Práctica 1.b: Búsquedas por Trayectorias para el Problema de la Selección de Características

SFS

Búsqueda Local de Primero el Mejor Enfriamiento Simulado Búsqueda Tabú

Gustavo Rivas Gervilla DNI: 75570417F gustavofox92@correo.ugr.es 5º Doble Grado en Ing. Informática y Matemáticas Grupo de los Viernes de 17:30 a 19:30

Índice

1	Descripción/formulación del problema abordado	3
2	Descripción de la aplicación de los algoritmos empleados al problema	4
3	Descripción en pseudocódigo de los algoritmos 3.1 Búsqueda Local (BL.py)	7
4	Breve descripción del algoritmo de comparación	9
5	Procedimiento considerado para desarrollar la práctica 5.1 Desarrollo	
6	Experimentos y análisis de resultados	10

1 Descripción/formulación del problema abordado

Lo que intentamos hacer con nuestro algoritmos es encontrar un conjunto de características de unos datos que nos permitan realizar una clasificación suficientemente buena de nuevos datos que nos lleguen con las mismas características.

Hay un problema muy habitual en la vida real y es la de clasificar una serie de elementos en distintas categorías en función de información sobre ellos, esta tarea puede ser realizada por personas o, lo que es más eficiente, por un ordenador. Para realizar tal clasificación es habitual que se recojan multitud de datos sobre los distintos elementos que se quieren clasificar, de modo que en base a esta información podamos decidir si el elemento es de una categoría o de otra. Pensemos por ejemplo en clasificar fruta en base a si se desecha o no. Podemos pensar en recoger datos sobre el tamaño de esa fruta, su color, su textura o su dureza y en base a estas mediciones una máquina debería clasificar la fruta en buena o mala.

El problema está en que normalmente no se conoce tan bien el campo de estudio como para saber a ciencia cierta qué datos recoger, qué datos serán más relevantes a la hora de clasificar elementos de una determinada población. Entonces lo que se hace es recoger gran cantidad de información sobre los elementos para al menos intentar que no haya carencias en la información, esto por supuesto conlleva tanto el coste de adquirir esa información (no sabemos cómo de caro es realizar una determinada medición) y el coste computacional de procesar toda esa información. Entonces lo que nos gustaría es averiguar qué información, de entre toda la que hemos obtenido, es la verdaderamente relevante para la clasificación que queremos realizar.

Entonces partiendo de un conjunto de datos de aprendizaje, valores de características de distintos elementos, queremos ver con qué subconjunto de características podemos hacer una buena clasificación de esos elementos, así si tenemos que cada dato viene dado por una lista de n características $[f_1, f_2, ..., f_n]$ queremos obtener un subconjunto de esas características, de modo que teniendo sólo la información $[f_{s1}, ..., f_{sm}]$, se haga una buena clasificación del conjunto de datos de aprendizaje, del que conocemos por supuesto la clasificación perfecta de dichos datos. Y esperamos que con esa misma información se clasifiquen lo mejor posible nuevos elementos de fuera de la muestra de aprendizaje.

2 Descripción de la aplicación de los algoritmos empleados al problema

Dado que estamos ante un problema de selección las soluciones se representarán como vectores binarios de booleanos de tamaño el número de características a elegir, indicando si una característica se considera o no, así tendremos claramente un espacio de búsqueda de 2^n , siendo el n el número de características a elegir que también lo podemos ver como el tamaño del problema abordado.

Entonces para evaluar como de buena es una determinada solución hacemos lo siguiente:

Para generar las soluciones vecinas a una dada usamos el operador flip que funciona del siguiente modo:

```
def flip(sol, idx):

cambiar el valor de la pos. idx de la sol por su negado
```

Cuando queramos ver cómo de buena es la solución final que ha obtenido nuestro algoritmo de búsqueda lo que hacemos es:

```
claficador = construir clasificador con los datos de entrenamiento solo con las caracterisiticas seleccionadas por nuestra solucion ver el porcentaje de acierto de este clasificador etiquetando los datos de test
```

A cada algoritmo le daremos solamente los datos de entrenamiento separados en características y etiquetas pera que con la estragia de búsqueda que implemente nos devuelva la mejor solución posible para él, luego la evaluación de la solución final la haremos fuera del algoritmo con los datos de test (en la sección 8 ya diremos cómo hemos generado las particiones TODO).

