UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS E DE COMPUTAÇÃO
http://www.icmc.usp.br
Departamento de Ciências de Computação

SCC-630 - Capítulo 10 Métodos de Amostragem e Avaliação de Algoritmos

João Luís Garcia Rosa[1]

[1]Departamento de Ciências de Computação
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação
Universidade de São Paulo - São Carlos
joaoluis@icmc.usp.br

2011

Agradecimento

Agradeço à Profa. Maria Carolina Monard, que gentilmente permitiu que eu usasse seus slides [1] para preparação deste capítulo.

Sumário

1 Métodos de Amostragem e Avaliação de Algoritmos

Material do Prof. José Augusto Baranauskas

Os próximos 61 slides contêm material do Prof. José Augusto Baranauskas, do Departamento de Física e Matemática - FFCLRP-USP, com atualização da Profa. Maria Carolina Monard.

Métodos de Amostragem e Avaliação de Algoritmos

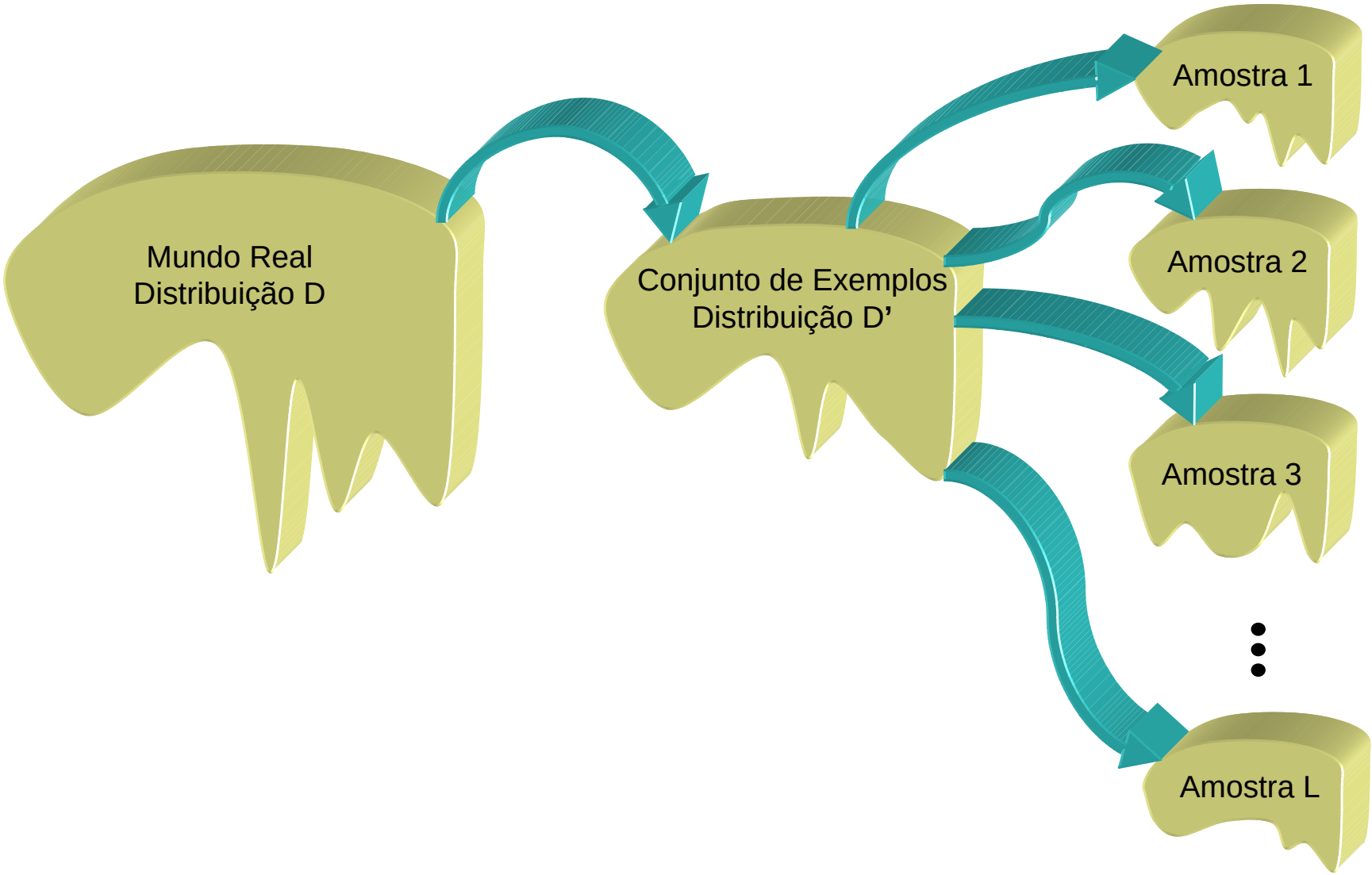
- AM é uma ferramenta poderosa, mas não existe um único algoritmo que apresente o melhor desempenho para todos os problemas
- Assim, é importante compreender o poder e a limitação dos diferentes algoritmos utilizando alguma metodologia de avaliação que permita comparar algoritmos
- Veremos uma metodologia de avaliação, freqüentemente utilizada pela comunidade de AM, para comparar dois algoritmos, a qual se baseia na idéia de amostragem (*resampling*)

José Augusto Baranauskas
Departamento de Física e Matemática – FFCLRP-USP
Sala 228 – Bloco P2 – Fone (16) 3602-4439
E-mail: augusto@fmrp.usp.br
URL: http://www.fmrp.usp.br/augusto

Métodos de Amostragem

- O classificador por si só não fornece uma boa estimativa de sua capacidade de previsão (ele possui boa capacidade de **descrever** os dados, não de **predizer**)
- Uma vez que o classificador conhece todos os dados é inevitável que super-estime sua capacidade de previsão
  - Por exemplo, a taxa de erro será super-otimista (abaixo da taxa de erro verdadeira) e não é raro obter 100% de precisão no conjunto de treinamento
- Assim, dados um conjunto de exemplos de tamanho finito e um indutor, é importante **estimar** o desempenho futuro do classificador induzido utilizando o conjunto de exemplos
- Todos os métodos não paramétricos descritos a seguir, exceto pelo método de resubstituição, estão baseados na idéia de **amostragem**

Métodos de Amostragem



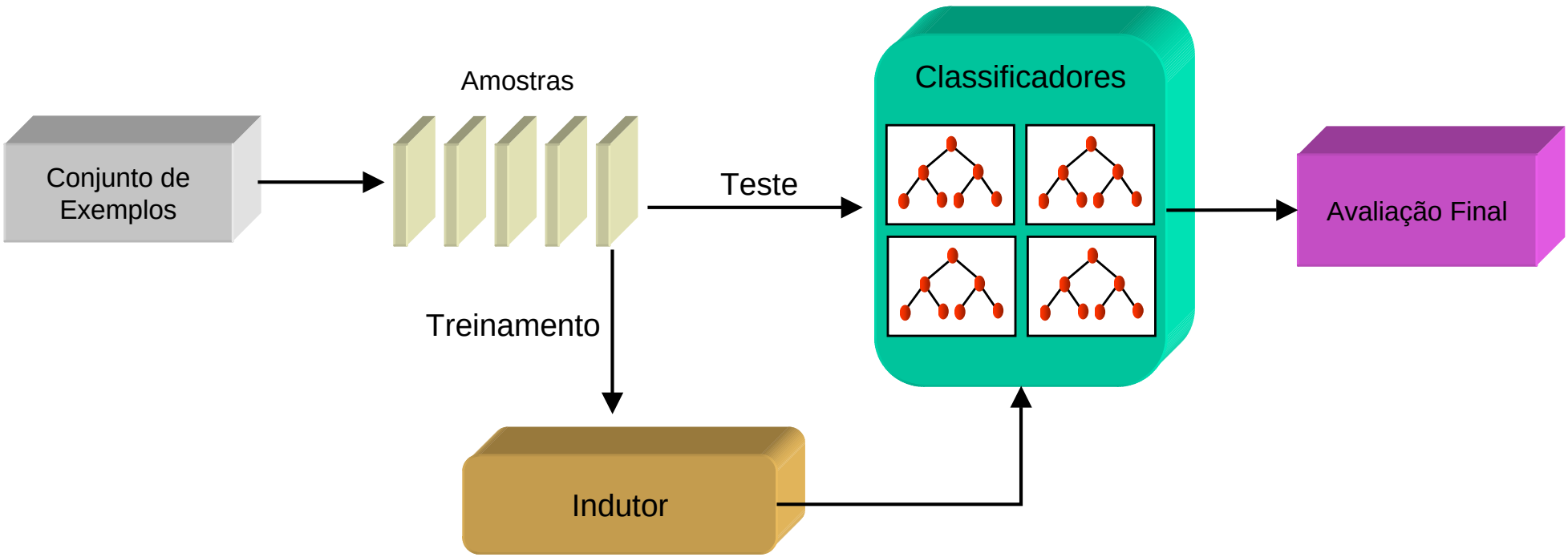
Métodos de Amostragem

- O mundo real apresenta uma distribuição de exemplos **D** em um dado domínio, a qual é desconhecida
- Ao extrair exemplos do mundo real, formando assim um conjunto de exemplos, obtém-se uma distribuição de exemplos **D'**, a qual é, supostamente, similar à distribuição **D**
- De modo a estimar uma medida, geralmente a precisão ou o erro, de indutores treinados com base na distribuição **D'**, extraem-se amostras a partir de **D'**, treina-se um indutor com essas amostras e testa-se seu desempenho em exemplos de **D'** (normalmente com exemplos fora da amostra utilizada para treinamento)
- Desta forma, simula-se o processo de amostragem que ocorre no mundo real, assumindo que **D'** representa o mundo real

Métodos de Amostragem

- É importante, ao estimar uma medida verdadeira (por exemplo, o erro verdadeiro), que a amostra seja **aleatória**, isto é, os exemplos não devem ser pré-selecionados
- Para problemas reais, normalmente é tomada uma amostra de tamanho **n** e o objetivo consiste em estimar uma medida para aquela população em particular (não para todas as populações)
- Alguns métodos para estimar medidas são descritos a seguir

