Práctica 3 Metaheurísticas. Algoritmos Genéticos para el problema de la selección de características

Jacinto Carrasco Castillo N.I.F. 32056356-Z jacintocc@correo.ugr.es

5 de mayo de 2016

Curso 2015-2016 Problema de Selección de Características. Grupo de prácticas: Viernes 17:30-19:30 Quinto curso del Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas.

Algoritmos considerados:

- 1. Algoritmo Genético Generacional
- 2. Algoritmo Genético Estacionario

${\bf \acute{I}ndice}$

2. Descripción de la aplicación de los algoritmos 2.1. Representación de soluciones 2.2. Función objetivo 2.3. Operadores comunes 2.3.1. Operador de cruce 2.3.2. Operador de mutación 2.3.3. Torneo 3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.4. Tiempos 7. Bibliografía	1.	Des	cripció	n del problema	3
2.2. Función objetivo 2.3. Operadores comunes 2.3.1. Operador de cruce 2.3.2. Operador de mutación 2.3.3. Torneo 3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos	2.	Des	cripció	n de la aplicación de los algoritmos	4
2.3. Operadores comunes		2.1.	Repres	sentación de soluciones	4
2.3.1. Operador de cruce 2.3.2. Operador de mutación 2.3.3. Torneo 3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos		2.2.	Funció	n objetivo	4
2.3.2. Operador de mutación 2.3.3. Torneo 3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos		2.3.	Operad	dores comunes	6
2.3.3. Torneo 3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			2.3.1.	Operador de cruce	6
3. Estructura del método de búsqueda 3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			2.3.2.	Operador de mutación	7
3.1. Algoritmo Genético Generacional 3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			2.3.3.	Torneo	8
3.1.1. Operador de selección 3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos	3.	Estr	ructura	a del método de búsqueda	9
3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos				_	10
3.1.2. Operador de reemplazamiento 3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					10
3.2. Algoritmo Genético Estacionario 3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos				•	10
3.2.1. Operador de selección 3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos		3.2.	Algorit	1	11
3.2.2. Operador de reemplazamiento 4. Algoritmo de comparación 5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					11
5. Procedimiento para desarrollar la práctica 5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			3.2.2.	•	11
5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos	4.	Algo	oritmo	de comparación	11
5.1. Ejecución del programa 6. Experimentos y análisis de resultados 6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados 6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos	5.	Pro	cedimi	ento para desarrollar la práctica	12
6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados . 6.2.1. KNN . 6.2.2. SFS . 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					13
6.1. Descripción de los casos 6.2. Resultados . 6.2.1. KNN . 6.2.2. SFS . 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos	6.	Exp	erimer	ntos y análisis de resultados	14
6.2. Resultados		_		· ·	14
6.2.1. KNN 6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			-		14
6.2.2. SFS 6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					14
6.2.3. Algoritmo genético generacional 6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					15
6.2.4. Algoritmo genético generacional 6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos 6.3.4. Tiempos			6.2.3.		15
6.2.5. Comparación 6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos			6.2.4.		15
6.3. Análisis de los resultados 6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos					16
6.3.1. Tasa In 6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos		6.3.			16
6.3.2. Tasa Out 6.3.3. Tasa reducción 6.3.4. Tiempos		0.0.			16
6.3.3. Tasa reducción					17
6.3.4. Tiempos					17
7 Bibliografía					18
i. Divilografia	7.	Bibl	liografí	, a	18

1. Descripción del problema

El problema que nos ocupa es un problema de clasificación. Partimos de una muestra de los objetos que queremos clasificar y su etiqueta, es decir, la clase a la que pertenece y pretendemos, en base a esta muestra, poder clasificar nuevas instancias que nos lleguen. La clasificación se realizará en base a una serie de características, que nos permitan determinar si un individuo pertenece a un grupo u otro. Por tanto, tendremos individuos de una población Ω representados como un vector de características: $\omega \in \Omega$; $\omega = (x_1(\omega), \dots x_n(\omega))$, donde ω es un individuo de la población y x_i , $i = 1, \dots n$ son las n características sobre las que se tiene información. Buscamos $f: \Omega \longrightarrow C = \{C_1, \dots, C_M\}$, donde $C = \{C_1, \dots, C_M\}$ es el conjunto de clases a las que podemos asignar los objetos.

El problema de clasificación está relacionado con la separabilidad de las clases en el sentido de que existirá la función f anteriormente mencionada siempre que las clases sean separables, es decir, siempre que un individuo con unas mismas características pertenzcan a una misma clase. Sin embargo, si se diese que dos individuos $\omega_1, \omega_2 \in \Omega$, $(x_1(\omega_1), \ldots, x_n(\omega_1)) = (x_1(\omega_2), \ldots, x_n(\omega_2))$ y sin embargo $f(\omega_1) \neq f(\omega_2)$, no podrá existir f. En todo caso, querríamos obtener la mayor tasa de acierto posible.

