UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

LogIA

Aprendizagem de Máquina

César Lincoln Cavalcante Mattos

2025

Agenda

Comitês de modelos

- **Questão**: Por que combinar predições de diferentes modelos de aprendizagem?

Comitês de modelos

- **Questão**: Por que combinar predições de diferentes modelos de aprendizagem?
- **Intuição**: Diferentes modelos podem apresentar erros distintos.

Comitês de modelos

- **Questão**: Por que combinar predições de diferentes modelos de aprendizagem?
- **Intuição**: Diferentes modelos podem apresentar erros distintos.
- **Dilema viés-variância** (mais detalhes no próximo slide)
  - $\rightarrow$ Viés alto em geral está relacionado a *underfitting* (modelo muito simples).
  - $\rightarrow$ Variância alta em geral está relacionada a *overfitting* (modelo muito complexo).

Comitês de modelos

- **Questão**: Por que combinar predições de diferentes modelos de aprendizagem?
- **Intuição**: Diferentes modelos podem apresentar erros distintos.
- **Dilema viés-variância** (mais detalhes no próximo slide)
  - $\rightarrow$ Viés alto em geral está relacionado a *underfitting* (modelo muito simples).
  - $\rightarrow$ Variância alta em geral está relacionada a *overfitting* (modelo muito complexo).
- O uso de múltiplos modelos visa **controlar o viés ou a variância**, buscando melhor **capacidade de generalização**.

Comitês de modelos

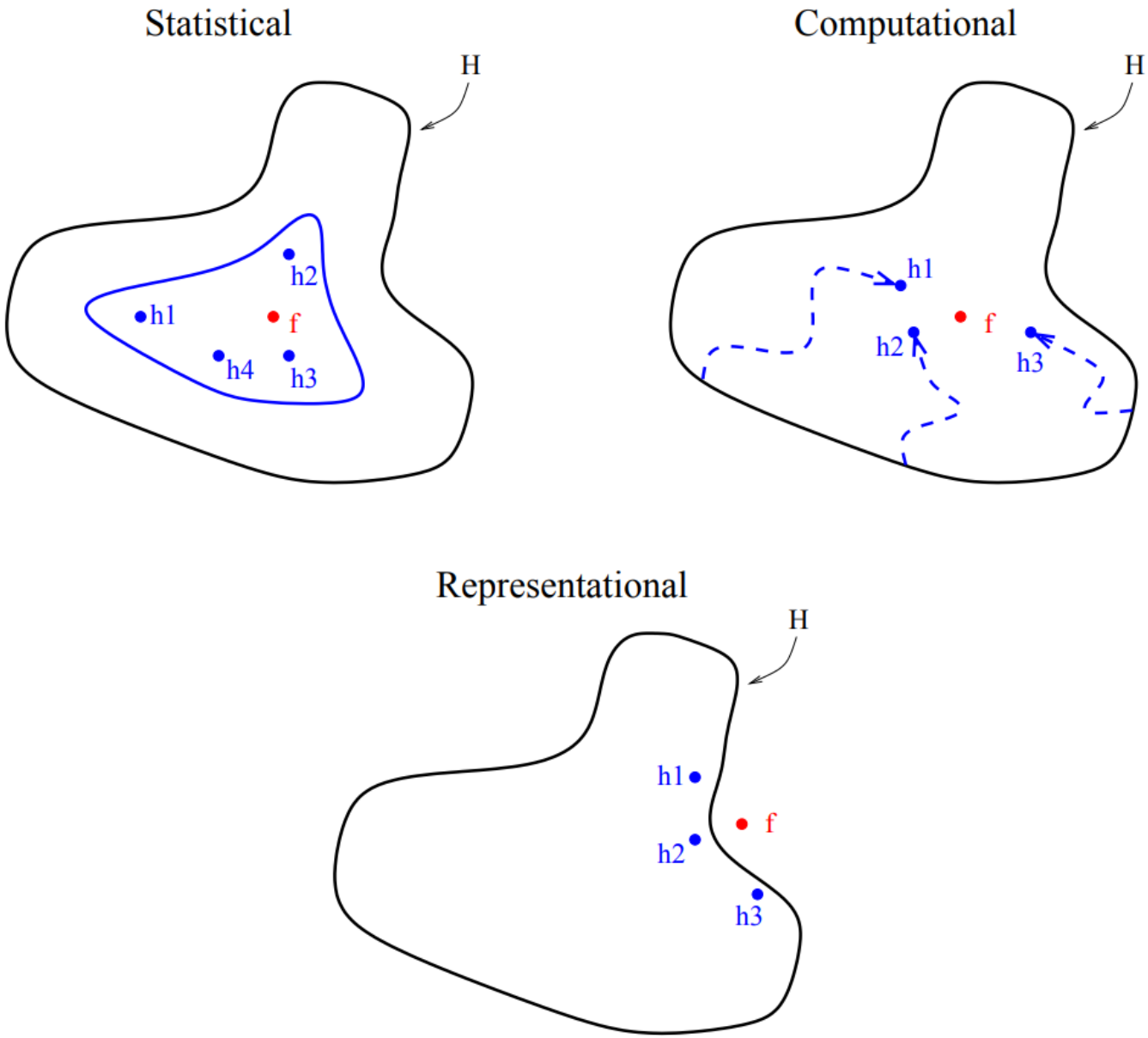
Dilema viés-variância

- Por exemplo, considere um estimador $\hat{\theta}$ e $\bar{\theta} = \mathbb{E}[\hat{\theta}]$ sua esperança para dados variantes.
- O erro quadrático médio obtido em relação ao parâmetro real θ^* pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta^*)^2] &= \mathbb{E}\left[\left[(\hat{\theta} - \bar{\theta}) + (\bar{\theta} - \theta^*)\right]^2\right] \\
&= \mathbb{E}[(\hat{\theta} - \bar{\theta})^2] + 2(\bar{\theta} - \theta^*)\mathbb{E}[\hat{\theta} - \bar{\theta}] + (\bar{\theta} - \theta^*)^2 \\
&= \underbrace{\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \bar{\theta})^2]}_{\text{variância de } \hat{\theta}} + \underbrace{(\bar{\theta} - \theta^*)^2}_{\text{viés de } \hat{\theta}}.
\end{aligned}$$

- Indica que um estimador com viés pode reduzir a sua variância no contexto de minimização do erro quadrático médio.

Motivação para o uso de comitês (*ensembles*)



DIETTERICH, Thomas G. Ensemble methods in machine learning, 2000.

Comitês de modelos

- Condições para que um comitê de classificadores seja melhor que suas componentes individuais:
  - → **Acurácia**: Os modelos individuais devem ser ao menos melhores que uma predição aleatória.
  - → **Diversidade**: Os modelos individuais devem apresentar erros distintos.

