## Metaheurísticas

## Seminario 2.a. Problemas de optimización con técnicas basadas en trayectorias simples

- 1. Problema de Asignación Cuadrática (QAP)
  - Definición del Problema
  - Representación y Ejemplo: Diseño de un Hospital. Solución Greedy
  - Búsquedas por Trayectorias Simples
  - La Biblioteca QAPLIB
- 2. Problema de la Selección de Características

 El Problema de Asignación Cuadrática (QAP) está considerado como uno de los problemas de optimización combinatoria más complejos

 Es NP-completo. Incluso la resolución de problemas pequeños de tamaño n>25 se considera una tarea computacionalmente muy costosa

 El problema general consiste en encontrar la asignación óptima de n unidades a n localizaciones, conociendo la distancia entre las primeras y el flujo existente entre las segundas

- Sean n unidades  $(u_i, i=1,...,n)$  y n localizaciones  $(l_j, j=1,...,n)$ . Se dispone de dos matrices  $F=(f_{ij})$  y  $D=(d_{ij})$ , de dimensión  $(n\times n)$  con la siguiente interpretación:
  - F es la matriz de flujo, es decir,  $f_{ij}$  es el flujo que circula entre la unidad i y la j
  - lacktriangle D es la matriz de distancias, es decir,  $d_{\rm kl}$  es la distancia existente entre la localización k y la l

■ El costo de asignar simultáneamente  $u_i$  a  $l_k$  y  $u_j$  a  $l_l$  es:

$$f_{ij} \cdot d_{kl}$$

La definición matemática del problema consiste en minimizar el costo de las asignaciones:

min 
$$\sum_{i,j=1}^{n} \sum_{k,p=1}^{n} f_{ij} d_{kp} x_{ij} x_{kp}$$
s.a. 
$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} = 1 \qquad 1 \le j \le n ,$$

$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij} = 1 \qquad 1 \le i \le n ,$$

$$x_{ij} \in \{0,1\} \qquad 1 \le i, j \le n .$$

 Como se puede ver, la función de coste es cuadrática, lo que da nombre al problema y lo complica sustancialmente

### ■ Problema de la asignación cuadrática, *QAP*:

Dadas n unidades y n localizaciones posibles, el problema consiste en determinar la asignación óptima de las unidades en las localizaciones conociendo el flujo existente entre las primeras y la distancia entre las segundas

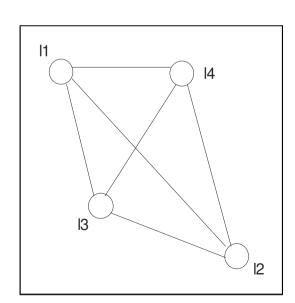
Si se considera una permutación para representar las asignaciones, se verifican directamente las restricciones del problema:

$$QAP = \min_{S \in \Pi_N} \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n f_{ij} \cdot d_{S(i)S(j)} \right)$$

Elshafei, A.N. (1977). Hospital Layout as a Quadratic Assignment Problem. Operations Research Quarterly 28, 167-179.

- Supongamos que se ha de diseñar un hospital que comprende cuatro unidades distintas:
  - u1: Maternidad
  - u2: Urgencias
  - u3: Unidad de Cuidados Intensivos
  - u4: Cirugía

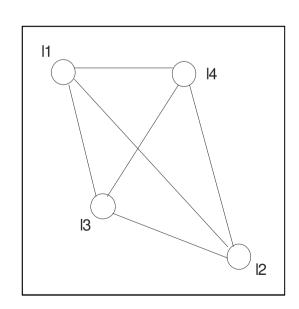
Que han de ser situadas en un edificio con la siguiente distribución:



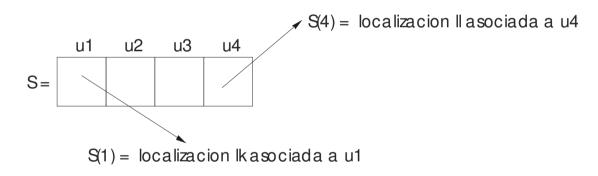
- La matriz D contiene las distancias existentes entre diferentes salas
- La matriz F recoge el número medio de pacientes que pasan de una unidad a otra cada hora (por ejemplo, podrían ser las medias mensuales, medias anuales, totales anuales, ...)

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 12 & 6 & 4 \\ 12 & 0 & 6 & 8 \\ 6 & 6 & 0 & 7 \\ 4 & 8 & 7 & 0 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 12 & 6 & 4 \\ 12 & 0 & 6 & 8 \\ 6 & 6 & 0 & 7 \\ 4 & 8 & 7 & 0 \end{pmatrix} \qquad F = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 8 & 3 \\ 3 & 0 & 2 & 4 \\ 8 & 2 & 0 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$



- Las soluciones son permutaciones del conjunto  $N=\{1, 2, 3, 4\}$
- Para entenderlo mejor, podemos pensar en su representación en forma de vector permutación: las posiciones se corresponden con las unidades y el contenido de las mismas con las localizaciones (salas del hospital) en la que se sitúan las unidades correspondientes:



- En este caso, usamos una permutación para representar una asignación, al contrario que en el TSP en el que representa un orden
- Esto nos permite verificar de forma sencilla las restricciones del problema, lo que sería más complicado en otras representaciones como una matriz binaria

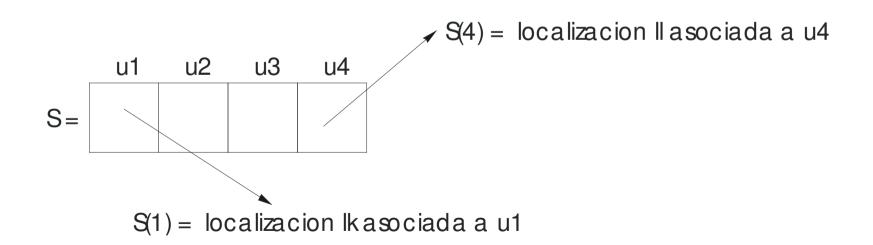
Así, la solución S={3,4,1,2} representa la siguiente distribución de asignaciones:

$$u1 \leftrightarrow I3$$

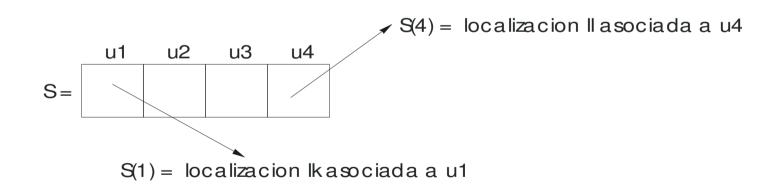
$$u2 \leftrightarrow I4$$

$$u3 \leftrightarrow I1$$

$$u4 \leftrightarrow l2$$



• cuyo costo C(S) es:



 Cada asignación unidad-localización influye globalmente en la red, es decir, en todas las transferencias que se efectúan desde la unidad en cuestión

### Otras Aplicaciones

- Diseño óptimo de teclados para distintos idiomas en función de la frecuencia de pares de letras. Unid: letras; loc: teclas; flujo: frecuencia de pares de letras; dist: distancia entre las teclas en el teclado Burkard, R.E. and J. Offerman (1977). Entwurf von Schreibmaschinentastaturen mittels quadratischer zuordnungsprobleme. Z. Operations Research 21, B121-B123
- Cableado óptimo de placas madre: localización de componentes para reducir el cableado. Unid: componentes; loc: posición en la placa; flujo: nº de cables conectando componentes; dist: distancia entre locs. Brixius, N.W. and K.M. Anstreicher (2001). The Steinberg Wiring Problem. In: The Sharpest Cut, The Impact of M. Padberg and His Work, M. Grötschel, ed., SIAM, 2004, 293-307
- Asignación óptima de directores a oficinas: Unid: directores; loc: oficinas; flujo: frecuencia de interacciones entre directores; dist: distancia entre oficinas

Hanan, M. and J.M. Kurtzberg (1972). A Review of the Placement and Quadratic Assignment Problems, SIAM Review 14, 324-342

### Otras Aplicaciones

- Diseño de turbinas: Localización de las aspas de la turbina (con masa ligeramente distinta por la fabricación) de modo que el centro de gravedad coincida con el eje del motor
  - J. Mosevich (1986). Balancing hydraulic turbine runners--A discrete combinatorial optimization problem, European Journal of Operational Research 26(2), 202-204

#### Diseño óptimo de campus

J.W. Dickey, J.W. Hopkins (1972). Campus building arrangement using TOPAZ, Transportation Research 6, 59–68