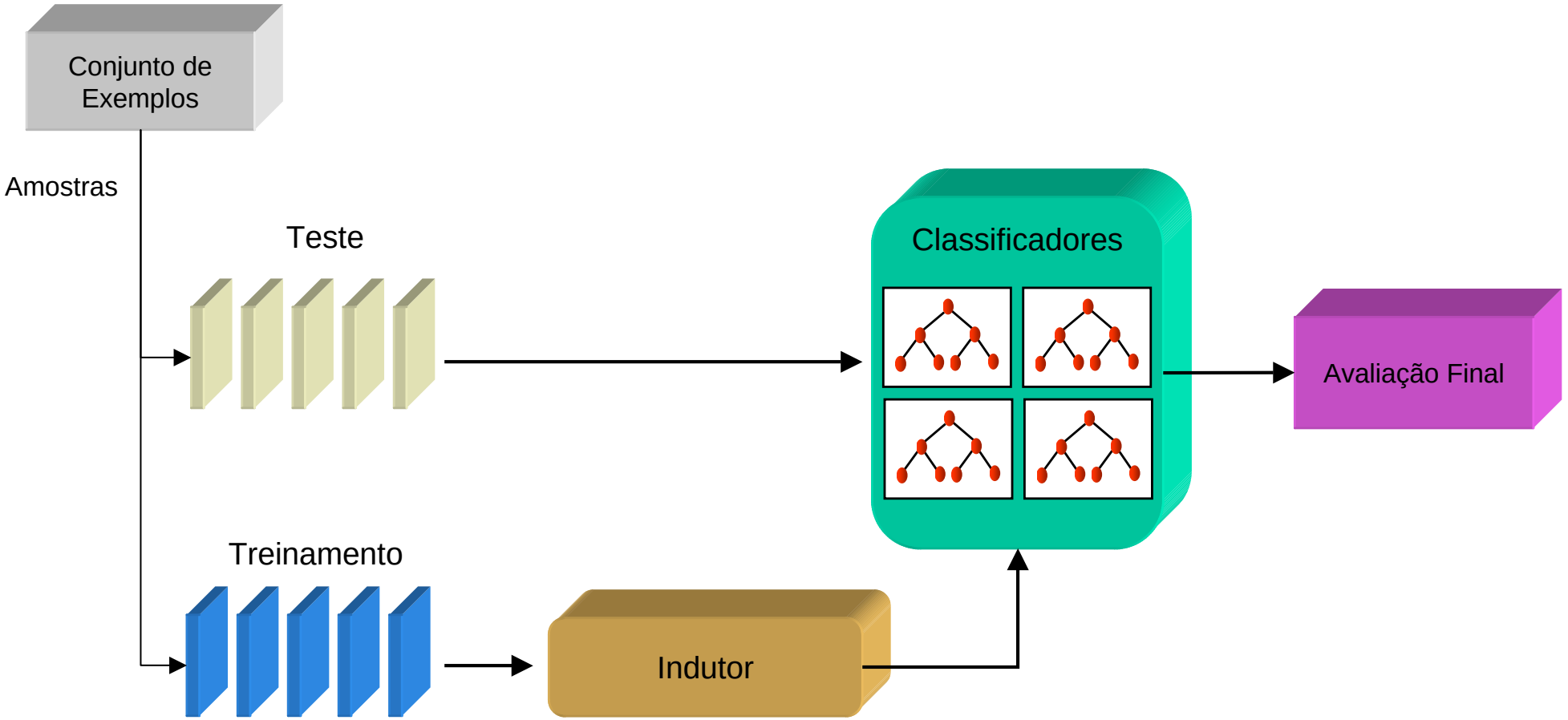
Métodos de Amostragem (Resubstituição)



Resubstituição

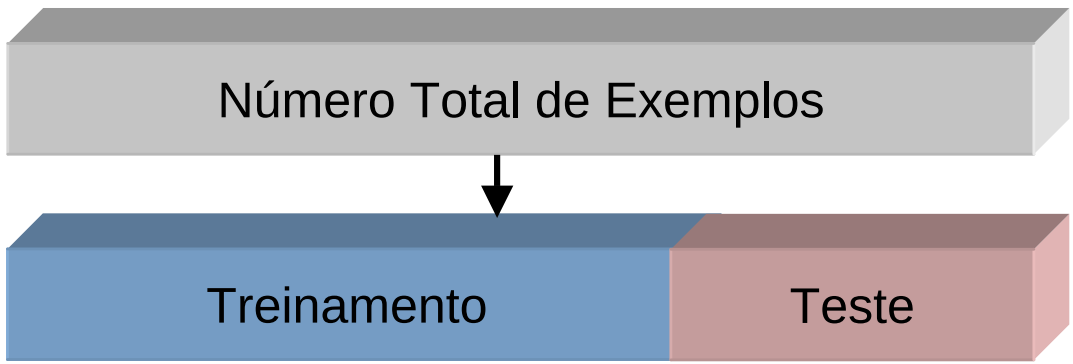
- Este método consiste em construir o classificador e testar seu desempenho no mesmo conjunto de exemplos, ou seja, o conjunto de teste é idêntico ao conjunto de treinamento
- Este estimador fornece uma **medida aparente**, possuindo uma estimativa altamente otimista da precisão, devido ao fato de que o processo de classificação tenta maximizá-la
- Para muitos algoritmos de indução que classificam corretamente todos os exemplos, tais como 1-**Nearest Neighbors** ou árvores de decisão sem poda, esta estimativa é muito otimista: se não houver exemplos conflitantes, a estimativa de precisão atinge 100%
- Assim sendo, o desempenho calculado com este método possui um *bias* otimista, ou seja, o bom desempenho no conjunto de treinamento em geral não se estende a conjuntos independentes de teste
- Quando o *bias* do estimador de resubstituição foi descoberto, diversos métodos de **cross-validation** (validação cruzada) foram propostos, os quais são descritos a seguir
- Todos eles estão baseados no mesmo princípio: **não deve haver exemplos em comum entre o conjunto de treinamento (ou aprendizado) e o conjunto de teste**

Métodos de Amostragem (Exceto Resubstituição)



Holdout

- Este estimador divide os exemplos em uma porcentagem fixa de exemplos **q** para treinamento e (1-**q**) para teste, considerando normalmente **q** > 1/2
- Valores típicos são **q** = 2/3 e (1-**q**) = 1/3, embora não existam fundamentos teóricos sobre estes valores



Holdout

- Entretanto, quando o conjunto de exemplos disponível é pequeno de exemplos, nem sempre é possível separar uma parte dos exemplos para utilizar como exemplos de teste

Métodos de Treinar-e-Testar

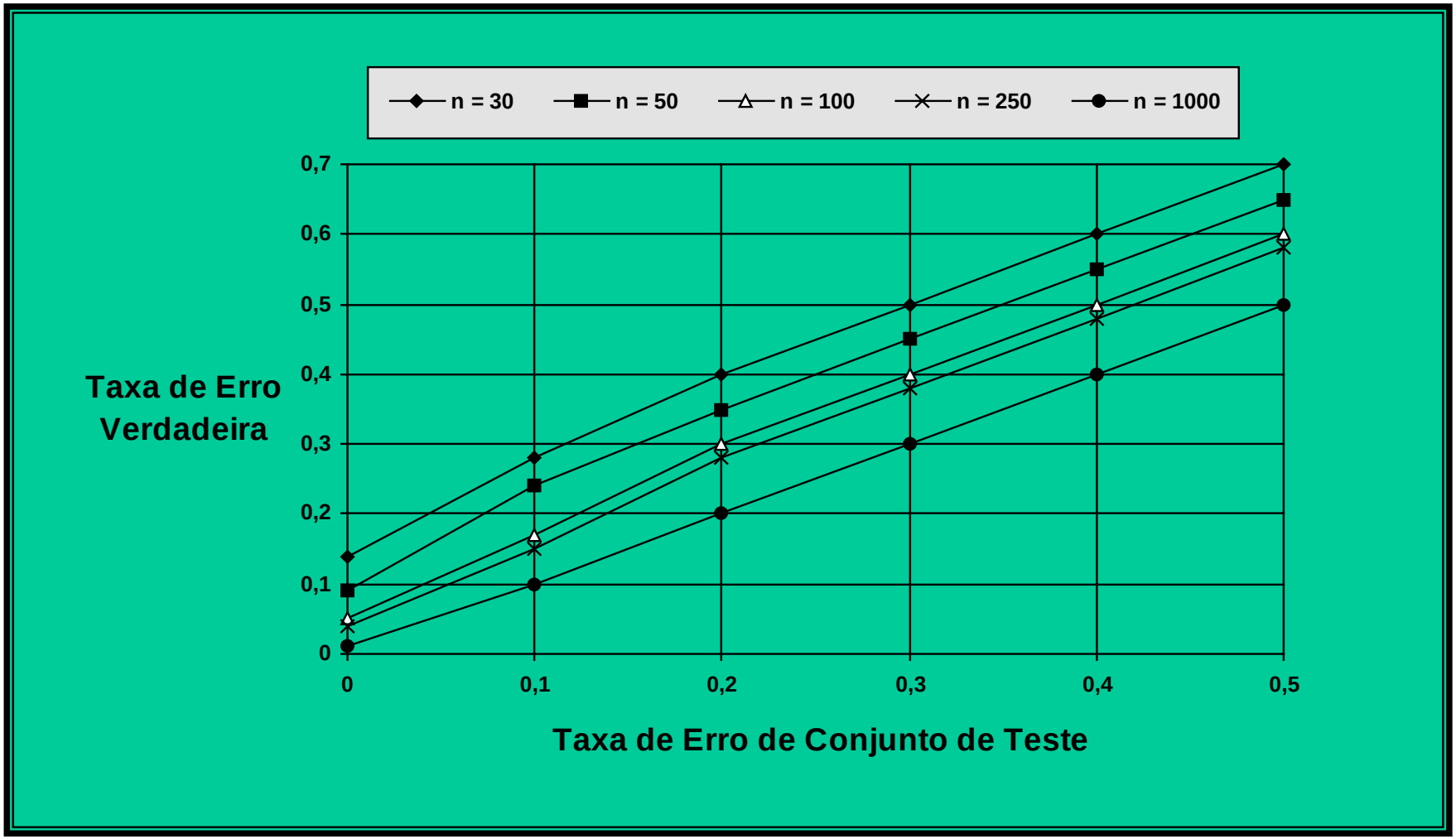
Quantos casos de teste são necessários para uma estimativa precisa?

Quantos casos deve conter cada conjunto de treinamento e teste?

Número de Casos de Teste e Qualidade da Predição

A seguir é mostrada a relação entre a taxa de erro do conjunto de teste e a mais alta possível taxa de erro verdadeira para conjuntos de teste de vários tamanhos. Esses valores têm 95% de confiabilidade. Isso significa que a probabilidade da taxa de erro ser maior que os valores apresentados no gráfico não excede 5%.

