Práctica 1. Aprendizaje de Pesos en Características (APC)

Antonio Molner Domenech

DNI: 77766814L

Grupo MH3: Jueves de 17:30h a 19:30h

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Índice general

Descripción del problema

El problema del Aprendizaje de Pesos en Características (APC) es un problema de búsqueda de codificación real ($sol \in \mathbb{R}^n$). Consiste en encontrar un vector de pesos que pondere las características asociadas a un modelo. En este caso utilizamos un modelo no paramétrico llamado KNN. La ponderación se realiza multiplicando cada característica por su valor correspondiente dentro del vector de pesos. Es decir, teniendo unos datos de entrada $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ y un vector de pesos $\vec{w} = (w_1, w_2, ..., w_n)^T \in \mathbb{R}^n$, multiplicamos cada columna por la componente correspondiente para obtener X'.

La ponderación se realiza para obtener un balance óptimo entre precisión (o cualquier otra métrica que evalúe el modelo) y sencillez. La sencillez se consigue al eliminar ciertas características cuyo peso está por debajo de un umbral, en nuestro caso, 0.2, ya que nos aseguramos que no son demasiado relevantes para las predicciones. Un modelo no paramétrico como es el caso de KNN tiene la desventaja de que es costoso hacer predicciones mientras que el tiempo de «fitting» es casi nulo. Por ese motivo es importante mantener únicamente las características relevantes para obtener un modelo eficiente. Además, reducimos el riesgo de sobreajuste ya que obtenemos una función hipótesis más sencilla y menos sensible al ruido.

Para este problema vamos a utilizar dos métodos de validación. El primero, un algoritmo de validación cruzada llamado k-fold, que consiste en dividir el conjunto de entrenamiento en K particiones disjuntas, ajustar el modelo con $K-1$ particiones y validarlo con la partición restante. El proceso se repite con todas las combinaciones posibles (K combinaciones). En nuestro caso usamos $K = 5$, es decir **5-fold cross validation**.

El segundo algoritmo se utiliza para evaluar las soluciones en cada paso de un algoritmo de búsqueda. Lo que se conoce comúnmente como la función fitness o la función objetivo. Para ese caso calculamos la precision con Leave-One-Out que consiste en usar el mismo conjunto de datos tanto para prueba como para validación pero eliminando la muestra en cuestión antes de predecir para evitar una precisión errónea del 100%.

Con esto aclarado, podemos definir el marco de trabajo principal de este proyecto, la función fitness u objetivo y el modelo a utilizar:

$$f(\vec{w}) = \alpha \times precision(\vec{w}, X) + (1 - \alpha) \times reduccion(\vec{w})$$

Donde:

$$reduccion(\vec{w}) = \frac{\text{nº de componentes < umbral}}{\text{nº de componentes total}}$$

$$precisin(\vec{w}, X) = \frac{\text{predicciones correctas ponderando con } \vec{w}}{\text{predicciones totales}}$$

Para reducir el coste computacional de los algoritmos, vamos a utilizar el clasificador KNN más sencillo usando un solo vecino. Por tanto, para hacer una predicción basta con hallar la clase del vecino más cercano. Se puede utilizar cualquier medida de distancia, en nuestro caso usamos la euclídea ℓ_2 o ℓ_2^2:

$$vecino(\vec{x}) = \underset{\vec{v} \in X}{\operatorname{argmin}}\, distancia(\vec{x}, \vec{v})$$

Descripción de la aplicación de los algoritmos

Las soluciones a nuestro problema se representan con un vector de pesos $\vec{w} = (w_1, w_2, ..., w_n)^T \in [0, 1]^n$. Por tanto, tenemos que cada componente w_i pondera una característica distinta. Como podemos intuir, características con un peso próximo a 1 son relevantes para el cálculo de la distancia en KNN mientras que las que tienen un peso próximo a 0 son prácticamente irrelevantes.

Matemáticamente, la ponderación de pesos podemos verla como una transformación lineal $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, T(\vec{x}) = (w_1 x_i, w_2 x_2, ..., w_n x_n)^T$. Claramente podemos ver la matriz asociada a esta aplicación lineal es la siguiente:

$$M_T = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & w_2 & ... & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & ... & w_n \end{bmatrix}$$

Esta forma de ver la ponderación es importante a la hora de implementarla, ya que podemos utilizar cualquier biblioteca de cálculo matricial como BLAS o LAPACK para realizar los cálculos de forma eficiente. Incluso más eficiente que multiplicar cada columna de la matriz de datos por su peso correspondiente. Dichas bibliotecas suelen usar instrucciones máquina óptimas y algoritmos paralelos.