#### Diseño de parques forestales

Bos, J. (1993). A quadratic assignment problem solved by simulated annealing. Journal of Environmental Management, 37(2), 127-145

#### Diseño de líneas de producción

Geoffrion, A.M., and G.W. Graves (1976). Scheduling Parallel Production Lines with Changeover Costs: Practical Applications of a Quadratic Assignment/LP Approach. Operations Research 24, 595-610

 La complejidad del problema ha provocado que se hayan aplicado muchos algoritmos aproximados para su resolución

Analizando la función objetivo podemos determinar que una buena fórmula heurística para resolver el problema es:

Asociar unidades de gran flujo con localizaciones céntricas en la red y viceversa

Podemos construir un algoritmo greedy usando esta heurística mediante dos vectores, el potencial de flujo y el de distancia:

$$\hat{f}_{i} = \sum_{j=1}^{n} f_{ij}$$
;  $i = 1, ..., n$ 

$$\hat{d}_{k} = \sum_{l=1}^{n} d_{kl}$$
;  $k = 1, ..., n$ 

• Cuanto mayor sea  $\hat{f}_i$ , más importante es la unidad en el intercambio de flujos y cuanto menor sea  $\hat{d}_k$ , más céntrica es la localización. Por tanto:

el algoritmo irá seleccionando la unidad i libre con mayor  $\hat{f}_i$  y le asignará la localización k libre con menor  $\hat{d}_k$ 

### Algoritmo Greedy-QAP

- 1. Calcular los potenciales  $\hat{f}_i$  y  $\hat{d}_k$ .
- 2.  $S \leftarrow \emptyset$ .
- 3. Repetir para x = 1 hasta n (asignaciones l a n):
  - 3.1. Escoger la unidad  $u_i$  no asignada aún  $(u_i \notin S)$  con mayor valor de  $\hat{f}_i$ .
  - 3.2. Escoger la localización  $l_k$  no asignada aún  $(l_k \notin S)$  con menor valor de  $\hat{d}_k$ .
  - 3.3.  $\mathbf{a}_{\mathbf{x}} = (u_i, l_k)$ .  $S \leftarrow S \cup \mathbf{a}_{\mathbf{x}}$ .
- 4. Calcular el costo de *S*, *C*(*S*). Devolver *S* y *C*(*S*).

Si aplicamos el algoritmo greedy propuesto al ejemplo del hospital obtenemos los siguientes resultados:

$$\hat{f} = \begin{bmatrix} 14 \\ 9 \\ 15 \\ 12 \end{bmatrix} \qquad \qquad \hat{d} = \begin{bmatrix} 22 \\ 26 \\ 17 \\ 19 \end{bmatrix}$$

$$S = \{(u_3, l_3), (u_1, l_4), (u_4, l_1), (u_2, l_2)\}\$$

$$C(S) = f_{12} \cdot d_{42} + f_{13} \cdot d_{43} + f_{14} \cdot d_{41}$$

$$+ f_{21} \cdot d_{24} + f_{23} \cdot d_{23} + f_{24} \cdot d_{21}$$

$$+ f_{31} \cdot d_{34} + f_{32} \cdot d_{32} + f_{34} \cdot d_{31}$$

$$+ f_{41} \cdot d_{14} + f_{42} \cdot d_{12} + f_{43} \cdot d_{13} = 3 \cdot 4 + 4 \cdot 12 + 5 \cdot 6 = 364$$

### Búsquedas por Trayectorias Simples

■ **Representación**: Problema de asignación: una permutación  $\pi$ =[ $\pi$ (1), ...,  $\pi$ (n)] en el que las posiciones del vector i=1,...,n representan las unidades y los valores  $\pi$ (1), ...,  $\pi$ (n) contenidos en ellas las localizaciones. Permite verificar las restricciones

■ Operador de vecino de intercambio y su entorno: El entorno de una solución  $\pi$  está formado por las soluciones accesibles desde ella a través de un movimiento de intercambio

Dada una solución (asignación de unidades a localizaciones) se escogen dos unidades distintas y se intercambia la localización asignada a cada una de ellas  $(Int(\pi,i,j))$ :

$$\pi = [\pi(1), ..., \pi(i), ..., \pi(j), ..., \pi(n)]$$

$$\pi' = [\pi(1), ..., \pi(j), ..., \pi(i), ..., \pi(n)]$$

### Búsquedas por Trayectorias Simples

- $Int(\pi,i,j)$  verifica las restricciones, si la solución original  $\pi$  es factible siempre genera una solución vecina  $\pi'$  factible
- Su aplicación provoca que el tamaño del entorno sea:

$$\mid E(\pi) \mid = \frac{n \cdot (n-1)}{2}$$

■ Las instancias del QAP no suelen ser demasiado grandes y el cálculo factorizado del coste de una solución se realiza de forma eficiente (O(n)), permitiendo explorar el entorno completo

Aún así, dicha exploración requería  $O(n^3)$  por lo que es recomendable utilizar una estrategia avanzada, considerando una modalidad de lista de candidatos y seleccionado primero los movimientos más prometedores

18

### Búsqueda Local para el QAP

Stützle, Iterated local search for the quadratic assignment problem, European Journal of Operational Research 174 (2006) 1519–1539

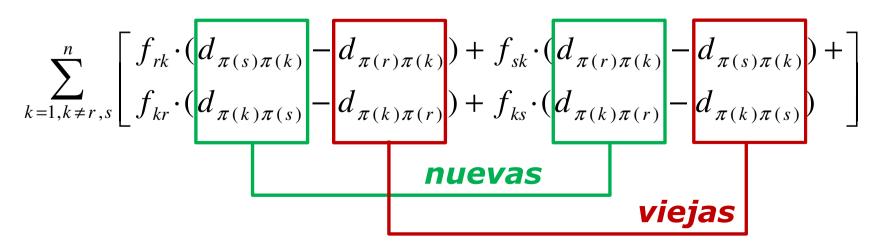
- Algoritmo de búsqueda local del primer mejor: en cuanto se genera una solución vecina que mejora a la actual, se aplica el movimiento y se pasa a la siguiente iteración
  - Se detiene la búsqueda cuando se ha explorado el vecindario completo sin obtener mejora
- Se considera una factorización para calcular el coste de  $\pi'$  a partir del de  $\pi$  considerando sólo los cambios realizados por el movimiento de intercambio
- Se usa la técnica don't look bits para la lista de candidatos
  - Se emplea un vector binario de tamaño n que asocia un bit a cada unidad
  - Si dicho bit está activado en la iteración actual, no se considera ningún movimiento "que arranque" de la unidad en cuestión

# BL-QAP: Factorización del Movimiento de Intercambio

Sea  $C(\pi)$  el coste de la solución original  $\pi$ . Para generar  $\pi'$ , el operador de vecino  $Int(\pi,r,s)$  escoge dos unidades r y s e intercambia sus localizaciones  $\pi(r)$  y  $\pi(s)$ :  $\pi=[\pi(1), ..., \pi(r), ..., \pi(s), ..., \pi(n)]$ 

$$\mathsf{t} \leftarrow \pi(r) \; ; \; \pi(r) \leftarrow \pi(s) \; ; \; \pi(s) \leftarrow \mathsf{t} \quad \Rightarrow \quad \pi' = [\pi(1), \, ..., \, \pi(s), \, ..., \, \pi(r), \, ..., \, \pi(n)]$$

- Por lo tanto, quedan afectados 2·n sumandos, los relacionados con las dos viejas y las dos nuevas localizaciones de las dos unidades alteradas
- El coste del movimiento (la diferencia de costes entre las dos soluciones)  $\Delta C(\pi,r,s)=C(\pi')-C(\pi)$  se puede factorizar como:



# BL-QAP: Factorización del Movimiento de Intercambio

- Si  $\Delta C(\pi,r,s)$  es negativo ( $\Delta C(\pi,r,s)$ <0), la solución vecina  $\pi'$  es mejor que la actual  $\pi$  (el QAP es un problema de minimización) y se acepta. Si no, se descarta y se genera otro vecino
- El pseudocódigo de la BL del Primer Mejor del Tema 2 de Teoría quedaría:

### Repetir

```
\pi' \leftarrow \mathsf{GENERA\_VECINO}(\pi_{\mathsf{act}});
Hasta (\Delta C(\pi, r, s) < 0) O
(se ha generado \mathsf{E}(\pi_{\mathsf{act}}) al completo)
```

■ El coste  $C(\pi')$  de la nueva solución vecina es:  $C(\pi') = C(\pi) + \Delta C(\pi)$ . Sólo es necesario calcularlo para la solución vecina aceptada