Número de Casos de Teste e Qualidade da Predição



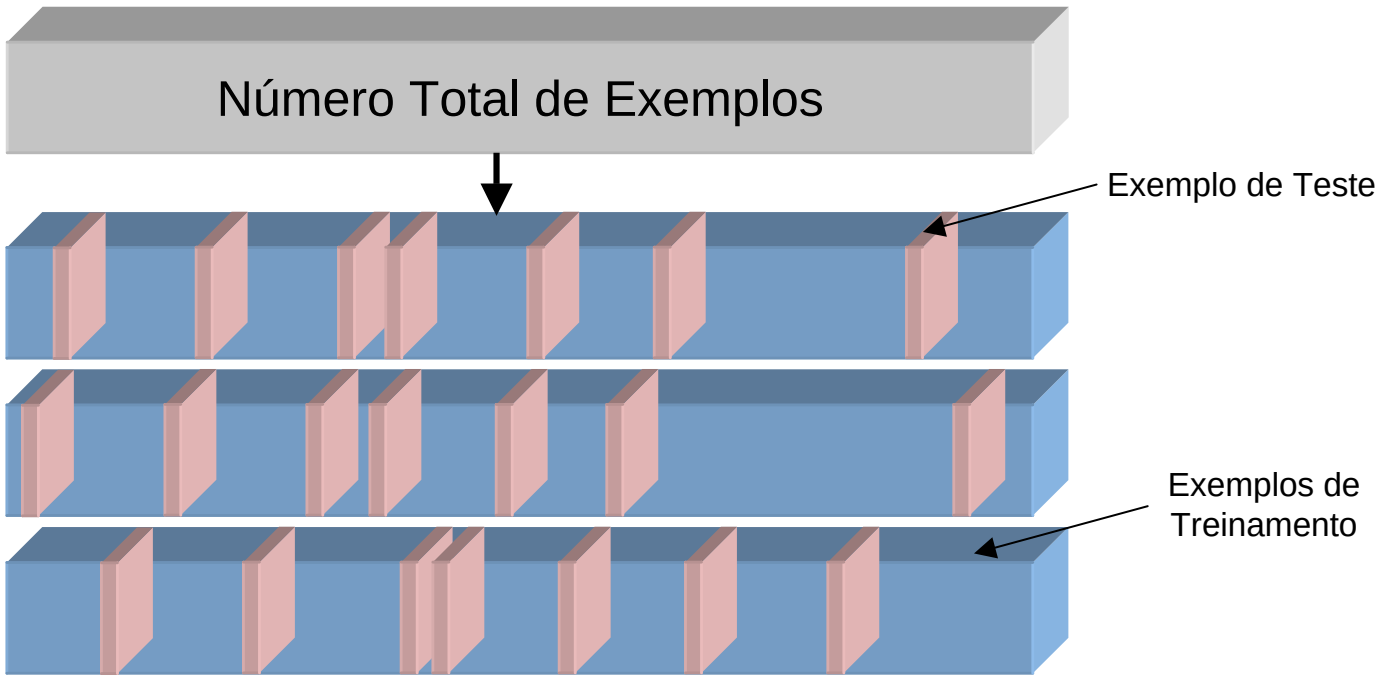
Número de Casos de Teste e Qualidade da Predição

Por exemplo, para um conjunto de teste de 50 exemplos, se a taxa de erro no conjunto de teste for 0%, há uma alta probabilidade (95%) que a taxa de erro verdadeira seja no máximo 10%.

Se isso acontecer com 1000 exemplos de teste, a taxa de erro verdadeira será, com alta probabilidade, menor que 1%

Amostragem Aleatória

- Na amostragem aleatória, **L** hipóteses, **L**<<**n**, são induzidas a partir de cada um dos **L** conjuntos de treinamento



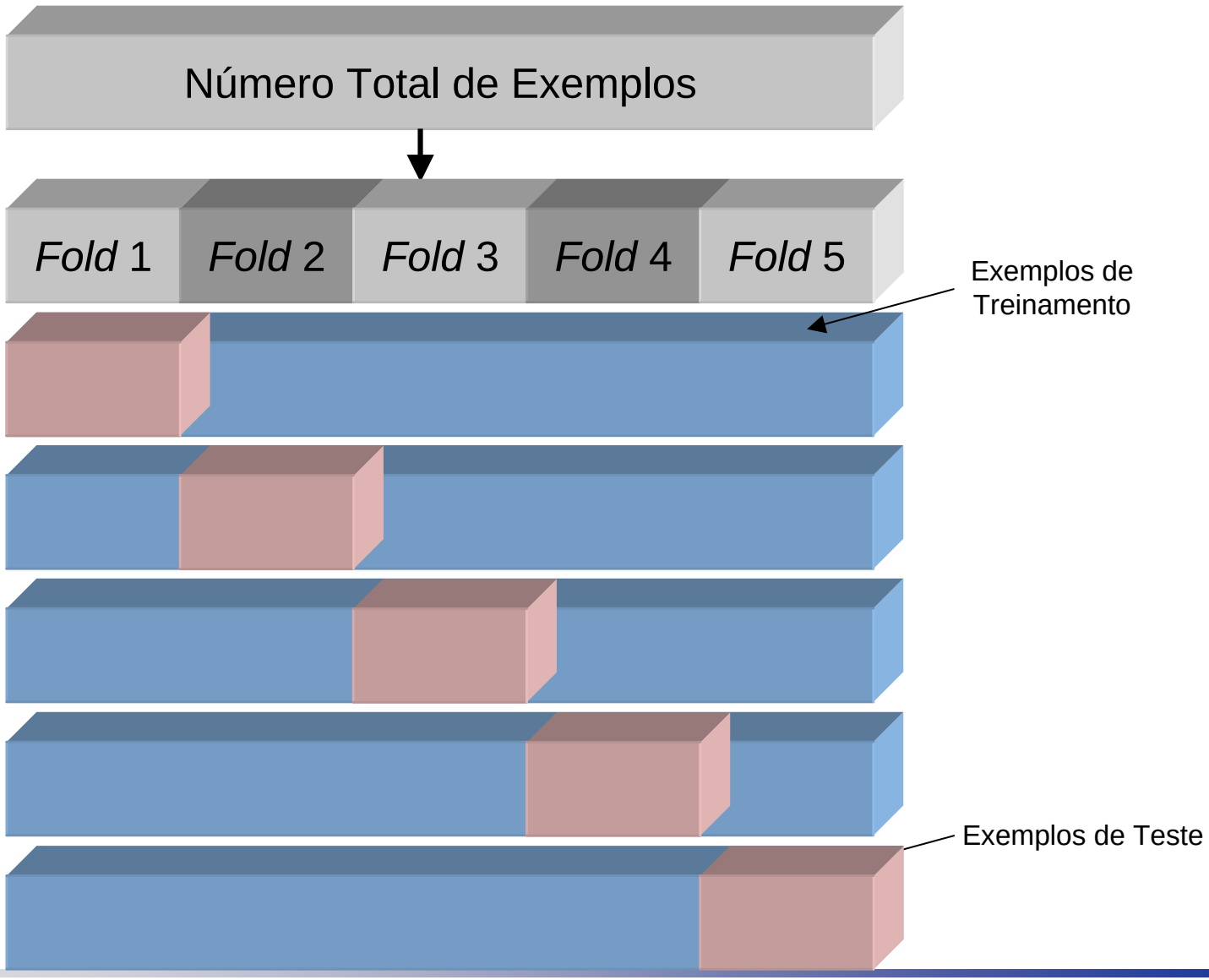
Amostragem Aleatória

- O erro final é calculando como sendo a média dos erros de todas as hipóteses induzidas e calculados em conjuntos de teste independentes e extraídos aleatoriamente
- Amostragem aleatória pode produzir melhores estimativas de erro que o estimador *holdout*

Cross-Validation

- Este estimador é um meio termo entre os estimadores *holdout* e *leave-one-out*
- Em **r**-*fold cross-validation* (CV) os exemplos são aleatoriamente divididos em **r** partições mutuamente exclusivas (*folds*) de tamanho aproximadamente igual a **n**/**r** exemplos
- Os exemplos nos (**r**-1) *folds* são usados para treinamento e a hipótese induzida é testada no *fold* remanescente
- Este processo é repetido **r** vezes, cada vez considerando um *fold* diferente para teste
- O erro na *cross-validation* é a média dos erros calculados em cada um dos **r** *folds*

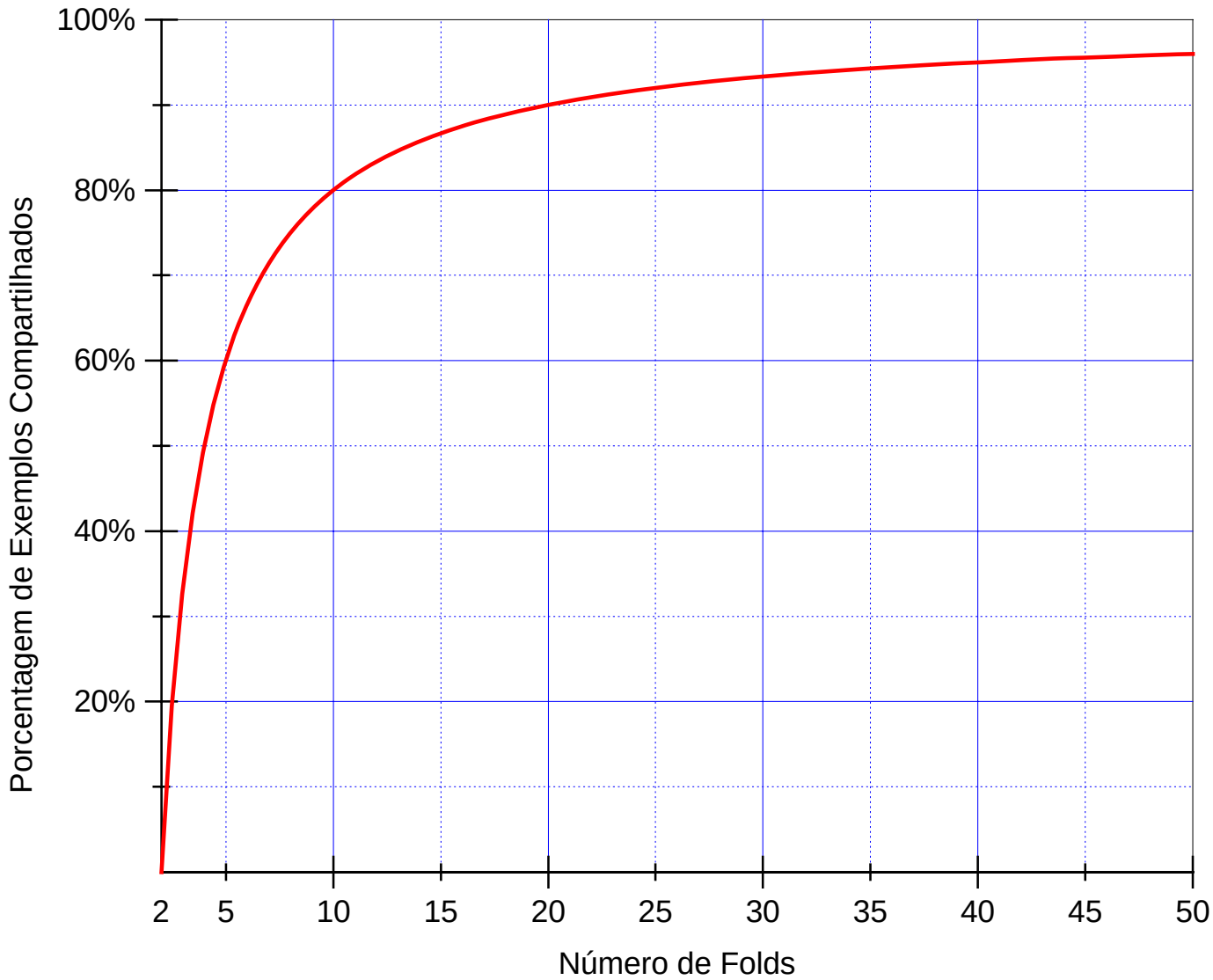
Exemplo de *Cross-Validation* com 5 *Folds (5-CV)*



Cross-Validation

- Este procedimento de rotação reduz tanto o *bias* inerente ao método de *holdout* quanto o custo computacional do método *leave-one-out*
- Entretanto, deve-se observar, por exemplo, que em *10-fold cross-validation*, cada par de conjuntos de treinamento compartilha 80% de exemplos
- É fácil generalizar que a porcentagem de exemplos compartilhados na ***r**-fold cross-validation* é dada por (1 - 2/**r**) para **r** >= 2 *folds* (figura seguinte)
- À medida que o número de *folds* aumenta, esta sobreposição pode evitar que os testes estatísticos obtenham uma boa estimativa da quantidade de variação que seria observada se cada conjunto de treinamento fosse independente dos demais