Comitês de modelos

Comitês de modelos por votação

- Combina as saídas de múltiplos modelos obtidos por diferentes estratégias de aprendizagem.
- **Classificação**: retorna a média das probabilidades preditas ou a classe mais presente entre as predições individuais.
- **Regressão**: retorna a média das predições individuais.
- Pode-se ainda **ponderar as predições** de cada modelo individual.
  - $\rightarrow$ Ponderação pelo desempenho em um conjunto de validação.

Comitês de classificadores por votação majoritária

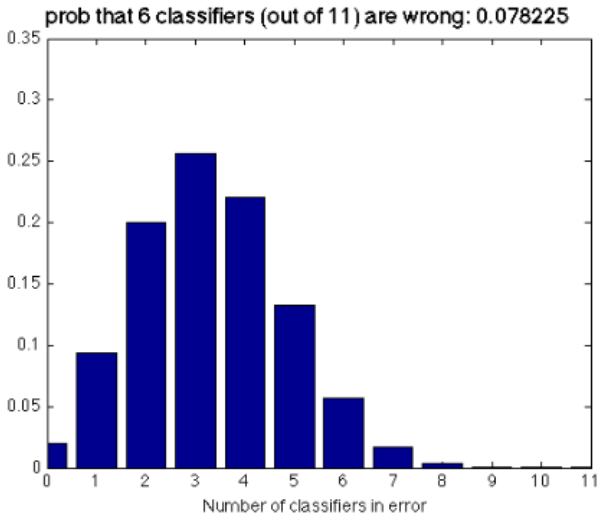
- Considere um problema de classificação binária e taxas de erros individuais independentes e iguais a ϵ.
- **Questão**: Qual a probabilidade de um comitê por votação majoritária de M classificadores retorne um erro?

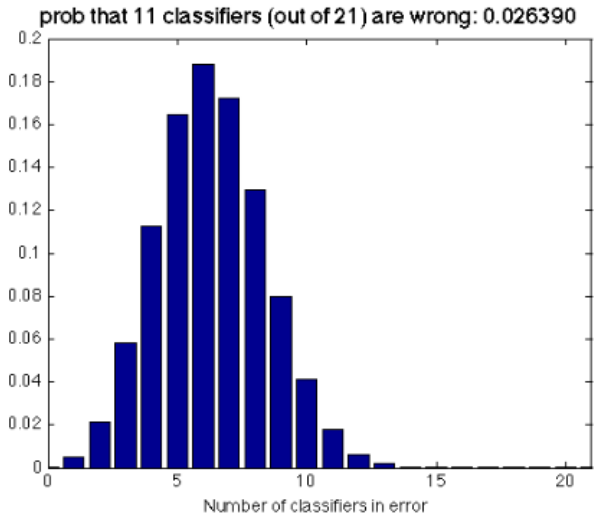
Comitês de classificadores por votação majoritária

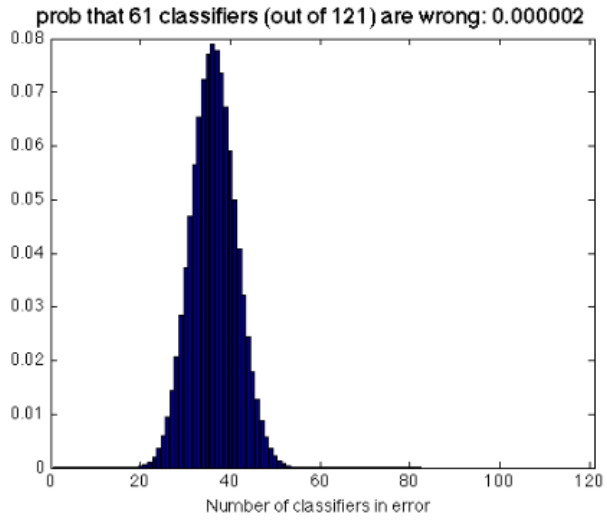
- Considere um problema de classificação binária e taxas de erros individuais independentes e iguais a ϵ.
- **Questão**: Qual a probabilidade de um comitê por votação majoritária de M classificadores retorne um erro?

$$\sum_{k=\lfloor M/2 \rfloor+1}^{M} P(\text{num erros} = k) = \sum_{k=\lfloor M/2 \rfloor+1}^{M} \binom{M}{k} \epsilon^k (1-\epsilon)^{M-k}.$$

Motivação para o uso de comitês (*ensembles*)