Una vez sabemos como transformar los datos, podemos evaluar diferentes algoritmos o soluciones. La forma de evaluar cada algoritmo es siempre la misma:

1. Dividimos el conjunto en 5 particiones disjuntas

2. Para cada partición:
    1. Calculamos los pesos usando el algoritmo en cuestión con las particiones restantes
    2. Transformamos los datos tanto de entrenamiento como de prueba con los pesos obtenidos.
    3. Entrenamos un clasificador KNN con los datos de entrenamiento transformados.
    4. Evaluamos el modelo con el conjunto de prueba transformado (la partición).

KNN

Nuestro clasificador es bastante sencillo de implementar. El pseudocódigo es el siguiente:

Listing 1: Pseudocódigo del clasificador KNN

```
function KNN(x, X, y)
  kdtree = build_KDTree(X)
  nearest_neighbour = KDTree.query(x, k=1)
  return y[nearest_neighbour]
```

Como se puede observar, se utiliza una árbol KDTree para encontrar el vecino más cercano. Para los conjuntos de datos que estamos utilizando parece una opción sensata comparada con el típico algoritmo de fuerza bruta. La complejidad temporal de estos arboles son de $O(n)$ para construirlos y $O(log(n))$ hasta $O(n)$ en el peor de los casos para consultarlos. Mientras que el algoritmo de fuerza bruta es $O(n)$ para cada consulta. Si construimos un solo árbol y realizamos muchas consultas, da un mejor rendimiento que fuerza bruta. **Nota**: Suponemos que el KDTree al hacer una consulta devuelve un vector de índices correspondiente a los k vecinos más cercanos.

Evaluacion

Para evaluar nuestra solución en las diferentes iteraciones de un algoritmo de búsqueda o una vez entrenado el modelo, se utiliza la siguiente función objetivo:

$$f(\vec{w}) = \alpha \times precision(\vec{w}, X) + (1 - \alpha) \times reduccion(\vec{w})$$

Como hemos visto anteriormente, la precisión indicaría que tan bueno es el clasificador KNN de un vecino cuando ponderamos con el vector de pesos $\vec{W}$. La precisión se calcula de dos formas distintas dependiendo de cuando se evalúa.

Si se evalúa con únicamente los datos de entrenamiento, como es el caso para la búsqueda local, se utiliza el método Leave-One-Out comentado anteriormente:

Listing 2: Pseudocódigo de la validación Leave-One-Out

```
function accuracy_leave_one_out(X_train, y_train)
  kdtree = build_KDTree(X)
  accuracy = 0
  for x in rows(X_train):
    // Cogemos el segundo más cercano porque el primero es él
       mismo.
    nearest_neighbour = KDTree.query(x, k=2)[1]
    if y_train[nearest_neighbour] == y_train[x.index] then
      accuracy = accuracy + 1
  return accuracy / num_rows(X_train)
```

Si se evalúa una vez entrenado el modelo con el conjunto de entrenamiento, se utiliza el conjunto de test para calcular la precision.

Listing 3: Pseudocódigo de la validación Hold-out

```
function accuracy_test(X_train, y_train, X_test, y_test)
  accuracy = 0
  for x in rows(X_test):
    prediction = KNN(x, X_train, y_train)
    if prediction == y_test[x.index] then
      accuracy = accuracy + 1
  return accuracy / num_rows(X_test)
```

Como hemos visto anteriormente, cualquier vector de pesos $\vec{w} \in \mathbb{R}^d$ no es una solución válida. Cada componente debe estar en el intervalo $[0, 1]$ por tanto, es posible que sea necesario capar algunas soluciones. Para ello se puede usar el siguiente algoritmo

Listing 4: Pseudocódigo de la función clip

```
function clip(w)
  for w_i in components(w):
    if w_i < 0 then; w_i = 0
    if w_i > 1 then; w_i = 1
  return w
```

Pseudocódigo de los algoritmos

Búsqueda Local

La búsqueda local ya supone un algoritmo más complejo. En nuestro caso utilizamos la búsqueda local del primero mejor, es decir, actualizamos la solución con el primer vecino que tenga un fitness mayor. La generación de cada vecino se realiza mutando una componente aleatoria sin repetición. Esta mutación es simplemente sumar un valor aleatorio de una distribución gaussiana $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Donde sigma es 0.3 para nuestro caso. El vector de pesos además se inicializa aleatoriamente: $\vec{w} = (w_0, w_1, ..., w_n)^T$ donde $w_i \sim \mathcal{U}(0, 1)$

El algoritmo se detiene cuando generamos 15000 vecinos o cuando no se produce mejora tras generar $20n$ vecinos, donde n es el número de características de nuestro conjunto de datos.