Cross-Validation



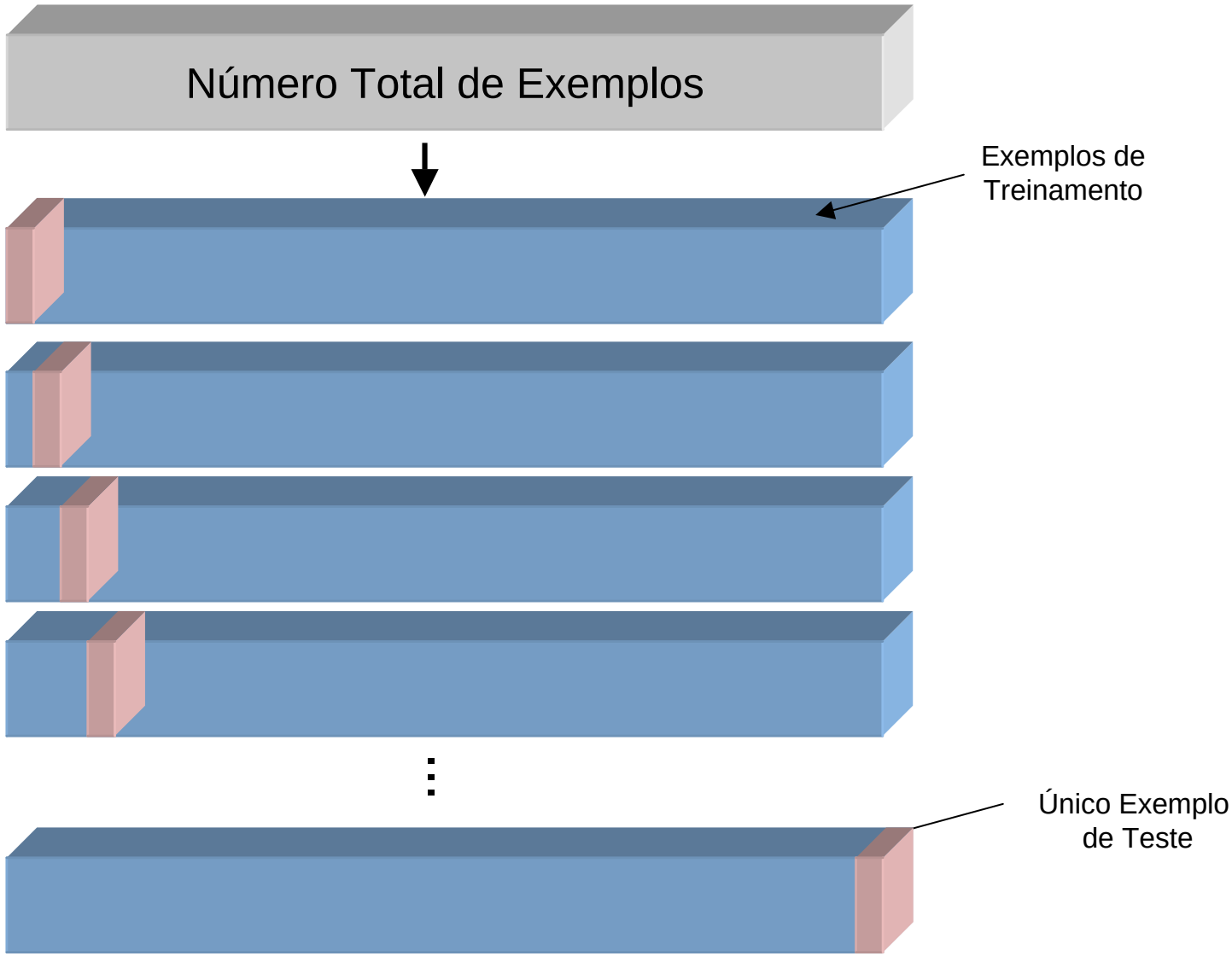
Stratified Cross-Validation

- O estimador *stratified cross-validation* é similar à *cross-validation*, mas ao gerar os *folds* mutuamente exclusivos, a distribuição de classe (proporção de exemplos em cada uma das classes) é considerada durante a amostragem
- Isto significa, por exemplo, que se o conjunto original de exemplos possui duas classes com distribuição de 20% e 80%, então cada *fold* também terá essa proporção de classes

Leave-one-out

- O estimador *leave-one-out* é um caso especial de *cross-validation*
- É computacionalmente dispendioso e freqüentemente é usado em amostras pequenas
- Para uma amostra de tamanho **n** uma hipótese é induzida utilizando (**n**-1) exemplos; a hipótese é então testada no único exemplo remanescente
- Este processo é repetido **n** vezes, cada vez induzindo uma hipótese deixando de considerar um único exemplo
- O erro é a soma dos erros em cada teste dividido por **n**

Leave-one-out



Leave-one-out

- Por muitos anos o *leave-one-out* foi a técnica recomendada para avaliar a performance de classificadores para pequenas amostras de exemplos.
- Embora o *leave-one-out* é um estimador praticamente não tendencioso (ou seja, o estimador, após várias aplicações, tende para a taxa de erro verdadeira), sua variança para pequenas amostras é alta.

Leave-one-out

- O *leave-one-out* pode ser comparado a um bébado tentando andar sobre uma linha reta. Na média, ele pode estar exatamente sobre a linha, mesmo quando constantemente cambaleia para a direita e a esquerda dessa linha.
- Lembrar que tendência e variança de um estimador de taxa de erro verdadeira contribuem para a imprecisão da taxa de erro estimada.

Bootstrapping

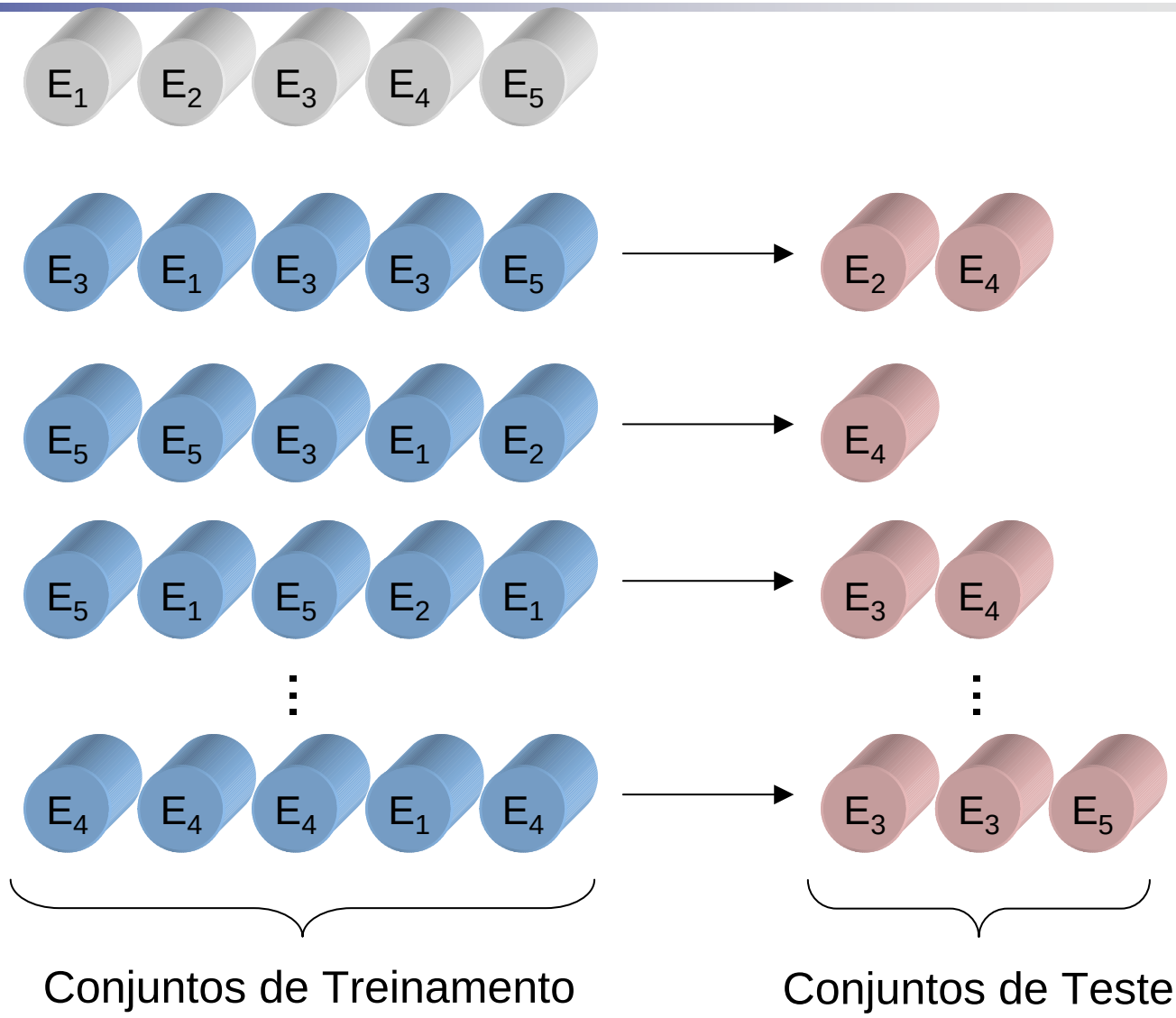
- Para amostras pequenas, o método de resampling *bootstrapping* tem mostrado resultados promissores como estimador da taxa de erro verdadeira.
- Cada experimento é conduzido com base em um novo conjunto de treinamento obtido por amostragem **com reposição** do conjunto original de exemplos
- Há muitos estimadores *bootstrap*, sendo o mais comum denominado *bootstrap e*0

Bootstrap e0

- Um conjunto de treinamento bootstrap consiste de **n** exemplos (mesmo tamanho do conjunto original de exemplos) amostrados **com reposição** a partir do conjunto original de exemplos
- Isto significa que alguns exemplos E_i podem não aparecer no conjunto de treinamento *bootstrap* e alguns E_i podem aparecer mais de uma vez
- Os exemplos remanescentes (aqueles que não aparecem no conjunto de treinamento *bootstrap*) são usados como conjunto de teste

Bootstrap e0

Conjunto Completo de Exemplos



Bootstrap e0

- Em uma amostra com **n** exemplos, a probabilidade de escolher um exemplo é

  1/ **n**

- A probabilidade de não escolher um exemplo é

  1-1/**n**

- Entao, a probabilidade de não escolher um exemplo em **n** tentativas é

  (1-1/**n**)^ **n**

Bootstrap e0

- Ou seja, para uma dada amostra *bootstrap*, um exemplo de treinamento tem probabilidade 1-(1-1/**n**)^**n** de ser selecionado pelo menos uma vez em cada uma das **n** vezes nas quais os exemplos são aleatoriamente selecionados a partir do conjunto original de exemplos
- Para **n** grande, isto é aproximadamente

  1-1/e = 0.632 (lembrar que (1-1/**n**)^**n ~ e^(-1)**
- Assim, a técnica possui uma fração média de casos (exemplos) não repetidos para o conjunto de treinamento de 0.632, e uma fração média de 0.368 para casos do conjunto de teste.