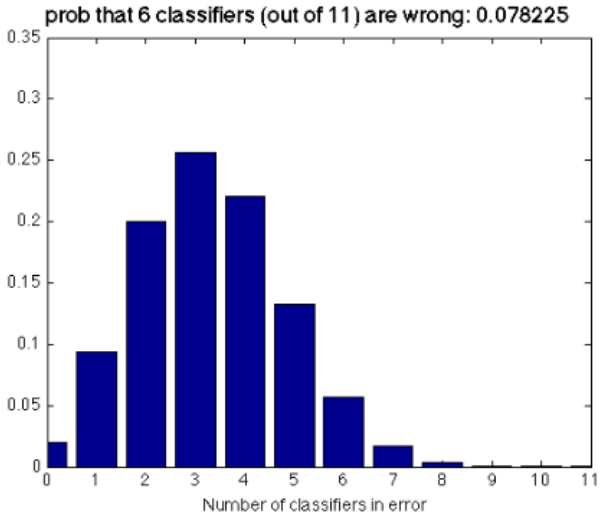


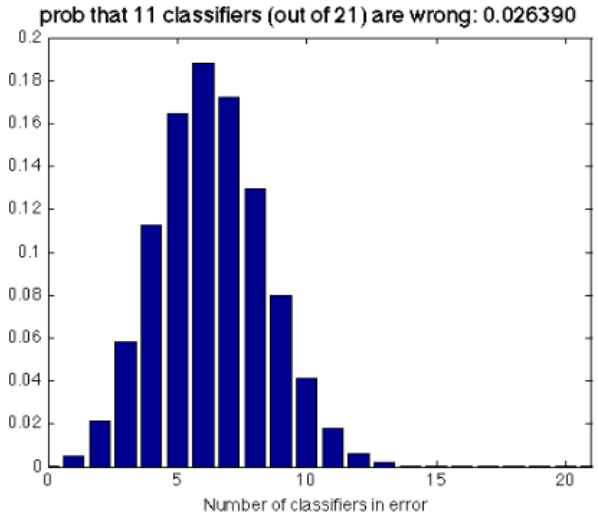


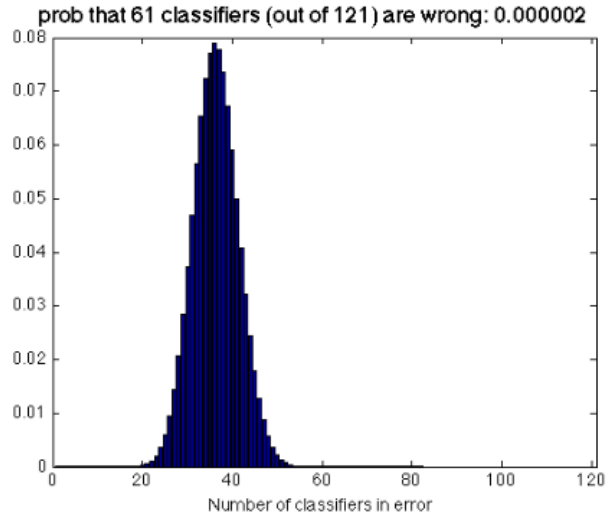


$\epsilon = 0.3;\ M = 11,\ M = 21$ e $M = 121.$

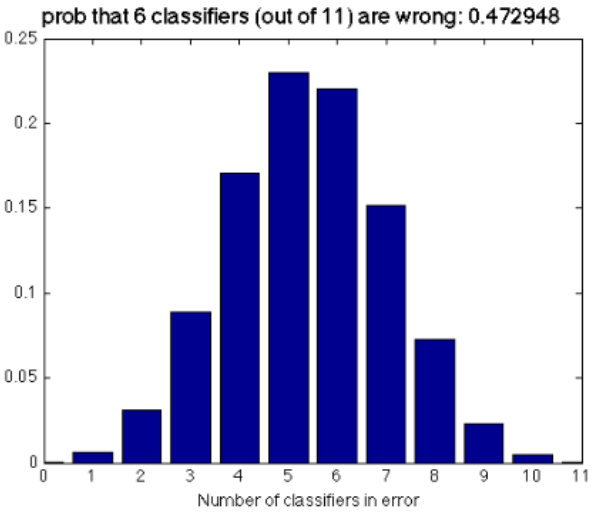
Motivação para o uso de comitês (*ensembles*)

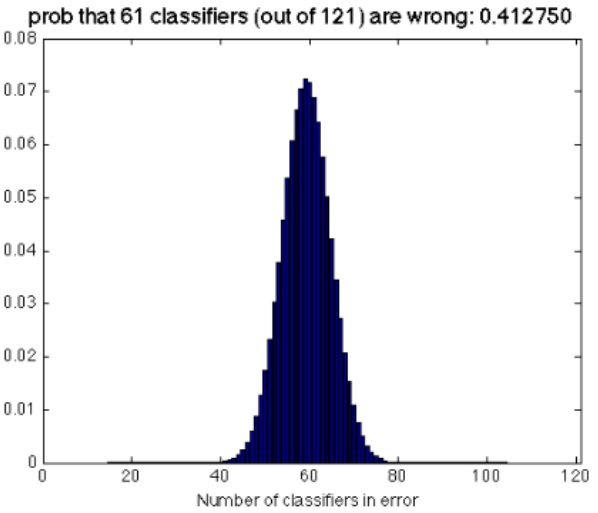


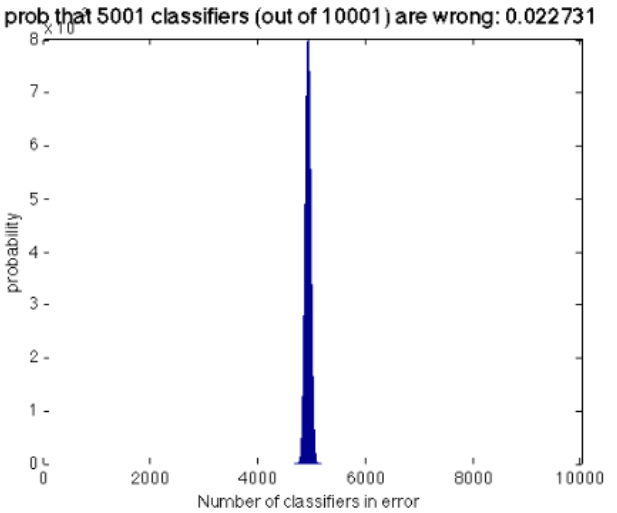




$\epsilon = 0.3$; $M = 11$, $M = 21$ e $M = 121$.







$\epsilon = 0.49$; $M = 11$, $M = 121$ e $M = 10001$.

Comitês de classificadores por votação majoritária

- **Problema**: Na prática é difícil garantir a completa independência das taxas de erro dos classificadores individuais.

Comitês de classificadores por votação majoritária

- **Problema**: Na prática é difícil garantir a completa independência das taxas de erro dos classificadores individuais.
- Estratégias comuns para promoção de **diversidade**:
  - **Bagging**: Cada classificador é treinado com um conjunto de treinamento um pouco diferente.
  - **Boosting**: Cada classificador é treinado com pesos diferentes para cada exemplo.

Agenda

Promoção de diversidade

- **Problema**: Classificadores base idênticos não apresentam melhoria quando combinados.

Promoção de diversidade

- **Problema**: Classificadores base idênticos não apresentam melhoria quando combinados.
- **Ideia**: Promover diversidade através de modificações no conjunto de treinamento.

