutação é 25%, o tamanho do torneio é 7 e a presença do eletismo está desativada. Esse fatores indicam que o elemento fundamental para encontrar as melhores solução está no *exploration*, em contraste com o *explotation*.

Figura 4: Resultados da *fitness*



(a) Tamanho da população

(b) Probabilidade de *crossover* e mutação

(c) Tamanho do torneio

(d) Efeito do eletismo

4 Conclusão

Os resultados demonstram a importância no balanceamento dos parâmetros na busca por soluções ótimas e na importância entre dois fatores que competem entre si: *exploration* e *explotation*. Os parâmetros que aumentam um desses fatores faz com que o outro diminua e vice-versa. Portanto, é importante encontrar o equilíbrio entre eles.

Em termos de implementação, o sistema desenvolvido é robusto e altamente flexível, pois permite aos usuários definirem novas funções e operadores em apenas uma linha de código. Outros fatores que podem ser alterados são a profundidade da árvore, método de geração, método de seleção, métrica de erro, quantidade de variáveis independentes, tipo de mutação (sub-árvore ou mutação de ponto), entre outros.

Por fim, algumas melhorias podem ser incorporadas nas próximas versões, como plotagem da *fitness* em tempo-real, ajuste de parâmetros durante a execução do algoritmo, ajustar a probabilidade dos operadores e funções de acordo com os resultados obtidos das soluções que os utilizam, isto é, uma função que faz com que os indivíduos tenham *fitness* de baixa qualidade devem ser selecionadas com menos frequência do que as que geram *fitness* de melhor qualidade.

Referências

Thomas Baeck. Selective pressure in evolutionary algorithms: A characterization of selection mechanisms. *IEEE Conference on Evolutionary Computation - Proceedings*, 1(1):57–62, 1994. doi: 10.1109/icec.1994.350042.

Nuno Faria, Rui Silva, and João L. Sobral. Impact of data structure layout on performance. *Proceedings of the 2013 21st Euromicro International Conference on Parallel, Distributed, and Network-Based Processing, PDP 2013*, pages 116–120, 2013. doi: 10.1109/PDP.2013.24.

Ying Jin, Weilin Fu, Jian Kang, Jiadong Guo, and Jian Guo. Bayesian Symbolic Regression. 2019. URL http://arxiv.org/abs/1910.08892.

Riccardo Poli, W.B. Langdon, and N.F. McPhee. *A Field Guide to Genetic Programing*. Number March. 2008. ISBN 978-1-4092-0073-4. URL http://www.essex.ac.uk/wyvern/2008-04/WyvernApril087126.pdf.