Listing 5: Pseudocódigo del algoritmo de Búsqueda Local

```
function local_search(X, y, max_neighbours, sigma, seed):
    n_features = num_columns(X)
    feed_random_generator(seed)
    weights = generate_random_uniform_vector(n_features, 0, 1)
    fitness = evaluate(weights, X, y)
    n_generated = 0
    last_improvement = 0
    while n_generated < max_neighbours:
        w_prime = copy(weights)
        for k in permutation(n_features):
            n_generated += 1
            w_prime[k] = w_prime[k] + generate_gaussian(0, sigma)
            w_prime = clip(w_prime)
            f = evaluate(w_prime, X, y)
            if fitness < f then
                weights = w_prime
                fitness = f
                last_improvement = n_generated
                break
            diff = n_generated - last_improvement
            if n_generated > max_neighbours or diff > (20 *
               n_features):
                return weights
    return weights
```

La función *evaluate* utilizada en el algoritmo únicamente transforma los datos con los pesos correspondientes y calcula el fitness de la solución.

Listing 6: Pseudocódigo del la función evaluadora de soluciones para Búsqueda Local

```
function evaluate(weights, X, y):
    // Aplicar la ponderación y eliminar las características
    // con un peso menor a 0.2
    X_transformed = transform(weights, X)
    accuracy = knn_accuracy_leave_one_out(X_transformed, y)
    return fitness(weights, accuracy)
```

Listing 7: Pseudocódigo del la función fitness

```
function fitness(weights, accuracy, alpha=0.5, threshold=0.2):
    reduction = count(weights < threshold) / length(weights)
    return alpha * accuracy + (1 - alpha) * reduction
```

Algoritmo de comparación

Relief

La implementación del algoritmo greedy Relief es bastante sencilla. Para cada muestra en el conjunto de entrenamiento calculamos el amigo (sin contar el mismo) y el enemigo más próximos, y actualizamos el vector de pesos con las distancias de cada uno hacia el punto en cuestión.

Listing 8: Pseudocódigo del algoritmo greedy Relief

```
function relief(X, Y):
    w = {0, 0,..., 0}
    for i=0 to rows_count(X):
        x, y = X[i], Y[i]
        X_same_class = X[Y == y]
        X_other_class = X[Y != y]
        kdtree1 = build_KDTree(X_same_class)
        kdtree2 = build_KDTree(X_other_class)
        ally = kdtree1.query(x, k=2)[1]
        enemy = kdtree2.query(x, k=1)[0]
        ally = X_same_class[ally]
        enemy = X_other_class[enemy]
        w += abs(x - enemy) - abs(x - ally)
    w = clip(w)
    w = w * (1 / max(w))
    return w
```

Como se puede observar, el algoritmo crea dos árboles KDTree en cada iteración lo cuál no es muy eficiente. El forma ideal sería crear un árbol para cada clase antes del bucle y utilizarlos dentro del bucle, pero el algoritmo de por sí ya es bastante eficiente y por legibilidad del código se ha descartado esa opción.

Proceso de desarrollo

Para la implementación de los algoritmos, tanto Relief como Búsqueda Local se ha utilizado **Python3**. Las principales fuentes de información utilizadas para el desarrollo han sido el seminario, el guión de prácticas y la documentación oficial de Python y los diferentes paquetes utilizados.

Con el fin de reutilizar todo el código posible, he hecho uso extensivo de la biblioteca de cálculo numérico y manejo de arrays **Numpy**. Esto ha permitido tener una implementación limpia y concisa (~270 lineas totales) con una velocidad de ejecución aceptable en comparación con otros lenguajes como C.

También he utilizado algunos **profilers** tanto a nivel de función como a nivel de línea, para detectar los cuellos de botella en el algoritmo de Búsqueda Local y determinar finalmente que

partes había que optimizar. Como era de esperar esas partes eran relativas a la función fitness, sobre todo calcular la precisión del clasificador. Por este motivo hice una búsqueda sobre las formas más eficientes de calcular los vecinos y encontré la estructura de datos **KDTree**. El uso de la misma ha permitido tener una implementación más eficiente que usando el típico algoritmo de fuerza bruta.

Además, se realizaron algunas pruebas para optimizar el código compilando parte del mismo usando Cython, Numba y Pythran las cuáles, desgraciadamente, no resultaron exitosas y las mejoras que ofrecían no justificaban la complicación en cuanto a desarrollo y distribución del proyecto.

Finalmente, una vez desarrollado ambos algoritmos, se envolvieron en una clase con una interfaz similar a los objetos de Scikit-Learn para permitir una integración sencilla con el resto del código. Con estas dos clases, ya se implementó el programa principal.

