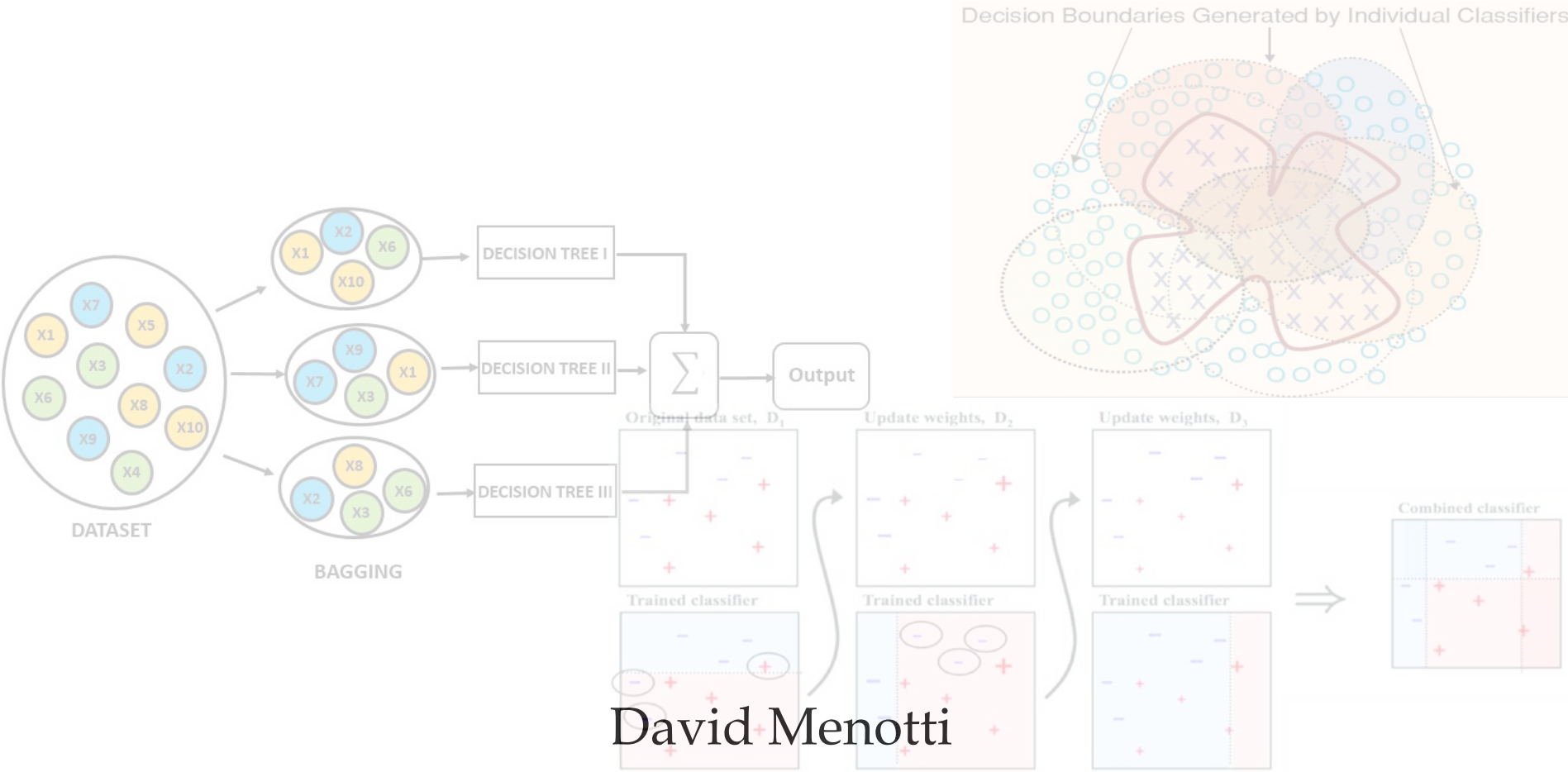
Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Especialização em Engenharia Industrial 4.0

Múltiplos Classificadores



David Menotti
www.inf.ufpr.br/menotti/am-18a

Hoje

- Múltiplos classificadores
  - Combinação de classificadores
  - Fusão de Classificadores
  - Comitês de Classificadores (*ensembles*)
    - *Bagging & Random forest*
    - *Boosting* & *Weak classifiers* (Adaboost)

Múltiplos Classificadores

- O uso de vários classificadores é uma estratégia bastante utilizada para aumentar o desempenho de sistemas de reconhecimento de padrões.

- A ideia é que os erros sejam minimizados através do uso de múltiplos classificadores ao invés de um único classificador.

- Resultados teóricos e experimentais demonstram a viabilidade do uso de múltiplos classificadores
  - Diferentes arquiteturas
  - Diferentes características (*subsets*)
    - Instâncias, atributos e classes

Múltiplos Classificadores

- O uso de múltiplos classificadores aparece na literatura com diferentes nomes:
  - *Multiple Classifier Systems* (MCS)
  - Fusão de classificadores
  - Combinação de classificadores
  - Mistura de classificadores
  - *Ensembles*
  - Comitês

Múltiplos Classificadores

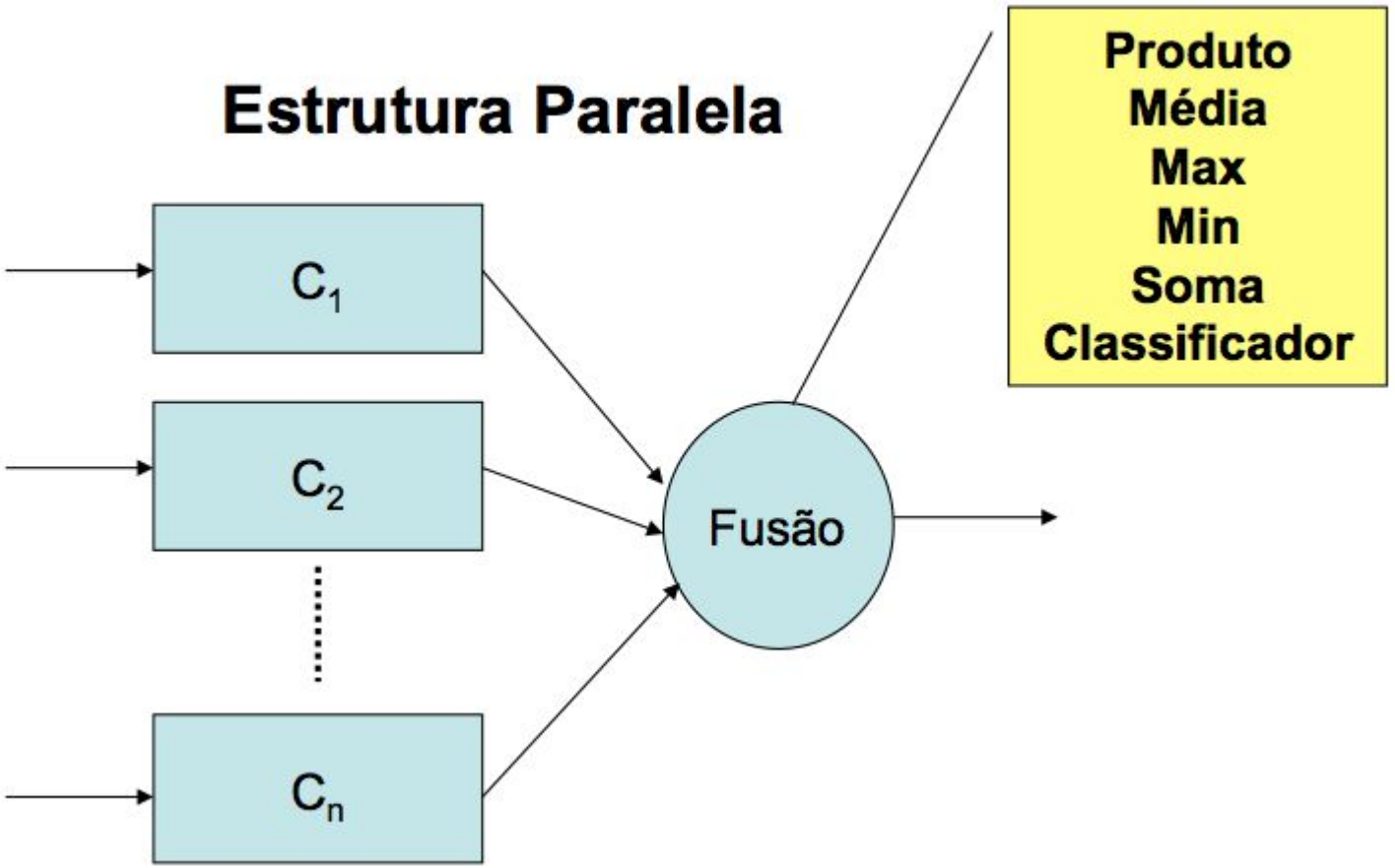
Podemos dividir o estudo de múltiplos classificadores