3 Descripción en pseudocódigo de los algoritmos

3.1 Búsqueda Local (BL.py)

3.2 Enfriamiento simulado (ES.py)

El esquema de enfriamiento que seguimos es el de Cauchy modificado para el que calculamos la nueva temperatura a partir de la anterior del siguiente modo:

```
|| nueva_T = T_actual/(1+beta*T_actual) #beta es una param. del problema
```

y la temperatura inicial se calcula en base al "costo" de la solución inicial, que en este caso es su poder de clasificación para las muestras de entrenamiento de las que partamos, y dos parámtros μ y ϕ que fijamos a 0.3 con lo que el cálculo de la temperatura inicial es tan sencillo como el siguiente:

```
|| TO = -mu*coste_sol_inicial/log(fi)
```

hay algo que me sorprende de este hecho y es que dado que el logarirmo neperiano de 0.3 es negativo, en nuestro cálculo, cuanto mejor sea la solución inicial de la que partamos, más elevada será dicha temperatura, es decir, más tardaremos en llegar a la temperatura final.

Pasamos ya a describir el esquema de búsqueda del algoritmo para el enfriamiento simulado:

```
generamos una sol. inicial aleatoria y calculamos los params. de el problema
while se acepte algun vecino en el vecindario explorado de la sol actual and no se hayan
    generado 15000 vecinos en total:
        n_{exitos} = 0 #vecinos generados y aceptados hasta el momento
        for hasta el max_vecinos permitidos:
                generamos un vecino aleatorio, cambiando una caracteristica de la sol
                    actual al azar
                n_vecinos_generados++
                delta = diferencia entre coste sol. actual y el vecino
                if (el vecino es mejor que la sol actual or U(0,1) <= exp(-delta/
                    temperatura_actual) \#U(0,1) valor aleatorio uniforme en el [0,1]) and
                     delta != 0:
                        sol actual = vecino
                        n exitos++
                        if la nueva sol es mejor que la mejor sol encontrada hasta el
                            momento:
                                mejor_sol = sol_actual
                if n_exitos == max_exitos or hemos generado el numero total de vecinos
                    posibles:
                        break
        actualizar temperatura
return la mejor solucion encontrada
```

Hemos añadido la condición de que delta no sea cero ya que de otro modo la exponencial que usamos para aceptar soluciones peores valdría uno con lo que estaríamos tomando siempre aquellos vecinos con el mismo coste que la solución actual, esto hacía que el algoritmo generase siempre los 15000 vecinos que tiene como tope, tardando media hora para una partición de wdbc.

3.3 Búsqueda Tabú (BT.py)

Aquí tenemos el pseudocódigo para la búsqueda tabú básica, en el también se ve cómo manejamos la lista tabú como una lista cíclica que consultamos para ver si un vecino ha sido generado mediante un movimiento tabú:

```
while no se hayan generado el maximo de vecinos permitido:
        elegimos n vecinos aleatorios a revisar, siendo n el maximo permitido por
            iteracion
       for cada vecino elegido:
                if el movimiento que lo genera esta en la lista tabu(LT):
                        if el vecino es mejor que la mejor sol encontrada and mejor que
                            el mejor vecino explorado en esta iteracion:
                                mejor vecino = nuevo vecino
                else:
                        if mejor que el mejor vecino explorado en esta iteracion:
                                mejor vecino = nuevo vecino
                if hemos generado el maximo de vecinos totales permitidos:
        sol_actual = mejor vecino encontrado en la iteracion
       if sol_actual mejor que la mejor encontrada hasta el momento:
                mejor_sol_encontrada = sol_actual
       LT[posicion_correspondiente] = movimiento que genero el mejor vecino de esta
        posicion_correspondiente = a la siguiente ciclicamente
return mejor_sol_encontrada
```