El programa principal (*practica1.py*) tiene varias funcionalidades interesantes. La primera de ellas es la **validación en paralelo** de los clasificadores y salida bien formateada de los resultados. El programa una vez obtenidos los resultados genera unos gráficos en formato PNG que se almacenan en la carpeta **output**. El programa también ofrece una validación de los argumentos recibidos, así como una página de ayuda.

Manual de usuario

Para poder ejecutar el proyecto es necesario tener instalado **Python3**. El proyecto no está testeado sobre Anaconda aunque posiblemente funcione. Únicamente requiere tener el intérprete y el instalador de paquetes **pip** que suele venir por defecto.

El proyecto tiene una serie de dependencias que son necesarias para poder ejecutarlo. Mi recomendación es utilizar un entorno virtual de Python para instalar las dependencias y así no interferir con los paquetes globales. En el directorio del proyecto **FUENTES**, existe un script llamado **install.sh** que crea el entorno virtual e instala los paquetes localmente. Los paquetes a instalar se encuentra en el fichero «requirements.txt». La lista es larga pero realmente no se utilizan tantos paquetes explícitamente. Lo que recoge ese archivo son las dependencias y las «dependencias de las dependencias» con sus versiones correspondientes para evitar incompatibilidades.

A efectos prácticos, hay que ejecutar únicamente lo siguiente:

Listing 9: Ejecución del script para instalar las dependencias

```
./FUENTES/install.sh
```

Una vez instalado todo, ya se puede utilizar el programa principal. Este programa tiene varios parámetros que se deben especificar: el conjunto de datos, el algoritmo a usar, número de procesos a ejecutar en paralelo, etc. En cualquier momento podemos acceder a la ayuda con **-h**.

Listing 10: Salida de la página de ayuda

```
python3 practica1.py -h

usage: practica1.py [-h] [--seed SEED] [--trace {True,False}]
                    [--n_jobs {1,2,3,4}]
                    {colposcopy,texture,ionosphere} {relief,local-
                       search}

positional arguments:
  {colposcopy,texture,ionosphere}
  {relief,local-search} Algorithm to use for feature weighting

optional arguments:
  -h, --help            show this help message and exit
  --seed SEED           Seed to initialize the random generator (
     default: 77766814)
  --trace {True,False}  Generate trace for local search? (default:
      False)
  --n_jobs {1,2,3,4}    Number of jobs to run in parallel for
     evaluating partitions. (default: 1)
```

Así, si queremos ejecutar el algoritmo de Búsqueda Local con el conjunto de datos Colposcopy, la semilla 1, y en paralelo, ejecutaríamos lo siguiente:

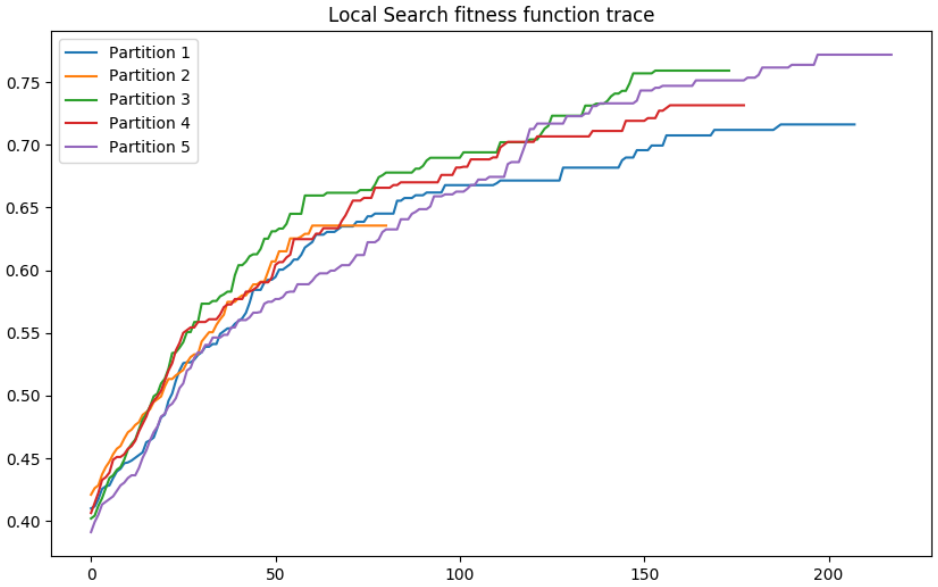
Listing 11: Salida del programa principal

```
python3 practica1.py colposcopy local-search --seed=1 --n_jobs=4

 ============================================================
     COLPOSCOPY      |      LOCAL-SEARCH       |  SEED = 1
 ============================================================
                Accuracy  Reduction  Aggregation        Time
 Partition 1    0.655172   0.682540     0.668856  114.770150
 Partition 2    0.793103   0.746032     0.769568  182.226361
 Partition 3    0.789474   0.587302     0.688388  166.377363
 Partition 4    0.789474   0.603175     0.696324  104.018618
 Partition 5    0.754386   0.698413     0.726399   89.622522

            Accuracy  Reduction  Aggregation        Time
 Mean       0.756322   0.663492     0.709907  131.403003
 Std.Dev    0.058707   0.066780     0.039256   40.553621
 Median     0.789474   0.682540     0.696324  114.770150
```