# BL-QAP: Definición de la Lista de Candidatos: *Don't Look Bits*

- Técnica que permite focalizar la BL en una zona del espacio de búsqueda en la que potencialmente puede ocurrir algo
- Reduce significativamente el tiempo de ejecución con una reducción muy pequeña de la eficacia de la BL
- Sólo es aplicable con la BL del primer mejor
- En la primera iteración, todos los bits están a 0, es decir, todos las unidades están activadas en un bucle externo y todos sus movimientos pueden ser considerados para explorar el entorno:
  - Si tras probar todos los movimientos asociados a esa unidad, ninguno provoca una mejora, se pone su bit a 1 para desactivarla en el futuro
  - Si una unidad está implicada en un movimiento que genera una solución vecina con mejor coste, se pone su bit a 0 para reactivarla

# BL-QAP: Definición de la Lista de Candidatos: *Don't Look Bits*

```
procedure iterative improvement
   for i = 1 to n do
     if dlb[i] = 0 then
       improve flag \leftarrow false
       for j = 1 to n do
          CheckMove(i, j)
          if move improves then
              ApplyMove(i, j); dlb[i] \leftarrow 0, dlb[j] \leftarrow 0
              improve flag \leftarrow true
       endfor
       if improve flag = false then dlb[i] \leftarrow 1
   end
end iterative improvement
```

## Enfriamiento Simulado para el QAP

- Representación: permutación de asignación, igual que en la BL
- Operador de generación de vecinos: intercambio, igual que en la BL
- Exploración del vecindario: En cada iteración del bucle interno se genera una única solución vecina, de forma aleatoria, y se compara con la actual. No se usa don't look bits
- Esquema de enfriamiento: esquema de Cauchy modificado
- Condición de enfriamiento L(T): cuando se genere un número máximo de soluciones vecinas, máx\_vecinos, o cuando se acepte un número máximo de los vecinos generados, máx\_éxitos
- Condición de parada: cuando se alcance un número máximo de iteraciones o cuando el número de éxitos en el enfriamiento actual sea 0

Skorin-Kapov, Tabu Search Applied to the Quadratic Assignment Problem, ORSA Journal on Computing 2:1 (1990) 33-40

- Representación: permutación de asignación, igual que en la BL
- Operador de generación de vecinos: intercambio, igual que en la BL
- Lista de valores de atributos y posiciones tabú: Cuando se acepta una nueva solución, se almacena información sobre ella en la lista tabú

Se guardan tanto las **localizaciones intercambiadas como las posiciones que ocupan** (es decir, las unidades a las pasan a estar asignadas): (i, j, Pos(i), Pos(j))

No se permiten futuros intercambios que den lugar a que la localización i vuelva a ocupar la posición (estar asignada a la unidad) Pos(i) Y/O la localización j la posición Pos(j)

La lista tabú es un vector de registros con esos cuatro valores

#### Ejemplo:

$$\pi_{act} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ \pi_{act} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 3 & 8 & 5 & 7 & 6 \end{pmatrix}$$
 $\pi' = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 & 3 & 8 & 4 & 7 & 6 \end{pmatrix}$ 

 $LT \leftarrow LT + \{(4,5,6,3)\}$  (si está llena, eliminar el registro más antiguo)

Para decidir si un movimiento es tabú activo, hay que tener en cuenta que (i, j, Pos(i), Pos(j)) = (j, i, Pos(j), Pos(i))

 Estrategia de selección de vecino: Examinar un número de soluciones vecinas generadas aleatoriamente y escoger la mejor que verifique los criterios tabú o que no los verifique y supere el criterio de aspiración

 Criterio de aspiración: Tener menor coste que la mejor solución obtenida hasta el momento

- Estrategias de reinicialización:
  - Generar una solución aleatoria y continuar el algoritmo a partir de ella (diversificación)
  - Volver a la mejor solución obtenida hasta el momento y continuar el algoritmo a partir de ella (intensificación)
  - Generar una nueva solución poco frecuente a partir de la memoria a largo plazo y continuar el algoritmo a partir de ella (diversificación controlada)

Memoria a largo plazo: Se usa una matriz frec de tamaño nxn que almacena el número de veces que se ha producido cada asignación unidad-localización en las soluciones aceptadas durante la búsqueda

- Para reinicializar con diversidad, se van realizando una a una las asignaciones que se dieron con menor frecuencia en el pasado:
  - Hacer  $U \leftarrow \{1,...,n\}$ ,  $L \leftarrow \{1,...,n\}$
  - Repetir n veces
    - Sea  $(u,l) \in U \times L$  tal que frec $[u,l] \leq$  frec[i,j],  $\forall i \in U$ ,  $\forall j \in L$
    - Hacer  $S[u] \leftarrow I$
    - Hacer *U*←*U*-{*u*} y *L*←*L*-{*l*}

- Se realiza una reinicialización cuando transcurran un cierto número de iteraciones sin mejorar la mejor solución obtenida hasta el momento en la ejecución del algoritmo (mejor global)
- Para realizar una reinicialización, se escoge una de las tres opciones según la siguiente distribución de probabilidades:
  - 0,25: Nueva solución actual aleatoria
  - 0,25: Volver a la mejor solución generada
  - 0,50: Solución poco frecuente a partir de la memoria a largo plazo
- Independientemente del tipo de reinicialización realizada, se modifica el tamaño de la lista tabú para provocar un cambio más efectivo en el comportamiento del algoritmo. El tamaño de cada lista se incrementa o decrementa en un 50% (modificación sobre el tamaño actual)
- Tras la reinicialización, la lista de corto plazo se inicializa a cero, mientras que la de largo plazo no se modifica

### La Biblioteca QAPLIB

La QAPLIB es una biblioteca que contiene distintas instancias del QAP llevando un registro de las mejores soluciones obtenidas hasta el momento para las mismas y de las cotas teóricas de la calidad de la mejor solución que se puede obtener

Es accesible en la Web en las direcciones siguientes:

http://www.opt.math.tu-graz.ac.at/qaplib (hasta Feb. 2002)

http://www.seas.upenn.edu/qaplib/ (hasta la actualidad)

 En dicha dirección pueden encontrarse tanto los datos como las soluciones de distintas instancias del problema, relacionadas con diferentes aplicaciones

### La Biblioteca QAPLIB

El formato de los ficheros de datos es:



donde n es el tamaño del problema y A y B son, respectivamente las matrices de flujo y distancia, o distancia y flujo, dependiendo del caso concreto del problema

El formato de los ficheros de soluciones (óptimas o mejores conocidas) es:

donde *n* es el tamaño del problema, *sol* es el coste de la solución y *p* es la permutación correspondiente

31

### La Biblioteca QAPLIB

■ La siguiente tabla es un ejemplo de la información que proporciona la QAPLIB:

	name	n	feas.sol.	permutation/bound o	ap
	Tai12a	12	224416 (OPT)	(8,1,6,2,11,10,3,5,9,7,12,4)	
	Tai12b	12	39464925 (OPT)	(9,4,6,3,11,7,12,2,8,10,1,5)	
	Tai15a	15	388214 (OPT)	(5,10,4,13,2,9,1,11,12,14,7,	15, 3, 8, 6)
	Tai15b	15	51765268 (OPT)	(1,9,4,6,8,15,7,11,3,5,2,14,	13, 12, 10)
	Tai17a	17	<u>491812</u> (OPT)	(12, 2, 6, 7, 4, 8, 14, 5, 11, 3, 16, 1	3,17,9,1,10,15)
	Tai20a	20	703482 (OPT)	(10, 9, 12, 20, 19, 3, 14, 6, 17, 11,	5,7,15,16,18,2,4,8,13,1)
*	Tai20b	20	122455319 (OPT)	(8,16,14,17,4,11,3,19,7,9,1,	15, 6, 13, 10, 2, 5, 20, 18, 12)
*	Tai25a	25	1167256 (OPT)	(9, 4, 6, 11, 5, 1, 15, 10, 14, 3, 17,	12, 19, 18, 23, 8, 21, 2, 22, 7, 16, 20, 24, 25, 13)
*	Tai25b	25	344355646 (OPT)	(4,15,10,9,13,5,25,19,7,3,17	,6,18,20,16,2,22,23,8,11,21,24,14,12,1)
	Tai30a	30	1818146 (Ro-TS)	1706855 (L&P) 6	.12 %
*	Tai30b	30	637117113 (OPT)	(4 8 11 15 17 20 21 5 14 30	2 13 6 29 10 26 27 24 28 22 12 9 7 23 19
	Tai35a	35	2422002 (Ro-TS)	2216627 (L&P) 8	,48 %