Comitês de modelos

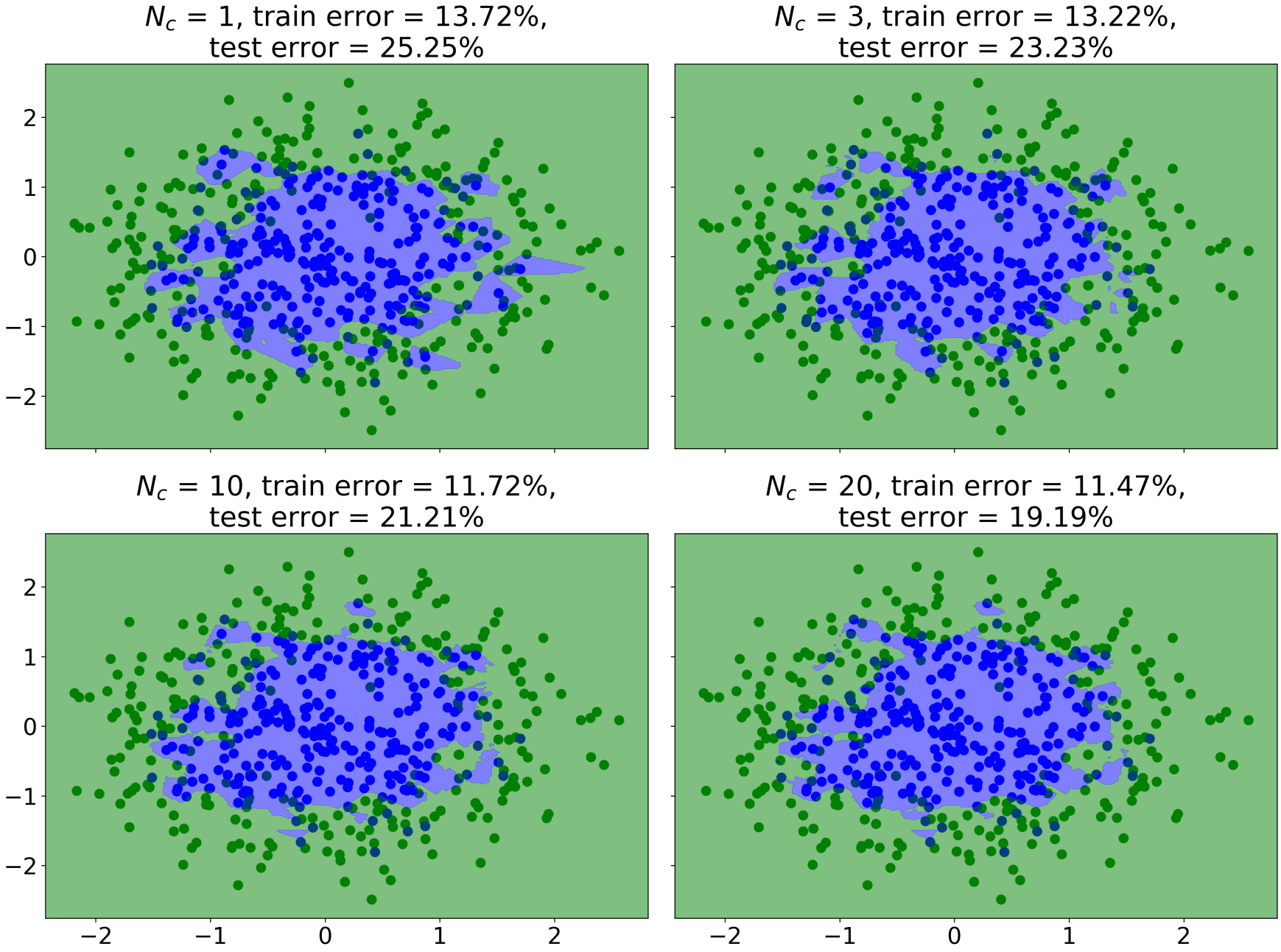
Bootstrap Aggregating (Bagging) (BREIMAN, 1996)

- Cria L subconjuntos a partir do conjunto de treinamento original via **amostragens aleatórias com reposição**.
- Cada modelo base é treinado com dados um pouco diferentes.
- Realiza votação majoritária ou média das saídas do comitê.
- Amostragem com reposição (*bootstrapping*) de um conjunto de N exemplos:
  - $\rightarrow$ Cada exemplo possui probabilidade $\left(\frac{N-1}{N}\right)^N$ de não ser adicionado em um subconjunto.
  - $\rightarrow$ Para N grande, temos $1 - \left(\frac{N-1}{N}\right)^N \approx 1 - \exp(-1) \approx 63.2\%$ de exemplos únicos em cada subconjunto.

Bagging

- Bagging é uma técnica de **redução de variância**.
- O viés de cada modelo base é um pouco maior, devido a menor quantidade de exemplos únicos de treinamento.
- **Out-of-bag**: Exemplos que não foram selecionados em um dado conjunto ($\approx 1/3$ dos dados) e que podem servir de conjunto de validação.