El parámetro *–trace* es muy interesante ya que puesto a True, permite generar un gráfico de como varía la función fitness a lo largo de las iteraciones. Obviamente es solamente aplicable para búsqueda local. Un ejemplo de gráfico es el siguiente:



Experimentos y Análisis de resultados

Descripción de los casos del problema

Los conjuntos de datos utilizados son los siguientes:

1. **Colposcopy:** Este conjunto de datos tiene 287 muestras y 62 características reales extraídas de imágenes colposcópicas. El objetivo es clasificar entre positivo y negativo (clasificación binaria).
2. **Ionosphere**: Este conjunto consta de 352 muestras y 34 características extraídas de datos de radares. Al igual que el conjunto anterior, la variable explicada es categórica binaria.
3. **Texture**: Diferentes imágenes de texturas se han procesado para extraer 550 muestras y 40 atributos. En este caso la clasificación es entre 11 categorías distintas.

Resultados obtenidos

Para realizar los experimentos se utilizado una semilla específica, mi DNI: 77766814. La semilla se ha utilizado tanto para los algoritmos probabilísticos como para crear las particiones k-fold del conjunto de datos. La funcionalidad de ejecutar la validación en paralelo está implementada y funciona correctamente, pero se ha utilizado un único proceso para evaluar todas las particiones y así, obtener tiempos mínimos de cada algoritmo. Los resultados de la ejecución de los algoritmos son los siguientes:

Tabla 5.1: Resultados obtenidos por el algoritmo 1-NN en el problema del APC

	Colposcopy				Ionosphere				Texture			
	% clas	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T
Partición 1	70,69%	0,00%	35,34%	0,00	88,73%	0,00%	44,37%	0,00	91,82%	0,00%	45,91%	0,00
Partición 2	68,97%	0,00%	34,48%	0,00	85,71%	0,00%	42,86%	0,00	90,00%	0,00%	45,00%	0,00
Partición 3	77,19%	0,00%	38,60%	0,00	80,00%	0,00%	40,00%	0,00	90,91%	0,00%	45,45%	0,00
Partición 4	77,19%	0,00%	38,60%	0,00	82,86%	0,00%	41,43%	0,00	94,55%	0,00%	47,27%	0,00
Partición 5	82,46%	0,00%	41,23%	0,00	92,86%	0,00%	46,43%	0,00	92,73%	0,00%	46,36%	0,00
Media	75,30%	0,00%	37,65%	0,00	86,03%	0,00%	43,02%	0,00	92,00%	0,00%	46,00%	0,00

Tabla 5.2: Resultados obtenidos por el algoritmo Relief en el problema del APC

	Colposcopy				Ionosphere				Texture			
	% clas	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T
Partición 1	68,97%	0,00%	34,48%	0,05	92,96%	0,00%	46,48%	0,06	95,45%	0,00%	47,73%	0,13
Partición 2	70,69%	0,00%	35,34%	0,05	91,43%	0,00%	45,71%	0,06	91,82%	0,00%	45,91%	0,12
Partición 3	73,68%	0,00%	36,84%	0,05	87,14%	0,00%	43,57%	0,05	91,82%	0,00%	45,91%	0,12
Partición 4	70,18%	0,00%	35,09%	0,05	81,43%	0,00%	40,71%	0,06	95,45%	0,00%	47,73%	0,13
Partición 5	91,23%	0,00%	45,61%	0,05	91,43%	0,00%	45,71%	0,06	90,91%	0,00%	45,45%	0,12
Media	74,95%	0,00%	37,47%	0,05	88,88%	0,00%	44,44%	0,06	93,09%	0,00%	46,55%	0,13