- Combinação de classificadores
  - Define regras de como combinar resultados produzidos por diferentes classificadores
- *Ensembles*
  - Como gerar diferentes classificadores para reduzir o erro de classificação
  - *Bagging*, *boosting*, *subspaces*, etc..
- Seleção dinâmica de classificadores

Combinando Classificadores

- Múltiplos classificadores podem ser combinados **paralelamente** ou em **série**.
  - Paralelo
    - Os classificadores C_1, C_2, …, C_n produzem decisões sobre um padrão desconhecido.
    - Todas essas decisões são então enviadas para um método de fusão que produzirá o resultado final.

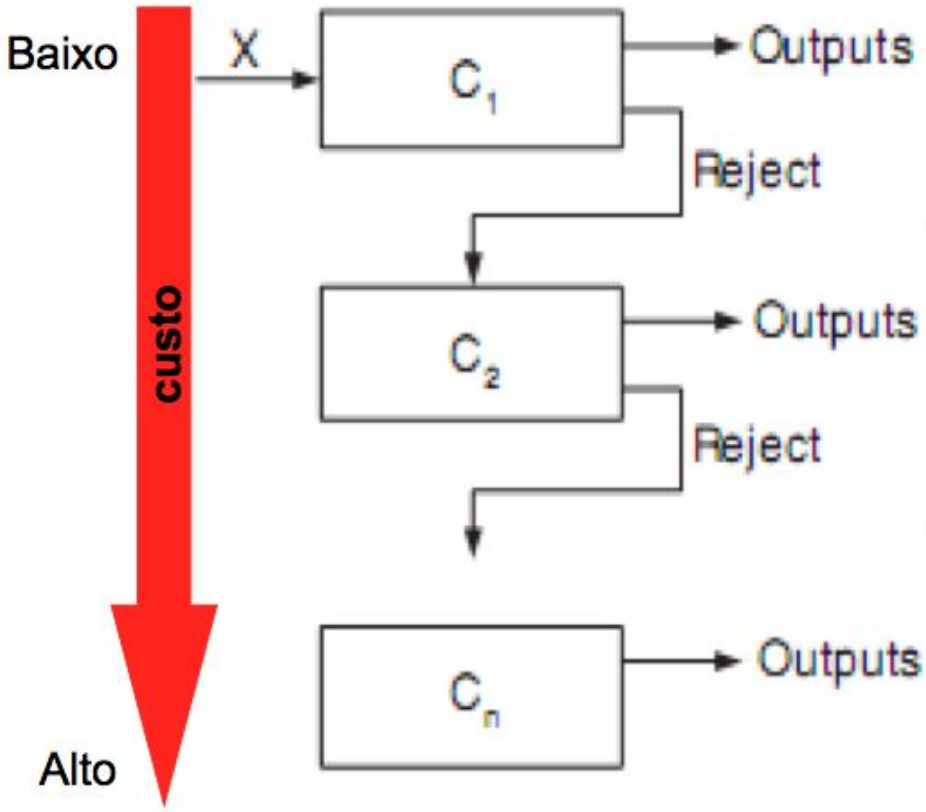
Combinando Classificadores



Combinando Classificadores

- Uma alternativa para a combinação paralela é a combinação em série
  - A cada estágio do sistema existe somente um classificador atuando no sistema
- A combinação em série pode ser dividida em duas abordagens
  - Redução de classes
  - Re-avaliação

Combinando Classificadores



Redução do custo computacional

A idéia é que a maioria dos padrões sejam classificados nos primeiros níveis, onde o custo computacional é mais baixo.

Combinando Classificadores

- Em geral, as saídas produzidas por classificadores podem ser divididas em três níveis:
  - **Abstrato**: o classificador produz como saída apenas o rótulo da classe escolhida.
    - e.g., C4.5
  - **Ranking**: O classificador produz uma lista ordenada com as possíveis classes.
    - e.g., kNN, pageRank
  - **Probabilidades/scores**: Além da lista ordenada, as probabilidades ou scores também são geradas.
    - e.g., NaiveBayes, SVM, MLP, etc.

Combinando Classificadores

Métodos de Fusão

- O método de fusão mais simples de ser implementado é o voto majoritário
  - Bastante utilizado com classificadores abstratos
  - Fácil implementação

	Probabilidade				
Classe	c1	c2	c3	c4	
1	0.8	0.56	0.1	0.6	**3**
2	0.2	0.44	0.9	0.4	1

Combinando Classificadores

Métodos de Fusão

- Se o classificador fornecer uma lista ordenada, outros métodos estão disponíveis
  - **Borda count**
    - O uso de lista de hipóteses ordenadas (*ranking*) é interessante quando a classe correta não aparece como a principal escolha (**Top 1**) do classificador, mas está próxima da saída correta Top 2 ou 3.
    - Bastante interessante para problemas com grandes léxicos (classes).

Combinando Classificadores

Exemplo **BordaCount**

- Considere os três classificadores abaixo, os quais fornecem uma lista ordenada com cinco classes
- Para cada classes, atribui-se um valor (rank). Nesse exemplo, foi atribuído 5 para o Top1, 4 para o Top2 e assim por diante.

Classificador 1

Classe	Rank
1	5
2	4
3	3
4	2
5	1

Classificador 2

Classe	Rank
4	5
2	4
5	3
1	2
3	1

Classificador 3

Classe	Rank
2	5
4	4
3	3
1	2
5	1

Combinando Classificadores

Exemplo **BordaCount**

- O resultado final é dado então pela soma dos *rankings*

Classificador 1

Classe	Rank
1	5
2	4
3	3
4	2
5	1

Classificador 2

Classe	Rank
4	5
2	4
5	3
1	2
3	1

Classificador 3

Classe	Rank
2	5
4	4
3	3
1	2
5	1

Resultado

Classe	Rank
2	13
4	11
1	9
3	7
5	5

Combinando Classificadores

Exemplo **BordaCount**

- Note que nesse exemplo, apenas um classificador (C_3) escolheu a classe 2
- Se o voto fosse utilizado, não haveria consenso.
- Pesos podem ser utilizados, caso existam classificadores com desempenhos bastante diferentes no conjunto.

Classificador 1

Classe	Rank
1	5
2	4
3	3
4	2
5	1

Classificador 2

Classe	Rank
4	5
2	4
5	3
1	2
3	1

Classificador 3

Classe	Rank
2	5
4	4
3	3
1	2
5	1

Resultado

Classe	Rank
2	13
4	11
1	9
3	7
5	5

Combinando Classificadores

- Se os classificadores produzem uma estimação de probabilidade a posteriori, podemos utilizar outros métodos de fusão, tais como:
  - Produto*
  - Soma*
  - Média
  - Máximo
  - Mínimo
- O score da combinação ainda pode ser utilizado para implementar um método de **rejeição**.

Combinando Classificadores

Produto $P(\omega_k)\prod P(\omega_k|x_i)$

- É uma regra bastante severa para combinar classificadores.
- Basta que um dos classificadores não esteja de acordo com a decisão dos outros que o resultado final será penalizado.
- Quando usar ?
- Baseado no resultados desses quatro classificadores, qual seria a classe escolhida com base na regra do produto?

	Probabilidade				
Classe	c1	c2	c3	c4	
1	0.8	0.56	0.1	0.6	0,027
2	0.2	0.44	0.9	0.4	**0,032**

Combinando Classificadores

Soma

$$(1-R)P(\omega_k)\sum_i P(\omega_k|x_i)$$

- Como o nome diz, a soma consiste em somar todas as estimativas de todos os classificadores envolvidos.
- Não é drástica como o produto.
- Resultados experimentais [Kittler 98 - On combining classifiers] mostram que a **soma** apresenta resultados bastante consistentes.
- Baseado no resultados desses quatro classificadores, qual seria a classe escolhida com base na regra da soma?