3.4 Búsqueda Tabú Extendida (BText.py)

El esquema de búsqueda es el mismo que en la BT básica, lo que cambia es que añadimos un esquema de reinicialización en el bucle interno que funciona del siguiente modo:

```
#iniciamos la memoria a largo plazo como un vector con tantos O como caracteristicas haya
while no hayamos generado mas vecinos que el total permitido:
       #todo igual que en la BT basica
       s = mejor vecino
       soluciones_aceptadas++
       para cada car. seleccionada en mejor vecino aumentamos el contador de la memoria
           a largo plazo de ella en 1
       if mejor vecino es mejor que mejor sol. hasta el momento:
                actualizamos la mejor
        else:
                numero de iteraciones sin mejorar++
       if llevamos 10 iteraciones sin mejorar la mejor solucion:
                obtenemos numero aleatorio en el [1,3] con probabilidades [0.25,0.25,0.5]
                if sale 1:
                        sol_actual = una solucion nueva completamente aleatoria
                elif sale 2:
                        sol_actual = mejor_solucion_encontrada
                else:
                        #construimos una nueva sol_actual donde cada caracteristica se
                            rige por lo que sigue
                        sol_actual[i] = U(0,1) < (1 - (numero de veces que la car. i se
                            ha aparecido en las sols. aceptadas/soluciones_aceptadas)
                Elegimos si reducir o aumentar el tamanio de la lista tabu
                if Reducir:
                        LT = una lista con la mitad de tamanio con todas las casillas a
                            -1 (vacia)
                else:
                        LT = una lista con el tamanio de antes + la mitad de ese tamanio
                            con todo a -1
                Se insertaran nuevos elementos empezando desde el inicio de la lista
return la mejor solucion encontrada
```

4 Breve descripción del algoritmo de comparación

Para el algoritmo de comparación, SFS, lo que hacemos es lo que vamos a reflejar en el siguiente pseudocódigo, la principal diferencia es que no tenemos la función usual flip sino que hemos hecho una función especial para poder realizar una función vectorizada en Python (aunque no produce ninguna mejora en tiempo a la versión que tendríamos si simplemente tuviésemos un for que recorriese las características que quedan por añadir hasta encontra la de mayor ganancia), esta función crea una nueva solución poniendo a True una componente de la solución que le pasamos y nos da su porcentaje de clasificación, como hacemos en el resto de algoritmos. Dicho esto pasamos al pseudocódigo:

5 Procedimiento considerado para desarrollar la práctica

5.1 Desarrollo

El código usado en prácticas lo he implementado yo a partir de las explicaciones dadas tanto en clase de prácticas como de teoría sobre los distintos algoritmos, siendo de mucha utilidad los pseudocódigos de las transparencia de teoría así como el esqueme de funcinamiento de las búsqueda tabú, también de las transparencia.

La parte que no ha sido implementada por mí es la correspondiente a la implementación de las soluciones, es decir, tanto el KNN como los mecanismos de evaluación de las soluciones. Para ello he usado un módulo de Python llamado scikit cuya documentación la podemos consultar en la siguien web que es la que he consultado yo para poder usar aquello que necesitaba http://scikit-learn.org/stable/documentation.html, para instalar este módulo en Ubuntu hemos usado el siguiente comando de terminal pip install -U scikit-learn. Este módulo nos permite tanto crear un clasificador 3NN con los datos que elijamos y posteriormente etiquetar datos u obtener directamente el porcentaje de acierto para un conjunto de datos.

Además tiene una función para hacer las pruebas Leave One Out dándole un conjunto de datos y nos dice los índices para poder separar el conjunto de datos de aprendizaje en una muestra por un lado y el resto por otro y poder calcular la función objetivo como queremos.

5.2 Manual de usuario

Cada uno de los algoritmos están implementados en distintos ficheros de los que podemos ver su contenido en el *leeme* que se nos pide que incluyamos con el código. Los experimentos han sido ejecutados usando el fichero main al que le pasamos por argumentos el nombre del algoritmo a usar: KNN, SFS, BL, ES, BT y BText. La semilla se establece dentro del fichero al inicio de la ejecución del algoritmo para cada una de las particiones. Esto lo hemos hecho así para poder cortar la obtención de datos cuando sea necesaria y poder retomar los experimento desde la partición por las que nos quedáramos, así no se desajusta la semilla con la que hacemos los experimentos al retomar.

Entonces para ejecutar los experimentos de cada algoritmo lo que haremos es *python main.py algoritmo* y se ejecutará el algoritmo sobre todas las particiones de datos que tenemos.