Por tanto, tratamos, en base a unos datos, hallar la mejor f posible. De esto trata el aprendizaje supervisado: Se conocen instancias de los datos y las clases a las que pertenecen. Usaremos como técnica de aprendizaje supervisado la técnica estadística conocida como k vecinos más cercanos. Se trata de buscar los k vecinos más cercanos y asignar al objeto la clase que predomine de entre los vecinos. En caso de empate, se seleccionará la clase con más votos más cercana.

Pero no nos quedamos en el problema de clasificación, sino que buscamos reducir el número de características. Con esto pretendemos seleccionar las características que nos den un mejor resultado (por ser las más influyentes a la hora de decidir la categoría). Usaremos los datos de entrenamiento haciendo pruebas mediante diferentes metaheurísticas hasta obtener la mejor selección que seamos capaces de encontrar.

El interés en realizar la selección de características reside en que se aumentará la eficiencia, al requerir menos tiempo para construir el clasificador, y que se mejoran los resultados al descartar las características menos influyentes y que sólo aportan ruido. Esto hace también que se reduzcan los costes de mantenimiento y se aumente la interpretabilidad de los datos.

Las funciones de evaluación pueden estar basadas en la consistencia, en la Teoría de la Información, en la distancia o en el rendimiento de clasificadores. Nosotros usaremos el rendimiento promedio de un clasificador 3-NN.

2. Descripción de la aplicación de los algoritmos

2.1. Representación de soluciones

Para este problema tenemos varias formas posibles de representar las soluciones:

- Representación binaria: Cada solución está representada por un vector binario de longitud igual al número de características, donde las posiciones seleccionadas tendrán un 1 o True y las no seleccionadas un 0 o False. Esta opción, que será la que tomaremos, sólo es recomendable si no tenemos restricciones sobre el número de características seleccionadas.
- Representación entera: Cada solución es un vector de tamaño fijo $m \le n$ con las características seleccionadas. Esta representación sí es adecuada si tenemos restricciones sobre el número de características tomadas ya que no podemos hacerlo con más de m características.
- Representación de orden: Cada solución es una permutación de n elementos, ordenados según la importancia de cada característica. Aquí también se maneja el cumplimiento de restricciones pues una vez encontrada la solución, tomaremos sólo las primeras m características.

Se ha de mencionar que en las dos últimas representaciones el espacio de soluciones es mayor que el espacio de búsqueda, justificado en la representación de orden porque da más información (podríamos tomar soluciones de longitud variable), pero que en la representación entera sólo es razonable asumir si tenemos una restricción de longitud fija. Además, otra ventaja de la representación binaria es la facilidad para aplicarle operadores (de vecindario, en posteriores prácticas de cruce...) manteniendo la consistencia.

Para esta práctica, aunque la representación de las soluciones también venga dada por la representación binaria, tendremos en todo momento una población en forma de array estructurado. Esto es, un array donde cada elemento está formado a su vez por dos cosas: el cromosoma, es decir, el vector de valores booleanos que determinan la selección o no de una característica, y el valor o score del mismo. De esta manera podemos saber la tasa de acierto de un vector solución sin tener que volver a llamar a la función de evaluación; sólo llamaremos a esta función cuando surja el nuevo individuo de la población.

2.2. Función objetivo

La función objetivo será el porcentaje de acierto en el conjunto de test para el clasificador 3-NN obtenido usando las distancias de los individuos ω en las dimensiones representadas por las características seleccionadas en el vector solución para el conjunto de entrenamiento. El objetivo será maximizar esta función. A la hora de buscar esta solución sólo estaremos manejando los datos de entrenamiento, luego aquí la función objetivo será

la media de tasa de acierto para cada uno de los datos de entrenamiento con respecto a todos los demás, por lo que tenemos que usar la técnica de *Leave-One-Out*. Esta técnica consiste en quitar del conjunto de datos cada uno de los elementos, comprobar el acierto o no para este dato en concreto, y devolverlo al conjunto de datos. Así evitamos que los resultados estén sesgados a favor de la clase o etiqueta original, al contar siempre con un voto la clase verdadera.

La implementación de la función objetivo (obtener el score para Test) la he realizado basándome en el código paralelizado realizado para CUDA por Alejandro García Montoro para la función de *Leave One Out*. El pseudocódigo incluido se trata del esquema seguido para cada proceso, esto es, cada elemento en el conjunto de datos de entrenamiento, puesto que el método en Python para pasarle a la GPU los datos de entrenamiento, test, categorías y un puntero con la solución no tiene mayor interés.