## Metaheurísticas

## Seminario 2.a. Problemas de optimización con técnicas basadas en trayectorias simples

- 1. Problema de Asignación Cuadrática (QAP)
- 2. Problema de la Selección de Características
  - Definición del Problema de Clasificación
  - Ejemplo de Clasificador: k-NN
  - Definición del Problema de Selección de Características
  - Representaciones
  - Solución Greedy
  - Búsquedas por Trayectorias Simples
  - Bases de Datos a Utilizar

### Definición del Problema de Clasificación

Disponemos de una muestra de objetos ya clasificados  $w_i,...,w_n$ , representados en función de sus valores en una serie de atributos:

$$w_i$$
 tiene asociado el vector  $(x_1(w_i),...,x_n(w_i))$ 

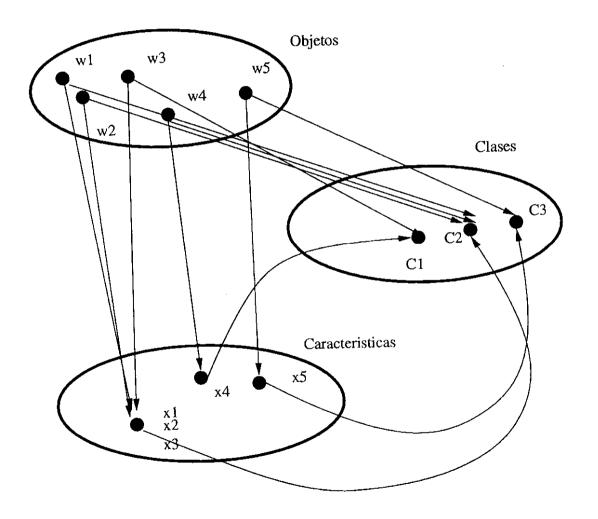
Cada objeto pertenece a una de las clases existentes  $\{C_1,...,C_M\}$ 

## OBJETIVO: Obtener un sistema que permita clasificar dichos objetos de modo automático

$$\begin{aligned} w_1 &= (x_1(w_1), \dots, x_n(w_1)) & \to & C_{i_1} \\ & \vdots & & \vdots & i_j \in \{1, \dots, M\}, \ j \in \{1, \dots, k\} \\ w_k &= (x_1(w_k), \dots, x_n(w_k)) & \to & C_{i_k} \end{aligned}$$

### Definición del Problema de Clasificación

El problema fundamental de la clasificación está directamente relacionado con la separabilidad de las clases



### Definición del Problema de Clasificación

### Concepto de aprendizaje supervisado en clasificación

- Se conocen las clases existentes en el problema
- Se conoce la clase concreta a la que pertenece cada objeto del conjunto de datos

Existen una gran cantidad de técnicas para el aprendizaje supervisado de Sistemas de Clasificación:

- Técnicas estadísticas: k vecinos más cercanos, discriminadores bayesianos, etc...
- Árboles de clasificación, Sistemas basados en reglas,
   Redes Neuronales, Máquinas de Soporte Vectorial, ...

### **Ejemplo:** Diseño de un Clasificador para la flor del Iris

- Problema simple muy conocido: clasificación de lirios
- Tres clases de lirios: setosa, versicolor y virgínica
- Cuatro atributos: longitud y anchura de pétalo y sépalo, respectivamente
- 150 ejemplos, 50 de cada clase
- Disponible en <a href="http://www.ics.uci.edu/~mlearn/MLRepository.html">http://www.ics.uci.edu/~mlearn/MLRepository.html</a>



setosa

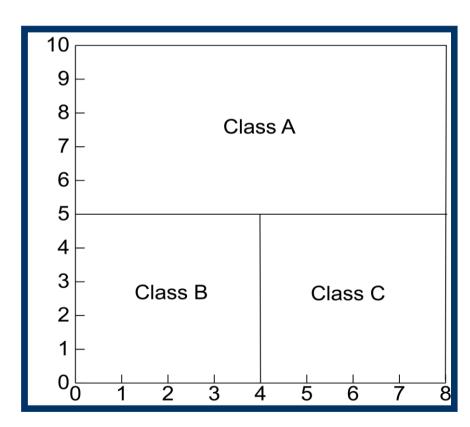


versicolor



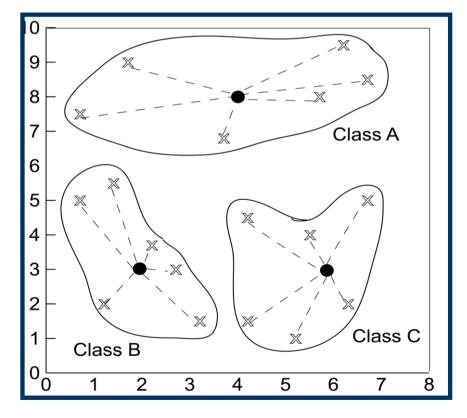
virgínica

# Ejemplos de clasificación sobre clases definidas: Basada en particiones y en distancias



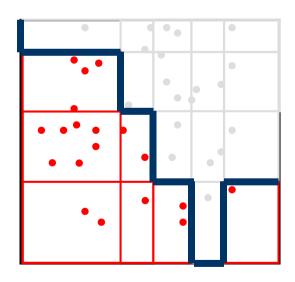
Basado en Particiones

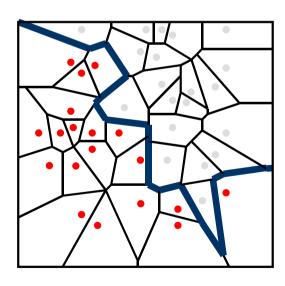
#### Basado en Distancias

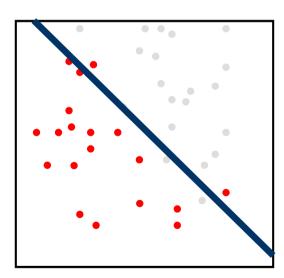


### Ejemplos de clasificación sobre clases definidas

- Reglas intervalares
- distancias
- Basado en
   Clasificador lineal







Para diseñar un clasificador, son necesarias dos tareas: Aprendizaje y Validación

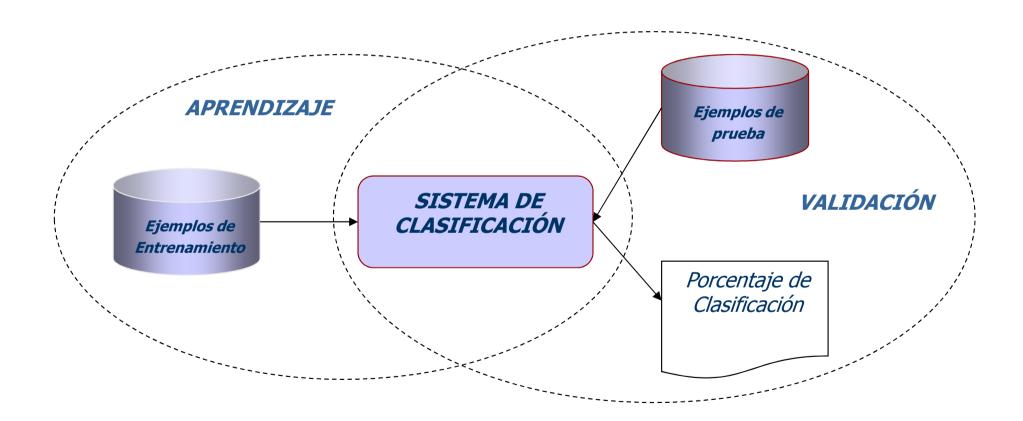
El conjunto de ejemplos se divide en dos subconjuntos:

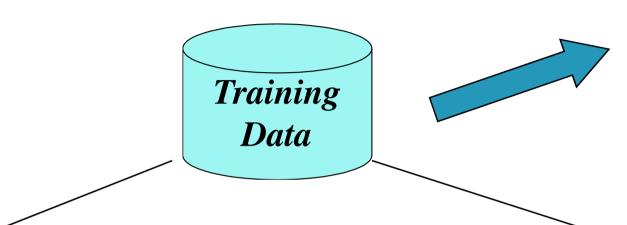
- Entrenamiento: Utilizado para aprender el clasificador
- Prueba: Se usa para validarlo. Se calcula el porcentaje de clasificación sobre los ejemplos de este conjunto (desconocidos en la tarea de aprendizaje) para conocer su poder de generalización