6 Experimentos y análisis de resultados

Estás prácticas han sido implementadas en Python 2.7.6 y ejecutadas sobre un ordenador son S.O. Ubuntu 14.04 LTS, de 8GB de RAM y procesador Intel Core i7-4790 CPU 3.60GHz con 8 núcleos, aunque dado que el código no ha sido paralelizado estos núcleos no han sido explotados al máximo.

Debido a algunas complicaciones y a la falta de tiempo he ejecutado los algoritmo con un número máximo de evaluaciones de 5000 en lugar de 15000 lo que se ve reflejado tanto en el tiempo de ejecución: por ejemplo la Búsqueda Tabú tarda aproximadamente un tercio del tiempo ya que como no tiene otro criterio de parada que no sea el número de evaluaciones, la reducción se ve afectada justamente por el número máximo de evaluaciones que se hagan.

Tabla 1: Resultados 3NN

3NN		Wdbc			Movement_Li			Arrhythmia				
21/1/	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т
Partición 1-1	96,14	96,12	0,00	0,00	72,22	71,66	0,00	0,00	65,46	65,10	0,00	0,00
Partición 1-2	96,83	95,78	0,00	0,00	63,33	67,77	0,00	0,00	63,02	64,94	0,00	0,00
Partición 2-1	95,43	96,47	0,00	0,00	67,22	66,11	0,00	0,00	62,37	63,02	0,00	0,00
Partición 2-2	96,12	96,49	0,00	0,00	70,55	71,11	0,00	0,00	65,10	64,43	0,00	0,00
Partición 3-1	93,68	97,18	0,00	0,00	68,88	70,55	0,00	0,00	61,34	67,18	0,00	0,00
Partición 3-2	97,53	95,43	0,00	0,00	67,22	70,55	0,00	0,00	63,54	64,43	0,00	0,00
Partición 4-1	96,14	95,42	0,00	0,00	68,33	70,00	0,00	0,00	62,37	65,62	0,00	0,00
Partición 4-2	98,23	95,43	0,00	0,00	67,77	70,55	0,00	0,00	63,54	64,43	0,00	0,00
Partición 5-1	96,14	95,42	0,00	0,00	62,77	77,22	0,00	0,00	65,97	65,10	0,00	0,00
Partición 5-2	97,88	95,43	0,00	0,00	72,77	70,55	0,00	0,00	63,54	63,40	0,00	0,00
Media	96,41	95,92	0,00	0,00	68,11	70,61	0,00	0,00	63,63	64,77	0,00	0,00

Tabla 2: Resultados SFS

SFS		Wdbc			Movement_Li	ibras		Arrhythmia				
51.5	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	$%_{clas}_{out}$	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	T
Partición 1-1	95,43	95,42	83,33	19,42	72,77	63,33	92,22	49,48	78,35	69,27	97,12	198,74
Partición 1-2	97,53	92,98	90,00	13,09	73,33	65,00	88,88	69,34	77,08	71,64	98,20	128,73
Partición 2-1	97,19	97,53	86,66	16,15	74,44	66,66	87,77	73,15	82,47	74,47	98,20	129,18
Partición 2-2	97,53	95,78	90,00	13,25	72,22	68,88	90,00	61,25	73,43	65,97	98,92	85,33
Partición 3-1	96,49	95,77	83,33	19,27	75,00	62,22	88,88	67,62	76,80	70,31	97,84	154,96
Partición 3-2	97,88	95,08	86,66	16,15	76,66	73,33	88,88	67,14	83,33	70,10	97,84	147,64
Partición 4-1	95,08	91,54	93,33	10,15	76,66	70,00	87,77	73,53	79,89	68,75	97,84	150,57
Partición 4-2	98,23	94,03	76,66	24,36	75,00	63,88	92,22	50,50	79,68	69,58	98,20	128,46
Partición 5-1	96,84	97,18	86,66	16,41	71,66	69,44	91,11	55,95	82,47	71,35	96,40	241,28
Partición 5-2	98,23	94,03	83,33	19,20	75,00	65,00	91,11	57,63	78,64	71,64	98,56	107,24
Media	97,04	94,93	86,00	16,75	74,27	66,77	89,88	62,56	79,21	70,31	97,91	147,21