	Probabilidade			
Classe	c1	c2	c3	c4
1	0.8	0.56	0.1	0.6
2	0.2	0.44	0.9	0.4

0,515

0,485

Combinando Classificadores

Média

$$\frac{1}{R}\sum P(\omega_k|x_i)$$

- Resultado médio de todos os classificadores
- Pode ser afetada por "*outliers*"
- Baseado no resultados desses quatro classificadores, qual seria a classe escolhida com base na regra da média?

	Probabilidade			
Classe	c1	c2	c3	c4
1	0.8	0.56	0.1	0.6
2	0.2	0.44	0.9	0.4

4,502

5,557

Combinando Classificadores

Mínimo $min(P(\omega_k|x_i))$

- Os resultados encontrados pelo Min, são bastante similares aos resultados encontrados com o produto

Máximo $max(P(\omega_k|x_i))$

- A regra do máximo considera somente o classificador que maximiza a estimação de probabilidade.
- Baseado no resultados desses quatro classificadores, qual seriam as classe escolhidas por essas duas regras?

	Probabilidade			
Classe	c1	c2	c3	c4
1	0.8	0.56	0.1	0.6
2	0.2	0.44	0.9	0.4

0,1 0,8

0,2 0,9

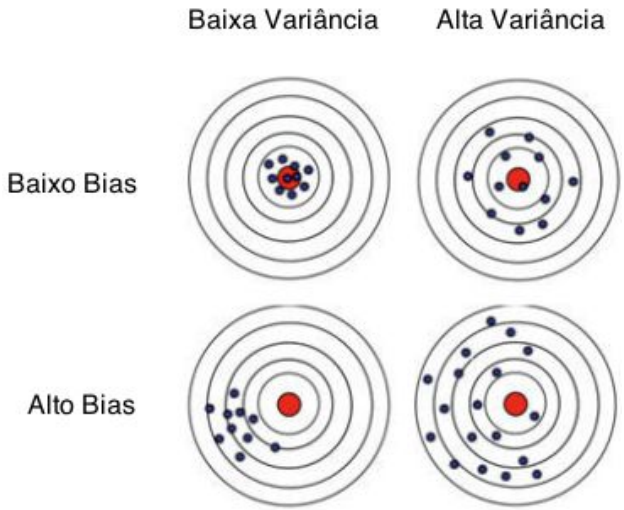
Combinando Classificadores

- Como a fusão com probabilidade se compara com o **voto majoritário**, supondo que a classe correta nesse caso é a classe 2?
- Porque a **média** se comportou diferentemente dos outros métodos baseado em fusão de probabilidades?

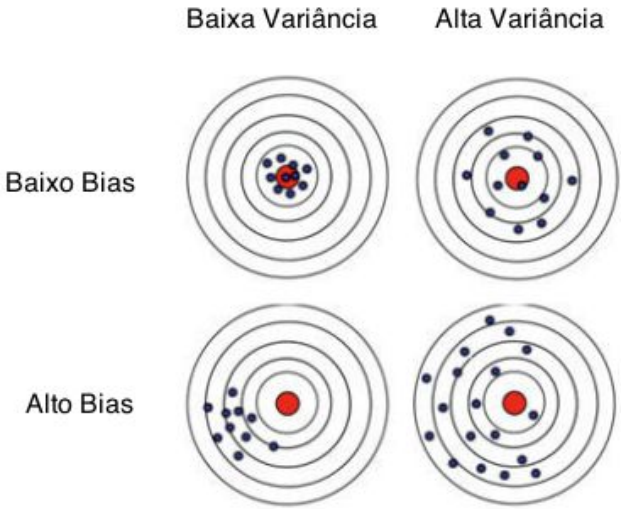
	Probabilidade								
Classe	c1	c2	c3	c4	**Prod**	**Media**	**Min**	**Max**	**Soma**
1	0.8	0.56	0.1	0.6	**0.027**	**0.515**	**0.100**	**0.800**	**4.502**
2	0.2	0.44	0.9	0.4	**0.032**	**0.485**	**0.200**	**0.900**	**5.557**

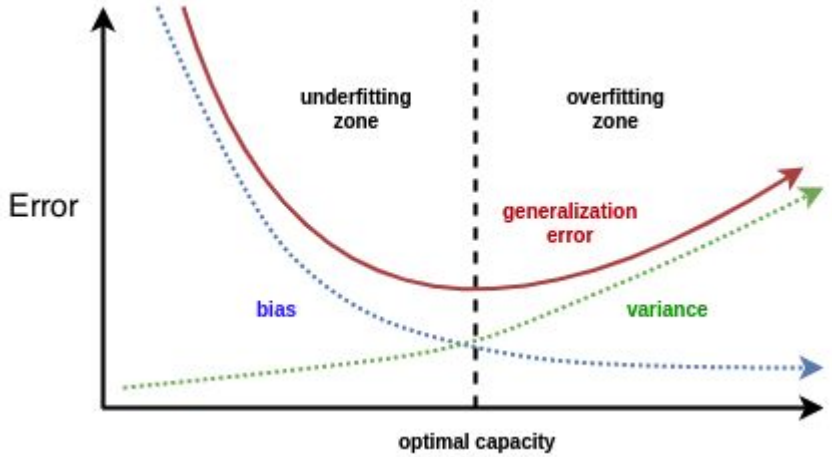
Ensembles

- Um conjunto de classificadores (geralmente do mesmo tipo) gerados automaticamente combinados de alguma forma.
- Resultados teóricos e práticos mostram que melhor desempenho do que um único classificador.
- Baseado na ideia de que o erro de um classificador pode ser decomposto em duas componentes:
  - **Bias**: Distância do resultado do classificador do seu objetivo
  - **Variância**: Quão dispersos são os resultados.



Ensembles

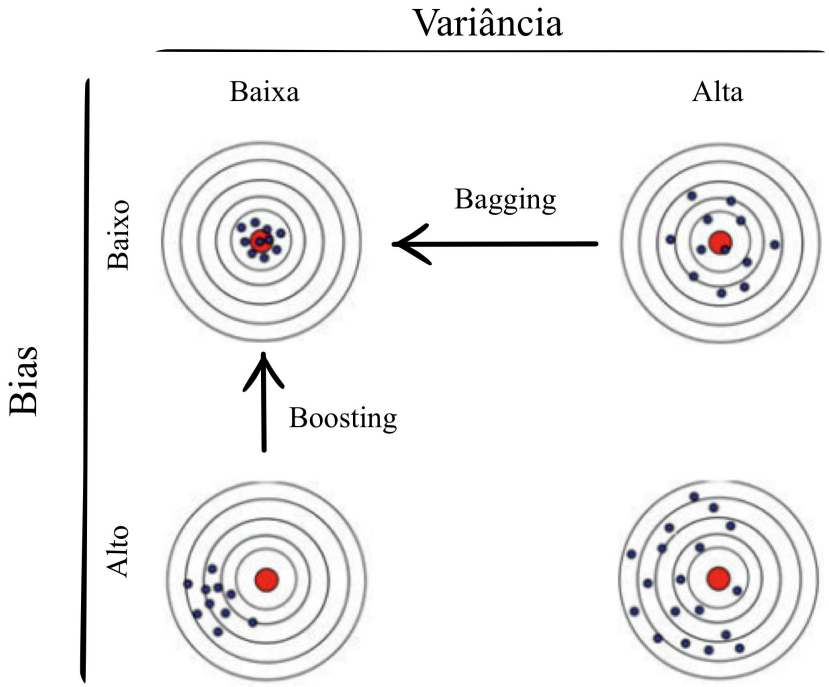

Baixa Variância
Alta Variância
Baixo Bias
Alto Bias


Error
underfitting zone
overfitting zone
generalization error
bias
variance
optimal capacity

Ensembles

Bagging e Boosting são as duas principais técnicas de *ensemble* para lidar com os problemas de alta variância e alto bias.