Para mayor seguridad, se suele hacer varias particiones entrenamiento-prueba

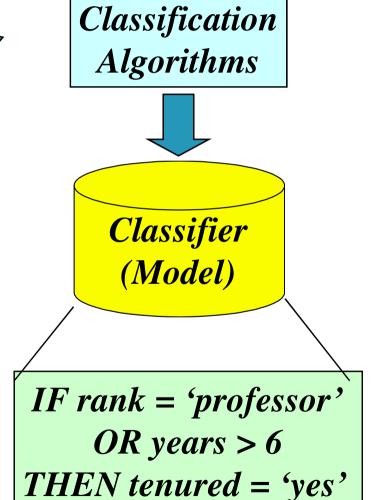
Para cada una, se diseña un clasificador distinto usando los ejemplos de entrenamiento y se valida con los de prueba

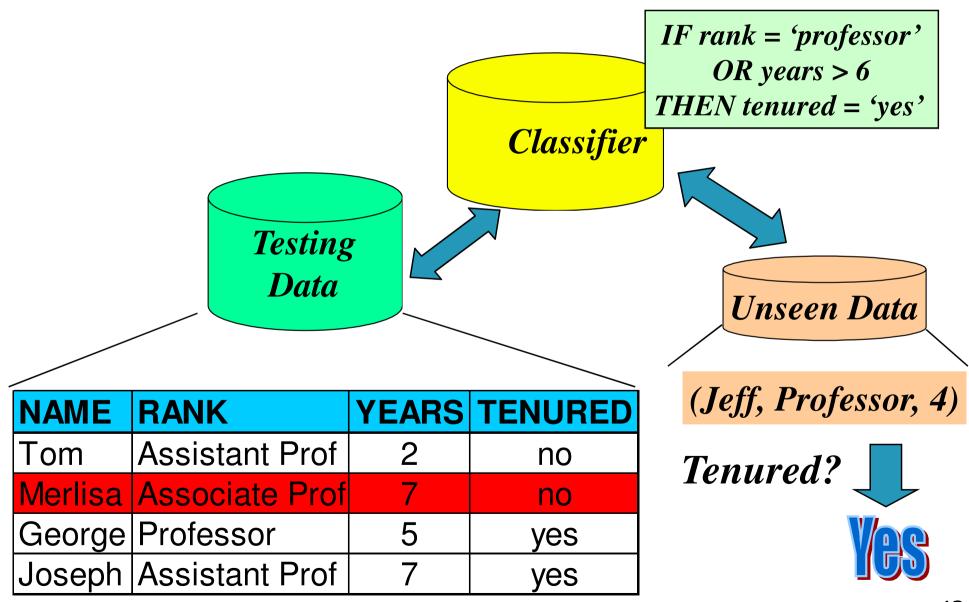
### Esquema de aprendizaje en clasificación





NAME	RANK	YEARS	TENURED
Mike	Assistant Prof	3	no
Mary	Assistant Prof	7	yes
Bill	Professor	2	yes
Jim	Associate Prof	7	yes
Dave	Assistant Prof	6	no
Anne	Associate Prof	3	no



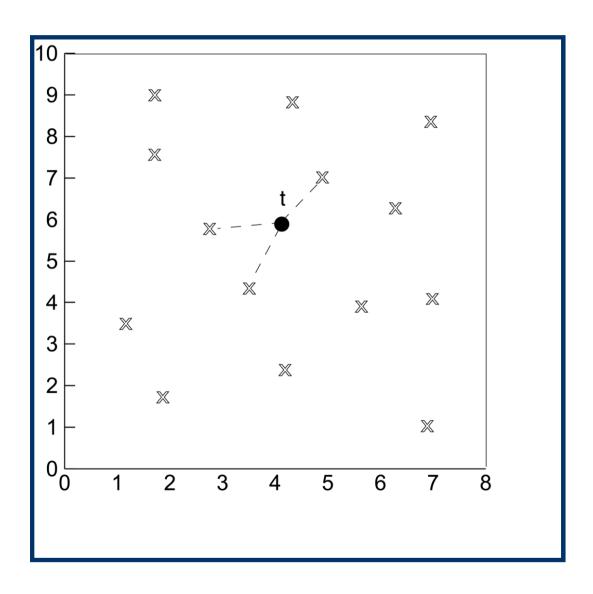


Nosotros aplicaremos la técnica de validación llamada 5×2-cross validation (validación cruzada)

- Usaremos 5 particiones distintas de los datos al 50%
- Aprenderemos un clasificador con la mitad de los datos y lo validaremos con la otra mitad. Luego repetiremos el proceso a la inversa
- Por tanto, de cada partición obtendremos dos valores de porcentaje de clasificación en el conjunto de prueba
- La calidad del método de clasificación se medirá con un único valor, correspondiente a la media de los 10 porcentajes de clasificación (2 de cada partición)

El k-NN (k vecinos más cercanos) es uno de los clasificadores más utilizados por su simplicidad

- El proceso de aprendizaje de este clasificador consiste en almacenar una tabla con los ejemplos disponibles, junto a la clase asociada a cada uno de ellos
- ii. Dado un nuevo ejemplo a clasificar, se calcula su distancia (usaremos la Euclídea) a los n ejemplos existentes en la tabla y se escogen los k más cercanos
- iii. El nuevo ejemplo se clasifica según la clase mayoritaria de esos *k* ejemplos más cercanos
- iv. El caso más simple es cuando k = 1 (1-NN)



k = 3

Dado el siguiente conjunto con 4 instancias, 3 atributos y 2 clases:

 $x_1$ : 0.4 0.8 0.2 positiva

x<sub>2</sub>: 0.2 0.7 0.9 positiva

 $x_3$ : 0.9 0.8 0.9 negativa

 $x_4$ : 0.8 0.1 0.0 negativa

Calculamos la distancia del ejemplo con todos los de la tabla: Queremos clasificar con 1-NN el ejemplo:  $x_q$ : 0.7 0.2 0.1

$$d(x_{1}, x_{q}) = \sqrt{(0.4 - 0.7)^{2} + (0.8 - 0.2)^{2} + (0.2 - 0.1)^{2}} = 0.678$$

$$d(x_{2}, x_{q}) = \sqrt{(0.2 - 0.7)^{2} + (0.7 - 0.2)^{2} + (0.9 - 0.1)^{2}} = 1.068$$

$$d(x_{3}, x_{q}) = \sqrt{(0.9 - 0.7)^{2} + (0.8 - 0.2)^{2} + (0.9 - 0.1)^{2}} = 1.020$$

$$d(x_{4}, x_{q}) = \sqrt{(0.8 - 0.7)^{2} + (0.1 - 0.2)^{2} + (0.0 - 0.1)^{2}} = 0.173$$

Por tanto, el ejemplo se clasificará con respecto a la clase negativa

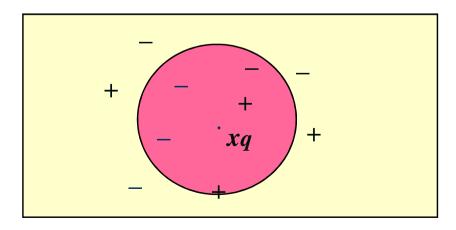
IMPORTANTE: Los atributos deben estar normalizados en [0,1] para no priorizar unos sobre otros

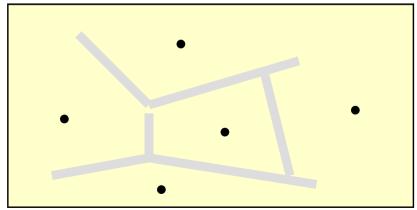
Para normalizar los datos, hay que saber el intervalo de dominio de cada uno de los atributos