Tabla 3: Resultados Búsqueda Local

BL		Wdbc				Movement_Li	ibras		Arrhythmia			
DL	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	$%_{clas}$ _out	%_red	Т
Partición 1-1	98,24	96,47	40,00	15,79	75,00	75,55	44,44	17,54	70,10	66,66	52,87	92,33
Partición 1-2	97,18	95,78	46,66	6,61	67,77	68,33	45,55	14,69	67,70	64,43	50,35	98,59
Partición 2-1	97,19	95,77	46,66	6,87	70,00	68,88	42,22	18,04	70,61	66,14	52,87	120,49
Partición 2-2	95,77	95,78	46,66	4,76	72,77	70,55	45,55	11,22	69,27	65,97	54,67	107,77
Partición 3-1	95,43	96,47	43,33	6,37	70,00	69,44	47,77	10,83	71,13	69,79	55,03	100,83
Partición 3-2	97,53	94,38	46,66	4,97	71,66	71,11	45,55	11,94	72,91	67,52	54,31	111,44
Partición 4-1	97,89	96,83	46,66	13,16	72,22	70,55	42,22	25,19	71,64	64,58	54,67	134,42
Partición 4-2	97,53	94,38	53,33	5,73	68,88	68,33	48,88	12,81	69,79	62,88	53,23	110,05
Partición 5-1	96,84	93,66	50,00	5,19	66,11	75,00	46,66	20,01	70,10	67,70	51,43	93,23
Partición 5-2	98,59	94,73	50,00	6,35	71,11	72,22	44,44	18,50	68,22	61,85	52,87	63,10
Media	97,22	95,43	47,00	7,58	70,55	71,00	45,33	16,08	70,15	65,75	53,23	103,23

Tabla 4: Resultados Enfriamiento Simulado

ES		Wdbc	20010	11 100	Buruados	Movement_I			Arrhythmia			
ES	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т
Partición 1-1	97,89	96,47	46,66	86,87	72,77	73,88	64,44	164,59	68,55	66,14	52,15	770,28
Partición 1-2	97,53	94,73	46,66	89,14	65,55	66,11	50,00	174,23	68,75	63,91	47,48	765,74
Partición 2-1	97,19	96,12	53,33	86,00	70,55	66,11	57,77	172,00	68,55	65,62	49,64	780,41
Partición 2-2	98,23	95,43	73,33	79,70	73,33	72,77	53,33	175,85	68,75	66,49	47,84	775,44
Partición 3-1	95,78	96,47	43,33	46,95	73,88	66,66	58,88	171,50	70,61	69,79	48,92	788,23
Partición 3-2	98,59	95,78	36,66	88,45	73,33	71,11	51,11	183,79	70,83	65,97	51,07	762,56
Partición 4-1	97,19	94,01	53,33	84,62	72,77	68,88	51,11	179,02	71,64	68,75	48,92	783,63
Partición 4-2	97,88	94,03	46,66	85,66	75,00	72,77	58,88	168,02	69,27	63,40	49,64	753,27
Partición 5-1	97,54	95,07	50,00	85,85	67,77	77,22	64,44	165,79	69,07	62,50	44,96	761,36
Partición 5-2	98,23	94,38	36,66	87,64	74,44	73,88	51,11	175,41	68,75	62,37	47,12	778,51
Media	97,61	95,25	48,66	82,09	71,94	70,94	56,11	173,02	69,48	65,49	48,77	771,94