Exemplo de aplicação de Bagging com 3-NN

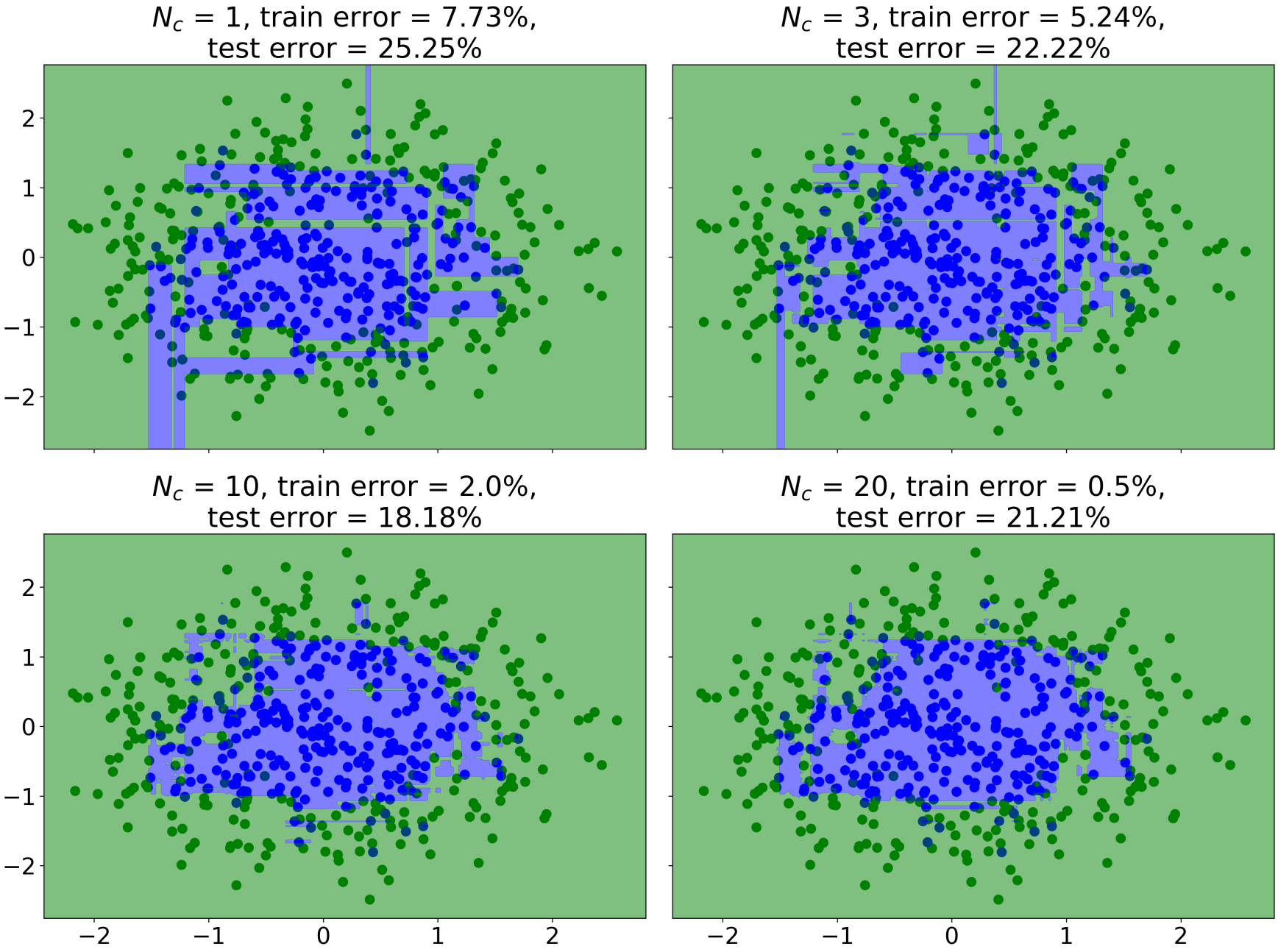


Bagging

Random Forest

- Bagging de modelos de árvore de decisão.
- **Bagging de atributos**: Cada classificador base tem acesso a um subconjunto aleatório dos atributos disponíveis.
- Grande diminuição na variância do modelo final ao custo de um aumento no viés dos modelos base.
- Pode ser usado tanto em classificação quanto para regressão.

Exemplo de aplicação do Random Forest



Bagging

- **Vantagens**:
  - → Visa a diminuição da variância do modelo final.
  - → Em geral, resulta em melhor acurácia.
  - → Pode usar os exemplos *out-of-bag* para validação.
  - → Os modelos individuais podem ser treinados em paralelo.
- **Desvantagens**:
  - → Resulta no aumento de viés dos modelos base.
  - → Modelo final não é interpretável.
  - → Muitos modelos causam aumento do custo computacional.

Agenda

Comitês de modelos

Boosting

- Estratégia de treinamento de múltiplos modelos em série, em que **o próximo modelo pondera mais os exemplos errados pelo modelo anterior**.
- Mantém um conjunto de pesos para cada padrão de treinamento.
- O modelo final agrega todos os modelos treinados a partir de uma soma ponderada.

Boosting

- Boosting é uma técnica de **redução de viés**.
- Costuma ser aplicado com *weak learners*, como *decision stumps* (árvores de decisão com somente uma ramificação).
- Diversos algoritmos para aplicação de boosting no treinamento: **AdaBoost**, L2Boosting, **Gradient Boosting**, Logit Boosting...

Boosting

AdaBoost

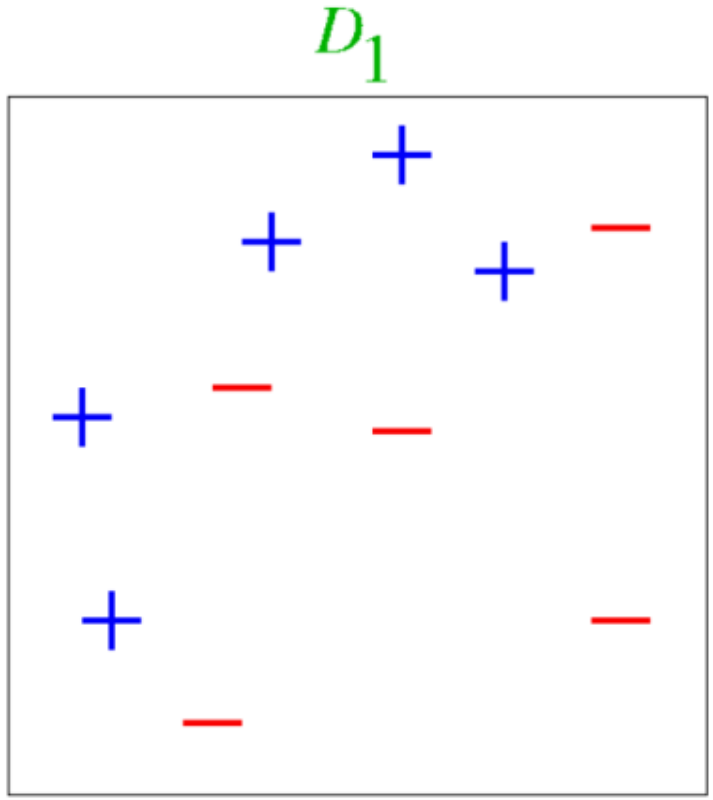
1. Inicializa os pesos dos exemplos de maneira uniforme: $\beta_i = \frac{1}{N}$;
2. Para M classificadores (considerando $y_i \in \{-1, 1\}$):
   1. Treine um *weak learner* G_m com o conjunto de treinamento ponderado por $\beta_i|_{i=1}^{N}$;
   2. Compute erros ponderados: $e_m = \frac{\sum_i \beta_i \mathbb{I}(y_i \neq G_m(\boldsymbol{x}_i))}{\sum_i \beta_i}$.
   3. Compute um peso para o classificador G_m: $\alpha_m = \frac{1}{2} \log\left(\frac{1-e_m}{e_m}\right)$.
   4. Atualize os pesos dos exemplos de treinamento:

$$\beta_i \leftarrow \beta_i \exp\left(-y_i \alpha_m G_m(\boldsymbol{x}_i)\right).$$

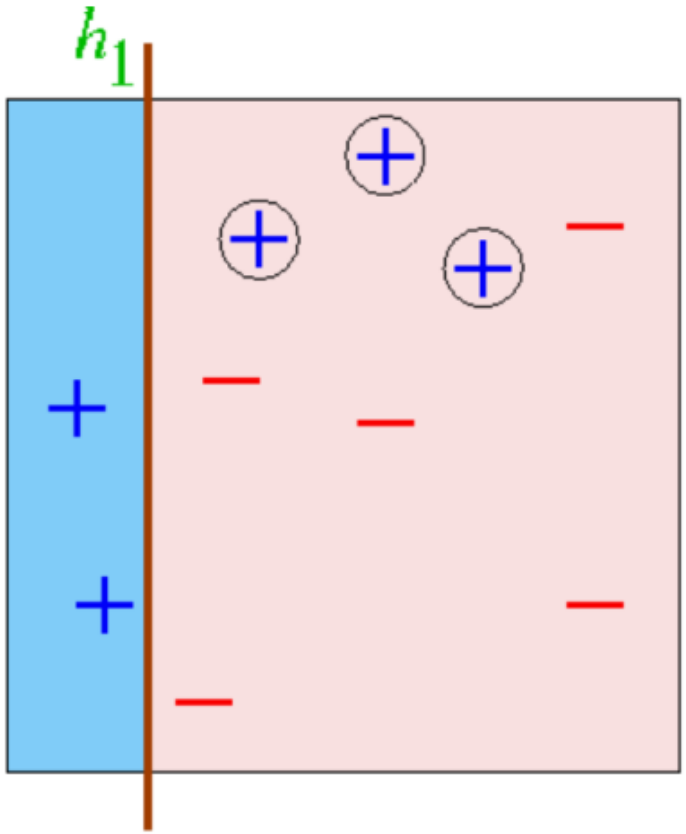
3. A saída do comitê é dada por: $f(\boldsymbol{x}) = \text{sign}\left(\sum_m \alpha_m G_m(\boldsymbol{x})\right)$.