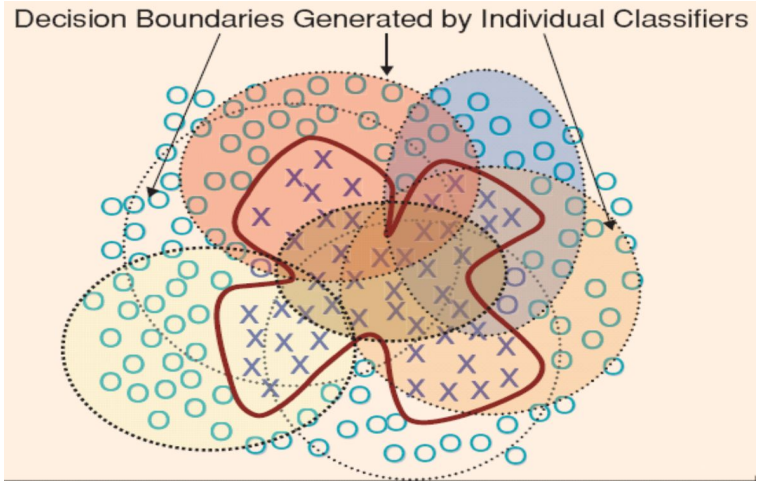
- **Bagging** é capaz de reduzir a **variância**.
- **Boosting** tem como objetivo reduzir o **bias**.



Ensembles

Bagging

- **Bagging** = *Bootstrap Aggregation*
  - Aprender diversos classificadores, utilizando para isso diferentes partições dos dados
  - Combinar o resultado dos modelos através da média
  - Média reduz a variância.



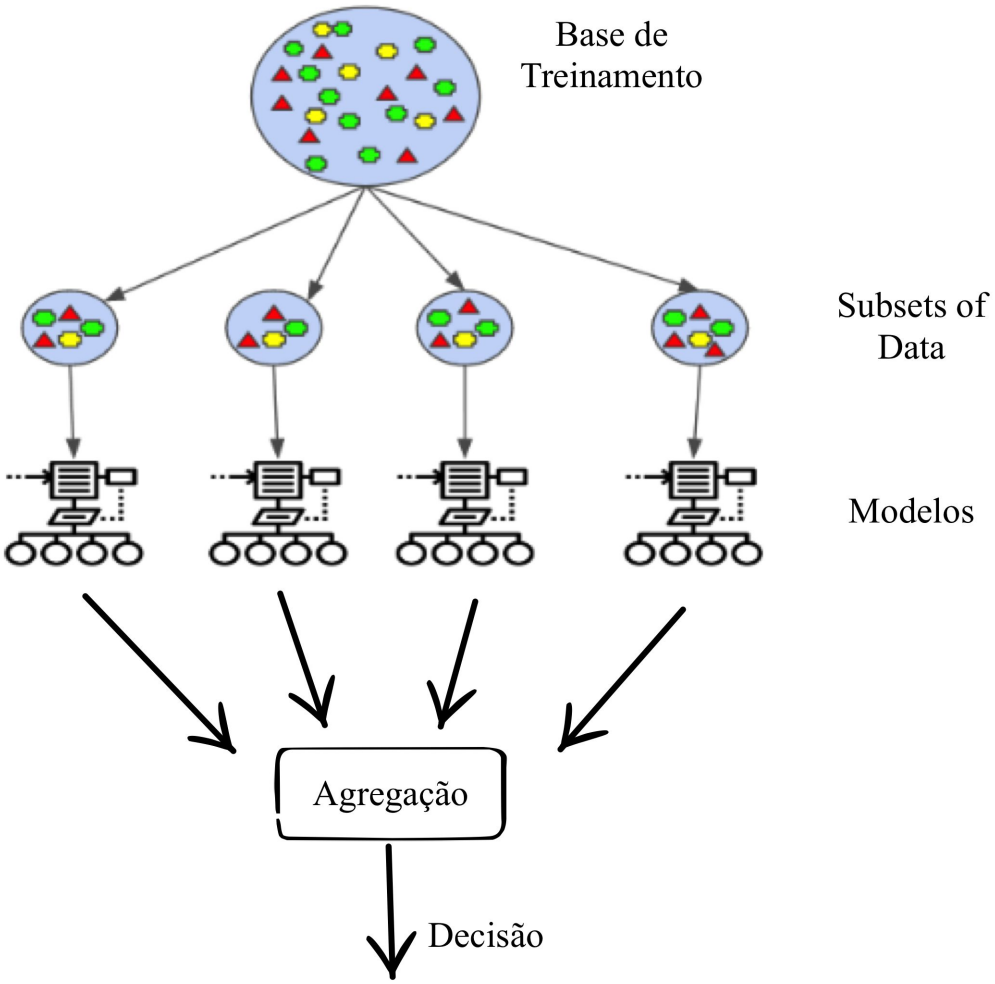
Ensembles

Bagging

- **Bootstrap**
  - Criar um conjunto aleatório de dados
  - Seleciona N' exemplos do conjunto N com reposição.
- **Bagging**
  - Repetir K vezes
  - Criar um conjunto de treinamento com N' < N exemplos
  - Treinar um classificador com esse conjunto
- Para testar, execute cada classificador na base de teste
  - Utilize uma regra de fusão para agregar os resultados (voto, média)
  - No caso de regressão, a média é usada.

Ensembles

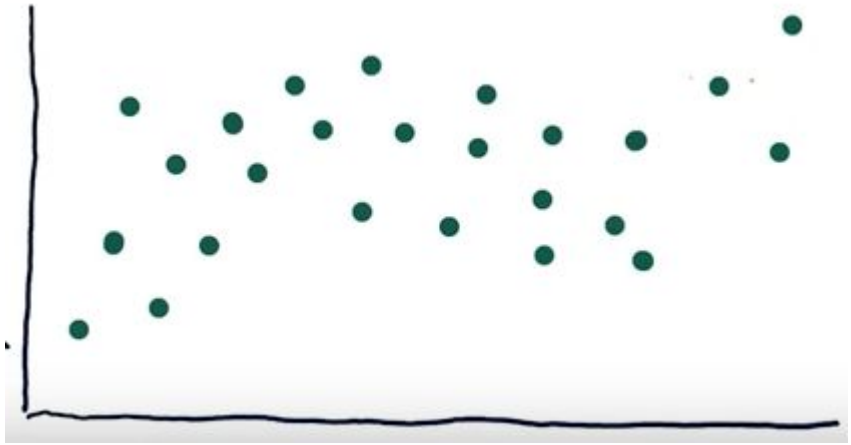
Bagging



Ensembles

Bagging - Exemplo (em regressão)

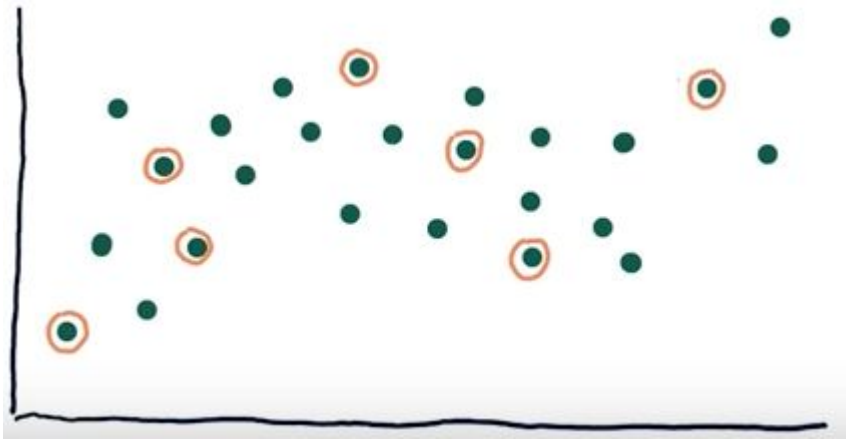
- Considere o conjunto de dados abaixo.