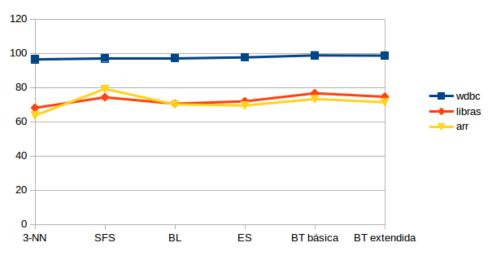
Tabla 5: Resultados Búsqueda Tabú

		Wdbc				Movement_L	ibras		Arrhythmia			
BT	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т
Partición 1-1	98,59	95,42	50,00	655,18	77,77	74,44	50,00	442,37	77,31	67,70	59,71	717,85
Partición 1-2	98,94	95,08	60,00	640,17	73,88	69,44	67,77	417,09	73,43	70,10	56,11	711,62
Partición 2-1	98,59	94,36	53,33	647,32	75,55	66,66	48,88	441,37	72,68	64,58	50,71	752,38
Partición 2-2	98,59	95,43	53,33	627,41	78,88	71,11	58,88	438,63	74,47	69,07	51,79	754,19
Partición 3-1	97,89	97,18	56,66	634,71	77,22	73,33	62,22	433,43	72,68	68,75	55,39	742,51
Partición 3-2	99,29	95,78	43,33	650,89	76,11	70,00	62,22	427,88	72,91	65,97	53,95	726,01
Partición 4-1	98,59	96,12	53,33	654,68	77,77	71,66	46,66	450,71	72,16	63,02	51,07	739,38
Partición 4-2	99,29	93,33	46,66	655,59	78,88	71,11	56,66	437,27	72,91	68,55	51,43	750,85
Partición 5-1	98,59	92,95	56,66	643,71	71,66	70,55	50,00	431,01	72,16	67,70	52,87	742,29
Partición 5-2	99,29	95,08	43,33	650,78	78,88	71,11	48,88	447,01	72,39	64,94	53,95	739,02
Media	98,77	95,07	51,66	646,04	76,66	70,94	55,22	436,68	73,31	67,04	53,70	737,61

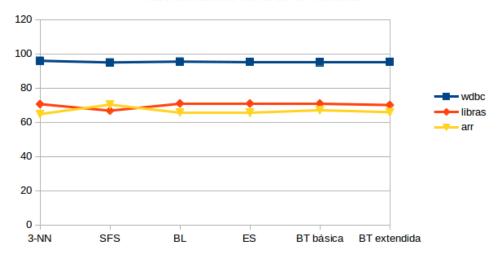
Tabla 6: Resultados Búsqueda Tabú Extendida

BText		Wdbc				Movement_L	ibras		Arrhythmia			
	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т	%_clas_in	%_clas_out	%_red	Т
Partición 1-1	98,59	95,07	56,66	692,23	78,88	69,44	54,44	494,48	74,74	65,62	55,39	954,81
Partición 1-2	98,59	96,14	40,00	682,91	68,88	68,33	54,44	502,04	72,39	68,04	52,87	916,16
Partición 2-1	98,59	94,36	56,66	680,20	72,22	66,66	43,33	506,60	70,61	67,18	51,43	992,34
Partición 2-2	98,59	96,14	70,00	666,33	75,55	71,11	51,11	510,13	69,27	68,04	51,43	942,76
Partición 3-1	97,19	96,12	60,00	690,01	75,55	71,66	53,33	511,65	70,10	67,18	52,15	959,00
Partición 3-2	99,29	95,78	30,00	708,35	74,44	71,11	51,11	506,18	70,83	67,52	53,59	922,41
Partición 4-1	98,24	95,42	50,00	691,62	76,66	68,88	52,22	508,98	70,61	65,10	52,51	945,75
Partición 4-2	99,29	94,03	60,00	677,52	74,44	68,33	47,77	517,49	72,91	63,40	52,51	890,61
Partición 5-1	98,59	93,66	46,66	689,44	71,11	72,22	53,33	505,05	72,68	67,18	55,39	944,00
Partición 5-2	99,29	96,14	20,00	694,33	78,33	72,77	44,44	498,50	69,79	59,79	56,11	929,24
Media	98,63	95,29	49,00	687,29	74,61	70,05	50,55	506,11	71,39	65,91	53,34	939,71

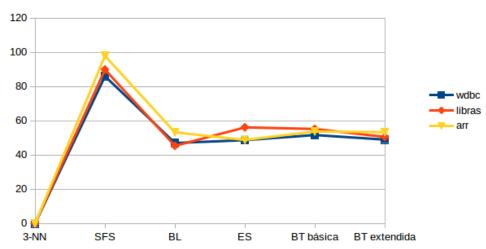
Tasa de acierto dentro de la muestra



Tasa de acierto fuera de la muestra







Tiempo de ejecución en segundos