Esto en CUDA lo que hace es guardarnos, para cada proceso, si se ha acertado o no. Posteriormente se pasa el vector con cada resultado (cada ejecución de este código) de nuevo a Python y se calcula el porcentaje de aciertos. Nótese que no se realiza la proyección por las características seleccionadas, esto lo hacemos al pasar los datos.

Para la función de evaluación de las posibles soluciones que se van generando durante la búsqueda utilizo el método realizado por Alejandro García Montoro para usar CUDA. El algoritmo es similar al anterior, pero incluye *Leave One Out*:

2.3. Operadores comunes

Para los dos algoritmos se comparte el operador de mutación y también, en cierta medida, el operador de cruce:

2.3.1. Operador de cruce

El operador de cruce de cada algoritmo se diferencia en que en el esquema estacionario únicamente se reproducen dos de los padres, mientras que en el esquema generacional, se seleccionan tantos padres como individuos tenga la población (se dará el caso con frecuencia de que un individuo se reproduzca más veces que otro). Sin embargo, sólo se cruzarán el 70 % de ellos, con lo que el operador de cruce para el caso generacional cruza únicamente el 70 % primero del vector de padres a cruzar, manteniendo el 30 % restante como estaba.

Operador de cruce de dos puntos El operador de cruce que se indica en la práctica para hacer es el cruce clásico en dos puntos. Para este cruce, dados dos padres tomamos dos posiciones aleatorias en dos vectores e intercambiamos la parte central, obteniendo a los hijos:

```
\texttt{parent\_1}_b, \dots, \texttt{parent\_1}_{num\_features-1}) \texttt{desc\_2} \leftarrow \texttt{concatenate(parent\_2}_0, \dots, \texttt{parent\_2}_{a-1}, \\ \texttt{parent\_1}_a, \dots, \texttt{parent\_1}_{b-1}, \\ \texttt{parent\_2}_b, \dots, \texttt{parent\_2}_{num\_features-1}) \texttt{RETURN desc\_1}, \texttt{desc\_2} \texttt{END}
```

Operador de cruce uniforme He implementado también una modificación sobre el Half Cross Uniform (HUX) consistente en, dados dos padres, asignar a cada gen del hijo el valor del gen de los padres si éste coincide en ambos; si es distinto, asignamos al gen de cada uno de los hijos los valores True o False aleatoriamente. Esto significa que, para un gen en el que los padres tienen distintos valores, un hijo (aleatoriamente en cada gen) recibirá True y el otro False. Así maximizamos la distancia hamming entre los hijos, obteniendo mayor diversidad.

```
huxCrossOperator( parent_1, parent_2 ):
BEGIN

FOR j IN {1,..., num_features} :
    IF parent_1[j] == parent_2[j] THEN
        desc_1[j] ← parent_1[j]
        desc_2[j] ← parent_1[j]

ELSE
        gen ← random({True,False})
        desc_1[j] ← gen
        desc_2[j] ← not gen

END

RETURN desc_1, desc_2
END
```

2.3.2. Operador de mutación

El operador de mutación se encarga de introducir diversidad en la población, favoreciendo la búsqueda en distintas zonas del espacio. Sin embargo, no podemos basar nuestra estrategia de búsqueda de buenas soluciones sólo en la mutación, pues esto nos haría explorar más zonas de búsqueda, sí, pero haciéndolo de forma aleatoria, no intensificando sobre regiones de las que se tenga información de que pueden ser buenas. Debido a esto, la probabilidad de mutación será baja, en concreto, de 0,001 por cada gen. Para ahorrar cálculos repetitivos he descartado la opción de hacer un random por cada gen que se somete al operador de mutación, mutando 1 gen seleccionado aleatoriamente por cada 1000 genes que pasen por el método en cuestión. Además, para el resto de dividir el número de genes de la población de hijos entre 1000 se genera un número aleatorio. Si este número es menor que el resto de la división por la probabilidad de realizar una mutación, mutaremos 1 gen más.

Ejemplo Sea una población de 30 individuos con 50 características. Esto hace un total de 1500 genes que pasarán por el proceso de mutación. $\lfloor \frac{1500}{1000} \rfloor = 1$, luego mutaremos un gen. Pero $1500 \equiv 500 mod(100)$, distinto de 0, luego si se cumple random() $< \frac{1500 mod(1000)}{1000} = 0.5$, modificamos un gen adicional.