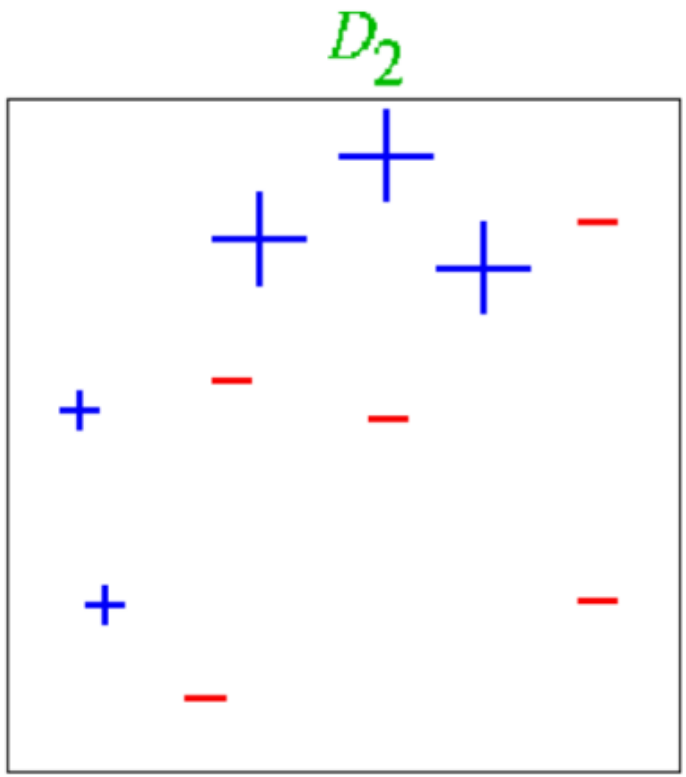
- Cada modelo dá mais ênfase aos padrões errados anteriormente.