Ensembles

Bagging - Exemplo

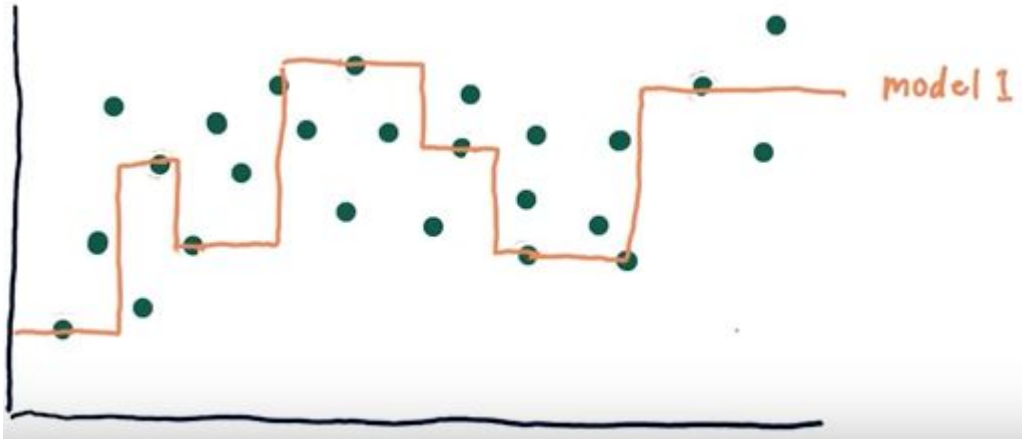
- Inicialmente selecionamos alguns dados aleatoriamente.



Ensembles

Bagging - Exemplo

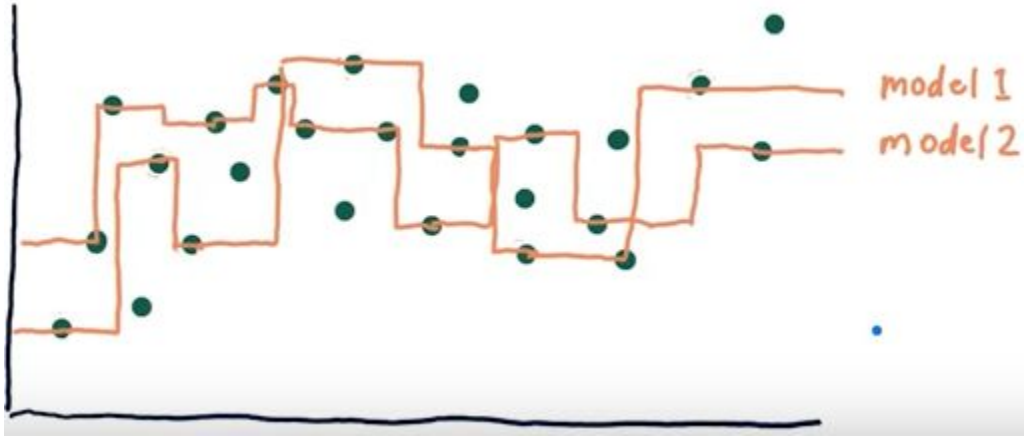
- Para esse conjunto de dados, construímos um classificador.
- Nesse exemplo, considere um *k*NN (*k* = 1) mostrado pela linha que passa sobre os pontos.
- Classificador com overfit.



Ensembles

Bagging - Exemplo

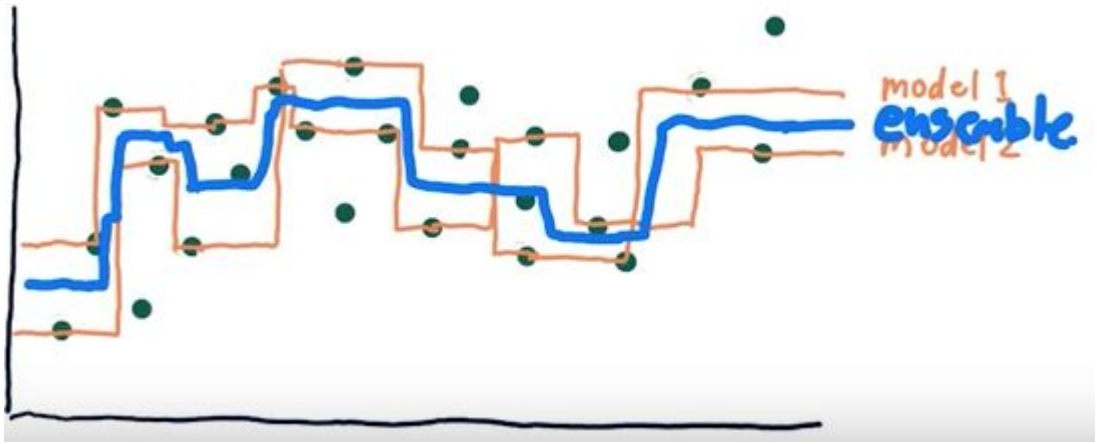
- Criando um segundo classificador com outro conjunto de dados.



Ensembles

Bagging - Exemplo

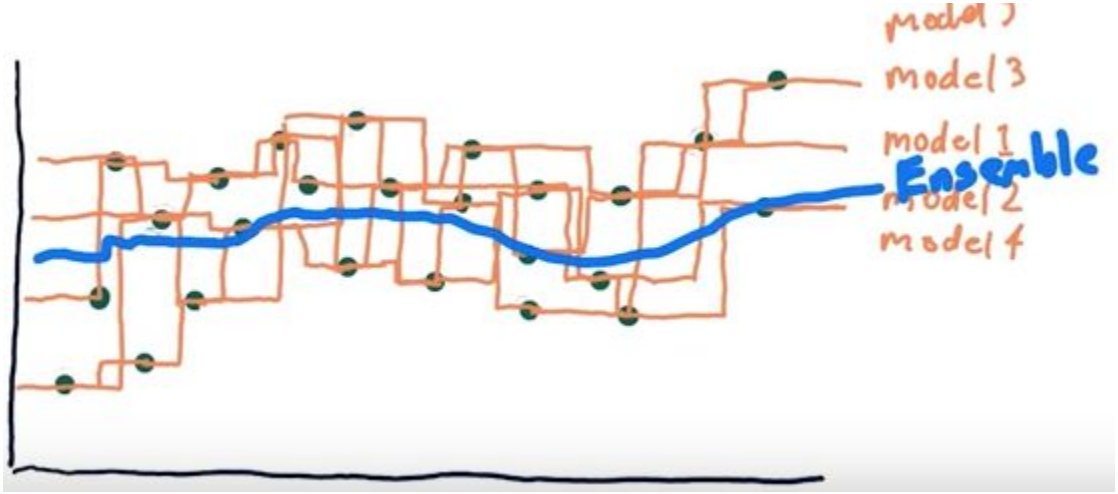
- Fazendo a média, temos um ***ensemble***.
- O qual, como pode-se perceber, descreve melhor os dados.



Ensembles

Bagging - Exemplo

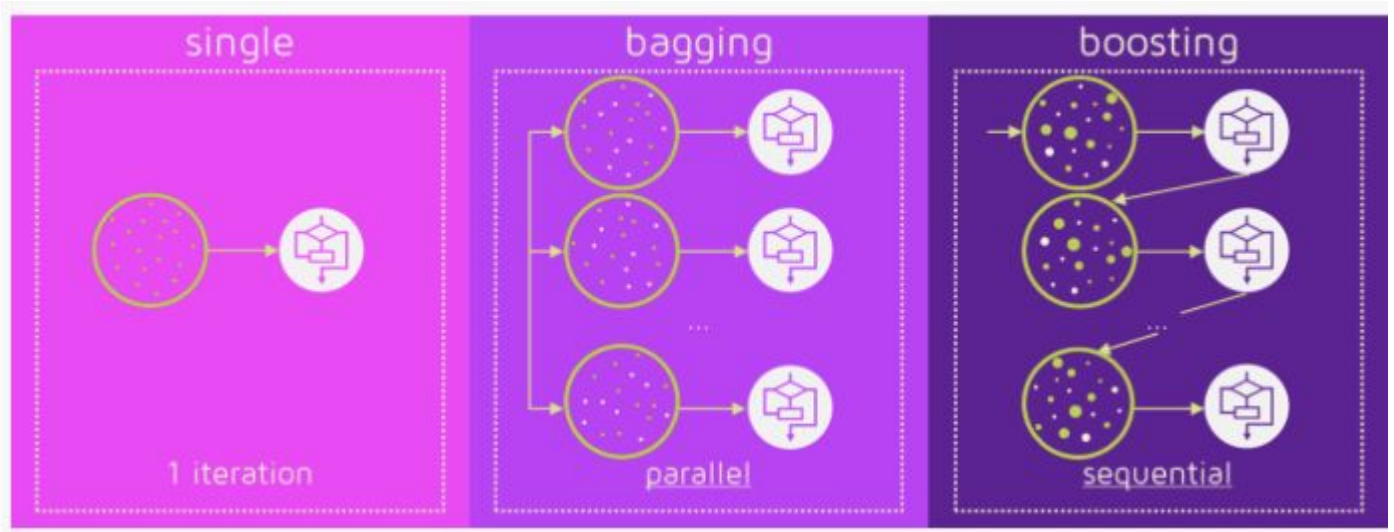
- Considerando mais classificadores, temos ainda um outro ensemble.