Dado un valor  $x_j$  perteneciente al atributo j del ejemplo x y sabiendo que el dominio del atributo j es  $[Min_j, Max_j]$ , el valor normalizado de  $x_j$  es:

$$x_j^N = \frac{x_j - Min_j}{Max_j - Min_j}$$

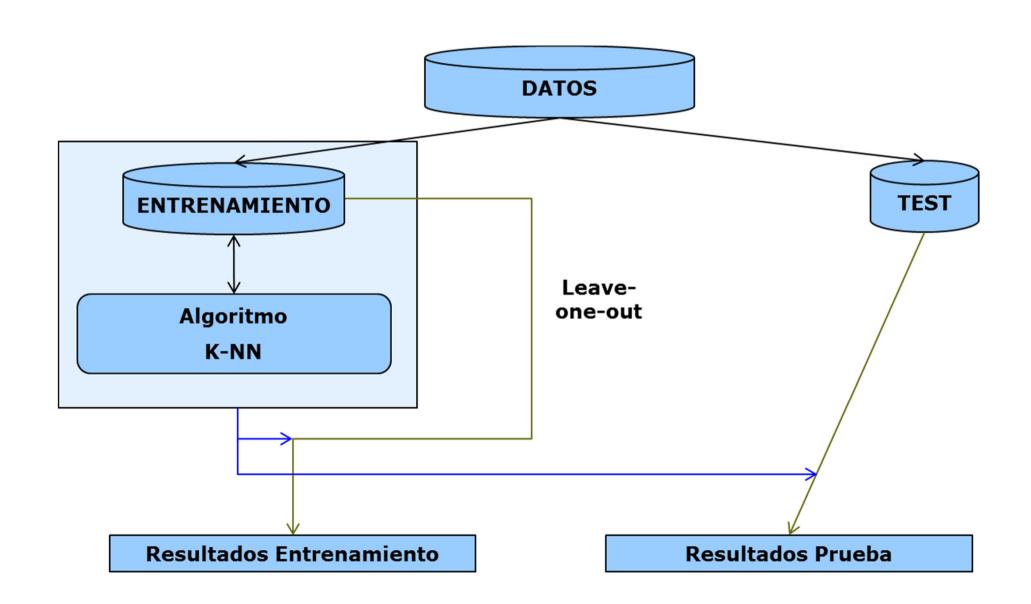
- El k-NN devuelve la clase más repetida de entre los k ejemplos de entrenamiento más cercanos a  $x_a$
- Diagrama de Voronoi: superficie de decisión inducida por 1-NN para un conjunto dado de ejemplos de entrenamiento



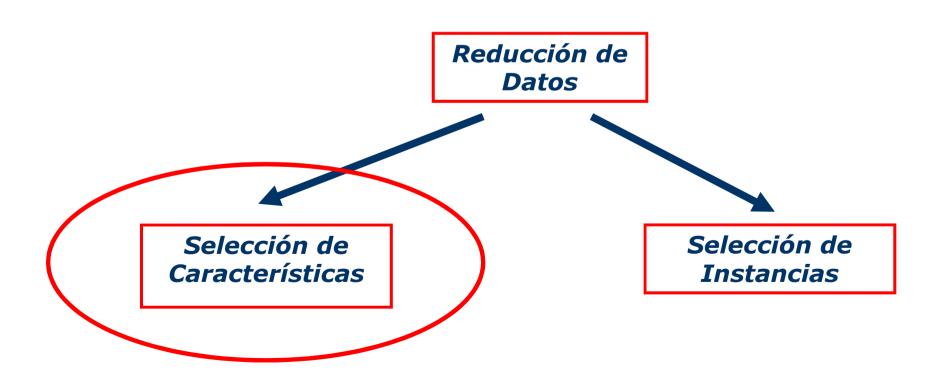


### Cálculo del Porcentaje de Entrenamiento en 1-NN:

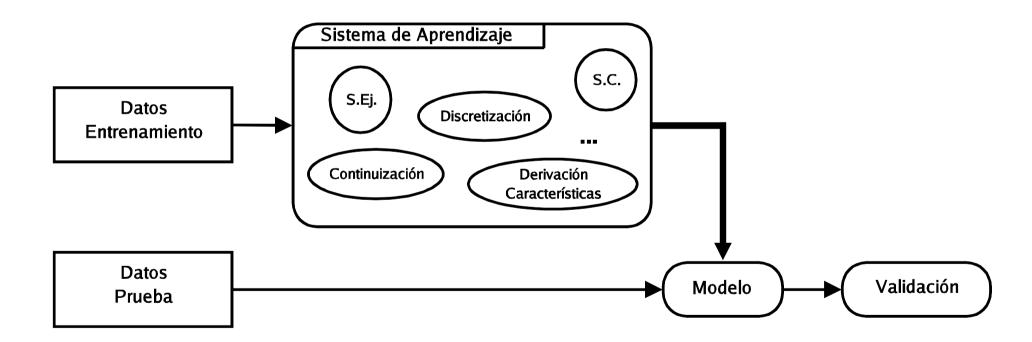
- En el algoritmo 1-NN, no es posible calcular el porcentaje de acierto sobre el conjunto de entrenamiento de un modo directo.
- Si intentásemos clasificar un ejemplo del conjunto de entrenamiento directamente con el clasificador 1-NN, el ejemplo más cercano sería siempre él mismo, con lo que se obtendría un 100% de acierto.
- Para remediar esto, se debe seguir el procedimiento denominado dejar uno fuera ("leave one out").
- Para clasificar cada ejemplo del conjunto de entrenamiento, se busca el ejemplo más cercano sin considerar a él mismo.
- Por lo demás, se opera igual: cada vez que la clase devuelta coincida con la clase real del ejemplo, se contabiliza un acierto.
- El porcentaje final de acierto es el número de aciertos entre el número total de ejemplos.



A veces el problema de clasificación es demasiado complejo y necesita ser procesado previamente para ser tratable → **Reducción de datos** 

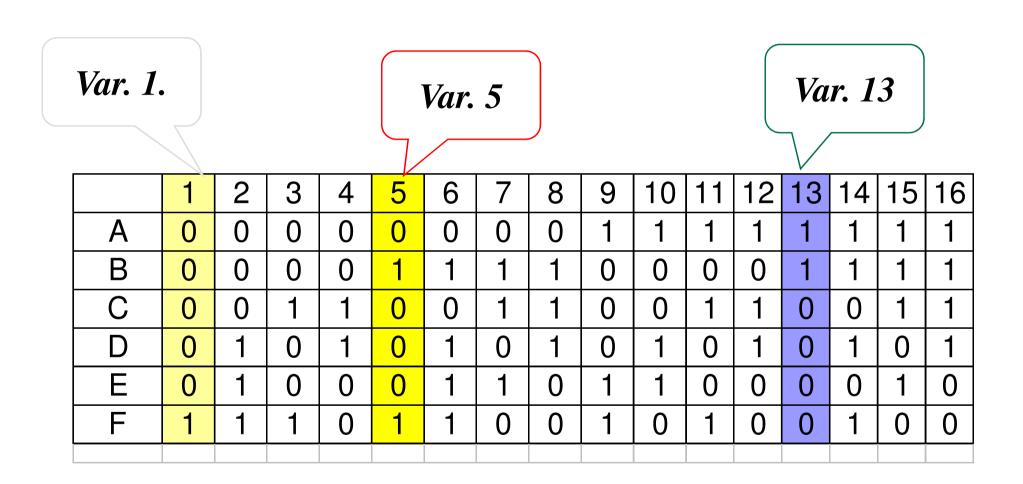


### Proceso de aprendizaje



Situación **ideal** en construcción de clasificadores: disponer del máximo de información → el mayor número de características

- Inconvenientes:
  - Características redundantes
  - Características irrelevantes
  - Costes en captación, almacenamiento, eficiencia



# **Ejemplo**

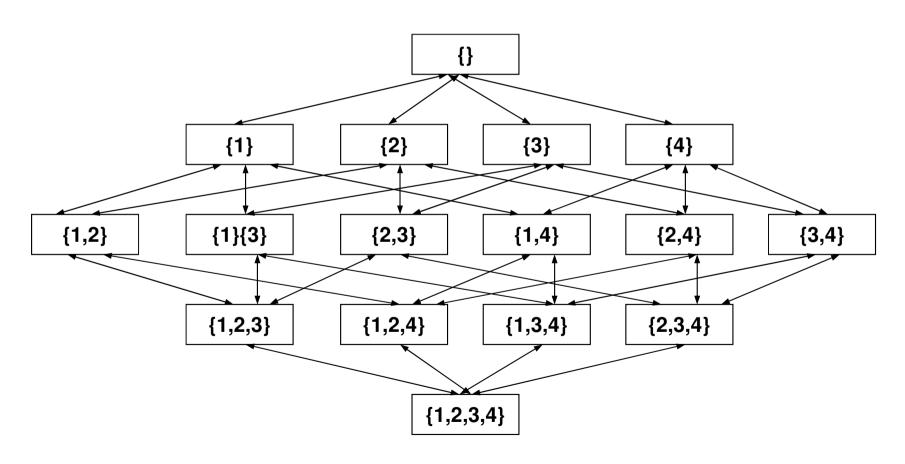
# **Ejemplo**

F =	$\{f_1$	$f_2$	$f_3$	• • •	$f_n \big\}$	Cl	_	S =	$\{f_1$	$f_3\}$	Cl
$e_1$	8.1	Sí	ESO	• • •	Casad.	A		$\overline{e_1}$	8.1	ESO	A
$\overline{e_2}$	3.4	No	Diplom.		Divor.	В	$\prod_S$	$\overline{e_2}$	3.4	Diplom.	В
$e_3$	-2.5	No	Doctor	• • •	Solt.	A		$e_3$	-2.5	Doctor	A
			•							•	
$e_n$	-1.0	No	Ingeni.	• • •	Viud.	C		$e_n$	-1.0	Ingeni.	C