La operación para mutar un bit de un determinado individuo es la ya conocida operación flip que nos hacía obtener los vecinos en las prácticas anteriores:

Por tanto, el operador de mutación nos queda de la siguiente manera:

```
mutate(descendants, mutation_prob):
BEGIN
    total_genes ← length(descendants)*num_features

num_gens_to_mutate ← floor(total_genes*mutation_prob)

IF random() < total_genes*mutation_prob-num_genes_to_mutate
    num_gens_to_mutate ← num_gens_to_mutate +1

individ ← {random(descendants), size = num_gens_to_mutate}
genes ← {random({0,...,num_features-1}), size = num_gens_to_mutate}
FOR (individ, gen) IN (individ,genes):
    individ[chromosome] ← flip(individ[chromosome], gen)
    individ[score] ← 0

END

RETURN descendants
END</pre>
```

Ajustando el valor del individuo mutado nos aseguramos que si el individuo mutado pertenecía a la población (estaba en el 30 % de la selección de padres que no se ha cruzado) se vuelve a evaluar y nos ahorramos hacerlo si el individuo no hubiera mutado.

2.3.3. Torneo

Hay además una operación que se necesita para los dos esquemas y su sistema de elección, y es el torneo. Esta función se encarga de determinar cuál de dos individuos de la población es mejor y, por tanto cuál de ellos se reproducirá. En nuestro caso, entendemos que una solución es mejor que otra si tiene una mejor tasa de acierto o, en caso de tener la misma tasa de acierto, tiene seleccionadas menos características. Si se volviese a producir un empate, se devolvería uno de los dos candidatos al azar.

3. Estructura del método de búsqueda

En esta práctica no sólo hay diversos operadores comunes, sino que el esquema general de los algoritmos es el mismo y las diferencias están, precisamente, en operadores concretos diferentes para cada algoritmo. Presentaré en primer lugar la estructura de los algoritmos genéticos implementados y posteriormente los operadores específicos de estos algoritmos.

```
geneticAlgorithm(data, categories, operators):
BEGIN
    MAX\_CHECKS \leftarrow 1500
   MUTATION_PROBABILITY ← 0.001
    \texttt{chromosomes} \; \leftarrow \; \{ \{ \texttt{random} \{ \texttt{T}, \texttt{F} \} \colon \, \texttt{size} \; = \; \texttt{num\_features} \; \} \colon \texttt{size} \; = \; 30 \}
    scores \leftarrow \{score(data[chrom], categories): chrom \in chromosomes\}
   population \leftarrow concatenate( (chromosomes, scores), by columns)
   sort(population, by scores)
   num\_checks \leftarrow 30
    WHILE num_checks < MAX_CHECKS DO
        selected_parents \( \tau \) selectionOperator(population)
        descendants \( \tau \) crossOperator(selected_parents)
        \texttt{descendants} \leftarrow \texttt{mutationOperator(descendants, MUTATION\_PROBABILITY)}
        FOR desc IN descendants not evaluated:
            score(data[desc], categories)
        replaceOperator(population, descendants)
        sort(population, by scores)
    END
END
```

Esta estructura básica hará más fácil la construcción de algoritmos evolutivos, pues sólo tendremos que modificar los operadores de selección, cruce, mutación y reemplazamiento. El funcionamiento será el visto en clase: en primer lugar se genera una población aleatoria,

evaluamos y ordenamos con respecto a esta puntuación obtenida. Entonces, mientras el número de evaluaciones realizados sea menor que el máximo establecido (15000 en nuestro caso), se realiza el siguiente bucle:

- I Se seleccionan unos padres de la población con selectionOperator.
- II Estos padres se reproducen mediante crossOperator
- III Los cromosomas obtenidos se someten a una mutación aleatoria usando mutation-Operator
- IV Se evalúan los hijos.
- V Se produce un reemplazo en la generación.
- VI Se reordena la población.

Finalmente, se devuelve el mejor individuo de la población existente al final de las evaluaciones.

3.1. Algoritmo Genético Generacional

3.1.1. Operador de selección

El operador de selección para el esquema generacional consiste en seleccionar aleatoriamente elementos de la población hasta obtener tantas parejas como elementos de la población y realizar el torneo entre estas parejas, quedándose con los vencedores.

```
selectionOperator_generational(population):
BEGIN
   tourn_cand \( \) {random(population): size = 2 length(population)}
   parents \( \) {tournament(tourn_cand[i], tourn_cand[i+1]): i = 0,2,...,2*(length(population)-1)}

   RETURN parents
END
END
```

3.1.2. Operador de reemplazamiento

En el operador de reemplazamiento, simplemente se intercambia la población actual por la de los descendientes, aunque como se mantiene el elitismo, se reemplaza al peor individuo de la población de descendientes por el mejor de la población anterior si no perteneciere a los descendientes.

```
replaceOperator_generational(population, descendants):
BEGIN
   best ← first(population)
   IF best NOT IN descendants THEN
        last(descendants) = best

   RETURN descendants
END
```

Para simplificar la lectura en el código y minimizar el número de operaciones, sobre todo usando los vectores de numpy, el orden es de menor a mayor, luego el mejor individuo se encuentra en la última posición. En el pseudocódigo se supone que los vectores están ordenados de mayor a menor tasa de aprendizaje.