Exemplo de aplicação do Boosting



Exemplo de aplicação do Boosting

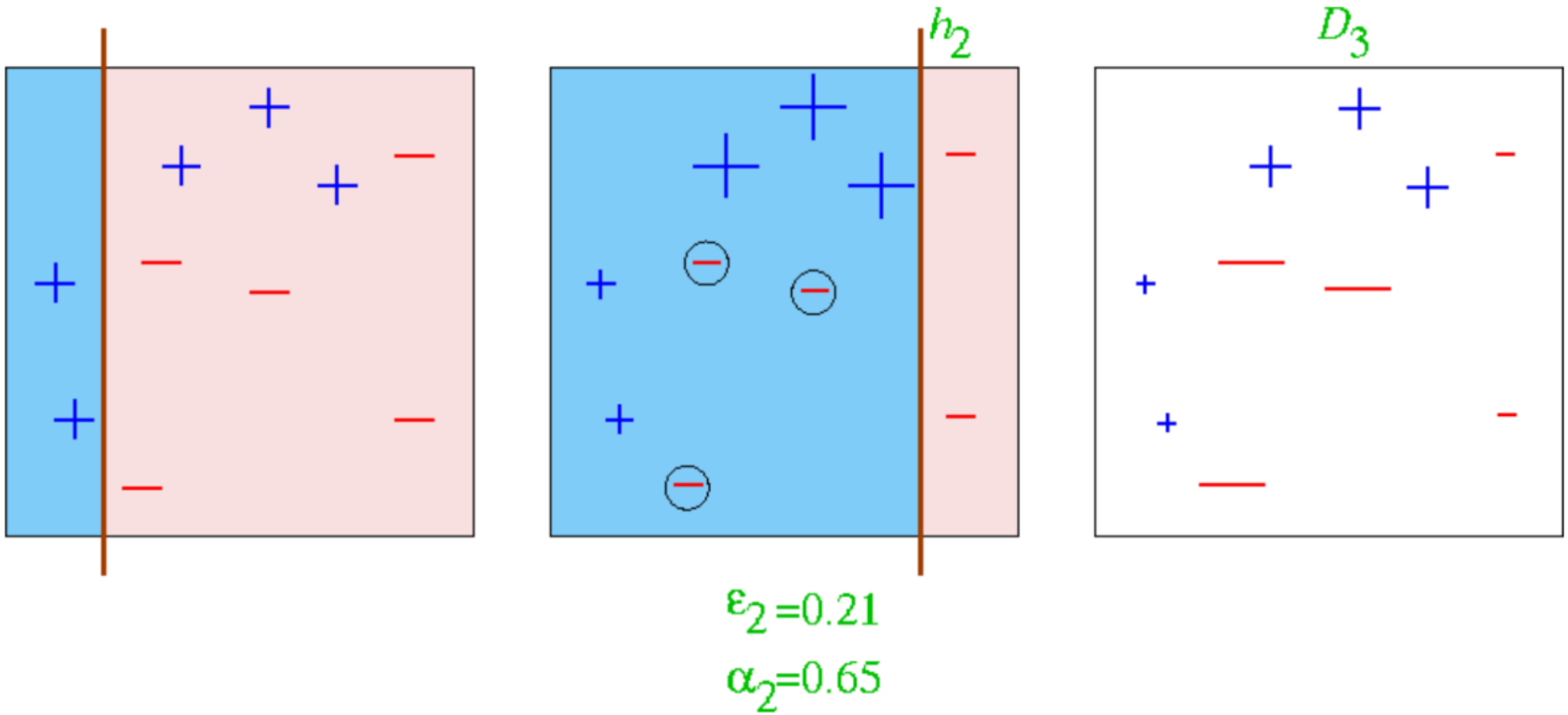




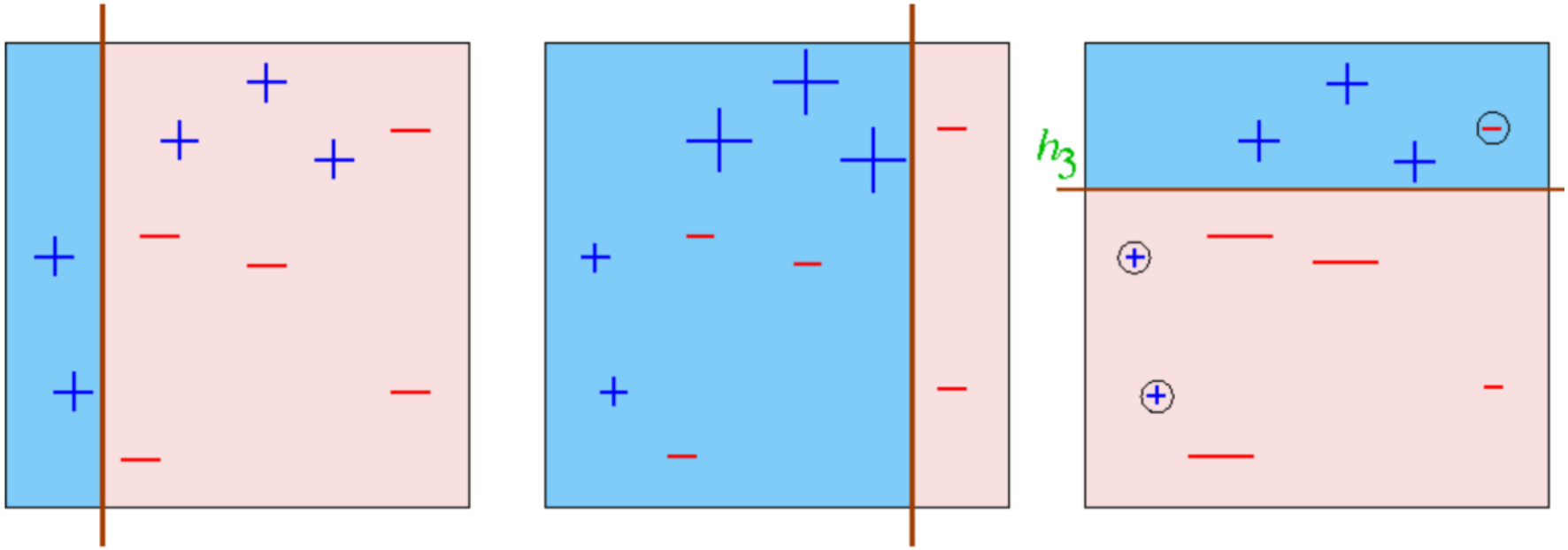
$\varepsilon_1 = 0.30$

$\alpha_1 = 0.42$

Exemplo de aplicação do Boosting



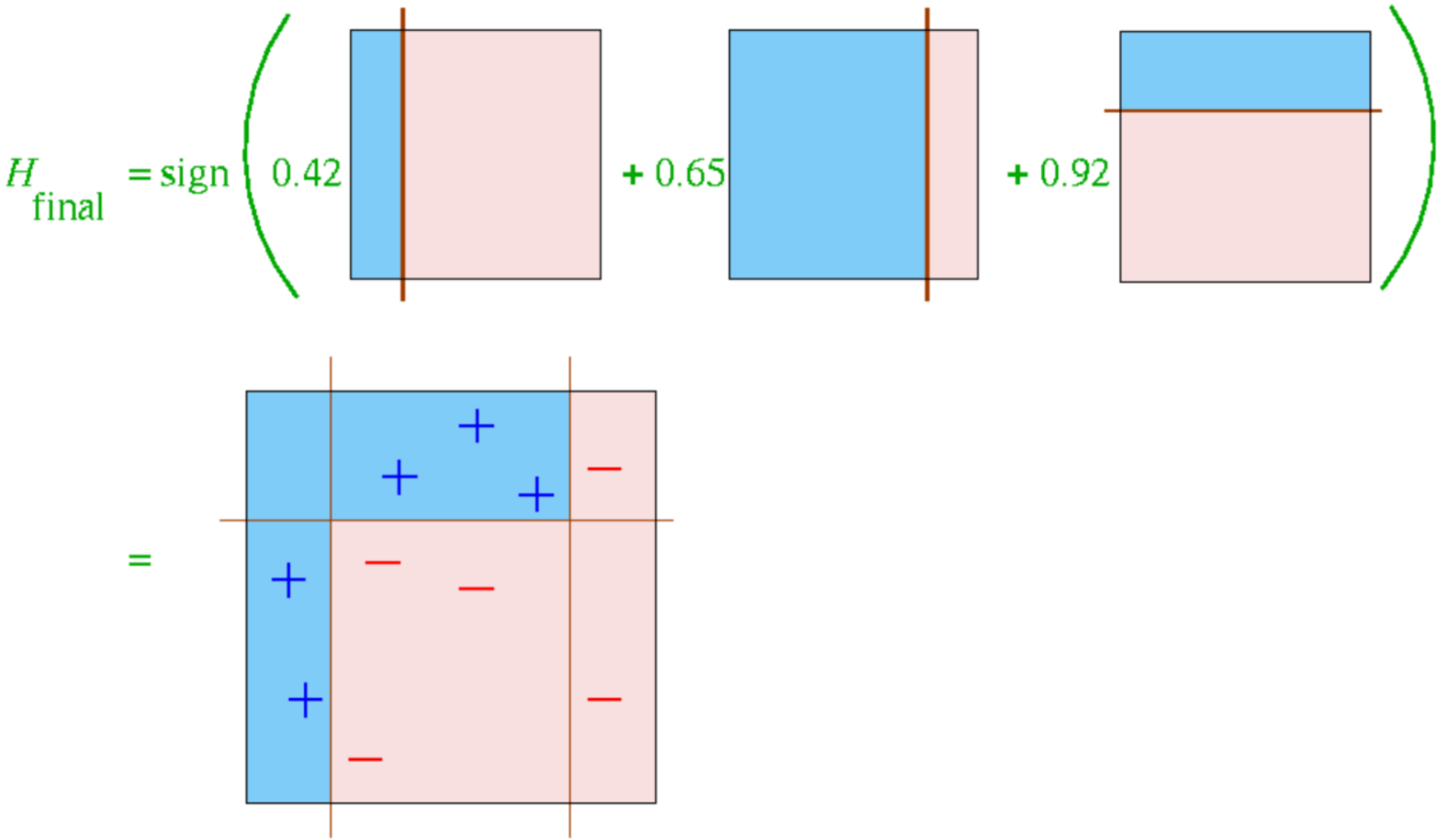
Exemplo de aplicação do Boosting



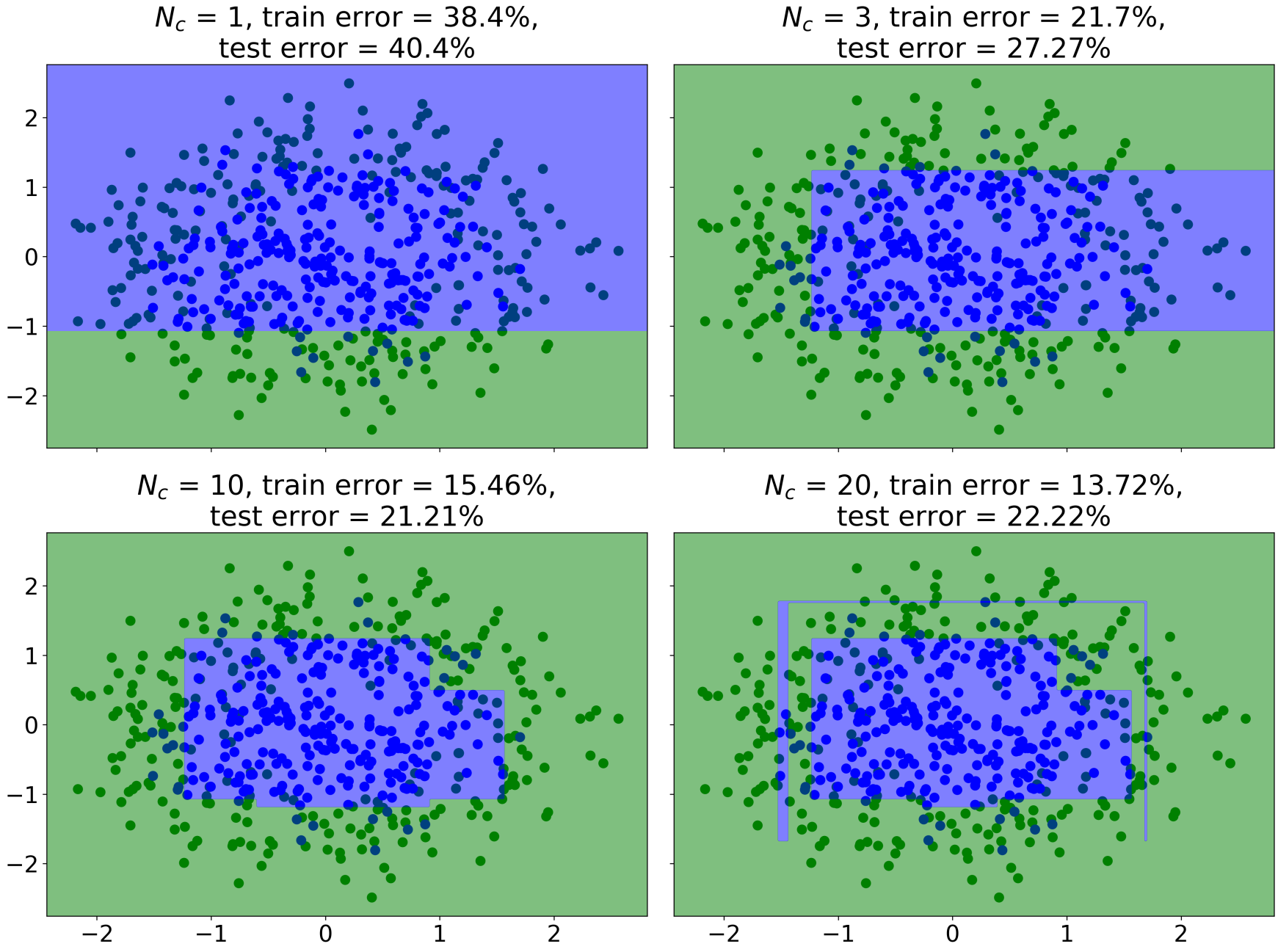
$\varepsilon_3 = 0.14$

$\alpha_3 = 0.92$

Exemplo de aplicação do Boosting



Exemplo de aplicação do AdaBoost



Boosting

Gradient Boosting

1. Inicializa com pesos uniformes: $\boldsymbol{f}_0 = \mathbf{1} \arg\min_\gamma \sum_{i=1}^{N} \mathcal{J}(y_i, \gamma)$;
2. Para M classificadores:
   1. Compute os gradientes residuais: $r_{im} = -\left[\frac{\partial \mathcal{J}(y_i, f(\boldsymbol{x}_i))}{\partial f(\boldsymbol{x}_i)}\right]_{f=f_{m-1}}$.

      Para $\mathcal{J}_{\text{MSE}}(y_i, f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)) = \frac{1}{2}(y_i - f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i))^2$:

      $$r_{im} = -\frac{\partial \mathcal{J}(y_i, f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i))}{\partial f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i)} = y_i - f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i).$$

   2. Treine um *weak learner* G_m a partir do dataset $(\boldsymbol{x}_i, r_{im})|_{i=1}^{N}$.
   3. Calcule o multiplicador $\gamma_m = \arg\min_\gamma \sum_{i=1}^{N} \mathcal{J}(y_i, f_{m-1}(\boldsymbol{x}_i) + \gamma G_m(\boldsymbol{x}_i))$.
   4. Atualize os pesos: $\boldsymbol{f}_m = \boldsymbol{f}_{m-1} + \gamma_m G_m(\boldsymbol{X})$.