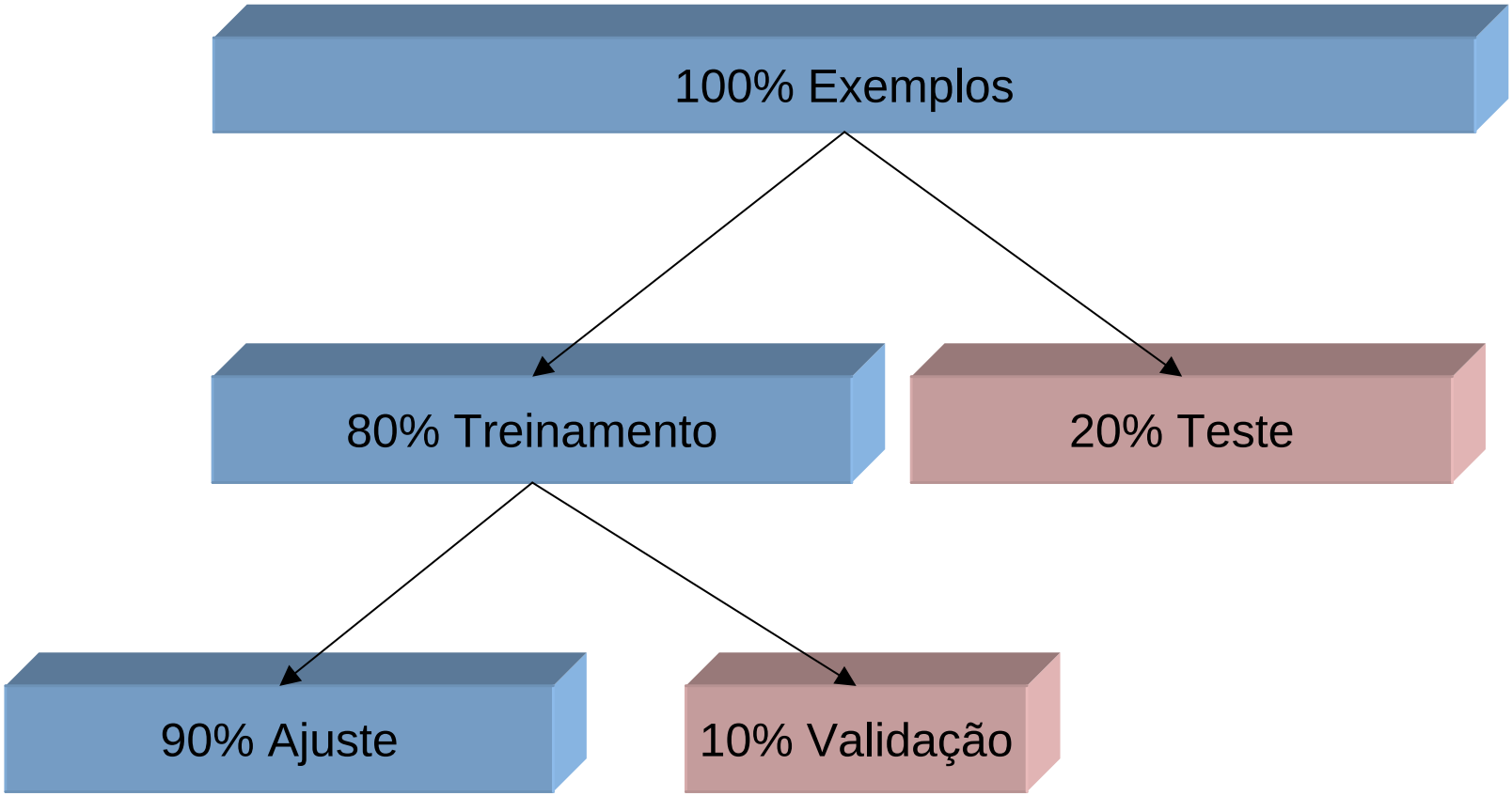
Bootstrap e0

- A taxa de erro final é calculada através da média das taxas se erro das várias iterações. Cerca de 200 iterações são consideradas necessárias para uma boa estimatva com o *boostrap e0.* Portanto, este método pode ser considerado mais caro que o método *leave-one-out.*

Ajuste de Parâmetros

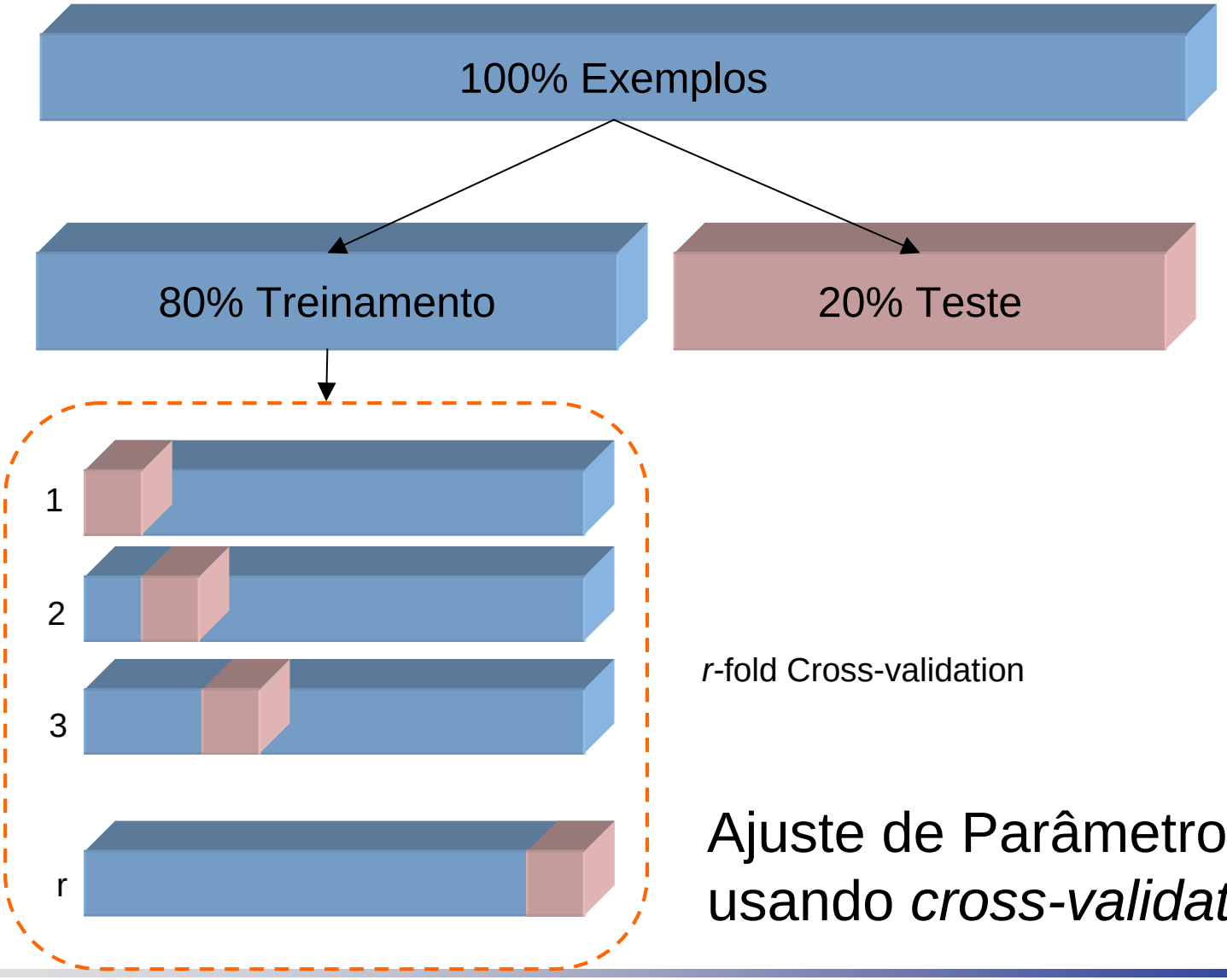
- Em algumas situações torna-se necessário realizar um ajuste de parâmetros de um indutor
  - fator de confiança (poda), número mínimo de exemplos em cada folha, etc (DT)
  - número de condições por regra, suporte, etc (Indução de Regras)
  - número de neurônios, tipo de função de ativação, número de camadas, etc (RNA)
- Nesses casos, é necessário reservar uma parte dos exemplos para ajustar os parâmetros e outra parte para teste

Ajuste de Parâmetros
Variação *Holdout* 1



Ajuste de parâmetros utilizando *holdout*

Ajuste de Parâmetros
Variação *Holdout 2*



r-fold Cross-validation

Ajuste de Parâmetros usando *cross-validation*

Desempenho de Algoritmos

- Ainda que o erro de um algoritmo seja menor que outro usando o mesmo conjunto de dados, é necesário utilizar algum teste estatístico apropriado para verificar a probabilidade da validade dessa afimação.
- Os testes de hipóteses têm como objetivo decidir, com base na informação fornecida pelos dados de uma amostra, sobre a aceitação ou não de uma dada hipótese
- Existem muitos testes estatísticos (e muitas discusões ao respeito) que podem ser utilizados para esse fim pela comunidade de AM.

Desempenho de Algoritmos

- Porém, esse tema foge do programa desta disciplina. Assim, no TP, somente deve ser apresentado o erro dos classificadores no conjunto de dados, sem análise dos resultados usando algum teste estatístico, como mostrado a seguir.

Calculando Média e Desvio Padrão Utilizando Amostragem

- Dado um algoritmo **A** e um conjunto de exemplos **T**, assume-se que **T** seja dividido em **r** partições
- Para cada partição **i**, é induzida a hipótese $\mathbf{h_i}$ e o erro denotado por $\mathbf{err(h_i)}$, i = 1,2,...,r, é calculado
- A seguir, a **média** (mean), **variância** (var) e **desvio padrão** (sd) para todas as partições são calculados utilizando-se:

$$\mathsf{mean}(A) = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r}\mathsf{err}(h_i)$$

$$\mathsf{var}(A) = \frac{1}{r}\left[\frac{1}{r-1}\sum_{i=1}^{r}(\mathsf{err}(h_i)-\mathsf{mean}(A))^2\right]$$

$$\mathsf{sd}(A) = \sqrt{\mathsf{var}(A)}$$

Calculando Média e Desvio Padrão Utilizando Amostragem

- É possível denotar **mean(A)** como **mean(A,T)**, quando a intenção é tornar evidente o fato que o erro médio do algoritmo **A** foi calculado sobre o conjunto de exemplos **T**
- Alternativamente, **mean(A)** pode ser denotado por **mean(T)**, quando deseja-se evidenciar o fato que o erro médio foi calculado utilizando o conjunto particular de exemplos **T**, assumindo o algoritmo **A** fixo para um dado experimento
- Analogamente, essa notação se estende para **var(A)**, **sd(A)** ou outros valores que possam ser derivados a partir destes