3.2. Algoritmo Genético Estacionario

3.2.1. Operador de selección

El operador de selección en el esquema estacionario es el mismo que para el generacional, con la salvedad de que los padres seleccionados son únicamente 2, con lo que necesitamos 4 elementos que participen en sendos torneos.

3.2.2. Operador de reemplazamiento

El operador de reemplazamiento sí es diferente al del esquema generacional. Al tener únicamente dos descendientes en cada iteración, no podríamos sustituir enteramente la población por la siguiente generación, sino que seleccionamos los dos individuos de la población, los comparamos con los dos descendientes generados y escogemos los dos mejores de estos cuatro elementos.

```
replaceOperator_stationary(population, descendants):
BEGIN
    replacement ← concatenate(last(population, size=2), descendants)
    sort(replacement, by 'score')
    last(population, size = 2) ← first(replacement, size = 2)
    RETURN population
END
```

4. Algoritmo de comparación

Como algoritmo de comparación tenemos el algoritmo greedy SFS. Partiendo de un vector con ninguna característica seleccionada, exploramos por el entorno y nos quedamos con el vecino que genera una mejor tasa de acierto. Repetimos este proceso hasta que ningún vecino aporta una mejora a la solución obtenida.

```
greedySFS(data, categories) BEGIN
    solution ← {F,...,F: size = num_features}
    current_value ← getValue(data, categories, solution)

REPEAT
    neighbours ← {flip(solution,i): i ∈ characteristics}

    best_value ← máxneighbours getValue(data, categories, ·)

IF best_value > current_value THEN
    solution ← argmaxneighbours getValue(data, categories, ·)

WHILE(best_value > current_value)

RETURN solution
END
```

5. Procedimiento para desarrollar la práctica

El código de la práctica está realizado en Python 3.5.1 y en CUDA. Como se ha comentado anteriormente, el código para el KNN está paralelizado usando el código de Alejandro García Montoro para usarlo con *leave-one-out* y añadiéndole un método para usarlo como función de evaluación de la solución obtenida para el conjunto de test. Esto ha permitido reducir los tiempos considerablemente.

Los paquetes utilizados son:

- 1. scipy para leer de una manera sencilla la base de datos.
- 2. numpy para el manejo de vectores y matrices y tratar que sea algo más eficiente en lugar de las listas de Python.
- 3. ctype para importar el generador de números aleatorios en C disponible en la página web de la asignatura.
- 4. csv para la lectura y escritura de ficheros .csv con los que manejar más cómodamente los datos.
- 5. pycuda y jinja2 para la paralelización en CUDA.

La semilla con la que he realizado las ejecuciones es 3141592, insertada tanto en el generador en C como en el generador de números de numpy y en el propio de Python. He usado los dos porque pretendía usar el primero, que es con el que se realizan las particiones, pero al llegar a los métodos que usan los generadores de números pseudoaleatorios en su funcionamiento me dí cuenta de que tendría que repetir el código de importación del módulo en C para cada método, por lo que opté por usar en los métodos el random de

numpy. Mientras he ido realizando la práctica he ido creando funciones para permitir un más cómodo manejo del programa intentando que el código fuese entendible.

5.1. Ejecución del programa

La salida de cada ejecución (10 iteraciones de un algoritmo con una base de datos) se puede elegir entre mostrar por pantalla o redirigir a un archivo .csv para manejarlo posteriormente, por ejemplo para incluir la tabla en LATEX. Los parámetros que acepta el programa son:

- Base de datos: Será una letra W,L,A que representa cada una de las bases de datos a utilizar. Este parámetro es el único obligatorio.
- Algoritmo utilizado: Por defecto es el KNN. Para introducir uno distinto, se usa
 -a seguido de una letra entre K,S,G,E que se corresponden con KNN, greedy SFS,
 algoritmo genético generacional y algoritmo genético estacionario, respectivamente.
- Semilla. Para incluir una semilla, se añade -seed seguido del número que usaremos como semilla. Por defecto es 3141592.
- Salida por pantalla o a fichero. Se utiliza con el parámetro opcional -write para escribir en un fichero en una carpeta llamada Resultados. El nombre del fichero será la primera letra de la base de datos utilizada seguida por las iniciales del algoritmo. Incluye también la media, el mínimo, el máximo y la desviación típica para cada columna.
- h o --help para mostrar la ayuda y cómo se introducen los parámetros.