# **Objetivo:**

- Seleccionar un subconjunto del conjunto total de características, de tal forma que los clasificadores que se construyan a partir de él sean mejores
- Existen distintos criterios para determinar cuándo el clasificador generado es mejor
- Es un problema de búsqueda en el espacio de todos los posibles subconjuntos de características
- Hay 2<sup>n</sup> posibles subconjuntos para n características. Es un problema NP-duro

# La selección de características (SC) se puede considerar como un problema de búsqueda:



# Ventajas de la SC:

- Eficiencia. El tiempo que se requiere para construir un clasificador depende del número de características
- Mejora en los resultados. Principio de la "navaja de Occam"
- Reducción de costes de adquisición y almacenamiento
- Permite aplicar técnicas de diseño de clasificadores que sufran de la "maldición de la dimensionalidad"
- Mejora la interpretabilidad

# Tipos de métodos de SC:

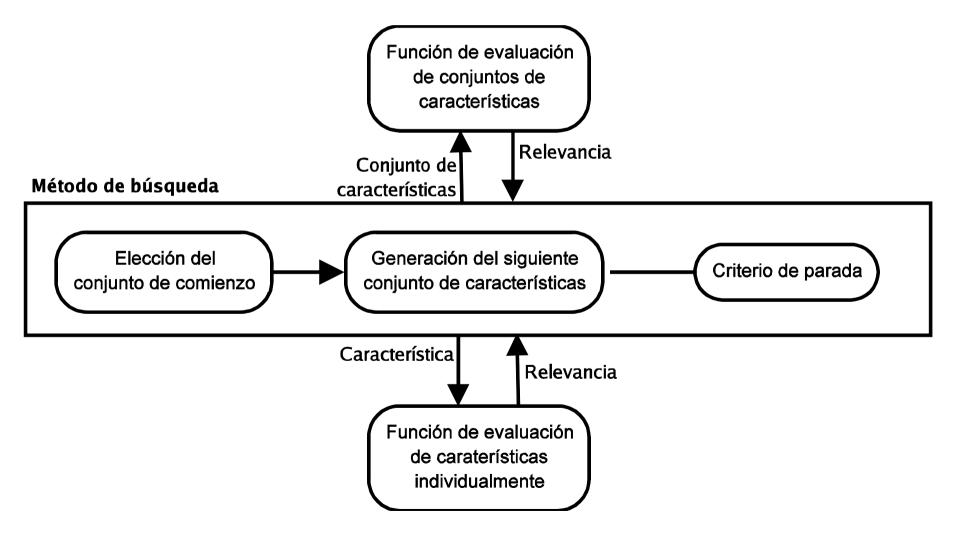
 Tipo filtro (filter). La SC es previa a la construcción del clasificador

Ej: métodos basados en información mutua

 Tipo envolvente (wrapper). La SC y la construcción del clasificador son etapas conjuntas

 Tipo incrustado (embedded). El método de diseño del clasificador realiza de forma implícita una SC
 Ej: árboles de clasificación

### Descomposición modular del problema de SC:



# Funciones de evaluación:

Medidas basadas en consistencia

Medidas basadas en Teoría de la Información

Medidas basadas en distancia

Medidas basadas en rendimiento de clasificadores

### Nuestra función de evaluación:

- Rendimiento promedio de un clasificador 3-NN (considerando k=3 vecinos) aplicando validación sobre el conjunto T de datos: tasa\_clas
- tasa\_clas mide el porcentaje de instancias correctamente clasificadas pertenecientes a T:

$$tasa\_clas = 100 \cdot \frac{\text{n° instancias bien clasificadas de } T}{\text{n° instancias en } T}$$

 El objetivo es obtener el subconjunto de características que maximiza esta función

- Hay varias representaciones para el problema de SC: binaria, entera, permutación
- Su uso puede depender de si se especifica el número de características deseado a priori o si lo aprende el método
- Cuando no se especifica, en un problema con n características existen 2<sup>n</sup> posibles subconjuntos de características
- En caso de indicar un número de características m predefinido, el tamaño del espacio de búsqueda varía

### **1. Representación binaria:** Vector binario de tamaño *n*:

$$S = (f_1, f_2, ..., f_n), donde f_i \in \{0, 1\}$$

|--|

Un 1 en la posición  $f_i$  indica la selección de la característica en cuestión, un 0 su no selección

La representación binaria es adecuada para el aprendizaje del número de características. El tamaño del espacio es 2<sup>n</sup>

Si se desea extraer un número fijo, no es una buena opción porque requiere el manejo de restricciones. Una solución sólo es factible (válida) si tiene exactamente m 1's

2. Representación entera: Vector de tamaño m≤n con valores {1, ..., n} que indican el no. de la característica seleccionada:

$$S = (sel_1, sel_2, ..., sel_m),$$
 donde  $sel_i \in \{1, ..., n\}$ 

sel <sub>1</sub>	sel <sub>2</sub>		sel <sub>m-1</sub>	sel <sub>m</sub>
------------------	------------------	--	--------------------	------------------

Esta representación está más pensada para el caso en que se desee extraer un número de características concreto. El tamaño del espacio de búsqueda es el número combinatorio  $\binom{m}{n}$ 

Aún así, hay que manejar restricciones. Para que una solución sea factible, no puede tener características repetidas

Además, ies redundante! Hay m! vectores distintos que representan el mismo subconjunto de características  $\rightarrow$  El espacio de búsqueda es más grande que el espacio de soluciones real

3. Representación de orden: También es posible codificar una solución al problema de la SC con una permutación

Se tiene una permutación  $\pi$  de tamaño n. Las características seleccionadas son las primeras del orden definido:

$$S = \pi = (of_1, of_2, ..., of_n),$$
 donde  $of_i \in \{1, ..., n\}$ , sin repetidos

	of <sub>1</sub>	of <sub>2</sub>	 of <sub>n-1</sub>	of <sub>n</sub>
L				

El tamaño del espacio de búsqueda es n!

### Esta representación es muy flexible:

- Se puede usar con un número de características prefijado, escogiendo las m primeras
- Se puede usar para aprender el número de características considerando que cada permutación  $\pi$  codifica varias soluciones (una con la primera característica, otra con las dos primeras, ...)

A la hora de evaluar la solución, se decodificarían todas, se evaluarían y se asignaría a esa permutación  $\pi$  el mejor valor de función objetivo de todas

<u>En ambos casos, sigue siendo redundante. Distintas ordenaciones</u> <u>de las mismas características representan la misma selección</u>

# Métodos de búsqueda:

- Enumeración explicita (búsqueda completa)
  - Garantiza el óptimo
- Búsqueda secuencial
  - Método voraz (greedy) que parte de un conjunto vacío de características y va añadiendo de una en una (forward), o parte del conjunto total y va eliminando de una en una (backward)
- Búsqueda probabilística
  - Métodos MonteCarlo y Las Vegas
- Búsqueda con metaheurísticas

# Solución greedy

## Método Sequential Forward Selection (SFS):

- Parte del conjunto vacío de características
- En cada paso añade la característica más prometedora
- La más prometedora es la que produce una mayor ganancia en la función de evaluación con respecto al conjunto de características ya seleccionado
- El algoritmo para cuando ninguna de las características que quedan por seleccionar produce una mejora en la función de evaluación
- Usaremos la función de evaluación indicada, basada en el acierto de clasificación del k-NN con k=3

# Solución *greedy*

### **Algoritmo SFS:**

```
F \leftarrow \{f_1, ..., fn\}
S \leftarrow \emptyset
fin \leftarrow falso
Mientras (F \neq \emptyset y !fin)
    fp \leftarrow Característica\_más\_prometedora(F)
     Si\ S \cup \{fp\}\ mejora\ la\ solución\ actual\ S\ (f(S \cup \{fp\}) \ge f(S))
         S \leftarrow S \cup \{fp\}
     en otro caso
         fin \leftarrow verdad
     F \leftarrow F - \{fp\}
Devolver S
```

# Búsquedas por Trayectorias Simples

■ Representación binaria: Problema de selección: un vector binario  $s=(s_1, ..., s_n)$  en el que cada posición i representa una característica y su valor 0/1 indica si está o no seleccionada