Tabla 5.3: Resultados obtenidos por el algoritmo BL en el problema del APC

	Colposcopy				Ionosphere				Texture			
	% clas	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T	*% clas*	*%red*	*Agr.*	T
Partición 1	70,69%	62,90%	66,80%	96,35	92,96%	84,85%	88,90%	44,73	86,36%	80,00%	83,18%	89,95
Partición 2	70,69%	46,77%	58,73%	28,60	84,29%	72,73%	78,51%	54,02	90,00%	67,50%	78,75%	99,87
Partición 3	70,18%	70,97%	70,57%	82,14	85,71%	78,79%	82,25%	35,39	90,00%	57,50%	73,75%	38,97
Partición 4	73,68%	69,35%	71,52%	77,01	87,14%	75,76%	81,45%	36,08	95,45%	80,00%	87,73%	190,33
Partición 5	82,46%	77,42%	79,94%	89,03	91,43%	54,55%	72,99%	19,24	91,82%	82,50%	87,16%	121,92
Media	73,54%	65,48%	69,51%	74,62	88,31%	73,33%	80,82%	37,89	90,73%	73,50%	82,11%	108,21

Análisis de los resultados

Antes de continuar con el análisis de los resultados es importante mencionar que las muestras recogidas, pese a haberse obtenido en las mismas condiciones (misma semilla), son bastante pequeñas. Se han realizado únicamente 5 particiones por conjunto de datos, lo que nos da una muestra demasiado pequeña que nos impide realizar cualquier test de hipótesis paramétrico. Incluso si realizásemos un test no paramétrico como el test Anderson-Darling, las conclusiones podrían no ser correctas y podríamos cometer errores de Tipo I o Tipo 2 (falsos positivos o falsos negativos).

Por lo explicado anteriormente, cualquier conclusión que saquemos con los datos recogidos pueden no ser extrapolables al resto de situaciones. Aún así, es importante comparar los resultados para entender que algoritmos funcionan mejor sobre nuestros conjuntos de datos específicos y sus particiones correspondientes.

En primer lugar, vemos que el algoritmo 1-NN básico aporta un porcentaje de precisión alto en los casos *Ionosphere* y *Texture* y un porcentaje no tan alto en el conjunto *Colposcopy*. Si bien la métrica de la precisión puede ser válida en *Texture*, para los otros dos conjuntos puede no funcionar tan bien. Lo ideal sería utilizar alguna otra métrica como AUC, F1-Score, etc. Pero como nuestro objetivo es comparar diferentes algoritmos que utilizan la misma métrica, este detalle no es relevante.

Para el caso *Colposcopy* vemos que el clasificador básico tiene una precisión mayor que las versiones Relief y Búsqueda Local. Para el algoritmo Relief, poco hay que añadir, en ese conjunto a priori no funciona bien. Pero el algoritmo BL si que es importante recalcar una cosa. La diferencia de precision entre 1-NN y BL es de tan solo 1,76% . Es decir, hemos perdido menos de un 2% de precisión usando únicamente el 35% de las características. Esto implica que nuestro algoritmo posiblemente vaya a generalizar mucho mejor que el clasificador 1-NN y el coste computacional de predecir nuevos valores se va a reducir drásticamente. El inconveniente principal de este algoritmo en este conjunto de datos (y en general), es el tiempo de preprocesado. Para obtener los pesos correspondientes tarda de media ~75s lo cuál es inmensamente mayor que los otros dos algoritmos comparados.

Lo importante de los algoritmos de APC que estamos implementado es que una vez calculado los pesos óptimos para un conjunto de datos, se validan, y quedan prefijados para el resto del desarrollo. Esto hace que en fases posteriores, realizar predicciones sea mucho más eficiente. Si nos fijamos, se consigue más de un 70% de reducción de media entre los tres conjuntos de datos. Por otra parte, si nuestro objetivo es la inferencia, podemos saber que características tienen más importancia que otras cuando nos enfrentamos a algoritmos de aprendizaje «black-box»,

los cuales son difíciles de interpretar, pero con estos métodos podemos desentrañar parte de la información que aprenden. Por estos motivos, los altos tiempos de ejecución del algoritmo BL no deben ser limitantes a la hora de usarlo como parte de un flujo de trabajo en Aprendizaje Automático.

Algo similar pasa con el resto de casos. El algoritmo Relief esta vez si que mejora la precisión con respecto al 1-NN. Ahora si podemos decir que este algoritmo funciona correctamente para estos casos particulares. Cumple su objetivo que es maximizar el rendimiento del modelo ponderando pero sin reducir las características. Por otra parte, la búsqueda local incluso mejora la precisión en el caso *Ionosphere*, posiblemente debido a la reducción de la varianza en el modelo; aunque se queda un poco por detrás en *Texture*. Donde la diferencias son un poco mayor que el resto de casos pero los tres algoritmos tienen una precisión bastante alta.