Exemplo

- Para exemplificar o cálculo da média e desvio padrão de um algoritmo **A** utilizando um conjunto de exemplos **T**, considere *10-fold cross-validation*, isto é, **r**=10, para um algoritmo **A** com os seguintes erros em cada *fold*
  - (5.5, 11.4, 12.7, 5.2, 5.9, 11.3, 10.9, 11.2, 4.9, 11.0)
- Então:

$$\text{mean}(A) = \frac{90.00}{10} = 9.00$$

$$\text{sd}(A) = \sqrt{\frac{1}{10 \times 9} 90.30} = 1.00$$

- Em geral, o erro é representado por sua média seguida pelo seu desvio padrão entre parênteses
  - neste exemplo, o erro é 9.00 (1.00)

Comparando Algoritmos

- Ao tentar comparar dois algoritmos observando apenas valores, por exemplo, a taxa de erro em problemas de classificação ou o erro em problemas de regressão, não é fácil perceber se um algoritmo é melhor do que o outro
- Em várias situações, para comparar o erro (média e desvio padrão) obtido, **r**-*fold stratified cross-validation* é usualmente utilizado (para manter a distribuição de classes)
- De fato, a maioria dos trabalhos na área reportam erros utilizando 10-*fold cross-validation* ou *stratified cross-validation*

Comparando Algoritmos

- Ao comparar dois indutores no mesmo domínio T, o **desvio padrão** pode ser visto como uma imagem da robustez do algoritmo: se os erros, calculados sobre diferentes conjuntos de teste, provenientes de hipóteses induzidas utilizando diferentes conjuntos de treinamento são muito diferentes de um experimento para outro, então, o indutor **não é robusto** a mudanças no conjunto de treinamento proveniente de uma mesma distribuição

Comparando Algoritmos

- Suponha por exemplo, que deseja-se comparar dois algoritmos A_S e A_P com taxas de erro iguais a
  - A_S : 9.00 (1.00) e
  - A_P : 7.50 (0.80)
- Parece que o segundo, A_P, é melhor que A_S nesse conjunto de dados. Mas se a gente aplicar algum teste estatístico apropriado para decidir qual deles é melhor que o outro (com grau de confiança de 95% por exemplo) veremos que A_P **não** supera A_S significativamente (com grau de confiança de 95%)

Comparando Algoritmos

- No exemplo a seguir, no qual são considerados (3) três algoritmos de AM e 6 (seis) conjuntos de exemplos diferentes, é mostrado o erro aparente (usando o mesmo conjunto de treinamento para medir o erro), e a estimativa do erro verdadeiro utilizando validação cruzada

Aplicação do 10-Fold Cross-Validation a Conjuntos de Dados

Utilizando os algoritmos

- CN2
- NewId
- Foil

foram realizados diversos experimentos utilizando conjuntos de dados com características diferentes.

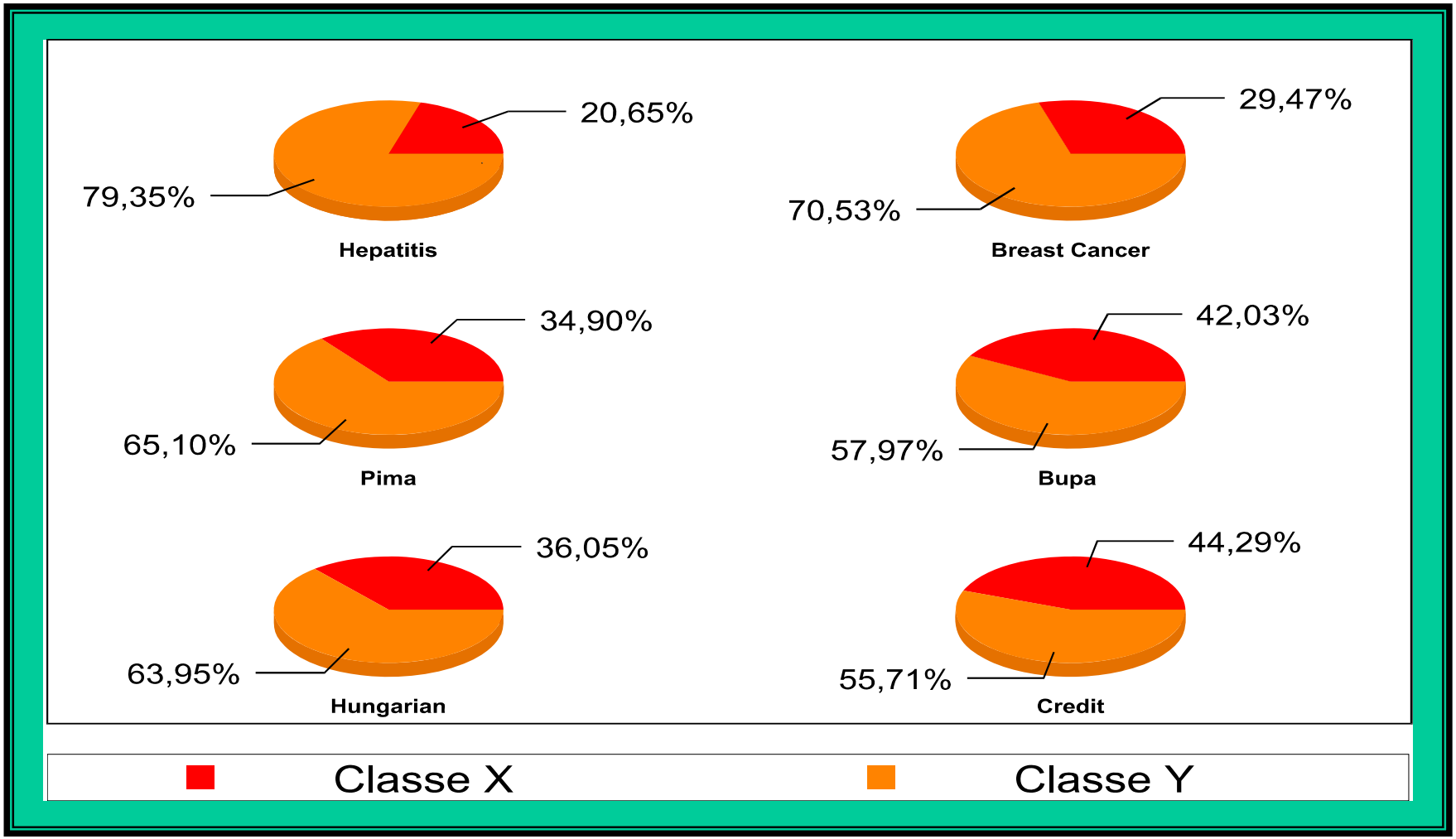
Características dos Conjuntos de Exemplos

Nome	#E	#D	#C	?	Classe			
					X		Y	
1. Hepatitis	155	13	6	y	die	32	Live	123
2. Breast Cancer	285	5	4	y	rcr	84	no_rcr	201
3. Pima	768	0	8	n	0	500	1	268
4. Bupa	345	0	6	n	1	145	2	200
5. Hungarian	294	0	13	y	pres	106	abs	188
6. Credit	490	10	5	y	is_+	217	is_-	273

% Exemplos Classe X e Y

- É muito importante considerar a distribuição dos exemplos entre as classes
- Conhecendo essa distribuição, é possivel determinar o erro do classificador mais simples que simplesmente prediz a classe como sendo da classe majoritária
- Assim, pode-se dizer que um algoritmo “aprende” se ele tem capacidade de reduzir esse erro

% Exemplos Classe X e Y



Matriz de Confusão

	Classes Preditas	
Classes Verdadeiras	Classe *X*	Classe *X*
Classe *X*	a	b
Classes *Y*	c	d

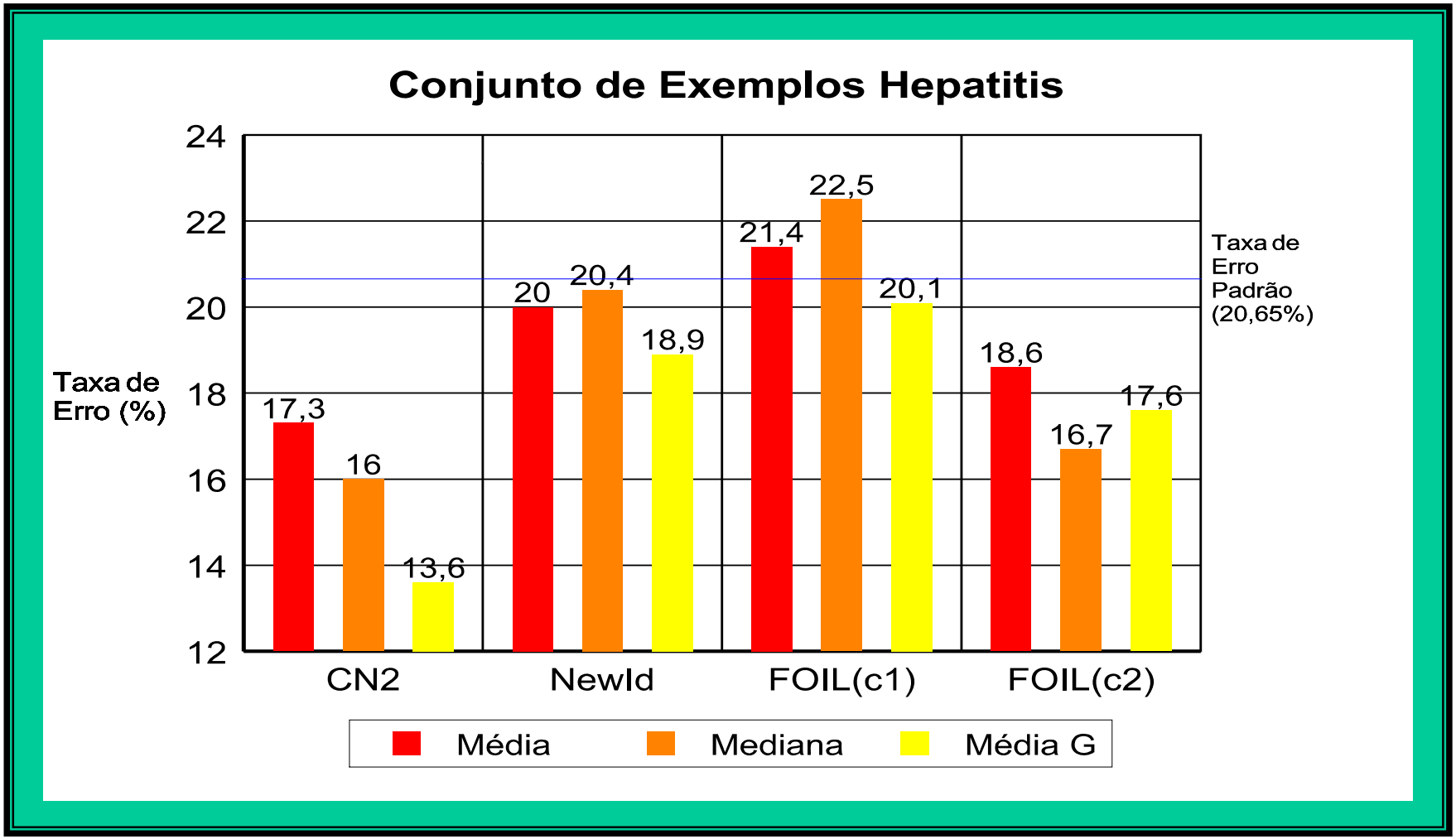
Onde:

- ***a*** **representa o número de casos pertencentes à classe *X*, corretamente classificados;**
- ***b*** **o número de casos pertencentes à classe *X* incorretamente classificados como pertencentes à classe *Y*;**
- ***c*** **o número de casos da classe *Y* incorretamente classificados como pertencentes à classe *X* e;**
- ***d*** **o número de casos da classe *Y* corretamente classificados.**

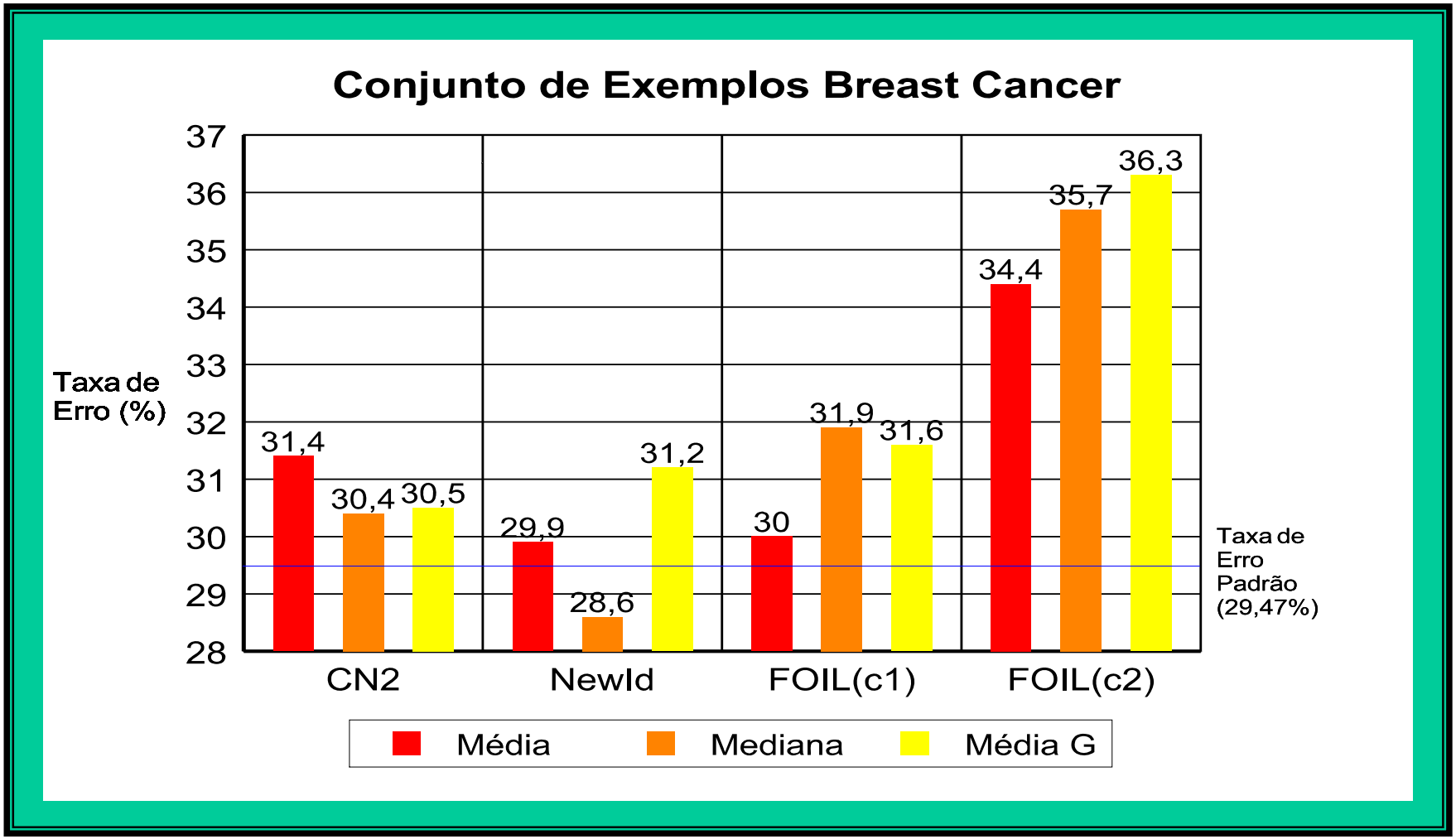
Matriz de Confusão e Taxas de Erro de Classificação

Classes Verdadeiras	*Classes Preditas*		Taxa de Erro na Classe	Taxa de Erro no Conjunto
	X	*Y*		
X	a	b	$\frac{b}{a+b}$	$\frac{b+c}{a+b+c+d}$
Y	c	d	$\frac{c}{c+d}$	

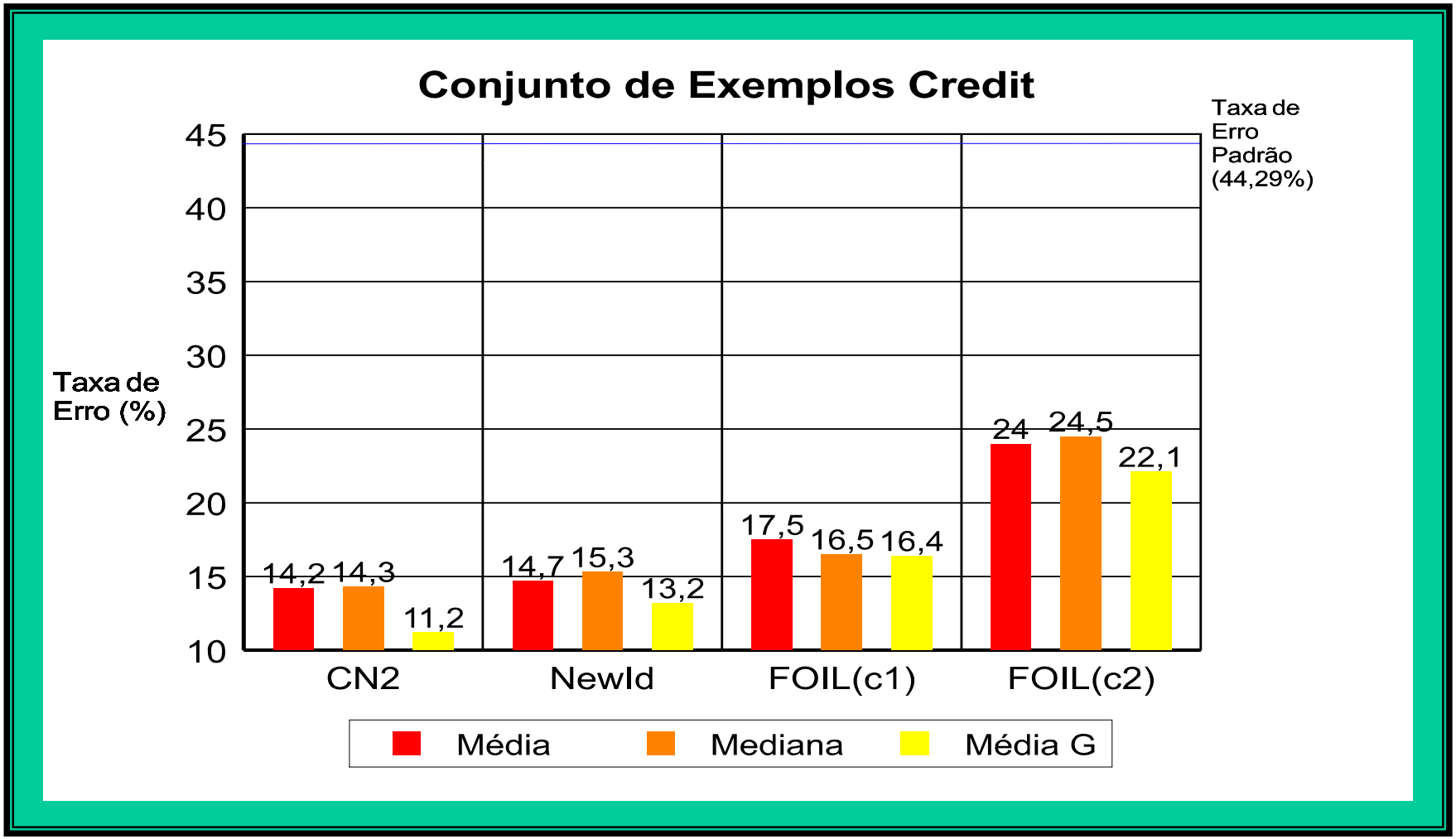
Taxa de Erro Estimada *Hepatitis* 10-fold Cross-Validation



Taxa de Erro Estimada *Brest C*
10-fold Cross-Validation



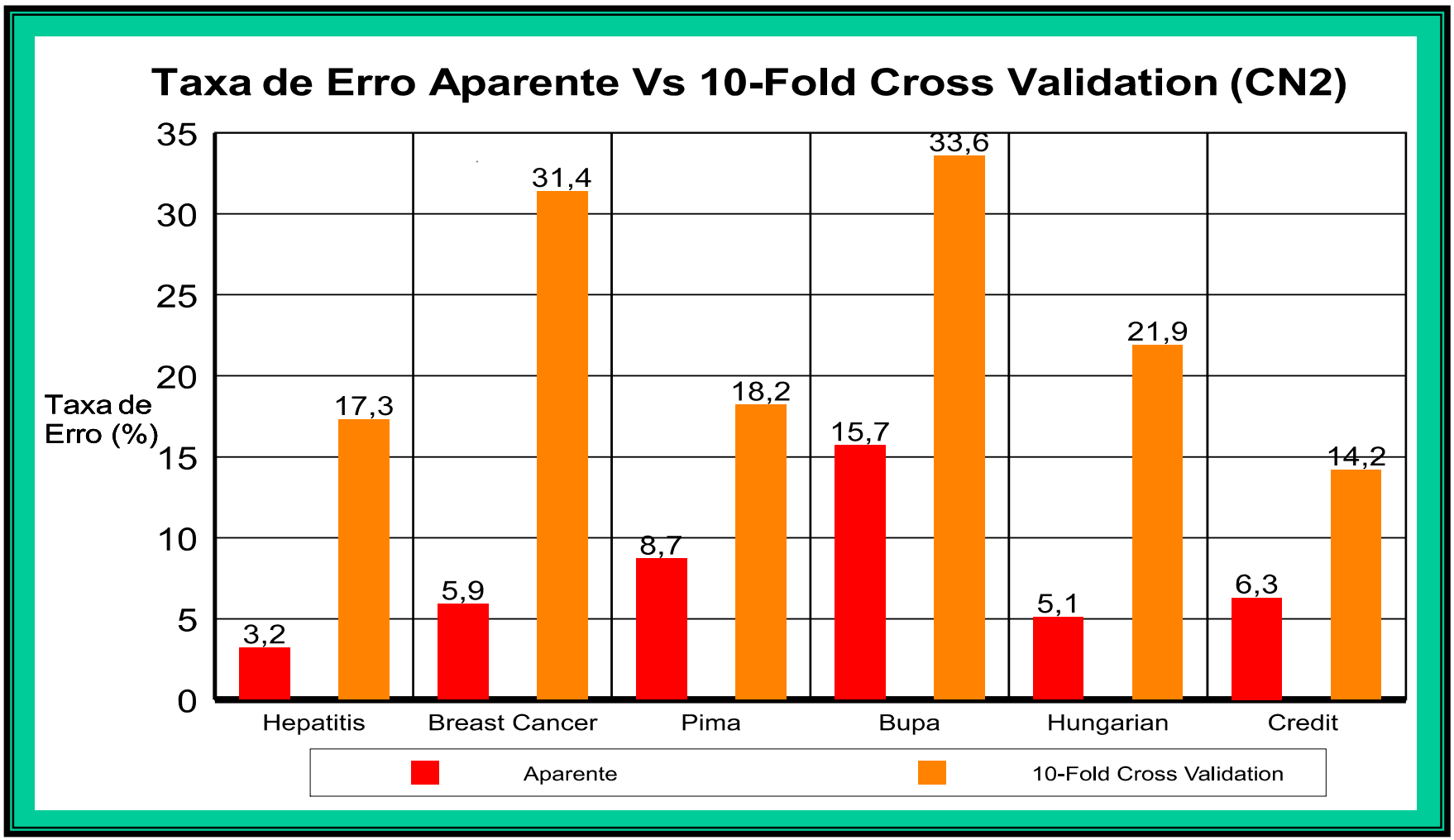
Taxa de Erro Estimada *Credit* 10-fold Cross-Validation