Por tanto, la ejecución del programa se hará de la siguiente manera:

```
python Practica3.py base_de_datos [-a algoritmo -seed semilla -write T/F]
```

Si por ejemplo queremos lanzar la base de datos de WDBC con el AGE, semilla 123456 y que los resultados se muestren por pantalla, escribimos

Si optamos por la base de datos Arrhythmia con el AGG y guardar el resultado en un fichero:

Para mostrar la introducción de parámetros:

6. Experimentos y análisis de resultados

6.1. Descripción de los casos

Los casos del problema planteados son tres, cada uno de ellos asociado a una base de datos:

- WDBC: Base de datos con los atributos estimados a partir de una imagen de una aspiración de una masa en la mama. Tiene 569 ejemplos, 30 atributos y debemos clasificar cada individuo en dos valores.
- Movement Libras: Base de datos con la representación de los movimientos de la mano en el lenguaje de signos LIBRAS. Tiene 360 ejemplos y consta de 91 atributos.
- Arrhythmia: Contiene datos de pacientes durante la presencia y ausencia de arritmia cardíaca. Tiene 386 ejemplos y 254 atributos para categorizar en 5 clases. He reducido el número de características eliminando las columnas que tuvieran el mismo valor para todos los datos. Está explicado en la práctica 2 que tardaba excesivamente en la búsqueda local si se intentaba bajar el número de características deseleccionando aquellas que no influyesen en la tasa de acierto.

6.2. Resultados

6.2.1. KNN

	WDBC					Movement L	ibras		Arrhythmia			
	%Clas. in	%Clas. out	red	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т
Particion 1-1	95,7895	95,7747	0	0,0407	65,5556	73,8889	0	0,0341	63,9175	60,9375	0	0,1014
Particion 1-2	97,5352	94,0351	0	0,0119	73,8889	76,6667	0	0,0331	63,5417	61,8557	0	0,1094
Particion 2-1	95,4386	97,1831	0	0,0116	74,4444	65,5556	0	0,0334	59,7938	64,0625	0	0,0967
Particion 2-2	95,7747	96,8421	0	0,0114	68,3333	75	0	0,0331	64,0625	63,4021	0	0,1089
Particion 3-1	96,1404	97,1831	0	0,0115	61,6667	76,6667	0	0,0335	63,9175	63,5417	0	0,0967
Particion 3-2	97,5352	96,8421	0	0,0115	72,2222	80	0	0,0333	63,5417	63,4021	0	0,1087
Particion 4-1	95,7895	96,1268	0	0,0115	74,4444	75	0	0,0335	63,4021	62,5	0	0,0967
Particion 4-2	95,7747	97,193	0	0,0114	70	71,1111	0	0,0331	64,5833	64,9485	0	0,1088
Particion 5-1	96,1404	95,0704	0	0,0115	68,8889	71,1111	0	0,0332	64,9485	63,5417	0	0,0968
Particion 5-2	97,5352	95,0877	0	0,0114	70	76,6667	0	0,0333	63,0208	61,8557	0	0,1087
Media	96,3453	96,1338	0	0,0144	69,9444	74,1667	0	0,0334	63,4729	63,0047	0	0,1033
Max	97,5352	97,193	0	0,0407	74,4444	80	0	0,0341	64,9485	64,9485	0	0,1094
Min	95,7747	94,0351	0	0,0114	61,6667	71,1111	0	0,0331	59,7938	60,9375	0	0,0967
Desv. Típica	0,8014	1,0529	0	$8,7 \cdot 10^{-3}$	3,9083	3,8349	0	$3 \cdot 10^{-4}$	1,3382	1,1383	0	$5.8 \cdot 10^{-3}$

Los datos y su análisis son los mismos que en la práctica anterior.