Gráficos

Como parte final del análisis, voy a mostrar varios gráficos explicativos generados tras realizar los experimentos:

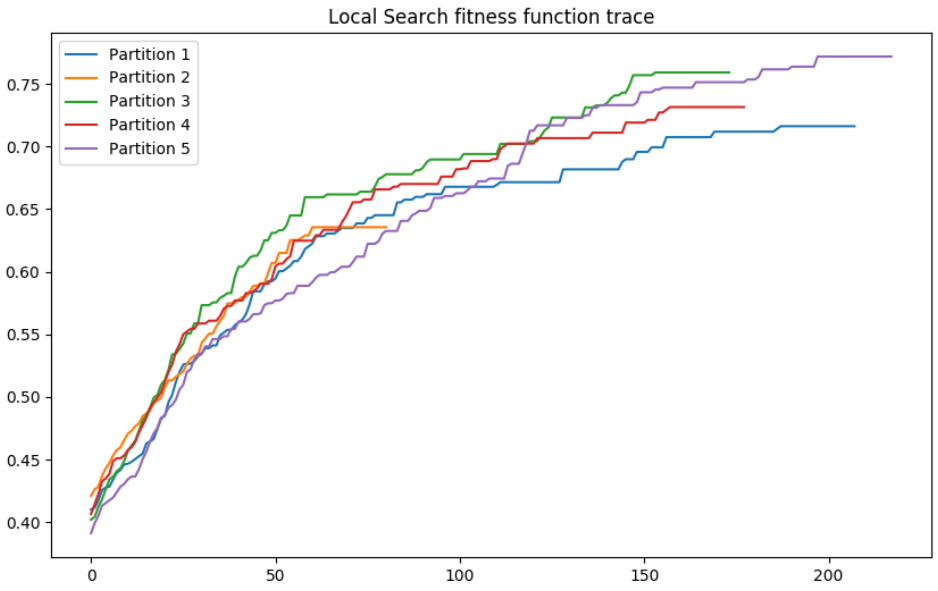


Figura 1: Local Search Convergence Plot (Colposcopy)

Esto es uno de los gráficos generados por la aplicación. Como vemos, el valor de la función fitness aumenta rápidamente en las primeras iteraciones y posteriormente se estabiliza lo que nos da un indicio de que el algoritmo ha convergido o ronda muy próximo a un máximo local. Como vemos en cada partición se llega a un máximo distinto. Esto es debido a que cada partición representa un conjunto de datos totalmente distinto y por tanto la función fitness tiene una geometría distinta. En todas las particiones se utiliza el mismo valor de inicialización, por tanto el punto de inicio es el mismo haciendo que este factor no influya.

Podemos también comparar los algoritmos a partir de los datos recogidos de forma visual:

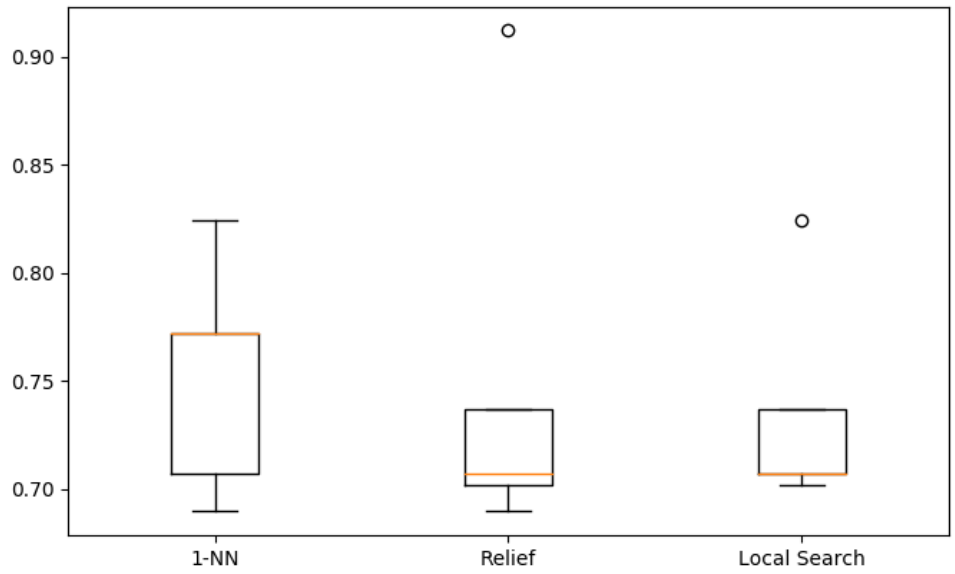


Figura 2: Accuracy Comparison (Colposcopy)