Taxa de Erro Aparente *versus* Resampling

- A taxa de erro aparente é um estimador **muito** otimista
- Apesar de que a taxa de erro obtida através de um método de resampling seja apenas uma estimativa da taxa de erro verdadeira, esta estimativa é muito menos tendenciosa que a obtida através do cálculo da taxa de erro aparente

Taxa de Erro Aparente *versus* Resampling - Exemplo



Problemas com Índices de Erros Publicados na Literatura

- É importante lembrar que o processo de indução, usado pelos algoritmos de aprendizado, preserva a falsidade. Assim, qualquer resultado deve ser validado experimentalmente.
- Portanto, é fundamental que os experimentos realizados possam ser repetidos por outra pessoa. Assim, os resultados experimentais obtidos devem ser apresentados conjuntamente com a descrição clara da experiência realizada.
- Diversas informações devem ser fornecidas, tais como...

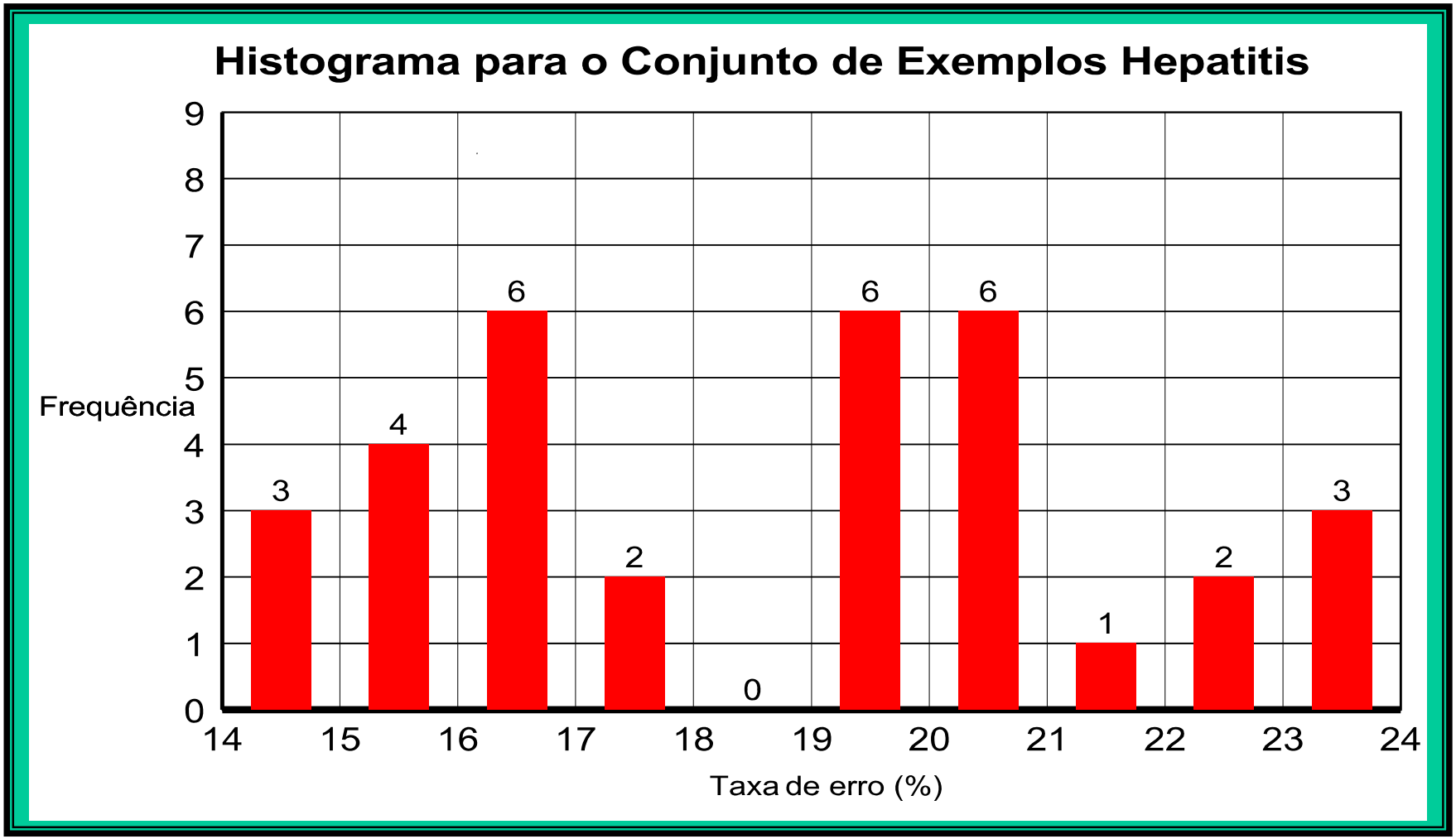
Problemas com Índices de Erros Publicados na Literatura

- Qual método é utilizado?
- Qual a média, variância e intervalo de confiança dos resultados?
- Uso de conjuntos diferentes para treinamento e teste?
- Múltiplas execuções? Quantas?
- Uso de conjunto de validação?
- etc...

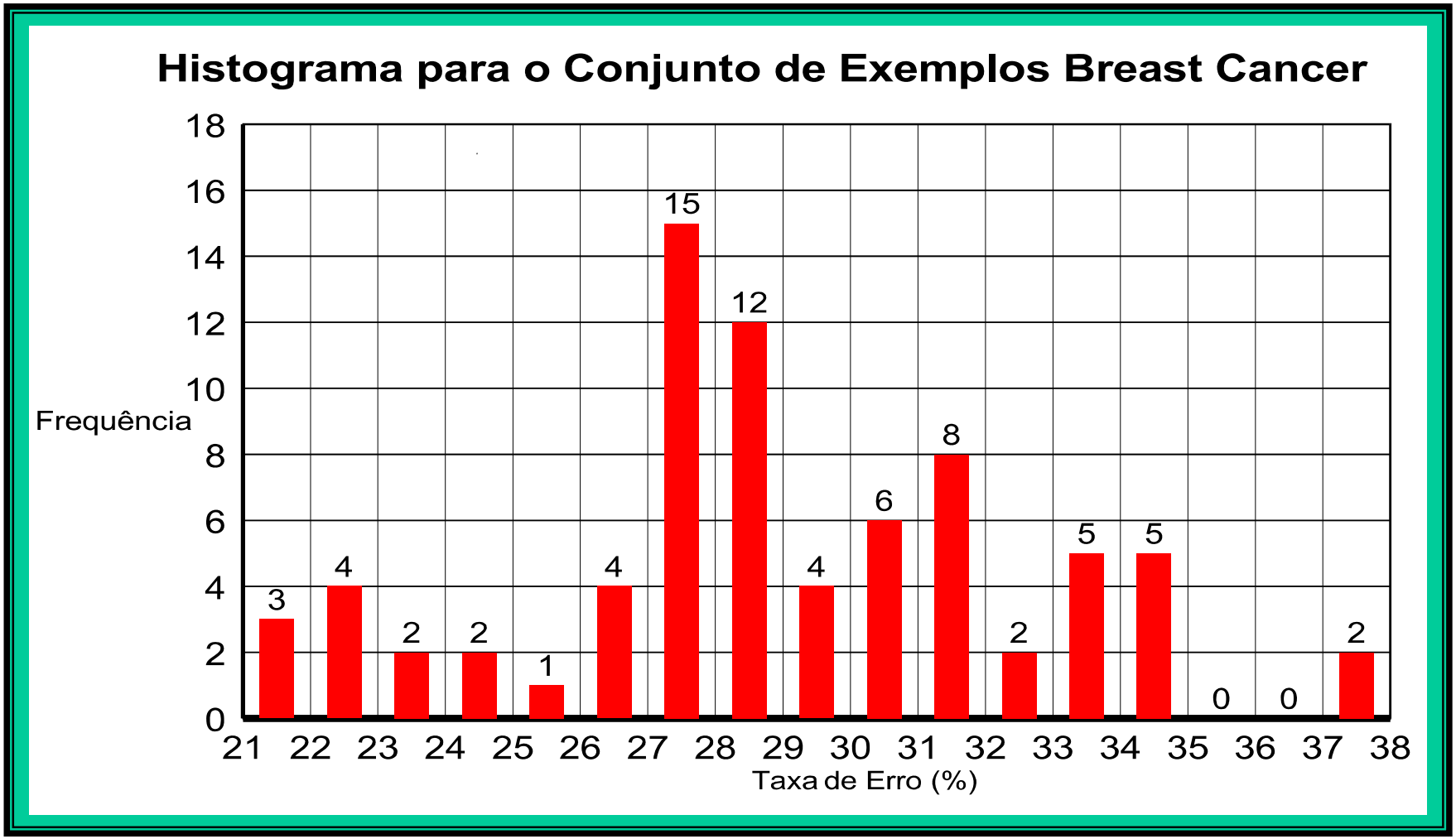
Índices de Performance Publicados de dois Conjunto de Exemplos

- Nos seguintes histogramas são mostrados resultados publicados na literatura relacionados a taxa de erro dos conjuntos de dados da UCI *Hepatitis* (total de 33 artigos) e *Breast Cancer* (total de 75 artigos). Observe que:
- Erro padrão de *Hepatitis ~ 20.6%*
- Erro padrão de *Breast Cancer* ~29.5%

33 Índices de Performance do Conjunto de Exemplos *Hepatitis*



75 Índices de Performance do Conjunto de Exemplos *BreastC*



Índices de Performance Publicados de dois Conjunto de Exemplos

- Isso mostra a importância de descrever claramente nos trabalhos como foram conduzidos os experimentos
- É fundamental que o leitor possa repetir os experimentos!!!

Métodos de Amostragem e Avaliação de Algoritmos

Material atualizado por
Maria Carolina Monard

FIM

José Augusto Baranauskas
Departamento de Física e Matemática – FFCLRP-USP
Sala 228 – Bloco P2 – Fone (16) 3602-4439

E-mail: augusto@fmrp.usp.br
URL: http://www.fmrp.usp.br/augusto

Referências I

[1] Monard, M. C.
Slides da disciplina SCC630 - Inteligência Artificial. ICMC - USP, 2010.