6.2.2. SFS

		WDBC	!		Movement L	ibras		Arrhythmia				
	%Clas. in	%Clas. out	red	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т
Particion 1-1	92	89,0845	93,3333	0,2245	71	75,5556	90	1,9763	86	76,5625	97,482	4,6152
Particion 1-2	96	90,1754	93,3333	0,1951	75	62,7778	93,3333	1,3277	73	69,0722	98,2014	3,361
Particion 2-1	95	91,5493	93,3333	0,1946	81	66,6667	88,8889	2,2523	76	68,2292	97,8417	3,9263
Particion 2-2	96	93,6842	90	0,2707	75	74,4444	92,2222	1,5851	80	75,2577	98,2014	3,3409
Particion 3-1	96	94,7183	90	0,2738	72	81,6667	92,2222	1,5394	82	72,3958	96,7626	6,2122
Particion 3-2	96	94,7368	90	0,2702	75	71,6667	92,2222	1,434	83	72,6804	97,1223	5,5603
Particion 4-1	98	95,0704	86,6667	0,3459	73	57,7778	93,3333	1,2212	80	73,9583	98,5611	2,6402
Particion 4-2	95	93,3333	90	0,2696	77	68,8889	90	1,9021	80	68,5567	97,8417	4,0374
Particion 5-1	96	94,0141	86,6667	0,3529	76	67,2222	92,2222	1,4372	75	69,7917	98,5611	2,6352
Particion 5-2	96	91,9298	90	0,2669	81	70,5556	90	1,8991	76	74,7423	98,5611	2,6895
Media	95,6	92,8296	90,3333	0,2664	75,6	69,7222	91,4444	1,6574	79,1	72,1247	97,9137	3,9018
Max	98	95,0704	93,3333	0,3529	81	81,6667	93,3333	2,2523	86	76,5625	98,5611	6,2122
Min	92	89,0845	86,6667	0,1946	71	57,7778	88,8889	1,2212	73	68,2292	96,7626	2,6352
Desv. Típica	1,4283	1,9527	2,3333	0,0509	3,2	6,4082	1,4948	0,3147	3,8328	2,877	0,5976	1,1785

Los datos y su análisis son los mismos que en la práctica anterior.

6.2.3. Algoritmo genético generacional

		WDBC				Movement I	Libras		Arrhythmia			
	%Clas. in	%Clas. out	red	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т
Particion 1-1	98,2456	95,0704	43,3333	7,8924	76,1111	76,6667	58,8889	51,314	80,9278	61,9792	50,9881	742,3719
Particion 1-2	99,2958	94,386	43,3333	7,2976	80	75	50	46,141	72,9167	62,3711	53,3597	675,2898
Particion 2-1	97,8947	97,1831	56,6667	6,6382	80,5556	66,1111	52,2222	45,359	75,2577	66,1458	56,1265	678,0366
Particion 2-2	98,5916	95,0877	53,3333	7,4998	78,3333	75,5556	55,5556	52,9768	76,5625	67,0103	51,7787	689,171
Particion 3-1	98,5965	95,7747	73,3333	5,263	73,8889	74,4444	62,2222	47,8783	75,2577	64,5833	58,1028	595,518
Particion 3-2	98,2394	96,8421	53,3333	7,2592	80,5556	78,8889	52,2222	42,0196	75	67,5258	53,3597	718,6257
Particion 4-1	98,9474	94,3662	43,3333	7,4867	82,2222	70	60	48,8344	72,6804	64,0625	55,336	639,662
Particion 4-2	97,8873	95,0877	56,6667	9,0106	82,2222	71,6667	62,2222	45,5346	79,1667	63,9175	55,7312	671,2428
Particion 5-1	97,5439	95,0704	60	7,572	80,5556	68,8889	63,3333	43,4099	78,3505	65,1042	57,7075	630,6454
Particion 5-2	98,9437	96,1404	53,3333	6,8579	81,1111	76,1111	63,3333	44,6671	$76,\!5625$	67,5258	54,5455	724,5674
Media	98,4186	95,5009	53,6667	7,2777	79,5556	73,3333	58	46,8135	76,2683	65,0226	54,7036	676,5131
Max	99,2958	97,1831	73,3333	9,0106	82,2222	78,8889	63,3333	52,9768	80,9278	67,5258	58,1028	742,3719
Min	97,5439	94,3662	43,3333	5,263	73,8889	66,1111	50	42,0196	72,6804	61,9792	50,9881	595,518
Desv. Típica	0,5263	0,9141	8,7496	0,9058	2,5556	3,8006	4,8381	3,2686	2,4976	1,9073	2,2373	43,167