Ensembles

Boosting

- Treina uma sequência de classificadores (fracos) dando ênfase para exemplos **classificados erroneamente** pelo classificador anterior.
- Todos esses classificadores são então combinados, gerando assim um classificador robusto.
- Diferentemente do *bagging*, o *boosting* é sequencial.



Ensembles

Boosting

- O algoritmo original de *boosting* tem a desvantagem de precisar de um conjunto muito grande de aprendizagem.
- Em função disso, várias implementações do algoritmo de *boosting* têm sido desenvolvidas nos últimos anos.
- Uma implementação que teve bastante impacto na comunidade foi o ***AdaBoost*** (*Adaptive Boosting*)
- Mais recentemente, variantes como ***Gradient Boosting*** e ***Extreme Gradient Boosting*** (*XGBoost*) têm sido utilizadas com sucesso em diferentes tipos de problemas de classificação e regressão.

AdaBoost

- *AdaBoost* é um algoritmo que utiliza *Boosting* como método de aprendizagem
- A partir da combinação de vários classificadores com acurácia baixa (hipóteses fracas), uma regra de predição para um classificador com acurácia mais alta (hipótese forte) é produzida;
- Utiliza a mesma base de aprendizagem diversas vezes.
  - Por esse motivo a base não precisa ser muito grande.
- Classificadores devem ser fracos. Assim podemos garantir que eles não sofrem de *overfitting* (falta de generalização).

AdaBoost

Amostras / Instâncias

- Seja { $(x_i, y_i) \mid i = 1,2,...,N$ } um conjunto de N exemplos de treinamento, em que y_i é o rótulo da classe associado com a instância x_i

- $x_i \in \Re$ $\quad\quad$ $y_i \in \{+1,-1\}$ ou (natural, plástico)

AdaBoost

Taxa de Erro e Importância do Classificador

- Dado um classificador aplicado ao *TrainSet*, é necessário estimar a taxa de erro da classificação realizada

- A **Taxa de Erro** de uma hipótese (classificador) h_f (fraco) é

$$\epsilon = PR(h_f(x_i) \neq y_i)$$

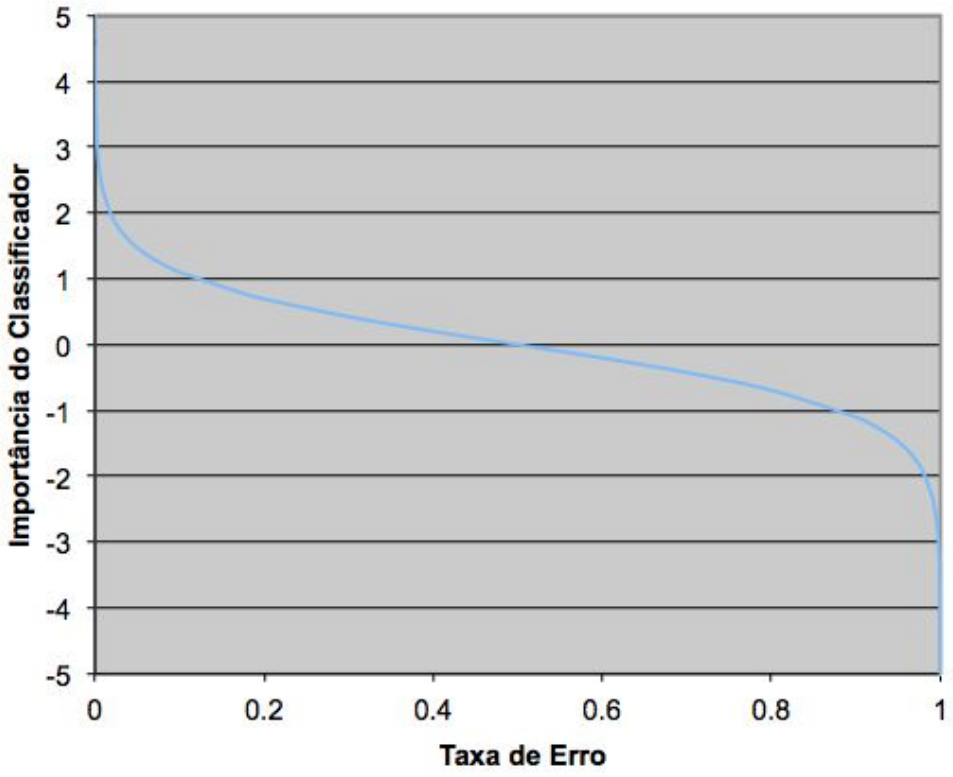
- A **Importância de um Classificador fraco** h_f , onde t é o índice da iteração, é

$$\alpha_t = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-e_t}{e_t}\right)$$

AdaBoost

Taxa de Erro e Importância do Classificador

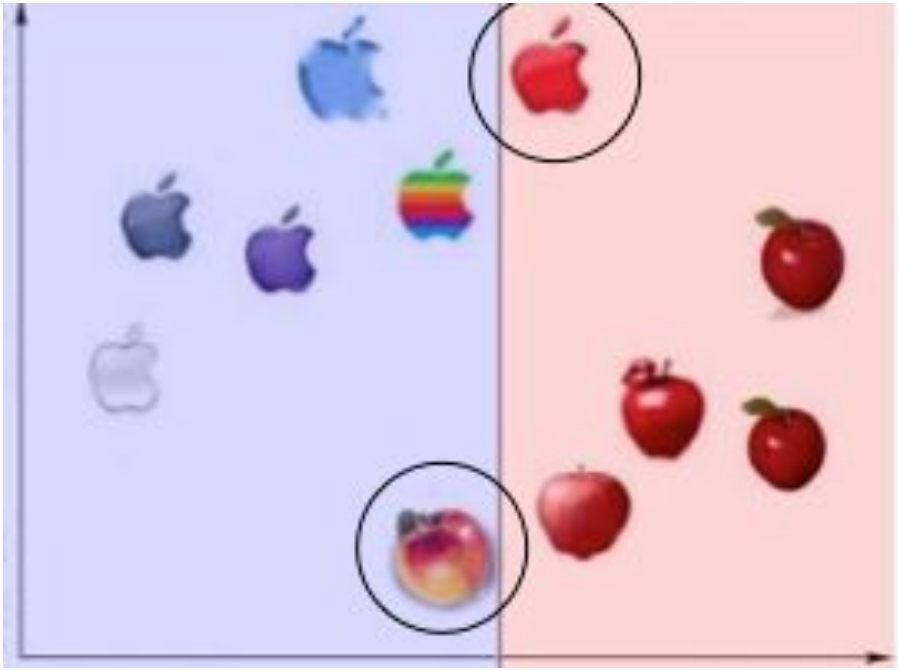
- Com isso é possível observar que quanto menor a taxa de erro, maior é a importância atribuída ao classificador.