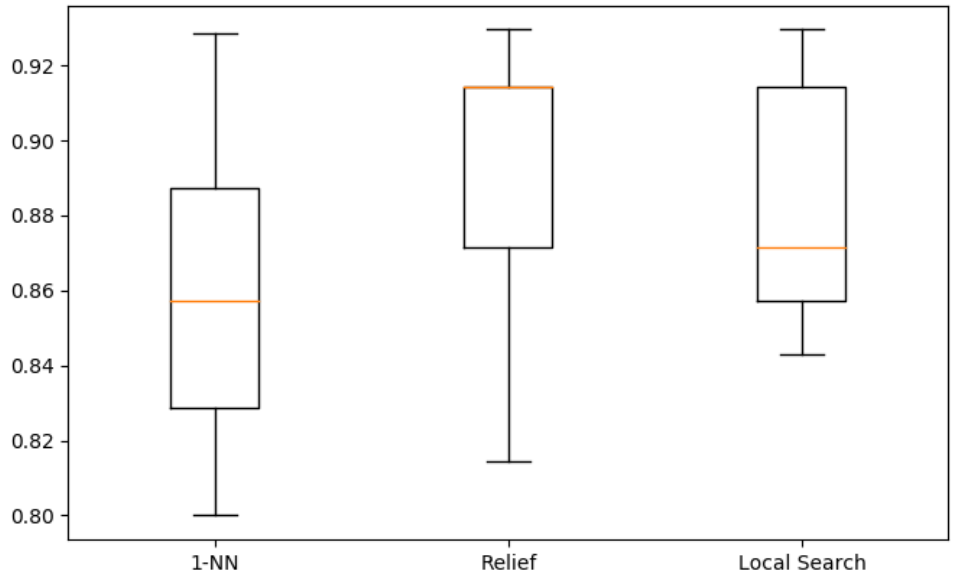


Figura 3: Accuracy Comparison (Ionosphere)

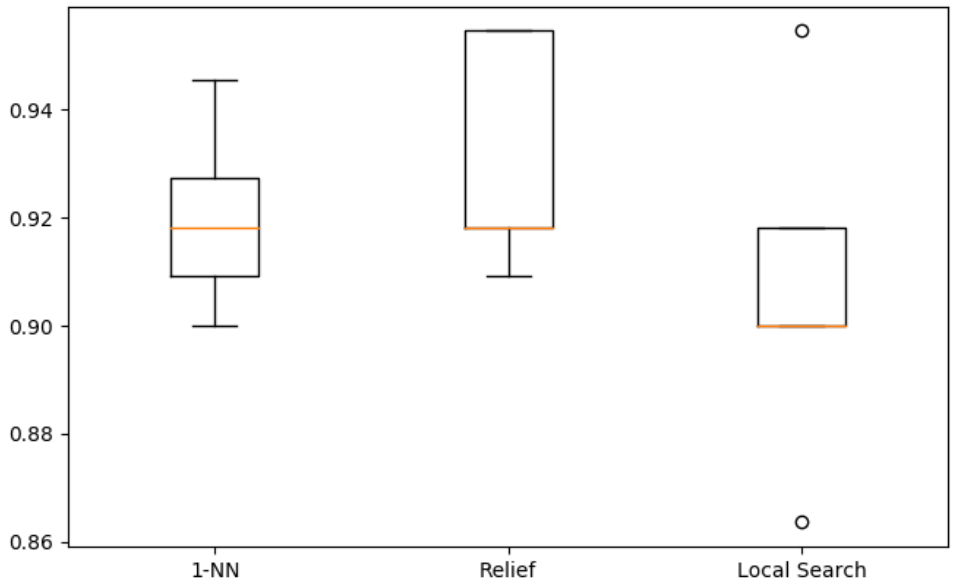


Figura 4: Accuracy Comparison (Texture)

Estos gráficos reflejan la relevancia de las particiones en los conjuntos de datos. Para el algoritmo básico, las muestras de precisión están siempre en el rango intercuartílico incluso para *Ionosphere* los datos son simétricos. Mientras que para los algoritmos Relief y Búsqueda local existen dos casos donde hay outliers. Para Relief, esto es debido a la naturaleza greedy del algoritmo y para búsqueda local esto es debido a lo comentado anteriormente sobre convergencia. Cada partición de datos genera un función fitness con una geometría distinta, por tanto un búsqueda local puede hacer que lleguemos a puntos máximos totalmente distintos en cada caso. A modo de resumen, podríamos decir que los algoritmos Relief y Búsqueda Local son más sensibles a los cambios en las particiones de datos que el clasificador 1-NN básico.

Referencias bibliográficas

Entendimiento

Al principio, pese a lo básico del algoritmo, no llegaba a comprender como funcionaba realmente Relief. Este paper me fue de gran ayuda:

RELIEF Algorithm and Similarity Learning for K-NN

Implementación

Para la implementación he utilizado la documentación oficial de Python y sus bibliotecas correspondientes:

- Python3 Docs
- Scipy-Suite
- Scikit-Learn
- joblib (Paralelismo)
- KDTree