6.2.4. Algoritmo genético generacional

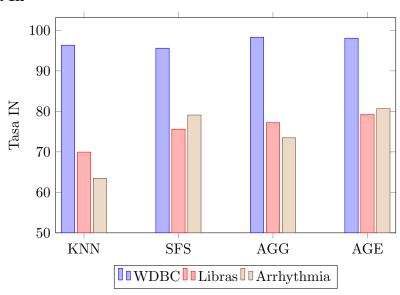
		WDBO				Movement I	Libras		Arrhythmia				
	%Clas. in	%Clas. out	red	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	
Particion 1-1	97,8947	95,0704	46,6667	10,6061	75,5556	74,4444	56,6667	50,9651	85,0515	73,9583	92,8854	191,9178	
Particion 1-2	99,2958	93,3333	43,3333	10,976	78,8889	76,1111	52,2222	44,4958	78,6458	72,1649	87,3518	199,0155	
Particion 2-1	97,5439	96,1268	43,3333	11,9668	80	66,6667	48,8889	56,6316	80,4124	71,3542	90,9091	193,9727	
Particion 2-2	97,5352	95,0877	40	12,3856	74,4444	77,7778	53,3333	51,0907	80,2083	72,1649	84,1897	252,4235	
Particion 3-1	97,5439	95,7747	26,6667	11,8944	68,8889	75,5556	41,1111	47,8755	80,9278	70,8333	78,2609	236,8755	
Particion 3-2	97,8873	96,1404	16,6667	11,098	79,4444	76,6667	47,7778	49,9642	80,2083	71,134	78,2609	327,0603	
Particion 4-1	98,5965	95,0704	30	12,4167	78,8889	72,7778	62,2222	45,1795	78,866	73,4375	76,2846	307,5072	
Particion 4-2	97,8873	96,1404	36,6667	12,4423	78,8889	71,6667	58,8889	49,5447	82,8125	69,0722	70,751	585,1382	
Particion 5-1	97,5439	95,7747	30	12,0175	80	70	57,7778	54,1461	80,4124	68,2292	68,7747	466,6614	
Particion 5-2	98,9437	96,1404	26,6667	12,0377	77,2222	75	50	51,6029	79,1667	66,4948	67,9842	629,5999	
Media	98,0672	95,4659	34	11,7841	77,2222	73,6667	52,8889	50,1496	80,6712	70,8843	79,5652	339,0172	
Max	99,2958	96,1404	46,6667	12,4423	80	77,7778	62,2222	56,6316	85,0515	73,9583	92,8854	629,5999	
Min	97,5352	93,3333	16,6667	10,6061	68,8889	66,6667	41,1111	44,4958	78,6458	66,4948	67,9842	191,9178	
Desv. Típica	0,6129	0,8364	9,0431	0,6222	3,2961	3,2413	5,9255	3,5198	1,8446	2,2166	8,5471	155,7725	

6.2.5. Comparación

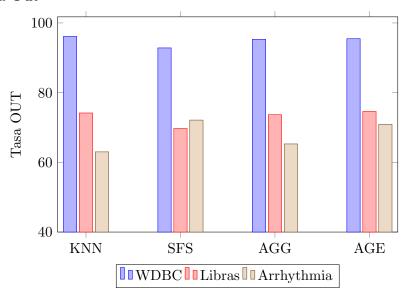
		WDBC				Movement I	Libras		Arrhythmia				
	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	Т	%Clas. in	%Clas. out	%red.	T	
KNN	96.3453	96.1338	0.0000	0.0144	69.9444	74.1667	0.0000	0.0334	63.4729	63.0047	0.0000	0.1033	
SFS	95.6000	92.8296	90.3333	0.2664	75.6000	69.7222	91.4444	1.6574	79.1000	72.1247	97.9137	3.9018	
AGG	98.3132	95.2905	56.3333	8.7687	77.2222	73.6667	52.8889	50.1496	73.4708	65.2830	53.3597	784.8466	
AGE	98.0672	95.4659	34.0000	11.7841	79.2222	74.6111	59.6667	55.3370	80.6712	70.8843	79.5652	339.0172	

6.3. Análisis de los resultados

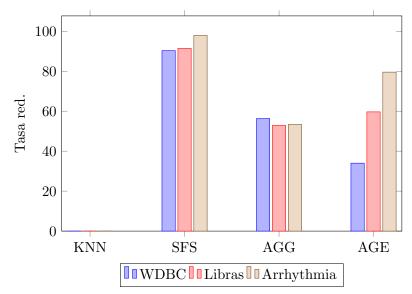
6.3.1. Tasa In



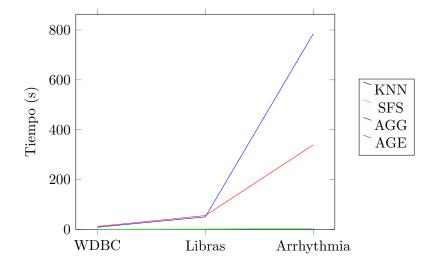
6.3.2. Tasa Out



6.3.3. Tasa reducción



6.3.4. Tiempos



7. Bibliografía

- Módulo en scikit para KNN
- \bullet Para realizar las tablas en LaTeX: Manual PGFPLOTSTABLE