AdaBoost

Cálculo de ϵ e $\propto$

- Erro (ϵ) = 2/11 = 0,18
- Importância ($\propto$) = $\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-0,18}{0,18}\right) = 0,75$



AdaBoost

Pesos

- Usamos α_t para atualizar os pesos dos exemplos de treinamento.
- Considerando $\omega_i^{(t)}$ o peso atribuído ao exemplo (x_i , y_i) na iteração t , temos

$$\omega_i^{(t+1)} = \frac{\omega_i^{(t)}}{Z_t} \times k \qquad k = \begin{cases} \exp^{-\alpha_t} & \text{se } h_t(x_i) = y_i, \\ \exp^{\alpha_t} & \text{se } h_t(x_i) \neq y_i \end{cases}$$

- Em que Z_t é o fator de normalização usado para garantir que o somatório dos pesos seja 1.
- Desta forma,
  - O peso diminui para registros classificados corretamente
  - O peso aumenta para registros classificados erroneamente

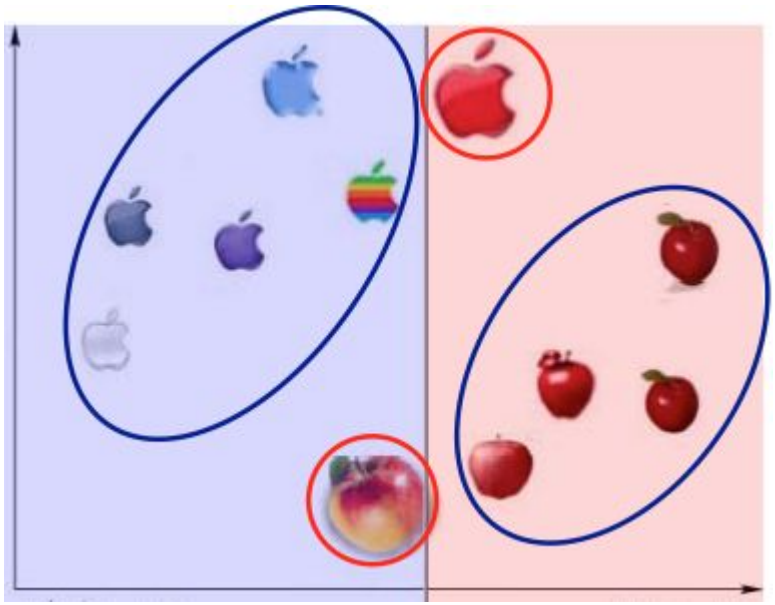
AdaBoost

Exemplo do Cálculo dos Pesos ($t = 1$)

- $\omega_i^{(t=0)} = 1/11 = 0{,}091$

- Corretos ($h_t(x_i) = y_i$)
  - $\omega_i^{(t=1)} = 0{,}091 \times \exp^{-0.75}$
  - $0{,}091 \times 0{,}047 = \mathbf{0{,}043}$

- Incorretos ($h_t(x_i) \neq y_i$)
  - $\omega_i^{(t=1)} = 0{,}091 \times \exp^{0.75}$
  - $0{,}091 \times 2{,}117 = \mathbf{0{,}193}$



AdaBoost

Normalização

- Garantir que a soma seja 1
  - (0,043 x 9) + (0,193 x 2) = 0,773
    - Corretos: 0,043 / 0,773 = **0,056**
    - Incorretos: 0,193 / 0,773 = **0,248**
  - (0,056 x 9) + (0,248 x 2) ≅ 1,000

- O resultado final é calculado com base nos resultados dos classificadores e seus respectivos pesos

$$H_f(x) = sign\left(\sum_t \alpha_t h_t(x)\right)$$

AdaBoost

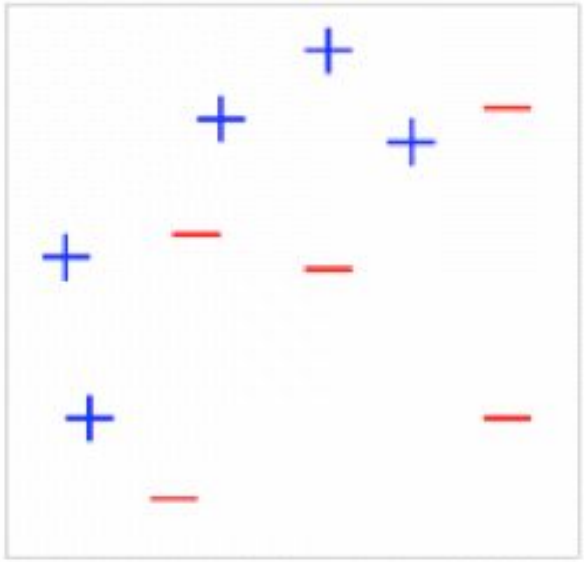
Algoritmo

1. Inicializar pesos para os N exemplos
2. Seja t o número de iterações
3. Para i = 1..t faça
   a. Crie *TrainSet* D_i pela amostragem de D de acordo com o peso
   b. Treine um classificador base h_t utilizando D_i
   c. Aplique h_t $\forall$ exemplos em D
   d. Calcule a taxa de erro de $h_t (\in)$
   e. Se a taxa de error for maior que **50%** então
      i. Re-inicialize os pesos para os N exemplos
      ii. Vá para o passo 3.a
   f. Calcule a importância do classificador ($\propto$)
   g. Calcule o novo peso para cada exemplo (ω)
4. Construa o classificador final (**forte**) ponderando as importâncias ($\propto$) de cada classificador fraco.

AdaBoost

Exemplo - Inicialização

- Considere um *TrainSet* com 10 amostras de duas classes (+,-)
- Inicialmente todas as amostras de treinamento possuem o mesmo pesso (1/10).



AdaBoost

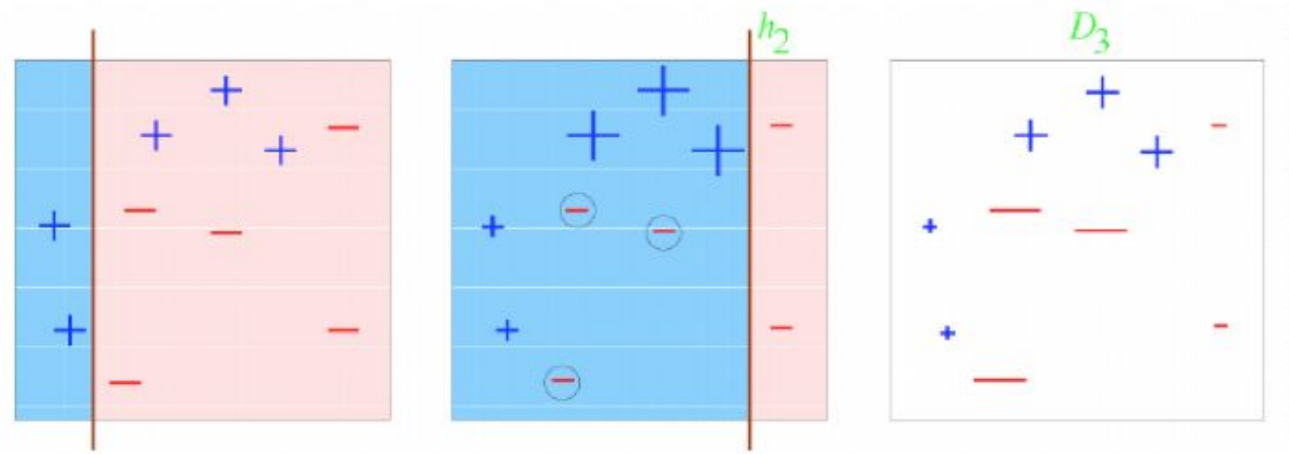
Exemplo - Primeira Iteração

- Três amostras positivas são classificadas incorretamente pelo classificador h_1
- Os pesos para essas amostras são aumentados (*boosted*).
  - $\epsilon_1 = 0{,}30$ (30%) e $\alpha_1 = 0{,}42$ (importância)