3. A saída será: $f(\boldsymbol{x}) = f_M(\boldsymbol{x}) = f_0(\boldsymbol{x}) + \sum_{m=1}^{M} \gamma_m G_m(\boldsymbol{x})$.

- Cada modelo é treinado a partir dos "pseudo-resíduos" anteriores.
- $\mathcal{J}(y_i, \hat{y}_i)$ pode ser qualquer função custo diferenciável, como erro quadrático médio ou entropia cruzada.

Boosting

- **Vantagens**:
  - → Visa a diminuição incremental do viés.
  - → Em geral, resulta em melhor acurácia.
  - → Modelos aditivos (modelos anteriores não precisam ser retreinados)
- **Desvantagens**:
  - → Resulta no aumento da variância dos modelos base.
  - → Modelo final não é interpretável.
  - → Não pode ser treinado em paralelo.
  - → Pode ser sensível a dados ruidosos.

Agenda

Tópicos adicionais

- Implementações open source: XGBoost, LightGBM, CatBoost.
- Bayesian Model Averaging:

$$p(y_*|\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}) = \sum_{k=1}^{K} p(y_*|\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}, \mathcal{M}_k) p(\mathcal{M}_k|\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}).$$

- Mistura de especialistas (mixture of experts):

$$p(y|\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k(\boldsymbol{x}) p_k(y|\boldsymbol{x}).$$

- Mistura hierárquicas de especialistas (hierarchical mixture of experts).

Agenda

Referências bibliográficas

- **Cap. 16** - MURPHY, Kevin P. **Machine learning: a probabilistic perspective**, 2012.
- **Cap. 14** - BISHOP, C. **Pattern recognition and machine learning**, 2006.