No tiene restricciones al no exigir un número predeterminado de características

Operador de vecino de inversión y su entorno: El entorno de una solución s está formado por las soluciones accesibles desde ella a través de un movimiento de inversión Flip(s,i):

Dada una solución (subconjunto de características) se escoge una característica concreta *i* y se intercambia su selección (pasa a valer 1, si estaba a 0, o viceversa):

$$S=(S_1, ..., S_i, ..., S_n) \rightarrow S'=(S_1, ..., S'_i, ..., S_n)$$

### Búsquedas por Trayectorias Simples

- Flip(s,i) verifica las restricciones, si la solución original s es factible siempre genera una solución vecina s' factible
- Su aplicación provoca que el tamaño del entorno sea:

$$|E(s)| = n$$

 El problema de la SC no permite realizar un cálculo factorizado del coste de forma sencilla

Tampoco es fácil definir una preferencia entre las características para explorar el entorno. Podría considerarse alguna medida de cantidad de información para esta tarea

# Búsqueda Local para la SC

 Algoritmo de búsqueda local del primer mejor: en cuanto se genera una solución vecina que mejora a la actual, se aplica el movimiento y se pasa a la siguiente iteración

 Se detiene la búsqueda cuando se ha explorado el vecindario completo sin obtener mejora

No se considera ningún tipo de factorización ni ningún mecanismo específico de exploración del entorno, se estudian los vecinos por orden

## Enfriamiento Simulado para la SC

- Representación: vector binario, igual que en la BL
- Operador de generación de vecinos: inversión, igual que en la BL
- Exploración del vecindario: En cada iteración del bucle interno se genera una única solución vecina, de forma aleatoria, y se compara con la actual
- Esquema de enfriamiento: esquema de Cauchy modificado
- Condición de enfriamiento L(T): cuando se genere un número máximo de soluciones vecinas, máx\_vecinos, o cuando se acepte un número máximo de los vecinos generados, máx\_éxitos
- Condición de parada: cuando se alcance un número máximo de iteraciones o cuando el número de éxitos en el enfriamiento actual sea 0

# Búsqueda Tabú para la SC

- Representación: vector binario, igual que en la BL
- Operador de generación de vecinos: inversión, igual que en la BL
- Lista de valores de atributos y posiciones tabú: Cuando se acepta una nueva solución, se almacena información sobre ella en la lista tabú
  - Se guarda el **movimiento que generó la solución** (es decir, el índice de la característica de la que se alteró la selección): (*i*)

No se permiten futuros intercambios que provoquen que el estatus de seleccionada/no seleccionada de la característica *i* se vuelva a modificar

```
Ejemplo: 1 2 3 4 5 6 7 8 (0 1 <u>1</u> 0 0 1 1 0) (0 1 <u>0</u> 0 0 1 1 0)
```

 $LT = LT + {3}$  (si está llena, eliminar el registro más antiguo)

# Búsqueda Tabú para la SC

- Estrategia de selección de vecino: Examinar un número de soluciones vecinas generadas aleatoriamente y escoger la mejor que verifique los criterios tabú o que no los verifique y supere el criterio de aspiración
- Criterio de aspiración: Tener mayor coste que la mejor solución obtenida hasta el momento
- Estrategias de reinicialización:
  - Generar una solución aleatoria y continuar el algoritmo a partir de ella (diversificación)
  - Volver a la mejor solución obtenida hasta el momento y continuar el algoritmo a partir de ella (intensificación)
  - Generar una nueva solución poco frecuente a partir de la memoria a largo plazo y continuar a partir de ella (diversificación controlada)

# Búsqueda Tabú para la SC

 Memoria a largo plazo: Se usa un vector frec de tamaño n que almacena el número de veces que cada característica ha sido seleccionada en las soluciones aceptadas durante la búsqueda

Para reinicializar con diversidad, se genera una nueva solución inicial aleatoria con una probabilidad inversa a la de la memoria de frecuencias:

$$s_{i} = \begin{cases} 1, & \text{si } u_{\text{aleatorio}} < 1 - \frac{frec_{i}}{num\_soluciones} \\ 0, & \text{si } u_{\text{aleatorio}} \ge 1 - \frac{frec_{i}}{num\_soluciones} \end{cases}$$

 La elección de qué mecanismo de reinicialización aplicar se hace igual que en el QAP

78

- En la actualidad, hay muchas bases de datos que se utilizan como bancos de prueba (benchmarks) para comprobar el rendimiento de los algoritmos de clasificación
- El UCI es un repositorio de bases de datos para aprendizaje automático muy conocido
- Está accesible en la Web en:

http://www.ics.uci.edu/~mlearn/MLRepository.html

- A partir de este repositorio, se ha desarrollado un formato para definir todas las cualidades de una base de datos en un único fichero
- Se trata del formato ARFF, utilizado en WEKA (<a href="http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/">http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/</a>)
- Un fichero ARFF contiene dos partes:
  - Datos de cabecera: Líneas que comienzan por @. Contienen información acerca de los atributos: significado y tipo
  - Datos del problema: Líneas de datos. Son los ejemplos en sí. Cada línea se corresponde con un ejemplo y los valores están separados por comas

#### Ejemplo fichero ARFF:

```
@relation iris

@attribute sepalLength real

@attribute sepalWidth real

@attribute petalLength real

@attribute petalWidth real

@attribute class {Iris-setosa, Iris-versicolor, Iris-virginica}}

@data

5.1, 3.5, 1.4, 0.2, Iris-setosa

4.9, 3.0, 1.4, 0.2, Iris-setosa

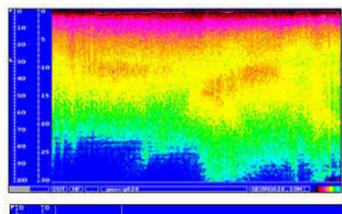
7.0, 3.2, 4.7, 1.4, Iris-versicolor

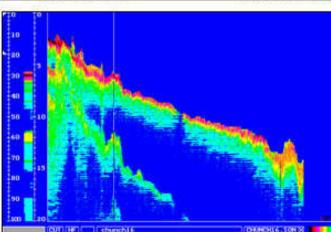
6.0, 3.0, 4.8, 1.8, Iris-virginica
```

- 5 Atributos, los 4 primeros de tipo real y el último de tipo nominal
- La clase es el último atributo (atributo de salida) con los posibles valores definidos
- Los datos van a continuación de la directiva @data

Trabajaremos con tres bases de datos: Sonar, SpamBase y Ozone

Sonar es una base de datos de detección de materiales mediante señales de sónar, discriminando entre objetos metálicos y rocas





- Consta de 208 ejemplos
- Consta de 61 atributos (clase incluida)
- Consta de 2 clases (R: roca; M: metal)
- Atributos: Cada atributo representa la energía dentro de una banda de frecuencia en concreto. Están definidos en el rango [0.0,1.0]
- Hay 111 ejemplos referentes a señales obtenidas a partir de cilindros metálicos a partir de diversos ángulos y condiciones, y 97 referentes a rocas bajo condiciones similares

Trabajaremos con tres bases de datos: Sonar, SpamBase y Ozone

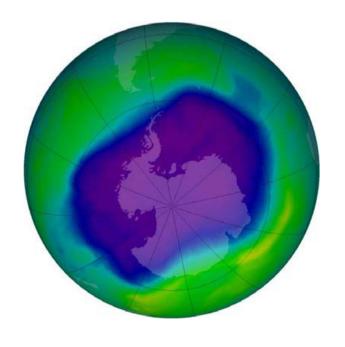
**SpamBase** es una base de datos de detección de SPAM frente a correo electrónico seguro



- Consta de 460 ejemplos
- Consta de 58 atributos (clase incluida)
- Consta de 2 clases (1: SPAM, 0: correo seguro)
- Atributos:
  - 48 atributos en [0,100] sobre la frecuencia de una palabra concreta en el correo
  - 6 atributos en [0,100] sobre la frecuencia de un carácter
  - 1 atributo sobre el número de caracteres seguidos en mayúsculas, etc.

Trabajaremos con tres bases de datos: Sonar, SpamBase y Ozone

Ozone es una base de datos para la detección del nivel de ozono según las mediciones realizadas a lo largo del tiempo



- Consta de 185 ejemplos (seleccionados de los 2536 originales, eliminando los ejemplos con valores perdidos y manteniendo la distribución de clases)
- Consta de 74 atributos (clase incluida)
- Consta de 2 clases (día normal o con una alta concentración de ozono)
- Atributos: Predicción del nivel de ozono local, Temperatura, Radiación Solar, Velocidad del viento...