AdaBoost

Exemplo - Segunda Iteração

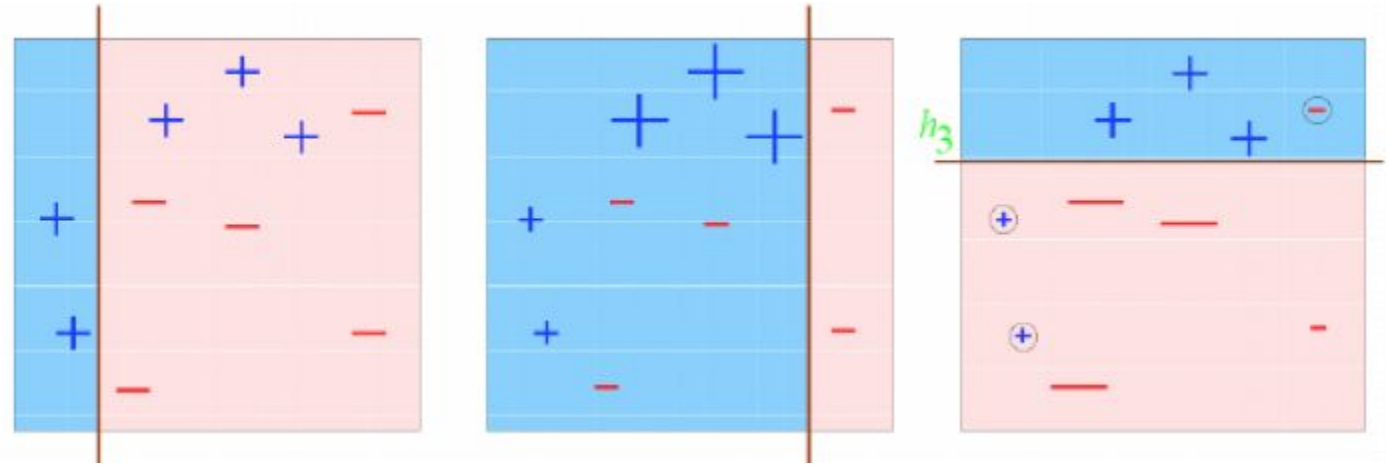
- Três amostras negativas são classificadas incorretamente pelo classificador h_2
- Os pesos para essas amostras são aumentados (*boosted*).
  - $\epsilon_2 = 0{,}21$ (21%) e $\alpha_2 = 0{,}62$ (importância)



AdaBoost

Exemplo - Terceira Iteração

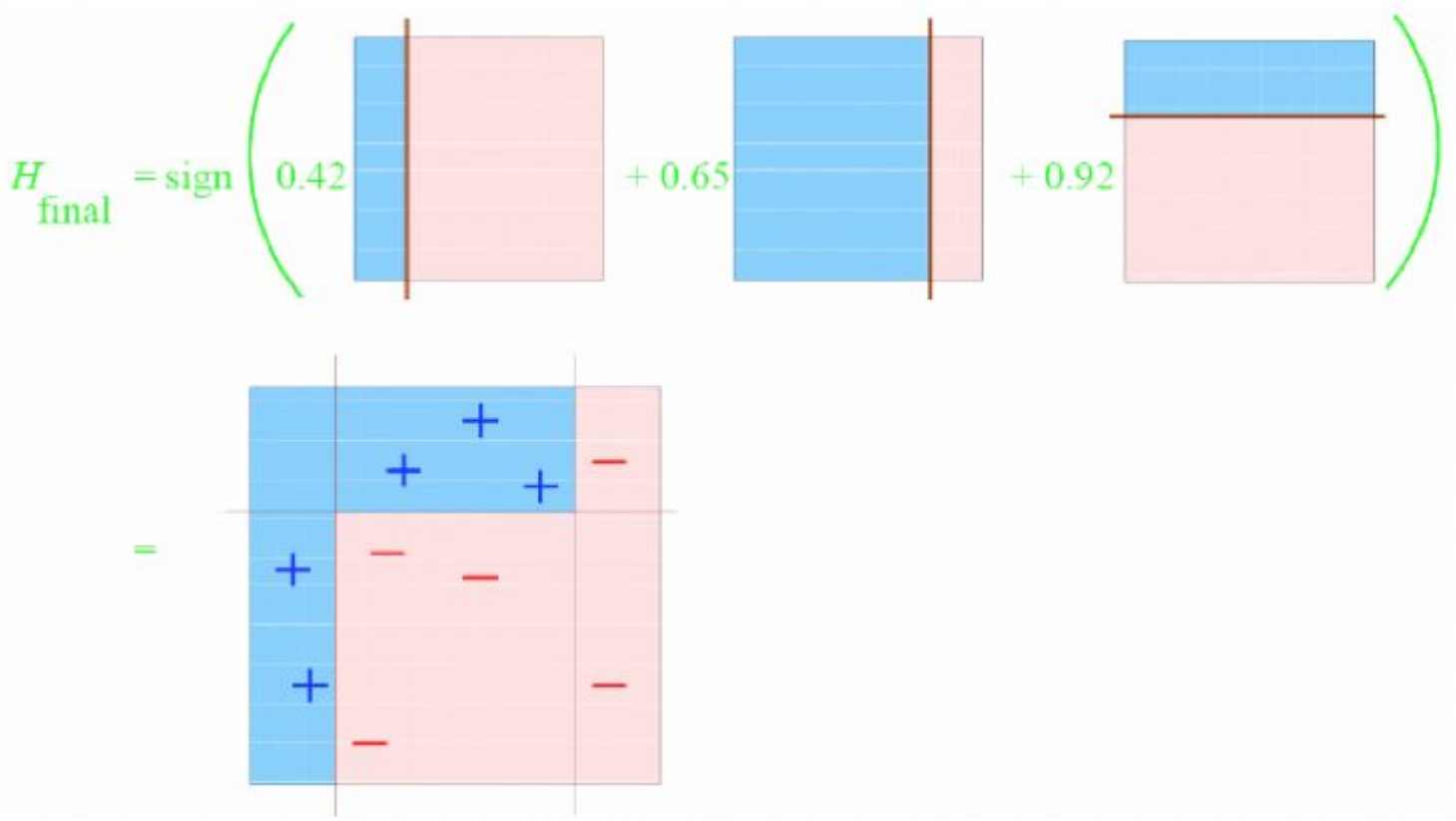
- Uma amostra negativas e três positivas são classificadas incorretamente pelo classificador h_3
- Os pesos para essas amostras são aumentados (*boosted*).
  - $\epsilon_2 = 0{,}14$ (14%) e $\alpha_3 = 0{,}92$ (importância)



AdaBoost

Exemplo - Classificador final

- Integra os três classificadores fracos e obtém um classificador final robusto



AdaBoost

Vantagens:

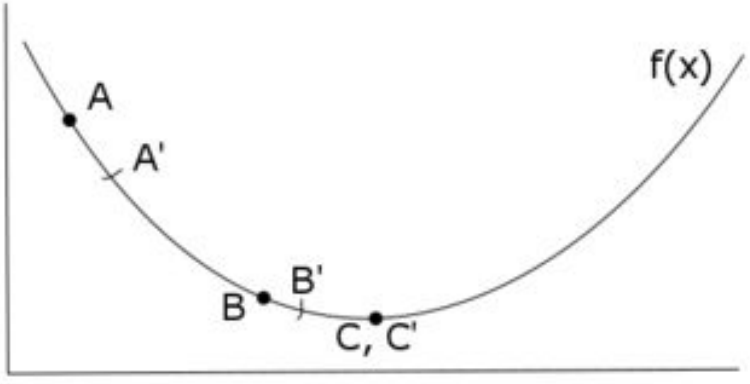
- Simples e fácil de implementar.
- Diferentes algoritmos de base podem ser usados como classificadores fracos.
- Como o conjunto de dados é sempre o mesmo, não existe a necessidade de uma grande base de treinamento.

Desvantagens:

- Depende do desempenho dos classificadores fracos. (**> 50%**)
- Desempenho é ruim se a quantidade de ruídos for alta (desempenho ruim dos classificadores fracos).

Gradient Boosting

- O desempenho do *Boosting* pode ser melhorado dando pesos para os classificadores.
- No caso do *Gradient Boosting*, os pesos são encontrados através do algoritmo ***Gradient Descent***.
- O algoritmo de otimização é dividido em duas partes:
  - Determinar a direção do gradiente
  - Tamanho do passo
- **XGBoost** segue exatamente a mesma ideia, mas foi o processo de otimização da descida do gradiente que foi modificado para ganhar em desempenho e também evitar *overfitting*.



Random Subspace Method (RSM)

- RSM é bastante parecido com *Bagging*, porém as características (**atributos**) são selecionados aleatoriamente com reposição.
- Esse processo é também conhecido como "*Feature Bagging*".
- Isso evita que características fortes (alto poder de discriminação) sejam sempre utilizadas.
- Gera maior diversidade.
- RSM utilizado com árvores de decisão é conhecido como
  - Florestas Aleatórias (***Random Forests***)

Random Forests

- Árvores muito profundas tendem a ter baixo poder de generalização (baixo **bias** e alta **variância**).

- *Random Forests* é a maneira de se fazer a média de diversas árvores treinadas em diferentes partições da mesma base.

- Nesse caso existe um pequeno aumento no bias
  - um pouco de perda de interpretabilidade das decisões (ponto forte da árvore de decisão)

Referências